

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:

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

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

Simulation

Experimentieren

be/ja/2

9 - 3

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

w_E 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)

Simulation

Experimentieren

- 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"

Simulation

Experimentieren

be/ja/2

9 - 4

- **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

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

Simulation

Experimentieren

- 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)

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

$COV[V(w_i), V(w_j)] = COV[\epsilon(w_i), \epsilon(w_j)] = 0$
 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 ϵ)

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
 $v_1 := (v_{1,1}(w_{11}), v_{1,2}(w_{11}), \dots, v_{1,k1}(w_{11}))$
 $v_2 := (v_{2,1}(w_{12}), v_{2,2}(w_{12}), \dots, v_{2,k2}(w_{12}))$

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

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

Verfahren / Experiment-"Entwürfe":

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

Simulation

Experimentieren

be/ja/2(6)

9 - 11

Schätzer als (gemäß Tabelle)
 gewichtete Summe der Realisierungen

Schätzer S	$v(0,0)$	$v(0,1)$	$v(1,0)$	$v(1,1)$	$E[S]$	$VAR[S]$
$\bar{\mu}$	1/4	1/4	1/4	1/4	$(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2})$	$\frac{2}{4}$
$\tilde{\alpha}_1$	-1/2	-1/2	1/2	1/2	1	2
$\tilde{\alpha}_2$	-1/2	1/2	-1/2	1/2	2	2
$\tilde{\alpha}_{12}$	1/2	-1/2	-1/2	1/2	0	2

sowie

$(\tilde{\alpha}_{12})^2$ 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 $\alpha_1, \alpha_2 = 0$
 die Schätzer $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2$ $N(0, 2)$ -verteilt
 und $\tilde{\alpha}_1 / \tilde{\alpha}_2$ $N(0,1)$ -verteilt
 sowie $\tilde{\alpha}_1 / (\tilde{\alpha}_{12})^2, \tilde{\alpha}_2 / (\tilde{\alpha}_{12})^2$ t_1 -verteilt

und Tests auf "Signifikanz" von α_1, α_2 können (wie gehabt)
 mithilfe t-Tafel durchgeführt werden
 (zu verwerfen wäre jeweils Hypothese $\alpha_1=0, \alpha_2=0$)

Simulation

Experimentieren

Einfacher voller Faktor-Entwurf (single full factorial design)

Verfahren:
 einzelne Experimente für jede Kombination (q,r)

- Annahmen:
- "Modell" ist rein additiv, ohne Interaktion
 $V(q,r) = \mu + \alpha_1 \cdot q + \alpha_2 \cdot r + \alpha_{12} \cdot q \cdot r$
 - $E[(q,r)] = 0$
 - $VAR[(q,r)] = 2$
 - $(V(q,r))$ normalverteilt

Ergebnisse:

Ergebnisgröße	Erwartungswert	Varianz	Realisierung
$V(0,0)$	μ	2	$v(0,0)$
$V(0,1)$	$\mu + \alpha_2$	2	$v(0,1)$
$V(1,0)$	$\mu + \alpha_1$	2	$v(1,0)$
$V(1,1)$	$\mu + \alpha_1 + \alpha_2$	2	$v(1,1)$

Vorgehen:
 Kombination der Ergebnisse
 zur Gewinnung unkorrelierter Schätzer
 für Modell-Parameter α_1, α_2

Simulation

Experimentieren

be/ja/2(6)

9 - 12

Normalverteilungsannahme "etwas" weniger kritisch
 als anzunehmen, da α_1, α_2 bereits Summen von (vier) ZV

Wenn auch Interaktion als möglich angesehen,
 Modell also

$$V(q,r) = \mu + \alpha_1 \cdot q + \alpha_2 \cdot r + \alpha_{12} \cdot q \cdot r + \alpha_{12} \cdot q \cdot r + \alpha_{12} \cdot q \cdot r$$

dann ist

$$E[\tilde{\alpha}_{12}] = \alpha_{12} / 2$$

und $2 \cdot \tilde{\alpha}_{12}$ ist erwartungstreu Schätzer für α_{12}

Allerdings verbleibt dann kein verfügbarer, unabhängiger (unkorrelierter) Schätzer für α_{12}
 und Signifikanztests sind nicht mehr möglich

"Mehrfache" Faktorentwürfe als Ausweg:

Simulation

Experimentieren

Simulation

Experimentieren

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

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

Ergebnisse:

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

Vorgehen:

Ermittelte Punktschätzer
für:

gemäß:

$$E[V_{qr}] = \mu_{qr} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_{qr}^{(k)}$$

$$VAR[V_{qr}] = \frac{\sigma^2}{n} = \frac{1}{n-1} \left\{ \sum_{k=1}^n (V_{qr}^{(k)})^2 - n \mu_{qr}^2 \right\}$$

$$VAR[\bar{v}_{qr}] = \frac{\sigma^2}{4} \quad q,r \in \{0,1\}$$

sowie für: gemäß:

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

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

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 $\tilde{v}_i' / (\sigma^2/n)$ $N(0,1)$ -verteilt
sowie $\tilde{v}_i' / (\sigma^2/n)$ 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{v}_i Summen von ("einigen") ZVn sind

Simulation

be/ja/2(5)

Experimentieren

9 - 15

Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 16

Wenn auch Interaktion als möglich angesehen,
Modell also

$$V(q,r) = \mu + \alpha_1 \cdot q + \alpha_2 \cdot r + \alpha_{12} \cdot q \cdot r + \epsilon(q,r)$$

dann ist ermittelbar
Punktschätzer
für:

gemäß:

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

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

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

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

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:
Mih72, Klei74, Klei82, Klei92, LaKe82, LaKe91

Simulation

Experimentieren

Simulation

Experimentieren

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

Simulation

be/ja/2

Experimentieren

9 - 19

Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 20

Alternativer Ansatz:

- Sei $\mu(\underline{w})$ "gedachterweise"
an einem Punkt $\underline{w}_0 = (w_{01}, w_{02}, \dots, w_{0k})$ des \underline{w} -Raumes
in eine Taylor-Reihe entwickelt, d.h.

$$\mu(\underline{w} - \underline{w}_0) = \mu(\underline{w}_0) + \sum_{i=1}^k \frac{\partial \mu}{\partial w_i}(\underline{w}_0) (w_i - w_{0i}) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial w_i \partial w_j}(\underline{w}_0) (w_i - w_{0i})(w_j - w_{0j}) + \dots$$

- 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 $\mu(\underline{w})$

Simulation

Experimentieren

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 ($v_i(\underline{w}); i=1, \dots, n$) zu schätzen
- Schätzung müßte "ziemlich präzise" sein,
um Basis iterativer Optimierung zu liefern:
benötigt Ableitungen!
- Ansatz offensichtlich extrem aufwendig

9.2.1 Entwürfe zur Anpassung von Modellen erster Ordnung

Modellform (standardmäßig: am Punkt \underline{w}_0)

$$V(\underline{w}) = \mu(\underline{w}_0) + \sum_{j=1}^k \frac{\partial \mu}{\partial w_j}(\underline{w}_0) (w_j - w_{0j}) + \epsilon$$

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

$$v_i = \mu(\underline{w}_0) + \sum_{j=1}^k \frac{\partial \mu}{\partial w_j}(\underline{w}_0) (w_{ij} - w_{0j}) + \epsilon_i \quad i=1, 2, \dots, n$$

wo ϵ_i Realisierung von

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

$$\underline{v}^T = (v_1, v_2, \dots, v_n) \quad \text{d.h.} \quad \underline{V}^T = (V_1, V_2, \dots, V_n)$$

$$\underline{w}^T = (w_{01}, w_{02}, \dots, w_{0k})$$

$$\underline{e}^T = (\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n) \quad \text{d.h.} \quad \underline{\epsilon}^T = (\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n)$$

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

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

Simulation

Experimentieren

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 $COV[\underline{e}]$

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

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

wo formal

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

notwendige Bedingung für Minimum ist

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \underline{w}} \right) = \underline{0}$$

Simulation

be/ja/2(4)

Experimentieren

9 - 23

Sie sind des weiteren (o.B.):
Schätzer mit der geringsten erzielbaren Varianz:
best linear unbiased estimators,
"BLUE"-Schätzer von \underline{w}

$W^T \cdot W$ ist Diagonalmatrix heißt

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

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

Entwürfe

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

Orthogonalentwürfe

das heißt

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

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

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

Sind diese Schätzer erwartungstreu?

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

Demnach:

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

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

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

Demnach:

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

Simulation

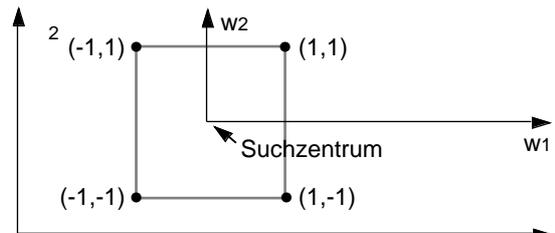
be/ja/2

Experimentieren

9 - 24

Beispiele für Orthogonalentwürfe:

- voller Faktorentwurf zweidimensionale Skizze:



(w_1, w_2) Ursprungskordinaten
(w_1, w_2) Koordinaten bezogen auf Suchzentrum, gemessen in Standardabweich'gen (Streuung)

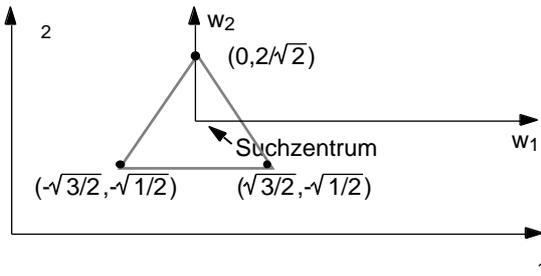
Experimente in allen $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ -Punkten des "designs"

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 $\underline{0}$)

$$V(\underline{w}) = 0 + \sum_{i=1}^k \beta_i w_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} w_i w_j +$$

bzw, wenn β_{ij}, β_{ji} - Terme für i j zusammengefaßt

$$V(\underline{w}) = 0 + \sum_{i=1}^k \beta_i w_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij} w_i w_j +$$

• Erinnerung Modelle 1. Ordnung:

- Experimente an n Punkten erklärbar

als $\underline{y} = W \cdot \underline{\beta} + \underline{e}$ Dimension: n

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

- Schätzer der Koeffizienten β_i, β_{ij} gewinnbar (und dann: erwartungstreu),

wenn n (mindestens) Anzahl zu schätzender Größen,

dort: $1 + k$ (n)

Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 27

Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 28

• 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"):

$$\underline{\beta} \sim (W^T W)^{-1} W^T \underline{y}$$

• 3^k -Entwürfe: n = 3^k

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

• und weitere

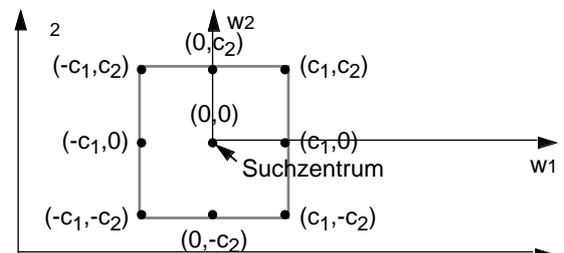
• 3^k -Entwürfe:

mit Experimenten an den Punkten

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

Entwürfe nicht orthogonal, orthogonalisierbar durch Variablentransformation

zweidimensionale Skizze:



1

• 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 ₂ ²	w ₁ w ₂

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

• central composite Entwürfe ("zentral kombiniert"):

mit Experimenten

an den Punkten des 2^k-Faktorentwurfs

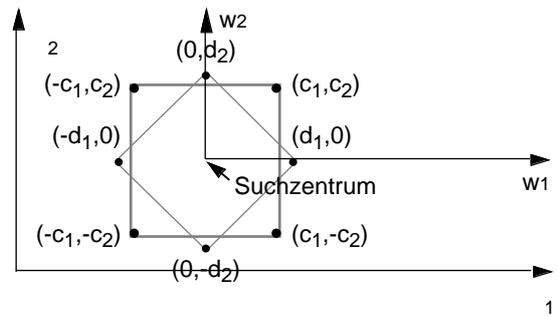
- je Faktor: w. {+c,-c}
- insgesamt: in allen Kombinationen

zusätzlich auf den Faktor-Achsen

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

erneut: Entwürfe nicht orthogonal, orthogonalisierbar

zweidimensionale Skizze:



Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 31

Simulation

be/ja/2(6)

Experimentieren

9 - 32

• 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

• 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")

Simulation

Experimentieren

Simulation

Experimentieren