

# Systematische Entwicklung neuartiger strukturierter Packungen

## Generatives Design neuartiger additiv fertiger strukturierter Packungen für thermische Trennapparate

**A. Lange, G. Fieg**, Institut für Systemverfahrenstechnik, Technische Universität Hamburg (TUHH)

### Kurzgefasst

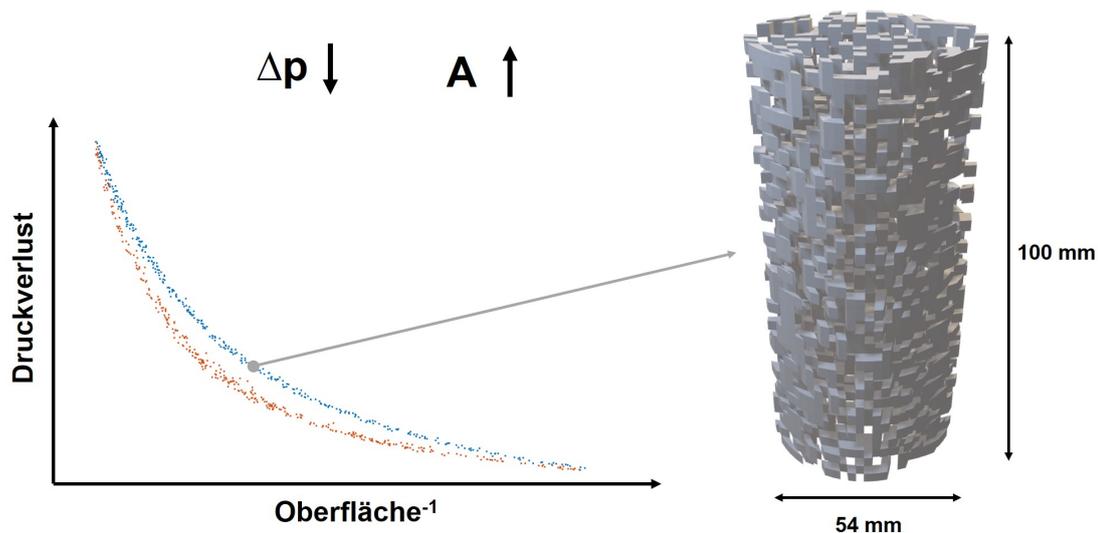
- Strukturierte Packungen werden flächendeckend in industriellen Trennapparaten eingesetzt
- Formverbesserungen der Packungen führen zu effizienteren Prozessen und damit zu Einsparungen von Energie und Treibhausgasen
- 3D-Druck ermöglicht die Realisierung von neuartigen, erstmalig generativ gestalteten Packungen

Thermische Trennapparate werden industriell für die Aufreinigung von Stoffgemischen eingesetzt. Die destillative Trennung gilt dabei als das mit Abstand weitest verbreitete thermische Trennverfahren der Chemie- und Prozessindustrie. Die apparative Umsetzung der mehrstufigen Destillation erfolgt in Rektifikationskolonnen und ermöglicht die Gewinnung hochreiner Produkte. Dadurch gilt die Rektifikation als unverzichtbare Technologie. Gleichzeitig handelt es sich dabei jedoch um ein sehr energieintensives Trennverfahren. Dem gegenüber stehen hohe Energiepreise und vor allem die globale Herausforderung der Vermeidung von Treibhausgasen sowie das Ziel der Klimaneutralität. Für den Transformationsprozess der Chemie- und Prozessindustrie hin zu einer grünen und klimaneutralen Produktion und für verfolgte Strategien (z.B. Der europäische grüne Deal), ist die effiziente Nutzung von Ressourcen und Energieträgern ein unverzichtbarer Baustein. Deshalb ist es das Ziel dieses Forschungsprojekts, Rektifikationskolonnen konsequent weiterzuentwickeln und damit Rektifikationsprozesse energieeffizienter zu gestalten. Abhängig von den spezifischen Betriebsbedingungen und des aufzureinigenden Stoffgemischs werden die Rektifikationskolonnen mit trennwirksamen Einbauten versehen, welche den Stofftransport zwischen der im Gegenstrom geführten Flüssigkeits- und Dampfphase intensivieren. Strukturierte Packungen werden als trennwirksame Einbauten insbesondere in Kolonnen im Vakuumbetrieb eingesetzt, sodass neben einer maximalen Trenneffizienz, ein minimierter Druckverlust über die Packung sowie ein maximaler Durchsatz gefordert sind. Diese drei Kenngrößen korrelieren direkt mit den vorliegenden Strömungsverhältnissen, welche wiederum durch

die Form der strukturierten Packung bestimmt werden. Formverbesserungen führen somit zu direkten Einsparungen von Energiekosten und Treibhausgasen bei dem Betrieb der Kolonne. Entsprechend der extrem hohen Anzahl von weltweit betriebenen Vakuumrektifikationskolonnen führen bereits geringe prozentuale Verbesserung der Kenngrößen der Packungen in Summe zu hohen Einsparungen. Deshalb steht die Form der strukturierten Packungen bereits lange im Forschungsinteresse und wird stetig weiterentwickelt. Bisherige Entwicklungen unterlagen jedoch den Einschränkungen konventioneller Fertigungsverfahren wie beispielsweise dem Biegen und Fügen von Stahlblechen. Additive Fertigungsverfahren bieten nun eine bisher nicht dagewesene Gestaltungs- und Fertigungsfreiheit, sodass sie die Schlüsseltechnologie für die Entwicklung einer neuen Generation von Packungen darstellen könnten. Die Nutzung des vorhandenen Potentials bedarf jedoch einer systematischen Methodik basierend auf der engen Verbindung von Simulations- und Optimierungsmethoden sowie zielgerichteten Experimenten. Deshalb ist das Ziel, mit Hilfe des Einsatzes von Methoden der Strukturoptimierung neuartige, additiv fertige, strukturierte Packungen zu entwickeln, welche einen minimalen Druckverlust bei möglichst maximaler Trennleistung und Produktionskapazität aufweisen.

Dazu werden im Institut für Systemverfahrenstechnik der Technischen Universität Hamburg bereits erfolgreich strukturierte Packungen konstruiert, simulationsbasierte Formoptimierungen durchgeführt, Prototypen mit einem stereolithographischen Verfahren gefertigt und diese in Experimenten untersucht [1]. Dank der Unterstützung durch das HLRN konnte das Forschungsprojekt auf eine neue Ebene gehoben werden. Es werden nun umfangreiche mehrkriterielle Topologieoptimierungsstudien durchgeführt, sodass erstmalig strukturierte Packungen generativ gestaltet werden. So sollen systematisch, neuartige, leistungsfähige Packungsstrukturen identifiziert werden, die substantiell dazu beitragen, den Betrieb von Rektifikationskolonnen ökonomisch und ökologisch effizienter zu gestalten.

Für die Optimierungsstudien wurde ein Werkzeug für das generative Design von Packungen entwickelt und breit erprobt. Dieses verknüpft einen genetischen Optimierungsalgorithmus mit



**Abbildung 1:** Auftragung des Druckverlusts gegen den Kehrwert der Oberfläche der untersuchten Packungen von zwei unterschiedlichen Generationen (rot = höhere Generation) sowie Darstellung der Packung eines untersuchten Individuums.

einphasigen Strömungssimulationen als Analysemodell. Der Entwurfsraum kann damit systematisch und zielgerichtet untersucht und eine Vielzahl von Packungsentwürfen evaluiert werden. Als Zielfunktionen der mehrkriteriellen Optimierung sind die Maximierung der Oberfläche der Packung sowie die Minimierung des Druckverlustes über die Packung definiert. Spezifische prozess- und fertigungsbedingte Nebenbedingungen sichern die Integrität der Packungen und minimieren zielgerichtet den Umfang des Lösungsraums. Quaderförmige Elemente, welche entweder Materialelemente oder durchströmbare Elemente darstellen, dienen als Designvariablen. Ziel ist es, die Materialelemente bestmöglich und automatisiert innerhalb eines Entwurfsraums zu verteilen. Angelehnt an die Evolutionstheorie ahmt der genetische Algorithmus durch die Operationen der Selektion, Rekombination und Mutation die Evolution nach. Jede Generation umfasst dabei eine definierte Anzahl von Individuen. Jedes Individuum repräsentiert eine aus den Entwurfsvariablen der binären Materialelemente generierte Packung, deren Kenngrößen in jeweils einer Strömungssimulation bestimmt werden. Die Strömungssimulationen werden durchgeführt und der Druckverlust sowie die spezifische Oberfläche der Packung durch den Optimierungsalgorithmus evaluiert. Auf Basis der ausgewerteten Fitnessfunktionen sowie der erwähnten Operatoren wird eine neue Generation von Individuen erzeugt und diese wiederum durch Strömungssimulationen ausgewertet. Anhand der Auftragung des Druckverlusts gegen den Kehrwert der spezifischen Oberfläche eines jeden Individuums einer Generation wird das Wandern der entstehenden Front im Laufe der

Optimierung visualisiert. Dies ist in Abbildung 1 anhand von zwei Generationen exemplarisch dargestellt. Zusätzlich ist die Packung eines Individuums dargestellt.

Die am HLRN durchgeführten Optimierungsstudien haben das Ziel, durch den Einsatz der beschriebenen innovativen Methode, neuartige, strukturierte Packungen zu identifizieren, die dem besten Kompromiss aus maximaler Oberfläche und minimalem Druckverlust über die Packung entsprechen. Es wird erwartet, dass diese Ergebnisse die Grundlage für eine neue Generation strukturierter Packungen darstellen. Zusätzlich kann das hier am Beispiel der Rektifikationskolonne durchgeführte Vorgehen durch ein einfaches Anpassen der Zielfunktionen und/oder der Randbedingungen auf weitere thermische Trennverfahren wie der Absorption geschickt erweitert werden. Die Allgemeingültigkeit des verfolgten Ansatzes durch die einfache Übertragbarkeit auf weitere Apparate und Anwendungen bietet damit einen Mehrwert für weitere Disziplinen, sodass die am HLRN generierten Ergebnisse als substantielle Grundlage für anknüpfende Forschungsarbeiten dienen.

#### WWW

<https://www.tuhh.de/psi/>

#### Weitere Informationen

- [1] A. Lange, G. Fieg, *Chem. Ing. Tech.* 92, No. 9, 12931325 (2020). doi:10.1002/cite.202055133