Some useful equations for biological studies

Andrea Onofri

Perugia, February 2011

Contents

1 Introduzione

Difficilmente i fenomeni biologici possono essere descritti da funzioni lineari, salvo il caso in cui si consideri un intervallo di variazione della variabile indipendente piuttosto ristretto. Più comunemente, le relazioni di maggior interesse agrario e biologico in genere (per esempio la crescita di una coltura, la cinetica degradativa degli erbicidi nel terreno, la risposta produttiva delle colture a densità crescenti di malerbe o a dosi crescenti di concime, la risposta fitotossica di una specie infestante alla dose di un erbicida) sono curvilinee, posseggono punti di massimo o minimo, flessi e, soprattutto, asintoti.

2 Forme funzionali

Uno dei criteri fondamentali, ancorchè empirico, per la selezione di una curva è quello di considerarne la forma, in relazione al fenomeno biologico in studio.

Curve shapes

- POLYNOMIALS
  1. Straight Line
  2. 2nd order polynomial
- CONVEX/CONCAVE CURVES
  1. Exponential model

2. Power curve
3. Logarithmic equation
4. Rectangular hyperbola
5. Asymptotic regression

- SIGMOID CURVES
  1. Logistic symmetric
  2. Gompertz
  3. Extreme value
  4. Log-logistic (Hill function)
  5. Weibull-1 (log-Gompertz)
  6. Weibull-2 (log-Extreme)
- PEACKED CURVES
  1. Brain-Cousens model

3 Conoscere le funzioni

Per ogni funzione è importante conoscere il significato biologico dei parametri, in quanto spesso l'informazione scientifica viene riassunta proprio in queste quantità stimate. Per questo motivo è spesso necessario calcolare limiti, derivate ed integrali, almeno con l'aiuto di un PC.

Linear model

$$Y = a + b \cdot X$$

- PARAMETERS: a is the value of Y when X=0; b is the growth rate (constant; unit increase in y when x increases of one unit)
- SHAPE: Straight line
- USAGE: local approximation of biological processes
- Very simple to parameterise!!!

2nd order polynomial

$$Y = a + b \cdot X + c \cdot X^2$$

- PARAMETERS: a is the value of Y when X=0; b is the initial growth rate (when X = 0). The slope is $b + 2cX$. The maximum (minimum) is reached when $b + 2cX = 0$, i.e. at $X = -b/(2c)$.

- SHAPE: local approximation of curvilinear biological processes.
- USAGE: degradation kinetics, exponential growth
- Very simple to parameterise!!!

Exponential model

$$Y = a \cdot b^X \;\; = a \cdot exp(cX) = exp(d + cX)$$

- PARAMETERS: A is the value of Y when X=0; b is the relative growth rate (constant)
- SHAPE: Exponential growth (concave increasing; $c > 0$) and exponential decay (concave decreasing $c < 0$)
- USAGE: degradation kinetics, exponential growth
- SELF STARTER FUNCTIONS: NLSexponential.1(), NLSexponential.2(), DRCexponential.1(), DRCexponential.2()

Per la definizione della derivata prima poniamo:

$$\begin{array}{l} f(x) = a \\ g(x) = e^{h(x)} \\ h(x) = bX \end{array}$$

e ricordiamo la regola del prodotto:

$$(f(x) \cdot g(x))' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$$

e la regola di derivazione delle funzioni esponenziali:

$$\frac{d}{dx}e^{h(x)} = e^{h(x)}h'(x)$$

dove:

$$\begin{array}{l} f'(x) = 0 \\ h'(x) = b \\ g'(x) = e^{bX}b \end{array}$$

da cui:

$$\frac{d}{dx}ae^{bX} = bae^{bX}$$

cioè

$$\frac{d}{dx}ae^{bX} = bY$$

Possiamo quindi definire il tasso di crescita relativo (RGR) come l'incremento di Y nell'unità di X, relativo al livello di Y in quel momento:

$$RGR = \frac{d}{dx} a e^{bX} \frac{1}{Y} = b$$

La funzione esponenziale descrive quindi una crescita/decrescita che avviene con un tasso costante nel tempo.

Rectangular hyperbola

Definition 1.

$$y = \frac{a \cdot x}{b + x}$$

- ALSO KNOWN AS: Michaelis-Menten model
- PARAMETERS: a: maximum value of the response; b x value at which half the maximum response is attained
- SHAPE: convex increasing
- USAGE: species-area curves, enzyme kinetics
- SELF STARTER FUNCTIONS: SSmicmen(); MM.2()

Rectangular hyperbola - 2

Definition 2.

$$y = \frac{i \cdot x}{1 + \frac{i \cdot x}{A}}$$

- PARAMETERS: i: initial slope; A maximum value
- SHAPE: convex increasing
- USAGE: competition studies (Cousens, 1985)
- SELF STARTER FUNCTIONS: DRCcousens85, NLScousens85

Power curve

Definition 3.

$$y = a \cdot X^b = a \cdot exp[(b \cdot log(X)]$$

- ALSO KNOWN AS: Allometric function, Freundlich equation
- PARAMETERS: X must be > 0, b dictates the shape
- SHAPE: concave increasing ($b > 1$), concave decreasing ($b < 0$) or convex increasing ($0 < b < 1$).
- USAGE: sorption of pesticides, species-area curves

- SELF STARTER FUNCTIONS: NLSpowerCurve(); DRCpowerCurve()

Nel caso delle curve area specie l'individuazione dell'area minima di campionamento viene in genere effettuata con il metodo di Muller-Dumbois.

Si individa graficamente la retta che unisce l'origine degli assi cartesiani, con il punto massimo osservato. Questa retta ha una pendenza pari a max(y)/max(x). Questa retta unisce i punti con pari incremento percentuale delle due variabili ('100% delle specie-100%dell'area' o '50% delle specie-50% dell'area' e così via).

Si calcola la derivata prima della curva di potenza, pari a abx^{b-1} e la si eguaglia alla pendenza della retta sopra indicata, ottenendo così l'area alla quale corrisponde un incremento paritetico dello sforzo di campionamento con il guadagno informativo. Più in particolare l'area minima individua quell'area alla quale ad un incremento del 10% della superficie corrisponde un incremento pari al 10% delle specie (quindi un incremento informativo abbastanza irrilevante, rispetto allo sforzo che richiederebbe.

Logarithmic equation

IT IS A LINEAR MODEL (on log-transformed x)!

Definition 4.

$$y = a + b \cdot log(x)$$

- PARAMETERS: X must be > 0, b dictates the shape
- SHAPE: concave increasing ($b > 0$), concave decreasing ($b < 0$)
- USAGE: species-area curves and many others
- SELF STARTER FUNCTIONS: NLSlogCurve(); DRClogCurve()

Asymptotic regression

Definition 5.

$$plateau - (plateau - init) \cdot e^{-m \cdot x}$$
$$plateau - range \cdot e^{-m \cdot x}$$
$$plateau(1 - b \cdot e^{-m \cdot x}$$

- ALSO KNOWN AS: monomolecular growth, Mitscherlich law, negative exponential
- PARAMETERS: *plateau*: maximum attainable y; *init* y at x=0; *range* equals to $plateu - init$; b is the ratio $range/plateau$ m relates to the RGR
- SHAPE: convex increasing
- USAGE: growth studies
- SELF STARTER FUNCTIONS: DRCmonoGrowth.1, DRCmonoGrowth.2, DRCmonoGrowth.3, NLSmonoGrowth.1, NLSmonoGrowth.2, NLSmonoGrowth.3

Asymptotic regression - other parameterisations

Definition 6.

$$plateau - range \cdot e^{-m \cdot x}$$
$$plateau(1 - b) \cdot e^{-m \cdot x}$$

- PARAMETERS: *plateau*: maximum attainable y; *range*: $plateau - init$; b: $range/plateau$; m relates to the RGR
- SELF STARTER FUNCTIONS: DRCmonoGrowth.1, NLSmonoGrowth.1, DRCmonoGrowth.3, NLSmonoGrowth.3

Logistic Curve

COUNTLESS PARAMETERISATIONS!

Definition 7.

$$c + \frac{d - c}{1 + exp(b(x - a))}$$

- PARAMETERS: d: maximum attainable y, c: minimum attainable y a X50, b slope at x50;
- SHAPE: symmetric sigmoid increasing ($b > 0$) or decreasing ($b < 0$)
- USAGE: growth studies and bioassay work (log-logistic o Hill's function)
- SELF STARTER FUNCTIONS SSfpl(), SSlogis ($d = 0$) (they give $1/b$, instead of b)

Gompertz Curve

COUNTLESS PARAMETERISATIONS!

Definition 8.

$$c + (d - c) * exp(-exp(b(x - e))$$

- PARAMETERS: d: maximum attainable y, c: minimum attainable y a X50, b slope around inflection;
- SHAPE: asymmetric sigmoid increasing ($b > 0$) or decreasing ($b < 0$)
- USAGE: growth studies and bioassay work (log-Gompertz or Weibull-1 function)
- SELF STARTER FUNCTION: SSGompertz ($d = 0$)

Model parameterisation

A model is parameterised when its parameters are known. This is possible by using:

- local experience
- literature information
- measurements in appropriately planned experiments