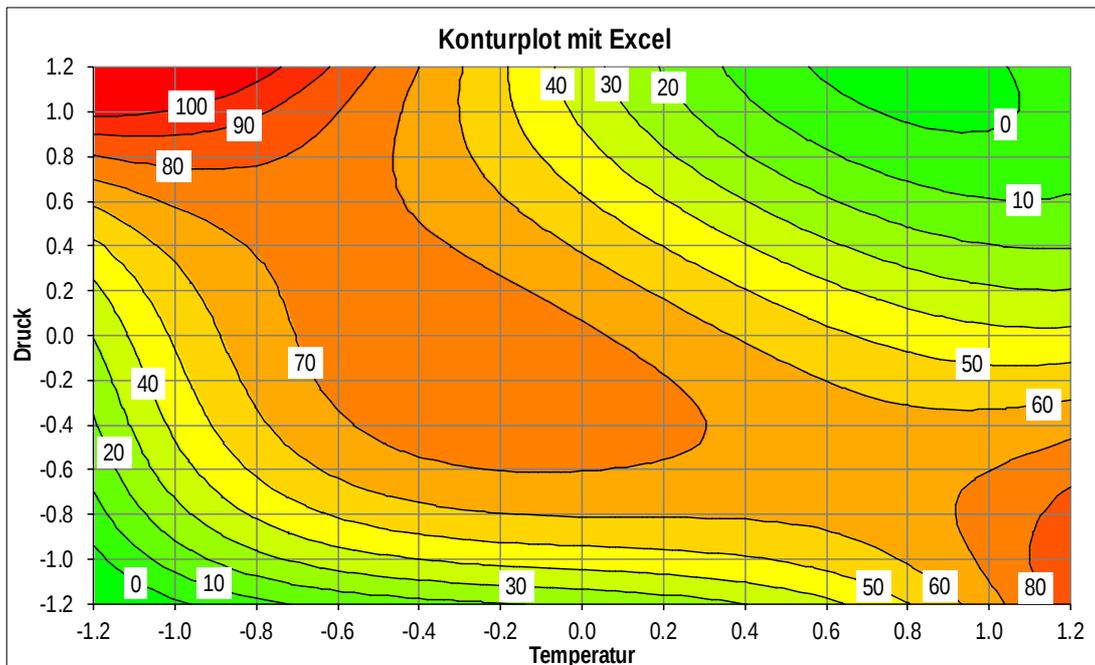


# Planung, Analyse und Definition eines Optimums statistischer Experimente mit OQM-Stat in Excel



Eckehardt Spenhoff



Alle Rechte, auch die Übersetzung in fremden Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Werkes darf ohne vorherige schriftliche Genehmigung des Verfassers in irgendeiner Form, auch nicht zum Zweck der Unterrichtsgestaltung, reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Medien verarbeitet und vervielfältigt werden.

Copyright © 2023 Eckehardt Spenhoff

## 1 Einführung

In den Ingenieurwissenschaften sind häufig komplexe Probleme zu lösen, die statistische Versuchsplanung ist dabei ein wichtiges Werkzeug zur Lösung dieser Probleme. Industrieller Prozesse verursachen unterschiedlich große Streuungen, welche es schwierig machen Ergebnisse vorherzusagen. Nur mit statistischen Methoden kann man diese Streuungen bewerten und gegebenenfalls auch reduzieren. Die statistische Versuchsplanung ist das adäquate Werkzeug um stetige Prozessergebnisse (ohne Bruchlinien) mit linearen Funktionen modellhaft darzustellen. Mit Hilfe dieser Regressionsmodelle lassen sich optimale Prozessbedingungen definieren bei gleichzeitiger Schätzung der zu erwartenden Streuung. Details entnehmen sie bitte der einschlägigen Literatur.<sup>1</sup>

Für erfolgreiche Anwendung der statistischen Versuchsplanung (DoE, Design of Experiments) gelten einige erfüllbare Forderungen.

- **Messmittelpräzision:** Die Prozessstandardabweichung muss 20-mal größer als die Messmittelstandardabweichung sein.
- **Einflussgrößen (Faktoren):** Die Faktoren sollten mit bedacht ausgewählt werden. Zu viele Faktoren vergrößern die Anzahl der Versuche und die Versuchsdurchführung wird unwirtschaftlich. Außerdem besteht die Gefahr eines Fehlers III. Art (Fehler in der Versuchsdurchführung). Die Faktoren sollten einen kausalen Einfluss auf die Response haben und unabhängig voneinander sein.
- **Zielgrößen (Response):** Für die Response gilt es die Frage zu beantworten, ob sie direkt oder indirekt das gewünschte Ergebnis misst. Direkte Messungen sind besser. Was sind die genauen Ziele?
- **Versuchsraum:** Die Definition des Versuchsraumes ist von zentraler Bedeutung, weil ein zu kleiner Versuchsraum kaum signifikante Wirkungen zeigt und ein zu großer Versuchsraum Modelle höheren Grades erfordert. Eventuell muss der Versuchsraum durch Vorversuche abgeklärt werden.
- **Redundanz:** Die Redundanz sollte größer 1 sein. Sollte dies nicht der Fall sein, sind ausreichende Wiederholungen des gesamten Versuchs erforderlich, sonst droht *Kaffeesatzleserei*. Die Redundanz wird durch den Quotienten: Anzahl verschiedener Versuche / Anzahl zu schätzender Wirkungen.
- **Wiederholungen:** Die Wiederholung von Versuche sind das Salz in der Suppe ermöglichen sie doch die Modellanpassung zu prüfen, den Versuchsfehler zu schätzen bei gleichzeitiger Verkleinerung desselben, auch kleinere Wirkungen noch zu erkennen.

---

<sup>1</sup> Spenhoff, Eckehardt  
Prozess-Sicherheit II. Statistische Versuchsplanungen für Ingenieure in Prozess- und Produktentwicklung, GRIN Verlag 2017

## 2 Faktorielle und teilfaktorielle Versuchen

Im Gegensatz zu kommerziellen Programmen beschränkt sich OQM-Stat auf wesentliche Versuchspläne, die da sind:  $2^2$ ,  $2^3$ ,  $2^4$ ,  $2^{5-1}$ ,  $2^{6-1}$ . Alle faktoriellen Versuchspläne sind entweder vollständig oder mindestens vom Lösungstyp V. In der Praxis werden häufig auch faktorielle Versuchspläne des Lösungstyp III und Lösungstyp IV angewendet. Der Grund liegt in der geringen Anzahl von Versuchen mit denen man viele Faktoren untersuchen kann. Auch Desinteresse an Wechselwirkungen hilft nicht, weil Hauptwirkungen mit 2-fach-Wechselwirkungen oder 2-fach-Wechselwirkungen untereinander vermengt sind. Solche Versuchspläne liefern keine vertrauenswürdigen Modelle und sind ungeeignet. Der Wunsch nach kleinen Versuchsplänen kann allenfalls mit dem Lösungstyp V erfüllt werden, weil 2-fach-Wechselwirkungen mit 3-fach-Wechselwirkungen vermengt sind. Das ist deshalb möglich, weil 3-fach-Wechselwirkungen 0 oder sehr klein sind. Sollte eine 3-fach-Wechselwirkungen bedeutsam sein wird dies zu einem Anpassungsdefekt führe und ein Modell zweiten Grades (CCD) erforderlich machen. Bezüglich der Anzahl von Versuchen ist dies nur die halbe Wahrheit, denn es muss einen oder mehrere Zentralpunkte geben damit die Modellanpassung geprüft werden kann.

The screenshot shows a software window titled "Faktorielle Versuche". It contains the following elements:

- Input fields for "Anzahl der Faktoren:" (value: 2), "Anzahl wiederholter Versuche:" (value: 16), and "Anzahl von Zentralversuche:" (value: 0).
- A table for factor settings:
 

Name des Faktors	Minimum	Maximum
X1	-1	1
X2	-1	1
- Copyright information: "OQM-Stat 2.3.2", "copyright 2017", "E. Spenhoff & HJK", "oqm@espenhoff.de".
- Buttons for "Start" and "Beenden".

Das Menü erlaubt die Definition von 2 bis 6 Faktoren oder 4 bis 32 verschiedenen Versuchseinstellungen. Soll eine Wirkung, die in etwa einer Standardabweichung der Prozessstreuung entspricht, als signifikant erkannt werden, muss die vorgegebene Anzahl an Wiederholungen bestätigt werden. Die Gesamtzahl der durchzuführenden

Versuche beträgt somit immer mindestens 64 (bei zwei Standardabweichungen sind es 16 Versuche). Selbstverständlich dürfen sie der Anzahl der Wiederholungen frei wählen, sie verringern oder steigern damit das Erkennen von signifikanten Wirkungen. Auch eine zu hohe Anzahl von Wiederholungen ist nicht erstrebenswert, weil sonst auch kleinste (nicht relevante) Wirkungen signifikant werden. Ein einfacher Test soll die Wichtigkeit von Wiederholungen demonstrieren, dazu definieren wir eine Funktion ( $Y=5+0.5*X1+0.5*X2+0.5*X1*X2$ ) und addieren Zufallswerte (0,1) hinzu. Die Daten sind in der folgenden Tabelle.

Testdurchführung Matrix				Analyse Matrix			
Versuch	X1	X2	Y1	X1	X2	X1X2	
1	-1	-1	3,85	-1	-1	1	1
2	1	-1	5,28	1	-1	-1	-1
3	-1	1	5,16	-1	1	-1	-1
4	1	1	5,81	1	1	1	1
7	0	0	5,85	0	0	0	0
8	0	0	6,32	0	0	0	0
9	0	0	3,87	0	0	0	0

Der Zentralpunkt musste definiert werden, weil die Redundanz 1 ist und sonst keine Streuung berechnet werden kann. Das Ergebnis der Regressionsanalyse zeigt das zu erwartende Ergebnis.

Regressionsstatistiken für Y1								
Anz. Beob.:	7	Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert	
Anz. fehl. Beob.:	0	TSS	3,30554	6	0,55092			
R <sup>2</sup> :	0,42791	RSS	1,41448	3	0,47149	0,74798	0,59147	
St.Abw. Error:	0,79395	Error	1,89107	3	0,63036			
AIC_ols:	-1,16138	LoF	0,30360	1	0,30360	0,38250	0,59932	
BIC_ols:	-1,37774	pure Error	1,58747	2	0,79373			
Variable	Koeffizient	SE	SE (HC2)	t_SE	t_HC2	p_SE	p_HC2	VIF
Konstante	4,90286	0,30008	0,25829	16,33824	18,98234	<b>0,00025</b>	<b>0,00016</b>	
X1	0,04250	0,39697	0,27550	0,10706	0,15426	0,46075	0,44360	1,00000
X2	0,20250	0,39697	0,27550	0,51011	0,73503	0,32257	0,25778	1,00000
X1X2	-0,55750	0,39697	0,27550	-1,40437	-2,02359	0,12742	0,06809	1,00000
Prüfung auf Heteroskedastizität				Prüfung auf Normalität				
BP-Test:	0,00000	1,00000		AD-Test:	0,881260	0,024162		

Ohne auf die Details einzugehen<sup>2</sup>, ist klar, dass nur die Konstante signifikant ist, die Wirkungen für X1, X2 und X1X2 sind es nicht. Die Größen der Wirkungen passen

<sup>2</sup> Spenhoff, Eckehardt

Prozess-Sicherheit III. Angewandte Statistik mit Excel, GRIN Verlag 2017

nicht und die Wechselwirkung X1X2 ist sogar negativ. Dieser Versuchsplan zeigt uns ein falsches Ergebnis. Wegen zu wenig Wiederholungen ist dieser Versuchsplan völlig ungeeignet. Ein Versuchsplan nach den Vorgaben zeigt ein anderes Bild.

Regressionsstatistiken für Y1								
Anz. Beob.:	80	Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert	
Anz. fehl. Beob.:	0	TSS	118,33392	79	1,49790			
R2 :	0,42978	RSS	50,85741	3	16,95247	19,09387	0,00000	
St.Abw. Error:	0,94226	Error	67,47651	76	0,88785			
AIC_ols:	-5,61976	LoF	0,01378	1	0,01378	0,01532	0,90182	
BIC_ols:	3,90834	pure Error	67,46273	75	0,89950			
<b>Variable</b>	<b>Koeffizient</b>	<b>SE</b>	<b>SE (HC2)</b>	<b>t_SE</b>	<b>t_HC2</b>	<b>p_SE</b>	<b>p_HC2</b>	<b>VIF</b>
Konstante	4,88688	0,10535	0,10523	46,38811	46,43949	<b>0,00000</b>	<b>0,00000</b>	
X1	0,58281	0,11778	0,11430	4,94822	5,09893	<b>0,00000</b>	<b>0,00000</b>	1,00000
X2	0,51125	0,11778	0,11430	4,34064	4,47284	<b>0,00002</b>	<b>0,00001</b>	1,00000
X1X2	0,44000	0,11778	0,11430	3,73571	3,84949	<b>0,00018</b>	<b>0,00012</b>	1,00000
<b>Prüfung auf Heteroskedastizität</b>				<b>Prüfung auf Normalität</b>				
BP-Test:	0,01321	0,90850		AD-Test:	0,32329	0,52622		

Alle Faktoren (X1 und X2) und auch die Wechselwirkung (X1X2) sind signifikant, auch die Größen der Parameter sind zutreffende Schätzungen. Das Beispiel zeigt, wie wichtig ausreichende Wiederholungen sind. Das heißt aber nicht, dass immer eine große Anzahl Wiederholungen notwendig sind. Es ist das Zusammenspiel zwei Kenngrößen dem Versuchsfehler und Delta (ist die Differenz zwischen der Zielgröße für die minus- und plus-Einstellung die als relevant erachtet wird) welche die Anzahl der Wiederholungen bestimmen.

## 2.1 Charakterisierung der faktoriellen Versuchsplänen

2 <sup>2</sup> faktorieller Versuch	
Würfelpunkte	Es ergeben sich 4 Würfelpunkte, sie sind wesentlich für die Berechnung der Parameter
Zentralpunkte	Mindestens 3 zur Ermittlung des Versuchsfehlers, empfohlen werden 16 Zentralpunkte
Wiederholungen	Es werden 16 Wiederholungen aller Würfelpunkte empfohlen nach $[ N = 64 * (\text{Versuchsfehler} / \Delta)^2 ]$
Parameter	4: (b0, b1, b2, b12)
Redundanz	Die Redundanz ist 1, deshalb sind Zentralpunkte oder Wiederholungen der gesamten Würfelpunkte notwendig.
Faktoren	Bei kategoriellen Faktoren, ist kein Zentralpunkt und keine Prüfung der Modellanpassung möglich.

2 <sup>3</sup> faktorieller Versuch	
Würfelpunkte	Es ergeben sich 8 Würfelpunkte, sie sind wesentlich für die Berechnung der Parameter
Zentralpunkte	Mindestens 3 zur Ermittlung des Versuchsfehlers, empfohlen werden 8 Zentralpunkte
Wiederholungen	Es werden 8 Wiederholungen aller Würfelpunkte empfohlen nach $[ N = 64 \cdot (\text{Versuchsfehler} / \Delta)^2 ]$
Parameter	7: ( b <sub>0</sub> , b <sub>1</sub> , b <sub>2</sub> , b <sub>3</sub> , b <sub>12</sub> , b <sub>13</sub> , b <sub>23</sub> )
Redundanz	Die Redundanz ist größer 1.
Faktoren	Bei kategoriellen Faktoren, ist kein Zentralpunkt und keine Prüfung der Modellanpassung möglich.

Die Notwendigkeit von Wiederholung besteht auch darin, dass ein Versuchsfehler berechnet kann. Es wird zur Analyse keine speziell für faktorielle Versuche entsprechende Berechnung verwendet, sondern die multiple Regressionsanalyse.

2 <sup>4</sup> faktorieller Versuch	
Würfelpunkte	Es ergeben sich 16 Würfelpunkte, sie sind wesentlich für die Berechnung der Parameter
Zentralpunkte	Mindestens 3 zur Ermittlung des Versuchsfehlers, empfohlen werden 4 Zentralpunkte
Wiederholungen	Es werden 4 Wiederholungen aller Würfelpunkte empfohlen nach $[ N = 64 \cdot (\text{Versuchsfehler} / \Delta)^2 ]$
Parameter	11: ( b <sub>0</sub> , b <sub>1</sub> , b <sub>2</sub> , b <sub>3</sub> , b <sub>4</sub> , b <sub>12</sub> , b <sub>13</sub> , b <sub>14</sub> , b <sub>23</sub> , b <sub>24</sub> , b <sub>34</sub> )
Redundanz	Die Redundanz ist größer 1.
Faktoren	Bei kategoriellen Faktoren, ist kein Zentralpunkt und keine Prüfung der Modellanpassung möglich.

Dies ist eine gewollte Beschränkung in der Analyse, zumal zur Analyse immer auch die Schätzung eines Versuchsfehlers gehört. Die multiple Regression ist ein universelles Verfahren lineare Zusammenhänge zu analysieren.

2 <sup>5-1</sup> teilfaktorieller Versuch	
Würfelpunkte	Es ergeben sich 16 Würfelpunkte, sie sind wesentlich für die Berechnung der Parameter
Zentralpunkte	Mindestens 3 zur Ermittlung des Versuchsfehlers, empfohlen werden 4 Zentralpunkte
Wiederholungen	Es werden 4 Wiederholungen aller Würfelpunkte empfohlen nach $[ N = 64 \cdot (\text{Versuchsfehler} / \Delta)^2 ]$
Parameter	16: ( b <sub>0</sub> , b <sub>1</sub> , b <sub>2</sub> , b <sub>3</sub> , b <sub>4</sub> , b <sub>5</sub> , b <sub>12</sub> , b <sub>13</sub> , b <sub>14</sub> , b <sub>15</sub> , b <sub>23</sub> , b <sub>24</sub> , b <sub>25</sub> , b <sub>34</sub> , b <sub>35</sub> , b <sub>45</sub> )
Redundanz	Die Redundanz ist 1, deshalb sind Zentralpunkte oder Wiederholungen der gesamten Würfelpunkte notwendig.
Faktoren	Bei kategoriellen Faktoren, ist kein Zentralpunkt und keine Prüfung der Modellanpassung möglich.



Testdurchführung Matrix					Analyse Matrix					
Versuch	Temp.	Form.	Rühr.	Zufallszahl	Temp.	Form.	Rühr.	X1X2	X1X3	X2X3
13	60	2	4500	0.046222122	-1	-1	1	1	-1	-1
8	90	3	4500	0.082606172	1	1	1	1	1	1
9	60	2	3000	0.131850279	-1	-1	-1	1	1	1
5	60	2	4500	0.296523804	-1	-1	1	1	-1	-1
15	60	3	4500	0.311785451	-1	1	1	-1	-1	1
4	90	3	3000	0.331480436	1	1	-1	1	-1	-1
11	60	3	3000	0.380602949	-1	1	-1	-1	1	-1
2	90	2	3000	0.424945359	1	-1	-1	-1	-1	1
12	90	3	3000	0.45282519	1	1	-1	1	-1	-1
1	60	2	3000	0.637084984	-1	-1	-1	1	1	1
10	90	2	3000	0.740791642	1	-1	-1	-1	-1	1
7	60	3	4500	0.828258984	-1	1	1	-1	-1	1
3	60	3	3000	0.854538495	-1	1	-1	-1	1	-1
6	90	2	4500	0.858559513	1	-1	1	-1	1	-1
16	90	3	4500	0.874710604	1	1	1	1	1	1
14	90	2	4500	0.915729462	1	-1	1	-1	1	-1

Dieser Versuchsplan wird nun randomisiert, dazu werden Zufallszahlen mit Excel (Zufallszahl()) erzeugt. Diese Zufallszahlen werden kopiert und als Werte zurück geschrieben. Dann wird der gesamte Datenbereich mit Überschriften selektiert und die Daten nach Zufallszahl sortiert. Nun können die Zufallszahlen gelöscht werden. Die Durchführung der Versuche findet Charge für Charge statt. Deswegen ist eine Umsortierung nach niedrigen und dann hohen Temperaturen nicht notwendig. Entsprechend der Zufallsordnung wird zuerst Versuch 13, gefolgt vom 8 usw. realisiert. Bei jedem Versuch ist darauf zu achten, dass die Randbedingungen eingehalten werden. Speziell die eingesetzte Menge einer Charge muss gleich sein, weil dies sonst die Zielgröße verzerren würde. Jeder Messwert der Filtrationsrate muss auf Plausibilität hin beurteilt werden. Nicht plausible Messwerte können wegen der geringen Anzahl an Wiederholungen das Ergebnis der Analyse verzerren. Gibt es den Verdacht einen nicht plausiblen Messwert zu haben, dann empfiehlt es den Versuch zu wiederholen. Eingabe der Messwert erfolgt in der Reihenfolge der durchgeführten Versuche (Zufallsordnung ist einzuhalten), dies kann aber an beliebiger Stelle im Arbeitsblatt geschehen. Empfohlen wird aber die Eingabe zwischen den beiden Matrizen. Wenn der Platz nicht ausreichend ist, weil es mehr als eine Zielgröße gibt, können beliebig viele Spalten eingefügt werden. Sollte dies erledigt sein, empfiehlt es sich das gesamte Arbeitsblatt zu duplizieren. Wir werden später, bei der Durchführung der Analyse erklären warum dies hilfreich sein kann.

Testdurchführung Matrix					Analyse Matrix					
Versuch	Temp.	Form.	Rühr.	Filtration	Temp.	Form.	Rühr.	X1X2	X1X3	X2X3
13	60	2	4500	170.3	-1	-1	1	1	-1	-1
8	90	3	4500	325.5	1	1	1	1	1	1
9	60	2	3000	181.7	-1	-1	-1	1	1	1
5	60	2	4500	162.8	-1	-1	1	1	-1	-1
15	60	3	4500	265.0	-1	1	1	-1	-1	1
4	90	3	3000	227.1	1	1	-1	1	-1	-1
11	60	3	3000	302.8	-1	1	-1	-1	1	-1
2	90	2	3000	268.7	1	-1	-1	-1	-1	1
12	90	3	3000	246.0	1	1	-1	1	-1	-1
1	60	2	3000	170.3	-1	-1	-1	1	1	1
10	90	2	3000	246.0	1	-1	-1	-1	-1	1
7	60	3	4500	283.9	-1	1	1	-1	-1	1
3	60	3	3000	257.4	-1	1	-1	-1	1	-1
6	90	2	4500	378.5	1	-1	1	-1	1	-1
16	90	3	4500	363.4	1	1	1	1	1	1
14	90	2	4500	393.6	1	-1	1	-1	1	-1

Nach diesen Vorbereitungen kann die eigentliche Analyse beginnen. Wir starten die multiple Regression von OQM-Stat und füllen das Formblatt aus.

Zuerst wird der Bereich aller Wirkungen (X Variablen) mit Namen eingelesen, dann machen wir das gleiche mit einer Zielgröße (Y Variable). Die Regression wird mit

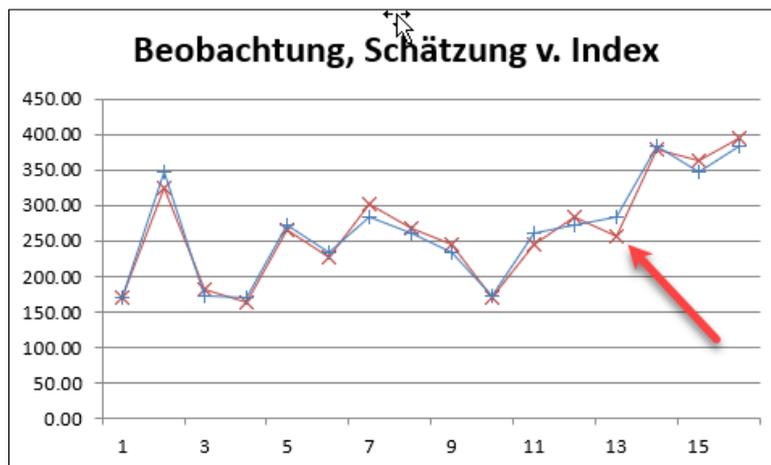
Regressionskonstanter und der Ausgabe der Residuen durchgeführt. Der Typ des robusten Standardfehlers spielt nur dann eine Rolle wenn die Residuen nicht gleichgestreut sind. Wir drücken den Button „Ausführen“ und erhalten das Analyseergebnis der Regressionsrechnung.

Regressionsstatistiken für Filtration								
			Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert
Anz. Beob.:	16		TSS	82098.27750	15	5473.21850		
Anz. fehl. Beob.:	0		RSS	79376.23750	6	13229.37292	43.74085	0.00000
R <sup>2</sup> :	0.96684		Error	2722.04000	9	302.44889		
St.Abw. Error:	17.39106		LoF	151.29000	1	151.29000	0.47080	0.51201
AIC_ols:	96.18477		pure Error	2570.75000	8	321.34375		
BIC_ols:	101.59289							
Variable	Koeffizient	SE	SE (HC2)	t_SE	t_HC2	p_SE	p_HC2	VIF
Konstante	265.1875	4.34776	4.34776	60.99399	60.99399	0.00000	0.00000	
Temp.	40.9125	4.34776	4.34776	9.41001	9.41001	0.00000	0.00000	1.00000
Form.	18.7000	4.34776	4.34776	4.30106	4.30106	0.00099	0.00099	1.00000
Rühr.	27.6875	4.34776	4.34776	6.36822	6.36822	0.00007	0.00007	1.00000
X1X2	-34.3000	4.34776	4.34776	-7.88911	-7.88911	0.00001	0.00001	1.00000
X1X3	31.4625	4.34776	4.34776	7.23648	7.23648	0.00002	0.00002	1.00000
X2X3	-2.1250	4.34776	4.34776	-0.48876	-0.48876	0.31835	0.31835	1.00000
			Prüfung auf Heteroskedastizität			Prüfung auf Normalität		
BP-Test:			2.16310	0.14136	AD-Test:			0.49216 0.21816

Wir interpretieren das Ergebnis von links nach rechts im oberen Bereich. Die Anzahl der Beobachtungen ist 16, keine der Beobachtungen ist fehlerhaft. Das Bestimmtheitsmaß ist mit 0.96684 hoch, d.h. 96.684 % der Gesamtstreuung lassen sich durch das Regressionsmodell erklären. Der Versuchsfehler ist mit 17.39 sehr hoch, sodass Vorhersagen erhebliche Unsicherheiten aufweisen. AIC und BIC lassen sich nur im Vergleich mit anderen Modellen interpretieren. In der Anova wird das Regressionsmodell geprüft, der p-Wert für die Regression ist 0.0000, somit wird die Nullhypothese (keine Regression vorhanden) auf hohem Niveau abgelehnt. Der p-Wert 0.512 für den Mangel an Anpassung, bestätigt eine ausreichende Modellanpassung. Mittleren Teil stehen die Regressionskoeffizienten mit ihrer Streuung. Die p-Werte zeigen ob diese Regressionskoeffizienten signifikant sind. Bis auf die Wechselwirkung X2X3 sind alle Wirkungen signifikant. Die Wechselwirkung X2X3 kann weggelassen werden, ohne das Regressionsmodell zu verändern. Der Grund ist die Orthogonalität (bestätigt durch VIF = 1) faktorieller Versuche. Orthogonalität wird erreicht durch die Kodierung der Faktoren und erlaubt unabhängige Schätzungen aller Wirkungen. Im unteren Teil der Analyse finden zwei Tests auf Ungleichgestreutheit und Normalverteilung der Residuen statt. Ein p-Wert von 0.14136 bestätigt die Nullhypothese (die Residuen sind gleichgestreut). Auch die Normalverteilung der Residuen wird mit einem p-Wert von 0.21816 bestätigt.

Analyse der Residuen										
Nr.	beobachtet	geschätzt	Residual	Std.Residual	Hebel	stud. Res	del. Res	Cooks D	Dffits	
1	170.3	169.625	0.675	0.03881	0.43750	0.05175	0.04880	0.00030	0.04304	
2	325.5	347.525	-22.025	-1.26646	0.43750	-1.68861	-1.92613	0.31682	-1.69869	
3	181.7	172.925	8.775	0.50457	0.43750	0.67276	0.65086	0.05029	0.57401	
4	162.8	169.625	-6.825	-0.39244	0.43750	-0.52326	-0.50101	0.03042	-0.44185	
5	265.0	271.375	-6.375	-0.36657	0.43750	-0.48876	-0.46704	0.02654	-0.41189	
6	227.1	233.475	-6.375	-0.36657	0.43750	-0.48876	-0.46704	0.02654	-0.41189	
7	302.8	283.175	19.625	1.12845	0.43750	1.50460	1.63969	0.25154	1.44607	
8	268.7	260.425	8.275	0.47582	0.43750	0.63443	0.61198	0.04472	0.53972	
9	246.0	233.475	12.525	0.72020	0.43750	0.96026	0.95562	0.10246	0.84278	
10	170.3	172.925	-2.625	-0.15094	0.43750	-0.20125	-0.19017	0.00450	-0.16772	
11	246.0	260.425	-14.425	-0.82945	0.43750	-1.10593	-1.12168	0.13590	-0.98923	
12	283.9	271.375	12.525	0.72020	0.43750	0.96026	0.95562	0.10246	0.84278	
13	257.4	283.175	-25.775	-1.48208	0.43750	-1.97611	-2.47620	0.43389	<b>-2.18380</b>	
14	378.5	382.975	-4.475	-0.25732	0.43750	-0.34309	-0.32560	0.01308	-0.28715	
15	363.4	347.525	15.875	0.91283	0.43750	1.21710	1.25545	0.16459	1.10721	
16	393.6	382.975	10.625	0.61095	0.43750	0.81459	0.79799	0.07373	0.70376	

Die Residuenanalyse wird häufig zu unrecht vernachlässigt. Die Spalten zeigen die beobachteten Werte im Vergleich zu den geschätzten Werten. Aus diesen werden die Restabweichungen (Residuen) berechnet. Im nächsten Schritt werden die Residuen standardisiert (NV(0, 1)). Als nächstes werden die Hebelwirkungen mit Hilfe der HAT-Matrix bestimmt, diese sollten möglichst klein (min. 0.4) sein. Die Hebelwirkungen hängen von der Anzahl der Wiederholungen und von der Lage zum Zentrum des Versuchsraumes ab. In dem Beispiel sind alle Hebelwirkungen gleich, weil jeder Versuch die gleiche Anzahl von Wiederholungen hat und jeder Versuch gleichweit vom Zentrum entfernt ist. Die studentisierten Residuen berücksichtigen die Hebelwirkungen und stellen eine bessere Schätzung der Residuen dar, welche vom Zentrum entfernt sind.



Das gelöschte Residuum zeigt wie sich das Residuum ändert wenn der dazugehörige Wert in der Regression nicht berücksichtigt wird. Die Auswirkung sollte klein sein.

Dies ist bei der Beobachtung 13 nicht der Fall. Auch Cook's D zeigt einen auffällig großen Wert, aber erst die DFFITS zeigen ein signifikantes Resultat, d.h., dieser Wert beeinflusst das Regressionsmodell deutlich. Im Normalfall würde man diesen Versuch wiederholen und gegebenenfalls durch die neue Messung ersetzen. Diesen Versuch einfach zu streichen *verbessert* die Regressionsfunktion, ist aber eine unerlaubte Maßnahme weil sie der Manipulation *Tür und Tor* öffnet. Es bleibt fest zu halten, dass ein Versuch die Regressionsfunktion deutlich beeinflusst. Durch Überlegungen lassen sich optimale Einstellungen definieren, dies ist im kleinen Regressionsmodell einfach. Es kann aber auch die in OQM-Stat implementierte Polyoptimierung angewendet werden. Dazu muss eine VBA-Funktion definiert werden.

```
Public Function Filtrat(ByVal X1 As Double, ByVal X2 As Double, ByVal X3 As Double) As Double
Dim Y As Double
  Y = 265.1875
  Y = Y + X1 * 40.9125
  Y = Y + X2 * 18.70009
  Y = Y + X3 * 27.6875
  Y = Y + X1 * X2 * -34.3
  Y = Y + X1 * X3 * 31.4625
  Filtrat = Y
End Function
```

So gerüstet steht der Polyoptimierung nichts im Wege.

Formblatt für gradientenbasierte Polyoptimierung ✕

**OQM-Stat 2.3.2**  
copyright 2017  
E. Spenhoff & HJK  
oqm@espenhoff.de

Anzahl der Antwortgrößen (1 bis 6):

Anzahl der Faktoren (2 bis 6):

Zielgröße	Optimum	UGW	Ziel	OGW
Filtration	größer ▾	280	400	
Y2	größer ▾			
Y3	größer ▾			
Y4	größer ▾			
Y5	größer ▾			
Y6	größer ▾			

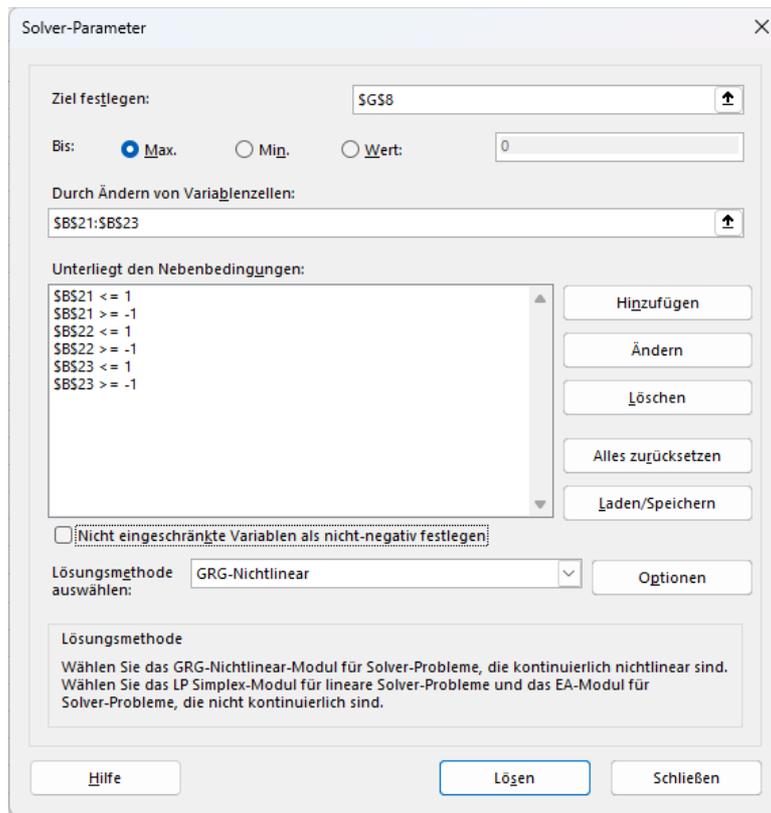
Faktor	Minimum	Maximum
Temp.	60	90
Form.	2	3
Rühr.	3000	4500
X4		
X5		
X6		

Die Eingaben sind selbst erklärend, da für die Filtration gilt je größer je besser wird kein oberer Grenzwert definiert.

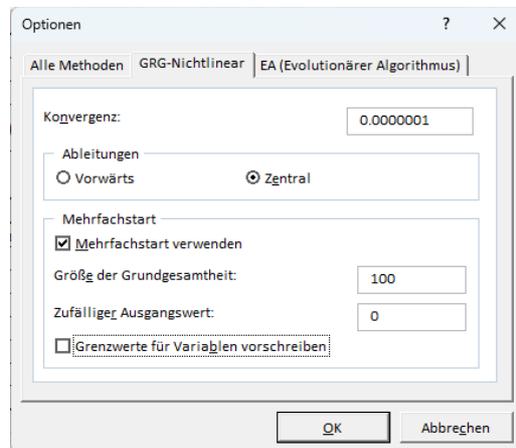
Wenn man kleiner je besser einstellt wird nur ein Zielwert und ein oberer Grenzwert definiert. Nur bei der Einstellung *Ziel* müssen der Zielwert, unterer und oberer Grenzwert festgelegt werden.

Definition der Zielwerte und Berechnung des Optimums									
Zielgrößenwerte					Optimierungsergebnis				
Zielgrößen	Ymin	Y1	Zielwert	Y2	Ymax	Kenngrößen		Werte	
Filtration	280	414	400			Anzahl der Zielgrößen		1	
						Produktsomme ind. Wunschwerte		0	
						<b>aggregierter Wunschwert</b>			
						<b>0</b>			
Funktionen zur Ermittlung der Wunschfunktion									
Zielgrößen	steigende Gerade		Approximations-Polynom 4-ten Grades					fallende Gerade	
	a1	b1	A	B	C	D	E	a2	b2
Filtration	-2.33333333	0.00833333							
Start- und Ergebniswerte					Definiton der Zielgrößen und Wunschwerte				
Faktoren	cod. Fak.	reale Fak.	Schrittweite	Zentrum	Zielgrößen	opt. Richt.	Antwort	Bezeichner	Wunschwert
Temp.	0	75	15	75	Filtration	größer	265.1875	1	0
Form.	0	2.5	0.5	2.5					
Rühr.	0	3750	750	3750					

Grün markierte können verändert werden, auch die codierten Faktoren dürfen vor der Optimierung geändert werden. Im der orange-farbigen Bereich werden die VBA-Funktionen [=Filtrat(B21,B22,B23)] eingegeben. Im nächsten Schritt wird der Excel-Solver aufgerufen. Dort wird der aggregierte Wunschwert als Ziel (immer Maximum) definiert, dann folgen die codierten Faktoren als veränderliche Zellen zur Zielerreichung. Nun müssen wir dem Solver mitteilen in welchen Bereichen die Lösung des Optimum gesucht wird. Dies ist notwendig, weil der Solver sonst irreguläre Lösungen findet. Der Button für „Nicht eingeschränkte Variablen als nicht-negativ festlegen“ muss deaktiviert werden.



Unter Optionen sollten an dem Solver weitere Verbesserung eingestellt werden.



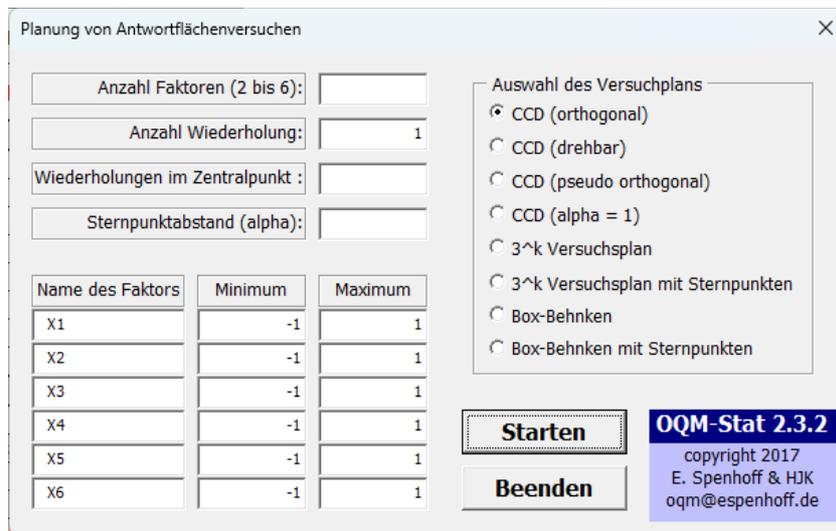
Wir wählen GRG-Nichtlinear und erhöhen die Konvergenz. Für die Ableitungen ist „Zentral“ zu wählen. „Mehrfachstart“ aktivieren und „Grenzwerte für Variablen vorschreiben“ deaktivieren. Nach diesen Eingaben kann die Lösung des Solvers gestartet werden.

Definition der Zielwerte und Berechnung des Optimums									
Zielgrößenwerte					Optimierungsergebnis				
Zielgrößen	Ymin	Y1	Zielwert	Y2	Ymax	Kenngrößen		Werte	
Filtration	280	414	400			Anzahl der Zielgrößen		1	
						Produktsomme ind. Wunschwerte		0.84041667	
						<b>aggregierter Wunschwert</b>			
						<b>0.840416667</b>			
Funktionen zur Ermittlung der Wunschfunktion									
Zielgrößen	steigende Gerade		Approximations-Polynom 4-ten Grades					fallende Gerade	
	a1	b1	A	B	C	D	E	a2	b2
Filtration	-2.33333333	0.00833333							
Start- und Ergebniswerte					Definiton der Zielgrößen und Wunschwerte				
Faktoren	cod. Fak.	reale Fak.	Schrittweite	Zentrum	Zielgrößen	opt. Richt.	Antwort	Bezeichner	Wunschwert
Temp.	1	90	15	75	Filtration	größer	380.85	1	0.84041667
Form.	-1	2	0.5	2.5					
Rühr.	1	4500	750	3750					

Das Optimierungsergebnis ist hervorragend, so konnte die Filtrationsrate um rund 100 Liter gesteigert werden. Gleichzeitig konnte der Einsatz von Formaldehyd deutlich gesenkt werden.

### 3 Antwortflächen-Versuchspläne

Unter den Antwortflächen-Versuchsplänen (Response Surface Methodology kurz: RSM) verbergen sich Versuchspläne höherer Ordnung.



Aus acht Verfahren kann das passende Verfahren ausgewählt werden. Es gibt Versuchspläne mit wenig Wiederholungen und Versuchspläne mit vielen Versuchspunk-

ten. Die zentral zusammengesetzter Versuchspläne (central composite Design, kurz CCD) heißen so, weil sie auf faktoriellen Versuchen aufbauen, dann wird ein Zentralpunkt und danach Sternpunkte hinzugefügt. Der Sternpunktabstand (Alpha) vom Zentrum und die Anzahl Wiederholungen im Zentrum definieren die Eigenschaften Orthogonalität und Drehbarkeit der Versuchspläne.

### 3.1 Orthogonaler CCD

Diese Versuchspläne sind flexibel und orthogonal für alle zu schätzenden Parameter. Sie werden häufig verwendet, wenn der gesamte Versuchsraum wiederholt wird. Faktorielle Versuche können dank der Flexibilität leicht zu einem CCD erweitert werden. Die quadratischen Parameter werden durch die Sternpunkte festgelegt. Das vorgegebene Alpha darf nicht geändert werden, weil sonst die Orthogonalität verloren geht.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1 <sup>2</sup>	X2 <sup>2</sup>	X3 <sup>2</sup>
X1	1								
X2	0	1							
X3	0	0	1						
X1X2	0	0	0	1					
X1X3	0	0	0	0	1				
X2X3	0	0	0	0	0	1			
X1 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	1		
X2 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	0	1	
X3 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	0	0	1

### 3.2 Drehbarer CCD

Im Gegensatz zu den orthogonalen CCD sind die drehbaren CCD weniger flexibel, weil das Alpha nur von den verschiedenen Würfelpunkte abhängt und die Anzahl der Versuche im Zentralpunkt fest vorgeben ist. In der Regel wird man den gesamten Versuch nicht wiederholen, weil man dadurch sehr viele Zentrumspunkte erhält. Wer die Drehbarkeit erhalten will darf weder das Alpha noch die Anzahl der Zentrumspunkte verändern.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1 <sup>2</sup>	X2 <sup>2</sup>	X3 <sup>2</sup>
X1	1								
X2	0	1							
X3	0	0	1						
X1X2	0	0	0	1					
X1X3	0	0	0	0	1				
X2X3	0	0	0	0	0	1			
X1 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	1		
X2 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	-0.090	1	
X3 <sup>2</sup>	0	0	0	0	0	0	-0.090	-0.090	1

### 3.3 Pseudo-orthogonaler CCD

Die pseudo-orthogonalen CCD verbinden die orthogonalen mit den drehbaren CCD. Von ihrer Konstruktion her sind es drehbare Versuchspläne, welche durch eine

erhöhte Anzahl von Zentrumspunkten nahezu orthogonal sind. Vollständige Orthogonalität kann wegen der Ganzzahligkeit der Anzahl von Zentrumspunkten nicht erreicht werden. Ansonsten gelten die Regeln wie bei den drehbaren CCD.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1^2	X2^2	X3^2
X1	1								
X2	0	1							
X3	0	0	1						
X1X2	0	0	0	1					
X1X3	0	0	0	0	1				
X2X3	0	0	0	0	0	1			
X1^2	0	0	0	0	0	0	1		
X2^2	0	0	0	0	0	0	-0.007	1	
X3^2	0	0	0	0	0	0	-0.007	-0.007	1

### 3.4 Flächen-zentrierte CCD

Der flächen-zentrierte Versuchsplan kann nicht empfohlen werden, er ist weder orthogonal noch drehbar. Leider ist man manchmal gezwungen, diese Versuchspläne anzuwenden, weil Alpha ungleich 1 aus technischen Gründen nicht realisiert werden kann. Alpha ist bei diesen Versuchsplänen auf 1 festgelegt. Wiederholungen nur im Zentralpunkt verschlechtern den Versuchsplan, sodass die Empfehlung lauten muss, nur den gesamten Versuch zu wiederholen.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1^2	X2^2	X3^2
X1	1								
X2	0	1							
X3	0	0	1						
X1X2	0	0	0	1					
X1X3	0	0	0	0	1				
X2X3	0	0	0	0	0	1			
X1^2	0	0	0	0	0	0	1		
X2^2	0	0	0	0	0	0	0.4	1	
X3^2	0	0	0	0	0	0	0.4	0.4	1

### 3.5 3<sup>k</sup> Faktorieller Versuch

Die 3-stufigen Versuchspläne haben keine statistischen Eigenschaften, welche die Optimalitätskriterien von Versuchsplänen erfüllen. Außerdem steigt die Anzahl von Versuchen mit jedem zusätzlichen Faktor stark an. Der Grund für die Anwendung dieser Versuchspläne ist die Möglichkeit quadratische Wechselwirkungen in das Regressionsmodell aufzunehmen. Für zwei Faktoren gilt:

$$Y = b_0 + b_1 * X_1 + b_2 * X_2 + b_{12} * X_1 * X_2 + b_{11} * X_1^2 + b_{22} * X_2^2 + b_{112} * X_1^2 * X_2 + b_{122} * X_1 * X_2^2 + b_{1122} * X_1^2 * X_2^2$$

Bei diesem Versuchsplan können 9 unbekannte Parameter berechnet werden, wir haben 9 Versuchspunkte, das ergibt eine Redundanz gleich 1. Zur Bestimmung von Streuungen ist eine Wiederholung aller Versuche erforderlich. Auch für andere Anzahlen von Faktoren gibt es Einschränkungen, weil auch diese Versuchspläne

reduziert wurden. Bei drei und vier Faktoren gibt es keine Einschränkungen. Bei fünf Faktoren können folgende Wirkungen

$$X1^2 * X5, X2^2 * X5, X3^2 * X5, X4^2 * X5, X1^2 * X5^2, X2^2 * X5^2, X3^2 * X5^2, X4^2 * X5^2$$

nicht berechnet werden und bei sechs Faktoren sind es die Wirkungen

$$X1^2 * X6, X2^2 * X6, X3^2 * X6, X4^2 * X6, X5^2 * X6, X1^2 * X6^2, X2^2 * X6^2, X3^2 * X6^2, X4^2 * X6^2, X5^2 * X6^2$$

Diese Einschränkungen sind sicherlich zu verkräften, weil bei 5 Faktoren 38 Koeffizienten und bei 6 Faktoren 54 Koeffizienten berechnet werden können.

	X1	X2	X3	X1*X2	X1*X3	X2*X3	X1^2	X2^2	X3^2	X1^2*X2	X1^2*X2^2	X1^2*X3	X1^2*X3^2	X2^2*X3	X2^2*X3^2	X1^2*X2^2	X1^2*X3^2	X2^2*X3^2
X1	1																	
X2	0	1																
X3	0	0	1															
X1*X2	0	0	0	1														
X1*X3	0	0	0	0	1													
X2*X3	0	0	0	0	0	1												
X1^2	0	0	0	0	0	0	1											
X2^2	0	0	0	0	0	0	0	1										
X3^2	0	0	0	0	0	0	0	0	1									
X1^2*X2	0	0.816	0	0	0	0	0	0	0	1								
X1^2*X2^2	0.816	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1							
X1^2*X3	0	0	0.816	0	0	0	0	0	0	0	0	1						
X1^2*X3^2	0.816	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	1					
X2^2*X3	0	0	0.816	0	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	1				
X2^2*X3^2	0	0.816	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	0	0	0	1			
X1^2*X2^2	0	0	0	0	0	0	0.632	0.632	0	0	0	0	0	0	0	1		
X1^2*X3^2	0	0	0	0	0	0	0.632	0	0.632	0	0	0	0	0	0	0.4	1	
X2^2*X3^2	0	0	0	0	0	0	0	0.632	0.632	0	0	0	0	0	0	0.4	0.4	1

### 3.6 3<sup>k</sup> Faktorieller Versuch mit Sternpunkten

Es gelten die gleichen Einschränkungen wie unter 3.5 definiert. Zusätzlich kann nun ein kubisches Modell berechnet werden. Das Alpha für die Sternpunkte muss mindestens 2 betragen.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1 <sup>2</sup>	X2 <sup>2</sup>	X3 <sup>2</sup>	X1 <sup>2</sup> X2	X1X2 <sup>2</sup>	X1 <sup>2</sup> X3	X1X3 <sup>2</sup>	X2 <sup>2</sup> X3	X2X3 <sup>2</sup>	X1 <sup>2</sup> X2 <sup>2</sup>	X1 <sup>2</sup> X3 <sup>2</sup>	X2 <sup>2</sup> X3 <sup>2</sup>	X1 <sup>3</sup>	X2 <sup>3</sup>	X3 <sup>3</sup>	
X1	1																					
X2	0	1																				
X3	0	0	1																			
X1*X2	0	0	0	1																		
X1*X3	0	0	0	0	1																	
X2*X3	0	0	0	0	0	1																
X1^2	0	0	0	0	0	0	1															
X2^2	0	0	0	0	0	0	-0.287	1														
X3^2	0	0	0	0	0	0	-0.287	-0.287	1													
X1^2*X2	0	0.679	0	0	0	0	0	0	0	1												
X1^2*X2^2	0.679	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1											
X1^2*X3	0	0	0.679	0	0	0	0	0	0	0	0	1										
X1^2*X3^2	0.679	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	1									
X2^2*X3	0	0	0.679	0	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	1								
X2^2*X3^2	0	0.679	0	0	0	0	0	0	0	0.667	0	0	0	0	1							
X1^2*X2^2	0	0	0	0	0	0	0.170	0.170	-0.097	0	0	0	0	0	0	1						
X1^2*X3^2	0	0	0	0	0	0	0.170	-0.097	0.170	0	0	0	0	0	0	0.476	1					
X2^2*X3^2	0	0	0	0	0	0	-0.097	0.170	0.170	0	0	0	0	0	0	0.476	0.476	1				
X1^3	0.812	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.287	0	0.287	0	0	0	0	0	0	1		
X2^3	0	0.812	0	0	0	0	0	0	0	0.287	0	0	0	0	0.287	0	0	0	0	0	1	
X3^3	0	0	0.812	0	0	0	0	0	0	0	0	0.287	0	0.287	0	0	0	0	0	0	0	1

### 3.7 Box-Behnken Versuch

Die Box-Behnken sind sehr beliebt, benötigen sie doch vergleichsweise wenig Versuchspunkt. Sie sind flächen-zentrierte Versuchspläne und für quadratische Modelle gut geeignet. Diese Versuchspläne erlauben allerdings keine Versuche in der Ecken des Versuchsraumes. Der Versuchsplan basiert auf den Einstellungen -1, 0, 1. Box-Behnken Versuchspläne sind angenähert drehbar und orthogonal. Die Versuchspläne nach Box-Behnken werden in der Regel nicht wiederholt.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1^2	X2^2	X3^2
X1	1								
X2	0	1							
X3	0	0	1						
X1X2	0	0	0	1					
X1X3	0	0	0	0	1				
X2X3	0	0	0	0	0	1			
X1^2	0	0	0	0	0	0	1		
X2^2	0	0	0	0	0	0	-0.071	1	
X3^2	0	0	0	0	0	0	-0.071	-0.071	1

### 3.8 Box-Behnken Versuch mit Sternpunkten

Box-Behnken Versuchspläne lassen sich mit Sternpunkten für die Berechnung kubischer Modelle erweitern. Das Alpha ist mindestens 2. Durch die Sternpunkte und die kubischen Wirkungen werden die guten Eigenschaften des ursprünglichen Versuchsplanes zerstört.

	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1^2	X2^2	X3^2	X1^3	X2^3	X3^3
X1	1											
X2	0	1										
X3	0	0	1									
X1X2	0	0	0	1								
X1X3	0	0	0	0	1							
X2X3	0	0	0	0	0	1						
X1^2	0	0	0	0	0	0	1					
X2^2	0	0	0	0	0	0	-0.295	1				
X3^2	0	0	0	0	0	0	-0.295	-0.295	1			
X1^3	0.857	0	0	0	0	0	0	0	0	1		
X2^3	0	0.857	0	0	0	0	0	0	0	0	1	
X3^3	0	0	0.857	0	0	0	0	0	0	0	0	1

### 3.9 Beispiel für RSM

In einer Studie ist der Einfluss verschiedener unabhängiger Variabler (Faktoren)

Faktoren	Minimum	Maximum
X1 Drehzahl (min <sup>-1</sup> )	10000	15000
X2 Dauer (min)	10	15
X3 Tenside-Konzentration (%)	1	1.25
X4 Polymer-Konzentration (mg/mL)	3	6

auf die abhängigen Variablen (Antwortgrößen)

Antwortgröße	Optimum
PG, Partikelgröße (nm),	kleiner ist besser
ZP, Zeta-Potential (mV),	kleiner ist besser
WF, Wirkstoff-Freisetzung (%)	größer ist besser
EW, Einschlusswirksamkeit (%),	größer ist besser

mit Hilfe eines Box-Behnken zu bewerten und zu optimieren. Basierend auf dem Box-Behnken Design wurden die Chargen mit der entsprechenden Faktoren eingestellt und gemessen wurden die Partikelgröße, das Zeta-Potenzial, die kumulative Wirkstoff-Freisetzung(%) und die Einschlusswirksamkeit(%).

Testdurchführung Matrix								
Versuch	Drehzahl	Dauer	Tenside	Polymer	EW	WF	ZP	PG
1	10000	10	1.125	4.5	59.09	74.28	-25.71	351
17	12500	10	1.125	3	30.59	97.59	-24.9	201
12	15000	12.5	1.125	6	71.69	58.37	-15.47	178
4	15000	15	1.125	4.5	63.26	77.36	-22.78	146
29	12500	12.5	1.125	4.5	53.99	80.64	-19.59	239
13	12500	10	1	4.5	55.08	78.85	-21.73	264
23	12500	12.5	1	6	70.37	49.19	-12.55	266
18	12500	15	1.125	3	45.62	84.66	-29.26	275
2	15000	10	1.125	4.5	47.55	81.1	-20.09	219
8	15000	12.5	1.25	4.5	60.06	78.94	-21.19	162
15	12500	10	1.25	4.5	50.69	73.87	-19.08	228
11	10000	12.5	1.125	6	66.64	52.92	-15.28	394
6	15000	12.5	1	4.5	52.24	74.09	-20.53	224
14	12500	15	1	4.5	56.67	75.04	-25	266
26	12500	12.5	1.125	4.5	53.21	73.74	-22.37	241
7	10000	12.5	1.25	4.5	57.26	77.27	-26.32	425
24	12500	12.5	1.25	6	70.3	58.27	-16.49	221
25	12500	12.5	1.125	4.5	52.19	75.26	-22.64	244
22	12500	12.5	1.25	3	44.61	88.26	-29.93	264
10	15000	12.5	1.125	3	42.12	90.83	-22.44	189
3	10000	15	1.125	4.5	52.1	68.51	-23.75	425
20	12500	15	1.125	6	70.69	50.26	-18.35	205
19	12500	10	1.125	6	69.54	54.18	-18.61	260
5	10000	12.5	1	4.5	56.16	66.45	-22.91	397
27	12500	12.5	1.125	4.5	53.26	73.61	-23.4	241
28	12500	12.5	1.125	4.5	52.68	76.17	-23.3	236
16	12500	15	1.25	4.5	64.62	74.11	-25.5	232
21	12500	12.5	1	3	36.28	84.95	-25.15	237
9	10000	12.5	1.125	3	45.4	86.96	-27.16	383

Folgend werden die verkürzten Analysen der vier Antwortgrößen ausgegeben.

Regressionsstatistiken für EW									
				Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert
Anz. Beob.:	29								
Anz. fehl. Beob.:	0			TSS	3062.45806897	28	109.37350246		
R <sup>2</sup> :	0.98244250			RSS	3008.68895618	11	273.51717783	86.47700850	0.00000000
St.Abw. Error:	1.77845129			Error	53.76911278	17	3.16288899		
AIC_ols:	41.90469745			LoF	51.94059278	13	3.99543021	8.74024941	0.02486940
BIC_ols:	58.31224741			pure Error	1.82852000	4	0.45713000		
Variable	Koeffizient	SE	t SE	p SE	VIF				
Konstante	53.91159091	0.53622324	100.53945250	0.00000000					
Dauer	3.36833333	0.51339467	6.56090443	0.00000242	1.00000000				
Tenside	1.72833333	0.51339467	3.36648090	0.00183204	1.00000000				
Polymer	14.55083333	0.51339467	28.34239294	0.00000000	1.00000000				
X1X2	5.67500000	0.88922564	6.38195720	0.00000341	1.00000000				
X1X3	1.68000000	0.88922564	1.88928424	0.03801701	1.00000000				
X1X4	2.08250000	0.88922564	2.34192526	0.01580931	1.00000000				
X2X3	3.08500000	0.88922564	3.46931065	0.00146640	1.00000000				
X2X4	-3.47000000	0.88922564	-3.90227162	0.00057302	1.00000000				
X3X4	-2.10000000	0.88922564	-2.36160531	0.01519608	1.00000000				
X1^2	1.64036932	0.67694866	2.42318129	0.01341815	1.01920063				
X3^2	1.73661932	0.67694866	2.56536342	0.01003243	1.01920063				
<b>Prüfung auf Normalität</b>									
							AD-Test:	0.94044318	0.01726905
<b>Prüfung auf Heteroskedastizität</b>									
							BP-Test:	3.27986968	0.07013450

Regressionsstatistiken für ZP									
		Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert		
Anz. Beob.:	29	TSS	475.84760000	28	16.99455714				
Anz. fehl. Beob.:	0	RSS	406.20864025	7	58.02980575	17.49919765			0.00000019
R <sup>2</sup> :	0.85365281	Error	69.63895975	21	3.31614094				
St.Abw. Error:	1.82102744	LoF	59.97235975	17	3.52778587	1.45978353			0.38796776
AIC_ols:	41.40482207	pure Error	9.66660000	4	2.41665000				
BIC_ols:	52.34318871								
Variable	Koeffizient	SE	p_SE	t_SE	VIF	Prüfung auf Normalität			
Konstante	-22.15613636	0.54906043	0.00000000	-40.35281922		AD-Test:	0.54397114		0.16230129
Drehzahl	1.55250000	0.52568534	0.00379437	2.95328760	1.00000000				
Dauer	-1.21000000	0.52568534	0.01584272	-2.30175716	1.00000000				
Tenside	-0.88666667	0.52568534	0.05323204	-1.68668707	1.00000000				
Polymer	5.17416667	0.52568534	0.00000000	9.84270676	1.00000000				
X1X4	-1.22750000	0.91051372	0.09598817	-1.34834004	1.00000000				
X2^2	-1.15446023	0.69315482	0.05532954	-1.66551569	1.01920063				
X4^2	1.24178977	0.69315482	0.04381823	1.79150421	1.01920063	BP-Test:	0.11215313		0.73770602
Regressionsstatistiken für WF									
		Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert		
Anz. Beob.:	29	TSS	4208.26370345	28	150.29513227				
Anz. fehl. Beob.:	0	RSS	4017.00017257	6	669.50002876	77.00893403			0.00000000
R <sup>2</sup> :	0.95455049	Error	191.26353088	22	8.69379686				
St.Abw. Error:	2.94852452	LoF	158.40501088	18	8.80027838	1.07129334			0.53321297
AIC_ols:	68.70433531	pure Error	32.85852000	4	8.21463000				
BIC_ols:	78.27540612								
Variable	Koeffizient	SE	t_SE	p_SE	VIF	Prüfung auf Normalität			
Konstante	75.25235294	0.71512224	105.23005571	0.00000000		AD-Test:	0.18388719		0.90955084
Drehzahl	2.85833333	0.85116571	3.35813965	0.00142056	1.00000000				
Dauer	-2.49416667	0.85116571	-2.93029504	0.00387335	1.00000000				
Tenside	1.84583333	0.85116571	2.16859456	0.02059968	1.00000000				
Polymer	-17.50500000	0.85116571	-20.56591299	0.00000000	1.00000000				
X2X4	2.25250000	1.47426226	1.52788283	0.07039629	1.00000000				
X4^2	-3.88235294	1.11170270	-3.49225827	0.00103102	1.00000000	BP-Test:	0.01128996		0.91538064
Regressionsstatistiken für PG									
		Ursache	SSQ	FG	MSS	F-Stat	p-Wert		
Anz. Beob.:	29	TSS	164431.24137931	28	5872.54433498				
Anz. fehl. Beob.:	0	RSS	163614.37868992	9	18179.37540999	422.84723892			0.00000000
R <sup>2</sup> :	0.99503219	Error	816.86268939	19	42.99277313				
St.Abw. Error:	6.55688746	LoF	651.56268939	11	59.23297176	2.86668950			0.07284090
AIC_ols:	116.80708033	pure Error	165.30000000	8	20.66250000				
BIC_ols:	130.48003863								
Variable	Koeffizient	SE	t_SE	p_SE	VIF	Prüfung auf Normalität			
Konstante	236.70454545	1.97697595	119.73061435	0.00000000		AD-Test:	0.51404690		0.19271098
Drehzahl	-104.75000000	1.89281037	-55.34099015	0.00000000	1.00000000				
Tenside	-10.16666667	1.89281037	-5.37120191	0.00001747	1.00000000				
X1X2	-36.75000000	3.27844373	-11.20958694	0.00000000	1.00000000				
X1X3	-22.50000000	3.27844373	-6.86301241	0.00000075	1.00000000				
X1X4	-5.50000000	3.27844373	-1.67762526	0.05489723	1.00000000				
X2X4	-32.25000000	3.27844373	-9.83698446	0.00000000	1.00000000				
X3X4	-18.00000000	3.27844373	-5.49040993	0.00001345	1.00000000				
X1^2	50.37784091	2.49580980	20.18496798	0.00000000	1.01920063				
X3^2	12.00284091	2.49580980	4.80919696	0.00006096	1.01920063	BP-Test:	1.55599366		0.21225279

Zur Optimierung müssen nun die Funktionen für die vier Zielgrößen definiert werden, dazu sind einige Vorbereitungen zu treffen. Unter Verwendung von Excel ist es einfach die Funktionen zu erstellen. Wir kopieren die Namen und Koeffizienten in ein Excel-Blatt, dort fügen wir in einer weiteren Spalte das Multiplikation-Zeichen ein. Im nächsten Schritt akkumulieren wir die Ergebnisse der Zeilen. Diesen Algorithmus

kopieren wir nun in die vorbereitete Funktion. Die Ergebnisse werden folgend dargestellt.

```
Public Function EW(X1, X2, X3, X4) As Double
EW = 53.91159091
EW = EW + 3.36833333 * X2
EW = EW + 1.72833333 * X3
EW = EW + 14.55083333 * X4
EW = EW + 5.675 * X1 * X2
EW = EW + 1.68 * X1 * X3
EW = EW + 2.0825 * X1 * X4
EW = EW + 3.085 * X2 * X3
EW = EW + -3.47 * X2 * X4
EW = EW + -2.1 * X3 * X4
EW = EW + 1.64036932 * X1 ^ 2
EW = EW + 1.73661932 * X3 ^ 2
End Function
```

```
Public Function WF(X1, X2, X3, X4) As Double
WF = 75.25235294
WF = WF + 2.85833333 * X1
WF = WF + -2.49416667 * X2
WF = WF + 1.84583333 * X3
WF = WF + -17.505 * X4
WF = WF + 2.2525 * X2 * X4
WF = WF + -3.88235294 * X4 ^ 2
End Function
```

```
Public Function ZP(X1, X2, X3, X4) As Double
ZP = -22.15613636
ZP = ZP + 1.5525 * X1
ZP = ZP + -1.21 * X2
ZP = ZP + -0.88666667 * X3
ZP = ZP + 5.17416667 * X4
ZP = ZP + -1.2275 * X1 * X4
ZP = ZP + -1.15446023 * X2 ^ 2
ZP = ZP + 1.24178977 * X4 ^ 2
End Function
```

Public Function PG(X1, X2, X3, X4) As Double

PG = 236.70454545

PG = PG + -104.75 \* X1

PG = PG + -10.16666667 \* X4

PG = PG + -36.75 \* X1 \* X2

PG = PG + -22.5 \* X1 \* X3

PG = PG + -5.5 \* X1 \* X4

PG = PG + -32.25 \* X2 \* X4

PG = PG + -18# \* X3 \* X4

PG = PG + 50.37784091 \* X1 ^ 2

PG = PG + 12.00284091 \* X3 ^ 2

End Function

So gerüstet steht der Optimierung nichts mehr im Wege.

Definition der Zielwerte und Berechnung des Optimums									
Zielgrößenwerte					Optimierungsergebnis				
Zielgrößen	Ymin	Y1	Zielwert	Y2	Ymax	Kenngrößen		Werte	
EW	50	72.5	70			Anzahl der Zielgrößen		4	
WF	60	83	80			Produktsumme ind. Wunschwerte		0.96258629	
ZP			-25	-26	-20	<b>aggregierter Wunschwert</b>			
PG			200	215	300				
						<b>0.990512404</b>			
Funktionen zur Ermittlung der Wunschfunktion									
Zielgrößen	steigende Gerade		Approximations-Polynom 4-ten Grades					fallende Gerade	
	a1	b1	A	B	C	D	E	a2	b2
EW	-2.5	0.05							
WF	-3	0.05							
ZP								-4	-0.2
PG								3	-0.01
Start- und Ergebniswerte					Definiton der Zielgrößen und Wunschwerte				
Faktoren	cod. Fak.	reale Fak.	Schrittweite	Zentrum	Zielgrößen	opt. Richt.	Antwort	Bezeichner	Wunschwert
Drehzahl	1	15000	2500	12500	EW	größer	69.2517259	1	0.9625863
Dauer	1	15	2.5	12.5	WF	größer	81.9839417	2	1
Tenside	1	1.25	0.125	1.125	ZP	kleiner	-25	3	1
Polymer	-0.32300575	4.01549137	1.5	4.5	PG	kleiner	156.37669	4	1