

Abschlussbericht zu BMLE-Projekt

**Intensivierung von Separationsprozessen in der Lebensmittelindustrie durch Digitale
Zwillinge und intelligente Prozesskontrolle (InSeLDiP)**

Gefördert durch die Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung

Förderkennzeichen: 281A503A19

Laufzeit des Vorhabens: 15.10.2020 – 14.10.2023(AIS)/31.01.2024(STT)

Berichtszeitraum des Vorhabens: 15.10.2020 – 14.10.2023(AIS)/31.01.2024(STT)

Inhalt

I. Kurzdarstellung	2
1. Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie der wissenschaftliche und technische Stand der Technik	2
2. Ablauf des Vorhabens.....	2
3. Wesentliche Ergebnisse	2
II. Eingehende Darstellung	3
1. Übersicht über die durchgeführten Arbeiten	4
2. Erläuterung der wichtigsten Positionen im zahlenmäßigen Nachweis	22
3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeit	22
4. Voraussichtliche Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse	22
5. Änderung im wissenschaftlichen und technischen Stand der Technik während der Projektlaufzeit	23
6. Übersicht über erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse	23
III. Erfolgskontrollbericht	25
1. Wissenschaftlich-technische Ergebnisse des Vorhabens, erreichte Nebenergebnisse und gesammelte wesentliche Erfahrungen	26
2. Fortgeschriebener Verwertungsplan zum Sachbericht	28
3. Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben	29
4. Einhaltung der Ausgaben- und Zeitplanung	29



I. Kurzdarstellung

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung und wiss. / techn. Stand der Technik

Der steigende Wettbewerbsdruck fordert die zunehmende Automatisierung und Digitalisierung der deutschen Lebensmittelindustrie. Für etablierte Separationsprozesse wie die Crossflow (CF) oder die Dynamische Crossflow (DCF) Filtration werden teilweise bereits digitale Zwillinge eingesetzt, um Prozessstruktur und -verhalten abzubilden. Zudem werden in der Literatur verschiedene Optimierungsmethoden für CF-Prozesse basierend auf Neuronalen Netzen, genetischen Algorithmen, empirischen und mechanistischen Modellen diskutiert. Am Beispiel mechanischer Komponenten wird gezeigt, dass Datenanalyseergebnisse gezielt verbessert werden können, wenn diese mit physikalischen Modellen oder Expertenwissen kombiniert werden. Diese Optimierungsansätze erfordern aber eine Digitalisierung der CF, der DCF sowie auch neuer innovativer Produktionsprozesse wie den Rotor-Stator-Magnet-Separator (RSMS). Im Projekt InSeLDiP sollen generalisierbare Digitalisierungskonzepte für Separationsanlagen entworfen werden, um in Echtzeit Prozessdaten zu erfassen und diese in Kombination mit bisher nicht genutzten historischen Datensätzen zu verarbeiten. Ziel ist ein hybrider digitaler Zwilling bestehend aus datengetriebenen Ergebnissen, vorhandenem Expertenwissen und formalisierten physikalischen/empirischen Modellen, der das Bedienpersonal dabei unterstützt, eine optimierte, nachhaltige Verfahrensweise und eine hohe Ressourceneffizienz zu erreichen. Die Schwerpunkte des Projekts umfassen:

1. Anbindung von Produktionsanlagen und Nutzung von Echtzeitdaten zur Digitalisierung bestehender (Brownfield) und neuer Produktionsprozesse (Greenfield).
2. Unterstützung bei der Entscheidungsfindung in der Produktion durch Nutzung vorhandenen Expertenwissens und Nachvollziehbarkeit von Analyseergebnissen.
3. Kombination von mechanistischen Modellen, menschlichem Expertenwissen und datengetriebenen Verfahren für die Online-Optimierung von Produktionsprozessen und zur Steigerung der Ressourceneffizienz.

2. Ablauf des Vorhabens

AP 1: Anforderungsermittlung

Zu Beginn des Projektes werden die zu betrachtenden Anwendungsfälle genau festgelegt und daraus systematisch Anforderungen an das Digitalisierungskonzept abgeleitet.

AP 2: Digitalisierung von Produktionsprozessen

Zur Digitalisierung bestehender Anlagen werden diese zielgerichtet mit zusätzlicher (virtueller) Sensorik sowie Konnektivitätslösungen über Hard- und Softwaregateways nachgerüstet, um



die Prozessdaten gezielt und strukturiert zu erheben, nutzbar zu machen, zentral zu sichern und für die Weiterverarbeitung in standortsübergreifenden Cloudumgebungen bereitzustellen.

AP 3: Hybride Digitale Zwillinge

Für die Anwendungsfälle werden zur Prozessoptimierung hybride digitale Zwillinge erstellt. Sie bestehen a) aus mechanistischen Modellen, die prozessrelevante Zusammenhänge mathematisch und durch Multiphysikansätze abbilden, um z.B. messtechnisch nicht erfassbare Größen zu beschreiben, und b) aus datengetriebenen Modellen, für die die in AP 2 erfassten Prozessdaten mit historischen Datensätzen kombiniert und analysiert werden.

AP 4: Prozessoptimierung und Assistenz

Zur Nachvollziehbarkeit des digitalen Zwillings wird das Expertenwissen des Bedienpersonals erhoben und mithilfe dessen ein Assistenzsystem konzipiert, das die Ergebnisse und Empfehlungen des digitalen Zwillings anzeigt und (nach Quittierung) automatisiert umsetzt.

AP 5: Evaluation des Gesamtansatzes

Zum Abschluss werden die entwickelten Konzepte an den Anwendungsfällen evaluiert.

3. Wesentliche Ergebnisse

Im Projekt InSeLDiP entstand seitens TUM ein Digitalisierungskonzept mit (virtueller) Sensorik und neuen digitalen Modellen für Greenfield-Anlagen am Beispiel RSMS sowie ein Konzept für die Nachrüstung der Systemarchitektur für Brownfield-Anlagen (CF, DCF) zur Datenerhebung und zum Einsatz des digitalen Zwillings im Feld sowie in der Cloud. Wir evaluierten Kommunikationsprotokolle, Datenbanktechnologien und Edge-Hardware. Automatisierte Verfahren verbesserten die DCF-Prozessdatenqualität und wurden für verschiedene Anwendungsfälle angepasst. Durch Datenanalyse und Expertenvalidierung entstand ein datengetriebenes Modell zur Prozessoptimierung, insbesondere zur Vorhersage des Transmembrandrucks in DCF-Anlagen. Darüber hinaus wurden Empfehlungen zur Reinigungsoptimierung abgeleitet. Die Vorhersagen der KI und die relevanten Prozessdaten wurden visualisiert, um das Bedienpersonal bei Entscheidungen zu unterstützen. Die Kommunikation zwischen dem digitalen Zwilling und dem Bedienpersonal wurde für potenzielle automatisierte Prozesseingriffe konzipiert. Es wurden innovative mechanistische Modelle für den RSMS entwickelt und erfolgreich validiert. Diese Modelle wurden sowohl für die Entwicklung virtueller Sensoren als auch für die Prozessoptimierung mithilfe von Bayes'schen Optimierungsalgorithmen genutzt. Mechanistische Modelle wurden im Digitalen Zwilling implementiert, um eine bidirektionale Kommunikation mit der Prozesssteuerung zu ermöglichen und Handlungsempfehlungen während des Betriebs zu geben.



II. Eingehende Darstellung (max. 20 Seiten)

1. Übersicht über die durchgeführten Arbeiten

Im Folgenden werden erst die im Projekt InSeLDiP betrachteten Anwendungsfälle für Separationsprozesse (Arbeitspaket 1) und anschließend die Projektergebnisse aus den Arbeitspaketen 2 bis 5 der Technischen Universität München, getrennt nach Arbeiten des Lehrstuhls für Bioseparation Engineering (STT) am RSMS und des Lehrstuhls für Automatisierung und Informationssysteme (AIS) am DCF vorgestellt. Für die Ergebnisse der anderen Projektpartner wird auf die jeweiligen Abschlussberichte verwiesen.

1.1 Übersicht über die Anwendungsfälle im InSeLDiP-Projekt

Im Rahmen des Projekts wurden drei verschiedene Anwendungsfälle für Separationsprozesse bearbeitet. Diese wurden zu Projektbeginn (Arbeitspaket 1) gemeinsam mit den industriellen Projektpartnern im Rahmen von Workshops und bilateralen Treffen durch Erfassung von IST- und SOLL-Zustand, Anforderungen, Risiken und Evaluationsplanung detailliert.

Brownfield-Anwendungsfall Crossflow-Filtration (CF): CF (Querstrom) -Technologie wird in der Lebensmittelindustrie bereits intensiv zur Separation von Stoffen mit schlechten Filtrationseigenschaften eingesetzt. Bei der herkömmlichen CF-Filtration wird das Wachstum einer die Filtration behindernden Deckschicht auf der Oberfläche der Filtermembranen durch ein tangenciales Überströmen der Membranen limitiert.

Brownfield- Anwendungsfall Dynamische-Crossflow-Filtration (DCF): Die DCF ist eine Weiterentwicklung der CF und eignet sich insbesondere für empfindliche Produkte (z.B. Biomoleküle). Durch rotierende keramische Membranen ermöglicht sie höhere Effizienzen und Konzentrierungsgrade. Die Hauptanforderungen an den DCF-Prozess sind die Verlängerung der Produktionsphasen zwischen den stets notwendigen Rückspül- und Reinigungszyklen sowie eine Verlängerung der Membranstandzeiten. Dazu sollen die Transmembrandruckkurve sowie die Reinigungsprogrammwahl (ressourceneffizient) optimiert werden. Zur DCF liegen Daten von zwei kundenspezifischen Variationen von DCF-Anlagen zur Analyse vor.

Greenfield-Anwendungsfall Rotor-Stator-Magnet-Separator (RSMS): Die Greenfield-Anlage RSMS setzt Magnetseparation ein, um die sonst sehr aufwändige Gewinnung von Proteinen aus großen Masseströmen zu ermöglichen. Durch den prototypischen Charakter des Verfahrens ist eine Digitalisierung der Produktionsanlagen noch nicht erfolgt, nicht alle relevanten Größen werden messtechnisch erfasst und es ist ein hohes Maß an Expertenwissen notwendig, um die relevanten Parameter optimal einzustellen. Die Hauptanforderungen an den RSMS-Prozess sind die Maximierung der Reinheit und Ausbeute von Lactoferrin und die Minimierung der Ressourcen (Zeit, Mensch, Material).

1.2 Durchgeführte Arbeiten des Lehrstuhls für Bioseparation Engineering (STT)

STT hat erfolgreich die beiden Hauptanforderungen des RSMS-Prozesses erfüllt. Dies wurde durch folgende Hauptmaßnahmen erreicht: (1) Einsatz von Hardware- und Software-Sensoren zur automatisierten Prozessregelung, (2) digitale Erfassung aller relevanten Prozessgrößen zur weiteren Analyse (3) Entwicklung detaillierter mechanistischer Modelle zur Prozessbeschreibung und (4) Implementierung eines zweistufigen Assistenzsystems, das zunächst passive Handlungsempfehlungen generiert und anschließend in definierten Bereichen autonom in den Prozess eingreifen kann.

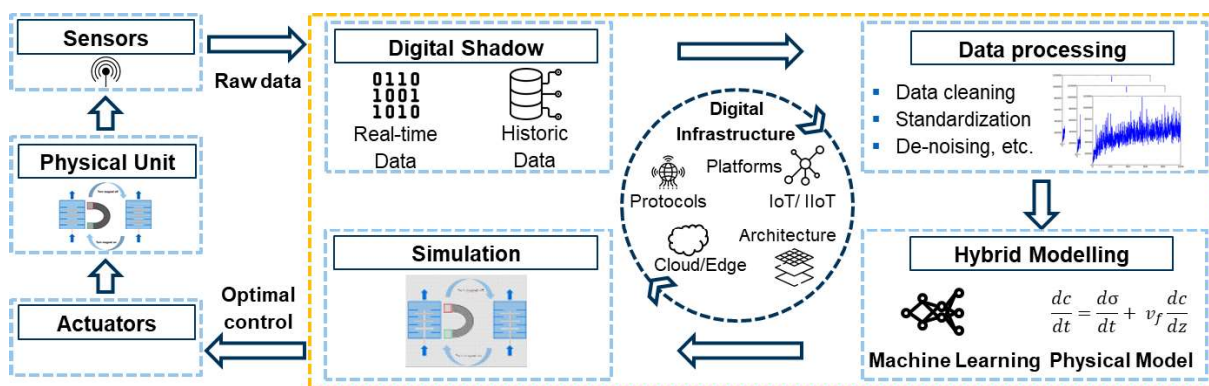


Abbildung 1: Gesamtkonzept der Entwicklung des Digitalen Zwillings für den RSMS

Arbeitspaket 2: Digitalisierung von Produktionsprozessen

In diesem Arbeitspaket wurden die Digitalisierungskonzepte für den RSMS umgesetzt, wie im Pflichtenheft spezifiziert. Das Ziel bestand darin, den RSMS als Greenfield-Anlage zu digitalisieren, um die für den digitalen Zwilling benötigten Daten im Feld zu erfassen, zu verarbeiten und Empfehlungen an die Anlage oder den Operator weiterzugeben. Die Umsetzung umfasste:

- Migration der Prozesssteuerung
- Integration von IIoT und Sensoren
- Erhöhung der Konnektivität durch OPC UA und Profibus DP
- Datenbankintegration (InfluxDB und MySQL)
- Erstellung eines formalisierten Prozessabbildes zum RSMS für die automatisierungstechnische Darstellung des R&I-Fließbildes

In diesem Prozess wurden Schnittstellen in der bestehenden Projektierung der Prozesssteuerung implementiert, um die Steuerung durch den digitalen Zwilling mithilfe mechanistischer Modelle und Optimierungsalgorithmen zu ermöglichen. Zusätzlich zu den vorherigen Entwicklungen wurden folgende Erweiterungen und Optimierungen vorgenommen:

- Optimierung der Datenbank durch Migration zu TimeScaleDB

- Optimierung der Datenverarbeitung in NodeRED
- Implementierung von Containern für eine schnellere Bereitstellung von Anwendungen und Mikrodiensten wie Softsensoren und modellbasierten Controllern
- Verbesserte Kommunikation zwischen digitalen Modellen und Prozesssteuerung durch Containerisierung

Die Migration der Echtzeitdatenbank InfluxDB zu TimeScaleDB auf Basis von PostgreSQL erfolgte aufgrund besserer Leistung im Hinblick auf das Verhältnis von Lese- und Schreibzugriffen. Die Bereitstellung aller Programme in Containern ermöglicht eine höhere Portabilität, bessere Ressourcennutzung und erhöhte Sicherheit. Die Containerisierung verbesserte auch die Kommunikation zwischen digitalen Modellen und Prozesssteuerung, indem Anwendungen im Hintergrund automatisch gestartet wurden, wenn der Operator Prozesse am RSMS initiierte. Die finale digitale Infrastruktur ist in Abbildung 2 dargestellt.

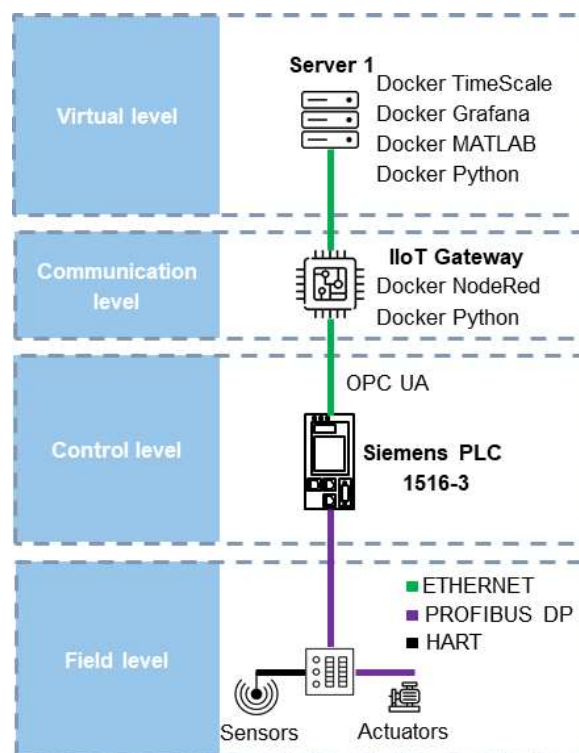


Abbildung 2: Vereinfachte Darstellung der digitalen Infrastruktur des RSMS

Arbeitspaket 3: Hybride Digitale Zwillinge

Im Rahmen des dritten Arbeitspakets des Projekts wurden mechanistische und hybride Modelle für den RSMS-Prozess entwickelt. Diese Modelle, basierend auf einer Kombination makro- und mikroskopischer Ansätze in MATLAB und COMSOL Multiphysics, beschreiben den Transport von magnetischen Nanopartikeln und integrieren charakteristische Größen für

die magnetische Separation. Nach erfolgreicher Validierung zeigten die Modelle eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten, wie in Abbildung 3 dargestellt.

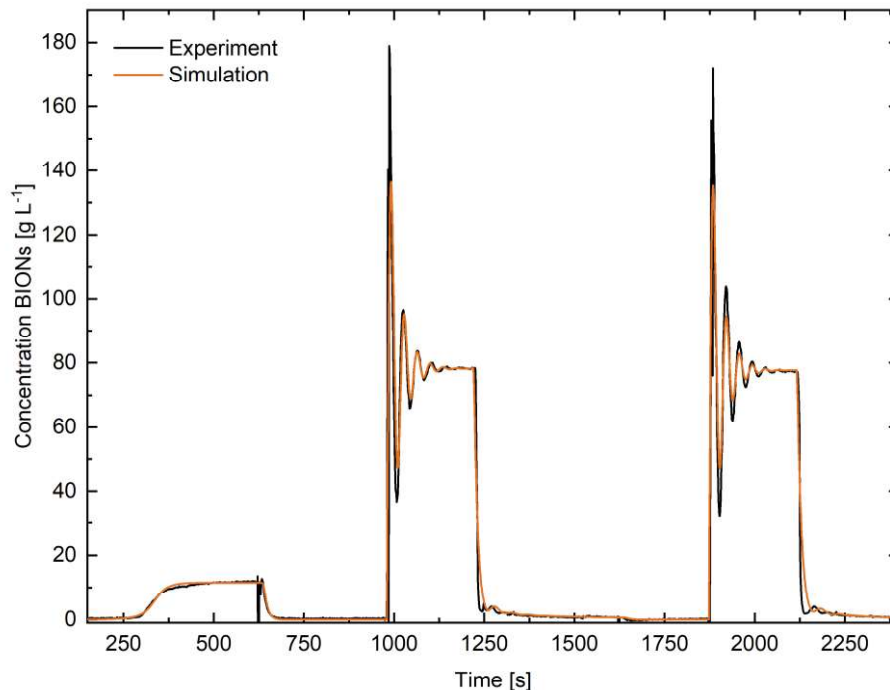


Abbildung 3: Die Modellleistung (durchgehende orangefarbene Linie) wurde anhand der experimentellen Daten validiert, die aus Soft-Sensor (SS) Messungen stammen (gestrichelte Linie), und spiegelt die typische Sequenz wider, die in Proteinreinigungsprotokollen verwendet wird

Im Jahr 2022 wurden diese Modelle weiterentwickelt, wobei drei Hauptbereiche im Fokus standen: Erstens wurden mikroskopische Modelle entwickelt, die die maximale Filterkapazität der Anlage unter variablen Feed-Zusammensetzungen berücksichtigen. Dadurch sind eine flexible Vorhersage und Prozesskontrolle möglich. Zweitens wurde die Analyse realistischer Fluidodynamik in der Prozesskammer vorangetrieben, um genauere Modelle zu erzielen. Durch die Kopplung mit magnetischer Simulation wurde ein allgemeiner Ansatz entwickelt, um das Design der Prozesskammer in-silico zu untersuchen und zu optimieren. In Abbildung 4 sind die Ergebnisse der mikroskopischen Modelle für die Fluidodynamik (rechts) und das Magnetfeld (links) zu sehen.

Das Modell zur Beschreibung der Ferrohydrodynamik wurde erweitert, um die Separation biologischer Makromoleküle wie Proteine und Antikörper vorherzusagen. Das RSMS-Modell wurde um neue Gleichungen für die Proteinsorption, die Bildung einer sogenannten Slurryphase aus Magnetpartikeln in der Prozesskammer und ein Ionenreaktionssystem zur Bestimmung des Suspension-pH-Werts erweitert. Die Proteinsorption wird auf Basis von Massenwirkungsmechanismen modelliert, während die Bildung der Slurryphase proportional zur magnetischen Trennung erfolgt und durch den Slurryfaktor charakterisiert wird. Im

Ionenreaktionssystem wird neben den Gleichungen für die Pufferarten auch die Pufferkapazität der MNPs berücksichtigt, indem ein 2-pK-Gouy-Chapmann-Modell implementiert wird.

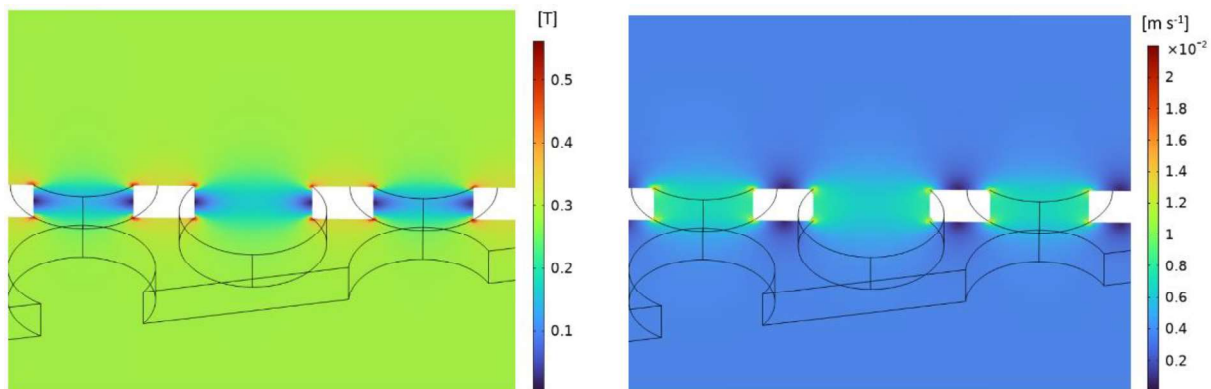


Abbildung 4 Konturdiagramme von (links) Magnetflussdichte B und (rechts) Potenzialströmungsgeschwindigkeit eines einzelnen Scheibenkollektors. Das externe angelegte magnetische Feld beträgt 0.28T . Die externe angelegte Strömungsgeschwindigkeit beträgt $=5 \times 10^{-3} \text{ m/s}$.

Durch das detaillierte mechanistische Modell wurde ein umfassendes Verständnis des Prozesses erreicht, wodurch kritische Prozessparameter präziser identifiziert werden können. Dies ermöglicht eine genauere Steuerung und Optimierung des Prozesses.

Ein Ziel dieses Forschungsprojekts bestand darin, ein hybrides Modell zu entwickeln, das Isothermen-Gleichungen zur Beschreibung von Adsorptions- und Desorptionsprozessen von Proteinen an magnetischen Nanopartikeln verwendet. Dieses Modell soll Prognosen über den RSMS-Prozess basierend auf variierenden Feed-Eigenschaften ermöglichen und aufwendige Experimente zur Bestimmung der Isothermen-Parameter umgehen. Eine solche Vorgehensweise könnte in Zukunft erhebliche Kosteneinsparungen und Zeitvorteile bieten. Allerdings gestaltet sich die Datenaufnahme aufgrund fehlender Hochdurchsatzmethoden als langsam und kostspielig. Manuell konnten die benötigten Daten in kurzer Zeit und aufgrund der hohen Kosten nicht erhoben werden. Die Integration von Automatisierung im Kleinstmaßstab wird es ermöglichen, nachhaltig von Produktionsdaten zu lernen und einen kontinuierlichen Verbesserungsprozess umzusetzen. Dadurch können Adsorptionsdaten bereits während des Prozesses erfasst werden, anstatt sie durch zusätzliche manuelle Versuche nachzustellen, was zeitaufwendig und kostspielig ist. Die Struktur des entwickelten Modells bietet die Möglichkeit der Hybridisierung.

Die Automatisierung und Digitalisierung des hybriden Synthese-/Adsorptionsreaktors wurde erfolgreich gestartet und stellt einen wichtigen Schritt dar, um nachhaltig von Produktionsdaten zu lernen und einen kontinuierlichen Verbesserungsprozess umzusetzen.

Arbeitspaket 4: Prozessoptimierung und Assistenz

Um den digitalen Zwilling als Assistenzsystem zu entwickeln, wurden zunächst zwei Anwendungsfälle formuliert: (1) das Waschen der Partikel nach der Synthese und (2) die Proteinreinigung selbst.

Im ersten Anwendungsfall wurden die Magnetpartikel nach der Synthese von Restprodukten automatisiert im RSMS gewaschen. Dadurch kann der RSMS zusätzlich als vorgelagerter Schritt zur Proteinreinigung genutzt werden, was zu einer Prozessintegration und -intensivierung führt. Die Integration der Magnetpartikel und ihrer Eigenschaften in den RSMS ist entscheidend für die spätere Proteinreinigung und ermöglicht eine holistische Prozessoptimierung.

Bei der Umsetzung des automatisierten Waschens wurden neben den klassischen Feedback-Regelungen auch digitale Modelle genutzt, um die Produktivität des Prozesses zu erhöhen. Die Produktivität wurde dabei als Menge der gewaschenen Partikel pro Zeit beschrieben, und das Ziel war es, diese zu maximieren.

Die Kommunikation und Optimierung des Prozesses erfolgt über den digitalen Zwilling, der kontinuierlich mit Echtzeitdaten gefüttert wird. Die nachstehende Abbildung 4 veranschaulicht das Konzept der Kommunikation und Optimierung über den digitalen Zwilling.

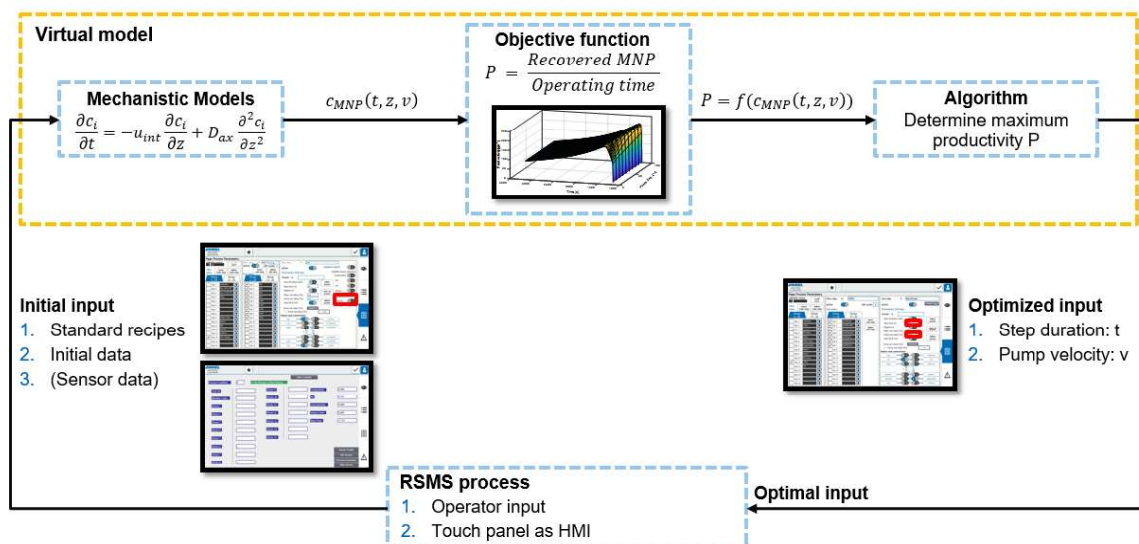


Abbildung 5: Umsetzung des mechanistischen Digitalen Zwillings zur Optimierung der Produktivität bei der Herstellung von Magnetpartikeln

Im Rahmen des Projekts zur Entwicklung des Digitalen Zwillings als Assistenzsystem zur Prozessoptimierung wurden mechanistische Modelle implementiert, um eine bidirektionale Kommunikation zwischen den Modellen und der Prozesssteuerung zu ermöglichen. Dies ermöglicht die Bereitstellung von Handlungsempfehlungen während des Betriebs. Zunächst war es erforderlich, das automatische Lesen der Rezepte zu ermöglichen, um eine flexiblere



Formulierung von Rezepten durch den Operator zu ermöglichen. Nach der Optimierung auf virtueller Ebene werden die Daten und Handlungsempfehlungen an die HMI zurückgesendet. Um die Transparenz zu erhöhen, wurden die Hintergründe der Modelle sichtbar gemacht und Schlüsselergebnisse der Modelloutputs sowie Empfehlungen in den Kontext von Prozesseingriffen gesetzt. Dadurch sollen die Akzeptanz und Sicherheit der Modelle während des Prozesses gesteigert werden. Die Transparenz wurde weiter erhöht, indem Modellausgaben in Form von Grafiken und Modellausschnitten auf einem separaten HMI bereitgestellt werden. Die implementierte Lösung kann nun beliebig erweitert werden durch verbesserte Modelle und Erweiterungen.

Im nächsten Schritt haben wir unser detailliertes RSMS-Modell zur Beschreibung der Proteinreinigung mit Bayes'schen Optimierungsalgorithmen gekoppelt und einen Anwendungsfall zur Aufreinigung von human Immunglobulin G (hIgG) aus direkten CHO-Zellkulturüberständen experimentell durchgeführt, simuliert und optimiert. Dazu wurde zunächst eine Zielfunktion definiert, die eine Maximierung des Ausbeute Y , Minimierung der Prozesszeit T und Minimierung der Produktverdünnung C integriert. Die finale normalisierte und gewichtete Zielfunktion ergab sich zu:

$$F_{MO} = -\frac{w_1}{\sum w_i} Y + \frac{w_2}{\sum w_i} \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}} + \frac{w_3}{\sum w_i} \frac{C - C_{min}}{C_{max} - C_{min}}$$

Die Funktion wurde so formuliert, dass die Minimierung der Zielfunktion zum optimalen Prozessergebnis führt. In Abbildung 6 ist das Optimierungsergebnis des Oberflächenplots aus dem Bayes'schen Optimierungsalgorithmus für die von uns gewählten Freiheitsgrade dargestellt. Ein Oberflächenplot eines Bayes'schen Optimierungsalgorithmus beschreibt die optimierten Parameterwerte in Bezug auf die Zielfunktion. Dabei werden verschiedene Freiheitsgrade des Systems auf den Achsen des Surfaceplots dargestellt, während die Zielfunktion als Höhe des Plots visualisiert wird. Dies ermöglicht es, die Auswirkungen unterschiedlicher Parameterkombinationen auf das Ergebnis zu untersuchen und den optimalen Satz von Parametern zu identifizieren, der die Zielfunktion minimiert.

Neben den optimalen Parametern wie der Zyklusanzahl während der Elution, den pH-Werten der verschiedenen Puffer und der Pumpengeschwindigkeit ist der interessante Wert die Menge der eingesetzten Magnetpartikel. Das Design der Kammer ist darauf ausgelegt, bis zu 50 g an magnetischen Nanopartikeln aufzufangen. Die Optimierung schlägt jedoch für alle simulierten Szenarien eine Menge an Magnetpartikeln von 9-12 g vor. Die Schlussfolgerung, die sich daraus ziehen lässt, ist, dass das Design der Kammer nicht optimal für den Betrieb ausgelegt ist und somit kein optimales Verhältnis zwischen eingefangenen Partikeln und dem möglichen Volumen an Elutions- und Waschpuffer liefert. Hier besteht ein enormes Optimierungspotenzial, das mittels modellgestützter Designauslegung kosteneffizienter und schneller erreicht werden kann.

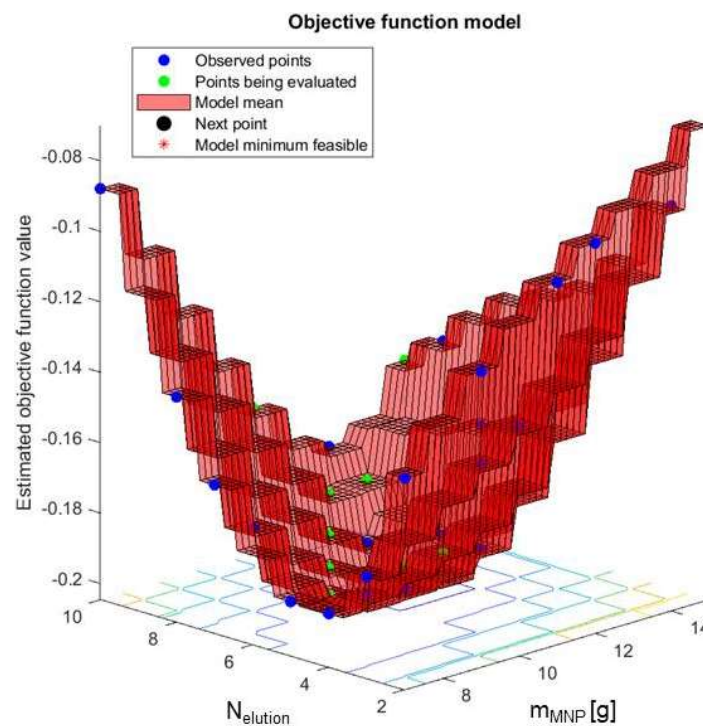


Abbildung 6: Oberflächenplot des Bayes'schen Optimierungsalgorithmus zur Darstellung der Zielfunktion in Abhängigkeit der Freiheitsgrade

Wir haben diese Optimierung für eine prädiktive Prozesskontrolle implementiert. Darüber hinaus haben wir eine Echtzeit-Anpassung des pH-Werts eingebaut, um sicherzustellen, dass der gemessene pH-Wert während des Betriebs mit der Modellvorhersage übereinstimmt. Sollte eine Diskrepanz zwischen der Modellvorhersage und dem gemessenen pH-Wert

auftreten, übernimmt ein Algorithmus direkt in der PLC die Steuerung und informiert den Bediener über ein Pop-Up-Fenster, wie in Abbildung 7 dargestellt.



Abbildung 7: Vergleich zwischen dem prädiktiven pH-Wert (gelb) und dem online gemessenen pH-Wert (grün). Im Falle einer Diskrepanz zwischen diesen beiden Werten wird ein Pop-Up-Fenster eingeblendet, um den Operator zu informieren.

Die Entwicklung des Digitalen Zwillings und der hybriden Modelle hat gezeigt, dass eine umfassendere Erfassung der Daten erforderlich ist, um datengetriebene Lösungen zu ermöglichen. Die Modelbasierte Optimierung im Anwendungsfall der hlgG Trennung führte schließlich zu einer Produktivitätssteigerung der Anlage von 20% und konnte Limitationen im Design der Kammer aufzeigen.

Arbeitspaket 5: Evaluation des Gesamtansatzes

Das gesamte Systemarchitektur-Konzept wurde gemäß den Anforderungen des Industriepartners für den RSMS-Anwendungsfall aufgebaut und dort anhand von Laufzeitmessungen (Datenbanken, Netzwerkverzögerungen usw.) evaluiert. Sowohl das mechanistische Modell als auch die prädiktive Modellsteuerung wurden prototypisch umgesetzt und anhand der realen Prozessdaten von zwei RSMS-Anwendungsfällen getestet. Die Systemarchitektur und die prototypische Umsetzung des digitalen Zwillings wurden dokumentiert und sind zur Integration in den RSMS-Anwendungsfall bereit.

1.3 Durchgeführte Arbeiten des Lehrstuhls für Automatisierung und Informationssysteme (AIS)

Der AIS fokussiert in seinen Projektarbeiten das Digitalisierungskonzept zur Nachrüstung der CF- und DCF-Brownfield-Anlagen, die systematische Aufbereitung und Analyse von Daten aus Batch-Prozessen, die Erstellung eines datengetriebenen Prozessmodells für den DCF-Prozess, die datenbasierte Vorhersage des Verlaufs des Transmembrandrucks, die Reinigungsoptimierung sowie die Visualisierung der Ergebnisse in Form eines Assistenzsystems für das Bedienpersonal. **Error! Reference source not found.** gibt einen Überblick über die Projektarbeiten und -ergebnisse des Lehrstuhls AIS, die im Folgenden in den Arbeitspaketen (APs) 2 - 5 detailliert beschrieben sind.

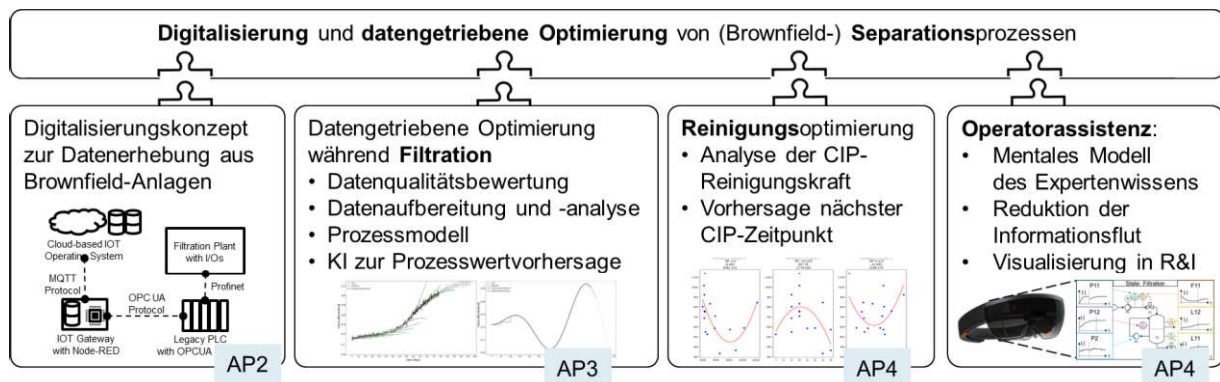


Abbildung 8: Übersicht Projektarbeiten und -ergebnisse des Lehrstuhls AIS

Arbeitspaket 2: Digitalisierung von Produktionsprozessen

Ziel des AP2 war die Digitalisierung von Brownfield-Anlagen, um die für den digitalen Zwilling benötigten Prozessdaten gezielt und strukturiert im Feld zu erheben, nutzbar zu machen, zentral zu sichern und für die Weiterverarbeitung in standortsübergreifenden Cloud-umgebungen bereitzustellen. Brownfield-Anlagen haben eine feste Systemarchitektur inkl. Sensorik und Speicherprogrammierbarer Steuerung (SPS). Im Projekt InSeLDiP wurden fünf technologieneutrale Konzepte zur zielgerichteten Nachrüstung von Konnektivitätslösungen über Hardware- und Softwaregateways erarbeitet und experimentell erprobt (vgl. **Error! Reference source not found.**), um die Alt-SPS (Legacy-PLC) an die Cloud (Company Intranet) anzuschließen. Die Lösungen unterscheiden sich nach den Randbedingungen der bestehenden Systemarchitektur, z.B. ob die Daten von einem Hardware-Gateway (A) direkt im Feld oder (C) in einer höheren Ebene, oder (E) durch eine Direktverbindung von einem PC abgegriffen werden, ob die SPS software-seitig nachgerüstet werden darf (B) oder bereits über eine Internetverbindung zum direkten Datenaustausch verfügt (D). Ein digitaler Zwilling zur Prozessoptimierung kann für schnelle Prozesseingriffe direkt im Feld, z.B. via Hardware-



Gateway oder PC (A, C, E) und/oder in der Cloud für rechenintensivere, standortübergreifende Analysen eingebunden werden.

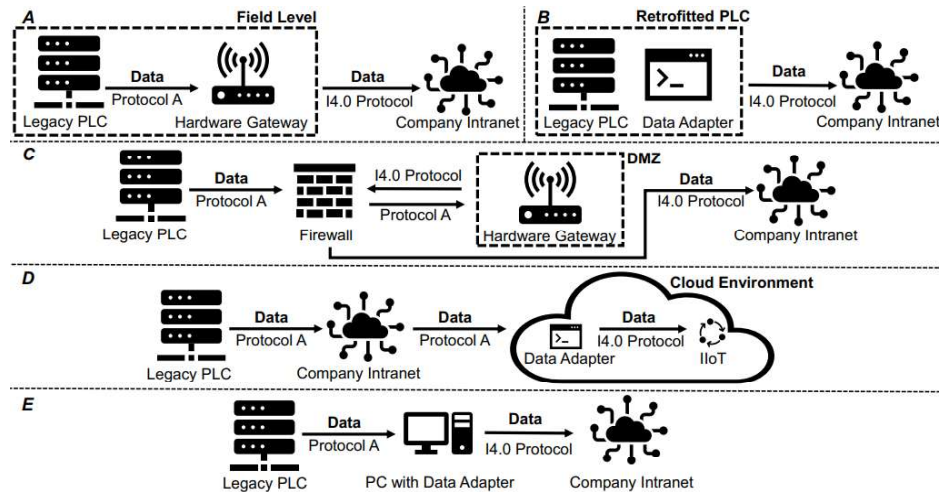


Abbildung 9: Fünf Konzepte A – E zur Nachrüstung von Brownfield-Anlagen [AIS-TRV21]

Die Wahl eines geeigneten Kommunikationsprotokolls richtet sich nach der verwendeten Alt-SPS. **Error! Reference source not found.** zeigt daher, welche SPSsen welche Kommunikationsprotokolle unterstützen. Da in den Brownfield-Anlagen überwiegend Siemens-SPS zum Einsatz kommen, wurden die kompatiblen Kommunikationsprotokolle u.a. bzgl. der zu übertragenden Datenmenge und ihrer Ausfallsicherheit (d.h. Vermeidung von Datenverlust) verglichen (vgl. **Error! Reference source not found.**).

Tabelle 1: Übersicht Kommunikationsprotokolle für ausgewählte, repräsentative SPSs verschiedener Hersteller [AIS-TRV21]

SPS	OPC DA	OPC UA	MQTT	AMQP	CoAP	(Industrial) Ethernet	Modbus TCP	S7 Protocol	ADS	Blue-com
Beckhoff TwinCAT3 PLCs	✓	✓	✓	✓	-	EtherCAT, Profinet, Ethernet/TCP+UDP	✓	o	✓	-
Bachmann MX220	✓	✓	✓	-	-	EtherCAT, Profinet, Ethernet/TCP+UDP	✓	-	-	✓
Phoenix ILC 190 ETH 2TX	✓	o	✓	o	-	Profinet, Ethernet/TCP+UDP	✓	-	-	-
Siemens S7-1500	✓	✓	✓	o	-	Profinet, Ethernet/TCP+UDP	✓	✓	-	-
B&R Power Panel 400	✓	o	o	o	-	PowerLink, Ethernet/TCP	✓	-	-	-

Legende für Unterstützung: - : Protokoll wird nicht unterstützt
✓ : Gerätespezifisch (wird von Gerät/Serie unterstützt, aber nicht zwingend von allen Geräten/Serien des Herstellers);
o : Hersteller (wird von betrachtetem Gerät/Serie nicht unterstützt, aber von anderen Geräten/Serien des Herstellers);

Tabelle 2: Detailansicht Protokolle für Siemens-SPS

Protokoll	TIA Com	TIA HTTP	TIA MQTT	TIA OPC UA	TIA SNMP	MQTT
Übertragungsmethode	Server/Client, 1:1	Server/Client, n:1	Pub/Sub, n:m	Pub/Sub; n:m oder Server/Client	Server/Client n:1	Pub/Sub n:m
Empfangsbestätigung	Bedingt	Ja - StatusID	Ja – QoS {0,1,2}	Ja	Nein	Ja – QoS {0,1,2}
Schutz vor Datenverlust	Nein	Nein	Unbekannt	Unbekannt	Unbekannt	Ja
Max. Paketgröße	16 MB	Unbekannt	Unbekannt	Unbekannt	486 Byte	260 MB
Datentyp	Bytearray	HTML-String	String	Komplexe Datentypen	Bytearray	String



Erhaltung der Reihenfolge	Ja	Ja	Ja	Unbekannt	Unbekannt	Ja
Latenz der SPS		10ms (=1 Zyklus)	5 µs	20 ms (= 2 Zyklen)		5 µs

Um Daten für den digitalen Zwilling effizient direkt im Feld halten zu können, bedarf es einer Datenbanktechnologie, die eine hohe Performance und Speicherplatz bei gleichzeitig limitierten Ressourcen bieten. Es wurden drei verschiedene Datenbanken hinsichtlich ihrer Lese-Schreib-Zyklendauer bei 500 Datenpunkten unterschiedlicher Datentypen evaluiert: MySQL, PostgreSQL und Influxdb (Ergebnisse vgl. **Error! Reference source not found.**). PostgreSQL hat im Vergleich zu den anderen Technologien das vielversprechendste Lese-Schreib-Zugriff-Verhältnis und kann die für den DCF-Anwendungsfall benötigten Datenarten speichern. Mit den Ergebnissen aus AP2 können Anwender das für sie geeignete Digitalisierungskonzept inkl. der dazu passenden Hard- und Softwarekomponenten auswählen. Die Erkenntnisse aus dem in AP2 erarbeiteten Digitalisierungskonzept für CF/DCF flossen in die Digitalisierung des RSMS ein. Gemeinsam mit STT wurden am RSMS für die Datenerhebung Kommunikationsprotokoll und Datenbank-technologie ausgewählt, das R&I-Fließbild automatisierungstechnisch angepasst sowie die Qualität der aufgezeichneten Daten bewertet.

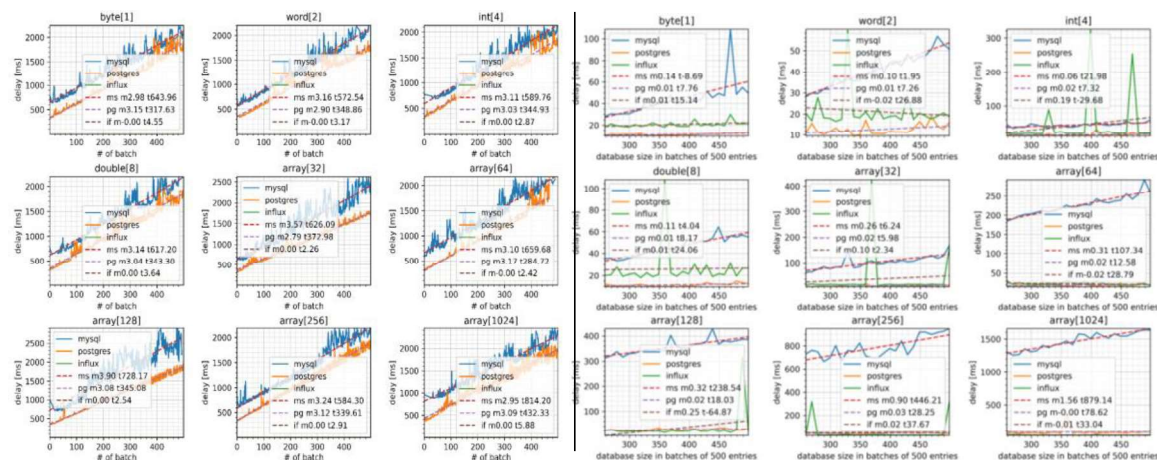


Abbildung 10: Übersicht Analyse der Lese-Schreib-Zyklen dreier Datenbanktechnologien (links: Schreibzyklen; rechts: Lesezyklen)

Arbeitspaket 3: Hybride Digitale Zwillinge

Der hybride digitale Zwilling soll die Prozesse mithilfe von mechanistischen sowie datengetriebenen Modellen optimieren. Der Lehrstuhl AIS der TUM fokussierte sich hierbei auf das datengetriebene Modell sowie die datenbasierte Prozesswertvorhersage.

3.1 Datengetriebenes Modell und intelligente Prozesswertvorhersage

Zur Aufbereitung der vorhandenen, historischen sowie aktuellen industriellen Prozessdaten (Rohdaten) des DCF-Anwendungsfall und zur Bewertung und Erhöhung derer Datenqualität wurden die folgenden Schritte angewandt: (1) Auffüllen fehlender Datenpunkte, (2) Anpassung

der Zeitabtastung, (3) Segmentierung der Zeitreihen für geregelte Batch-Prozesse mit manuellen Prozesseingriffen (vgl. **Error! Reference source not found.**), (4) Qualitative, kontextuale Trendanalyse, (5) Identifikation und Extraktion von ähnlichen, wiederkehrenden Zeitreihensegmenten. Die Verfahren zur Aufbereitung der Prozessdaten wurden automatisiert und an den zur Verfügung gestellten industriellen Prozessdaten des DCF evaluiert. Die Datenaufbereitung ermöglicht eine Nutzbarmachung der Daten für die Weiterverwendung z.B. für die Anwendung von Big-Data-Ansätzen oder Maschinellen Lernen. Basierend auf den Erkenntnissen zur Datenqualität und Datenerhebung wurden Empfehlungen für die Datenaufzeichnung und -sicherung abgeleitet, die iterativ in die Nachrüstkonzepte (AP2) eingeflossen sind (z.B. Abtastzeit für DCF-Prozess, notwendige Messgenauigkeit). Um die für die Datenanalyse benötigte Varianz an Datenpunkten zu erhalten, wurde im Projekt eine Testmatrix erarbeitet, gemäß der an einer industriellen DCF-Anlage gezielt Daten in der gewünschten Qualität (Abtastzeit, Prozessparametervariation) aufgezeichnet wurden.

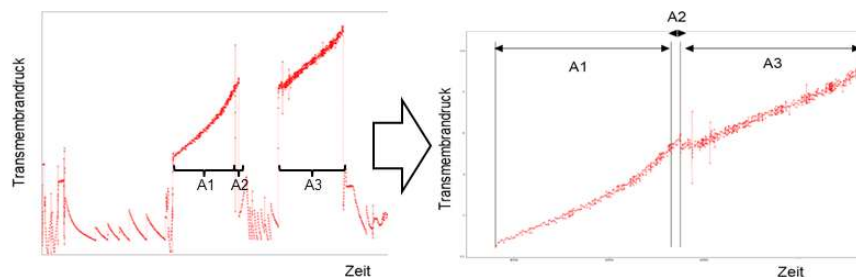


Abbildung 11: Zeitreihensegmentierung, hier: zur Extraktion des TMP-Verlaufs während der Produktion [AIS-KVL+22a]

Durch historische Daten sowie den gemäß der Testmatrix aufgezeichneten Daten lagen dem AIS die Datensätze von zwei DCF-Anlagenvariationen für eine umfangreiche Analyse vor. Aus den Daten wurden die Prozessparameter und deren Korrelation mit dem TMP-Verlauf (vgl. **Error! Reference source not found.**) analysiert (vgl. **Error! Reference source not found.**). Die identifizierten Einflüsse wurden in AP4 für die Validierung des erfassten, mentalen Modells der Experten verwendet.

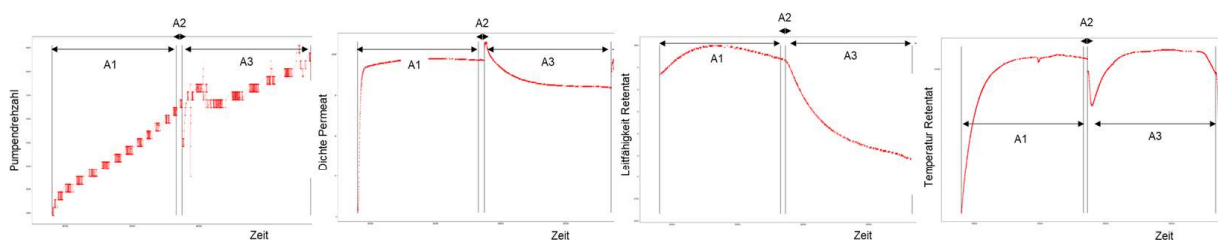


Abbildung 12: Segmentierter Verlauf der Prozessparameter (von links.: Pumpendrehzahl, Permeatdichte, Retentatleitfähigkeit, Retentattemperatur) abhängig vom TMP-Verlauf (vgl. Figure 4) [AIS-KVL+22a]

Um eine vorausschauende und somit optimierte Prozessführung zu ermöglichen, wurde aus den Analyseergebnisse ein Konzept für den DCF-Anwendungsfall entwickelt, um den Verlauf

des Transmembrandrucks (TMP) basierend auf vorherigen TMP-Werten datenbasiert vorherzusagen. Verschiedene datengetriebene KI-Modelle (Prophet, ARIMA, LSTM) wurden prototypisch realisiert und evaluiert [AIS-MVL+23c], um die Genauigkeit der Vorhersagen der jeweiligen Algorithmen abhängig von dem vorherzusagenden Zeithorizont zu vergleichen. Die besten Ergebnisse wurden bei einer Vorhersage der nächsten 10 Minuten basierend auf den letzten 40 Minuten des TMP-Verlaufs mit dem ARIMA-Modell erzielt.

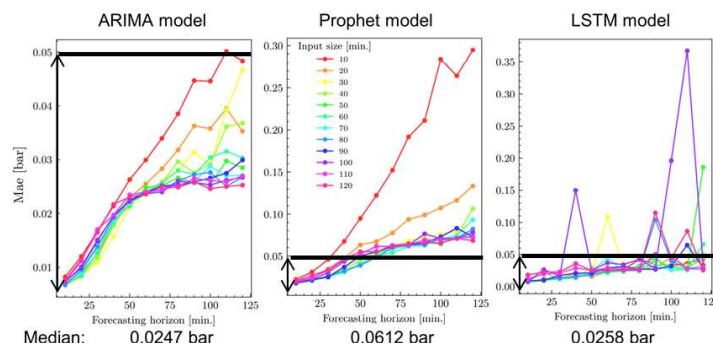


Abbildung 13: Genauigkeitsvergleich der Vorhersage des TMP-Verlaufs mit ARIMA-, Prophet- und LSTM-Modell [AIS-MVL+23c]

Basierend auf dem ARIMA-Modell wurde für die DCF eine künstliche Intelligenz (KI) entwickelt, die alle vergangenen Prozesswerte eines Batches berücksichtigt, selbstständig die für eine präzise Vorhersage benötigten Werte auswählt und darauf basierend zukünftige Prozesswerte vorhersagt. Die eigene Vorhersage wird dabei in regelmäßigen Abständen auf Abweichungen zum tatsächlichen Verlauf überprüft, um die KI während des Prozesses nachzutrainieren und so ihre Vorhersagegenauigkeit zu verbessern. Um die Vorhersagegeschwindigkeit der KI zu erhöhen und die KI auch auf verschiedenen Endgeräten performant nachzutrainieren (z.B. ARIMA-Modell der 8. Ordnung hat 512 Kombinations-möglichkeiten der ARIMA-Parameter p, d, q), wurde ein Ansatz zum Multiprocessing und Multithreading der Teilberechnungen entwickelt. Der Multiprocessing-Ansatz skaliert automatisiert abhängig von den im Endgerät verfügbaren Prozessorkernen und nutzt damit performante Hochleistungsserver wie auch leistungstärkere SPS im Feld bestmöglich aus. Die im Projekt prototypisch realisierte KI kann mithilfe verschiedener Parameter an die Anforderungen des Anlagenbetreibers sowie an die Datenqualität angepasst werden. Anpassbare Parameter sind u.a. der vorherzusagenden Zeithorizont, die Zykluszeit für den (Wieder-)Aufruf der KI oder die Sensibilität für Prozesswertschwankungen, welche bei hochdynamischen Prozessen (vgl. **Error! Reference source not found.**, rechts) hoch, bei verrauschten Prozesswerten (vgl. **Error! Reference source not found.**, links) jedoch niedrig angesetzt werden sollte, um von der KI eine verlässliche Vorhersage zu erhalten.

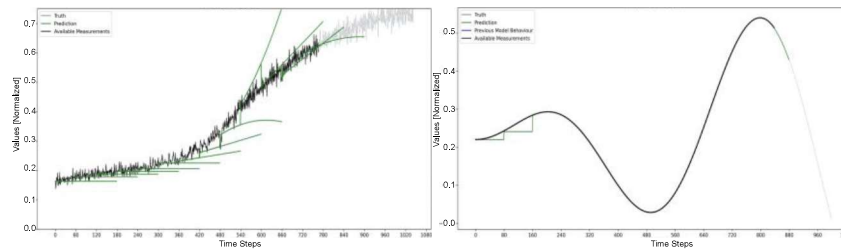


Abbildung 14: Vorhersage zukünftiger Prozesswerte mit künstlicher Intelligenz basierend auf ARIMA-Modell (links: für verrauschte Prozesswerte; rechts: für Prozesswerte ohne Rauschen)

Stark verrauschte Signalverläufe oder Sprünge in den Prozessdaten können zu Ausreißern in der Vorhersage der selbstlernenden KI führen. Um dynamisch Ausreißern in der Vorhersage der KI zu erkennen und darauf zu reagieren, wurde eine Überwachungsfunktionalität für robustere KI-Vorhersagen entwickelt. Die Überwachungsfunktionalität überprüft für alle von der KI vorhergesagten Prozesswerte, ob diese im selben Interquartilsbereich (IQR) liegen und dieselbe relative Abweichung zueinander haben wie die vergangenen Prozesswerte. Insofern mindestens eine der beiden Kriterien nicht erfüllt ist, werden die prädizierten Werte, die die Kriterien verletzen, automatisiert korrigiert. Für die Korrektur der Ausreißer wurden drei Ansätze entwickelt: ein Korrekturansatz beruhend auf einem statistischen ARIMA-Modell, auf linearer Regression oder auf polynomialer Regression. Insofern das Verhalten des Prozesses bekannt ist, kann eine der drei Ansätze fest vorgegeben werden. Alternativ wurde ein Automatik-Modus entwickelt, gemäß dem die drei Ansätze sequenziell in der oben genannten Reihenfolge verwendet werden, bis mit einem der Ansätze ein sinnvoller neuer Prädiktionswert detektiert wurde, der die IQR sowie die relative Abweichung erfüllt (vgl. **Error! Reference source not found.**).

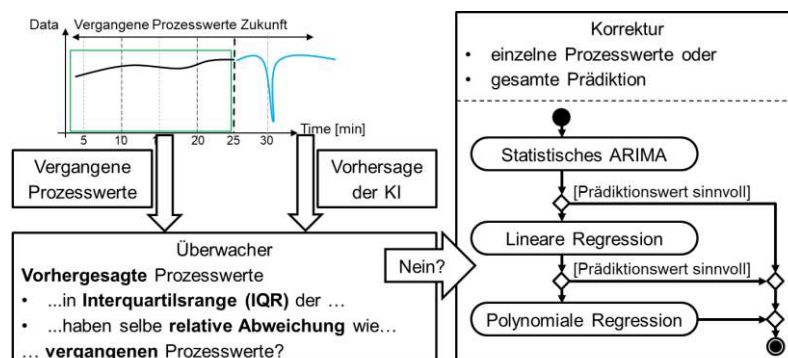


Abbildung 15: Überwachung (links) und Korrektur (rechts) der KI-Vorhersage

3.2 Modellkombination

Um sowohl datengetriebene als auch mechanistische Erkenntnisse in der Prozessoptimierung zu berücksichtigen, stellte der Lehrstuhl AIS ein Konzept zur Modellkombination vor (vgl. **Error! Reference source not found.**). Das regelungstechnische Konzept erfordert als

Eingabe eine ideale Verlaufskurve für die Prozessparameter, welche anhand von Expertenwissen abgeschätzt oder alternativ direkt aus dem mechanistischen Modell extrahiert werden kann. Der Abgleich der idealen Verlaufskurve mit den aktuellen Prozessparametern ermöglicht die frühzeitige Vorhersage, wie sich die Prozesswerte zukünftig entwickeln werden (vgl. **Error! Reference source not found.**). Mithilfe der Vorhersage des Prozessverlaufs sowie dem mechanistischen Modell, anhand dessen die möglichen Auswirkungen eines manuellen Operatoreingriffs simuliert werden können, wird ermittelt, wie die Stellgrößen angepasst werden müssen, um den Prozessverlauf zu optimieren bzw. an die ideale Verlaufskurve anzupassen.

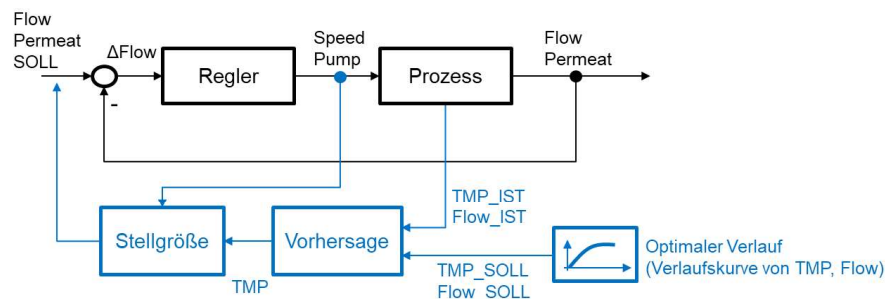


Abbildung 16: Konzept zur datengetriebenen Prozessregelung unter Einbindung der Erkenntnisse aus dem mechanistischen Modell

Als Grundlage für die Modellkombination von datengetriebenen und mechanistischen Modellen stellte der AIS exemplarische historische TMP-Verläufe den modellierten TMP-Verläufen des KITs gegenüber. Darauf basierend erprobte der AIS ein Parameterfitting der mechanistischen Modelle anhand der historischen Prozessdaten und erarbeitete Vorschläge zur Vereinfachung des mechanistischen Modells des KITs.

3.3 Untersuchung der hardwaretechnischen Umsetzung eines hybriden digitalen Zwillings

Zur Untersuchung der hardwaretechnischen Umsetzbarkeit eines hybriden digitalen Zwillings wurden Laufzeitmessungen von verschiedenen (KI-) Standardalgorithmen zur Datenverarbeitung (z.B. Fourier-Transformation) sowie von vom KIT gewünschten genetischen Algorithmen auf verschiedenen Hardwareplattformen (Edge-Devices) durchgeführt, um die Hardwareplattformen sowie Algorithmen für die Realisierung eines (reduzierten) digitalen Zwillings im Feld zu erproben und zu bewerten. Zusätzlich wurden Anforderungen und Ablauf des Informationsaustauschs zwischen digitalem Zwillings im Feld (für schnelle Analysen, Reaktionen und Empfehlungen während des Prozesses) und einem Cloud-digitalen-Zwillings (für zeitaufwändigere Analysen sowie Simulationen) am Use-Case DCF definiert. Die Erkenntnisse dienen als Entscheidungsgrundlage für die Auswahl geeigneter Hardware für einen hybriden digitalen Zwillings im Feld für alle Use-Cases.

Arbeitspaket 4: Prozessoptimierung und Assistenz

Für die effiziente Einbindung des Menschen in die Prozessoptimierung wurde ein Assistenzsystem entworfen. Hierfür wurden die relevanten Betriebs- und Qualitätsparameter, deren Korrelationen sowie die Prozesszusammenhänge (während Filtration und Reinigung beim DCF-Anwendungsfall sowie während der Adsorption am RSMS-Anwendungsfall) gemeinsam mit den Projektpartnern in Experteninterviews erfasst und in Form von mentalen Modellen (Ursache-Wirkungs-Graphen) strukturiert. Der Ursache-Wirkungs-Graph für die Prozess-zusammenhänge am DCF-Use-Case wurde iterativ durch den Abgleich mit den historischen Prozessdaten und den Ergebnissen der Datenanalyse verfeinert sowie validiert. Um die Prozessdaten für den menschlichen Maschinenoperator aufzubereiten und die Informationsflut zu reduzieren, erfolgte ein Mapping des Prozessabbildes auf ein je nach Prozessphase (Filtration, Reinigung, Stillstand) reduziertes R&I-Fließbild (vgl. **Error! Reference source not found.**).

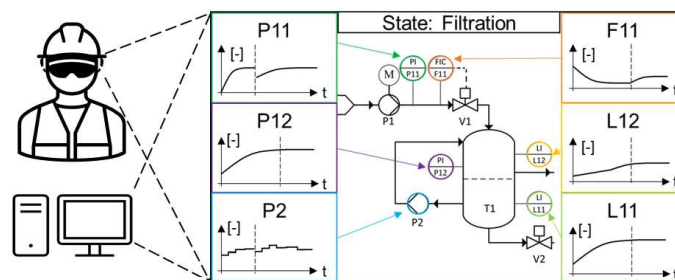


Abbildung 17: Visualisierung aktueller Prozesswerte am reduzierten R&I-Fließbild für den Operator via HoloLens oder Bildschirm

Um Rückmeldungen des menschlichen Maschinenoperators im digitalen Zwilling zu berücksichtigen, wurde gemeinsam mit Andritz ein Konzept für die Interaktion des Operators mit dem digitalen Zwilling am DCF-Anwendungsfall erarbeitet. Demnach erhält der digitale Zwilling die Operatoreingaben indirekt über das Verhalten bzw. die geänderten Stellgrößen der speicherprogrammierbaren Steuerung (SPS). Für den Informationsaustausch von SPS und digitalem Zwilling wurden gemeinsam mit Andritz ein Konzept festgelegt sowie eine prozessfähige Schnittstelle abgestimmt.

Für die Prozessoptimierung während der Filtration wurde die KI (vgl. AP 3) eingesetzt. Für die Reinigungsoptimierung wurden vergangene Reinigungsverläufe hinsichtlich Auswahl des Reinigungsprogramms, vorige Betriebsdauer, produzierte Produktmenge und TMP-Wert vor der Reinigung sowie CIP-Effizienz nach der Reinigung und deren Einfluss auf den Foulingzustand (quantifizierter Verdreckungsgrad der Anlage) analysiert. Als Ergebnis wurde eine positive Korrelation von Fouling und Batch-Produktmenge sowie voriger TMP-Verlauf



detektiert, die eine Vorhersage des Fouling-Verlaufs anhand von Flow- und TMP-Werten ermöglicht.

Arbeitspaket 5: Evaluation des Gesamtansatzes

Das gesamte Systemarchitektur-Konzept wurde exemplarisch gemäß den Anforderungen des Industriepartners für den DCF-Anwendungsfall am AIS als Teststand aufgebaut und dort mithilfe von Laufzeitmessungen (Datenbanken, Verzögerungen im Netzwerk, ...) evaluiert. Das datenbasierte Modell sowie die intelligente Prozesswertvorhersage wurden prototypisch realisiert und anhand der realen Prozessdaten von zwei DCF-Anwendungsfällen des Industriepartners evaluiert. Die Systemarchitektur sowie die prototypische Realisierung des datenbasierten digitalen Zwillings wurden an den Industriepartner zur Integration in den DCF-Anwendungsfall sowie zur weiteren Evaluation an der realen Anlage im Betrieb übergeben.



2. Erläuterung der wichtigsten Positionen im zahlenmäßigen Nachweis

Personalmittel: Das Projekt wurde seitens TUM mit zwei wissenschaftlichen Haupt-Mitarbeitern bearbeitet, durch wissenschaftliche Hilfskräfte unterstützt wurden. Bei TUM STT hat zudem in der Endphase des Projektes zur erfolgreichen Umsetzung des Synthesereaktors-Konzeptes ein weiterer Mitarbeiter unterstützt.

Sachmittel: Als Nutzerschnittstelle zum Assistenzsystem und zur Evaluierung des Visualisierungskonzepts hat TUM AIS eine Microsoft HoloLens 2 angeschafft. TUM STT hat neben Digitalisierungskomponenten des RSMS (PLC, IIOT, Schnittstellen, Plattformen, Servern) ebenfalls einen Synthesereaktor/Adsorptionsreaktor mit entsprechender digitaler Ausstattung (Steuerung, Server, Sensoren) angeschafft.

Reisekosten wurden aufgrund der Corona-Pandemie und der somit eingeschränkten Reisemöglichkeiten nur bedingt abgerufen. Bilaterale und Treffen und Projekttreffen wurden per Webmeeting durchgeführt. An nationalen und internationalen Tagungen und Konferenzen wurde wie geplant für Publikation und Wissenstransfer der Teilergebnisse teilgenommen.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeit

Die geleisteten Projektarbeiten waren notwendig und angemessen für die von der Industrie geforderte Digitalisierung von Separationsanlagen. Das erarbeitete Digitalisierungskonzept adressiert sowohl die Anbindung und Nachrüstung von Brownfield-Anlagen, um diese nachträglich mithilfe digitaler Zwillinge optimieren zu können, als auch den effizienten sensortechnischen Aufbau von Greenfield-Anlagen, um hier bereits im Voraus Datenerhebung in hoher Qualität zu erzielen. Die datengetriebene, künstliche Intelligenz im digitalen Zwilling ermöglicht einerseits die Vorhersage des Verlaufs des Transmembrandrucks während der Produktion für eine optimierte, nachhaltige Verfahrensweise, sowie andererseits durch die Vorschläge zur Reinigungsoptimierung für eine höhere Ressourceneffizienz. Beides trägt erheblich zur Wirtschaftlichkeit von Separationsanlagen bei. Die Entwicklung neuer mechanistischer Modelle für den RSMS war von entscheidender Bedeutung, da es sich um einen neuartigen Prozess handelt, für den weit verbreitetes Prozessverständnis und physikalische Modelle fehlen.

4. Voraussichtliche Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die im Projekt erarbeiteten Ergebnisse und Konzepte werden durch die im Projekt beteiligten Firmen weiterentwickelt. Die direkte optimierte Unterstützung des Bedienpersonals in der Prozessführung von DCF-Anlagen wird bereits umgesetzt und die Weiterentwicklung des



RSMS wird aktuell übertragen. Der Wissenstransfer über nationale und internationale Konferenzen, Gremienarbeit sowie die Integration der Projekterkenntnisse in Lehrveranstaltungen der TUM ermöglicht anderen Wissenschaftlern und Unternehmen sowie zukünftigen Prozessingenieur:innen, die Erkenntnisse zu nutzen und weiter voran zu treiben.

5. Änderung im wissenschaftlichen und technischen Stand der Technik während der Projektlaufzeit

Während der Projektlaufzeit sind keine Ergebnisse Dritter bekannt geworden, die für die Durchführung des Projektes relevant sind.

6. Übersicht über erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

Im Folgenden sind die innerhalb von InSeLDiP durch die Technische Universität München, speziell vom Lehrstuhl für Bioseparation Engineering (STT) und vom Lehrstuhl für Automatisierung und Informationssysteme (AIS) getätigten Veröffentlichungen, Vorträge und Gremienarbeiten zusammengefasst.

Internationale, wissenschaftliche Veröffentlichungen

- [AIS-TRV21] E. Trunzer, B. Rupprecht, and B. Vogel-Heuser, „*Concepts for Retrofitting Industrial Programmable Logic Controllers for Industrie 4.0 Scenarios*“, ICIT 2021.
- [AIS-KVL+23a] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land, G. Grim, J. Lorenzer, M. Freiberg, M. Franzreb, S. Berensmeier, „*Digitalisation and DataDriven Optimisation of Separation Processes in the Food Industry*“, F&S International Edition 2023, Vulkan-Verlag GmbH, 2023.
- [AIS-KVL+23b] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land and J. Brandstetter. "Challenges in Forecasting Membrane Fouling in Filtration Processes using Univariate Data-Driven Models," IFAC World Congress, pp. 3173-3176, 2023.
- [AIS-KVL+23c] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land, J. Brandstetter, J. Lorenzer, G. Grimm, M. Franzreb and S. Berensmeier. "Forecasting Membrane Fouling in Filtration Processes using Univariate Data-Driven Models," IEEE CASE, 2023.

Nationale, wirtschaftsnahe Veröffentlichungen

- [AIS-KVL+22a] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land, G. Grim, J. Lorenzer and M. Hanf, „*Data Mining in der Prozesstechnik als Key-Enabler intelligenter Digitaler Zwillinge für eine datengetriebene Optimierung der Prozessführung*“, VDI-Kongress AUTOMATION, 2022.
- [AIS-KVL+22b] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land, G. Grim, J. Lorenzer, M. Freiberg, M. Franzreb, S. Berensmeier, „*Digital Twin: Mehr Flexibilität für Produktionsprozesse*“, atp-Magazin, vol. 08, 2022.



- [AIS-KVL22] M. Krüger, B. Vogel-Heuser, K. Land, „*Digitalisierung und datengetriebene Optimierung von Separationsprozessen in der Lebensmittelindustrie*“, F&S Filtrieren und Separieren, vol. 05, Vulkan-Verlag GmbH, 2022.

Akzeptierte und geplante Veröffentlichungen

- Geplant: [STT-TSBB24a] M. Tesanovic, J. P. de Souza, M. Z. Bazan, S. Berensmeier „Magnetic particle capture in high-gradient magnetic separation: a theoretical and experimental study“, American Institute of Chemical Engineers, AIChE Journal, 2024
- Geplant: [STT-TZSB24b] M. Tesanovic, I. Zimmermann, M. Schneider, S. Berensmeier „Modelling magnetic separation for IgG purification: a theoretical and experimental study“, Elsevier, Separation and Purification Technology Journal, 2024

Vorträge ohne separate Veröffentlichung

- [AIS-LKV22] K. Land, M. Krüger, B. Vogel-Heuser „*Centralized Data Handling and Processing to Enable AI-driven Process Optimization in Food Industry*“, Siemens RIE Conference Munich "Future of Automation", 2022.
- [STT-TB22a] M. Tesanovic, S. Berensmeier “Digitalization and automation of the innovative Rotor-Stator Magnetic Separator on pilot-scale”, Himmelfahrtstagung on Bioprocess Engineering, 2022
- [STT-TB22b] M. Tesanovic, S. Berensmeier “Model-based optimization of the Rotor-Stator Magnetic Separator”, Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. Fachgruppe Analytische Chemie, AK Prozessanalytik, 2022
- [STT-TB24] M. Tesanovic, S. Berensmeier “THE NEW FRONTIER? EXPLORING INNOVATIVE MAGNETIC SEPARATION WITH MECHANISTIC MODELS”, International Symposium on Preparative and Process Chromatography, Philadelphia, 2024

Gremienarbeit

- [AIS-NAMU] NAMUR Arbeitskreis 1.4 “Verwaltungsschale”
- [AIS-TuLA] TuLAUT Gruppe "Komposition von Digitalen Zwillingen"

Studentische wissenschaftliche Arbeiten an der TUM

- [AIS-Rupp20] B. Rupprecht, “Retrofitting and Migration Concepts for Interfacing Industrial Programmable Logic Controllers in Industrie 4.0 Scenarios“, Master’s Thesis, 2020.
- [AIS-Bran22] J. Brandstetter, “Sliding prediction of time-resolved process variables using machine learning methods on the example of cyclic filtration processes“, Master’s Thesis, 2022.



- [AIS-Tenz22] F. Tenzer, „Informationsextraktion und Visualisierung von Engineering- und Prozessdaten durch Mapping auf R&I-Fließbilder für Anlagen in der Prozessleittechnik“, Bachelor's Thesis, 2022.
- [STT-Hemp21] S. Hempfling, “Modeling and simulation: Magnetic separation on a pilot scale” Master's Thesis, 2021.
- [STT-Hauc22] A. L. Hauck, “Modelling and Simulation of Magnetic Separation in COMSOL Multiphysics” Master's Thesis, 2022.
- [STT-Ilya22] O. B. Ilya, “Automated feedback control of Rotor-Stator-Magnetic-Separator process and digitalization” Master's Thesis, 2022.
- [STT-Jaco23] P. Jacoby, “Towards a Digital Twin application: Model based optimization of an innovative magnetic separation process at pilot scale” Master's Thesis, 2023.
- [STT-Xeng23] S. Xeng, “Digitalization and automation of magnetic separation at pilot-scale” Master's Thesis, 2023
- [STT-Veit23] S. Veit, “Development and Application of a Digital Twin for the Purification of Proteins through Magnetic Separatioat large-scale” Master's Thesis, 2023.
- [STT-Schne24] M. Schneider, “Dynamic Modeling and Experimental Validation: A Comprehensive Approach for Protein Purification with Magnetic Nanoparticles in a pilot-scale HGMS” Master's Thesis, 2024.
- [STT-Bard24] T. Bardel, “Bayesian Optimization of a Magnetic Separation Processes for Protein Purification at Pilot Scale” Master's Thesis, 2024.