

Experimentieren mit Simulationsmodellen

Clemens Berchtold

Institut für Technik Intelligenter Systeme (ITIS e.V.)
an der Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Informatik

Bericht 2000-05, November 2000

Zusammenfassung

Simulationsmodelle sind ein Werkzeug, um Problemstellungen aus der Realität zu beantworten, die nicht oder nur schwer auf analytischem Wege gelöst werden können. Die Anwendung und das Experimentieren mit dem Simulationsmodell müssen in geeigneter Weise durchgeführt werden, damit auch korrekte, effiziente und effektive Schlussfolgerungen gezogen werden können. Analysemöglichkeiten und Richtlinien für das Experimentieren mit Simulationsmodellen werden in diesem Bericht aufgezeigt.

Der Bericht ist in zwei Teile gegliedert. In Kapitel eins wird die Metamodellierung besprochen, die ja als Analysemöglichkeit eingesetzt werden kann. Es werden detailliert die Vorgehensweise beim Erstellen eines Metamodells sowie die Anwendungsfelder der Metamodelle beschrieben. Im zweiten Kapitel wird erörtert, nach welchen (stochastischen) Kriterien Simulationsexperimente effizient entworfen und analysiert werden. Weiters werden einige Klassen und Arten von Experimental Designs vorgestellt und im Anschluß auf den Metamodellbildungsprozeß angewendet.

Dieser Bericht entstand im Rahmen einer ITIS-Studie zum Thema *Zukunftsfelder der Modellbildung und Simulation*.

Experimentation with Simulation Models

Abstract

Experimentation with simulation models has to be done in an appropriate way so that statistically correct results are maintained. In this report we point out possibilities for analysing the simulation results and give a guidance for experimentation with simulation models. This report is divided into two parts. In part one metamodeling and its different goals are discussed. Part two deals with the design of experiments. Classes of experimental designs are presented and applied to metamodeling.

This report is part of an ITIS scientific study under the title *Future Perspectives in Modeling and Simulation*.

Inhaltsverzeichnis

1	Metamodellierung	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Metamodellierungsprozeß	2
1.2.1	Vorüberlegungen über das Metamodell	3
1.2.2	Spezifikation des Metamodells	4
	Polynome	5
	Splines	5
1.2.3	Parameterbestimmung und Parameterauswertung	6
	Methode der kleinsten Fehlerquadrate	6
	Beispiel	7
1.2.4	Validierung des Metamodells	8
1.3	Anwendungsfelder von Metamodellen	8
1.3.1	Metamodelle zum Verständnis des Simulationsmodelles	9
1.3.2	Metamodelle als Ersatz für Simulationsmodelle	9
1.3.3	Metamodelle zur Optimierung und Zielsuche	10
1.3.4	Metamodelle zur Unterstützung im Verifikations- und Validierungsvorgang	11
1.4	Zusammenfassung und Ausblick	11
2	Entwurf und Analyse von Simulationsexperimenten	13
2.1	Einleitung	13
2.2	Analyse von Simulationsergebnissen	15
2.2.1	Unterschiede bei deterministischen und stochastischen Simulationsmodellen	16
2.2.2	Unterschiede bei terminierenden und nicht-terminierenden Simulationen	16
	Terminierende Simulationen	17
	Nicht-terminierende Simulationen	19
2.3	Entwurf von Simulationsexperimenten (Experimental Design)	21
2.3.1	Zweck von Experimental Design	21
2.3.2	Klassen und Arten von Designs	22
	Vollständig faktorielles Design	23
	Unvollständig faktorielles Design	23
	CC-Designs	24
2.3.3	Experimental Design im Metamodellbildungsprozeß	24
2.4	Zusammenfassung	24
	Literatur	27

1 Metamodellierung

1.1 Einleitung

Ein Simulationsmodell kann als eine Art Transformation der Eingabedaten in Ausgangsdaten angesehen werden und somit als eine Funktion der Inputwerte. Diese Funktion ist aber meistens sehr komplex und kann nicht durch eine Formel oder einen mathematischen Ausdruck dargestellt werden. Daher ist es für den Betrachter des Simulationsmodells auch schwer, Zusammenhänge und Auswirkungen von Eingabewerten auf Ausgabewerte zu erkennen. Eine Möglichkeit, diese Probleme in den Griff zu bekommen, ist das Erstellen eines *Metamodells*, eines Modells vom Simulationsmodell. Ein Metamodell approximiert das Verhalten von Input und Output des Simulationsmodells durch einen (einfachen) mathematischen Ausdruck, wie Polynome oder Splines, und entsteht demnach durch eine hierarchische Modellierung wie in Abbildung 1 dargestellt ist. Zu ei-

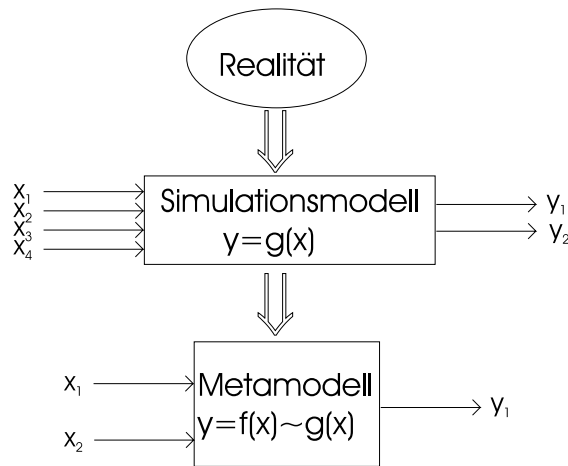


Abbildung 1: Hierarchie von Realität, Simulationsmodell und Metamodell

nem Simulationsmodell können mehrere Metamodelle erstellt werden, nämlich zu jeder Ausgangsvariablen y_i wird jeweils ein geeignetes Metamodell konstruiert. Ein Metamodell wird demnach immer nur speziell für die Analyse *einer* Ausgangsvariablen verwendet und nicht für alle Ausgangsvariablen des Simulationsmodells gleichzeitig.

Die Vorteile eines Metamodells gegenüber dem Simulationsmodell sind die einfache (mathematische) Form, und es können bekannte mathematische und statistische Methoden angewendet werden. Es ist somit auch eine effiziente und damit schnellere Auswertbarkeit möglich. Man braucht also nicht mehr die zum Teil sehr lange Simulationsläufe durchrechnen, um Daten für die Analyse zu gewinnen, sondern führt die Analysen mit dem Metamodell durch. Dies führt zu Zeit- und damit zu Kostenersparnis. Zudem können Metamodelle universell eingesetzt werden und ihre Anwendung ist nicht auf eine bestimmte Kategorie von

Simulationsmodellen beschränkt. Diese Vorteile gehen natürlich auf Kosten der Genauigkeit, da das Metamodell eine Annäherung an das Simulationsmodell ist, welches wiederum ja eine Approximation der Realität darstellt. Die Frage nach der Genauigkeit hängt zum großen Teil von der Anwendung des Metamodells (siehe Kapitel 1.3) ab.

1.2 Metamodellierungsprozeß

Das Erstellen eines Metamodells kann grob in zwei Phasen eingeteilt werden, in

- Anpassung (*fitting*) und
- Validierung

des Metamodells. Unter Anpassung wird das Vorgehen verstanden, mathematische und statistische Techniken auf Ein- und Ausgabedaten des Simulationsmodells anzuwenden, um die (unbekannten) Parameter des Metamodells zu bestimmen und auszuwerten. In der Validierungsphase des Metamodells wird überprüft, ob das Metamodell den Anforderungen (wie zum Beispiel die geforderte Genauigkeit) genügt. Bevor jedoch mit der Anpassungsphase begonnen werden kann, müssen noch bestimmte Vorüberlegungen über das Metamodell getroffen werden, sowie die mathematische Form des Metamodells und der dazugehörige Experimententwurf (siehe auch Kapitel 2) spezifiziert werden. Wir erhalten demnach einen fünfstufigen Metamodellbildungsprozeß, bestehend aus den Phasen

1. Vorüberlegungen über das Metamodell
2. Spezifikation des Metamodells
3. Spezifikation des Experimententwurfs
4. Parameterbestimmung und Parameterauswertung
5. Validierung

wie sie in Abbildung 2 skizziert sind.

Vorgehensweise Es wird nun kurz die Vorgehensweise beim Erstellen eines Metamodells dargestellt. Nachdem die Vorüberlegungen über das Metamodell (Anwendungsgebiet, Eingangsgrößen, Ausgangsgrößen, Wertebereich, Genauigkeit) getroffen worden sind, legt man die mathematische Form des Metamodells fest. Aus der gewählten Spezifikation des Metamodells ergeben sich die unbekannt Parameter. Im nächsten Schritt des Metamodellierungsprozesses wird für diese Spezifikation des Metamodells die Experimentdurchführung entworfen, wie in Kapitel 2 ausführlich beschrieben wird. Der Experimententwurf muß somit auf die mathematische Form des Metamodells abgestimmt werden.

Sind nun die Vorüberlegungen sowie die Spezifikationen des Metamodells und des Experimententwurfs abgeschlossen, beginnt die Anpassungsphase. Hier werden aus den gesammelten Daten, die aufgrund des Experimentes gewonnen wurden, die unbekannt Parameter des Metamodells im deterministischen Fall

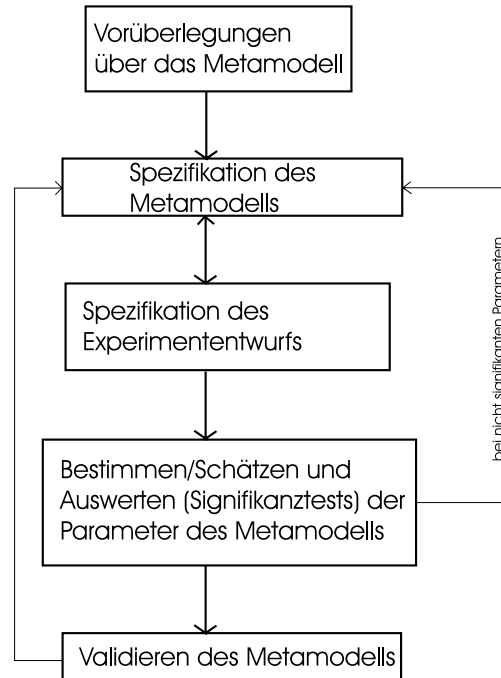


Abbildung 2: Der Metamodellbildungsprozeß

bestimmt und im stochastischen Fall geschätzt. Anschließend wird die Signifikanz der Parameter überprüft. Können durch diese Überprüfung einige Parameter auf null gesetzt werden (das Metamodell ist überbestimmt), wird die mathematische Form des Metamodells revidiert und beim Schritt „Spezifikation des Metamodells“ wieder aufgesetzt.

Werden jedoch alle Parameter als signifikant angesehen, so muß das Metamodell noch validiert werden. Genügt es nicht den Validitätsanforderungen, muß wiederum die Spezifikation des Metamodells überdacht werden.

In den folgenden Unterkapiteln werden diese Schritte näher erläutert, wobei die Spezifikation des Experimententwurfs in Kapitel 2 behandelt wird. Diese fünfstufige Unterteilung stützt sich auf den in [11] vorgeschlagenen Metamodellbildungsprozeß.

1.2.1 Vorüberlegungen über das Metamodell

Folgende Vorüberlegungen über das Metamodell müssen getroffen werden:

- Anwendungsfeld
- Eigenschaft der Eingangsvariablen
- Wertebereich (*experimental region*)

- Eigenschaften der Ausgangsvariablen
- Genauigkeit der Ausgangsgröße
- Validitätskriterien

Wie später (Kapitel 1.3) noch beschrieben wird, lassen sich im wesentlichen vier Anwendungsfelder oder Ziele der Metamodelle zusammenfassen, diese sind Verständnisgewinn, Diagnose von Simulationsmodellen, Optimierung und Unterstützung im Verifikations- und Validierungsvorgang.

Bei Eingabewerten wird unterschieden zwischen Eingabevariablen (input variables) und Eingabeparametern [15]. Eingabevariablen sind Größen, die unmittelbar beobachtet werden können und sich während der Simulation ändern, während Eingabeparameter zwar variiert werden können, während der Simulation jedoch unveränderlich bleiben. Eingabevariablen, Eingabeparameter und funktionale Zusammenhänge bilden die *unabhängigen* Variablen des Metamodells, ein Metamodell kann daher als Funktion dieser unabhängigen Variablen angesehen werden. Bei der Metamodellierung muß nun entschieden werden, welche unabhängigen Variablen entscheidende Auswirkungen auf die Ausgabevariable (*abhängige Variable*) haben. Weiters muß festgestellt werden, ob die Eingabevariablen deterministisch oder stochastisch sind.

Die Überlegungen über den Wertebereich (*experimental region*) legen fest, mit welchen Werten die unabhängigen Variablen belegt werden können. Hier wird also der Bereich abgegrenzt, in dem das Metamodell Gültigkeit haben soll.

Die Ausgangsvariable oder abhängige Variable gibt an, für welche Fragestellung man sich interessiert. Gleich wie bei den Eingabevariablen muß die Ausgangsvariable als deterministisch oder als stochastisch klassifiziert werden.

Die geforderte Genauigkeit des Metamodells und die Validitätskriterien für das Metamodell hängen zum großen Teil von der Anwendung ab, für die das Metamodell eingesetzt wird. Ebenfalls können sich die geforderte Genauigkeit und die Validitätskriterien ändern, je nachdem ob das Metamodell auf Fragestellungen hinsichtlich des Simulationsmodells oder hinsichtlich der modellierten Realität angewendet wird. Weitere Erläuterungen werden weiter unten im Unterkapitel „Validierung des Metamodells“ gegeben.

1.2.2 Spezifikation des Metamodells

In diesem Schritt des Metamodellierungsprozesses wird die (meist) mathematische Form des Metamodells festgelegt. Diese Spezifikation bestimmt wesentlich die Methode bei der Parameterbestimmung und Parameterschätzung (siehe Kapitel 1.2.3) sowie auch den Entwurf des Simulationsexperiment. Metamodelle können verschiedene mathematische Formen annehmen, wobei meist der Übersichtlichkeit halber zunächst eine einfache Form gewählt wird. Es wird jener mathematische Ausdruck festgelegt, der für eine gegebene Fragestellung am geeignetsten ist. In den folgenden Zeilen möchten wir ein paar Beispiele von solchen mathematischen Ausdrücken geben. In [1] werden folgende Typen von Metamodellen vorgestellt:

- Polynome

- Splines
- Funktionen mit kreisförmiger Basis (radial bases functions)
- Neuronale Netze
- Modelle mit räumlicher Korrelation (spatial correlation models) und
- Näherungen im Häufigkeitsbereich (frequency-domain approximations).

Bei unseren Ausführungen werden wir uns auf Polynome und Splines konzentrieren.

Polynome Ein Polynom über den reellen Zahlen in einer Variablen x wird allgemein beschrieben durch

$$f(x) := \sum_{h=0}^k a_h x^h$$

wobei a_h reelle Zahlen sind. Ein Polynom hat den Grad n , falls n die größte natürliche Zahl mit $a_n \neq 0$ ist. Ein Polynom dritten Grades zum Beispiel hat die Form $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, wobei $a_3 \neq 0$ ist. Da bei der Metamodellierung mehrere Eingangsgrößen Beachtung finden, müssen zumeist Polynome in mehreren Variablen $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ aufgestellt werden. Diese Erweiterung kann in folgender Schreibweise dargelegt werden:

$$f(x) = \sum_{h=0}^k b_h p_h(x)$$

wobei b_h reelle Zahlen und $p_h(x)$ Produkte von sogenannten univariaten Potenzfunktionen sind wie $x_1, (x_1)^2, x_1x_3, (x_2)^4x_3$. Sei wieder n die größte natürliche Zahl mit $b_n \neq 0$, dann versteht man unter dem (Total)-Grad des Polynoms $f(x)$ die Summe der Grade der Potenzfunktionen von $p_n(x)$. Zum Beispiel notieren wir im Weiteren (vor allem im Kapitel 2) ein Polynom (in mehreren Unbekannten) zweiten Grades mit

$$f(x) = b_0 + \sum_{h=1}^k b_h x_h + \sum_{h=1}^k \sum_{r=1}^k b_{h,r} x_h x_r$$

mit $b_h, b_{h,r}$ sind wiederum reelle Zahlen.

Splines Polynome können oft nur schwer das Ein- Ausgabeverhalten des Simulationsmodells über den *gesamten* Wertebereich wiedergeben. Sie sind dann nur für einen kleinen Teilbereich gültig. Dies motiviert eine Unterteilung des Metamodells in stückweise polynomiale Funktionen. Gelten an den Randpunkten dieser einzelnen Teilstücke des Wertebereichs Stetigkeitsbedingungen und innerhalb dieser Teilstücke Differenzierbarkeitsbedingungen, erhält man *Splines*. (Spline (engl.) bedeutet dünne Latte, und der Name entstand durch das Interpolationsproblem, bei dem durch gegebene äußere Stützpunkte eine dünne

homogene Latte gelegt werden soll, die an jenen äußeren Stützpunkten gelenkig gelagert ist. Zwischen diesen äußeren Stützpunkten soll die Biegelinie der Latte die Lösung des Interpolationsproblems sein [14].) Allgemein lassen sich Spline-Funktionen im eindimensionalen Fall (d.h. einer Variablen) darstellen als

$$s(x) = \sum_{h=1}^k c_h B_h(x)$$

wobei $B_h(x)$ stückweise polynomiale Funktionen in den jeweiligen Teilintervallen des Wertebereichs sind. Eine Splinefunktion ist vom Grad n , wenn sie $(n - 2)$ -mal stetig differenzierbar ist und die stückweise polynomialen Basisfunktionen höchstens vom Grad $(n - 1)$ sind. Ein Algorithmus zur Berechnung von kubischen Splines ist zum Beispiel in [14] angegeben. Ein Nachteil von Splinefunktionen als Metamodell gegenüber den Polynomen ist, daß die Erweiterung auf den mehrdimensionalen Fall (mehrere Variablen) nicht mehr durch die herkömmliche Multiplikation (wie bei $x_1 x_2^2$) sondern zum Beispiel durch Tensorprodukte vollzogen werden muß [1].

Vollständige Beschreibungen und Erläuterungen dieser Funktionen und auch der anderen oben angegebenen Metamodelle sind in der mathematischen Literatur über Numerik, Interpolation oder Regression zu finden (siehe z.B. [14]) und würden den Rahmen dieses Berichts sprengen. Auf die mathematische Form der Polynome und der Splines werden wir noch in den folgenden Kapiteln zurückgreifen.

1.2.3 Parameterbestimmung und Parameterauswertung

Durch die Spezifikation des Metamodells wird die Anzahl und die Art der unbekannt Parameter (oben b_i und c_i) festgelegt. Diese müssen nun durch mathematische bzw. stochastische Methoden und Techniken bestimmt werden. Das ist die Anpassungsphase (Fitting) im Metamodellbildungsprozeß. Bevor mit der Parameterbestimmung begonnen werden kann, müssen Simulationsergebnisse, d.h. Ein-/Ausgabedaten des Simulationsmodells, gesammelt werden. Eine möglichst effiziente und effektive Planung der Simulationsexperimente, um diese geeigneten Ein-/Ausgabedaten zu erhalten, ist Aufgabe des Experimententwurfs, wie er noch in Kapitel 2 dargelegt wird.

Aus dieser Menge von Ein-/Ausgabedaten können nun die unbekannt Parameter bestimmt (im deterministischen Fall) bzw. geschätzt (im stochastischen Fall) werden. Die Parameterbestimmung oder Regressionsanalyse und die Schätztheorie sind Teilgebiete und aktuelle Forschungsthemen in der Mathematik. In diesem Bericht möchten wir beispielhaft das Vorgehen beim Bestimmen der Parameter an der Methode der kleinsten Fehlerquadrate erläutern.

Methode der kleinsten Fehlerquadrate Wir nehmen an, wir haben n unbekannt Parameter und schreiben sie als Vektor an $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$. Weiters haben wir m Simulationsergebnisse $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$, die in einer funktionalen Beziehung zu den unabhängigen Variablen (oder Regressor) $x_j = (x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jm})^T$ stehen, also $y_j = f(x_j, b)$. Um die n unbekannt

Parameter bestimmen zu können, benötigt man im allgemeinen $m \geq n$ Simulationsergebnisse. Bei $m > n$ erhält man ein überbestimmtes Gleichungssystem, welches im allgemeinen keine (exakte) Lösung besitzt. Wenn man schon keine exakte Lösung erhält, so will man doch eine möglichst gute Lösung, das heißt, man möchte ein b finden, das den Ausdruck

$$S := \sum_{j=1}^m (y_j - f(x_j, b))^2$$

minimiert. Man versucht also die Summe über die Quadrate der Abweichungen (oder Fehler) möglichst klein zu halten. Die unbekannt Parameter werden also so bestimmt, daß die Regressionskurve die Daten möglichst gut approximiert.

Sind die unabhängigen Variablen x deterministische Variablen und wird angenommen, daß $f(x, b)$ linear in b ist ($y = Xb$), erhält man in Matrixschreibweise als Lösung für die unbekannt Parameter b

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y \tag{1}$$

wobei mit X^T die Transponierte und mit X^{-1} die Inverse von der Matrix X bezeichnet wird. Eine Herleitung der Formel ist zum Beispiel in [2] zu finden. Ist $f(x, b)$ nicht linear in b , so läßt sich keine geschlossene analytische Formel für b angeben.

Sind die unabhängigen Variablen stochastisch, werden die einzelnen Abweichungen $y_j - f(x_j, b)$ durch die dazugehörigen Varianzen σ_j gewichtet. Als Folge erhält man für die Parameter b die Formel

$$b = (X^T \sigma_y^{-1} X)^{-1} X^T \sigma_y^{-1} y$$

wobei mit σ_y die Kovarianzmatrix mit den Varianzen σ_j in der Diagonale bezeichnet wird.

Beispiel Zur Verdeutlichung der Methode zur Parameterbestimmung, im speziellen der Methode der kleinsten Fehlerquadrate, wollen wir ein kleines Beispiel geben.

Ein Objekt wird mit einem Radar beobachtet und die Position in Zeitintervallen von 0.2 Sekunden gemessen. Die Position wird durch das Modell $f(x) = b_0 + b_1 x + b_2(x^2/2)$ (b_0 ist die Anfangsposition, b_1 ist die Anfangsgeschwindigkeit und b_2 ist die Beschleunigung) berechnet. Wir haben ein Polynom zweiten Grades in der Unbekannten x . (Ein Metamodell könnte zum Beispiel diese mathematische Form haben.) Folgende Ergebnisse wurden gemessen:

x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x_i)$	3	59	98	151	218	264

Wendet man obige Formel (1) an, erhält man $b = (4.79, 234, 55.4)^T$. \diamond

Anschließend an die Parameterbestimmung können die geschätzten Parameter noch „beurteilt“ werden, wir sprechen von Parameterauswertung. Mathematische oder statistische Kriterien werden herangezogen. Zum Beispiel können bei einem linearen Regressionsmodell als Metamodell statistische Verfahren angewendet werden, um zu bestimmen, ob das Metamodell überbestimmt ist, das heißt ob einige Parameter auf 0 gesetzt werden können [11]. Solche statistischen Verfahren sind z.B. die sogenannten t- und F- Tests (siehe zum Beispiel [3]).

1.2.4 Validierung des Metamodells

Im letzten Schritt des Metamodellierungsprozesses muß noch überprüft werden, ob das spezifizierte Metamodell mit den errechneten Parametern das Simulationsmodell hinreichend genau beschreibt. Das Metamodell wird validiert. Welche Kriterien und welche Genauigkeit angesetzt werden, für die das Metamodell als valide angesehen werden kann, hängt von der Anwendung des Metamodells ab. Zum Beispiel ist die geforderte Genauigkeit geringer, wenn das Metamodell zum Verständnis des Simulationsverhaltens benutzt wird. Wird das Metamodell als Ersatz für das Simulationsmodell eingesetzt, werden auch höhere Anforderungen an die Genauigkeit gestellt.

Allgemein ist der Vorgang beim Validieren des Metamodells der folgende: nachdem die Parameter geschätzt wurden, werden neue Experimentsituationen geschaffen, das heißt, für neue Kombinationen und Wertebelegungen der Eingangsgrößen (unabhängige Variablen) werden die Ergebnisse des Metamodells wie des Simulationsmodells errechnet. Wir erhalten für jede neue Kombination ($n + 1$) und Wertebelegung der unabhängigen Variablen zwei neue Ergebnisse, y_{n+1}^* (das neue Ergebnis des Metamodells) und y_{n+1} (neues Ergebnis des Simulationsmodells). Die Signifikanz in den Abweichungen der zwei Ergebnisse kann zum Beispiel wieder mit statistischen Tests wie t- und F- Test ermittelt werden. Wird diese Abweichung als signifikant, also für entscheidend angesehen, so ist das Metamodell nicht validiert. Ab wann die Abweichung signifikant ist, hängt von der Formulierung der Testhypothese ab. Die Testhypothese legt die Genauigkeit fest, die vom Metamodell gefordert wird.

Ein anderes viel verwendetes Kriterium zur Entscheidung, ob ein Metamodell hinreichend genau das Simulationsmodell annähert, ist das *R²-Kriterium*, bei dem der Vergleichskoeffizient R^2 ein Hinweis auf die Abweichung von Metamodell zum Simulationsmodell gibt. Er ist definiert durch

$$R^2 = \frac{\sum (y_i^* - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum (y_i - y_i^*)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}$$

wobei y_i wieder die neuen Simulationsergebnisse und y_i^* die neuen Ergebnisse des Metamodells sind. \bar{y} ist der Mittelwert aller y_i . Der Koeffizient R^2 liegt zwischen 0 und 1. R^2 ist gleich null, wenn für alle Kombinationen der Eingangswerte die y_i^* gleich dem Mittelwert sind. R^2 ist gleich eins, wenn alle Ergebnisse des Metamodells mit dem Ergebnissen des Simulationsmodells übereinstimmen. Die Abweichung des Metamodells ist also um so geringer je größer der Koeffizient R^2 ist.

Eine andere Annäherung an die Validierung des Metamodells ist die sogenannte *Cross-Validation* (siehe zum Beispiel [10]), bei der statt neue Kombinationen der Eingangswerte hinzugefügt Kombinationen gestrichen werden. Auf dieser Untermenge an Kombinationen werden wieder die Parameter geschätzt und schlußendlich verglichen.

1.3 Anwendungsfelder von Metamodellen

Metamodelle können für verschiedene Ziele konstruiert werden, nämlich

- zum Verständnis des Simulationsmodells,

- als Ersatz für Simulationsmodelle,
- zur Optimierung und Zielsuche und
- zur Unterstützung im Verifikations- und Validierungsvorgang.

In den folgenden Unterkapiteln wird näher auf die Besonderheiten in diesen Anwendungsfeldern eingegangen.

1.3.1 Metamodelle zum Verständnis des Simulationsmodelles

Simulationsmodelle können oft sehr komplex konstruiert sein, sodaß es dem Betrachter schwer fällt, auf intuitivem Wege Auswirkungen von Änderungen in den Eingangsgrößen auf Auswirkungen der Ausgangsgrößen festzustellen. Durch die meist einfache Form der Metamodelle, wie Polynome, kann der Zusammenhang zwischen Input und Output klarer dargelegt werden. Indirekt dient somit das Metamodell auch zum besseren Verständnis der Gesetzmäßigkeiten der modellierten Realität. Ein Gewinn von Verständnis über das Simulationsmodell (und über die modellierte Problemstellung) kann auf folgende Art geschehen [11]:

1. Gesamtänderung der Ausgangsvariable,
2. Bestimmen der entscheidenden Faktoren und
3. Auswirkungen der einzelnen Faktoren.

Im ersten Fall stellt sich die Frage, ob ein Anstieg einer Eingangsvariablen auch einen Anstieg der Ausgangsvariable bewirkt. Wenn zum Beispiel als Metamodell ein Polynom ersten Grades $p(x) = ax + b$ gewählt wurde, dann bedeutet ein positiver Parameter a bei wachsendem x auch einen Anstieg der Ausgangsgröße. Im zweiten Fall wird das Metamodell verwendet, um in einem Aussiebverfahren (*screening*) diejenigen Faktoren zu bestimmen, die wesentlichen Einfluß auf die Ausgangsgrößen haben. Man bekommt auf diesem Wege mehr Einblick in die Zusammenhänge von Inputparametern und Output. Für diese beiden Fälle reicht oft ein grobes, einfaches Metamodell aus, um den Zweck der Verständniserweiterung zu erreichen. Ein etwas genaueres Metamodell wird im dritten Fall verlangt, da hier die Auswirkungen von einzelnen Faktoren berechnet werden und nicht nur die Signifikanz eines Faktors.

1.3.2 Metamodelle als Ersatz für Simulationsmodelle

Metamodelle können als Ersatz für das Simulationsmodell Anwendung finden. Das Metamodell übernimmt in diesem Fall die Rolle des meist sehr komplizierten Simulationsmodells. Hier wird natürlich erwünscht, daß das Metamodell sehr genau das Simulationsmodell annähert. Deshalb reichen oft einfache polynomiale Ausdrücke nicht aus. Entweder werden Polynome mit höheren Grad angesetzt oder es werden alternativ Metamodelle entwickelt wie die weiter oben beschriebenen Splines.

Vor allem in Simulationen, in denen Simulationszeit kostbar ist, werden die Metamodelle als Ersatz für das Simulationmodell eingesetzt. Statt der oft sehr

langen Simulationsläufe werden durch die Metamodelle Daten zur Analyse gewonnen. Die numerische Auswertung von Polynomen oder auch Splines sind ja auf heute gängigen Rechnern nicht mehr zeitaufwendig. Durch den Einsatz von Metamodellen hat man folglich eine Möglichkeit gefunden, Zeit und somit Kosten zu sparen.

1.3.3 Metamodelle zur Optimierung und Zielsuche

Die Optimierung ist ein weiteres Anwendungsgebiet der Metamodelle. So werden etwa in der Literatur über z.B. Operations Research Methoden beschrieben, mit denen für eine sogenannte Zielfunktion Extremwerte, das heißt Maxima oder Minima, gefunden werden. Zum Beispiel könnte eine Kostenfunktion eine solche Zielfunktion sein. Das Simulationsmodell oder bestimmte abhängige Variablen des Modells können eine Zielfunktion darstellen, und Metamodelle können dazu verwendet werden, um diese optimalen Werte zu finden.

Ähnlich zur Optimierung ist die Zielsuche, bei der zu gegebenen Ausgangswerten gehörige Eingangswerte gefunden werden sollen. Man gibt also die Werte der Ausgangsgrößen des Simulationsmodells vor und möchte berechnen, welche Wertebelegungen der Eingangsgrößen zu diesen vorgegebenen Werten der Ausgangsgrößen führen.

Eine Methode mithilfe von Metamodellen Optimierung und Zielsuche durchzuführen, ist zum Beispiel das sogenannte *RSM-Verfahren (Response Surface Method)*. Das RSM-Verfahren ist eine heuristische, iterative Methode, bei der sich die Lösung bei jedem Iterationsschritt einem Optimum annähert. Auf vier Eigenschaften stützt sich das RSM-Verfahren [10]:

1. RSM benutzt als Metamodelle Polynome ersten und zweiten Grades.
2. RSM verwendet klassische Experimentplanung (siehe Kapitel 2).
3. Die mathematische Methode des *steilsten Anstiegs* bestimmt die Änderung der zu optimierenden Variablen in jedem Iterationsschritt.
4. Klassische mathematische Methoden werden angewendet, um zu überprüfen, ob das gefundene Optimum ein Extremwert oder ein Sattelpunkt ist.

Die Vorgehensweise beim RSM-Verfahren ist in etwa die folgende:

- 1. Schritt:** Im ersten Schritt wird ein kleiner Anfangswertebereich (experimental region) festgelegt und für diesen Wertebereich ein Metamodell und zwar ein Polynom ersten Grades angepaßt.
- 2. Schritt:** Im zweiten Schritt wird aus den Parametern des Polynoms und aus den unabhängigen Variablen der Pfad des steilsten Anstiegs berechnet, der angibt, in welche Richtung sich der Wertebereich ändert. In diesem neuen Wertebereich wird nun wieder ein Polynom ersten Grades bestimmt und der steilste Anstieg berechnet. Dieses Vorgehen wird solange wiederholt bis ein optimaler Wertebereich gefunden wird, das heißt bis die Richtungsänderungen gering sind.

3. Schritt: Im letzten Schritt wird in diesem optimalen Wertebereich ein Polynom zweiten Grades angesetzt und die optimalen Werte gefunden. Ein Polynom zweiten Grades ist notwendig, um entscheiden zu können, ob es sich bei der gefundenen Lösung um einen Extremwert oder einen Sattelpunkt handelt.

Eine formale Beschreibung des RSM-Verfahren ist zum Beispiel in [9] zu finden.

1.3.4 Metamodelle zur Unterstützung im Verifikations- und Validierungsvorgang

Auf zwei Arten können Metamodelle im Verifikations- und Validierungsvorgang eingesetzt werden, zum einen wenn Daten aus der realen Welt vorhanden oder meßbar sind zum anderen wenn nur wenig Daten aus dem Problembereich zur Verfügung stehen.

Sind Daten aus der realen Welt gesammelt, können die Ergebnisse des Simulationsmodells mit der Wirklichkeit verglichen werden. Allerdings ist es oft aufwendig, diese Daten aus der Wirklichkeit zu erhalten. Daher ist es sinnvoll, diese Datengewinnung in einer effizienten Weise durchzuführen, es muß eine Entscheidung getroffen werden, wie viele und welche Daten beobachtet werden müssen. Hier kann das Metamodell derart herangezogen werden, indem zum Metamodell der dazugehörige Experimententwurf geplant wird (siehe Kapitel 2). Dieser Experimententwurf legt fest, mit welchen Eingangsdaten das Simulationsmodell belegt werden muß. Die so gewonnen Ausgangsdaten werden dann mit den Daten der Wirklichkeit verglichen, und damit wird das Simulationsmodell validiert.

Wenn keine oder nur wenige Daten oder Messungen aus der realen Welt vorhanden sind, so ist doch in den meisten Fällen ein Vorwissen über das zu simulierende System vorhanden, zum Beispiel ob ein Anstieg einer Eingangsgröße im Simulationsmodell einen Anstieg einer Ausgangsgröße bewirkt. Hier kann dann ein Metamodell für die Verifikation und Validierung folgendermaßen verwendet werden. Man überprüft die Übereinstimmung vom Verhalten des Metamodells mit dem Vorwissen der Realität. Ergibt zum Beispiel eine Schätzung eines Parameters des Metamodells ein falsches Vorzeichen, ist das ein starker Hinweis auf ein falsches Simulationsmodell oder einer falschen Implementierung.

1.4 Zusammenfassung und Ausblick

Unter einem Metamodell versteht man ein Modell vom Simulationsmodell. Es erklärt und beschreibt also das Verhalten von Ein- und Ausgabe des Simulationsmodells und wird zumeist mit einem mathematischen Formalismus, wie Polynome oder Splines, gebildet. Die Motivation, ein Metamodell zu erstellen, kann verschieden sein, Anwendungsfelder sind: Metamodelle

- zum Verständnis des Simulationsmodells,
- als Ersatz für Simulationsmodelle,
- zur Optimierung und Zielsuche und

- zur Unterstützung im Verifikations- und Validierungsvorgang.

Die Spezifikation des Metamodells und die Genauigkeit, die vom Metamodell verlangt wird, hängen von der Anwendung des Metamodells ab. Zum Beispiel sind die Anforderungen an das Metamodell am höchsten, wenn es als Ersatz für das Simulationsmodell dient, während bei der Anwendung des Metamodells zum Verständnis über das Simulationsmodell eine gröbere Annäherung ausreicht.

Das Erstellen des Metamodells ist ein mehrphasiger Prozeß, man kann ihn grob unterteilen in Anpassung (fitting) und Validierung. Bei der Anpassung werden aus den Ausgabedaten des Simulationsmodells die unbekannt Parameter des Metamodells bestimmt. Ein mögliches mathematisches Kriterium für diese Bestimmung ist das Minimum der Summe über die Quadrate der Abweichungen. Bei der Validierung des Metamodells wird die Gültigkeit des Metamodells für einen bestimmten Zweck überprüft. Statistische Methoden werden eingesetzt, um die Signifikanz von Parametern zu testen.

In der Mathematik ist die Regressionstheorie ein klassisches Forschungsgebiet, aus dem viele Erkenntnisse für die Metamodellierung in der Simulation verwendet werden können. Mit diesen Methoden lassen sich genaue Analysen über das Verhalten vom Simulationsmodell anstellen.

Simulationsmodelle und die dazugehörigen Simulationsdurchläufe werden durch die Möglichkeit der schnelleren Rechner und der wachsenden Rechnerressourcen immer aufwendiger, komplexer und umfangreicher. Somit werden sie für Analysezwecke immer schwerer zu handhaben und die Zusammenhänge lassen sich nicht intuitiv leicht erklären. Metamodelle können helfen, diese komplexen Sachverhalte zu erklären und auszuwerten. Mit dem Erstellen und Anwenden eines Metamodells hat man sich folglich eine formale und wissenschaftlich fundierte Möglichkeit erschaffen, Schlußfolgerungen aus dem Experimentieren mit dem Simulationsmodell ziehen zu können.

2 Entwurf und Analyse von Simulationsexperimenten

2.1 Einleitung

Ein Simulationsmodell wird unter anderem entworfen, um Probleme und Fragestellungen zu beantworten, die in der realen Welt schlecht gelöst und untersucht werden können. Von den ersten Überlegungen über das Modell bis zur Validation des Simulationsmodells werden viele Anstrengungen aufgebracht. Erst wenn das Simulationsmodell verifiziert und validiert wurde, kann es zum Experimentieren herangezogen werden. Aber um gültige Ergebnisse aus den Simulationsläufen zu erhalten, muß nicht nur das Simulationsmodell selbst validiert sein, sondern auch das Experimentieren mit dem Simulationsmodell muß in geeigneter Weise geschehen. In diesem Kapitel wird aufgezeigt, was beim Entwurf und bei der Analyse von Simulationsexperimenten beachtet werden muß.

Das klassische Experimentieren kann in vier Schritten aufgeteilt werden. Diese Schritte sind:

1. Formulieren der Hypothese
2. Planung des Experiments
3. Beobachtungen und Sammlung von Daten
4. Interpretation der Resultate

Beim Formulieren der Hypothese wird die Vermutung oder Behauptung über den Ausgang einer Fragestellung festgelegt, zum Beispiel Medikament M_1 und M_2 haben Einfluß auf den Blutdruck, M_3 nicht. Im zweiten Schritt wird die Durchführung des Experiments bestimmt, in unserem Beispiel unter anderem welche Konzentrationen der Medikamente welchen Probanden gegeben werden, wieviel verschiedene Kombinationen der Medikamentkonzentrationen jedem einzelnen Probanden verabreicht werden und wie lange die Medikamente injiziert oder eingenommen werden sollen. Anschließend wird dann der Blutdruck gemessen, über einen Zeitraum beobachtet und mitprotokolliert. Aus diesen gesammelten Daten werden nun -Analysen angestellt, die eine Interpretation der Resultate zulassen. Zu diesem Zweck werden geeignete statistische Tests herangezogen, um die Auswirkungen der einzelnen Medikamente zu überprüfen. Zum Beispiel dient der sogenannte F-Test dazu, die Gleichheit zweier Varianzen zu testen [5].

Im wesentlichen trifft man auf zwei Problemstellungen beim Experimentieren (sowohl beim klassischen als auch beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell), diese sind:

- Experimententwurf und
- (statistische) Datenanalyse.

Montgomery [12] gibt eine genauere Unterteilung vom Prozeß des Experimentierens, er gibt sieben Phasen an, nämlich

- Festlegung der Fragestellung,
- Wahl der Eingangsgrößen und deren Wertebelegungen,
- Auswahl der Ausgangsgröße,
- Wahl des Experimententwurf,
- Durchführung des Experiments,
- Datenanalyse und
- Schlußfolgerungen.

Zwei wichtige Prinzipien beim Experimentieren sind *zufälliges Auswählen (Randomization)* und *Experimentwiederholung (Replication)* [12]. Das Prinzip der Experimentwiederholung besagt, daß die einzelnen Experimentläufe unter den selben Rahmenbedingungen stattfinden müssen, um statistische Aussagen zu erzielen. Außerdem kann dadurch der Meßfehler (*experimental error*) bestimmt werden, der als Maß der Genauigkeit angesehen werden kann. Das zufällige Auswählen soll verhindern, daß der Ausgang des Experiments beeinflußt wird. In vielen Experimenten in der Naturwissenschaft können jedoch nicht beliebig viele Wiederholungen mit den selben Randbedingungen durchgeführt werden, zum Beispiel in landwirtschaftlichen Untersuchungen beeinflußt oft das Wetter das Experiment. Hingegen hat man beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell vollständige Kontrolle über die Bedingungen und über die Einflußgrößen. Das ist auch einer der wesentlichen Vorteile beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell gegenüber dem klassischen Experimentieren. Die Vorteile beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

- Kontrolle über die Einflußgrößen und Eingangsparameter,
- Prinzip des zufälligen Auswählens und der Experimentwiederholung wird durch Zufallszahlengeneratoren übernommen,
- Eventuelle Beschleunigung des Experiments.

Es muß jedoch darauf geachtet werden, daß geeignete, gute Zufallszahlengeneratoren gewählt werden, schlechte Zufallszahlen können das Ergebnis sogar verfälschen.

Voraussetzung für das Experimentieren ist immer ein validiertes Simulationsmodell. Das Experimentieren mit einem Simulationsmodell ist folglich als letzte Stufe im Modellbildungsprozeß einzuordnen, wie es in Abbildung 3 dargestellt ist. Experimente können jedoch auch schon in früheren Phasen des Modellbildungsprozesses eingesetzt werden, um etwa Erkenntnisse aus Teilmodellen oder Komponenten zu gewinnen, die wiederum für das Gesamtmodell von Bedeutung sein können. Auf diesem Wege können Teilmodelle validiert werden. Ebenfalls können durch Experimente (jedoch nicht mit dem Simulationsmodell) zum Beispiel unbekannte Parameter eines Teilmodells bestimmt werden. Im Rest dieses Kapitels wird nur das Experimentieren mit einem validierten Simulationsmodell besprochen. Das Simulationsmodell ersetzt die Wirklichkeit, und es werden

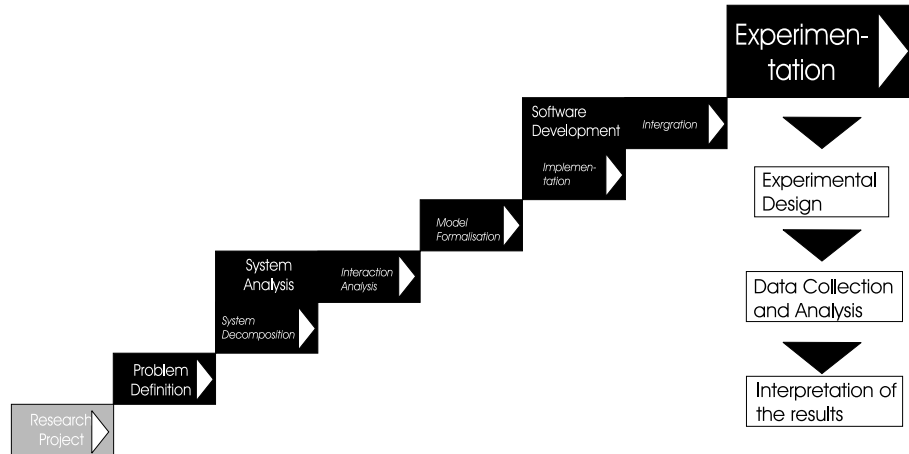


Abbildung 3: Entwurf und Analyse von Simulationsexperimenten im Modellbildungsprozeß

somit Fragestellungen aus der realen Welt untersucht. Im Kapitel 2.2 wird die Analyse von Simulationsergebnissen behandelt. Hier wird beschrieben, wie vor allem stochastische und statistische Daten ausgewertet werden, statistische Fragestellungen werden aufgeworfen und es wird untersucht, wie sich Merkmale im Simulationsmodell auf die Datenanalyse auswirken. In Kapitel 2.3 wird dann auf den Entwurf von Simulationsexperimenten eingegangen. Zum Abschluß (Kapitel 2.3.3) wird noch der Entwurf von Experimenten betrachtet, wenn zur Analyse Metamodelle herangezogen werden.

2.2 Analyse von Simulationsergebnissen

Um einen Vorteil aus der Simulation für die Beantwortung einer Fragestellung zu ziehen, müssen die gewonnenen Daten aus den Simulationsläufen in einer Art dargestellt werden, die eine Auswertung der Ergebnisse ermöglicht. Diese Darstellungsart kann verschiedene Formen annehmen, man unterscheidet:

- graphische Darstellungen und
- statistische Aussagen.

Ein Beispiel einer graphischen Darstellung sind Histogramme wie in Abbildung 4. In diesem Beispiel werden die Häufigkeiten von Zensurnoten mit entsprechend langen Balken symbolisiert. Weitere graphische Darstellungen sind unter anderem (gezeichnete) Regressionskurven, wie sie im Kapitel über Metamodelle formal betrachtet wurden. Bei diesen graphischen Darstellungsarten werden die Ergebnisse „nur“ präsentiert, das Problem der Interpretation der Ergebnisse, also das wissenschaftliche Schlußfolgern, ist für den Betrachter noch nicht gelöst und hängt natürlich von der gegebenen Fragestellung ab. Für die Beantwortung vieler Fragestellungen reicht jedoch eine graphische Darstellung

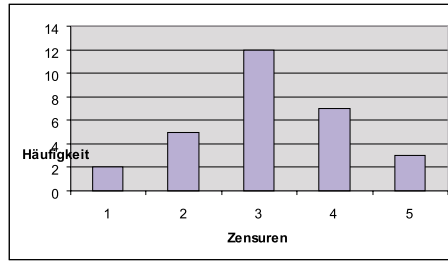


Abbildung 4: Histogramm

aus, zum Beispiel wenn durch eine Regressionskurve der Simulationsverlauf der beobachteten Größe verfolgt wird.

Im Rest dieses Kapitels wird hingegen auf die statistische Analyse von Simulationsausgangsdaten eingegangen.

2.2.1 Unterschiede bei deterministischen und stochastischen Simulationsmodellen

Die Zustandsübergänge können deterministisch oder stochastisch geschehen. Bei der Analyse und beim Design von Simulationsexperimenten spielt diese Unterscheidung eine wesentliche Rolle. Sind bei einem deterministischen Simulationsmodell auch alle Eingangswerte deterministisch, so sind auch alle Ausgangswerte deterministisch, das heißt, ein Simulationslauf mit den selben Anfangswerten ergibt das gleiche Ergebnis. Trotzdem sind zu Analysezwecke möglicherweise viele Simulationsläufe notwendig, jedoch nur zur Auswertung verschiedener Kombinationen von Eingangsparametern [7].

Bei stochastischen Simulationsmodellen hingegen werden die Zustandsänderungen durch Wahrscheinlichkeit bestimmt, und somit beeinflusst diese Wahrscheinlichkeit den Ausgang des Simulationslaufes. Ein einzelner Simulationslauf mit denselben Eingangsparametern ist daher lediglich eine Beobachtung dieser Parameterkombination. Erst mehrere solche Beobachtungen bewirken eine statistische Aussage. Folglich sind mehr Simulationsläufe für die gleichen Werte der Eingangsparameter nötig. Ziel bei stochastischen Simulationsmodellen ist es, Erkenntnisse über die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Ausgangswerte zu gewinnen, wie zum Beispiel Mittelwerte und Standardabweichungen (Varianzen). Auf geeignete Methoden, die einen solchen Erkenntnisgewinn der stochastischen Verteilung der Ausgangsvariablen herbeiführen, und auf Fragestellungen bezüglich statistischer Eigenschaften wird im folgenden Abschnitt eingegangen.

2.2.2 Unterschiede bei terminierenden und nicht-terminierenden Simulationen

Da viele Vorgänge in der realen Welt auf Zufälligkeiten beruhen, werden auch meist stochastische Modelle in der Simulation verwendet. Im folgenden betrach-

ten wir Experimente mit stochastischen Simulationsmodellen. Für die Analyse muß unterschieden werden zwischen

- terminierenden (oder endlichen) und
- nicht-terminierenden Simulationen.

Von terminierenden Simulationen spricht man, wenn der Simulationsbeginn und das Simulationende durch die Problemstellung vorgegeben sind bzw. wenn ein Ereignis das Simulationende herbeiführt. Ein Beispiel für eine endliche Simulation sind Vorgänge in einer Bank, da die Öffnungszeiten den Start- und Endzeitpunkt angeben. Bei nicht-terminierenden Simulationen sind diese Start- und Endzeitpunkte der Simulation nicht vorgegeben, das heißt, es tritt kein Ereignis ein, das ein Ende der Simulation bewirkt. Netzwerksimulationen oder Simulationen einer Notaufnahme in Krankenhäusern sind Beispiele für nicht-terminierende Simulationen. Im Vordergrund steht die Frage nach der Simulationslänge und der nötigen Anzahl der Simulationsläufe, damit schlüssige statistische Aussagen getroffen werden können.

Terminierende Simulationen Angenommen, x ist die zu beobachtende Ausgangsgröße des Simulationsmodells und n Simulationsläufe werden durchgeführt. Wichtig ist, daß die Simulationsläufe mit den gleichen Parameterkombinationen berechnet werden, und sich die Ausgangsvariable nur durch die Zufallszahlen ändert. Bei guter Wahl eines Zufallszahlengenerators erhält man Ausgangswerte x_1, x_2, \dots, x_n (in jedem Simulationslauf ein x_i), die unabhängig voneinander sind. Weiters wird hier angenommen, daß die Ausgangswerte normalverteilt sind. Die erste Frage, die sich bei der Analyse von Simulationsexperimenten stellt, ist die Frage, welche statistische Größe geschätzt wird oder welche statistische Aussage begründet wird. Eine oft interessierende Größe ist zum Beispiel der Mittelwert der beobachteten Ausgangsvariablen. In den weiteren Erläuterungen wird deshalb beispielhaft auf diese Fragestellung eingegangen. Eine Annäherung an den tatsächlichen Mittelwert μ (des realen Systems) wird geschätzt (durch die Simulationsbeobachtungen) mittels

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Anstatt eines solchen einzelnen Punktschätzers ist es jedoch aussagekräftiger sogenannte *Konfidenzintervalle* zu bestimmen. Ein Konfidenzintervall ist der Bereich, in dem mit einer Zuverlässigkeit $(1 - \alpha)$, zum Beispiel mit einer 95% Wahrscheinlichkeit, angegeben werden kann, daß der geschätzte Mittelwert vom tatsächlichen Mittelwert nur um eine vorgegebene Genauigkeit (c) abweicht. Das heißt, es wird ein Intervall (mit dem Mittelwert als Mittelpunkt) berechnet, damit folgende Gleichung gelte:

$$P(|\bar{x} - \mu| \leq c) = 1 - \alpha$$

wobei mit $P(A)$ die Wahrscheinlichkeit des Eintritts eines Ereignisses A bezeichnet wird.

Die nächste Überlegung, die nun angestellt werden muß, ist die Frage nach der Anzahl der Simulationsläufe, damit eine statistisch gültige Aussage getroffen werden kann. Die benötigte Anzahl der Simulationsläufe hängt ab von der verlangten Genauigkeit (c), von der Zuverlässigkeit ($1 - \alpha$), mit der eine statistische Aussage getroffen wird und von der Varianz (σ), das heißt von den Abweichungen der x_i vom Mittelwert \bar{x} . Die minimal nötige Anzahl n von Simulationsläufen wird berechnet durch [4]:

$$n = \frac{1}{c^2} z_{\alpha/2}^2 \sigma^2$$

wobei $z_{\alpha/2}$ derjenige Wert aus einer Tabelle der Standardnormalverteilung Φ ist, für den $\Phi(z) = 1 - \alpha/2$ gilt. Aus dieser Gleichung ist ersichtlich, daß die Anzahl der Simulationsläufe steigt, falls eine höhere Genauigkeit (c wird kleiner) gefordert ist und wenn die Standardabweichung steigt. Ist in einem Simulationsexperiment die Anzahl der Simulationsläufe im Verhältnis zur Varianz gering, so erhält man keine schlüssigen statistischen Resultate. In den meisten Fällen ist darüberhinaus die tatsächliche Varianz σ nicht bekannt und muß durch die empirische Standardabweichung geschätzt werden. Die empirische Standardabweichung wird berechnet durch:

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Die empirische Standardabweichung wird während der Simulationsläufe berechnet. Ist die tatsächliche Varianz also nicht bekannt, benötigt man ein statistisches Verfahren, das angibt, wieviel Simulationsläufe nötig sind. So ein Verfahren wird nun an einem Beispiel aus [4] erläutert.

Beispiel In diesem Beispiel wird die Frage nach der Anzahl der Simulationsläufe bei vorgegebener Länge des Konfidenzintervalls und unbekannter Varianz mit einem sequentiellen Verfahren beantwortet. Es wird wieder ein validiertes (stochastisches) Simulationsmodell angenommen, das x_i unabhängige identischverteilte Beobachtungen liefert (je Simulationslauf eine Beobachtung). Folgende Schritte werden durchgeführt:

- 1. Schritt:** *Festlegung der zu untersuchenden statistischen Größe:* Hier wird festgelegt, daß der Mittelwert der Beobachtungen x_i untersucht wird.
- 2. Schritt:** *Angabe der gewünschten Genauigkeit und Zuverlässigkeit:* Eine 95% Wahrscheinlichkeit ($\alpha = 0.05$) wird verlangt mit einer halben Konfidenzintervalllänge (h^*) von 3, also ($h^* = 3$).
- 3. Schritt:** *Durchführen von einer kleinen Anzahl von Simulationsläufen:* Wie groß diese „kleine“ Anzahl von Simulationsläufen ist, hängt von der Anwendung ab. Die Beobachtungen dieser Simulationsläufe werden gesammelt.
- 4. Schritt:** *Berechnung des Konfidenzintervalls:* Das zur Zuverlässigkeit $1 - \alpha$ gehörige Konfidenzintervall für den Mittelwert wird bestimmt durch

$$\bar{x} - t_{n-1, 1-\alpha/2} \frac{s}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{x} + t_{n-1, 1-\alpha/2} \frac{s}{\sqrt{n}}$$

wobei $t_{n-1, 1-\alpha/2}$ das $1 - \alpha/2$ -Quantil der t-Verteilung mit $n - 1$ Freiheitsgraden ist. Aus dieser Formel ergibt sich dann folglich auch die halbe Konfidenzintervalllänge h .

Die Problemstellung war, wie viele Simulationsläufe bei vorgegebener Konfidenzintervalllänge h^* nötig sind, es ist daher zu überprüfen, ob $h < h^*$ ist. Falls nicht, muß man den nächsten Schritt durchführen.

- 5. Schritt:** *Berechnung von n^* :* Da mit der bis jetzt durchgeführten Anzahl von Simulationsläufen die gewünschte Genauigkeit, das heißt die gewünschte Konfidenzintervalllänge, nicht erreicht werden konnte, wird eine neue Anzahl n^* der nötigen Simulationsläufe berechnet durch

$$n^* = \lceil n \left(\frac{h}{h^*} \right) \rceil$$

wobei mit den nach unten offenen eckigen Klammern das größte Ganze bezeichnet wird.

- 6. Schritt:** *Durchführen von $n^* - n$ Simulationsläufen:* n Simulationsläufe sind schon durchgeführt, es fehlen also noch $n^* - n$ Simulationsläufe. Um keine identischen Simulationsläufe zu erhalten, müssen für die verbleibenden Simulationsläufe die Startwerte der Zufallszahlenströme geändert werden.
- 7. Schritt:** *Berechnung des endgültigen Konfidenzintervalles:* Mit diesen n^* Beobachtungen wird nun gemäß obiger Formel das endgültige Konfidenzintervall berechnet. Man hat nun also durch die n^* Simulationsläufe eine statistisch gültige Aussage, daß mit einer 95% Wahrscheinlichkeit der Mittelwert in diesem Konfidenzintervall ist. \diamond

Verfahren zur Bestimmung der Anzahl der Simulationsläufe bei anderen statistischen Rahmenbedingungen (zum Beispiel bei Tests von einer Hypothese) sind zum Beispiel in Büchern über statistische Methoden wie in [9] oder [3] beschrieben und würden den Rahmen dieses Berichtes sprengen.

Nicht-terminierende Simulationen Bei nicht-terminierenden Simulationen ist kein natürlicher Anfangs- und Endzeitpunkt der Simulation gegeben. Das fundamentale Problem bei der Analyse von Experimenten mit stochastischen nicht-terminierenden Simulationsmodellen ist daher die Frage nach der Simulationslänge, also in welcher Zeitspanne der Simulation Daten gesammelt werden sollen. Weiters wird die Simulation bei solchen Systemen oft mit unrealistischen, atypischen Anfangswerten begonnen. In einer Simulation über die Notaufnahme in Krankenhäusern zum Beispiel könnten noch keine Bettenbelegung, keine Operationsgerätebenutzung oder keine Auslastung der Ärzte am Beginn der Simulation gesetzt sein. Da jedoch die Notaufnahme ständig in Betrieb ist, ist diese Situation nicht realistisch. Erst im Verlauf der Simulation wird ein Zustand erreicht, der der Realität hinreichend nahe kommt. Ein solcher Zustand in einer nicht-terminierenden Simulation wird *steady state* Zustand genannt. Die Phase bis zum Erreichen dieses *steady state* Zustandes wird als *Aufwärmphase* (*warm-up*) bezeichnet.

In einer nicht-terminierenden Simulation müssen hinsichtlich der Analyse von Experimenten zwei Bedingungen erreicht werden, nämlich

- Steady State Bedingungen und
- statistisch unabhängige Beobachtungen.

Sind diese beiden Bedingungen erfüllt, ist die Vorgehensweise der Analyse der Daten (z.B. das Bestimmen von Konfidenzintervallen) dieselbe wie bei terminierenden Simulationen. Zwei Methoden werden vorgestellt, die sowohl steady state Zustände als auch (quasi) statistisch unabhängige Beobachtungen erzeugen, diese Methoden sind:

- Replication-Deletion Methode
- Methode mit Batches.

Replication-Deletion Methode Bei der Replication-Deletion Methode werden wie bei terminierenden Simulationen n Simulationsläufe (Replikationen) für eine Parameterkombination mit jeweils anderen Zufallszahlen durchgeführt. Durch die atypischen Anfangswerte bei nicht terminierenden Simulationen werden jedoch die Beobachtungen der einzelnen Simulationsläufe verfälscht. Es muß daher die Aufwärmphase bestimmt werden, und die Daten, die in dieser Aufwärmphase gewonnen werden, werden gestrichen. Man sammelt also nur Daten, die im steady state Zustand der Simulationsläufe beobachtet werden. Die Bestimmung der Länge der Aufwärmphase ist folglich entscheidend für die Auswertung der Daten. Verfahren zur Bestimmung der Länge der Aufwärmphase sind zum Beispiel in [6] zu finden.

Methode mit Batches Bei dieser Methode wird ein hinreichend langer Simulationslauf durchgeführt, sodaß die Länge der Aufwärmphase im Vergleich zur Länge des Simulationslaufes nicht ins Gewicht fällt. Bei der Methode mit Batches unterteilt man den Simulationslauf in n angrenzende Teilabschnitte (den Batches) und erhält pro Abschnitt eine Beobachtung x_i . Aus allen Batches zusammen werden also n (quasi) statistisch unabhängige Beobachtungen gesammelt und es können wieder Analysen durchgeführt werden, wie sie weiter oben besprochen wurden. Als Länge eines solchen Abschnitts kann zum Beispiel die Länge der Aufwärmphase gewählt werden.

Ob die Replication-Deletion Methode oder die Methode mit Batches günstiger ist, hängt zum großen Teil von der Länge der Aufwärmphase ab. Zum Beispiel [13] sei die Länge der Aufwärmphase 3000 (Zeiteinheiten), und man möchte 20 unabhängige Beobachtungen x_i (die sich aus jeweils 1000 Zeiteinheiten ergeben), dann sind bei der Replication-Deletion Methode $20(3000+1000)=80000$ Zeiteinheiten nötig, wobei 75% für die Analyse gestrichen werden (3000 Zeiteinheiten der Aufwärmphase). Bei der Methode mit Batches benötigt man hingegen $3000+20(1000)=23000$ Zeiteinheiten. Kann die Aufwärmphase im Vergleich zum steady state Zustand wesentlich schneller simuliert werden (da ja eventuell nur wenige Ereignisse abgearbeitet werden müssen), ist die Replication-Deletion Methode vorzuziehen.

2.3 Entwurf von Simulationsexperimenten (Experimental Design)

Bis jetzt wurde in diesem Kapitel aufgezeigt, auf was für Probleme geachtet werden muß, wenn aus den gesammelten Daten statistische Größen (wie Mittelwert, Standardabweichung oder Konfidenzintervall) geschätzt wurden oder statistische Aussagen und Tests (Testen eine Hypothese) auf ihre Richtigkeit untersucht wurden. Die wesentlichen Fragestellungen sind, wieviel Simulationsläufe sind nötig bzw. wie lange muß ein Simulationslauf sein. Eine weitere Fragestellung in der Simulation ist, wie sich Änderungen in den Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen auswirken. Welche Wertekombinationen der Eingangsgrößen in Betracht gezogen werden müssen, um eine gewünschte Auswertung einer Ausgangsgröße zu erhalten, ist Gegenstand dieses Kapitels 2.3. Im folgenden verstehen wir also unter Planung und Entwurf von Simulationsexperimenten die geeignete Wahl dieser Wertekombinationen. Die Eingangsgrößen werden auch *Faktoren* genannt. In [8] werden folgende Fragen angegeben, die beim Entwurf von Simulationsexperimenten gestellt werden müssen:

1. Welche Parameterkombinationen müssen simuliert werden?
2. Wie lange müssen die Simulationsläufe angesetzt werden?
3. Wieviel Simulationsläufe sind nötig?
4. Wie werden die Daten analysiert und
5. Was ist die effizienteste Möglichkeit, die Simulationsläufe zu gestalten?

Die Fragen 2., 3., und 4. wurden schon im Kapitel 2.2 beantwortet. Die restlichen zwei Fragen werden im folgenden behandelt und hängen wesentlich von der Weise ab, mit welchen (mathematischen) Mitteln die Änderungen der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen analysiert werden. Üblicherweise geschieht dies mit der sogenannten Regressionsanalyse, bei der durch die Datenmenge eine Regressionskurve gelegt wird. In [3], Seite 145ff, ist die Theorie ausführlich dargestellt. Bei unseren Ausführungen werden wir als Regressionskurven Metamodelle annehmen. Die Vorgehensweise beim Entwurf von Experimenten ändert sich dabei nicht. Demnach wird auch am Ende des Kapitels spezielles Augenmerk auf Experimental Designs gelegt, wenn Metamodelle als Regressionsanalyse eingesetzt werden. Davor wird noch der Zweck vom Planen und Entwerfen von Simulationsexperimenten erläutert und es werden verschiedene Klassen von Designs vorgestellt.

2.3.1 Zweck von Experimental Design

Es ergeben sich verschiedene Vorteile, wenn ein Simulationsexperiment gut entworfen wird:

- Effiziente Experimentdurchführung,
- genauere Schätzung der Regressionsparameter,
- Entwurf von Experimenten kann zur Optimierung eingesetzt werden.

Simulationsläufe können sehr aufwendig und zeitintensiv sein. Daher ist es sinnvoll, die Simulationsläufe so zu gestalten, daß mit der kleinsten nötigen Anzahl an Simulationsläufen die Gültigkeit der statistischen Aussage gewährleistet ist. Eine größere Anzahl an Simulationsläufen führt bei guter Wahl der Faktorkombinationen zu keiner besseren Schätzung der Regressionsparameter und somit zu keinen genaueren statistischen Aussagen. Folglich können Zeit und Kosten durch geeigneten Entwurf von Simulationsexperimenten gespart werden. Wenn Metamodelle zur Optimierung und Zielsuche eingesetzt werden (siehe Kapitel 1.3.3) hilft Experimental Design, möglichst schnell und zuverlässig das Optimum zu finden.

2.3.2 Klassen und Arten von Designs

In diesem Abschnitt wird exemplarisch beschrieben, wie die Experimental Designs dargestellt werden, welche Klassen und Arten unterschieden werden, um anschließend zu verdeutlichen, welche Designs für welche Regressionsmodelle geeignet sind. Eine ausführliche Betrachtung ist zum Beispiel in [12, 5, 9, 10] zu finden.

In diesem Kapitel wird nur der Fall untersucht, wenn die Faktoren mit zwei Werten (*2-level*) belegt werden. Da ja die Auswirkungen von den Änderungen der Faktoren auf die Ausgangsgröße untersucht werden, ist es naheliegend, zwei „gegensätzliche“ aber realistische Werte für die Belegung in Betracht zu ziehen. Notiert werden diese zwei Werte mit „+“ und „-“. Voraussetzung für eine solche Belegung ist, daß die Faktoren quantifizierbar sind. Für jeden Simulationslauf wird also eine Faktorkombination niedergeschrieben, wie in folgender Tabelle dargestellt ist.

Faktorkombination	Faktor x_1	Faktor x_2	Faktor x_3	Ergebnis
1	-	-	-	y_1
2	-	-	+	y_2
3	-	+	-	y_3
4	-	+	+	y_4
5	+	-	-	y_5
6	+	-	+	y_6
7	+	+	-	y_7
8	+	+	+	y_8

Die Ergebnisse y_i können zum Beispiel Mittelwerte, Standardabweichungen oder Konfidenzintervalle sein und werden wie im vorigen Abschnitt 1.1.2 ermittelt. Die Regressionsparameter werden dann gemäß des Kriteriums

$$S := \sum_{j=1}^m (y_i - f(x_j, b))^2$$

wie es im Kapitel über Metamodelle schon erörtert wurde, bestimmt. Die erste Frage, die sich stellt, ist, wieviel Faktorkombinationen sind nötig, um die unbekannt Parameter des Regressionsmodells zu bestimmen. Die Antwort auf diese

Frage ist, daß zumindest so viele Faktorkombinationen wie unbekannte Parameter durchgespielt werden müssen. Sei also n die Anzahl der Faktorkombinationen und q die Anzahl der unbekannt Parameter, dann muß gelten $n \geq q$.

Im folgenden werden einige Klassen von Experimental Designs vorgestellt.

Vollständig faktorielles Design Beim vollständig faktoriellen Design werden alle möglichen Faktorkombinationen simuliert. Angenommen, die Faktoren werden wieder mit zwei Werten belegt, und die Anzahl der Faktoren sei k , dann gibt es 2^k Möglichkeiten an Faktorkombinationen, also bei drei Faktoren acht Möglichkeiten wie auch in obiger Tabelle ersichtlich ist. Solche Designs werden mit 2^k -Design notiert und bezeichnet. Der Nachteil ist, daß die Anzahl der Möglichkeiten der Faktorkombinationen exponentiell mit der Anzahl der Faktoren steigt. Bei sieben Faktoren gibt es bereits 128 Kombinationen.

Unvollständig faktorielles Design Hat man bei einem Simulationsmodell zum Beispiel sieben Eingangsgrößen (Faktoren), aber wird nur ein Regressionsmodell mit weniger als 128 unbekannt Parameter angesetzt und hat man Kapazität und Zeit für weniger als 128 Simulationsdurchgänge (Faktorkombinationen), so kommen unvollständig faktorielle Designs zur Anwendung. Im Beispiel wenn 32 Simulationsdurchgänge möglich sind, dann erhält man ein 2^{7-2} -Design. Da jetzt nicht alle Möglichkeiten durchgerechnet werden, spricht man von einem *unvollständig* faktoriellen Design, allgemein notiert als 2^{k-p} -Design. Welche Kombinationen aus allen möglichen ausgewählt werden, wird durch sogenannte *Generatoren* bestimmt. Generatoren geben an, wie ein Faktor x_i von den anderen Faktoren $x_j, j \neq i$, abhängt. Im Beispiel der obigen Tabelle könnte der dritte Faktor durch den Generator $x_3 = x_1 x_2$ festgesetzt werden, es bleiben dann nur noch vier Möglichkeiten übrig. Wie diese Generatoren gesetzt werden müssen, hängt vom zugrundeliegenden Regressionsmodell ab, das heißt, welche Parameter geschätzt werden müssen. Dies führt uns zu drei wichtigen Klassen innerhalb der unvollständig faktoriellen Designs, nämlich 2^{k-p} -Design mit

- Auflösung 3 (2_{III}^{k-p} -Design),
- Auflösung 4 (2_{IV}^{k-p} -Design) und
- Auflösung 5 (2_V^{k-p} -Design).

Aufgrund der Definitionen von Kleijnen [9] können die drei Klassen folgendermaßen charakterisiert werden (mit individuelle Faktorauswirkung (main effects) wird der (zu bestimmende) Parameter a_i genannt, der beim Regressionsmodell mit dem Faktor x_i multipliziert wird, also $a_i x_i$; mit zweifachen Interaktionsauswirkungen werden die Parameter a_{ij} mit $a_{ij} x_i x_j$ bezeichnet):

2^{k-p} -Design mit Auflösung 5: Alle individuellen Faktorauswirkungen und alle zweifachen Interaktionsauswirkungen können eindeutig bestimmt werden.

2^{k-p} -Design mit Auflösung 4: Die individuelle Faktorauswirkungen können eindeutig bestimmt werden. Nicht alle zweifachen Interaktionsauswirkungen können bestimmt werden. Welche zweifachen Interaktionsauswirkungen eindeutig bestimmt werden können, ist abhängig vom Generator.

2^{k-p} -Design mit Auflösung 3: Die individuelle Faktorauswirkungen können eindeutig bestimmt werden. Zweifache Interaktionsauswirkungen können nicht eindeutig bestimmt werden.

Diese Definitionen implizieren, daß die Auflösung eines 2^{k-p} -Designs die kleinste Zahl der bei der Konstruktion des Generators beteiligten Faktoren sind. Eine formalere Darstellung und Wege zur Konstruktion von 2^{k-p} -Designs verschiedener Auflösungen sind in [12, 5, 9] beschrieben und würden den Rahmen des Berichtes sprengen.

CC-Designs Bei CC-Designs (*Central-Composite-Designs*) wird die Belegung der Faktoren um die Möglichkeit der Belegung mit 0 erweitert. Für einen Faktor gibt es beim CC-Design drei Belegungen $(-c, 0, +c)$. Dadurch wurde die Anzahl der Möglichkeiten von Faktorkombinationen auf 3^k erhöht. CC-Designs werden konstruiert, wenn unvollständig faktorielle Designs mit Auflösung 5 nicht mehr ausreichen. Häufig werden daher 2^{k-p} -Designs mit Auflösung 5 um den Nullpunkt (“Central”) erweitert.

2.3.3 Experimental Design im Metamodellbildungsprozeß

Wie im Kapitel über Metamodelle schon dargestellt wurde, werden im Metamodellbildungsprozeß die Parameter der Metamodelle bestimmt. Um die Parameter richtig bestimmen bzw. schätzen zu können, müssen ausreichend viele Faktorkombinationen simuliert werden. Wie in Kapitel 2.2 erläutert, müssen weiters pro Faktorkombination genügend Simulationsläufe durchgeführt werden. Je nachdem welches Regressionmodell als Metamodell angesetzt wird (z.B. Polynome oder Splines) und wie die unbekannt Parameter gesetzt werden, gestaltet sich der Entwurf des Simulationsexperimentes. Gemäß den oben gegebenen Definitionen der verschiedenen Klassen und Arten von Designs kann folgende Tabelle 2 zusammengefaßt werden:

Metamodell	→	Experimental Design
Polynom ersten Grades (keine Interaktion zwischen den Faktoren)	→	2^{k-p} -Design mit Auflösung 3
Polynom zweiten Grades (zweifache Interaktionen zwischen Faktoren werden beeinflußt)	→	2^{k-p} -Design mit Auflösung 4
Polynome zweiten Grades (zweifache Interaktionen werden nicht beeinflußt)	→	2^{k-p} -Design mit Auflösung 5
Polynome höheren Grades	→	vollständig faktorielle Designs
Polynome mit quadratischen Faktoren	→	CC-Designs

Bei komplexeren Metamodellen lassen sich im allgemeinen keine Designs angeben.

2.4 Zusammenfassung

In die Entwicklung von Simulationsmodellen wird, angefangen von der konzeptionellen Grundidee bis zur Validierung, viel Anstrengung investiert. Nachdem das Simulationsmodell für eine Problemstellung validiert wurde, kann es zum Experimentieren eingesetzt werden. Jedoch muß auch das Experimentieren mit

dem Simulationsmodell in geeigneter Weise stattfinden, um (statistisch) gültige Ergebnisse zu erzielen und gültige Schlußfolgerungen zu ziehen.

Das „klassische“ Experimentieren, wie das Experimentieren in den Naturwissenschaften, erfolgt im wesentlichen in folgenden Schritten:

- Formulieren der Hypothese
- Planung des Experiments
- Beobachtungen und Sammlung von Daten
- Interpretation der Resultate.

Man kann das Experimentieren (sowohl beim klassischen als auch beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell) in zwei Problemstellungen unterteilen, nämlich

- Experimententwurf und
- (statistische) Datenanalyse.

Gegenüber dem Experimentieren in den Naturwissenschaften ergeben sich beim Experimentieren mit einem Simulationsmodell Vorteile, da in den Naturwissenschaften das Experiment vielfach von nicht beeinflussbaren Größen abhängt. Vorteile sind:

- Kontrolle über die Einflußgrößen und Eingangsparameter,
- Prinzip des zufälligen Auswählens und der Experimentwiederholung wird durch Zufallszahlengeneratoren übernommen,
- eventuelle Beschleunigung des Experiments.

In diesem Kapitel wird das Augenmerk auf stochastische Modelle gelegt. Bei stochastischen Simulationsmodellen muß unterschieden werden zwischen:

- terminierenden (oder endlichen) und
- nicht-terminierenden Simulationen.

Terminierende Simulationen haben im Gegensatz zu nicht-terminierenden Simulationen durch die Problemstellung einen vorgegebenen natürlichen Simulationsbeginn und ein Simulationsende. Die erste Frage, die sich dann beim Entwurf und Analyse von Simulationsexperimenten stellt, ist, welche Ausgangsgröße und welche (statistischen) Aussagen untersucht werden. Beispiele für solche statistische Größen sind der Mittelwert, die Varianz oder Konfidenzintervalle. Diese statistischen Größen bestimmen auch bei terminierenden Simulationen die Anzahl der Simulationsläufe, die notwendig sind, um gültige Schätzungen dieser Größen zu erhalten. Bei nicht-terminierenden Simulationen kommt die Frage der Simulationslänge auf, zur Analyse muß steady-state Zustand erreicht werden und es müssen unabhängige Beobachtungen gewonnen werden. Dazu werden zwei Methoden vorgestellt, und zwar:

- Replication-Deletion Methode

- Methode mit Batches.

Eine weitere Fragestellung in der Simulation ist, wie sich Änderungen in den Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen auswirken. Welche Wertekombinationen der Eingangsgrößen in Betracht gezogen werden müssen, um eine gewünschte Auswertung einer Ausgangsgröße zu erhalten, ist Gegenstand des Kapitels über Entwurf von Simulationsexperimenten. Regression ist hier die Methode zur Analyse der gewonnenen Daten. Vorteile und Zweck von Experimental Design sind:

- Effiziente Experimentdurchführung,
- genauere Schätzung der Regressionsparameter,
- Entwurf von Experimenten kann zur Optimierung eingesetzt werden.

Drei Klassen von Experimental Designs wurden vorgestellt, diese sind:

- vollständig faktorielles Design,
- unvollständig faktorielles Design und
- CC-Designs.

Der Entwurf von Simulationsexperimenten im Metamodellbildungsprozeß wurde besprochen. In Tabelle 2 wurde zusammengestellt, welche Klassen von Designs bei welchen mathematischen Formen der Metamodelle angewendet werden müssen.

Abschließend kann festgestellt werden, daß das Experimentieren mit Simulationsmodellen nach festen (statistischen) Vorschriften durchgeführt werden muß, um richtige Analysen anstellen zu können. Ein Simulationslauf eines stochastischen Modells ergibt lediglich eine Beobachtung aber noch keine (statistische) Aussage. Experimental Design führt darüberhinaus zu einer effizienten und effektiven Experimentdurchführung, das Zeit und somit Kosten sparen kann. Daher erscheint es unumgänglich, neben dem Entwurf des Simulationsmodells selbst auch Anstrengungen in den Entwurf von Simulationsexperimenten zu stecken.

Literatur

- [1] Russel R. Barton. Simulation metamodels. In *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference*, pages 167–174. SCS, 1998.
- [2] Clemens Berchtold. Anwendung von kompartmentmodellen und identifikationsmethoden auf den gebieten des metabolismus und der pharmakokinetik. Master's thesis, Universität Innsbruck, 1997.
- [3] Karl Bosch. *Elementare Einführung in die angewandte Statistik*. vieweg, Braunschweig, 1987.
- [4] Martha A. Centeno and M. Florencia Reyes. So you have your model: What to do next. a tutorial on simulation output analysis. In *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference*, pages 23–29. SCS, 1998.
- [5] M. N. Das and N. C. Giri. *Design and Analysis of Experiments*. Wiley Eastern Limited, New Delhi, 1979.
- [6] D. Goldsman. Simulation output analysis. In *Proceedings of the 1992 Winter Simulation Conference*, pages 97–103. SCS, 1992.
- [7] W. David Kelton. Statistical analysis of simulation output. In *Proceedings of the 1997 Winter Simulation Conference*, pages 23–30. SCS, 1997.
- [8] W. David Kelton. Designing simulation experiments. In *Proceedings of the 1999 Winter Simulation Conference*, pages 33–38. SCS, 1999.
- [9] Jack P.C. Kleijnen. *Statistical Tools for Simulation Practitioners*. Marcel Dekker, New York, 1987.
- [10] Jack P.C. Kleijnen. Experimental design for sensitivity analysis, optimization, and validation of simulation models. In Jerry Banks, editor, *Handbook of Simulation*. Wiley, New York, 1997.
- [11] Jack P.C. Kleijnen and Robert G. Sargent. A methodology for fitting and validating metamodels in simulation. Technical Report Report No.97116, Department of Information Systems/Center for Economic Research, Tilburg University, 5000 LE Tilburg, Netherlands, 1997.
- [12] Douglas C. Montgomery. *Design and Analysis of Experiments*. John Wiley and Sons, New York, 1976.
- [13] Susan M. Sanchez. Abc's of output analysis. In *Proceedings of the 1999 Winter Simulation Conference*, pages 24–32. SCS, 1999.
- [14] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1997.
- [15] Bernhard Zeigler. *Theory of Modelling and Simulation*. Wiley Interscience, New York, 1976.