

## Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung.....</b>	<b>1</b>
<b>2. Stand der Technik .....</b>	<b>3</b>
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
<b>3. Material und Methoden .....</b>	<b>36</b>
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

<b>4. Automatisierung.....</b>	<b>44</b>
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
<b>5. Parameterbestimmung mittels künstlicher neuronaler Netze .....</b>	<b>67</b>
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 Fluidodynamik und Packung .....	119
5.3.3	Ergebnisse Phasengleichgewicht .....	120
5.3.4	Gleichzeitige Prädiktion von Phasengleichgewichts-, Fluidodynamik- und Säulenpackungsparametern .....	123
5.3.5	Fazit.....	128
6.	<b>Diskussion .....</b>	<b>130</b>
7.	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>137</b>
8.	<b>Symbol- und Abkürzungsverzeichnis .....</b>	<b>143</b>
8.1	Formelzeichen.....	143
8.2	Griechische Symbole.....	144
8.3	Abkürzungen.....	144
9.	<b>Abbildungsverzeichnis .....</b>	<b>147</b>
10.	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>152</b>
11.	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>154</b>
12.	<b>Anhang .....</b>	<b>185</b>