

Robustifizierung und Informationsmetriken der modellgestützten Versuchsplanung

Dr. R. Schenkendorf^{1,2)} (E-Mail: r.schenkendorf@tu-braunschweig.de), X. Xie^{1,2,3)}, Prof. Dr.- U. Krewer^{1,2)}

¹⁾Institut für Energie und Systemverfahrenstechnik, TU Braunschweig, Franz Liszt Straße 35, 38106 Braunschweig, Deutschland

²⁾Zentrum für Pharmaverfahrenstechnik, TU Braunschweig, Franz Liszt Straße 35a, 38106 Braunschweig, Deutschland

³⁾International Max Planck Research School for Advanced Methods in Process and Systems Engineering, MPI Magdeburg, Sandtorstraße 1, 39106 Magdeburg, Deutschland

Modellgestützte Methoden sind Standardwerkzeuge in der Pharmatechnik. Mechanische Parameter werden jedoch nur indirekt über Messungen der Prozessgrößen bestimmbar. Die identifizierten Parameter sind aufgrund von Messunsicherheiten und modellvereinfachenden Annahmen nur Näherungen. Die Schätzungen weichen teilweise signifikant von den wahren Parameterwerten ab und sind mit Unsicherheiten behaftet.

Die modellgestützte Versuchsplanung (optimal experimental design, OED) ermittelt optimierte Versuchsprotokolle, die

nistische Modelle ermöglichen ein besseres Prozessverständnis und erlauben die Gewinnung informativer Daten und genauere Parameterschätzungen. Standardverfahren der OED basieren jedoch auf der vereinfachenden Annahme der Linearisierung und können bei komplexen Prozessmodellen versagen [1]. Bayes'sche Verfahren als auch globale Parametersensitivitäten sind vielversprechende Alternativen. Beide Robustifizierungskonzepte werden für Prozessmodelle der Pharmatechnik näher analysiert. Parallel hierzu werden gängige als auch neue Informa-

tionssmetriken der OED betrachtet. Hierbei zeigt sich, dass neben effizienten Methoden der Unsicherheitsanalyse auch Metriken der Informationstheorie weiterzuentwickeln sind.

- [1] R. Schenkendorf, X. Xie, M. Rehbein, S. Scholl, U. Krewer, *Processes* **2018**, *6* (4), 27. DOI: <https://doi.org/10.3390/pr6040027>