

Statistische Versuchsplanung

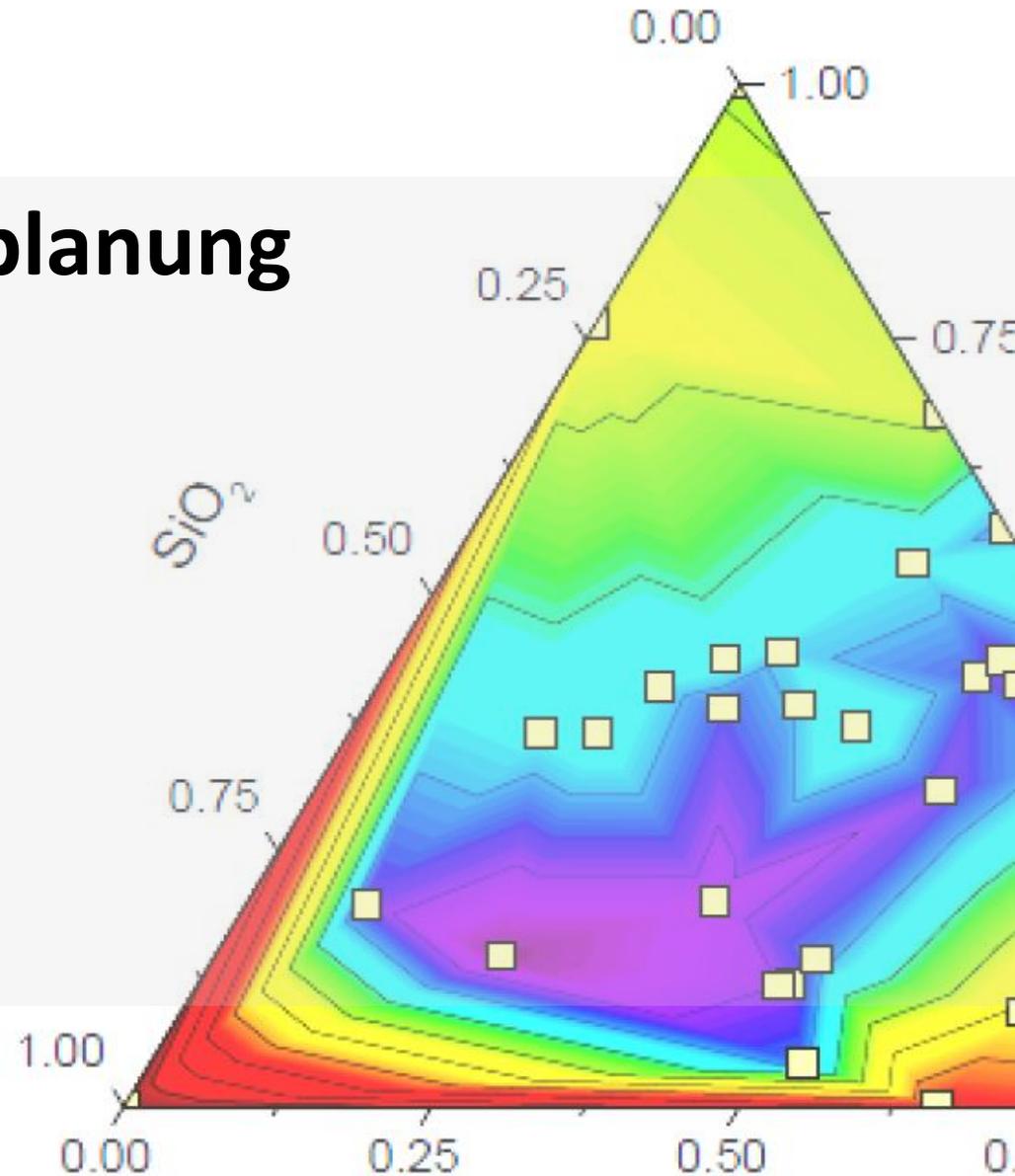
DoE (Design of Experiments)

Für Ingenieure und Techniker aus
Technik und Naturwissenschaft

PROZESSE NACHHALTIG VERBESSERN

QUALITÄT STEIGERN

PRODUKTE EFFIZIENT ENTWICKELN



Karl - Heinz Elsässer

Statistische Versuchsplanung
DoE (Design of Experiments)

Für Ingenieure und Techniker aus
Technik und Naturwissenschaft

Einleitung

All Ihre Produktions- und Fertigungsprozesse sind stabil, die Abläufe aufeinander abgestimmt und optimal. Die Qualität Ihrer Produkte ist konstant und jedes Teil verlässt den Prozess so wie spezifiziert und vom Kunden gewünscht.

Sie haben somit keine Verschwendung.

Ihre einzige Verschwendung besteht dann darin, dieses Buch gekauft zu haben

Was ist DoE ?

Experimente und Tests spielen heute in Technik, Produktentwicklung und Ökonomie eine bedeutende Rolle. Das Ziel ist die Optimierung der Prozesse oder Prozessabläufe und deren Stabilisierung.

Der klassische Approach ist dabei die sequenzielle Untersuchung der verschiedenen Einflussvariablen auf die zu optimierende (n) Zielgrösse(n).

Diese sogenannte one – variable - at – a – time hat gewaltige Nachteile und ist nicht selten ungeeignet. Prozesse haben in der Regel mehrere Einflussgrössen. Hier wird diese Methode zeitaufwändig. Bestehen zwischen den Einflussgrössen irgendwelche Wechselwirkungen, so ist die Methode gänzlich ungeeignet, sie führt zu falschen Erkenntnissen.

Hier setzt DoE ein. Mit DoE ist es möglich mehrere Einflussvariablen gleichzeitig zu analysieren und so mit wesentlich geringerem Zeit- und Ressourcenaufwand zu den gewünschten Resultaten zu gelangen.

Kaum eine andere Methode ist so universell in allen Ingenieur- Disziplinen einsetzbar wie DoE. Die Methode ist heute weit verbreitet und findet breit gefächerte Anwendung in sämtlichen Branchen.

Hier die Vorteile in Kürze:

Vorteile schnelle und effektive Anwendung zur Untersuchung von komplexen Systemen und Zusammenhängen
weltweit standardisierte Vorgehensweise, insbesondere in der Darstellung der Ergebnisse
Grundbegriffe wie Faktor, Effekt oder Wechselwirkung sind das Vokabular der DoE
Reduktion der Versuche zur Optimierung von Prozessen im Gegensatz zu herkömmlichen Vorgehensweisen
Erlaubt die gleichzeitige Änderung der Einflussgrößen

Zu diesem Buch

Keine Sorge, Sie halten kein Mathematik- oder Statistikbuch in Händen. Dennoch ist es unabdingbar einige Grundlagen der Statistik zu verstehen. So befassen sich die ersten beiden Kapitel mit diesen Grundlagen. Dabei beschränkt sich der Umfang auf die Statistik, welche für das Verständnis von DoE notwendig erscheint. Bei entsprechenden Vorkenntnissen ist es natürlich möglich diese Kapitel zu übergehen und mit Kapitel 3, der Statistischen Versuchsplanung zu beginnen.

Ergänzend zu diesem Buch ist eine Zusammenstellung von DoE - Beispielen aus den verschiedensten Branchen erhältlich. Darin werden die verschiedensten Problemstellungen abgehandelt, sowie deren Lösung mit Hilfe der Software Minitab® und Design Expert® aufgezeigt.

Inhalt

Einleitung

Was ist DoE

Zu diesem Buch

Zum entsprechenden Seminar

1. Beschreibende Statistik

1.1 Einführung

Phasen einer statistischen Analyse

1.2 Auswahl von Proben

1.2.1 Zufällige Auswahl von Einheiten

1.2.2 Bewusst bzw. geplante Auswahl
von Einheiten

1.2.3 Klumpenstichprobe

1.3 Messung von Median und Mittelwert

1.3.1 Der Mittelwert

1.3.2 Der Median

1.4 Messung der Varianz

1.4.1 Die Range

1.4.2 Die Standard Abweichung

1.4.3 Freiheitsgrade

1.4.4 Kalkulation der Standard Abweichung

1.5 Normal Verteilung

1.5.1 Prüfung auf Normal Verteilung

2. Beschreibende Statistik

2.1 Einführung

2.2 Die Verteilung des Mittelwertes der
Stichprobe

2.3 Statistische Hypothesen- und
Parametertests

2.3.1 Planung und Durchführung

2.3.2 Die Standardabweichung σ ist bekannt

2.3.3 Die Standardabweichung σ ist unbekannt

I

II

II

III

1

2

2

3

3

3

4

4

5

6

6

7

10

10

11

15

19

20

21

22

25

27

2.3.4

2.4

2.4.1

2.4.2

2.4.3

3. Konzeptionelles zu DoE

3.1 Definition, Scope und Motivation

3.2 Experiment – Definition

3.3 Identifizieren von Variablen und
Responses

3.4 Typen von Variablen

3.5 Typen von Responses

3.6 Wechselwirkungen

3.6.1 Interpretation von Wechselwirkungen

3.7 Typen von Experimenten (Versuchstypen)

3.8 Wahl der Faktorstufen

3.8.1 Qualitative Faktorstufen

3.8.2 Quantitative Faktorstufen

3.9 Blockbildung

3.10 Randomisierung

3.11 Stufen des Versuchsablaufes

3.11.1 Ursachen – Wirkung Diagramm

3.11.2 Dokumentation des Prozesses

3.11.3 Detaillierte Problembeschreibung

3.11.4 Festlegung des Versuchsplanes

3.11.5 Festlegung des Stichprobenumfangs,

der Blockbildung und der Randomisierung

29

30

30

31

32

37

37

37

39

40

41

41

42

42

45

45

45

46

46

47

48

48

49

50

51

3.11.6	Durchführung des Versuches	51	5.3.2	Daten durch reine Beobachtungen	94
3.11.7	Statistische Analyse der Messdaten aus dem Versuch	52	5.3.3	Daten über „designed experiment“	94
			5.4	Rolle von Computern	95
3.11.8	Interpretation der statistischen Analyse	52	5.5	Anwendung der Regression / Regressionsanalyse	96
3.11.9	Durchführung eines Testexperiments	53			
3.11.10	Dokumentieren des durchgeführten Versuches	53	5.6	Einfache Lineare Regression	96
3.12	Gründe warum Versuche in die „Hose“ gehen	54	5.6.1	Das Modell	96
			5.6.2	Die Least Squares Methode	97
4. Varianzanalyse (ANOVA)		56	5.6.3	Hypothesentest für die Parameter β_0 und β_1	101
4.1 Anwendung		56	5.7	Multiple Lineare Regression	106
4.2 Einführung		57	5.7.1	Einführung	106
4.3 Einfache Varianzanalyse		60	5.7.2	Schätzen der Modellparameter	109
4.3.1 Vorgehensweise		60	5.8	Beispiele zur Linearen Regression	115
4.3.2 Modell der einfachen Varianzanalyse		68	5.8.1	Beispiel	115
4.4 Zweifaktorielle Varianzanalyse		69	5.8.2	Beispiel	118
4.4.1 Vorgehensweise		69			
4.5 Weiteres zur Varianzanalyse		79	6. RSM (Response Surface Methode)		121
4.5.1 Multifaktorielle Varianzanalyse		79	6.1 Einführung		121
4.5.2 Mehrere Faktoren – ungleiche Anzahl Messungen		80	6.2 Methode des steilsten Anstiegs		124
			6.3 Analyse des Response Surface mit Modell zweiter Ordnung		125
4.6 Kovarianzanalyse		81	6.3.1	Lage des stationären Punktes	126
4.6.1 Einführung		81	6.3.2	Charakterisierung der Response- Oberfläche	127
4.6.2 Vorgehensweise		81	6.3.3	Untersuchung mehrerer Responses	128
4.7 Schlussbetrachtungen zur Varianzanalyse		87	6.4 Versuch – Designs		132
			6.4.1	Experimentelle Designs für Modelle erster Ordnung	133
5. Regression und Regressionsanalyse		89	6.4.2	Experimentelle Designs für Modelle zweiter Ordnung	134
5.1 Einführung		89			
5.2 Regression und Modellbildung		90	6.5 Beispiele zu RSM		135
5.3. Daten zusammentragen		93	6.5.1	Beispiele1	135
5.3.1 Zugreifen auf schon existente Daten (hystorische Daten)		93			

6.5.2	Beispiele 2	141	8. Robust Design	
6.6	Experimente mit Mischungen (Experiments with Mixtures)	144	(Taguchi / Shainin - Philosophie)	203
6.6.1	Einführung	144	8.1 Einführung	203
6.6.3	Mischungsmodelle mathematische Modelle – eine Zusammenfassung	147 152	8.2 Grundlegendes zu Quality – Engineering	204
6.6.2	Versuchspläne für Mischungen Standard Simplex Design Simplex - Centroid Design Axial Design Mischungspläne mit Begrenzung Einführung von Pseudokomponenten Simplex-Screening-Versuchspläne Kombinierte Versuchspläne Beispiel	154 154 156 157 157 159 164 165 167	8.2.1 Qualitätsverluste Ein Beispiel aus [B. Klein 2007, S.16] 8.2.2 Qualitätsfunktion 8.2.3 prozessbezogener Qualitätsverlust 8.3 Taguchi Versuchspläne Beispiel aus [W. Kleppmann 2013, S.171]	204 206 207 209
7. Faktorielle – Versuchspläne (Factorial Designs)		181	9. Optimal Designs	215
7.1 Einführung		181	9.1 Einführung	215
7.2 Vollfaktorielle Versuchspläne		182	9.2 D-optimale Versuchspläne	216
7.2.1 Interpretation von Interaktionen		183	2.2.1 Vor- und Nachteile	217
7.2.2 k Faktoren auf je zwei Level		184	9.3 Modell	219
7.3 Screening – Versuchspläne		188	9.3.1 Potential Terms	221
7.3.1 Fraktionelle faktorielle Versuchspläne		189	9.3.2 Versuchspunkte	222
7.3.2 Blockbildung des 2^{4-1} Versuchsplans		193	Einbeziehung von Versuchspunkten	223
7.3.3 Fraktionell faktorielle 2^{k-p} Versuchspläne		197	Einschränkung des Versuchsgebiets	224
7.3.4 Auflösung		198	Anzahl erforderlicher Versuche	227
7.4. Plackett – Burman Versuchspläne		200	9.4. Erstellung D-optimaler Pläne	228
7.4.1 Plackett – Burman Versuchspläne der Auflösung (III)		200	9.4.1 Suchalgorithmen	229
7.4.2 Konstruktion eines Plackett – Burman Versuchsplans		202	A1 Matrizenrechnung	230
			Literaturverzeichnis	241
			Sachverzeichnis	243

1

Beschreibende Statistik [18] [24] (Descriptive Statistics)

1.1 Einführung

Die Statistik lässt sich in zwei Gebiete, die beschreibende und die induktive Statistik gliedern. In der beschreibenden Statistik werden die für die jeweilige Problemstellung interessierenden bzw. notwendigen Daten in ihrer Gesamtheit gesammelt und aufgearbeitet. Die hierbei gesammelten Daten beziehen sich ausschliesslich auf die sogenannte Grundgesamtheit. Unterlaufen bei der Datenerhebung keine Rechenfehler, so ist das Ergebnis mit keinen Unsicherheiten belastet.

Hingegen baut die induktive Statistik auf der Wahrscheinlichkeitstheorie auf. Die Analyse der Daten wird nicht aus der gesamten Grundgesamtheit vollzogen, sondern anhand von Stichproben. Es wird auf Grund der aus den Stichproben gewonnenen Daten auf die Gesamtheit geschlossen.

Phasen einer statistischen Analyse

Generell lässt sich jede statistische Analyse in fünf Phasen unterteilen, die Planung, die Datengewinnung, die Datenanalyse und letztlich die Interpretation der Daten.

Planung

Eine gewissenhafte, mit Sorgfalt durchgeführte Planung sieht am Anfang jeder Datenanalyse und ist von grosser Bedeutung. Nur eine genaue Beschreibung der anstehenden Problematik bzw. Fragestellung führt zu eine zielorientierten Beschaffung der notwendigen Informationen.

Von der Planung hängt die Qualität der gesamten Analyse ab. Nur eine sorgsam durchgeführte Planung kann zu einer brauchbaren Schlussfolgerungen führen.

Datengewinnung

Nach der genauen Formulierung der Frage – bzw. Problemstellung muss der Aufgabe der Datenerhebung nachgegangen werden. Dabei ist zu unterscheiden, ob auf schon existierende Daten zurückgegriffen werden kann, oder ob neue Daten zu erheben sind.

Es stellt sich die Frage, ob Daten durch Befragung, Beobachtung oder Messungen gewonnen werden können. Bei der Wahl der Datensammlung stehen Qualität, Zeit-bedarf und Kosten der Datenerhebung im Vordergrund.

Aufbereitung der gewonnen Daten

Liegen die erhobenen Daten vor, müssen diese, in eine für die bevorstehende Analyse geeignete Form gebracht werden.

Es erfolgt eine Zusammenfassung in Tabellen und Schaubildern.

Datenanalyse

In der Datenanalyse, dem Kernstück der Statistik werden die aufbereiteten Daten nach geeigneten statistischen Verfahren untersucht. Dazu gehören die Berechnung statistischer Kennzahlen, wie Mittelwerte, Varianzen usw.

Interpretation der Ergebnisse

Den Schluss bildet die Interpretation der aus der Datenanalyse gewonnen Erkenntnissen. In der beschreibenden Statistik ist die eigentliche statistische Analyse damit abgeschlossen. Es wurde die Grundgesamtheit erfasst.

In der schliessenden Statistik beziehen sich die aus der Datenanalyse gefundenen Resultate nur auf die Stichprobe. Es muss hier noch ein Rückschluss auf die Grundgesamtheit angeschlossen werden. Es wirken Zufallseinflüsse auf das Ergebnis ein, die sich jedoch mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsrechnung quantifizieren lassen. Aussagen können nur mit einer gewissen, aber quantifizierbaren Unsicherheit getroffen werden.

1.2 Auswahl von Proben

Wie schon weiter oben erwähnt kann zwischen Total- und Teilerhebung sprich Stich-probe(n) unterschieden werden. Bei der Teilerhebung durch Stichproben versucht man mit Hilfe statistischer Methoden zu einer Aussage über die Gesamtheit zu kommen. Dazu ist unabdingbar, dass die Probe die Gesamtheit möglichst gut repräsentiert.

Die Stichproben- Erfassung lässt sich in zwei Teile gliedern

Zufällige Auswahl von Einheiten

Bewusst bzw. geplante Auswahl von Einheiten

1.2.1 Zufällige Auswahl von Einheiten

Wurde für eine Stichprobenauswahl entschieden, so bereitet die Auswahl der Stichproben aus der Grundgesamtheit mehr Schwierigkeiten als man anfänglich vielleicht glaubt. Eine Auswahl „aufs Geratewohl“ erscheint am Anfang als am sinnvollsten.

Entscheidend für die Anwendung der Wahrscheinlichkeitsrechnung zur Schlussfolgerung von Stichproben auf die Grundgesamtheit ist die Auswahl der Proben nach dem Zufallsprinzip.

Definition (vereinfacht und nicht der mathematischen Statistik entnommen)

Werden die Einheiten der Probe durch Zufallsauswahl, z.B. durch Zufallsgenerator bestimmt, so bezeichnet man dies als Zufallsstichprobe. Jede Einheit der Grundgesamtheit muss eine zu beziffernde Wahrscheinlichkeit haben, in die Stichprobe zu gelangen.

Nur bei einer zufälligen Auswahl der Einheiten lässt sich der sogenannte Stichprobenfehler mit Hilfe statistischer Methoden erfassen und bewerten.

Dies ist wohl der Hauptgrund dafür, dass in der Praxis fast ausschliesslich Zufallsstichproben zur Anwendung kommen. Im Folgenden soll immer, wenn von Stichproben die Rede ist, davon ausgegangen werden, dass es sich um Zufallsstichproben handelt.

1.2.2 Bewusst bzw. geplante Auswahl von Einheiten

Bei einer bewusst bzw. geplanten Stichprobenauswahl erfolgt die Selektion nach bestimmten, vorgegebenen Regeln. So werden beispielsweise aus einer Produktion konsequent jedes fünfte produzierte Teil entnommen. Dieses Vorgehen wird auch als Schlussziffernverfahren bezeichnet. Es ist mit dem Lotteriespiel vergleichbar.

Wichtig erscheint dabei, dass die Regeln so gewählt werden, dass das Verfahren möglichst nahe an das der Zufallsstichprobe kommt.

Die bewusst bzw. geplante Auswahl von Einheiten ist nicht selten mit viel Subjektivität verbunden, während bei der zufälligen Auswahl, wie der Name schon sagt, die Auswahl rein zufällig geschieht.

Nur bei einer zufälligen Auswahl der Einheiten lässt sich der sogenannte Stichprobenfehler mit Hilfe statistischer Methoden erfassen und bewerten. Bei einer geplanten Auswahl ist dies nicht möglich. Dies schliesst jedoch nicht aus, dass auch mit einer geplanten Stichprobenauswahl brauchbare Ergebnisse erzielt werden können.

1.2.3 Klumpenstichprobe

Hier geht man davon aus, dass die Grundgesamtheit in Teilmengen bzw. in sogenannte Klumpen zerlegt werden kann. Diese sollten wenigstens ein grobes Abbild der Grundgesamtheit darstellen. So bilden beispielsweise Industriebetriebe Klumpen der Industrie.

Es werden nicht die einzelnen Stichproben- Einheiten durch Zufallsauswahl bestimmt, sondern durch einige Klumpen. Klumpenstichproben werden überwiegend aus organisatorischen und finanziellen Gründen eingesetzt.

1.3 Messung von Median und Mittelwert

1.3.1 Der Mittelwert

Will man eine Menge von Daten (Zahlen) in komprimierter Form d.h. in einer einzigen Zahl darbringen, so wählt man einen Mittelwert. Dieser Wert liegt zwischen den Extrem Werten. Er dient sehr oft als Vergleichsmaßstab zwischen zwei Messreihen am selben Objekt.

Man unterscheidet:

die errechneten Mittelwerte und

die natürlichen Mittelwerte

Zu den errechneten Mittelwerten gehören das einfache, das gewogene arithmetische Mittel und das geometrische Mittel. Den errechneten Mittelwerten ist eigen, dass die Daten nicht zu ordnen sind. Sie lassen sich alle zahlenmässig genau bestimmen.

Zum natürlichen Mittelwert gehören: der dichteste Wert und der Zentralwert.

Hier müssen die Zahlenreihen zunächst in aufsteigender oder abfallender Folge geordnet werden.

Arithmetischer Mittelwert

Der arithmetische Mittelwert ist wohl der Wert, der am meisten eingesetzt wird. Er wird allgemein als Durchschnitt bezeichnet. Dieser Wert ist ein rein theoretischer Wert, er braucht nicht gemessen worden sein. Er wird auch innerhalb Six Sigma sehr häufig benutzt um Vergleiche anzustellen und Daten zu interpretieren.

Berechnung des arithmetischen Mittelwertes:

$$\bar{x} = \sum x_i / n$$

\bar{x} arithmetischer Mittelwert

Gl.1.3.1

x_i steht für sämtliche Messwerte

n Anzahl der durchgeführten Messungen

Es wird die Summe aus allen Messwerten gebildet und diese durch die Anzahl an durchgeführten Messungen dividiert.

Ein Beispiel soll die Berechnung verdeutlichen:

$x_1 = 5.478$ Einh., $x_2 = 5.917$ Einh., $x_3 = 7.002$ Einh., $x_4 = 6.940$ Einh., $x_5 = 6.286$ Einh. und $x_6 = 7112$ Einh.

Daraus ergibt sich die Anzahl der Daten zu $n = 6$ und die Summe der Daten zu 39.733 Einh. entsprechend

$$\bar{x} = \sum x_i / n = 39.733 \text{ Einh.} / 6 = 6.622 \text{ Einh.}$$

Bei Datenreihen in welchen einzelne Daten stark von den übrigen abweichen, kann der berechnete arithmetische Mittelwert mehr oder weniger verfälscht werden.

gewichtetes arithmetisches Mittel

Kommt den einzelnen Werten einer Datenreihe nicht die gleiche Gewichtung (Bedeutung) zu, so führt der reine arithmetische Mittelwert zu falschen Ergebnissen. Es kommt dann der gewichtete arithmetische Mittelwert zum Einsatz.

$$X_G = \sum f x_i / n$$

X_G gewichteter arithmetischer Mittelwert

x_i steht für sämtliche Messwerte

n Anzahl der durchgeführten Messungen

f Gewichtung

ein Beispiel dazu:

Kredit (x)	Dauer in Mon. (f)	$f x_i$
100.000	1	100.000
55.000	2	110.000
10.000	9	90.000
		300.000

$$n = \sum f = 12$$

$$X_G = \sum f x_i / n = 300.000 / 12 = 25.000$$

1.3.2 Der Median

Der Median ist der Wert bei dem die eine Hälfte der Messwerte unterhalb von diesem und die andere Hälfte oberhalb liegt. Bei einer geraden Anzahl von Daten wird der Median aus dem Mittelwert der beiden mittleren Daten bestimmt.

Beispiel:

$$5, 7, 9, 11, \mathbf{12}, \mathbf{15}, 16, 18, 21, 23 \quad \text{Median} = 12+15 / 2 = \mathbf{13.5}$$

Der Median wird immer dann angewendet, wenn die Messwerte Ausreisser beinhalten. Der arithmetische Mittelwert würde hier zu einer Verfälschung führen.

Von Ausreissern spricht man immer dann, wenn ein oder mehrere Messwerte nicht in die erwartete Messreihe passen, oder allgemein nicht den Erwartungen entsprechen.

1.4 Messung der Varianz

Eine gängige Methode zur Streuungsmessung ist die durchschnittliche Abweichung ($\bar{\delta}$). Ausgang ist das arithmetische Mittel (\bar{x}) einer Datenreihe. Zu diesem wird von jedem Datenwert (x_i) die Differenz bestimmt.

So ergibt sich:

$$\bar{\delta} = x_i - \bar{x} \quad (Gl.1.4.1)$$

x_i einzelne Messwerte
 \bar{x} Mittelwert
 $\bar{\delta}$ durchschn. Abweichung

Wird die Abweichung ($\bar{\delta}$) in Prozent angegeben, so erhält man den Variabilitätskoeffizienten:

$$\text{Variabilitätskoeffizient} = (\bar{\delta} \times 100) / \bar{x} \quad (Gl.1.4.2)$$

Sollen die Abweichungen verschiedener Messreihen miteinander verglichen werden, so ist der Variabilitätskoeffizient der besser geeignete Wert als das blosse $\bar{\delta}$.

Das Problem stellt sich hier im Vorzeichen der berechneten Werte aus $x_i - \bar{x}$

Ist \bar{x} grösser als x_i so ergibt sich ein negativer Wert als Ergebnis. Gefragt war jedoch die Entfernung vom Mittelwert, und diese kann nicht negativ sein.

1.4.1 Die Range

Wenn zwei gleiche Mittelwerte vorliegen, so sagt das nicht dass auch die Verteilung der Werte gleich ist. Es werden noch andere Kennwerte benötigt um die Häufigkeitsverteilung zu charakterisieren. Es muss quantifiziert werden, wie weit die einzelnen Werte vom Mittelwert entfernt liegen (Streuung).

Der einfachste Wert um die Streuung zu erfassen ist die Spannweite. Sie ist die Differenz zwischen dem grössten und dem kleinsten Messwert.

$$R = x_{\max} - x_{\min}$$

x_{\max}	grösster Messwert
x_{\min}	kleinster Messwert
R	Spannweite (Range)

Bei der Berechnung von R sind die Ausreisser zwangsläufig x_{\max} oder x_{\min} .

1.4.2 Die Standard Abweichung

Für kleine Stichprobenwerte mit $n < 10$ stellt die Range ein recht brauchbarer wert für die Abweichung dar. Nicht so bei Stichproben von grösserem Umfang ($n > 10$). Hier ist die Anwendung von σ die bessere Wahl, σ hat eine bessere Konstanz von Stichprobe zu Stichprobe.

Die Kalkulation von σ ist komplexer als die der Range . Obwohl die Berechnung heute in jedem Statistik Programm enthalten ist, sollte deren Berechnung bekannt sein. σ stellt im Rahmen von DoE ein Schlüsselwert dar.

Die Stichproben Standard Abweichung s resultiert aus der Betrachtung der einzelnen, innerhalb der Probe gemessenen Werte x_i und deren Differenz zum Mittelwert \bar{x} dieser.

Es dürfte nun klar sein, dass s ein besserer Wert für die Abweichung darstellt als die Range R. Bei der Berechnung von s werden alle gemessenen Werte x_i der Stichprobe mit einbezogen und nicht nur die beiden Extremwerte wie bei R.

Die Differenz ε_i der gemessenen Werte x_i zum Mittelwert \bar{x} ist gegeben durch:

$$\varepsilon_i = x_i - \bar{x}$$

ε_i	Abweichung vom Mittelwert
x_i	Messwerte
\bar{x}	Mittelwert

Die Proben Standard Abweichung wird berechnet :

$$s^2 = \sum \varepsilon_i^2 / n-1 \quad \text{und daraus folgend} \quad s = \sqrt{\sum \varepsilon_i^2 / n-1} \quad (\text{Gl.1.4.3})$$

$$i = 1, \dots n$$

Es stellt sich die Frage, warum denn die Abweichung so kompliziert berechnet wird ?
Warum nicht einfach der Mittelwert aus der Summe der Abweichungen ε_i ?

$$\bar{\varepsilon} = 1/n \sum \varepsilon_i = 0 \quad \text{mit } i = 1 \dots n$$

Der Mittelwert aus der Summe aller Abweichungen ε_i ergibt sich zu „null“, und macht daher wenig Sinn.
Eine Möglichkeit bestünde in der Verwendung des Absolut-Wertes $|\varepsilon_i|$. Dieser wird als Mittel- Abweichung bezeichnet, gelangt jedoch so gut wie nie zur Anwendung.

$$\bar{\varepsilon} = 1/n \sum |\varepsilon_i| \quad \text{mit } i = 1 \dots n$$

Die Standard Abweichung der Grundgesamtheit σ wird auf dem selben Wege berechnet wie die Standard Abweichung s der Stichprobe:

$$\sigma = \sqrt{\varepsilon_i^2 / N} \quad \text{mit } N \text{ als der Umfang der Grundgesamtheit}$$

und

$$\varepsilon_i = x_i - \mu \quad \text{mit } \mu \text{ als Mittelwert der Grundgesamtheit}$$

Da an dieser Stelle wie für die Berechnung für s nicht $N-1$ zur Anwendung gelangt, liegt daran, dass μ sich auf die Grundgesamtheit bezieht.

Es versteht sich, dass nur in den wenigsten Fällen alle x_i der Grundgesamtheit vorliegen oder zugänglich sind. So kann σ nur sehr selten direkt berechnet werden. Die Bestimmung von σ erfolgt in der Regel über Stichproben aus der Grundgesamtheit, und somit über die Berechnung von s , der Standard Abweichung aus der Stichprobe.

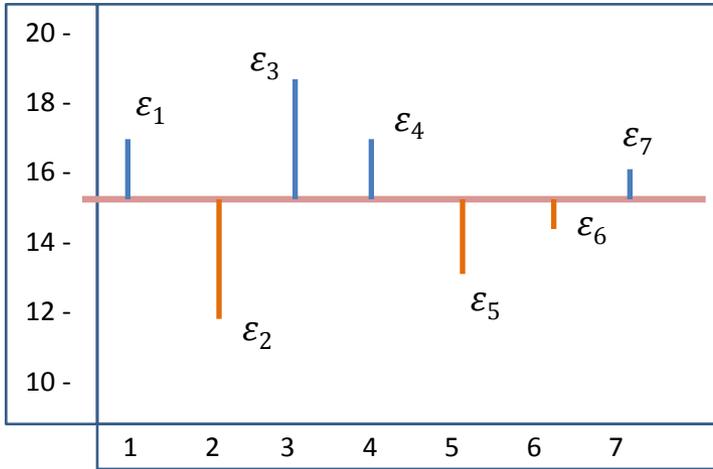
Das Quadrat der Standard Abweichung σ^2 bzw. s^2 werden als Varianz bezeichnet.

$$\sigma^2 = \sum \varepsilon_i^2 / N \quad \text{beziehungsweise}$$

$$s^2 = \sum \varepsilon_i^2 / (n-1) \quad \text{Gl.1.4.4}$$

Nachteilig wirkt sich die Einheit der Varianz auf deren Interpretation aus.

Die Einheit der Varianz ist das Quadrat der Einheit der Messwerte x_i . Ist die Einheit der Messwerte x_i beispielsweise $^{\circ}\text{C}$, so ist die Einheit der Varianz $^{\circ}\text{C}^2$.



$\bar{x} = \sum x_i / n$
hier $n = 7$

Abb.1.4.2
Aufzeichnung der Messwerte x_i
Und der Abweichungen ϵ_i vom
Mittelwert von $\sum x_i$

Beispiel

Folgend aus eine Stichprobe gemessenen Werte x_i liegen vor
13 16 11 15 12 16 und 13

Es sollen die Abweichungen ϵ_i bestimmt und daraus die Standard Abweichung errechnet werden.

Die Summe der Messwerte $\sum (13 16 11 15 12 16 13)$ ergibt sich zu 96.

Dementsprechend ist der Mittelwert $\bar{x} = \sum x_i / n = 96 / 7 = 13,7$

Die Standard Abweichung s berechnet sich daraus zu $\epsilon_i = x_i - \bar{x}$ und $s = \sqrt{\sum \epsilon_i^2 / n-1}$

Eingesetzt ergibt sich: $s = \sqrt{\sum \epsilon_i^2 / n-1} = \sqrt{23,4 / 6} = 1,976$

3.8 Wahl der Faktorstufen

Der Festlegung der Faktorstufe ist grosse Bedeutung zu schenken. Erfolgt die Auswahl falsch, so kann das Experiment scheitern, oder zu falschen Ergebnissen führen.

3.8.1 Qualitative Faktorstufen

Weniger kritisch ist die Wahl der Variablenstufe bei qualitativen Variablenstufen. Es ist einzig darauf zu achten, dass die Stufen realistisch sind und deren Wahl brauchbare Ergebnisse liefert. Besser noch ist der Versuch die qualitative Variable in eine quantitative zu überführen.

In vielen Fällen haben die qualitativen Variablen die Stufen YA und NEIN oder GUT und NICHT GUT.

Wird beispielsweise eine chem. Reaktion einmal mit und einmal ohne Katalysator durchgeführt, so lauten die Stufen der Variablen „Katalysator“ auf MIT und OHNE. Man könnte hier jedoch diese qualitative Stufen leicht in quantitative überführen, indem man die Konzentration des Katalysator als Faktorstufe wählt.

3.8.2 Quantitative Faktorstufen

Die Auswahl quantitativer Faktorstufen gestaltet sich wesentlich komplexer. Der Bedeutende Teil ist die Wahl des höchsten und tiefsten Stufen- Niveaus. Der Prozess sollte in der Praxis in der Lage sein, bei diesen Stufen zu arbeiten. Ebenso muss das entsprechende Equipment für diese Stufen geeignet sein. Es bringt beispielsweise wenig wenn eine Druckstufe auf 10 barü festgelegt wird, das Equipment jedoch nur für 5 barü geeignet ist.

Um jegliche Risiken innerhalb des Experiments auszuschliessen, ist man oft geneigt die Stufen so nah als möglich beieinander zu wählen. Dies führt dazu, dass Effekte oft unerkannt bleiben, oder im „Rauschen“ untergehen. Die höchste und tiefste Stufe sollte so gewählt werden, dass Effekte der Variablen auf den Respons gemessen werden können.

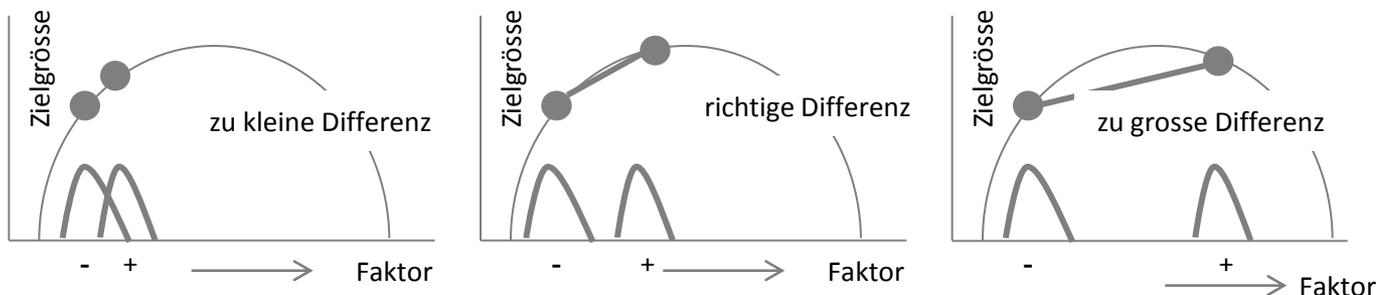


Abb. 3.8.1
Differenzen zwischen
maximaler und mini-
maler Faktorstufe

Wie die Abbildung 3.8.1 verdeutlicht, ist die Wahl des Stufenabstandes ein wichtiger Entscheid. Nur mit einem richtig ausgewählten Stufenabstand wird der Effekt auf die Zielgrösse deutlich. Bei zu nahe beieinander liegenden Stufenwerten wird der Effekt von Zufall- Streuungen verdeckt. Zu weit gefasste Stufenabstände führen nicht zwangsläufig zu grösseren Effekten auf die Zielgrösse. Die kleinste Nichtlinearität verfälscht die Werte.

Anhaltspunkt für die Wahl der Stufenwerte kann die bisher beste Einstellung eines laufenden Prozesses sein. Man untersucht einen Bereich, der symmetrisch zu diesen Werten liegt.

Kann ein Faktor aufgrund des zur Verfügung stehenden Mess- Systems nicht genau gemessen werden, so empfiehlt sich ein Abstand der Faktorstufen von mindestens 6σ . Eine Extrapolation der Messwerte ist nicht zulässig. Also sollten die Faktorstufen den interessanten Bereich abdecken. Bei EVOP werden oft die Spezifikationsgrenzen als Faktorstufen gewählt.

3.9 Blockbildung

Durch die Blockbildung sollen Zufalls- Streuung minimiert werden. Mit möglichst wenigen Einzel- Experimenten sollen so abgesicherte Ergebnisse erhalten werden. Es werden die Einzelversuche in sogenannte Blöcke unterteilt.

Es werden dadurch die zufälligen Unterschiede möglichst klein gehalten

Jede Faktorstufen- Kombination sollte möglichst gleich viel auftreten

Eventuell auftretende Unterschiede zwischen den einzelnen Blöcken können durch Ausgewogenheit innerhalb der Blöcke erkannt werden. Sie werden aus der Rechnung gestrichen. Die Zufalls- Streuung wird reduziert.

3.10 Randomisierung

Es ist so gut wie ausgeschlossen, dass alle Experimente gleichzeitig ausgeführt werden können. Typischerweise erfolgt die Durchführung run nach run.

Da unkontrollierte Einflussparameter sich während der sequenziellen Durchführung der Experimente ändern können, muss der Versuchs- Reihenfolge Beachtung geschenkt werden.

Eine Methode diesem Umstand vorzubeugen ist die Randomisierung der Versuchs- Reihenfolge. Die Einzelversuche werden in zufälliger Reihenfolge durchgeführt.

Dabei ist „zufällige Reihenfolge“ nicht gleich zu setzen mit „beliebiger Reihenfolge“. Die Reihenfolge wird mit Hilfe von Zufallszahlen festgelegt. Diese so bestimmte Reihenfolge ist dann strikt einzuhalten. Eine nachträgliche Änderung kann zu verfälschten Ergebnissen führen.

Durch Blockbildung zusammen mit einer Randomisierung erreicht man eine weitgehende Absicherung gegen ungewollt auftretende Veränderung der Versuchsbedingungen.

Durch Blockbildung können bekannte und kontrollierbare Veränderungen aus der Zufalls- Streuung gehalten werden.

Durch Randomisierung innerhalb der Blöcke kann dann eine Verfälschung der Effekte durch unbekannte unkontrollierbare Veränderungen vermieden werden.

3.11 Stufen des Versuchsablaufes

Es sollen nun im einzelnen die Schritte bei der Durchführung eines Experiments erörtert werden.

Aufstellen eines Ursachen – Wirkung Diagramms zur Festlegung der In- und Output – Variablen des zu untersuchenden Prozesses

Dokumentation des Prozesses durch Flowchart oder Beschreibungen

Detaillierte Problembeschreibung

Festlegung des Versuchsplans

Festlegung des Stichprobenumfangs, der Blockbildung und der Randomisierung

Durchführung des Versuches

Statistische Analyse der Messdaten aus dem Versuch

Interpretation der statistischen Analyse

Durchführung eines Testexperiments

Zusammenfassung der Versuchsergebnisse

3.11.1 Ursachen – Wirkung Diagramm

Die erste Stufe eines Versuchsablaufes stellt das Zusammentragen der In- und Output Variablen dar. Es sind die Einflussgrößen sowie die Zielgrößen festzulegen. Dies geschieht im Team (siehe Abb. 3.11.1.1). Alle Variablen, ob messbar oder nicht sind aufzulisten und zu kategorisieren.

Dazu bietet sich das Aufstellen eines sogenannten Ursachen – Wirkung Diagramms an.

Es werden links die Eingangsvariablen und rechts die Responses eingetragen (siehe dazu auch unter Kap. 3.3)
 Dieses Diagramm ist die Grundbasis und hat über den gesamten Versuchsablauf Bestand. Treten während des Experiments neue Erkenntnisse in Bezug auf In- oder Output Variablen auf, so ist das Ursachen- Wirkung Diagramm anzupassen bzw. zu aktualisieren.

Die so zusammengestellte Liste von Eingangsvariablen und Responses ist essenziell für das Verständnis des Prozesses. Nicht in der Tiefe mit dem Prozess vertraute Personen erhalten damit schnell einen Überblick.

Wie schon erwähnt geschieht das Aufstellen dieses Diagramms im Team. Unten dargestellt beispielhaft eine Teamzusammenstellung über alle Phasen eines Versuchsablaufes.

Aktivität	Projekt-leiter	Operator	Techniker	Design Engineer	Prozess-Engineer	Manager	Statistik Spezialist
Ursachen- Wirkung Analyse	x	x	x	x	x	x	
Dokumentation des Prozesses	x	x	x	x	x	Info	
Detaillierte Problembeschreibung	x				Info		
Festlegung des Versuchsplans	x	x					Support
Festlegung des Stichprobenumfangs	x						Support
Durchführung des Versuches	x	x	x	x	x		
Statistische Analyse der Messdaten	x						Support
Interpretation der statistischen Analyse	x				Info	Info	Support
Durchführung eines Testexperiments	x	x	x		Info		
Zusammenfassung der Versuchsergebnisse	x				Info	Info	

Abb. 3.11.1.1
 Teamzusammensetzung

3.11.2 Dokumentation des Prozesses

Um für alle ein Prozessverständnis zu schaffen, ist es notwendig diesen zu dokumentieren. Es wird der genaue Ablauf schriftlich festgehalten und so ein Prozessverständnis geschaffen. Existiert ein solches Dokument, so ist dieses sorgfältig zu überarbeiten und dem neuesten Kenntnisstand anzupassen.

Liegt kein solches als Grundlage vor, so ist dieses von Grund auf zu erstellen. Nur mit einer genauen Dokumentation des Prozesses ist es möglich gezielt Experimente durchzuführen. Ein unvollständiges Wissen über das System führt unweigerlich zu Gaps in der Erstellung des Versuchsplanes. Grundsätzlich gilt, je mehr Informationen an dieser Stelle vorliegen, desto reibungsloser gestalten sich die weiteren Schritte.

Die Dokumentation sollte alle Informationen die zum sicheren und stabilen Betreiben des Prozesses notwendig sind enthalten. Dazu gehören auch historische Daten über Performance- Entwicklung sowie Änderungen, die in der Vergangenheit durchgeführt wurden. Die Historie kann wertvolle Anhaltspunkte zur Verbesserung liefern.

Nicht zu vergessen sind Informationen bezüglich eingesetzter Mess- Systeme, deren Funktion und Genauigkeit. Selbst noch so gewissenhaft geplante, und durchgeführte Experimente sind ohne geeignete und funktionstüchtige Mess- Systeme wertlos oder führen oft zu fehlerhaften Resultaten. Bevor all diese Informationen nicht vorliegen sollte nicht mit dem nächsten Schritt begonnen werden. Die hier als vergeudet geglaubte Zeit wird nachträglich überkompensiert.

3.11.3 Detaillierte Problembeschreibung

Nur eine detaillierte Problembeschreibung kann Auskunft darüber geben was das Vorhaben ist bzw. sein soll. Sie gibt Auskunft über den Ist- zustand und deren Schwächen und Probleme. Aus der Problembeschreibung lässt sich gleichzeitig der gewünschte Soll- Zustand ableiten.

Die Problembeschreibung sollte somit folgend aufgeführte Punkte enthalten:

Zielwerte die zu studieren und analysieren sind

Die kleinste zu erwartende Änderung des Zielwertes bei Durchführung der Versuche

(wichtig zur Bestimmung des Stichprobenumfanges)

Auflistung der relevanten theoretischen Grundlagen oder physikalischen Modelle die für die Problembearbeitung relevant sind.

Eine Liste der für das Experiment relevanten Variablen (siehe unter 3.11.1). Diese kann im Laufe des Versuchsablaufes noch ergänzt werden.

Die Liste enthält:

Variablen, welche während des Experiments gezielt verändert werden

Variablen, welche während des Experiments konstant gehalten werden

Variablen, welche während des Experiments nicht betrachtet werden

Eine Liste der erwarteten oder möglichen Wechselwirkungen zwischen Variablen

Personal, finanzielle Mittel und Material, das für die Durchführung der Versuche notwendig er-scheint

Zur Problemformulierung gehört gleichfalls die Diskussion über mögliche Hindernisse während der Ausführung des Experiments. Nur so ist es möglich eventuell notwendige Gegenmass-nahmen schon im Vorfeld zu erörtern.

Die Problembeschreibung sollte vom Projektleiter erstellt werden und anschliessend dem gesamten Projektteam zur Diskussion vorgestellt werden.

3.11.4 Festlegung des Versuchsplanes

Sind die Schritte zuvor gut abgehandelt, so ist dieser Schritt einer der Einfacheren.

Er beinhaltet Antworten auf Fragen wie die Probenanzahl, Probengrösse usw. Auch hier ist es wichtig immer das Ziel der Versuche nicht aus den Augen zu verlieren.

Ist bekannt, welche Auswertemethode zur Anwendung gelangen soll, so kann dies in diesem Schritt sehr hilfreich sein. Dinge wie Probenumfang, Anzahl notwendiger Messungen usw. sind dann besser zu beantworten.

Ziel jedes Versuches ist es, ein Modell zu konstruieren, welches möglichst gut die Zusammenhänge zwischen Eingangsvariablen und Zielgrösse abbildet. Es werden so Antworten zum Prozess erhalten und Möglichkeiten zur Prozessverbesserung eröffnet. Das Modell entsteht „rückwärts“. Es müssen die angestrebten Ziele klar sein, erst dann kann das dazu geeignete Modell erstellt werden.

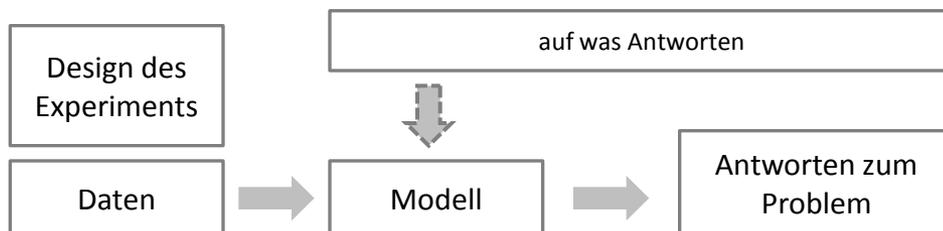


Abb. 3.11.4.1
Das Modell entsteht ausgehend vom angestrebten Ziel

6

RSM

Response Surface Methode

[1] [2] [5] [7] [9] [15] [16] [20] [21] [23]

6.1 Einführung

RSM ist eine Sammlung statistischer und mathematischer Methoden, die zur Optimierung von Systemen genutzt werden können. Es werden Systeme mit n sowohl kontinuierlichen als auch diskreten Variablen x_i betrachtet. Der Response y soll optimiert werden. Dieser ist über die Funktion $y = f(x_1, \dots, x_n)$ festgelegt.

In den meisten Fällen ist die Funktion f nicht bekannt. Es ist aber möglich den Response konkreter Faktorenwerte zu ermitteln.

Dazu stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung:

1. Berechnung des Responses auf der Basis bekannter Informationen (z.B. physikalische Zusammenhänge)
2. Messung der Werte am realen System
3. Modellierung und anschließende Simulation oder numerische Auswertung

Die so ermittelten Werte enthalten in der Regel einen Fehler ϵ unbekannter Größe.

Die Funktion f kann nur durch eine Funktion g mit

$$y = g(x_1, \dots, x_n) + \epsilon$$

approximiert werden, wobei ϵ für den geschätzten Fehler steht.

Wird der erwartete Response y als $E(y) = f(x_1, \dots, x_n) = \eta$ formuliert, so wird η als Response Surface bezeichnet.

In der Mehrzahl der Fälle wird die Response Surface grafisch verdeutlicht.

Die Abbildung 6.1.1 verdeutlicht beispielsweise den Zusammenhang der Konzentration von Reaktand A und der Katalysatorkonzentration in Bezug auf die Optimierungsgröße y (Ausbeute in %) einer chemischen Reaktion.

Um den Verlauf der Respon- Fläche besser zu verdeutlichen, wird oft zusätzlich der Contour Plot mit dargestellt. Jede Linie dieses bedeutet dabei einen Wert von y . Es werden so die Höhenlinien von y dargestellt.

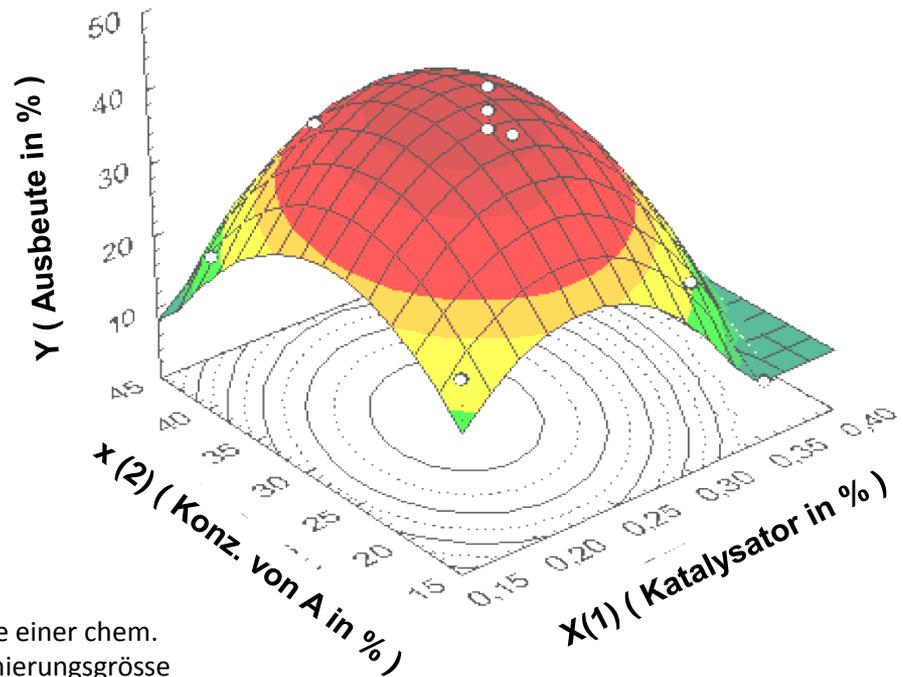


Abb.6.1.1
Darstellung der Response- Fläche einer chem.
Reaktion mit Ausbeute als Optimierungsgröße

In der Praxis ist die Form der Beziehungen zwischen Response y und den unabhängigen Variablen x_1, x_2, \dots, x_k unbekannt. So ist die erste Stufe der RSM eine Schätzung für den wahren funktionalen Zusammenhang zwischen y und den unabhängigen Variablen zu finden. Man erarbeitet meist für einen Bereich von y ein Polynom niedriger Ordnung. Kann die Zielgröße y durch eine lineare Funktion gut abgebildet werden, so ist die Näherungsfunktion ein Modell erster Ordnung:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \epsilon \quad \text{Gl.6.1.1}$$

Wird eine „Krümmung“ im Zusammenhang von y und den unabhängigen Variablen erwartet, so kommt ein Polynom höherer Ordnung, wie das Modell zweiter Ordnung zur Anwendung:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_{1i} x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{2ij} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad \text{Gl.6.1.2}$$

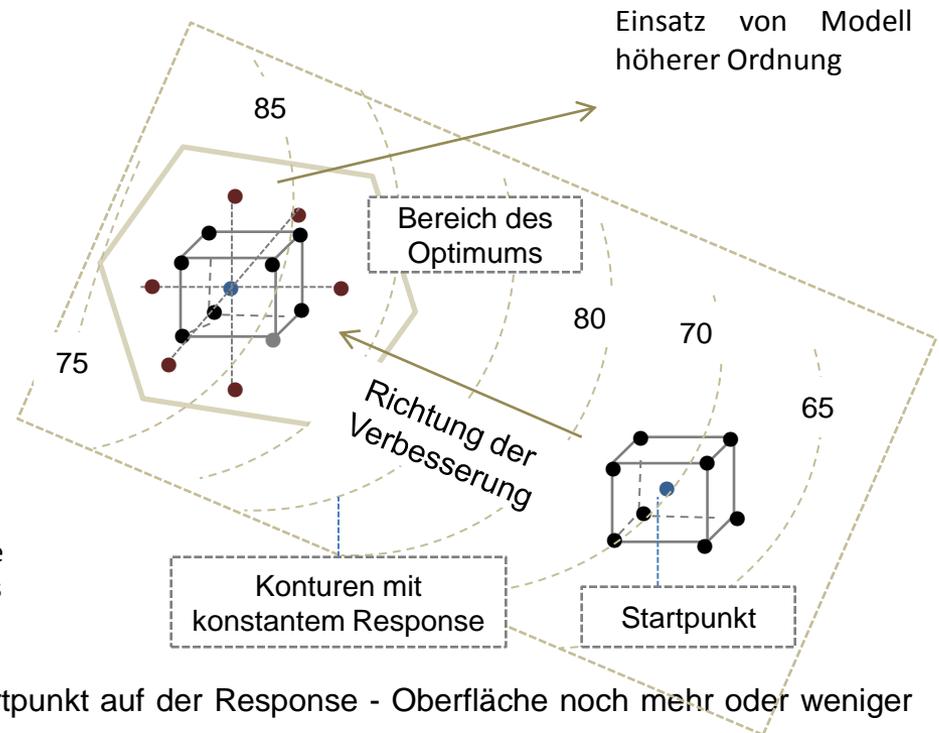
Generell benutzt die RSM ein oder beide dieser Modelle (Gl.6.1.1 / 6.1.2). Höhere Polynome Modelle beschreiben in der Regel Zusammenhänge zwischen y und den unabhängigen Variablen sehr gut. Für grössere Bereiche sind sie oft ungeeignet.

Zur Schätzung der Parameter der Näherungsfunktion erfolgt über die least squares Methode, wie in Kapitel 5.6.2 näher beschrieben. Die wohl beste Schätzung der Parameter erfolgt mit Daten aus experimentellen Designs. Designs, welche zur Berechnung der Response - Oberfläche begezogen werden, heissen Response Surface Design (siehe dazu Kap. 6.3)

Die Vorgehensweise bei der Anwendung der Response Surface Methodologie ist stufenweise:

1. Screening der Faktoren
 - Polynome Modelle niedriger Ordnung
 - Regression mit least squares Methode
2. Bereich mit Optimum abgrenzen
 - Anpassung der Faktorstufen
 - Methode des steilsten Anstiegs
3. Lokalisierung des Optimums
 - Polynom Modell höherer Ordnung
 - Analyse der Response

Abb.6.1.2
Sequenzielle Vorgehensweise
zum Erreichen des Optimums



Wie durch Abbildung 6.1.2 verdeutlicht, ist der Startpunkt auf der Response - Oberfläche noch mehr oder weniger weit vom Optimum entfernt.

Ziel muss es sein, mit vernünftigem Aufwand möglichst schnell entlang des „Verbesserungsweges“ zum Optimum zu gelangen. Im Bereich des Optimums kommt dann besser ein Modell höherer Ordnung zum Einsatz.

6.2 Methode des steilsten Anstiegs

Wie oben schon erwähnt, liegt der Startpunkt oft mehr oder weniger weit vom Optimum entfernt. Es gilt mit einer experimentellen Prozedur möglichst ökonomisch und effizient zu diesem Optimum zu gelangen. Befindet man sich fern ab des Optimums, so kann im ersten Schritt ein Modell erster Ordnung zu Grunde gelegt werden.

Die Methode des steilsten Anstiegs ist eine Prozedur, bei der man sich stufenweise mit dem grössten Anstieg des Response in Richtung des Optimums bewegt. Gilt es ein Minimum zu finden, so spricht man logischerweise von der Methode des steilsten Abstiegs (Vorzeichen drehen sich dabei).

Das berechnete Modell erster Ordnung ergibt sich zu:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$$

Die Konturen des Modells erster Ordnung sind , wie Abbildung 6.2.1 dargestellt parallele Linien. Der steilste Anstieg ist der Weg auf dem \hat{y} am schnellsten ansteigt. Diese Richtung ist Normal zu der berechneten Responseoberfläche (Rechter Winkel zu den \hat{y} - Konturen). Die Stufen des steilsten Anstiegs sind proportional zum absoluten Betrag der Regressions- Koeffizienten $|\hat{\beta}_i|$. Die Stufenweite wird durch den Experimentator festgelegt. Massgebend sind elementare Kenntnisse des zu optimierenden Prozesses.

Die Versuche werden so lange fortgeführt, bis kein weiterer Anstieg des berechneten Response mehr zu verzeichnen ist.

Der steilste Anstieg ist proportional zu den Vorzeichen und Grössen der Regressionskoeffizienten des berechneten Modells.

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$$

So kann ein allgemeiner Algorithmus zur Berechnung der Koordinaten des steilsten Anstiegs angegeben werden. Geht man davon aus, dass der Ausgangspunkt bei $x_1 = x_2, \dots = x_k = 0$ liegt, dann kann wie folgt vorgegangen werden:

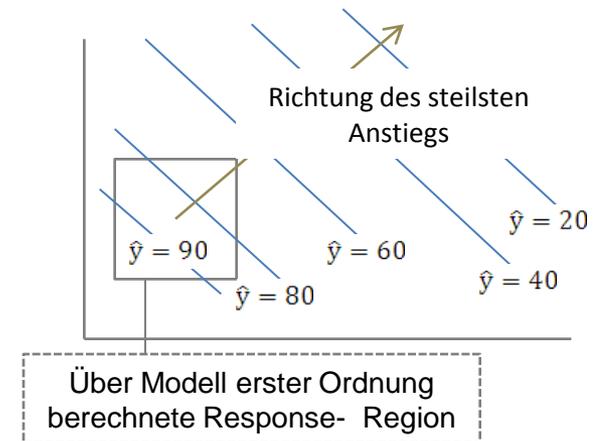


Abb.6.2.1

Methode des steilsten Anstiegs

Auswahl einer Schritt- bzw. Stufenweite Δx_j . Dabei ist sinnvoll die Variable zu wählen, über welche die meisten Prozesskenntnisse vorliegen, oder die mit dem grössten absoluten Regressionskoeffizienten $|\hat{\beta}_j|$.

Die Stufengrösse der anderen Variablen ergibt sich zu:

$$\Delta x_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\hat{\beta}_j / x_j} \quad i = 1, 2, \dots, k \quad i \neq j$$

Umrechnung der Variablen Δx_i von codierten Werten auf Ursprungswerte.

Ein Beispiel mit $\hat{\beta}_1 = 0,775$ $\hat{\beta}_2 = 0,325$ $x_1 = 1,0$ soll dies verdeutlichen:

$$\Delta x_2 = \frac{\hat{\beta}_2}{\hat{\beta}_1 / x_1} = 0,325 / (0,775 / 1,0) = 0,42$$

Umrechnung der codierten Werte $\Delta x_1 = 1,0$ und Δx_2 in Ursprungswerte: $\Delta x_1 = \Delta \xi_1 / 5$ und $\Delta x_2 = \Delta \xi_2 / 5$ ergibt $\Delta \xi_1 = \Delta x_1 (5) = 5$ und $\Delta \xi_2 = \Delta x_2 (5) = 2$

6.3 Analyse des Response Surface mit Modell zweiter Ordnung

Befindet man sich nahe des Optimums, ist ein Modell welches Krümmungen wiedergibt gefragt. In den meisten Fällen genügt dazu ein Modell zweiter Ordnung.

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon$$

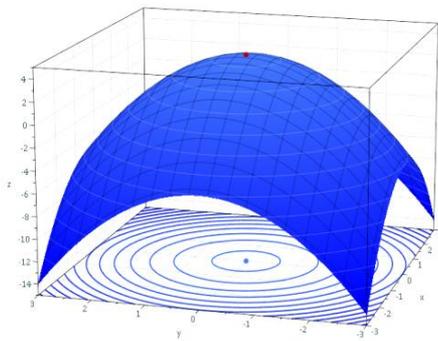
Ziel ist mit diesem Modell die Variablen x zu finden, welche die „Ziel- Oberfläche“ repräsentieren.

6.3.1 Lage des stationären Punktes

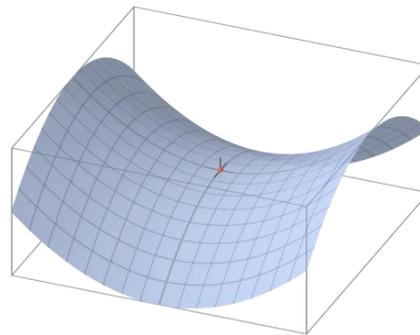
Es gilt die Variablen x_1, x_2, \dots, x_k zu finden, welche den Zielwert y optimieren. Existiert dieser optimale Punkt, so ist

die partielle Ableitung $\frac{\delta \hat{y}}{\delta x_1} = \frac{\delta \hat{y}}{\delta x_2} = \dots = \frac{\delta \hat{y}}{\delta x_k} = 0$ Dieser Punkt mit den Koordinaten $x_{1s}, x_{2s}, \dots, x_{ks}$

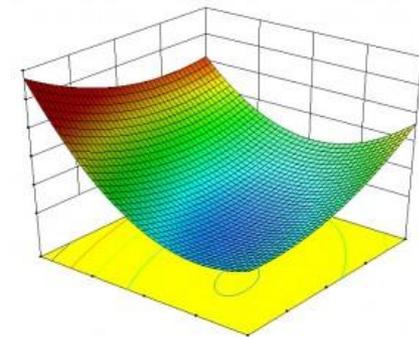
wird als stationärer Punkt bezeichnet. Dieser Punkt kann ein Maximum, ein Minimum oder ein Sattelpunkt darstellen.



Maximum



Sattelpunkt



Minimum

Abb.6.3.1.1

Drei Möglichkeiten Maximum, Minimum und Sattelpunkt in 3D Grafik

Um den stationären Punkt mathematisch auszudrücken, wird das gefittete Modell zweiter Ordnung in Matrixform wiedergegeben.

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}' \mathbf{b} + \mathbf{x}' \mathbf{B} \mathbf{x}$$

mit

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11}, \hat{\beta}_{12}/2, \dots, \hat{\beta}_{1k}/2 \\ \hat{\beta}_{22}, \dots, \hat{\beta}_{2k}/2 \\ \vdots \\ \text{sym.} & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$