

9. Über das Experimentieren mit Simulationsmodellen

Erinnerung Abschn. 1:

Problemlage für "Systemanalytiker"

- gegeben System,
 - das auf verschiedene Arten konfiguriert, organisiert, betrieben werden kann; wo "Arten" charakterisiert / spezifizierbar durch Werte

w_C W_C einer Menge C kontrollierbarer Größen

- das weiterhin beeinflusst wird durch Werte

w_U W_U einer Menge U unkontrollierbarer Größen

- System reagiert auf unterschiedliche Situationen (w_C, w_U), so daß Werte

w_P W_P einer Menge P (zumindest im Prinzip) beobachtbarer, meßbarer Größen

sein resultierendes, unterschiedliches Verhalten erfassen; schematisch gesehen, existiert Zusammenhang

$$w_P = f(w_C, w_U)$$

- Systemverhalten wird beurteilt anhand eines (mehrerer) Gütemaßes / Leistungsmaßes, dessen Wert v sich aus den Werten der Beobachtungsgrößen ergibt; schematisch:

$$v = g^*(w_P) = g^*(f(w_C, w_U))$$

$$v := g(w_C, w_U)$$

- verfolgte Ziele / Fragestellungen sind
 - (a) Beantwortung von "was-wenn"-Fragen;
meist hinsichtlich Unkontrollierbarer U
 - (b) Verbesserung, Optimierung des Systems;
meist hinsichtlich Kontrollierbarer C
- bei "modellgestütztem" Vorgehen
wird ein Modell bemüht, das Abhängigkeit

$$v = g(w_C, w_U)$$

"hinreichend realitätstreu" wiedergibt

- ein Modelltyp ist der Simulator,
ein "numerisches" Modell,
 - das "g" nicht explizit darstellt,
 - das (lediglich) Möglichkeit bietet,
g-Wert für jede "Setzung" Situation (w_C, w_U)
zu ermitteln / zu errechnen
 - damit sind Ziele
 - (a) unmittelbar verfolgbar
 - (b) in der Methodik reduziert auf
(systematische) Folge von (a)-Fragestellungen:
 - "Setzen (w_C, w_U), Ermitteln zugehörigen v's"
- und Vorgehen in beiden Fällen "experimentell"

- für Simulationsexperiment
 - "verschwindet" Unterscheidung C / U
 - existiert (nur noch) Menge $E=C \cup U$ von Einflußgrößen, jeweils charakterisiert durch ihre Werte

$$w_E \quad W_E$$

- ermittelt Modell (Simulator) Abhängigkeit

$$v = g(w_E)$$

jeweils numerisch (ab hier Index E "geschenkt")

- beim Experimentieren werden je nach Fragestellung
 - gewisse Komponenten von w "fest eingestellt" (w i.allg. mehrdimensional),
 - andere Komponenten von w in **Experimentserie** "systematisch verändert";

in Experimentserie zu verändernde Einflußgrößen (w -Komponenten) heißen **Faktoren**

- zwei Arten von Faktoren unterschieden

- **qualitative Faktoren**

können ein **Niveau** (level) aus endlicher Menge von Niveaus einnehmen,

sind nicht zwingend irgendwie "geordnet" (z.B. unterschiedliches scheduling, Winter/Sommer)

- **quantitative Faktoren**

können einen **Wert**
aus Kontinuum von Werten annehmen,
(z.B. Geschwindigkeit Prozessor,
Regenfallmenge während Zeitintervall)

- Größen mit diskretem (zahlenmäßigem) Wertevorrat meist als "qualitativ" behandelt

Unsere Untersuchungen galten
(i.w.) stochastischen Simulatoren (Motivation: s. Abschn. 2)

Erhaltene Resultate (Werte)

$$v = g(t^*, w, s)$$

t^* : Zeitpunkt Resultatbeobachtung

w : Werte Einflußgrößen

s : Saatwert(e) ZZ-Generatoren

waren als Realisierungen von Zufallsvariablen aufzufassen

- bei Ensemble-Analyse

- Variation der Realisierungen v der Resultat-ZV V hervorgerufen / reproduziert durch Variation der ZZ-Saat s

- t^* für alle Replikationen identisch gewählt

- bei variablem w demnach zu betrachten

$$V = G(w) \quad \left(\begin{array}{l} \text{Zufallsvariable, Zufallsfunktion;} \\ \text{s-Variation "implizit"} \\ \text{für ZV-"Charakter"} \end{array} \right)$$

- bei Zeitreihen-Analyse
(von Prozessen in stationärer Phase)

war Resultat als unabhängig von

- Saatwert s
 - und Zeitpunkt t
- anzusehen

also gleichfalls zu betrachten

$$V = G(w)$$

Problemlage in beiden Fällen:

beobachtbar sind Realisierungen v von V

- die für festes w (gemäß bestimmter Verteilung)
stochastisch variieren
- deren Verteilung abhängig von w ist

auftauchende Fragen

- welche Situationen w sind zu untersuchen,
- wieviele Replikationen sind je w anzustellen
(bzw. welche Beobachtungs"dauer" ist je w zu wählen)
- wie ist von den verschiedenen Situationen
aus bzgl. "Überlegenheit", "Optimalität" zu schließen

sind Fragen der Bereiche

Experimententwurf

Experimentanalyse

(wie schon gewohnt,
Bescheidenes Vorgehen:

anstatt Verteilung von V in Abhängigkeit von w
lediglich Erwartungswert von V in Abhängigkeit von w

betrachtet, also

$$\mu(w) := E[V(w)]$$

unter (zusätzlich einschränkend) Modellannahmen

$$V(w) = \mu(w) + \epsilon(w)$$

mit $\mu(w)$ deterministische Funktion
 $\epsilon(w)$ "schwankende Größe",
die "Zufallseinfluß" ("Fehler") erfaßt;
also "Zufallsvariable" ist

wo standardmäßig angenommen

$E[\epsilon(w)] = 0$ Erwartungswert unabhängig von w
verschwindend (gemäß Definition ok)

$\text{VAR}[\epsilon(w)] = \sigma^2$ Varianz unabhängig von w
identisch-wertig
(nicht automatisch gesichert !)

$\text{COV}[V(w_i), V(w_j)] = \text{COV}[\epsilon(w_i), \epsilon(w_j)] = 0$
für alle untersuchten Situationen w .
paarweise Unkorreliertheit
der Beobachtungen
(nicht automatisch gesichert !)

9.1 Experimententwürfe für qualitative Faktoren

Allgemeine Problemlage:

gewisse Anzahl qualitativer Faktoren,
für jeden gewisse (i.a. unterschiedliche) Anzahl Niveaus

Faktoren	Niveaus			
F_1	$w_{1,1}$	$w_{1,2}$...	$w_{1,n1}$
F_2	$w_{2,1}$	$w_{2,2}$...	$w_{2,n2}$
...
F_k	$w_{k,1}$	$w_{k,2}$...	$w_{k,nk}$

Zu jeder Situation (bestimmtes Niveau für jeden Faktor)
gehört bestimmtes μ

Bei Beobachtung variiert Beobachtungsgröße V

- mit Veränderung des Niveaus jedes Faktors
- zusätzlich aber durch "statistische Schwankung"
(modellmäßig erfaßt durch)

Hauptfrage daher:

Beeinflußt die Veränderung von Faktor-Niveaus
die Beobachtungen **signifikant** ?

Rein praktisch gesehen:

Derart, daß Beobachtungs-Unterschiede
aufgrund Faktor-Niveau-Änderungen
von statistischen Schwankungen unterscheidbar sind ?

Fragenkomplex üblicherweise behandelt mit Methoden der
Varianzanalyse, analysis of variance, ANOVA

9.1.1 (erster, schon bekannter Fall: Ein Faktor, zwei Niveaus

- Problem:

Faktor: F_1

Niveaus: w_{11}, w_{12}

- Methode:

- gewinne zwei Stichproben

$$v_1 := (v_{1,1}(w_{11}), v_{1,2}(w_{11}), \dots, v_{1,k_1}(w_{11}))$$

$$v_2 := (v_{2,1}(w_{12}), v_{2,2}(w_{12}), \dots, v_{2,k_2}(w_{12}))$$

- führe Test aus bzgl.

$$E[V_1] = E[V_2]$$

d.h. $\mu(w_{11}) = \mu(w_{12})$

Hypothese "="

Alternativen " "

">" , "<"

zweiseitiger Test

einseitige Tests

- Verfahren:

Vergleich zweier Stichproben,

vgl. Abschn. 8 (Validierung),

wo drei einschlägige Tests behandelt:

- 2-Stichproben-t-Test
- Mann-Whitney-U-Test
- Wilcoxon-matched-pairs-signed-rank-Test

9.1.2 Zwei Faktoren, je zwei Niveaus

Problem:

Faktoren: F_1 F_2
 Niveaus: $q \in \{0,1\}$ $r \in \{0,1\}$
 (übliche Bezeichnungskonvention)

Frage: Auswirkung von q, r auf Erwartungswert
 $\mu(q, r) = E[V(q, r)]$

Annahme: Abhängigkeitsform ist
 $\mu(q, r) = \mu + \alpha_1 \cdot q + \alpha_2 \cdot r (+ \alpha_{12} \cdot q \cdot r)$
 d.h. entweder "rein additiv"
 oder "mit Interaktion"

Methode:

- gewinne Stichproben
 $v(q, r) := (v^{(1)}(q, r), v^{(2)}(q, r), \dots, v^{(n)}(q, r))$
 für $q, r \in \{0, 1\}$

- schätze $\mu, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12}$

- führe Test aus bzgl.
 $\mu, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12} = 0$

jeweils Hypothese	"="	
jeweils Alternativen	" "	
	">" , "<"	zweiseitige Tests einseitige Tests

Verfahren / Experiment-"Entwürfe":

- einfacher voller Faktor-Entwurf
- mehrfacher voller Faktor-Entwurf
- "weitere"

Einfacher voller Faktor-Entwurf (single full factorial design)

Verfahren:

einzelne Experimente für jede Kombination (q,r)

Annahmen:

- "Modell" ist rein additiv, ohne Interaktion

$$V(q,r) = \mu + \beta_1 \cdot q + \beta_2 \cdot r + \epsilon(q,r)$$

- $E[\epsilon(q,r)] = 0$
- $\text{VAR}[\epsilon(q,r)] = \sigma^2$
- ($\epsilon(q,r)$ normalverteilt)

Ergebnisse:

Ergebnis- größe	Erwartungs- wert	Varianz	Realisierung
V(0,0)	μ	σ^2	$v(0,0)$
V(0,1)	$\mu + \beta_2$	σ^2	$v(0,1)$
V(1,0)	$\mu + \beta_1$	σ^2	$v(1,0)$
V(1,1)	$\mu + \beta_1 + \beta_2$	σ^2	$v(1,1)$

Vorgehen:

Kombination der Ergebnisse
zur Gewinnung unkorrelierter Schätzer
für Modell-Parameter β_1, β_2

Schätzer als (gemäß Tabelle)
gewichtete Summe der Realisierungen

Schätzer S	v(0,0)	v(0,1)	v(1,0)	v(1,1)	E[S]	VAR[S]
$\tilde{\mu}$	1/4	1/4	1/4	1/4	$(\mu_1 + \mu_2)/2$	2/4
$\tilde{\mu}_1$	-1/2	-1/2	1/2	1/2	1	2
$\tilde{\mu}_2$	-1/2	1/2	-1/2	1/2	2	2
$\tilde{\mu}$	1/2	-1/2	-1/2	1/2	0	2
sowie $(\tilde{\mu})^2$					2	

Gefundene Schätzer sind Punktschätzer!
(erwartungstreu, paarweise unkorreliert)

Läßt sich etwas über Konfidenzintervalle sagen?

Falls (zusätzliche Annahme)
V(q,r) normalverteilt für alle Wertekombinationen (q,r),

dann sind
unter Hypothesen $\mu_1, \mu_2 = 0$

die Schätzer $\tilde{\mu}_1, \tilde{\mu}_2$ N(0, 2)-verteilt

und $\tilde{\mu}_1/\sqrt{2}, \tilde{\mu}_2/\sqrt{2}$ N(0,1)-verteilt

sowie $\tilde{\mu}_1/(\tilde{\mu})^2, \tilde{\mu}_2/(\tilde{\mu})^2$ t₁-verteilt

und Tests auf "Signifikanz" von μ_1, μ_2 können (wie gehabt)
mithilfe t-Tafel durchgeführt werden
(zu verwerfen wäre jeweils Hypothese $\mu_1=0, \mu_2=0$)

Normalverteilungsannahme "etwas" weniger kritisch als anzunehmen, da μ_1, μ_2 bereits Summen von (vier) ZV

Wenn auch Interaktion als möglich angesehen, Modell also

$$V(q,r) = \mu + \mu_1 \cdot q + \mu_2 \cdot r + \mu_{12} \cdot q \cdot r + \epsilon(q,r)$$

dann ist

$$E[\tilde{\mu}] = \mu_{12}/2$$

und $2 \cdot \tilde{\mu}$ ist erwartungstreuer Schätzer für μ_{12}

Allerdings verbleibt dann kein verfügbarer, unabhängiger (unkorrelierter) Schätzer für μ_2 und Signifikanztests sind nicht mehr möglich

"Mehrfache" Faktorentwürfe als Ausweg:

Mehrfacher voller Faktor-Entwurf (replicated full factorial design)

Verfahren:

mehrere Experimente für jede Kombination (q,r),
oft jeweils gleiche Anzahl $n_{qr} = n$

Annahmen:

- Modell ist rein additiv, ohne Interaktion

$$V(q,r) = \mu + \alpha_1 \cdot q + \alpha_2 \cdot r + \epsilon(q,r)$$

- $E[\epsilon(q,r)] = 0$
- $\text{VAR}[\epsilon(q,r)] = \sigma^2$
- ($\epsilon(q,r)$ normalverteilt)

Ergebnisse:

Reihe von $v_{qr}^{(k)}$ $q,r \in \{0,1\}$
 $k = 1,2,\dots,n$

Vorgehen:

Ermittle Punktschätzer
für:

gemäß:

$$E[V_{qr}]$$

$$\tilde{\mu}_{qr} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_{qr}^{(k)}$$

$$\text{VAR}[V_{qr}] \quad (= \sigma_{qr}^2)$$

$$\tilde{\sigma}_{qr}^2 = \frac{1}{n-1} \left\{ \sum_{k=1}^n \left(V_{qr}^{(k)} \right)^2 - n \tilde{\mu}_{qr}^2 \right\}$$

$$\text{VAR}\left[\sum_{q,r \in \{0,1\}} V_{qr} \right] \quad (= \sigma^2)$$

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{4} \sum_{q,r \in \{0,1\}} \tilde{\sigma}_{qr}^2$$

sowie für: gemäß:

$$1 \quad \tilde{\mu}_1 = \frac{1}{2} \left(-\tilde{\mu}_{00} - \tilde{\mu}_{01} + \tilde{\mu}_{10} + \tilde{\mu}_{11} \right)$$

$$2 \quad \tilde{\mu}_2 = \frac{1}{2} \left(-\tilde{\mu}_{00} + \tilde{\mu}_{01} - \tilde{\mu}_{10} + \tilde{\mu}_{11} \right)$$

Falls (zusätzliche Annahme)

$V(q,r)$ normalverteilt für alle Wertekombinationen (q,r) ,

dann sind

unter Hypothesen $\mu_1, \mu_2 = 0$

die Schätzer	$\tilde{\mu}_i$	$N(0, \sigma^2/n)$ -verteilt
und	$\tilde{\mu}_i / \left(\frac{\sigma^2}{n} \right)$	$N(0,1)$ -verteilt
sowie	$\tilde{\mu}_i / \left(\frac{\sigma^2}{n} \right)$	t_{4n-4} -verteilt

und Tests auf "Signifikanz" von μ_1, μ_2 können (wie gehabt) mittels t-Tafel durchgeführt werden

(zu verwerfen wäre jeweils Hypothese $\mu_1=0, \mu_2=0$)

Normalverteilungsannahme nicht sehr kritisch,
da die $\tilde{\mu}_i$ Summen von ("einigen") ZVn sind

Wenn auch Interaktion als möglich angesehen,
Modell also

$$V(q,r) = \mu + \beta_1 \cdot q + \beta_2 \cdot r + \beta_{12} \cdot q \cdot r + \epsilon(q,r)$$

dann ist ermittelbar
Punktschätzer
für:

gemäß:

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{1}{2} \left(\tilde{\mu}_{00} - \tilde{\mu}_{01} - \tilde{\mu}_{10} + \tilde{\mu}_{11} \right)$$

wo $\tilde{\mu}_{ij}$ unter Annahme normalverteilter $V(q,r)$'s
und $\beta_{12} = 0$ unter Hypothese

die Testgröße $\hat{\beta}_{12} / (\hat{\sigma}^2/n)$ t_{4n-4} -verteilt ist

so daß Tests auf "Signifikanz" von β_{12} (wie gehabt)
mittels t-Tafel durchgeführt werden können
(zu verwerfen wäre hier Hypothese $\beta_{12}=0$)

Im Gegensatz zum einfachen vollen Faktorentwurf
bietet der mehrfache volle Faktorentwurf demnach

- Schätzer für alle interessierenden Größen
- Signifikanztests für alle interessierenden Größen

9.1.3 "Weitere" Fälle

Volle Faktorentwürfe für

k Faktoren

m Niveaus je Faktor

n Werte je Stichprobe (z.B.: Replikationen je Kombination)

erfordern

$N = n \cdot m^k$ Experimente

kann (offensichtlich) zu viel sein !

Zwischenformen existieren:

1 Faktor, mehrere Niveaus

"best of k alternatives"

Experimententwürfe für allgemeinen Fall existieren,

die "weniger Experimente"

bei "gleichem Erkenntnisumfang"

anstreben:

- Teilentwürfe (fractional designs)
- Erforschungsentwürfe (screening designs)

Wirklich "gleicher" Erkenntnisumfang

kann offensichtlich nicht bei "weniger Information"

erreicht werden;

Reduktion i.w. bei geprüften
bzw vernachlässigten Interaktionen
("zu zweit", "zu dritt", ...)

Siehe Statistik-Literatur,

in Zusammenhang mit Simulation:

Mihr72, Klei74, Klei82, Klei92, LaKe82, LaKe91

9.2 Experimententwürfe für quantitative Faktoren

Antwort (response) eines Experiments

$$V(\underline{w}) \quad \underline{w} = (w_1, w_2, \dots, w_k)$$

ist stochastische Funktion
des Vektors \underline{w} kontinuierlicher Faktoren

Neben speziellen "was-wenn"-Fragen
hier Hauptinteresse
"optimaler" Satz von Faktor-Werten

Modellvorstellung (wie zuvor):

$$V(\underline{w}) = \mu(\underline{w}) + \epsilon(\underline{w})$$

wo (hier:)

$\mu(\underline{w}) := E[V(\underline{w})]$ als kontinuierliche,
(in allen \underline{w} -Komponenten,
partiell, mehrfach)
differenzierbare Funktion in \underline{w}
angenommen

und (wie zuvor) gelte, daß

$$E[\epsilon(\underline{w})] = 0$$

$$\text{VAR}[\epsilon(\underline{w})] = \sigma^2$$

$$\text{COV}[\epsilon(\underline{w}_i), \epsilon(\underline{w}_j)] = 0$$

Man nennt $\mu(\underline{w})$ **Antwortfunktion**
response function /
response surface

Problem demnach:

Optimierung von $\mu(\underline{w})$ im Hinblick auf variable w_1, w_2, \dots, w_k

Ein denkbarer Ansatz zur Lösung wäre:

- Anwendung bekannter deterministischer, iterativer Optimierungstechniken
- dazu wäre, für "eine Reihe" verschiedener \underline{w} , jeweils $\mu(\underline{w})$ aus Stichprobe ($v_i(\underline{w}); i=\dots$) zu schätzen
- Schätzung müßte "ziemlich präzise" sein, um Basis iterativer Optimierung zu liefern:
benötigt Ableitungen!
- Ansatz offensichtlich extrem aufwendig

Alternativer Ansatz:

- Sei $\mu(\underline{w})$ "gedachterweise" an einem Punkt $\underline{w} = (w_1, w_2, \dots, w_k)$ des \underline{w} -Raumes in eine Taylor-Reihe entwickelt, d.h.

$$\begin{aligned} \mu(\underline{w} - \underline{w}) &= \mu(\underline{w}) + \sum_{i=1}^k \frac{\partial \mu}{\partial w_i} (w_i - w_i) \\ &+ \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \frac{\partial^2 \mu}{\partial w_i \partial w_j} (w_i - w_i)(w_j - w_j) \\ &+ \dots \end{aligned}$$

- Man versuche nun, die diversen $\frac{\partial \mu}{\partial w_i}$ -Koeffizienten aus einem gewissen Satz einfacher Experimente zu schätzen
 - "Abschneiden" nach linearen Termen liefert **Modell erster Ordnung** (lineare lokale Approximation), verwendbar als Basis von Gradientenmethoden ("hill climbing") und damit zur groben Optimierung ("lokale Extrema, Sattelpunkte")
 - "Abschneiden" nach quadratischen Termen liefert **Modell zweiter Ordnung** (quadratische lokale Approximation), verwendbar zur Analyse von Extrempunkten und damit zur verfeinerten Optimierung
- insgesamt wird gearbeitet mit lokalen Approximations(-Modellen) der response surface $\mu(\underline{w})$

9.2.1 Entwürfe zur Anpassung von Modellen erster Ordnung

Modellform (standardmäßig: am Punkt $\underline{0}$)

$$V(\underline{w}) = 0 + \sum_{j=1}^k w_j +$$

n Realisierungen von V
(potentiell an unterschiedlichen Punkten \underline{w})
lassen sich damit erklären / darstellen als

$$v_i = 0 + \sum_{j=1}^k w_{ji} + e_i \quad i=1,2,\dots,n$$

wo e_i Realisierung von

oder kompakter (+ bzgl. Spalten-, Zeilen-Vektoren präziser)
mit

$$\begin{aligned} \underline{v}^T &= (v_1, v_2, \dots, v_n) & \text{d.h. } \underline{V}^T &= (V_1, V_2, \dots, V_n) \\ \underline{w}^T &= (w_{11}, w_{12}, \dots, w_{kn}) \\ \underline{e}^T &= (e_1, e_2, \dots, e_n) & \text{d.h. } \underline{e}^T &= (e_1, e_2, \dots, e_n) \end{aligned}$$

und der sog. **Entwurfsmatrix** W

$$W = \begin{pmatrix} 1 & w_{11} & w_{21} & \dots & w_{k1} \\ 1 & w_{12} & w_{22} & \dots & w_{k2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & w_{1n} & w_{2n} & \dots & w_{kn} \end{pmatrix}$$

als

$$\underline{v} = W \cdot \underline{w} + \underline{e}$$

Aufgrund der Annahmen über die \underline{e}
 (Mittelwert identisch 0, gleiche Varianz, unkorreliert)
 ist

$$E[\underline{e}] = \underline{0}$$

und die Matrix aller Varianzen und Kovarianzen der \underline{e} ,
 die sog. Varianz-/Kovarianzmatrix $\text{COV}[\underline{e}]$

$$\text{COV}[\underline{e}] = \sigma^2 \cdot I \quad (\text{wo } I \text{ Einheitsmatrix})$$

Aus obigen n Realisierungen kann man versuchen,
 "passende" \underline{x} zu gewinnen
 (Schätzer $\underline{\tilde{x}}$ für \underline{x} zu ermitteln),
 indem man die \underline{e} "insgesamt" minimiert
 (hier: $L :=$ Summe der quadrierten \underline{e} , minimiert)

wo formal

$$\begin{aligned} L &= \sum_{i=1}^n e_i^2 \\ &= \underline{e}^T \underline{e} \\ &= (\underline{v} - W \underline{\tilde{x}})^T (\underline{v} - W \underline{\tilde{x}}) \\ &= \underline{v}^T \underline{v} - \underline{\tilde{x}}^T W^T \underline{v} - \underline{v}^T W \underline{\tilde{x}} + \underline{\tilde{x}}^T W^T W \underline{\tilde{x}} \\ &= \underline{v}^T \underline{v} - 2 \underline{\tilde{x}}^T W^T \underline{v} + \underline{\tilde{x}}^T W^T W \underline{\tilde{x}} \end{aligned}$$

notwendige Bedingung für Minimum ist

$$\begin{pmatrix} -\underline{L} \\ - \end{pmatrix} = \underline{0}$$

das heißt

$$\begin{aligned} -2 W^T \underline{v} + 2 W^T W \underline{\tilde{w}} &= 0 \\ W^T W \underline{\tilde{w}} &= W^T \underline{v} \end{aligned}$$

bei nicht-singulärem $W^T \cdot W$
 (also W mit Rang $k+1$,
 damit notwendig $n = k+1$)
 ergeben sich die Schätzer

$$\underline{\tilde{w}} = (W^T W)^{-1} W^T \underline{v}$$

Sind diese Schätzer erwartungstreu?

$$\begin{aligned} E[\underline{\tilde{w}}] &= E\left[(W^T W)^{-1} W^T \underline{v}\right] \\ &= E\left[(W^T W)^{-1} W^T (W \underline{w} + \underline{e})\right] \\ &= \underline{w} + E\left[(W^T W)^{-1} W^T \underline{e}\right] \\ &= \underline{w} \end{aligned}$$

Demnach:

Die ermittelten $\underline{\tilde{w}}$ sind erwartungstreue Schätzer der \underline{w}

Wie sieht die Varianz-/Kovarianz-Matrix der $\underline{\tilde{w}}$ aus?

$$\begin{aligned} \text{COV}[\underline{\tilde{w}}] &= E\left[(\underline{\tilde{w}} - \underline{w})(\underline{\tilde{w}} - \underline{w})^T\right] \\ &= \sigma^2 (W^T W)^{-1} \end{aligned}$$

Demnach:

Ist $W^T \cdot W$ eine Diagonalmatrix,
 dann sind die ermittelten Schätzer unkorreliert

Sie sind des weiteren (o.B.):

Schätzer mit der geringsten erzielbaren Varianz:

best linear unbiased estimators,

"BLUE"-Schätzer von _

$W^T \cdot W$ ist Diagonalmatrix heißt

$$\sum_{u=1}^n w_{iu} w_{ju} = 0 \quad i \neq j$$

(für quadratisches W
 und Zeilenvektoren W betragsmäßig 1
 heiße das: W ist Orthogonalmatrix)

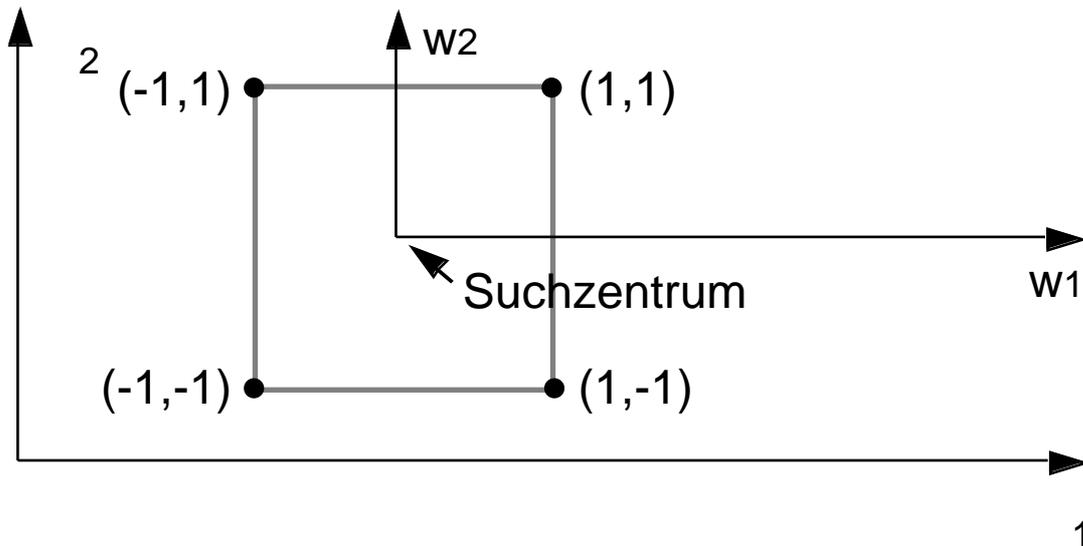
Entwürfe

(Menge zu prüfender Punkte des Experimentraums)
 welche obige (offensichtlich wünschenswerte)
 Eigenschaft aufweisen, heißen

Orthogonalentwürfe

Beispiele für Orthogonalentwürfe:

- voller Faktorentwurf
zweidimensionale Skizze:



(x_1, x_2) Ursprungskoordinaten
 (w_1, w_2) Koordinaten bezogen auf Suchzentrum,
 gemessen in Standardabweich'gen (Streuung)

Experimente

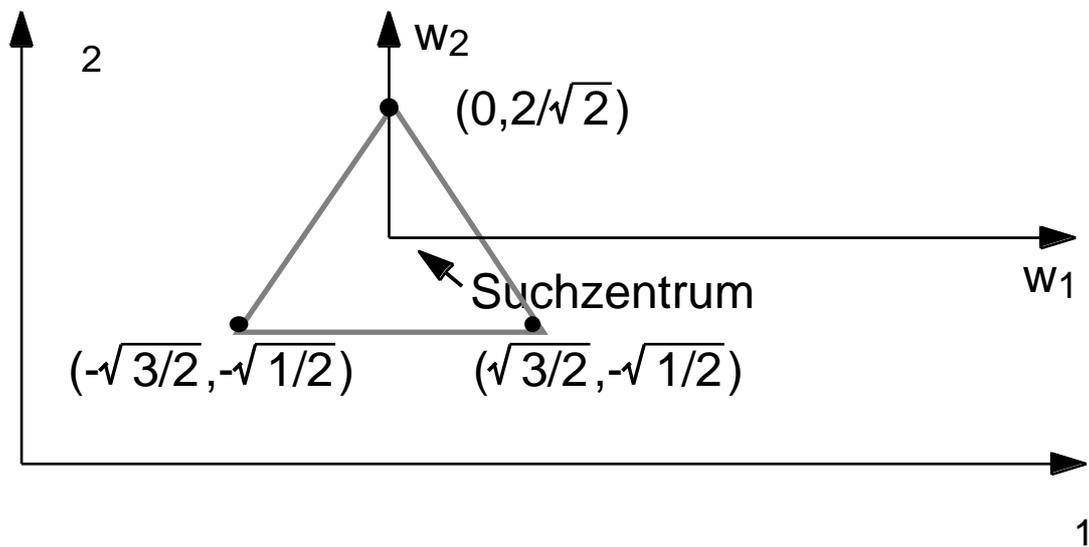
in allen $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ -Punkten des "designs"

Bei Einzelexperimenten (k Faktoren)

Experimentanzahl: 2^k

- Simplexentwurf

zweidimensionale Skizze:



Experimente

in allen Punkten des k -dimensionalen Simplex

Bei Einzelexperimenten (k Faktoren)

Experimentanzahl: $k + 1$

9.2.2 Entwürfe zur Anpassung von Modellen zweiter Ordnung

Erinnerung: quadratische lokale Approximation, zur Analyse von Extrempunkten und damit zur verfeinerten Optimierung

(verbleibende Gefahr: lediglich lokales Extremum)

Modellform (standardmäßig: am Punkt $\underline{0}$)

$$V(\underline{w}) = \underbrace{0}_{\text{0}} + \sum_{i=1}^k \underbrace{w_i}_{\text{1. Ordnung}} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \underbrace{w_i w_j}_{\text{2. Ordnung}} +$$

bzw, wenn i, j - Terme für i, j zusammengefaßt

$$V(\underline{w}) = \underbrace{0}_{\text{0}} + \sum_{i=1}^k \underbrace{w_i}_{\text{1. Ordnung}} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \underbrace{w_i w_j}_{\text{2. Ordnung}} +$$

- Erinnerung Modelle 1. Ordnung:

- Experimente an n Punkten erklärbar

$$\text{als } \underline{v} = W \cdot \underline{w} + \underline{e} \quad \text{Dimension: } n$$

wo in Entwurfsmatrix W die Koordinaten der n Experiment-Punkte eingehen

- Schätzer der Koeffizienten w_i, w_{ij} gewinnbar (und dann: erwartungstreu),

wenn n (mindestens) Anzahl zu schätzender Größen,

$$\text{dort: } 1 + k \quad (n)$$

- hier: $(1 + k) + (k + k(k-1)/2)$ (n)

k+1 Punkte (des Simplex-Entwurfs)
nicht ausreichend

2^k Punkte (des "vollen Faktorentwurfs")
erst ab k=3 ausreichend

Gebräuchliche Entwürfe

jeweils mit ihren Entwurfsmatrizen W

und Parameterschätzung ("wie gehabt"):

$$\underline{\tilde{}} = \left(W^T W \right)^{-1} W^T \underline{v}$$

- 3^k -Entwürfe:
 $n = 3^k$
- central composite Entwürfe ("zentral kombiniert"):
 $n = 3^k + 2k$
- und weitere

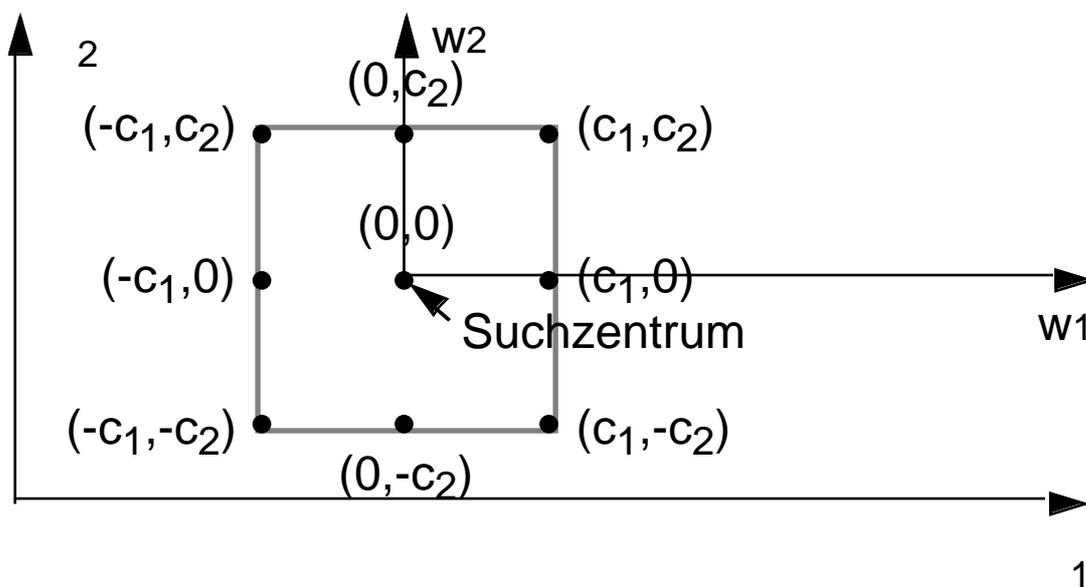
- 3^k -Entwürfe:

mit Experimenten an den Punkten

- je Faktor: w. $\{0,+c.,-c.\}$
- insgesamt: in allen Kombinationen

Entwürfe nicht orthogonal,
orthogonalisierbar durch Variablentransformation

zweidimensionale Skizze:



- 3^k -Entwürfe

mit Experimenten an den Punkten

- je Faktor: w. $\{0,+c.,-c.\}$
- insgesamt: in allen Kombinationen

- Beispiel: 3^k -Entwurfsmatrix für $k = 2$:

Faktoren für

0	1	2	11	22	12
w_1	w_2	w_1^2	w_1^2	w_2^2	$w_1 w_2$
1	$-c_1$	$-c_2$	c_1^2	c_2^2	$c_1 c_2$
1	$-c_1$	0	c_1^2	0	0
1	$-c_1$	c_2	c_1^2	c_2^2	$-c_1 c_2$
1	0	$-c_2$	0	c_2^2	0
1	0	0	0	0	0
1	0	c_2	0	c_2^2	0
1	c_1	$-c_2$	c_1^2	c_2^2	$-c_1 c_2$
1	c_1	0	c_1^2	0	0
1	c_1	c_2	c_1^2	c_2^2	$c_1 c_2$

- central composite Entwürfe ("zentral kombiniert"):

mit Experimenten

an den Punkten des 2^k -Faktorentwurfs

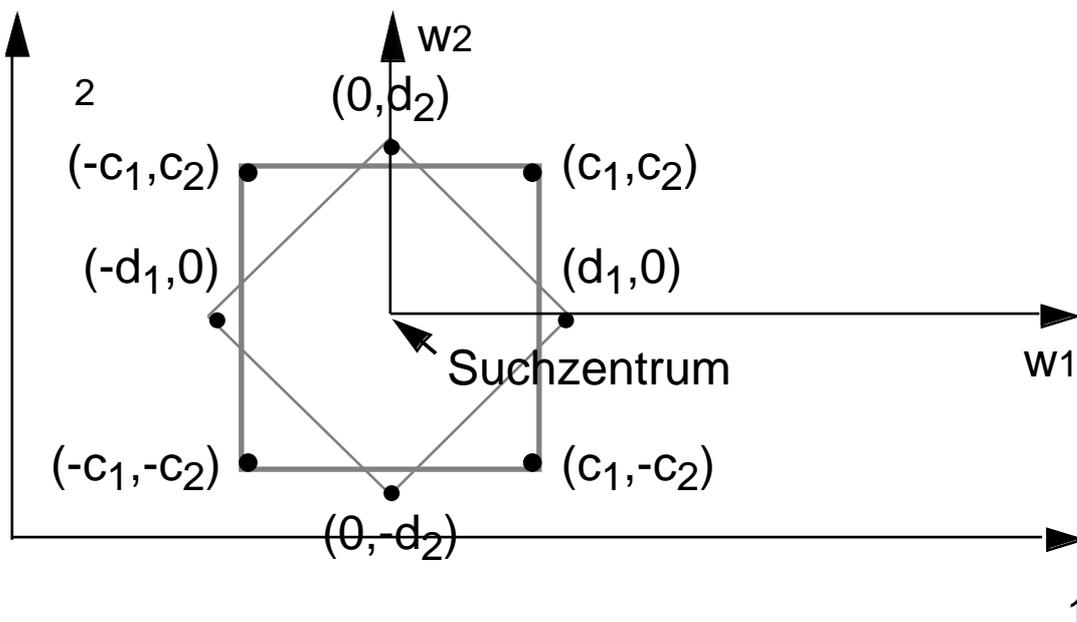
- je Faktor: w. $\{+c., -c.\}$
- insgesamt: in allen Kombinationen

zusätzlich auf den Faktor-Achsen

- je Faktor: w. $\{+d., -d.\}$
- andere Faktoren 0

erneut: Entwürfe nicht orthogonal, orthogonalisierbar

zweidimensionale Skizze:



- central composite Entwürfe ("zentral kombiniert"):

mit Experimenten

an den Punkten des 2^k -Faktorentwürfs

- je Faktor: w. $\{+c., -c.\}$
- insgesamt: in allen Kombinationen

zusätzlich auf den Faktor-Achsen

- je Faktor: w. $\{+d., -d.\}$
- andere Faktoren 0

- Beispiel: central composite Entwurfsmatrix für $k = 2$:

Faktoren für

0	1	2	11	22	12
	w_1	w_2	w_1^2	w_2^2	$w_1 w_2$

$$W = \begin{pmatrix} 1 & -c_1 & -c_2 & c_1^2 & c_2^2 & c_1 c_2 \\ 1 & -c_1 & c_2 & c_1^2 & c_2^2 & -c_1 c_2 \\ 1 & c_1 & -c_2 & c_1^2 & c_2^2 & -c_1 c_2 \\ 1 & c_1 & c_2 & c_1^2 & c_2^2 & c_1 c_2 \\ 1 & d_1 & 0 & d_1^2 & 0 & 0 \\ 1 & -d_1 & 0 & d_1^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & d_2 & 0 & d_2^2 & 0 \\ 1 & 0 & -d_2 & 0 & d_2^2 & 0 \end{pmatrix}$$

und

so

weiter !

siehe statistische Verfahren

- des Experimententwurfs
- der stochastischen Optimierung
- ...

in der Praxis im Zusammenhang mit Simulation
(leider) wenig bekannt und eingesetzt

(und daher viele,
an sich unnötige,
"ad-hoc-Probiererei")