



Dynamische Simulation, ODE/PDE und Betriebsmodi

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





Auf einen Blick

Technische Entscheidung	Pfad in Axion
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

ENTSCHEIDUNGSREGEL

Axion 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.

The screenshot displays the Axion Process OS interface for a 'Cultured Meat - Perfusion' project. The left sidebar contains navigation options: MODEL (Model Brief, Project Space, Plant Overview), PROCESS MODEL (Flowsheet Studio, Equipment Register, Stream Table, Model Equations), ANALYZE (Dynamic Simulation, Advanced Modelling, Reactor CFD, Constraints + AI, Standards Check), and REVIEW + HANDOFF. The main area shows the 'Plant Overview' with key metrics: Annual product (4.88 t), Campaign duration (272 h), Direct cost (\$52,456/kg), Utilities (1,840.2 MWh), and Plant utilization (59%). Below this is a 'PROCESS ENGINEERING REVIEW' section for the 'Cultured Meat production model', described as an industrial screening workspace. The 'CURRENT MODEL STATUS' section shows the 'Screening model' is 29% evidence complete, with a progress bar indicating 0 decision ready, 6 screening ready, 1 blocked, and 22 missing inputs.

Relevante Axion-Arbeitsoberfläche für dieses Teilhandbuch.

Modell vorbereiten

Eingabe	Warum erforderlich	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

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

GELTUNGSGRENZE

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

Arbeitsablauf

1. Betriebsmodus wählen

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

SICHTBARES ERGEBNIS

Volumen- und Transfergleichungen wechseln sichtbar mit dem Modus.

2. Zustände und Kinetik konfigurieren

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

SICHTBARES ERGEBNIS

State Register ist vollständig und dimensionskonsistent.

3. Events definieren

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

SICHTBARES ERGEBNIS

Ereignisleiste zeigt eine kausale Sequenz.

4. Pre-run Check ausführen

4. Struktur, Einheiten, Initialwerte, Bounds und Numerik prüfen.

SICHTBARES ERGEBNIS

Keine blockierende Meldung bleibt offen.

5. Simulation starten

5. Run starten und Konvergenz, Zeitschritt und Residuen beobachten.

SICHTBARES ERGEBNIS

Run ID, Solverstatus und vollständige Trajektorie entstehen.

6. Szenarien vergleichen

6. Nur beabsichtigte Parameter ändern und Branch-Baseline vergleichen.

SICHTBARES ERGEBNIS

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

Ergebnisse prüfen

Prüfkriterium	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.

ENTSCHEIDUNGSREGEL

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.



Übergabe und nächste Schritte

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

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

[Axion öffnen](#) [Technisches Onboarding buchen](#)