
Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
Abstract	II
Abkürzungsverzeichnis	III
Symbolverzeichnis	IV
Abbildungsverzeichnis	V
Tabellenverzeichnis	VII
1 Einleitung	1
2 Stand des Wissens	5
2.1 Grundlagen der Kristallisation	5
2.1.1 Physikalische Mechanismen	7
2.1.2 Beurteilung der Kristallqualität	12
2.2 Modellierung von Kristallisation	14
2.2.1 Wissensbasierte Modelle	14
2.2.2 Datengetriebene Modelle: KI und Machine Learning	18
2.3 Prozessführung von Kristallisationen	25
2.3.1 Modellfreie Prozessführung	26
2.3.2 Modellbasierte Prozessführung	27
2.3.3 KI-gestützte Prozessführung	30
2.4 Analytik	31
2.4.1 ATR-FTIR	31
2.4.2 FBRM	33
2.4.3 Streulichtsensoren	34
3 Konzept der Arbeit	35
3.1 Motivation und Ziele	35
3.2 Methode zur Erstellung von NN-MPC	38
3.2.1 Voraussetzungen	38
3.2.2 Überblick über die Bestandteile der Methode	39
3.3 Vorgehen zur Optimierung und Validierung der Methode	42
4 Material und Methoden	43
4.1 Experimentelles Vorgehen	43
4.1.1 Versuchsdurchführung von Kühlungskristallisationen	43
4.1.2 Messung der CLD mit FBRM	44

4.1.3	Messung der Konzentration mit ATR-FTIR	46
4.1.4	Messung der dispersen Oberfläche mit einem Streulichtsensor	47
4.2	Anlagensteuerung	48
4.3	Methodenentwicklung	50
4.3.1	Datengenerierung- und Speicherung	51
4.3.2	Pipeline-Server	52
4.3.3	Tracking-Server	59
4.3.4	MPC-Modul	59
4.4	Optimierung und Validierung der Methode	60
4.4.1	Experimentelle Generierung von Trainingsdaten	61
4.4.2	Optimierung; Parameterscreening bei der Modellerstellung	63
4.4.3	Validierung; Fallstudie zur Erstellung und Anwendung von NN-MPC . . .	67
5	Ergebnisse und Diskussion	69
5.1	Optimierung der Methode	69
5.1.1	Datenverarbeitung	69
5.1.2	Design von neuronalen Netzen	74
5.1.3	Training von neuronalen Netzen	76
5.2	Validierung der Methode	79
5.2.1	Generierung von Trainingsdaten	79
5.2.2	Training und Optimierung von neuronalen Netzen	82
5.2.3	Prozessführung von Kristallisationen mit NN-MPC	86
6	Zusammenfassung	97
7	Ausblick	99
8	Anhang	