

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung.....	1
2. Stand der Technik	3
2.1 Prozessautomatisierung.....	3
2.2 Speicherprogrammierbare Steuerungen.....	7
2.3 Open Platform Communication Unified Architecture.....	9
2.4 Chromatographie.....	11
2.5 Maschinelles Lernen	14
2.6 Künstliche neuronale Netze	16
2.6.1 Neuronen.....	17
2.6.2 Architektur von künstlichen neuronalen Netzen.....	19
2.6.3 Training von künstlichen neuronalen Netzen.....	21
2.6.4 Anwendung künstlicher neuronaler Netze in der Verfahrenstechnik ..	23
2.6.5 Anwendung künstlicher neuronaler Netze in der Chromatographie ...	25
3. Material und Methoden	36
3.1 Automatisierung	36
3.1.1 Hardware	36
3.1.2 Software.....	38
3.2 Simulation	40
3.2.1 Hardware	40
3.2.2 Software.....	40
3.3 Parallelisierung der Simulationen	41

Inhaltsverzeichnis

4. Automatisierung.....	44
4.1 Bio-Manufacturing Prozess	46
4.1.1 Physische Ebene	48
4.1.2 Programmcode Ebene	49
4.1.3 Netzwerkebene.....	51
4.2 Gesamtprozesssteuerung.....	53
4.3 Mobiles PAT System.....	56
4.4 Digitaler Zwilling Schnittstelle am Beispiel der ATPE von pDNA.....	58
4.5 Phytoextraktion.....	64
4.5.1 Automatisierte Mehrsäulenextraktion.....	64
4.5.2 Druckgestützte Heißwasserextraktion	65
5. Parameterbestimmung mittels künstlicher neuronaler Netze	67
5.1 Parameterbestimmung Langmuir-Isotherme	67
5.1.1 Datensatzgenerierung	68
5.1.2 Entwicklung des künstlichen neuronalen Netzes.....	74
5.1.3 Ergebnisse	75
5.1.4 Fazit.....	85
5.2 Parameterbestimmung SMA für Mixed-Mode Chromatographie	86
5.2.1 Datensatzgenerierung	87
5.2.2 Entwicklung des künstlichen neuronalen Netzes.....	96
5.2.3 Ergebnisse Zeitstempelmethode.....	98
5.2.4 Ergebnisse der Fit-Parameter-Methode	103
5.2.5 Diskussion.....	107

5.3	Online-Parameterbestimmung für präparative Chromatographie	109
5.3.1	Datensatzgenerierung	113
5.3.2	Ergebnisse Fluiddynamik und Packung	119
5.3.3	Ergebnisse Phasengleichgewicht	120
5.3.4	Gleichzeitige Prädiktion von Phasengleichgewichts-, Fluiddynamik- und Säulenpackungsparametern	123
5.3.5	Fazit.....	128
6.	Diskussion	130
7.	Zusammenfassung	137
8.	Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	143
8.1	Formelzeichen.....	143
8.2	Griechische Symbole.....	144
8.3	Abkürzungen.....	144
9.	Abbildungsverzeichnis	147
10.	Tabellenverzeichnis.....	152
11.	Literaturverzeichnis	154
12.	Anhang	185