Masterstudiengang „Simulations- und Experimentaltechnik“
Hochschule Düsseldorf, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik
Prof. Dr.-Ing. Mario Adam

Versuchsplanung und Auswertung
(DoE Design of Experiments)

Literatur (siehe HSD-Bibliothek, teils auch als e-book)

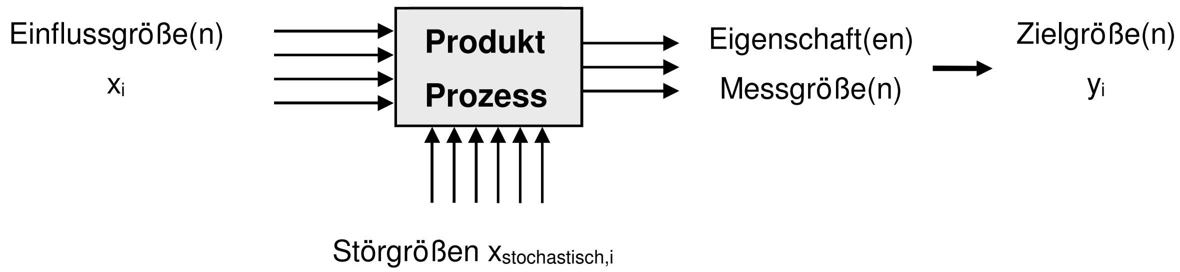
- Kleppmann, Wilhelm: Taschenbuch Versuchsplanung – Produkte und Prozesse optimieren, Hanser Verlag
- Siebertz, Karl et al.: Statistische Versuchsplanung – Desgin of Experiments (DoE), Springer Verlag

Ältere Literatur ohne Neuauflagen:

- Liebscher, Ulrich: Anlegen und Auswerten von technischen Versuchen - eine Einführung, Fortis-Verlag FH, 1999
  (HSD-Bibliothek: unter 11 WAS 6)
- Scheffler, Eberhard: Statistische Versuchsplanung und –auswertung – eine Einführung für Praktiker, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 3. Auflage 1997
  (HSD-Bibliothek: unter 12 TKP 8 (3))
- Bandemer, Hans et al.: Statistische Versuchsplanung, Teubner-Verlag, 4. Auflage, 1994
  (HSD-Bibliothek: unter 11 TKP 7 (4))

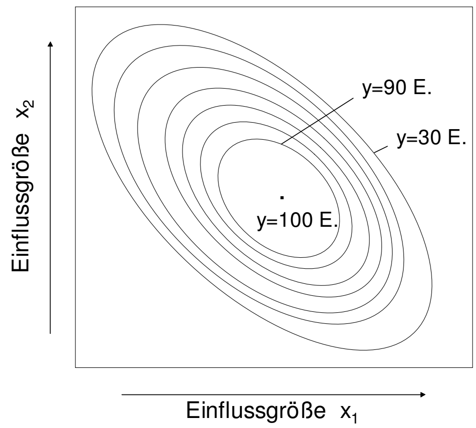
1. Einleitung: Problembewusstsein und Motivation

Allgemeine Beschreibung technischer Systeme:



Beispielhafter Systemzusammenhang

Zielgröße y in Abhängigkeit von 2 Einflussgrößen x_1 und x_2



Methoden zur Untersuchung des Verhaltens technischer Systeme in Wissenschaft, Produktentwicklung, Prozessoptimierung, etc.:

- analytisch: theoretische Herleitung bzw. Berechnung auf Basis physikalischer Gesetzmäßigkeiten
- empirisch: Parametervariationen bei praktischen Experimenten oder Rechner-Simulationen

  = Inhalt der Lehrveranstaltung

  Beispiel aus meiner Berufspraxis (Experiment): Verminderung der NOx- und CO-Emissionen eines Gasbrenners durch Variation der Geometrie von Brenner und Brennkammer

Mögliche Fragestellungen:

- allgemeinen funktionalen Zusammenhang $y = f(x_i)$ ermitteln
- Maximum oder Minimum von y finden
- Bereich finden, in dem y bestimmte Werte annimmt
- etc.

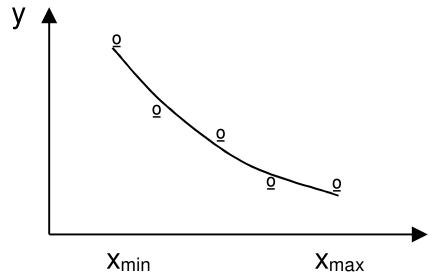
1.1 Konventionelle Methoden bei empirischen Untersuchungen

Mögliche Vorgehensweisen:

- Fall A: 1 Einflussgröße, d.h. $y = f(x_1)$

  z.B.: Bremsweg = f (Bremsscheibendurchmesser)
  Schweißnahtgüte = f (Vorschubgeschwindigkeit)
  energetischer Wirkungsgrad = f (Systemdruck)

  - Regressionsfunktion mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmen: Variation der Einflussgröße x_1, Messung der Zielgröße y z.B. entsprechende Bremsscheiben herstellen und Bremsweg damit testen (alle anderen Einflussgrößen konstant), Regressionskurve durch die Messergebnisse



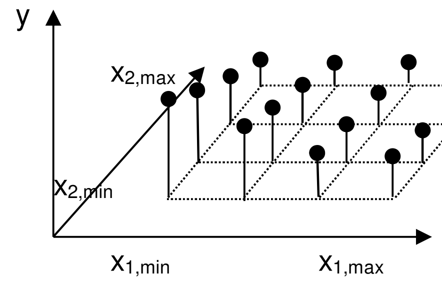
Anzahl Versuchspunkte:

- je nach gewünschtem Aussagegehalt
- mindestens 2 bei linearem Zusammenhang und 3 bei quadratischem Zusammenhang

- Fall B: 2 Einflussgrößen, d.h. $y = f(x_1, x_2)$

  z.B.: Bremsweg = f (Bremsscheibendurchmesser, Reifenprofiltiefe)

  - Zufallsmethode: zufällige Variation von x_1 und x_2 und Messung von y
  - Gitternetzmethode: Variation von x_1 und x_2 in einem Gitternetzraster



Anzahl Versuchspunkte:

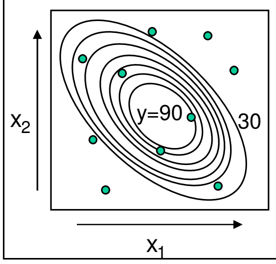
- je nach gewünschtem Aussagegehalt
- = Stufenzahl$^{\text{Einflussgrößenzahl}}$
- hier $4^2 = 16$

  - Vereinfachte Einfaktormethode: Variation von x_1 (bei x_2 = konstant), optimale Einstellung von x_1 bestimmen und bei den weiteren Versuchen zur Ermittlung der optimalen Einstellung von x_2 nicht mehr verändern
  - Einfaktormethode: wie vereinfachte Einfaktormethode, jedoch wird die Optimierung für alle Faktoren mehrfach durchlaufen (siehe Bild „Konventionelle Methoden der Versuchsplanung“)

Konventionelle Methoden der Versuchsplanung

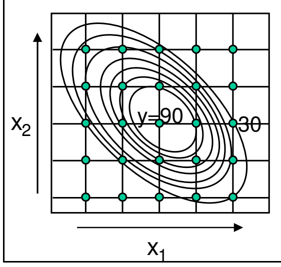
bei 2 Einflussgrößen x_1 und x_2

Zufalls-Methode



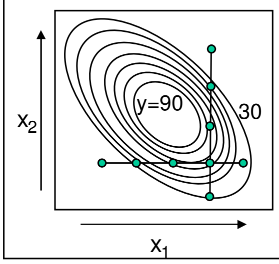
- zufällige Ergebnis-werte
- hohe Anzahl an Versuchen

Gitterlinien-Methode



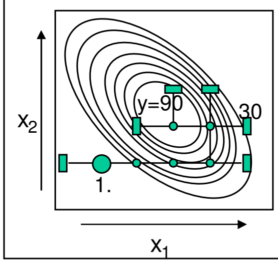
- bei feinem Gitter präzises Verfahren (--> sehr viele Versuche)
- Möglichkeit zur Interpolation, Regression

Einfaktor-Methode (vereinfacht)



- optimale Einstellung für 1. Faktor suchen, davon ausgehend Optimum für 2. Faktor suchen
- unpräzises Verfahren, da das Ergebnis von den Startwerten (hier von x_2) abhängt

Einfaktor-Methode



- Vorgehensweise der vereinfachten Methode so oft wiederholen, bis sich das Ergebnis nicht mehr verbessert
- präzises Verfahren bei kleiner Schrittweite (--> viele Versuche)
- nur einzelne Ergebniswerte

- Fall C: 5 Einflussgrößen, d.h. $y = f(x_1, \ldots, x_5)$

  z.B.: Bremsweg = f (Bremsscheibendurchmesser, Reifenprofiltiefe, Reifenbreite, Straßenrauhigkeit, Straßenfeuchtigkeit)

  - analoge Vorgehensweisen wie bei 2 Einflussgrößen, jetzt im 5-dimensionalen statt im 2-dimensionalen Versuchsraum, wobei die Anzahl an Versuchen drastisch zunimmt,
  - z.B. Gitternetzmethode, jede Einflussgröße auf 4 Stufen variiert → $4^5 = 1024$ Gitternetz- bzw. Versuchspunkte

- Fall D: 20 Einflussgrößen, d.h. $y = f(x_1, \ldots, x_{20})$

  z.B.: Bremsweg = f (Bremsscheibendurchmesser, Reifenprofiltiefe, Reifenbreite, Straßenrauhigkeit/-feuchtigkeit, Reifendruck, Profilmuster, Gummimischung, c_W-Wert des Fahrzeuges, Pedaldruck des Fahrers, etc.)

  - kaum handhabbar

Charakteristische Mängel bei den bislang diskutierten Vorgehensweisen:

- großer Aufwand bzw. viele Versuchspunkte, vor allem bei der Gitternetzmethode und bei mehr als 2 Einflussgrößen
- eingeschränkte Erkenntnis, vor allem bei der Zufallsmethode und den Einfaktormethoden
  - unpräzise Ergebnisse, unter anderem weil Wechselwirkungen*) nicht berücksichtigt werden (*) Wirkung eines Faktors ist vom Wert eines anderen Faktors abhängig)
  - keine Modellbildung bzw. Regressionsfunktion bzw. nur einzelne Werte $y=f(x_i)$
  - nur Maxima bzw. Minima bestimmbar, keine Aussagen über Wertebereiche
- Achtung: streuende Messergebnisse bei - vermeintlich - konstanten Randbedingungen

1.2 Ansätze der klassischen Statistischen Versuchsplanung

Wichtigstes Kennzeichen: Vergleichsweise hoher Erkenntnisgewinn bei vergleichsweise geringem Versuchsaufwand !

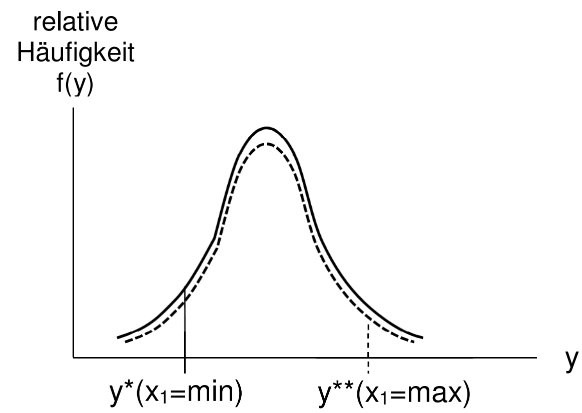
- vergleichsweise hoher Erkenntnisgewinn
  - aus den Messergebnissen wird eine Regressionsfunktion bestimmt, welche im gesamten Versuchsraum gilt → Funktionswerte an beliebigen Punkten im Versuchsraum, Maxima oder Minima, Wertebereiche etc. können mit dieser Funktion berechnet werden

    Beispiel für 5 Einflussfaktoren (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) und eine Funktion mit Termen für lineare und quadratische Abhängigkeiten und 2fach-Wechselwirkungen:

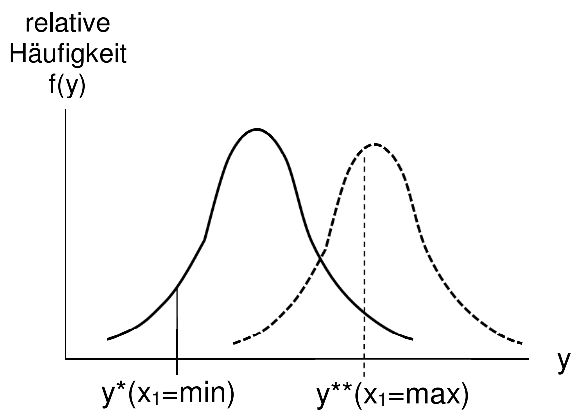
    $y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_6 x_1^2 + a_7 x_2^2 + \ldots + a_{11} x_1 x_2 + \ldots + a_{20} x_4 x_5$

  - es findet eine Bewertung der beobachteten „Wirkungen" der Einflussgrößen auf die Zielgröße(n) statt: „Gibt es die Wirkung tatsächlich oder wurde sie nur zufällig gemessen?"

    Beispiel: Veränderung der Einflussgröße x_1 von min- nach max-Einstellung → Messung zweier unterschiedlicher Werte für die Zielgröße y



Möglichkeit 1: x_1 hat <u>keine</u> Wirkung auf y (→ die y-Häufigkeitsverteilungen für die min/max-Einstellungen von x_1 liegen übereinander). Der beobachtete Unterschied resultiert aus der natürlichen Streuung der Messwerte - bei der Messung mit x_1=min wurde zufällig ein Wert am unteren, bei der Messung mit x_1=max am oberen Rand der jeweiligen Häufigkeitsverteilung gemessen



Möglichkeit 2: x_1 hat eine Wirkung auf y (→ die y-Häufigkeitsverteilungen für die min/max-Einstellungen von x_1 liegen <u>nicht</u> übereinander). Der beobachtete Unterschied resultiert aus einer tatsächlich vorhandenen Wirkung von x_1 auf y.

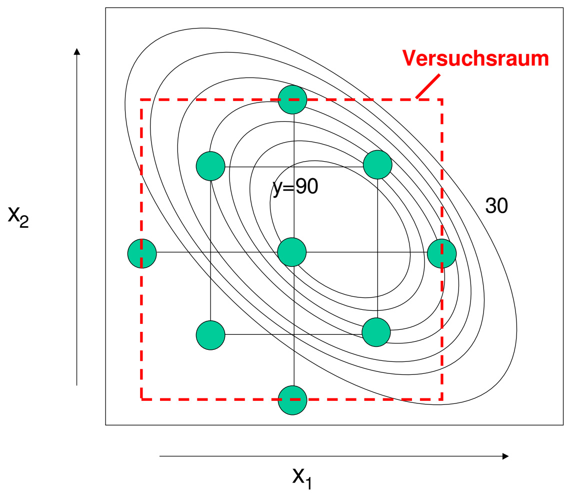
- vergleichsweise geringer Versuchsaufwand

  z.B. bei 5 Einflussfaktoren (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) und Variation jedes Faktors auf 3 Stufen

  - Gitternetz-Methode: 3^5= 243 kombinatorische Möglichkeiten bzw. Versuchspunkte
  - DoE-Standardversuchsplan: 27 Versuchspunkte
  - Weitere Verringerung der Anzahl an DoE-Versuchspunkten bei gezieltem Verzicht auf Erkenntnis

DoE Design of Experiments

Statistische Versuchsplanung und -auswertung



- geringe Anzahl an Versuchen
- hoher Erkenntnisgewinn durch Modellbildung $y = f(x_i)$ (Regressionsfunktion)
- Regressionsfunktion gilt im gesamten Versuchsraum

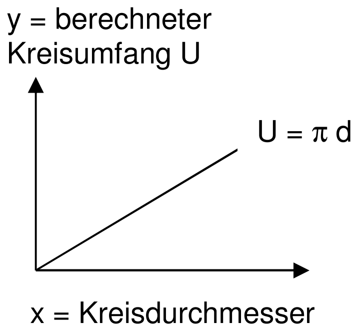
Gründe für den vergleichsweise geringen Versuchsaufwand:

- Beschränkung auf 2 bzw. 3 Stufen bei linearen bzw. quadratischen Abhängigkeiten
- Die Versuchsergebnisse an allen Versuchspunkten werden bei der Auswertung mehrfach genutzt
- Bestimmung quadratischer Abhängigkeiten meist nur an 1 charakteristischen Stelle im Versuchsraum (um das Zentrum herum)

Wieso *statistische* Versuchsplanung?

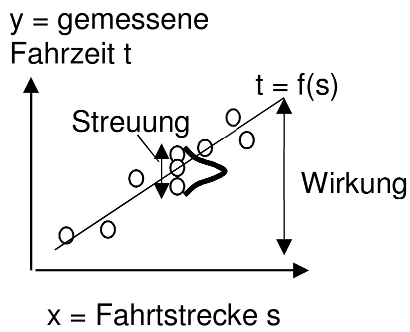
Eindeutige Ergebnisse:

Beispiel:



Streuende Ergebnisse:

Beispiel:



Änderung der Zielgröße Δ y, hervorgerufen durch

(a) Änderung der Einflussgrößen Δx_i → resultierendes Δy = „Wirkung“, „Effekt“

(b) Änderung der Störgrößen $\Delta x_{stochast.,i}$ → resultierendes Δy = „Streuung“, „Rauschen“

wenn

(b) << (a), dann sind statistische Methoden nicht erforderlich, aber auch nicht schädlich (→ auch bei Simulationen einsetzbar)

(b) < = bzw. > (a), dann sind statistische Methoden sinnvoll bzw. unverzichtbar; sie liefern Wahrscheinlichkeitsaussagen (!!) zur wahren Größe der gesuchten Werte

Ursachen für streuende d.h. unterschiedliche Versuchsergebnisse bei (vermeintlich) konstanten Randbedingungen:

- die Zielgröße ist nicht nur von bewusst einstellbaren Einflussgrößen abhängig, sondern auch von Störgrößen, welche sich zufällig (= stochastisch) verändern können, d.h. von
  - Größen, deren Einfluss nicht bedacht wurde
  - Größen, die nicht beeinflussbar sind (z.B. Wetter, ...)
  - Einstellfehler bzgl. der Einflussgrößen und Messfehler bzgl. der Zielgrößen
- es können aus verschiedensten Gründen große Einzelabweichungen, so genannte Ausreißer, auftreten (z.B. Zahlendreher, ...)

Notwendige Maßnahmen:

- Sorgfalt und Kontrolle, um Einstell-/Messfehler und Ausreißer zu vermeiden
- mehrfache Messungen und Betrachtung von Streuungsmaßen und Mittelwerten, um Einflüsse bzw. Fehler durch Störgrößen zu berücksichtigen (= Statistik)
- Maßnahme, um den Versuchsaufwand bei DoE in Grenzen zu halten: Ermittlung der Versuchsstreuung meist nur an 1 charakteristischen Stelle im Versuchsraum (im Zentrum)

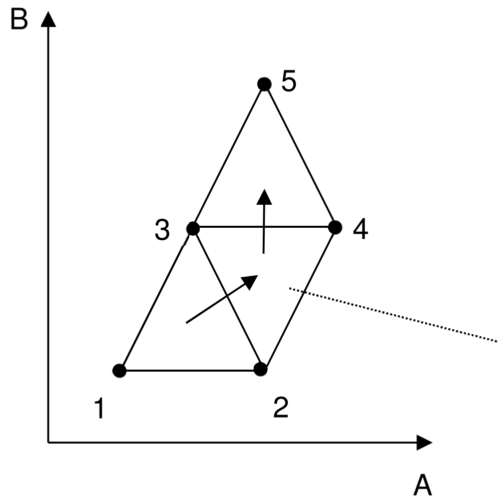
1.3 Weitere Methoden der Versuchsplanung und Auswertung

neben den in Kapitel 1.1 und 1.2 genannten

speziell in laufenden Prozessen, Produktionen, Anlagen

- Veränderungen von Einflussgrößen in laufenden Prozessen dürfen bei unbekannter Wirkung auf die Zielgrößen in der Regel nur in kleinen Schritten vorgenommen werden, da zu große negative Wirkungen auf die Zielgrößen ausgeschlossen werden müssen.
- aber: Optimierung nicht ganz so einfach bei mehreren Zielgrößen

• Simplex- Methode



Vorgehensweise: Versuchspunkt VP mit schlechtestem Ergebnis wird gespiegelt

(i) VP 1 mit schlechtestem Ergebnis → VP 4

(ii) VP 2 mit schlechtestem Ergebnis → VP 5

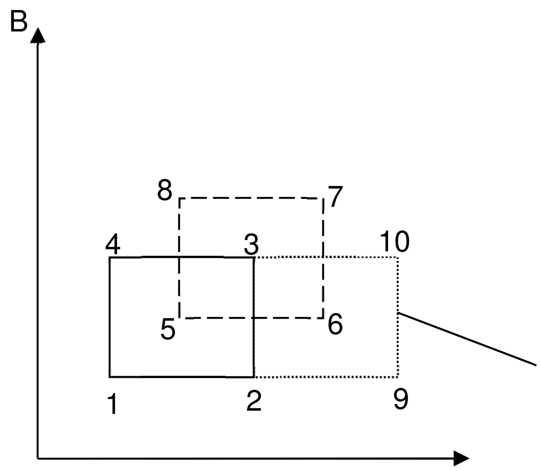
etc.

2 dim. Versuchsraum: gleichseitiges Dreieck

3 dim. Versuchsraum: gleichseitiger Tetraeder

etc.

• EVOP – Methode (Evolutionäre Operationen)



Vorgehensweise: Neuer Versuchsplan um Versuchpunkt mit bestem Ergebnis

(i) VP 3 mit bestem Ergebnis → VP 5-8

(ii) VP 6 mit bestem Ergebnis → VP 9-10

etc.

= faktorieller Kern bei DoE

Vergleich EVOP ↔ Simplex:

- Vorteil EVOP: jeder einzelne Versuchsplan ist wie bei DoE auswertbar → mehr Kenntnisse über Wirkzusammenhänge
- Nachteil EVOP: höherer Aufwand, mehr Versuchspunkte

- Künstliche Neuronale Netze
  - zur Beschreibung der Wirkzusammenhänge
  - „gefüttert“ mit Ergebnissen unsystematisch eingestellter Versuchspunkte z.B. aus dem laufenden Betrieb einer Anlage
  - sehr viele „Versuchspunkte“ bzw. Datensätze $y_i = f(x_i)$ notwendig

<u>Speziell bei Simulationen</u>

- charakteristisch (im Vergleich zu Parametervariationen bei Experimenten):
  - keine Streuung der Ergebnisse → wiederholte Messungen unter konstanten Randbedingungen sind nicht nötig
  - schneller in der Durchführung → Verringerung der Anzahl der Versuchspunkte ist nicht so entscheidend
  - Zwischenwerte der Einflussgrößen „einfach“ einstellbar (es müssen keine Versuchsmuster hergestellt werden) → Verringerung der Anzahl der Einflussgrößen-Stufen ist nicht so entscheidend
- Latin Hypercube Designs zur Versuchsplanung
  (→ siehe separates Kapitel)
- Künstliche Neuronale Netze zur Beschreibung der Wirkzusammenhänge
  (→ siehe separates Kapitel)

1.4 Begriffe und Definitionen

- **DoE = Design of Experiments = Statistische Versuchsplanung =**

  arbeitseffiziente Methodik zur systematischen Erstellung von Versuchsplänen, deren Abarbeitung und quantitativen Auswertung

  mit dem Ziel der Modellbildung und/oder der Ermittlung relevanter Einflussgrößen und/oder der gewünschten Optimierung der Zielgrößen (maximal, minimal, innerhalb einer bestimmten Bandbreite, robust gegen Störeinflüsse, ...)

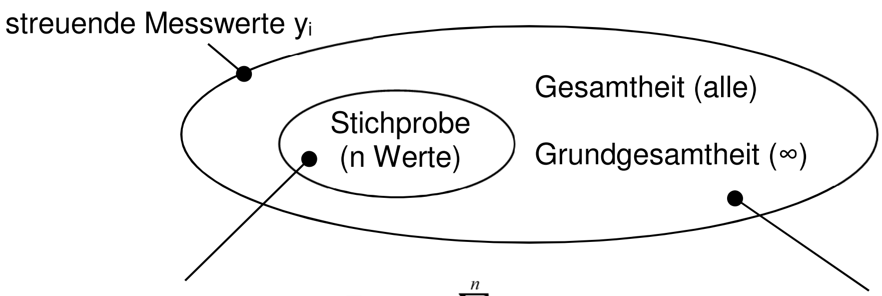
  bezüglich der Funktionsweise eines Produktes oder Prozesses.
- **Modell**: hinreichend genaue Beschreibung eines gerade interessierenden Systemverhaltens in einem bestimmten Bereich der Einflussgrößen (anders als ein Naturgesetz); mehrere Modelle können in Übereinstimmung mit den Versuchsergebnissen stehen
  hier: Regressionsfunktion = mathematisches Modell für den gesuchten Zusammenhang $y = f(x)$
- **Einflussgröße** oder **Einflussfaktor**: kontrolliert einstellbarer Parameter mit (vermuteter) Wirkung auf die Zielgröße, variabel oder konstant (im Gegensatz zur unkontrollierten Störgröße)
  Anmerkung:
  - bei mehreren Einflussgrößen sollen diese unabhängig voneinander einstellbar sein
  - Zusammenfassung mehrer Einflussgrößen zu einer ist möglich, z.B. in Form von
    - dimensionslosen Kennzahlen wie der Reynolds-Zahl bei Strömungsvorgängen
    - spezifischen Kenngrößen zur Vermeidung unsinniger Kombinationen von Einflussgrößenwerten in einem Versuchspunkt
      Beispiel: Speichervolumen pro Quadratmeter Kollektorfläche; ansonsten würde max-Wert des Kollektorfeldes auch kombiniert mit min-Wert des Speichervolumens
- **Zielgröße**: abhängige Variable bzw. interessierende Eigenschaft des Systems
- **Stufen**: Einstellwerte der Einflussgrößen
- **Versuchsraum**: begrenzt durch die gewählten maximalen und minimalen Werte der Einflussgrößen
- **Versuchspunkt**: die für einen Versuch festgelegte Stufenkombination aller variablen und konstanten Einflussgrößen
- **Versuchsplan**: zusammen gehörende, systematisch hergeleitete Versuchspunkte
  Anmerkung: umso umfangreicher je größer die Zahl der variablen Einflussgrößen, der Grad des Modellansatzes (linear, quadratisch) und die geforderte Präzision der Ergebnisse (kleine Streuung bzw. Standardabweichung → Wiederholungen)
- **Dimension des Versuchsraumes**: entspricht der Anzahl der Einflussgrößen
- **Ordnung des Versuchsplanes**: 1. Ordnung = Einflussgrößen auf 2 Stufen (linear);
  2. Ordnung = Einflussgrößen auf 3 Stufen (quadratisch)

2. Statistische Grundlagen

2.1 Streuende Messergebnisse an 1 Versuchspunkt

Wiederholte Versuche unter (vermeintlich) konstanten Randbedingungen liefern unterschiedliche Zahlenwerte für das Ergebnis aufgrund von zufälligen Unterschieden z.B. bei den verwendeten Materialien, den Umgebungsbedingungen, der Versuchsdurchführung oder der Ermittlung der Messergebnisse.

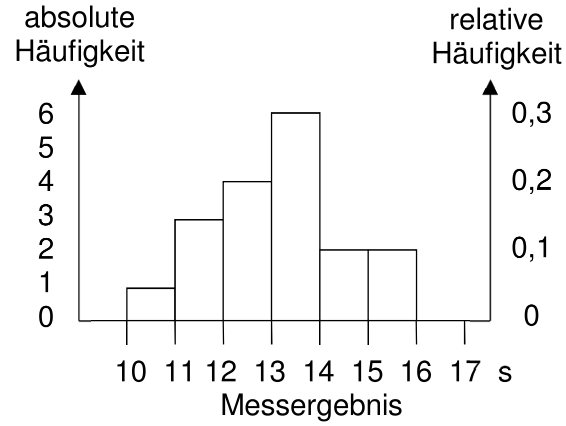
Rechnerische Auswertung von Messergebnissen:



Arithmetischer Mittelwert $\bar{y}$ (auch andere Mittelwerte sind möglich)	$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$	wahrer Wert μ
Streuung, Varianz s^2	$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}{(n-1)}$	Streuung der (Grund-)Gesamtheit σ^2
Standardabweichung s	$s = \sqrt{s^2}$	Standardabweichung der (Grund-)Gesamtheit σ
Variationskoeffizient v	$v = \frac{s}{\bar{y}}$	

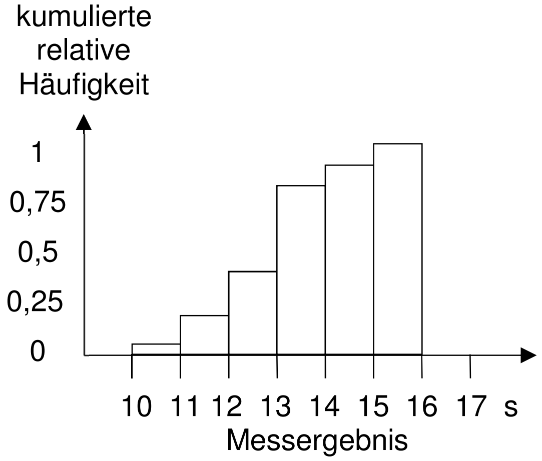
- die an der Stichprobe ermittelten Werte sind erste Anhalts- bzw. Schätzwerte für die wahren Werte der Grundgesamtheit (mehr nicht)
- Anmerkung: n - 1 = Anzahl der Freiheitsgrade für $(y_i - \bar{y})$
  (Hintergrund: mit $\bar{y}$ und n -1 y_i-Werten liegt der n-te y_i-Wert fest)

Grafische Auswertung von Messergebnissen: Darstellung der Häufigkeitsverteilung ihres Auftretens in Form von Diagrammen



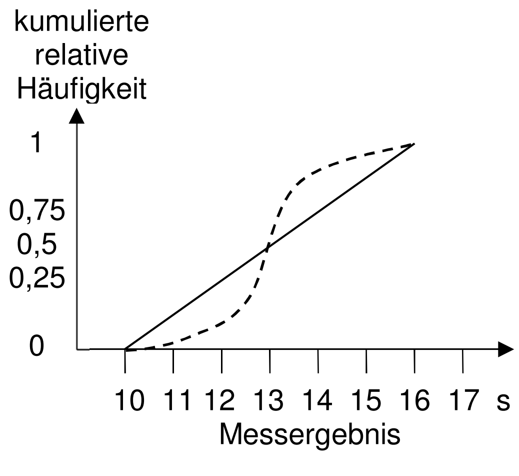
Absolute bzw. relative Häufigkeit

- Wertebereich der Messergebnisse (= dimensionsbehaftete Zahlenwerte) in gleich große „Klassen“ unterteilen
- absolute Häufigkeit = Anzahl der Messwerte in jeder Klasse
- relative Häufigkeit = Anzahl der Messwerte in jeder Klasse dividiert durch die Gesamtzahl der Messwerte (z.B. zum Vergleich von Messreihen mit unterschiedlich vielen Werten sinnvoll)



Kumulierte relative Häufigkeit
(= relative Summenhäufigkeit)

- Summe der Messwerte unterhalb einer „Klassen-Grenze“ dividiert durch die Gesamtzahl der Messwerte



Wahrscheinlichkeitsnetz

- kumulierte relative Häufigkeits-verteilung
- mit geeignet umskalierter, nicht linearer y-Achse (= %-Achse), so dass sich für eine Gauß‘sche Normalverteilung statt einer S-Kurve eine Gerade ergibt

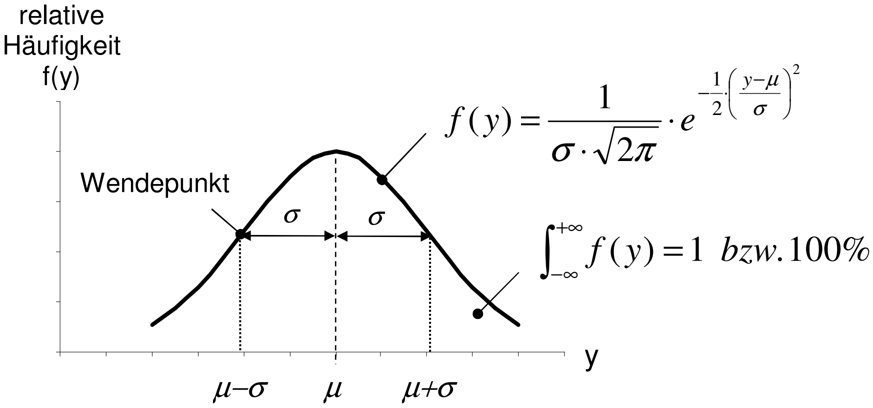
Bei Messwertanzahl → ∞ (= Grundgesamtheit aller Messwerte) und Klassenbreite → 0 gehen die Häufigkeitsverteilungen über in stetige Funktionen

- relative Häufigkeit → Verteilungsdichte der Grundgesamtheit
- kumulierte relative Häufigkeit → Verteilungsfunktion der Grundgesamtheit
- mathematische Beschreibung der Häufigkeitsverteilung = Wahrscheinlichkeitsmodell (z.B. Gaußsche Normalverteilung)

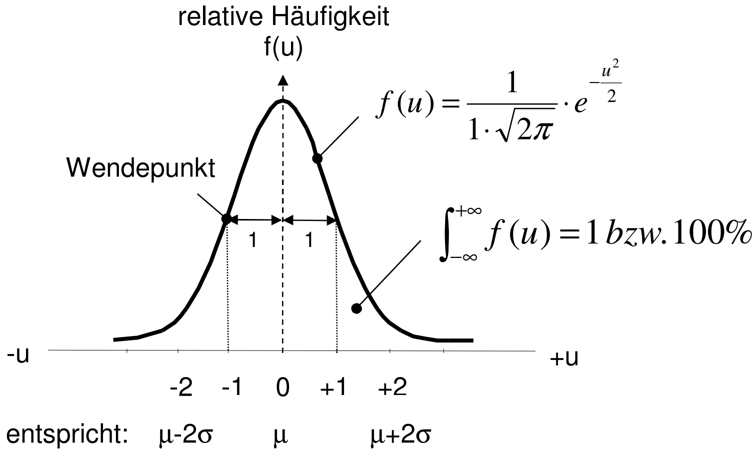
Gaußsche Normalverteilung

- gilt nur für n = ∞
- beschreibt an technischen Systemen gemessene, zufällig (= stochastisch) streuende Ergebnisse in der Regel sehr gut
  (Hintergrund, Zentraler Grenzwertsatz der Mathematik: Bei vielen unabhängigen Einflussfaktoren strebt die Häufigkeitsverteilung der davon in Summe beeinflussten Messgröße zur Normalverteilung, egal welche Häufigkeitsverteilung jeder Einflussfaktor für sich produzieren würde)

Dimensionsbehaftete Normalverteilung
(Auftragung der relativen Häufigkeit über der Messgröße y)



Standardisierte (= verallgemeinerte) Normalverteilung
(durch Transformation bzw. Normierung mit $u = \frac{y-\mu}{\sigma}$)

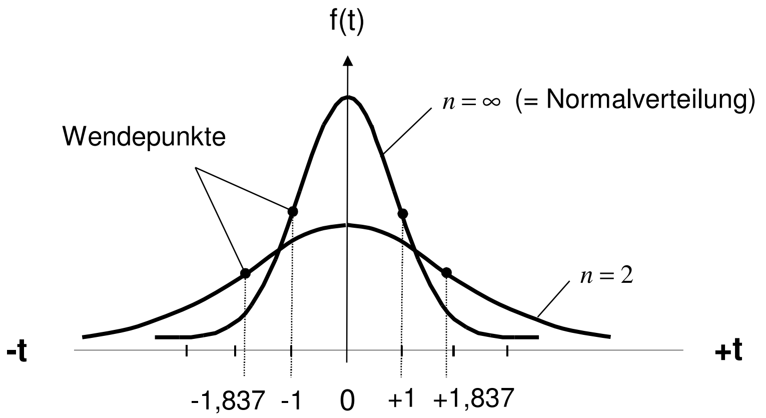


Wahrscheinlichkeitsverteilung für f(u) (analog für f(y))

- Integral f(u) [-1 ... + 1] = 68,27 % bzw. 0,6827
- Integral f(u) [- 2 ... + 2] = 95,45 %
- Integral f(u) [- 3 ... + 3] = 99,73 %
- Integral f(u) [- ∞ ... + ∞] = 100 %

Student´sche t-Verteilung (normiert mit $t = \frac{y - \overline{y}}{s}$)

für n < ∞ → Normalverteilung geht in die Student´sche t-Verteilung über; je kleiner die Anzahl der Messungen n bzw. der Freiheitsgrad (n-1), umso flacher bzw. breiter die Häufigkeitsverteilung
→ aus wenigen Messungen abgeleitete Aussagen sind „gröber“



entspricht: $\overline{y} - t \cdot s$ $\overline{y}$ $\overline{y} + t \cdot s$ mit t = 1 (für n = ∞, S = 68,27 %) bzw.
t = 1,837 (für n = 2, S = 68,27%)

t-Werte = f (FG, S)

mit FG = Freiheitsgrad (z.B. FG = n-1 für die Menge an n Einzelwerten und den daraus berechneten Mittelwert)

S = Wahrscheinlichkeitsverteilung (Sicherheitswahrscheinlichkeit, statistische Sicherheit)

	S = 68,269 %	**95,000 %**	**95,450 %**	**99,000 %**	**99,730 %**	**99,9 %**
FG = 1	1,837	12,706	13,968	63,657	235,801	636,62
2		4,303		9,925		31,60
3	1,197	3,182	3,307	5,841	9,219	12,92
4		2,766		4,604		8,610
5	1,111	2,571	2,649	4,032	5,507	6,869
6		2,447		3,707		5,959
7	1,077	2,365	2,429	3,499	4,530	5,408
8		2,306		3,355		5,041
9	1,059	2,262	2,320	3,250	4,094	4,781
10		2,228		3,169		4,587
12		2,179		3,055		4,318
15		2,131		2,947		4,073
20		2,086		2,845		3,850
30		2,042		2,750		3,646
40		2,021		2,704		3,551
50		2,009		2,678		3,496
70		1,994		2,648		3,435
100	1,005	1,984	2,026	2,626	3,078	3,390
1000	1,001	1,962	2,003	2,581	3,008	3,300
∞	1,000 = σ	1,960	2,000 = 2·σ	2,576	3,000 = 3·σ	3,291

Streubereich $y_{o,u}$ = y-Wertebereich, in dem ein bestimmter prozentualer Anteil an y-Werten liegt

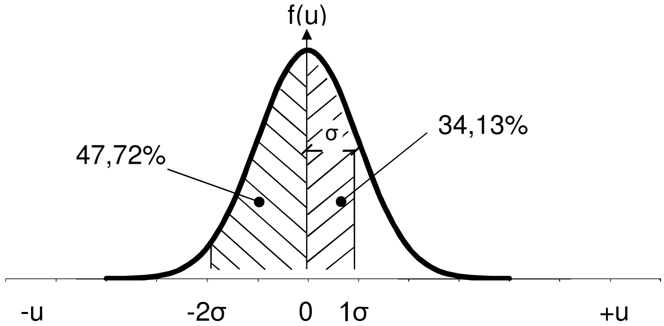
Angabe mit $y_{o,u} = \mu \pm u \cdot \sigma$ für n = ∞

$y_{o,u} = \bar{y} \pm t \cdot s$ für n < ∞

Beispiele für n = ∞: siehe auch Angaben zur Wahrscheinlichkeitsverteilung bei der Gauß-Verteilung

im Streubereich $y_{o,u} = \mu \pm 1 \cdot \sigma$ liegen 2·34,135 % = 68,27 % der Werte einer gaußverteilten Grundgesamtheit

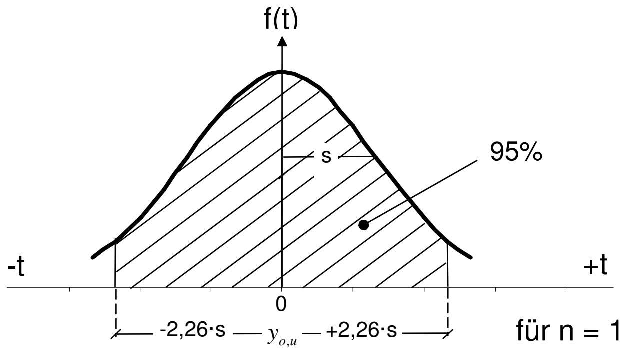
im Streubereich $y_{o,u} = \mu \pm 2 \cdot \sigma$ liegen 2·47,725 % = 95,45 % der Werte einer gaußverteilten Grundgesamtheit



Beispiel für n < ∞: siehe Tabelle zur Wahrscheinlichkeitsverteilung bei der t-Verteilung

im Streubereich $y_{o,u} = \bar{y} \pm 2{,}262 \cdot s$ liegen 95 % der Werte einer t-verteilten Stichprobe von insgesamt 10 Werten (FG = 9)

im Streubereich $y_{o,u} = \bar{y} \pm 5{,}841 \cdot s$ liegen 99 % der Werte einer t-verteilten Stichprobe von insgesamt 4 Werten (FG = 3)



für n = 10 (Freiheitsgrad = 9)

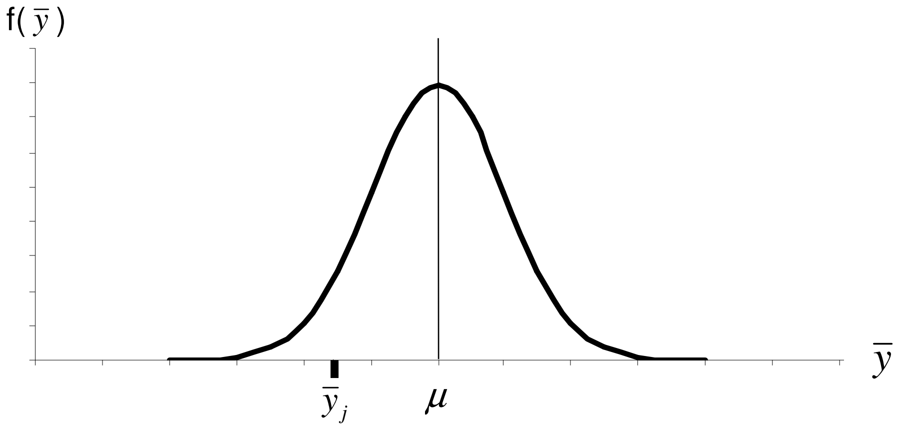
andere, analoge Formulierung: Mit einer Wahrscheinlichkeit von x % liegt ein einzelner Messwert im Streubereich $y_{o,u}$=… (unter der Voraussetzung, dass die Messwerte gauß- bzw. t-verteilt sind).

Interpretation der Abhängigkeit der t-Verteilung vom Freiheitsgrad (bzw. n): Je geringer die Anzahl an Messwerten ist, umso gröber sind die daraus ableitbaren Schlussfolgerungen

2.2 Wahrer Wert an 1 Versuchspunkt

Allgemeine Aussagen zu mehreren Stichproben aus der gleichen Grundgesamtheit:

- Mehrere Stichproben liefern in der Regel unterschiedliche Ergebnisse bezüglich Mittelwert $\bar{y}_j$ und Standardabweichung s_j, da die Einzelwerte und damit die Stichproben dem Zufall unterliegen.
- Je größer der Stichprobenumfang n je Stichprobe ist, desto weniger streuen die Mittelwerte der einzelnen Stichproben um den wahren Wert μ.
- Der Mittelwert aus den Mittelwerten der Stichproben nähert sich dem wahren Wert μ mit zunehmender Anzahl an Stichproben m.
- Unter der Voraussetzung, dass die Mittelwerte der Stichproben um den wahren Mittelwert μ der Grundgesamtheit normal- bzw. t-verteilt sind, gilt.



Mittelwert der Mittelwerte: $\bar{\bar{y}} = \frac{1}{m} \cdot \sum_{j=1}^{m} \bar{y}_j$

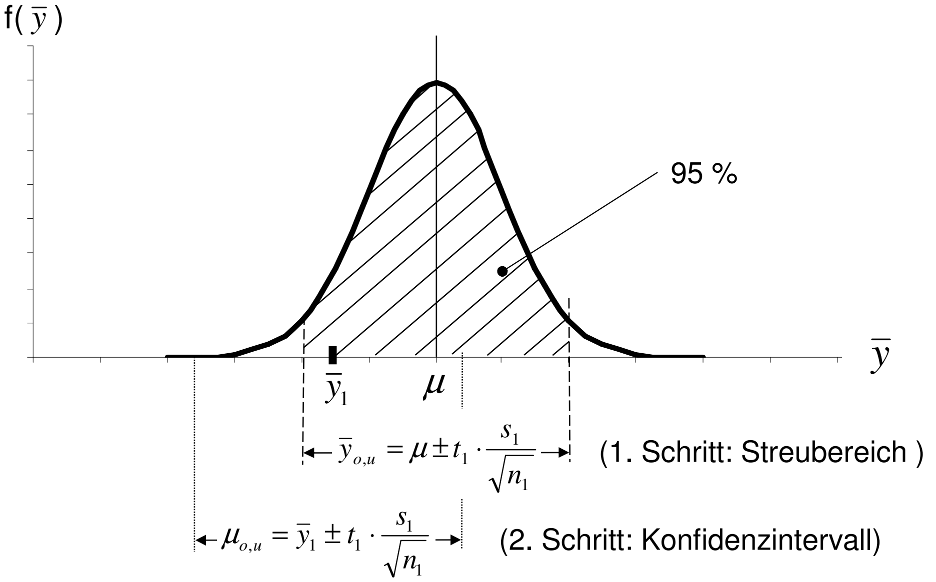
Standardabweichung der Mittelwerte: $s_{\bar{y}} = \frac{s}{\sqrt{N}}$

mit
- m: Anzahl an Stichproben
- n: Anzahl an Einzelwerten je Stichprobe (= Stichprobenumfang)
- N: Summe der Einzelwerte aller Stichproben (= n · m = Versuchsumfang) (Division durch Wurzel N ↔ Mittelwertverteilung ist schmaler als Einzelwertverteilung
- s: Standardabweichung aus den Einzelwerten aller Stichproben

Rückschluss von 1 Stichprobe auf den wahren Mittelwert μ der Grundgesamtheit (Voraussetzung: Normal- bzw. t-Verteilung der Daten):

Ziel: Angabe eines <u>Konfidenzintervalls</u> $\mu_{o,u}$,

das den wahren (aber unbekannten) Wert μ mit einer vorzugebenden Wahrscheinlichkeit (bzw. statistischen Sicherheit, Sicherheitswahrscheinlichkeit) enthält



1. Schritt: In der Häufigkeitsverteilung der Stichproben-Mittelwerte einer (Grund-) Gesamtheit lassen sich Streubereiche $\bar{y}_{o,u}$ für beliebige Wahrscheinlichkeiten (z.B. 95 %) definieren und daraus ableiten, dass mit dieser Wahrscheinlichkeit ein einzelner Stichproben-Mittelwert $\bar{y}_1$ in diesem Streubereich liegt (analog zu den Streubereichen in den Häufigkeitsverteilungen von Einzelwerten)

$$\bar{y}_{o,u} = \mu \pm t \cdot s_{\bar{y}} = \mu \pm t_1 \cdot \frac{s_1}{\sqrt{n_1}}$$ für n < ∞ und m = 1, mit t = f (FG, S)

(für n = ∞ ergibt sich $\bar{y}_{o,u} = \mu$)

2. Schritt: Verschiebung des Streubereich-Intervalls in der Art, dass der Mittelwert der vorliegenden Stichprobe $\bar{y}_1$ neuer Mittelpunkt des Intervalls wird! (mathematisch entspricht dies einer Umstellung der Gleichung bzgl. y und μ)

→ Konfidenzintervall für den wahren Wert μ

$$\mu_{o,u} = \bar{y}_1 \pm t_1 \cdot \frac{s_1}{\sqrt{n_1}}$$ für n < ∞ und m = 1, mit t = f (FG, S)

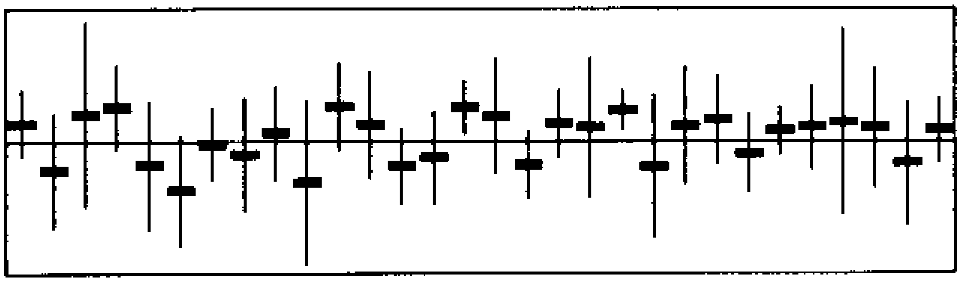
absoluter (bzw. relativer) <u>Vertrauensbereich</u> für μ: $\pm t \cdot \frac{s}{\sqrt{n}}$ (bzw. $\pm \frac{t \cdot \frac{s}{\sqrt{n}}}{\bar{y}}$)

Anmerkungen:

- Jede Stichprobe aus einer Grundgesamtheit liefert (zufallsbedingt) ein unterschiedliches Konfidenzintervall.
- Einem Konfidenzintervall kann man nicht „ansehen“, ob es den wahren Wert tatsächlich enthält oder nicht.
- Im Mittel über viele Konfidenzintervalle enthalten so viele Konfidenzintervalle den wahren Wert, wie es der zu Grunde gelegten Sicherheitswahrscheinlichkeit entspricht.
- Beispiel:

  nachfolgendes Bild zeigt die 95%-Konfidenzintervalle für den wahren Mittelwert μ, die aus 30 verschiedenen Stichproben mit je 4 Werten ermittelt wurden (Querstrich = Mittelwert der Stichprobe, Längsstrich = Ausdehnung des Konfidenzintervalls). 28 der 30 Konfidenzintervalle überdecken den wahren, aber normalerweise unbekannten Wert μ, d.h. ca. 95 %.

μ



(Quelle: Kleppmann, Taschenbuch Versuchsplanung)

Maßnahmen zur Verbesserung der Schätzgenauigkeit bzgl. der Lage von μ:

- Auf Richtigkeit der Messungen achten (richtige Lage von $\bar{y}$)!
  - Vermeidung systematischer Fehler an Apparatur, Methode, Experimentator z.B. falsch anzeigendes Messgerät, konstant falsches Ablesen des Experimentators

    Anmerkung: durch statistische Analyse nicht überprüfbar
- Kleinen Vertrauensbereich „produzieren“!
  - kleine Streuung der Messwerte (→ kleines s),
    d.h. gute Reproduzierbarkeit der Ergebnisse bzw. schlanke Häufigkeitsverteilung

    Maßnahmen: Störeinflüsse minimieren, exakte Versuchsdurchführung
  - große Anzahl an Messwerten (→ kleines 1/Wurzel n und kleiner t-Wert)

    Maßnahmen: mehrmalige Wiederholung der Messungen

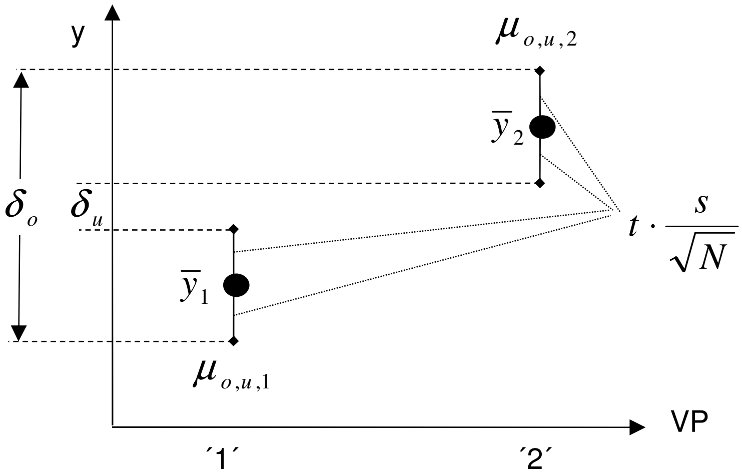
    Anmerkung: Der notwendige Prüfumfang lässt sich für eine geforderte Größe des absoluten oder relativen Vertrauensbereiches iterativ abschätzen (siehe Übungsaufgabe)
  - Wahl einer geringen Wahrscheinlichkeit für das Zutreffen der Aussage (→ kleiner t-Wert)

    meist 95 % (Kompromiss; je nach wissenschaftlicher Disziplin bzw. eigenen Vorgaben unterschiedlich)

2.3 Wahre Differenz zwischen 2 Versuchspunkten (Mittelwertvergleich)

Rückschluss von zwei Stichproben aus unterschiedlichen Grundgesamtheiten mit $\bar{y}_1$, s_1, n_1 und $\bar{y}_2$, s_2, n_2 auf den wahren Unterschied der Mittelwerte der beiden Grundgesamtheiten $(\mu_2 - \mu_1)_{o,u}$

Voraussetzungen: Normal- bzw. t-Verteilung der Daten, gleiche Standardabweichungen der Grundgesamtheiten (nicht der Stichproben)



hier: für $n_1 = n_2 = n$ (auch für $n_1 \neq n_2$ existiert eine Lösung):

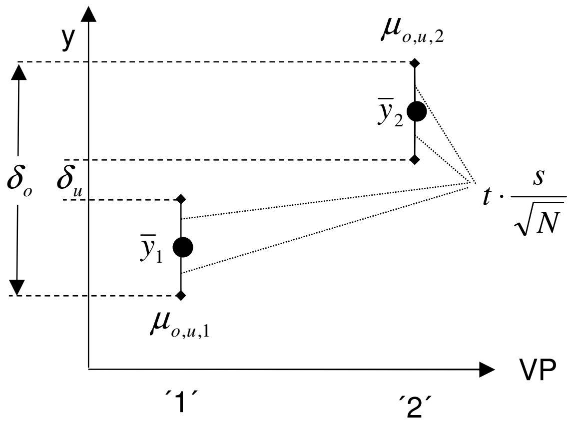
$$\delta_{o,u} = (\mu_2 - \mu_1)_{o,u} = (\bar{y}_2 - \bar{y}_1) \pm t \cdot s_{\bar{d}} = (\bar{y}_2 - \bar{y}_1) \pm t \cdot 2 \cdot \frac{s}{\sqrt{N}}$$

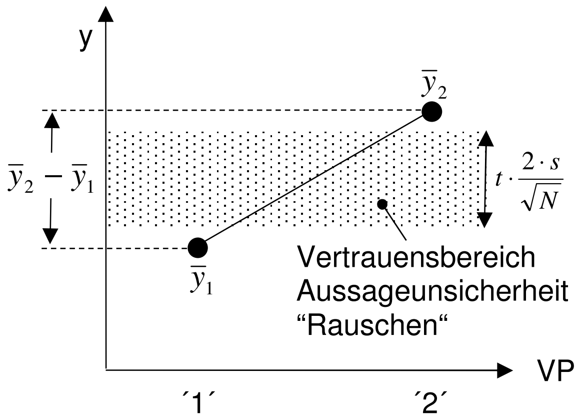
mit	$(\bar{y}_2 - \bar{y}_1)$	Differenz der Stichprobenmittelwerte = Wirkung bzw. Effekt der von ´1´ nach ´2´ veränderten Einflussgröße(n) auf die Zielgröße y
	$s_{\bar{d}}$	Standardabweichung des „Effektes“
	$t \cdot 2 \cdot \frac{s}{\sqrt{N}}$	Vertrauensbereich des „Effektes“ (auch als Aussageunsicherheit bzw. Rauschen interpretierbar)
	$s^2 = \frac{s_1^2 + s_2^2}{2}$	Mittelwert der Varianzen der beiden Stichproben ($s = \sqrt{s^2}$)
	$N = n_1 + n_2$	Summe der Umfänge der beiden Stichproben (= Versuchsumfang)
	$FG = 2 \cdot (n-1)$	Summe der Freiheitsgrade der beiden Stichproben
	t = f (FG, S)	

Ergebnis des Mittelwertvergleiches

Fall A: Die Mittelwerte unterscheiden sich signifikant!

- δ_u und δ_o sind eindeutig positiv (oder negativ)
- das Konfidenzintervall $\delta_{o,u}$ enthält nicht den Wert Null
- die Differenz der Stichprobenmittelwerte ist vom Betrag her größer als der ermittelte Vertrauensbereich des Effektes





→ Die beobachteten Unterschiede der Mittelwerte der Stichproben aus den beiden Grundgesamtheiten sind statistisch signifikant; sie unterscheiden sich tatsächlich (mit x % Wahrscheinlichkeit).

→ Die Wirkung der von Versuchspunkt ´1´ nach ´2´ veränderten Einflussgröße(n) auf die Zielgröße y ist statistisch signifikant.

Fall B: Die Mittelwerte unterscheiden sich nicht signifikant!

- δ_u ist negativ und δ_o ist positiv (oder umgekehrt)
- das Konfidenzintervall $\delta_{o,u}$ enthält den Wert Null
- der wahre Ergebniswert an VP ´2´ kann sowohl kleiner als auch größer als der an VP ´1´ sein
- die Differenz der Stichprobenmittelwerte ist vom Betrag her kleiner als der ermittelte Vertrauensbereich des Effektes

→ Die beobachteten Unterschiede der Stichprobenmittelwerte sind statistisch betrachtet nicht signifikant (mit x % Wahrscheinlichkeit); sie können auch zufällig zustande gekommen sein.

→ Eine Differenz der Mittelwerte der beiden Grundgesamtheiten bzw. eine Wirkung der von Versuchspunkt ´1´ nach ´2´ veränderten Einflussgröße(n) auf die Zielgröße y ist statistisch betrachtet (mit der gewählten Sicherheitswahrscheinlichkeit) nicht nachweisbar.

Maßnahmen zur Verbesserung der Aussagegenauigkeit des Mittelwertvergleichs, um noch möglichst kleine wahre Mittelwertdifferenzen als statistisch signifikant nachweisen zu können: analog zur Verbesserung der Aussagegenauigkeit bzgl. des Konfidenzintervalls 1 Grundgesamtheit (siehe vorne) → richtige Lage der Messwerte, kleiner Vertrauensbereich

2.4 Voraussetzungen für statistische Analysen

Allgemeine Anforderungen an die Qualität der Daten bzw. der Stichproben

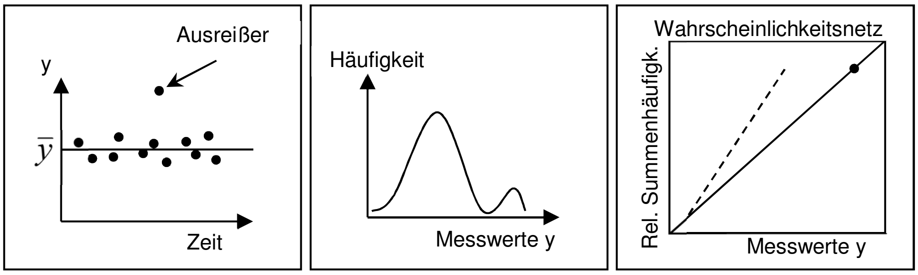
a) Die Daten sind repräsentativ für die jeweilige Grundgesamtheit (häufige Fehlerquelle!):

- zufällige Entnahme aus der Grundgesamtheit, d.h. jedes Element der Grundgesamtheit besitzt die gleiche Wahrscheinlichkeit, in die Stichprobe zu kommen.
- anders formuliert: Alle relevanten Störeinflüsse, die man kennt und nicht vermeiden kann, müssen bei allen Messungen Gelegenheit haben, sich auszuwirken, z.B. der Einfluss unterschiedlicher Experimentatoren oder ungenauer Einstellungen eines Einflussfaktors (Probefrage: Macht eine Mittelung der durch den Störeinfluss hervorgerufenen Veränderungen der Ergebnisse Sinn? Ja $\rightarrow$ auswirken lassen)
- repräsentativ: ungenaue Einstellung einer Einflussgröße $\rightarrow$ immer neu einstellen
- nicht repräsentativ: zehnmaliges Ablesen des Versuchsergebnisses auf einem digitalen Messgerät nach einmaliger Durchführung des Experimentes

b) Die Daten enthalten keine Ausreißer:

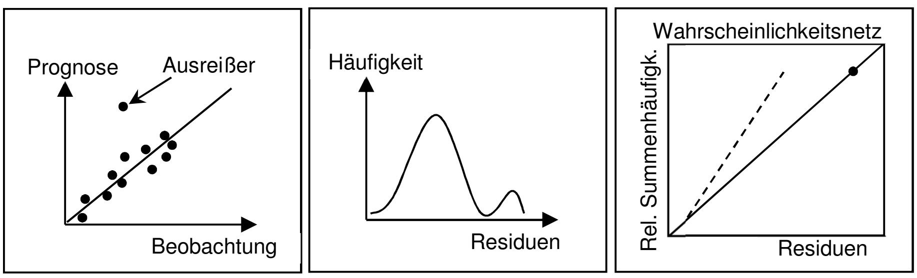
Ausreißer = extrem hoher bzw. niedriger Wert z.B. durch Messfehler oder Übertragungsfehler

bei Daten aus 1 Grundgesamtheit bzw. von 1 Versuchspunkt:



bei Daten aus mehreren Grundgesamtheiten bzw. von mehreren Versuchspunkten und einer daraus abgeleiteten Regressionsfunktion, welche die Daten beschreibt

- Beobachtung = Messwerte
  Prognose = mit Regressionsfunktion berechnete Werte
- Residuen = Messwert - berechneter Wert



- (x,y)-Wertepaare in einem x/y-Diagramm auftragen, die sich korreliert zueinander verändern (z.B. wenn x größer wird, wird y kleiner)

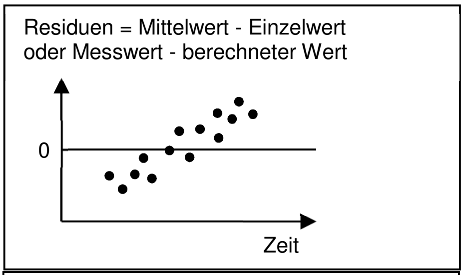
Abhilfemaßnahmen:

– Sorgfalt, Kontrolle
– einzelner Extremwert (= Ausreißer)
    → aus Auswertung herausnehmen
    → Messung wiederholen
    → ggf. auf plausiblen Wert setzen und Auswertung damit fortsetzen
– mehrere Extremwerte (≠ Ausreißer)
    → Ursachen suchen, eliminieren, Versuch wiederholen

c) Die Daten besitzen <u>keine Autokorrelation</u>:

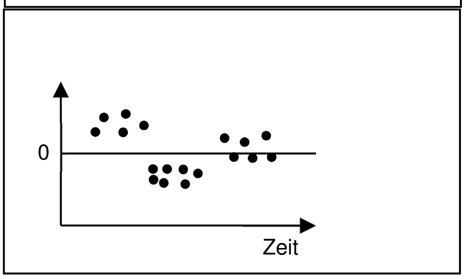
Autokorrelation = Datenwerte sind von der zeitlichen Abfolge der Messung abhängig (systematischer Fehler über der Zeit)

Beispiele:



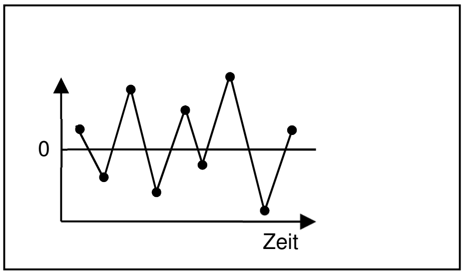
Trend

(z.B. durch Drift im Messgerät)



Haufenbildung

(z.B. durch verschiedene durchführende Personen)



Phasenwechsel

(z.B. Kalibrierung eines Drift behafteten Messgerätes nach jedem 2. Versuch)

Autokorrelation = Störgröße → Erhöhung der Versuchsstreuung

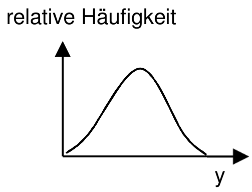
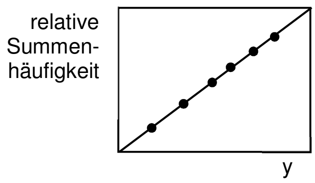
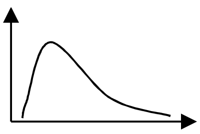
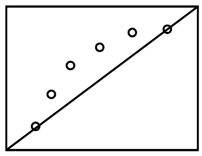
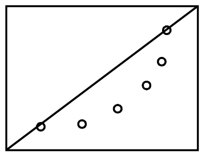
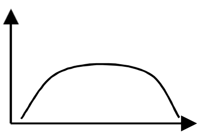
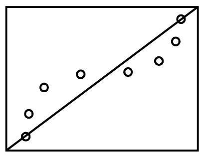
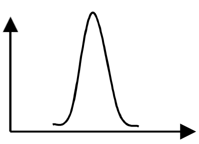
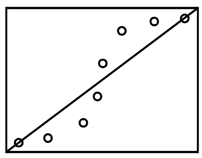
Abhilfemaßnahmen

- Ursachen vermeiden
- Zufällige Versuchsreihenfolge (nur relevant bei Mittelwertvergleichen bzw. mehreren Versuchspunkten)

<u>Spezifische Voraussetzungen</u> an die Qualität der Daten bzw. Stichproben für die Ableitung von Konfidenzintervallen

a) Die Daten jeder Stichprobe sind einzeln <u>normalverteilt</u>:

- Hintergrund: Zur Ableitung von Aussagen aus Stichproben werden die Normal- bzw. die t-Verteilung zu Grunde gelegt.
- Grafischer Test: Auftragung der relativen Häufigkeit in Histogrammform oder der relativen Summenhäufigkeit im Wahrscheinlichkeitsnetz („probability plot“)
- Rechnerische Tests: Kolmogoroff-Smirnoff-Test, Shapiro-Wilk-Test

Art der Häufigkeitsverteilung der Daten (Messwerte oder Residuen)	Darstellung im Histogramm (Nachteil: nur bei vielen Daten anwendbar)	Darstellung im Wahrscheinlichkeitsnetz (Vorteil: auch bei wenigen Daten anwendbar)
Normalverteilung		
linksschiefe Verteilung typisch, wenn: y nur ≥ bestimmter Wert, Einflüsse wirken multiplikativ auf y (z.B. Fläche, Volumen), Lebensdauerdaten		
Rechtsschiefe Verteilung typisch, wenn: y nur ≤ bestimmter Wert		
flacher Gipfel typisch für Mischverteilung d.h. 2 Verteilungen ineinander		
spitzer Gipfel typisch für unpräzise Messmethode z.B. immer auf 4 gerundet		

wenn keine Normalverteilung vorliegt:

- mögliche Ursachen analysieren, ggf. eliminieren, Versuch wiederholen
- bei schiefen Verteilungen → Transformation der Daten → weitere Auswertung mit transformierten Daten → anschließende Rücktransformation

  Beachte: Die y-Werte werden transformiert, nicht die Häufigkeiten!

Transformationen:

Stärke der Transformation: steigt / =0 / steigt

Transformation	Gleichung	Anwendung	Rücktrans-formation
kubisch	$y^* = y^3$	Selten, bei rechtsschiefer Verteilung	$y = (y^*)^{1/3}$
quadratisch	$= y^2$	Häufig, 〃	$= (y^*)^{1/2}$
keine	$= y^1$		
Wurzel	$= y^{0,5}$	Häufig, bei linksschiefer Verteilung	$= (y^*)^2$
Logarithmus	$= \ln y$	Sehr häufig, 〃	$= e^{y^*}$
Reziproke Wurzel	$= y^{-0,5}$	Häufig, 〃	$= (y^*)^{-2}$
Reziprokwert	$= y^{-1}$	Häufig, 〃	$= (y^*)^{-1}$
Reziprokes Quadrat	$= y^{-2}$	Selten, 〃	$= (y^*)^{-1/2}$

b) Die zu vergleichenden Grundgesamtheiten besitzen gleiche Standardabweichungen = „Homoskedastizität“:

- nur relevant bei Mittelwertvergleichen bzw. mehreren Versuchspunkten
- bei DoE aus Effizienzgesichtspunkten meist nur Wiederholungen an einem Versuchspunkt (in der Regel am Zentralpunkt) → dann keine Prüfung auf Homoskedastizität möglich, Homoskedastizität wird stillschweigend vorausgesetzt

Auswirkungen fehlender Voraussetzungen:

- Sind obige Voraussetzungen nicht gegeben, werden die Ergebnisse der statistischen Tests verfälscht → verfälschte Konfidenzintervalle und Signifikanzaussagen, größerer Mangel an Anpassung zwischen Regressionsfunktion und Messwerten
- jedoch:
  - Gefundene Zusammenhänge können dennoch - unter Vorbehalt - interpretiert werden.
  - Mittelwertvergleiche sind relativ unempfindlich gegenüber moderaten Abweichungen von der Normalverteilung.
  - Die Transformation deutlich nicht normal verteilter Daten verringert meist auch Unterschiede in der Standardabweichung der Stichproben.

2.5 Übungsaufgaben

(1) Thema Häufigkeitsverteilung

Wie groß ist der Prozentsatz an Messwerten, die sich in nachfolgenden Intervallen befinden. Veranschaulichen Sie die Intervalle zunächst grafisch in einem oder zwei Häufigkeitsdiagramm(en). Ermitteln Sie die Prozentsätze dann für eine unendlich große Anzahl an Messwerten und anschließend für eine Messwertanzahl von 101 Stück. Intervalle:

a) $\bar{y} \pm 3s$?

b) kleiner $\bar{y} - 2s$?

Lösung: 99,73%; 2,275%; 99,604%; 2,4145%

(2) Thema Konfidenzintervall (bei 1 Versuchspunkt)

Sie führen an einer Anlage 4 Zeitmessungen mit folgenden Ergebnissen durch:
27,7 s - 31,3 s - 30,1 s - 32,9 s
Geben Sie das Konfidenzintervall an, in dem sich der wahre Wert T befindet. Variieren Sie die (Sicherheits-)Wahrscheinlichkeit, mit der Ihre Aussage gilt, mit 95 %, 99% und 99,9%! Interpretieren Sie das Ergebnis bzgl. gewählter (Sicherheits-)Wahrscheinlichkeit und der Breite des Konfidenzintervalles!

Lösung: 30,5 ± 3,5 s, 30,5 ± 6,4 s, 30,5 ± 14,1 s
(in Anlehnung an Kleppmann/Taschenbuch Versuchsplanung)

(3) Thema Prüfumfang (bei 1 Versuchspunkt)

Schätzen Sie die Anzahl an Messwerten ab, die Sie benötigen, wenn Sie den gesuchten wahren Wert Ihrer Messgröße mit einer „relativen Genauigkeit" von ±5 % (= Größe des relativen Vertrauensbereiches) und einer Sicherheitswahrscheinlichkeit von 95 % angeben wollen. Erste Messungen ergeben einen Variationskoeffizienten von 10,9 %, den Sie für Ihre Abschätzung zu Grunde legen können.

Lösung: ca. 21 Messwerte

(4) Thema Häufigkeitsverteilung und Konfidenzintervall (bei 1 Versuchspunkt)

Skizzieren Sie die absolute Häufigkeitsverteilung einer beliebigen Grundgesamtheit. Stellen Sie anschließend in diesem Diagramm für die nachfolgend beschriebenen Stichproben aus dieser Grundgesamtheit jeweils die Häufigkeitsverteilung und das daraus abgeleitete Konfidenzintervall für μ qualitativ dar. Interpretieren Sie das Ergebnis.

a) Stichprobe mit kleiner Streuung, die zu einem wahren Ergebnis führt
b) Stichprobe mit kleiner Streuung, die zu einem unwahren Ergebnis führt
c) Stichprobe mit großer Streuung, die zu einem wahren Ergebnis führt

(5) Thema Mittelwertvergleich (bei 2 Versuchspunkten)

Sie wollen wissen, ob die Erhöhung des Nachdruckes beim Druckgießen von 300 auf 400 bar die Dichte der gefertigten Teile positiv beeinflusst (erhöht). Sie erhalten folgende Messergebnisse (in kg/m³): 300 bar: 2635 - 2639 - 2637
400 bar: 2641 - 2640 - 2645

Aufgaben:

a) Skizzieren Sie die Messwerte in einem x/y-Diagramm und schlussfolgern Sie zunächst intuitiv.

b) Ermitteln Sie das Konfidenzintervall für die wahre Mittelwertdifferenz der beiden Grundgesamtheiten mit einer Sicherheitswahrscheinlichkeit von 95 % und einer von 99 %. Zeichnen Sie die beiden Konfidenzintervalle in Ihre Skizze aus Unterpunkt a) ein und interpretieren Sie das Ergebnis.

c) Wiederholen Sie Arbeitspunkt b) unter der Annahme, dass statt 3 nun 5 Messwerte je Stichprobe vorliegen; Mittelwerte und Standardabweichung der beiden Stichproben sind gleich geblieben.

Lösung: 5 ± 5,3 kg/m3, 5 ± 8,8 kg/m3, 5 ± 3,4 kg/m3, 5 ± 4,97 kg/m3
(in Anlehnung an Kleppmann/Taschenbuch Versuchsplanung)

(6) Thema Transformation von Daten

Sie haben nachstehende Häufigkeitsverteilung gegeben. Skizzieren Sie diese in einem Häufigkeitsdiagramm. Wie bezeichnet man eine solche Art von Verteilung. Wenden Sie mehrere Transformationen auf die Werte an und überprüfen Sie die Wirkung Ihrer Transformationen durch Darstellung der transformierten Daten in Häufigkeitsdiagrammen. Geben Sie für jede Transformation die zugehörige Rücktransformation an.

y	2	3	4	5	6	7	8
f(y)	2	10	6	4	2	2	1

3. Vorgehensweise bei DoE anhand einfacher 2^2-Faktoren-Versuche

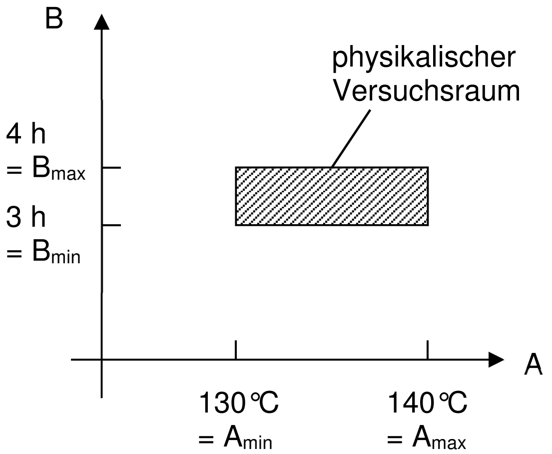
2^k - Faktoren Versuche

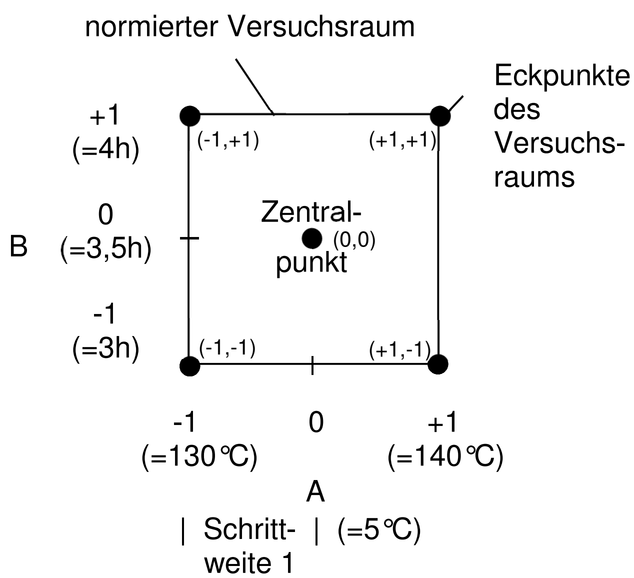
k: Anzahl der Einflussgrößen (Faktoren)

2: Anzahl der Stufen pro Einflussgröße (hier: 2 Stufen → ″lineares″ Modell; genauer: lineare Abhängigkeit der Zielgröße von jeder Einflussgröße)

3.1 Zahlenbeispiel: Umsatzrate = f (Temperatur, Zeit)

Allgemeines Vorgehen	Beispiel: Untersuchung der Umsatzrate bei einer chemischen Reaktion in Abhängigkeit von Reaktionstemperatur und -zeit
• Zielgrößen festlegen = dimensionsbehaftete Messgrößen	Umsatzrate y
• Einflussgrößen sammeln, interessierende Einflussgrößen festlegen, Störgrößenanalyse (gefundene Störgrößen wenn möglich wie Einflussgrößen behandeln)	Reaktionstemperatur A Reaktionszeit B weitere Einflussgrößen: Reaktionsdruck, Mischungsverhältnis der Ausgangsstoffe, etc.
• Min / Max- Werte der variablen Einflussgrößen festlegen, d.h. Versuchsraum als Teil des Gesamtraumes definieren	A: 130 ... 140°C B: 3 ... 4h
• Werte der konstant zu haltenden Einflussgrößen festlegen	Reaktionsdruck = 3 bar Mischungsverhältnis 2:1, etc.
• Variable Einflussgrößen normieren auf –1 bis +1	



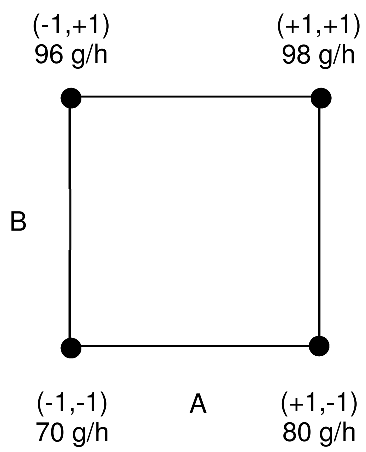


- Versuchsplan notieren in der Standardschreibweise, siehe unten (→ einfach erweiterbar
- Prüfmuster erstellen
- Versuche durchführen, dabei achten auf
  - Repräsentativität der Messergebnisse
  - Richtigkeit der Messergebnisse (→ richtige Lage der $\bar{y}$ bzgl. der wahren Werte μ)!
  - Geringe Streuung der Messergebnisse, d.h. Störeinflüsse so weit wie möglich vermeiden (→ kleine Standardabweichung)!
  - Zufällige Reihenfolge bei der Durchführung der Versuchspunkte = "Randomisierung" (nicht gemäß der Reihenfolge in der Standardschreibweise des Plans; per Los/Zufallszahl ermitteln)!

    → verfälschende Einflüsse von Störgrößen werden zufällig gestreut und heben sich dadurch zumindest teilweise auf

    → Hintergründe und Details siehe Kapitel zum Thema „Blockbildung“

Versuchsplan Versuchsanzahl = 2^2 = 4			Versuchsergebnisse in g Produkt / h Messwerte		Mittelwerte
Versuchs punkt Nr.	Einflussfaktor A	B	y Messung 1	y Messung 2	$\bar{y}$
1	- (130℃)	- (3h)	69	71	70
2	+ (140℃)	- (3h)	82	78	80
3	- (130℃)	+ (4h)	93	99	96
4	+ (140℃)	+ (4h)	99	97	98



- Prüfung der Datenqualität

  Ausreißer, Autokorrelation, Normal- bzw. t-Verteilung (Homoskedastizität)

wird häufig erst durchgeführt bei schlechter Anpassung der Regressionsfunktion (geht teils nur anhand Residuen)

- Auswertung der Versuche

  Bestimmung der Regressionsfunktion im normierten Versuchsraum

lineares Modell,
2 Einflussgrößen

$y =$
$b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot A{\cdot}B$

- b_o = Regressionskonstante

  = Total
  = Mittelwert aller Messergebnisse = $\Sigma\, y_i$,/ n_i
  = Schätzwert für y im Zentralpunkt (0,0)

b_o

= (70 + 80 + 96 + 98) / 4

= 86 g/h

- b_1 = Regressionskoeffizient der Einflussgröße A

  = ½ · (mittlere) Wirkung von A (auf y)

  Wirkung von A = mittlere Veränderung von y, wenn A physikalisch von $A_{min} \rightarrow A_{max}$ bzw. normiert von $-1 \rightarrow +1$ (= 2 Schrittweiten) variiert wird (= lineare Hauptwirkung)

  Berechnung der (mittleren) Wirkung von A:

  (i) Mittelwert aller Versuchsergebnisse an den Versuchspunkten mit A auf + Niveau minus Mittelwert … mit A auf - Niveau: [$\bar{y}$ (A = +) – $\bar{y}$ (A = –)]

  (ii) Mittelwert aller Differenzen der Versuchsergebnisse, bei denen unter Konstanthaltung aller anderen Einflussfaktoren A von - nach + Niveau verändert wird (Mittelwert aus $0{,}5 \cdot 2^k$ Differenzwerten):

$$\frac{1}{0{,}5 \cdot 2^k} \cdot \sum_{i=1}^{0{,}5 \cdot 2^k} \left[y(A=+) - y(A=-) \right]_{B,C,\ldots=konstant}$$

b_1 = ½ · (mittl.) Wirkung von A

(i)
= ½ · [(80+98)/2 – (70+96)/2]
= ½ · [89 – 83]
= 3 g/h

(ii)
= ½ · [{ (80-70)+(98-96) } / 2]
= ½ · [(10+2)/2]
= 3 g/h

(mittlere) Wirkung von A= 6 g/h

- b_2 analog

  b_2 = ½ · (mittlere) Wirkung von B (auf y)

b_2 = 11 g/h
= ½ · [(96+98)/2 – (70+80)/2]
= ½ · [{ (96-70)+(98-80) } / 2]

(mittl.) Wirkung von B = 22 g/h

- b_3 = Regressionskoeffizient der Einflussgröße A·B

  beschreibt die von den mittleren Wirkungen abweichenden Wirkungen von A und B auf y, wenn A bzw. B ≠ 0 (= 2fach-Wechselwirkung)

  = ½ · Wirkung A·B
  = ½ · [½ [Wirkung $A_{(B+)}$ – Wirkung $A_{(B-)}$]]
  = ½ · [½ [{ $\bar{y}$ (A+) – $\bar{y}$ (A–)}$_{(B+)}$ – { $\bar{y}$ (A+) – $\bar{y}$ (A–)}$_{(B-)}$]]

  oder auch

  = ½ · [½ [Wirkung $B_{(A+)}$ – Wirkung $B_{(A-)}$]]
  = ½ · [½ [{ $\bar{y}$ (B+) – $\bar{y}$ (B–)}$_{(A+)}$ – { $\bar{y}$ (B+) – $\bar{y}$ (B–)}$_{(A-)}$]]

b_3 = – 2 g/h

= ½ · [½ [(98–96) – (80–70)]]
= ½ · [½ [2 – 10]

oder auch

= ½ · [½ [(98–80) – (96–70)]]
= ½ · [½ [18 – 26]]

Wirkung von AB = – 4 g/h

- Auswerteschema:

Nr.	A	B	AB	T	$\bar{y}$ [g/h]
1	–	–	+	+	70
2	+	–	–	+	80
3	–	+	–	+	96
4	+	+	+	+	98
	b_1	b_2	b_3	b_0	

b_0 = (+70+80+96+98)/4 = 86 g/h

b_1 = (-70+80-96+98)/4 = 3 g/h

- Wirkung = Effekt oder Rauschen ?

  Ist die beobachtete Wirkung einer Einflussgröße auf die Zielgröße signifikant d.h. tatsächlich vorhanden (→ Effekt) oder nicht signifikant d.h. zufällig beobachtet worden (→ Rauschen)?

  Prüfung durch Mittelwertvergleich (analog Kapitel 2.3)

  Voraussetzung für die Prüfung

  - Streuung kann ermittelt werden
  - d.h. Anzahl der Versuchsergebnisse > Anzahl der zu bestimmenden Regressionskoeffizienten, d.h.
    - → wiederholte Messungen an allen bzw. einzelnen Versuchspunkten oder/und
    - → mehr Versuchspunkte als zu bestimmende Regressionskoeffizienten

  Vorgehensweise bei der Prüfung

  - Ermittlung des Vertrauensbereiches der Effekte VB_E
    - $VB_E = t \cdot 2 \cdot \frac{s}{\sqrt{N}}$
    - VB_E = Größe des Konfidenzintervalls des Total
    - wegen vorausgesetzter Homoskedastizität ist VB_E im gesamten Versuchsraum überall gleich
  - |Wirkung| ≥ VB_E
    - → Wirkung ist signifikant, Wirkung = Effekt
    - → Vorzeichen der Wirkung ist statistisch abgesichert
  - |Wirkung| < VB_E
    - → Wirkung ist nicht signifikant, Wirkung = Rauschen
    - → Vorzeichen der Wirkung ist statistisch zweifelhaft, kann positiv oder negativ sein

$$VB_E = t \cdot 2 \cdot \frac{s}{\sqrt{N}} = 2{,}766 \cdot 2 \cdot \frac{2{,}738}{\sqrt{8}}$$

= 5,36 g/h

mit

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

$$s_1^2 = \frac{(69-70)^2 + (71-70)^2}{2-1} = 2g^2/h^2$$

$$s_2^2 = \frac{(82-80)^2 + (78-80)^2}{2-1} = 8g^2/h^2$$

$$s_3^2 = \frac{(93-96)^2 + (99-96)^2}{2-1} = 18g^2/h^2$$

$$s_4^2 = \frac{(99-98)^2 + (97-98)^2}{2-1} = 2g^2/h^2$$

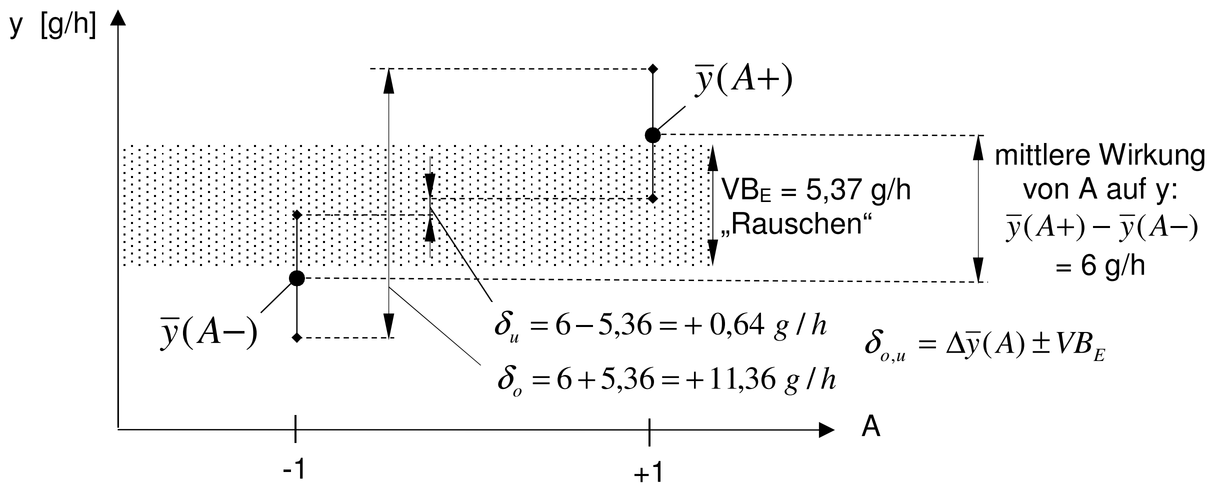
$$s = \sqrt{\frac{2+8+18+2}{4}} = 2{,}7386 g/h$$

$$FG = 4 \cdot (n-1) = 4 \cdot (2-1) = 4$$

$$t\ (FG = 4, S = 95\%) = 2{,}766$$

→ Einflussgrößen mit signifikanter Wirkung (= Effekt):
B mit +22 g/h
A mit +6 g/h

→ Einflussgrößen mit nicht signifikanter Wirkung (= Rauschen):
AB mit -4g/h



• (Schrittweise) Elimination nicht signifikanter Wirkungen = Streichung des jeweils kleinsten nicht signifikanten Terms in der Regressionsfunktion → mehr Messergebnisse können zur Bestimmung der Versuchsstreuung herangezogen werden → ggf. Veränderung des Vertrauensbereichs der Effekte (kleiner oder größer; bei orthogonalen Plänen konstant d.h. bei orthogonalen Plänen ist schrittweises Vorgehen nicht nötig) → ggf. weitere Wirkungen signifikant bzw. nicht signifikant Anmerkung: mittlere Wirkung eines Einflussfaktors nur eliminieren, wenn auch alle Wechselwirkungen eliminiert wurden	Elimination von AB → $VB_E = 5{,}36$ (konstant, da orthogonaler Plan) → Einflussgrößen mit signifikanter Wirkung (= Effekt): A, B (zur Bewertung vor der Eliminierung siehe auch Paretodiagramm der Effekte in STATISTICA)
• Ergebnis: Regressionsfunktion mit statistisch signifikanten Termen	y = 86 g/h + 3 g/h · A + 11 g/h · B
• Prüfung der Anpassung der Regressionsfunktion an die Messwerte - Prognose/Beobachtungs-Grafik (visuell, qualitativ) Prognose = Funktionswert am Versuchspunkt Beobachtung = Messwert am Versuchspunkt qualitative Beurteilung der Abweichung im interessierenden Wertebereich - Lack of Fit (statistisch, quantitativ) durch Vergleich der Versuchsstreuung mit den Abweichungen zwischen den Messwerten und den Funktionswerten an den Versuchspunkten (Voraussetzung: Anzahl Versuchspunkte > Anzahl zu bestimmender Regressionskoeffizienten; sonst keine Abweichungen zwischen Mess- und Regressionswerten)	y (-1,-1) = 86-3-11 = 72 g/h mittlerer Messwert : 70 g/h y (+1,-1) = 86+3-11 = 78 g/h mittlerer Messwert : 80 g/h y (-1,+1) = 86-3+11 = 94 g/h mittlerer Messwert : 96 g/h y (+1,+1) = 86+3+11=100 g/h mittlerer Messwert : 98 g/h Lack of Fit: nicht signifikant, siehe ANOVA-Tabelle (Anmerkung: für y = 86+3A wäre der LoF signifikant)
• Darstellung und Auswertung der Ergebnisse - Wirkungsdiagramm: 1 dimensionale Darstellung der ermittelten Wirkungen bzw. Effekte (Haupt- und Wechselwirkungen) in einem x/y-Diagramm - Konturliniengrafik: 2 dimensionale Darstellung der *errechneten* Zielgrößenwerte in Form von Isolinien (Höhenlinien) als Funktion zweier Einflussgrößen - etc. • Bestätigungsexperimente	siehe dazu folgendes Kapitel bzw. Darstellung in STATISTICA

Nachvollziehen des Beispiels mit STATISTICA (siehe auch Anhang "Handhabung von STATISTICA")

3.2. Visualisierung der Auswertungsergebnisse in Konturlinien-/Wirkungsdiagrammen

Ergebnis der Auswertung:
- (Wechsel)Wirkungen der Einflussgrößen auf die Zielgrößen
- Regressionsfunktionen für Zielgrößen y = f (Einflussgrößen)

Wirkungen von A, B, ...: (lineare) Hauptwirkungen
mittlere Wirkung einer Einflussgröße auf die Zielgröße
(alle anderen Einflussgrößen auf 0-Niveau)

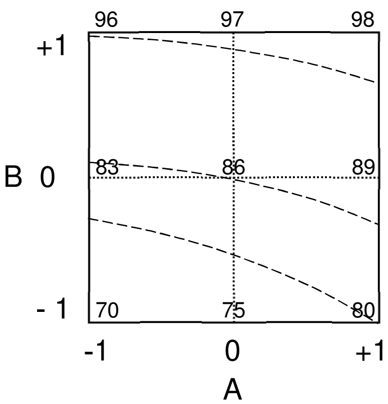
Wirkungen von AB, BC, ...: 2fach Wechselwirkungen
berücksichtigt, dass die Wirkung einer Einflussgröße auf die Zielgröße sich mit der *Stufe* einer anderen Einflussgröße ändert bzw. die (linearen) Hauptwirkungen sich nicht einfach additiv überlagern

Wirkungen von ABC, AAB, ...: 3fach Wechselwirkungen (und höhere Wechselwirkungen)
sind in aller Regel klein gegenüber dem Vertrauensbereich der Effekte und werden deshalb *vernachlässigt*; siehe auch Multiplikation von $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \ldots$ in der Berechnungsformel
(großer zusätzlicher Versuchsaufwand zu ihrer Ermittlung $\leftrightarrow$ kleiner zusätzlicher Erkenntnisgewinn)

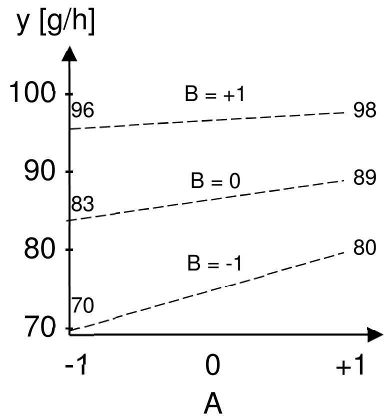
Konturlinien-/Wirkungsdiagramme für das Beispiel aus dem vorangegangenen Kapitel

$y = 86\ g/h + 3\ g/h \cdot A + 11\ g/h \cdot B - 2\ g/h \cdot A \cdot B$

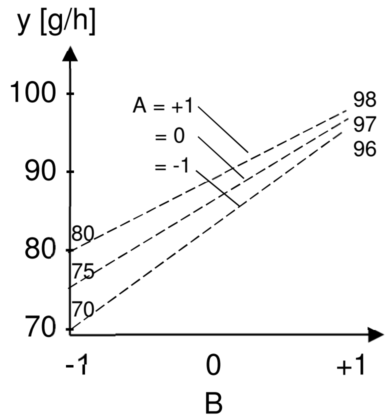
berechnete y-Werte mit der Regressionsfunktion	Messergebnis (Mittelwert)
$y(-1, -1) = 86 - 3 - 11 - 2 = 70$ g/h	70 g/h
$y(+1, -1) = 86 + 3 - 11 + 2 = 80$ g/h	80 g/h
$y(-1, +1) = 86 - 3 + 11 + 2 = 96$ g/h	96 g/h
$y(+1, +1) = 86 + 3 + 11 - 2 = 98$ g/h	98 g/h



Konturliniendiagramm
y = f (A,B)



Wirkungsdiagramm
y = f(A) mit Parameter B



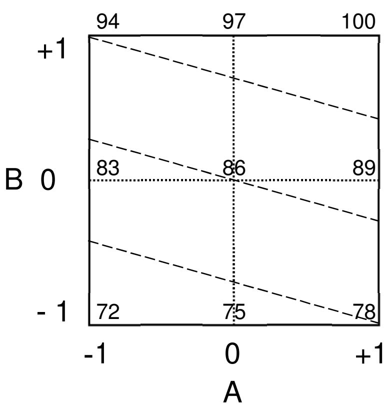
Wirkungsdiagramm
y = f(B) mit Parameter A

leichte Wechselwirkung AB → leicht gekrümmte Iso-Linien (Wert konstant) in Konturliniengrafik, Geraden mit leicht unterschiedlichen Steigungen in den Wirkungsdiagrammen

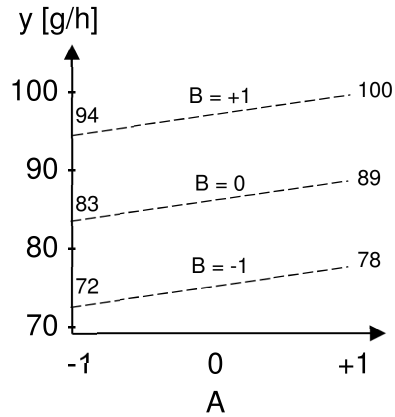
Nebenbei: Wenn die Anzahl der Versuchspunkte gleich ist der Anzahl der Koeffizienten in der Regressionsfunktion, sind die Funktionswerte und die (mittleren) Messergebnisse an jedem Versuchspunkt identisch.

Variante mit AB nicht signifikant (Elimination) → y = 86 g/h + 3 g/h · A + 11 g/h · B

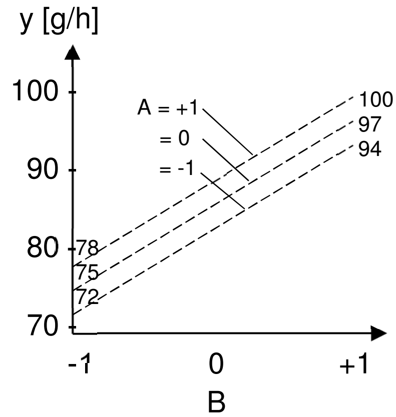
berechnete y-Werte mit der Regressionsfunktion	Messergebnis (Mittelwert)
y (– 1, – 1) = 86 – 3 – 11 = 72 g/h	70 g/h
y (+ 1, – 1) = 86 + 3 – 11 = 78 g/h	80 g/h
y (– 1, + 1) = 86 – 3 + 11 = 94 g/h	96 g/h
y (+ 1, + 1) = 86 + 3 + 11 = 100 g/h	98 g/h



Konturliniendiagramm
y = f (A,B)



Wirkungsdiagramm
y = f(A) mit Parameter B

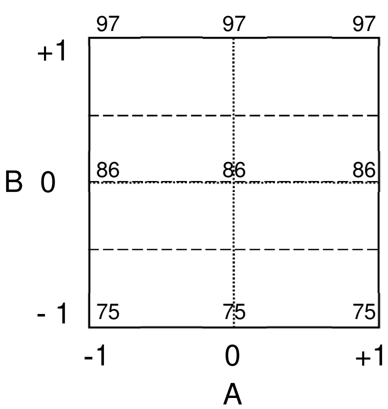


Wirkungsdiagramm
y = f(B) mit Parameter A

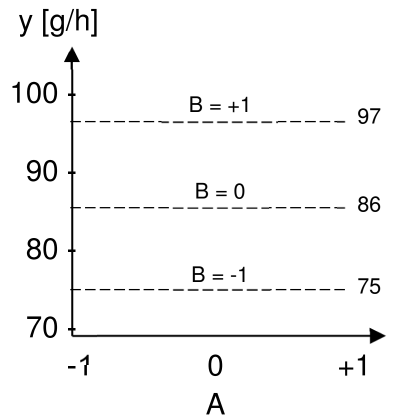
keine Wechselwirkung AB → gerade Iso-Linien (Wert konstant) in Konturliniengrafik, Geraden mit jeweils gleichen Steigungen in den Wirkungsdiagrammen

Variante mit A und AB nicht signifikant (Elimination) → y = 86 g/h + 11 g/h · B

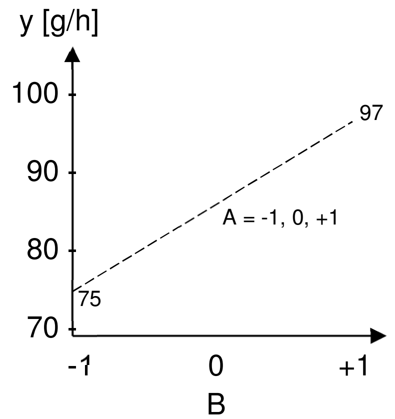
berechnete y-Werte mit der Regressionsfunktion	Messergebnis (Mittelwert)
y (– 1, – 1) = 86 – 11 = 75 g/h	70 g/h
y (+ 1, – 1) = 86 – 11 = 75 g/h	80 g/h
y (– 1, + 1) = 86 + 11 = 97 g/h	96 g/h
y (+ 1, + 1) = 86 + 11 = 97 g/h	98 g/h



Konturliniendiagramm
y = f (A,B)



Wirkungsdiagramm
y = f(A) mit Parameter B



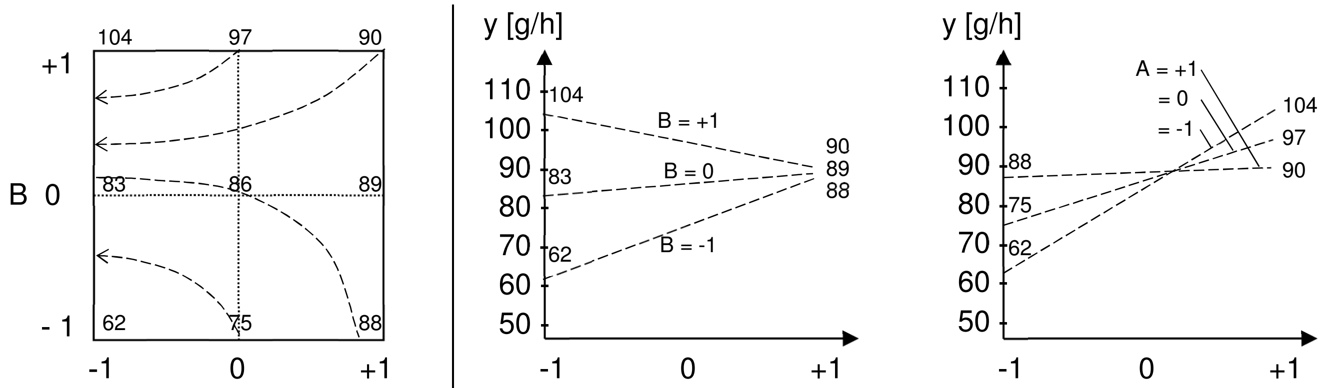
Wirkungsdiagramm
y = f(B) mit Parameter A

nur eine Hauptwirkung (hier B) → sehr einfache Konturlinien-/Wirkungsdiagramme

Variante mit großer Zweifach-Wechselwirkung AB
(größer als eine der beiden Hauptwirkungen → „hybride“ Wechselwirkung)

y = 86 g/h + 3 g/h · A + 11 g/h · B – **10 g/h** · AB

berechnete y-Werte mit Hilfe der Regressionsfunktion
y (- 1, -1) = 86 – 3 – 11 – 10 = 62 g/h
y (+1, -1) = 86 + 3 – 11 + 10 = 88 g/h
y (- 1,+1) = 86 – 3 + 11 + 10 = 104 g/h
y (+1,+1) = 86 + 3 + 11 – 10 = 90 g/h



Konturliniendiagramm
y = f (A,B)

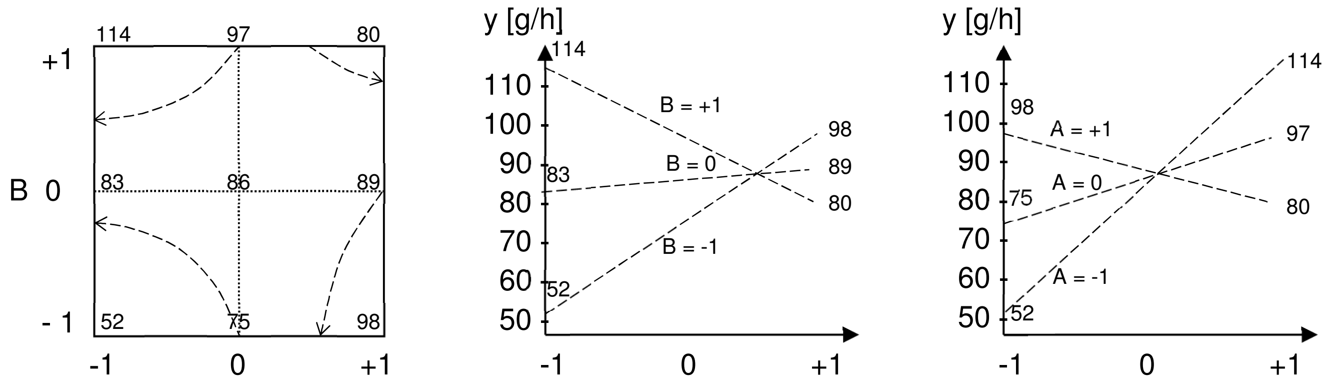
Wirkungsdiagramm
y = f(A) mit Parameter B

Wirkungsdiagramm
y = f(B) mit Parameter A

Variante mit sehr großer Zweifach-Wechselwirkung AB
(größer als jede der beiden Hauptwirkungen → „disordinale“ Wechselwirkung)

y = 86 g/h + 3 g/h · A + 11 g/h · B – **20 g/h** · AB

berechnete y-Werte mit Hilfe der Regressionsfunktion
y (- 1, -1) = 86 – 3 – 11 – 20 = 52 g/h
y (+1, -1) = = 98 g/h
y (- 1,+1) = = 114 g/h
y (+1,+1) = = 80 g/h



Konturliniendiagramm
y = f (A,B)

Wirkungsdiagramm
y = f(A) mit Parameter B

Wirkungsdiagramm
y = f(B) mit Parameter A

große Wechselwirkung AB → stark unterschiedlich gekrümmte Iso-Linien (Wert konstant) in Konturliniengrafik (bis hin zum Sattel), Geraden mit stark unterschiedlichen Steigungen in den Wirkungsdiagrammen (Wirkungen ändern das Vorzeichen, „drehen sich um“)

Zusätzliche Erkenntnisse:

- Durch die Elimination von Wechselwirkungen werden die Hauptwirkungen (= mittlere Wirkungen der Einflussfaktoren) nicht verändert

- Konturlinien-Grafik bei linearen Modellen
  - die y-Werte an Kanten und senkrechten Schnitten durch den Versuchsraum sind linear skaliert,
    Beispiel: B = konstant → $y = b_0^* + b_1^* \cdot A$ = Geradengleichung
  - je größer die Wechselwirkungen, desto gekrümmter die y-Isolinien in der Konturliniengrafik bis hin zur Ausbildung von „Sätteln", d.h. mit linearen Modellen der gewählten Art können schon recht komplexe Zusammenhänge beschrieben werden

- Maxima bzw. Minima der Zielgröße bei linearen Modellen
  - befinden sich immer an den Eckpunkten des Versuchsraumes (können sich nur dort befinden)
  - nur Maxima, Minima der Zielgröße gesucht + Realität verhält sich linear
    → Versuchsergebnisse an Eckpunkten des Versuchsraumes reichen aus, weitere Auswertung der Regressionsfunktion wird nicht benötigt.
  - Werte der Zielgröße im Inneren des Versuchsraumes gesucht
    → Bestimmung und Auswertung der Regressionsfunktion ist notwendig.

- Vergleich: Messwerte aus den Versuchen ↔ Funktionswerte aus der Regressionsfunktion
  - Anzahl Versuchspunkte = Anzahl zu bestimmender Regressionskoeffizienten
    → Funktionswerte an den Versuchspunkten = mittlere Messwerte
  - Anzahl Versuchspunkte > Anzahl zu bestimmender Regressionskoeffizienten
    → Funktionswerte an den Versuchspunkten ≠ mittlere Messwerte

3.3 Beispielexperiment Solarzelle

Kurzschlussstrom einer Solarzelle = f (Fläche, Beleuchtungsstärke)

- Beschreibung des Experiments
  - Messung des Kurzschlussstromes I einer Solarzelle bei verschiedenen Flächen und Beleuchtungsstärken
  - Veränderung der Fläche der Solarzelle durch Verdeckung mit Pappkarton zwischen 50 und 100 %
  - Veränderung der Beleuchtungsstärke zwischen 4000 und 8000 Lux durch Veränderung des Abstandes zwischen Solarzelle und Halogenstrahler;

    Messung der Beleuchtungsstärke mit dem Lux-Meter, Gleichstrom in µA = 0,07 · Lux

    4000 Lux → 280 µA

    8000 Lux → 560 µA
  - Messung des Kurzschlussstromes (Gleichstrom) durch direkte Verbindung der Solarzelle mit dem Strommessgerät

    DC-Strom-Messbereich 2000 mA (gelbe Messgeräte); Messgerät und Messbereich nicht wechseln
- Gemeinsame Planung und Durchführung in der Vorlesung unter Nutzung von STATISTICA
- Überprüfung der gefundenen Regressionsfunktion am Zentralpunkt durch ein „Bestätigungsexperiment“

4. DoE-Versuchspläne

4.1 Vollfaktorielle Versuchspläne

lineare Modellbildung

= Bestimmung der Koeffizienten einer Regressionsfunktion mit linearen Termen (= lineare Hauptwirkungen und 2fach Wechselwirkungen)

→ alle Einflussgrößen auf 2 Stufen variieren

Übersicht über vollfaktorielle Versuchspläne = 2^k-Pläne (k Einflussgrößen, welche jeweils auf 2 Stufen variiert werden)

Anzahl Einflussfaktoren	vollfaktorieller 2-Stufen Plan	Anzahl der Versuchspunkte = Anzahl „Ecken“ des Versuchsraumes
2	2^2	4
3	2^3	8
4	2^4	16
5	2^5	32
6	2^6	64
7	2^7	128
8	2^8	256

Aufbau vollfaktorieller Versuchspläne in Standardschreibweise (→ einfach erweiterbar):

Versuchs-Nummer	2^4-Plan				...
	2^3-Plan				...
	2^2-Plan				...
	A	B	C	D	...
1	-	-	-	-	...
2	+	-	-	-	...
3	-	+	-	-	...
4	+	+	-	-	...
5	-	-	+	-	...
6	+	-	+	-	...
7	-	+	+	-	...
8	+	+	+	-	...
9	-	-	-	+	...
10	+	-	-	+	...
11	-	+	-	+	...
12	+	+	-	+	...
13	-	-	+	+	...
14	+	-	+	+	...
15	-	+	+	+	...
16	+	+	+	+	...
...	...	...	...	...	...

allgemeine Form der linearen Regressionsfunktionen:

- 2 Einflussfaktoren:

  $y = b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_4 \cdot A \cdot B$

- 3 Einflussfaktoren:

  $y = b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot C + b_4 \cdot A \cdot B + b_5 \cdot A \cdot C + b_6 \cdot B \cdot C$

  (+ $b_7 \cdot A \cdot B \cdot C$: wird in der Regel nicht ausgewertet)

- 4 Einflussfaktoren:

  $y = b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot C + b_4 \cdot D + b_5 \cdot A \cdot B + b_6 \cdot A \cdot C + b_7 \cdot A \cdot D + b_8 \cdot B \cdot C + b_9 \cdot B \cdot D + b_{10} \cdot C \cdot D$

  (+ $b_{11} \cdot A \cdot B \cdot C + b_{12} \cdot A \cdot B \cdot D + b_{13} \cdot A \cdot C \cdot D + b_{14} \cdot B \cdot C \cdot D + b_{15} \cdot A \cdot B \cdot C \cdot D$: werden in der Regel nicht ausgewertet)

allgemein bei k Einflussfaktoren:

- 2^k = Anzahl der Versuchspunkte in einem vollfaktoriellen Plan
  = Anzahl aller Regressionskoeffizienten in einer linearen Regressionsfunktion mit linearen Hauptwirkungen und allen Wechselwirkungen
- Anzahl der interessierenden Regressionskoeffizienten:

1	Regressionskonstante
k	Lineare (Haupt)-Wirkungen
$k \cdot (k-1)/2$	2fach-Wechselwirkungen

  $\Sigma = 1 + k + k \cdot (k-1)/2$

Anmerkungen

- Reduzierung der zunehmenden Überbestimmtheit (Anzahl Versuchspunkte > Anzahl interessierender Regressionskoeffizienten) bei zunehmender Anzahl an Einflussfaktoren durch Teilfaktorisierung der Pläne (siehe Kapitel 4.2)
- Prüfung, ob der lineare Modellansatz die Realität ausreichend gut beschreibt, durch voll- und teilfaktorielle Versuche mit Zentralpunkt (siehe Kapitel 4.3)

4.2 Faktorielle Versuchspläne mit Zentralpunkt

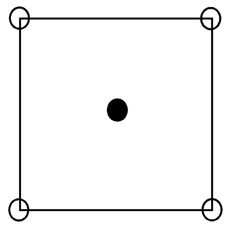
Der Ansatz eines linearen Modells bzw. eines faktoriellen Versuchsplanes stellt bei unbekannten Problemstellungen eine vereinfachende Annahme dar. Zur Überprüfung der Annahme wird im Allgemeinen ein Versuch im Zentralpunkt herangezogen. Der Messwert am Zentralpunkt wird verglichen mit dem rechnerisch ermittelten Wert für die Zielgröße aus der Regressionsfunktion.

2^2-Faktoren-Versuch mit Zentralpunkt

Versuchsplan in Standardform

Nr.	A	B
1	–	–
2	+	–
3	–	+
4	+	+
5	0	0

grafische Darstellung des Versuchsplans

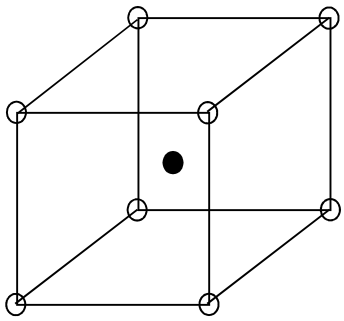


2^3-Faktoren-Versuch mit Zentralpunkt

Versuchsplan in Standardform

Nr.	A	B	C
1	–	–	–
2	+	–	–
3	–	+	–
4	+	+	–
5	–	–	+
6	+	–	+
7	–	+	+
8	+	+	+
9	0	0	0

grafische Darstellung des Versuchsplans



$\overline{y}_{ZP}$ = Mittelwert der Versuchsergebnisse am Zentralpunkt

T = Total = Mittelwert aller Versuchsergebnisse = Regressionsfunktionswert am ZP

$|T - \overline{y}_{ZP}|$ < Vertrauensbereich der Effekte → Realität linear, lineares Modell ok

≥ Vertrauensbereich der Effekte → lineares Modell ist ungeeignet

Zusatznutzen: Zentralpunkt = geeigneter Versuchspunkt für Wiederholungen

Anhaltswerte zur Erzielung ausreichend kleiner Vertrauensbereiche:

- bei 2 oder 3 Einflussgrößen (4-8 VP): 1 Wiederholung in jedem Versuchspunkt
- bei ≥ 4 Einflussgrößen (≥ 16 VP): 3 - 10 Wiederholungen nur im Zentralpunkt

Anmerkungen :

- Versuchsergebnisse am Zentralpunkt → neuer Wert des Total = Mittelwert aller Versuchsergebnisse; Wirkungen bzw. Effekte der Einflussgrößen bleiben unverändert
- Versuche am Zentralpunkt reichen noch nicht für eine quadratische Modellbildung aus

4.3 Blockbildung und Randomisierung

Blockbildung

Einsatz von Blockbildung, wenn …

- die Randbedingungen der Versuche nicht konstant gehalten werden können + daraus resultierende Auswirkungen auf die Endergebnisse nicht auszuschließen sind, diese jedoch voraussichtlich deutlich kleiner sein werden als die zu untersuchenden Haupt- und Wechselwirkungen
- zum Beispiel:
  - eine Materialcharge reicht nicht aus für den kompletten Versuchsplan → 2. Charge
  - Durchführung der Versuche auf 2 unterschiedlichen Drehmaschinen und / oder durch unterschiedliche Personen
  - größere zeitliche Abstände zwischen den Versuchen

Beispiel:

2^3-Faktoren Versuch (y-Daten aus Übungsbeispiel „Adhäsionskraft einer Verklebung“)

Nr.	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	T	y alt	y neu andere Klebercharge Negativbeispiel	y neu andere Klebercharge Positivbeispiel
1	–	–	–	+	+	+	–	+	30	30	30
2	+	–	–	–	–	+	+	+	35	35	**+1 = 36**
3	–	+	–	–	+	–	+	+	25	25	**+1 = 26**
4	+	+	–	+	–	–	–	+	33	33	33
5	–	–	+	+	–	–	+	+	30	**+1 = 31**	**+1 = 31**
6	+	–	+	–	+	–	–	+	41	**+1 = 42**	41
7	–	+	+	–	–	+	–	+	40	**+1 = 41**	40
8	+	+	+	+	+	+	+	+	45	**+1 = 46**	**+1 = 46**

Wie man es nicht machen sollte (Negativbeispiele)

- Versuche 1-4 mit Charge 1 und Versuche 5-8 mit Charge 2
  - → Effekt C wird fehlerhaft berechnet (und T um 0,5 Einheiten zu groß; alle anderen Wirkungen korrekt)
  - → genauer: in die Berechnung des Effektes von C fließt der Einfluss der Chargenänderung voll mit ein; es wird die Summenwirkung von C und der Charge berechnet

    Effekt C = $\bar{y}$ (C+, Charge 2) – $\bar{y}$ (C-, Charge 1)

    im Zahlenbeispiel wird der Effekt von C durch die Wirkung der Charge um 1 Einheit zu groß berechnet
- Versuche 1,4,5,8 mit Charge 1 und Versuche 2,3,6,7 mit Charge 2
  - → Effekt AB wird fehlerhaft berechnet ...

Lösung des Problems: Blockbildung

- gezielte Aufteilung der Versuche in der Art, dass die veränderlichen Randbedingungen die Berechnung der interessierenden Haupt- und 2fach-Wechselwirkungen so wenig wie möglich beeinflussen
- realisierbar durch 100%ige Vermengung der "Blockvariablen" (hier: Charge) mit einer Wechselwirkung, die nicht berechnet werden soll, da sie voraussichtlich einen vernachlässigbar kleinen Einfluss auf die Zielgröße hat.

  im obigen Beispiel: 3fach-Wechselwirkung ABC
- Aufteilung der Versuche gemäß der Vorzeichenspalte dieser Wechselwirkung bzw. Blockvariablen

  im obigen Beispiel: Versuche 1,4,6,7 mit Charge 1

  Versuche 2,3,5,8 mit Charge 2

  bei allen anderen „Einflussfaktoren" werden auf Plus- und Minusniveau jeweils die Hälfte der Versuche mit Charge 1 und Charge 2 durchgeführt → Auswirkung der Charge kompensiert sich
- statt der vernachlässigbar kleinen Wirkung von ABC kann statt dessen ggf. die Wirkung der Blockvariablen (im Beispiel: Chargen-Wirkung) berechnet werden

Notwendigkeit von mehr als 2 Blöcken z.B. 4 Chargen oder 2 Maschinen + 2 Arbeiter

→ zwei voraussichtlich nicht signifikante Wechselwirkungen ″nutzen″

z.B.: AB und AC nutzen; Aufteilung der Blöcke so, dass AB und AC jeweils gleiche Vorzeichenkombinationen besitzen

Block 1 bzw. Charge 1:	Versuche	1, 8
Block 2 bzw. Charge 2:	″	2, 7
Block 3 bzw. Charge 3:	″	3, 6
Block 4 bzw. Charge 4:	″	4, 5

bei allen den Einflussfaktoren A, B, C werden auf Plus- bzw. Minusniveau jeweils gleich viele Versuche mit jedem Block durchgeführt → Einflüsse der Blöcke kompensieren sich (nicht bei BC)

Randomisierung = zufällige Versuchsreihenfolge

- Einflüsse unbekannter Störgrößen werden dadurch zufällig gestreut, so dass sie sich zumindest teilweise kompensieren
- Hintergrund: wie bei Blockbildung, jedoch nicht systematisch sondern stochastisch

4.4 Teilfaktorielle Versuchspläne

Mit zunehmender Anzahl an Einflussfaktoren steigt bei vollfaktoriellen Versuchsplänen die Anzahl an Versuchspunkten rasch an, deutlich stärker als die Anzahl der interessierenden Regressionskoeffizienten. Gerade dann lässt sich die Anzahl an Versuchspunkten mit teilfaktoriellen Versuchsplänen wieder deutlich reduzieren - teils mit nahezu gleichem Erkenntnisgewinn.

4.4.1 Generierung teilfaktorieller Versuchspläne

Vorabbemerkungen:

- Mit dem Begriff „Einflussfaktor" in Anführungszeichen werden im Folgenden nicht nur die Einflussfaktoren selbst (z.B. A, B, C, …) sondern auch die Wechselwirkungen (z.B. A·B, A·B·C, …) bezeichnet. Bei der Durchführung von Versuchen werden die Einflussfaktoren selbst direkt eingestellt. Die Einstellung der Wechselwirkungen (= multiplikative Kombinationen der einzelnen Einflussfaktoren) werden damit indirekt mit eingestellt.
- Vollfaktorielle Versuchspläne besitzen keinerlei „Vermengungen" zwischen den „Einflussfaktoren", d.h.
  - alle Wirkungen (lineare Hauptwirkungen, 2fach Wechselwirkungen, auch höhere Wechselwirkungen) lassen sich völlig unabhängig voneinander berechnen; die berechneten Wirkungen können eindeutig einem „Einflussfaktor" zugeordnet werden
  - Hintergrund (siehe auch Kapitel 2):
    - die Berechnung der einzelnen linearen Hauptwirkungen (= mittlere lineare Wirkung) erfolgt als Mittelwert aller Differenzen der Versuchsergebnisse, bei denen unter Konstanthaltung aller anderen Einflussfaktoren der betrachtete Einflussfaktor von - nach + Niveau verändert wird
    - allgemein: bei den Versuchspunkten, bei denen der betrachtete „Einflussfaktor" auf Plusniveau steht, ist jeder andere „Einflussfaktor" gleich oft auf Plus- und Minusniveau, d.h. deren Einfluss auf die Mittelwertberechnung für das Plusniveau des betrachteten „Einflussfaktors" kompensiert sich (wie wenn die anderen „Einflussfaktoren" alle auf 0-Niveau gestanden hätten); analoges gilt für das Minusniveau; damit kann die (mittlere) Wirkung des betrachteten „Einflussfaktors" unabhängig von der Einstellung anderer „Einflussfaktoren" berechnet werden
      (gilt für alle zu berechnenden Wirkungen in vollfaktoriellen Plänen)
- 100%ige „Vermengung" von Wirkungen bzw. „Einflussfaktoren" (= Aliase) heißt
  - die vermengten „Einflussfaktoren" F_i besitzen in der Auswertematrix exakt die gleiche Vorzeichenspalte
    - d.h. sie werden bei allen Versuchspunkten in gleicher Weise variiert (sind an einem Versuchspunkt alle entweder auf Plus- oder Minusniveau eingestellt)
    - d.h. in den vermengten Auswertespalten wird in gleicher Weise die Summenwirkung der miteinander vermengten „Einflussgrößen" auf die Zielgröße ermittelt

  berechnete Wirkungen der vermengten Einflussfaktoren F_i (in den Auswertespalten für F_1, F_2, … , F_i) sind alle gleich
  = reale Wirkung von F_1 + reale Wirkung von F_2 + … + reale Wirkung von F_i

- nur wenn bei i vermengten „Einflussfaktoren“ die Wirkung von i-1 „Einflussfaktoren“ (nahe) Null ist, kann die berechnete Wirkung eindeutig 1 „Einflussfaktor“ zugeordnet werden

  reale Wirkung von F_1 + reale Wirkung von F_2 + … + reale Wirkung von F_i
  = reale Wirkung von F_1

  wenn reale Wirkung von F_2, …, $F_i \approx 0$
  (vernachlässigbar klein oder physikalisch prinzipiell nicht vorhanden)

Generierung teilfaktorieller Versuchspläne aus vollfaktoriellen Plänen:

- vorteilhafter Weise existieren in vollfaktoriellen Versuchsplänen Auswertespalten, vor allem bei zunehmender Anzahl an Einflussfaktoren, die nicht ausgewertet werden, da die zugehörigen Wirkungen sehr klein sind; Beispiele:
  - 3fach-, 4fach-, 5fach-Wechselwirkungen etc., die tendenziell als vernachlässigbar klein angesehen werden (können)
  - 2fach-Wechselwirkungen, die der Anwender mit seinem Sachverstand ausschließen kann, z.B. Bremsweg ≠ f (2fach-WW Bremsscheibendurchmesser x Reaktionszeit), bzw. bei denen er nur vernachlässigbar kleine Werte erwartet
- normalerweise: Nutzung dieser Überbestimmtheit (Anzahl Versuchspunkte > Anzahl interessierender Regressionskoeffizienten) als Beitrag zur Ermittlung der Versuchs-streuung und zur Prüfung auf Mangel an Anpassung
- hier: absichtliche 100%ige Vermengung einer weiteren Einflussgröße mit einer vernachlässigbar kleinen Wechselwirkung
  - Ziel: Untersuchung einer zusätzlichen Einflussgröße ohne zusätzliche Versuchspunkte
  - die Berechnung der interessierenden zusätzlichen Hauptwirkung ist möglich, da die absichtlich damit vermengte Wechselwirkung klein ist (Begründung siehe oben)
  - aber: zusätzliche Einflussgröße → nicht nur zusätzliche Hauptwirkung, sondern auch zusätzliche 2fach-Wechselwirkungen, die zu berücksichtigen sind → weitere (gegebenenfalls kritische) Vermengungen → verschiedene Qualitäten (= Lösungs-typen) teilfaktorieller Pläne
  - kritische Vermengungen: mehrere 2fach-Wechselwirkungen miteinander und Hauptwirkung mit 2fach-Wechselwirkung(en), da 2fach-Wechselwirkungen nicht ohne weiteres als vernachlässigbar klein angesehen werden können. Damit lässt sich die berechnete Wirkung nicht eindeutig 1 „Einflussfaktor“ zuordnen.

Bezeichnung der teilfaktoriellen Versuchspläne: 2^{k-p}

mit: k: Anzahl der untersuchten Einflussgrößen

p: Anzahl der absichtlichen 100%igen Vermengungen

Unterschied zur Blockbildung:

- Bei der Blockbildung findet eine absichtliche Vermengung mit einer „Störgröße“ statt, welche selbst schon eine voraussichtlich geringe „Hauptwirkung“ besitzt. Wechselwirkungen mit anderen Einflussfaktoren sind tendenziell noch kleiner und werden deshalb vernachlässigt.

Beispiel: 2^{5-1}-teilfaktorieller Plan = 2^4-Versuch mit E = ABCD

	Einflussfaktoren, Wechselwirkungen																															
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32
Versuchs -Nummer	A	B	C	D	A B	A C	A D	B C	B D	C D	A B C	A B D	A C D	B C D	E = A B C D	T	E = A B C D	A E	B E	C E	D E	A B E	A C E	A D E	B C E	B D E	C D E	A B C E	A B D E	A C D E	B C D E	A B C D E
1	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	+
2	+	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	+	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-	+	+
3	-	+	-	-	-	+	+	-	-	+	+	+	-	+	-	+	-	+	-	+	+	+	-	-	+	+	-	-	-	+	-	+
4	+	+	-	-	+	-	-	-	-	+	-	-	+	+	+	+	+	+	+	-	-	+	-	-	-	-	+	-	-	+	+	+
5	-	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+	-	+	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	-	+
6	+	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	+	+	+	+	+	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	+	+
7	-	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	+	+	-	+	+	+	-	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	+	+	-	+
8	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	+	-	-	+	-	+	+	-	+	+	+	+
9	-	-	-	+	+	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	+	-	-	-	+
10	+	-	-	+	-	-	+	+	-	-	+	-	-	+	+	+	+	+	-	-	+	-	-	+	+	-	-	+	-	-	+	+
11	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+	+	+	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+
12	+	+	-	+	+	-	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+	-	-	-	+	-	-	+	-	+	-	+	+	-	+	+	+
13	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	+	+	+	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	+
14	+	-	+	+	-	+	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	+	-	+	+	-	+	+
15	-	+	+	+	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	+	+	-	+
16	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
100%ige Vermeng-ung mit	B C D E	A C D E	A B D E	A B C E	C D E	B D E	B C E	A D E	A C E	A B E	D E	C E	B E	A E	E	A B C D E																
kritisch?	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n																

grau hinterlegte Spalten: (direkte) Einstellvorschrift für die 5 zu untersuchenden Einflussfaktoren; die Einstellung aller anderen "Einflussfaktoren" (= Wechselwirkungen) ändert sich indirekt mit (gemäß der Vorzeichen in den jeweiligen Spalten)

Die absichtliche 100%ige Vermengung von E mit ABCD zieht weitere Vermengungen nach sich, aber ohne größere Einbußen bezüglich der Aussagequalität der interessierenden Haupt- und 2fach-Wechselwirkungen, da diese nur mit 3-, 4-, und 5-fach-Wechselwirkungen vermengt sind (→ unkritisch).

4.4.2 Arten bzw. Lösungstypen teilfaktorieller Versuchspläne

a) Lösungstyp I: alle Haupt- und alle 2fach-WW können bestimmt werden

existierende 100%ige Vermengungen:

- Hauptwirkungen mit ≥ 4fach-WW: unkritisch
- 2fach-WW mit ≥ 3fach-WW: unkritisch

Zahl der Einflussgrößen	5	6	7	8	etc.
mögliche teilfaktorielle Pläne	2^{5-1}	2^{6-1}	2^{7-1}	2^{8-2}	...
Zahl Versuchspunkte, vollfakt. Plan	$2^5 = 32$	$2^6 = 64$	$2^7 = 128$	$2^8 = 256$	...
Zahl Versuchspunkte, teilfakt. Plan	$2^4 = 16$	$2^5 = 32$	$2^6 = 64$	$2^6 = 64$	...
Wichtigkeit in der Praxis	bedeutsam [1]		nicht so bedeutsam [2]		

[1] unproblematisch anzuwendende Pläne

[2] Pläne mit > 64 Versuchspunkten werden zu unübersichtlich, zu fehleranfällig in der Durchführung

b) Lösungstyp II: alle Hauptwirkungen können bestimmt werden; zusätzlich einige 2fach-WW, sofern die übrigen 2fach-WW vernachlässigbar klein sind

existierende 100%ige Vermengungen:

- Hauptwirkungen mit 3fach-WW: unkritisch
- 2fach-WW mit 2fach-WW: **kritisch !!!**

Zahl der Einflussgrößen	4	6	7	7	8	8	etc.[1]
mögliche teilfakt. Pläne	2^{4-1}	2^{6-2}	2^{7-3}	2^{7-2}	2^{8-4}	2^{8-3}	...
Zahl VP, vollfakt. Plan	$2^4 = 16$	$2^6 = 64$	$2^7 = 128$	$2^7 = 128$	$2^8 = 256$	$2^8 = 256$	...
Zahl VP, teilfakt. Plan	$2^3 = 8$	$2^4 = 16$	$2^4 = 16$	$2^5 = 32$	$2^4 = 16$	$2^5 = 32$	...
Zahl 2fach-WW, gesamt	6	15	21	21	28	28	...
möglichst vernachl.bar	3	8	14	3	21	8	...
davon max. bestimmbar[2]	3	7	7	18	7	20	...
Wichtigkeit in der Praxis	bedeutsam [3]						

[1] für ≥ 9 Einflussgrößen mit

- $2^5 = 32$ Versuchspunkten: 2^{9-4}, 2^{10-5}, ..., 2^{15-10}, 2^{16-11}
- $2^6 = 64$ Versuchspunkten: 2^{9-3}, 2^{10-4}, ..., 2^{31-25}, 2^{32-26}

[2] nicht alle Kombinationen an 2fach-WW sind möglich (siehe STATISTICA/Menü „Aliasse aller Haupteffekte“)

[3] wenn eine ausreichende Zahl an 2fach-WW aus Systemkenntnis vernachlässigt werden kann, oder bei einer großen Anzahl potentieller Einflussgrößen für Vorversuche zum Sondieren maßgeblicher Hauptwirkungen (= Screening)

c) Lösungstyp III: die Haupt- und wenige 2fach-WW können nur dann unbeeinflusst bestimmt werden, wenn sehr viele 2fach-WW vernachlässigbar klein sind

existierende 100%ige Vermengungen:

- Hauptwirkungen mit 2fach-WW **sehr kritisch !!**
- 2fach-WW mit 2fach-WW **kritisch !!**

Zahl der Einflussgrößen	3	5	6	7	8		etc.[1]
mögliche teilfakt. Pläne	2^{3-1}	2^{5-2}	2^{6-3}	2^{7-4}	-		...
Zahl VP, vollfakt. Plan	$2^3 = 8$	$2^5 = 32$	$2^6 = 64$	$2^7 = 128$	-		...
Zahl VP, teilfakt. Plan	$2^2 = 4$	$2^3 = 8$	$2^3 = 8$	$2^3 = 8$	-		...
Zahl 2fach-WW, gesamt	3	10	15	21	-		...
davon max. bestimmbar[2]	0	2	1	0	-		...
Wichtigkeit in der Praxis	wenig bedeutsam [3]						

[1] für ≥ 9 Einflussgrößen mit
- $2^4 = 16$ Versuchspunkten: 2^{9-5}, 2^{10-6}, ..., 2^{15-11}
- $2^5 = 32$ Versuchspunkten: 2^{17-12}, 2^{18-13}, ..., 2^{31-26}

[2] siehe STATISTICA/Menü „Aliasse aller Haupteffekte“

[3] ggf. für Screening-Versuche bei einer sehr großen Anzahl an Einflussgrößen, aus denen nur die wichtigsten mit den dominierenden Effekten herausgefiltert werden sollen; unbrauchbar bei vielen Effekten mit gleicher Größenordnung, da dann eine Beeinflussung der Versuchsaussage durch die vermengten 2fach-WW nicht auszuschließen ist

Mögliche Vorgehensweisen bei einer großen Zahl an Einflussgrößen (Beispiel: 8 Stück)

a) einschrittig, direkt mit einem Plan vom Lösungstyp I:
$2^{8-2} = 64$ Versuchspunkte

b) zweischrittig, Kombination aus Screening-Plan vom Lösungstyp II und Plan vom Lösungstyp I

(1) Screening: $2^{8-4} = 16$ Versuchspunkte
zur Ermittlung der wichtigen Einflussgrößen

(2) Je nach Anzahl der wichtigen Einflussgrößen

<u>Anzahl</u>	<u>Plan</u>	<u>Anzahl VP</u>	<u>Anzahl VP gesamt</u> (mit Screening)	
8	2^{8-2}	64	64*)	d.h. gleicher Aufwand wie bei a)
7	2^{7-1}	64	80	d.h. größerer Aufwand als bei a)
6	2^{6-1}	32	48	d.h. kleinerer Aufwand als bei a)
5	2^{5-1}	16	32	´´
4	2^4	16	32	´´
3	2^3	8	24	´´
2	2^2	4	20	´´

*): die 16 VP aus dem 2^{8-4}-Plan sind auch im 2^{8-2}-Plan enthalten (müssen nicht nochmal gemacht werden)

4.5 Zentral zusammengesetzte Versuche und quadratische Modellbildung

quadratische Modellbildung

= Bestimmung der Koeffizienten in einer Regressionsfunktion mit linearen und quadratischen Termen (lineare Hauptwirkungen, 2fach Wechselwirkungen, quadratische Wirkungen)

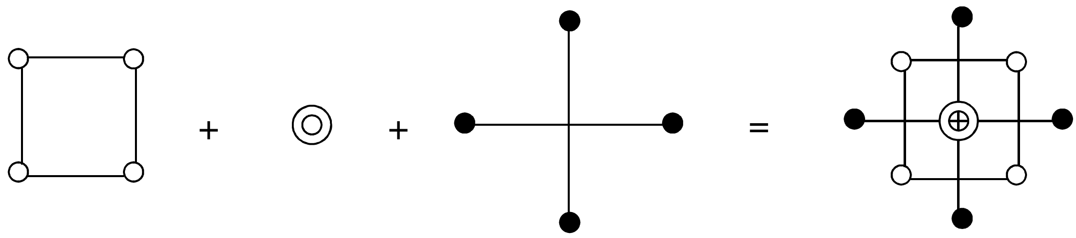
→ Einflussgrößen auf 3 bzw. 5 Stufen variieren

4.5.1 Zentral zusammengesetzte Versuche mit voll- oder teilfaktoriellem Kern

- 2 Einflussfaktoren

  Regressionsfunktion: $y = b_0 + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot A \cdot B + b_4 \cdot A^2 + b_5 \cdot B^2$

  Versuchsplan, grafische Darstellung:

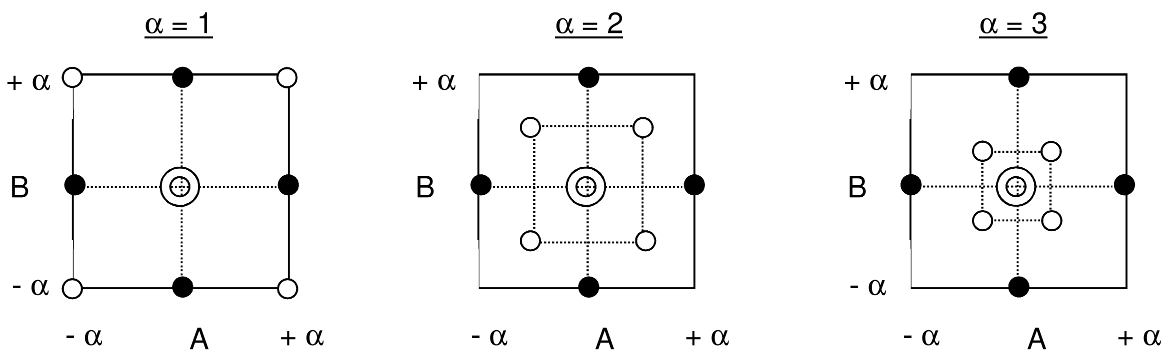


faktorieller Kern + Zentralpunkt + Sternpunkte = zentral zusammengesetzter Versuch

Versuchsplan, in Standardschreibweise:

Nr.	A	B
1	–	–
2	+	–
3	–	+
4	+	+
5	0	0
6	- α	0
7	+ α	0
8	0	- α
9	0	+ α

Versuchsraum, grafische Darstellung (Min/Max-Grenzen des Versuchsraumes von –α bis +α sind physikalisch gegeben):



- 3 Einflussfaktoren

  Regressionsfunktion mit interessierenden Termen:

  $y = b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot C + b_4 \cdot A \cdot B + b_5 \cdot B \cdot C + b_6 \cdot A \cdot C + b_7 \cdot A^2 + b_8 \cdot B^2 + b_9 \cdot C^2$

- k Einflussfaktoren:

  - Anzahl der interessierenden Regressionskoeffizienten

1	Regressionskonstante
k	Lineare (Haupt)-Wirkungen
$k \cdot (k-1)/2$	2fach-Wechselwirkungen
k	Quadratische Wirkungen

    $\Sigma = 1 + 2 \cdot k + k \cdot (k-1)/2$ = Mindestanzahl an Versuchspunkten

  - Anzahl der Versuchspunkte bei vollfaktoriellem Kern

2^k	Eckpunkte des vollfaktoriellen Kerns
1	Zentralpunkt
$2 \cdot k$	Sternpunkte

    $\Sigma = 1 + 2 \cdot k + 2^k$

  - durch die Sternpunkte nimmt die Überbestimmtheit der Versuchspläne zu (2 Sternpunkte zur Bestimmung von 1 quadratischen Regressionskoeffizienten)

Anmerkungen:

- Die linearen Hauptwirkungen werden bei zentral zusammengesetzten Plänen nicht nur anhand der Messwerte auf den Ecken des (teil-)faktoriellen Kerns sondern auch anhand derer an den Sternpunkten berechnet. Das einfache „händische“ Auswerteschema aus Kapitel 3 führt deshalb zu anderen Ergebnissen als bei Nutzung einschlägiger Software.
- Die quadratischen Wirkungen werden nur aus den Ergebnissen an den Sternpunkten und am Zentralpunkt ermittelt.

4.5.2 Arten zentral zusammengesetzter Versuchspläne

Unterschiedliche Arten zentral zusammengesetzter Versuchspläne → Werte von $\alpha = 1 \dots 3$

- orthogonaler Plan
  - $\alpha = 1$ bei 2^2-Kern bis $\alpha = 1{,}761$ bei 2^6-Kern
  - keine Vermengung von Wirkungen, Regressionskoeffizienten werden unabhängig voneinander bestimmt
- drehbarer Plan
  - $\alpha = 1{,}414$ bei 2^2-Kern bis $\alpha = 2{,}828$ bei 2^6-Kern
  - Anzahl Wiederholungen im Zentralpunkt wird vorgegeben: 5 bei 2^2-, 15 bei 2^6-Kern
  - gleich gute Präzision der Schätzungen für alle Punkte im Versuchsraum mit gleicher Entfernung zum Zentralpunkt
  - Achtung: prozentuale Vermengungen vorhanden (sollten ≤ 30 % sein)
- pseudoorthogonal und drehbar
  - $\alpha = 1{,}414$ bei 2^2-Kern bis $\alpha = 2{,}828$ bei 2^6-Kern
  - Anzahl Wiederholungen im Zentralpunkt wird vorgegeben: 8 bei 2^2-, 24 bei 2^6-Kern → vergleichsweise hohe Anzahl an Versuchspunkten, keine Vermengungen
  - vereinen die Vorteile orthogonaler und drehbarer Pläne
- $\alpha = 1$
  - ggf. vorteilhaft bei der Einstellung der Versuchspunkte, z.B.
    - bei kategoriellen Variablen mit drei „ganzzahligen“ Einstellmöglichkeiten (z.B. 1, 2, 3 Stück)
    - zur Reduzierung der Anzahl herzustellender Hardware-Prüflinge (wenn sich die Prüflinge nur in einem Einflussfaktor unterscheiden) → 3 statt 5 Varianten
  - Achtung: prozentuale Vermengungen vorhanden (sollten ≤ 30 % sein)
  - Wenn nur 1 Einflussfaktor mit $\alpha = 1$ behandelt werden soll, in einem orthogonalen oder drehbaren Plan nur bei diesem Einflussfaktor manuell $\alpha = 1$ setzen (andere ungleich 1 lassen → geringere Teilvermengungen)

Anmerkungen:

- die Anzahl der Eck- und Sternpunkte ist bei allen Arten gleich; nur die α-Werte und die Anzahl der Wiederholungen im Zentralpunkt sind unterschiedlich
- die Anzahl an Wiederholungen im Zentralpunkt beeinflusst die Lage von α
- prozentuale Vermengung von Einflussgrößen: die berechnete Wirkung einer Einflussgröße hängt zu einem bestimmten Prozentsatz von der Wirkung einer anderen Einflussgröße ab (siehe Korrelationsmatrix in STATISTICA)
- können einzelne Stufenwerte nicht exakt auf $-\alpha$, -1, 0, +1, $+\alpha$ eingestellt werden, so sollten die normierten Stufenwerte im Plan gemäß der eingestellten physikalischen Werte verändert werden (resultierende Korrelationen beachten)

4.5.3 Zahlenbeispiel für zentral zusammengesetzten Versuch

Erweiterung des Beispiels Reaktionsausbeute = f (Temperatur, Zeit)

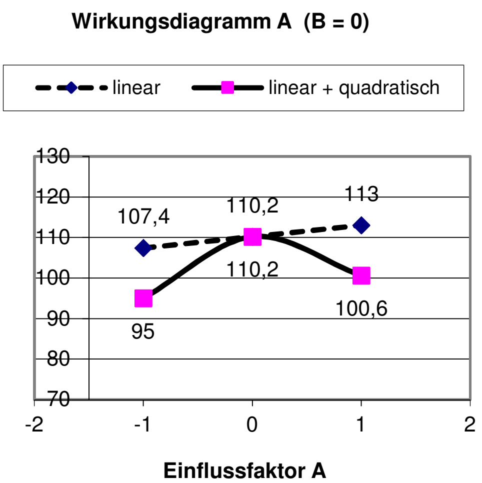
- zentral zusammengesetzter Plan mit $\alpha = 1$

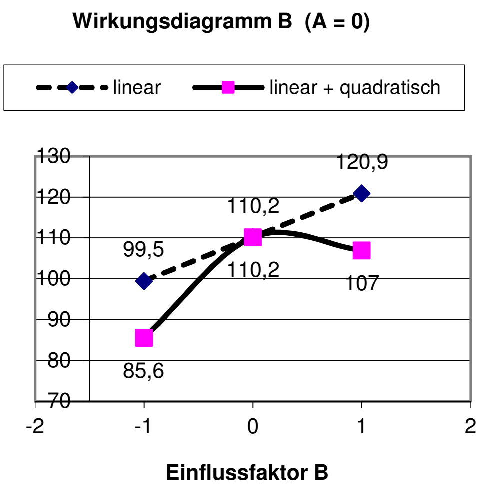
  → A^2 und B^2 sind nur zu 17 % miteinander vermengt ($\alpha_{\text{orthogonaler Plan}} = 1{,}08$)

  → 2 Wiederholungen im Zentralpunkt
- 1 Wiederholung des gesamten Grundplanes
- Versuchsplan + Messwerte:

Nr.	A	B	y_1	y_2
1	–	–	69	71
2	+	–	82	78
3	–	+	93	99
4	+	+	99	97
5	$-\alpha$	0	89	93
6	$+\alpha$	0	94	98
7	0	$-\alpha$	81	83
8	0	$+\alpha$	100	104
9	0	0	112	113
10	0	0	116	117

- Regressionsfunktion: $y = 110{,}2 + 2{,}8 \cdot A + 10{,}7 \cdot B - 2 \cdot A \cdot B - 12{,}4 \cdot A^2 - 13{,}9 \cdot B^2$
- Konturlinien- und Flächendarstellung: nach oben gewölbte Fläche
- Wirkungsdiagramme für die mittleren Wirkungen von A und B





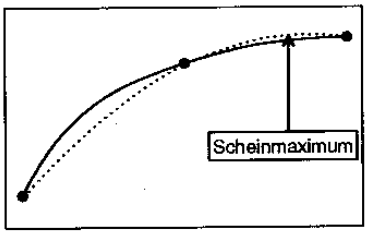
- Maximum im Versuchsraum
  - Suchfunktion in STATISTICA: y (A = 0,084; B = 0,377) = 112,4
  - Kurvendiskussion der Regressionsfunktion
    erste partielle Ableitungen der Regressionsfunktion zu Null setzen
    $dy/dA = 2{,}8 - 2 \cdot B - 24{,}8 \cdot A = 0$ und $dy/dB = 10{,}7 - 2 \cdot A - 27{,}8 \cdot B = 0$
    Lösung des Gleichungssystems → A = 0,0823, B = 0,379
    zweite partielle Ableitung $d^2y/dA^2 = -24{,}8$ = negativ → Maximum
    zweite partielle Ableitung $d^2y/dB^2 = -27{,}8$ = negativ → Maximum

4.5.4 Grenzen des quadratischen Modells

bei nicht zu großen Versuchsräumen können quadratische Modelle technische Zusammenhänge in der Regel gut beschreiben

Beispiele, bei denen quadratische Modelle unzulängliche Aussagen liefern:

a) die Zielgröße strebt asymptotisch gegen einen Grenzwert, z.B. Sättigungsverhalten der Ausbeute einer chemischen Reaktion in Abhängigkeit von der Zeit (durchgezogene Linie im Bild)

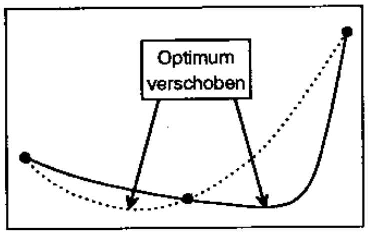


Problem: das quadratische Modell (punktierte Linie im Bild) kann ein flaches Maximum bzw. Minimum ausweisen, welches gar nicht existiert

Lösung: geeignete Transformation der Faktorstufen, wenn die prinzipiellen funktionalen Zusammenhänge vor Versuchsdurchführung bekannt sind, z.B. Sättigungsverhalten wird eher durch y = f (ln Zeit) als durch y = f (Zeit²) beschrieben, physikalische Grenzen des Versuchsraumes liegen mit 2 und 4 h fest (= $\pm\alpha$), Transformation der Stufenwerte für die Zeit gemäß folgender Tabelle (tief gestellte Zahlen in Tabelle = Reihenfolge des Vorgehens) → Regressionsfunktion auf Basis normierter Werte in der ln-Zeit-Skala

normierter Wert	-1,414	-1	0	+1	+1,414
Zeiteinstellung ohne Transformation /h	2	2,293	3	3,707	4
Zeiteinstellung mit Transformation /h	2_1	$2{,}214_4$	$2{,}829_4$	$3{,}615_4$	4_1
ln (Zeit)	$0{,}693_2$	$0{,}795_3$	$1{,}040_3$	$1{,}285_3$	$1{,}386_2$

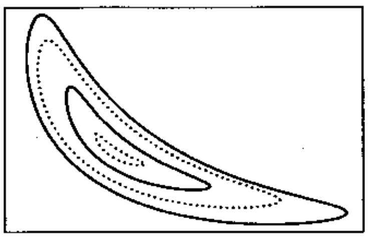
b) die Zielgröße ändert vergleichsweise abrupt ihr Verhalten z.B. weil an einem Rand des Versuchsraumes neue physikalische Phänomene auf die Zielgröße wirken (durchgezogene Linie im Bild)



Problem: Maximum bzw. Minimum wird verschoben (in Richtung weg vom „Ausreißer"; punktierte Linie im Bild) bzw. großer Lack of Fit

Lösung: kleinerer Versuchsraum

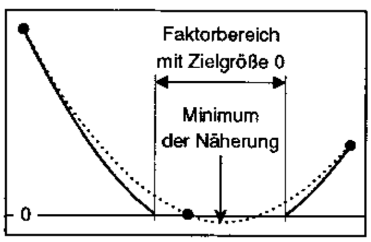
c) quadratische Wirkung(en) auf die Zielgröße sind von den Stufen anderer Einflussfaktoren abhängig (Maximum bzw. Minimum ist im Konturdiagramm nicht elliptisch ausgebildet; im Bild z.B. bananenförmig)



Problem: Maximum bzw. Minimum ist verschoben bzw. großer Lack of Fit

Lösung: 3er Gitterraster, kleinerer Versuchsraum

d) für die Zielgröße können negative Werte berechnet werden, obwohl physikalisch nur Werte ≥0 möglich sind (im Bild: real = durchgezogene Linie, berechnet = punktierte Linie)



Lösung: sinnvolle Ergebnisinterpretation, kleinerer Versuchsraum

(Bilder aus Kleppmann/Taschenbuch Versuchsplanung)

4.5.5 Beispielexperiment: Windkraftanlage

Planung:

- Zielgrößen: Strom, Spannung, Leistung (= I x U), Drehzahl, Geräusche, etc.
- Einflussgrößen variabel: Windgeschwindigkeit v
Lastwiderstand im Stromkreis R (mit Innenwiderstand des Strommessgerätes und der Windkraftanlage)
- Einflussgrößen konstant: Flügelanzahl (1, 2, 3 oder 4) = 3
Flügeltyp (gerade oder gewölbt) = gerade
Anstellwinkel der Flügel = 45°
etc.
- Störgrößen: Luftdruck, Lufttemperatur, Luftfeuchte, etc.
- Versuchsraum: Min/Max v = Windrad dreht … vor Endanschlag
Min/Max R = jeweils ca. 5 Ω von Endanschlägen entfernt
- Versuchsplan: zentral zusammengesetzt, orthogonal, 2^2-Kern
mit z.B. 6 Versuchen im Zentralpunkt → $\alpha = 1{,}2671$
- Normierung:

	α = -	-1	0	+1	α = +
v					
R					

Durchführung: Hinweise zur Steigerung der Reproduzierbarkeit (geringere Versuchsstreuung, bessere Homoskedastizität) und Repräsentativität

- Die Einstellgenauigkeit der Einflussgrößen sollte bei jedem Versuchspunkt identisch sein.
aber: 10 Skalenteile können reproduzierbarer eingestellt werden als 10,35
besser: physikalische Größen (hier Windgeschwindigkeit, Widerstand) einstellen und an jedem Versuchspunkt neu und mit einheitlicher Anzahl an Kommastellen vermessen
- schwankende Einstellwerte bei Messung der Windgeschwindigkeit → geeignet mitteln
- schwankende Messwerte für Strom und Spannung zur Ermittlung der Leistung → beide Werte gleichzeitig ablesen (in einem mittleren Wertebereich)
- Randomisierung

Auswertung:

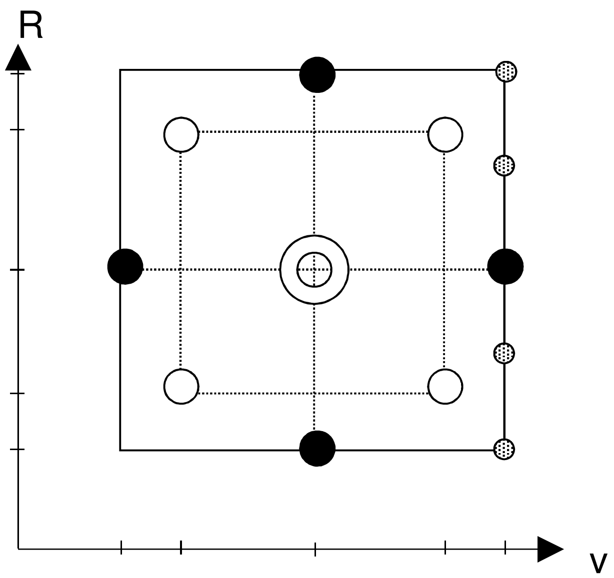
- Regressionsfunktion, allgemein: $y = b_o + b_1 \cdot A + b_2 \cdot B + b_3 \cdot A \cdot B + b_4 \cdot A^2 + b_5 \cdot B^2$
- Regressionsfunktion nach der Eliminierung nicht signifikanter Wirkungen

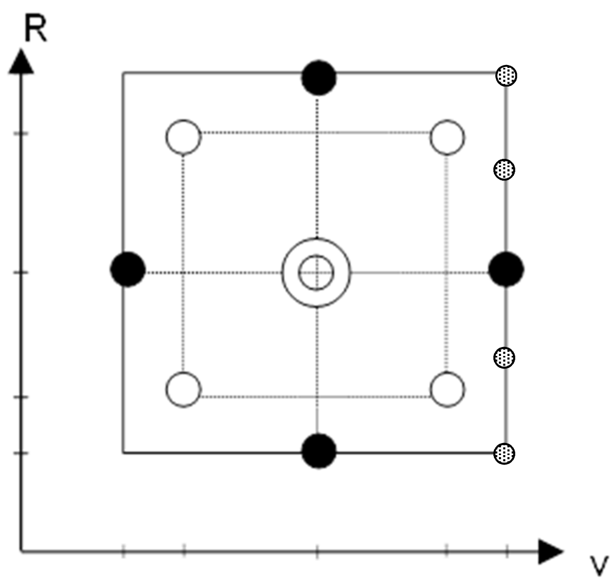
  y = …
- Prüfung auf Anpassung (Prognose/Beobachtungsgrafik, Lack of Fit)
- Ergebnisdarstellung (Konturplot in 2D und 3D, Wirkungsdiagramme, etc.)
- Vergleich mit Überprüfungsexperimenten

Plan und Ergebnistabelle

	v		**R**		**I**	**U**	**P_{el}**	**U**	**n**
Nr.	norm.	m/s	norm.	Ω	mA	mV	µW	mV	1/min
	–		–						
	+		–						
	–		+						
	+		+						
	- α		0						
	+ α		0						
	0		- α						
	0		+ α						
	0		0						
	0		0						
	0		0						
	0		0						
	0		0						
	0		0						
Überprüfungsexperimente									
	+ α		- α						
	+ α		- α/2						
	+ α		0						
	+ α		+ α/2						
	+ α		+ α						

Grafische Darstellung des Plans zum Eintragen der Messergebnisse





4.6 Versuchspläne mit kategoriellen bzw. mit kategoriellen und stetigen Einflussfaktoren

stetige Einflussfaktoren

- Beispiele: Temperatur, Zeit, Durchmesser
- einstellbar auf beliebige Zwischenwerte
- faktorielle und zentral zusammengesetzte Versuchspläne verwendbar
- neben linearen und 2fach-Wechselwirkungen sind auch quadratische Wirkungen bestimmbar

kategorielle Einflussfaktoren

- Beispiele: Farbe Rot oder Blau, Material Messing oder Kupfer, Stückzahl 1 oder 2
- nur stufig einstellbar, „ungerade“ Zwischenwerte für Plus- und Minusniveau, Zentralpunkt oder Sternpunkte sind nicht möglich
- nur faktorielle Versuchspläne verwendbar
- nur lineare Wirkungen und 2fach-Wechselwirkungen bestimmbar
- ggf. in stetige Einflussfaktoren überführen z.B. statt Messing / Kupfer die Härte des Materials als Einflussgröße verwenden (sofern diese Eigenschaft die Zielgröße maßgeblich beeinflusst)

Beispiel für einen Versuchsplan mit nur kategoriellen Einflussfaktoren:

- Schießergebnis eines Biathleten
  - Zielgröße: Trefferzahl
  - Einflussfaktoren:

Einflussfaktoren	„– Niveau”	„+ Niveau”
A: Visiereinrichtung	mechanisch	Display
B: Position des Schützen	stehend	liegend
C: Lichtverhältnisse	Sonnenlicht	Kunstlicht
D: Munitionsdarbietung	sortiert	unsortiert

  - 4 kategorielle Einflussfaktoren → faktorieller Versuch
    - vollfaktoriell: 2^4-Plan
    - teilfaktoriell: 2^{4-1}-Plan,
      wenn drei der insgesamt sechs 2fach-Wechselwirkungen vernachlässigt werden können

Gemischte Versuchspläne mit kategoriellen und stetigen Einflussfaktoren:

- Kombinierte Standardpläne für 2- und 3-stufige Faktoren: an jedem Punkt des faktoriellen Kerns der 2stufigen kategoriellen Einflussfaktoren variieren die stetigen Einflussfaktoren auf 3 Stufen (-,0,+) in allen möglichen Kombinationen

  Beispiel: Standardpläne bei 5 Einflussgrößen

Anzahl Einflussgrößen		Anzahl Versuchspunkte	
2-stufig	3-stufig	vollfaktorieller Kern	reduzierter Versuchsplan (siehe Statistica)
5	-	$2^5 = 32$	$2^{5-1} = 16$
4	1	$2^4 \cdot 3^1 = 16 \cdot 3 = 48$	$¾ \cdot 48 = 36$
3	2	$2^3 \cdot 3^2 = 8 \cdot 9 = 72$	$½ \cdot 72 = 36$
2	3	$2^2 \cdot 3^3 = 4 \cdot 27 = 108$	$½ \cdot 108 = 54$
1	4	$2^1 \cdot 3^4 = 2 \cdot 81 = 162$	$½ \cdot 162 = 81$
-	5	$2^5 + 10 + 1 = 43$	$2^{5-1} + 10 + 1 = 27$

  teils deutlich größere Anzahl an Versuchspunkten bei gemischten Plänen als bei rein faktoriellen oder zentral zusammengesetzten Plänen

- Möglichkeiten zur Reduzierung der Versuchsanzahl bei gemischten Versuchsplänen
  - Abhilfe 1: unter Verzicht auf die Bestimmung quadratischer Wirkungen die stetigen Variablen nur auf 2 Stufen variieren → rein faktoriellen Plan verwenden
  - Abhilfe 2: wenn möglich aus den kategoriellen Variablen stetige machen (siehe oben) → zentral zusammengesetzten Plan verwenden
  - Abhilfe 3: vom Grunde her kategorielle Variable wie z.B. Stückzahlen, welche aber auf ein sinnvolles 0-Niveau eingestellt werden können, als stetige Variable interpretieren → zentral zusammengesetzten Plan mit $\alpha = 1$ für alle Einflussfaktoren verwenden oder in einem orthogonalen bzw. drehbaren zentral zusammengesetzten Plan nur für die kategorielle(n) Variable(n) den α-Wert manuell auf 1 setzen (jeweils Korrelationsmatrix prüfen)
  - Abhilfe 4: auf den Plus- und Minus-Stufen der kategoriellen Variablen jeweils einen zentral zusammengesetzten Plan mit den stetigen Einflussgrößen ausführen

    Beispiele für 1 kategorielle Variable:

Anzahl Einflussgrößen		Anzahl Versuchspunkte	
2-stufig	3-stufig	Gemischter Standardplan	zentral zusammengesetzte Pläne auf Plus- und Minus-Niveau der kategoriellen Variablen
1	2	$2^1 \cdot 3^2 = 2 \cdot 9 = 18$	$2 \cdot (2^2 + 4 + 1) = 18$
1	3	$2^1 \cdot 3^3 = 2 \cdot 27 = 54$	$2 \cdot (2^3 + 6 + 1) = 30$
1	4	$2^1 \cdot 3^4 = 2 \cdot 81 = 162$ (81 bei reduziertem Plan)	$2 \cdot (2^4 + 8 + 1) = 50$

4.7 D-optimierte Versuchspläne

D-Optimierung

- Reduzierung der Versuchspunktzahl noch unter die der teilfaktoriellen Pläne
- feste Vorgabe der Anzahl an Versuchspunkten VP mit
  Mindestanzahl VP ≤ Anzahl VP im D-optimierten Plan < Anzahl VP im teilfaktoriellen Plan

  mit: Mindestanzahl VP
  = Anzahl gesuchter Koeffizienten
  = k (linear) + k (quadratisch) + k·(k-1)/2 (2fach-WW) + 1 (Total)
- bei der D-Optimierung werden aus dem vollfaktoriellen Plan die Versuchspunkte ausgewählt, die die noch bestmöglichen statistischen Eigenschaften liefern
- die Verringerung der Versuchspunktzahl gegenüber den teilfaktoriellen Plänen führt meistens, aber nicht immer, zu einer Verschlechterung der statistischen Eigenschaften wie der Größe der vorhandenen Vermengungen
- Vorgehen:
  - D-Optimierung für verschiedene Anzahl an Versuchspunkten durchführen lassen
  - statistische Eigenschaften der Pläne überprüfen
  - geeigneten Plan auswählen
- besonders effizient bei einer großen Anzahl an Versuchspunkten im vollfaktoriellen Plan

Beispiel für 5 Einflussgrößen

- Möglichkeit 1: zentral zusammengesetzter Plan mit vollfaktoriellem Kern

  2^5 (Kern) + 2·5 (Sternpunkte) + 1 (Zentralpunkt) = 43 Versuchspunkte
- Möglichkeit 2: zentral zusammengesetzter Plan mit teilfaktoriellem Kern

  2^{5-1} (Kern) + 2·5 (Sternpunkte) + 1 (Zentralpunkt) = 27 Versuchspunkte
- Möglichkeit 3: D-optimierter Plan mit einer selbst vorgegebenen Anzahl an Versuchspunkten zwischen 21 und 27

  mit

  Mindestanzahl VP = 5 (L) + 5 (Q) + 5·4/2 (2fach-WW) + 1 (T) = 21

4.8 Latin Hypercube Designs

4.9 Übungsaufgaben

(1) Thema vollfaktorieller Versuch mit 3 Einflussgrößen

Gegeben:

- Zielgröße: Adhäsionskraft einer Verklebung [kN]
- Einflussgrößen: Beschichtungsdicke A: 30 g/m² bis 40 g/m²

  Anpressdruck B: 10 N/cm² bis 20 N/cm²

  Anpressdauer C: 1 h bis 24 h
- Vertrauensbereich der Effekte = 2,7 kN
- Die Versuchsergebnisse (= Messwerte bei den Versuchen) werden nach Lösung der Teilaufgaben a) und b) mitgeteilt.

Gesucht:

a) Versuchsplan in Standardschreibweise

b) Grafische Darstellung des normierten Versuchsraumes

c) allgemeine Form der Regressionsfunktion

d) die Größe aller Regressionskoeffizienten

e) Regressionsfunktion mit signifikanten Termen

Lösungen für alle Regressionskoeffizienten: T=34,875 kN; A:3,625 kN; B:0,876 kN; C:4,125 kN; AB:-0,38 kN; AC:0,38 kN; BC:2,625; ABC:-1,125 kN; signifikant sind T, A, C, BC

(2) Thema Blockbildung

Welche Regressionskoeffizienten bzw. Wirkungen ändern sich aufgrund der Chargenänderung im „Positivbeispiel“ im Kapitel „Blockbildung“? Berechnen Sie die Wirkungen und vergleichen Sie diese mit den Ergebnissen aus dem Beispiel ohne Chargenänderung (siehe Übungsaufgabe 1).

Lösung: T = 35,375 kN (vorher 34,875 kN); ABC = -1,25 kN (vorher: -2,25 kN)

(3) Thema Generierung teilfaktorieller Versuchspläne

Generieren Sie aus dem folgenden 2^3-Versuch einen 2^{4-1}-Versuch, in dem Sie eine 100%ige Vermengung von D mit ABC vornehmen. Prüfen Sie, welche weiteren Vermengungen daraus resultieren und ob diese Vermengungen kritisch sind.

Einflussfaktoren	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	T								
1	-	-	-	+	+	+	-	+								
2	+	-	-	-	-	+	+	+								
3	-	+	-	-	+	-	+	+								
4	+	+	-	+	-	-	-	+								
5	-	-	+	+	-	-	+	+								
6	+	-	+	-	+	-	-	+								
7	-	+	+	-	-	+	-	+								
8	+	+	+	+	+	+	+	+								
100%ige Vermengung mit																
kritisch ?																

Wieso gibt es keinen 2^{4-2}-Versuch?

(4) Thema faktorielle Versuchspläne allgemein

Erstellen Sie eine Übersicht über faktorielle und teilfaktorielle Versuchspläne.

Anzahl Einfluss-größen	Anzahl interessierender Regressions-koeffizienten	mögliche (teil)faktorielle Versuchspläne	Anzahl Versuchs-punkte	Lösungstyp
2				

(5) Thema Zentral zusammengesetzte Versuche

a) Notieren Sie für einen zentral zusammengesetzten Versuch mit 3 Einflussfaktoren den Versuchsplan in Standardschreibweise und stellen Sie den Versuchsraum grafisch dar!

b) Füllen Sie folgende Tabelle aus:

Anzahl Einfluss-faktoren	Anzahl interessierender Regressions-koeffizienten	Anzahl Versuchspunkte bei zentral zusammen-gesetztem Versuchsplan mit **vollfaktoriellem** Kern	Anzahl Versuchspunkte bei zentral zusammen-gesetztem Versuchsplan mit **teilfaktoriellem** Kern vom Lösungstyp I
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			

5. Spezielle Aspekte bei DoE

5.1 Mindestanzahl an Versuchspunkten in Abhängigkeit von der Modellbildung

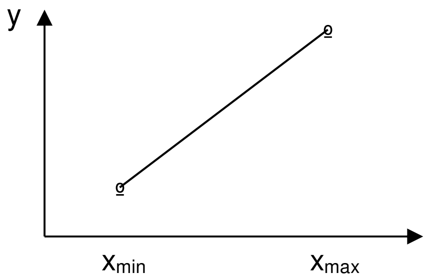
- $y = f(x)$

<u>linearer Zusammenhang</u>

$y = a_0 + a_1 x$

2 Versuchspunkte zur Bestimmung der 2 unbekannten Koeffizienten

→ Variable x auf 2 Stufen

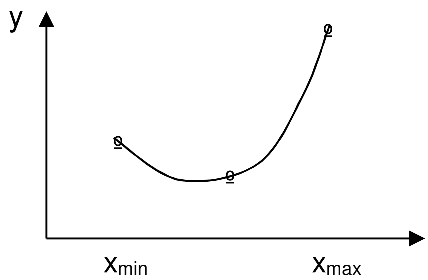


<u>quadratischer Zusammenhang</u>

$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

3 Versuchspunkte zur Bestimmung der 3 unbekannten Koeffizienten

→ Variable x auf 3 Stufen



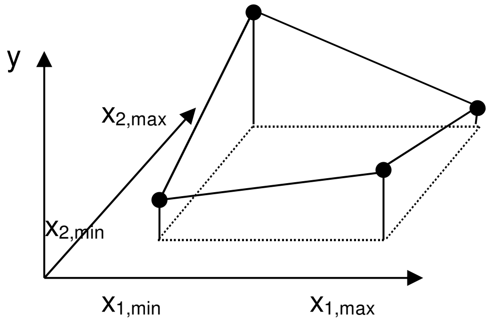
- $y = f(x_1, x_2)$

<u>linearer Zusammenhang</u>

$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_1 x_2$

4 Versuchspunkte zur Bestimmung der 4 unbekannten Koeffizienten

→ jede Variable auf 2 Stufen

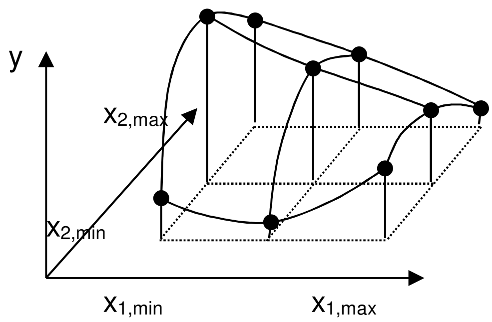


<u>quadratischer Zusammenhang</u>

$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_1^2 + a_4 x_2^2 + a_5 x_1 x_2$
$(+ a_6 x_1^2 x_2 + a_7 x_1 x_2^2 + a_8 x_1^2 x_2^2)$

6 (9) Versuchspunkte zur Bestimmung der 6 (9) unbekannten Koeffizienten

→ jede Variable auf 3 Stufen

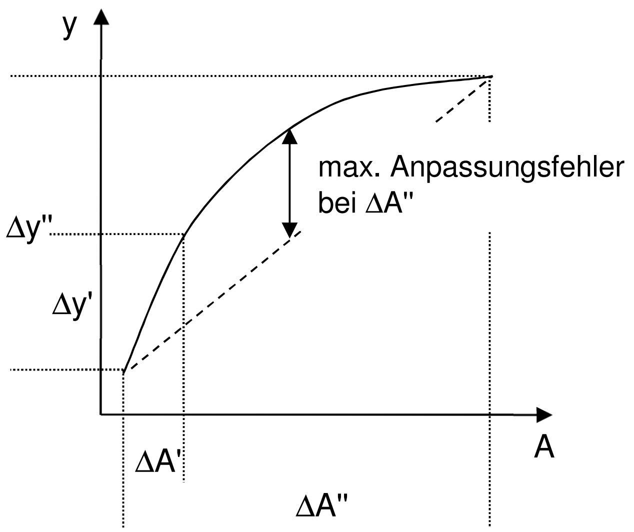


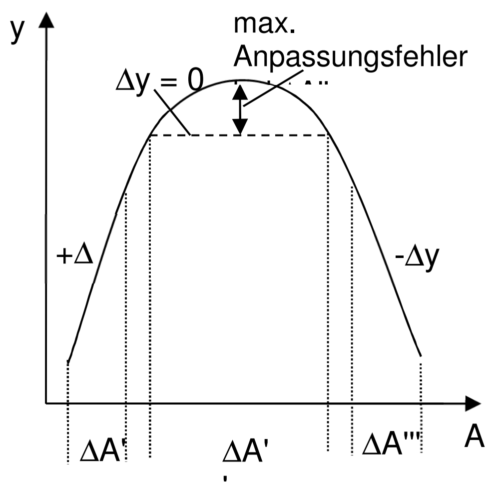
- $y = f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$
  - linearer Zusammenhang: 16 Polynomkoeffizienten
    $a_0 + 5 \cdot a_{linear} \cdot x_{linear} + 5 \cdot (5-1)/2 \cdot a_{gemischt} \cdot x_{linear,gemischt}$
  - quadratischer Zusammenhang: 21 Polynomkoeffizienten
    $a_0 + 5 \cdot a_{linear} \cdot x_{linear} + 5 \cdot (5-1)/2 \cdot a_{gemischt} \cdot x_{linear,gemischt} + 5 \cdot a_{quadratisch} \cdot x_{quadratisch}$

5.2 Festlegung des Versuchsraumes

Abstand und Lage der Stufen beeinflussen …

- die Größe der Effekte (Δy): großer Stufenabstand → tendenziell große Effekte → Signifikanz von Einflüssen ist leichter nachzuweisen
- die Richtung der Effekte ($\pm \Delta y$)
- den Anpassungsfehler des Modells (Lack of Fit): großer Stufenabstand → tendenziell größerer Mangel an Anpassung
- Beispiele bei linearer Modellbildung
  - Bild links: kleiner (großer) Effekt $\Delta y'$ ($\Delta y''$) und kleiner (großer) Anpassungsfehler bei $\Delta A'$ ($\Delta A''$)
  - Bild rechts: positiver (negativer) Effekt $+\Delta y$ ($-\Delta y$) bei $\Delta A'$ ($\Delta A'''$); kein Effekt und großer Anpassungsfehler bei $\Delta A''$





tendenziell gilt:

- gute Vorkenntnisse → kleiner Stufenabstand (kleinster Stufenabstand = 6 σ der Einstellstreuung der Einflussgröße)
- wenig Vorkenntnisse → großer Stufenabstand

einschränkende Aspekte bzgl. großer Versuchsräume:

- physikalische Realisierbarkeit der einzustellenden Stufenwerte und sinnvolle Ergebnisse an allen Versuchspunkten
- an Rändern des Versuchsraumes sollten keine neuen physikalischen Phänomene die Messergebnisse zusätzlich beeinflussen
- bei zentral zusammengesetzten Plänen: bei wichtigen physikalischen Werten möglichst viele Versuche durchführen, d.h. dort den faktoriellen Kern platzieren oder $\alpha = 1$ setzen
- nachfolgende quadratische Ergänzung eines faktoriellen Planes zu einem zentral zusammengesetzten Plan mit Sternpunkten und $\alpha > 1$
- Grenzen des quadratischen Modells (siehe auch separates Kapitel dazu)

5.3 Künstliche Neuronale Netze zur Beschreibung der Wirkzusammenhänge

als Alternative zu Regressionsfunktionen

5.4 Prüfung auf Anpassung: Lack of Fit und Prognose/Beobachtungs-Grafik

Anpassungsqualität

- zwischen der Regressionsfunktion (= Modell, Prognose) und den Messwerten (= Realität, Beobachtung)
- indem die Differenzen zwischen Funktions- und Messwerten quantitativ (→ Lack of Fit) oder qualitativ (→Prognose/Beobachtungs-Grafik) bewertet werden

Prüfung

- quantitative Bewertung: Berechnung der statistischen Kenngröße „Lack of Fit“ (= Mangel an Anpassung) durch einen Vergleich der Differenzen zwischen den Funktions- und Messwerten an den Versuchspunkten mit der Versuchsstreuung

  der “Lack of Fit” ist signifikant, wenn (siehe Anova-Tabelle in Statistica)
  - die Messwerte außerhalb der Konfidenzintervalle der Regressionsfunktionswerte liegen
  - dies kann sowohl aus einer vergleichsweise kleinen gemessenen Versuchsstreuung oder aus vergleichsweise großen Differenzen zwischen Funktions- und Messwerten resultieren
- qualitative Bewertung: mit Hilfe der Prognose/Beobachtungs-Grafik
  - es werden nur die Differenzen zwischen den Funktions- und Messwerten an den Versuchspunkten visuell bewertet (ohne Berücksichtigung der Versuchsstreuung)
  - Anmerkung: Die Gerade im Diagramm stellt nicht die Regressionsfunktion dar, sondern die Diagramm-Diagonale, auf der Prognose- und Beobachtungswerte gleich sind.
  - Bei zwei Messwerten pro Versuchspunkt existiert in der Regel kein Mangel an Anpassung, wenn der rechnerische Prognosewert zwischen den beiden Messwerten liegt, d.h. die Messwertepaare rechts und links der Diagonalen liegen

Anmerkungen

- auch bei rechnerisch signifikantem Lack of Fit kann die gefundene Regressionsfunktion ausgewertet werden!!
  - insbesondere, wenn die Prognose/Beobachtungs-Grafik im interessierenden Wertebereich brauchbare Übereinstimmung zeigt

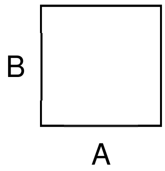
    Häufiges Beispiel: Maximum gesucht, guter Fit bei großen y-Werten, schlechter Fit bei kleinen y-Werten → Lack of Fit ist signifikant, Regressionsfunktion ist dennoch für Maximumsuche gut geeignet
  - insbesondere, wenn der signifikante Lack of Fit aus einer vergleichsweise kleinen Versuchsstreuung resultiert
- die Kenngröße Lack of Fit kann nur berechnet werden, wenn gilt:
  Anzahl Versuchspunkte > Anzahl zu bestimmender Regressionskoeffizienten
  (nach der Eliminierung nicht signifikanter Terme)

  gleiche Anzahl → Regressionsfunktion verläuft exakt durch die mittleren Messergebnisse an den Versuchspunkten → keine Berechnung des Lack of Fit möglich

5.5 Mehrdimensionale grafische Ergebnisdarstellung in Konturplots

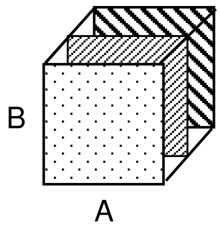
2 Faktoren

→ 1 Konturplot:



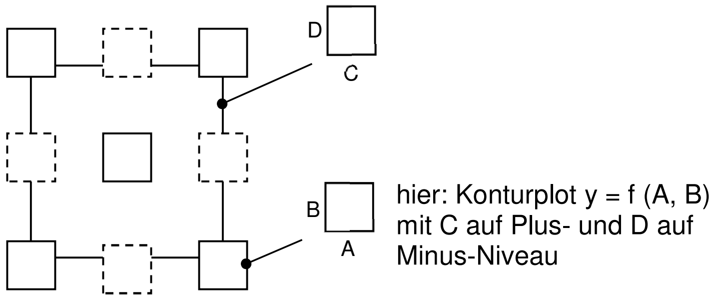
3 Faktoren

→ ≥ 3 Konturplots:



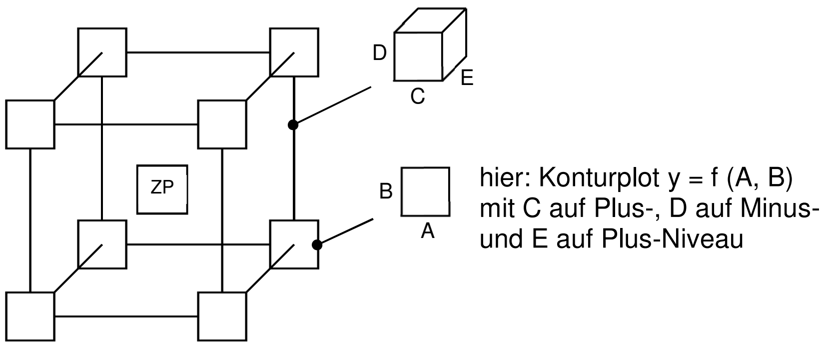
4 Faktoren

→ ≥ 5 Konturplots:



5 Faktoren:

→ ≥ 9 Konturplots



Empfehlung: gleiche Skalierung (d.h. Farbabstufungen) in allen Bildern

Mögliche Kriterien zur Wahl der Einflussgrößen für die Plots selbst, hier A und B genannt:

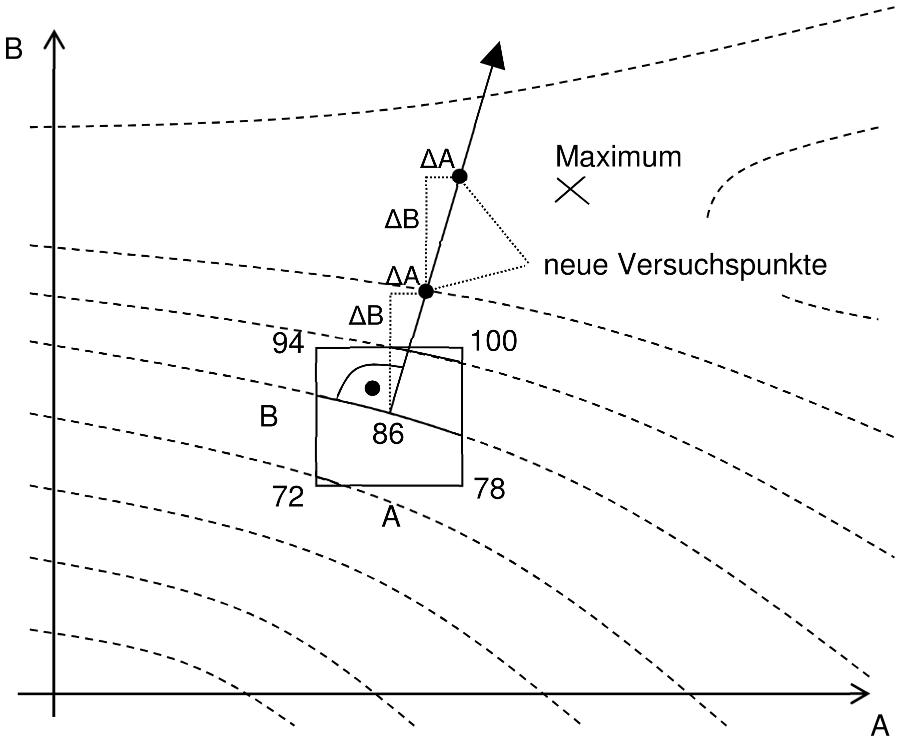
- A, B = Einflussgrößen mit den größten Wechselwirkungen und/oder quadratischen Wirkungen, da diese schwerer „im Kopf" zu interpolieren sind als lineare Wirkungen
- A, B = fachlich wichtigste Einflussgrößen
- A, B = Einflussgrößen mit kleinen Wirkungen, um Feinheiten besser auflösen zu können
- etc.

5.6 Extrapolierende Optimierungsmethode des steilsten Anstieges

Anwendung, wenn das gesuchte Optimum außerhalb des Versuchsraumes liegt und durch weitere Versuche außerhalb des zunächst gewählten Versuchsraumes gefunden werden soll

Beispiel: $y = 86 + 3 \cdot A + 11 \cdot B$

Grafische Vorgehensweise



Rechnerische Vorgehensweise

- neuen Versuchspunkt ermitteln mit $\Delta A = \frac{b_1}{b_2} \cdot \Delta B = \frac{3}{11} \cdot \Delta B$
- ΔB wählen, z.B. +2 $\rightarrow$ $\Delta A = \frac{3}{11} \cdot 2 = \frac{6}{11}$
- rechnerische Vorgehensweise problematisch bei starken Wechselwirkungen

5.7 Polyoptimierung bei mehreren Zielgrößen

Hintergrund:

- Es gibt mehrere Zielgrößen, die alle optimale Werte annehmen sollen.
- Aber: Die Optima der Zielgrößen liegen häufig an unterschiedlichen Stellen im Versuchsraum, das heißt bei unterschiedlichen Einstellungen der Einflussgrößen
  → Kompromiss im Sinne eines Polyoptimums ist notwendig

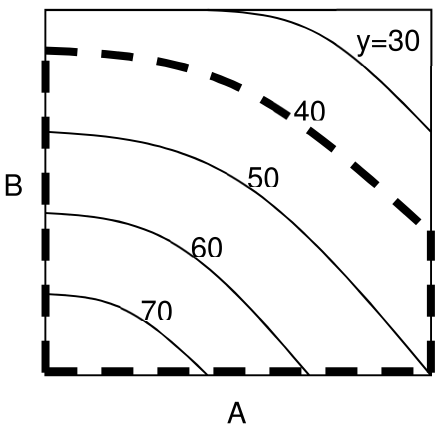
1. Möglichkeit: grafisch mittels Konturplots:

- Konturplots für jede Zielgröße einzeln erstellen, übereinander legen, gemeinsames Optimum ermitteln (siehe unten)
- Nachteil: schwierig bei zunehmender Anzahl an Ziel- und Einflussgrößen

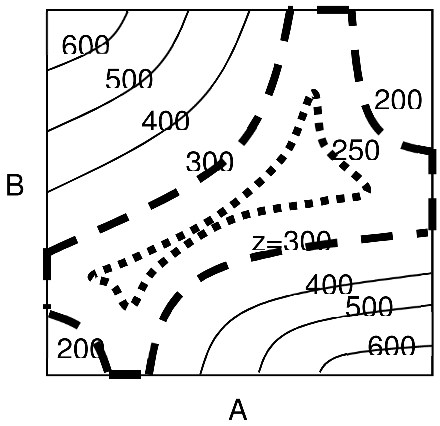
Beispiel:

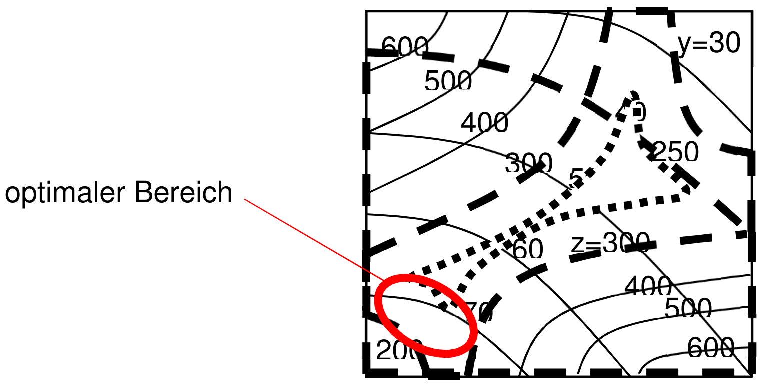
- für 2 Zielgrößen (y, z) und 2 Einflussgrößen (A, B)
- Zielbereiche für die Zielgrößen:
    - y: mindestens über 40 Einheiten, ab 100 Einheiten ist optimal
    - z: zwischen 200…300 Einheiten, 250 Einheiten sind optimal

y = f (A,B)



z = f (A,B)



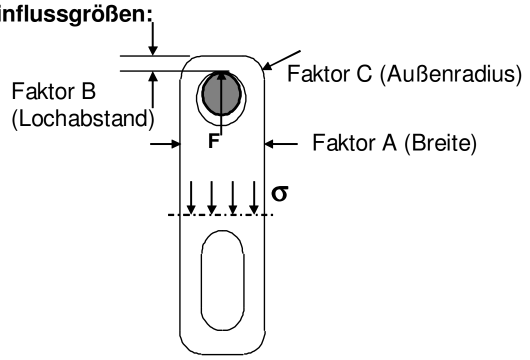


Beispiel: Festigkeit einer Tragelasche für einen Kessel

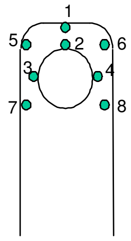
Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels
- Systemanalyse -

- **Objekt der Optimierung:** Tragelasche = Tragehilfe für einen Gaskessel
- **Ziel des Versuchs:** Absicherung der Tragelasche gegenüber **Zugspannungen** bei einer vorgegebenen Belastung mit dem Ziel: **σ = 270 N/mm²**
- **Vorgehensweise:** Optimierung der Spannungssituation im Rahmen eines Simulationsexperiments mit MECHANICA

Einflussgrößen:



Zielgrößen: Zug/Druckspannungen an kritischen Punkten



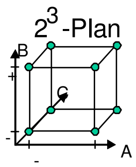
Zugspannungen an unterschiedlichen Punkten werden als einzelne Zielgrößen interpretiert!

(Punkt 2: Druck-spannung!)

adam

Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels
- Versuchsplan, Simulationsergebnisse -

- **Einfluss-/Zielgrößen:** 3 Einflussgrößen (Breite, Lochabstand, Radius)
  7 Zielgrößen (Zugspannungen an verschiedenen Punkten)
- **Gewählter Versuchsplan:** **vollfaktorieller 2^3 - Plan**



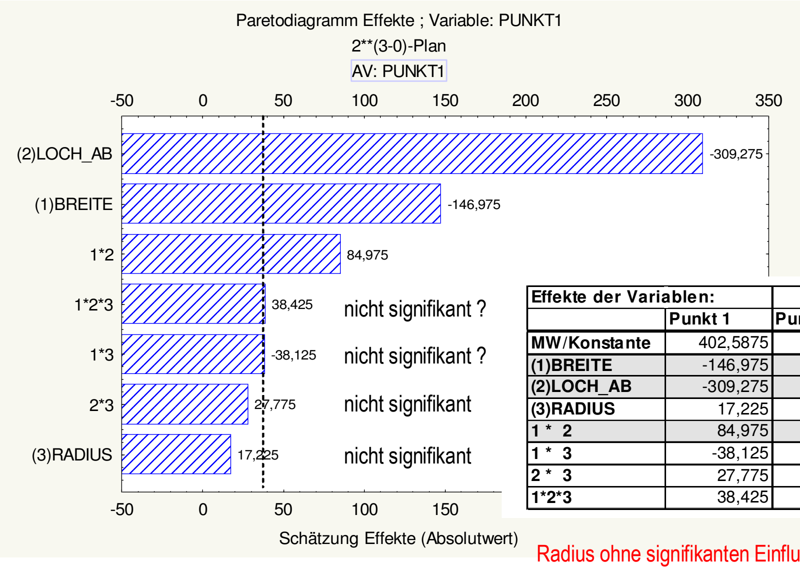
krit. Positionen!

	Faktoren					**Ergebnisse**				
A) BREITE	B) LO_AB	C) RADIUS	PUNKT1	(PUNKT2)	PUNKT3	PUNKT4	PUNKT5	PUNKT6	PUNKT7	PUNKT8
-1	-1	-1	640,2	625,6	473,6	385,3	253,6	208,9	214,7	161,3
-1	-1	1	706,2	686,1	441,8	374,7	211,8	207,5	238,2	149,6
-1	1	-1	256,6	485,7	293,9	217,4	119,2	64,5	172,3	87,4
-1	1	1	301,3	554	293,7	223,2	88,6	60	166,3	85,5
1	-1	-1	484,8	541,5	249,3	221,9	112	108	81,7	54,1
1	-1	1	397,7	569,7	270,5	232,4	97,8	69,6	81,5	63,6
1	1	-1	194,3	524,7	187,7	159	63,6	59,7	78,4	40,4
1	1	1	239,6	524,5	185,7	155,3	68,4	53,3	71,4	46,5
-1=40 mm	-1=20 mm	-1=5 mm				Angaben in N/mm²				
1=50 mm	1=25 mm	1=15 mm								

adam

Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels

- Größe und Signifikanz der Effekte -



Effekte der Variablen:	Punkt 1	Punkt 3	Punkt 4
MW/Konstante	402,5875	299,525	246,15
(1)BREITE	-146,975	-152,45	-108
(2)LOCH_AB	-309,275	-118,55	-114,85
(3)RADIUS	17,225	-3,2	0,5
1 * 2	84,975	45,35	44,85
1 * 3	-38,125	12,8	2,9
2 * 3	27,775	2,1	0,55
1*2*3	38,425	-13,7	-7,65

Radius ohne signifikanten Einfluss → konstant setzen

adam

Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels

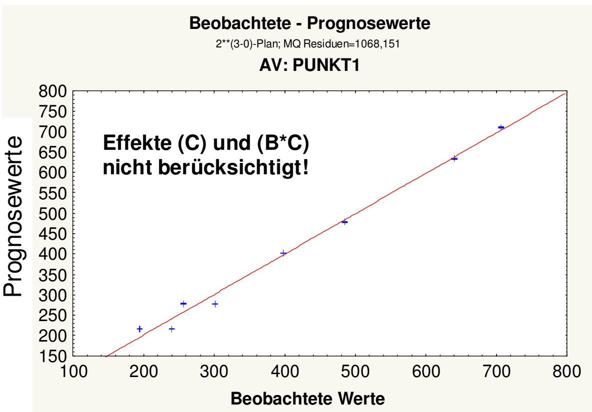
- Regressionsanalyse -

Regressionsgleichung: Y1 = 402,588 - 73,488*(A) - 154,638*(B) + 42,488*(A)*(B)

- 19,063*(A)*(C) + 19,213*(A)*(B)*(C) – könnten auch noch eliminiert werden

Visuelle Prüfung der Anpassung des Modells an die Messwerte in der Prognose/Beobachtungs-Grafik

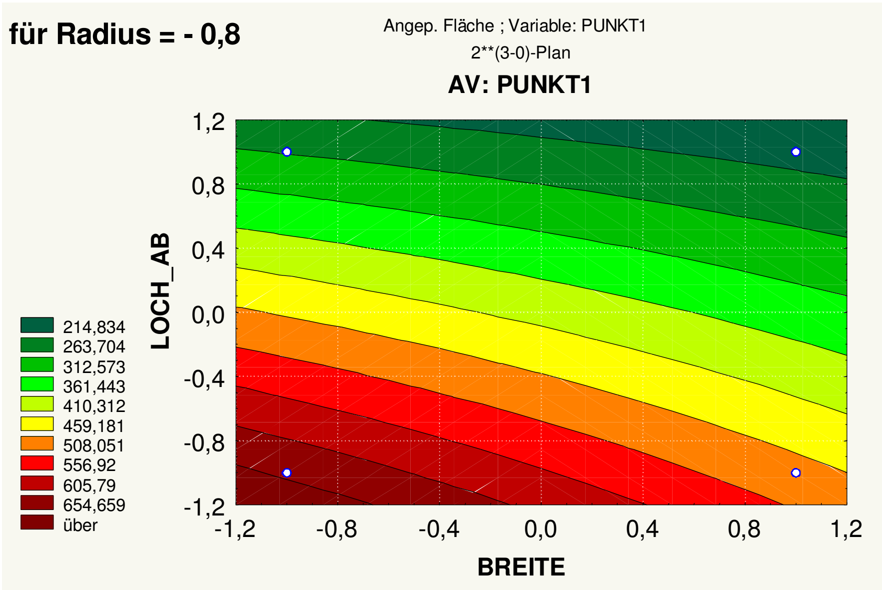
Vergleich Rechnung (= Prognose) ↔ Messung (= Beobachtung)



adam

Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels

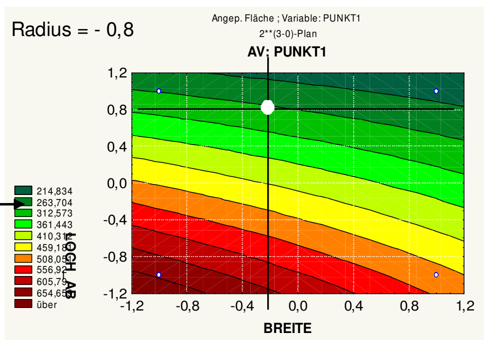
- Konturplots -

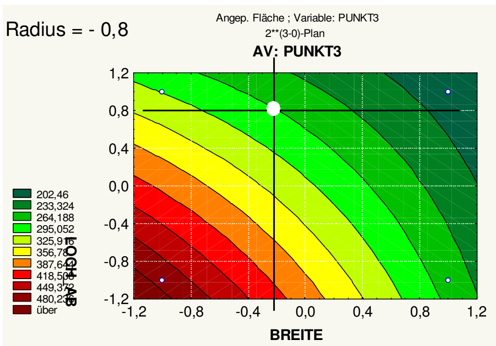


a d a m

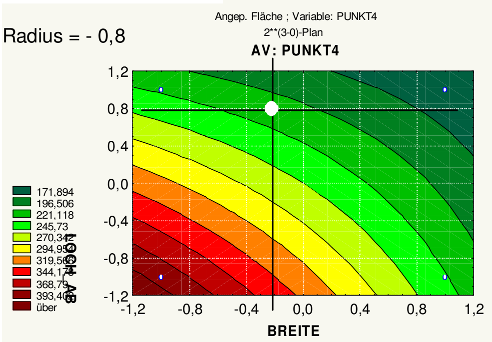
Beispiel: Simulation Tragelasche eines Kessels

- Ergebnis der Polyoptimierung -





Zielwert: 270 N/mm²



Poly-Optimum:

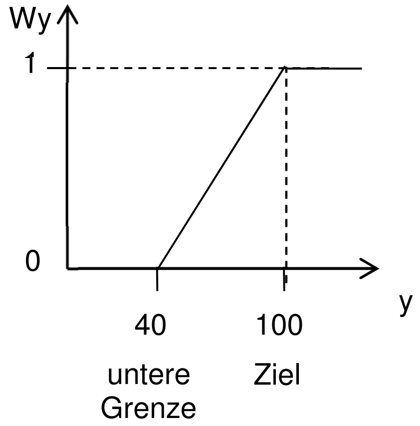
(1) Breite = - 0,2
(2) Loch_Ab = +0,8
(3) Radius = - 0,8

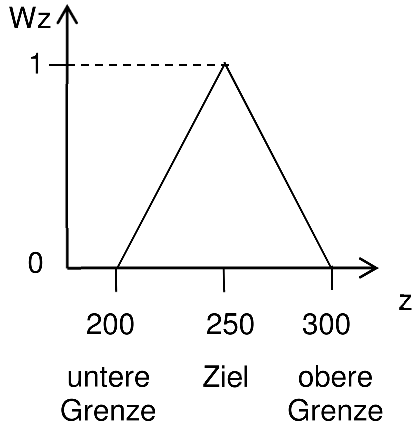
a d a m

2. Möglichkeit: rechnerisch mittels Wunschfunktion W (gewichtet)

- Teil-Wunschfunktionen W_i für jede Zielgröße einzeln definieren = Wertebereiche jeder Zielgröße mit 0 bis 100 % Erwünschtheit

  Beispiel für 2 Zielgrößen y, z:
  - y: mindestens über 40 Einheiten, ab 100 Einheiten ist optimal
  - z: zwischen 200…300 Einheiten, 250 Einheiten sind optimal





- Maximum für die Gesamt-Wunschfunktion $W_{ges} = \sqrt[k]{\prod_{i=1}^{k} W_i}$ suchen
  - $W_{ges} = 1$, wenn <u>alle</u> $W_i = 1$
  - $W_{ges} = 0$, wenn <u>ein</u> $W_i = 0$

- Umsetzung in STATISTICA: im Menü Wirk/Wunschprofile, Definition der Teil-Wunschfunktionen, Berechnung der Gesamt-Wunschfunktion in einem Gitternetzraster im gesamten Versuchsraum unter Vorgabe der Anzahl an Schritten zwischen einer wählbaren kleinsten und größten Stufe jeder Einflussgröße (→ Berechnung der Werte der Zielgrößen, der Teil-Wunschfunktionen und der Gesamt-Wunschfunktion an jedem Punkt des Gitternetzrasters)

- Anmerkung: Je steiler der Gradient einer Teil-Wunschfunktion ist, desto stärker beeinflusst die jeweilige Zielgröße das Ergebnis der Polyoptimierung. Am Besten verschiedene Einstellungen ausprobieren und die Ergebnisse vergleichen.

Beispiel: Windkraftanlage (Demo mit STATISTICA)

- Zielgrößen:
  - Leistung: möglichst groß
  - Drehzahl: möglichst klein
- Einflussgrößen: Windgeschwindigkeit, Widerstand im Stromkreis
- Auswertung
  - Konturplots: zur Orientierung und grafischen Polyoptimierung
  - Wunschfunktionen: zur rechnerischen Polyoptimierung

3. Möglichkeit: ungewichtet mittels Genetischen Algorithmen

Anhang: Handhabung von STATISTICA

- Programmaufruf
- Versuchsplanung
- z.B. für einen 2^k-Faktoren Plan: 2(k-p)–Pläne (faktorielle Zweistufenpläne)

Versuchsplan aufstellen

- Anzahl Faktoren
- zum Beispiel einen 2 / 1 / 4 – Plan:
  2 Faktoren, 1 Block, 4 Versuchspunkte bzw. Runs
- Plan anzeigen, etc.
- Faktornamen: ggf. Eintragen von Klartexten, Namen, etc.
  oder Doppelklick auf entsprechendes Feld im Plan
- Faktoren, Runs, Anzeige: nur Auswirkung auf das Layout (nicht den Inhalt) des Plans
    - ausprobieren, jeweils Plan anzeigen lassen
    - Zufallsreihenfolge, für die Durchführung wichtig, ansonsten aber unübersichtlich
- Hinzufügen:
    - Identische Kopien, Nullpunkte: sofern kompletter Plan und/oder Zentralpunkt wiederholt werden sollen
    - Leerspalte: zum Beispiel 1 Leerspalte, um später die Versuchsergebnisse hier eintragen zu können
- als Daten speichern
- alle Fenster schließen

Eintragen der Versuchsergebnisse

- Daten öffnen, Werte eintragen, speichern

Auswertung eines Versuchsplanes

- alles schließen, auszuwertende Daten öffnen
- Analyse, Weiter mit Analyse
- Auswertung, Variablen:
    - abhängige = Zielgrößen
    - unabhängige = Einflussgrößen
- Wichtige Vorgaben setzen
    - ANOVA-Fehlerterm: auf ″Reiner Fehler ″ setzen
    - Im Modell: auf ″2fach Interaktionen ″ setzen
    - Konfidenzintervall: 95 %; alpha: 0,05 (ist vorbesetzt)

- zahlreiche Anzeigemöglichkeiten, zum Beispiel
    - Anzeige des Versuchsplanes: Messwerte bzw. Mittelwerte, Standardabweichungen, Konfidenzintervalle an den Versuchspunkten
    - Haupteffekte & Interaktionen bzw. Regressionskoeffizienten: Wirkungen bzw. Regressionskoeffizienten, Prüfgrößen der Signifikanzprüfung wie p-Value, Konfidenzintervalle für die berechneten Wirkungen bzw. Koeffizienten
    - Paretodiagramm Effekte (mit ″Plot standard. Effekte″-Ein): Effekte nach Größe sortiert und Anzeige der Signifkanzgrenze
    - weiterhin: Aliasse (= 100%ige Vermengungen), Generatoren für teilfaktorielle Pläne bzw. Blöcke (= absichtliche 100%ige Vermengung), Korrelationsmatrix (auch Teilvermengungen)
- in der Effekte- bzw. Koeffiziententabelle sind signifikante Einflussgrößen und Wirkungen
    - rot unterlegt
    - $|$ Wirkung $| \geq VB_E$ Vertrauensbereich der Effekte
      mit VB_E = Konfidenzintervall des Total
    - Vorzeichen des Effektes eindeutig positiv oder negativ (Konfidenzintervall reicht nicht über 0)
    - ″p-Value″ $\leq \alpha = 0{,}05$
- Nicht signifikante Einflussgrößen mit „Ignorieren bestimmter Effekte“ eliminieren
    - Orthogonale Pläne → keine Vermengungen → Elimination aller nicht signifikanten Wirkungen auf einen Schlag möglich
    - Pläne mit prozentualen Vermengungen: schrittweises eliminieren; mit der kleinsten Wirkung beginnen, dann die zweitkleinste, etc; Auswahl z.B. mit "Paretodiagramm Effekte"
- Prognose/Beobachtungs-Grafik: visueller Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Werten an den Versuchspunkten
- ANOVA-Tabelle: Lack of Fit
  signifikanter Lack of Fit ist rot hinterlegt, p-Value < 0,05
- Normalverteilungs-Plot (probability-plot) der Residuen: Residuen im Wahrscheinlichkeitsnetz
- Fläche oder Kontur (ggf. mit „angepasste Funktion“)
    - Grafische Darstellung der mit der Regressionsfunktion berechneten Werte in Abhängigkeit zweier Einflussfaktoren (andere auf konstante Werte setzen)
    - Doppelklick auf Fläche oder Kontur → Flächen-/Konturen-Stufen definieren, Konturen definieren, Intervallstufen und Schrittweite eingeben
- Werte Prognostizieren: Berechnung des Funktionswertes an einem Punkt im Versuchsraum, des Konfidenzintervalls für den Mittelwert und des Prognoseintervalls für Einzelwerte an diesem Punkt
- Quadr. Plot, Würfelplot: Funktionswerte auf Ecken des Versuchsraumes
- Wirkungsdiagramme (im Menü Wirkungsprofile/Wunschprofile), z.B. mit „Setze Faktoren auf Mittelwert“ (→ alle anderen Faktoren auf 0-Niveau) oder

einzelne Faktoren „… benutzerdefiniert“ vorgeben (Anzeige der Wunschfunktion für Wirkungsdiagramme nicht notwendig, siehe hierzu Polyoptimierung)

Polyoptimierung

- Menü Wirk-/Wunschprofile
- abhängige Variablen (=Zielgrößen) wählen, die in die Polyoptimierung mit einbezogen werden sollen
- „Setze Faktoren auf: Optimum“ anklicken
- Gitter: Anzahl Schritte zwischen Minimum und Maximum für jeden Faktor einzeln wählen, in der Regel 20 – 40 Stück
- Wunschfunktionen für jede Zielgröße spezifizieren
- Optionen (sind in der Regel richtig vorbesetzt bzw. uninteressant)
    - Such-Optionen: auf "Optimale Erwünschtheit auf exakten Gitterpunkten" setzen
(„Allg. Optimierung“ → Rechenzeit unabhängig von Gitter, auch Zwischenwerte auffindbar)
    - (Intervalle: Anzeige von Konfidenzintervallen für Prognosewerte)
    - (Optionen für Profilplots: Textwerte für Faktorstufen)
    - (Optionen zur Anpassung: Spline, nur bei Flächen/Konturen-Anzeige)
- "Anzeige" → Rechnung wird durchgeführt
- Anmerkungen:
    - sofern im Menü „Ignoriere bestimmte Effekte“ einzelne Terme angeklickt wurden, werden sie bei der Polyoptimierung in Statistica für alle Zielgrößen eliminiert
    - die „Polyoptimierung“ ist natürlich auch dazu geeignet, einzelne Zielgrößen auf Maxima bzw. Minima zu untersuchen
    - wenn man bei der Polyoptimierung eine Einflussgröße auf einen bestimmten Wert setzen möchte, kann man dies dadurch erreichen, dass man unter „Gitter“ den Min/Max-Abstand und die Anzahl Schritte sehr klein wählt