



TEILHANDBUCH

Dynamische Simulation, ODE/PDE und Betriebsmodi

Batch, Fed-batch, Perfusion und kontinuierliche Prozesse reproduzierbar berechnen

DOKUMENTBASIS

Produktabläufe, sichtbare Ergebnisse, Prüfkriterien, Evidenzgrenzen und kontrollierte Übergabe.

M03-DE-4.2 | RELEASE 4.2

6. OKTOBER 2026



Dokumentenkontrolle

Eine kontrollierte Basis für öffentliche Produktdokumentation.

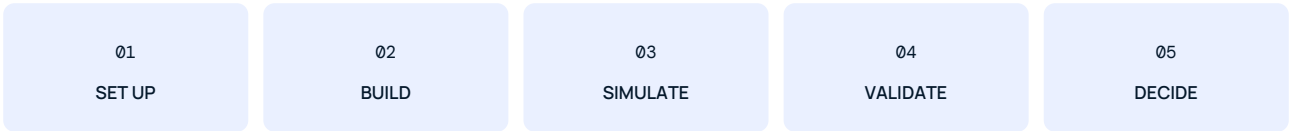
FELD	WERT
Dokument-ID	M03-DE-4.2
Release	4.2
Geprüft	6. Oktober 2026
Zielgruppe	Process Development, Modelling, Scale-up, MSAT
Zweck	Wie entwickeln sich Prozesszustände über Zeit und innerhalb welcher Betriebsgrenzen ist das Szenario plausibel?
Owner	Acatian Product and Engineering

GELTUNGSGRENZE

Dieses Handbuch erklärt Produktablauf und erforderliche Evidenz. Es ersetzt weder qualifiziertes Engineering-Urteil noch Kunden-QMS, Sicherheitsprüfung, Lieferantendaten oder die Validierung für einen regulierten Intended Use.

Geltungsbereich und Nutzung

Nutzen Sie Navigationspfad, Eingaberegister, sichtbares Ergebnis, Prüfkriterien und Übergabe gemeinsam. Eine Ansicht oder Zahl ohne Modellversion, Basis, Einheit, Evidenzstatus und Geltungsgrenze ist kein kontrolliertes Engineering-Ergebnis.



LANGUAGE

Dieses Dokument ist durchgängig auf Deutsch. Produkt-Navigationsnamen bleiben so erhalten, wie sie in der Oberfläche angezeigt werden.

Dynamische Simulation, ODE/PDE und Betriebsmodi

Batch, Fed-batch, Perfusion und kontinuierliche Prozesse reproduzierbar berechnen



TECHNISCHE ENTSCHEIDUNG	PFAD IN ACATIAN
Wie entwickeln sich Prozesszustände über Zeit und innerhalb welcher Betriebsgrenzen ist das Szenario plausibel?	Simulate > Dynamic simulation / Advanced modelling
PRIMÄRE NUTZER	ZULÄSSIGER REIFEGRAD
Process Development, Modelling, Scale-up, MSAT	Screening ohne Kalibrierung; Calibrated nach Parameterschätzung; Validated erst mit unabhängigem Datensatz

MIT DER ENTSCHEIDUNG BEGINNEN

Acatian koppelt Komponentenbilanzen mit zeitabhängigen Zuständen. ODEs beschreiben ideal gemischte Zustände; PDEs erfassen räumliche Gradienten als diskretisierte Felder. Betriebsmodus und Ereignisse müssen zur realen Fahrweise passen.

Erwartete Artefakte

ARTEFAKT	EMPFÄNGER
State trajectories	Process Development
Parameter fit	Modellreview
Scenario comparison	Entscheider
Numerical audit	Reviewer

Modell vorbereiten

EINGABE	WARUM RELEVANT	BEREIT, WENN
Anfangszustände	Startpunkt für Biomasse, Substrate, Produkt, Metabolite, Volumen und Temperatur.	Jeder Zustand hat Wert, Einheit und Quelle.
Kinetik	Bestimmt Wachstum, Aufnahme, Bildung und Absterben.	Gleichung, Parameterbereich und Gültigkeitsfenster sind dokumentiert.
Betriebsprofil	Unterscheidet Charge, Feed, Bleed, Harvest und kontinuierliche Zu-/Abfuhr.	Zeitpunkte, Raten und Steuerlogik sind definiert.
Numerik	Beeinflusst Stabilität, Genauigkeit und Rechenzeit.	Solver, Schrittweite, Toleranz und Abbruchbedingungen sind gesetzt.
Messdaten	Ermöglicht Kalibrierung und unabhängige Prüfung.	Training und Validation sind getrennt und zeitlich zugeordnet.

Prüfung vor dem Start

CHECK	Flowsheet und Komponentenbilanz strukturell lösbar
CHECK	Keine unbekannte Einheit
CHECK	Anfangszustände innerhalb physikalischer Grenzen
CHECK	Ereignisse chronologisch
CHECK	Baseline vor Run gespeichert

Arbeitsablauf

01

Betriebsmodus wählen

Batch, Fed-batch, Perfusion oder Continuous auswählen und Working Volume prüfen.

SICHTBARES ERGEBNIS: Volumen- und Transfergleichungen wechseln sichtbar mit dem Modus.

02

Zustände und Kinetik konfigurieren

ODE/PDE-Variablen, Parameter, Bounds und Quellen öffnen.

SICHTBARES ERGEBNIS: State Register ist vollständig und dimensionskonsistent.

03

Events definieren

Feed, Inokulation, Harvest, Bleed, Proben und Transfers terminieren.

SICHTBARES ERGEBNIS: Ereignisleiste zeigt eine kausale Sequenz.

04

Pre-run Check ausführen

Struktur, Einheiten, Initialwerte, Bounds und Numerik prüfen.

SICHTBARES ERGEBNIS: Keine blockierende Meldung bleibt offen.

05

Simulation starten

Run starten und Konvergenz, Zeitschritt und Residuen beobachten.

SICHTBARES ERGEBNIS: Run ID, Solverstatus und vollständige Trajektorie entstehen.

06

Szenarien vergleichen

Nur beabsichtigte Parameter ändern und Branch-Baseline vergleichen.

SICHTBARES ERGEBNIS: Vorher/Nachher zeigt Zustand, Output und Bound-Verletzungen.

Ergebnis prüfen

KRITERIUM	BESTANDEN, WENN	WENN NICHT BESTANDEN
Massenabschluss	Komponentenresiduen liegen innerhalb dokumentierter Toleranz.	Stöchiometrie, Streambasis oder Solver prüfen.
Nichtnegativität	Konzentrationen, Volumen und relevante Zustände bleiben physikalisch.	Bounds, Schrittweite und Gleichungen korrigieren.
Numerische Unabhängigkeit	Kleinerer Zeitschritt ändert die Entscheidung nicht wesentlich.	Konvergenzstudie durchführen.
Datenfit	Residuen sind zufällig und im vereinbarten Fehlerband.	Modellstruktur, Parameteridentifizierbarkeit und Datenqualität prüfen.

GELTUNGSGRENZE

Eine stabile numerische Lösung ist kein Nachweis biologischer oder physikalischer Gültigkeit. Parameter und Modellstruktur benötigen projektspezifische Kalibrierung und unabhängige Validierung.

Fehler beheben

BEOBACHTUNG	WAHRSCHEINLICHE URSACHE	KORREKTUR
Run startet nicht	Pre-run-Blocker oder unvollständiger Zustand.	Fehlerliste von oben nach unten schließen.
Perfusion verhält sich wie Batch	Dilution, Bleed oder Zellrückhalt fehlen.	Inlet/Outlet und Retention Efficiency ergänzen.
Unrealistische Spitzen	Event, Einheit oder Zeitschritt ist falsch.	Eventzeiten und Einheiten prüfen; Schrittweite reduzieren.
Guter Fit, schlechte Prognose	Überanpassung oder nicht identifizierbare Parameter.	Unabhängigen Validationsdatensatz und Profil-Likelihood verwenden.

Kontrollierte Übergabe

ARTEFAKT	EMPFÄNGER	MUSS ENTHALTEN
State trajectories	Process Development	Zeit, Zustand, Einheit, Intervall, Bound-Status
Parameter fit	Modellreview	Schätzwert, CI, Korrelation, Datensatz, Residuen
Scenario comparison	Entscheider	Änderung, KPI-Effekt, Unsicherheit, Constraint
Numerical audit	Reviewer	Solver, Toleranz, Schrittweite, Konvergenz

Abschlusscheck

CHECK	Aktives Projekt, Branch, Version und Intended Use sind sichtbar.
CHECK	Eingaben besitzen Einheit, Herkunft, Reviewstatus und relevante Unsicherheit.
CHECK	Blockierende Modell-, Physik-, Numerik- und Evidenzlücken sind geschlossen oder zugewiesen.
CHECK	Der Ergebnisreifegrad passt zur vorhandenen Evidenz.
CHECK	Das Ausgabepaket öffnet fehlerfrei und enthält seine Geltungsgrenzen.

ACATIAN ÖFFNEN

<https://acatian.com/login> | support@acatian.com