

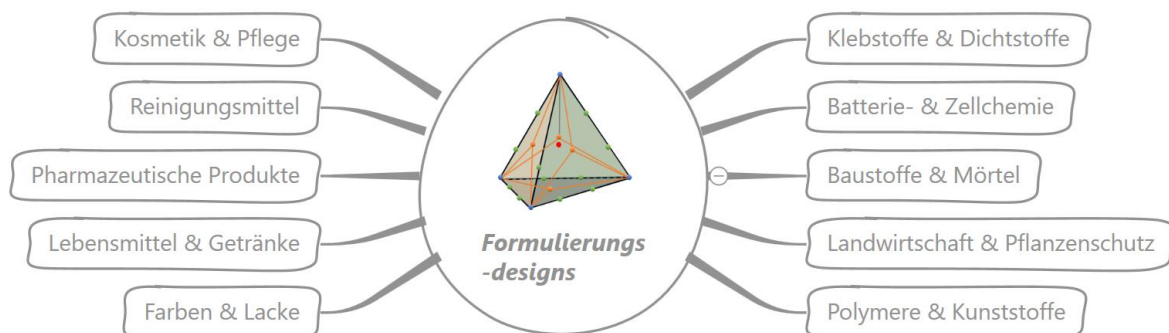


Abbildung 1 Titelbild Blog #54 Stefan Moser

Formulierungsdesigns im Griff – mit Mischungskreuz, Sweet Spot & Design Space

DoE-Happen #54: Verständlich erklärt & praktisch anwendbar

Formulierungsdesigns ohne Umwege – systematisch statt zufällig



In der Entwicklung komplexer Produkte wie Reinigungsmitteln, Kosmetika oder Lebensmitteln stellt sich schnell die zentrale Frage: Wie finde ich die „beste Mischung“? Klassische DoEs mit Stellvertretervariablen können erste Hinweise liefern, geraten jedoch spätestens bei mehr als drei Komponenten an ihre Grenzen. Genau hier setzen spezialisierte Mischungsdesigns an – und ermöglichen, was Standarddesigns oft nur eingeschränkt leisten können: den gezielten, vollständigen Blick auf den Mischungsraum.

In diesem Blog (#54) gehe ich bewusst einen Schritt weiter: Anhand einer bewusst vereinfachten, aber sehr praxisnahen Fallstudie mit vier Komponenten zeige ich, wie sich ein Formulierungsdesign strukturiert planen, analysieren und visualisieren lässt. Der Fokus liegt auf dem Mix aus Theorie, Praxis und Softwareunterstützung – mit einem klaren Ziel: Sie zu inspirieren, eigene DoEs auszuprobieren.

Was bisher geschah – und warum dieser Blog wichtig ist

In den Blogs #50, #51 und #53 haben wir die Grundlagen von Mischungsdesigns behandelt. Insbesondere ging es um die Frage, ob sich Formulierungen besser mit echten Mischungsdesigns oder mit Stellvertretervariablen in klassischen DoEs abbilden lassen.

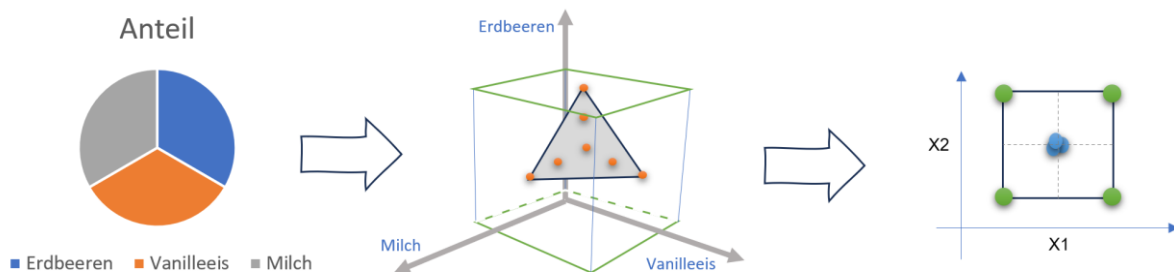


Abbildung 2: Design mit zwei Stellvertretervariablen, durch die drei Komponenten beschrieben werden.

Die Antwort: Für einfache Konstellationen kann der Stellvertreteransatz funktionieren. Doch bei mehr als drei Fraktionen wird er schnell unübersichtlich, schwer interpretierbar und in der Praxis unpraktisch.

Das Szenario: Ein biologisches Reinigungsmittel – mit vier Zutaten zur optimalen Mischung

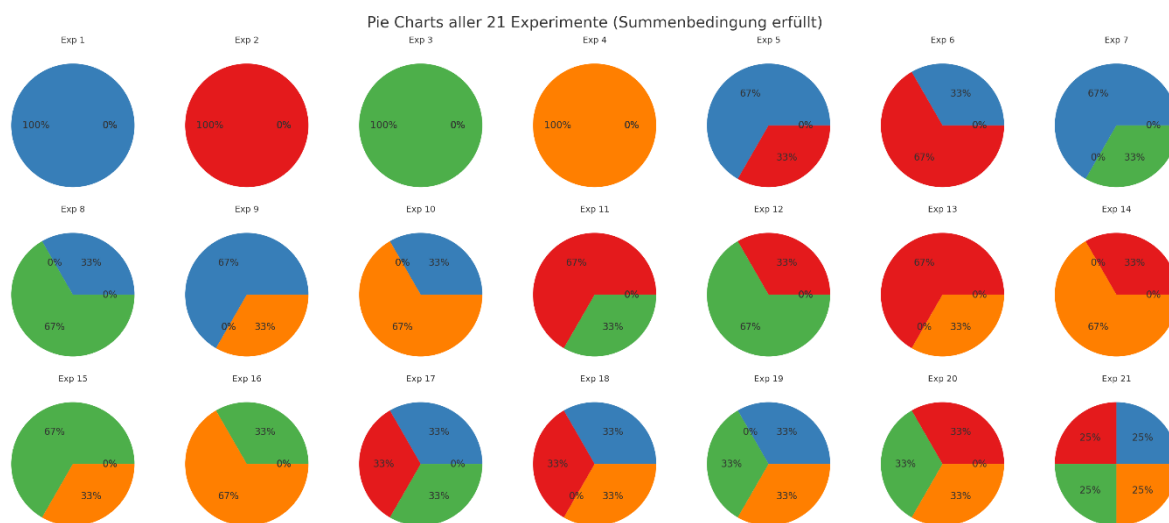


Abbildung 3 Verschiedene Möglichkeiten der Abmischungen zur Darstellung der Komplexität.

Die voranstehende Abbildung zeigt exemplarisch einige ausgewählte Abmischungen in Form von **Kreisdiagrammen (Pie Charts)**. Diese Visualisierung verdeutlicht die Vielfalt an möglichen Zusammensetzungen und deren oft nur schwer vergleichbare Relationen. So wird deutlich, wie komplex es ist, sinnvolle und ausgewogene Versuche „von Hand“ (z.B. mit dem *OFAT-Ansatz* „One factor at a time“) zu entwerfen. Gerade bei vier oder mehr Komponenten ergibt sich eine nahezu unüberschaubare Zahl an Varianten – weshalb ohne ein strukturiertes Design die Interpretation zur Herausforderung wird.

Genau deshalb steigen wir nun tiefer ein – mit einem vollständigen fiktiven Beispiel inklusive Versuchsplan, Visualisierung und Auswertung.

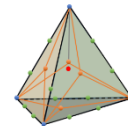
Das Beispiel:

Ein Unternehmen entwickelt ein umweltfreundliches Reinigungsmittel. Dabei kommen vier Hauptkomponenten zum Einsatz:

- **Natürliche Lösungsmittel** (wirksam, aber flüchtig)
- **Tenside** (schaumbildend, unterstützen Reinigung)
- **Stabilisatoren** (verlängern Haltbarkeit)
- **Enzymträger** (gezielte Wirkung auf biologische Rückstände)

Jede dieser Komponenten hat Stärken und Schwächen – keine allein erfüllt alle Anforderungen. Die Herausforderung: die richtige Mischung zu finden, die alle Ziele möglichst gut abdeckt. Und genau das ist eine klassische Aufgabe für ein gut geplantes Mischungsdesign.

Das Design: Modified Simplex Centroid mit Kanten- und Flächenpunkten



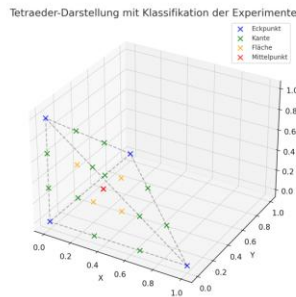
Für dieses Szenario eignet sich ein spezielles Design: das sogenannte "Modified Simplex Centroid Design mit **Kanten- und Flächenpunkten**". Damit lassen sich sowohl die Einzeleffekte als auch die Interaktionen und Nichtlinearitäten untersuchen.

- Die Summe aller Komponenten in einem Formulierungsdesign muss stets 100 % ergeben.
- Jede Komponente wird auch als Reinkomponente getestet, um ihre individuellen Effekte, mögliche Wechselwirkungen sowie nichtlineare Zusammenhänge zuverlässig erfassen zu können – und zwar auf Basis ausreichend verteilter, unabhängiger Experimente (Stützstellen).
- Zusätzlich wird eine zentrale Einstellung (25 % je Komponente) dreimal randomisiert wiederholt, um die Reproduzierbarkeit der Experimente zu überprüfen.

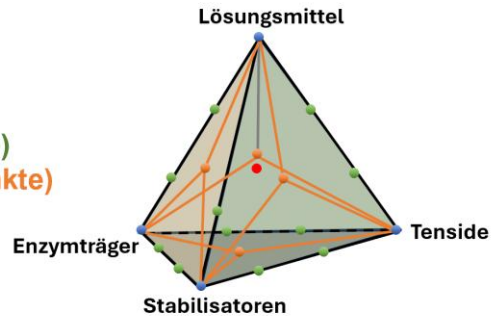
Der entstehende Versuchsraum ist systematisch aufgebaut und gleichzeitig praxisnah – ein guter Kompromiss zwischen statistischer Aussagekraft und realer Umsetzbarkeit. Dadurch können sowohl die Haupteffekte der einzelnen Formulierungsbestandteile als auch mögliche Wechselwirkungen (Verstärkungen oder Abschwächungen in Faktor-Kombination) sowie nichtlineare Zusammenhänge zuverlässig erkannt und analysiert werden.

Visualisierung der Versuche – der Tetraeder als Orientierung

Bei vier Komponenten wird die tabellarische Darstellung schnell komplex. Deshalb bietet sich eine visuelle Darstellung im **Tetraeder** an – einem dreidimensionalen Körper mit vier Eckpunkten, von denen jeder eine der Formulierungskomponenten repräsentiert.



- **Blau (Eckpunkte)**
- **Grün (Kantenpunkte)**
- **Orange (Flächenpunkte)**
- **Rot (Mittelpunkt)**



Der Aufbau der Versuche / Versuchsplan:

- **Blau (Eckpunkte): reine Komponenten (100 % von einem Medium)**
- **Grün (Kantenpunkte): Mischungen aus 2 Medien**
- **Orange (Flächenpunkte): Mischungen aus 3 Medien**
- **Rot (Mittelpunkt): gleichmäßige Mischung aus allen 4 Medien**

Diese Systematische Anordnung – bestehend aus Reinkomponenten, Kanten- und Flächenpunkten sowie einem zentralen Mischpunkt – sorgt dafür, dass alle relevanten Bereiche des Mischungsraums systematisch abgedeckt sind. Genau das ist entscheidend: Nur wenn genügend unabhängige Stützstellen vorhanden sind, können die Haupteffekte, Wechselwirkungen und nichtlinearen Zusammenhänge zuverlässig modelliert werden – und das bei einem noch überschaubaren Versuchsaufwand.

Zielgrößen und Antwortskalen – was soll optimiert werden?

Im Rahmen unserer Fallstudie betrachten wir drei exemplarische Zielgrößen, die häufige Anforderungen in der Produktentwicklung widerspiegeln:

- **Wirksamkeit** – die Reinigungsleistung, also wie gut Verschmutzungen entfernt werden,
- **Stabilität** – die Haltbarkeit und Widerstandsfähigkeit der Formulierung gegenüber äußeren Einflüssen,
- **Löslichkeit** – die Fähigkeit, sich vollständig und rückstandsfrei im Anwendungsmilieu Wasser zu lösen.

Die Bewertung dieser Zielgrößen erfolgt über passende Messgrößen, die je nach Anwendung ganz unterschiedlich ausfallen können – etwa Laboranalysen, technische Kennzahlen oder standardisierte Prüfmethoden. In unserem Beispiel dienen die Werte ausschließlich der Veranschaulichung, um die Methodik nachvollziehbar zu machen.

Sobald klar ist, welche Zielgrößen wirklich relevant sind – und wie sie gemessen werden können – lässt sich gezielt daran arbeiten, die Balance zu verbessern, Schwerpunkte zu setzen oder Kompromisse zwischen mehreren Anforderungen optimal auszutarieren.

Modellierung, Contourplots und Mischungskreuze – wie man sich im Raum orientiert

Hinweis: Die Modellierung selbst läuft – wie bei klassischen DoEs – nach bekannten Prinzipien ab und wird in diesem Beitrag nicht im Detail behandelt. Stattdessen liegt der Fokus auf einigen Besonderheiten in der Darstellung und Interpretation, die speziell bei Mischungsdesigns eine zentrale Rolle spielen: Contourplots, Mischungskreuze, Sweet Spot und Design Space Probability Plots.

Nach Durchführung der Versuche lassen sich für jede Zielgröße einzelne Modelle erstellen. Diese Modelle zeigen:

- wie stark die einzelnen Komponenten wirken,
- wie sich die Kombinationen der Komponenten gegenseitig beeinflussen (Interaktionen), ob sich Effekte verstärken oder abschwächen,
- und ob nichtlineare Zusammenhänge zwischen den Einflussgrößen bestehen.

Besonders hilfreich: die **Contourplots**. Sie zeigen die Zielgröße als Höhenlinien in einem Mischungsdreieck – also einer zweidimensionalen Projektion des Versuchsraums mit drei variierenden Komponenten. Weitere Komponenten (z. B. die vierte) werden dabei konstant gehalten, sodass sich der Einfluss der ausgewählten Variablen gut visualisieren lässt.

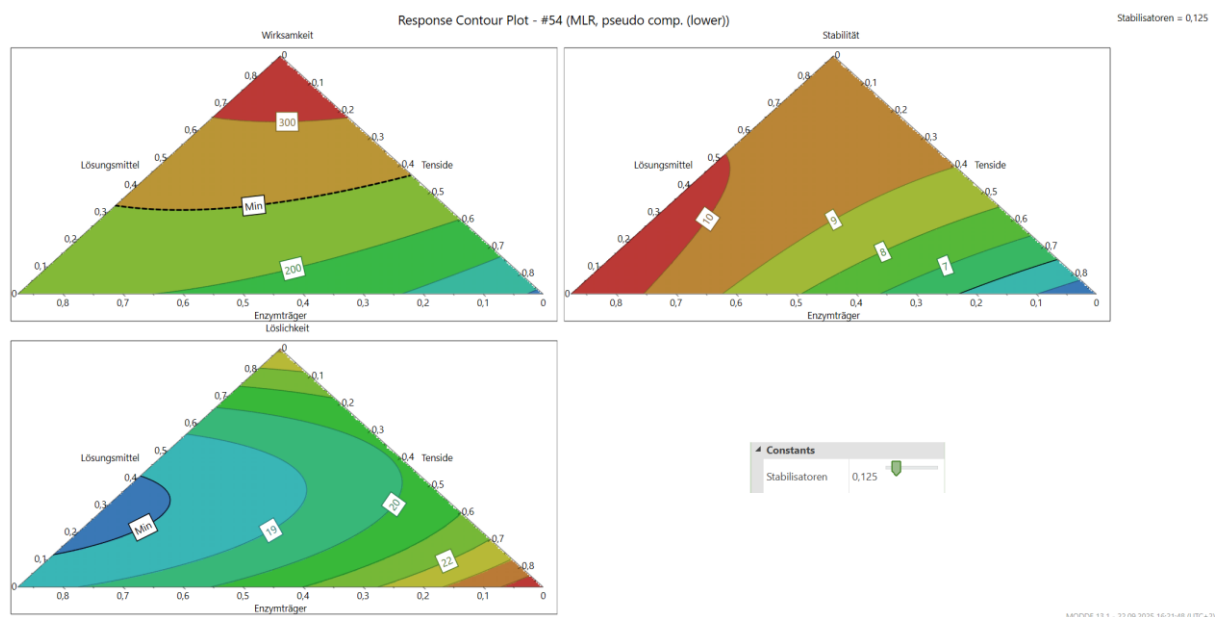


Abbildung 4 Contourplots für alle 3 Zielgrößen

Statt eines klassischen Fadenkreuzes kommt beim Navigieren durch den Mischungsraum das sogenannte Mischungskreuz zum Einsatz. Diese etwas ungewohnte, aber sehr hilfreiche Darstellungsform ermöglicht es, gezielt drei Komponenten zu variieren, während die restlichen konstant gehalten werden.

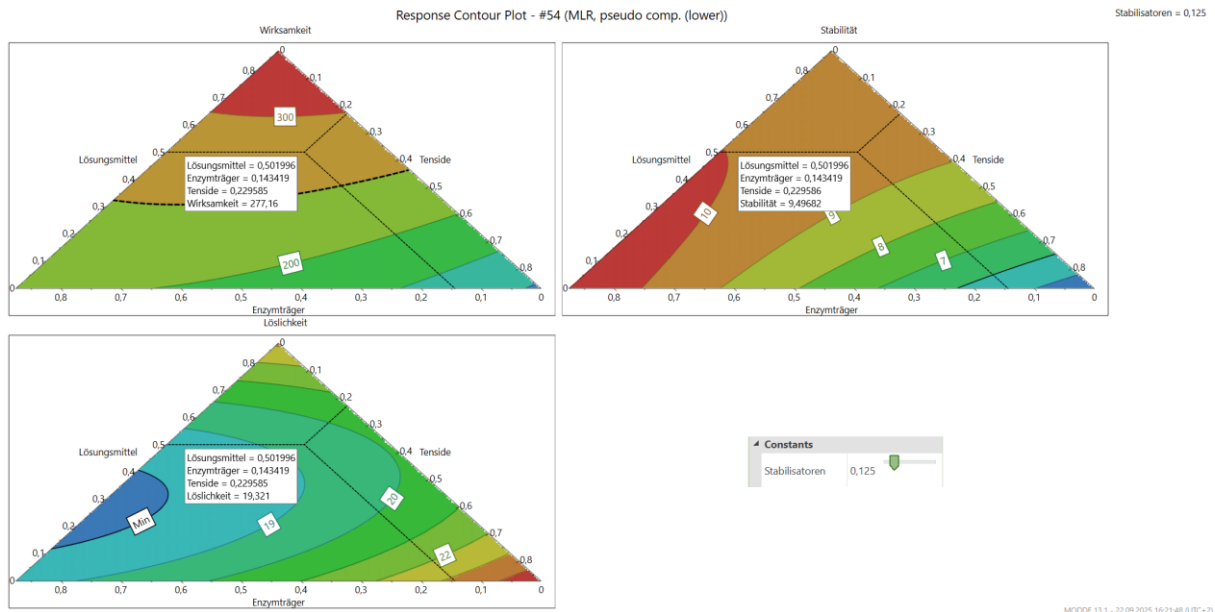


Abbildung 5 Contourplots für alle 3 Zielgrößen mit 3D Fadenkreuz / Mischungskreuz

Beispielsweise in der Software Modde lassen sich diese konstanten Faktoren ganz einfach über interaktive Schieberegler („Slider“) anpassen – die Contourplots reagieren direkt darauf. So wird auf einen Blick sichtbar, wie sich die Zielgrößen mit den veränderten Einstellungen verschieben. Eine sehr intuitive Art, sich durch den Raum zu bewegen und gleichzeitig Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge zu erkennen.

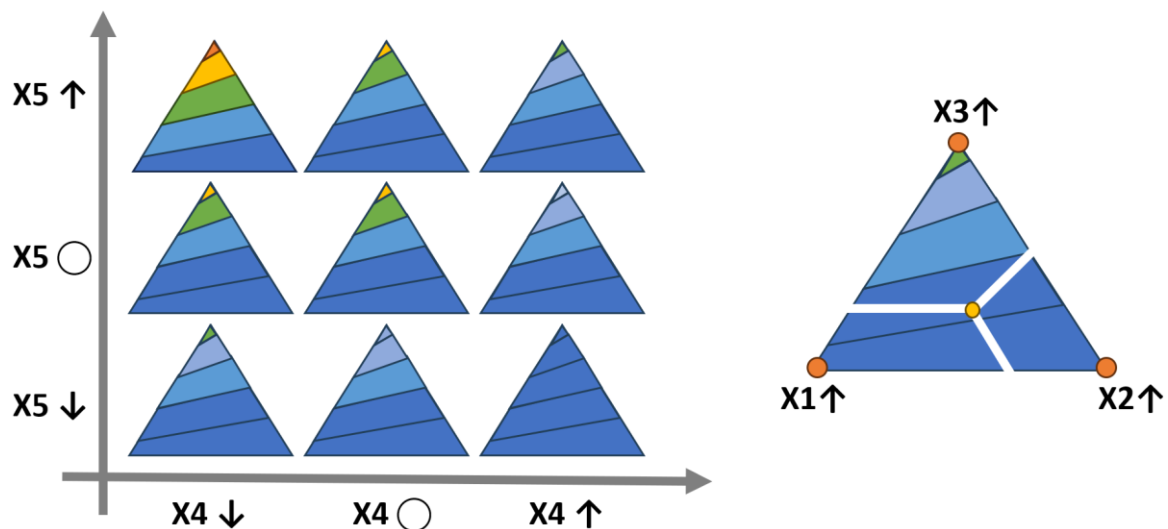


Abbildung 6 Schematische Darstellung von Mischungsdiagrammen mit 5 Faktoren

Modde erlaubt darüber hinaus die Darstellung mehrerer Mischungsdiagramme für eine Zielgröße – etwa bei vier oder fünf Einflussfaktoren. Hierbei werden zusätzliche Dreiecke in einer Matrix (z. B. 2x3 oder 3x3) angeordnet. Die inneren Achsen bleiben gleich, während die äußeren durch unterschiedliche Einstellungen der fixierten Faktoren (z. B. auf drei Levels) variiert werden. So lässt sich der Einfluss höherdimensionaler Faktoren nachvollziehbar abbilden – visuell und interaktiv.

Sweet Spot Analyse – Wo treffen sich alle Zielgrößen?

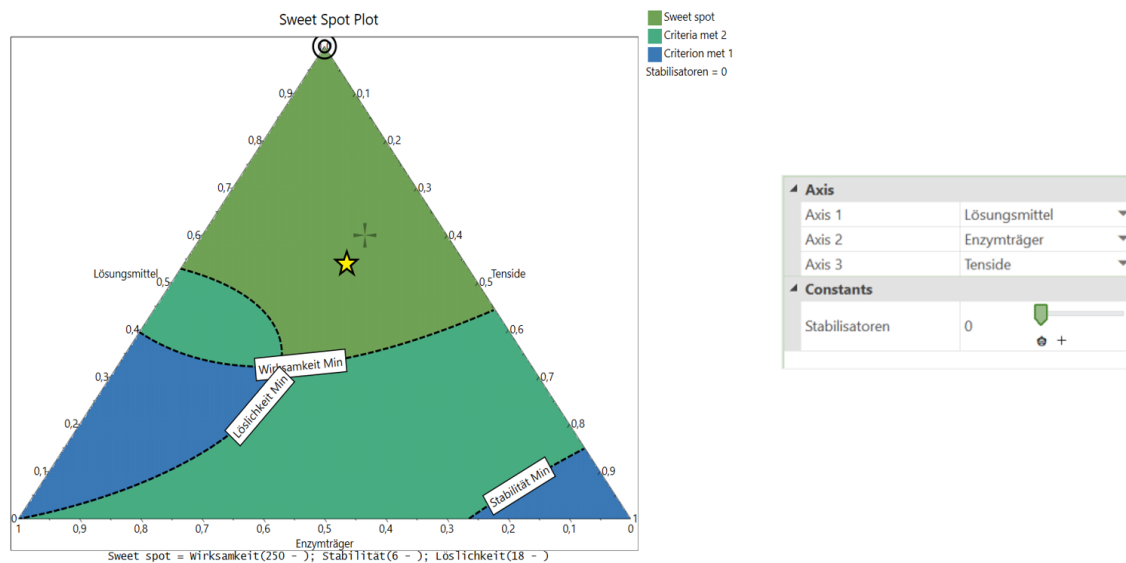


Abbildung 7 Sweet Spot Plot oder Venn Diagramm zur Darstellung der Zielerfüllung (grob, da ohne Modellfehler)

Der sogenannte Sweet Spot Plot gehört zu den anschaulichsten Auswertungen im Mischungsdesign. Er zeigt auf einen Blick, wo im Versuchsraum alle Zielgrößen gleichzeitig innerhalb ihrer Spezifikationen liegen – also der „gemeinsame Nenner“ aller Anforderungen. Die grün markierte Fläche steht dabei für die Kombinationen, bei denen das gelingt – ein guter erster Hinweis auf mögliche optimale Einstellungen.

Wichtig zu wissen: Diese Darstellung berücksichtigt nicht die Unsicherheit (Modelfehler) der Modelle – sie ist daher ein grober, aber hilfreicher Überblick, nicht mehr.

Design Space Probability Plot – mit Unsicherheiten rechnen

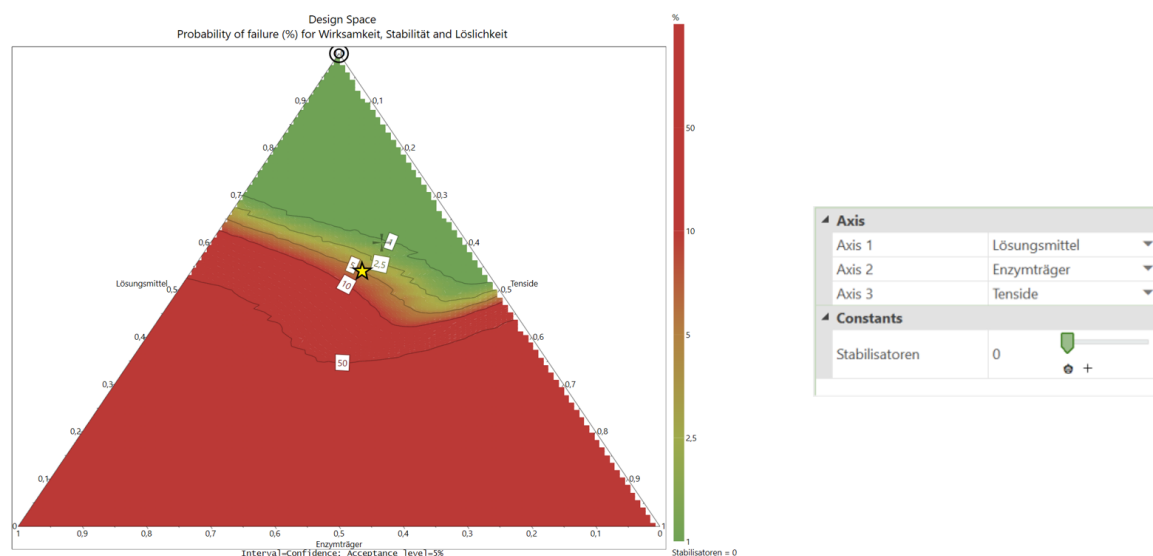


Abbildung 8 Abbildung des Probarbility Design Plots zur Visualisierung der Versagens -Wahrscheinlichkeit

Eine Weiterentwicklung stellt der Design Space Probability Plot dar. Dieser basiert auf Monte-Carlo-Simulationen und integriert zusätzlich die ortsabhängige Modellunsicherheit. Für jeden Punkt im Mischungsraum wird dabei berechnet, mit welcher Wahrscheinlichkeit an dieser Stelle eine Verletzung der Spezifikationen zu erwarten ist – also, dass nicht alle Zielgrößen gleichzeitig innerhalb ihrer Grenzen liegen. Die Ausgabe kann dabei als Prozentwert oder als ppm-Wert (Fehlerwahrscheinlichkeit pro Million) erfolgen.

Typische Ausgaben des Plots sind:

- Wahrscheinlichkeit (in %) oder Fehlerwahrscheinlichkeit pro Million (ppm) – also mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Verletzung der Spezifikationen zu erwarten ist,
- Cpk-Werte (Capability Index) – zur Beurteilung der Prozessfähigkeit in Bezug auf die definierten Zielgrößen können hier entsprechend abgeleitet werden.

Das ermöglicht realistische Aussagen zu Prozessfenstern, Toleranzen sowie zur Sicherheit und Robustheit – ein echter Mehrwert, gerade in regulierten Branchen oder bei kostensensitiven Produkten und starken Regulierungen. Für mich persönlich ist dieser Plot oft der Schlüssel, um fundiert zu entscheiden: Lohnt sich eine weitere Optimierung – und wenn ja, wo, warum und mit welchem Risiko bzw. mit welchen Erfolgsaussichten?

Praxistipp: Wie man ein Formulierungsdesign startet

- **Komponenten definieren (Methodische Planung)**
Welche Zutaten gehören zur Mischung? Welche Funktion haben sie im Produkt?
- **Versuchsraum planen:** Skizzieren Sie den Formulierungsraum – z. B. mit DoE-Software oder auf Papier. Welche Kombinationen sind technisch oder fachlich sinnvoll?
- **Machbarkeit prüfen – fachlich & praktisch**
Stimmen die Ansätze mit der Realität überein? (Materialverfügbarkeit, Labor, Technik, Logistik, Budget?)
- **Versuchsplanungsexpertise einbeziehen**
Holen Sie sich methodisches Know-how ins Boot: Sind die geplanten Kombinationen statistisch sinnvoll und effizient abbildbar?
- **Realitätscheck & ggf. Reduktion**
Ist der geplante Versuchsraum wirklich durchführbar? Wenn nicht: Skalieren Sie zurück – z. B. über Blockdesigns oder fokussierte Subräume.
- **Experimente durchführen & modellieren**
Führen Sie die geplanten Versuche durch und erstellen Sie statistische Modelle für Ihre Zielgrößen.
- **Optimieren & bewerten**
Analysieren Sie die Ergebnisse, erkennen Sie Trends – und finden Sie den besten Kompromiss für Ihre Anforderungen. Und vor allem: „Entsprechen Ihre Ergebnisse den Erwartungen, wenn nicht warum?“

- **Grenzen & Chancen dokumentieren**

Halten Sie fest, was funktioniert – und wo Zielkonflikte, Grenzen oder neue Fragen auftauchen.

- **Ergebnisse teilen & diskutieren**

Präsentieren Sie Ihre Erkenntnisse – und starten Sie eine kompetente Diskussion über nächste Schritte.

Ausblick / Rückblick

👉 Gab's einen Aha-Moment? Dann freue ich mich über ein kurzes Feedback – oder einen Kommentar, wo hat es bei Ihnen Klick gemacht.



Abbildung 9 Logo Stefan Moser Process Optimization

Mehr aus Ihren Prozessen rausholen?

Ob DoE-Grundlagen oder Spezialthemen wie Troubleshooting, Screening, Optimierung, Mischungsdesigns oder Robustheit – ich unterstütze Sie mit praxisnahen DoE-Trainings, gezielter Beratung und methodischer Begleitung. Auch bei MVDA, DFSS und QFD bin ich an Ihrer Seite – vom ersten Workshop bis zur robusten Umsetzung.

👉 Schreiben Sie mir: info@stefan-moser.com

🌐 Mehr unter: www.stefan-moser.com

Bleiben Sie experimentierfreudig und neugierig!

Ihr DoE-Trainer Stefan Moser

PS: Sie möchten diesen Blogbeitrag als PDF? Kein Problem – auf meiner Webseite im Bereich „Blog“ finden Sie alle Artikel bequem zum Download.