

Aus dem Institut für Agrar- und Ernährungswissenschaften
(Geschäftsführender Direktor: Prof. Dr. Reinhold Jahn)

der Naturwissenschaftlichen Fakultät III
(Dekan: Prof. Dr. Peter Wycisk)

der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Fachgebiet: Biometrie

Auswertung von Zähldaten mit wiederholten Beobachtungen pro Objekt -
dargestellt an Beispielen aus dem landwirtschaftlichen Versuchswesen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor agriculturarum (Dr. agr.)

von

Diplom-Ernährungswissenschaftlerin Katrin Thamm

Halle/Saale 2012

Aus dem Institut für Agrar- und Ernährungswissenschaften
(Geschäftsführender Direktor: Prof. Dr. Reinhold Jahn)

der Naturwissenschaftlichen Fakultät III
(Dekan: Prof. Dr. Peter Wycisk)

der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Auswertung von Zähl- und Beobachtungsdaten mit wiederholten Beobachtungen pro Objekt -
dargestellt an Beispielen aus dem landwirtschaftlichen Versuchswesen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor agriculturarum (Dr. agr.)

vorgelegt von
Diplom-Ernährungswissenschaftlerin Katrin Thamm
geb. am 22.12.1983 in Halle/Saale

Gutachter: Prof. Dr. J. Spilke
Prof. Dr. H. H. Swalve
Prof. Dr. N. Reinsch

Verteidigung am: 15.10.2012

Halle/Saale 2012

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis	VI
Abbildungsverzeichnis	X
1 Einleitung und Zielstellung	1
2 Statistische Modelle	5
2.1 Das generalisierte lineare gemischte Modell	5
2.2 Das marginale Modell	6
2.3 Zusammenhang zwischen GLMM und marginalem Modell	7
2.4 Das lineare gemischte Modell	9
3 Schätzung der Modellparameter	10
3.1 Maximum-Likelihood Methode	10
3.1.1 ML-Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur	10
3.1.2 ML-Methode basierend auf der Laplace-Approximation	11
3.2 Pseudo-Likelihood Methode basierend auf Linearisierung der Daten	12
3.3 Generalized estimating equations	13
3.4 Berechnung der Standardfehler in der Responseskala	15
4 Modellierung von Zähldaten	16
4.1 Poisson-Modelle mit zufälligen Effekten	16
4.2 Modelle der negativen Binomialverteilung mit zufälligen Effekten	17
4.3 Zähldaten mit Nullenüberschuss	18
4.3.1 Hurdle Modelle mit zufälligen Effekten	18
4.3.2 Zero Inflated Modelle mit zufälligen Effekten	20
4.4 Modellwahl und -überprüfung bei Vorliegen von Zähldaten	21
4.4.1 Wahl einer geeigneten Verteilung	22
4.4.2 Verwendung von Informationskriterien	22
4.4.3 Modellwahl mit Hilfe von Trendkurven	23

5	Anwendungen im landwirtschaftlichen Versuchswesen	24
5.1	Anzahl Thripse pro Ährenschrift beim Winterweizen	24
5.1.1	Material	24
5.1.2	Modellwahl und Modellüberprüfung	24
5.2	Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat beim Milchrind	26
5.2.1	Material	26
5.2.2	Modellwahl und Modellüberprüfung	27
5.2.3	Rechentechnische Umsetzung für Zählzeiten mit Nullenüberschuss . . .	32
6	Planung und Durchführung von Simulationsstudien	36
6.1	Ziele der Simulationsstudien	36
6.2	Kriterien zur Beurteilung der Simulationsergebnisse	36
6.3	Simulation des Merkmals Anzahl Thripse pro Ährenschrift	39
6.3.1	Versuchsplan, Simulationsmodell und -parameter sowie geprüfte Hypothesen	39
6.3.2	Auswertung mit einem linearen gemischten Modell	40
6.3.3	Simulationsparameter für Poi-, NB- und LMM-Modelle	40
6.3.4	Genauigkeit der Schätzung	42
6.4	Simulation des Merkmals Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat	43
6.4.1	Versuchsplan, Simulationsmodell und -parameter sowie geprüfte Hypothesen	43
6.4.2	Vorgabewerte der Modellparameter	46
6.4.3	Variation der Freiheitsgrade bei Durchführung der statistischen Tests .	48
6.5	Erzeugung der simulierten Daten	49
7	Ergebnisse der Simulationsstudien	50
7.1	Poissonverteilung für die Anzahl Thripse pro Ährenschrift	50
7.1.1	Poissonverteilung ohne zufällige Ähreneffekte	50
7.1.2	Poissonverteilung mit zufälligen Ähreneffekten	52
7.1.3	Poissonverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten . . .	56
7.2	Negative Binomialverteilung für Anzahl Thripse pro Ährenschrift	59
7.2.1	Negative Binomialverteilung ohne zufällige Ähreneffekte	59
7.2.2	Negative Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten	61
7.2.3	Negative Binomialverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten	68

7.3	Vergleich bei Berücksichtigung von linearen Modellen	71
7.3.1	Modelle ohne zufällige Ähreneffekte	71
7.3.2	Modelle mit zufälligen Ähreneffekten	73
7.4	HP-Modell für die Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat	75
7.4.1	HP-Modell ohne zufällige Tiereffekte	75
7.4.2	HP-Modell mit zufälligen Tiereffekten	77
8	Diskussion und Schlussfolgerungen	79
8.1	Poissonmodelle	79
8.2	Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung	83
8.3	Berücksichtigung von linearen Modellen	84
8.4	Hurdle Modelle	85
9	Zusammenfassung	87
10	Summary	90
	Literaturverzeichnis	92
	Anhang	98

Abkürzungsverzeichnis

Absgconv	größte absolute Werte der Komponenten des Gradienten
AIC(C)	Akaike-Information-Criterion (corrected)
AV	ANOVA
BIC	Bayesian-Information-Criterion
BTW	between within
CON	containment
FG	Freiheitsgrade
Gconv	größte relative Werte der Komponenten des Gradienten
GEE	generalized estimating equations
GL(M)M	generalized linear (mixed) models
HNB	Hurdle negative Binomialverteilung
HP	Hurdle Poissonverteilung
KI	Konfidenzintervall
Laplace	Maximum-Likelihood Methode basierend auf der Laplace-Approximation
L(M)M	linear (mixed) model/lineares (gemischtes) Modell
LM_inh	lineares Modell mit inhomogenen Restvarianzen
LMM_inh	lineares gemischtes Modell mit inhomogenen Restvarianzen
LSM	Least Squares Means
logL	Log-Likelihoodfunktion
ML	Maximum-Likelihood
MMPL	Maximum-Likelihood marginale Pseudo-Likelihood
MS(P)E	mean squared (percentage) error
MSPL	Maximum-Likelihood subjektsspezifische Pseudo-Likelihood
NB	negative Binomialverteilung

PA	population-averaged
PL	Pseudo-Likelihood
Poi	Poissonverteilung
Quad	Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur
RE	random-effects
REML	Restricted Maximum-Likelihood
RMS(P)E	root mean squared (percentage) error
RMPL	Restricted marginale Pseudo-Likelihood
RSPL	Restricted subjektsspezifische Pseudo-Likelihood
TNB	gestutzte negative Binomialverteilung
TPoi	gestutzte Poissonverteilung
ZI(NB)	Zero Inflated (negative Binomialverteilung)
ZI(P)	Zero Inflated (Poissonverteilung)

Tabellenverzeichnis

5.1	Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%), ermittelt aus den Modellen basierend auf Poisson- (Poi) und negativer Binomialverteilung (NB) für die Anzahl Thripse 0 bis 7 und ≥ 8	25
5.2	Anzahl der Modellparameter (d), mit (-2) multiplizierte Log-Likelihoodfunktion (-2LogL), AIC-, AICC- und BIC-Werte in Abhängigkeit der Verteilungsannahme und der zufälligen Ähreneffekte	25
5.3	Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%) bei Nutzung der Poisson- (Poi) und negativen Binomialverteilung (NB) für die Anzahl Besuche 0 bis 8, gemittelt über alle Kühe und Laktationstage	28
5.4	Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%) ermittelt aus Hurdle bzw. Zero Inflated Modellen basierend auf Poisson (HP- bzw. ZIP-Modell) und negativer Binomialverteilung (HNB- bzw. ZINB-Modell) für die Anzahl Besuche 0 bis 8	30
5.5	Anzahl der fixen (p) und zufälligen (q) Modellparameter, mit (-2) multiplizierte Log-Likelihoodfunktion (-2LogL), AIC-, AICC- und BIC-Werte für Hurdle bzw. Zero Inflated Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung (HNB bzw. ZINB)	31
5.6	Implementierung von Hurdle bzw. Zero Inflated Modellen basierend auf Poissonverteilung (HP bzw. ZIP) und negativer Binomialverteilung (HNB bzw. ZINB) in ausgewählten SAS-Prozeduren	33
6.1	Simulationsmodelle für das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährensicht	39
6.2	Vorgabewerte für den festen Effekt γ_{jk} zum j-ten Termin in der k-ten Schicht in der Link- (= γ_{jk}) und Responseskala (= $\exp(\gamma_{jk})$) für die Datensätze A und B	41
6.3	Vorgabewerte für die Ährenvarianz und den Dispersionsparameter α in Abhängigkeit des Simulationsmodells	41
6.4	Genauigkeit der geschätzten Sortenmittel im Poissonmodell mit s_λ als Standardfehler für λ und d bzw. d_λ als halbe Intervallbreite des 95 %-Konfidenzintervalls für den Bias bzw. Bias (%) in Abhängigkeit der Anzahl Simulationen (N) und der Ährenvarianz (σ_u^2)	43
6.5	Vorgabewerte für die Regressionskoeffizienten der Kovariablen für den Laktationstag und Varianzkomponenten für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung ohne Berücksichtigung von zufälligen Effekten	46
6.6	Vorgabewerte für die Simulation und daraus abgeleitete Verteilungsparameter für die i-te Ration und die j-te Periode für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung ohne Berücksichtigung von zufälligen Effekten	47

6.7	Vorgabewerte für die Simulation und daraus abgeleitete marginale Verteilungsparameter für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung mit Berücksichtigung von zufälligen Effekten	48
7.1	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	50
7.2	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	53
7.3	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Erzeugung eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegeben mit $\sigma_u^2 = 0.4087$ für die Datensätze A und B	54
7.4	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	56
7.5	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Erzeugung eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für die geschätzte Ährenvarianz ($\hat{\sigma}_{u_j}^2$) für die Datensätze A und B in Abhängigkeit vom Termin (j)	57
7.6	Anzahl an Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	59
7.7	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}(N_0)$, Mittelwert (Mean), unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.4664$ für die Datensätze A und B	60
7.8	Anzahl der Läufe mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	62
7.9	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegeben mit $\sigma_u^2 = 0.36$ für die Datensätze A und B	62
7.10	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}(N_0)$, Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ für die Datensätze A und B	63

7.11	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B	65
7.12	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegebenen mit $\sigma_u^2 = 0.36$ in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B	65
7.13	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B	66
7.14	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	68
7.15	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für die geschätzte Ährenvarianz ($\hat{\sigma}_{u_j}^2$) für die Datensätze A und B in Abhängigkeit des Termins (j)	69
7.16	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u, KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ für die Datensätze A und B	69
7.17	Anzahl an Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Varianten A1 und A2	71
7.18	Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Varianten A1 und A2	73
7.19	Erwartungswerte und deren Schätzungen, Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$), Bias (%) und RMSE der Erwartungswerte in Abhängigkeit von Ration und Periode	75
7.20	Bias (%) und Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für den linearen Prädiktor $\eta_{0,ij}(\bar{t})$ $\eta_{1,ij}(\bar{t})$ der Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ bzw. λ_{ij} in Abhängigkeit von Ration und Periode	76
7.21	Bias (%) und Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für die marginalen Erwartungswerte und die Verteilungsparameter in Abhängigkeit von Ration und Periode	77
7.22	Vorgegebene und geschätzte Varianzkomponenten einschließlich Bias (%)	77

7.23	Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für die Verteilungsparameter in Abhängigkeit von Ration i, Periode j und der Anzahl Freiheitsgrade (FG)	78
7.24	Fehler 1. Art für die Differenz der Regressionskoeffizienten von Ration eins und zwei für die Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ ($=\beta_{mi}^{(1)}$) und λ_{ij} ($=\beta_{mi}^{(2)}$) in Abhängigkeit von der Kovariablennummer (m) und der Anzahl Freiheitsgrade (FG)	78

Abbildungsverzeichnis

5.1	Mittlere Anzahl Besuche in Abhängigkeit der Tageszeit gemittelt über alle Kühe und Laktationstage für die Ration Luzerne	27
5.2	Geschätzte Wahrscheinlichkeit, dass pro Stunde kein Besuch stattfindet, ermittelt mit Hilfe der Modellparameter im Vergleich zur geglätteten Trendkurve innerhalb Laktationsklasse eins	31
7.1	Bias (%) und 95 % Konfidenzintervall für die zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B	51
7.2	Mittelwerte und Konfidenzintervalle ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für das Poisson-Modell ohne zufällige Ähreneffekte für die Datensätze A und B	52
7.3	Mittelwert und zweiseitiges Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für das Poisson-Modell mit zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), Restricted subjektspezifische Pseudo-Likelihood Methode (RSPL) und generalized estimating equations (GEE), für die Datensätze A und B	55
7.4	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Poisson-Modelle mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B	58
7.5	Bias (%) und 95 % Konfidenzintervall für die zwölf marginalen Erwartungswerte für die Datensätze A und B	60
7.6	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung ohne zufällige Ähreneffekte für die Datensätze A und B	61
7.7	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B	64

7.8	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten in Abhängigkeit der Anzahl Ähren für die Datensätze A und B	67
7.9	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B	70
7.10	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für ein Poisson-Modell (Poi) und lineare Modelle ohne bzw. mit inhomogenen Restvarianzen und (LM bzw. LM_inh)	72
7.11	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Poisson-Modelle (Poisson) und lineare gemischte Modelle ohne bzw. mit inhomogenen Restvarianzen (LMM bzw. LMM_inh) mit zufälligen Ähreneffekten	74
7.12	Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den Fehler 1. Art der acht getesteten Hypothesen in der Linkskala für das Hurdle Modell ohne zufällige Ähreneffekte	76

1 Einleitung und Zielstellung

Zählraten beschreiben die Anzahl des Auftretens von bestimmten Ereignissen. Die Analyse von Zählraten kommt sowohl in der Medizin, der Biologie, aber auch im landwirtschaftlichen Versuchswesen eine hohe Bedeutung zu (Tempelman, 1998; Rodrigues-Motta et al., 2007; Naya et al., 2008; Cummings et al., 2009; Ribeiro Jr et al., 2009; Ruiz-Cárdenas et al., 2009; Gaafar et al., 2011; Peñagaricano et al., 2011). Typische Beispiele sind die Anzahl Krankheitsbefunde pro Tier oder die Anzahl Schädlinge pro Pflanze landwirtschaftlicher Produkte wie z. B. Weizen oder Kaffee. Zählraten erfüllen nicht die Anforderung an normalverteilte Daten. So sind beispielsweise die Varianzen der Responsevariablen Funktionen der Erwartungswerte. Mit Annahme einer bestimmten Verteilung für die Zählraten wird gleichzeitig die Varianzfunktion festgelegt. Zur Auswertung von Zählraten steht die Theorie der generalisierten linearen Modelle (englisch: generalized linear models (GLM)) zur Verfügung (McCullagh und Nelder, 1989; McCulloch et al., 2008).

GLM enthalten bei Annahme von Normalverteilung die linearen Modelle als Spezialfall. Analog zu den linearen Modellen werden die Effekte von qualitativen Faktoren und die Regressionskoeffizienten von quantitativen Faktoren (Kovariablen) im linearen Prädiktor eingebunden. Zwischen den Erwartungswerten der Responsevariablen und dem linearen Prädiktor besteht im GLM im Allgemeinen ein nichtlinearer Zusammenhang, der durch Angabe einer Linkfunktion beschrieben wird. Durch Angabe einer Verteilung, der Linkfunktion und des linearen Prädiktors sind die Komponenten eines GLM charakterisiert.

Häufig müssen für Merkmale aus dem landwirtschaftlichen Versuchswesen zufällige Effekte direkt im Auswertungsmodell berücksichtigt werden, um beispielsweise den Einfluss des Nutztieres oder der Nutzpflanze abbilden zu können. Liegen für die Untersuchungsobjekte wiederholte Beobachtungen z. B. über die Zeit vor (Longitudinaldaten), so können diese Beobachtungen nicht als unabhängig angesehen werden und müssen mit einer adäquaten Kovarianzstruktur im Modell abgebildet werden. Liegen korrelierte Daten vor, existieren innerhalb der GLM die subjektspezifischen und die marginalen Modelle (McCulloch et al., 2008).

Wiederholte Beobachtungen pro Objekt werden in subjektspezifischen Modellen mit Hilfe von Zufallseffekten als expliziter Bestandteil im Modell berücksichtigt. Im Ergebnis der Parameterschätzung ergeben sich in der Responseskala (Originalskala) bedingte Erwartungswerte, die durch Beachtung der Variabilität zwischen den Objekten in marginale Erwartungswerte umgerechnet werden können. Bei der Anwendung von subjektspezifischen Modellen wird der Vergleich von Gruppen/Behandlungen standardmäßig in der Linkskala immer unter der Annahme gegebener zufälliger Objekteffekte geführt. Wünscht der Anwender Aussagen über Unterschiede von Gruppen/Behandlungen in der Responseskala, so muss eine Rücktransformation mit Hilfe der inversen Linkfunktion durchgeführt werden. Sollen die Aussagen für ein zufällig aus einer Grundgesamtheit herausgegriffenes Objekt getroffen werden, so muss aus statistischer

Sicht beispielsweise zum Vergleich von Gruppenmitteln eine Umrechnung von bedingten in marginale Erwartungswerte erfolgen. Diese Umrechnung gelingt, indem die bedingten Erwartungswerte als Zufallsgrößen der Objekteffekte aufgefasst werden und der Erwartungswert in der Verteilung der Objekteffekte gebildet wird. Im Fall nichtlinearer Linkfunktionen ist die explizite Umrechnung nur in Spezialfällen möglich. Dieser Sachverhalt erschwert die Erweiterung der Hypothesenprüfung von der Link- auf die Responseskala.

Zur Schätzung der Modellparameter in einem GLM gibt es zum einen die Maximum-Likelihood (ML) Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur (Quad) oder basierend auf Laplace-Approximation (Laplace) und zum anderen die Pseudo-Likelihood (PL) Methode basierend auf Linearisierung der Daten (Agresti, 2002; McCulloch et al., 2008). In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, unter welchen Modellannahmen die approximativen Verfahren eine Alternative zur ML-Methode basierend auf numerischer Integration darstellen. Weiterhin ergibt sich die Frage nach der Wirksamkeit von statistischen Tests, falls verschiedene Schätzverfahren verwendet werden und falls die Hypothesenprüfung in der Responseskala durchgeführt wird. Die Hypothesenprüfung in der Responseskala beinhaltet eine weitere zusätzliche Herausforderung. Die marginalen Erwartungswerte sind im Allgemeinen nichtlineare Funktionen der fixen Modellparameter und der Varianzen der zufälligen Objekteffekte. Folglich müssen zur Ableitung des Standardfehlers der geschätzten Erwartungswerte approximative Methoden verwendet werden. Dieser Sachverhalt erklärt, weshalb beispielsweise in den SAS-Prozeduren zur Parameterschätzung im GLM mit Zufallseffekten standardmäßig keine Hypothesenprüfung in der Responseskala möglich ist.

Zählraten mit wiederholten Beobachtungen pro Objekt können zusätzlich mit marginalen Modellen analysiert werden, indem eine Arbeitskorrelationsmatrix die korrelierten Daten berücksichtigt. Für die Arbeitskorrelationsmatrix muss im Sinne der Modellwahl eine bestimmte Struktur vorgegeben werden. Aus der Korrelationsmatrix werden Varianz-Kovarianz-Matrizen für die Beobachtungsvektoren pro Objekt abgeleitet. Die Varianzen in der Diagonale dieser Matrizen ergeben sich aus den für die Beobachtungen getroffenen Verteilungsannahmen. Die zufälligen Effekte der Objekte sind nicht expliziter Bestandteil der Modellgleichungen. Mit den geschätzten fixen Modellparametern kann durch Rücktransformation in die Responseskala die direkte Berechnung von marginalen Erwartungswerten erfolgen. Die Modellparameter innerhalb marginaler Modelle können mit Hilfe der generalized estimating equations (GEE) geschätzt werden (Liang und Zeger, 1986; Hardin und Hilbe, 2003). Marginale Modelle gestatten die Transformation in die Responseskala durch formales „Einsetzen“ der geschätzten fixen Modellparameter in die inverse Linkfunktion. Die in der Linkskala geschätzten fixen Modellparameter und die geschätzten marginalen Erwartungswerte lassen sich unmittelbar für die Grundgesamtheit, aus der die Objekte zufällig ausgewählt wurden, interpretieren. Allerdings muss im Sinne einer Modellwahl die Struktur der Arbeitskorrelationsmatrix optimiert werden. Liegen für die zufälligen Objekte Verteilungsannahmen vor, so stellt sich die Frage, ob und mit welcher Korrelations-

struktur derartige Annahmen berücksichtigt werden können.

Als Verteilung für Modelle von Zähldaten werden häufig die Poisson (Poi)- oder die negative Binomialverteilung (NB) unterstellt. Tritt jedoch ein sogenannter „Nullenüberschuss“ auf, bei dem die beobachtete Anzahl Nullen nicht durch die erwartete Anzahl Nullen, geschätzt mit Hilfe des Poi-Modells oder des Modells basierend auf NB, widergespiegelt werden kann, so müssen alternative Modellansätze genutzt werden. In der Tierzucht lässt sich beispielsweise ein Nullenüberschuss für die Anzahl klinischer Mastitisfälle pro Kuh im Verlauf einer Laktation beobachten (Rodrigues-Motta et al., 2007). Zur Modellierung von Zählmerkmalen mit Nullenüberschuss sind in der Literatur Zero Inflated (ZI) (Lambert, 1992) und Hurdle Modelle (Mullahy, 1986) entwickelt worden. Wiederum ergibt sich die Frage nach der Anpassung eines adäquaten Modells, nach der Auswahl eines geeigneten Verfahrens zur Schätzung der Modellparameter, nach der Umrechnung von bedingten in marginale Erwartungswerte und nach der Wirksamkeit von statistischen Tests, falls die Hypothesenprüfung in der Responseskala erfolgt. Abgeleitet aus praktischen Fragestellungen steht in der vorliegenden Arbeit die Auswertung von Zähldaten mit und ohne Nullenüberschuss unter Verwendung von GLM im Vordergrund. Dabei wird vorrangig die Situation betrachtet, dass pro Objekt wiederholte oder mehrere Beobachtungen für das Untersuchungsmerkmal vorliegen. Zur Überprüfung der verschiedenen Modellansätze (subjektspezifisches und marginales Modell) sowie der verschiedenen Schätzverfahren (Quad, Laplace, PL-Methode und GEE) wird die Methode der stochastischen Simulation verwendet.

Anhand von zwei Anwendungen aus dem Feld- und Tierversuchswesen werden Aussagen über die Erwartungstreue der Schätzungen (Bias), den mittleren quadratischen Fehler (englisch: mean squared error (MSE)), das Konvergenzverhalten der Algorithmen, die erforderliche Rechenzeit, die Einhaltung des nominalen Fehlers 1. Art und die Überdeckungswahrscheinlichkeiten abgeleitet. Zur Gewinnung von Versuchsplänen und Modellparametern werden zwei Praxisversuche analysiert. Zum einen die Anzahl Schädlinge pro Ährenschnitt, erfasst an verschiedenen Winterweizensorten, und zum anderen die Anzahl Besuche einer Kuh pro Stunde am Futterautomat in Abhängigkeit verschiedener Rationen. Die Beurteilung der Schätzverfahren und die Hypothesenprüfung (Vergleich der Sorten und Rationen) erfolgt nicht wie üblich in der Linkskala, sondern zur besseren Interpretation der Ergebnisse durch den Anwender in der Responseskala der Untersuchungsmerkmale. Für die vorliegende Arbeit ergeben sich im Einzelnen folgende Ziele:

- Modellwahl und -überprüfung von Zählmerkmalen mit und ohne Nullenüberschuss, dargestellt an zwei Beispielen aus dem landwirtschaftlichen Versuchswesen, um Modellparameter für die stochastische Simulation zu gewinnen
- Simulation von Zähldaten mit und ohne Nullenüberschuss bei Vorliegen von mehreren Beobachtungen pro Objekt und Auswertung mit subjektspezifischen und marginalen Mo-

dellen

- Schätzung der Modellparameter mit Hilfe unterschiedlicher Verfahren
- Überprüfung der Schätzverfahren und Modellansätze für die Modellparameter durch Berechnung des prozentualen Bias, des MSE und von Überdeckungswahrscheinlichkeiten der Konfidenzintervalle
- Hypothesenprüfung in der Responseskala und Beurteilung der statistischen Tests anhand der Einhaltung des nominalen Fehlers 1. Art.

2 Statistische Modelle

Im folgenden Abschnitt werden die statistischen Modelle vorgestellt, die in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden. Liegen für Zählraten wiederholte Beobachtungen pro Objekt vor und sollen die zufälligen Effekte explizit berücksichtigt werden, so erfolgt die Auswertung mit generalisierten linearen gemischten Modellen, welche zu den subjektspezifischen Modellen bzw. Modellen mit Zufallseffekten gehören. In der englischsprachigen Literatur werden solche Modelle auch als generalized linear mixed models (GLMM) und random-effects (RE) models bezeichnet (Agresti, 2002; Lee et al., 2006; McCulloch et al., 2008). Marginale Modelle hingegen beziehen mehrere Beobachtungen pro Objekt anhand einer Arbeitskorrelationsmatrix mit ein (Liang und Zeger, 1986) und werden auch unter dem Begriff population-averaged (PA) Modelle zusammengefasst. In 2.1 und 2.2 werden diese zwei grundsätzlich verschiedenen Ansätze für Modelle mit wiederholten Beobachtungen pro Objekt vorgestellt. In Ergänzung wird unter 2.4 das lineare gemischte Modell vorgestellt, da geprüft werden soll, ob diese Modellklasse unter bestimmten Voraussetzungen zur Auswertung von Zählraten geeignet ist. Im Englischen wird diese Modellklasse als linear mixed model (LMM) bezeichnet (Searle, 1971).

2.1 Das generalisierte lineare gemischte Modell

Nachfolgend wird das GLMM vorgestellt. Die aufgeführten Darstellungen weichen von der üblichen Formulierung ab (McCulloch et al., 2008), damit sowohl die Hurdle als auch die ZI-Modelle integriert werden können. Sei y_{ij} die j -te Beobachtung von Objekt i . Die Beobachtungen y_{ij} werden nachfolgend als Realisierung der Zufallsgrößen Y_{ij} aufgefasst. Bezeichne β einen Vektor von festen Modellparametern und u_i einen Vektor von zufälligen Effekten, zugehörig zu Objekt i . Die Zufallsgrößen Y_{ij} ($i = 1, \dots, a$ und $j = 1, \dots, n_i$) sollen für gegebene u_i -Werte einer bekannten Verteilung mit der Dichtefunktion $f(y_{ij} | \beta, u_i)$ genügen. Für die bedingten Erwartungswerte gelte die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned} E(Y_{ij} | u_i) &= h(\lambda_{ij}, p_{ij}) \\ \text{mit } \lambda_{ij} &= h_1(x'_{1,ij}\beta_1 + z'_{1,ij}u_{1i}) \\ p_{ij} &= h_2(x'_{2,ij}\beta_2 + z'_{2,ij}u_{2i}) \\ \text{und } u_i &= (u_{1i}, u_{2i})'; \beta = (\beta_1, \beta_2)' \end{aligned} \tag{2.1}$$

Bemerkung: In Darstellung (2.1) sind $x_{k,ij}$ bzw. $z_{k,ij}$ ($k = 1, 2$) die bekannten Versuchsplanvektoren der festen bzw. zufälligen Modelleffekte. Sind die Verteilungsparameter λ_{ij} alle positiv

und repräsentieren die p_{ij} Wahrscheinlichkeiten, so sind folgende Linkfunktionen denkbar:

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{ij}) &= x'_{1,ij}\beta_1 + z'_{1,ij}u_{1i} \\ \log(\lambda_{ij}) &= x'_{2,ij}\beta_2 + z'_{2,ij}u_{2i} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Stammen die bedingten Verteilungen aus einer Exponentialfamilie, liegt also beispielsweise eine Poi vor, so lassen sich die Verteilungsparameter als Erwartungswerte interpretieren. Es gilt dann der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned} E(Y_{ij} | u_i) &= \mu_{ij} \\ \text{mit } \mu_{ij} &= h(\eta_{ij}) \text{ bzw. } g(\mu_{ij}) = \eta_{ij} \\ \text{und } \eta_{ij} &= x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i \end{aligned} \quad (2.3)$$

In Darstellung (2.3) bezeichnet η_{ij} den linearen Prädiktor, der über die inverse Linkfunktion $h(\cdot)$ mit dem Erwartungswert verknüpft ist. Für die zufälligen Effekte wird in der vorliegenden Arbeit Unabhängigkeit zwischen den Objekten sowie Normalverteilung mit der Varianz-Kovarianz-Matrix D vorausgesetzt. Im Fall von zweidimensionaler Normalverteilung folgt für u_i :

$$u_i \sim N(0, D) \text{ mit } D = \begin{pmatrix} \sigma_{u,1}^2 & \sigma_{u,12} \\ \sigma_{u,12} & \sigma_{u,2}^2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

2.2 Das marginale Modell

Sei y_{ij} die j -te Beobachtung von Objekt i zugehörig zur Zufallsgröße Y_{ij} . Die Y_{ij} sollen einer bekannten Verteilung mit der Dichtefunktion $f(y_{ij} | \beta, u_i)$ genügen. Für den marginalen Erwartungswert μ_{ij} gelte die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned} E(Y_{ij}) &= E_u [E(Y_{ij} | u_i)] = \mu_{ij} \\ \text{mit } \mu_{ij} &= h(x'_{ij}\beta) \\ \text{und } \text{Var}(Y_{ij}) &= v(\mu_{ij}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

In Darstellung (2.5) ist $v(\mu_{ij})$ eine bekannte Varianzfunktion, abgeleitet aus den Verteilungsannahmen über die Beobachtungen. Der Zusammenhang zwischen den wiederholten Beobachtungen pro Objekt wird über eine Arbeitskorrelationsmatrix wie folgt angegeben:

$$\begin{aligned} \text{Corr}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) &= c(\mu_{ij}, \mu_{ij^*}, \alpha) \text{ für } j \neq j^* \\ \text{mit } c(\cdot) &\text{ bekannte Funktion} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Die Korrelation zwischen Y_{ij} und Y_{ij^*} ist demnach eine Funktion der marginalen Erwartungswerte und des Parametervektors $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_q)'$.

2.3 Zusammenhang zwischen GLMM und marginalem Modell

Mit Hilfe der subjektspezifischen Modelle ergeben sich bedingte Erwartungswerte, die Aussagen für die einzelnen Objekte liefern. Möchte man jedoch Aussagen über die gesamte Population treffen, so müssen die subjektspezifischen in marginale Erwartungswerte umgerechnet werden.

Sei $\varphi(u_i)$ die Dichtefunktion des Vektors der zufälligen Effekte von Objekt i . Dann gilt:

$$E(Y_{ij}) = E_u [E(Y_{ij} | u_i)] = \int E(Y_{ij} | u_i) \varphi(u_i) du_i \quad (2.7)$$

Seien β^{RE} bzw. β^{PA} die Vektoren der Modellparameter im GLMM bzw. PA-Modell. Dann gilt gemäß Formel (2.3) und (2.5):

$$\begin{aligned} E(Y_{ij} | u_i) &= h(x'_{ij}\beta^{RE} + z'_{ij}u_i) \\ E(Y_{ij}) &= h(x'_{ij}\beta^{PA}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Entspricht $h(\eta) = \eta$, dann folgt:

$$\begin{aligned} E_u [E(Y_{ij} | u_i)] &= x'_{ij}\beta^{RE} + z'_{ij}E(u_i) \\ &= x'_{ij}\beta^{RE} \end{aligned} \quad (2.9)$$

somit gilt $\beta^{RE} = \beta^{PA}$. Dieser Fall ist jedoch die Ausnahme. Im Allgemeinen ist das Integral in Formel (2.7) nicht geschlossen lösbar. Ist die Funktion $h(\cdot)$ nicht linear, so gilt:

$$\int h(x'_{ij}\beta^{RE} + z'_{ij}u_i) \varphi(u_i) du_i \neq h(x'_{ij}\beta^{RE}) \quad (2.10)$$

Sei Y_{ij} die Zufallsgröße zur j -ten Beobachtung von Objekt i ($i = 1, \dots, a; j = 1, \dots, n_i$). Betrachtet man den Spezialfall, dass die Zufallsgröße einer Poi genügt, dann folgt:

$$\begin{aligned} Y_{ij} &\sim Poi(\lambda_{ij}) \\ \log(\lambda_{ij}) &= x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i \\ u_i &\sim N(0, D) \end{aligned} \quad (2.11)$$

In Darstellung (2.11) sind β der Vektor der festen Modellparameter, u_i der Vektor der zufälligen Effekte von Objekt i und x_{ij} bzw. z_{ij} bekannte Versuchsplanvektoren. Dann gilt (Molenberghs et al., 2007):

$$\begin{aligned} \mu_{ij} &= E(Y_{ij}) = E[E(Y_{ij} | u_i)] \\ \mu_{ij} &= E[\exp(x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i)] \\ &= \exp(x'_{ij}\beta) \cdot E(\exp(z'_{ij}u_i)) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Setzt man $d_{ij} = \text{Var}(z'_{ij}u_i) = z'_{ij}Dz_{ij}$. Dann lässt sich zeigen (Molenberghs et al., 2007):

$$E[\exp(z'_{ij}u_i)] = e^{\frac{1}{2}d_{ij}} \quad (2.13)$$

Somit folgt:

$$\mu_{ij} = \exp(x'_{ij}\beta + \frac{1}{2}d_{ij}) \quad (2.14)$$

Weiterhin gilt (Greene, 2002):

$$\text{Var}(Y_{ij}) = E[\text{Var}(Y_{ij} | u_i)] + \text{Var}[E(Y_{ij} | u_i)] \quad (2.15)$$

Da unter Poi Erwartungswert und Varianz übereinstimmen, folgt:

$$\begin{aligned} E[\text{Var}(Y_{ij} | u_i)] &= E[E(Y_{ij} | u_i)] \\ &= e^{x'_{ij}\beta + \frac{1}{2}d_{ij}} \\ &= \mu_{ij} \end{aligned} \quad (2.16)$$

und

$$\begin{aligned} \text{Var}[E(Y_{ij} | u_i)] &= \text{Var}(e^{x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i}) \\ &= e^{2x'_{ij}\beta} \cdot \text{Var}(e^{z'_{ij}u_i}) \\ &= e^{2x'_{ij}\beta} e^{d_{ij}} (e^{d_{ij}} - 1) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Einsetzen in (2.15) liefert:

$$\text{Var}(Y_{ij}) = \mu_{ij} + (\mu_{ij})^2 \cdot (e^{d_{ij}} - 1) \quad (2.18)$$

Analog folgt für die Kovarianzen für $j \neq j^*$:

$$\text{Cov}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) = \text{Cov}(E(Y_{ij} | u_i), E(Y_{ij^*} | u_i)) + E(\text{Cov}(Y_{ij}, Y_{ij^*} | u_i)) \quad (2.19)$$

Unter Annahme der bedingten Unabhängigkeit folgt (McCulloch et al., 2008, S. 192 f):

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) &= e^{x'_{ij}\beta + x'_{ij^*}\beta} \cdot \text{Cov}(e^{z'_{ij}u_i}, e^{z'_{ij^*}u_i}) \\ &= e^{x'_{ij}\beta + x'_{ij^*}\beta + \frac{1}{2}(z'_{ij}Dz_{ij} + z'_{ij^*}Dz_{ij^*})} \cdot (e^{z'_{ij}Dz_{ij^*}} - 1) \\ \text{Cov}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) &= \mu_{ij} \cdot \mu_{ij^*} \cdot (e^{z'_{ij}Dz_{ij^*}} - 1) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Betrachtet man den Spezialfall:

$$\begin{aligned} \log(\lambda_{ij}) &= x'_{ij}\beta + u_i \\ \text{mit } u_i &\sim N(0, d) \text{ und } d = \sigma_u^2 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Dann ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 E(Y_{ij}) &= \mu_{ij} = e^{x'_{ij}\beta + \frac{1}{2}d} \\
 \text{Var}(Y_{ij}) &= \mu_{ij} + \mu_{ij}^2(e^d - 1) \\
 \text{Cov}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) &= \mu_{ij} \cdot \mu_{ij^*}(e^d - 1); j \neq j^*
 \end{aligned}
 \tag{2.22}$$

Bemerkung: Die Varianz von Y_{ij} ist eine quadratische Funktion des Erwartungswertes μ_{ij} falls $d = \sigma_u^2 > 0$ ist. Somit stimmen in der marginalen Verteilung Erwartungswert und Varianz nicht überein. Folglich genügen die Y_{ij} keiner Poi mehr.

2.4 Das lineare gemischte Modell

Sei $y_i = (y_{i1}, \dots, y_{in_i})'$ der Beobachtungsvektor für Objekt i und $Y_i = (Y_{i1}, \dots, Y_{in_i})'$ der zugehörige Vektor von Zufallsgrößen. Setzt man für Y_i mehrdimensionale Normalverteilung und für die Linkfunktion die Identität $g(\eta) = \eta$ voraus, so ergeben sich die LMM als Spezialfall der GLMM. Unter Annahme der Normalverteilung besitzt das LMM die Darstellung:

$$\begin{aligned}
 Y_i &= X_i' \beta + Z_i' u_i + e_i \\
 \text{mit } E(Y_i) &= X_i' \beta \\
 \text{und } \text{Var}(Y_i) &= Z_i' \text{Var}(u_i) Z_i + \text{Var}(e_i) \\
 &= Z_i' G Z_i + R
 \end{aligned}
 \tag{2.23}$$

In (2.23) sind X_i bzw. Z_i Versuchsplanmatrizen für den Vektor β der festen Effekte bzw. für den Vektor u_i der zufälligen Effekte von Objekt i und e_i der Vektor der unbekanntem zufälligen Resteffekte. Für verschiedene Objekte i und i^* wird in der vorliegenden Arbeit gefordert:

$$\text{cov}(u_i, u_{i^*}') = 0 \text{ und } \text{cov}(e_i, e_{i^*}') = 0
 \tag{2.24}$$

Bemerkung: Zur Schätzung der Varianzkomponenten im LMM ist die Restricted-ML (REML) Methode etabliert. Die verallgemeinerte Methode der kleinsten Quadrate liefert beispielsweise Schätzungen für die festen Effekte mit optimalen Eigenschaften. Eine Einteilung in marginale und subjektspezifische Modelle ist nicht notwendig (vgl. Abschnitt 2.1 und 2.2). Die Ergebnisse der Parameterschätzung beziehen sich bereits auf die Responseskala.

3 Schätzung der Modellparameter

Für die unter Abschnitt 2 vorgestellten Modelle stehen verschiedene Verfahren zur Schätzung der Modellparameter zur Verfügung. In der vorliegenden Arbeit werden die ML-, die PL-Methode und die GEE genutzt.

3.1 Maximum-Likelihood Methode

In Abschnitt 3.1.1 und 3.1.2 werden die zwei verschiedenen Ansätze Quad und Laplace zur Schätzung der Parameter im GLMM mit Hilfe der ML-Methode vorgestellt. Die zwei Varianten werden nachfolgend als Schätzverfahren Quad bzw. Laplace oder kurz Quad- bzw. Laplace-Verfahren bezeichnet.

3.1.1 ML-Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Sei β der Vektor der festen Modelleffekte und u_i der Vektor der zufälligen Effekte von Objekt i ($i = 1, \dots, a$). Pro Objekt sei ein Vektor $y_i = (y_{i1}, \dots, y_{in_i})'$ von n_i wiederholten Beobachtungen vorhanden. Die Vektoren u_i seien unabhängig voneinander und normalverteilt mit $u_i \sim N(0, D)$. Die Varianzen und Kovarianzen in D seien in dem Vektor θ zusammengefasst. Zur Vereinfachung werden die Dichtefunktionen generell mit $p(\cdot)$ bezeichnet. Dann besitzt die Log-Likelihoodfunktion (logL) der Beobachtungen die Gestalt:

$$\log L(\beta, \theta | y_i) = \sum_{i=1}^a \log \left\{ \int p(y_i | u_i, \beta) \cdot p(u_i | \theta) du_i \right\} \quad (3.1)$$

Aufgrund von Messwiederholungen gilt für das Integral in Darstellung (3.1):

$$\int p(y_i | u_i, \beta) \cdot p(u_i | \theta) du_i = \int \prod_{j=1}^{n_i} p(y_{ij} | u_i, \beta) \cdot p(u_i | \theta) du_i \quad (3.2)$$

Zur Aufstellung der logL müssen demnach Integrale berechnet werden, deren Dimension der Anzahl zufälliger Effekte für Objekt i entspricht.

Zur numerischen Berechnung von Integralen stehen die Gauß-Hermite-Quadraturformeln bereit (Diggle et al., 2002, S. 212 ff). Gilt $u_i \sim N(0, \sigma_u^2)$, so sind die Integrale in Darstellung (3.1) eindimensional. Es gilt die Approximation:

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x) e^{-x^2} du \approx \sum_{i=1}^{N_q} h(x_i) \cdot w_i \quad (3.3)$$

In Darstellung (3.3) sind w_i Gewichte, x_i Abszissenwerte und N_q die Anzahl der Quadraturpunkte. Die Berechnung von w_i und x_i erfolgt mit Hilfe der Hermite-Polynome (McCulloch et al., 2008, S. 327 f).

3.1.2 ML-Methode basierend auf der Laplace-Approximation

Zur Vereinfachung werden im folgenden Abschnitt die Dichtefunktionen generell mit $p(\cdot)$ angegeben. Sei y der Vektor aller Beobachtungen, β der Vektor der festen Modellparameter, u der Vektor der zufälligen Modelleffekte mit $Var(u) = G$ und θ der Vektor der Varianzen und Kovarianzen in G . Dann besitzt die marginale Verteilung von y die Gestalt (SAS 9.2, online Dokumentation für die Prozedur GLIMMIX):

$$\begin{aligned} p(y) &= \int p(y | u, \beta) \cdot p(u | \theta) du \\ &= \int \exp\{l(u | \beta, \theta, y)\} du \\ \text{mit } l(u | \cdot) &= \log\{p(y | u, \beta)\} + \log\{p(u | \theta)\} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Maximiere \hat{u} die Funktion $l(u | \cdot)$ für gegebene Werte von β und θ . Dann liefert die Taylorreihenentwicklung an der Stelle \hat{u} die folgende Näherungsformel für das Integral (3.4):

$$\begin{aligned} p(y) &\approx (2\pi)^{\frac{q}{2}} \cdot \exp(l(\hat{u} | \cdot)) | -l''(\hat{u} | \cdot) |^{-\frac{1}{2}} \\ \text{mit } l''(\hat{u} | \cdot) &= \frac{\partial^2 l}{\partial u \partial u'} \Big|_{(\hat{u}=u)} \end{aligned} \quad (3.5)$$

In Darstellung (3.5) ist q die Dimension von u und $| -l''(\hat{u}) |$ steht für die Determinante der Matrix $l''(\hat{u})$. Die Laplace-Approximation ist folglich gegeben durch:

$$L(\beta, \theta | \hat{u}, y) = (2\pi)^{\frac{q}{2}} \cdot \exp(l(\hat{u} | \cdot)) | -l''(\hat{u} | \cdot) |^{-\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

Die Schätzung der Modellparameter β und θ erfolgt bei der Laplace-Methode durch Lösung des Optimierungsproblems:

$$(-2) \log L(\beta, \theta | \hat{u}, y) \rightarrow \underset{\beta, \theta}{Min!} \quad (3.7)$$

Der Optimierungsalgorithmus ist einfach iterativ. Allerdings hängt \hat{u} von β und θ ab. Seien $\hat{\beta}$ und $\hat{\theta}$ gegebene Schätzwerte. Dann muss zur Bestimmung von \hat{u} das Teiloptimierungsproblem

$$l(u | \beta, \hat{\theta}, \hat{y}) \rightarrow \underset{u}{Max!} \quad (3.8)$$

gelöst werden. Liegen longitudinale Daten für a unabhängige Objekte mit n_i Beobachtungen für Objekt i ($i = 1, \dots, a$) vor, so lassen sich die Formeln (3.4) bis (3.6) im Hinblick auf die rechentechnische Umsetzung erheblich vereinfachen (SAS 9.2, online Dokumentation).

Gemäß Vonesh (1996) reduziert sich die Verzerrung der ML-Schätzer basierend auf der Laplace-Approximation, falls sich die Anzahl der Objekte und die Anzahl der Beobachtungen pro Objekt - genauer das Minimum der n_i -Werte - erhöhen.

3.2 Pseudo-Likelihood Methode basierend auf Linearisierung der Daten

Nachfolgend wird die PL-Methode (Wolfinger und O'Connell, 1993), implementiert in der Prozedur GLIMMIX von SAS (SAS 9.2, online Dokumentation), vorgestellt. Die PL-Methode stellt ein alternatives Schätzverfahren dar, falls die numerische Integration nicht umsetzbar ist.

Sei y der Beobachtungsvektor für die Untersuchungsobjekte der Zufallsgröße Y . In Anlehnung an die üblichen Bezeichnungen im linearen gemischten Modell (McCulloch et al., 2008) besitzen der bedingte Erwartungswert und die bedingte Varianz von Y in Matrixschreibweise die Darstellung:

$$\begin{aligned} E(Y | u) &= h(X\beta + Zu) = h(\eta) = \mu \\ \text{Var}(Y | u) &= A^{\frac{1}{2}}RA^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Hierbei sind β der Vektor der unbekanntesten festen Effekte, u der Vektor der unbekanntesten zufälligen Effekte, X und Z bekannte Versuchsplanmatrizen der festen bzw. zufälligen Effekte und A eine Diagonalmatrix, deren Diagonalelemente Funktionen der Erwartungswerte und damit die Varianzfunktionen abgeleitet aus den Verteilungsannahmen sind.

Die Korrelationsmatrix R kann für den gegebenen Vektor u von Objekteffekten bei wiederholten Beobachtungen pro Objekt beispielsweise eine autoregressive Struktur besitzen.

In (3.9) bedeutet die Schreibweise $h(\eta)$, dass die skalare Funktion $h(\cdot)$ auf die Elemente des Vektors $\eta = X\beta + Zu$ angewendet wird. Die Gestalt der Varianzfunktion ergibt sich aus den Verteilungsannahmen hinsichtlich des Beobachtungsvektors y . Die Taylorentwicklung erster Ordnung von $h(\eta)$ an der Stelle $(\tilde{\beta}, \tilde{u})$ liefert:

$$\begin{aligned} h(\eta) &= h(\tilde{\eta}) + \frac{\partial h}{\partial \beta}(\beta - \tilde{\beta}) + \frac{\partial h}{\partial u}(u - \tilde{u}) \\ &= h(\tilde{\eta}) \frac{\partial h}{\partial \eta} \cdot X(\beta - \tilde{\beta}) + \frac{\partial h}{\partial \eta} \cdot Z(u - \tilde{u}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Also:

$$\begin{aligned} h(\eta) &= h(\tilde{\eta}) + \tilde{\Delta} \cdot X(\beta - \tilde{\beta}) + \tilde{\Delta} \cdot Z(u - \tilde{u}) \\ \text{mit } \tilde{\Delta} &= \frac{\partial h}{\partial \eta} | (\tilde{\beta}, \tilde{u}) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Umstellung und Multiplikation mit der inversen Matrix $\tilde{\Delta}^{-1}$ liefert:

$$\begin{aligned} \mu - h(\tilde{\eta}) &= \tilde{\Delta} \cdot X(\beta - \tilde{\beta}) + \tilde{\Delta} \cdot Z(u - \tilde{u}) \\ \tilde{\Delta}^{-1}(\mu - h(\tilde{\eta})) + X\tilde{\beta} + Z\tilde{u} &= X\beta + Zu \end{aligned} \quad (3.12)$$

In Gleichung (3.12) ist die linke Seite der bedingte Erwartungswert des folgenden Vektors P

von „Pseudodaten“ (Schabenberger, 2005).

$$\begin{aligned}
P &= \tilde{\Delta}^{-1}(Y - h(\tilde{\eta})) + X\tilde{\beta} + Z\tilde{u} \\
\text{mit } E(P | u) &= X\beta + Zu \\
\text{und } \text{Var}(P | u) &= \tilde{\Delta}^{-1}A^{\frac{1}{2}}RA^{\frac{1}{2}}\tilde{\Delta}^{-1}
\end{aligned}
\tag{3.13}$$

In Darstellung (3.13) wird für P Normalverteilung unterstellt und das folgende lineare gemischte Modell aufgestellt und gelöst:

$$\begin{aligned}
P &= X\beta + Zu + \varepsilon \\
\text{mit } E(P) &= X\beta \\
\text{und } \text{Var}(P) &= V(\theta) = ZGZ' + \tilde{\Delta}^{-1}A^{\frac{1}{2}}RA^{\frac{1}{2}}\tilde{\Delta}^{-1}
\end{aligned}
\tag{3.14}$$

In (3.14) bezeichnet θ den Vektor der unbekanntten Varianzkomponenten, enthalten in den Matrizen G und R . Zu den gegebenen Startwerten $\tilde{\beta}$ und \tilde{u} muss also ein lineares gemischtes Modell für Pseudodaten unter Annahme der Normalverteilung aufgestellt und wie üblich iterativ gelöst werden. Die neuen Lösungen sind wiederum Startwerte für die Linearisierung, solange bis Start- und Lösungsvektor hinreichend gut übereinstimmen. Konvergenz wird erreicht, falls die Differenzen der Parameterschätzungen aus zwei aufeinander folgenden linearen gemischten Modellen eine vorgegebene Toleranz nicht überschreiten. Erfolgt die Linearisierung an der Stelle $(\tilde{\beta}, \tilde{u})$, so liegt eine subjektspezifische (S) PL-Methode vor. Wird dagegen an der Stelle $(\tilde{\beta}, 0)$ linearisiert, so liegt eine marginale (M) PL-Methode vor. Will man als Anwender letztendlich in der Originalskala zwischen den Gruppenmitteln vergleichen, dann müssen die bedingten Erwartungswerte innerhalb der SPL-Methode in marginale Erwartungswerte umgerechnet werden. Für die MPL-Methoden ist dies nicht nötig.

Die MPL- und SPL-Methode unterscheiden sich zusätzlich in der Schätzmethode für die Varianzkomponenten des Modells (3.14). Bei Nutzung der REML-Methode ergeben sich die Schätzverfahren RMPL und RSPL. Die REML-Methode ist sehr bedeutsam in der Tierzucht und beispielsweise Standard in den Programmpaketen ASREML (Gilmour et al., 2002) oder VCE (Groeneveld et al., 2008). Der Einsatz der ML-Methode zur Schätzung der Varianzkomponenten liefert die Schätzverfahren MMPL und MSPL.

3.3 Generalized estimating equations

Im marginalen Modell werden die Parameter durch Aufstellung und Lösung der GEE geschätzt. Der Ansatz für die Arbeitskorrelationsmatrix fließt bei Angabe einer Korrelationsmatrix für den Vektor der wiederholten Beobachtungen pro Objekt mit ein. Das Schätzverfahren GEE ist im Vergleich zu den Schätzverfahren Quad und Laplace erstens rechentechnisch einfacher umzusetzen und benötigt zweitens keine Vorgabe einer multivariaten Verteilung. Allerdings stehen

keine Informationskriterien basierend auf der Likelihoodfunktion zur Verfügung, welche als Anpassungsgüte zum Modellvergleich genutzt werden können. Sei $y_i = (y_{i1}, \dots, y_{in_i})'$ der Vektor der wiederholten Beobachtungen von Objekt i ($i = 1, \dots, a$) und $\mu_i = (\mu_{i1}, \dots, \mu_{in_i})'$ der Vektor der zugehörigen marginalen Erwartungswerte. Zwischen den Erwartungswerten und dem Vektor der festen Modellparameter besteht der folgende Zusammenhang:

$$\mu_{ij} = E(Y_{ij}) = h(x'_{ij}\beta) \quad (3.15)$$

In Darstellung (3.15) ist $h(\cdot)$ eine inverse Linkfunktion und x_{ij} ein bekannter Versuchsplanvektor. Weiterhin bezeichnet V_i die Varianz-Kovarianzmatrix von Y_i mit der folgenden Darstellung:

$$V_i = A_i^{\frac{1}{2}} R(\alpha) A_i^{\frac{1}{2}} \quad (3.16)$$

Hierbei bezeichnet A_i eine Diagonalmatrix, deren Diagonalelemente durch die Varianzen von Y_{ij} , entsprechend den Verteilungsannahmen, gegeben sind. Die Arbeitskorrelationsmatrix hängt von dem unbekanntem Parametervektor $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_q)'$ ab. Durch die Elemente von α wird für die Matrix R eine gewisse Struktur vorgegeben. Beispielsweise kann gelten:

$$\text{corr}(Y_{ij}, Y_{ij^*}) = \begin{cases} 1 & \text{für } j = j^* \\ \alpha & \text{für } j \neq j^* \end{cases} \quad (3.17)$$

Die Minimierung der folgenden quadratischen Form:

$$Q(\beta) = \sum_{i=1}^a (y_i - \mu_i)' V_i^{-1} (y_i - \mu_i) \rightarrow \underset{\beta}{Min!} \quad (3.18)$$

liefert die GEE zur iterativen Bestimmung von β :

$$\sum_{i=1}^N D_i' V_i^{-1} (y_i - \mu_i(\hat{\beta})) = 0 \quad (3.19)$$

mit $D_i' = \frac{\partial \mu_i}{\partial \beta}$

Die Schätzung von β wird wie folgt durchgeführt (SAS 9.2, online Dokumentation)

1. Bestimme eine Anfangslösung von β und berechne den Vektor $\mu_i(\beta)$.
2. Berechne die Matrix R , indem die Elemente von α nach der Momentenmethode durch Pearson Residuen geschätzt werden (Hardin und Hilbe, 2003).
3. Berechne eine Schätzung für Matrix V_i .
4. Löse das Gleichungssystem (3.19) iterativ und vergleiche den alten und den neuen Parametervektor β .

5. Wiederhole die Schritte zwei bis vier solange, bis die Differenzen zwischen aufeinanderfolgenden Parameterschätzungen ein vorgegebenes Toleranzniveau einhalten.

Bemerkung: Besitzt $R(\alpha)$ die durch (3.17) gegebene Struktur, so kann die Schätzung von α mit Pearson Residuen:

$$r_{ij} = \frac{(y_{ij} - \hat{\mu}_{ij})}{\sqrt{\hat{Var}(y_{ij})}}; \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, a \\ j = 1, \dots, n_i \end{array}$$

nach der folgenden Vorschrift erfolgen:

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{(N^* - p)} \sum_{i=1}^a \sum_{j < j^*} r_{ij} r_{ij^*}$$

mit $N^* = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^a n_i(n_i - 1)$ (3.20)

und $p =$ Anzahl unabhängiger Modellparameter

3.4 Berechnung der Standardfehler in der Responseskala

Für den Vergleich marginaler Erwartungswerte mit Hilfe des Wald t-Tests (Wald, 1943; Tuerlinckx et al., 2006) wird der Standardfehler der Differenzen in der Responseskala benötigt. Die Prozedur GLIMMIX liefert die Standardfehler von Differenzen standardmäßig nur innerhalb der Linkskala. Deshalb müssen die Standardfehler in der Responseskala näherungsweise nach der Deltamethode (Greene, 2002, S. 913) berechnet werden.

Sei $h(\theta)$ eine stetig differenzierbare Funktion des Vektors $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_q)'$ von Modellparametern. Für θ sei eine erwartungstreue Schätzung $\hat{\theta}$ mit (asymptotischer) Varianz-Kovarianzmatrix Σ vorhanden. Dann liefert die Deltamethode für die Varianz der Schätzungen $\hat{h} = h(\hat{\theta})$ die Näherungsformel:

$$\begin{aligned} Var(\hat{h}) &= c'(\hat{\theta}) \Sigma c(\hat{\theta}) \\ \text{mit } c'(\hat{\theta}) &= \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_1}, \dots, \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_q} \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Sei $\theta = (\theta_1, \theta_2)'$. Dann gilt beispielsweise:

$$Var(\hat{h}) = \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_1} \right)^2 \cdot Var(\hat{\theta}_1) + \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_2} \right)^2 \cdot Var(\hat{\theta}_2) + 2 \cdot \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_1} \cdot \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{\theta}_2} \cdot cov(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) \quad (3.22)$$

Bemerkung: Der Vektor $c(\hat{\theta})$ der ersten partiellen Ableitungen wird in der Literatur auch als Gradient (an der Stelle $\hat{\theta}$) bezeichnet.

4 Modellierung von Zähldaten

Im folgenden Abschnitt werden Modelle für Zähldaten vorgestellt. Für die Auswertung von Zähldaten stehen u. a. die Poi oder NB zur Verfügung, welche in 4.1 und 4.2 vorgestellt werden. Ein Sonderfall sind Zähldaten mit Nullenüberschuss, die in 4.3 näher erläutert werden.

4.1 Poisson-Modelle mit zufälligen Effekten

Das Poi-Modell wird häufig zur Auswertung von Zähldaten verwendet. Sei y_{ij} die j -te Beobachtung von Objekt i . Die Dichtefunktion der Poi beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass Y_{ij} ganzzahlige Werte $y_{ij} = 0, 1, 2, \dots$ annimmt:

$$P(Y_{ij} = y_{ij} \mid \lambda_{ij}) = f_{Poi}(y_{ij} \mid \lambda_{ij}) = \frac{\lambda_{ij}^{y_{ij}} e^{-\lambda_{ij}}}{y_{ij}!} \quad \text{mit } \lambda_{ij} > 0 \quad (4.1)$$

Bezeichne β den Vektor der festen Modellparameter, u_i den Vektor der zufälligen Effekte von Objekt i und x_{ij} bzw. z_{ij} bekannte Versuchsplanvektoren. Der Zusammenhang zwischen λ_{ij} und η_{ij} wird über eine inverse Linkfunktion angegeben:

$$\begin{aligned} Y_{ij} \mid u_i &\sim \text{Poi}(\lambda_{ij} \mid u_i) \\ \lambda_{ij} &= \exp(x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i) \\ \text{mit } u_i &\sim N(0, D) \end{aligned} \quad (4.2)$$

Der bedingte Erwartungswert und die Varianz lassen sich wie folgt formulieren:

$$E_{Poi}(Y_{ij} \mid u_i) = \text{Var}_{Poi}(Y_{ij} \mid u_i) = \lambda_{ij} \quad (4.3)$$

Besitzt der Vektor u_i der Objekteffekte nur eine Komponente, so folgt:

$$\begin{aligned} Y_{ij} &\sim \text{Poi}(\lambda_{ij}) \\ \text{mit } \log(\lambda_{ij}) &= x'_{ij}\beta + u_i \quad u_i \sim N(0, \sigma_u^2) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Umstellung in (4.4) liefert:

$$\lambda_{ij} = e^{u_i} e^{x'_{ij}\beta} \quad (4.5)$$

Setzt man $z_i = e^{u_i}$, so ergibt sich ein multiplikatives Modell.

$$\begin{aligned} Y_{ij} &\sim \text{Poi}(z_i \cdot \mu_{ij}) \\ \text{mit } \log(\mu_{ij}) &= x'_{ij}\beta \end{aligned} \quad (4.6)$$

Durch spezielle Wahl für die Verteilung von z_i ergeben sich weitere Poi-Modelle. Diese Modelle dienen vor allem zur Abbildung einer Überdispersion (Xu et al., 2008), wenn Erwartungswert und Varianz nicht mehr übereinstimmen. Folgende Modelle sind in der Literatur bekannt (Cameron und Trivedi, 1998, S. 100).

A) Das Poisson-Gamma-Modell

Genüge z_i einer Gamma-Verteilung mit Parameter δ .

$$\begin{aligned}
 z_i &\sim \text{Gamma}(\delta, \delta); & \delta > 0 \\
 &\text{mit der Dichtefunktion} \\
 g(z_i | \delta) &= \frac{\delta}{\Gamma(\delta)} \cdot z_i^{(\delta-1)} e^{-z_i \delta}; & z_i > 0 \\
 E(z_i | \delta) &= 1; & \text{Var}(z_i | \delta) = \frac{1}{\delta} = \alpha
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Bemerkung: Unter der Annahme einer Gammaverteilung lässt sich die marginale Verteilung von Y_{ij} angeben. Man erhält die NB.

B) Das Poisson- „Inverse Gaussian“-Modell

Genüge z_i einer inversen Gauß- bzw. Wald-Verteilung mit Parameter δ .

$$\begin{aligned}
 z_i &\sim \text{IGaussian}(1, \delta) \\
 &\text{mit der Dichtefunktion} \\
 g(z_i | \delta) &= \sqrt{\frac{\delta}{2\pi z_i^3}} \exp\left(-\frac{\delta(z_i - 1)^2}{2z_i}\right); & z_i > 0 \\
 E(z_i | \delta) &= 1; & \text{Var}(z_i | \delta) = \frac{1}{\delta}
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Weitere Verteilungsannahmen für z_i , einschließlich der Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Modellen, sind beispielsweise bei Osuna Echavarría (2004) zu finden.

4.2 Modelle der negativen Binomialverteilung mit zufälligen Effekten

Als weitere Möglichkeit steht das Modell der NB zur Verfügung. Vor allem, wenn für Zähl-daten Überdispersion vorliegt, ist das NB-Modell eine Alternative zum nicht multiplikativen Poi-Modell. Wählt man die klassische Form (Heilbron, 1994) so folgt:

$$f_{NB}(y_{ij} | \lambda_{ij}, \alpha) = \frac{\Gamma(\alpha^{-1} + y_{ij})}{\Gamma(\alpha^{-1}) y_{ij}!} \cdot (1 + \alpha \cdot \lambda_{ij})^{-\alpha^{-1}} \cdot \left(\frac{\alpha \cdot \lambda_{ij}}{1 + \alpha \cdot \lambda_{ij}}\right)^{y_{ij}} \tag{4.9}$$

Bezeichne β den Vektor der festen Modellparameter, u_i den Vektor der zufälligen Effekte von

Objekt i und x_{ij} bzw. z_{ij} bekannte Versuchsplanvektoren. Dann folgt:

$$\begin{aligned} Y_{ij} | u_i &\sim \text{NB}(\lambda_{ij}, \alpha | u_i) \\ \lambda_{ij} &= \exp(x'_{ij}\beta + z'_{ij}u_i) \\ \text{mit } u_i &\sim N(0, D) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Für den bedingten Erwartungswert und die Varianz ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_{\text{NB}}(Y_{ij} | u_i) &= \lambda_{ij} \\ \text{Var}_{\text{NB}}(Y_{ij} | u_i) &= \lambda_{ij} + \alpha \cdot \lambda_{ij}^2 \end{aligned} \quad (4.11)$$

Bemerkung: Die Dichte der NB hängt zusätzlich vom Parameter α ab. Für $\alpha > 0$ stimmen Erwartungswert und Varianz nicht mehr überein. Der Parameter α beschreibt also den Grad der Überdispersion und wird deshalb als Dispersionsparameter bezeichnet.

4.3 Zähldaten mit Nullenüberschuss

Übersteigt die Anzahl der beobachteten Nullen für Zähldaten die erwartete Anzahl, abgeleitet aus einer positiven Ursprungsverteilung wie der Poi oder der NB, so liegt ein sogenannter „Nullenüberschuss“ vor. Für die Behandlung dieses Problems sind kombinierte Modelle erforderlich, bei denen für das Ereignis Null und die positiven Ereignisse verschiedene Verteilungen zugrunde gelegt werden. Bekannt sind Hurdle und ZI-Modelle (Ridout et al., 1998; Hall, 2000; Yau et al., 2003; Min und Agresti, 2005; Rodrigues-Motta et al., 2007; Liu und Cela, 2008) unter Verwendung von Poi und NB, welche in den Abschnitten 4.3.1 und 4.3.2 beschrieben werden.

4.3.1 Hurdle Modelle mit zufälligen Effekten

Hurdle Modelle (Mullahy, 1986) sind kombinierte Modelle, wobei Ereignisse kleiner gleich und oberhalb einer Hürde unterschieden und deren Verteilungen miteinander kombiniert werden. Liegt ein Nullenüberschuss vor, so wird als Hürde der Wert Null gewählt. Im folgenden Abschnitt wird für die Verteilung oberhalb der Hürde „Null“ sowohl eine Poi als auch eine NB vorausgesetzt. Im Hurdle Modell wird die Wahrscheinlichkeit, dass Y_{ij} den Wert y_{ij} annimmt, wie folgt modelliert:

$$P(Y_{ij} = y_{ij}) = \begin{cases} p_{0,ij} & \text{für } y_{ij} = 0 \\ (1 - p_{0,ij}) \cdot f_T(y_{ij} | \lambda_{ij}) & \text{für } y_{ij} > 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

In Formel (4.12) ist $f_T(\cdot)$ die Dichtefunktion einer gestutzten Poi (TPoi) oder einer gestutzten NB (TNB). Im Hurdle Modell basierend auf Poi (HP-Modell) wird die gestutzte Dichtefunktion

($f_{TPoi}(\cdot)$) wie folgt berechnet:

$$f_{TPoi}(y_{ij} | \lambda_{ij}) = \frac{f_{Poi}(y_{ij} | \lambda_{ij})}{(1 - f_{Poi}(0 | \lambda_{ij}))} \quad (4.13)$$

mit $f_{Poi}(0 | \lambda_{ij}) = \exp(-\lambda_{ij})$

Für das Hurdle Modell unter Nutzung der NB (HNB-Modell) besitzt die gestutzte Dichtefunktion ($f_{TNB}(\cdot)$) die Gestalt:

$$f_{TNB}(y_{ij} | \lambda_{ij}, \alpha) = \frac{f_{NB}(y_{ij} | \lambda_{ij}, \alpha)}{(1 - f_{NB}(0 | \lambda_{ij}, \alpha))} \quad (4.14)$$

mit $f_{NB}(0 | \lambda_{ij}, \alpha) = (1 + \alpha \cdot \lambda_{ij})^{-\alpha^{-1}}$

Mit Hilfe der Logit- bzw. Log-Linkfunktion wird zwischen dem Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ bzw. λ_{ij} und den Einflussfaktoren der folgende Zusammenhang hergestellt:

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{0,ij}) &= x'_{1,ij}\beta_1 + z'_{1,ij}u_{1i} & \text{mit } u_{1i} &\sim N(0, D_1) \\ \log(\lambda_{ij}) &= x'_{2,ij}\beta_2 + z'_{2,ij}u_{2i} & \text{mit } u_{2i} &\sim N(0, D_2) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Setzt man $\omega = \frac{1 - p_{0,ij}}{1 - f_{Poi}(0 | \lambda_{ij})}$. Dann folgt für den bedingten Erwartungswert im HP-Modell die folgende Darstellung (Heilbron, 1994):

$$\begin{aligned} E_{HP}(Y_{ij} | u_i) &= \sum_{y_{ij}=1}^{\infty} \omega \cdot y_{ij} \cdot f_{Poi}(y_{ij} | \lambda_{ij}) = \omega \cdot \lambda_{ij} = \mu_{ij} \\ \text{mit } u_i &= (u_{1i}, u_{2i})' \end{aligned} \quad (4.16)$$

Indem in Formel (4.16) die Dichte der Poi durch die Dichte der NB ersetzt wird, gilt für den bedingten Erwartungswert des HNB-Modells die Darstellung:

$$\begin{aligned} E_{HNB}(Y_{ij} | u_i) &= \omega \cdot \lambda_{ij} = \mu_{ij} \\ \text{mit } \omega &= \frac{1 - p_{0,ij}}{1 - f_{NB}(0 | \lambda_{ij}, \alpha)} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Nach Definition gilt für die Varianz einer diskreten Zufallsgröße Y_{ij} mit Dichtefunktion $f(y_{ij})$ die Beziehung:

$$\text{Var}(Y_{ij}) = \sum_{y_{ij}=0}^{\infty} y_{ij}^2 \cdot f(y_{ij}) - [E(Y_{ij})]^2 \quad (4.18)$$

Die Anwendung der Formel (4.18) auf die Dichte des HP-Modells liefert die bedingte Varianz:

$$\begin{aligned}
Var_{HP}(Y_{ij} | u_i) &= \sum_{y_{ij}=1}^{\infty} y_{ij}^2 f_{Poi}(y_{ij} | \lambda_{ij}) \cdot \omega - (\omega \cdot \lambda_{ij})^2 \\
&= \omega \cdot \left(Var_{Poi}(Y_{ij} | u_i) + [E_{Poi}(Y_{ij} | u_i)]^2 \right) - (\omega \cdot \lambda_{ij})^2 \\
&= \omega \cdot (\lambda_{ij} + \lambda_{ij}^2) - (\omega \cdot \lambda_{ij})^2
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Setzt man $\mu_{ij} = \omega \cdot \lambda_{ij}$ ein, so folgt (Heilbron, 1994):

$$\begin{aligned}
Var_{HP}(Y_{ij} | u_i) &= \mu_{ij} + \lambda_{ij} \cdot \mu_{ij} - \mu_{ij}^2 \\
&= \mu_{ij} + \mu_{ij}(\lambda_{ij} - \mu_{ij})
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Bemerkung: Durch Umformung lässt sich die folgende Beziehung ableiten:

$$Var_{HP}(Y_{ij} | u_i) = \mu_{ij} + \frac{1 - \omega}{\omega} \cdot \mu_{ij}^2 \quad \text{mit} \quad \frac{1 - \omega}{\omega} = \left[\frac{\lambda_{ij}}{\mu_{ij}} - 1 \right]$$

Durch Einsetzen der Dichte der NB statt der Dichte der Poi in Darstellung (4.19) ergibt sich für die bedingte Varianz im HNB-Modell die folgende Darstellung:

$$Var_{HNB}(Y_{ij} | u_i) = \omega \cdot \left[\lambda_{ij} + \alpha \cdot \lambda_{ij}^2 + \lambda_{ij}^2 \right] - (\omega \cdot \lambda_{ij})^2 \tag{4.21}$$

Setzt man $\mu_{ij} = \omega \cdot \lambda_{ij}$ ein, so folgt (Heilbron, 1994):

$$\begin{aligned}
Var_{HNB}(Y_{ij} | u_i) &= \mu_{ij} + \alpha \cdot \lambda_{ij} \cdot \mu_{ij} + \lambda_{ij} \cdot \mu_{ij} - \mu_{ij}^2 \\
&= \mu_{ij} + \mu_{ij} \cdot (\lambda_{ij} - \mu_{ij}) + \alpha \cdot \lambda_{ij} \cdot \mu_{ij}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

4.3.2 Zero Inflated Modelle mit zufälligen Effekten

Die von Lambert (1992) eingeführten ZI-Modelle sind ebenfalls kombinierte Modelle, wobei Nullen nicht nur durch einen Auswahlprozess entstehen, sondern auch durch den Ursprungsprozess selbst. Das heißt, das Ereignis Null kann zwei unterschiedlichen Gruppen zugeordnet werden. Zum einen sind manche Milchkühe gegenüber Mastitis resistent und zum anderen existieren nicht resistente Milchkühe, die unter bestimmten positiven Umweltbedingungen gesund bleiben (Rodrigues-Motta et al., 2007). Das Ereignis Null tritt sowohl bei der Gruppe der resistenten als auch der nicht resistenten Milchkühe auf.

Im ZI-Modell wird die Wahrscheinlichkeit, dass die Zufallsgröße Y_{ij} den Wert y_{ij} annimmt, wie

folgt modelliert:

$$P(Y_{ij} = y_{ij}) = \begin{cases} p_{ij} + (1 - p_{ij}) \cdot f(0 | \lambda_{ij}) & \text{für } y_{ij} = 0 \\ (1 - p_{ij}) \cdot f(y_{ij} | \lambda_{ij}) & \text{für } y_{ij} > 0 \end{cases} \quad (4.23)$$

mit $0 \leq p_{ij} \leq 1$

In Darstellung (4.23) ist $f(\cdot)$ die Dichtefunktion für die Poi oder NB (vgl. Formel (4.1) und (4.9)). Die Verteilungsparameter p_{ij} und λ_{ij} seien von den Einflussgrößen wie folgt abhängig:

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{ij}) &= x'_{1,ij} \beta_1 + z'_{1,ij} u_{1i} & \text{mit } u_{1i} &\sim N(0, D_1) \\ \log(\lambda_{ij}) &= x'_{2,ij} \beta_2 + z'_{2,ij} u_{2i} & \text{mit } u_{2i} &\sim N(0, D_2) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Analog zu Darstellung (4.16) folgt für den bedingten Erwartungswert im ZI-Modell:

$$E_{ZI}(Y_{ij} | u_i) = (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} \quad (4.25)$$

Die Anwendung der Darstellung (4.18) für die Dichte der Poi im ZIP-Modell führt zu der folgenden Darstellung für die bedingte Varianz (Xiang et. al, 2007):

$$\begin{aligned} \text{Var}_{ZIP}(Y_{ij} | u_i) &= (1 - p_{ij}) \cdot (\lambda_{ij} + \lambda_{ij}^2) - [(1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij}]^2 \\ &= (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} \cdot [1 + \lambda_{ij} - (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij}] \\ &= (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} (1 + p_{ij} \cdot \lambda_{ij}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Analog ergibt sich durch Einsetzen der Dichte der NB für die bedingte Varianz im ZINB-Modell die folgende Darstellung (Erdman et al., 2008):

$$\begin{aligned} \text{Var}_{ZINB}(Y_{ij} | u_i) &= (1 - p_{ij}) \cdot (\lambda_{ij} + \alpha \cdot \lambda_{ij}^2 + \lambda_{ij}^2) - [(1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij}]^2 \\ &= (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} \cdot [1 + \alpha \cdot \lambda_{ij} + \lambda_{ij} - (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij}] \\ &= (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} \cdot [1 + \alpha \cdot \lambda_{ij} + p_{ij} \cdot \lambda_{ij}] \\ &= (1 - p_{ij}) \cdot \lambda_{ij} \cdot [1 + \lambda_{ij}(p_{ij} + \alpha)] \end{aligned} \quad (4.27)$$

4.4 Modellwahl und -überprüfung bei Vorliegen von Zähldaten

Zur Modellwahl und -überprüfung sind in der Literatur zahlreiche Kriterien wie beispielsweise die Pearson-Statistik oder die Devianz bekannt (Agresti, 2002). In den folgenden Abschnitten werden die drei Möglichkeiten beschrieben, die in der vorliegenden Arbeit zur Modellwahl genutzt wurden.

4.4.1 Wahl einer geeigneten Verteilung

Nach Vorgabe einer Verteilungsannahme für das jeweilige Untersuchungsmerkmal wurden die Wahrscheinlichkeiten $P(Y = y)$ mit $y = 0, 1, 2, \dots$, geschätzt aus der Stichprobe mit Hilfe relativer Häufigkeiten, und die mittleren Wahrscheinlichkeiten

$$\hat{P}(Y = y) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \hat{P}(Y_k = y),$$

vorhergesagt mit dem unterstellten Schätzmodell, berechnet und anschließend gegenübergestellt (Erdman et al., 2008). Dafür wurden für jeden Datensatz k (mit $k = 1, \dots, N$) die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten $\hat{P}_k(y) = \hat{P}(Y_k = y)$ unter Verwendung der Schätzungen für die Modellparameter, welche spezifisch für jeden Datensatz vorlagen, ermittelt. Vorhersagen für die relativen Häufigkeiten ergaben sich durch Bildung von mittleren Wahrscheinlichkeiten über $\hat{P}_k(y)$ für y -Werte von $0, 1, \dots, y_{max}$. Dabei entspricht y_{max} dem größten Wert für das Zählmerkmal in der Stichprobe. Eine Verteilung wurde dann akzeptiert, wenn der Trend der beobachteten Häufigkeiten näherungsweise wiedergespiegelt werden konnte.

4.4.2 Verwendung von Informationskriterien

Konkurrenzmodelle können mit Hilfe des Akaike-Information-Criterion (AIC) und dem Bayesian-Information-Criterion (BIC), basierend auf der $\log L$, rangiert werden. Das AIC nach Akaike (1974) und das BIC nach Schwarz (1978) sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} AIC &= -2\log L(\beta, \theta | y) + 2d \\ BIC &= -2\log L(\beta, \theta | y) + d\log(n). \end{aligned} \tag{4.28}$$

In Darstellung (4.28) ist n bei Vorliegen von wiederholten Beobachtungen pro Objekt die Anzahl unabhängiger Objekte und d die Anzahl der freien (unabhängigen) Modellparameter plus die Anzahl der Varianzkomponenten. Für das Modell in den Darstellungen (2.3) und (2.4) ist d der Rang der Versuchsplanmatrix der festen Effekte plus die Anzahl an Varianzkomponenten in der Matrix D .

Das AIC corrected (AICC) (Hurvich und Tsai, 1989) wird bei kleinem Stichprobenumfang N ($\frac{N}{d} < 40$) empfohlen (Burnham und Anderson, 2002):

$$AICC = -2\log L(\beta, \theta | y) + \frac{2dN}{N - d - 1}. \tag{4.29}$$

4.4.3 Modellwahl mit Hilfe von Trendkurven

Für ein Merkmal, das in Abhängigkeit eines quantitativen Einflussfaktors (beispielsweise des Laktationstages oder Alters) eine bestimmte Dynamik aufweist, müssen stetige Kovariablen im Modell berücksichtigt werden. Die Anzahl der Kovariablen ist abhängig vom Grad der Nichtlinearität des Zusammenhangs zwischen Responsevariable und stetiger Einflussgröße. Quasilineare Regressionsfunktionen sind wünschenswert, um Linearität für den Prädiktor im GLM zu gewährleisten.

Um ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Dynamik zu wählen, wurde eine Trendkurve aus den Beobachtungen ermittelt und der Erwartungswertkurve, geschätzt mit Hilfe der Modellparameter, gegenübergestellt. Zunächst wurde anhand der Beobachtungen eine Trendkurve mit Hilfe lokaler Regression (Cleveland et al., 1988) innerhalb der SAS-Prozedur LOESS geschätzt. Danach wurde die Erwartungswertkurve aus den Schätzungen für die Modellparameter ermittelt und optisch mit der Trendkurve verglichen. Ein Modell wurde akzeptiert, wenn der Trend gut wiedergespiegelt werden konnte.

5 Anwendungen im landwirtschaftlichen Versuchswesen

Im folgenden Abschnitt werden zwei Praxisbeispiele aus dem Feld- und Tierversuchswesen vorgestellt. Aus den Fragestellungen seitens der Versuchsansteller ergaben sich die Zählmerkmale Anzahl Thripse pro Ährenschrift beim Winterweizen und die Anzahl Besuche am Futterautomat beim Milchrind. Zunächst wird für beide Merkmale mit Hilfe der Kriterien aus Abschnitt 4.4 ein geeignetes Auswertungsmodell bestimmt, um für die anschließende Simulation Modellparameter vorzugeben.

5.1 Anzahl Thripse pro Ährenschrift beim Winterweizen

5.1.1 Material

Winterweizen hat in Sachsen-Anhalt eine wirtschaftlich wichtige Bedeutung. Thripse sind dabei eine der häufigsten Schädlinge beim Winterweizen und können den Ertrag erheblich mindern (Volkmar et al., 2009). In den Jahren 2008 und 2009 wurde deshalb in Freilandversuchen u. a. der Befall mit Thripsen der Art *Limothrips cerealium* und *Limothrips denticornis* an zwölf Winterweizensorten, von denen fünf Sorten resistent gegen Thripsbefall waren, untersucht (Gaafar et al., 2011). Der Befall mit Schädlingen wurde zu zwei unterschiedlichen Terminen in beiden Jahren analysiert, da man einen Zusammenhang zwischen dem Entwicklungsstadium der Weizenähre und der Anzahl an Schädlingen vermutete. Die Anlage war vollständig randomisiert. Durch Zählung der Anzahlen je Spindelstufe einer Weizenähre wurde das Merkmal Anzahl Thripse pro Spindelstufe einer Weizenähre erfasst. Von jeder Prüfsorte wurden in jedem Jahr an beiden Terminen zehn Ähren auf Befall mit Thripsen geprüft. Um den Jahreseinfluss zu berücksichtigen, werden die vier Messungen als vier Messtermine aufgefasst. Da sich das Schadausmaß je nach Bereich einer Ähre unterschied, erfolgte eine Einteilung der Spindelstufe in drei Schichten (Gaafar et al., 2011):

- Spindelstufe ≤ 7 : Schicht 1,
- Spindelstufe > 7 und ≤ 14 : Schicht 2,
- Spindelstufe > 14 : Schicht 3.

5.1.2 Modellwahl und Modellüberprüfung

Das Untersuchungsmerkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift wird als Zählmerkmal aufgefasst. Als feste Effekte werden die Prüffaktoren Sorte, Schicht und Termin im Modell berücksichtigt. Zusätzlich liegen mehrere Beobachtungen für eine Ähre bezogen auf die Schichten vor.

Die Ähre wird als zufälliger Effekt im Modell betrachtet. Im Rahmen der Modellwahl soll geklärt werden, inwiefern eine bestimmte Verteilungsannahme zu bevorzugen ist und die Varianz der zufälligen Ähreneffekte als abhängig vom Termin aufzufassen ist.

In Tabelle 5.1 sind die beobachteten und vorhergesagten relativen Häufigkeiten, ermittelt aus den Modellen basierend auf Poi und NB, dargestellt. Im Vergleich zwischen den Konkurrenzmodellen kann man feststellen, dass die relativen Häufigkeiten der Beobachtungen gut widerspiegelt werden, aber kein Ansatz favorisiert werden kann. Um dies weiter zu differenzieren, werden die Informationskriterien AIC, AICC und BIC der Konkurrenzmodelle verglichen.

Tabelle 5.1: Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%), ermittelt aus den Modellen basierend auf Poisson- (Poi) und negativer Binomialverteilung (NB) für die Anzahl Thripse 0 bis 7 und ≥ 8

Ursprung	P(Y = k)								
	k = 0	1	2	3	4	5	6	7	≥ 8
beobachtet	60.7	22.8	8.33	3.75	1.67	1.46	0.49	0.35	0.49
Poi-Modell	59.8	24.2	8.87	3.58	1.66	0.86	0.47	0.26	0.30
NB-Modell	60.6	23.7	8.68	3.52	1.62	0.83	0.46	0.26	0.29

Nachfolgend sind in Tabelle 5.2 die Anpassungsstatistiken für verschiedene Modellvarianten dargestellt. Die Modelle mit NB werden bei Verwendung von AIC und AICC immer geringfügig günstiger bewertet werden als die Modelle, basierend auf Poi. Zum anderen wird das Modell mit Berücksichtigung einer terminspezifischen Ährenvarianz besser bewertet. Anhand der BIC-Werte würde das weniger komplexe Poi-Modell ohne Berücksichtigung einer terminspezifischen Ährenvarianz am günstigsten bewertet werden. Jedoch wird der Dispersionsparameter im NB-Modell auf $\alpha = 0.47$ ohne Berücksichtigung der terminspezifischen Ährenvarianz und auf $\alpha = 0.13$ mit Berücksichtigung der terminspezifischen Ährenvarianz geschätzt. In beiden Fällen wird Überdispersion erkannt und das NB-Modell ist somit zu favorisieren.

Tabelle 5.2: Anzahl der Modellparameter (d), mit (-2) multiplizierte Log-Likelihoodfunktion (-2LogL), AIC-, AICC- und BIC-Werte in Abhängigkeit der Verteilungsannahme und der zufälligen Ähreneffekte

Modell ¹	d	Statistiken ²			
		-2LogL	Δ AIC	Δ AICC	Δ BIC
Poi + Ähreneffekte	145	2948	8	6	-9
NB + Ähreneffekte	146	2945	6	5	-6
Poi + Ähreneffekte (Termin)	148	2936	1	1	-3
NB + Ähreneffekte (Termin)	149	2932	0	0	0

¹Poi - Poissonverteilung, NB - negative Binomialverteilung

² Δ - Abweichung vom kleinsten Wert

Entsprechend der Ergebnisse aus Tabelle 5.2 wird das Modell basierend auf NB bei Berücksichtigung einer terminspezifischen Ährenvarianz bevorzugt. Sei y_{ijkl} die beobachtete Anzahl Thripse der i -ten Sorte ($i = 1, \dots, a$) zum j -ten Termin ($j = 1, \dots, b$) innerhalb der k -ten Schicht ($k = 1, \dots, c$) der l -ten Ähre ($l = 1, \dots, n_{ij}$). Für das favorisierte Modell ergibt sich:

$$\begin{aligned} Y_{ijkl} | u_{ijl} &\sim \text{NB}(\lambda_{ijkl}, \alpha | u_{ijl}) \\ \lambda_{ijkl} &= \exp(\gamma_{ijk} + u_{ijl}) \\ \text{mit } u_{ijl} &\sim N(0, \sigma_{u_j}^2); j = 1, \dots, b \end{aligned} \quad (5.1)$$

Hierbei sind: γ_{ijk} der feste Effekt der Kombination von Sorte i , Termin j und Schicht k , u_{ijl} der zufällige Effekt von Ähre l der Sorte i zu Termin j und $\sigma_{u_j}^2$ die Varianz der zufälligen Ähreneffekte zu Termin j . Für den bedingten Erwartungswert ergibt sich folgende Darstellung:

$$E(Y_{ijkl} | u_{ijl}) = \exp(\gamma_{ijk} + u_{ijl}) \quad (5.2)$$

Die Umrechnung in marginale Erwartungswerte erfolgt nach folgender Formel:

$$\mu_{ijk} = E_u(Y_{ijkl}) = \exp\left(\gamma_{ijk} + \frac{\sigma_{u_j}^2}{2}\right) \quad (5.3)$$

Mit Hilfe der marginalen Erwartungswerte kann ein Vergleich des Schadausmaßes zwischen den Sorten zu den verschiedenen Terminen erfolgen. Aussagen zum Vergleich der Sorten finden sich bei Gaafar et al. (2011).

5.2 Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat beim Milchrind

5.2.1 Material

In einem Fütterungsversuch an Milchkühen mit einem hohem Leistungsniveau wurden die drei totalen Mischrationen (TMR) Luzerne, Mais und Gras u. a. anhand der Merkmale energie-korrigierte Milch und Trockenmasseaufnahme pro Tag verglichen (Bulang et al., 2006). Die Futteraufnahme pro Kuh konnte über rechnergestützte Fress-Wiege-Tröge erfasst werden, da das Einzeltier über Transponder erkannt wurde. Ein Besuch am Trog wurde akzeptiert, falls eine Futteraufnahme von mindestens 5 g und eine Besuchsdauer von mindestens 6 s registriert wurden.

Weiterhin sollte geklärt werden, ob die Kühe ein bestimmtes Fressverhalten während eines Tages/24-Stundenzyklus (circadianer Rhythmus) zeigen. Deshalb wird im Folgenden das Merkmal Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat modelliert. Die Analyse wird auf die Luzerne-TMR beschränkt, da diese als Alternative zu den zwei anderen TMR besonders von Interesse war und hier Unterschiede zwischen Jung- und Altkühen sichtbar waren (Bulang et al., 2006;

Mielenz et al., 2011). Aus Sicht der Tierernährung wurde die maximale Dauer eines Besuches auf 50 min begrenzt. Außerdem lag für einige Kühe eine sehr hohe Futteraufnahme mit 13 kg Trockenmasse pro Besuch vor. Die Fressgeschwindigkeit lag im Mittel bei 141 g/min und wurde bei einem Variationskoeffizienten von 20 % auf 230 g/min begrenzt. Der Versuch wurde in der Landesanstalt für Landwirtschaft, Forsten und Gartenbau in Iden bezogen auf die Luzerne-TMR über 141 Tage an 7 Jung- und 15 Altkühen durchgeführt. In dem vorliegenden Versuch lag ein Tier-Fressplatz-Verhältnis von 2:1 vor. Folglich könnte es zu einer Konkurrenzsituation zwischen Jung- und Altkühen kommen. Um die Aufstallung zu bewerten, soll die Anzahl Besuche auch zwischen den Laktationsnummern verglichen werden.

5.2.2 Modellwahl und Modellüberprüfung

Die Analyse der mittleren Besuche pro Stunde zeigte während eines Tages keinen bestimmten Rhythmus (siehe Abbildung 5.1). Die Stunde wurde deshalb als fixer Faktor im Modell berücksichtigt. Die Kühe sind hochleistende Nutztiere mit einer mittleren täglichen energiekorrigierten Milch von 30.4 kg/d, die dreimal am Tag gemolken wurden (Stunde 4, 12 und 20). Außerdem wurden die Tröge einmal am Tag gereinigt und aufgefüllt (Stunde 7). Am Übergang zum nächsten Tag erfolgte eine Sperrzeit (Stunde 23). Dies sind zusätzliche Restriktionen, die sich auf das Fressverhalten ausgewirkt haben.

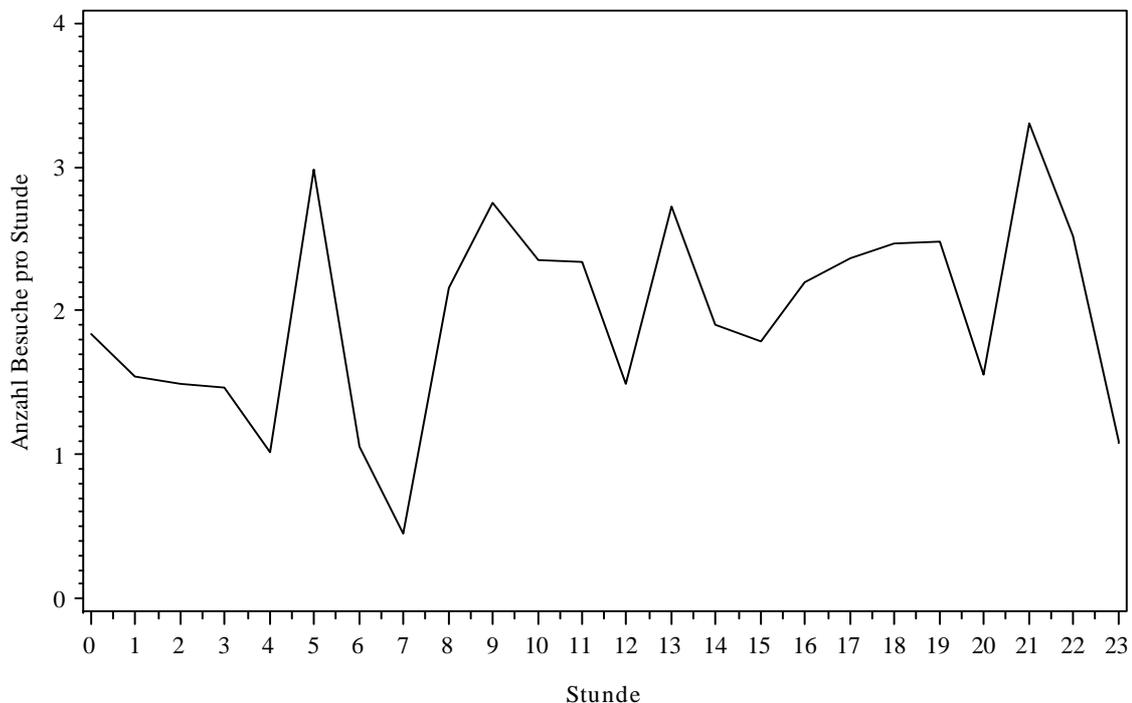


Abbildung 5.1: Mittlere Anzahl Besuche in Abhängigkeit der Tageszeit gemittelt über alle Kühe und Laktationstage für die Ration Luzerne

Die Laktationsnummer wurde als weitere fixe Einflussgröße angesehen. Um eine ausreichende Anzahl an Beobachtungen zu gewährleisten, bildet die erste Laktation eine Klasse und die zweite bis vierte Laktation wird in eine zweite Klasse zusammengefasst.

Der Laktationstag wurde als quantitative Variable im Modell berücksichtigt, da eine Laktationsdynamik des Merkmals Anzahl Besuche pro Stunde zu beobachten war. Zur Beschreibung der Laktationsdynamik wurden der Ansatz nach Ali und Schaeffer (1987) und Legendre-Polynome untersucht (Kirkpatrick et al., 1990).

Da eine geeignete Verteilungsannahme für das Zählmerkmal gefunden werden sollte, wurde im ersten Abschnitt der Analyse der Einfluss der Kühe vernachlässigt. Sei y_{ij} die beobachtete Anzahl Besuche pro Stunde der i -ten Stunde ($i = 1, \dots, a$) für die j -te Laktationsklasse ($j = 1, \dots, b$) am Laktationstag t . Für die Modelle basierend auf Poi bzw. NB wird unterstellt:

$$Y_{ij} \sim \text{Poi}(\lambda_{ij}) \text{ bzw. } \text{NB}(\lambda_{ij}, \alpha)$$

$$\lambda_{ij} = \exp(\beta_{0,ij} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mj} \cdot x_m(t)) \quad (5.4)$$

In Darstellung (5.4) bezeichnen $\beta_{0,ij}$ die festen Effekte der Kombination von Stufe i des Faktors Stunde und Stufe j des Faktors Laktationsklasse. Unabhängig von der untersuchten Verteilungsannahme haben sich Legendre-Polynome 4. Grades als vorteilhafter gegenüber dem Ansatz von Ali und Schaeffer erwiesen. Die beiden Ansätze wurden mit Hilfe von Trendkurven miteinander verglichen (vgl. Abschnitt 4.4.3). Die zugehörigen Abbildungen werden in der vorliegenden Arbeit nicht gezeigt. In Tabelle 5.3 sind die beobachteten relativen Häufigkeiten der Merkmalsausprägungen null bis acht im Vergleich mit den geschätzten Wahrscheinlichkeiten basierend auf Poi und NB dargestellt. Die Ereignisse null bis acht können nicht adäquat mit den Auswahlmodellen widerspiegelt werden.

Tabelle 5.3: Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%) bei Nutzung der Poisson- (Poi) und negativen Binomialverteilung (NB) für die Anzahl Besuche 0 bis 8, gemittelt über alle Kühe und Laktationstage

	P(Y = k)								
	k = 0	1	2	3	4	5	6	7	8
beobachtet	56.3	6.55	6.75	6.43	5.85	4.67	3.82	2.77	2.08
Poi-Modell	18.7	26.69	23.06	15.28	8.55	4.27	1.97	0.86	0.36
NB-Modell	35.7	22.30	14.10	9.09	5.96	3.97	2.68	1.83	1.26

Als Alternative wurden Modelle in die Auswertung einbezogen, die einen Nullenüberschuss berücksichtigen. Im Hurdle Modell wird die Wahrscheinlichkeit, dass Y_{ij} den Wert y_{ij} annimmt,

wie folgt modelliert:

$$P(Y_{ij} = y_{ij} | t) = \left\{ \begin{array}{ll} p_{0,ij} & \text{für } y_{ij} = 0 \\ (1 - p_{0,ij}) \cdot f(y_{ij} | \lambda_{ij}) & \text{für } y_{ij} > 0 \end{array} \right\} \quad (5.5)$$

Um die Wahrscheinlichkeit $p_{0,ij}$ in Abhängigkeit des Laktationstages t zu beschreiben, wurde zusätzlich ein Ansatz mit Sinus- und Kosinusfunktionen getestet. Dieser Ansatz erwies sich als vorteilhafter gegenüber den Legendre-Polynomen (Mielenz et al., 2011):

$$\begin{aligned} y_i(t) &= \sin\left(\frac{2\pi \cdot t}{T_i}\right) & \text{mit } i = 1, 2 \text{ und } T_1 = 300; T_2 = 100 \\ y_{i+1}(t) &= \cos\left(\frac{2\pi \cdot t}{T_i}\right) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Für Hurdle und ZI-Modelle, wie sie in Abschnitt 4.3 beschrieben sind, besteht zwischen den Verteilungsparametern $p_{0,ij}$ und λ_{ij} und den Einflussgrößen Stunde, Laktationsklasse und Laktationstag der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{0,ij}) &= \eta_{0,ij} & \text{mit } \eta_{0,ij} &= \beta_{0,ij}^{(1)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mj}^{(1)} \cdot y_m(t) \\ \log(\lambda_{ij}) &= \eta_{1,ij} & \text{mit } \eta_{1,ij} &= \beta_{0,ij}^{(2)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mj}^{(2)} \cdot x_m(t) \end{aligned} \quad (5.7)$$

In Darstellung (5.7) bezeichnen $\beta_{0,ij}^{(1)}$ bzw. $\beta_{0,ij}^{(2)}$ die festen Effekte der Kombination von Stufe i des Faktors Stunde und Stufe j des Faktors Laktationsklasse.

In Tabelle 5.4 werden die vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten der Hurdle und ZI-Modelle mit den beobachteten relativen Häufigkeiten verglichen. Es wird deutlich, dass Modelle mit Berücksichtigung eines Nullenüberschusses, die beobachtete Wahrscheinlichkeit besser widerspiegeln. Hurdle und ZI-Modelle basierend auf NB erreichten jedoch eine bessere Anpassung. Die aus dem HNB- und ZINB-Modelle berechneten Häufigkeiten erreichten identische Werte, so dass eine weitere Einschätzung der Modellanpassung mit Hilfe der Informationskriterien erfolgte.

Tabelle 5.4: Beobachtete und vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (%) ermittelt aus Hurdle bzw. Zero Inflated Modellen basierend auf Poisson (HP- bzw. ZIP-Modell) und negativer Binomialverteilung (HNB- bzw. ZINB-Modell) für die Anzahl Besuche 0 bis 8

	P(Y = k)								
	k = 0	1	2	3	4	5	6	7	8
beobachtet	56.3	6.55	6.75	6.43	5.85	4.67	3.82	2.77	2.08
HP-Modell	56.3	2.91	5.52	7.42	7.85	6.90	5.24	3.51	2.12
ZIP-Modell	56.3	2.91	5.52	7.42	7.84	6.90	5.24	3.52	2.12
HNB-Modell	56.3	6.23	7.11	6.77	5.83	4.71	3.64	2.73	1.99
ZINB-Modell	56.3	6.23	7.10	6.77	5.83	4.71	3.64	2.73	1.99

In Tabelle 5.5 sind die Anpassungsstatistiken für Modelle analog zu Darstellung (5.7) aufgeführt. Außerdem wurden die linearen Prädiktoren $\eta_{0,ij}$ und $\eta_{1,ij}$ im HNB-Modell um zufällige Tiereffekte einer Kuh k aus der Laktationsklasse j erweitert.

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{0,ijk}) &= \eta_{0,ij} + u_{0,jk} & \text{mit } \eta_{0,ij} &= \beta_{0,ij}^{(1)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mj}^{(1)} \cdot y_m(t) \\ \log(\lambda_{ijk}) &= \eta_{1,ij} + u_{1,jk} & \text{mit } \eta_{1,ij} &= \beta_{0,ij}^{(2)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mj}^{(2)} \cdot x_m(t) \end{aligned} \quad (5.8)$$

Für den Vektor $u_{jk} = (u_{0,jk}, u_{1,jk})'$ der zufälligen Tiereffekte gilt die folgende Verteilungsannahme:

$$u_{jk} = \begin{pmatrix} u_{0,jk} \\ u_{1,jk} \end{pmatrix} \sim N(0, D); \quad D = \begin{pmatrix} \sigma_{u_0}^2 & 0 \\ 0 & \sigma_{u_1}^2 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Im Vergleich von HNB- und ZINB-Modellen ohne Berücksichtigung von zufälligen Effekten wird das ZINB-Modell besser bewertet. Werden jedoch zufällige Effekte im HNB-Modell einbezogen, so liefert dieses Modell die kleinsten Werte für die Informationskriterien. Ein ZINB-Modell mit zufälligen Tiereffekten konnte rechentechnisch umgesetzt werden. Bei einer Rechenzeit von drei Wochen trat jedoch ein Likelihoodfunktionswert von 210449 auf, der sich nicht wie erwartet einordnet (unter Verwendung von SAS 9.2, Windows-XP, 1.86 GHz. CPU, 16 GB RAM). Betrachtet man die Likelihoodfunktion beider Modelle ohne zufällige Effekte, so würde man im Weiteren mit einer geringeren Likelihood für das ZINB-Modell mit zufälligen Effekten rechnen. Das HNB-Modell mit zufälligen Effekten wird letztendlich bevorzugt.

Tabelle 5.5: Anzahl der fixen (p) und zufälligen (q) Modellparameter, mit (-2) multiplizierte Log-Likelihoodfunktion (-2LogL), AIC-, AICC- und BIC-Werte für Hurdle bzw. Zero Inflated Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung (HNB bzw. ZINB)

Modell	p	q	Statistiken ¹			
			-2LogL	Δ AIC	Δ AICC	Δ BIC
HNB	112	1	213146	2769	2769	2767
ZINB	112	1	213137	2760	2760	2758
HNB + Tiereffekte	112	3	210373	0	0	0

¹ Δ - Abweichung vom kleinsten Wert

Die Wahl der Kovariablen für $p_{0,ij}$ und λ_{ij} wurde zusätzlich mit Hilfe von Trendkurven, geschätzt mit Hilfe von lokaler Regression anhand der Beobachtungen, und der Erwartungswertkurve, ermittelt aus den Schätzungen der Modellparameter, überprüft. In Abbildung 5.2 ist die Erwartungswertkurve für $p_{0,ij}$ innerhalb der Laktationsklasse eins, ermittelt aus den Schätzungen des favorisierten Modells, dargestellt. Die Wahl für die Kovariablen wird letztendlich akzeptiert, da der Trend aus den Beobachtungen optisch gut widerspiegelt werden kann.

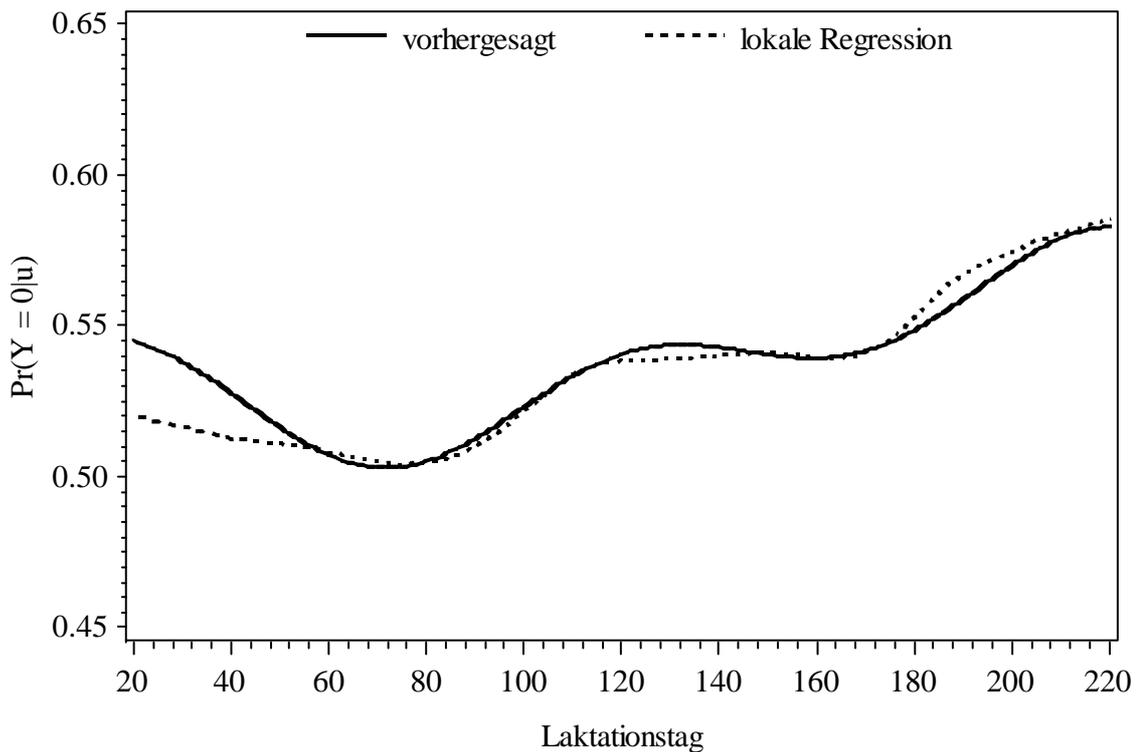


Abbildung 5.2: Geschätzte Wahrscheinlichkeit, dass pro Stunde kein Besuch stattfindet, ermittelt mit Hilfe der Modellparameter im Vergleich zur geglätteten Trendkurve innerhalb Laktationsklasse eins

Der bedingte Erwartungswert für das HNB-Modell mit zufälligen Tiereffekten besitzt die fol-

gende Darstellung:

$$\mu_{ijk}(t) = E(Y_{ijk} | u_{jk}, t) = \frac{(1 - p_{0,ijk})}{(1 - f_{NB}(0 | \lambda_{ijk}))} \cdot \lambda_{ijk} \quad (5.10)$$

In (5.10) ist $f_{NB}(0 | \lambda_{ijk})$ die Dichte, dargestellt in Formel (4.9). Sei $cov(u_{0,jk}, u_{1,jk}) = 0$, dann kann der marginale Erwartungswert näherungsweise wie folgt berechnet werden.

$$\mu_{ij}(t) = E(Y_{ij} | t) \approx \frac{(1 - p_{0,ij}(t))}{(1 - f_{NB}(0 | \lambda_{ij}(t)))} \cdot \lambda_{ij}(t) \quad (5.11)$$

In Formel (5.11) gilt (Ritz und Spiegelman, 2004):

$$p_{0,ij}(t) \approx \frac{\exp(a \cdot \eta_{0,ij})}{1 + \exp(a \cdot \eta_{0,ij})} \quad \text{mit } a = \frac{1}{\sqrt{(1 + c^2 \cdot \sigma_{u0}^2)}} \quad \text{und } c = \frac{16 \cdot \sqrt{3}}{15 \cdot \pi} \quad (5.12)$$

$$\lambda_{ij}(t) = \exp(\eta_{1,ij} + \frac{\sigma_{u1}^2}{2})$$

In Formel (5.12) sind die marginalen Schätzungen für die Verteilungsparameter $p_{0,ij}(t)$ und $\lambda_{ij}(t)$ im Hurdle Modell in Abhängigkeit von den Varianzkomponenten der zufälligen Modelleffekte angegeben.

Mit Hilfe der marginalen Schätzungen können die Laktationsklassen in Abhängigkeit der Laktationstage miteinander verglichen werden. Außerdem kann weiterhin durch Zusammenfassen von bestimmten Stunden, die Besuchsfrequenz am Tag und in der Nacht beurteilt werden. Aussagen für das Fressverhalten der Kühe, bezogen auf das Merkmal Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat, finden sich bei Mielenz et al. (2011).

5.2.3 Rechentechnische Umsetzung für Zähldaten mit Nullenüberschuss

Die rechentechnische Umsetzung erfolgte mit der Statistiksoftware SAS, Version 9.2 (2009). Die in SAS angewendeten Prozeduren für die Hurdle und ZI-Modelle sind in Tabelle 5.6 dargestellt.

Tabelle 5.6: Implementierung von Hurdle bzw. Zero Inflated Modellen basierend auf Poissonverteilung (HP bzw. ZIP) und negativer Binomialverteilung (HNB bzw. ZINB) in ausgewählten SAS-Prozeduren

Modell	Prozedur		
	GENMOD	GLIMMIX	NLMIXED
HP	nein	ja ²	ja
ZIP	ja ¹	nein	ja
HNB	nein	ja ²	ja
ZINB	nein	nein	ja

¹Berücksichtigung von zufälligen Effekten im linearen Prädiktor nicht möglich

²Angabe der Likelihood durch Nutzer notwendig

Die Umsetzung für das ZIP-Modell ist in Prozedur GENMOD unter der Option dist = ZIP möglich. Allerdings können hier keine zufälligen Effekte im Modell berücksichtigt werden. Nachfolgend ist die Umsetzung dargestellt.

```

/*LK = Laktationsklasse, x1 bis x4 und y1 bis y4 = Kovariablen*/
proc genmod data = daten;
class LK Stunde;
model anzahl = LK*Stunde x1(LK) x2(LK) x3(LK) x4(LK) / dist = ZIP link = log noint;
zeromodel LK*Stunde y1(LK) y2(LK) y3(LK) y4(LK) / link = logit ;
output out = df_out pred = mu pzero = p0 xbeta = p1 ;
run;

```

Das HNB-Modell mit zufälligen Effekten kann in SAS mit den Prozeduren NLMIXED und GLIMMIX umgesetzt werden. In der Prozedur NLMIXED müssen die Stufen bzw. Stufenkombinationen von festen Effekten als Regressionsansatz formuliert werden, da es keine class-Anweisung gibt. Liegen dabei viele Stufen vor, wie in dem vorliegenden Modell für das Untersuchungsmerkmal, so ist die Nutzung dieser Prozedur aufgrund von Konvergenzproblemen eingeschränkt. Die rechentechnische Umsetzung für das ZIP-Modell mit zufälligen Effekten innerhalb der Prozedur NLMIXED ist im Anhang 1 dargestellt.

Im Gegensatz dazu konnte durch das Einführen eines Zwei-Schritt-Verfahrens die Prozedur GLIMMIX zur Auswertung des Modells (5.8) genutzt werden. Das HNB-Modell ist in der Prozedur GLIMMIX nicht standardmäßig umgesetzt. Die logL der Hurdle Modelle besteht aus zwei Summanden (Min und Agresti, 2005; Liu und Cela, 2008). Der erste Summand hängt nur vom Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ ab. Deshalb kann die Schätzung der Modellparameter in zwei Schritten erfolgen, wobei vom Nutzer im zweiten Schritt die logL definiert werden muss.

Im ersten Schritt wird die binäre Variable Besuch eingeführt, definiert durch Besuch = 0, wobei kein Besuch pro Stunde am Futterautomat stattgefunden hat, und Besuch = 1, wenn mindestens ein Besuch pro Stunde am Futterautomat erfolgt ist. Damit können die Modellparameter für $p_{0,ij}$ geschätzt werden. Die Schätzungen erfolgen in der logit-Skala. Die Schätzungen für die $p_{0,ij}$ bzw. für den linearen Prädiktor (eta0) und die weiteren Einflussgrößen werden in die interne Datei df0_out gespeichert und stehen damit für den zweiten Schritt zur Verfügung.

```
proc glimmix data = besuch1 method = quad ;
class LK Stunde Tier_Nr; /*LK = Laktationsklasse;*/
model Besuch (event = '0') = LK*Stunde y1(LK) y2(LK) y3(LK) y4(LK) / dist = binary
link = logit noint ;
random int / subject = Tier_Nr;
output out = df0_out pred = eta0 residual = r;
id Anzahl Besuch Stunde LK x1 x2 x3 x4 Tier_Nr;
run;
```

Im zweiten Schritt wird das HNB-Modell mit zufälligen Effekten ausgewertet, indem auf die Schätzungen für $p_{0,ij}$ aus dem ersten Schritt zurückgegriffen wird. Für die Angabe der NB im Hurdle Modell muss der Dispersionsparameter α (alp) neu definiert werden. Dazu steht der interne Parameter $_phi_$ zur Verfügung, wobei α wie folgt berechnet wird (Schabenberger, 2008):

$$\alpha = 1 - \frac{1}{\exp(_phi_)} \quad (5.13)$$

Im nächsten Schritt müssen die zwei Summanden der logL ($_logL_$) für das HNB-Modell definiert werden. Der erste Summand entspricht der logL einer binären Zufallsgröße. Dagegen stellt der zweite Summand die logL einer Zufallsgröße mit TNB dar. In der Prozedur GLIMMIX muss der Beitrag einer Beobachtung zu der entsprechenden logL angegeben werden. (Schabenberger, 2008). Der SAS-interne Parameter $_mu_$ wird gemäß der model- und random-Anweisung gebildet und entspricht dem Verteilungsparameter λ_{ijk} in Formel 5.8.

```

proc glimmix data = df0_out method = quad;
class LK Stunde Tier_NR; /*LK = Laktationsklasse*/
model Anzahl = LK*Stunde x1(LK) x2(LK) x3(LK) x4(LK) / link = log solution noint;
random int / subject = Tier_Nr;
alp = 1 - 1 / exp(_phi_); /*Dispersionsparameter Alpha*/
/* Angabe der Log-Likelihoodfunktion */
if (_mu_ = .) or (_linp_ = .) then _logl_ = .;
else do; p0 = exp(eta0) / (1 + exp(eta0)); p1 = 1.0 - p0;
if (p0 > 1E-12) then log_p0 = log(p0);
else log_p0 = -1E20;
if(p1 > 1E-12) then log_p1 = log(p1);
else log_p1 = -1E20;
if (Anzahl = 0) then _logl_ = log_p0; /*erster Summand*/
else do;
f1 = lgamma (Anzahl + 1/alp) - lgamma (1/alp) - lgamma(Anzahl + 1);
mu1 = alp * _mu_;
if (mu1 > 1E-12) then log_m1 = log(mu1);
else log_m1 = -1E20;
mu2 = 1 + alp * _mu_;
if (mu2 > 1E-12) then log_m2 = log(mu2);
else log_m2 = -1E20;
f2 = Anzahl * log_m1; f3 = (Anzahl + 1/alp) * log_m2;
log_f1 = f1 + f2 - f3; f0 = 1 - mu2**(-1/alp);
if (f0 > 1E-12) then log_f0 = log(f0);
else log_f0 = -1E20;
_logl_ = log_p1 + log_f1 - log_f0; /*zweiter Summand*/
end;
end;
output out = df_out pred = p residual = r; id Anzahl LK Stunde p0 _mu_ _xbeta_ _linp_ alp
_phi_ eta0; ODS OUTPUT ParameterEstimates = sf; RUN;

```

6 Planung und Durchführung von Simulationsstudien

6.1 Ziele der Simulationsstudien

Die Fragestellungen für die Simulationsstudien ergeben sich aus den Anwendungsbeispielen und sind in Abschnitt 1 ausführlich dargestellt. Für die Anzahl Thripse pro Ährenschrift liegen drei Beobachtungen für jede Ähre vor. Es können marginale und subjektspezifische Modelle zur Berücksichtigung der Korrelation zwischen den Beobachtungen pro Ähre genutzt werden. Nachfolgend werden diese beiden Modellansätze und die dazugehörigen Verfahren aus Abschnitt 3 zur Schätzung von marginalen Erwartungswerten bei der Auswertung verglichen. Dabei werden die folgenden Schätzverfahren genutzt:

- direkte Schätzung der marginalen Erwartungswerte mit dem Verfahren GEE
- indirekte Schätzung der marginalen Erwartungswerte mit den Verfahren Quad, Laplace und RSPL

Die marginalen Erwartungswerte hängen bei der indirekten Schätzung von den Varianzen der zufällig ausgewählten Objekte (Ähre oder Kuh) ab. Erfolgt die Ableitung der Varianz der Schätzungen nach der Deltamethode (vgl. Darstellung (6.5)), so ist sowohl die Varianz-Kovarianz-Matrix der geschätzten festen Effekte als auch der geschätzten Varianzkomponenten erforderlich.

Zusätzlich ist für den Anwender ein Vergleich der Sorteneffekte in der Responsekala von Interesse. Es wird deshalb die Eignung des Wald t-Tests zur Überprüfung von Hypothesen in der Responsekala anhand des nominalen Fehlers 1. Art für das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift untersucht.

Die Überprüfung der Näherungsformeln basierend auf der Deltamethode für die Varianz geschätzter marginaler Erwartungswerte wird hauptsächlich an simulierten Daten für das Merkmal Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat durchgeführt. Hierzu werden für ausgewählte Schätzungen Konfidenzintervalle und der Anteil an Simulationen, in denen die konstruierten Konfidenzintervalle den wahren Parameter einschließen, an der Gesamtanzahl aller Simulationen berechnet. Die so geschätzten Überdeckungswahrscheinlichkeiten werden zusätzlich in Abhängigkeit von der Anzahl Freiheitsgrade (FG) für das entsprechende t-Quantil untersucht.

6.2 Kriterien zur Beurteilung der Simulationsergebnisse

Es werden die folgenden Kriterien zur Beurteilung der Schätzverfahren verwendet:

- Konvergenzverhalten: Anzahl der simulierten Stichproben mit Erreichen des Konvergenzkriteriums an der Gesamtanzahl aller simulierter Stichproben

- Bias (%), RMSE und RMSPE zur Bewertung der Wiederholungs- und Treffgenauigkeit für die geschätzten Modellparameter bzw. für die daraus berechneten Schätzungen der marginalen Erwartungswerte
- realisierter Fehler 1. Art bei der Hypothesenprüfung
- realisierte Überdeckungswahrscheinlichkeiten der Konfidenzintervalle für die Schätzungen der Modellparameter bzw. für die daraus berechneten Schätzungen der marginalen Erwartungswerte

Konvergenzverhalten. Zur Schätzung der Modellparameter sind innerhalb der Prozedur GLIMMIX nichtlineare Optimierungsprobleme zu lösen. Dazu wird standardmäßig eine Quasi-Newton-Methode verwendet. Diese Methode benutzt partielle Ableitungen erster Ordnung zur Berechnung der Suchrichtungen. Im Verlauf des Iterationsprozesses werden approximative zweite partielle Ableitungen erzeugt und bei der Bestimmung der Suchrichtungen zusätzlich mit verwendet. Die Suchrichtung dient der Ermittlung von Veränderungen der Modellparameter, so dass sich eine Verbesserung der Zielfunktionswerte von Iteration zu Iteration ergibt. Der Prozess der Iteration umgesetzt in GLIMMIX wird als konvergent ausgewiesen, falls mindestens ein Kriterium von mehreren Konvergenzkriterien erfüllt ist (SAS 9.2, online Dokumentation für die Prozedur GLIMMIX). Als Kriterien dienen die relative Veränderung zweier Zielfunktionswerte von aufeinander folgenden Iterationen, die größte relative Veränderung von Modellparametern aufeinander folgender Iterationen und die größten absoluten (Absgconv) und größten relativen Werte (Gconv) der Komponenten des Gradienten (Vektor der ersten partiellen Ableitungen) der Zielfunktion. Erfolgt die Parameterschätzung beispielsweise mit Hilfe des Schätzverfahrens Quad, so entspricht die Zielfunktion der logL. Der Optimierungsalgorithmus konvergiert, falls beispielsweise $\text{Absgconv} < 1\text{E-}05$ oder $\text{Gconv} < 1\text{E-}08$ erfüllt ist. Auf eine Abschwächung der Konvergenzkriterien durch Vorgabe eigener Abbruchschranken mit Hilfe der NLOPTIONS-Anweisung innerhalb von Prozedur GLIMMIX wurde verzichtet. Einerseits könnte sich die Zahl der simulierten Stichproben mit Konvergenz erhöhen, andererseits besteht jedoch die Gefahr, dass der Iterationsprozess zu früh abbricht und somit das mögliche Optimum nicht erreicht wird.

Bias(%), RMSE, RMSPE. Sei β ein Modellparameter bzw. ein aus den Modellparametern berechneter marginaler Erwartungswert und $\hat{\beta}_i$ die Schätzung von β , aus der i-ten simulierten Stichprobe. Weiterhin sei N die Anzahl der simulierten Stichproben (Anzahl Wiederholungen). Dann wurden der prozentuale Bias, der MSE und der mean squared percentage error (MSPE) wie folgt berechnet (Burton et al., 2006):

$$\begin{aligned}
\text{Bias (\%)} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\beta}_i - \beta}{\beta} \right) \cdot 100\% \\
\text{MSE} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{\beta}_i - \beta)^2 \\
\text{MSPE} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\beta}_i - \beta}{\beta} \right)^2
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Für den MSPE ist auch die Bezeichnung MSE (%) möglich. Durch Wurzelbildung für MSE und MSPE ergibt sich der root mean squared error (RMSE) bzw. root mean squared percentage error (RMSPE):

$$\begin{aligned}
\text{RMSE} &= \sqrt{\text{MSE}} \\
\text{RMSPE} &= \sqrt{\text{MSPE}}
\end{aligned}$$

Realisierter Fehler 1. Art. Schätzungen für den Fehler 1. Art ergeben sich aus der Anzahl der Simulationsläufe, in denen die Nullhypothese - kein Unterschied zwischen zwei Parametern - bei einem Signifikanzniveau von 5 % ($\alpha = 0.05$) (p-value in SAS) abgelehnt wird. Sei p_i die Überschreitungswahrscheinlichkeit einer Nullhypothese, getestet mit der i-ten simulierten Stichprobe. Dann lässt sich der empirische Fehler 1. Art wie folgt schätzen:

$$\begin{aligned}
\hat{\alpha}_E &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(p_i) \\
\text{mit } \delta(p_i) &= \begin{cases} 1 & \text{falls } p_i < \alpha \\ 0 & \text{falls } p_i \geq \alpha \end{cases}
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Realisierte Überdeckungswahrscheinlichkeiten der Konfidenzintervalle. Die Überdeckungs-raten bzw. -wahrscheinlichkeiten der Konfidenzintervalle werden geschätzt aus der Anzahl der Simulationsläufe, in denen die Konfidenzintervalle den wahren Parameter enthalten. Sei KI_i ein Konfidenzintervall für den Parameter β , berechnet mit der i-ten Stichprobe. Für unendliche FG und einem Konfidenzniveau $P = 0.95$ gilt beispielsweise $KI_i = [\hat{\beta}_i \pm 1.96 \cdot \text{SE}(\hat{\beta}_i)]$. Dann wird die Überdeckungswahrscheinlichkeit wie folgt geschätzt:

$$\begin{aligned}
\hat{P}_{KI}(\beta) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(KI_i) \\
\text{mit } \delta(KI_i) &= \begin{cases} 1 & \text{falls } \beta \in KI_i \\ 0 & \text{falls } \beta \notin KI_i \end{cases}
\end{aligned} \tag{6.3}$$

Die Planung der erforderlichen Simulationsläufe wird mit Hilfe des zweiseitigen Konfidenzintervalls nach Sachs (2009, S. 293 ff) durchgeführt. Sei p eine Wahrscheinlichkeit geschätzt mit N simulierten unabhängigen Stichproben, dann gilt für die Grenzen des zweiseitigen Konfidenz-

intervalls:

$$\begin{aligned}
 p_u &= \frac{x}{x + (N - x + 1) \cdot F_u} \\
 p_o &= \frac{(x + 1) \cdot F_o}{N - x + (x + 1) \cdot F_o} \\
 \text{mit } x &= N \cdot p \\
 \text{und } F_u &= F(1 - \alpha; 2 \cdot (N - x + 1), 2 \cdot x) \\
 F_o &= F(1 - \alpha; 2 \cdot (x + 1), 2(N - x))
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Sei in (6.4) $p = 0.05$ und $N = 10000$, dann ist das Konfidenzintervall $= [0.0458; 0.0545]$ bei einem Konfidenzniveau von 95 %. Eine Intervallbreite von 0.0087 wird als ausreichend angesehen. Für $p = 0.95$ ergibt sich aus (6.4) das Konfidenzintervall $[0.9455; 0.9542]$ bei einem Konfidenzniveau von 95 %.

6.3 Simulation des Merkmals Anzahl Thripse pro Ährenschrift

6.3.1 Versuchsplan, Simulationsmodell und -parameter sowie geprüfte Hypothesen

Der Versuchsplan ergibt sich aus der Analyse des Befalls verschiedener Weizensorten mit Thripsen (vgl. Abschnitt 5.1). Simuliert wird das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift bei Nutzung von Modell (5.1) sowohl basierend auf Poi als auch auf der NB ohne und mit zufälligen Ähreneffekten im linearen Prädiktor. In Tabelle 6.1 folgt eine Übersicht der Simulationsmodelle.

Tabelle 6.1: Simulationsmodelle für das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift

Simulationsmodell		
	Verteilung	linearer Prädiktor
A	Poisson	$\eta_{ijk} = \gamma_{jk}$
B	Poisson	$\eta_{ijkl} = \gamma_{jk} + u_{ijl}$ mit $Var(u_{ijl}) = \sigma_u^2$
C	Poisson	$\eta_{ijkl} = \gamma_{jk} + u_{ijl}$ mit $Var(u_{ijl}) = \sigma_{u_j}^2$
D	Negativ Binomial	$\eta_{ijk} = \gamma_{jk}$
E	Negativ Binomial	$\eta_{ijkl} = \gamma_{jk} + u_{ijl}$ mit $Var(u_{ijl}) = \sigma_u^2$
F	Negativ Binomial	$\eta_{ijkl} = \gamma_{jk} + u_{ijl}$ mit $Var(u_{ijl}) = \sigma_{u_j}^2$

In allen Simulationsvarianten wurden 20 Sorten an zwei Terminen und drei Schichten pro Ähre vorgegeben. Die Anzahl Ähren variiert zwischen 10 und 20. Werden in der Auswertung der Simulationsergebnisse keine Angaben zur Anzahl Ähren gemacht, so war $n_{ij} = 10$.

In jedem Simulationslauf werden die marginalen Erwartungswerte (vgl. (5.3)) von Sorte eins und zwei für die Termine und Schichten wie folgt geschätzt:

$$\hat{\mu}_{1jk} = \exp\left(\hat{\gamma}_{1jk} + \frac{\hat{\sigma}_{u_j}^2}{2}\right); \quad \hat{\mu}_{2jk} = \exp\left(\hat{\gamma}_{2jk} + \frac{\hat{\sigma}_{u_j}^2}{2}\right); \quad \text{mit } j = 1, 2 \text{ und } k = 1, 2, 3$$

Daraus ergeben sich zwölf Erwartungswerte. Weiterhin wird die Einhaltung des Fehlers 1. Art von 5 % für die folgenden Hypothesen überprüft:

$$\begin{aligned} H_0 : \mu_{1jk} = \mu_{2jk} & \quad H_1 : \mu_{1jk} \neq \mu_{2jk} & \quad \text{mit } j = 1, 2 \text{ und } k = 1, 2, 3 \\ H_0 : \bar{\mu}_1 = \bar{\mu}_2 & \quad H_1 : \bar{\mu}_1 \neq \bar{\mu}_2 & \quad \text{mit } \bar{\mu}_i = \frac{1}{6} \sum_{j,k} \mu_{ijk}; \quad (i = 1, 2) \end{aligned}$$

Werden zwei Sorten zu zwei Terminen innerhalb der drei Schichten miteinander verglichen, dann liegen sieben Vergleiche vor.

Zur Überprüfung von Hypothesen in der Responseskala wird der Standardfehler der Differenzen zweier marginaler Erwartungswerte benötigt. Zur Berechnung des Standardfehlers in der Responseskala wird die Deltamethode verwendet (siehe Abschnitt 3.4). Falls man zur Vereinfachung der Schreibweise auf den Index k verzichtet, ergibt sich beispielsweise:

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\mu}_{ij}, \hat{\mu}_{i^*j}) &= \frac{\partial \hat{\mu}_{ij}}{\partial \gamma_{ij}} \cdot \frac{\partial \hat{\mu}_{i^*j}}{\partial \gamma_{i^*j}} \cdot \text{cov}(\hat{\gamma}_{ij}, \hat{\gamma}_{i^*j}) + \frac{\partial \hat{\mu}_{ij}}{\partial \sigma_u^2} \cdot \frac{\partial \hat{\mu}_{i^*j}}{\partial \sigma_u^2} \cdot \text{Var}(\hat{\sigma}_u^2) \\ \text{mit } i, i^* &= 1, 2 \\ \text{und } \frac{\partial \hat{\mu}_{ij}}{\partial \gamma_{ij}} &= \hat{\mu}_{ij}; \quad \frac{\partial \hat{\mu}_{ij}}{\partial \sigma_u^2} = \frac{1}{2} \hat{\mu}_{ij} \end{aligned} \tag{6.5}$$

6.3.2 Auswertung mit einem linearen gemischten Modell

Zusätzlich zu den bisher dargestellten Modellen soll die Eignung eines LMM zur Auswertung des Zählmerkmals Anzahl Thripse pro Ährenschrift analysiert werden. Unter Annahme von Normalverteilung gilt:

$$\begin{aligned} y_{ijkl} &= \gamma_{ijk} + u_{ijl} + e_{ijkl} \\ \text{mit } \text{Var}(u_{ijl}) &= \sigma_u^2 \text{ und } \text{Var}(e_{ijkl}) = \sigma_e^2 \end{aligned} \tag{6.6}$$

Gilt in Darstellung (6.6) $\sigma_u^2 = 0$, dann liegt ein lineares Model (englisch: linear model (LM)) vor. Ein LM bzw. LMM mit inhomogenen Restvarianzen (LM_inh bzw. LMM_inh) liegt unter der folgenden Annahme vor:

$$\text{Var}(e_{ijkl}) = \sigma_{e_{jk}}^2 \tag{6.7}$$

6.3.3 Simulationsparameter für Poi-, NB- und LMM-Modelle

Zur Untersuchung der Einhaltung des Fehlers 1. Art werden bei der Simulation alle Sorteneffekte als identisch vorausgesetzt. Die Vorgabewerte für die festen Effekte der Schichten innerhalb einer Ähre zu den gegebenen zwei Terminen enthält Tabelle 6.2. Die Vorgabe der Simulations-

parameter beruhen auf Schätzungen, gewonnen aus den Daten des Praxisversuches. Durch Berechnung von Least Squares Means (LSM) über alle Sorten pro Termin und Schicht ergaben sich die Vorgabewerte von Datensatz B. Die mittlere Anzahl von Schädlingen liegt für diese Variante zwischen 0.30 und 1.17. Aufgrund dieser für ein Zählmerkmal geringen Mittelwerte wurde ein zweiter Datensatz durch Betrachtung einer Sorte mit mittlerer Anzahl Thripse zwischen 0.97 und 3.31 in die Untersuchung aufgenommen (Datensatz A).

Tabelle 6.2: Vorgabewerte für den festen Effekt γ_{jk} zum j-ten Termin in der k-ten Schicht in der Link- (= γ_{jk}) und Responseskala (= $\exp(\gamma_{jk})$) für die Datensätze A und B

j	k	Datensatz A		Datensatz B	
		γ_{jk}	$\exp(\gamma_{jk})$	γ_{jk}	$\exp(\gamma_{jk})$
1	1	-0.03188	0.9686	-0.7703	0.4629
1	2	0.1913	1.2108	-0.3558	0.7006
1	3	1.1968	3.3095	-0.09442	0.9099
2	1	0.9002	2.4601	-1.2046	0.2998
2	2	0.7460	2.1085	-0.3695	0.6911
2	3	-0.03413	0.9664	0.1575	1.1706

Außerdem wurden für Modelle mit zufälligen Effekten die Ährenvarianz und bei Vorliegen einer NB der Dispersionsparameter α vorgegeben. Diese Vorgabewerte sind in Tabelle 6.3 dargestellt.

Tabelle 6.3: Vorgabewerte für die Ährenvarianz und den Dispersionsparameter α in Abhängigkeit des Simulationsmodells

Modell ¹	Vorgabewerte
Poi + zufällige Ähreneffekte	$\sigma_u^2 = 0.4087$
Poi + zufällige Ähreneffekte (Termin)	$\sigma_{u_1}^2 = 0.35, \sigma_{u_2}^2 = 0.47$
NB ohne zufällige Ähreneffekte	$\alpha = 0.4664$
NB + zufällige Ähreneffekte	$\alpha = 0.10, \sigma_u^2 = 0.36$
NB + zufällige Ähreneffekte (Termin)	$\alpha = 0.10, \sigma_{u_1}^2 = 0.35, \sigma_{u_2}^2 = 0.47$

¹Poi - Poissonverteilung, NB - negative Binomialverteilung

Die einschlägigen Modelle für Zähldaten sollen mit dem LMM verglichen werden. Die Sorteneffekte wurden zusätzlich variiert, da in der Praxis immer auch unterschiedliche Sorteneffekte existieren. Zwei Varianten wurden im Poi-Modell simuliert:

- In Variante A1 sind wie bisher alle 20 Sorteneffekte gleich null. Es trifft für die simulierten Daten die globale Nullhypothese zu.

- In Variante A2 sind die Effekte für Sorte 1 und 2 gleich und die restlichen 18 Sorten unterscheiden sich. Es folgt also:

$$\begin{aligned}
\gamma_{1jk} &= \gamma_{2jk} = 0 \\
&\text{und für } i > 2 \text{ und } a = 20 \\
\gamma_{ijk} &= s_i + \gamma_{jk} \\
&\text{mit } s_i = s_{min} + (i - 3) \cdot (s_{max} - s_{min}) / (a - 3) \\
&\text{und } s_{min} = -1; s_{max} = 1
\end{aligned} \tag{6.8}$$

6.3.4 Genauigkeit der Schätzung

Um den Bias für die marginalen Erwartungswerte beurteilen zu können, wird im Folgenden die Genauigkeit der Schätzungen näherungsweise hergeleitet. Bei Abwesenheit von Ähreneffekten im Poi-Modell (vgl. Modell (5.1)) liefert die Maximierung der Likelihood-Funktion für das Mittel von Sorte i zu Termin j in Schicht k die folgende Schätzung.

$$\lambda_{ijk} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_{ijkl} \tag{6.9}$$

Wegen $\text{Var}(Y_{ijkl}) = E(Y_{ijkl}) = \lambda_{ijk}$ folgt für die Varianz von $\hat{\lambda}_{ijk}$:

$$\begin{aligned}
s_\lambda^2 &= \text{Var}(\hat{\lambda}_{ijk}) = \frac{\lambda_{ijk}}{n} \\
&\text{mit } n = \text{Anzahl Ähren pro Sorte und Termin}
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Liegt ein Poi-Modell mit zufälligen Ähreneffekten vor, so kann man das arithmetische Sortenmittel näherungsweise als Schätzung für den marginalen Erwartungswert auffassen. Für die Varianz der Schätzung ergibt sich (vgl. Formel (2.15)):

$$\begin{aligned}
s_\lambda^2 &= \text{Var}(\hat{\lambda}_{ijk}) = \frac{1}{n} [E(Y_{ijkl}) + E(Y_{ijkl})^2 \cdot (\exp(\sigma_u^2) - 1)] \\
&\text{mit } E(Y_{ijkl}) = \lambda_{ijk} \cdot \exp(0.5 \cdot \sigma_u^2)
\end{aligned} \tag{6.11}$$

Eine Schätzung von λ_{ijk} mit N simulierten Stichproben besitzt dann näherungsweise ein 95 % Konfidenzintervall mit der folgenden halben Intervallbreite d .

$$d = 1.96 \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot s_\lambda \tag{6.12}$$

Für den prozentualen Bias ergibt sich die folgende Beziehung.

$$P\left(\frac{|\hat{\lambda}_{ijk} - \lambda_{ijk}|}{\lambda_{ijk}} \cdot 100 \leq d_\lambda\right) = 1 - \alpha \quad \text{mit } d_\lambda = \frac{d}{\lambda_{ijk}} \cdot 100 \tag{6.13}$$

In Tabelle 6.4 sind die Werte von s_λ , d und d_λ in Abhängigkeit von N und σ_u^2 zu $n = 10$ für den minimalen und den maximalen λ -Wert, abgeleitet aus den Vorgabewerten für das simulierte Merkmal Anzahl Besuche pro Stunde (vgl. Tabelle 6.2), dargestellt.

Tabelle 6.4: Genauigkeit der geschätzten Sortenmittel im Poissonmodell mit s_λ als Standardfehler für λ und d bzw. d_λ als halbe Intervallbreite des 95 %-Konfidenzintervalls für den Bias bzw. Bias (%) in Abhängigkeit der Anzahl Simulationen (N) und der Ährenvarianz (σ_u^2)

λ	σ_u^2	N	s_λ	d	d_λ
0.97	0	5000	0.311	0.0086	0.890
	0	10000	0.311	0.0061	0.629
3.31	0	5000	0.575	0.0159	0.482
	0	10000	0.575	0.0113	0.341
0.97	0.4087	5000	0.436	0.0121	1.017
	0.4087	10000	0.436	0.0086	0.719
3.31	0.4087	5000	1.113	0.0308	0.760
	0.4087	10000	1.113	0.0218	0.537

Für 10000 simulierte Stichproben sollte der prozentuale absolute Bias im Poi-Modell ohne zufällige Ähreneffekte für den minimalen λ -Wert unter 0.63 % und für den maximalen λ -Wert unter 0.34 % liegen. Im Fall von zufälligen Ähreneffekten erhöht sich der Standardfehler s_λ in Abhängigkeit der Ährenvarianz. Bei 10000 simulierten Stichproben wird der prozentuale absolute Bias für den minimalen λ -Wert unter 0.72 % und für den maximalen λ -Wert unter 0.54 % erwartet. Die verwendete Formel (6.11) für den Standardfehler gilt nur näherungsweise. Deshalb werden nachfolgend die Schätzungen für die Sortenmittel als erwartungstreu angesehen, falls der prozentuale Bias unter 1 % liegt.

6.4 Simulation des Merkmals Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat

6.4.1 Versuchsplan, Simulationsmodell und -parameter sowie geprüfte Hypothesen

Der beschriebene Versuchsplan ergibt sich aus der Auswertung des Merkmals Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat unter 5.2. Um die Anzahl der Vorgabewerte zu begrenzen, wurde der Faktor Ration auf zwei Stufen beschränkt und die Tagesstunden in die folgenden drei Perioden zu je sieben Stunden wie folgt eingeteilt:

- Periode 1: $20 < \text{Stunde} < 4$,

- Periode 2: $4 < \text{Stunde} < 12$,
- Periode 3: $12 < \text{Stunde} < 20$.

Das nachfolgende Modell ist ein Kompromiss zwischen Sparsamkeit bei der Vorgabe aller Modellparameter und der Wiedergabe des Versuchsplanes, abgeleitet aus dem Praxisversuch. Sei y_{ijk} die beobachtete Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat der i -ten Ration ($i = 1, \dots, a$) zur j -ten Periode ($j = 1, \dots, b$) für die k -te Kuh ($k = 1, \dots, c$) am Laktationstag t . Im HP-Modell wird die Wahrscheinlichkeit, dass Y_{ijk} den Wert y_{ijk} annimmt, wie folgt modelliert:

$$P(Y_{ijk} = y_{ijk} | t) = \begin{cases} p_{0,ijk} & \text{für } y_{ijk} = 0 \\ (1 - p_{0,ijk}) \cdot f_{TPoi}(y_{ijk} | \lambda_{ijk}) & \text{für } y_{ijk} > 0 \end{cases} \quad (6.14)$$

In Formel (5.5) ist $f_{TPoi}(\cdot)$ die Dichtefunktion der TPoi (siehe (4.13)). Im HP-Modell besteht zwischen den Verteilungsparametern $p_{0,ijk}$ und λ_{ijk} und den Einflussgrößen der folgende Zusammenhang (vgl. Abschnitt 5.2):

$$\begin{aligned} \text{logit}(p_{0,ijk}(t)) &= \eta_{0,ij} + u_{0,jk} & \text{mit } \eta_{0,ij} &= \beta_{0,ij}^{(1)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mi}^{(1)} \cdot x_m(t) \\ \log(\lambda_{ijk}(t)) &= \eta_{1,ij} + u_{1,jk} & \text{mit } \eta_{1,ij} &= \beta_{0,ij}^{(2)} + \sum_{m=1}^4 \beta_{mi}^{(2)} \cdot x_m(t) \end{aligned} \quad (6.15)$$

In Darstellung (6.15) bezeichnen $\beta_{0,ij}^{(1)}$ bzw. $\beta_{0,ij}^{(2)}$ die festen Effekte der Kombination von Stufe i des Faktors Ration mit Stufe j des Faktors Periode. Für die Kovariablen $x_m(t)$ gilt:

$$x_m(t) = (t/t_{max})^m \quad \text{mit } m = 1, \dots, 4 \quad (6.16)$$

Für den Vektor u_k der zufälligen Tiereffekte gilt die folgende Verteilungsannahme:

$$u_k = \begin{pmatrix} u_{0k} \\ u_{1k} \end{pmatrix} \sim N(0, D) \quad \text{mit } D = \begin{pmatrix} \sigma_{u0}^2 & 0 \\ 0 & \sigma_{u1}^2 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

Die marginalen Schätzungen für den Erwartungswert und die Verteilungsparameter $p_{0,ij}(t)$ und $\lambda_{ij}(t)$ sind in (5.11) und (5.12) dargestellt.

Als nächstes wird die Herleitung der Standardfehler für die geschätzten Erwartungswerte abgeleitet. Zur Vereinfachung wird bei der Schreibweise zur Berechnung der Standardfehler für die Schätzungen $\hat{p}_{0,ij}$, $\hat{\lambda}_{ij}$ und $\hat{\mu}_{ij}$ ein mittlerer Laktationstag \bar{t} angenommen und bei der Ableitung der Varianzen auf die Angabe der Indizes i und j verzichtet. Sei $h(z) = \exp(z)/(1 + \exp(z))$. Unter Verwendung der Deltamethode (Greene, 2002, S. 913) gilt näherungsweise (Mielenz, 2011,

persönliche Mitteilung):

$$\hat{p}_0 = h(\hat{a} \cdot \hat{\eta}_0) \quad \text{mit } \hat{a} = (1 + c^2 \cdot \hat{\sigma}_{u0}^2)^{-\frac{1}{2}} \quad (6.18)$$

Für die Varianz von \hat{p}_0 :

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{p}_0) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \sigma_{u0}^2} & \frac{\partial \hat{h}}{\partial \eta_0} \end{pmatrix}' \begin{pmatrix} \text{Var}(\hat{\sigma}_{u0}^2) & 0 \\ 0 & \text{Var}(\hat{\eta}_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \sigma_{u0}^2} \\ \frac{\partial \hat{h}}{\partial \eta_0} \end{pmatrix} \\ &= \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial \sigma_{u0}^2} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{\sigma}_{u0}^2) + \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial \eta_0} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{\eta}_0) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Für die partiellen Ableitungen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial \sigma_{u0}^2} &= \frac{\partial h}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial a} \cdot \frac{\partial a}{\partial \sigma_{u0}^2} \\ &= h(z) \cdot (1 - h(z)) \cdot \eta_0 \cdot \left(-\frac{c^2}{2} \cdot (1 + c^2 \cdot \sigma_{u0}^2)^{-\frac{3}{2}} \right) \\ &= p_0 \cdot (1 - p_0) \cdot \eta_0 \cdot \left(-\frac{c^2}{2} \right) \cdot a^3 \\ \frac{\partial h}{\partial \eta_0} &= \frac{\partial h}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta_0} \\ &= p_0 \cdot (1 - p_0) \cdot a \end{aligned} \quad (6.20)$$

Wegen $\hat{\lambda} = \exp\left(\hat{\eta}_1 + \frac{\hat{\sigma}_{u1}^2}{2}\right) = g(\hat{\eta}_1, \hat{\sigma}_{u1}^2)$ ergibt sich analog:

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\lambda}) &= \left(\frac{\partial \hat{g}}{\partial \sigma_{u1}^2} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{\sigma}_{u1}^2) + \left(\frac{\partial \hat{g}}{\partial \eta_1} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{\eta}_1) \\ \text{mit } \frac{\partial \hat{g}}{\partial \sigma_{u1}^2} &= \frac{1}{2} \cdot \exp\left(\eta_1 + \frac{\sigma_{u1}^2}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \lambda \\ \text{und } \frac{\partial \hat{g}}{\partial \eta_1} &= \exp\left(\eta_1 + \frac{\sigma_{u1}^2}{2}\right) = \lambda \end{aligned} \quad (6.21)$$

Der Erwartungswert $\mu_{ij} = E(Y_{ij} | \bar{t})$ besitzt bei Verzicht auf Indizes die Darstellung:

$$\mu = g(p_0, \lambda) = \frac{(1 - p_0) \cdot \lambda}{(1 - \exp(-\lambda))} \quad (6.22)$$

Unter Verwendung der Varianzen aus den Formeln (6.19) und (6.21) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\mu}) &= \left(\frac{\partial \hat{g}}{\partial p_0} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{p}_0) + \left(\frac{\partial \hat{g}}{\partial \lambda} \right)^2 \cdot \text{Var}(\hat{\lambda}) \\
 \text{mit } \frac{\partial \hat{g}}{\partial p_0} &= \frac{(-\lambda)}{(1 - \exp(-\lambda))} \\
 \text{und } \frac{\partial \hat{g}}{\partial \lambda} &= \frac{(1 - p_0)}{(1 - \exp(-\lambda))} \cdot \left(1 - \frac{\lambda \cdot \exp(-\lambda)}{(1 - \exp(-\lambda))} \right)
 \end{aligned} \tag{6.23}$$

Die Einhaltung des Fehlers 1. Art von 5 % wird für die folgenden acht Hypothesen überprüft:

$$H_0 : \beta_{m1}^{(k)} = \beta_{m2}^{(k)} \quad H_1 : \beta_{m1}^{(k)} \neq \beta_{m2}^{(k)} \quad \text{mit } m = 1, 2, 3, 4 \text{ und } k = 1, 2$$

Diese formulierten Hypothesen testen die Abhängigkeit der Regressionskoeffizienten zur Beschreibung der Laktationsdynamik der zwei Rationen.

6.4.2 Vorgabewerte der Modellparameter

Bei der Simulation werden generell rationsunabhängige Regressionskoeffizienten für die vier Kovariablen simuliert (siehe Tabelle 6.5). Zur Vereinfachung wurde bei Ableitung von Prädiktor-, Verteilungsparametern und Erwartungswerten ein mittlerer Laktationstag von $\bar{t} = 114.5$ zugrunde gelegt.

Tabelle 6.5: Vorgabewerte für die Regressionskoeffizienten der Kovariablen für den Laktationstag und Varianzkomponenten für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung ohne Berücksichtigung von zufälligen Effekten

k	$\beta_{1i}^{(k)}$	$\beta_{2i}^{(k)}$	$\beta_{3i}^{(k)}$	$\beta_{4i}^{(k)}$	$\sigma_{u,k-1}^2$
1	-6.4837	22.4780	-29.0985	12.9464	0.0
2	6.7937	-18.1612	20.9716	-8.7497	0.0

Die restlichen Modellparameter bei Abwesenheit von zufälligen Effekten im linearen Prädiktor enthält Tabelle 6.6. Simuliert wurde ein Fütterungsversuch über 140 Tage mit jeweils zehn geprüften Kühen pro Ration. Der Laktationstag, mit dem die Kühe in den Versuch eintreten, wurde als gleichverteilt in dem Intervall [5,224] angesehen. Geprüft wurde eine Kuh maximal 140 Tage, aber nicht über den 224sten Tag hinaus.

Tabelle 6.6: Vorgabewerte für die Simulation und daraus abgeleitete Verteilungsparameter für die i -te Ration und die j -te Periode für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung ohne Berücksichtigung von zufälligen Effekten

i	j	$\beta_{0,ij}^{(1)}$	$\beta_{0,ij}^{(2)}$	$\eta_{0,ij}(t)$	$\eta_{1,ij}(t)$	$p_{0,ij}(\bar{t})$	$\lambda_{ij}(\bar{t})$	$\mu_{ij}(\bar{t})$
1	1	0.7910	0.6459	0.3474	1.5769	0.5860	4.8400	2.0197
	2	0.3673	0.5862	-0.0760	1.5172	0.4809	4.5595	2.3917
	3	0.2570	0.6065	-0.1870	1.5375	0.4534	4.6530	2.5674
2	1	0.7513	0.7748	0.3077	1.7058	0.5763	5.5059	2.3422
	2	0.3168	0.6656	-0.1270	1.5966	0.4684	4.9363	2.6433
	3	0.4026	0.6952	-0.0410	1.6262	0.4898	5.0846	2.6105

Die vorgegebenen Modellparameter bei Berücksichtigung von zufälligen Effekten im linearen Prädiktor unter der Annahme $\sigma_{u0}^2 = \sigma_{u1}^2 = 0.03$ enthält Tabelle 6.7. Die Vorgabewerte für die Simulation wurden anhand des Praxisversuches bei Annahme eines HP-Modells geschätzt.

Der marginale Erwartungswert für Ration i und Periode j zum Laktationstag t ist gemäß Definition durch das uneigentliche Integral:

$$\mu_{ij}(t) = E(Y_{ij} | t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(1 - p_{0,ij})}{(1 - \exp(-\lambda_{ij}))} \cdot \lambda_{ij} \cdot \varphi(u_1) du_1 \quad (6.24)$$

gegeben. In Formel (6.24) gilt:

$$\begin{aligned} p_{0,ij} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(\eta_{0,ij} + u_0)}{1 + \exp(\eta_{0,ij} + u_0)} \cdot \varphi(u_0) du_0 \\ &\text{mit } \varphi(u_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{u_0^2}{2}\right) \\ \lambda_{ij} &= \exp(\eta_{1,ij} + u_1) \end{aligned} \quad (6.25)$$

Insbesondere lässt sich zeigen:

$$\lambda_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(\eta_{1,ij} + u_1) \cdot \varphi(u_1) du_1 = \exp(\eta_{1,ij} + \frac{\sigma_{u1}^2}{2}) \quad (6.26)$$

Außerdem werden die marginalen Erwartungswerte und Verteilungsparameter näherungsweise berechnet (vgl. Darstellung (5.11) und (5.12)). Die Ergebnisse der Tabelle 6.7 zeigen gute Übereinstimmung zwischen den approximativen und den mit Hilfe von numerischer Integration unter Verwendung der SAS-Funktion Quad geschätzten marginalen Erwartungswerten (siehe Darstellung (6.25) und (6.26)). Deshalb wurden im Simulationsprogramm ausschließlich die approximativen Formeln verwendet.

Tabelle 6.7: Vorgabewerte für die Simulation und daraus abgeleitete marginale Verteilungsparameter für das Hurdle Modell basierend auf Poissonverteilung mit Berücksichtigung von zufälligen Effekten

<i>i</i>	<i>j</i>	$\beta_{0,ij}^{(1)}$	$\beta_{0,ij}^{(2)}$	$p_{0,ij}(\bar{t})^1$		$\lambda_{ij}(\bar{t})^1$		$\mu_{ij}(\bar{t})^1$	
				approx.	exakt	approx.	exakt	approx.	exakt
1	1	0.7910	0.6459	0.5856	0.5854	4.9132	4.9132	2.0513	2.0555
	2	0.3673	0.5862	0.4810	0.4811	4.6284	4.6284	2.4256	2.4296
	3	0.2570	0.6065	0.4537	0.4537	4.7233	4.7233	2.6033	2.6079
2	1	0.7513	0.7748	0.5759	0.5758	5.5891	5.5891	2.3790	2.3826
	2	0.3168	0.6656	0.4685	0.4685	5.0109	5.0109	2.6811	2.6851
	3	0.4026	0.6952	0.4898	0.4898	5.1614	5.1614	2.6485	2.6522

¹approx. - approximativ, exakt - geschätzt mit Hilfe von numerischer Integration

6.4.3 Variation der Freiheitsgrade bei Durchführung der statistischen Tests

Die Bestimmung der FG z. B. für die Aufstellung der Hypothesen und die Konstruktion von Konfidenzintervallen wird problematisch, falls zufällige Effekte im linearen Prädiktor von p_0 und λ auftreten und eine Varianzkomponentenschätzung notwendig wird. In der SAS-Prozedur GLIMMIX ist standardmäßig die containment (CON) Methode eingestellt, die im Beispiel dazu führt, dass alle Tests mit unendlichen FG durchgeführt werden. Aus der Theorie der LMM sind mit den Methoden von Satterthwaite (Satterthwaite, 1941; Giesbrecht und Burns, 1985) und die Erweiterung von Kenward und Roger (1997; 2009) weitere approximative Verfahren zur Bestimmung der FG bekannt. Schätzt man die Modellparameter im Hurdle Modell durch Näherungsverfahren wie beispielsweise den PL-Methoden, so lässt sich die FG-Approximation auf das GLMM übertragen. Innerhalb der Prozedur GLIMMIX unter dem Schätzverfahren Quad sind aufgrund des Zwei-Schritt-Verfahrens für die Hurdle Modelle (siehe 5.2.3) nur die einfachen Approximationen CON und “between within” (BTW) anwendbar. Sei N die Anzahl aller Beobachtungen, n die Anzahl Tiere pro Ration, a die Anzahl Rationen, b die Anzahl Perioden und p die Anzahl fixer Regressionskoeffizienten. Bei 20 Tieren mit maximal 140 Kontrolltagen und 24 Beobachtungen pro Tag ergibt sich eine maximale Stichprobengröße von $N_{\max} = 67200$. Da nicht für alle Kühe aufgrund des simulierten Versuchsplans zu jedem der 140 Kontrolltage Beobachtungen vorliegen, besteht die simulierte Stichprobe aus rund 40000 Beobachtungen. Folglich steht einer großen Zahl von Beobachtungen eine geringe Anzahl von unabhängigen Objekten (20 Kühe) gegenüber. Deshalb wird bei der Simulation versucht, die Anzahl an FG für die statistischen Test unter Verwendung des Konzeptes der Varianzanalyse, der sogenannten analysis of variance bzw. ANOVA (AV), anzupassen. Im konkreten Fall gelten dann die folgenden Berechnungsvorschriften.

$$FG(CON) = N - a \cdot (n + b + p) - 2 = N - 32 = \text{”}\infty\text{”}$$

$$\text{FG(BTW)} = a \cdot [(n-1) \cdot (b-1) - 1] = 2 \cdot [(10-1) \cdot (3-1) - 1] = 34$$

Weitere einfache Approximationen zur Berücksichtigung der Abhängigkeit zwischen den Beobachtungen innerhalb der Objekte ergeben sich aus dem AV-Konzept. Beispielsweise kann man setzen:

$$\text{FG(AV1)} = \text{Anzahl Objekte minus Eins} = n \cdot a - 1 = 19$$

$$\text{FG(AV2)} = \text{Anzahl Objekte minus Anzahl zu schätzende fixe Effekte} = n \cdot a - b \cdot a - p = 10 \cdot 2 - 3 \cdot 2 - 4 = 10, \text{ falls LSM zu prüfen sind}$$

$$\text{FG(AV3)} = \text{Anzahl Objekte minus Anzahl zu schätzende fixe Effekte und Varianzkomponenten, falls Erwartungswerte zu prüfen sind}$$

Bemerkung: Die Schätzung von $p_{0,ij}(t)$ im Hurdle Modell erfolgt unter Verwendung eines logit-Modells für binäre Daten mit Hilfe der Prozedur GLIMMIX (siehe 5.2.3). Deshalb könnten die FG zum Testen von Hypothesen in Verbindung mit $p_{0,ij}(t)$ bei Verwendung der Approximation nach Satterthwaite erfolgen. Aufgrund der sehr langen Rechenzeiten musste jedoch innerhalb der Simulationen auf diese Möglichkeit verzichtet werden.

6.5 Erzeugung der simulierten Daten

Die rechentechnische Umsetzung der Simulation und die Auswertung der Simulationsergebnisse erfolgten mit der Statistiksoftware SAS, Version 9.2 (2009). Die Umsetzung in SAS wurde in den folgenden Schritten realisiert:

1. Vorgabe der Modellparameter und Abspeicherung innerhalb von internen Dateien
2. Aufruf von Makros:
 - Makro mit Anzahl der Läufe und des Zufallszahlengenerators
 - Einlesen der Modellparameter aus den internen Dateien
 - Simulation der Daten gemäß der Simulationsmodelle pro Lauf mit Hilfe eines Generators zur Erzeugung von Zufallszahlen innerhalb der Prozedur IML
 - Abspeicherung der Modellparameter in interne Dateien
 - Aufruf von Makros zur Schätzung der Parameter innerhalb der Prozeduren GENMOD oder GLIMMIX, Durchführung der statistischen Tests und Datenspeicherung
3. Ende des Laufs und Aufruf des nächsten Laufs

Im Anhang 2 wird die rechentechnische Umsetzung beispielhaft für den zweiten Schritt der Datensimulation des Merkmals Anzahl Thripse pro Ährensicht gemäß Modell (5.1) dargestellt.

7 Ergebnisse der Simulationsstudien

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse zu den Simulationsstudien, die unter 6.3 und 6.4 vorgestellt wurden, dargestellt. Für das simulierte Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift wird für zwölf Sortenmittel (zwei Sorten, zwei Termine und drei Schichten) der Bias und der RMSPE berechnet. In den folgenden Tabellen wird der mittlere Bias über alle zwölf Sortenmittel angegeben. Da der Bias sowohl positiv als auch negativ ausfallen kann, wird deshalb das Minimum und Maximum des Bias für die zwölf geschätzten Mittelwerte aufgeführt.

7.1 Poissonverteilung für die Anzahl Thripse pro Ährenschrift

7.1.1 Poissonverteilung ohne zufällige Ähreneffekte

Nachfolgend werden die Ergebnisse für das simulierte Modell mit Poi und ohne zufällige Ähreneffekte vorgestellt. Im Fall von Unabhängigkeit zwischen den drei Beobachtungen pro Ähre liefern die ML- und die GEE-Methode identische Schätzungen. Beim Vergleich der Methoden erübrigt sich die Umrechnung der bedingten in marginale Erwartungswerte.

Für beide Datensätze konnte eine 100 %ige Konvergenz beobachtet werden (siehe Tabelle 7.1). Die Sortenmittel werden innerhalb der Schichten erwartungstreu geschätzt.

Tabelle 7.1: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
		Mean	Min	Max	
A	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.2543
B	10000	-0.0078	-0.5410	0.1495	0.4048

Zusätzlich wurde für jeden Erwartungswert der Bias mit dem 95 % Konfidenzintervall angegeben (siehe Abbildung 7.1). Alle Konfidenzintervalle für den Bias der Erwartungswerte enthalten die Null, so dass Erwartungstreue angenommen werden kann.

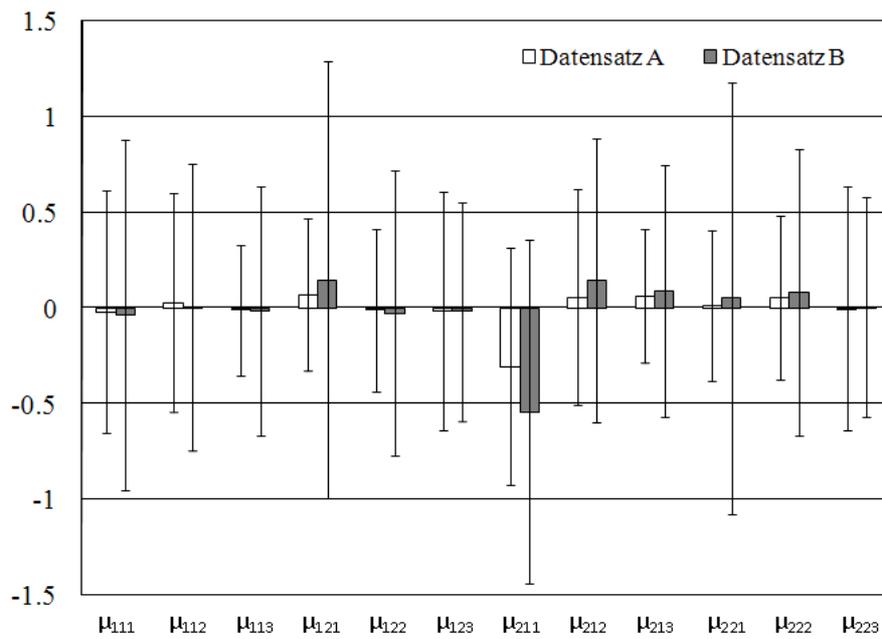


Abbildung 7.1: Bias (%) und 95 % Konfidenzintervall für die zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Der Fehler 1. Art wird bei Nutzung von Datensatz A für fünf Hypothesen eingehalten (siehe Abbildung 7.2). Für Datensatz B kam es bei drei Hypothesen zu einer Unterschätzung des Fehlers 1. Art.

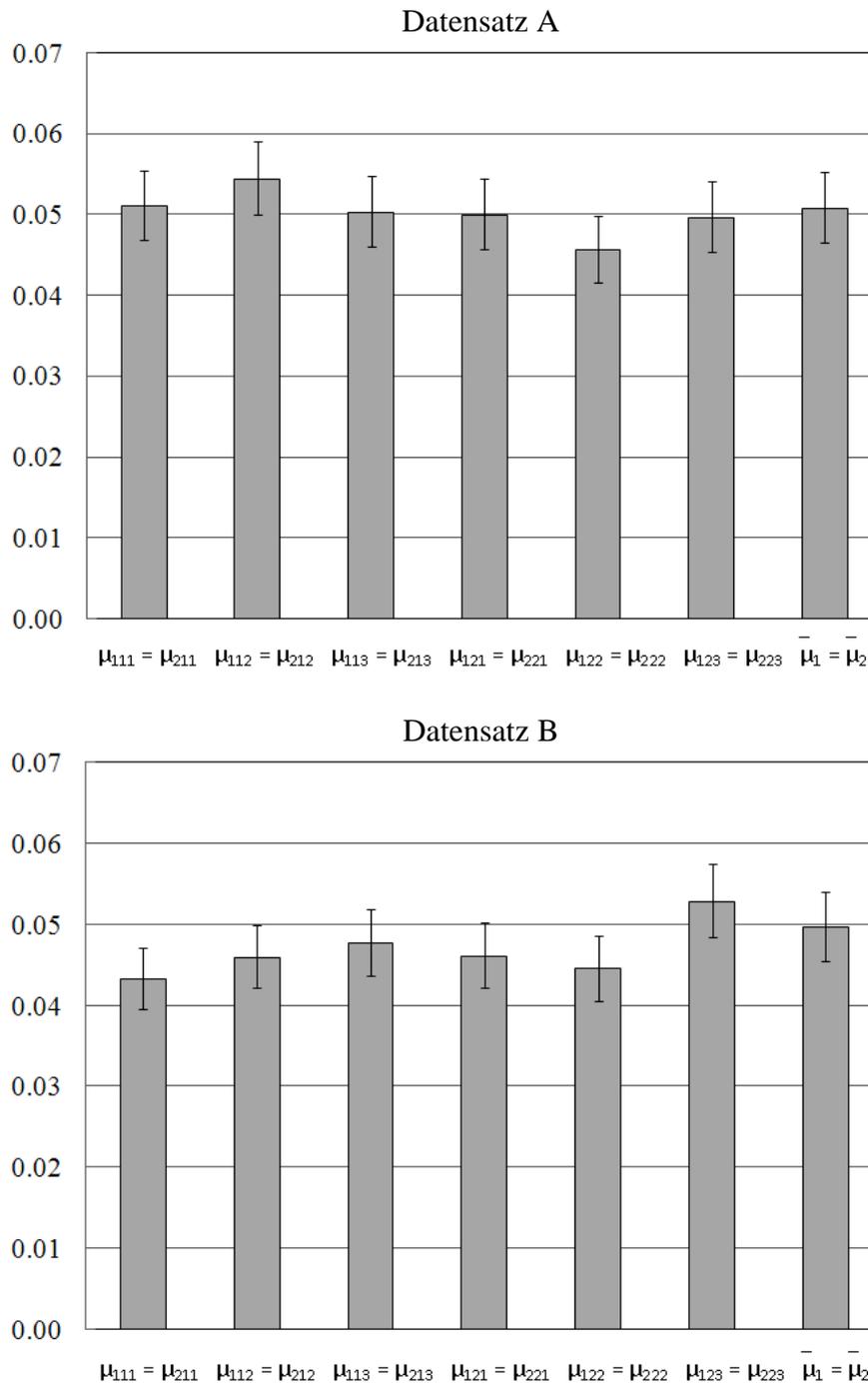


Abbildung 7.2: Mittelwerte und Konfidenzintervalle ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für das Poisson-Modell ohne zufällige Ähreneffekte für die Datensätze A und B

7.1.2 Poissonverteilung mit zufälligen Ähreneffekten

In diesem Abschnitt werden die Simulationsergebnisse für das Modell mit Poi und zufälligen Ähreneffekten dargestellt. Für Datensatz A zeigen die Verfahren Quad und Laplace eine sehr gute Konvergenz und erwartungstreue Schätzungen (siehe Tabelle 7.2). Beim Laplace-

Verfahren werden jedoch die Erwartungswerte systematisch geringfügig unterschätzt (-0.50 bis -0.20 %). Das RSPL-Verfahren zeigte schlechtere Konvergenz und verzerrte Schätzungen für die Erwartungswerte. Der Bias lag im Mittel bei 6.8 %. Wurden die Modellparameter mit dem Verfahren GEE geschätzt, zeigte sich eine geringfügige Abnahme der Konvergenz gegenüber Quad und Laplace bei erwartungstreuen Schätzungen. Der RMSPE differenzierte sich zwischen den Schätzverfahren nur geringfügig.

Für den Datensatz B wurde für Quad und Laplace wieder eine sehr gute Konvergenz (100 %) und erwartungstreue Schätzungen beobachtet, welche im Mittel unter 1 % lagen (siehe Tabelle 7.2). Für das Schätzverfahren RSPL waren mit 5720 Simulationsläufen über die Hälfte der Läufe nicht konvergent. Zusätzlich wurden die Erwartungswerte mit 11.1 % im Mittel deutlich überschätzt. Für die GEE-Methode zeigte sich für 43 % der Simulationsläufe Konvergenz, wobei der mittlere Bias bei 1 % lag. Der RMSPE war beim Schätzverfahren RSPL am höchsten. Ansonsten unterschied sich der RMSPE zwischen den anderen Schätzverfahren nur geringfügig.

Tabelle 7.2: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
			Mean	Min	Max	
A	Quad	10000	-0.0841	-0.3261	0.1548	0.3154
A	Laplace	10000	-0.2592	-0.5006	-0.0211	0.3149
A	RSPL	8220	6.7606	6.3777	7.2571	0.3375
A	GEE	9975	-0.0776	-0.3659	0.1775	0.3241
B	Quad	10000	0.0093	-0.2306	0.2429	0.4262
B	Laplace	10000	-0.1102	-0.3487	0.1231	0.4256
B	RSPL	4280	11.0552	9.5887	14.7126	0.4699
B	GEE	4294	1.0480	-0.5292	4.5983	0.4271

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur, RSPL - Restricted subjektsspezifische Pseudo-Likelihood Methode, GEE - generalized estimating equations

In Tabelle 7.3 ist die Ährenvarianz für die einzelnen Datensätze und Schätzverfahren dargestellt. Mit dem RSPL-Verfahren konnte für die Ährenvarianz bei geringerer Konvergenz im Vergleich zu den anderen Schätzverfahren für den Datensatz A im Mittel aller Simulationen mit 0.3885 und auch für den Datensatz B im Mittel mit 0.3597 die geringste Verzerrung erreicht werden. Es lagen trotz Konvergenz bei einigen Läufen teilweise keine Schätzungen für den Standardfehler der Ährenvarianz vor. Somit konnten keine Schätzungen für den Standardfehler der Differenzen zweier Erwartungswerte erzeugt werden.

Tabelle 7.3: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Erzeugung eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegeben mit $\sigma_u^2 = 0.4087$ für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_{SE}	Ährenvarianz		
				Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	10000	10000	0.3489	0.3481	0.3497
A	Laplace	10000	9998	0.3440	0.3432	0.3448
A	RSPL	8220	8220	0.3885	0.3878	0.3893
B	Quad	10000	9082	0.3247	0.3235	0.3258
B	Laplace	10000	9075	0.3243	0.3232	0.3254
B	RSPL	4280	4280	0.3597	0.3581	0.3612

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur, RSPL - Restricted subjektsspezifische Pseudo-Likelihood Methode

Der Fehler 1. Art wird für Datensatz A unter den Schätzverfahren Quad und Laplace für drei Hypothesen eingehalten (siehe Abbildung 7.3). Für RSPL bzw. GEE wurde der Fehler 1. Art stark unter- bzw. überschätzt.

Für den Datensatz B wurde der Fehler 1. Art für die Schätzverfahren Quad und Laplace bei der Prüfung von sieben Hypothesen nur einmal eingehalten. Bei den Schätzverfahren RSPL und GEE kam es im Vergleich zu den Verfahren Quad und Laplace zu einer stärkeren Unter- bzw. Überschätzung des Fehlers 1. Art. Nur eine Hypothese unter GEE konnte eingehalten werden (Vergleich Sorte eins und zwei zu Termin zwei in Schicht eins).

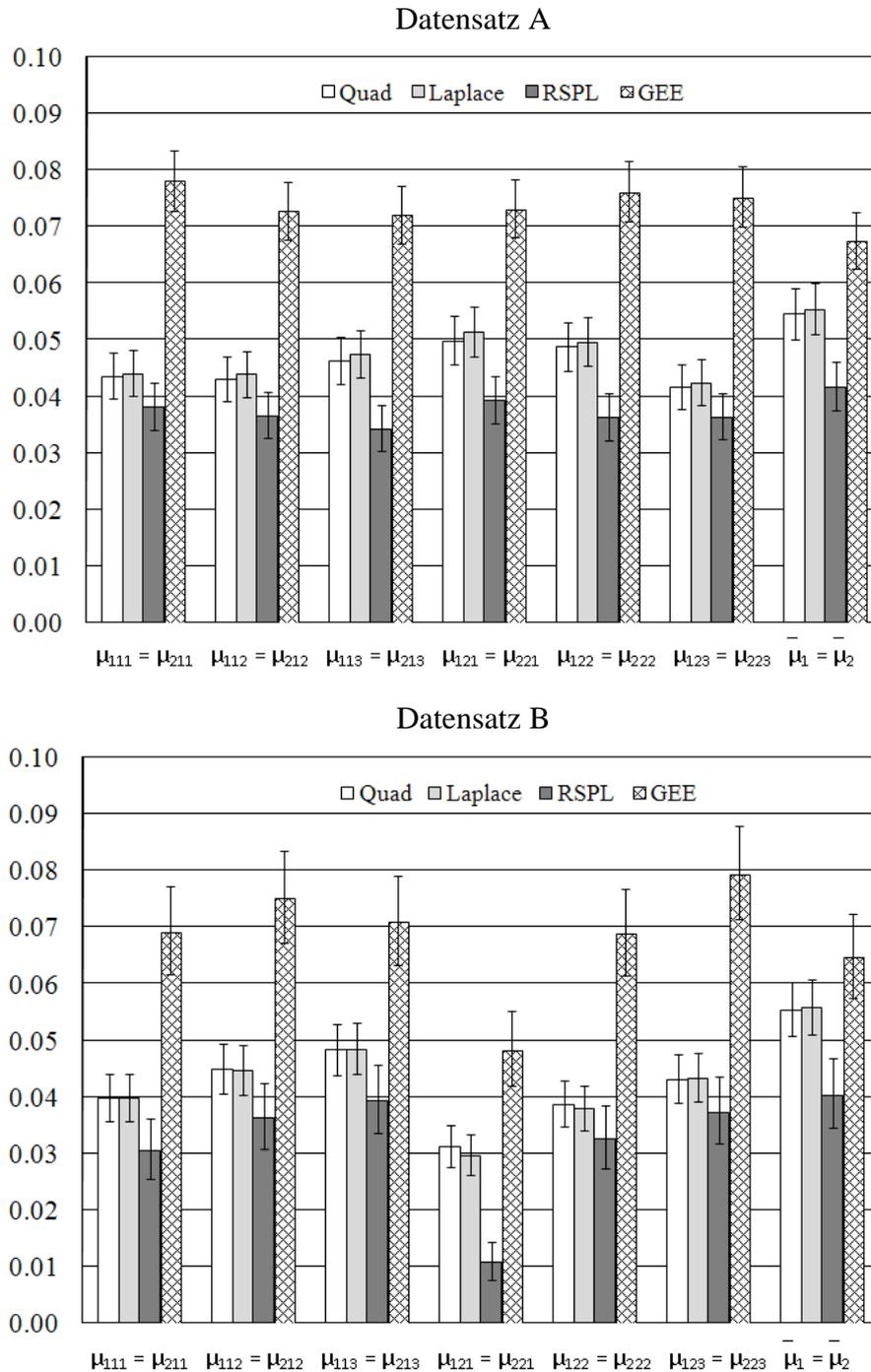


Abbildung 7.3: Mittelwert und zweiseitiges Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für das Poisson-Modell mit zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), Restricted subjektspezifische Pseudo-Likelihood Methode (RSPL) und generalized estimating equations (GEE), für die Datensätze A und B

7.1.3 Poissonverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten

Ein Modell mit Poi und terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten wird im folgenden Abschnitt bei der Simulation verwendet. Aufgrund der Ergebnisse aus Abschnitt 7.1.2 wurde die Schätzung der Modellparameter auf die Verfahren Quad und Laplace beschränkt.

Sowohl für Datensatz A als auch für Datensatz B ergaben sich für beide Schätzverfahren 100 % konvergente Läufe und erwartungstreue Schätzungen (siehe Tabelle 7.4). Der RMSPE unterschied sich zwischen den Schätzverfahren für beide Datensätze nur geringfügig.

Tabelle 7.4: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
			Mean	Min	Max	
A	Quad	10000	-0.0582	-0.3525	0.1687	0.3156
A	Laplace	10000	-0.2339	-0.4916	0.0289	0.3150
B	Quad	10000	0.0015	-0.1881	0.4952	0.4260
B	Laplace	10000	-0.1270	-0.3802	0.3023	0.4254

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Für die Ährenvarianzen traten im Mittel über alle simulierten Stichproben für Datensatz A und beide Schätzverfahren Verzerrungen auf (siehe Tabelle 7.5). Für den Datensatz B wurden geringfügig schlechtere Schätzwerte für die Ährenvarianz ermittelt. Es treten für diesen Datensatz wieder Läufe auf, bei denen trotz Konvergenz kein Standardfehler für die Ährenvarianz geschätzt wurde.

Tabelle 7.5: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Erzeugung eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für die geschätzte Ährenvarianz ($\hat{\sigma}_{u_j}^2$) für die Datensätze A und B in Abhängigkeit vom Termin (j)

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_{SE}	j	$\sigma_{u_j}^2$	$\hat{\sigma}_{u_j}^2$		
						Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	10000	10000	1	0.35	0.2961	0.2951	0.2971
A	Quad	10000	10000	2	0.47	0.4038	0.4024	0.4050
A	Laplace	10000	10000	1	0.35	0.2921	0.2911	0.2931
A	Laplace	10000	10000	2	0.47	0.3980	0.3968	0.3992
B	Quad	10000	9901	1	0.35	0.2692	0.2678	0.2707
B	Quad	10000	9901	2	0.47	0.3772	0.3755	0.3789
B	Laplace	10000	9896	1	0.35	0.2716	0.2701	0.2730
B	Laplace	10000	9896	2	0.47	0.3744	0.3728	0.3760

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

In Abbildung 7.4 sind die empirischen Fehler 1. Art dargestellt. Für Datensatz A wurde der Fehler 1. Art durch die Verfahren Quad und Laplace jeweils bei einer Hypothese eingehalten. Für Datensatz B konnte dagegen für beide Schätzverfahren der Fehler 1. Art bei zwei Hypothesen eingehalten werden.

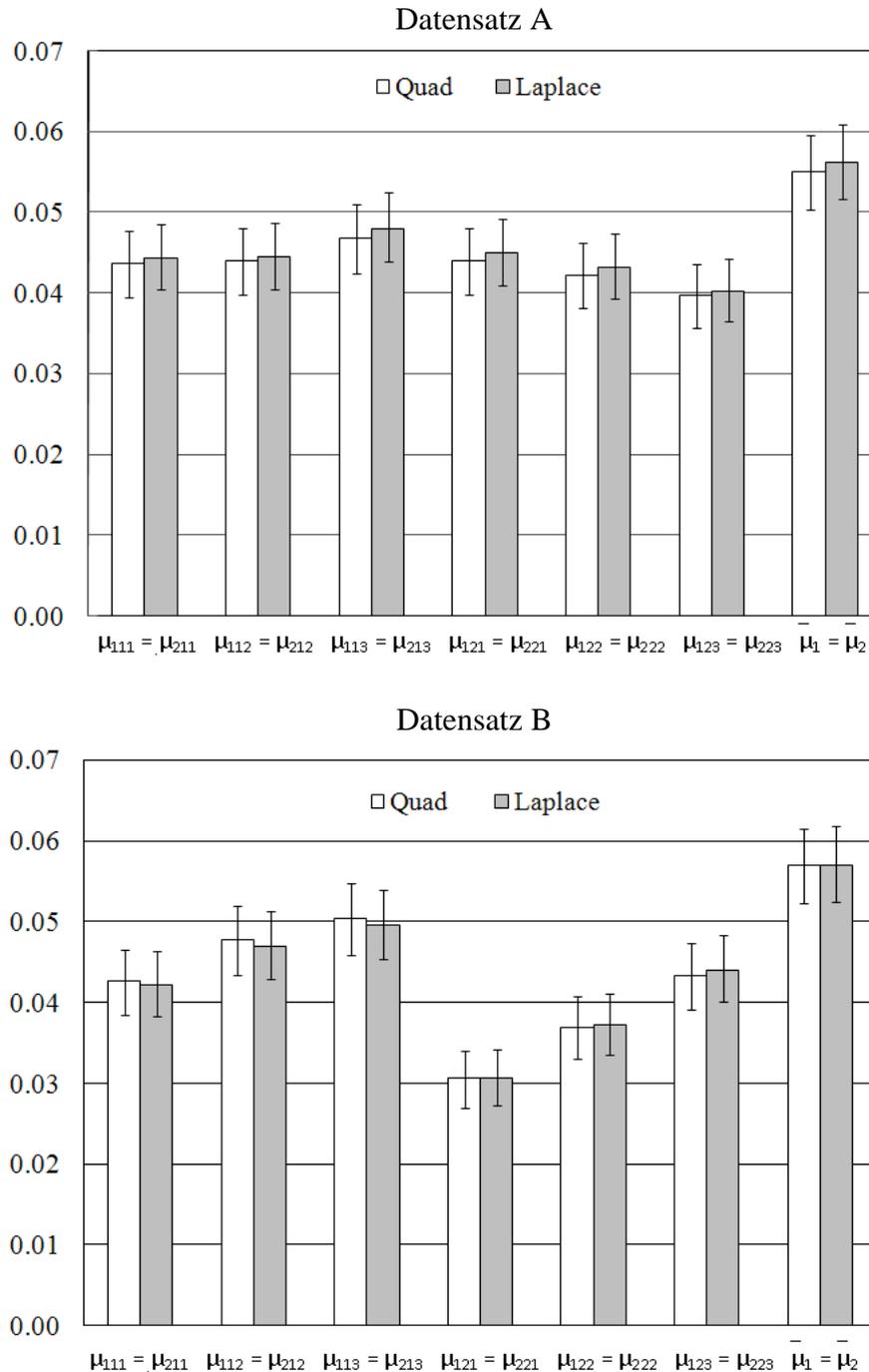


Abbildung 7.4: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Poisson-Modelle mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B

7.2 Negative Binomialverteilung für Anzahl Thripse pro Ährenschrift

Im nachfolgenden Abschnitt werden Ergebnisse für Modelle mit NB demonstriert. Im NB-Modell wird neben den Modellparametern der Dispersionsparameter α geschätzt. Strebt α gegen null, so geht die Dichtefunktion der NB in die Dichtefunktion der Poi über. Folglich kann zur Prüfung der Hypothese $H_0 : \alpha = 0$ gegen $H_1 : \alpha > 0$ ein Likelihood-Quotiententest, basierend auf den Likelihoodwerten des Poi- und des NB-Modells, verwendet werden. Ein derartiger Test wurde jedoch nicht bei der Simulation berücksichtigt. Zur Beurteilung des Dispersionsparameters wurde letztendlich nur die Anzahl Simulationen angegeben, in denen $\alpha > 10^{-5}$ geschätzt wird.

7.2.1 Negative Binomialverteilung ohne zufällige Ähreneffekte

Nachfolgend werden die Simulationsergebnisse für ein Modell mit NB ohne zufällige Ähreneffekte dargestellt. Für beide Datensätze ergab sich in allen Simulationsläufen Konvergenz (siehe Tabelle 7.6). Für die Sortenmittel lagen erwartungstreue Schätzungen vor, welche unter 1 % lagen.

Tabelle 7.6: Anzahl an Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
		Mean	Min	Max	
A	10000	-0.0105	-0.4677	0.6617	0.3362
B	10000	-0.0323	-0.6427	0.8986	0.4605

Zusätzlich wurde für jeden Erwartungswert der Bias mit dem zugehörigen 95 % Konfidenzintervall angegeben (siehe Abbildung 7.5). Bis auf einen Erwartungswert (Sorte eins zu Termin zwei in Schicht drei = μ_{122}) für Datensatz B enthalten die Konfidenzintervalle des Bias (%) der Erwartungswerte die Null, so dass Erwartungstreue angenommen werden kann.

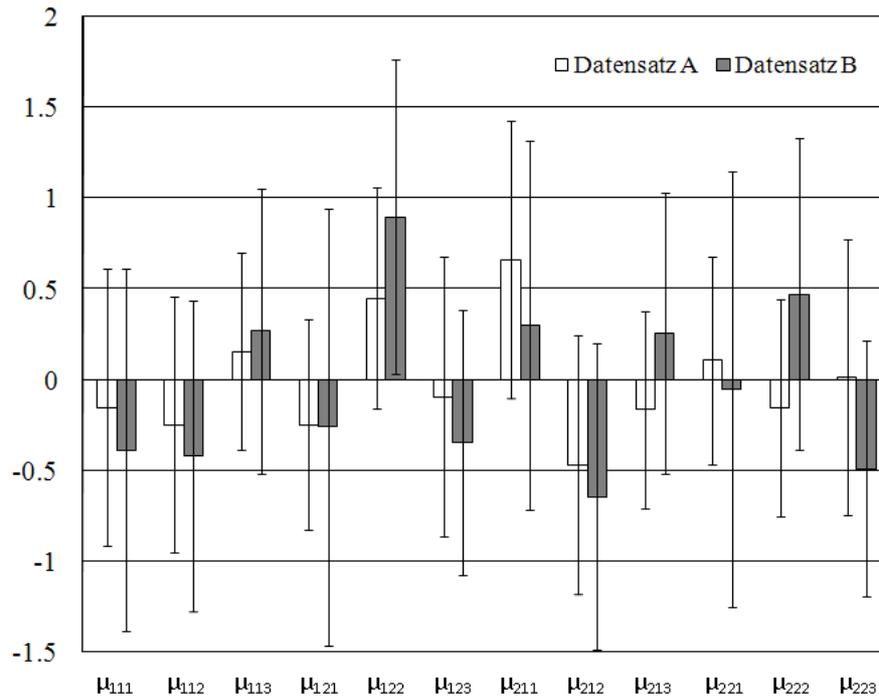


Abbildung 7.5: Bias (%) und 95 % Konfidenzintervall für die zwölf marginalen Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Bei der Auswertung der simulierten Stichproben wird im Mittel die Überdispersion signifikant positiv geschätzt (siehe Tabelle 7.7). In allen Läufen wird $\alpha > 10^{-5}$ geschätzt. Allerdings wird für beide Datensätze der vorgegebene Dispersionsparameter signifikant unterschätzt, da das 95 % Konfidenzintervall den vorgegebenen Parameter nicht enthält.

Tabelle 7.7: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean), unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.4664$ für die Datensätze A und B

Datensatz	N_{konv}	N_0	α		
			Mean	KI_u	KI_o
A	10000	10000	0.3498	0.3490	0.3507
B	10000	10000	0.2563	0.2549	0.2577

Für die getesteten Hypothesen wurde der nominale Fehler 1. Art für Datensatz A zweimal und für Datensatz B dreimal eingehalten (siehe Abbildung 7.6).

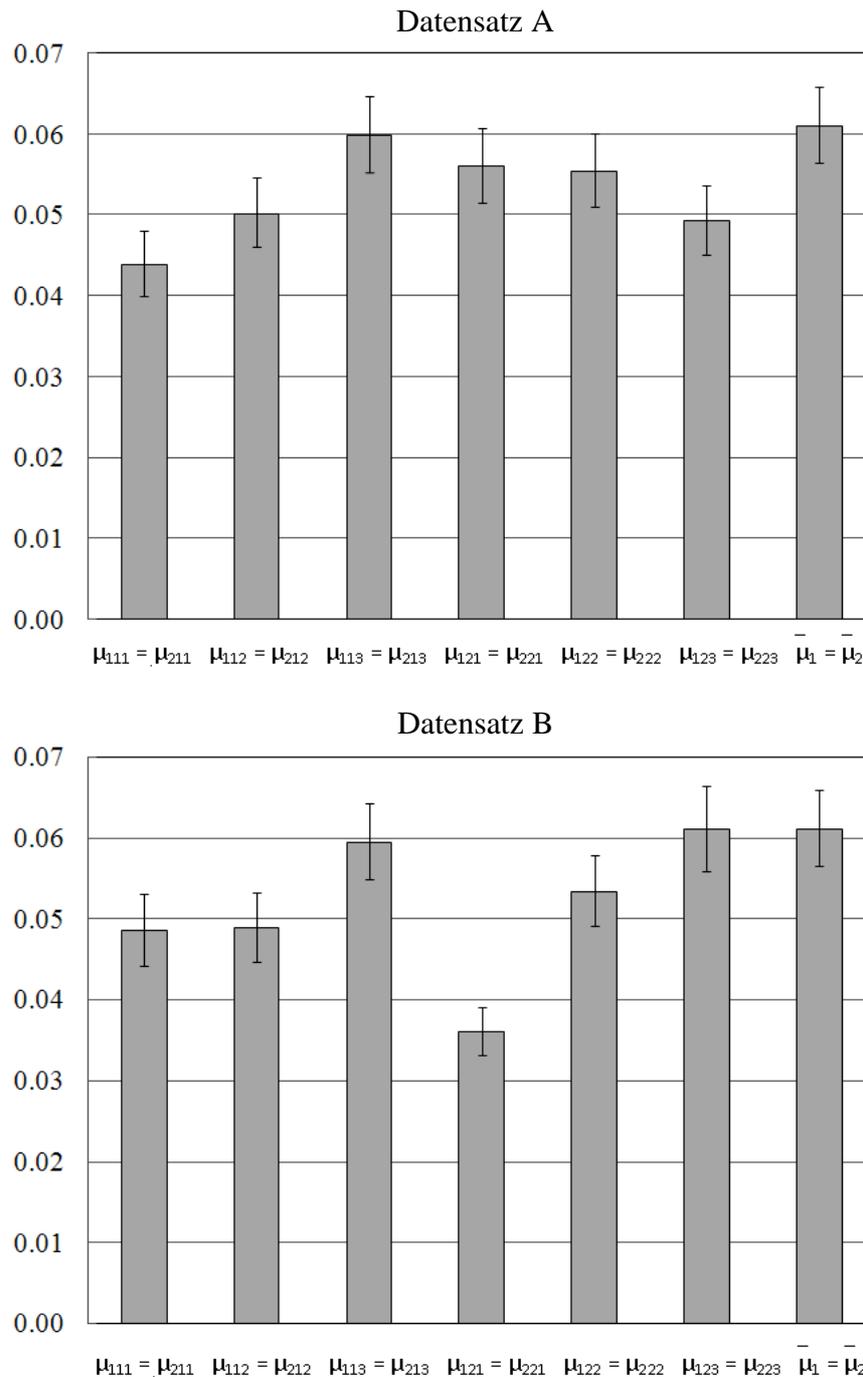


Abbildung 7.6: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung ohne zufällige Ähreneffekte für die Datensätze A und B

7.2.2 Negative Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten

Als nächstes werden die Ergebnisse für das simulierte Modell mit NB und zufälligen Ähreneffekten vorgestellt. Für den Datensatz A wurde für das Schätzverfahren Quad bei 179 bzw. Laplace bei 481 Läufen keine Konvergenz erreicht (siehe Tabelle 7.8). Die Sortenmittel wur-

den erwartungstreu geschätzt. Der RMSPE unterschied sich zwischen den Schätzverfahren nur geringfügig.

Für den Datensatz B wurde durch Quad in über 40 % und durch Laplace in über 60 % der Simulationen keine Konvergenz erzielt (siehe Tabelle 7.8). Die Sortenmittel wurden für beide Verfahren erwartungstreu geschätzt. Der RMSPE unterschied sich zwischen den Schätzverfahren nur geringfügig.

Tabelle 7.8: Anzahl der Läufe mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
			Mean	Min	Max	
A	Quad	9821	-0.2213	-0.4596	0.0035	0.3170
A	Laplace	9519	-0.2662	-0.4755	0.0226	0.3171
B	Quad	5998	0.0211	-0.6084	0.6561	0.4302
B	Laplace	3832	0.3771	-0.4746	0.4362	0.4337

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Die Ährenvarianz wurde für die Verfahren Quad und Laplace innerhalb beider Datensätze verzerrt geschätzt (siehe Tabelle 7.9). Die Simulation mit Datensatz A unter Verwendung von Laplace ergab Läufe mit Konvergenz ohne Angabe eines Standardfehlers für die geschätzte Ährenvarianz. Diese Aussage trifft bei Datensatz B für beide Schätzverfahren zu.

Tabelle 7.9: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegeben mit $\sigma_u^2 = 0.36$ für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_{SE}	Ährenvarianz		
				Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	9821	9821	0.3157	0.3149	0.3165
A	Laplace	9519	9518	0.3190	0.3182	0.3198
B	Quad	5998	5830	0.2873	0.2859	0.2888
B	Laplace	3832	3763	0.2985	0.2967	0.3004

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Der Dispersionsparameter α wird für beide Datensätze und Verfahren unterschätzt (siehe Tabelle 7.10). Vor allem für Datensatz B liegen häufig Läufe vor, in denen $\alpha < 10^{-5}$ geschätzt

wird.

Tabelle 7.10: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_0	α		
				Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	9821	9629	0.0463	0.0458	0.0468
A	Laplace	9519	9060	0.0382	0.0377	0.0387
B	Quad	5998	4560	0.0290	0.0282	0.0299
B	Laplace	3832	1958	0.0156	0.0148	0.0165

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Für Datensatz A wurde der nominale Fehler 1. Art für das Quad-Verfahren bei vier und für das Laplace-Verfahren bei drei Hypothesen eingehalten (siehe Abbildung 7.7). Ansonsten traten bis auf den Vergleich von Sorte eins und zwei über alle Termine und Schichten nur geringe Unter- bzw. Überschätzungen auf.

Für Datensatz B wurden im Gegensatz dazu mehr Fehler 1. Art unter dem Schätzverfahren Laplace im Vergleich zu Quad eingehalten. Mit Ausnahme von zwei Vergleichen kam es zu geringen Über- bzw. Unterschätzungen.

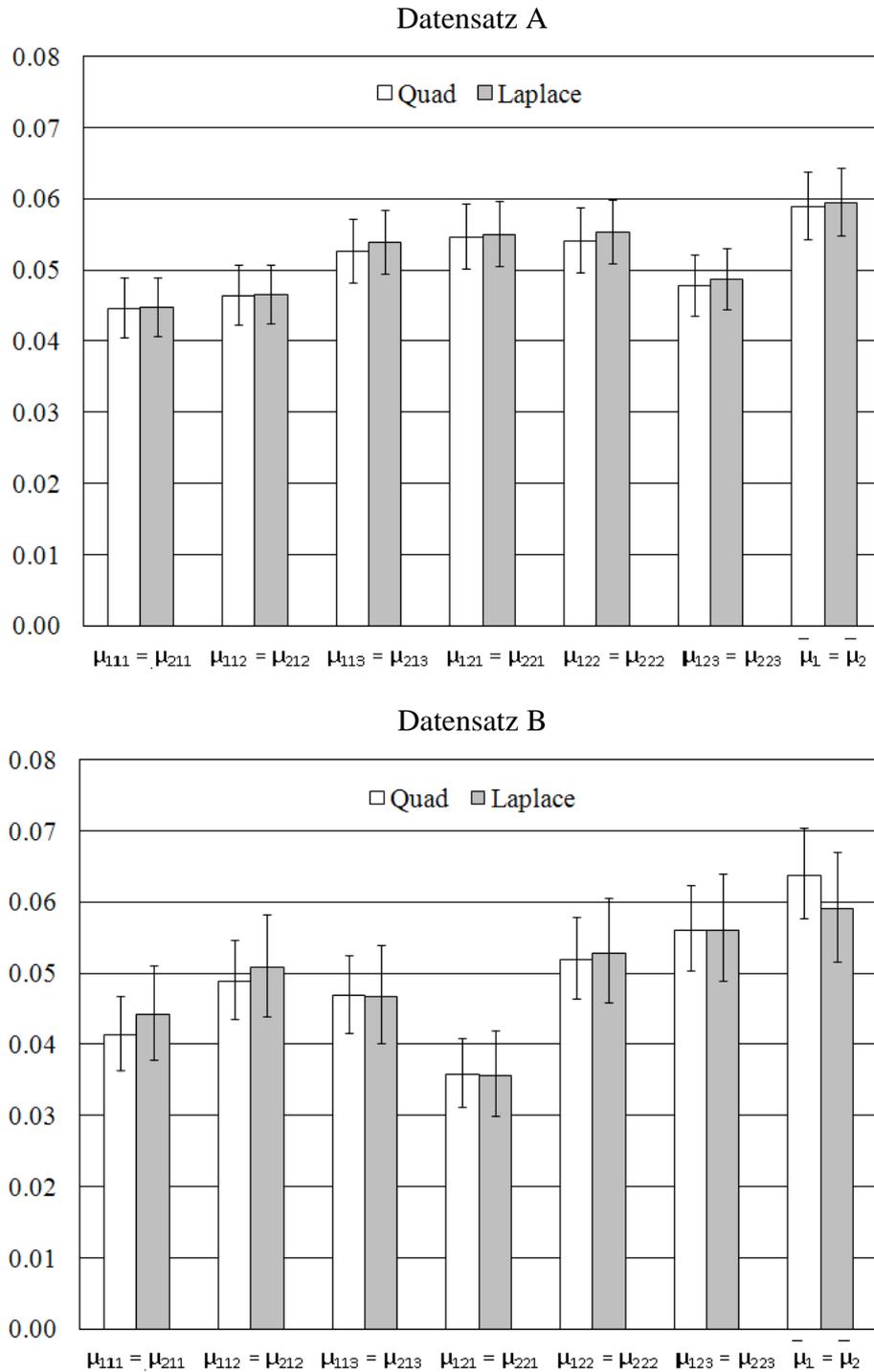


Abbildung 7.7: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B

Erhöhung der Anzahl Ähren pro Sorte. Zusätzlich wurde für das Schätzverfahren Quad für beide Datensätze die Anzahl der simulierten Ähren pro Sorte und Termin erhöht. Mit Erhöhung

der Anzahl Ähren auf 20 verbessern sich für beide Datensätze die Konvergenzeigenschaften (siehe Tabelle 7.11). Für Datensatz A konnte für alle simulierten Stichproben Konvergenz beobachtet werden. Die Sortenmittel wurden erwartungstreu geschätzt. Geringfügig verschlechtern sich die Schätzungen für Datensatz B. Die RMSPE-Werte verringern sich für beide Datensätze bei erhöhter Ährenanzahl erwartungsgemäß.

Tabelle 7.11: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B

n_{ij}	Datensatz	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
			Mean	Min	Max	
10	A	9821	-0.2213	-0.4596	0.0035	0.3170
20	A	10000	-0.1586	-0.2096	-0.0282	0.2240
10	B	5998	0.0211	-0.6084	0.6561	0.4302
20	B	9550	-0.2381	-0.8591	-0.0369	0.3021

Die Einhaltung der Vorgabewerte für die Ährenvarianz verbesserte sich im Mittel für beide Datensätze mit Erhöhung der Ährenanzahl (siehe Tabelle 7.12). Jedoch lagen immer noch Verzerrungen vor und für den Datensatz B traten weiterhin Läufe auf, bei denen trotz Konvergenz kein Standardfehler für die Ährenvarianz geschätzt werden konnte.

Tabelle 7.12: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für die Ährenvarianz vorgegebenen mit $\sigma_u^2 = 0.36$ in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B

n_{ij}	Datensatz	N_{konv}	Ährenvarianz			
			N_{SE}	Mean	KI_u	KI_o
10	A	9821	9821	0.3157	0.3149	0.3165
20	A	10000	10000	0.3348	0.3342	0.3354
10	B	5998	5830	0.2873	0.2859	0.2888
20	B	9550	9543	0.3200	0.3191	0.3208

Der geschätzte Dispersionsparameter verbessert sich mit Erhöhung der Ährenanzahl für beide Datensätze (siehe Tabelle 7.13). Allerdings wird α immer noch unterschätzt und für Datensatz B liegen Läufe vor, bei denen $\alpha < 10^{-5}$ geschätzt wird.

Tabelle 7.13: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ in Abhängigkeit der Anzahl Ähren (n_{ij}) für die Datensätze A und B

n_{ij}	Datensatz	N_{konv}	N_0	α		
				Mean	KI_u	KI_o
10	A	9821	9629	0.0463	0.0458	0.0468
20	A	10000	10000	0.0749	0.0746	0.0753
10	B	5998	4560	0.0290	0.0282	0.0299
20	B	9550	9185	0.0456	0.0557	0.0572

Der Fehler 1. Art wurde bei einer simulierten Anzahl von 20 Ähren für Datensatz A bis auf eine Hypothese eingehalten (siehe Abbildung 7.8). Damit verbesserte sich die Einhaltung bei Erhöhung der Ährenanzahl. Für Datensatz B verbessert sich die Einhaltung des Fehlers 1. Art bei zwei Hypothesen. Für den Vergleich von Sorte eins und zwei zu Termin zwei in Schicht zwei verschlechtert sich der geschätzte Fehler 1. Art und wird nicht mehr eingehalten.

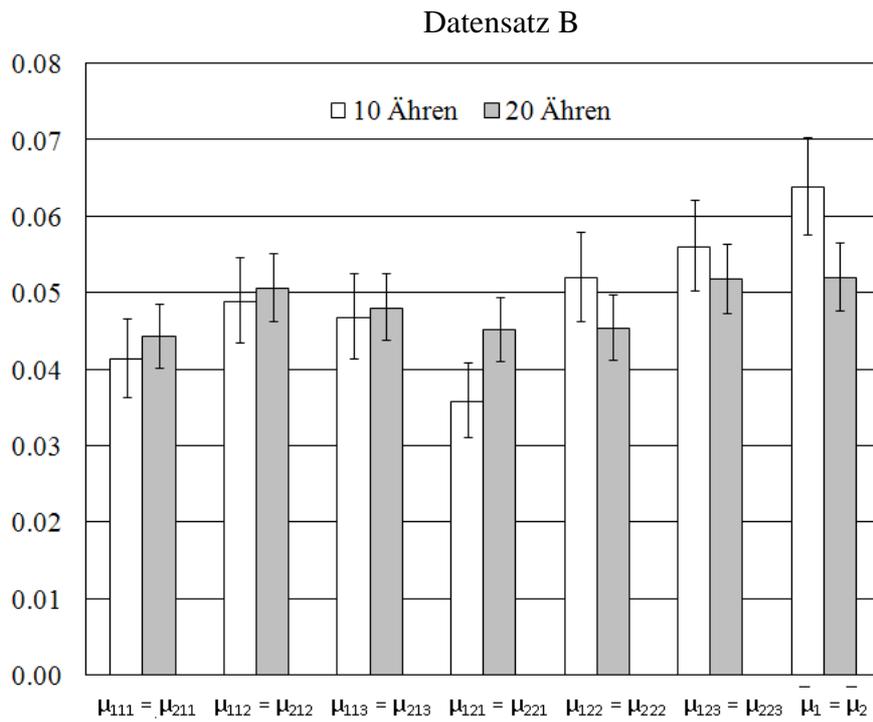
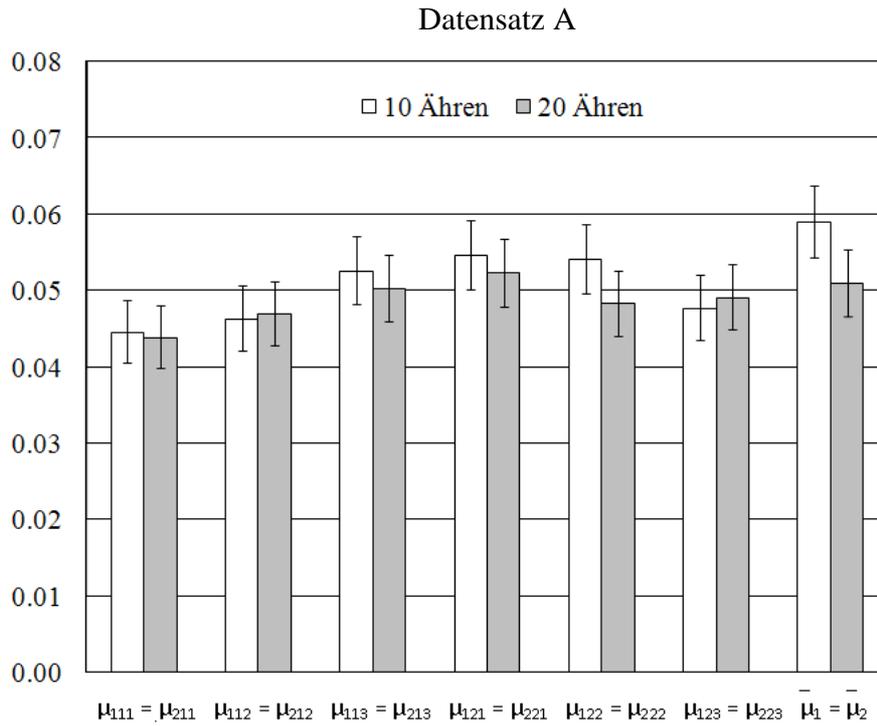


Abbildung 7.8: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit zufälligen Ähreneffekten in Abhängigkeit der Anzahl Ähren für die Datensätze A und B

7.2.3 Negative Binomialverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten

Nachfolgend wird ein Modell mit NB und terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten simuliert. Für Datensatz A ergab das Laplace-Verfahren im Vergleich zu Quad weniger Simulationsläufe mit Konvergenz (siehe Tabelle 7.14). Das Sortenmittel pro Schicht und Termin wurde erwartungstreu geschätzt und der RMSPE unterschied sich zwischen den Schätzverfahren nicht. Bei Vorliegen von Datensatz B ergab Quad nur 64 % und Laplace nur 40 % konvergente Läufe (siehe Tabelle 7.14). Es lagen erwartungstreue Schätzungen für die Sortenmittel vor. Im RMSPE zeigte sich zwischen den Schätzverfahren nur ein geringer Unterschied.

Tabelle 7.14: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSPE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	Bias (%)			RMSPE
			Mean	Min	Max	
A	Quad	9823	-0.1423	-0.5123	0.2084	0.3354
A	Laplace	9534	-0.1587	-0.2942	0.1040	0.3355
B	Quad	6368	0.1796	-0.3719	0.7034	0.4437
B	Laplace	4032	0.3958	-0.9244	1.3345	0.4465

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Die terminspezifischen Ährenvarianzen wurden für beide Datensätze und Verfahren nicht erwartungstreu geschätzt (siehe Tabelle 7.15). Für Datensatz B traten häufig konvergente Simulationsläufe auf, bei denen kein Standardfehler für die geschätzte Ährenvarianzen vorlag.

Tabelle 7.15: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers (N_{SE}), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für die geschätzte Ährenvarianz ($\hat{\sigma}_{u_j}^2$) für die Datensätze A und B in Abhängigkeit des Terms (j)

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_{SE}	j	$\sigma_{u_j}^2$	$\hat{\sigma}_{u_j}^2$		
						Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	9823	9823	1	0.35	0.3084	0.3073	0.3095
A	Quad	9823	9823	2	0.47	0.4124	0.4111	0.4138
A	Laplace	9534	9534	1	0.35	0.3119	0.3107	0.3130
A	Laplace	9534	9534	2	0.47	0.4149	0.4135	0.4163
B	Quad	6368	6073	1	0.35	0.2778	0.2758	0.2797
B	Quad	6368	6073	2	0.47	0.3816	0.3792	0.3840
B	Laplace	4032	4003	1	0.35	0.2872	0.2848	0.2896
B	Laplace	4032	4003	2	0.47	0.3950	0.3922	0.3978

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Der Dispersionsparameter α wurde im Mittel über alle Datensätze und Verfahren unterschätzt (siehe Tabelle 7.16). Besonders für das Laplace-Verfahren und Datensatz B wurde in nur 51 % der Simulationen mit Konvergenz $\alpha > 10^{-5}$ geschätzt.

Tabelle 7.16: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit $\alpha > 10^{-5}$ (N_0), Mittelwert (Mean) und unteres bzw. oberes Konfidenzintervall (KI_u , KI_o) ($P = 0.95$) für den Dispersionsparameter vorgegeben mit $\alpha = 0.10$ für die Datensätze A und B

Datensatz	Verfahren ¹	N_{konv}	N_0	α		
				Mean	KI_u	KI_o
A	Quad	9823	9667	0.0467	0.0462	0.0472
A	Laplace	9534	9124	0.0386	0.0382	0.0391
B	Quad	6368	4871	0.0349	0.0337	0.0360
B	Laplace	4032	2047	0.0144	0.0137	0.0152

¹Quad - Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur

Der Fehler 1. Art wurde für Datensatz A bei Verwendung von Quad für vier Hypothesen und von Laplace für drei Hypothesen eingehalten (siehe Abbildung 7.9). Für die restlichen Fehler 1. Art traten geringfügige Unter- bzw. Überschätzungen auf.

Für Datensatz B wurde der Fehler 1. Art für das Quad-Verfahren dreimal und für das Laplace-Verfahren zweimal nicht eingehalten.

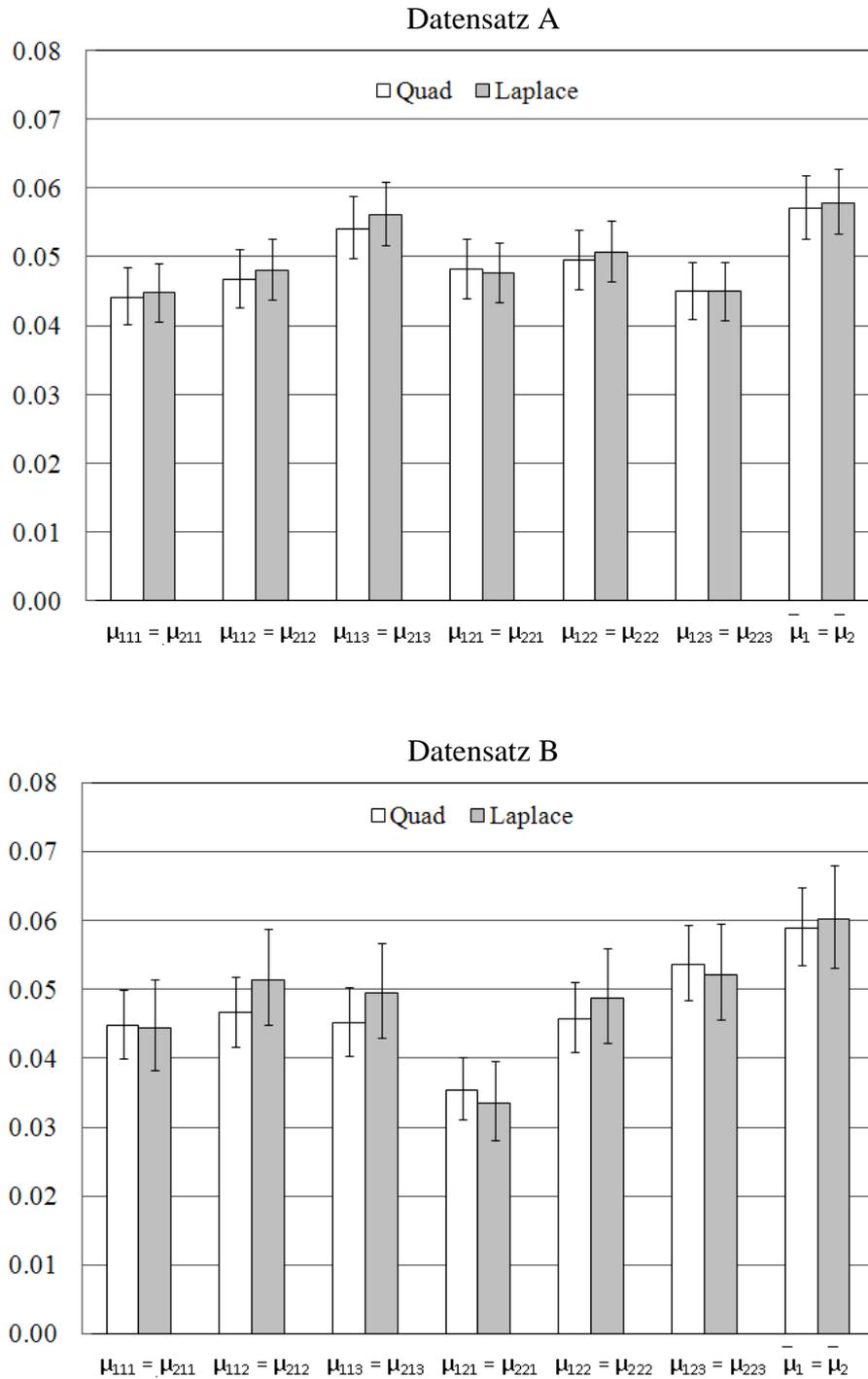


Abbildung 7.9: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung mit terminspezifischen zufälligen Ähreneffekten, geschätzt mit der Maximum-Likelihood Methode basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur bzw. Laplace-Approximation (Quad bzw. Laplace), für die Datensätze A und B

7.3 Vergleich bei Berücksichtigung von linearen Modellen

Nachfolgend werden die mit Poi simulierten Stichproben für das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift zusätzlich mit linearen Modellen (siehe Modell (6.6)) unter Annahme von Normalverteilung ausgewertet. Die nachfolgenden Auswertungen wurden auf den Datensatz A beschränkt (siehe Tabelle 6.2). Die Schätzung der Modellparameter innerhalb des Poi-Modells erfolgte nach dem Quad-Verfahren. Abweichend von den bisherigen Untersuchungen werden für die Vorgabe der Sorteneffekte zwei verschiedene Konstellationen untersucht (siehe Abschnitt 6.3.3, Variante A1 und A2).

7.3.1 Modelle ohne zufällige Ähreneffekte

Zunächst wurden Modelle ohne zufällige Ähreneffekte ausgewertet. Gemäß Tabelle 7.17 sind der Bias (%) und der RMSE sowohl für alle Modellansätze als auch für beide Varianten gleich. Es liegen erwartungstreue Schätzungen vor. Die identischen Schätzwerte können folgendermaßen erklärt werden. Im LM und LM_inh sind die LSM von Sorte i zu Termin j in der Schicht k durch das arithmetische Mittel der Beobachtungen dieser Stufenkombination gegeben. Im Poi-Modell ergeben sich die Effektschätzungen aus dem Logarithmus der entsprechenden arithmetischen Mittel. Unterschiede zwischen den Modellen zeigen sich erst bei Betrachtung der Fehler 1. Art für die untersuchten Hypothesen.

Tabelle 7.17: Anzahl an Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Varianten A1 und A2

Modell ¹	Variante	N_{konv}	Bias (%)			RMSE		
			Mean	Min	Max	Mean	Min	Max
Poisson	A1	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878
LM	A1	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878
LM_inh	A1	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878
Poisson	A2	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878
LM	A2	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878
LM_inh	A2	10000	-0.0054	-0.3048	0.0717	0.4300	0.3064	0.5878

¹LM(_inh) - lineares Modell (mit inhomogenen Restvarianzen)

Für den Fehler 1. Art zeigen sich Unterschiede zwischen den drei Auswertungsmodellen (siehe Abbildung 7.10). Durch das Poi-Modell wird die Irrtumswahrscheinlichkeit von 5 % bis auf zwei Vergleiche eingehalten. Im LM liegen für beide Varianten bis auf einen Vergleich (Variante A1: $\bar{\mu}_1 = \bar{\mu}_2$) sowohl Unter- als auch Überschätzungen vor. Werden inhomogene Restvarianzen beachtet (LM_inh), verbessert sich der Fehler 1. Art und wird für die Variante A1 eingehalten.

Für die Variante A2, d. h. bei Vorliegen unterschiedlicher Sorteneffekte (18 von 20), liegen immer Unterschätzungen vor.

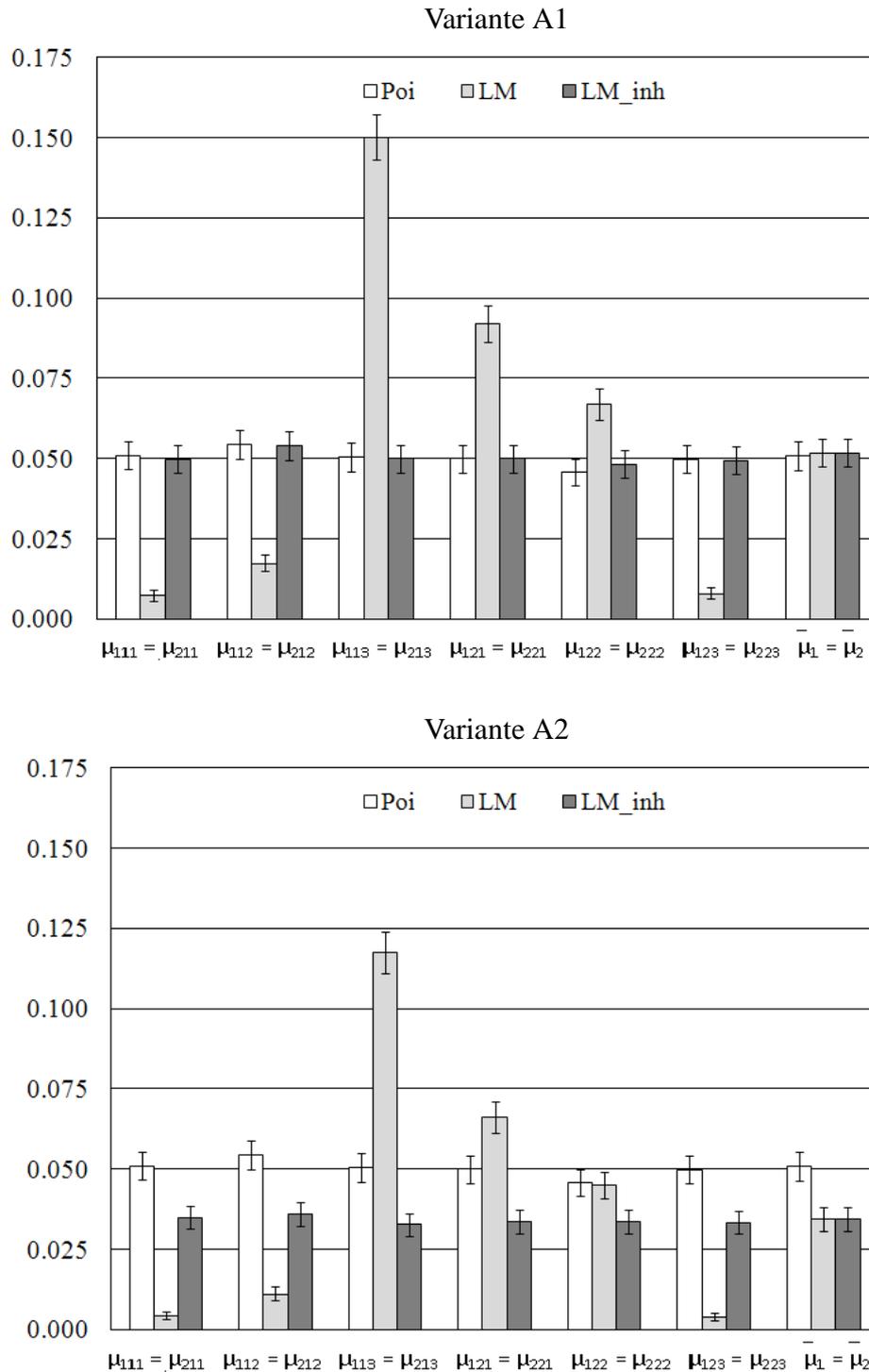


Abbildung 7.10: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für ein Poisson-Modell (Poi) und lineare Modelle ohne bzw. mit inhomogenen Restvarianzen und (LM bzw. LM_inh)

7.3.2 Modelle mit zufälligen Ähreneffekten

Als nächstes werden bei der Simulation zufällige Ähreneffekte berücksichtigt. Tabelle 7.18 zeigt, dass sich der Bias (%) und RMSE nur geringfügig zwischen den Modellansätzen und Varianten unterscheiden. Es liegen unverzerrte Schätzungen vor. Für das LMM_inh traten jedoch Konvergenzprobleme auf. In über 200 bzw. 1000 Läufen wurde keine Konvergenz erreicht.

Tabelle 7.18: Anzahl der Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}), Mittelwert (Mean), Minimum und Maximum für den Bias (%) und RMSE der geschätzten zwölf Erwartungswerte für die Varianten A1 und A2

Modell ¹	Variante	N_{konv}	Bias (%)			RMSE		
			Mean	Min	Max	Mean	Min	Max
Poisson	A1	10000	-0.0841	-0.3261	0.1548	0.7112	0.6017	106.85
LMM	A1	10000	-0.0767	-0.3622	0.1526	0.7353	0.4365	111.10
LMM_inh	A1	9717	-0.0161	-0.3962	0.3991	0.7351	0.4361	111.01
Poisson	A2	10000	-0.0677	-0.2999	0.1765	0.7111	0.4279	106.93
LM	A2	10000	-0.0767	-0.3622	0.1526	0.7353	0.4365	111.10
LMM_inh	A2	8959	-0.0959	-0.4395	0.1244	0.7328	0.4365	110.84

¹LMM(_inh) - lineares gemischtes Modell (mit inhomogenen Restvarianzen)

Der Fehler 1. Art wurde für die Läufe mit vorhandenem Standardfehler für die Ährenvarianz für das Poi-Modell innerhalb der Variante A1 bei drei und der Variante A2 bei zwei Hypothesen eingehalten (siehe Abbildung 7.11). Ansonsten liegen geringfügige Unter- bzw. Überschätzungen vor. Für das LMM wurde der Fehler 1. Art bis auf eine Hypothese für beide Varianten stark über- oder unterschätzt. Werden jedoch inhomogene Restvarianzen im Modell berücksichtigt, verbessert sich der Fehler 1. Art. Allerdings wird dieser weiterhin nicht eingehalten.

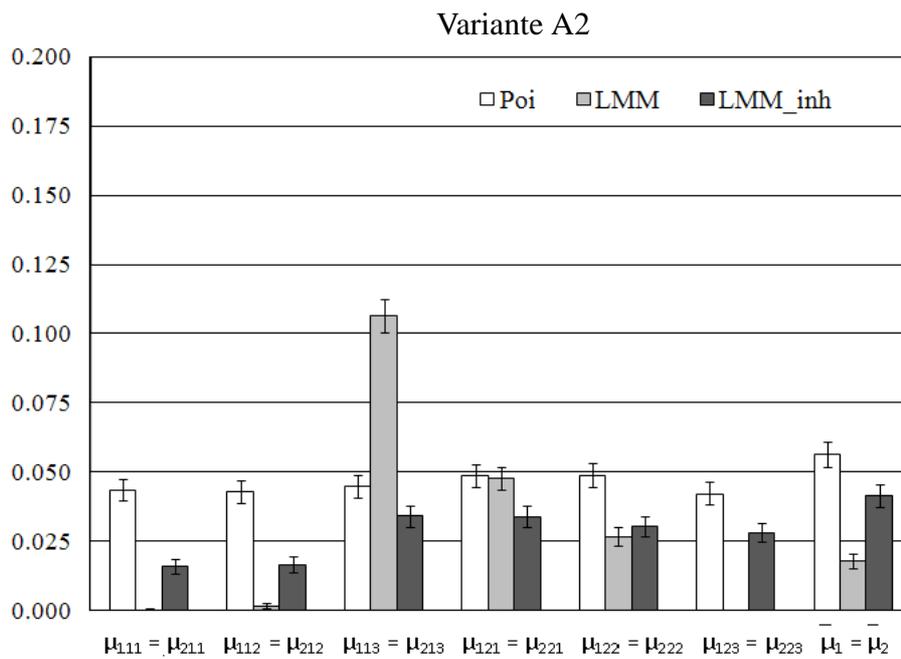
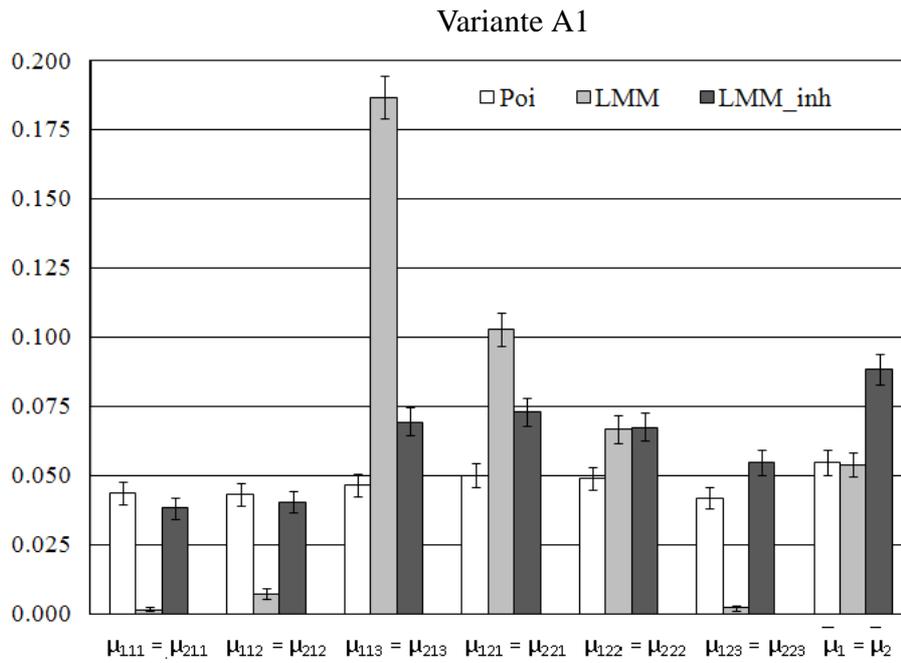


Abbildung 7.11: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den empirischen Fehler 1. Art der getesteten sieben Hypothesen in der Responseskala für Poisson-Modelle (Poisson) und lineare gemischte Modelle ohne bzw. mit inhomogenen Restvarianzen (LMM bzw. LMM_inh) mit zufälligen Ähreneffekten

7.4 HP-Modell für die Anzahl Besuche pro Stunde am Futterautomat

Die nachfolgenden Untersuchungen beziehen sich auf ein Zählmerkmal, für welches Nullenüberschuss vorliegt. Simuliert wird ein HP-Modell für die Anzahl Besuche einer Kuh pro Stunde am Futterautomat (siehe Abschnitt 6.4). Für die Berechnung der marginalen Erwartungswerte des Merkmals Anzahl Besuche pro Stunde innerhalb Ration und Periode wurden Näherungsformeln abgeleitet (vgl. Darstellung (5.11)). Mit Hilfe der Deltamethode konnte der Standardfehler für die geschätzten Erwartungswerte approximiert werden. Durch die nachfolgende Simulationsstudie soll die Eignung der abgeleiteten Näherungsformeln geprüft werden. Deshalb werden mit Hilfe der Standardfehler 95 % Konfidenzintervalle konstruiert und überprüft, in wieviel Prozent der simulierten Stichproben die berechneten Konfidenzintervalle den wahren Parameter enthalten. Die Modellparameter werden immer unter Verwendung von Quad geschätzt.

7.4.1 HP-Modell ohne zufällige Tiereffekte

Zunächst werden die Ergebnisse für das HP-Modell ohne zufällige Tiereffekte dargestellt. In Tabelle 7.19 sind die geschätzten marginalen Erwartungswerte den vorgegebenen marginalen Erwartungswerten gegenübergestellt. Die Schätzungen sind für alle Rationen und Perioden erwartungstreu.

Tabelle 7.19: Erwartungswerte und deren Schätzungen, Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$), Bias (%) und RMSE der Erwartungswerte in Abhängigkeit von Ration und Periode

Ration	Periode	$E(Y_{ij} \bar{t})$	$\hat{E}(Y_{ij} \bar{t})$	$\hat{P}_K(0.95)$	Bias (%)	RMSE
1	1	2.0197	2.0200	0.9547	0.015	0.0368
	2	2.3917	2.3919	0.9499	0.010	0.0375
	3	2.5674	2.5678	0.9498	0.016	0.0385
2	1	2.3422	2.3414	0.9512	-0.032	0.0420
	2	2.6433	2.6427	0.9538	-0.023	0.0399
	3	2.6105	2.6107	0.9478	0.006	0.0414

In Tabelle 7.20 sind die Ergebnisse für den linearen Prädiktor zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit, dass kein Besuch stattfindet (Ereignis null) und zur Beschreibung, dass eine bestimmte positive Anzahl von Besuchen stattfindet (Ereignis eins, zwei usw.), dargestellt. Bis auf Ration zwei in Periode drei liegt der Bias (%) für den Prädiktor beider Verteilungsparameter unter 1 %.

Tabelle 7.20: Bias (%) und Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für den linearen Prädiktor $\eta_{0,ij}(\bar{t})$ $\eta_{1,ij}(\bar{t})$ der Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ bzw. λ_{ij} in Abhängigkeit von Ration und Periode

Ration	Periode	$\eta_{0,ij}(\bar{t})$		$\eta_{1,ij}(\bar{t})$	
		Bias (%)	$\hat{P}_K(0.95)$	Bias (%)	$\hat{P}_K(0.95)$
1	1	0.0303	0.9535	0.0034	0.9530
	2	0.0602	0.9515	-0.0005	0.9497
	3	0.1836	0.9502	-0.0046	0.9496
2	1	0.1708	0.9517	-0.0083	0.9510
	2	-0.2132	0.9556	-0.0077	0.9509
	3	1.0220	0.9477	-0.0117	0.9483

Werden die Regressionskoeffizienten beider Rationen im linearen Prädiktor der Verteilungsparameter verglichen, so wird der vorgegebene Fehler 1. Art für alle Vergleiche eingehalten (siehe Abbildung 7.12).

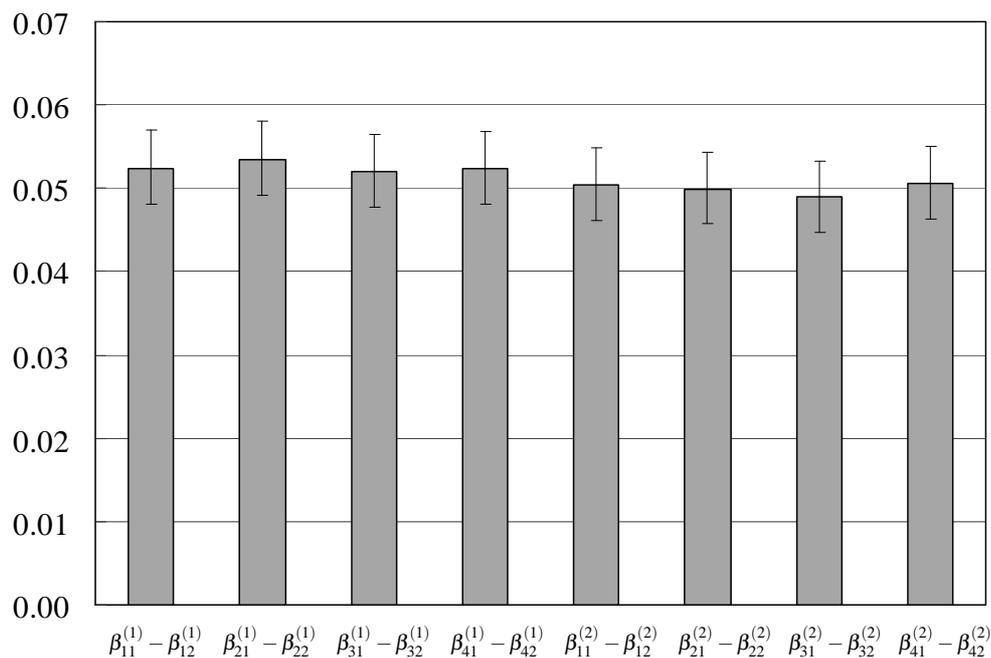


Abbildung 7.12: Mittelwert und Konfidenzintervall ($P = 0.95$) für den Fehler 1. Art der acht getesteten Hypothesen in der Linkskala für das Hurdle Modell ohne zufällige Ähren-effekte

7.4.2 HP-Modell mit zufälligen Tiereffekten

In diesen Abschnitt wird das HP-Modell mit zufälligen Tiereffekten untersucht. Der Bias (%) für die Schätzungen der Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ und λ_{ij} und der marginalen Erwartungswerte liegt unter 1 % (siehe Tabelle 7.21). Während der Erwartungswert, also die mittlere Anzahl Besuche pro Stunde für Ration i und Periode j, immer geringfügig überschätzt wird, wird der Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ immer geringfügig unterschätzt. Nur in 90 bis 92 % der Fälle waren die wahren Parameter im geschätzten 95 % Konfidenzintervall.

Tabelle 7.21: Bias (%) und Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für die marginalen Erwartungswerte und die Verteilungsparameter in Abhängigkeit von Ration und Periode

Ration	Periode	Bias (%)			$\hat{P}_K(0.95)$		
		$p_{0,ij}$	λ_{ij}	$E(Y_{ij} \bar{t})$	$p_{0,ij}$	λ_{ij}	$E(Y_{ij} \bar{t})$
1	1	-0.0305	0.1183	0.1717	0.9041	0.9099	0.9030
	2	-0.0248	0.1124	0.1479	0.9044	0.9091	0.9044
	3	-0.0134	0.1122	0.1348	0.9062	0.9125	0.9033
2	1	-0.0484	-0.0244	0.0578	0.9085	0.9168	0.9074
	2	-0.0704	-0.0426	0.0410	0.9083	0.9155	0.9074
	3	-0.0349	-0.0205	0.0312	0.9045	0.9179	0.9081

Die vorgegebene Varianz wurde für beide Verteilungsparameter stark unterschätzt (siehe Tabelle 7.22).

Tabelle 7.22: Vorgegebene und geschätzte Varianzkomponenten einschließlich Bias (%)

k	$\sigma_{u_k}^2$	$\hat{\sigma}_{u_k}^2$	Bias (%)
0	0.0300	0.0258	-38.8
1	0.0300	0.0267	-27.0

Für HP-Modelle, welche zufällige Effekte im linearen Prädiktor enthalten, wurde als nächstes die Anzahl der FG zur Berechnung der Konfidenzintervalle für die Verteilungsparameter variiert. Mit Abnahme der FG verbessern sich die Überdeckungswahrscheinlichkeiten für die Schätzungen der Verteilungsparameter (siehe Tabelle 7.23).

Tabelle 7.23: Überdeckungsraten ($\hat{P}_K(0.95)$) für die Verteilungsparameter in Abhängigkeit von Ration i, Periode j und der Anzahl Freiheitsgrade (FG)

		$p_{0,ij}(\bar{t})$				$\lambda_{ij}(\bar{t})$			
		CON	BTW	AV1	AV3	CON	BTW	AV1	AV3
i	j	FG = ∞	34	19	9	∞	34	19	9
1	1	0.9038	0.9125	0.9208	0.9391	0.9095	0.9198	0.9285	0.9462
	2	0.9039	0.9125	0.9210	0.9367	0.9087	0.9182	0.9275	0.9460
	3	0.9063	0.9125	0.9220	0.9406	0.9122	0.9213	0.9284	0.9493
2	1	0.9091	0.9178	0.9246	0.9407	0.9167	0.9248	0.9324	0.9481
	2	0.9084	0.9175	0.9243	0.9415	0.9158	0.9234	0.9313	0.9490
	3	0.9044	0.9148	0.9234	0.9409	0.9183	0.9268	0.9342	0.9487

CON = containment, BTW = Between within, AV1 bzw. AV3 = ANOVA-Konzepte

Der Fehler 1. Art für den Vergleich der Regressionskoeffizienten beider Rationen in der Linkskala wird für die Bestimmung der FG mit der Methode CON überschätzt (siehe Tabelle 7.24). Besonders der Rationsvergleich für die Regressionskoeffizienten $\beta_{m1}^{(2)} - \beta_{m2}^{(2)}$ ($m = 1, \dots, 4$) weist mit 0.40 einen sehr hohen Fehler 1. Art auf. Wird die Bestimmung der FG verändert, so verbessert sich der Fehler 1. Art und wird für den Vergleich der Regressionskoeffizienten $\beta_{m1}^{(1)} - \beta_{m2}^{(1)}$ ($m = 1, \dots, 4$) bei sechs FG eingehalten. Der nominale Fehler 1. Art von 5 % konnte für den Rationsvergleich der Regressionskoeffizienten im linearen Prädiktor des Verteilungsparameters λ_{ij} für alle untersuchten FG-Varianten nicht eingehalten werden.

Tabelle 7.24: Fehler 1. Art für die Differenz der Regressionskoeffizienten von Ration eins und zwei für die Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ ($=\beta_{mi}^{(1)}$) und λ_{ij} ($=\beta_{mi}^{(2)}$) in Abhängigkeit von der Kovariablennummer (m) und der Anzahl Freiheitsgrade (FG)

		$\beta_{m1}^{(1)} - \beta_{m2}^{(1)}$				$\beta_{m1}^{(2)} - \beta_{m2}^{(2)}$			
FG	m = 1	2	3	4	FG	m = 1	2	3	4
∞	0.1112	0.1112	0.1072	0.1077	∞	0.3956	0.4023	0.4024	0.3977
34	0.0993	0.1001	0.0987	0.0951	34	0.3760	0.3846	0.3857	0.3811
19	0.0897	0.0895	0.0890	0.0863	19	0.3645	0.3706	0.3700	0.3685
9	0.0657	0.0672	0.0672	0.0662	2	0.0650	0.0688	0.0693	0.0670
6	0.0475	0.0471	0.0465	0.0458	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

8 Diskussion und Schlussfolgerungen

In der vorliegenden Arbeit erfolgte der Vergleich verschiedener Methoden und Modellansätze zur Analyse von Zähldaten vorwiegend an Modellparametern, geschätzt in der Responseskala. Der Versuchsansteller möchte beispielsweise die mittlere Anzahl von Thripsen der Sorte eins mit der mittleren Anzahl von Sorte zwei vergleichen und Signifikanzaussagen über die Differenz der entsprechenden Mittelwertparameter treffen. Weiterhin interessiert, welche Differenz der Mittelwerte zwischen den Rationen für das Merkmal Anzahl Besuche pro Stunde als signifikant ausgewiesen werden kann. In der Literatur ist es in Simulationsstudien üblich, die Erwartungstreue für die Modellparameter im linearen Prädiktor der GLM zu untersuchen. Diese Vorgehensweise bietet sich an, falls die Modellparameter als Regressionskoeffizienten von stetigen Kovariablen interpretierbar sind. Die Differenz von fixen Effekten der Stufen eines qualitativen Einflussfaktors im linearen Prädiktor lässt sich jedoch insbesondere im Hurdle Modell in der Responseskala nur schwer interpretieren. Deshalb wurden die geschätzten Modellparameter von der Link- in die Responseskala rücktransformiert und die Hypothesenprüfung ebenfalls in der Responseskala durchgeführt. Der Nachteil dabei ist, dass die SAS-Prozeduren GLIMMIX und GENMOD beispielsweise für die Differenz zweier in der Responseskala geschätzter Mittelwerte keinen Standardfehler und daraus abgeleitete statistische Tests bereitstellen. Zur näherungsweisen Berechnung der Standardfehler wurde deshalb die Deltamethode verwendet. Folglich werden insbesondere im Hurdle Modell die mit der Deltamethode abgeleiteten Näherungsformeln zur Berechnung der Standardfehler getestet.

Neben den Standardfehlern werden zur Berechnung von Konfidenzintervallen und zur Durchführung von statistischen Tests Approximationen der FG für die Quantile der t-Verteilung benötigt. Die FG hängen in hohem Maße von der Anzahl unabhängiger Objekte ab. In den Modellen mit Poi und NB wurden die 20 Sorten mit je zehn Ähren pro Sorte an den zwei Terminen simuliert. Folglich liegen für jede simulierte Stichprobe 400 voneinander unabhängige Ähreneffekte vor. Eine Approximation der FG wird somit nicht erforderlich. Dagegen wurde das Hurdle Modell mit lediglich zehn Kühen für jede der zwei Rationen simuliert. Deshalb wurden unterschiedliche Möglichkeiten zur Approximation der FG in die Untersuchung mit aufgenommen.

8.1 Poissonmodelle

Im Fall der Analyse der Anzahl Thripse wurden zwei Datensätze als Vorgabewerte für die fixen Modelleffekte im linearen Prädiktor untersucht. Bei Abwesenheit von zufälligen Effekten liegen die Erwartungswerte des Merkmals Anzahl Thripse pro Ährenschrift für Datensatz A zwischen 1 und 3 und für Datensatz B unter 1.2. Folglich werden durch Datensatz A im Mittel größere Erwartungswerte im Vergleich zu Datensatz B realisiert.

Modelle ohne zufällige Effekte. Für Modelle ohne zufällige Ähreneffekte ist eine Unterscheidung zwischen subjektspezifischen und marginalen Modellen überflüssig. Die Methoden GEE und ML liefern identische Schätzungen für die Modellparameter der untersuchten Datensätze.

Aus den Ergebnissen für Modelle ohne zufällige Effekte ist zu erkennen, dass sowohl für sehr kleine als auch erhöhte Erwartungswerte sehr gute Konvergenz und unverzerrte Schätzungen mit der ML-Methode erreicht werden. Der Fehler 1. Art konnte, angewendet auf die Poi-Modelle, fast immer eingehalten werden. Geringfügige Abweichungen zwischen geschätzten und vorgegebenen Fehlern 1. Art erklären sich aus der Deltamethode zur näherungsweise Ableitung der Standardfehler für die geschätzten Parameter in der Responseskala.

Modelle mit zufälligen Effekten. Werden zufällige Effekte zu gegebener Ährenvarianz im linearen Prädiktor simuliert, muss zwischen marginalen und subjektspezifischen Modellen unterschieden werden. Zur Schätzung der Modellparameter im marginalen Modell wurde die GEE-Methode genutzt. Die Rücktransformation in die Responseskala kann direkt unter Verwendung der geschätzten fixen Modellparameter erfolgen. Die subjektspezifischen Modelle liefern dagegen bei Rücktransformation in die Responseskala nur bedingte Erwartungswerte, d. h. Erwartungswerte gegeben dem zufälligen Ähreneffekt. Marginale Erwartungswerte ergeben sich, indem die geschätzte Ährenvarianz neben den geschätzten Effekten in die Rücktransformation mit einfließt. Zur Berechnung des Standardfehlers für die marginalen Erwartungswerte und deren Differenzen wird folglich der Standardfehler der geschätzten Ährenvarianz benötigt.

Die Schätzverfahren Quad und Laplace zeigen sehr gutes Konvergenzverhalten, wobei für einige Läufe mit Datensatz B (kleinere Mittelwerte pro Termin und Schicht) kein Standardfehler für die geschätzte Ährenvarianz in der Prozedur GLIMMIX ausgegeben wurde. Bei Bereitstellung von ML-Schätzern mit dem Quad-Verfahren kann dieses Problem durch die Erhöhung der Anzahl der Quadraturpunkte beispielsweise auf 40 gelöst werden. Damit konnte die Anzahl an Läufen mit Angabe eines Standardfehlers für die geschätzte Ährenvarianz zumindest leicht erhöht werden (siehe Anhang 4).

Für relativ hohe Erwartungswerte pro Termin und Schicht (Datensatz A) unterscheiden sich die ML-Schätzer des Verfahrens Quad oder Laplace hinsichtlich der Einhaltung des Fehlers 1. Art kaum. Nur bei dem Schätzverfahren Laplace treten wenige Läufe auf, bei denen keine Hypothesen getestet werden können, da kein Standardfehler für die Ährenvarianz geschätzt wurde. Es treten allerdings bei beiden Schätzverfahren immer noch Hypothesen auf, bei denen der Fehler 1. Art nicht eingehalten wird. Ein möglicher Grund dafür sind die stark unterschätzten Varianzen der zufälligen Ähreneffekte. Das Quad-Verfahren muss jedoch nicht zwangsläufig zu Verzerrungen führen. Rabe-Hesketh et al. (2005) konnten schon für eine geringe Anzahl an Quadraturpunkten innerhalb des Quad-Verfahrens unverzerrte Schätzungen für die Standardabweichung der zufälligen Effekte erzielen. Allerdings wurde für eine binäre Variable ein probit Modell mit minimal 10000 Beobachtungen simuliert (Clustergröße 1000 x 10 Beobachtungen), wobei im linearen Prädiktor nur drei Regressionskoeffizienten und ein zufälliger Effekt

zu schätzen waren. In der vorliegenden Arbeit wurden maximal nur 2400 Beobachtungen simuliert (20 Sorten x 20 Ähren x 3 Schichten x 2 Termine). Außerdem wurde bei Gültigkeit der Hypothesen, dass alle Sortenmittel identisch sind, mit einem Modell mit allen möglichen Stufenkombinationen der festen Effekte ausgewertet. Folglich muss die Variabilität in der Stichprobe auf die Variabilität zwischen den festen Effekten und auf die Variabilität zwischen den Ähren aufgeteilt werden. Die Aufteilung auf nicht vorhandene feste Effekte führt wahrscheinlich zu einer starken Unterschätzung der Ährenvarianz.

Für sehr kleine Erwartungswerte treten für die Schätzverfahren Quad und Laplace häufiger Läufe auf, bei denen kein Standardfehler für die Ährenvarianz geschätzt werden kann. Auch hier gibt es für Quad den Vorteil, dass die Quadraturpunkte erhöht werden können und somit diese Problematik zumindest für einzelne Läufe gelöst werden kann. Wird die Anzahl an Varianzkomponenten erhöht, indem die Modelle um terminspezifische Ährenvarianzen erweitert werden, verbessert sich die Einhaltung des Fehlers 1. Art für die aufgestellten Hypothesen. Hierbei wird für das Schätzverfahren Laplace der Fehler 1. Art öfter eingehalten, allerdings bei weniger konvergenten Läufen. In anderen Studien werden die Hypothesen hauptsächlich in der Linkskala geprüft. Litière et al. (2007) geben für eine binäre Zufallsvariable im Prädiktor drei Regressionskoeffizienten und einen zufälligen Effekt vor. Zusätzlich werden neben der Normalverteilung unterschiedliche Verteilungsannahmen für das zufällige Intercept unterstellt und die Varianzen der zufälligen Effekte variieren zwischen 1 und 32. Die Modellparameter werden mit dem Quad-Verfahren geschätzt. Bei 500 wiederholten Stichproben und 4800 Beobachtungen (2 Behandlungen x 6 Zeitpunkte x 400 Objekte) wird der Fehler 1. Art innerhalb der Linkskala eingehalten. Liegen jedoch nur 300 Beobachtungen vor (2 Behandlungen x 6 Zeitpunkte x 25 Objekte), wird der Fehler 1. Art stark unterschätzt. Bei der Hypothesenprüfung innerhalb der Responseskala, die seitens des Anwenders gewünscht wird, müssen geringe Fehleinschätzungen auch aufgrund der nur approximativ geschätzten Standardfehler in Kauf genommen werden. Die marginalen Erwartungswerte sind nichtlineare Funktionen der festen Effekte und der Varianzen. Folglich werden zur Berechnung der Standardfehler die gemeinsame Varianz-Kovarianz-Matrix der geschätzten Effekte und der geschätzten Varianzkomponenten benötigt. Innerhalb der SAS-Prozeduren wird nur jeweils die Varianz-Kovarianz-Matrix der festen Effekte und die Varianz-Kovarianz-Matrix der Varianzkomponenten bereitgestellt. Bei Anwendung der Deltamethode mussten deshalb mögliche Kovarianzen vernachlässigt werden.

In der Arbeit von Joe (2008) wird ein analytischer Vergleich der Schätzverfahren Laplace und Quad ohne Nutzung der stochastischen Simulation durchgeführt. Der Vergleich der Schätzverfahren gelingt, indem von unendlicher Clustergröße bei nur wenigen Beobachtungen pro Cluster ausgegangen wird. Die Anzahl der Cluster ist mit der Anzahl der zufälligen Objekte, also beispielsweise der Anzahl der Ähren, äquivalent. Bei Joe (2008) werden eine bis maximal vier Beobachtungen pro Cluster bei Annahme einer Poi unterstellt. Um die möglichen Realisierungen gering zu halten, werden im linearen Prädiktor nur ein fixes Intercept und die Variabilität

zwischen den Clustern vorgegeben. Für Mittelwerte nahe Null treten bei lediglich zwei Beobachtungen pro Cluster bei Verwendung des Laplace-Verfahrens verzerrte Schätzungen auf. Für höhere Mittelwerte verringert sich der Bias der Schätzungen und erreicht sogar für eine Beobachtung pro Cluster eine ignorierbare Größenordnung.

Im Gegensatz zu den Verfahren Quad und Laplace war die Parameterschätzung unter Verwendung der GEE-Methode mit Konvergenzproblemen verbunden. Im Poi-Modell sind die Varianzen und Kovarianzen zwischen den Beobachtungen innerhalb einer Ähre Funktionen des Erwartungswertes. Folglich bestehen unterschiedliche Kovarianzen zwischen verschiedenen Ährensichten. Diese Kovarianzen wiederum sind vom Zeitpunkt abhängig, zu dem die Ähre untersucht wurde. Bei identischen Sorteneffekten ergeben sich also so viele Varianz-Kovarianz-Matrizen zwischen den drei Ährensichten wie Termine vorliegen. In der Prozedur GENMOD konnte jedoch nur eine (3 x 3) Varianz-Kovarianz-Matrix mit sechs zu schätzenden Varianzkomponenten, gültig für alle Termine, berücksichtigt werden. Somit gibt das unterstellte Auswertungsmodell unter Verwendung der GEE-Methode den simulierten Sachverhalt nicht vollständig wieder. Die simulierten korrelierten Daten können mit einer einzigen Arbeitskorrelationsmatrix nur unzureichend abgebildet werden. Folglich traten zum einen Läufe ohne Konvergenz besonders deutlich für sehr kleine Erwartungswerte (Datensatz B) auf. Zum anderen wird der Fehler 1. Art sehr stark überschätzt, da vermutlich die Standardfehler der Differenzen für die marginalen Erwartungswerte nicht entsprechend widergespiegelt werden können. Die Überschätzung des Fehlers 1. Art innerhalb der GEE-Methode deckt sich mit den Ergebnissen der Simulationsstudie von Durán Pacheco et al. (2009). Pan und Connett (2002) zeigen, dass durch Berücksichtigung einer adäquaten Arbeitskorrelationsmatrix die Eigenschaften der Schätzungen verbessert werden können.

Das RSPL-Verfahren umgeht die numerische Integration durch Linearisierung der Daten. In jedem Iterationsschritt muss die Likelihoodfunktion für einen Vektor von Pseudodaten, welcher einem LMM genügt, aufgestellt werden. Diese Vorgehensweise ist umso effektiver, je besser die Pseudodaten einer Normalverteilung entsprechen. In der vorliegenden Simulationsstudie werden abgeleitet aus einem Praxisversuch relativ geringe Erwartungswerte vorgegeben. Die simulierten Häufigkeiten für die Ereignisse 0, 1, 2 usw. sind somit stark abweichend von der Gaußschen Glockenkurve einer Normalverteilung. Diese Aussage trifft vermutlich auch für den Vektor der Pseudodaten zu. Für beide Datensätze ergab sich unter dem Schätzverfahren RSPL ein hoher Anteil von Läufen ohne Konvergenz, wobei stark verzerrte Schätzungen für die marginalen Erwartungswerte auftraten. Da die Erwartungswerte immer stark überschätzt und die Varianzen immer unterschätzt werden, weisen die Fehler 1. Art immer Verzerrungen auf. In der Literatur wird berichtet, dass unter der Penalized Quasi-Likelihood (PQL) Methode Verzerrungen für die Varianzkomponenten besonders für binäre Daten auftreten können (Breslow und Clayton, 1993; Breslow und Lin, 1995; Breslow, 2003; Jang und Lim, 2006). In einer Studie von Gonçalves et al. (2007) wurden Zähldaten simuliert. Im linearen Prädiktor sind vier

Regressionskoeffizienten und ein zufälliges Intercept vorhanden. Es liegen pro Objekt mehrere Beobachtungen vor, die abhängig voneinander sind. Bei 1000 simulierten Stichproben und 33800 Beobachtungen (zwei Gruppen x 13 Zeitpunkte x Wechselwirkung zwischen Gruppe und Zeitpunkt x 50 Objekte) wird letztendlich zur Schätzung der Modellparameter das Verfahren Quad gegenüber PQL favorisiert, wenn Korrelationen zwischen den Beobachtungen innerhalb der Objekte vorliegen.

Die Schätzverfahren Quad und Laplace schneiden am besten ab, wobei Quad den Vorteil der Möglichkeit einer Erhöhung der Quadraturpunkte besitzt und demzufolge ein besseres Konvergenzverhalten zeigt. Das Verfahren Laplace ergibt sich als Spezialfall aus dem Quad-Verfahren, indem nur ein Quadraturpunkt gewählt wird (SAS 9.2, online Dokumentation für die Prozedur GLIMMIX). Sie liefert für die in dieser Arbeit untersuchten Modellansätze fast gleichwertige Ergebnisse bei geringerer Laufzeit (siehe Anhang 3). Zusätzlich sind alle Aussagen von der Größenordnung der simulierten Erwartungswerte abhängig. Liegen sehr kleine Erwartungswerte für Zähldaten vor und wird Poi bei gegebenen Zufallseffekten unterstellt, dann treten vermehrt Konvergenzprobleme auf und es können öfter keine Hypothesen über die marginalen Erwartungswerte getestet werden.

8.2 Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung

Modelle ohne zufällige Effekte. Das Verfahren Quad, angewendet auf Modelle ohne zufällige Effekte, zeigt sowohl für sehr kleine als auch leicht höhere Erwartungswerte sehr gute Konvergenz und unverzerrte Schätzungen. Der Fehler 1. Art wird jedoch selten eingehalten. Abweichungen zwischen geschätzten und vorgegebenen Fehlern 1. Art können durch die approximativen Standardfehler für die geschätzten Parameter in der Responseskala nach der Deltamethode erklärt werden.

Modelle mit zufälligen Effekten. Werden zufällige Effekte bei der Simulation berücksichtigt, treten häufig Läufe ohne Konvergenz auf. Für das Schätzverfahren Laplace und für sehr kleine vorgegebene Erwartungswerte war dies am häufigsten zu beobachten. Hinzu kommt, dass für einige Läufe kein Standardfehler für die Ährenvarianz geschätzt wurde und somit der Standardfehler für die Differenz der Erwartungswerte nicht berechnet werden konnte. Auch hier besteht für das Schätzverfahren Quad zum einen die Möglichkeit zur Erhöhung der Quadraturpunkte, um das Konvergenzverhalten für einige Läufe zu verbessern. Zum anderen zeigt sich bei Erhöhung der Anzahl an simulierten Objekten, dass für das Schätzverfahren Quad die Anzahl an Läufen mit Konvergenz sowohl für sehr kleine als auch leicht erhöhte Erwartungswerte stark zunimmt, wobei nur noch wenige Läufe ohne geschätzten Standardfehler für die Ährenvarianz auftreten. Allerdings werden dann die marginalen Erwartungswerte immer geringfügig unterschätzt. Das Schätzverfahren Laplace zeigt insgesamt im Vergleich zum Schätzverfahren Quad ein schlechteres Konvergenzverhalten. Wird die Anzahl an Varianzkomponenten im Modell er-

höht, indem die zufälligen Ähren-effekte zusätzlich abhängig vom Termin simuliert werden, verbessert sich sowohl das Konvergenzverhalten für beide vorgegebenen Datensätze als auch für beide Schätzverfahren. Der Fehler 1. Art wird für die vorgegebenen Hypothesen sowohl unter Nutzung beider Schätzverfahren als auch beider Datensätze nur zum Teil eingehalten.

8.3 Berücksichtigung von linearen Modellen

Modelle ohne zufällige Effekte. Die Auswertung von Daten mit Poi und ohne zufällige Ähren-effekte mit Hilfe von LM führt zu erwartungstreuen Schätzungen für die Mittelwerte der Sorten innerhalb der Schichten und Termine. Allerdings können LM den vorgegebenen Fehler 1. Art nicht einhalten. Unter Poi sind die Varianzen Funktionen der Erwartungswerte und folglich abhängig von den Termin- und Schichteffekten. Wurden diese Abhängigkeiten über termin- und schichtspezifische Restvarianzen berücksichtigt (LM_inh), so wird zumindest bei Vorliegen von gleichen Sorteneffekten (Variante A1) der Fehler 1. Art eingehalten. Werden jedoch für zwei Sorten gleiche und für die restlichen Sorten unterschiedliche Effekte vorgegebenen (Variante A2), so wird der Fehler 1. Art durch das LM_inh systematisch unterschätzt. Diese Problematik könnte man theoretisch abfangen, indem die Restvarianzen zusätzlich spezifisch für jede Sorte geschätzt werden. Da in der Praxis davon auszugehen ist, dass Unterschiede zwischen den Sorten bestehen, erweisen sich die Poi-Modelle hier als Vorteil und gewährleisten die beste Einhaltung des Fehlers 1. Art.

Modelle mit zufälligen Effekten. Werden bei der Simulation zufällige Effekte im Modell berücksichtigt, differenzieren sich alle drei Auswertungsmodelle bereits im Konvergenzverhalten und bei der Schätzung der Mittelwerte für die Stufenkombinationen von Sorte, Termin und Schicht. Für die LMM mit inhomogenen Restvarianzen treten häufig Läufe ohne Konvergenz auf. Während sich der Bias zwischen den Modellansätzen nicht unterscheidet, ist der RMSE für das Poi-Modell am geringsten.

Für Poi-Modelle wiederum treten bei Vorliegen von unterschiedlichen Sorteneffekten einige Läufe ohne Angabe einer Schätzung für den Standardfehler der Ährenvarianz auf. Für diesen Fall können allerdings wieder die Quadraturpunkte für das Schätzverfahren Quad erhöht werden, um die Anzahl an geschätzten Standardfehlern der Ährenvarianz innerhalb der Simulation zu erhöhen. Der Fehler 1. Art wird sowohl für das LMM als auch für das LMM_inh für gleiche und unterschiedliche Sorteneffekte nicht eingehalten. Für Poi-Modelle liegen seltener Verzerrungen für den Fehler 1. Art vor. Wenn Verzerrungen auftreten, sind diese geringfügiger im Gegensatz zu den Schätzungen im LMM. Da die Standardfehler im Poi-Modell mit der Delta-methode nur approximativ geschätzt werden, können diese geringfügigen Abweichungen vom vorgegebenen Fehler 1. Art zustande kommen. Das Poi-Modell liefert für die unter praktischen Bedingungen zu erwartende Situation ungleicher Sorteneffekte die beste Einhaltung des Fehlers 1. Art.

8.4 Hurdle Modelle

Die Auswertung von Zähldaten mit Nullenüberschuss unter Verwendung von Hurdle Modellen mit zufälligen Effekten ist in SAS nur mit der Prozedur NLMIXED möglich. NLMIXED besitzt jedoch keine class-Anweisung, so dass alle fixen Effekte über Kovariablen entsprechender Hilfsvariablen kodiert werden müssen. In Abschnitt 5.2.3 wurde gezeigt, wie die Prozedur GLIMMIX in einem Zwei-Schritt-Verfahren genutzt werden kann. Dazu musste eine benutzerdefinierte logL für die TPoi definiert werden. Folglich konnte nur die ML-Methode zur Schätzung der Parameter untersucht werden. Aufgrund der Erfahrungen aus Abschnitt 7.1 wurde das Schätzverfahren Quad ausgewählt und auf die Prüfung von Laplace verzichtet.

Modelle ohne zufällige Effekte. Sind im Hurdle Modell keine zufälligen Effekte vorhanden, so werden die Mittelwerte für die Stufenkombination der Faktoren Ration und Periode erwartungstreu geschätzt. Die Überdeckungswahrscheinlichkeit für die Konfidenzintervalle der geschätzten Mittelwerte halten das vorgegebene Konfidenzniveau von 95 % ein. Dieses Ergebnis bestätigt die numerische Umsetzung des eingeführten Zwei-Schritt-Verfahrens innerhalb der SAS-Prozedur GLIMMIX. Dieses Verfahren wurde bisher noch nicht angewendet. Auch der Fehler 1. Art wird eingehalten. Min und Agresti (2005) zeigen in einer Simulationsstudie für ein HP-Modell mit zwei zu schätzenden Regressionskoeffizienten ebenfalls, dass das Quad-Verfahren unverzerrte Schätzungen für die Modellparameter liefert.

Modelle mit zufälligen Effekten. Werden zufällige Effekte im linearen Prädiktor für die Verteilungsparameter $p_{0,ij}$ und λ_{ij} simuliert, dann können bei Nutzung von Quad weiterhin zumindest unverzerrte Schätzungen für die Modellparameter gewonnen werden. Maruotti (2011) verfolgte in einer Simulationsstudie für ein HP-Modell mit zufälligen Effekten ein anderes Ziel als in der vorliegenden Arbeit. In klinischen Studien können z. B. durch Ausscheiden von Probanden fehlende Beobachtungen pro Objekt während der Studiendauer auftreten. Maroutti (2011) beachtet die fehlenden Beobachtungen und beurteilt den Einfluss auf die zu schätzenden Modellparameter ohne und mit Berücksichtigung der Fehlstellen.

Die beobachteten Überdeckungswahrscheinlichkeiten von Konfidenzintervallen geschätzter Verteilungsparameter können das vorgegebene Konfidenzniveau nicht einhalten. Die Angabe von Konfidenzintervallen beruht neben dem Standardfehler der Schätzungen auf dem t-Quantil, berechnet für eine bestimmte Anzahl von FG. Die simulierten Daten zeichnen sich dadurch aus, dass für wenige Objekte (zehn Kühe pro Ration) eine große Anzahl von wiederholten Beobachtungen vorliegt. Pro Kuh liegt für jede Tagesstunde zu jedem der untersuchten Testtage jeweils eine Beobachtung vor, die zusätzlich vom Laktationsstadium abhängt, in dem sich die Kuh befindet. Einer Vielzahl von abhängigen Beobachtungen steht also eine sehr geringe Anzahl von unabhängigen Objekten gegenüber. Diese Konstellation muss bei Berechnung der FG berücksichtigt werden, indem beispielsweise die FG durch $(a - 1)$ approximiert werden, wobei a die Anzahl der unabhängigen Objekte ist. Innerhalb des Schätzverfahrens Quad, angewendet

auf das GLMM, ist aus der Literatur keine FG-Approximation, wie sie im LMM z. B. nach Satterthwaite (Satterthwaite, 1941; Giesbrecht und Burns, 1985) und in Erweiterung nach Kenward und Roger (1997; 2009) existieren, bekannt. Wählt man die FG nach der in der vorliegenden Arbeit angewendeten Vorgehensweise, so verbessern sich die Überdeckungsraten der Konfidenzintervalle von allen untersuchten Parametern, wobei jedoch das vorgegebene Konfidenzniveau von 95 % generell unterschritten wird. Zur Angabe der marginalen Erwartungswerte, aber auch zur Berechnung der Standardfehler, werden Schätzungen für die Varianzen benötigt. Die systematische Unterschätzung der Varianzen könnte eine mögliche Ursache für die in der Simulation beobachtete Unterschätzung des nominalen Konfidenzniveaus sein.

Die Ergebnisse für den empirischen Fehler 1. Art zeigen, dass die FG zwischen der Anzahl Objekte und Eins zu wählen sind. Die Angabe der FG hängt zusätzlich davon ab, in welchem linearen Prädiktor ($p_{0,ij}$ oder λ_{ij}) die getesteten Regressionskoeffizienten enthalten sind. Für den linearen Prädiktor λ_{ij} konnten im Gegensatz zum Prädiktor $p_{0,ij}$ die FG nicht adäquat bestimmt werden. Der Fehler 1. Art wurde bei der Hypothesenprüfung im Prädiktor λ_{ij} bei Variation der FG nicht eingehalten. Die Bestimmung der FG zur Hypothesenprüfung im HP-Modell mit zufälligen Effekten bei Nutzung des Schätzverfahrens Quad bleibt für den linearen Prädiktor λ_{ij} in dieser Arbeit ein nicht vollständig gelöstes Problem.

In der Literatur werden häufig ZI-Modelle für Zähldaten mit Nullenüberschuss simuliert (Lee et al., 2001; Xie et al., 2001; Xiang et al., 2006; 2007; Hall und Shen, 2010; Buu et al., 2011). Im Gegensatz dazu sind Simulationsstudien für Hurdle Modelle weniger häufig.

9 Zusammenfassung

Zähl- und wiederholte Beobachtungen pro Objekt spielen im landwirtschaftlichen Versuchswesen eine wichtige Rolle. So wird z. B. die Anzahl des Auftretens von Krankheiten bei Nutztieren wie Mastitis einer Milchkuh in mehreren Abschnitten eines Prüfzeitraums erfasst. Die Beobachtungen innerhalb eines Objektes dürfen hierbei nicht als unabhängig angesehen werden. Dieser Sachverhalt muss bei der Modellierung berücksichtigt werden. Des Weiteren können im Spezialfall Zähl- und wiederholte Beobachtungen mit Nullenüberschuss auftreten. Für diese Daten stimmt die beobachtete Anzahl Nullen nicht mit der erwarteten Anzahl Nullen, abgeleitet aus der für Zähl- und wiederholte Beobachtungen üblicherweise angewendeten Poisson- oder negativen Binomialverteilung, überein. Hierfür stehen Hurdle oder Zero Inflated Modelle zur Verfügung. Zur Auswertung von Zähl- und wiederholten Beobachtungen mit und ohne Nullenüberschuss wird die Theorie der generalisierten linearen Modelle (englisch: generalized linear models (GLM)) genutzt, da die Verteilung von Zählmerkmalen den Anforderungen einer Normalverteilung nicht mehr genügen. Die Einflussfaktoren werden über Modellparameter im sogenannten linearen Prädiktor berücksichtigt (Linkskala). Der lineare Prädiktor und die Erwartungswerte der Responsevariablen (Originalskala) werden durch eine nichtlineare Linkfunktion verknüpft. Es existiert hier kein linearer Zusammenhang zwischen Modellparametern und Erwartungswerten. Durch unterschiedliche Berücksichtigung der Korrelationen zwischen den Beobachtungen eines Objektes besteht im GLM die Möglichkeit, zwischen subjektspezifischen und marginalen Modellen zu differenzieren. Für beide Ansätze existieren verschiedene Verfahren zur Schätzung der Modellparameter. In der vorliegenden Arbeit wurden die Maximum-Likelihood Methode, basierend auf der adaptiven Gauß-Hermite-Quadratur (Quad) oder basierend auf der Laplace-Approximation (Laplace), und die Restricted subjektspezifische Pseudo-Likelihood Methode (RSPL) innerhalb der subjektspezifischen sowie die generalized estimating equations (GEE) Methode innerhalb der marginalen Modelle verwendet. Aus Sicht des Anwenders ergibt sich die Frage, welche Unterschiede zwischen den Behandlungen oder Gruppen für das zu untersuchende Zählmerkmal innerhalb der Originalskala bestehen. Im Falle der subjektspezifischen Modelle müssen deshalb die bedingten in marginale Erwartungswerte umgerechnet werden, um Aussagen über ein zufällig ausgewähltes Objekt einer Grundgesamtheit, wie beispielsweise einer Population oder Herde, zu erhalten. Anhand von zwei Praxisversuchen aus dem landwirtschaftlichen Versuchswesen wurde in der vorliegenden Arbeit ein Vergleich von Weizensorten hinsichtlich des Schädlingsbefalls bzw. von Rationen für Milchkuhe in Bezug auf die Besuche am Futterautomat durchgeführt. Zur Hypothesenprüfung in der Responseskala für zwei Sorten bzw. Rationen muss der Standardfehler der Differenz zweier geschätzter Mittelwerte näherungsweise mit Hilfe der Deltamethode berechnet werden, da innerhalb der genutzten SAS-Prozeduren hierfür kein Standardfehler standardmäßig zur Verfügung steht. Weiterhin besteht das Ziel dieser Arbeit in der Anpassung eines geeigneten Auswertungsmodells für Zähl- und wiederholte Beobachtungen mit und ohne Nullenüberschuss an die Anwendungsbeispiele unter

Verwendung eines GLM. Die analysierten Praxisversuche sind dadurch charakterisiert, dass pro Objekt wiederholte Beobachtungen vorliegen, die nicht unabhängig voneinander sind. Folglich werden zwei Modellansätze (subjektspezifisches und marginales Modell) und deren Schätzverfahren (Quad, Laplace, RSPL, GEE) mit Hilfe der stochastischen Simulation bewertet.

Zur Untersuchung des Merkmals Anzahl Thripse pro Ährenschrift (Beispiel eins) wurden die unterschiedlichen Modellansätze innerhalb der GLM und deren Schätzverfahren geprüft. Für das Zählmerkmal von Beispiel eins wurde sowohl mit Poissonverteilung als auch mit negativer Binomialverteilung simuliert. Vorgegeben wurden 20 Sorten bei 10 bzw. 20 Ähren pro Sorte mit drei Beobachtungen pro Ähre an zwei Terminen. Zusätzlich wurden zwei unterschiedliche Varianten (Datensätze) für die Vorgabe der Modellparameter untersucht. Datensatz A enthielt Erwartungswerte zwischen 1 und 3 für das Untersuchungsmerkmal pro Sorte, Termin und Ährenschrift. Im Gegensatz dazu wurden für Datensatz B Erwartungswerte < 1.2 vorgegeben. Da den Anwender der Vergleich von zwei Sorten hinsichtlich des Schädlingsbefalls innerhalb der Originalskala interessiert, wird die Überprüfung der Einhaltung des nominalen Fehlers 1. Art für Hypothesen in der Responseskala untersucht. Auffällig waren die stark überschätzten Erwartungswerte und die schlechte Einhaltung des Fehlers 1. Art für das Schätzverfahren RSPL. Auch die GEE-Methode konnte den nominalen Fehler 1. Art von 5 % für keine der Hypothesen einhalten. Die besten Ergebnisse mit unverzerrten Schätzungen und einer guten Einhaltung des Fehlers 1. Art ergaben sich für das Verfahren Quad. Unter der Einschränkung, dass nur Simulationen mit Angabe eines Standardfehlers für alle geschätzten Modellparameter einschließlich der Varianzkomponenten beachtet werden, konnte das Laplace-Verfahren ähnlich gute Ergebnisse erzielen. Alle Ergebnisse hingen zusätzlich von der Größenordnung der Erwartungswerte des Zählmerkmals ab, wobei für die Hypothesenprüfung bei Vorliegen sehr kleiner Erwartungswerte schlechtere Ergebnisse erzielt wurden. Bei Durchführung der Hypothesenprüfung in der Responseskala konnte der Fehler 1. Art nicht für alle Vergleiche eingehalten werden. Dies ist jedoch der Tatsache geschuldet, dass die Standardfehler der Differenzen nur approximativ berechnet werden können. Werden die simulierten Zählzahlen mit Hilfe von linearen Modellen ausgewertet, so konnte gezeigt werden, dass bei Vorliegen von unterschiedlichen Sorteneffekten für 18 der 20 geprüften Sorten die linearen Modelle schlechtere Ergebnisse für die Einhaltung des nominalen Fehlers 1. Art liefern. Hier sind die Poisson-Modelle oder die Modelle basierend auf negativer Binomialverteilung zu bevorzugen. Bei nur drei Beobachtungen pro Objekt und bei der Prüfung von 20 Behandlungen (Sorten) mit 10 bis 20 Objekten (Ähren) pro Sorte erwies sich das Quad-Verfahren, umgesetzt in der Prozedur GLIMMIX von SAS, als Verfahren der Wahl.

Das Zählmerkmal Anzahl Besuche einer Kuh pro Stunde am Futterautomat (Beispiel zwei) stellt einen Anwendungsfall für Zählzahlen mit Nullenüberschuss dar. Hier wurde nur ein subjektspezifisches Modell sowie das Schätzverfahren Quad geprüft. Es wurde ein auf der Poissonverteilung basierendes Hurdle Modell simuliert und ein Versuchsplan mit zwei Rationen, zehn

Kühen pro Ration, drei Perioden pro Tag und ein Prüfzeitraum von 140 Tagen vorgegeben. Das Hurdle Modell lieferte unverzerrte Schätzungen, falls keine zufälligen Tiereffekte im linearen Prädiktor berücksichtigt werden müssen. Die Überdeckungsraten für die geschätzten Konfidenzintervalle der Verteilungsparameter hielten das vorgegebene Konfidenzniveau ein. Dieses Ergebnis bestätigt, dass die Parameterschätzung im Hurdle Modell in zwei Schritten erfolgen kann. Das Zwei-Schritt-Verfahren schätzt im ersten Schritt die Modellparameter für die Wahrscheinlichkeit, dass pro Stunde kein Besuch am Fütterungsautomat stattfindet. Im zweiten Schritt erfolgt die Schätzung der Modellparameter einer gestutzten Poissonverteilung. Das Zwei-Schritt-Verfahren wurde zusätzlich innerhalb der SAS-Prozedur GLIMMIX implementiert. Müssen im Hurdle Modell zufällige Tiereffekte berücksichtigt werden, so ergeben sich mit dem Zwei-Schritt-Verfahren ebenfalls unverzerrte Schätzungen. Allerdings muss vorausgesetzt werden, dass die zufälligen Tiereffekte im linearen Prädiktor zur Modellierung der Wahrscheinlichkeit des Ereignisses Null und zur Modellierung der Wahrscheinlichkeiten der Ereignisse größer Null unkorreliert sind. Nur bei Anpassung der Freiheitsgrade an die Anzahl der unabhängigen Objekte konnten die Überdeckungsraten von geschätzten Konfidenzintervallen das vorgegebene Konfidenzniveau einhalten. Der Umstand, dass einer Vielzahl von abhängigen Beobachtungen eine sehr geringe Anzahl von unabhängigen Objekten gegenübersteht, muss bei der Bestimmung der Freiheitsgrade berücksichtigt werden. Bei Vorliegen von großen Datensätzen und zahlreichen Modellparametern stellt das Hurdle Modell eine brauchbare Alternative zu den rechentechnisch aufwendiger umzusetzenden Zero Inflated Modellen dar.

10 Summary

Count data with more than one observation per object are important in agricultural science. The number of clinical mastitis cases per cow over a given period is an example that shows count data with repeated measurements per object. These observations are correlated within an object. This fact must be taken into account in the model. Special cases are count data with excess zeros. Within this data the observed number of zeros is unequal to what is expected from a Poisson or a negative binomial distribution. These two distributions are used normally to analyse count data. Hurdle or zero-inflated models are available as an alternative to Poisson or negative binomial models. Count data with or without excess zeros are not normally distributed. Thus, the theory of generalized linear models (GLM) is used. Explanatory variables are considered as model parameters within the linear predictor (link scale). The linear predictor and the expected value of the response variable (original scale) are associated by a link function. The expected value is not a linear function of the model parameters. Correlations of the observations within one object can be taken into account by marginal or subject-specific models. There are different methods to estimate the model parameters within these two different approaches. The estimation methods in this research were: maximum likelihood with adaptive Gauss-Hermite quadrature (Quad) or based on Laplace-Approximation (Laplace) as well as restricted subject-specific pseudo-likelihood (RSPL) for the subject-specific models and generalized estimating equations (GEE) for the marginal models. The user wants to compare different groups or treatments within the original scale. If subject-specific models are used then the conditional expected values have to be transformed into marginal expected values in order to make conclusions about a randomly chosen subject from a population like a herd.

The research is based on two trials in agricultural science. The first trial is about infestation of thrips in different wheat cultivars. In a second trial, three total mixed rations for dairy cows were compared by the number of feeder visits. The standard errors of differences of two marginal expected values have to be approximately calculated by delta method for the statistical hypothesis testing within the response scale for two cultivars or rations. By default they are not implemented in the used SAS procedures. In order to fit a suitable evaluation model for count data with or without excess zeros based on data of the trials GLM are used. There is more than one observation per object within trials. Thus, two model approaches (subject-specific and marginal model) and their estimation methods (Quad, Laplace, RSPL, GEE) are evaluated by stochastic simulation. In order to evaluate the number of thrips per section of the ear (example one) different model approaches within the GLM and their estimation methods were tested. Poisson distribution as well as negative binomial distribution was simulated for count data in example one. In the simulation study 20 cultivars and 10 or 20 ears per cultivar with three observations per ear on two different dates were used. In addition, two different data sets for the simulated model parameters were evaluated. Dataset A has marginal expected values

between 1 and 3 for the trait per cultivar, date and ear part. In contrast, dataset B has marginal expected values < 1.2 . The user wants to compare the thrips infestation of two cultivars within the original scale. Thus, the realisation of the nominal type one error is evaluated within the response scale. RSPL provides biased estimators and a worse realisation of the nominal type one error. The nominal type one error for GEE is always overestimated for all hypotheses. The best result provides Quad with unbiased estimators and the realisation of the nominal type one error. Laplace achieves similar results. But the method shows a worse convergence compared to Quad. All results depend on the values of the chosen parameters. Dataset B with smaller marginal expected values provides a worse realisation of the nominal type one error compared to dataset A. The nominal type one error could not always be realised for the hypothesis testing within the response scale for both datasets. One reason is the approximate calculation of the standard errors of the estimated expected values. If the simulated count data were evaluated by linear models and there were different cultivar effects (for 18 of 20 cultivars) then the nominal type one error could not be realised. Therefore, Poisson or negative binomial models should be preferred. If 20 treatments (cultivars) are compared and there are three observations per object for 10 to 20 objects (ears) per cultivar then method Quad within the SAS procedure GLIMMIX has to be chosen.

The number of feeder visits of a cow per hour (example two) is an example for count data with excess zeros. A subject-specific model and the estimation method Quad were tested for these data. A hurdle model based on Poisson distribution was simulated. An experimental design with two rations, ten cows per ration, three periods per day and a period of 140 days was used. The hurdle model provides unbiased estimators if random effects are not taken into account within the linear predictor. The coverage rates of estimated confidence intervals of distribution parameters are approximately equal to the nominal confidence level. This approves the usefulness of a two-step method within the SAS procedure GLIMMIX. In the first step the model parameter are estimated for the probability that no feeder visit took place. In the second step the estimation of the model parameters within the SAS procedure GLIMMIX occurs by specification of a user-defined log-likelihood function for the truncated Poisson distribution. If random effects have to be taken into account, then the hurdle models also provide unbiased estimators under the following assumption. The random effects of the linear predictor (modelling event zero and events larger than zero) have to be uncorrelated. If the approximations for the degrees of freedom have been used then the coverage rates of estimated confidence intervals are in accordance with the nominal confidence level. The small number of subjects compared to the high number of correlated observations has to be taken into account for the calculation of the degrees of freedom. If there are huge datasets and a lot of model parameters then hurdle models are an alternative to zero-inflated models which can lead to difficulties for the computational implementation.

Literaturverzeichnis

Agresti, A. (2002): *Categorical Data Analysis*. New York, NY, John Wiley & Sons, Inc.

Akaike, H. (1974): A new look at the statistical model identification. *IEEE Trans Autom Control*, 19: 716-723.

Ali, T. E.; Schaeffer, L. R. (1987): Accounting for covariances among test day milk yields in dairy cows. *Can J Anim Sci*, 67: 637-644.

Breslow, N. E.; Clayton, D. G. (1993): Approximate inference in generalized linear mixed models. *J Am Statist Assoc*, 88: 9-25.

Breslow, N. E.; Lin, X. (1995): Bias Correction in Generalised Linear Mixed Models with a Single Component of Dispersion. *Biometrika*, 82: 81-91.

Breslow, N. E. (2003): Whither PQL? UW Biostatistics Working Paper Series, Working Paper 192 (<http://www.bepress.com/uwbiostat/paper192>).

Bulang, M.; Kluth, H.; Engelhard, T.; Spilke, J.; Rodehutsord, M. (2006): Zum Einsatz von Luzernesilage bei Kühen mit hoher Milchleistung. *J Anim Physiol Anim Nutr*, 90: 89-102.

Burnham, K. P.; Anderson, D. R. (2002): *Model Selection and Multimodel Inference: A Practical Information-Theoretic Approach*. 2nd ed. New York: Springer-Verlag.

Burton, A.; Altman, D. G.; Royston, P.; Holder, R. L. (2006): The design of simulation studies in medical statistics. *Statist Med*, 25: 4279-4292.

Buu, A.; Johnson, N. J.; Li, R.; Tan, X. (2011): New variable selection methods for zero-inflated count data with applications to the substance abuse field. *Statist Med*, 30: 2326-2340.

Cameron, A. C.; Trivedi, P. K. (1998): *Regression analysis of count data*. Cambridge University Press.

Cleveland, W. S.; Devlin, S. J.; Grosse, E. (1988): Regression by local fitting: Methods, properties, and computational algorithms. *J Econometrics*, 37: 87-114.

Cummings, K. J.; Warnick, L. D.; Alexander, K. A.; Cripps, C. J.; Gröhn, Y. T., McDonough, P. L.; Nydam, D. V.; Reed, K. E. (2009): The incidence of salmonellosis among dairy herds in the northeastern United States. *J Dairy Sci*, 92: 3766-3774.

- Diggle, P. J.; Heagerty, P.; Liang, K. Y.; Zeger, S. L. (2002): Analysis of Longitudinal Data. Oxford University press, second edition.
- Durán Pacheco, G.; Hattendorf, J.; Colford Jr, J. M.; Mäusezahl, D.; Smith, T. (2009): Performance of analytical methods for overdispersed counts in cluster randomized trials: Sample size, degree of clustering and imbalance. *Stat Med*, 28: 2989-3011.
- Erdman, D.; Jackson, L.; Sinko, A. (2008): Zero-Inflated Poisson and Zero-Inflated Negative Binomial Models Using the COUNTREG Procedure. *SAS Global Forum*, Paper 322: 1-11.
- Gaafar, N.; Volkmar, C.; Cöster, H.; Spilke, J. (2011): Susceptibility of winter wheat cultivars to wheat ear insects in Central Germany. *Gesunde Pflanzen*, 62: 107-115.
- Giesbrecht, F. G.; Burns, J. C. (1985): Two-Stage Analysis Based on A Mixed Model: Large-Sample Asymptotic Theory and Small-Sample Simulation Results. *Biometrics*, 41: 477-486.
- Gilmour, A. R.; Gogel, B. J.; Cullis, B. R.; Welham, S. J.; Thompson, R. (2002): ASReml User Guide Release 1.0. Hemel Hempstead, UK: VSN International Ltd.
- Gonçalves, M. H.; Cabral, M. S.; Ruiz de Villa, M. C.; Escrich, E.; Solanas, M. (2007): Likelihood approach for count data in longitudinal experiments. *Comput Stat Data An*, 51: 6511-6520.
- Greene, W. H. (2002): *Econometric Analysis*. 5th ed. New Jersey, Prentice Hall.
- Groeneveld, E.; Kovač, M.; Mielenz, N. (2008): *VCE User's Guide and Reference Manual*, Version 6.0.
- Hall, D. B. (2000): Zero-Inflated Poisson and Binomial Regression with Random Effects: A Case Study. *Biometrics*, 56: 1030-1039.
- Hall, D. B.; Shen, J. (2010): Robust Estimation for Zero-Inflated Poisson Regression. *Scand J Stat*, 37: 237-252.
- Hardin, J. W.; Hilbe, J. M. (2003): *Generalized Estimating Equations*. CRC/Chapman & Hall, London.
- Heilbron, D. C. (1994): Zero-Altered and other Regression Models for Count Data with Added Zeros. *Biom J*, 36: 531-547.
- Hurvich, C. M.; Tsai, C. L. (1989): Regression and Time Series Model Selection in Small Samples. *Biometrika*, 76: 297-307.

- Jang, W.; Lim, J. (2006): PQL Estimation Biases in Generalized Linear Mixed Models. Technical report, Institute for Statistics and Decision Sciences, Duke University.
- Joe, H. (2008): Accuracy of Laplace approximation for discrete response mixed models. *Comput Stat Data An*, 52: 5066-5074.
- Kenward, M. G.; Roger, J. H. (1997): Small Sample Inference for Fixed Effects from Restricted Maximum Likelihood. *Biometrics*, 53: 983-997.
- Kenward, M. G.; Roger, J. H. (2009): An improved approximation to the precision of fixed effects from restricted maximum likelihood. *Comput Stat Data An*, 53: 2583-2595.
- Kirkpatrick, M.; Lofsvold, D.; Bulmer, M. (1990): Analysis of the Inheritance, Selection and Evolution of Growth Trajectories. *Genetics*, 124: 979-993.
- Lambert, D. (1992): Zero-Inflated Poisson Regression, With an Application to Defects in Manufacturing. *Technometrics*, 34: 1-14.
- Lee, A. H.; Wang, K.; Yau, K. K. W. (2001): Analysis of Zero-Inflated Poisson Data Incorporating Extent of Exposure. *Biom J*, 43: 963-975.
- Lee, Y.; Nelder, J. A.; Pawitan, Y. (2006): *Generalized Linear Models with Random Effects: Unified Analysis via H-likelihood*. CRC/Chapman & Hall, London.
- Liang, K. Y.; Zeger, S. L. (1986): Longitudinal Data Analysis Using Generalized Linear Models. *Biometrika*, 73: 13-22.
- Litière, S.; Alonso, A.; Molenberghs, G. (2007): Type I and Type II Error Under Random-effects Misspecification in Generalized Linear Mixed Models. *Biometrics*, 63:1038-1044.
- Liu, W.; Cela, J. (2008): Count Data Models in SAS. *SAS Global Forum 2008*, Paper 371: 1-12.
- Maruotti, A. (2011): A two-part mixed-effects pattern-mixture model to handle zero-inflation and incompleteness in a longitudinal setting. *Biom J*, 53: 716-734.
- McCullagh, P.; Nelder, J. A. (1989): *Generalized Linear Models*. CRC/Chapman & Hall, London.
- McCulloch, C. E.; Searle, S. R., Neuhaus, J. M. (2008): *Generalized, Linear, and Mixed Models*. New York, NY, John Wiley & Sons, Inc.

- Mielenz, N.; Thamm, K.; Bulang, M.; Spilke, J. (2011): Generalized linear models with random effects for the description of data with excess zeros. *Arch Tierz*, 54: 661-675.
- Min, Y.; Agresti, A. (2005): Random effect models for repeated measures of zero-inflated count data. *Stat Model*, 5: 1-19.
- Molenberghs, G.; Verbeke, G.; Demétrio, C. G. B. (2007): An extended random-effects approach to modeling repeated, overdispersed count data. *Lifetime Data Anal*, 13: 513-531.
- Mullahy, J. (1986): Specification And Testing Of Some Modified Count Data Models. *J Econometrics*, 33: 341-365.
- Naya, H.; Urioste, J. I.; Chang, Y. M.; Rodrigues-Motta, M.; Kremer, R.; Gianola, D. (2008): A comparison between Poisson and zero-inflated Poisson regression models with an application to number of black spots in Corriedale sheep. *Genet Sel Evol*, 40: 379-394.
- Osuna Echavarría, L. E. (2004): Semiparametric Bayesian Count Data Models. Dissertation, LMU München: Fakultät für Mathematik, Informatik und Statistik.
- Pan, W.; Connett, J. E. (2002): Selecting The Working Correlation Structure In Generalized Estimating Equations With Application To Lung Health Study. *Statistica Sinica*, 12: 475-490.
- Peñagaricano, F.; Urioste, J. I.; Naya, H.; de los Campos, G.; Gianola, D. (2011): Assessment of Poisson, Probit and linear models for genetic analysis of presence and number of black spots in Corriedale sheep. *J Anm Breed Genet*, 128: 105-113.
- Rabe-Hesketh, S.; Skrondal, A.; Pickles, A. (2005): Maximum likelihood estimation of limited and discrete dependent variable models with nested random effects. *J Econometrics*, 128: 301-323.
- Ribeiro Jr, P. J.; Viola, D. N.; Demétrio, C. G. B.; Manly, B. F.; Fernandes, O. A. (2009): Spatial Pattern Detection Modeling Of Thrips (*Thrips tabaci*) On Onion Fields. *Sci Agric*, 66: 90-99.
- Ridout, M.; Demétrio, C. G. B.; Hinde, J. (1998): Models for count data with many zeros. In *Proceedings of the XIXth International Biometric Conference*, 179-192.
- Ritz, J.; Spiegelman, D. (2004): Equivalence of conditional and marginal regression models for clustered and longitudinal data. *Stat Methods Med Res*, 13: 309-323.
- Rodrigues-Motta, M.; Gianola, D.; Heringstad, B.; Rosa, G. J. M.; Chang, Y. M. (2007): A zero-inflated poisson model for genetic analysis of the number of mastitis cases in Norwegian red cows. *J Dairy Sci*, 90: 5306-5315.

- Ruiz-Cárdenas, R., Assunção, R. M.; Demétrio, C. G. B. (2009): Spatio-temporal Modelling Of Coffee Berry Borer Infestation Patterns Accounting For Inflation Of Zeroes And Missing Values. *Sci Agric*, 66: 100-109.
- Sachs, L. (2009): *Angewandte Statistik*. Springer-Verlag, Berlin.
- Satterthwaite, F. (1941): Synthesis of variance. *Psychometrika*, 6: 309-316.
- SAS Institute (2009): *SAS Version 9.2*. SAS Institute Inc., Cary, NC, USA.
- Schabenberger, O. (2005): Introducing the GLIMMIX Procedure for Generalized Linear Mixed Models. SAS Institute Inc., Cary, NC. SUGI 30, Paper 196-30.
- Schabenberger, O. (2008): Example 38.14 Generalized Poisson Mixed Model for Overdispersed Count Data. *SAS-Hilfe für PROC GLIMMIX in SAS 9.2*.
- Schwarz, G. (1978): Estimating The Dimension Of A Model. *Ann Stat*, 6: 461-464.
- Searle, S. R. (1971): *Linear Models*. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- Tempelman, R. J. (1998): Generalized Linear Mixed Models in Dairy Cattle Breeding. *J Dairy Sci*, 81: 1428-1444.
- Tuerlinckx, F.; Rijmen, F.; Verbeke, G.; De Boeck, P. (2006): Statistical inference in generalized linear mixed models: A review. *Br J Math Stat Psychol*, 59: 225-255.
- Volkmar, C.; Schröder, A.; Gaafar, N.; Cöster, H.; Spilke, J. (2009): Evaluierungsstudie zur Befallssituation von Thripsen in einem Winterweizensortiment. *Mitt Dtsch Ges Allg Angew Ent*, 17: 227-230.
- Vonesh, E. F. (1996): A note on the use of Laplace's approximation for nonlinear mixed-effects models. *Biometrika*, 83: 447-452
- Wald, A. (1943): Tests Of Statistical Hypotheses Concerning Several Parameters When The Number Of Observations Is Large. *Trans Amer Math Soc*, 54: 426-482.
- Wolfinger, R; O'Connell, M. (1993): Generalized Linear Mixed Models: A Pseudo-likelihood Approach. *J Stat Comput Sim*, 4: 233-243.
- Xiang, L.; Lee, A. H.; Yau, K. K. W.; McLachlan, G. J. (2006): A score test for zero-inflation in correlated count data. *Statist Med*, 25: 1660-1671.

Xiang, L.; Lee, A. H.; Yau, K. K. W.; McLachlan, G. J. (2007): A score test for overdispersion in zero-inflated poisson mixed regression model. *Statist Med*, 26: 1608-1622.

Xie, M.; He, B.; Goh, T. N. (2001): Zero-inflated Poisson model in statistical process control. *Comput Stat Data An*, 38: 191-201.

Xu, S.; Grunwald, G.; Jones, R. (2008): A simulation study comparing likelihood and non-likelihood approaches in analyzing overdispersed count data.

(<http://arxiv.org/pdf/0809.1024v1.pdf>)

Yau, K. K. W.; Wang, K.; Lee, A. H. (2003): Zero-Inflated Negative Binomial Mixed Regression Modeling of Over-Dispersed Count Data with Extra Zeros. *Biom J*, 45: 437-452.

Anhang

Anhang 1: Umsetzung des Zero Inflated Poisson-Modells mit zufälligen Effekten in der Prozedur NLMIXED

```
proc nlmixed data = temp;
array LS{48} LS1-LS48;
array a_LS{48} a_LS1-a_LS48;
array b_LS{48} b_LS1-b_LS48;
parms
/*Regressionskoeffizienten*/
a_LS1-a_LS48 = 0.2 b_LS1-b_LS48 = 1.3
a_t11 = 0.0 a_t12 = 0.0 a_t21 = 0.0 a_t22 = 0.0 a_t31 = 0.0 a_t32 = 0.0 a_t41 = 0.0 a_t42 =
0.0
b_t11 = 0.0 b_t12 = 0.0 b_t21 = 0.0 b_t22 = 0.0 b_t31 = 0.0 b_t32 = 0.0 b_t41 = 0.0 b_t42
= 0.0
/*Varianz-Kovarianz*/ s2u = 0.03 s2v = 0.03
/*Dispersionsparameter*/ alp = 0.4;
bounds s2u > 0, s2v > 0;
/*Prädiktor der Nullwerte*/
eta0 = 0.0; do j = 1 to 48; eta0 = eta0+a_LS{j}*LS{j}; end;
eta0 = eta0 + (a_t11*L1 + a_t12*L2)*x1 + (a_t21*L1 + a_t22*L2)*x2 + (a_t31*L1 +
a_t32*L2)*x3 + (a_t41*L1 + a_t42*L2)*x4 + u;
exp_eta0 = exp(eta0); p0 = exp_eta0/(1 + exp_eta0);
/*Prädiktor der positiven Werte*/
etap = 0.0; do j = 1 to 48; etap = etap + b_LS{j}*LS{j}; end;
etap = etap + (b_t11*L1 + b_t12*L2)*y1 + (b_t21*L1 + b_t22*L2)*y2 + (b_t31*L1 +
b_t32*L2)*y3 + (b_t41*L1 + b_t42*L2)*y4 + v;
exp_etap = exp(etap);
/*Log-Likelihoodfunktion*/
if anzahl = 0 then ll = log(p0 + (1-p0)*exp(-exp_etap));
else ll = log(1 - p0) + anzahl*etap - exp_etap - lgamma(anzahl + 1);
model anzahl~general(ll); random u v~normal([0,0],[s2u,0,s2v]) subject = tiernr; run;
```

Anhang 2: Datensimulation für das Poisson-Modell mit zufälligen Ähren- effekten

```
%macro simu_poi(nsimu= , seed=); /*Makro mit der Anzahl an Simulationen und dem  
Zufallszahlengenerator*/  
proc datasets; delete tab_lsm tab_sig tab_fit tab_conv tab_covp; run;  
%do ilauf=1 %to &nsimu; ods select all;  
proc iml;  
print &ilauf;  
create rand var{i,j,k,l,eta0,u_eff,y,lam,ypoi};  
use eta_para; /*Einlesen der Vorgabewerte*/  
read all var{i} into i_ind; read all var{j} into j_ind; read all var{eff} into v_eff; read all  
var{vart} into v_var; read all var{na} into n_sorte; read all var{nb} into n_termin; read all  
var{nc} into n_aehre; read all var{nd} into n_schicht;  
close eta_para;  
na=n_sorte[1]; nb=n_termin[1]; nc=n_aehre[1]; nd=n_schicht[1];  
var=shape({0},nb,1); eta=shape({0},nb,nd); nn=nrow(v_eff);  
do k=1 to nn;  
var[i_ind[k]]=v_var[k]; eta[i_ind[k],j_ind[k]]=v_eff[k];  
end;  
do i = 1 to na; do j = 1 to nb; do k= 1 to nc;  
u_eff= RANNOR(&seed+&ilauf*1389)*SQRT(var[j]); /*zufällige Ähreneffekte*/  
do l=1 to nd;  
eta0=eta[j,1]; /*feste Effekte*/  
y=eta0 + u_eff; lam = EXP(y);  
ypoi = RANPOI(&seed+&ilauf*1389,lam); /*Poisson-verteiltes Merkmal*/  
append; end;  
end; end; end;  
close rand; quit; run;  
/*Aufruf von Makros zur Datenauswertung, Berechnung von marginalen Erwartungswerten  
und für statistische Tests*/  
%glm_quad; %erg_lsm; %erg_sig; %erg_conv; %erg_fit; %erg_covp; %END;  
ods select all; %erg_aus; %MEND simu_poi;
```

Anhang 3: Vergleich der Rechenzeiten für die angewendeten Modelle und Schätzverfahren in SAS für das Merkmal Anzahl Thripse pro Ährenschrift

Modell		Datensatz	Verfahren	Rechenzeit (h:min)
Verteilung	zufällige Effekte			
Poisson	-	A	Quad	0:53
	-	B	Quad	0:57
	Ähre	A	Quad	28:33
	Ähre	A	Laplace	4:17
	Ähre	A	RSPL	6:23
	Ähre	A	GEE	2:01
	Ähre	B	Quad	32:03
	Ähre	B	Laplace	5:05
	Ähre	B	RSPL	7:45
	Ähre	B	GEE	4:05
	Ähre (Termin)	A	Quad	198:36
	Ähre (Termin)	A	Laplace	5:23
	Ähre (Termin)	B	Quad	219:48
	Ähre (Termin)	B	Laplace	5:49
	Negativ Binomial	-	A	Quad
-		B	Quad	1:16
Ähre		A	Quad	37:50
Ähre		A	Laplace	11:27
Ähre		B	Quad	53:46
Ähre		B	Laplace	17:32
Ähre (Termin)		A	Quad	116:02
Ähre (Termin)		A	Laplace	12:18
Ähre (Termin)		B	Quad	172:12
Ähre (Termin)		B	Laplace	19:08

Anhang 4: Berücksichtigung unterschiedlicher Quadraturpunkte innerhalb des Schätzverfahrens Quad - Anzahl an Simulationen mit Konvergenz (N_{konv}) bzw. mit Angabe eines Standardfehlers für die Ährenvarianzen (N_{SE}) und Rechenzeit (cpu time) für das Poisson-Modell mit zufälligen Ähreneffekten für Datensatz B

Quadraturpunkte	N_{konv}	N_{SE}	Rechenzeit (h:min)
1	10000	9075	5:05
5	10000	9082	32:03
40	10000	9131	210:58

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Halle/Saale, den 31.03.2012

.....

Katrin Thamm

Wissenschaftliche Entwicklung

- 10/2003 - 09/2008 Studium der Ernährungswissenschaften an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Abschluss: Diplom-Ernährungswissenschaftlerin
- 10/2008 - 09/2011 Wissenschaftliche Mitarbeiterin in der AG Biometrie und Agrar-informatik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Halle/Saale, den 31.03.2012

.....

Katrin Thamm

Danksagung

Diese Arbeit entstand im Rahmen eines durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Projektes.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Spilke für die Bereitstellung des Themas und Unterstützung bei der Anfertigung der Arbeit.

Herrn Prof. Swalve und Herrn Prof. Reinsch danke ich für die Anfertigung der Gutachten.

Ein besonderer Dank gilt auch Herrn Dr. Mielenz für die jederzeit fachliche und geduldige Unterstützung.

Zu bedanken habe ich mich ebenfalls bei Herrn Dr. Bulang für die kompetente Hilfe, besonders in Fragen der Tierernährung und der Bereitstellung der Daten zum Thema Milchkühe.

Frau Prof. Volkmar und Frau Dr. Gaafar möchte ich für die Bereitstellung der Daten zum Thema Schädlingsbefall danken.

Den Kollegen und Doktoranden der AG Biometrie und Agrarinformatik Frau Braunsdorff, Herrn Giebler, Frau Häßler, Frau Gietl, Herrn Harnisch, Frau Höttl und Frau Reinhold möchte ich danken für die angenehme Arbeitsatmosphäre, Ratschläge und fachliche Unterstützung, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Meiner Familie möchte ich besonders danken für ihren Beistand und Verständnis, die mich meinem Ziel weitergebracht haben.