

8. Experimentieren mit Simulatoren

Wieder Erinnerung Vorlesung Modellierung und Simulation

Ziel der Systemanalyse: Für ein gegebenes System

- das auf unterschiedliche Arten konfiguriert, organisiert, betrieben werden kann (“Arten” werden durch Werte der kontrollierbaren Größen $w_C \in W_C$ spezifiziert)
- das weiterhin beeinflusst wird durch nicht beeinflussbare Werte (dargestellt durch Werte der unkontrollierbaren Größen $w_U \in W_U$)
- das auf Situationen (w_C, w_U) mit unterschiedlichem Verhalten $w_P = f(w_C, w_U)$ reagiert

soll das Systemverhalten bzgl. eines Leistungsmaßes

$v = g(w_P) = g(f(w_C, w_U))$ beurteilt werden

Typische Fragestellungen sind

- “was-wenn” Fragen oft bzgl. der unkontrollierbaren Größen U
- Verbesserung, Optimierung des Systems meist hinsichtlich der kontrollierbaren Größen C

Simulator ist ein numerisches Modell, d.h.

- g ist nicht explizit dargestellt
- sondern nur Werte von v für bestimmte Situationen (w_C, w_U) ermittelbar

Methodik der Vorgehensweise:

- "Setzen" der Situation (w_C, w_U)
- "Ermitteln" der zugehörigen Werte von v

⇒ **Experimentieren** mit dem Simulator

⇒ **Design von Experimenten** wird benötigt
(Plan, welche Experimente durchzuführen sind)

Beim Experimentieren (mit Simulatoren) existiert nur noch

- eine Menge von Einflussgrößen $E = C \cup U$
- charakterisiert durch Werte $w \in W_E$

Simulator ermittelt (punktweise) $v = g(w)$

Durchführung von Experimenten

übliches Vorgehen in den Naturwissenschaften

Beispielanwendung	Eingaben	Ausgaben
Chemische Reaktion	Druck Temperatur Katalysator	Menge Qualität
Anbau von Tomaten	Dünger Wasser Saatgut PH-Wert des Bodens	Menge Qualität
Simulation eines Fertigungssystems	Anzahl Maschinen Zuverlässigkeit Auswahlstrategien Größe der Puffer	Durchsatz Auslastungen Verweilzeiten

Beim Experimentieren werden

- gewisse Komponenten von w fest eingestellt
- andere Komponenten von w systematisch verändert

Veränderliche Komponenten heißen **Faktoren**

Man unterscheidet

- **qualitative Faktoren**

- können ein Niveau aus einer endlichen Menge von Niveaus annehmen
- sind nicht zwingend geordnet (z.B. unterschiedliche Schedulingstrategien, Winter/Sommer)

- **quantitative Faktoren**

- können einen Wert aus einem Kontinuum von Werten annehmen (z.B. Regenmenge, Geschwindigkeit)

Größen mit diskretem Wertevorrat können als

quantitative oder qualitative Größen behandelt werden
(z.B. indem nur der größte und kleinste Wert betrachtet wird)

Unterschiede zwischen simulativen und physikalischen
Experimenten:

- Im Prinzip sind alle Größen kontrollierbar
- Zufall ist einstellbar via ZZ-Generatoren
- Experimente sind beliebig wiederholbar

System	Faktoren	quant.	qual.	kont.	unkont.	Resultate
Supermarkt	Ankunftszeit	X			X	Verweilzeit
	Bedienzeit	X		X?		Schlangenlänge
	Anzahl Kassen	X?	X?	X		Kassenauslastung
	Expresskasse		X	X		
Fertigungs- linie	Anzahl Maschinen	X?	X?	X?	X?	Durchsatz
	Abfertigungsdiszip.		X	X?	X?	Zeit im System
	Puffergöße	X?	X?	X?	X?	Auslastung
	Maschinengruppierung		X	X?	X?	Gewinn/Verlust
	Geschw. Förderband	X		X?	X?	
Computersystem	Anzahl Terminals	X?	X?	X?	X?	Antwortzeit
	Plattengröße	X		X?	X?	CPU Auslastung
	CPU Geschwindigkeit	X		X?	X?	Durchsatz
	Benutzerzahl	X?	X?		X?	Verfügbarkeit
	Schedulingverfahren		X	X		
Kommunikations- netz	Ankunftsrate	X			X	Verzögerungszeit
	Nachrichtengröße	X			X	Durchsatz
	Anzahl Knoten	X		X?	X?	Verfügbarkeit
	Anzahl Kanten	X		X?	X?	Zuverlässigkeit
	Leistungskapazität	X		X?	X?	
	Protokoll		X	X?	X?	
Einkaufs- strategie	Auftragsrate	X			X	Umsatz
	Auftragsgröße	X			X	Lagerkosten
	Lieferzeit	X		X?	X?	Bestellkosten
	Bestellzeiten	X		X		verlorene Aufträge
	Bestellmengen	X		X		Gewinn/Verlust
	Inventurfrequenz	X		X		
	max. Lagerbestand	X		X?	X?	

Wir verwenden stochastische Simulatoren und erhalten Resultate

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

mit

t^* Zeitpunkt der Resultatbeobachtung

w Werte der Einflussgrößen

s Saatwert(e) der ZZ-Generatoren

Resultatwert v ist als Realisierung einer ZV V aufzufassen

Damit

- variiert v für festes w bei unterschiedlichen s

Verteilung hängt von w und t^* ab

Es tauchen Fragen auf

- Welche Situationen w sind zu untersuchen?
- Wieviele Replikationen sind für ein w zu beobachten?
- Was kann man bzgl. des Vergleichs von Situationen w und w' aussagen (Überlegenheit, Optimalität)?
- Wie muss man w ändern, um v zu optimieren?

Fragen dieser Art werden beantwortet durch

Experimententwurf und Experimentanalyse

Auch hier wieder bescheideneres Ziel:

Statt Bestimmung der Verteilung von V lediglich Erwartungswert in Abhängigkeit von w bestimmen

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

und unter entsprechenden Modellannahmen

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

mit

$\mu(w)$ deterministische Funktion

$\epsilon(w)$ "schwankende Größe" die "Zufallseinflüsse" erfasst

(also ZV!)

Es wird angenommen

- $E[\epsilon(w)] = 0$, Erwartungswert unabhängig von w und verschwindend
- $VAR[\epsilon(w)] = \sigma_\epsilon^2$ Varianz unabhängig von w
(nicht automatisch gesichert)
- $COV[V(w_i), V(w_j)] = 0$ für alle untersuchten Paare i, j
paarweise Unkorreliertheit
(nicht automatisch gesichert)

Im folgenden betrachten wir

8.1 Experimententwürfe für qualitative Faktoren

8.2 Experimententwürfe für quantitative Faktoren

8.1 Experimententwürfe für qualitative Faktoren

Allgemeines Problem:

k qualitative Faktoren

jeder mit gewisser (i.a. unterschiedlicher) Anzahl von möglichen Niveaus (sei n_i Anzahl der Niveaus von Faktor i)

Einfaches Design erfordert

$$n = 1 + \sum_{i=1}^k (n_i - 1)$$

Experimente (ein Faktor wird pro Experiment verändert)

Problem:

Einfluss der einzelnen Faktoren nicht unabhängig

(z.B. größerer Hauptspeicher und schnellere CPU)

⇒ einfaches Design führt zu falschen Rückschlüssen

Vollständiges Design erfordert

$$n = \prod_{i=1}^k n_i$$

Experimente (alle Kombinationen werden untersucht)

Aber Aufwand wächst sehr schnell mit mehreren Faktoren und/oder Niveaus

Zur Aufwandsreduktion:

- Anzahl Niveaus reduzieren (oft reichen 2)
- Anzahl Faktoren reduzieren (nur signifikante)
- Teilentwürfe verwenden

Was können wir erwarten?

In der Simulation variiert die Beobachtungsgröße V

- mit Veränderung des Niveaus jedes Faktors
- zusätzlich durch statistische Schwankungen (erfasst durch ε)

Zentrale Frage:

- Beeinflusst die Veränderung des Faktor-Niveaus die Beobachtungen signifikant?

Anders ausgedrückt:

- Wie kann man Verhaltensunterschiede auf Grund von Faktoränderungen von stochastischen Schwankungen unterscheiden?

Fragen dieser Art werden üblicherweise behandelt mit Methoden der

Varianzanalyse, analysis of variance, ANOVA, ...

Zentraler Vorteil der Simulation:

Im Prinzip kann jedes Experiment beliebig oft wiederholt werden

⇒ stochastische Schwankungen der einzelnen Experimente sind beobachtbar

⇒ Konfidenzintervalle sind ermittelbar

Einfachste Version:

- Ein Faktor mit 2 Niveaus (-1,+1)
- Vorgehensweise:
 - Gewinne zwei Stichproben
 - * $v_1 = (v_{1,1}(-1), v_{1,2}(-1), \dots, v_{1,k_1}(-1))$
 - * $v_2 = (v_{2,1}(+1), v_{2,2}(+1), \dots, v_{2,k_2}(+1))$
 - Schätze μ_{v_i} und σ_{v_i} ($i = 1, 2$)
 - Teste $\mu_{v_1} \neq \mu_{v_2}$ bzw. $\mu_{v_1} < / > \mu_{v_2}$
- Verfahren (siehe Kap. 2)
 - Vergleich der Konfidenzintervalle
 - * Welch Verfahren
 - * gepaarte Stichproben
 - Testverfahren
 - * Zwei-Stichproben Test
 - * Mann-Whitney U-Test
 - * Wilcoxon Matched Pairs Signed Rank Test
- Ergebnis:
 - Signifikanz des Faktors bzgl. des Systemverhaltens

Nächst komplexere Variante:

- 2 Faktoren w_1 und w_2
- mit jeweils 2 Niveaus hier dargestellt als $+1$ oder -1
- ein Experiment pro Faktorkombination (erst einmal)
- und beobachteter Ergebnisgröße $v(w_1, w_2)$
($w_1, w_2 \in \{-1, +1\}$)

Annahme

$$v(w_1, w_2) = q_0 + q_1 \cdot w_1 + q_2 \cdot w_2 + q_{12} \cdot w_1 \cdot w_2 + \varepsilon$$

Störung ε unabhängig von w_1 und w_2

mit fester Varianz σ_ε und $E[\varepsilon] = 0$

Beispiel:

Leistung eines PC in Million Instructions per Second (MIPS) bei

- Cachegröße (w_1) 1 Kbyte (-1) oder 2 Kbytes ($+1$)
- Hauptspeicher (w_2) 4 Mbytes (-1) oder 16 Mbytes ($+1$)

Resultate der Experimente

Experiment	w_1	w_2	$v(w_1, w_2)$
1	-1	-1	15
2	1	-1	25
3	-1	1	45
4	1	1	75

Berechnung der Werte für q_1 , q_2 und q_{12} :

Offensichtlich gilt

$$\begin{aligned} v(-1, -1) &= v_1 = q_0 - q_1 - q_2 + q_{12} \\ v(1, -1) &= v_2 = q_0 + q_1 - q_2 - q_{12} \\ v(-1, 1) &= v_3 = q_0 - q_1 + q_2 - q_{12} \\ v(1, 1) &= v_4 = q_0 + q_1 + q_2 + q_{12} \end{aligned}$$

und damit gilt

$$\begin{aligned} q_0 &= \frac{1}{4} (v_1 + v_2 + v_3 + v_4) \\ q_1 &= \frac{1}{4} (-v_1 + v_2 - v_3 + v_4) \\ q_2 &= \frac{1}{4} (-v_1 - v_2 + v_3 + v_4) \\ q_{12} &= \frac{1}{4} (v_1 - v_2 - v_3 + v_4) \end{aligned}$$

Werte sind einfach berechenbar mit Vorzeichentabelle

all	w_1	w_2	$w_1 w_2$	v_i
1	-1	-1	1	15
1	1	-1	-1	45
1	-1	1	-1	25
1	1	1	1	75
160	80	40	20	Σ
40	20	10	5	$\Sigma/4$

Multiplikation der Matrixspalten mit dem Vektor liefert
Ergebnisse der vorletzten Zeile

Letzte Zeile beinhaltet Werte für q_0 , q_1 , q_2 und q_{12} :

$$v(w_1, w_2) = 40 + 20 \cdot w_1 + 10 \cdot w_2 + 5 \cdot w_1 \cdot w_2 + \varepsilon$$

k Faktoren mit jeweils 2 Niveaus erfordern 2^k Experimente

Berechnung wie vorher aus der Vorzeichentabelle

Erweiterung des Beispiels um dritten Faktor:

w_3 Anzahl Prozessoren 1 (Niveau -1) oder 2 (Niveau 1)

	w_1	w_2	w_3	w_1w_2	w_1w_3	w_2w_3	$w_1w_2w_3$	v_i
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	14
1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	22
1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	10
1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	34
1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	46
1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	58
1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	50
1	1	1	1	1	1	1	1	86
320	80	40	160	40	16	24	9	Σ
40	10	5	20	5	2	3	1.1	$\Sigma/8$

mit dem Ergebnis

$$v(w_1, w_2) = 40 + 10w_1 + 5w_2 + 20w_3 + 5w_1w_2 + 2w_1w_3 + 3w_2w_3 + 1.1w_1w_2w_3 + \varepsilon$$

Probleme des bisherigen Vorgehens:

- Nur 2 Niveaus pro Faktor
 - u.U. Rückführung auf mehrere 2 Niveau Probleme \Rightarrow sehr viele Experimente
- Keine Konfidenzintervalle sondern nur "Punktschätzer"
 - zur Bestimmung von Konfidenzintervallen müssen Experimente wiederholt werden

Faktordesign mit Wiederholungen

r Experimente pro Faktorkombination

(also insgesamt $r \cdot 2^k$ Experimente)

Wir betrachten den Fall von 2 Faktoren ($k = 2$)

Sei v_{w_1, w_2}^i Ergebnis des i -ten Experiments

mit Niveaus w_1 und w_2

Annahmen:

$$V(w_1, w_2) = q_0 + q_1 \cdot w_1 + q_2 \cdot w_2 + q_{12} \cdot w_{12} + \varepsilon_{w_1, w_2}$$

$$E[\varepsilon_{w_1, w_2}] = 0$$

$$VAR[\varepsilon_{w_1, w_2}] = \sigma_\varepsilon^2$$

$V(w_1, w_2)$ normalverteilt

Punktschätzer für die einzelnen Größen

Größe	Punktschätzer
$E[V(w_1, w_2)]$	$\tilde{v}_{w_1, w_2} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{w_1, w_2}^i$
$VAR[V(w_1, w_2)]$	$\tilde{\sigma}_{w_1, w_2}^2 = \frac{1}{r-1} \sum_{i=1}^r (v_{w_1, w_2}^i - \tilde{v}_{w_1, w_2})^2$
$VAR[\varepsilon_{w_1, w_2}]$	$\tilde{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{1}{4} \sum_{w_1, w_2 \in \{-1, 1\}} \tilde{\sigma}_{w_1, w_2}^2$

und somit auch

Größe	Punktschätzer
\tilde{q}_0	$\frac{1}{4} (\tilde{v}_{-1, -1} + \tilde{v}_{1, -1} + \tilde{v}_{-1, 1} + \tilde{v}_{1, 1})$
\tilde{q}_1	$\frac{1}{4} (-\tilde{v}_{-1, -1} + \tilde{v}_{1, -1} - \tilde{v}_{-1, 1} + \tilde{v}_{1, 1})$
\tilde{q}_2	$\frac{1}{4} (-\tilde{v}_{-1, -1} - \tilde{v}_{1, -1} + \tilde{v}_{-1, 1} + \tilde{v}_{1, 1})$
\tilde{q}_{12}	$\frac{1}{4} (\tilde{v}_{-1, -1} - \tilde{v}_{1, -1} - \tilde{v}_{-1, 1} + \tilde{v}_{1, 1})$

Falls die Hypothese $V(w_1, w_2)$ normalverteilt gilt,

dann sind unter der Hypothese $\tilde{q}_i = 0$

- die Schätzer \tilde{q}_i sind $N(0, \sigma_\varepsilon^2/4r)$ -verteilt
- und $\tilde{q}_i/\sqrt{(\sigma_\varepsilon^2/4r)}$ ist $N(0, 1)$ -verteilt
- sowie $\tilde{q}_i/\sqrt{(\tilde{\sigma}_\varepsilon^2/4r)}$ ist t_{4r-4} -verteilt

Damit kann mit Hilfe der t -Verteilung getestet werden, ob \tilde{q}_i signifikant von 0 verschieden

Falls dies nicht der Fall ist, hat Faktor i bzw Faktorkombination i, j keinen signifikanten Einfluss auf das Resultat

Konfidenzintervalle für \tilde{q}_i ergeben sich aus

$$\left[\tilde{q}_i - t_{[1-\alpha/2, 4r-4]} \cdot \sqrt{\tilde{\sigma}_\varepsilon^2/4r}, \tilde{q}_i + t_{[1-\alpha/2, 4r-4]} \cdot \sqrt{\tilde{\sigma}_\varepsilon^2/4r} \right]$$

In ähnlicher Form können Konfidenzintervalle für \tilde{v}_{w_1, w_2} bestimmt werden

Vorgehen ist auf k Faktoren übertragbar

Dabei insbesondere beachten,

ob Kombinationen vieler Faktoren
signifikanten Einfluss haben

⇒ Reduktion der Anzahl der Faktoren reduziert
die Anzahl der notwendigen Experimente

Beispiel

(Fortführung des Beispiels von Folie 10)

3 Replikationen für jede Faktorkombination

Ergebnisse:

all	w_1	w_2	$w_1 w_2$	v_i	\bar{v}_i
1	-1	-1	1	(15, 18, 12)	15
1	1	-1	-1	(45, 48, 51)	48
1	-1	1	-1	(25, 28, 19)	24
1	1	1	1	(75, 75, 81)	77
164	86	38	20		Σ
41	21.5	9.5	5		$\Sigma/4$

Liefert die Regressionsgleichung:

$$v(w_1, w_2) = 41 + 21.5 \cdot w_1 + 9.5 \cdot w_2 + 5 \cdot w_1 \cdot w_2 + \varepsilon$$

$$\tilde{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{102}{2^2 \cdot (3-1)} = \frac{102}{8} = 12.75$$

$$\sqrt{\frac{\tilde{\sigma}_\varepsilon^2}{12}} = \sqrt{\frac{12.75}{12}} = 1.03$$

Wert der t -Verteilung mit 8 Freiheitsgraden ($\alpha = 0.9$): 1.86

Konfidenzintervalle: $\tilde{q}_i \pm 1.92$

$$q_0 : (39.08, 42.91)$$

$$q_A : (19.58, 23.41)$$

$$q_B : (7.58, 11.41)$$

$$q_{AB} : (3.08, 6.91)$$

⇒ kein Konfidenzintervall enthält 0

⇒ alle Faktoren signifikant verschieden von 0

Beispiel:

Zwei Prozessoren (Faktor w_1) und
zwei Benchmarks (Faktor w_2)

- Gemessen wird die Ausführungszeit in Sekunden
- Jedes Experiment wird drei mal wiederholt

Es ergibt sich folgende Tabelle

all	w_1	w_2	$w_1 w_2$	v_i	\bar{v}_i
1	-1	-1	1	(85.1, 79.5, 147.9)	104.17
1	1	-1	-1	(0.891, 1.047, 1.072)	1.003
1	-1	1	-1	(0.955, 0.933, 1.122)	1.003
1	1	1	1	(0.0148, 0.0126, 0.0118)	0.013
106.18	-104.15	-104.15	102.17		Σ
26.55	-26.04	-26.04	25.54		$\Sigma/4$

mit dem Ergebnis

$$v(w_1, w_2) = 26.55 - 26.04 \cdot w_1 - 26.04 \cdot w_2 + 25.54 \cdot w_1 \cdot w_2 + \varepsilon$$

und den Konfidenzintervallen

$$\tilde{q}_i \pm 10.2$$

Überprüfung der Residuen

w_1	w_2	$w_1 w_2$	$v_1 -$ $v(w_1, w_2)$	$v_2 -$ $v(w_1, w_2)$	$v_3 -$ $v(w_1, w_2)$	$\bar{v} -$ $v(w_1, w_2)$
-1	-1	1	-19.07	-24.67	43.73	0.00
1	-1	-1	-0.119	0.037	0.062	-0.007
-1	1	-1	-0.055	-0.077	0.112	-0.007
1	1	1	0.005	0.003	0.002	0.003

- Breite Konfidenzintervalle
- Große Residuen für große Antwortzeiten
(Experimentserie 1)

⇒ Zumindest für die Faktorkombination -1, -1 ist das berechnete Modell nur eine schlechte Approximation, da die Werte der Antwortzeiten sehr stark streuen

Überprüfung der Annahmen:

1. Fehler sind unabhängig
2. Fehler sind additiv
3. Fehler sind normal verteilt
4. Fehler haben konstante Varianz
5. Effekte der Faktoren sind additiv

Ersten 4 Annahmen kann man durch graphische Darstellung der Fehler mit visueller Überprüfung und mit statistischen Tests überprüfen

Hier betrachtet 5.: Annahme bei der Modellerstellung
Zusammenhang zwischen Faktoren lässt sich durch eine
lineare Regression darstellen!

Entspricht dies der Realität?

Am besten zu beantworten aus der Kenntnis
des realen Systems

Unser Beispiel: Programme werden auf Prozessoren abgearbeitet

Einige Szenarien

1. Neuer Prozessor um Faktor x schneller \Rightarrow
Antwortzeit reduziert sich um Faktor x
2. Neuer Algorithmus ist um Faktor y schneller \Rightarrow
Antwortzeit reduziert sich um Faktor y
3. Kombination aus 1. und 2. \Rightarrow
Antwortzeit reduziert sich um Faktor $x \cdot y$

Also offensichtlich multiplikativer und
nicht additiver Zusammenhang

Wie kann man dies in unser Modell einbauen?

Naheliegende Idee: Logarithmus verwenden

$$\log(V(w_1, w_2)) = q_0 + q_1 \cdot w_1 + q_2 \cdot w_2 + q_{12} \cdot w_1 w_2 + \varepsilon_{w_1, w_2}$$

oder

$$V(w_1, w_2) = 10^{q_0} \cdot 10^{q_1 w_1} \cdot 10^{q_2 w_2} \cdot 10^{q_{12} w_1 w_2} \cdot 10^{\varepsilon_{w_1, w_2}}$$

auf Basis der Werte von $\log(v_i)$ lassen sich mit dem linearen
Ansatz die Parameter schätzen

all	w_1	w_2	$w_1 w_2$	$\log(v_i)$	$\overline{\log(v_i)}$
1	-1	-1	1	(1.93, 1.90, 2.17)	2.00
1	1	-1	-1	(-0.05, 0.02, 0.03)	0.00
1	-1	1	-1	(-0.02, -0.03, 0.05)	0.00
1	1	1	1	(-1.83, -1.90, -1.93)	-1.89
0.11	-3.89	-3.89	0.11		Σ
0.03	-0.97	-0.97	0.03		$\Sigma/4$

Mit dem Ergebnis

$$v(w_1, w_2) = 10^{0.03} \cdot 10^{-0.97w_1} \cdot 10^{-0.97w_2} \cdot 10^{0.03w_1w_2} \cdot 10^\varepsilon$$

bzw.

$$v(w_1, w_2) = 1.07 \cdot 0.107^{w_1} \cdot 0.107^{w_2} \cdot 1.07^{w_1w_2} \cdot 10^\varepsilon$$

und den Konfidenzintervallen

$$\tilde{q}_i \pm 0.09$$

Ergebnis zeigt:

- Durchschnittlicher Benchmark benötigt auf durchschnittlichem Prozessor 1.07 Sekunden
- Prozessor 1 ist 9 mal schneller als ein durchschnittlicher Prozessor und 81 mal schneller als Prozessor 2
- Benchmark 1 beinhaltet 81 mal mehr Operationen als Benchmark 2
- Interaktion zwischen Benchmark und Prozessor ist nicht signifikant von 0 verschieden und kann deshalb vernachlässigt werden

Probleme beim Faktordesign:

- Regressionsmodell muss nicht die Realität widerspiegeln
- Interpolation zwischen - und + gefährlich
(weitere Linearitäts-Annahme)
- Extrapolation ebenfalls gefährlich
(also - und + Werte nicht zu weit auseinanderliegend wählen)
- Aufwand kann immens sein

Beispiel:

11 Faktordesign mit 5 Replikationen und
1 Minute Laufzeit per Experiment:

- $2^{11} \cdot 5 = 2048 \cdot 5 = 10240$ Experimente
- knapp 170.67 Stunden ≈ 7 Tage Laufzeit
- Reale Problem umfassen oft über 100 Faktoren

⇒ Wichtige von unwichtigen Faktoren/Faktorkombinationen
unterscheiden

⇒ Andere Arten des Faktordesigns

2^{k-p} Faktordesigns

Für große k ist ein volles Faktordesign aufwändig oder unmöglich

⇒ Nur 2^{k-p} der 2^k möglichen Simulationen durchführen
($1/2^p$ der möglichen Experimente)

Welche Experimente müssen durchgeführt werden,
um die notwendigen Parameter des Modells schätzen zu können?

Also insbesondere die Parameter, die den Einfluss einzelner oder weniger Faktoren berücksichtigen

Vorgehen: (die einfachste Methode!)

Erstelle eine Tabelle für ein 2^{k-p} Design und ersetze anschließend die Parameter in der Tabelle durch die zu berechnenden Parameter

Beispiel 2^{4-1} Design

Exp.	w_1	w_2	w_3	w_1w_2	w_1w_3	w_2w_3	$w_1w_2w_3$ → w_4
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	1	1
3	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4	1	1	-1	1	-1	-1	-1
5	-1	-1	1	1	-1	-1	1
6	1	-1	1	-1	1	-1	-1
7	-1	1	1	-1	-1	1	-1
8	1	1	1	1	1	1	1

Berechnung der Parameter aus der Tabelle wie bekannt

Mit Hilfe des beschriebenen Designs können folgende Parameter berechnet werden:

$$q_1, q_2, q_3, q_4, q_{12}, q_{13}, q_{23}$$

Was passiert bei der Berechnung von q_{123} ?

nach unserem Berechnungsschema ergibt sich:

$$q_{123} = \frac{-v_1 + v_2 + v_3 - v_4 + v_5 - v_6 - v_7 + v_8}{8} = q_4$$

damit beschreibt q_4 eigentlich den Effekt von

$$w_4 \text{ und } w_1 w_2 w_3$$

(Man sagt im Englischen die Faktoren sind *confounded*)

Annahme: Effekt $w_1 w_2 w_3$ ist vernachlässigbar (d.h. $q_{123} = 0$)

$\Rightarrow \tilde{q}_4$ ist erwartungstreuer Schätzer für q_4

Weitere Beziehungen dieser Art

$q_1 = q_{234}$	$q_2 = q_{134}$	$q_3 = q_{124}$	$q_{12} = q_{34}$
$q_{13} = q_{24}$	$q_{23} = q_{14}$	$q_{123} = q_4$	$q_0 = q_{1234}$

Verschiedene 2^{k-p} Designs beschreiben

unterschiedliche Abhängigkeiten!

Damit ist auch nicht jedes Design *gleich gut*!

Problem im Beispiel:

Zweiwege-Abhängigkeiten werden durch identische Faktoren beschrieben z.B. $q_{12} = q_{34}$

(Annahme Abhängigkeiten der Ordnung 3 vernachlässigbar hilft nicht weiter)

Quantifizierung eines 2^{k-p} Designs:

- Auflösung eines Designs ist eine natürliche Zahl, die als römische Ziffer als Subskript an das Design geschrieben wird
- Auflösung a garantiert, dass Effekte der Ordnung x und y mit $x + y < a$ durch unabhängige Faktoren beschrieben werden (nicht *confounded* sind)

2_{IV}^{k-p} Design (wie im Beispiel) stellt sicher, dass

- Effekte der Ordnung 1 und 2 durch unabhängige Faktoren beschrieben werden,
- nicht aber Faktoren der Ordnung 2 und 2

⇒ Zur Abschätzung der Haupteffekte reicht Design der Ordnung *III*, zur Abschätzung der Zweiwege-Abhängigkeiten ist Design der Ordnung *V* notwendig

Faustregeln:

- q_0 sollte nur mit Parametern höherer Ordnung (die wahrscheinlich wenig Einfluss haben) zusammenhängen
- Design höherer Ordnung ist in der Regel besser als Design niedriger Ordnung

Weitere Faustregeln aus den Daten plus Interpretation ableiten

In realen Modellen kommen oft sehr viele Faktoren vor
(u.U. mehrere hundert)

⇒ Anzahl Faktoren reduzieren (*screening of factors*)

- Gruppenbildung von Faktoren
- Schrittweise Hinzunahme von Faktoren bis Regression “gut genug”
- Balancierte Designs (gleiche Anzahl + und - pro Spalte)
- Zufällige balancierte Designs
- ...

Zahlreiche Ansätze in der Literatur vorhanden

3.2 Experimententwürfe für quantitative Faktoren

Sei $\underline{w} = (w_1, \dots, w_k)$ Vektor der Faktorwerte

jedes $w_i \in \mathbb{R}$

Auch hier gilt wieder $V(\underline{w}) = g(\underline{w}) + \varepsilon(\underline{w})$

mit den zusätzlichen Annahmen

- $E[V(\underline{w})] = g(\underline{w})$ als kontinuierliche, in allen Komponenten von \underline{w} partiell differenzierbare Funktion angenommen
- $E[\varepsilon(\underline{w})] = 0$
- $VAR[\varepsilon(\underline{w})] = \sigma_\varepsilon^2$
- $COV[\varepsilon(\underline{w}^i), \varepsilon(\underline{w}^j)] = 0$

Man nennt $g(\underline{w})$

Antwortfunktion, response function/response surface

Typische Fragestellungen:

- wie ändert sich das Ergebnis, wenn sich die Eingaben ändern?
- was ist ein “optimaler” Satz von Faktorwerten (d.h. für welche(s) \underline{w} ist $g(\underline{w})$ minimal/maximal)?

Im zweiten Fall:

Optimierung von $g(\underline{w})$ bzgl. w_1, \dots, w_k

Möglicher Lösungsansatz:

- Anwendung bekannter deterministischer, iterativer Optimierungstechniken
 - dazu muss für verschiedene \underline{w} jeweils $g(\underline{w})$ aus einer Stichprobe geschätzt werden
 - Schätzung muss “ziemlich präzise” sein, um Basis iterativer Optimierungsmethoden zu liefern (i.a. werden auch die Ableitungen an der Stelle \underline{w} benötigt)
- \Rightarrow sehr aufwändiger Ansatz

Alternatives Vorgehen:

Entwicklung von $g(\underline{w})$ an einem Punkt $\underline{\alpha}$ als Taylor-Reihe, d.h.

$$g(\underline{w} - \underline{\alpha}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i \cdot (w_i - \alpha_i) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} \cdot (w_i - \alpha_i) \cdot (w_j - \alpha_j) + \dots$$

die Parameter β_{\dots} hängen von $\underline{\alpha}$ ab

(hier nicht direkt dargestellt!)

Man versucht, Koeffizienten β_{\dots} aus einfachen Experimenten zu schätzen

\Rightarrow Verhaltensapproximation um einem Punkt im Parameterraum

Praktisch verwendete Modelle

- Modell erster Ordnung

(lineare lokale Approximation)

- nur lineare Terme werden einbezogen
(d.h. nur Werte β_j werden geschätzt)
- Multiple lineare Regression
- Werte für β_j werden so bestimmt, dass die Summe der Fehlerquadrate $\sum_{i=1}^r (v(\underline{w}^i) - g(\underline{w}^i))^2$ minimiert wird, wobei r Experimente durchgeführt werden und $v(\underline{w}^i)$ das beobachtete Ergebnis des i -ten Experiments ist
- verwendbar als Basis für Gradientenmethoden
("hill climbing")
- zur groben Optimierung
(lokale Extrema, Sattelpunkte)

- Modelle zweiter Ordnung

(lineare und quadratische Approximation)

- lineare und quadratische Terme werden einbezogen (d.h. Werte β_i und β_{ij} werden geschätzt)
- auch hier wieder Wahl der Parameter, so dass Summe der Abstandsquadrate minimal
- verwendbar zur verfeinerten Optimierung

In beiden Fällen werden lokale Approximations-Modelle der Antwortfunktion benutzt

Anpassung von Modellen erster Ordnung

Entwicklung der Taylor-Reihe standardmäßig im Punkt $\underline{0}$

$$g(\underline{w}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i \cdot w_i$$

r Experimente liefern r Resultate v^i

Experimente werden potentiell an unterschiedlichen Punkten \underline{w}^i durchgeführt

gesuchte Darstellung

$$v^i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j \cdot w_j^i + e_i \text{ für } i = 1, \dots, r$$

e_i ist eine Realisierung von ε

Kompakte Darstellung in Vektor-Matrix Notation

$$\underline{v}^T = (v^1, \dots, v^r)$$

$$\underline{\beta}^T = (\beta_0, \dots, \beta_k)$$

$$\underline{e}^T = (e_1, \dots, e_r)$$

$$\underline{W} = \begin{pmatrix} 1 & w_1^1 & \dots & w_k^1 \\ 1 & w_1^2 & \dots & w_k^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & w_1^r & \dots & w_k^r \end{pmatrix} \text{ (Entwurfsmatrix)}$$

damit ergibt sich der Zusammenhang

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

Auf Grund der Annahmen über ε gilt:

$$E[\underline{\varepsilon}] = \underline{0} \text{ und}$$

$$COV[\underline{\varepsilon}] = \sigma_\varepsilon^2 \cdot \underline{I} \text{ (wobei } \underline{I} \text{ die } r \times r \text{ Einheitsmatrix ist)}$$

$L :=$ Summe der quadrierten e_i bei gegebenem Schätzer $\underline{\tilde{\beta}}$
es gilt

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

Die notwendige Bedingung für das Minimum lautet

$$\left(\frac{dL}{d\underline{\tilde{\beta}}} \right) = 0$$

dies lässt sich umformen zu

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

falls $\underline{W}^T \underline{W}$ nicht singulär

(damit muss $r > k$ gelten!)

ergeben sich die Schätzer

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

Zu beachten:

Experimente mit unterschiedlichen Saaten des ZZ-Generators ausführen (sonst sind die e_i nicht unabhängig!)

Einige Bemerkungen:

Verfahren auch für Modelle höherer Ordnung verwendbar

(Werte $w_i \cdot w_j$ werden als eigenständige Variablen aufgefasst, für die Koeffizient β_{ij} ermittelt wird)

Konfidenzintervalle für Koeffizienten berechenbar

(auf dieser Basis entscheidbar welche Koeffizienten signifikant von 0 verschieden sind)

Ziel ist immer die Ermittlung eines Modells mit

- möglichst wenigen Parametern und
- möglichst großer Aussagekraft

Darstellung des Systemverhalten durch ein Polynom ist eine Form der **Metamodellbildung**

Metamodelle können zur

- Optimierung und
- Verhaltensvorhersage eingesetzt werden

Für unterschiedliche Beobachtungsmaße können unterschiedliche Metamodelle erstellt werden

Regression ist nur eine Möglichkeit der Metamodellbildung

Alternativen:

- Kriging-Modelle,
- Pade-Approximationen,
- Neuronale-Netze, ...