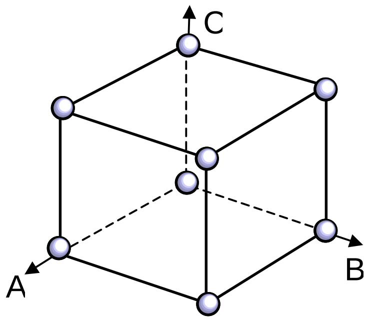
Mischungspläne

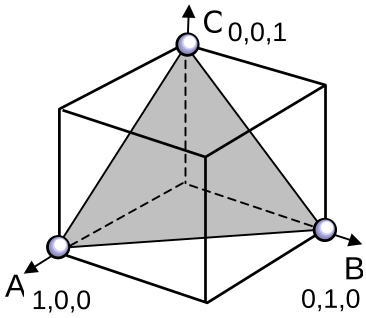
Bei Experimenten, bei denen es um Mischungen z.B. von chemischen Flüssigkeiten geht, werden in die Anteile in % angegeben. Was in normalen Versuchsplänen die Faktoren sind, sind in Mischungsplänen die verschiedenen Komponenten. Alle Anteile müssen in Summe 100% ergeben, was zu der folgenden Bedingung führt

$x_1 + x_2 + ... x_k = 1$ $\quad$ k = Anzahl Komponenten

und bedeutet, dass die Komponenten voneinander abhängig sind. Dies muss für die jeweiligen Versuche berücksichtigt werden und kann durch Standardversuchspläne nicht behandelt werden (bzw. nur mit Aufwand). Die möglichen Anteilskombinationen liegen in einem gleichseitigen Dreieck.
In den meisten Fällen gibt es 3 Komponenten. Der entsprechende Versuchsplan sieht im Vergleich zum „konventionellen“ wie rechts dargestellt aus:



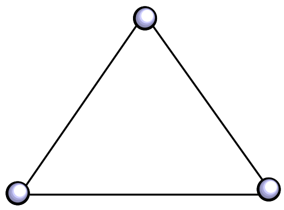
Vollfaktorieller Versuchsplan



Mischungsplan

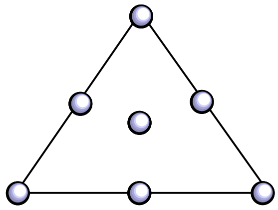
Kombinationen müssen sich innerhalb des grau dargestellten Bereiches befinden. Bei k=4 Komponenten liegen die möglichen Kombinationen in einem Tetraeder. Dreieck, Tetraeder und die entsprechenden Anordnungen bei mehr als 4 Komponenten heißen Simplexe, daher werden die Mischungspläne auch als Simplexpläne bezeichnet. Zur Bestimmung nur der „Haupteffekte“ wird ein Plan mit so genannten Typ „Grad 1“ verwendet. Dies entspricht einem linearen Versuchsplan.

Nr.	Komp. A	Komp. B	Komp. C
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1



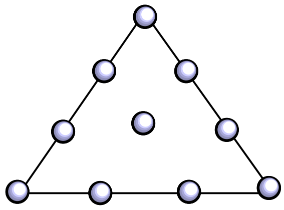
Ein Versuchsplan vom Typ Grad 2 ergibt folgende Kombinationen (zusätzlich mit Verwendung aller Komponenten in der letzten Zeile):

Nr.	Komp. A	Komp. B	Komp. C
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1
4	1/2	1/2	0
5	0	1/2	½
6	1/2	0	½
6	1/3	1/3	1/3



Hiermit können Wechselwirkungen und Nichtlinearitäten bestimmt werden. Die nächste Stufe ist Grad 3, was zur nächst höheren Kombinationen führt:

Nr.	Komp. A	Komp. B	Komp. C
1	1	0	0
2	0	1	0
3	0	0	1
4	1/3	2/3	0
5	2/3	1/3	0
6	0	1/3	2/3
7	0	2/3	1/3
8	1/3	0	2/3
9	2/3	0	1/3
10	1/3	1/3	1/3



Mit zunehmenden Faktoren und Grad nimmt die Anzahl der Versuche schnell zu, wie folgende Tabelle zeigt:

Kompon.	Grad 1	Grad 2	Grad 3	Grad 4
2	2	3	4	5
3	3	6	10	15
4	4	10	20	35
5	5	15	35	70
6	6	21	56	126
7	7	28	84	210

Anzahl Versuche in Abhängigkeit von der Anzahl Komponenten und vom Typ

Allgemein gilt für k=Anzahl Komponenten und g=Grad

$$m = \frac{k\cdot(k+1)\cdot(k+2)\cdot\ \ldots\ \cdot(k+g-1)}{1\cdot 2\cdot 3\ \ldots\ \cdot g}$$

Um den Aufwand zu begrenzen, setzt man auch hier D-Optimale Verfahren ein. Das Vorgehen ist dabei mit den konventionellen Plänen vergleichbar, weshalb hier nicht weiter darauf eingegangen werden soll.

Grad 1 entspricht dem Modell linear, Grad 2 quadratisch, usw. Die Bedingung $x_1 + x_2 + .. x_k = 1$ führt jedoch dazu, dass einige der Koeffizienten im allgemeinen Ansatz verschwinden. Die Auswertung von Mischungsplänen kann deshalb mit Ausnahme von Grad 1 nicht mit der Standardvariante der multiplen Regression erfolgen. Eine Alternative ist die Verwendung von Neuronalen Netzen, bei denen sich auch 3-fach-Wechselwirkungen oder komplexere Beziehungen approximieren lassen.