D-Optimale Versuchspläne

Grundsätzliches

Das Ziel von D-Optimalen Plänen ist mit miminalem Aufwand Versuchspläne zu erstellen, die die gewünschten Effekte und Wechselwirkungen eindeutig abbilden. Dies ist ein entscheidender Vorteil gegenüber teilfaktoriellen Plänen, bei denen Wechselwirkungen z.T. miteinander vermengt sind.

Mit p = Anzahl Faktoren berechnet sich die Anzahl der einfachen Wechselwirkungen:

p' = p*(p-1)/2

Die höheren Wechselwirkungen (z.B. ABC, ABD, ACD, usw.) werden in der Regel nicht berücksichtigt, da ihr Einfluss gegenüber den einfachen meist geringer ist. Sie würden auch den Umfang der Versuche sprengen.

Insgesamt wird für einen Versuchsplan mit zwei Einstellungen folgende Anzahl Versuche benötigt:

Konstante	: 1
Haupteffekte (Faktoren)	: p
Wechselwirkungen	: p*(p-1)/2
Σ	: p+ p*(p-1)/2+1

Im Falle eines quadratischen Modells kommen nocheinmal p Versuche hinzu (mit mittlerer Einstellung). Weiterhin werden ca. 5 Versuche benötigt, um genügend Information über die Streuungen zu erhalten (Signifikanzen der Faktoren).

Ein D-Optimaler Plan wird nicht mit einem festem Schema generiert, sondern iterativ aufgebaut. Er hat u.a. folgende wichtige Eigenschaften:

- Maximierung der Determinante $Det(X^T X)$ (Kennzahl für Auswertbarkeit)
- Minimierung der Korrelationen und Vertrauensbereiche
- Möglichst gute Ausbalancierung, d.h. gleiche Anzahl von Stufen
  (gilt nur für Randbereiche -1 und +1, nicht für Zwischenwerte)

Insbesondere aufgrund der Zielsetzung, dass alle Wechselwirkungen bei geringer Versuchsanzahl erkannt werden sollen, verhindert dass diese Pläne vollständig orthogonal sind. D.h. gewisse Korrelationen lassen sich nicht vollständig beseitigen. In der Auswertung über Multiple Regression ist dies jedoch ein untergeordneter Nachteil.

Vorteile der D-optimalen Versuchspläne

- Freie Wahl für die Zahl der Stufen pro Einflussfaktor. Die Stufenzahl kann von Faktor zu Faktor unterschiedlich gewählt werden.

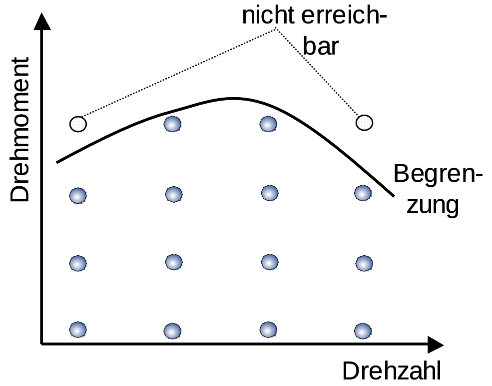
- Freie Wahl der Stufenabstände, die äquidistant oder nicht äquidistant gewählt werden können.

- Freie Wahl für die Verteilung der Versuchspunkte im n-dimensionalen Versuchsraum

- Freie Wahl des mathematischen Modells

- Erweiterungsmöglichkeit durch neue Einflussfaktoren

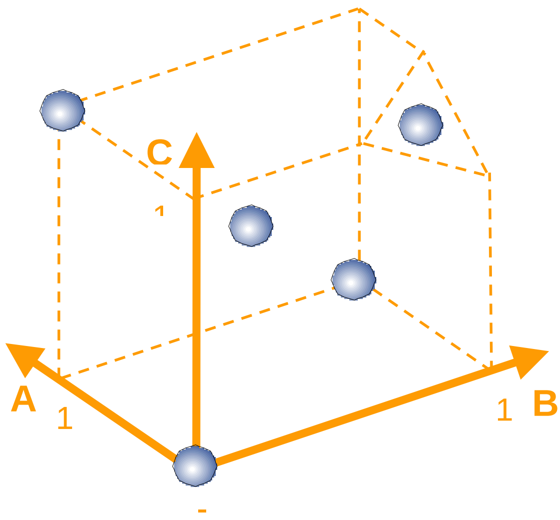
- Bestimmte Einstellungen und Kombinationen können ausgeschlossen werden, die nicht erreichbar sind (siehe Beispiel einer Drehmomentkurve)



Nachteile der D-optimalen Versuchspläne

- Der Versuchsplan ist nicht orthogonal, die Abweichungen sind aber meist nur klein

- Die Erstellung der Pläne ist nur mit entsprechenden Rechenalgorithmen möglich



Hinweise: Der dargestellte „Grundversuchsplan“ zur Bestimmung der Faktoren und Wechselwirkungen ist hier der Ausgangspunkt, bevor über die Determinante weitere Versuche hinzugefügt werden. In der Literatur findet man zur Bestimmung eines Grundversuchsplanes auch andere Vorgehensweisen auf die hier nicht weiter eingegangen werden soll.

Erzeugung eines D-Optimale Versuchsplanes

A	B	C
-1	-1	-1
-1	-1	-1
0	0	0
1	1	1
1	1	1

Es gibt verschiedene Verfahren für die Erzeugung von D-Optimalen Versuchsplänen. Diese sind insbesondere die genannten Exchange-Algorithmen beschrieben in /6/ und /10/. Eine andere Möglichkeit ist die hier gezeigte Methode der „Randomisierung“. Der Grundplan wird zunächst so angelegt, dass die Anzahl der Stufen möglichst gut ausbalanciert ist (siehe Beispiel mit 3 Faktoren rechts). Bei quadratischen, kubischen oder höherwertigeren Plänen werden die inneren Stufen (hier die 0) weniger oft belegt, da die Determinante stärker durch die außen liegenden Einstellungen erhöht werden kann. Danach erfolgt iterativ ein Tauschen der Positionen der Stufen auf ihren Plätzen. Dies ist besser, als wenn durch den Zufallsgenerator der Wert der Stufen direkt festgelegt wird. Denn hierdurch wird erreicht, dass die Anzahl der unteren, oberen und mittleren Stufen erhalten bleibt. Dieser Randomtausch wird solange wiederholt, bis die Determinante maximal und die Korrelation minimal ist, oder eine weitere Iteration keine nennenswerten Verbesserungen mehr bringt.

A	B	C
-1	-1	-1
-1	-1	-1
0	0	0
1	1	1
1	1	1

usw

Ein D-Optimalen Plan kann auch vereinfacht durch einen „Grundplan“ mit Zusatzversuchen aufgebaut werden. In diesem Grundplan ist zunächst jeder Faktor alleine auf hoher Stufe. Hinzu kommen dann noch die Kombination der Wechselwirkungen (jeweils paarweise Faktoren auf hoher Stufe). Dadurch sollen die Wechselwirkungen eindeutig bestimmbar sein. Die Zusatzversuche werden auch hier über Randomauswahl solange ausgetauscht, bis die Determinante optimal ist.
Im folgenden soll ein nachvollziehbares Beispiel für einen einfachen D-Optimalen Plan gezeigt werden. Dieser ist zwar streng genommen nicht ganz der optimale, soll aber das Prinzip verdeutlichen:

Beispiel:

Für den Fall einer 3x3 Matrix berechnet sich die Determinante nach Sarrus nach dem dargestellten Schema:

$$\begin{array}{ccc|cc} & & - & - & - \\ a_{11} & a_{21} & a_{31} & a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} & a_{13} & a_{23} \\ & & + & + & + \end{array}$$

—— Hauptdiagonale ----- Nebendiagonale

Die Spalten 1 und 2 werden nochmals an die rechte Seite gesetzt. Die Determinante D errechnet sich dann mit:

$$D = a_{11}\, a_{22}\, a_{33} + a_{21}\, a_{32}\, a_{13} + a_{31}\, a_{12}\, a_{23} - a_{31}\, a_{22}\, a_{13} - a_{11}\, a_{32}\, a_{23} - a_{21}\, a_{12}\, a_{33}$$

Gesucht wird ein D-Optimaler Plan mit 5 Versuchen zur Bestimmung von 3 Hauptfaktoren und einer Wechselwirkung AB (Vollfaktoriell 2^3 = 8 Versuche).

	A	B	C
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	-1	1
7	-1	1	1
8	1	1	1

Vollfaktoriell Versuchsplan = Kandidatensatz

Nummer im Kandidatensatz

	A	B	C
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
5	-1	-1	1
4	1	1	-1

Grundplan D-Optimal (alle Hauptfaktoren + Wechselwirkung AB)

Gesucht: optimaler Zusatzversuch

Im Grundplan sind bereits die Versuche 2,3,4 und 5 aus dem Kandidatensatz enthalten. Es sind nun der Reihe nach die verbleibenden Versuche 1,6,7 und 8 nacheinander einzusetzen, bis die bestmöglichste Determinante entsteht. Erster Versuch mit Kandidat 1:

$$X_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \qquad X_1^T = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

$X' = X^T X$ wird Wert für Wert über folgende Formel berechnet:

$x'_{j,i} = \sum_{k=1}^{n} x_{k,i}^{(T)} x_{j,k}$ mit j = Spaltenindex, i = Zeilenindex

$$X^T X_1 = \begin{bmatrix} 5 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 5 \end{bmatrix} \qquad \left| \begin{matrix} 5 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 5 \end{matrix} \right| \begin{matrix} 5 & 1 \\ 1 & 5 \\ -1 & -1 \end{matrix}$$

$Det(X^T X)_1$ = (5)(5)(5) + (1)(-1)(-1) + (-1)(1)(-1) - (-1)(5)(-1) - (5)(-1)(-1) - (1)(1)(5) = 112

Nächster Versuch mit Kandidat 6:

$$X_6 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \qquad X_6^T = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$X^T X_6 = \begin{bmatrix} 5 & -1 & -1 \\ -1 & 5 & -3 \\ -1 & -3 & 5 \end{bmatrix} \qquad \left| \begin{matrix} 5 & -1 & -1 \\ -1 & 5 & -3 \\ -1 & -3 & 5 \end{matrix} \right| \begin{matrix} 5 & -1 \\ -1 & 5 \\ -1 & -3 \end{matrix}$$

$Det(X^T X)_6$ = (5)(5)(5) + (-1)(-3)(-1) + (-1)(-1)(-3) - (-1)(5)(-1) - (5)(-3)(-3) - (-1)(-1)(5) = 64

Was ein erheblich schlechterer Wert ist, als mit Kandidat 1. Insgesamt errechnen sich für die weiteren Kandidaten folgende Determinanten:

Kandidat	$Det(X^T X)$
1	112
6	64
7	64
8	112

Somit bildet entweder Kandidat 1 oder 8 die optimale Determinante.

Hinweis:
Im Grundplan müsste eigentlich ein weiterer Versuch zur Bestimmung der Konstanten enthalten sein. Dieser wurde hier unterschlagen. In Hinblick auf einen möglichst einfachen Aufbau um Umfang wurde dieses Beispiel bewusst reduziert gehalten.

Im Anhang ist ein Formular dargestellt, in dem ein Versuchsplan vorbereitet werden kann (entsprechende Angaben für Faktoren und Zielgrößen).

Zur Auswertung der Matrix siehe auch Kapitel Multiple Regression.