

Produkte und Prozesse Optimieren mit DoE – Die Response Surface Methodik

Oliver Thunich, M.Sc. Statistik

oliver.thunich@statcon.de

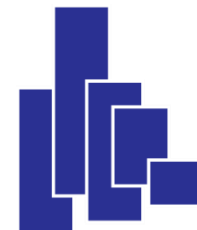
Design of Experiments Software und Training

www.statease.com

www.statcon.de

StatEase[®] 360

DESIGN EXPERT



STATCON

Statistik: Consulting • Training • Software



Statistics Made Easy by Stat-Ease

@StatisticsMadeEasybyStatEase

Das Beste aus dieser Lernmöglichkeit machen

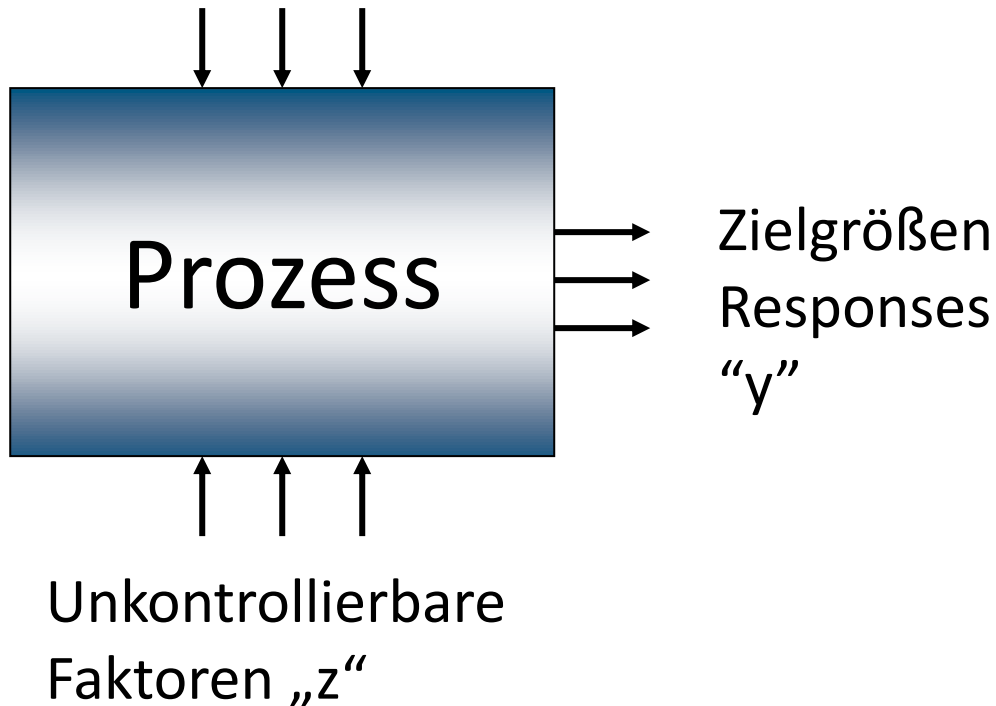
Um Tonstörungen zu vermeiden, werden alle Teilnehmer stummgeschaltet.

Fragen können im Fragebereich (Chat) gestellt werden. Wenn sie nicht während des Webinars beantwortet werden können, **werde ich sie anschließend per E-Mail beantworten.**

Fragen können auch an stathelp@statease.com (Englisch) gesendet werden. Bitte geben Sie Ihren Firmennamen und, wenn Sie Design-Expert verwenden, die Seriennummer an (zu finden unter *Help, About*).

Hinweis: Die Folien und eine Aufzeichnung dieses Webinars werden im Abschnitt Webinare auf der Stat-Ease-Website für Sie zur Verfügung gestellt.

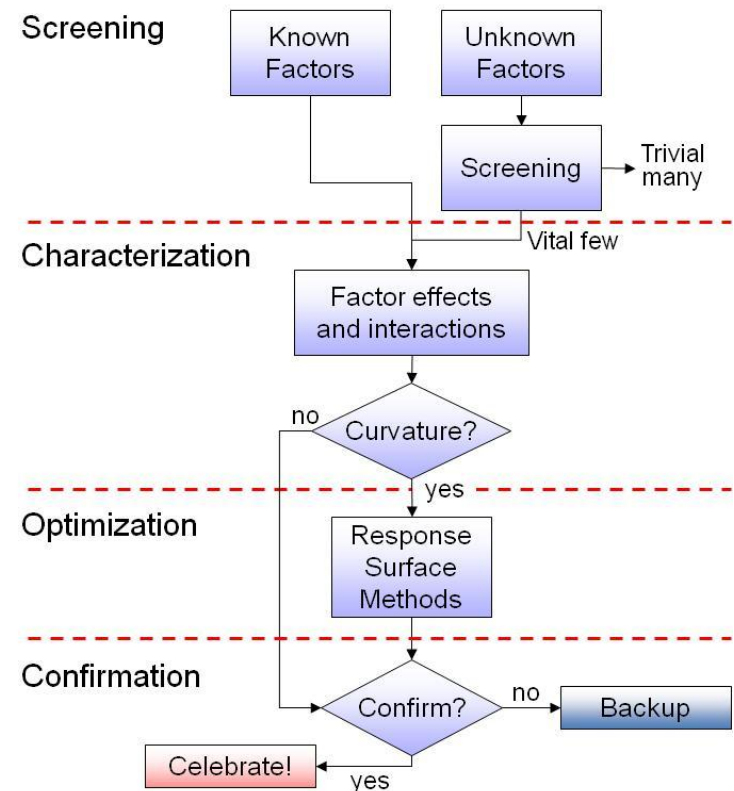
Kontrollierbare Faktoren „x“



Statistische Versuchsplanung
(Design of Experiments (DOE)) ist:

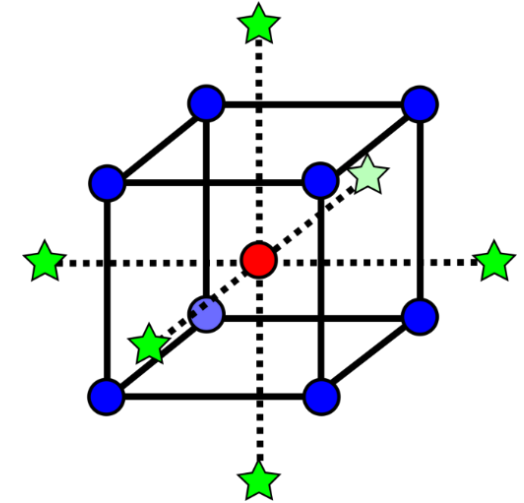
„Eine systematische Reihe von Tests, bei denen gezielte Änderungen an den kontrollierbaren Faktoren vorgenommen werden, um die Ursachen für signifikante Änderungen der Zielgrößen (Responses) zu ermitteln.“

- **Die Response Surface Methodik**
- RSM-Versuchspläne
- Analyse
- Optimierung mehrerer Zielgrößen
- Zusammenfassung



Hat man die entscheidenden Faktoren identifiziert, untersucht man oft was die optimalen Einstellungen für diese Faktoren sind.

Die **Response-Surface-Methodik** (RSM) widmet sich diesem Ziel der Optimierung.

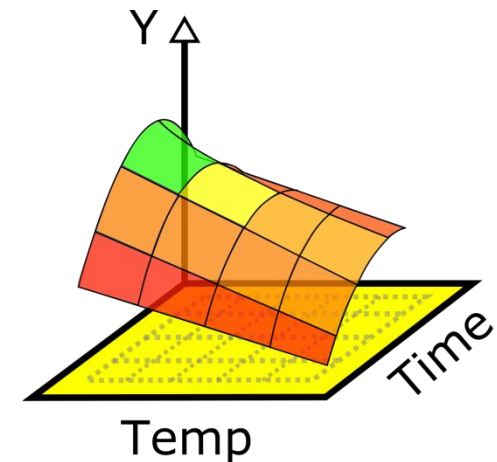
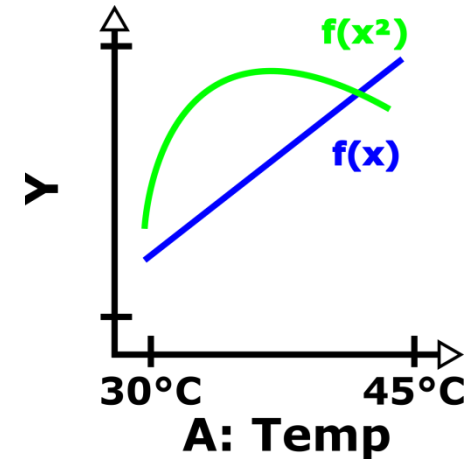


Da im Screening **viele Faktoren** gleichzeitig untersucht werden, akzeptieren wir, dass die Aussagen über die Faktoren recht allgemein sein müssen.

- Wir verwenden im Screening typischerweise **lineare Modelle**.

Für die Prognose eines Optimums (z.B. eines Maximums) sind lineare Modelle in der Regel ungeeignet.

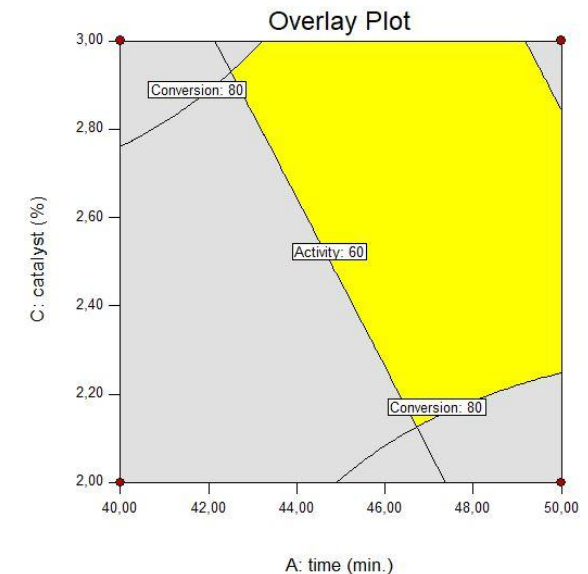
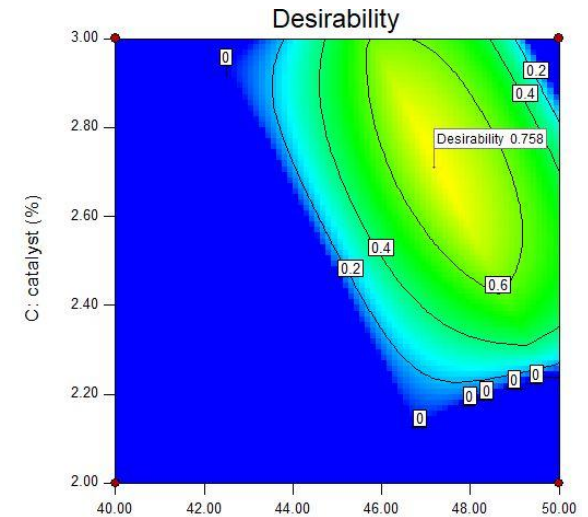
Für die Optimierung der Zielgrößen wird in der RSM meist mit **quadratischen Modellen** gearbeitet.



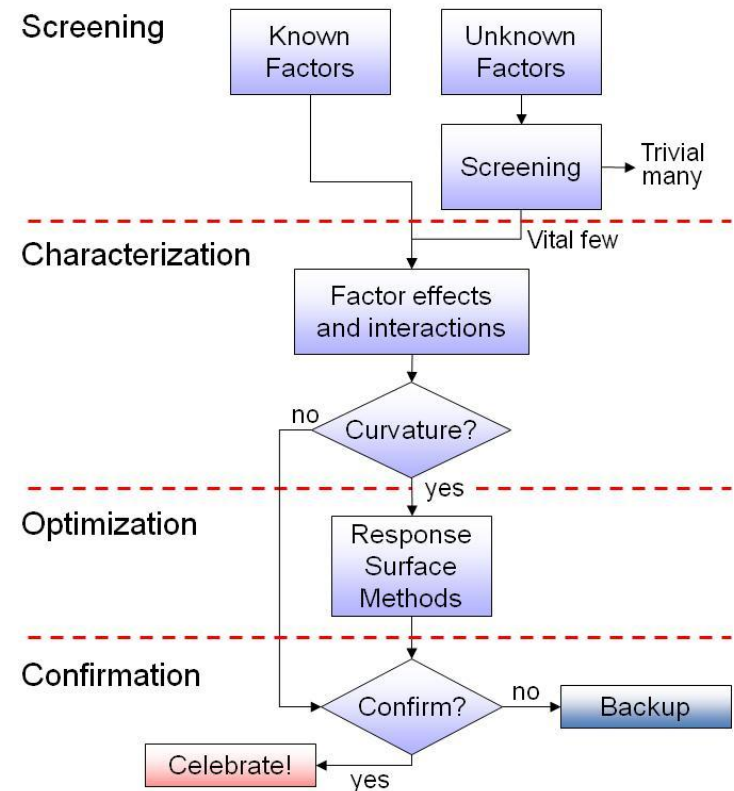
Quadratische Modelle werden genutzt,
um optimale Arbeitspunkte zu ermitteln

Mehrere Ziele werden können gleichzeitig
berücksichtigt und optimiert werden

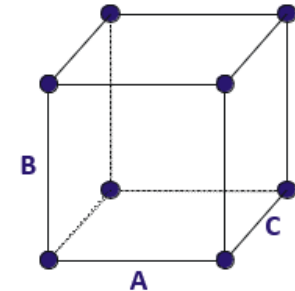
Nachdem **Modelle** für einzelne Zielgrößen
definiert wurden, werden diese
„überlagert“, um so die optimalen
Faktoreinstellungen für **alle** Ziele
gleichzeitig zu ermitteln.



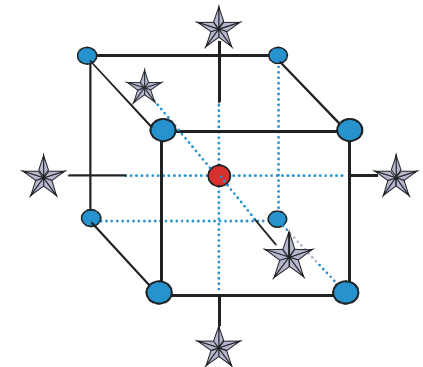
- Die Response Surface Methodik
- **RSM-Versuchspläne**
- Analyse
- Optimierung mehrerer Zielgrößen
- Zusammenfassung



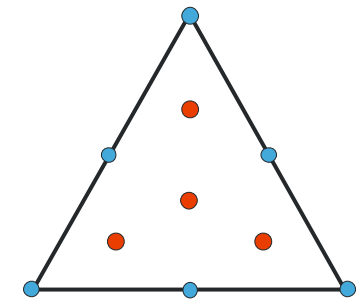
Faktoriell – Erfahren Sie mehr über Haupteffekte und Wechselwirkungen für eine Screening- oder Charakterisierungsstudie. Zwei Stufen für jeden Faktor minimieren den Aufwand und maximieren die Informationen.



Response Surface – Erstellen Sie quadratische Polynome (oder Polynome höherer Ordnung), um nicht-lineare Faktor-Wirkungs-Beziehungen zu modellieren. Drei+ Stufen für Faktoren erfordern mehr Einzelerperimente, liefern aber mehr Informationen.



Mischungen* – Modellierung von Rezepturen, bei denen die Responses von den Anteilen der Mischungskomponenten abhängig sind. Erforderlich für die korrekte Modellierung der Abhängigkeiten zwischen den Komponenten.



**Aufgezeichnetes Webinar – Crash Course in Mixture DOE*

● Zwei-stufig vollfaktoriell / teilfaktoriell

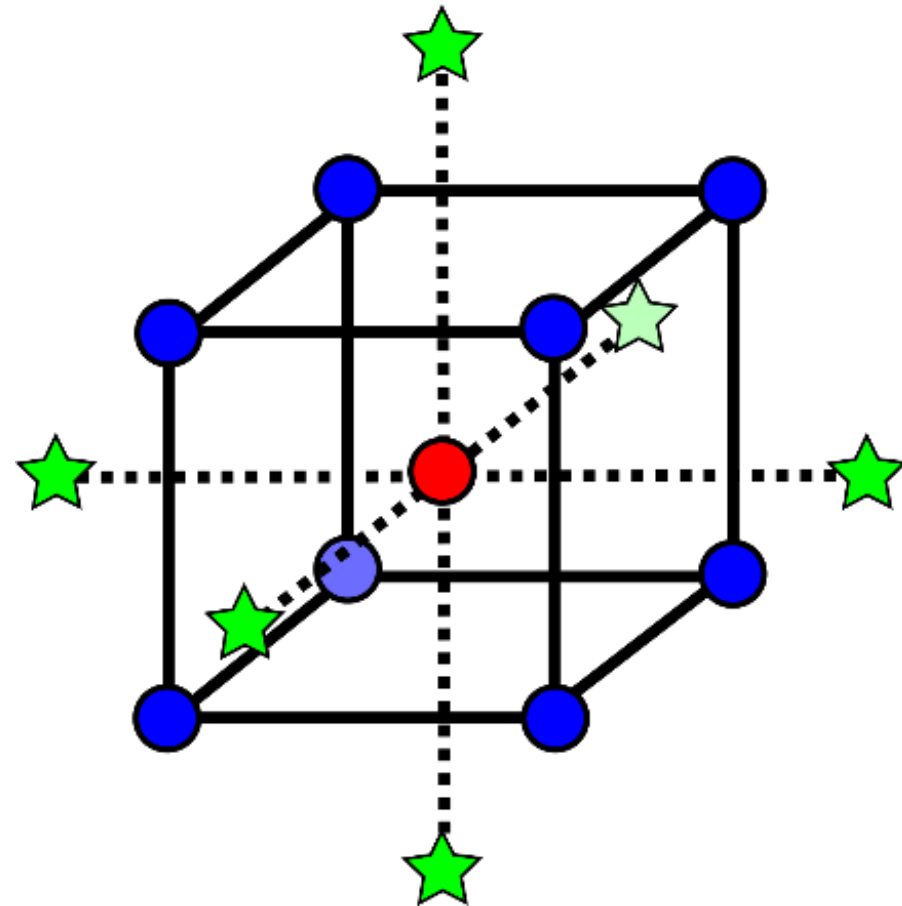
- Schätzt lineare Effekte und Wechselwirkungen.

Zentrumspunkte (Center Points)

● ▪ Schätzen „pure error“

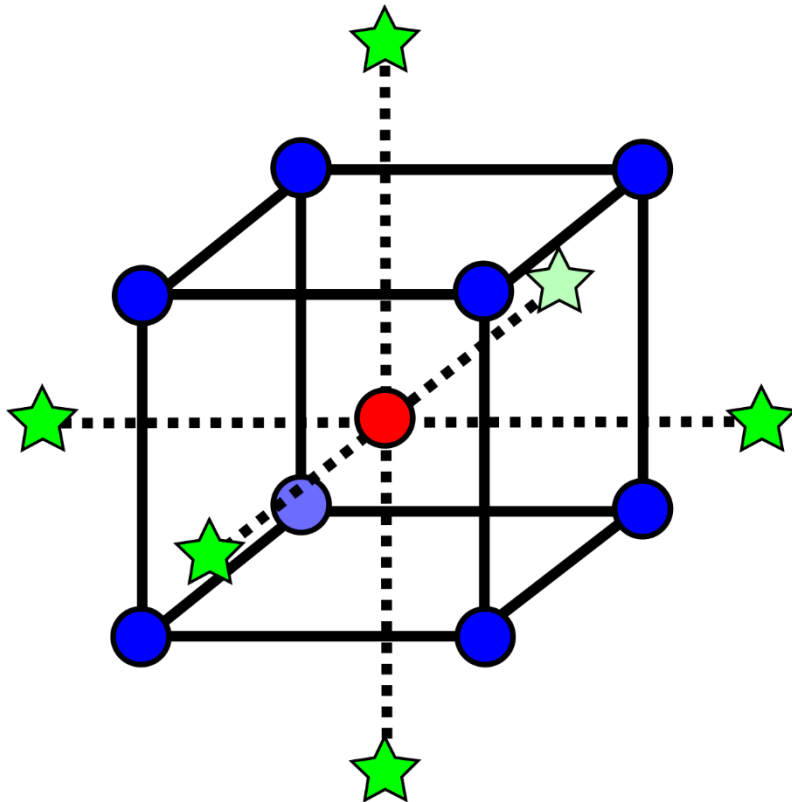
Axial – oder Sternpunkte (Axial oder Star Points)

★ ▪ Schätzen die quadratischen Effekte.



Zentral zusammengesetzte Designs (CCDs)

drei Faktoren



	A	B	C
Faktorielle punkte:	-1	-1	-1
	1	-1	-1
	-1	1	-1
	1	1	-1
	-1	-1	1
	1	-1	1
	-1	1	1
	1	1	1
Axial (star) punkte:	$-\alpha$	0	0
	α	0	0
	0	$-\alpha$	0
	0	α	0
	0	0	$-\alpha$
	0	0	α
Zentrums punkte:	0	0	0
	0	0	0
	0	0	0
	0	0	0
	0	0	0
	0	0	0

Vorteile

- Einfach und Effizient
- Symmetrisch
- Direkte Erweiterung faktorieller Designs

Nachteile

- Nur stetige Faktoren
- Keine Nebenbedingungen
- Teils extreme Faktoreinstellungen

Alternative: Optimale Versuchspläne

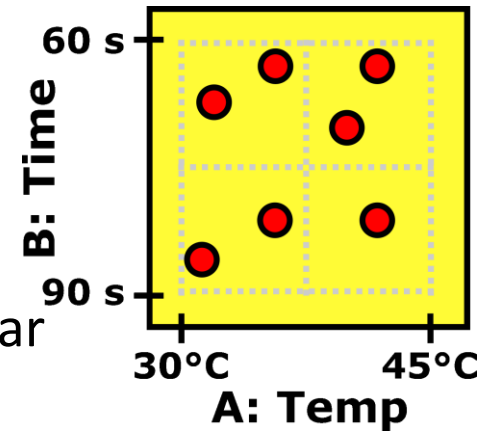
Experimente werden mithilfe von Algorithmen „optimal“ im Versuchsraum verteilt.

Vorteile

- Flexibel auf (fast) alle Problemstellungen anwendbar
- Größtmögliche (mathematische) Effizienz der Experimente

Nachteile

- Weniger intuitiv ggf. Asymmetrisch
- In der Regel wird mehr vorab Information benötigt.



Der Prozess einer chemischen Reaktion soll bezüglich zweier Zielsetzungen überprüft werden:

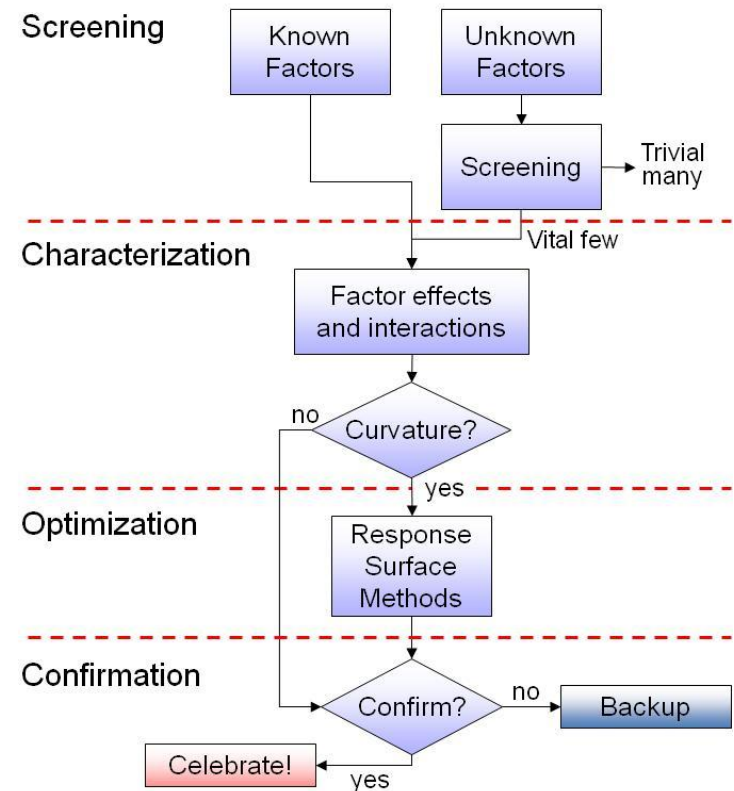
Zielgröße	Einheit	Zielsetzung
Umwandlung (conversion)	%	$\geq 80\%$
Aktivität (activity)		63 ± 3

Folgende Faktoren werden betrachtet:

Faktor	Einheit	Min	Max
Reaktionszeit (time)	Min	40	50
Temperatur (temperature)	°C	80	90
Katalysatorkonzentration (catalyst)	%	2	3

Versuchsplan: Zentral zusammengesetzt (20 Experimente)

- Die Response Surface Methodik
- RSM-Versuchspläne
- **Analyse**
- Optimierung mehrerer Zielgrößen
- Zusammenfassung



Analyse eines RSM-Designs Übersicht

Nr.	Analyseschritt Ziele	In DX/ SE360	Tools (Design Expert)
1.	Explorative Datenanalyse (EDA) „Feeling“ für Daten: Ausreißer, Eingabefehler, ...	Custom Graphs/ Summary	2D- und 3D-Scatterplots, Histogramme
2.	Modellauswahl Finde eine gute Modellierung für die Daten	Fit Summary/ Model/ ANOVA	Sequential Sum of Squares, Auto Select, R^2
3.	Diagnose Modellvalidierung, Voraussetzungen prüfen	Diagnostics	Normal Plot, Residual Plots, Box-Cox
4.	Modellinterpretation Aus Grafiken lernen	Model Graphs	Perbutation-, Contour-, 3D- Surface-Plots
5.	Optimierung Optimale Faktoreinstellungen bestimmen	Optimization	Numerical, Graphical

Der Prozess einer chemischen Reaktion soll bezüglich zweier Zielsetzungen überprüft werden :

Zielgröße	Einheit	Zielsetzung
Umwandlung (conversion)	%	≥ 80%
Aktivität (activity)		63 ± 3

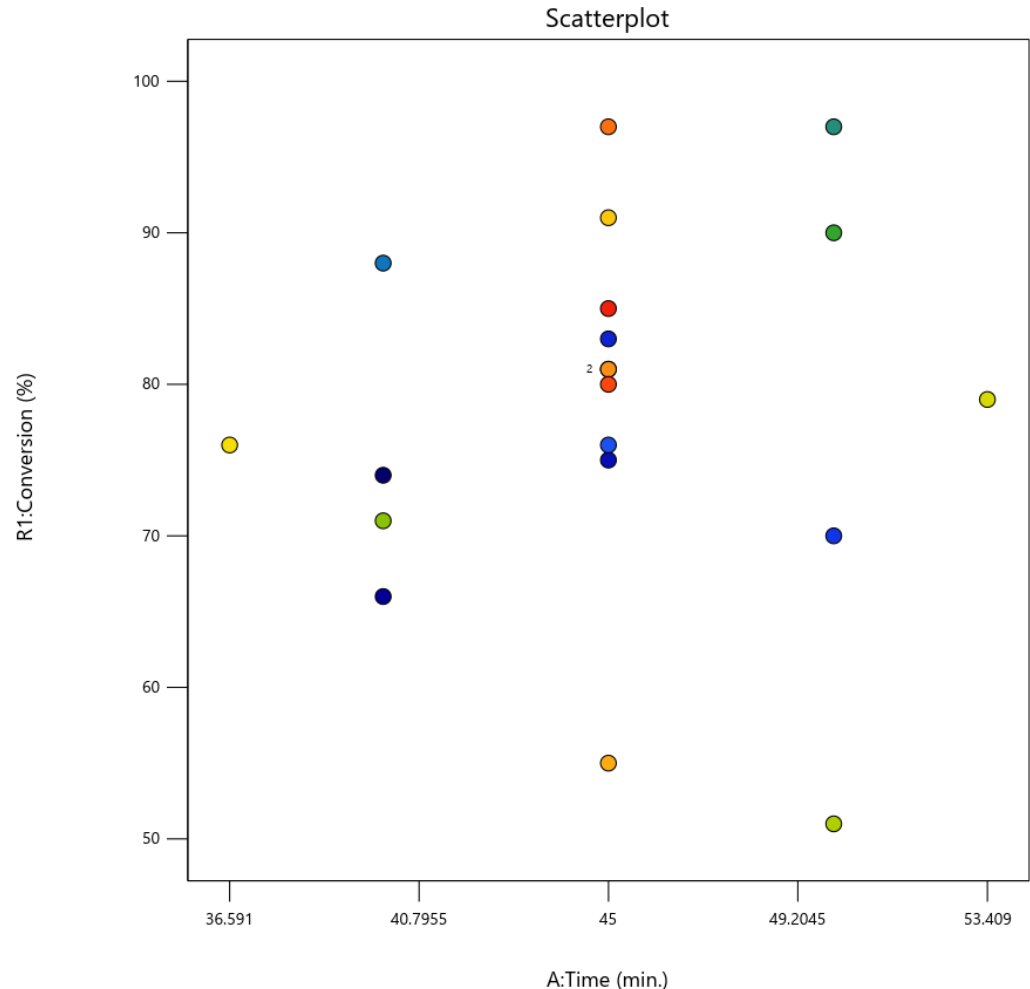
Folgende Faktoren werden betrachtet:

Faktor	Einheit	Min	Max
Reaktionszeit (time)	Min	40	50
Temperatur (temperature)	°C	80	90
Katalysatorkonzentration (catalyst)	%	2	3

Versuchsplan: Zentral zusammengesetzt (20 Experimente)

Die Explorative Datenanalyse bietet einen ersten Überblick über die Daten folgende Fragestellungen sind zu beachten:

- Gibt es Ausreißer, Messfehler oder fehlende Werte?
- Sind erste Zusammenhänge zu erkennen?

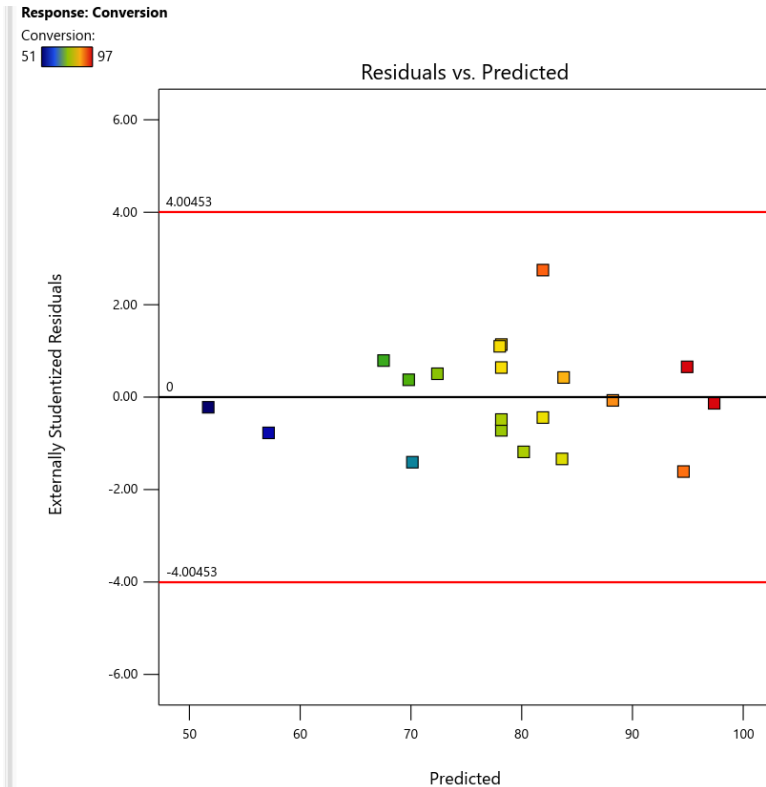
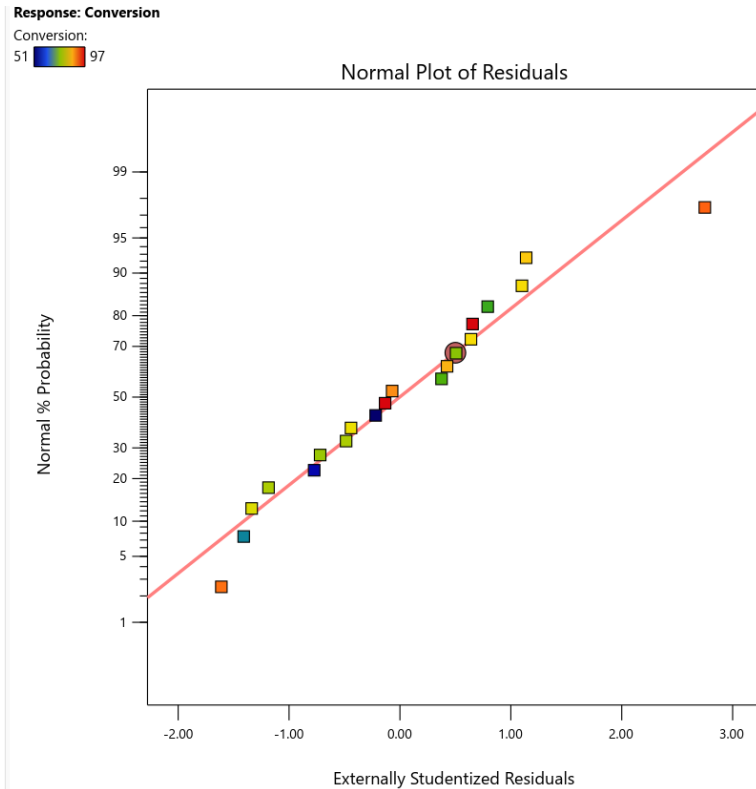


- Auswahl relevanter (signifikanter) Einflüsse
- RSM-Designs erlauben die Modellierung quadratischer (selten: kubischer) Einflüsse der Faktoren
- Schrittweise Modellwahl
 - Manuell oder Automatisiert

ANOVA for Reduced Quadratic model

Response 1: Conversion

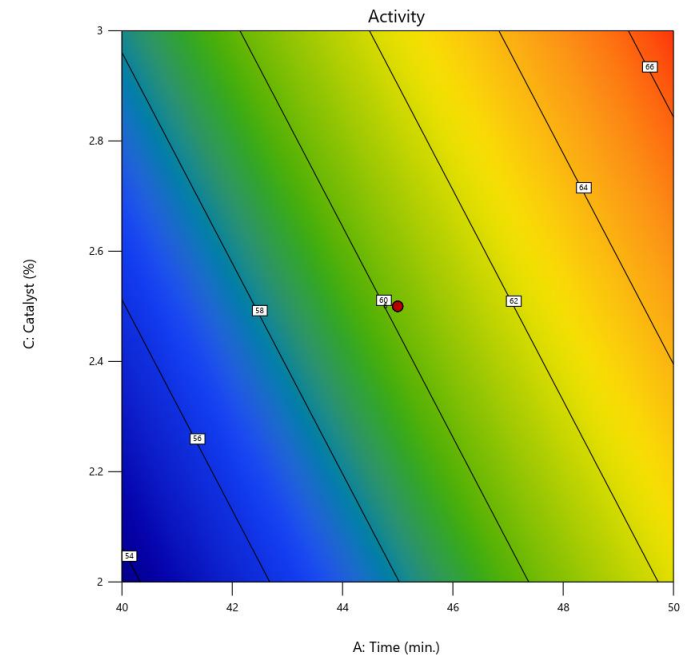
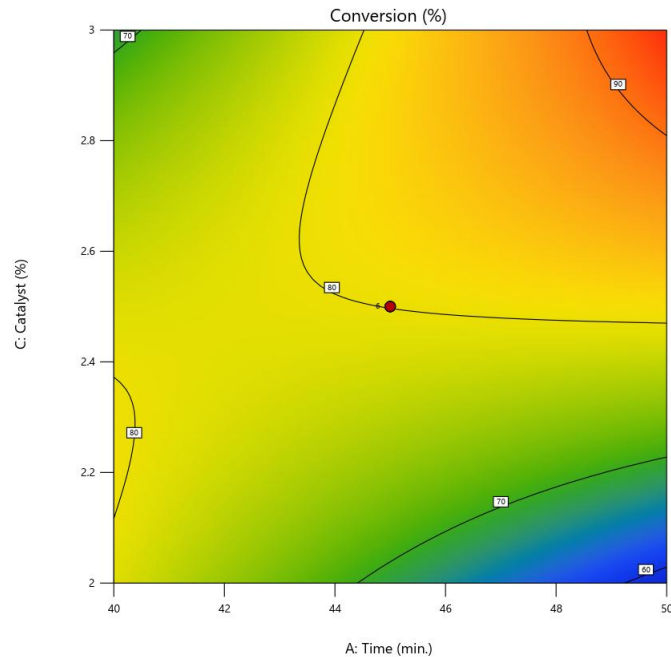
Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F-value	p-value	
Blocks	64.53	1	64.53			
Model	2473.93	7	353.42	16.22	< 0.0001	significant
A-Time	14.44	1	14.44	0.6628	0.4329	
B-Temperature	222.96	1	222.96	10.23	0.0085	
C-Catalyst	525.64	1	525.64	24.12	0.0005	
AC	1035.12	1	1035.12	47.49	< 0.0001	
BC	120.12	1	120.12	5.51	0.0386	
B ²	136.79	1	136.79	6.28	0.0292	
C ²	373.17	1	373.17	17.12	0.0016	
Residual	239.74	11	21.79			
Lack of Fit	134.49	7	19.21	0.7302	0.6646	not significant
Pure Error	105.25	4	26.31			
Cor Total	2778.20	19				



Überprüfung statistischer Annahmen

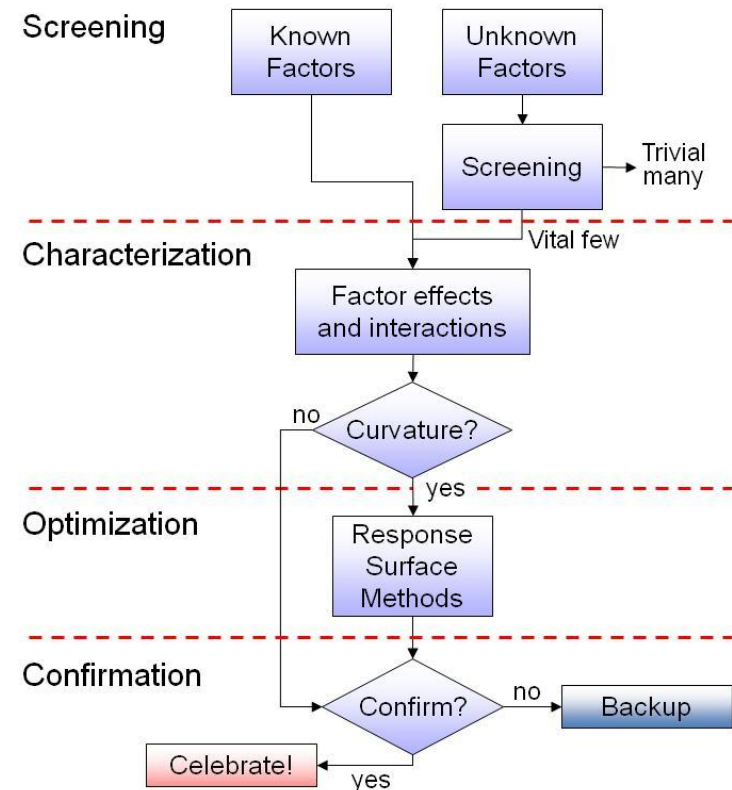
- Normalverteilung, Varianzgleichheit, Unabhängigkeit

Interpretation



- Zusammenhänge erkennen und Interpretieren
- Plausibilität prüfen

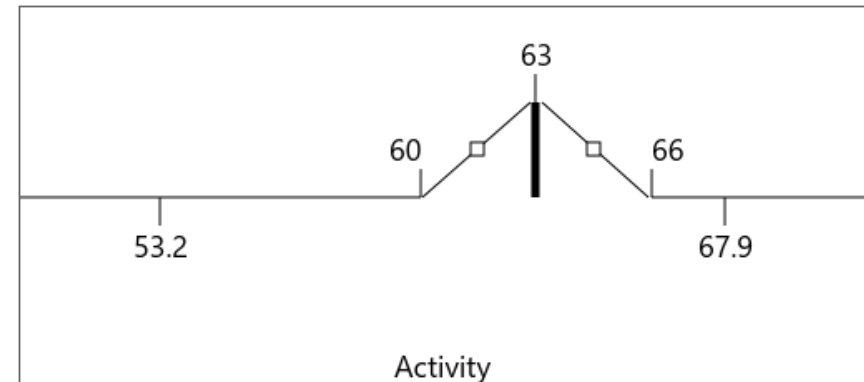
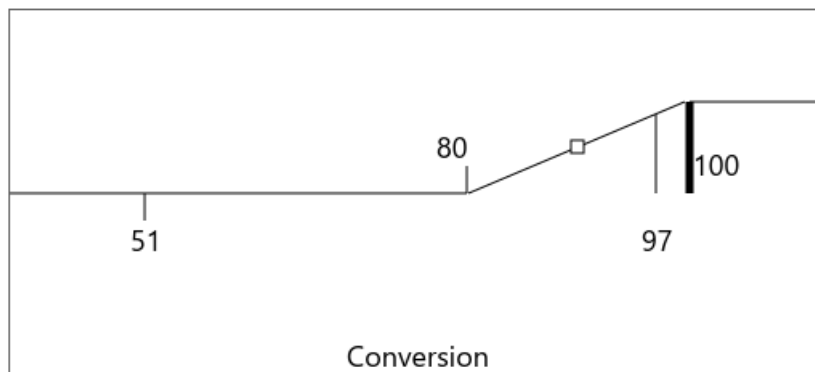
- Die Response Surface Methodik
- RSM-Versuchspläne
- Analyse
- **Optimierung mehrerer Zielgrößen**
- Zusammenfassung



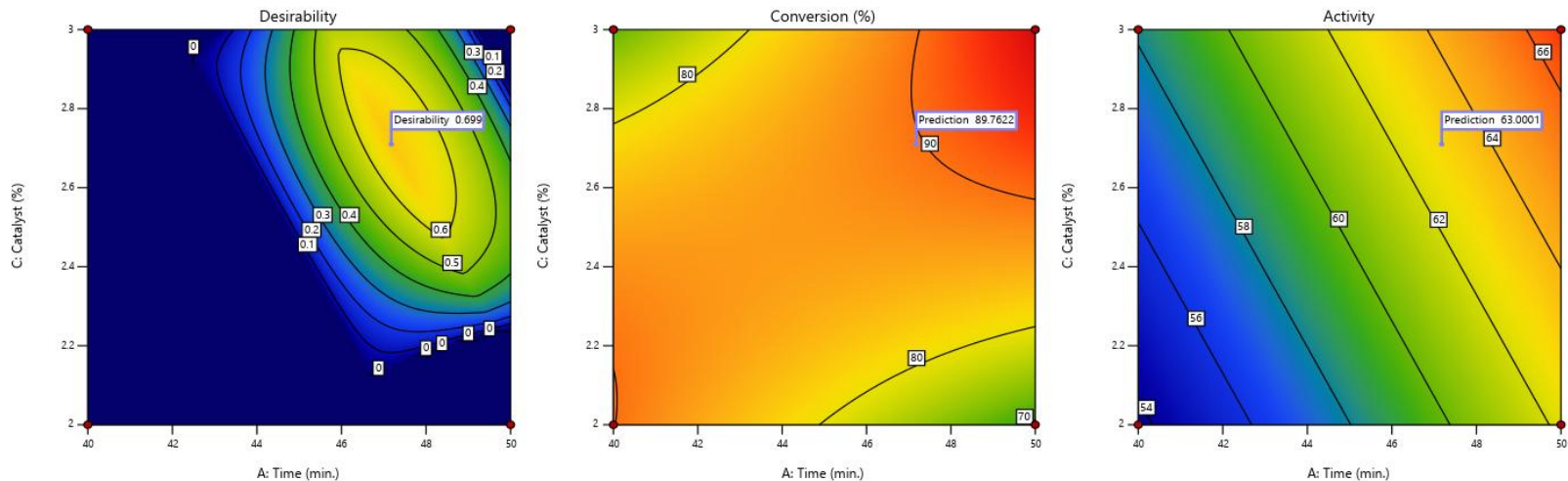
Nur mit einer guten Vorarbeit in den anderen Analyseschritten können bei der Optimierung valide Ergebnisse erzielt werden.

Bei der Optimierung werden diejenigen Faktoreinstellungen gesucht, welche im Hinblick auf alle Zielgrößen gleichzeitig die besten Werte liefern.

1. Ziele definieren:



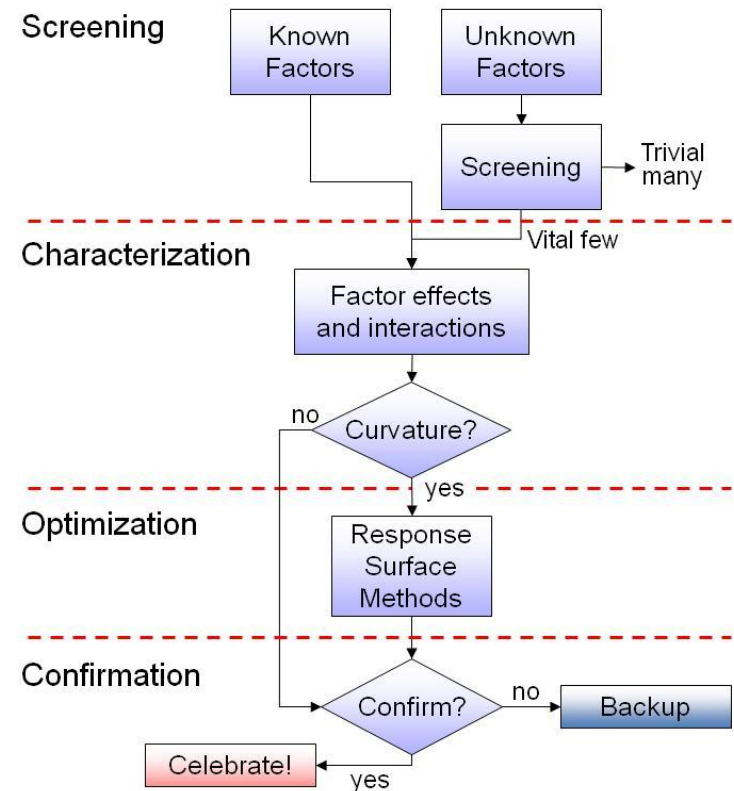
2. Kompromiss finden



3. Optional: Weitere Lösungen finden

- Priorisierung der Zielgrößen
- Kosten als zusätzliches Kriterium

- Die Response Surface Methode
- RSM-Versuchspläne
- Analyse
- Optimierung mehrerer Zielgrößen
- **Zusammenfassung**



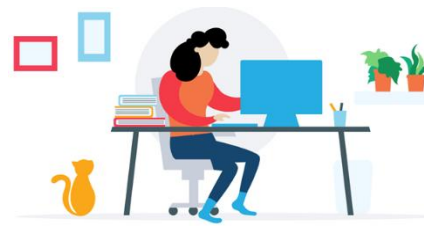
RSM-Designs werden verwendet, um die optimale Faktoreinstellungen der relevanten Faktoren zu ermitteln

Versuchspläne

- Klassisch: CCD; Algorithmisch: Optimale Designs

Analyse: In der Regel quadratische Modelle

Optimierung: Überlagerung verschiedener Ziele erlaubt es alle Qualitäts- und Kosten- Aspekte gleichzeitig zu berücksichtigen.



Schulungen der Statcon GmbH: www.statcon.de/shop/de/kurse

Wir bieten verschiedene Schulungen zu DoE an – wie Einführungsschulungen, Schulungen zur *Response Surface Methodology* oder zu Mischungsdesigns.

Kurstitel	Termine
Statistische Versuchsplanung – 3 Tagesintensivkurs	25.02.-27.02.2026 19.-21.05.2026 14.-16.10.2026 (Vor-Ort)
Einführung in die statistische Versuchsplanung	Inhouse & Auf Anfrage
Prozessoptimierung - RSM Designs	Inhouse & Auf Anfrage
Optimierung von Mixturen - Mischungsdesigns	Inhouse & Auf Anfrage

Erfahren Sie mehr: <https://www.statcon.de>

Kontakt: vertrieb@statcon.de

Möglichkeiten des Selbststudiums, um mehr zu lernen

Stat-Ease-Webinare: www.statease.com/webinars/

YouTube-Channel: www.youtube.com/c/StatisticsMadeEasybyStatEase

Eine Sammlung von Webinaren zu grundlegenden bis mittelschweren Themen.



Vielen Dank!

Fragen zu DOE? E-Mail: consult@statcon.de

Fragen zum Verkauf? E-Mail: vertrieb@statcon.de