

эксперименты,  
исследования,  
получение знаний

Практическое применение имитационных моделей

# Методика проведения модельного проекта



# Проведение экспериментов

*План проведения экспериментов* дает возможность с минимальными затратами сделать статистически значимые выводы или найти наилучшее решение.

*Конечная цель проведения экспериментов* – получение достаточной статистической информации для принятия решений о системе по результатам моделирования.

Статистическое экспериментирование проводится с целью – нахождения некоторых особых значений характеристик моделируемой системы (**оптимизирующий эксперимент**) или выявления важных факторов, влияющих на моделируемую систему (**отсеивающий эксперимент**).

Принципиально другой вид экспериментов, проводимых с моделью – **структурная оптимизация**, под которой понимается поиск наилучшей структуры моделируемой системы, т.е. сравнение нескольких моделей.

# Планирование экспериментов

При планировании эксперимента обычно определяют:

- входные данные для каждого эксперимента;
- количество прогонов имитационной модели;
- длительность одного прогона модели;
- длительность переходного процесса в модели;
- стратегию сбора данных для каждого прогона модели;
- методы оценки точности выходных данных с построением доверительных интервалов;
- чувствительность модели к входным данным, различным видам распределений, сценариям поведения моделируемой системы;
- условия эксперимента и сценарии;
- условия генерации потоков случайных чисел внутри системы моделирования и для вероятностных входных данных;
- стратегию достижения цели эксперимента (оптимизация целевой функции)

# Организация экспериментов

При экспериментировании с моделью различают входные и выходные переменные.

Входные переменные называются **факторами**.

Выходные переменные называются **откликами**.

Каждый фактор в эксперименте может принимать одно или несколько значений, называемыми **уровнями фактора**. Множество уровней факторов определяет одно из возможных состояний моделируемой системы и представляет условия проведения одного из возможных экспериментов. Существует зависимость между уровнями факторов и откликами системы, которая обычно заранее неизвестны. Ее называют **функцией отклика** или реакции, а геометрический образ – **поверхность отклика**.

**Факторный эксперимент** представляет собой план прогонов модели, в котором все уровни каждого фактора встречаются в сочетании с уровнями всех других факторов.

## Преимущества факторного плана

- Становится более полной картина влияния каждого фактора, поскольку они изучаются в самых различных условиях (вследствие одновременного изменения других факторов).
- Большое число комбинаций факторов, используемых в эксперименте, облегчает предсказание результатов, которые могут быть достигнуты при определенной комбинации условий.
- Если эффекты, вызываемые каждым фактором, статистически независимы, то о каждом факторе можно получить не меньше информации, чем при изменении в экспериментах только одного фактора при фиксации остальных.
- Если различные факторы не являются независимыми, а вызывают эффекты, которые в большей или меньшей степени коррелированы, то в этом случае только факторный эксперимент может дать информацию о характере этих взаимодействий. При наличии нескольких взаимосвязанных существенных факторов обойтись без постановки факторного эксперимента невозможно.
- Для ряда часто встречающихся специальных задач разработано большое число стандартных факторных планов.

# Дисперсионный анализ

## *ANOVA (analysis of variance)*

Используется для определения, является фактор значимым или нет.

Применим только к количественным факторам. Помогает определить количественные отклонения наблюдений от среднего значения.

Если какой-либо фактор не оказывает влияние на отклик, то он является *незначимым*. С другой стороны, если фактор влияет на отклик, то количественное значение фактора сравнивают с оценкой изменчивости наблюдения, т.е. со стандартной ошибкой.

Это делается для исключения эффектов случайных флюктуаций.

В ANOVA используется статистическая модель в виде аддитивной математической модели, которая определяет компоненты изменения в наблюдениях

$$y_{ig} = \mu + \alpha_i^A + e_{ig}$$

С помощью ANOVA проверяется гипотеза об отсутствии влияния фактора.

# Регрессионный анализ

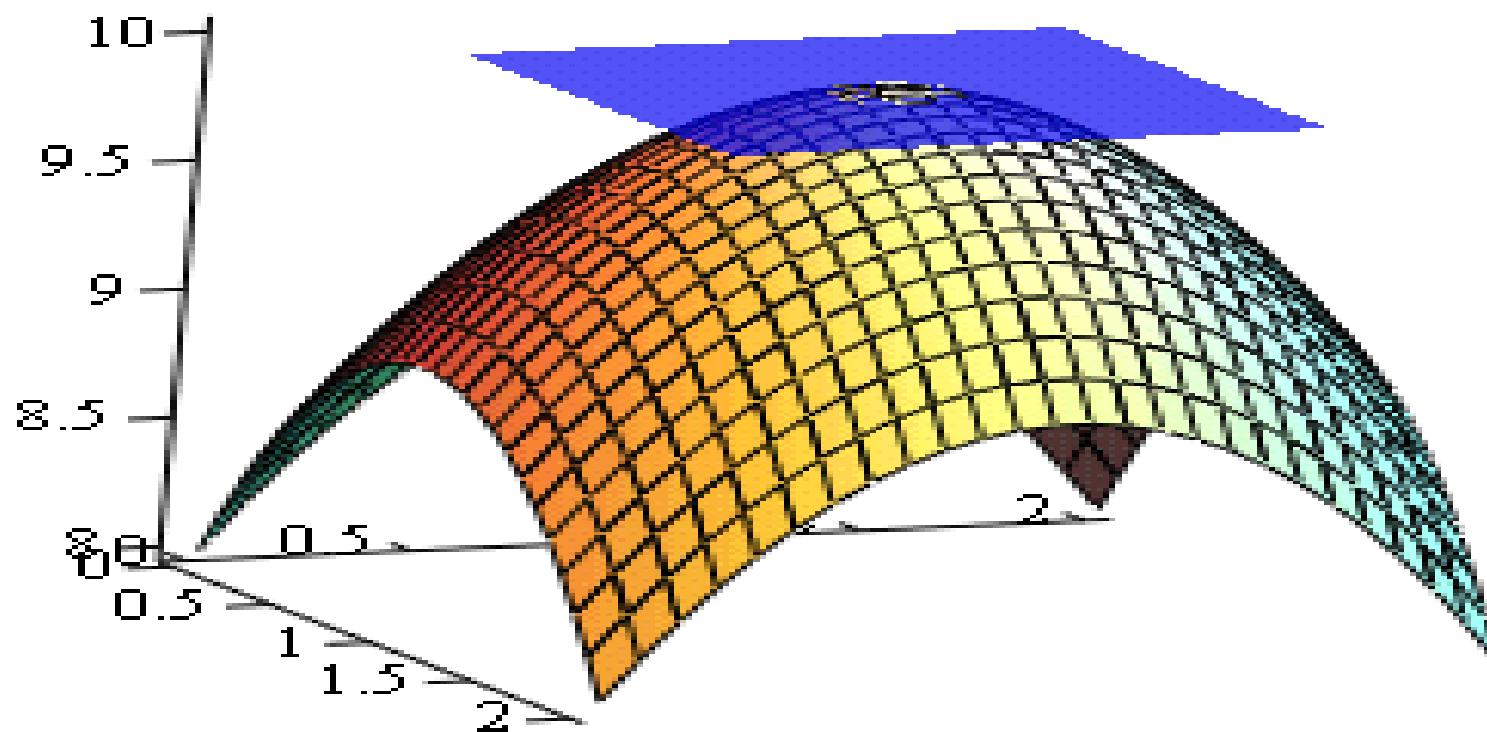
Во многих случаях цель имитационного моделирования заключается в поиске таких величин или уровней независимых переменных, при которых отклик достигает экстремального значения.

Для определения направления движения к экстремальной точке в случае использования количественных, непрерывных и измеряемых величин применяют ряд небольших, полных и неполных факторных экспериментов. Поверхность отклика неизвестна, и ее аппроксимируют какой-то гладкой функцией, в качестве которой используют полином 1го или 2го порядка:

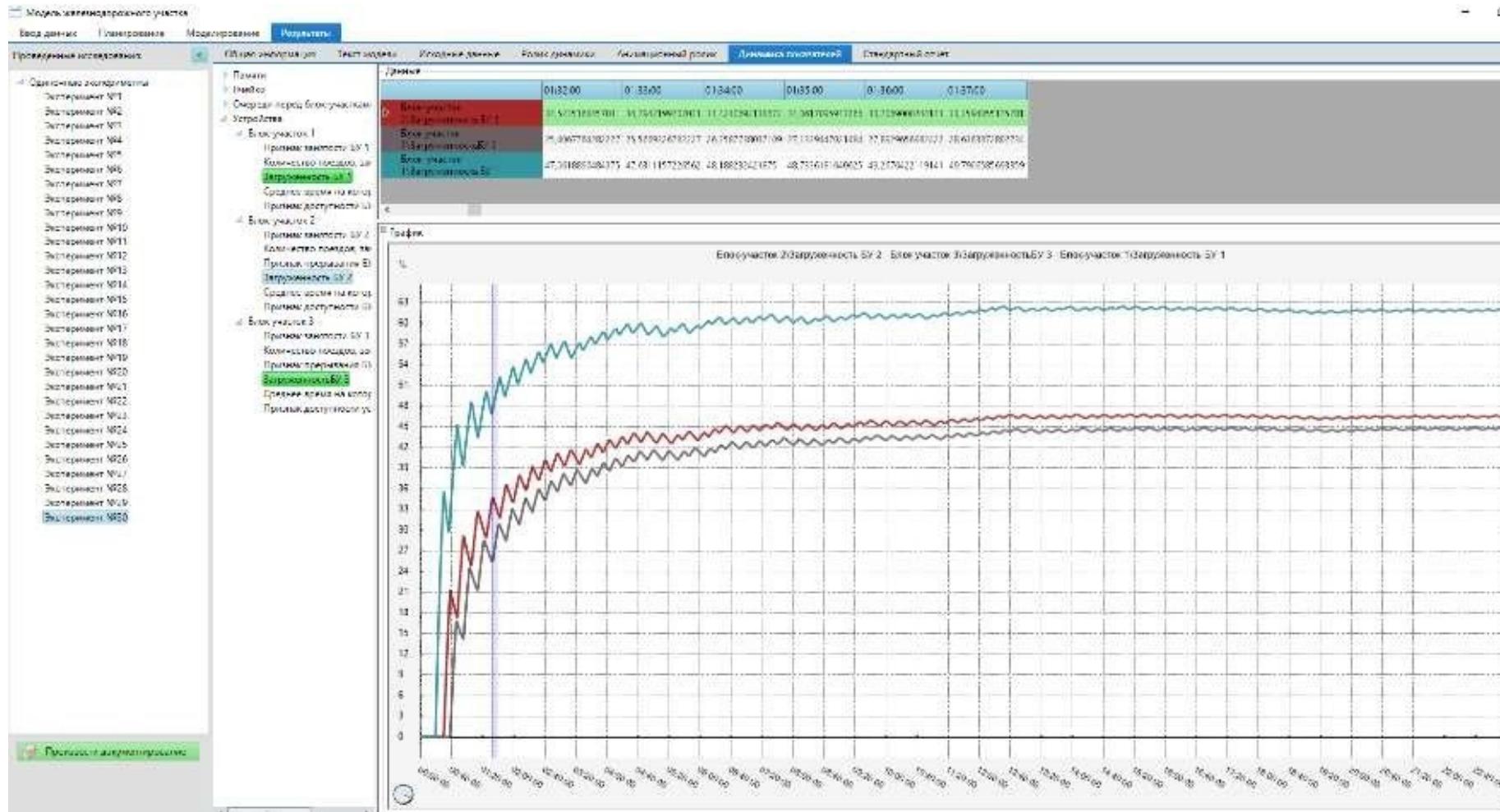
$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{12}x_1x_2$$

Для поиска экстремума наиболее часто используют метод наискорейшего подъёма. Он основан на линейной аппроксимации поверхности отклика в окрестности рассматриваемой точки  $P$  с помощью факторного эксперимента.

# Регрессионный анализ



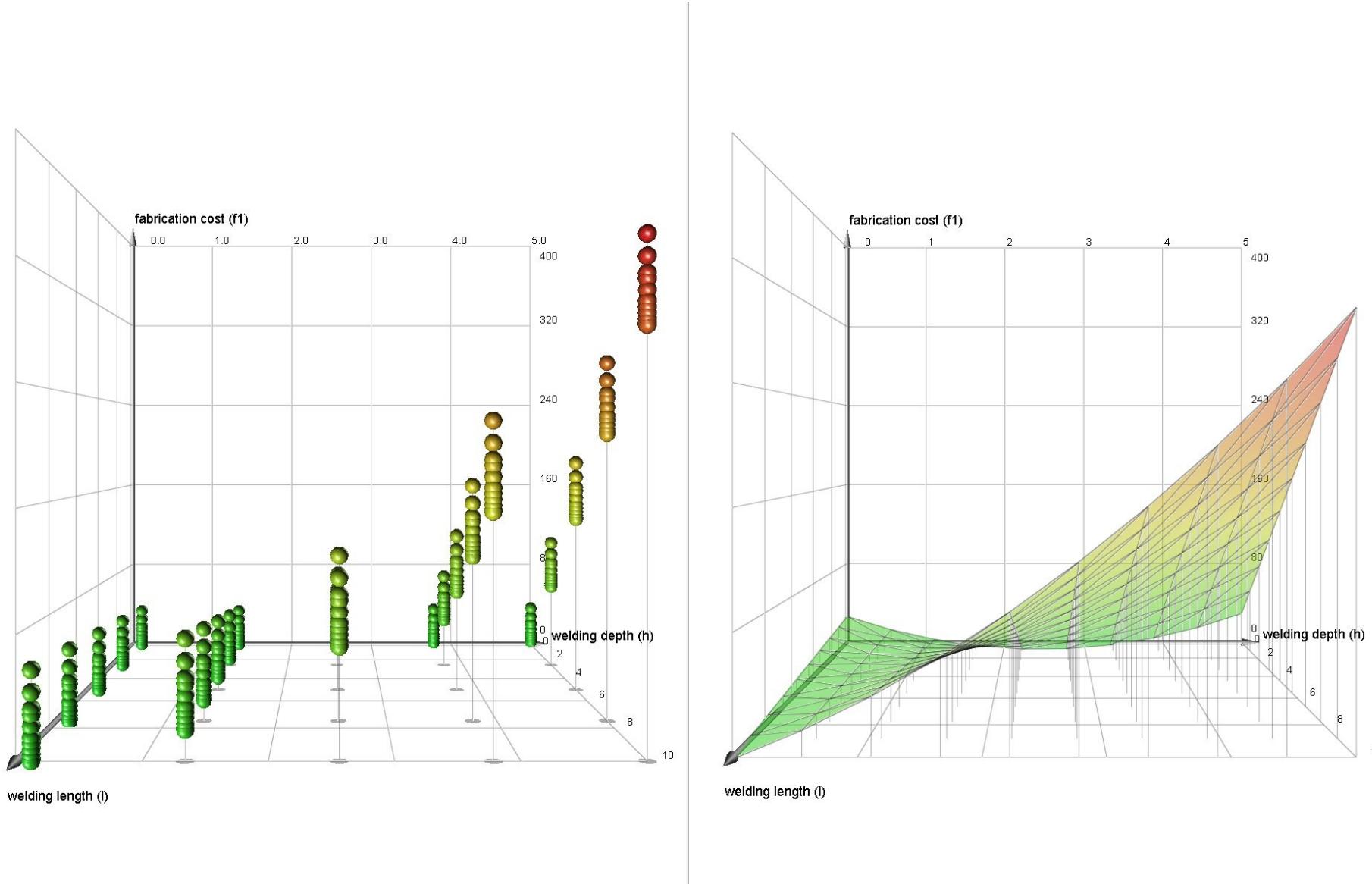
# Результаты имитационного эксперимента



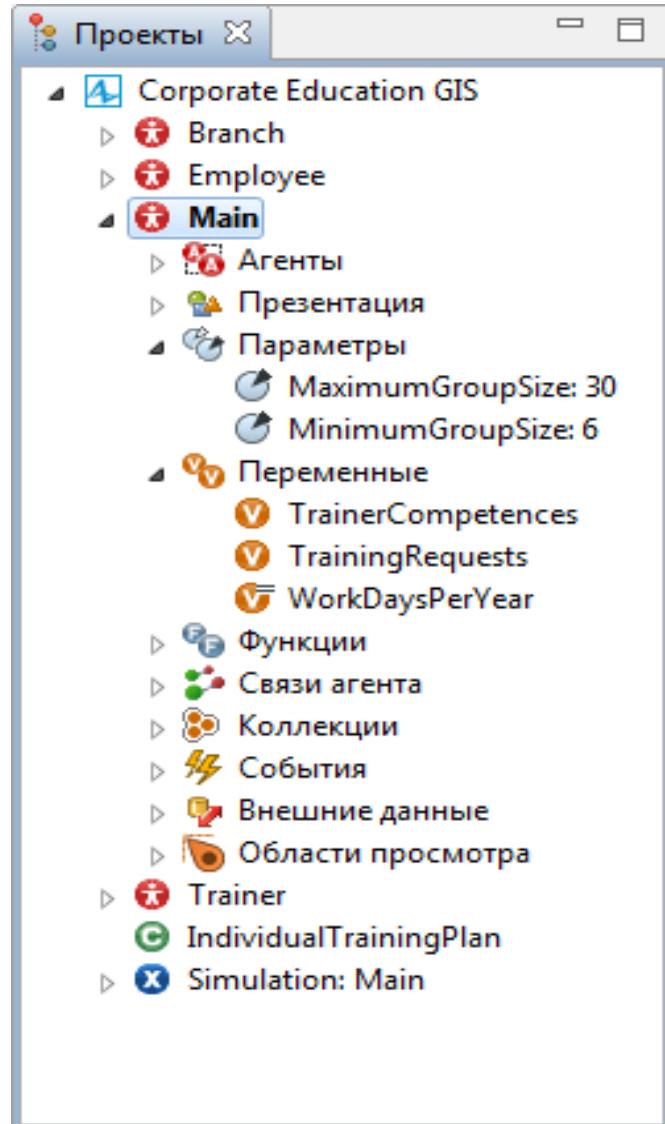
# Результаты имитационного эксперимента



# Эксперименты и поверхность отклика



# Эксперименты в AnyLogic



Модель организована в виде иерархического проекта.

Сама модель образует верхний уровень «дерева».

Следующий уровень образуют

типы агентов,

эксперименты,

база данных,

файловые ресурсы модели.

Элементы, входящие в состав агентов, вложены в соответствующую подветвь дерева типа агентов.

# Эксперименты в AnyLogic

**Простой эксперимент.** При создании модели автоматически создаётся один простой эксперимент Simulation. Эксперимент этого типа используется в большинстве случаев. Другие эксперименты нужны в тех случаях, когда важную роль играют значения параметров модели, и нужно проанализировать, как они влияют на поведение или эффективность моделируемой системы или если нужно найти оптимальные параметры вашей модели.

**Оптимизация.** Позволяет найти значения параметров, при которых достигается наилучший результат моделирования системы, а также изучить поведение модели при заданных условиях. Процесс оптимизации модели заключается в выполнении нескольких прогонов модели с различными значениями параметров и нахождении оптимальных (с учетом заданных ограничений) значений параметров (при которых достигается оптимальное значение заданной целевой функции). Оптимизация в условиях неопределенности производится с помощью репликаций.

**Варьирование параметров.** Производит повторный запуск модели с разными значениями параметров корневого объекта. Этот эксперимент позволяет сравнить поведение модели при разных значениях параметров и оценить степень влияния отдельных параметров на поведение модели. Запуская несколько прогонов модели с фиксированными значениями параметров, вы также можете оценить влияние случайных факторов в стохастических моделях.

# Эксперименты в AnyLogic

**Сравнение "прогонов".** Позволяет интерактивно задавать различные значения параметров и запускать модель с этими значениями. Визуально сравнивает результаты "прогонов" как в скалярной форме, так и в виде наборов данных.

**Монте-Карло.** Получает и отображает набор результатов моделирования для стохастической модели или для модели со стохастически меняющимися параметрами.

**Анализ чувствительности.** Выполняет несколько "прогонов" модели, варьируя значения одного из параметров и показывая, как результаты моделирования зависят от этих изменений.

**Калибровка.** С помощью оптимизатора находит значения параметров модели, при которых результаты моделирования наиболее точно соответствуют заданным данным.

**Обучение ИИ.** Позволяет настроить модель AnyLogic для обучения ИИ-агента с подкреплением (reinforcement learning) и подготовить ее к загрузке на специализированную платформу ИИ.

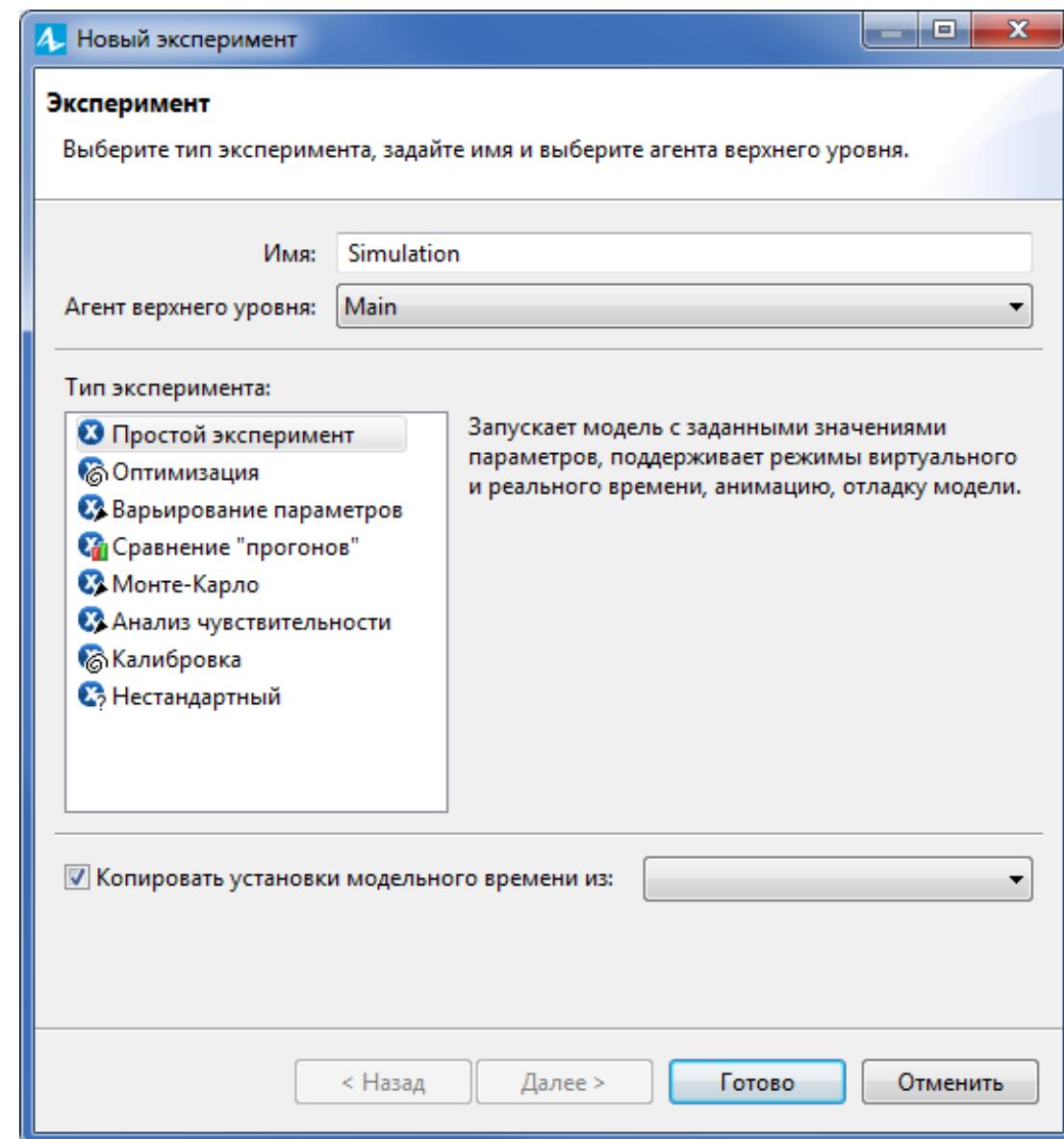
**Нестандартный.** Запускает эксперимент произвольного сценария, написанного пользователем.

# Эксперименты в AnyLogic

При создании модели создается простой эксперимент, названный *Simulation*.

Он запускает модель с заданными значениями параметров, поддерживает режимы виртуального и реального времени, анимацию, отладку модели.

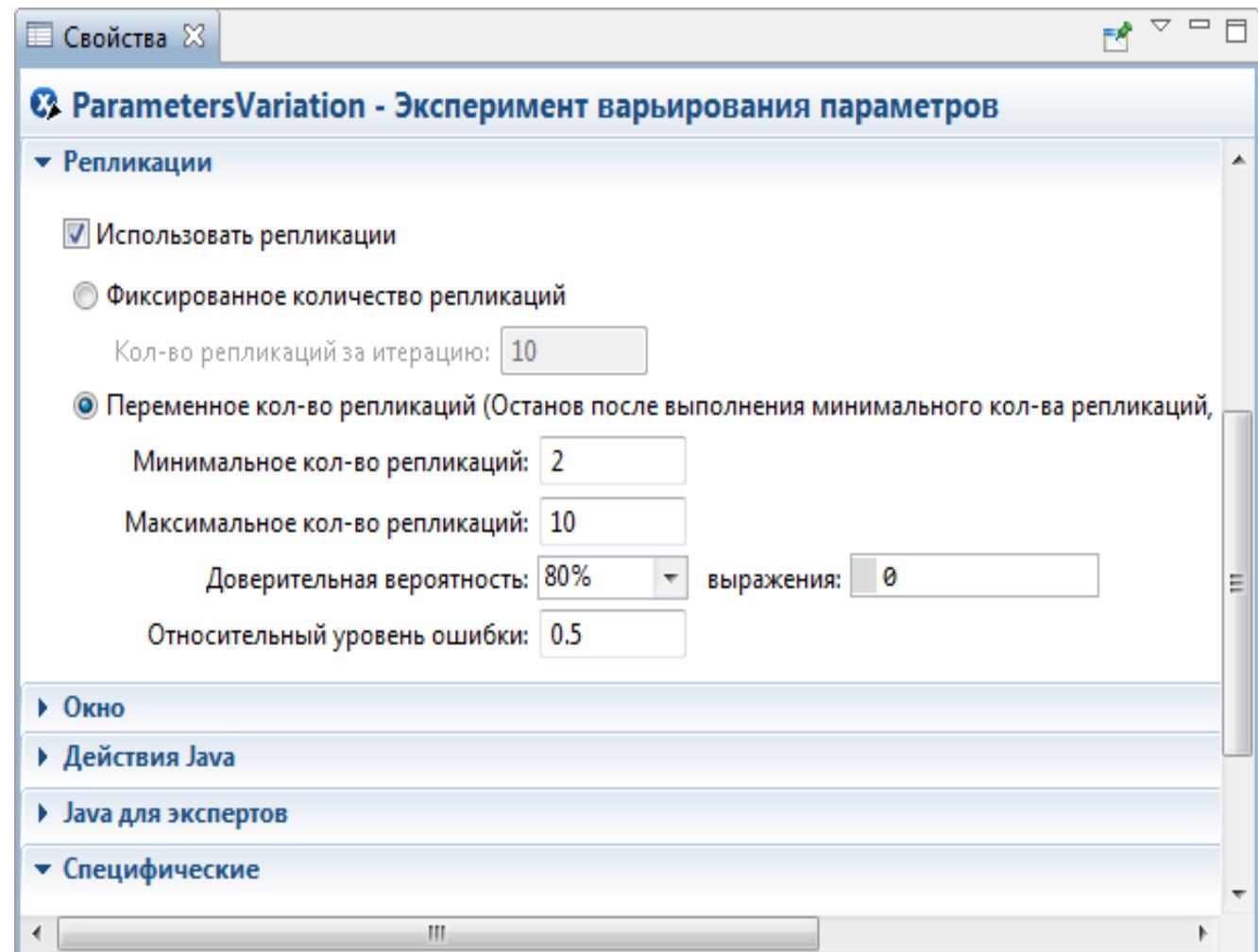
Можно создать несколько экспериментов с разными настройками и менять текущие настройки запуска модели, запуская тот или иной вариант эксперимента.



# Эксперименты в AnyLogic

С помощью эксперимента *варьирования параметров* модель будет автоматически запускаться заданное количество раз с варьирующимиися значениями выбранных параметров.

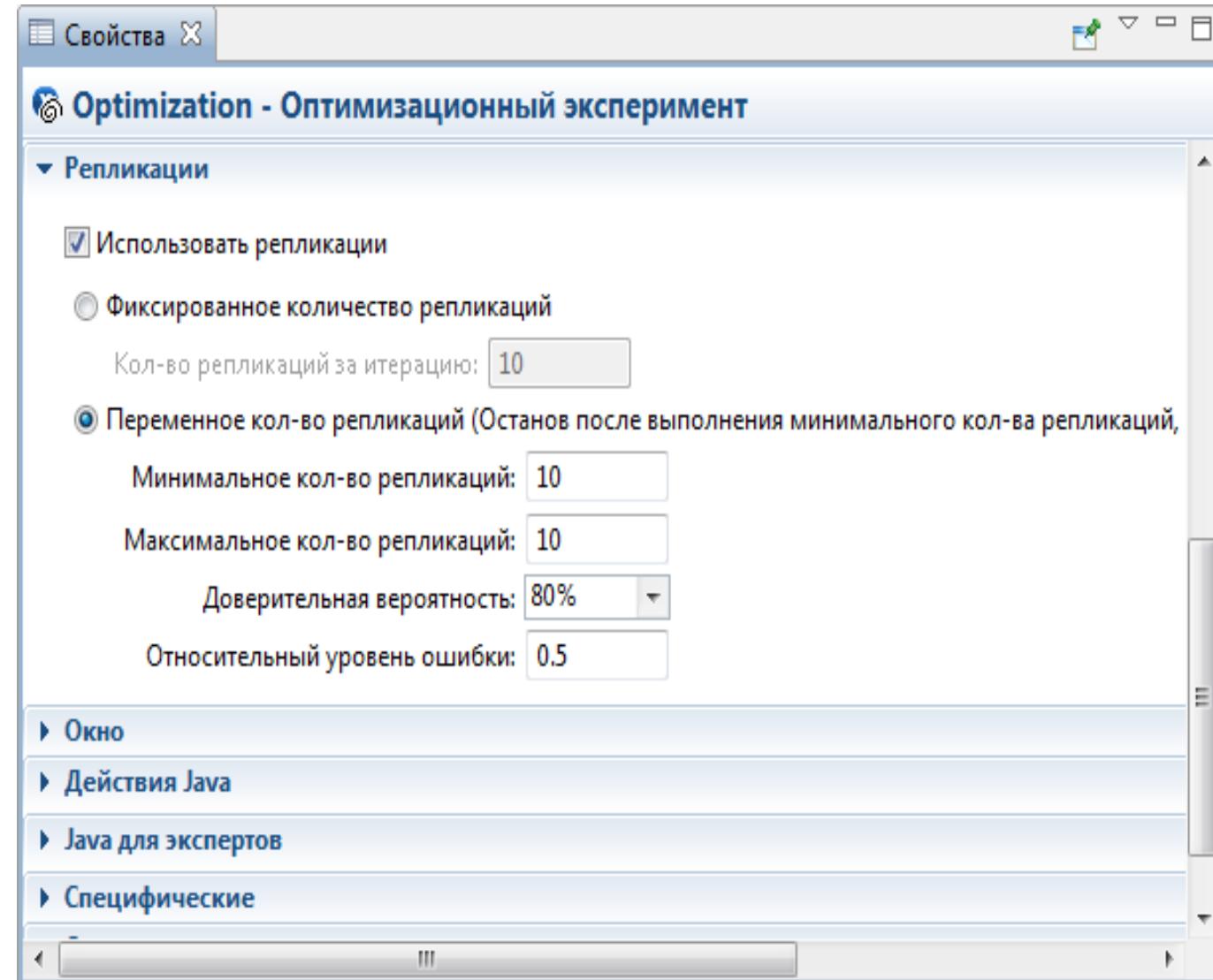
Изучить и сравнить поведение модели при разных значениях параметров можно с помощью диаграмм. Запуск эксперимента с фиксированными значениями параметров позволит оценить влияние случайных факторов в стохастических моделях.



# Эксперименты в AnyLogic

Если нужно изучить поведение модели при каких-то заданных условиях или улучшить производительность модели, найдя значения параметров, при которых достигается наилучший результат работы модели, то можно использовать возможность оптимизации.

Оптимизация модели заключается в последовательном выполнении нескольких прогонов модели с различными значениями параметров и нахождении оптимальных значений параметров.



# Эксперименты оптимизации

Чтобы быстрее найти оптимальное решение задавайте соответствующие настройки :

- ✓ Предлагайте близкие к оптимальным значения оптимизационных параметров.
- ✓ Сократите область поиска, задав границы интервалов допустимых значений для оптимизационных параметров.
- ✓ Исключите из процесса параметры, не влияющие на значение целевой функции.
- ✓ Старайтесь не задавать ограничения, вначале оптимизируйте вашу модель без ограничений и проверьте, удовлетворяет ли найденное решение вашим ограничениям. Если какие-то из ограничений не будут удовлетворены, тогда оптимизируйте модель с ограничениями.

Решайте оптимизационную задачу итеративно:

- ✓ Вначале ограничьтесь грубым приближением проблемы: задайте большие интервалы значений, большие шаги, небольшие точности параметров и целевого функционала.
- ✓ Задайте более точные установки оптимизации. Сократите интервалы допустимых значений и шаги параметров. Начните оптимизацию со значениями, найденными при запуске оптимизации с грубой постановкой задачи.
- ✓ Запустите оптимизацию и изучайте ход процесса до тех пор, пока найденные решения не будут улучшаться медленно. Если вас устроят полученные результаты, то можете остановить оптимизацию; если нет, то повторите процесс заново.

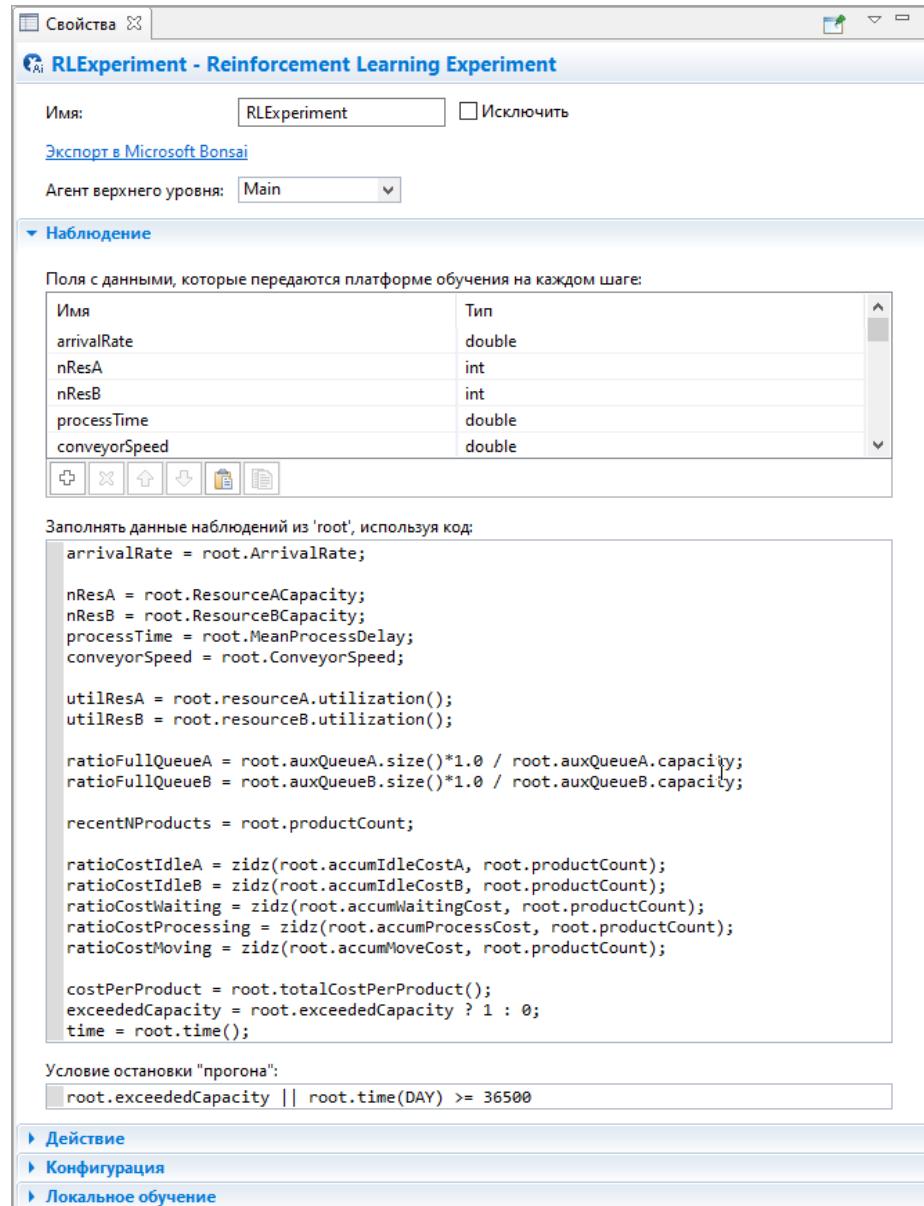
Чем больше оптимизационных параметров задать, тем медленнее будет производиться оптимизация модели.

# Эксперименты в AnyLogic

Эксперимент **Обучения ИИ** (искусственного интеллекта) - особый тип эксперимента, предназначенный для выгрузки готовых для обучения с подкреплением (*reinforcement learning*) моделей AnyLogic на платформы, предназначенные для работы с нейросетями.

Сейчас эксперимент обучения ИИ позволяет экспортить модели AnyLogic на платформу [Microsoft Project Bonsai](#).

В будущем предполагаются другие варианты интеграции.  
В настоящий момент эксперимент ИИ не подразумевает возможности запуска моделей с ML непосредственно в AnyLogic.



# Анализ данных

Популярными инструментами анализа данных являются такие статистические методы, например, как [регрессионный анализ](#) и ANOVA ([дисперсионный анализ](#)).

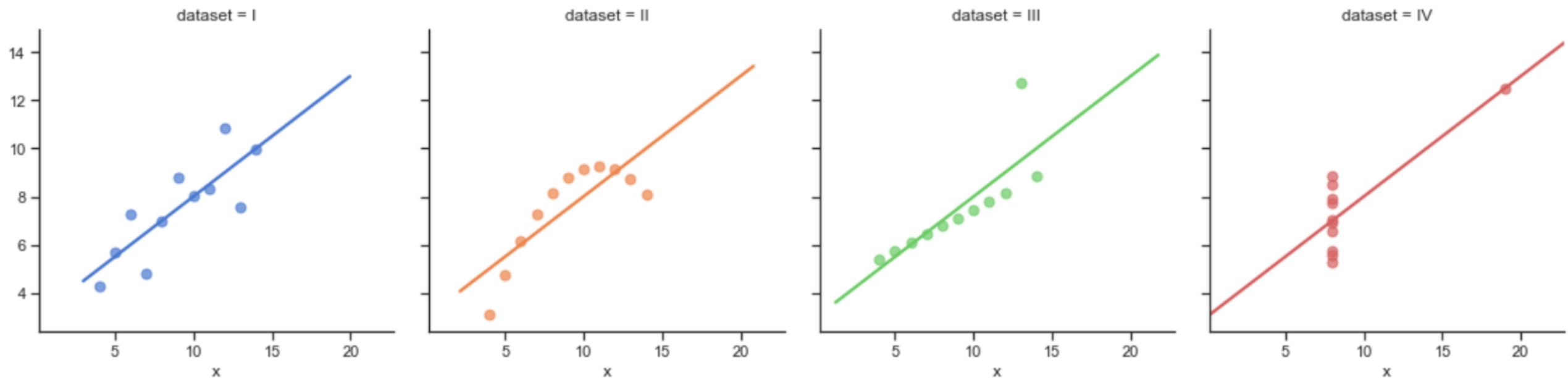
Однако, в процессе анализа должны учитываться и предметные знания.

Статистические методы не являются окончательным доказательством, что какой-либо фактор оказывает определенное влияние, но они дают рекомендации для принятия решений.

К обоснованным выводам статистические методы приводят в сочетании с хорошими инженерными знаниями и здравым смыслом.

Без здравого смысла чисто статистические модели могут вводить в заблуждение.

# Квартет Анскомба



# Анализ данных средствами Python

Методы поверхности отклика (RSM) используются для оценки передаточных функций в оптимальной области.

Затем для оптимизации откликов используется функция оценки (estimate).

В RSM часто используется квадратичная модель.

Инструментами для анализа данных в RSM являются факторный анализ, линейная регрессия и ANOVA.

После того как переменные готовы к анализу используется библиотека *scipy stats* для выполнения метода ANOVA по выбранным признакам. Получив результаты ANOVA, проверим является ли связь между двумя переменными статистически значимой.

Если уровень значимости меньше 0.05, то делается вывод о значимости связи.

```
F, pval = stats.f_oneway(experiment_ds)
```

# Эксперименты (средствами Python)

Однофакторный ANOVA проверяет гипотезу  **$H_0$**  о том, что выборки имеют *одинаковое среднее значение* по совокупности.

Тест применяется к двум и более выборкам, аргументы: *sample1, sample2, ...array\_like*

Аргументов должно быть как минимум два. Если массивы являются многомерными, то все измерения массива должны быть одинаковыми. Тогда для оси входных массивов, по которой будет применяться тест, значение по умолчанию равно 0.

ANOVA возвращает --      вычисленная *F*-статистика теста;  
                                *pvalue* - соответствующее *p*-значение из *F*-распределения.

Однофакторный тест ANOVA содержит важные допущения, которые должны быть выполнены, чтобы полученное *p*-значение было достоверным:

1) выборки независимы; 2) каждая выборка получена из нормально распределенной совокупности; 3) стандартные отклонения всех совокупностей одинаковы – это свойство известно как *гомоскедастичность*.

Если эти предположения *неверны* для заданного набора данных, можно использовать критерий Краскала-Уоллиса или тест Александера-Говерна (хотя и менее мощных).

# Эксперименты (средствами Python)

Однофакторный ANOVA проверяет гипотезу  **$H_0$**  о том, что выборки имеют одинаковое среднее значение по совокупности.

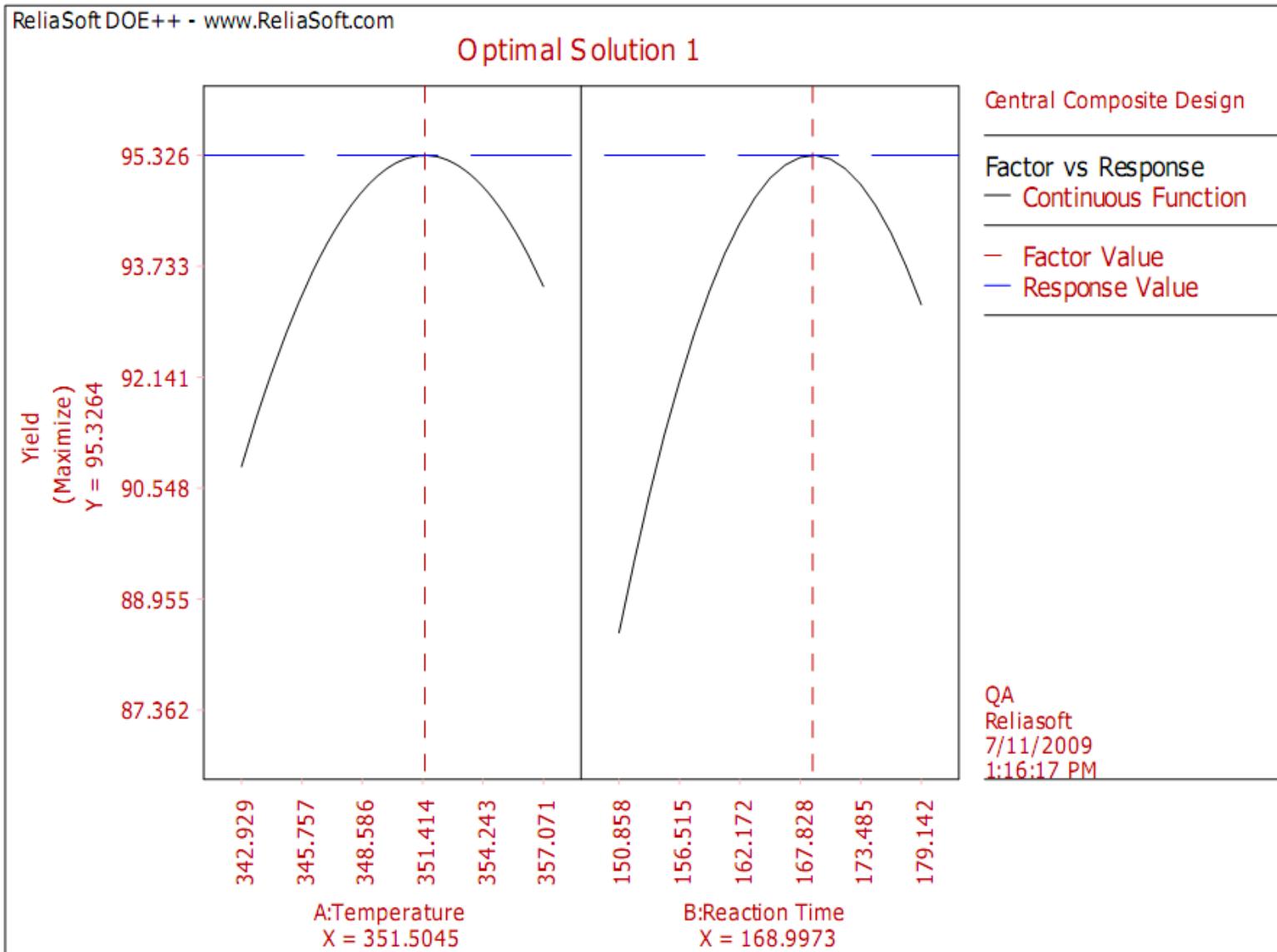
Если рассчитанное значение *p-value* менее 0,05, то можно отвергнуть нулевую гипотезу. Это означает, что у нас достаточно оснований, чтобы утверждать, что существует статистически значимая разница между выборками.

Если отвергается нулевая гипотеза, это значит, что, по крайней мере, одно из средних значений выборок отличается от других, но в ANOVA не указывается, какие средние значения совокупности отличаются.

Если нужно определить и это, то необходимо выполнить специальные (*post hoc*) тесты, также известные как тесты множественных сравнений, например, тест Тьюки, метод Хольма, тест Даннета.

ANOVA подходит для случаев, когда одна переменная непрерывна, а другая категориальна.

# Оптимизация (средствами Python)



# Оптимизация (средствами Python)

```
import numpy as np  
from scipy.optimize import minimize  
import matplotlib.pyplot as plt  
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D  
from matplotlib import cm
```

Optimization terminated successfully.

Current function value: 0.000000

Iterations: 77

Function evaluations: 147

[3.17941614e-09 3.64600127e-09]

Optimization terminated successfully.

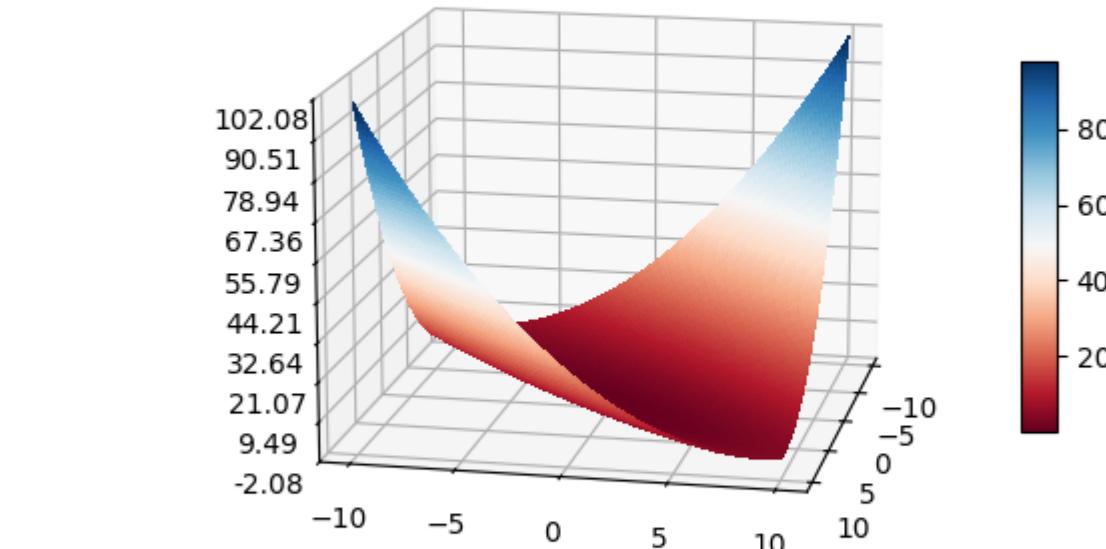
Current function value: 0.000000

Iterations: 3

Function evaluations: 59

[-6.66133815e-14 -1.32338585e-13]

Figure 1



# Оптимизация (средствами Python)

```
x = np.linspace(-10,10,100)
y = np.linspace(-10,10,100)
x, y = np.meshgrid(x, y)
z = 0.26 *(x**2 + y**2) - 0.48*x*y
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(projection='3d')
surf = ax.plot_surface(x, y, z, rstride=1, cstride=1,
                      cmap=cm.RdBu, linewidth=0, antialiased=False)
ax.zaxis.set_major_locator(LinearLocator(10))
fig.colorbar(surf, shrink=0.5, aspect=10)
plt.show()
x0 = np.array([-10, 10])
NelderMeadOptimizeResults = minimize (matyas, x0,
                                       method='nelder-mead', options={'xtol':1e-8, 'disp':True})
print(NelderMeadOptimizeResults.x)
```

Имитационная модель строится для определения характеристик некоторых случайных величин. Такими случайными величинами могут быть, например:

- время обслуживания заявки в системе;
- расход сырья;
- количество выполненных работ;
- время наработки на отказ технического устройства.

Из характеристик случайных величин наиболее интересуют :

матем.ожидание, дисперсия, коэффициент корреляции.

Приближенное значение называют оценка характеристики.

# Эксперименты (средствами Python)

Критерий независимости  $\chi^2$  (*Хи-квадрат*) - это статистический критерий, используемый для анализа того, насколько значима связь между двумя категориальными переменными.

При выполнении теста *Хи-квадрат* каждая категория одной переменной имеет свою частоту по сравнению с категориями второй переменной.

Это означает, что данные могут быть отображены в виде таблицы частот, где строки представляют независимые переменные, а столбцы-зависимые переменные.

Тест *Хи-квадрат* используют, когда объясняющая переменная количественна, а переменная ответа категориальна, что можно сделать, разделив объясняющую переменную на категории, а также для анализа того, насколько значима связь между двумя категориальными переменными.

```
chi_square = scipy.stats.chi2_contingency(table)
```

# Оценка адекватности имитационной модели объекту-оригиналу

Оценка состоит в сравнении статистических характеристик реальной и модельной систем на основе использования методов математической статистики.

Процедура статистического оценивания средних значений выходных статистик ИМ и объекта-оригинала осуществляется как проверка *гипотезы о близости средних значений* каждой  $k$ -й компоненты откликов модели  $Y_k$  известным средним значениям  $k$ -й компоненты откликов реальной системы  $Y_k$ .

Для этого проводят  $N_1$  опытов на реальной системе и  $N_2$  опытов на ИМ ( $N_2 > N_1$ ). Для реальной системы и ИМ определяют значения математического ожидания и дисперсии.

# Оценка адекватности имитационной модели объекту-оригиналу

Гипотезу *о равенстве средних значений* проверяют при помощи параметрического критерия Манны–Уитни или по *t-критерию Стьюдента*.

**Адекватность** модели можно проверить с использованием гипотезы *о равенстве дисперсий отклонений* откликов модели от среднего значения выходных статистик системы. Сравнение дисперсий производится с помощью *F-критерия Фишера*.

Тестирование гипотезы *о согласованности теоретического и эмпирического распределений* откликов реальной системы и откликов разработанной ИМ для размера выборки --

более 100 наблюдений проводят на основе *критерия  $\chi^2$*

для выборок ( $30 < N < 100$ ) используют *критерий Колмогорова – Смирнова*

для малых выборок – *критерий Крамерса–фон Мизеса*

# Оценка количества реализаций

Связь точности  $\epsilon$  и достоверности  $\alpha$  с количеством реализаций  $N$

модели, когда целью эксперимента является определение оценки мат.ожидания некоторой случайной величины  $b$ .

$$\epsilon = t_\alpha \frac{\sigma_b}{\sqrt{N}}$$

$$N = t_\alpha^2 \frac{\sigma_b^2}{\epsilon^2}$$

Фрагмент таблицы распределения Стьюдента

p=(1- $\alpha$ )	0.8	0.9	0.95	0.99	0.995	0.999	k
$t_{\alpha^*}$	1.28	1.66	1.98	2.62	2.86	3.37	120
	1.30	1.67	2.0	2.66	2.91	3.46	60
	1.31	1.7	2.04	2.75	3.03	3.65	30
	1.37	1.81	2.23	3.17	3.58	4.59	10