

## 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" (zB unterschiedliches scheduling, Winter/Sommer)

- **quantitative Faktoren**

können einen **Wert**  
aus Kontinuum von Werten annehmen,  
(zB 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

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

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

Aus jeder Situation (bestimmtes Niveau für jeden Faktor)  
resultiert bestimmtes  $\mu$

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**  
(hier nicht detailliert betrachtet)

### 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  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12}$

- 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"

## 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
$V(0,0)$	$\mu$	$\sigma^2$	$v(0,0)$
$V(0,1)$	$\mu + \beta_2$	$\sigma^2$	$v(0,1)$
$V(1,0)$	$\mu + \beta_1$	$\sigma^2$	$v(1,0)$
$V(1,1)$	$\mu + \beta_1 + \beta_2$	$\sigma^2$	$v(1,1)$

Vorgehen:

Kombination der Ergebnisse

zur Gewinnung unkorrelierter Schätzer

für Modell-Parameter  $\beta_1, \beta_2$

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
$\tilde{1}$	-1/2	-1/2	1/2	1/2	1	2
$\tilde{2}$	-1/2	1/2	-1/2	1/2	2	2
$\tilde{}$	1/2	-1/2	-1/2	1/2	0	2
sowie $(\tilde{ })^2$					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  $\tilde{1}, \tilde{2}$  N(0, 2)-verteilt  
und  $\tilde{1} / \sqrt{2}, \tilde{2} / \sqrt{2}$  N(0,1)-verteilt  
sowie  $\tilde{1} / (\tilde{ })^2, \tilde{2} / (\tilde{ })^2$  t<sub>1</sub>-verteilt

und Tests auf "Signifikanz" von  $\mu_1, \mu_2$  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  $\mu_1, \mu_2$  bereits Summen von (je 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  $\mu_{12}$

Allerdings verbleibt dann

kein verfügbarer, unabhängiger (unkorrelierter)

Schätzer für  $\mu_2$

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:

$$E[V_{qr}]$$

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

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

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

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

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

sowie für:      gemäß:

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

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

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	$\tilde{\mu}_i / (\sigma^2/n)$	$N(0,1)$ -verteilt
sowie	$\tilde{\mu}_i / (\tilde{\sigma}^2/n)$	$t_{4n-4}$ -verteilt

und Tests auf "Signifikanz" von  $\mu_1, \mu_2$  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:

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

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

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

so daß Tests auf "Signifikanz" von  $\beta_{12}$  (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 (zB: 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

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

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 "numerische" 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

$$\begin{aligned} \underline{v}^T &= (v_1, v_2, \dots, v_n) & \text{dh } \underline{v}^T &= (V_1, V_2, \dots, V_n) \\ \underline{w}^T &= (0, w_1, w_2, \dots, w_k) \\ \underline{e}^T &= (e_1, e_2, \dots, e_n) & \text{dh } \underline{e}^T &= (1, 2, \dots, n) \end{aligned}$$

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"  $\underline{\tilde{x}}$  zu gewinnen  
 (Schätzer  $\underline{\tilde{x}}$  für  $\underline{x}$  zu ermitteln),  
 indem man die e. "insgesamt" minimiert  
 (hier:  $L :=$  Summe der quadrierten e. minimiert)

wo formal

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

notwendige Bedingung für Minimum ist

$$\left( -\frac{L}{\underline{\tilde{x}}} \right) = \underline{0}$$

das heißt

$$-2W^T \underline{y} + 2W^T W \underline{\tilde{z}} = 0$$

$$W^T W \underline{\tilde{z}} = W^T \underline{y}$$

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

ergeben sich die Schätzer

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

Sind diese Schätzer erwartungstreu?

$$E[\underline{\tilde{z}}] = E[(W^T W)^{-1} W^T \underline{y}]$$

$$= E[(W^T W)^{-1} W^T (W \underline{z} + \underline{e})]$$

$$= \underline{z} + E[(W^T W)^{-1} W^T \underline{e}]$$

$$= \underline{z}$$

Demnach:

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

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

$$\text{COV}[\underline{\tilde{z}}] = E[(\underline{\tilde{z}} - \underline{z})(\underline{\tilde{z}} - \underline{z})^T]$$

$$= \sigma^2 (W^T W)^{-1}$$

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  $\mu$

$W^T \cdot W$  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 )

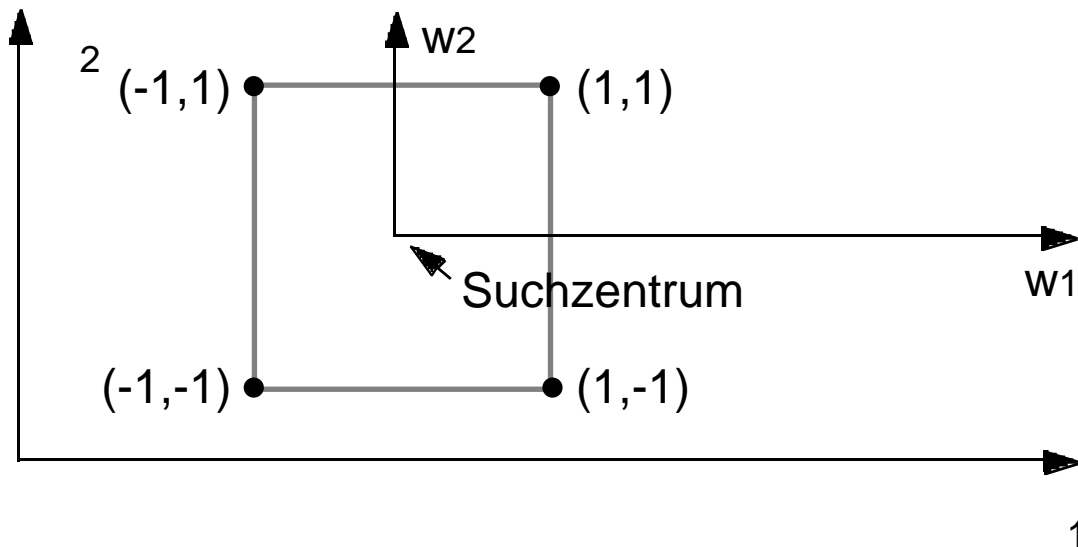
Entwürfe

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

## Orthogonalentwürfe

## Beispiele für Orthogonalentwürfe:

- voller Faktorentwurf  
zweidimensionale Skizze:



$(1, 2)$  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"

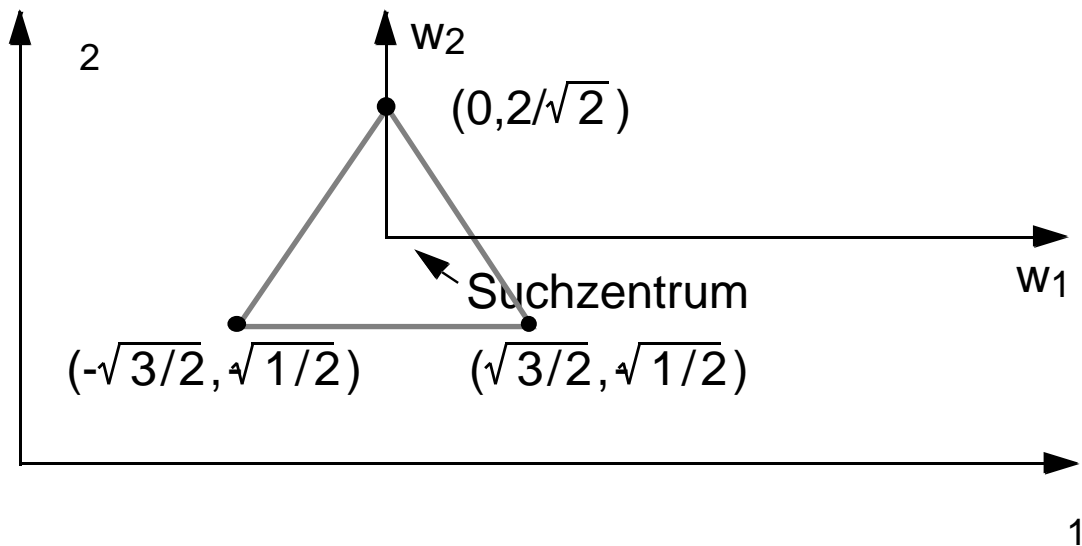
Bei Einzelexperimenten (k Faktoren)

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  $\underline{Q}$ )

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

bzw, wenn  $ij, ji$  - Terme für  $i, j$  zusammengefaßt

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

- Erinnerung Modelle 1. Ordnung:
  - Experimente an  $n$  Punkten erklärbar  
als  $\underline{y} = W \cdot \underline{x} + \underline{e}$  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,  
  
dort:  $1 + k$  (  $n$ )

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

$k+1$  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"):

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

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

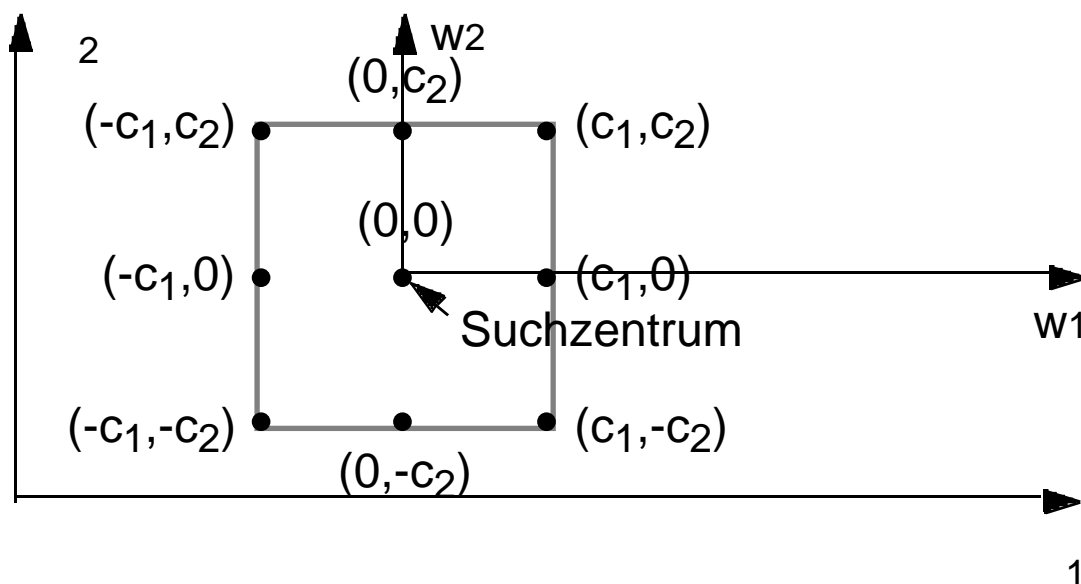
- $3^k$ -Entwürfe:

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
	$w_1$	$w_2$	$w_1^2$	$w_2^2$	$w_1 w_2$

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

- central composite Entwürfe ("zentral kombiniert"):

mit Experimenten

an den Punkten des  $2^k$ -Faktorentwürfs

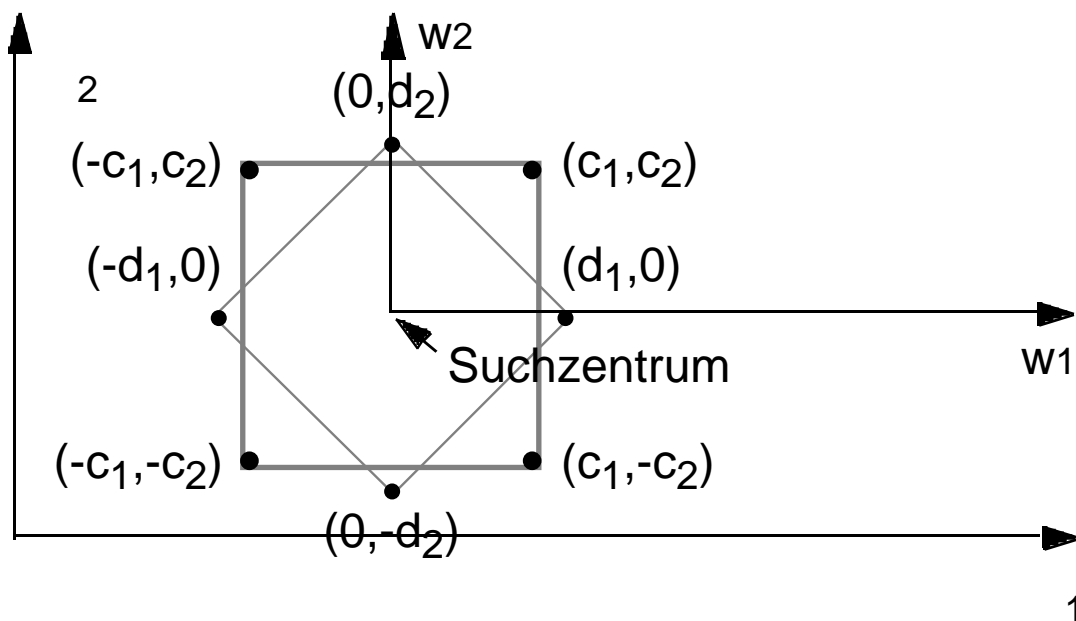
- je Faktor: w.  $\{+c., -c.\}$
- insgesamt: in allen Kombinationen

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")