

Prof. Alexander Mitsos, Ph.D.

(*12.10.1976, verheiratet, ein Kind: 2010)

RWTH Aachen University

Aachener Verfahrenstechnik

Systemverfahrenstechnik

Forckenbeckstraße 51, D-52074 Aachen

Tel.: +49 241 80 94704, alexander.mitsos@avt.rwth-aachen.de



ORCID: 0000-0003-0335-6566; ResearcherID: D-5873-2011

URL der Website: <https://www.avt.rwth-aachen.de>

@alexander.mitsos; <https://scholar.google.de/citations?user=HF46sqQAAAAJ>

Vision der Arbeitsgruppe und Beitrag und Bezug zu catalaix

Meine Forschungsvision ist die rationale Gestaltung und der Betrieb neuartiger Chemie- und Energiesysteme unter Verwendung bestehender und/oder neuer Analyse- und Optimierungsmethoden. Unsere Forschung bewegt sich an der Schnittstelle von Prozesssystemtechnik, Energiesystemen und Computational Engineering. Wir arbeiten allein, in disziplinären Teams und interdisziplinären Teams, insbesondere mit Chemikern, Biologen, Mathematikern und Informatikern. Wir stehen an der Spitze der numerischen Optimierung und des maschinellen Lernens in der chemischen Verfahrenstechnik.

Mein Ziel bei catalaix ist die Entwicklung von Werkzeugen für i) rationale integrierte Produktprozesse für Kreislaufwirtschaft und ii) integriertes Design von Prozess und Katalysator. Um dieses Ziel zu erreichen, werde ich die Zusammenarbeit zwischen Experten für maschinelles Lernen einerseits und Technologiespezialisten (aus Chemie, Biologie und Chemieingenieurwesen) andererseits leiten.

Aktuelle & vorherige Positionen

| | |
|-------------|---|
| seit 2012 | Professor für Systemverfahrenstechnik (W3), AVT.SVT, RWTH Aachen University |
| seit 2017 | Direktor , IEK-10, Energiesystemtechnik, Forschungszentrum Jülich |
| 2009 – 2012 | Rockwell International Assistant Professor (Mechanical Engineering), Massachusetts Institute of Technology |
| 2008 – 2008 | Junior Research Group Leader , AICES, RWTH Aachen University |
| 2006 – 2007 | Senior Engineer , Cambridge (MA) USA, RES Group/Numerica Technology |

Akademische Laufbahn

| | |
|-----------|---|
| 2001-2006 | Promotion bei Paul I. Barton, Chemical Engineering with Minor in Optimization, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (MA) USA |
| 1994-1999 | Diplom mit Auszeichnung in Chemieingenieurwesen, Universität Karlsruhe |

Forschungspreise und -stipendien

| | |
|-----------|--|
| 2016 | AICHe CAST Outstanding Young Researcher Award |
| 2014 | Journal of Global Optimization, best paper |
| 2010 | Rockwell International Career Development Professor |
| 2010 | Best practice award Research & Discovery, bioIT world |
| 2003-2004 | Martin Fellow for Sustainable Development |
| 2000 | Dechema Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie, Preis für kurzes und effizientes Studium |

Einbindung im Wissenschaftssystem

- Seit 2000 -aktives Mitglied in mehreren (inter)nationalen Berufsverbänden, darunter Dechema/Processnet, American Institute of Chemical Engineers, INFORMS, Mathematical Optimization Society, Society of Industrial and Applied Mathematics, American Chemical Society und Technical Chamber of Greece.
- Mitglied mehrerer Fachgremien; u.a. stellvertretender Sprecher für Modellgestützte Prozessentwicklung und -optimierung (Processnet) und deutscher akademischer Vertreter in der European Computer Aided Process Engineering Working Party.
- mehrere Vertrauensstellungen in Fachzeitschriften und Fachgesellschaften, z. B. als Redakteur der renommierten Zeitschrift AAAS Science Advances und der Fachzeitschriften Journal of Global Optimization und Computers & Chemical Engineering.
- Mitglied in zahlreichen Programm- und Redaktionsausschüssen; Programmvorsitzender (2020-2022) der Abteilung für Computer- und Systemtechnik des American Institute of Chemical Engineers.

Ausgewählte Projekte

- seit 2021 **Sprecher/Koordinator** DFG-Projekt SPP 2331 Maschinelles Lernen in der Chemietechnik (chemengml.org/)
- seit 2019 **Direktor** (für die RWTH) der Helmholtz School for Data Science in Life, Earth and Energy (HDS-LEE hds-lee.de)
- seit 2016 **Direktor** BMBF Kopernikus-Projekt SynErgie
- seit 2012 **PI und stellvertretender Sprecher** DFG-Projekt CRC 985 Functional Microgels and Microgel Systems

Bedeutendste wissenschaftliche Beiträge

1. A. L. Ziegler and C. Grutering and L. Poduschnick and A. Mitsos and L. M. Blank. "Co-feeding enhances the yield of methyl ketones". Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology, Volume 50, Issue 1. (2023), <https://doi.org/10.1093/jimb/kuad029>.
Kombination von Experimenten und Simulation zur Verbesserung der Leistung von Mikroorganismen.
2. A. M. Schweidtmann and J. M. Weber and C. Wende and L. Netze and A. Mitsos. "Obey validity limits of data-driven models through topological data analysis and one-class classification". Optimization and Engineering, volume 23, 855-876. (2022), <https://doi.org/10.1007/s11081-021-09608-0>.
Eine neue Methode zur Ermittlung der Grenzen von Modellen des maschinellen Lernens.
3. A. M. Schweidtmann, D. Bongartz, D. Grothe, T. Kerkenhoff, X. Lin, J. Najman, and A. Mitsos. "Deterministic Global Optimization with Gaussian Processes Embedded". Mathematical Programming Computations, 13(3): 553–581. (2021), <http://DOI:10.1007/s12532-021-00204-y>.
Ein neuer numerischer Optimierungsalgorithmus, der bei der Optimierung mit maschinellen Lernmodellen viel besser skaliert.
4. J. Burre, D. Bongartz, S. Deutz and C. Mebrahtu, O. Osterthun, R. Sun, S. Volker, A. Bardow, J. Klankermayer, R. Palkovit, and A. Mitsos. "Comparing pathways for electricity-based production of dimethoxymethane as a sustainable fuel." Energy and Environmental Science, 14: 3686–3699. (2021), <https://doi.org/10.1039/D1EE00689D>.
Kombination von Chemie, Verfahrenstechnik und Lebenszyklusanalyse für die

- Herstellung synthetischer Kraftstoffe.*
5. A. M. Schweidtmann, J. G. Rittig, A. König, M. Grohe, A. Mitsos, M. Dahmen}, "Graph Neural Networks for Prediction of Fuel Ignition Quality". *Energy & Fuels*, volume 34, no. 9, pages 11395-11407. (2020), <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c01533>.
Eine Methode zur Prognose der Verbrennungseigenschaften auf der Grundlage der molekularen Struktur des Brennstoffs.
 6. A. N. Ksiazkiewicz and L. Bering and F. Jung and N. A. Wolter and J. Viell and A. Mitsos and A. Pich, "Closing the 1-5 μm Size Gap: Temperature-programmed, Fed-batch Synthesis of μm -sized Microgels". *Chemical Engineering Journal*, volume 379, page 122293. (2019), <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2019.122293>.
Kombination von mechanistischen Modellen, chemischen Experimenten und numerischer Simulation für optimale Polymereigenschaften.
 7. P. Joy and K. Rossow and F. Jung and H.-U. Moritz and W. Pauer and A. Mitsos and A. Mhamdi, "Model-based control of continuous emulsion co-polymerization in a lab-scale tubular reactor". *Journal of Process Control*, volume 75, pages 59-76. (2019), <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2018.12.014>.
Kombination von mechanistischen und datengesteuerten Modellen für die optimale Nutzung eines Laborreaktors.
 8. A. Tsoukalas and A. Mitsos. "Multivariate McCormick relaxations." *Journal of Global Optimization* 59.2-3: 633-662. (2014), DOI:10.1007/s10898-014-0176-0.
Eine neue Methode zur Ableitung von konvexen Relaxationen mathematischer Funktionen, die in der deterministischen globalen Optimierung verwendet werden können.
 9. A. Mitsos, B. Chachuat, and P. I. Barton. "McCormick-based relaxations of algorithms." *SIAM Journal on Optimization* 20.2: 573-601. (2009), <https://doi.org/10.1137/080717341>.
Ein neuer Ansatz für die deterministische globale Optimierung.
 10. A. Mitsos, I. N. Melas, P. Siminelakis, A. D. Chairakaki, J. Saez-Rodriguez, and L. G. Alexopoulos. "Identifying drug effects via pathway alterations using an integer linear programming optimization formulation on phosphoproteomic data." *PLOS Computational Biology* 5.12: e1000591. (2009), <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1000591>.
Zusammenarbeit von Systembiologie und numerischer Optimierung bei der Erforschung der molekularen Wirkungen von Krebsmedikamenten.

Patente

1. H. Zebian and A. Mitsos. A Double Pinch Criterion for Optimization of Regenerative Rankine Cycles. U.S. Patent 9,091,183. WO/2012/162187. May 2012.
Auf der Grundlage numerischer Optimierung und technischer Analysen haben wir ermittelt, wie Wärmekraftwerke ausgelegt und betrieben werden sollten.
2. A. F. Ghoniem, A. Mitsos, Y. Shao-Horn, M. A. Habib, K. Mezghani, and R. Ben-Mansour. Integrated Polymeric-Ceramic Membrane Based Oxy-fuel Combustor. US Patent 9004909. 2015.
Auf der Grundlage der Kombination von Materialwissenschaft, Verbrennung und chemischer Technik haben wir eine neue Art von intensivierter Betriebseinheit vorgeschlagen, die Trennung und Verbrennung kombiniert.