

Statistical Consulting

Fallstudie: Does It Have Good Taste?

Stefan Englert

13. November 2008

Inhaltsübersicht

Überblick

Versuchsbeschreibung

Central Composite Desing

Faktorielle Experimente

Composite Designs

Aliasing

Confounding

Die Daten

Response Surface Methode

First-Order Modell

Second-Order Modell

Praktische Überlegungen

Analyse der Daten

Literaturhinweise

Überblick

Im Folgenden beschreiben wir die Fallstudie 7.2 aus *Cabrera und McDougall, Andrew (2002) - Statistical consulting - Springer*. Einen Überblick über die angewandten Methoden und die vorliegende Datenbasis liefert die folgende Tabelle.

Methoden	Factorial Design Centerpoint Design
Daten	5 Design Faktoren 4 Antwortvariablen

Tabelle: Verwendete Methoden und vorliegende Datenbasis

Diese Fallstudie beschreibt beispielhaft eine Form der Qualitätsoptimierung.

Speziell in dieser Fallstudie spielt auch das Vertrauen des Klienten mit den statistischen Methoden und den dahinter liegenden Ideen eine wichtige Rolle, denn nur so war es möglich sinnvolle Annahmen zu treffen, die erst zu einem vernünftigen Versuchsdesign führen konnten.

Ein Schwerpunkt liegt hier also im Finden eines geeigneten und praktikablen Versuchsdesigns, durch das dann erst sinnvolle Auswertungen möglich sind.

Versuchsbeschreibung

In dieser Fallstudie wird beispielhaft eine Auswertung von vorgegebenen Daten durchgeführt.

In diesem Fallbeispiel möchte der Klient verschiedene messbare Parameter eines Nahrungsmittels wie Farbe, Beschaffenheit, Wassergehalt usw. bestimmen und später in geeigneter Hinsicht optimieren.

Das Nahrungsmittel, bei dem es sich wohl um eine Art Müsliriegel handelt, wurde dabei von einer Maschine hergestellt, die unter verschiedenen Einstellungen arbeiten kann.

So konnten die Ofentemperatur, die Menge an zugeführtem Wasser und Farbstoff sowie einige andere Parameter verändert werden.

Für jeden Faktor gab es immer mindestens drei Level oder Faktorstufen, die für den Klienten von Interesse waren, was zu mehreren Tausend Faktorkombinationen führen würde.

Deshalb war es schon von der Versuchsdurchführung oder Entwicklung eines Versuchsdesigns wichtig, den Klienten darauf aufmerksam zu machen, dass er sich auf einige wenige – aber besonders wichtige – Faktoren beschränken müsse.

Faktoren mit zugehörigen Faktorstufen

Der Klient schränkte sich daraufhin auf die folgenden Faktoren und zugehörigen Faktorstufen ein:

	Factors	Factor Levels				
A	Screw Speed (rpm)	550	590	625	665	770
B	Base Rate (lbs)	1,5	1,7	1,9	2,1	2,3
E	Water Added (%)	14	17	20	23	26
G	Dye Added (%)	0,00	0,75	1,5	2,25	3,00
H	Temperature (°F)	240	255	270	285	300

Tabelle: Faktoren mit zugehörigen Faktorstufen

Auch diese Auswahl an Faktoren und Faktorstufen würde uns immer noch

$$5^5 = 3125$$

mögliche Kombinationsmöglichkeiten liefern.

Der Klient konnte jedoch lediglich zwei Versuche pro Woche durchführen.

Dies war der Hauptgrund, warum ein alternatives Versuchsdesign gefunden werden musste.

Zielgrößen

Unser Klient möchte, dass sein Produkt nicht nur „gut schmeckt“, sondern auch andere Eigenschaften erfüllt.

Im Speziellen möchte unser Klient die folgenden Eigenschaften maximieren:

- ▶ Density (Beschaffenheit)
- ▶ Tickness (Dicke)
- ▶ Moisture (Feuchtigkeit)
- ▶ Flavor (Geschmack)

Diese Größen sollen deshalb für jede Faktorkombination bestimmt werden.

Iteratives Versuchsdesign

Durch die geringe Anzahl an Versuchen, die durchgeführt werden können, ist es notwendig ein iteratives Versuchsdesign anzuwenden.

Zuerst wird durch Überblicksversuche versucht die ungefähre Lage dieser Maxima zu schätzen. Ein dazu geeignetes Verfahren ist das *Central Composite Design*, welches im Folgenden vorgestellt wird.

Mit den aus diesen Versuchen erhaltenen Erkenntnissen können dann, falls dies gewünscht ist, weitere Versuche in der Nähe dieser so ermittelten Extrempunkte durchgeführt werden, um diese noch genauer zu bestimmen.

Wiederholung: Faktorielle Experimente vom Typ 2^k

In einem faktoriellen Experiment vom Typ 2^k nimmt jeder der k Faktoren genau zwei Stufen oder Level an, insgesamt ergeben sich 2^k mögliche Kombinationen.

Dadurch bleibt das Versuchsdesign übersichtlich, weshalb faktorielle 2^k -Versuche sehr häufig verwendet werden.

Verallgemeinerung

Bei einem 3^k Design nimmt jeder der k Faktoren genau drei Stufen an, diese werden meist mit *niedrig*, *mittel* und *hoch* bezeichnet. Insgesamt ergeben sich hier 3^k mögliche Kombinationen.

Dies lässt sich analog beliebig erweitern.

Wir könnten unser Fallbeispiel als 5^k Design mit $k = 5$ Faktoren betrachten, da jeder unserer fünf Faktoren genau fünf Level annimmt.

Faktoren mit zugehörigen codierten Faktorstufen

	Factors	Factor Levels				
A	Screw Speed (rpm)	-2	-1	0	1	2
B	Base Rate (lbs)	-2	-1	0	1	2
E	Water Added (%)	-2	-1	0	1	2
G	Dye Added (%)	-2	-1	0	1	2
H	Temperature (°F)	-2	-1	0	1	2

Tabelle: Faktoren mit zugehörigen codierten Faktorstufen

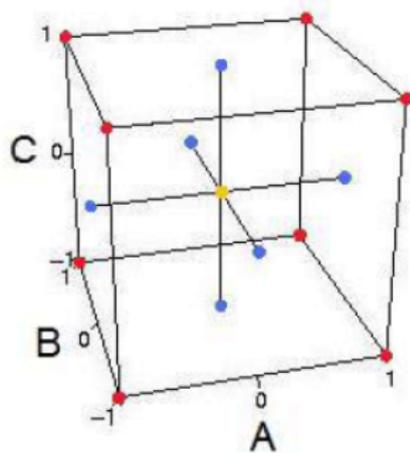
Wiederholung: Composite Design

Sehr oft wird auch das **Central Composite Design** (CCD) verwendet, da es effizienter als ein 3^k oder höherwertiges Experiment ist.

Bestandteile:

- ▶ Behandlungen des vollständigen 2^k -Designs
- ▶ *centre point*
Behandlung, bei der alle Faktoren den Mittelwert der Faktorstufen im 2^k -Design annehmen
- ▶ *star points* oder *axial points*
Behandlungen, bei denen alle Faktoren mit dem centre point übereinstimmen bis auf einen, dessen Stufe auch über die Stufe im 2^k -Experiment hinausgehen kann.

Veranschaulichung



2^k -Design

centre point

star points

Abbildung: Veranschaulichung eines Central Composing Design für drei Faktoren A, B und C mit jeweils drei Faktorstufen.

Axial und Center Points im Fallbeispiel

Axial Points				
A	B	E	G	H
-2	0	0	0	0
+2	0	0	0	0
0	-2	0	0	0
0	+2	0	0	0
0	0	-2	0	0
0	0	+2	0	0
0	0	0	-2	0
0	0	0	+2	0
0	0	0	0	-2
0	0	0	0	+2

Tabella: Axial Punkte des Central Composite Designs

Center Points				
A	B	E	G	H
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

Tabelle: Center Punkte des Central Composite Designs

2^k Design im Fallbeispiel

2^k				
A	B	E	G	H
-1	-1	-1	-1	-1
+1	-1	-1	-1	-1
-1	+1	-1	-1	-1
+1	+1	-1	-1	-1
-1	-1	+1	-1	-1
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
+1	+1	+1	+1	+1

Tabelle: 2^k Design des Central Composite Designs

2^k Design im Fallbeispiel

2^k					
A	B	E	G	H	Bezeichnung
-1	-1	-1	-1	-1	(1)
+1	-1	-1	-1	-1	a
-1	+1	-1	-1	-1	b
+1	+1	-1	-1	-1	ab
-1	-1	+1	-1	-1	e
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
+1	+1	+1	+1	+1	abegh

Table: 2^k Design des Central Composite Designs inkl. Beschriftungen

Für dieses vollständige 2^k Design wären also 32 Versuche notwendig. Zusammen mit den 10 Axial Points und den 4 Center Points wären also insgesamt 46 Versuche notwendig.

Diese Anzahl möchte und kann unser Klient nicht herstellen.

Deshalb soll im Folgenden durch *Aliasing* kein vollständiges sondern nur ein halbes 2^k Design durchgeführt werden.

Wiederholung: Factorial Experiments

Es bezeichne nun $Y_{(1)}, Y_a, Y_b, \dots, Y_{abegh}$ den beobachteten Wert einer Antwortvariablen bei der entsprechenden Faktorkombination eines 2^k Designs.

Wiederholung: Factorial Experiments

Es bezeichne nun $Y_{(1)}, Y_a, Y_b, \dots, Y_{abegh}$ den beobachteten Wert einer Antwortvariablen bei der entsprechenden Faktorkombination eines 2^k Designs.

Haupt- und Interaktionseffekte der Faktoren können nun durch geeignete Differenzenbildung (lineare Kontraste) geschätzt werden:

Wiederholung: Factorial Experiments

Es bezeichne nun $Y_{(1)}, Y_a, Y_b, \dots, Y_{abegh}$ den beobachteten Wert einer Antwortvariablen bei der entsprechenden Faktorkombination eines 2^k Designs.

Haupt- und Interaktionseffekte der Faktoren können nun durch geeignete Differenzenbildung (lineare Kontraste) geschätzt werden:

$$\hat{A} =$$

Wiederholung: Factorial Experiments

Es bezeichne nun $Y_{(1)}, Y_a, Y_b, \dots, Y_{abegh}$ den beobachteten Wert einer Antwortvariablen bei der entsprechenden Faktorkombination eines 2^k Designs.

Haupt- und Interaktionseffekte der Faktoren können nun durch geeignete Differenzenbildung (lineare Kontraste) geschätzt werden:

$$\begin{aligned}\hat{A} = & \frac{1}{16}(Y_a + Y_{ab} + Y_{ae} + Y_{abe} + Y_{ag} + Y_{abg} + Y_{aeg} + Y_{abeg} \\ & + Y_{ah} + Y_{abh} + Y_{aeh} + Y_{abeh} + Y_{agh} + Y_{abgh} + Y_{abegh}) \\ - & \frac{1}{16}(Y_{(1)} + Y_b + Y_e + Y_{be} + Y_g + Y_{bg} + Y_{eg} + Y_{beg} \\ & + Y_h + Y_{bh} + Y_{eh} + Y_{beh} + Y_{gh} + Y_{bgh} + Y_{egh} + Y_{begh})\end{aligned}$$

Effekt	(1)	A	B	A B	E	A E	B E	A B E	G	A G	B G	A B G	E G	A E G	B E G	A B E G	H	A H	B H	A B H	E H	A E H	B E H	A B E H	G H	A G H	B G H	A B G H	E G H	A E G H	B E G H	A B E G H
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1

Abbildung: Schätzung des linearen Kontrastes von A

Effekt	(t)	A	B	A B	E	A E	B E	A B E	G	A G	B G	A B G	E G	A E G	B E G	A B E G	H	A H	B H	A B H	E H	A E H	B E H	A B E H	G H	A G H	B G H	A B G H	E G H	A E G H	B E G H	A B E G H		
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1		
B	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1		
AB	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
E	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1		
AE	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1		
BE	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1		
ABE	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1		
G	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1		
AG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
EG	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEG	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BEG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABEG	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
EH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BEH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABEH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
GH	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
ABGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
EGH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEGH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BEGH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABEGH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1

Abbildung: Schätzung der linearen Kontraste

Wiederholung: Teilweise faktorielles Versuchsdesign vom Typ 2^{k-p}

Ist man bei einem Versuch nicht an der Schätzung aller Effekte interessiert oder stehen nicht genügend Ressourcen zur Verfügung, so bietet es sich an, nur einen Teil (genauer: ein 2^p -tel) des vollständigen 2^k -Experiments durchzuführen.

⇒ Fraktioniertes Experiment vom Typ 2^{k-p}

Wegen der geringeren Anzahl an Beobachtungen können die Effekte nicht unabhängig voneinander geschätzt werden, sie sind **aliased** (= vermengt).

Fallbeispiel

Aus Kostengründen können nun nicht alle 32 Kombinationen produziert werden, deshalb soll nicht das vollständige 2^5 -Experiment durchgeführt werden, sondern nur 2^4 Kombinationen.

⇒ teilweise faktorieller Versuch vom Typ 2^{5-1}

Wahl *eines* Effekts, auf dessen Schätzung verzichtet werden kann ("**Generator**"). Dies sei zum Beispiel ABEGH. Die Berechnung von $AB\hat{E}GH$ teilt die Behandlungen in zwei Gruppen ein.

Im fraktionierten Versuch wird nun nur eine der beiden Gruppen (der Größe 16) durchgeführt.

Datenblatt

Effekt	(1)	A	B	A B	E	A E	B E	A B E	G	A G	B G	A B G	E G	A E G	B E G	A B E G	H	A H	B H	A B H	E H	A E H	B E H	A B E H	G H	A G H	B G H	A B G H	E G H	A E G H	B E G H	A B E G H	
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
B	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
AB	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
E	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AE	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABE	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	
G	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
EG	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
AEG	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
BEG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABEG	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	
ABH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	
EH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
AEH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
BEH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
ABEH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
GH	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
BGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1
ABGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
EGH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
AEGH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1
BEGH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1
ABEGH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1

Abbildung: Schätzung der linearen Kontraste

Auswahl des Generators

Effekt	(t)	A	B	A B	E	A E	B E	A B E	G	A G	B G	A B G	E G	A E G	B E G	A B E G	H	A H	B H	A B H	E H	A E H	B E H	A B E H	G H	A G H	B G H	A B G H	E G H	A E G H	B E G H	A B E G H	
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
B	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
AB	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
E	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AE	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	
ABE	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
G	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
EG	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AEG	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABEG	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
BH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
ABH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
EH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AEH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
ABEH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
GH	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
BGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
ABGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
EGH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
AEGH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
BEGH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
ABEGH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1

Abbildung: Schätzung der linearen Kontraste mit hervorgehobenem Generator (blau)

Auswahl des Generators

Effekt	(1)	A	B	A B	E	A E	B E	A B E	G	A G	B G	A B G	E G	A E G	B E G	A B E G	H	A H	B H	A B H	E H	A E H	B E H	A B E H	G H	A G H	B G H	A B G H	E G H	A E G H	B E G H	A B E G H	
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
B	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
AB	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
E	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AE	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABE	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
AG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	
ABG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EG	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEG	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
BEG	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
ABEG	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
AH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
BH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
ABH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
EH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
AEH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1
BEH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
ABEH	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
GH	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1
AGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
BGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1
ABGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1
EGH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
AEGH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
BEGH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
ABEGH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1

Abbildung: Schätzung der linearen Kontraste mit hervorgehobenen Versuchen, in denen sich der Generator auf hohem Niveau „1“ befindet

Auswahl des 2^4 oder Halben 2^5 Designs

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	Alias
A	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	BEGH
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	AEGH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	ABGH
AE	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	
BE	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EG	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEG	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG
AH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	
BGH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	
BEGH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

Abbildung: Ausgewähltes 2^4 oder Halbes 2^5 Design inkl. Vermerkung der aliasing Effekte

Aliasing

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	Aliasing
A	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	BEGH
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	AEGH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	ABGH
AE	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BE	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EG	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG
AH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BGH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEGH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

Abbildung: Ausgewähltes 2^4 oder Halbes 2^5 Design mit Hervorhebung des Aliasing zwischen A und BEGH

Wiederholung: Confounding

Wird der Versuch mangels homogenem Versuchsmaterial in Blöcken durchgeführt, müssen die Behandlungskombinationen so auf die Blöcke verteilt werden, dass die Blockunterschiede keinen Einfluss auf die interessierenden Effekte haben.

So kann z.B. die Qualität eines Produktes davon abhängen in welcher Woche es hergestellt wurde. Dann tritt die Aufteilung in die verschiedenen Wochen als Blockeffekt auf.

Dadurch werden gewisse Wechselwirkungen weniger genau untersucht als andere, da diese mit den Blockunterschieden **vermengt** werden, d.h die Schätzung ist von den Blockunterschieden beeinflusst (**Confounding**).

Fallbeispiel

Unser Klient kann lediglich zwei Versuche pro Woche durchführen. Deshalb ist es notwendig die verbleibenden 16 Kombinationen in acht Blöcken zu je zwei Versuchen einzuteilen.

Es erscheint sinnvoll, dass die Faktoren

- ▶ **B** (Base Rate)
- ▶ **E** (Water Added)
- ▶ **G** (Dye Added)

weniger von den Blockeffekten beeinflusst werden. Deshalb wird das Confounding nach diesen drei Variablen durchgeführt.

Ausgewähltes 2^4 oder Halbes 2^5 Design

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	Aliased
A	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	BECH
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	AEGH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	ABGH
AE	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
EG	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG
AH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BGH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEGH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

Abbildung: Ausgewähltes 2^4 oder Halbes 2^5 Design

Confounding nach Faktor G (Dye Added)

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	
A	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	Aliased
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	BEGH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	AEHG
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	ABGH
AE	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EG	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG
AH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BGH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEHG	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	
BEGH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

Abbildung: Confounding nach Faktor G (Dye Added)

Confounding nach Faktor E (Water Added)

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	Aliased
A	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1		BECH
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		AEGH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1		
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1		ABGH
AE	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1		
BE	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1		
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1		
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1		
EG	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1		
AEG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1		
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1		
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1		ABEG
AH	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1		
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1		
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1		
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1		
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1		
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1		
BGH	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1		
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1		
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1		
AEGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
BEGH	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1		
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		

Abbildung: Confounding nach Faktor E (Water Added)

Confounding nach Faktor B (Base Rate)

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	Aliased
A	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	BEGH
B	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	AECH
AB	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	ABGH
AE	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BE	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	
ABE	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	ABEH
AG	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
BG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	
ABG	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	
EG	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	
AEG	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	
BEG	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
ABEG	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG
AH	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	
BH	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	
ABH	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
EH	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	
AEH	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
BEH	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
ABEH	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	
GH	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AGH	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	
BGH	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	
ABGH	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	
EGH	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
AEGH	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	
BEGH	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
ABEGH	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

Abbildung: Confounding nach Faktor B (Base Rate)

Haupteffekte

Effekt	A	B	E	A B E	G	A B G	A E G	B E G	H	A B H	A E H	B E H	A G H	B G H	E G H	A B E G H	<u>Aliased</u>
A	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	BEGH
B	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	AEGH
E	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	ABGH
G	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	ABEH
H	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEG

Abbildung: Berechnung der linearen Kontraste der Haupteffekte

Aufteilen in Blöcke

Effekt	H	A	B	A B H	E	A E H	B E H	A B E	G	A G H	B G H	A B G	E G H	A E G	B E G	A B E G H	Aliased
A	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	BEGH
B	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	AEGH
E	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	ABGH
G	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	ABEH
H	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	ABEG

Abbildung: Berechnung der linearen Kontraste der Haupteffekte sortiert nach Blöcken

Central Composite Design

Das so bestimmte Central Composite Design besteht aus einem 2^{5-1} Factorial Design zusammen mit 10 Axial Points und 4 Center Points.

Insgesamt müssen also nur noch 30 Versuche durchgeführt werden.

Die Daten

Es wurden nun zu jeder dieser Faktorkombination die vier Zielvariablen (Outputs) bestimmt.

Die Ergebnisse dieser Messungen zeigt diese Tabelle:

Factorial (2 ⁵ Half Rep.)					Outputs			
A	B	E	G	H	Density	Thickness	Mouisture	Flavor
590	1,7	17	0,75	285	197,725	0,18350	11,300	337
665	1,7	17	0,75	255	187,940	0,19565	11,175	340
590	2,1	17	0,75	255	198,290	0,21460	11,125	337
665	2,1	17	0,75	285	184,620	0,22895	11,050	339
590	1,7	23	0,75	255	303,340	0,16855	14,000	326
665	1,7	23	0,75	285	280,615	0,16540	13,600	329
590	2,1	23	0,75	285	280,265	0,19550	13,525	326
665	2,1	23	0,75	255	269,440	0,19385	13,375	329
590	1,7	17	2,25	255	218,215	0,19575	11,575	333
665	1,7	17	2,25	285	202,620	0,22005	11,125	338
590	2,1	17	2,25	285	220,495	0,22495	11,150	337
665	2,1	17	2,25	255	214,700	0,22175	11,425	339
590	1,7	23	2,25	285	314,415	0,15585	13,975	321
665	1,7	23	2,25	255	306,810	0,16190	13,775	322
590	2,1	23	2,25	255	315,135	0,18230	13,900	320
665	2,1	23	2,25	285	290,955	0,19585	13,300	325

Axial Points								
A	B	E	G	H	Density	Thickness	Mouisture	Flavor
550	1,9	20	1,50	270	265,405	0,18465	12,625	329
700	1,9	20	1,50	270	238,715	0,19395	12,200	334
625	1,5	20	1,50	270	245,055	0,15345	12,525	331
625	2,3	20	1,50	270	243,790	0,20715	12,225	331
625	1,9	14	1,50	270	167,655	0,22575	9,750	341
625	1,9	26	1,50	270	336,835	0,16625	14,575	324
625	1,9	20	0,00	270	224,930	0,18630	12,025	336
625	1,9	20	3,00	270	261,510	0,18990	13,125	331
625	1,9	20	1,50	240	255,015	0,19100	12,625	330
625	1,9	20	1,50	300	246,800	0,21305	12,275	331
Center Points								
625	1,9	20	1,50	270	2,53840	0,18490	12,625	331
625	1,9	20	1,50	270	248,495	0,18800	12,675	333
625	1,9	20	1,50	270	237,240	0,19405	12,325	339
625	1,9	20	1,50	270	247,310	0,20325	12,600	332

Ziel

Das Ziel dieser Untersuchung ist es herauszufinden welche Kombination der Faktorstufen der Faktoren A, B, E, G und H die Zielvariablen maximiert.

Um dieses Problem zu untersuchen wenden wir die *Response Surface Methode* an.

Response Surface Methode

Die Bezeichnung der *Response Surface Methode* folgt aus der Modelldarstellung

$$y = g(x_1, x_2, \dots, x_k) + \epsilon$$

wobei y die Zielvariable, ϵ ein zufälliger Fehler und $g(x_1, x_2, \dots, x_k)$ eine Funktion der Levels der Kontrollvariablen x_1, x_2, \dots, x_k ist.

Die erwarteten Werte der Zielvariablen werden also durch die „Oberfläche“ (surface) $g(x_1, x_2, \dots, x_k)$ bestimmt.

$$\hat{y} = g(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

Im Allgemeinen bleibt aber der wahre Zusammenhang zwischen y und den Kontrollvariablen unbekannt.

Deshalb ist der erste Schritt einer Response Surface Analyse der, dass man eine geeignete Approximation für die Funktion $g(x_1, x_2, \dots, x_k)$ sucht.

Da es in den meisten Untersuchungen das Hauptziel ist die Variablen x_1, \dots, x_k so zu bestimmen, dass die Antwortvariable maximiert wird, sind Approximationen durch lineare oder quadratische Polynome meist ausreichend.

Die jeweiligen Approximationen werden entsprechend als *first-order* oder *second-order* Modelle bezeichnet.

First-Order $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$

First-Order $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$

First-Order $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$

Second-Order $y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon$

First-Order $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + \epsilon$

Second-Order $y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon$

Diese Approximationen können sicher nur lokal gute Annäherungen an die wahre Funktion $g(x_1, x_2, \dots, x_k)$ liefern, dennoch eignen sie sich sehr gut dazu einen Prozess schrittweise zu optimieren.

Deshalb werden Response Surface Methoden meist iterativ verwendet: Die Ergebnisse des ersten Experimentes zeigen in welcher Region die nächsten Experimente durchgeführt werden sollten.

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

$$\text{First-Order } y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$$

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

$$\text{First-Order } y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$$

Setzt man in den Second-Order Modellen $x_i x_j =: \tilde{x}_{ij}$ so folgt:

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

$$\text{First-Order } y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$$

Setzt man in den Second-Order Modellen $x_i x_j =: \tilde{x}_{ij}$ so folgt:

$$\text{Second-Order } y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} \tilde{x}_{ij} + \epsilon$$

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

$$\text{First-Order } y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k + \epsilon$$

Setzt man in den Second-Order Modellen $x_i x_j =: \tilde{x}_{ij}$ so folgt:

$$\text{Second-Order } y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} \tilde{x}_{ij} + \epsilon$$

Also handelt es sich hier im Grund auch um ein lineares Modell der Form:

First-Order und Second-Order Designs

Bei den First-Order Designs handelt es sich offensichtlich um ein lineares Regressionsmodell:

$$\text{First-Order } y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + \epsilon$$

Setzt man in den Second-Order Modellen $x_i x_j =: \tilde{x}_{ij}$ so folgt:

$$\text{Second-Order } y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} \tilde{x}_{ij} + \epsilon$$

Also handelt es sich hier im Grund auch um ein lineares Modell der Form:

$$\text{Second-Order}' y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k+k^2} \beta_i \check{x}_i + \epsilon$$

Man könnte also die lineare oder quadratische Approximation einer Response Surface Analyse als „normale“ Regression betrachten:

Man wählt genug Kombinationen der Kontrollvariablen, um die Regressionsparameter β eindeutig bestimmen zu können.

In der Tat ist die Herangehensweise ähnlich, da – wie in der Regression – die Regressionsparameter durch den Kleinste-Quadrate-Ansatz bestimmt werden.

Bestimmung der Regressionsparameter

Wie gerade gesehen, handelt es sich bei den First-Order und Second-Order Modellen einer Response Surface Analyse im Grunde um eine lineare Approximation der Form

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} + \epsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Wir nehmen im Folgenden an, dass die Fehlerterme ϵ unkorrelierte Zufallsvariablen sind mit $E(\epsilon) = 0$ und $\text{Var}(\epsilon) = \sigma^2$.

Bestimmung der Regressionsparameter

Wie gerade gesehen, handelt es sich bei den First-Order und Second-Order Modellen einer Response Surface Analyse im Grunde um eine lineare Approximation der Form

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} + \epsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Wir nehmen im Folgenden an, dass die Fehlerterme ϵ unkorrelierte Zufallsvariablen sind mit $E(\epsilon) = 0$ und $\text{Var}(\epsilon) = \sigma^2$.

Die β werden so bestimmt, dass die Fehlerquadratsumme minimiert wird:

$$L = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij} \right)^2$$

Betrachten wir dazu das lineare Modell in Matrixschreibweise (vgl. Falk et al. 2004).

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Betrachten wir dazu das lineare Modell in Matrixschreibweise (vgl. Falk et al. 2004).

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

Der Kleinste-Quadrate-Schätzer der $\boldsymbol{\beta}$ ergibt sich zu zu (vgl. Falk et al. 2004):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$$

mit $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{\beta}$ und $\text{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

⇒

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

Es wäre nun möglich genug Kombinationen der Kontrollvariablen zu messen, um die Regressionsparameter β eindeutig bestimmen zu können.

Es ist aber effizienter die Faktorkombinationen nicht wahllos sondern nach einem sinnvollen Untersuchungsdesign zu wählen.

Wir passen deshalb das Versuchsdesign an das Response Surface Verfahren an.

First-Order Modell

Für *First-Order* Modelle eignen sich besonders 2^k oder 2^{k-p} Modelle, in denen keine Haupteffekte miteinander aliased sind.

Es werden lediglich zwei Levels pro Faktor benötigt.

Die Analyse der Response Surface Modelle ist nicht längentreu. Dies ist der Hauptgrund, warum codierte Faktoren eingeführt werden müssen.

Erst eine Codierung der Faktoren ermöglicht es jeden Faktor gleich zu gewichten und die Faktoren untereinander zu vergleichen.

Codierte Faktoren

Eine übliche Art der Codierung für einen Faktor mit zwei Stufen ξ_1 und ξ_2 ist:

$$\text{codierter Wert} = x_j = \frac{\xi_j - \frac{1}{2}(\min \xi_j + \max \xi_j)}{\frac{1}{2}(\max \xi_j - \min \xi_j)}$$

Diese Art der Codierung bildet den größeren Faktor auf 1 und den kleineren auf -1 ab.

Im Folgenden bezeichne x_1, \dots, x_k stets codierte Werte. Erst diese codierten Werte erlauben es uns die Faktoren untereinander sinnvoll zu vergleichen.

Second-Order Modell

Um ein *Second-Order* Modell an eine Messreihe anzupassen benötigen wir mindestens drei Level pro Faktor.

So eignen sich z.B. die 3^k Factorial Designs oder 2^k Designs bei denen einige Center Punkte hinzugefügt wurden für diese Art der Analyse.

Diese Modelle sind aber, nach einem Begriff den wir später einführen werden, nicht *rotierbar*.

Deshalb werden sehr gerne Central Composing Designs an Second-Order Response Surface Modelle angepasst.

Wiederholung: Central Composite Design

Ein Central Composite Design besteht aus:

- Factorial** Ein 2^k oder 2^{k-p} fractional factorial Design wird an zwei Faktorstufen jedes Faktors angepasst. Ihre codierte Bezeichnung ist in der Regel $+1$ und -1 . Außerdem sollten keine Haupteffekte aliased sein in den 2^{k-p} Designs.
- Axial** Zusätzlich werden insgesamt $2k$ Versuche durchgeführt, bei denen nacheinander jeder Faktor seine extremen Werte annimmt. In jedem dieser Fälle werden die Faktorstufen der Extremwerte auf die codierten Werte $\pm\alpha$ gesetzt, wobei alle anderen Faktoren auf ihrer Nullstellung $x_j = 0$ verbleiben. Die passende Wahl von α sehen wir gleich.
- Center** Zusätzlich werden noch n_0 Versuche durchgeführt, in der alle Faktorstufen auf ihren mittleren Stufen verbleiben. Dies entspricht in codierter Fassung der $(0, 0, \dots, 0)$.

Ein Central Composite Design kann also leicht aus einem 2^k factorial oder 2^{k-p} fractional factorial Design durch Hinzufügen weiterer Punkte aufgebaut werden.

Durch geeignete Wahl der Axial und Centerpunkte, d.h. durch geeignete Wahl von α und n_0 werden dabei noch zusätzliche günstige Eigenschaften erfüllt:

Rotatable, Orthogonal

Rotatable Ein Design wird als *rotatable* bezeichnet, wenn die Varianz von \hat{y} für ein \mathbf{x} nur vom Abstand des Punktes vom Mittelpunkt des Designs abhängt und nicht von seiner Richtung.

Orthogonal In einem orthogonalen Central Composite Design wird die Anzahl der Center Punkte so gewählt, dass die Schätzer der Second-Order Koeffizienten minimal korreliert sind mit den anderen Parameterschätzungen.

Motivation: Rotatable

Der Schätzwert für y lässt sich (s.o.) wie folgt berechnen:

$$\hat{y} = \mathbf{X}\hat{\beta}$$

mit $\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

Motivation: Rotatable

Der Schätzwert für y lässt sich (s.o.) wie folgt berechnen:

$$\hat{y} = \mathbf{X}\hat{\beta}$$

mit $\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

⇒

$$\hat{y}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0'\hat{\beta}$$

mit $\text{Var}(\hat{y}(\mathbf{x}_0)) = \sigma^2\mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0$

Motivation: Rotatable

Box und Hunter (1957) schlugen vor, dass ein Second-Order Response Surface Modell rotierbar sein sollte, d.h. dass $\text{Var}(\hat{y})$ konstant ist für alle Punkte \mathbf{x} , die den gleichen Abstand vom Mittelpunkt des Designs besitzen.

Das bedeutet, dass die Varianz auf Sphären um den Mittelpunkt konstant ist.

Bei einem solchen Design bleibt die Varianz von \hat{y} unverändert, wenn man das Design um den Nullpunkt $(0, 0, \dots, 0)$ dreht, daher auch der Name *rotatable*.

Rotierbares Design

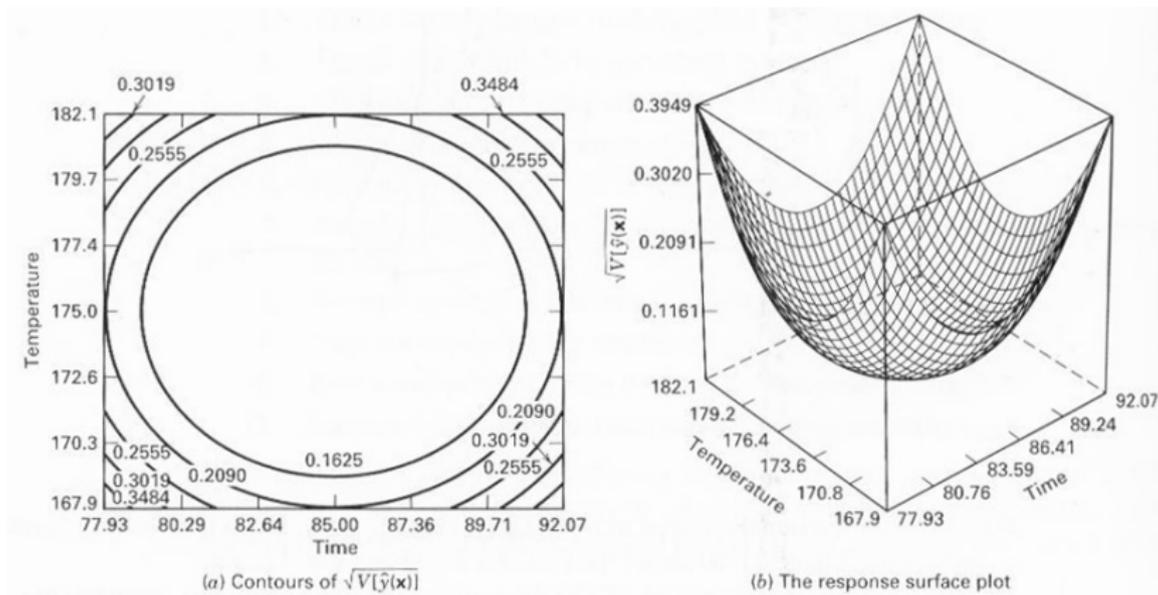


Abbildung: Contourplot und Response Surface Plot eines rotierbaren Designs

Motivation: Rotatable

Rotierbare Designs werden vor allem in Response Surface Analysen angewendet.

Bei Response Surface Analysen ist man stets an der Lage eines Extrempunktes interessiert. Die Lage des Extrempunktes ist jedoch vor dem Experiment unbekannt, deshalb macht es Sinn ein Design so zu wählen, dass es mit gleicher Genauigkeit in alle Richtungen arbeitet.

Ein Central Composite Design kann durch geeignete Wahl von α rotierbar gemacht werden.

Sei $n_f = 2^{k-p}$ die Anzahl der Versuche des (fractional) factorial Teils des Designs, dann macht die Wahl von $\alpha = \sqrt[k]{n_f}$ das Central Composite Design rotierbar.

Analyse der Second-Order Modelle

Zur Analyse der Second-Order Modelle

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

schreiben wir diese in Matrixform

$$y = \beta_0 + \mathbf{x}' \mathbf{b} + \mathbf{x}' \mathbf{B} \mathbf{x} + \epsilon.$$

Wir erhalten den Schätzer

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

wobei \mathbf{x} der $k \times 1$ Vektor der codierten Faktoren ist, $\hat{\mathbf{b}}$ der $k \times 1$ Vektor der geschätzten First-Order Koeffizienten und $\hat{\mathbf{B}}$ die $k \times k$ Matrix der geschätzten Second-Order Koeffizienten ist.

Will man nun die Vorhersage \hat{y} optimieren bezüglich \mathbf{x} , so erhält man eine stationäre Lösung für

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

Will man nun die Vorhersage \hat{y} optimieren bezüglich \mathbf{x} , so erhält man eine stationäre Lösung für

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

⇒

$$\mathbf{x}_0 = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{b}} \quad \Rightarrow \quad \hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_0\hat{\mathbf{b}},$$

wobei \hat{y}_0 der vorhergesagte Optimalwert ist.

Will man nun die Vorhersage \hat{y} optimieren bezüglich \mathbf{x} , so erhält man eine stationäre Lösung für

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

⇒

$$\mathbf{x}_0 = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{b}} \quad \Rightarrow \quad \hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_0\hat{\mathbf{b}},$$

wobei \hat{y}_0 der vorhergesagte Optimalwert ist.

Wie aus der Analysis bekannt, wird diese stationäre Lösung charakterisiert durch die Vorzeichen und Größe der Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{B}}$.

Will man nun die Vorhersage \hat{y} optimieren bezüglich \mathbf{x} , so erhält man eine stationäre Lösung für

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} + 2\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

⇒

$$\mathbf{x}_0 = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{b}} \quad \Rightarrow \quad \hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_0\hat{\mathbf{b}},$$

wobei \hat{y}_0 der vorhergesagte Optimalwert ist.

Wie aus der Analysis bekannt, wird diese stationäre Lösung charakterisiert durch die Vorzeichen und Größe der Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{B}}$.

Bezeichnen wir mit $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ die Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{B}}$, so gilt für die stationäre Lösung der Second Order Response Surface Methode:

Stationärer Punkt

Maximum Falls alle λ_j negativ sind, so handelt es sich um ein Maximum.

Maximum

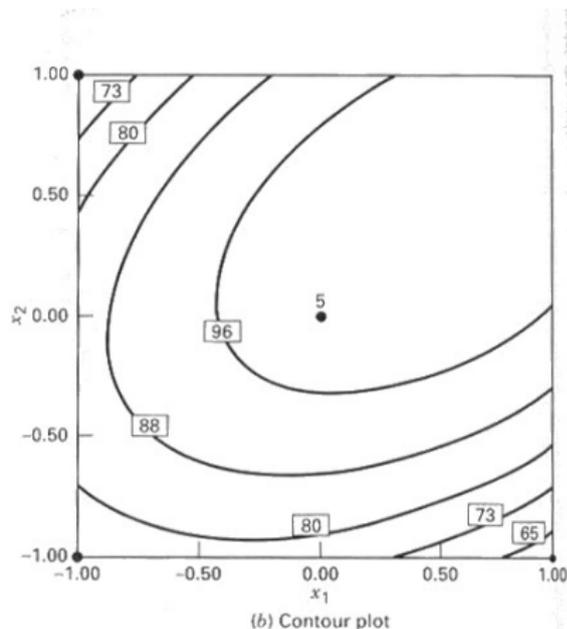
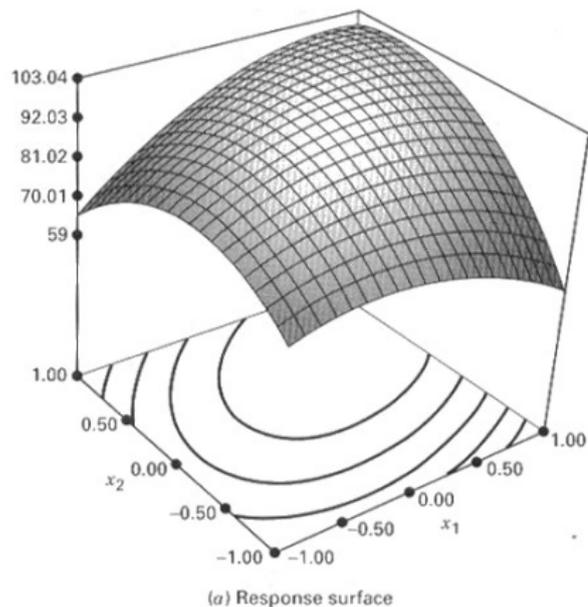


Abbildung: Contourplot und Response Surface Plot eines Maximums

Stationärer Punkt

Maximum Falls alle λ_j negativ sind, so handelt es sich um ein Maximum.

Minimum Falls alle λ_j positiv sind, so handelt es sich um ein Minimum.

Minimum

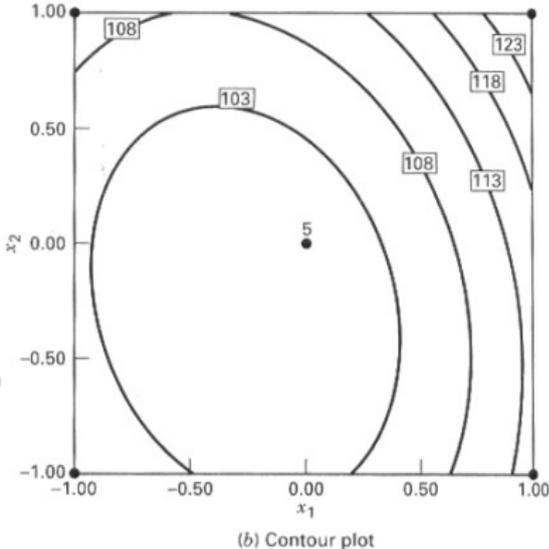
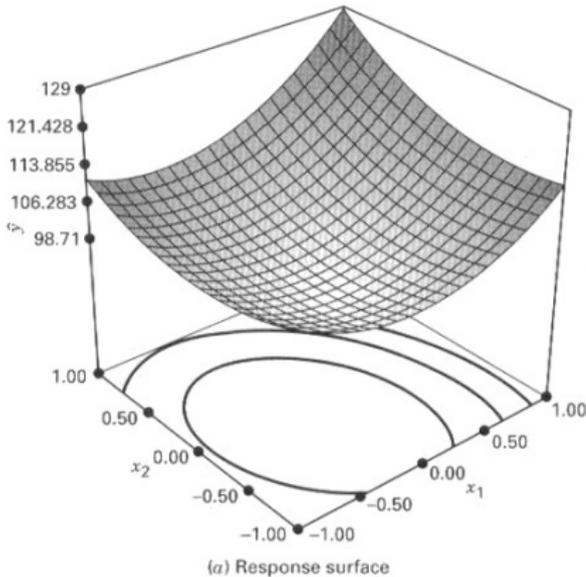


Abbildung: Contourplot und Response Surface Plot eines Minimums

Stationärer Punkt

Maximum Falls alle λ_j negativ sind, so handelt es sich um ein Maximum.

Minimum Falls alle λ_j positiv sind, so handelt es sich um ein Minimum.

Sattelpunkt Falls die λ_j gemischte Vorzeichen haben, so handelt es sich um einen Sattelpunkt, d.h. die erwartete Antwortvariable vergrößert sich in einer Richtung (wenn man den Stationären Punkt verlässt) und verkleinert sich in einer anderen Richtung.

Sattelpunkt

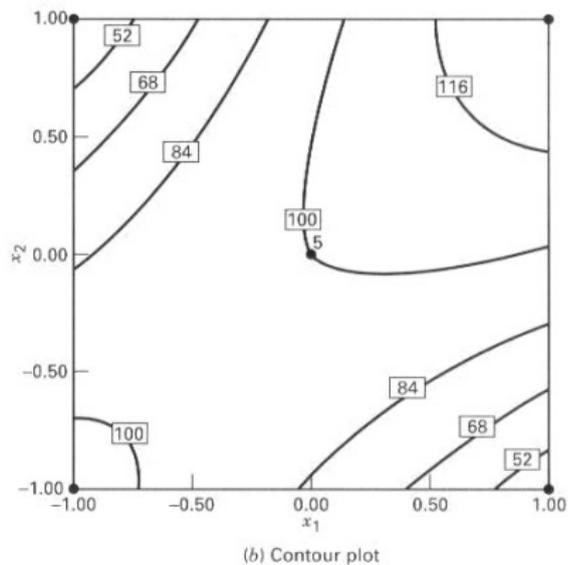
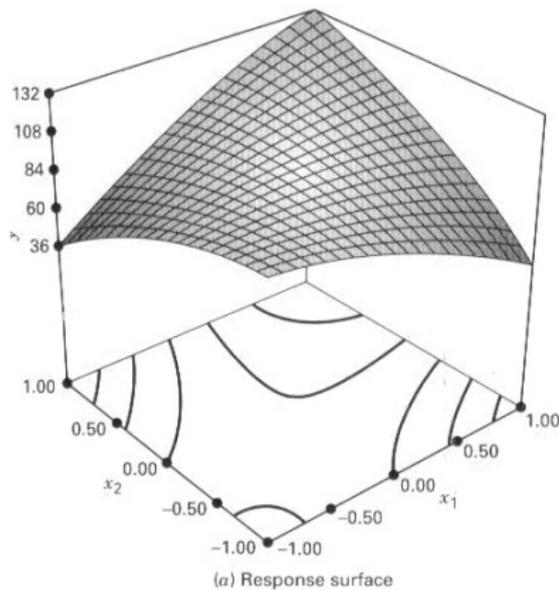


Abbildung: Contourplot und Response Surface Plot eines Sattelpunktes

Stationärer Punkt

Maximum Falls alle λ_j negativ sind, so handelt es sich um ein Maximum.

Minimum Falls alle λ_j positiv sind, so handelt es sich um ein Minimum.

Sattelpunkt Falls die λ_j gemischte Vorzeichen haben, so handelt es sich um einen Sattelpunkt, d.h. die erwartete Antwortvariable vergrößert sich in einer Richtung (wenn man den Stationären Punkt verlässt) und verkleinert sich in einer anderen Richtung.

Stationärer Rücken Falls ein oder mehrere der λ_j nahe bei Null sind, so ist die Oberfläche „flach“ in einer gewissen Region um den stationären Punkt, d.h. die Antwortvariable reagiert nur gering auf kleine Veränderungen der Faktoren in dieser Richtung.

Stationärer Rücken

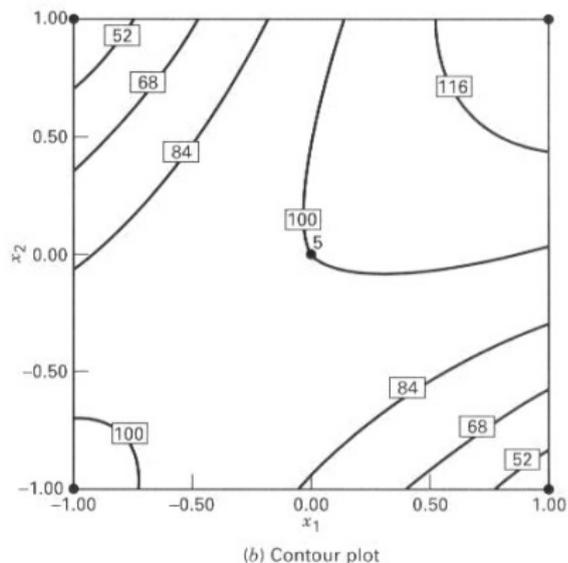
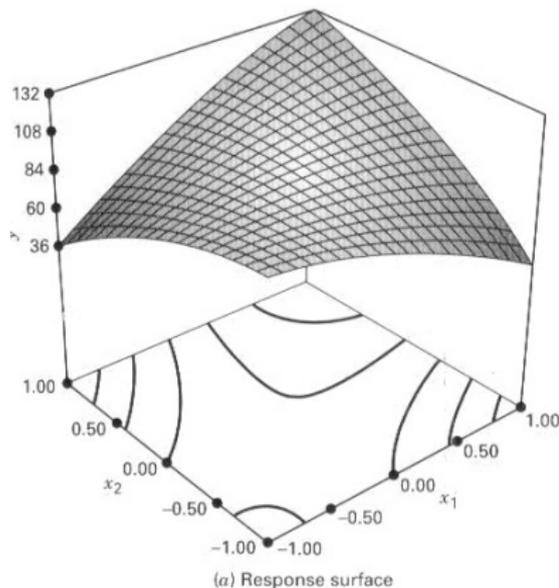


Abbildung: Contourplot und Response Surface Plot eines stationären Rückens

Praktische Überlegungen

- ▶ Die vorgestellte Prozedure versucht die Antwortfunktion im Hinblick auf die Kontrollvariablen zu maximieren oder minimieren. Der wahre Zusammenhang bleibt aber weiterhin unklar und die angewandten Approximationen können nur für eine relativ kleine Region gültig sein.
- ▶ Das durch die lokale Approximation erhaltene Optimum kann außerhalb der Region liegen, für die die Approximation sinnvoll ist.
- ▶ Oftmals sind iterative Versuchsdurchführungen notwendig um die genaue Lage des Optimums zu bestimmen.
- ▶ Die für das Versuchsdesign optimalen Faktorkombinationen können im Versuch zu unerwarteten oder fehlerhaften Ergebnissen führen.
- ▶ Die optimale Faktorkombination für ein Antwortvariable können sehr schlechte Ergebnisse für die anderen Antwortvariablen liefern.

Analyse der Daten

Wir kommen nun zur Analyse der Daten unserer Fallstudie.

Daten der Fallstudie

Bei unserer Fallstudie wurde ein Central Composite Design mit einem halben 2^5 Design, 10 Axial- und 4 Centerpunkten durchgeführt.

Die Axialpunkte befinden sich auf $\alpha = \pm 2$. Das durchgeführte halbe 2^5 fractional factorial Design verfügt über $n_f = 2^{5-1} = 16$ Versuche, folglich gilt:

$$2 = \alpha = \sqrt[4]{n_f} = \sqrt[4]{16}$$

und das durchgeführte Experiment ist somit rotierbar.

Wir werden an diese Daten ein Second-Order Modell anpassen um eventuelle Extremwerte der Zielvariablen zu bestimmen.

Analyse der Daten

Zur Analyse der Daten verwenden wir die SAS Prozedur `RSREG`. Diese Prozedur ist speziell dafür entwickelt worden Response Surface Anaysen durchzuführen.

Durch diese Analyse ist es jedoch immer nur möglich eine Zielvariable zu untersuchen, weshalb wir vier getrennte Analysen für unsere vier Zielvariablen *Density*, *Thickness*, *Moisture* und *Flavor* durchführen müssen und später die Ergebnisse in geeigneter Hinsicht kombinieren müssen.

Wir führen hier nur beispielhaft die Analyse für die Variable *Moisture* durch.

SAS Programm

```
DATA Daten;  
INFILE '/stud/c72.dat';  
INPUT a b e g h density thick moist flavor;  
RUN;
```

```
PROC RSREG DATA=Daten;  
MODEL moist = a b e g h;  
RUN; QUIT;
```

Die folgenden Seiten zeigen den SAS-Output.

The RSREG Procedure

Kodierungskoeffizienten für unabhängige Variablen

Faktor	Abzgl.	Geteilt durch
a	625.000000	75.000000
b	1.900000	0.400000
e	20.000000	6.000000
g	1.500000	1.500000
h	270.000000	30.000000

Response Surface for Variable moist

Response Mean	12.451667
Root MSE	0.201209
R-Square	0.9902
Coefficient of Variation	1.6159

Regression	Freiheits- grade	Typ I Summe der Quadrate	R-Quadrat	F-Statistik	Pr > F
Linear	5	36.573050	0.9795	180.67	<.0001
Quadratic	5	0.205313	0.0055	1.01	0.4626
Crossproduct	10	0.197187	0.0053	0.49	0.8611
Total Model	20	36.975551	0.9902	45.67	<.0001

Residuum	Freiheits- grade	Summe der Quadrate	Mittleres Quadrat	F-Statistik	Pr > F
Lack of Fit	6	0.290147	0.048358	1.95	0.3110
Pure Error	3	0.074219	0.024740		
Total Error	9	0.364366	0.040485		

The RSREG Procedure

Parameter	DF	Schätzwert	Standardfehler	t-Wert	Pr > t	Parameterschätzer
						aus Kodierten Daten
Intercept	1	-11.5258	28.8756	-0.40	0.6991	12.526067
a	1	0.0117	0.0451	0.26	0.8001	-0.209533
b	1	1.5369	7.4125	0.21	0.8404	-0.192992
e	1	1.2404	0.4755	2.61	0.0284	2.436631
g	1	1.6791	1.8340	0.92	0.3838	0.274575
h	1	0.0232	0.1159	0.20	0.8454	-0.168621
a*a	1	-0.0000094	0.0000276	-0.34	0.7403	-0.053200
b*a	1	0.0051	0.0067	0.76	0.4651	0.153384
b*b	1	-0.5664	0.9741	-0.58	0.5752	-0.090629
e*a	1	-0.0005	0.0004	-1.20	0.2592	-0.242141
e*b	1	-0.0859	0.0838	-1.03	0.3321	-0.206250
e*e	1	-0.0084	0.0043	-1.94	0.0837	-0.303129
g*a	1	-0.0006	0.0017	-0.37	0.7192	-0.074612
g*b	1	0.1354	0.3353	0.40	0.6958	0.081250
g*e	1	-0.0048	0.0223	-0.22	0.8327	-0.043750
g*g	1	0.0486	0.0692	0.70	0.5006	0.109371
h*a	1	-0.0000025	0.0000893	-0.03	0.9775	-0.005825
h*b	1	-0.0057	0.0167	-0.34	0.7404	-0.068750
h*e	1	0.0000347	0.0011	0.03	0.9759	0.006250
h*g	1	-0.0051	0.0044	-1.15	0.2801	-0.231250
h*h	1	-0.0000173	0.0001	-0.10	0.9223	-0.015629

Faktor	Freiheits- grade	Summe der Quadrate	Mittleres Quadrat	F-Statistik	Pr > F
a	6	0.363290	0.060548	1.50	0.2817
b	6	0.306766	0.051128	1.26	0.3612
e	6	35.722186	5.953698	147.06	<.0001
g	6	0.534401	0.089067	2.20	0.1385
h	6	0.229543	0.038257	0.94	0.5091

The RSREG Procedure
 Canonical Analysis of Response Surface Based on Coded Data

Faktor	Kritischer Wert	
	Kodiert	Unkodiert
a	7.022171	1151.662799
b	4.738991	3.795596
e	-0.257964	18.452219
g	-2.134848	-1.702273
h	-1.383836	228.484934

Vorhergesagter Wert bei stationärem Punkt: 10.842389

Eigenwerte	Eigenvektoren				
	a	b	e	g	h
0.191566	-0.018442	0.205180	-0.078416	0.836458	-0.501747
0.073780	0.733600	0.541105	-0.374166	-0.168158	-0.027548
-0.084988	0.011803	0.111807	-0.095366	0.481977	0.863692
-0.162026	0.611921	-0.766940	0.005267	0.192547	-0.015948
-0.371550	0.294796	0.253789	0.919091	0.051815	0.035686

Stationary point is a saddle point.

Zusammenfassung der Ergebnisse für den Faktor Moisture

Die Analyse der Ergebnisse der SAS Prozedur RSREG legt nahe, dass zur Beschreibung des Faktors Moisture ein lineares Modell bestehend aus dem Faktor **E** ausreichend ist:

$$\hat{\text{Moist}} = -11.5258 + 1.2404 * e$$

Literaturhinweise

-  Cabrera und McDougall, Andrew (2002). *Statistical consulting*, Springer.
-  Montgomery (1997). *Design and Analysis of Experiments*, 4. Aufl., Wiley.
-  Mayers und Montgomery (2002). *Response surface methodology*, 2. Aufl., Wiley.