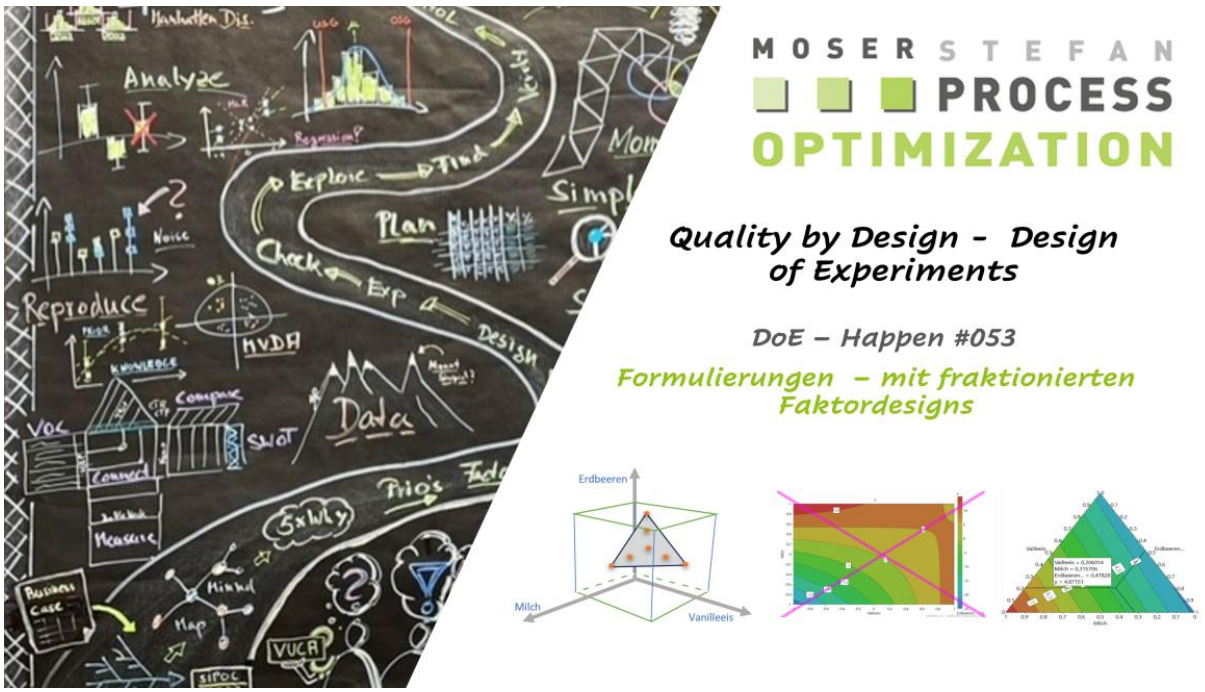

Abbildung 1 Titelbild Blog #53 Stefan Moser

DoE Blog #53: Effiziente Versuchsplanung für Rezepturen – mit fraktionierten Faktordesigns

1. Ausgangssituation – Das klassische Problem

In einem früheren Beitrag – konkret **Blog #51** – hatten wir uns mit der Herausforderung beschäftigt, ein klassisches Formulierungsdesign durch geeignete Transformation der Variablen effizienter zu gestalten. Dort gelang es uns, durch die geschickte Definition unabhängiger Stellvertretervariablen, die ursprüngliche Anzahl von sieben Faktoren auf sechs zu reduzieren.

Mithilfe eines fraktionierten Faktoriellen Designs (genauer: eines 2^{7-1}-Designs) konnten wir die Zahl der nötigen Versuche deutlich verringern, ohne auf die Analyse linearer Effekte und – wenngleich teilweise überlagert (confoundet) – zweifacher Wechselwirkungen zu verzichten. Entscheidend war damals wie heute: Die Grundformulierung der Mischung wurde über **Proportionen (Fraktionen im Sinne von Anteilen, Zutat_i / Gesamtsumme)** dargestellt, während kleinere Zusatzstoffe als separate, klassische Faktoren behandelt wurden.

Spannend war in diesem Projekt die Reaktion eines Kunden: Zunächst zeigte er sich skeptisch, ob sich drei Variablen wirklich sinnvoll durch zwei Verhältnisgrößen ersetzen lassen. Seine Sorge war, dass dadurch Information verloren gehen könnte und relevante Zusammenhänge übersehen würden. Erst im weiteren Verlauf – insbesondere durch die Visualisierung des Versuchsraums und die Rückrechenmöglichkeit – wurde ihm klar, dass genau das Gegenteil der Fall ist: Denn das eigentliche Problem lag darin, dass die

drei ursprünglichen Fraktionen *nicht unabhängig voneinander* untersucht werden können. Jede Veränderung einer Komponente erzwang automatisch eine Änderung der anderen – ein Umstand, der in einem klassischen Faktoriellen Design kaum beherrschbar ist. Die Transformation in unabhängige Verhältnisse löste dieses Dilemma elegant auf.

Diese Erkenntnis markierte einen Wendepunkt im Projekt – und bildet zugleich die Grundlage für das heutige Thema.

2. Einstieg über ein vereinfachtes Beispiel

> *Drei Zutaten, eine feste Gesamtsumme – klingt simpel, oder? Aber wie plant man dann gezielte Experimente?*

Um diesen Zusammenhang greifbarer zu machen, werfen wir heute einen Blick auf ein bewusst einfach gehaltenes Beispiel: einen klassischen Milchshake. Darin lassen sich die Herausforderungen eines Mischungsdesigns ebenso gut erkennen wie das Potenzial der Verhältnisbildung.

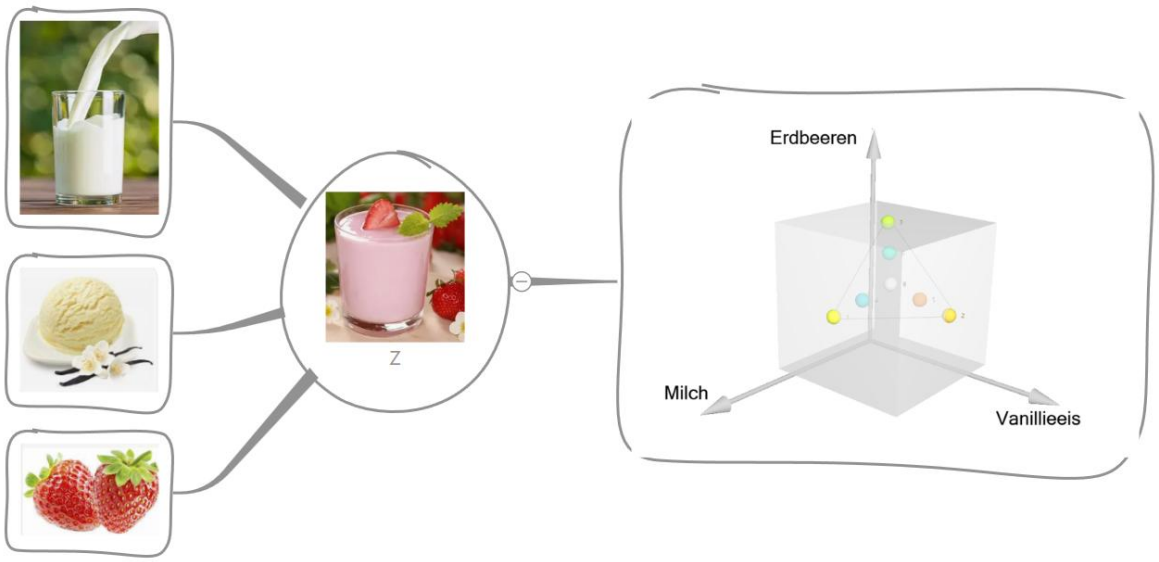

Abbildung 2 Milchshake und Design

Im Zentrum stehen drei Zutaten: Vanilleeis, Milch und Erdbeeren. In klassischen Mischungsdesigns ist die Summe der Proportionen (Fraktionen) stets konstant (z. B. 100 %). Eine Variation eines Faktors führt zwangsläufig zu einer Veränderung der anderen – die Faktoren sind also nicht unabhängig.

Beispiel: Wenn man in einem Milchshake mehr Erdbeeren hinzugibt, verringert sich zwangsweise der Anteil von Milch oder Vanilleeis. Das bedeutet zusätzlich: Solche Zusammenhänge lassen sich nicht mehr sinnvoll in einem klassischen 2D-Konturplot darstellen – sondern erfordern ein Ternär-Diagramm, diese sind Standardvisualisierungen für Dreifachmischungen mit Summenrestriktion.

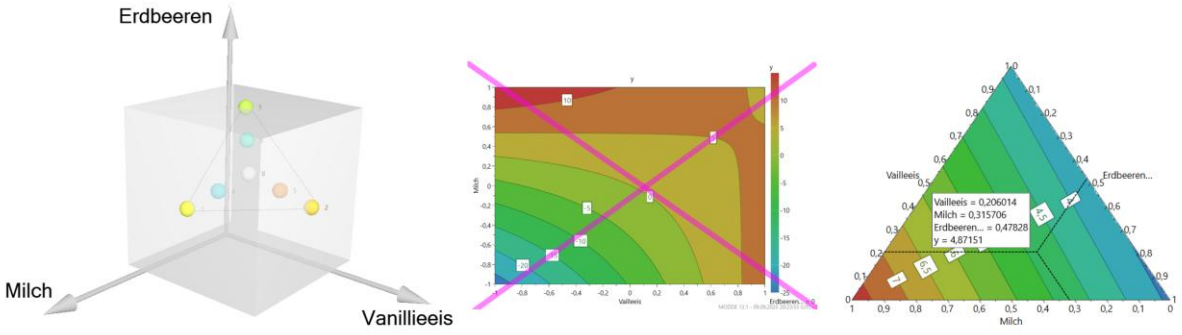

Abbildung 3 Formulierungsdesign und Contourplots

Voranstehend ein schematischer linearer Zusammenhang mit fiktivem Kontourplot

Im weiteren Verlauf zeigen wir, wie sich dieses Problem mithilfe von Verhältnisgrößen elegant umgehen lässt – und wie sich daraus ein sinnvoller, experimentell unabhängiger Faktorraum definieren lässt. Dabei soll jedoch nicht der Eindruck entstehen, dass sich jeder Faktor oder jede Faktorkombination problemlos durch einen repräsentativen Faktor ersetzen ließe. Jede Reduktion von Faktoren hat ihren Preis – sei es in Form von Interpretationsaufwand, Modellkomplexität oder Einschränkungen in der praktischen Anwendbarkeit.

3. Lösungsansatz – Repräsentative Faktoren statt Einzelzutaten

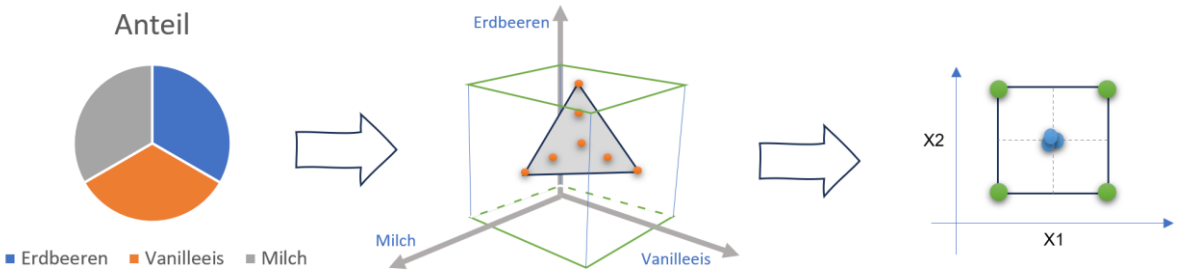

Abbildung 4 Formulierungsdesign und Transformation in ein Frac Fac Design

Statt mit den ursprünglichen Fraktionen Erdbeeren, Vanilleeis und Milch zu arbeiten, definieren wir zwei neue Variablen, z. B.:

- x_1 = Erdbeeren / Vanilleeis
- x_2 = Milch / (Vanilleeis + Erdbeeren)

Diese Größen sind bewusst so gewählt, dass sie unabhängig voneinander verändert werden können – trotz fixer Gesamtsumme. Damit wird aus einem eingeschränkten Ternärraum ein freier, rechteckiger Faktorraum. Dies entspricht dem mathematischen Freiheitsgradprinzip der Mischungsexperimente (k−1k-1k−1 für k Zutaten)

> ***Die Codierung auf –1 bis +1 ist kein Selbstzweck – sie schafft Vergleichbarkeit und Unabhängigkeit*. Im Standard der Mischungsdesigns werden Anteile auf 0–1 (Pseudo-Komponenten) oder –1 bis +1 (codierte Werte für die Regression) normiert. *Wie das funktioniert, zeige ich gleich. In der Praxis erledigt das Ihre DoE-Software meist automatisch – und es lohnt sich, zu verstehen, was sie da eigentlich tut.***

Allerdings nutzen wir zur Analyse ausschließlich die „kodierten Variablen", das heißt: Die ursprünglichen Verhältnisgrößen x_1 und x_2 werden durch lineare Transformation auf den Bereich –1 bis +1 normiert:

- $x1_{codiert} = \frac{x1 - Mitte\ x1}{(\frac{Max\ X1 - Min\ x1}{2})}$
- $x2_{codiert} = \frac{x2 - Mitte\ x2}{(\frac{Max\ X2 - Min\ x2}{2})}$

Diese Skalierung ist erforderlich, um die Effekte unabhängig voneinander zu analysieren und eine unabhängige Bewertung der Einflussgrößen zu ermöglichen.

> ***Ergebnis:*** *Statt die Summe der Zutaten ständig im Blick zu behalten, tragen die Verhältnisgrößen diese Bedingung quasi schon in sich – wie eingebaute Spielregeln.*

4. Von der Mischung zum Design – Schritt für Schritt

Um die Transformation von einem klassischen Mischungsdesign hin zu einem Verhältnis-basierten Faktorraum greifbar zu machen, nehmen wir ein einfaches, aber praxisnahes Beispiel: **den Milchshake**.

Realistische Einsatzbereiche:

- Erdbeeren: 100–200 g
- Vanilleeis: 150–250 g
- Milch: 200–300 g

Diese Werte spiegeln typische Rezepturbereiche wieder – mit Schwankungen, wie sie auch in der Entwicklung realer Produkte auftreten.

Die Herausforderung: Alle drei Zutaten hängen über die feste Gesamtmenge zusammen – klassische Mischungsproblematik. Deshalb braucht es eine Transformation, mit der sich die Effekte unabhängig voneinander analysieren lassen.

5. Transformation: Von Zutaten zu codierten Verhältnisgrößen

Exp Nr.	codiert		Verhältnisse		Orginal Zutaten			Hilfsgröße
	x1	x2	x1	x2	Erdbeeren	Vanilleeis	Milch	S
1	-1,00	-1,00	0,4	0,57	86	214	171	300
2	1,00	-1,00	1,35	0,57	173	127	171	300
3	-1,00	1,00	0,4	1,2	86	214	360	300
4	1,00	1,00	1,35	1,2	173	127	360	300
5	0,00	0,00	0,88	0,89	158	142	267	300
6	0,00	0,00	0,88	0,89	158	142	267	300
7	0,00	0,00	0,88	0,89	158	142	267	300

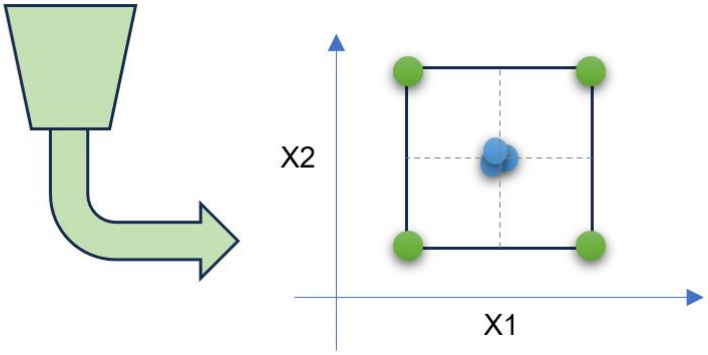

Abbildung 5 Versuchsplan und Design

Obwohl im Beispiel die ursprünglichen Zutaten (Erdbeeren, Vanilleeis, Milch) tabellarisch aufgeführt werden, dienen sie lediglich der didaktischen Herleitung und Validierung. Das eigentliche Design basiert vollständig auf den codierten Verhältnisgrößen x_1 und x_2 – als unabhängige Stellvertreter der Mischung.

Diese beiden Variablen wurden so definiert und skaliert, dass sie unabhängig voneinander variiert und für die Modellierung verwendet werden können. Damit lässt sich ein vollständiges 2-Faktor-Design aufbauen, das lineare Effekte und Wechselwirkungen systematisch untersucht – ohne die Einschränkungen klassischer Mischungsdesigns.

Die Versuchspunkte decken den relevanten Faktorraum möglichst gleichmäßig ab, was besonders bei Simulationen und Optimierungen von Vorteil ist. So lassen sich sinnvolle Rezepturbereiche gezielt eingrenzen.

Hinweis: In Formulierungsdesigns werden die Zutaten von >=0 (0%) bis <=1 (100%) verwendet und auch so dargestellt.

6.Rückrechnungsformeln

> ***Klingt das abstrakt? Dann schauen wir uns an, wie man wieder zurück zur echten Rezeptur kommt – inklusive Milch und Erdbeeren.***

Gegeben sind die Verhältnisgrößen x_1 und x_2. Um die ursprünglichen Zutatenmengen zurückzurechnen, gilt:

1. **Summe der festen Bestandteile (S):**
   S = Erdbeeren + Vanilleeis
2. **Rückrechnung Erdbeeren und Vanilleeis:**
   $\text{Erdbeeren} = \frac{x1}{1+x1} \cdot S$
   Vanilleeis = S − Erdbeeren
3. **Rückrechnung Milch:**
   Milch = x_2 * S

Mit diesen beiden Variablen können wir die Zusammenhänge zwischen den Zutaten **unabhängig** variieren und erhalten trotzdem die **reale Rezepturstruktur** vollständig zurück.

> *Kennen Sie dieses Gefühl, wenn die Rückrechnung plötzlich exakt mit den Originalwerten übereinstimmt? Genau das wollen wir.*

👉 In der Tabelle mit den Rückrechnungswerten sehen Sie: Die berechneten Mengen stimmen exakt mit den Ausgangswerten überein… damit ist der Rechenweg nachvollziehbar belegt – und das Modell in der Praxis bestätigt.

7. Vorteile dieses Ansatzes

- Unabhängige Variierbarkeit der repräsentativen Faktoren
- Reduktion der Dimensionalität: Von 3 auf 2 unabhängige Variablen
- Schnellere und günstigere Versuchspläne (ca. 50 % Einsparung)
- Gewohnte Darstellbarkeit in Konturplots
- Möglichkeit zur Implementierung in Algorithmen oder adaptive Steuerungen
- Modellierbarkeit von Ursache-Wirkung-Zusammenhängen
- Erweiterbar durch Codierung und Skalierung
- Ergänzbar auf RSM-Designs für nicht lineare Zusammenhänge möglich, daher auch die Centerpoint für die Relevanz Prüfung vorab.
- Fehleranalyse pro Variable möglich

8. Grenzen des Ansatzes

- Für mehr als drei Fraktionen empfiehlt sich die Trennung in „Basismischung“ (z. B. 80–90 %) und einzelne Additive (<5 %), wobei Additive wie klassische Faktoren behandelt werden können.
- Für komplexere Designs mit Nebenbedingungen und Prozessfaktoren sind **vollständige Mischungsdesigns** (Simplex-Lattice, D-optimal, Centroid)

notwendig und meist zusätzliche quantitative Faktoren (z. B. Temperatur, Additive) involviert.

- Orthografie: „Menge kann je nach Aufbau des Designs von 100 Teilen abweichen, kann aber leicht auf Anteile oder Prozente zurückgerechnet werden.

9. Praxistipp: Wie man damit startet

1. Formuliere die Verhältnisgrößen x_1 und x_2.
2. Schätze und plane den Versuchsraum für diese (z. B. DoE-Plan mit 2-Level Designs + Centerpoints, um ggfs. Nichtlinearitäten abzuschätzen + Wiederholungsfehler)→ Durch Abgleich des Versuchs Plans
3. Führe Rückrechnung durch, um sicherzustellen, dass alle realen Mischungen praktikabel sind. (Technisch, und im Abgleich der fachlichen Expertise)
4. Skalieren (Variablen Variation eingrenzen durch Simulation der Experimente) bis Versuchsplan / Faktorraum zielführend.
5. Exp. Abarbeiten und Daten modellieren.
6. Optimieren.

10. 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 6 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.