

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
12. Dezember 2024 (12.12.2024)



(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2024/251698 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:

G06F 30/23 (2020.01) G06F 111/20 (2020.01)
B33Y 50/00 (2015.01) G06F 113/08 (2020.01)
G05B 19/4099 (2006.01) G06F 113/10 (2020.01)
G06F 111/06 (2020.01) G06F 113/14 (2020.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2024/065260

(22) Internationales Anmeldedatum:
04. Juni 2024 (04.06.2024)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
23177960.4 07. Juni 2023 (07.06.2023) EP

(71) Anmelder: **EVONIK OPERATIONS GMBH** [DE/DE];
Rellinghauser Strasse 1-11, 45128 Essen (DE).

(72) Erfinder: **KLEINEKORTE, Johanna**; Beverstrasse 5,
52066 Aachen (DE). **REHAGE, Hendrik**; Pappelweg 21,
63452 Hanau (DE). **SCHAACK, Senada**; Katharina-Sta-
ritz-Strasse 10, 60438 Frankfurt am Main (DE).

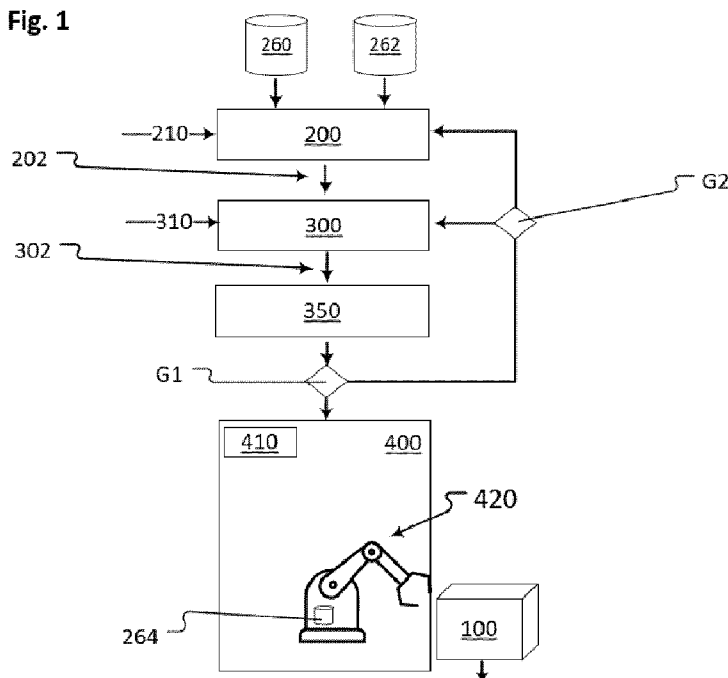
(74) Anwalt: **EVONIK PATENT ASSOCIATION**; c/o Evo-
nik Industries AG, IP Management, Bau 1042A, PB15,
Paul-Baumann-Strasse 1, 45772 Marl (DE).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für
jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL,
AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW,
BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ,
DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH,
GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO,
JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR,

(54) Title: COMPUTER-IMPLEMENTED METHOD FOR PRODUCING A CAD MODEL OF AN APPARATUS, AND ADDITIVE
MANUFACTURING METHOD OF AN APPARATUS

(54) Bezeichnung: COMPUTER-IMPLEMENTIERTES VERFAHREN ZUR HERSTELLUNG EINES CAD-MODELLS EINES
APPARATES UND ADDITIVES FERTIGUNGSVERFAHREN EINES APPARATES

Fig. 1



(57) Abstract: The invention relates to a computer-implemented method for producing a CAD model for an apparatus carrying a material system, wherein the material system comprises at least two material streams, and the apparatus is a heat exchanger or a reactor for synthesising at least one product from at least one starting material of at least one material stream, chosen from the following group: tube reactor, reactor with reaction and heat exchange channels or heat exchange chambers, continuous reactor, column with at least one intermediate tray, comprising the steps of: a) inputting system parameters into CAD software, wherein the system parameters comprise



LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) **Bestimmungsstaaten** (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), europäisches (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Erklärungen gemäß Regel 4.17:

- hinsichtlich der Berechtigung des Anmelders, ein Patent zu beantragen und zu erhalten (Regel 4.17 Ziffer ii)

Veröffentlicht:

- mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)

mass data, thermodynamic data and/or reaction data of the material system; b) creating the CAD model, comprising a three-dimensional and multiphysical simulation of the material system; c) outputting the CAD model to an output unit, evaluation unit and/or memory unit, and d) at least one definition step by means of a program module, which is upstream of the creation of the CAD model, wherein the definition step comprises the following: # providing at least one digital spatial element, # providing digital design elements, # arranging the design elements in the spatial element, # outputting a primary model as a further system parameter; e) generating the CAD model by means of the CAD software using the primary model as a further system parameter.

(57) **Zusammenfassung:** Die Erfindung betrifft ein computer-implementiertes Verfahren zur Herstellung eines CAD- Modells für einen ein Stoffsystem führenden Apparat, wobei das Stoffsystem mind. zwei Stoffströme umfasst, und der Apparat ein Wärmetauscher oder einen Reaktor zur Synthese mind. eines Produkts aus mind. einem Ausgangsstoff mind. eines Stoffstroms ist, genommen aus der folgenden Gruppe: Rohrreaktor, Reaktor mit Reaktions- und Wärmetauschanälen bzw. Wärmetauschräumen, Kontreaktor, Kolonne mit mind. einem Zwischenboden, umfassend die Schritte: a) Eingabe von Systemparametern in eine CAD-Software, wobei die Systemparameter Massedaten, thermodynamische Daten und/oder Reaktionsdaten des Stoffsystems umfassen; b) Erstellung des CAD-Modells, umfassend eine dreidimensionale und mehrfachphysikalische Simulation des Stoffsystems; c) Ausgabe des CAD-Modells an eine Ausgabereinheit, Auswertereinheit und/oder eine Speichereinheit, und wobei d) mind. einen Definitionsschritt mittels eines Programmmoduls, welcher der Erstellung des CAD-Modells vorgelagert ist, wobei der Definitionsschritt Folgendes umfasst: # Bereitstellung mind. eines digitalen Raumelements, # Bereitstellung digitaler Designelemente, # Anordnung der Designelemente im Raumelement, # Ausgabe eines Primärmodells als ein weiterer Systemparameter; e) Erzeugung des CAD-Modell mittels der CAD-Software unter Anwendung des Primärmodells als weiteren Systemparameter.

Computer-implementiertes Verfahren zur Herstellung eines CAD-Modells eines Apparates und additives Fertigungsverfahren eines Apparates

- 5 Die Erfindung betrifft ein Computer-implementiertes Verfahren zur Herstellung eines CAD-Modells eines Apparates und ein additives Fertigungsverfahren eines Apparates.

Der Einsatz von additiven Fertigungsverfahren für Apparate und insb. chemische Reaktoren, ermöglicht eine fast unbegrenzte Vielfalt und Komplexität für das jeweilige
10 technische Design. Die Evaluation eines möglichen technischen Designs erfordert jedoch aufwändige und langwierige Berechnungsschritte. Für jedes Design müssen CAD-Modelle bspw. durch eine CAD-Software, erzeugt werden, die nachfolgend evaluiert und ggf. hinsichtlich des jeweiligen Einsatzzweckes ergänzend simuliert und überprüft werden. Diese Evaluation eines technischen Designs bspw. hinsichtlich Festigkeit oder
15 thermischer Eigenschaften, ist aufgrund der Komplexität chemischer Zusammenhänge aufwändig. Die Anzahl an auszuwertenden Designs ist daher limitiert.

Aus der DE 10 2015 115 409 A1 ist ein Verfahren zur Gestaltung von fluiddurchströmten Bauteilen bekannt, wobei zur Gestaltung von fluiddurchströmten Bauteilen mit
20 Fluidräumen und einer die Fluidräume umschließenden Festkörperstruktur mittels rechnergestützter technischer Arbeitsprozesse (Computer Aided Engineering – CAE) zur Gestaltung der Topologie der Bauteile verwendet, wobei Strömungssimulationsmodelle (fluiddynamische Simulationen (CFD)), Festkörpersimulationsmodelle (Finite-Elemente-Methode (FEM)) und rechnergestützte Konstruktion (Computer-Aided Design - CAD)
25 kombiniert werden. Für die Fertigung von Bauteilen und Überwindung von Werkzeuglimitierungen schlägt die DE 10 2015 115 409 A1 vor, additive Fertigungsverfahren einzusetzen, wie Laserschmelzen, Lasersintern, Elektronenstrahlschmelzen oder 3D-Druck. Hierbei wird vorgeschlagen, zunächst die Fluidraumtopologie zu optimieren und im Folgeschritt die um umhüllende
30 Festkörperstruktur des Bauteils zu gestalten.

Nachteilig an diesem Verfahren ist, dass die große Anzahl von Parametern und Freiheitsgraden möglicher Fluidraumtopologien, wie bspw. die Anzahl von Fluidkanälen, geometrischer Querschnitt, Verlauf, Teilungen und Zusammenführungen von einzelnen
35 Fluidkanälen etc., sehr große Prozessorleistungen erfordern und/oder sehr lange Simulationszeiten erfordern, insb. wenn es sich um stark thermisch oder druckbelastete

Apparate handelt, wie bspw. Reaktoren für stark exotherme Reaktionen, so dass die nachfolgende Festigkeitssimulation (FEM) vorherige Fluidtopologien ggf. mehrfach als nicht realisierbar (genehmigungsfähig) verwirft. Weiterhin sind ist bei der

Apparateentwicklungen, Apparateerprobung und dem erforderlichen Scale-Up vom
5 Labormaßstab zu großtechnischen Bauteilen nachteilig, wenn eine Leistungsvergrößerung und/oder geringfügige konstruktive Anpassungsbedarfe, für jeden Schritt vollständig neue Simulationen und Neuberechnungen erfordern. Dies ist umso aufwändiger und wirtschaftlich nachteilig, wenn hierdurch in jedem Einzelfall behördliche Genehmigungen zur Herstellung solcher Apparate oder deren Betrieb erforderlich sind.

10

Die additive Fertigung, auch 3D-Druck genannt, ermöglicht hochkomplexe technische Designs für Apparate und Behälter im chemischen Apparatebau. Es besteht eine höhere Komplexität und größere Freiheitsgrade im dreidimensionalen Raum. Somit kann mittels 3D-Druck chemisches Prozessequipment extensiv nach Bedarf angepasst werden, durch
15 gezielte Geometrieoptimierung (siehe Capel, A. J., Rimington, R. P., Lewis, M. P., & Christie, S. D. (2018). 3D printing for chemical, pharmaceutical and biological applications. Nature Reviews Chemistry, 2(12), 422-436.).

Die Möglichkeiten zur Optimierung von Prozesseinheiten in allen drei Dimensionen ist
20 limitiert durch sehr aufwändige Computersimulationen, so genannten „multi-physics simulation“ (siehe Kaya, U., Gopireddy, S., Urbanetz, N., Nopens, I., & Verwaeren, J. (2022). Predicting the hydrodynamic properties of a bioreactor: Conditional density estimation as a surrogate model for CFD simulations. Chemical Engineering Research and Design, 182, 342-359.)

25

Allein die Simulation eines einfachen Reaktors für eine Flüssigphasenreaktion erfordert die Berechnung von Wärme- und Stofftransporten für alle eingesetzten Prozessfluide, der Reaktionskinetik, sowie des Wärmetransports durch die festen Bauteile des Reaktors. Dreidimensionale Simulation dieses einfachen Sets aus Gleichungen
30 erfordert sehr große Rechnerleistungen, die zzt. die Optimierungsmöglichkeiten auf eine kleine Anzahl von nutzbaren Designparametern limitieren (siehe Biedermann, M., Meboldt, M. (2020). Computational design synthesis of additive manufactured multi-flow nozzles. Additive Manufacturing, 35, 101231).

35 Somit bestehen der Bedarf und die Aufgabe darin, ein verbessertes Verfahren zur Verfügung zu stellen, mit dem verbesserte CAD-Modelle von Apparaten, insb. von

chemischen Reaktoren, in verkürzter Zeit erstellt werden können und insb. auch die Nutzerführung zu verbessern.

Die Aufgabe wird gelöst durch ein computerimplementiertes Verfahren zur Herstellung
5 eines CAD-Modells für einen ein Stoffsystem führenden Apparat nach Anspruch 1, ein Herstellungsverfahren nach Anspruch 14 und eine Speichermedium nach Anspruch 17.

Das computerimplementierte Verfahren zur Herstellung eines CAD-Modells für einen ein
10 Stoffsystem aus mind. zwei Stoffströmen führenden Apparat, wobei der Apparat ein Wärmetauscher, ein Reaktor zur Synthese mind. eines Produkts aus mind. einem Ausgangsstoff (Edukt) mind. eines Stoffstroms oder eine Kolonne mit mind. einem Zwischenboden ist, wobei die folgenden Schritte umfasst sind:

- 15 a) Eingabe von Systemparametern in eine CAD-Software, wobei die Systemparameter Massedaten, thermodynamische Daten und/oder Reaktionsdaten des Stoffsystems umfassen können;
- b) Erstellung des CAD-Modells, umfassend eine dreidimensionale und mehrfachphysikalische Simulation des Stoffsystems;
- 20 c) Ausgabe des CAD-Modells an eine Ausgabeeinheit, Auswerteeinheit und/oder eine Speichereinheit; und weiterhin
- d) mind. einen Definitionsschritt mittels eines Programmmoduls, welcher der Erstellung des CAD-Modells vorgelagert ist, wobei der Definitionsschritt Folgendes umfasst:
 - 25 ▪ Bereitstellung mind. eines digitalen Raumelements,
 - Bereitstellung digitaler Designelemente,
 - Anordnung der Designelemente im Raumelement,
 - Ausgabe eines Primärmodells als ein weiterer Systemparameter; und
- 30 e) Erzeugung des CAD-Modells mittels der CAD-Software unter Anwendung des Primärmodells als weiteren Systemparameter; und wobei

der Definitionsschritt mittels eines Programmmoduls der Erstellung des CAD-Modells vorgelagert ist, wobei der Schritt der Anordnung des Definitionsschritts
35 Folgendes umfasst:

- Auswahl einer definierten Anzahl und/oder Typen von Designelementen;
- Erster Ausrichtungsschritt, indem zwischen jeweils mindestens zwei Designelementen die Strömungswege von der mindestens einen Ausleitungsöffnung zu mind. einer definierten stromabwärts befindlichen Einleitungsöffnung eines weiteren Designelements bestimmt werden; und
- Zweiter Ausrichtungsschritt, indem mind. ein Teil der Designelemente im Raumelement, mindestens einem Raumsegment und/oder mindestens einem Rasterelement geometrisch in mindestens zwei Raumrichtungen, insb. in drei Raumrichtungen angeordnet werden.

Hierbei ist der Reaktor aus der folgenden Gruppe: genommen: Rohrreaktor, Reaktor mit Reaktions- und Wärmetauschanälen bzw. Wärmetauschräumen und/oder Kontireaktor.

Der Begriff „weiterer Systemparameter“ ist im vorliegenden Zusammenhang weit auszulegen und meint „mindestens ein weiterer Systemparameter“, insb. auch „alle Systemparameter“.

Somit kann bei einer vorteilhaften Ausführungsform vorgesehen werden, dass der Schritt a., der Eingabe von Systemparametern in eine CAD-Software, mind. teilweise durch den Definitionsschritt bzw. während des Definitionsschritts erfolgt, wobei dies insb. die vollständige Eingabe von Systemparametern durch den Definitionsschritt umfasst.

Bei einer bevorzugten Ausführungsform umfasst das Primärmodell jegliche Systemparameter für die CAD-Software und/oder im Definitionsschritt wird der wesentliche Umfang, insb. alle Systemparameter direkt eingegeben und/oder mittelbar durch die Auswahl, Anordnung und/oder Parametrisierung mind. eines Designelementes ausgewählt und/oder eingegeben.

Bei dieser bevorzugten Ausführungsform muss ein Nutzer vorteilhafterweise nach der Erstellung des Primärmodells keine weiteren Systemparameter für die CAD-Software auswählen und/oder in diese eingeben. Die Übernahme des Primärmodells stellt die vollständige (Eingangs-)Information zum computergemäßen Betrieb und Nutzung der CAD-Software dar.

Vorliegend ist „Stoffstrom“ nicht einschränkend zu verstehen, und meint jegliches Fluid oder Fluidgemisch, ebenso ist „Ausgangsstoff“ sehr breit zu verstehen und meint jeglichen

ersten Stoff, welcher aufgrund einer chemischen und/oder physikalischen Reaktion allein oder gemeinsam mit einem weiteren Stoff zu einem Produkt gewandelt wird. Ein „Ausgangsstoff“ wird auch synonym als „Edukt“ bezeichnet. Dies ist im Unterschied zu einem „Hilfsstoff“ zu verstehen, der selbst nicht zu einem „Produkt“ gewandelt wird.

5

Ein „Stoffsystem“ meint den Stoffstrom und dessen spezifisches chemisch-physikalisches Verhalten und Zustände. Dies umfasst rheologische Charakteristiken, Massetransport, thermische Charakteristik, einschließlich der Wärmeentwicklung und Wärmeübergänge bzw. Wärmetransport über benachbarte Raumelemente und Flächen und ggf. auch die Reaktionskinetik. Ein CAD-Modell wird insb. auf Basis von mehrfachphysikalischen Charakteristiken erstellt, wobei der Begriff „mehrfachphysikalisch“ auf die Beachtung von mind. zwei physikalischen Größen verweist, wie insb. Temperatur, Strömungsgeschwindigkeit und/oder Druck.

10

15

Die „CAD-Software“ meint jegliche Computer-Aided Design-Software, insb. eine für den für den Apparate- und Reaktorbau, wie bspw. NX der Firma Siemens, FreeCAD, oder eine sonstige vergleichbare Software. Weiterhin sind „Systemparameter“ nicht einschränkend zu verstehen und meint jegliche Vorgabe, Eingaben, Festlegung oder Parametrisierung, um die Aufgabenstellung zur Erstellung eines CAD-Modells für die CAD-Software festzulegen. Unter dem „CAD-Modell“ ist das Berechnungsergebnis und/oder Ausgabeformat einer CAD-Software zu verstehen. Weiterhin ist unter der „Erstellung des CAD-Modells“ die programm-basierte Erstellung eines verfahrenstechnisch optimierten digitalen CAD-Modells durch eine CAD-Software zu verstehen, basierend auf den Systemparametern.

20

25

Vorliegend meint „Systemparameter“ jeden Parameter, jede funktionale Abhängigkeit und/oder mathematischen Zusammenhang (Algorithmus), die zur Bildung des CAD-Modells vorteilhaft sein können und dem Programmmodul bzw. der CAD-Software zur Erstellung des CAD-Modells eines Apparates fallabhängig zur Verfügung gestellt werden.

30

Diese umfassen insbesondere die Reaktionsgleichung des bestimmungsgemäßen chemischen Verfahrens, die geforderte Produktionskapazität und zugehörige oder abgeleitete physikalische, thermodynamische und/oder chemische Größen, strömungsdynamische Größen, Energiemengen und -flüsse sowie Angaben zum Massentransport/-strömen. Weiterhin umfasst „Systemparameter“ geometrische

35

Vorgaben und Dimensionen des Apparates. Hierbei stellen mindesten ein Teil der Parameter Grenzwerte dar, bezüglich derer ein Optimum und/oder eine Verbesserung

ermittelt werden soll. Die Systemparameter können mind. teilweise automatisiert aus Datenbanken zur Verfügung gestellt werden, bspw. von der CAD-Software in Datenbanken abgerufen werden und/oder als Report, hier erfindungsgemäß als Primärmodellreport, vorgegeben werden oder darstellen. Weiterhin können mind. ein Teil
5 der Systemparameter über geeignete Interfaces, wie einen Computer, Monitor und/oder Terminal, manuell selektiert und/oder automatisiert vorgegeben werden.

Die „Ausgabe“ des CAD-Modells meint jegliche Übertragung, Speicherung und/oder Darstellung des Ergebnisses der CAD-Software, insb. die optische Darstellung an einem
10 Monitor für einen Bediener, die Speicherung als Datei auf einem Datenspeicher, insb. eine ausführbare Programmdatei und/oder die Weiterleitung als Datei, insb. die Weiterleitung an eine andere Bearbeitungs-, Simulations- und/oder Auswertesoftware, wie bspw. eine Software zur Berechnung oder Simulation der Festigkeit, wie bspw. eine FEM-Software. Weiterhin kann die Ausgabe auch an eine Drucksoftware oder einer
15 Druckvorrichtung erfolgen, um ein zweidimensionales oder dreidimensionales Abbild des CAD-Modells zu erstellen.

Die Auswertesoftware kann insb. auch eine Software sein, die als Machine Learning Software (ML-Software), Deep Learning Software (DL-Software) oder insg. als eine
20 Künstliche Intelligenz Software (KI) ausgebildet ist oder eine solche umfasst.

Die Ausgabedatei oder das Ausgabeformat der CAD-Software ist. bspw. eine .sty-Datei für 3D-Print oder Anzeige auf einem Monitor, Drucker (2D, ...)

25 Das „Raumelement“ meint einen mathematisch definierten Belegungsraum, bspw. als Zylinder, Kubus oder Würfel, der weiterhin ein Gitter oder Raster aufweisen kann oder als ein solches ausgebildet sein kann, auch Frame oder Grid genannt. Innerhalb des Raumelementes ist mind. ein Teil des Apparates, insb. ein wesentlicher Teil des Apparates mathematisch-geometrisch (digital) angeordnet. Das Raumelement ist mit Blick
30 auf die unendliche Größe eines Raumes eine Verminderung der Dimensionalität.

Das im Definitionsschritt erstellte „Primärmodell“ meint die Summe der mathematischen Gleichungen zur weitgehenden oder vollständigen Beschreibung der insb. strömungsmechanischen, thermodynamischen und reaktionskinetischen
35 Zusammenhänge einer Synthese in einem Apparat, basierend auf den vordefinierten Designelementen und der insgesamt verminderten Dimensionalität. Der

„Primärmodellreport“ ist das hieraus resultierende Ergebnis dieses Primärmodells. Der Primärmodellreport kann hierbei noch ungelöste oder unaufgelöste Variablen und/oder Wertebereiche für Variablen umfassen. Das Primärmodell bzw. der Primärmodellreport dient im CAD-Erstellungsschritt als Eingabewert bzw. als Parameter für die CAD-
5 Software.

Das Primärmodell wird in einem Programmmodul bzw. mittels einer dort ausführbaren Multi-Skalen-Optimierungssoftware (MSO-Software) erzeugt, wobei die MSO-Software ausgebildet ist, die physikalische Simulationen durchführt, um ein optimales technisches
10 Design in Form des Primärmodells zu generieren. Hierbei meint Multi-Skalen-Optimierung die thermodynamische und geometrische Optimierung des technischen Designs der jeweiligen Apparate, wie einen Reaktor oder einen Wärmetauscher, als Primärmodell. Nachfolgend meint Programmmodul synonym auch die dort ausführbare MSO-Software.

15 Anders ausgedrückt umfasst das Programmmodul vorteilhafterweise eine ausführbaren Multi-Skalen-Optimierungssoftware (MSO-Software) und/oder ist daraus gebildet, wobei die MSO-Software ausgebildet ist, um das Primärmodell durch eine physikalische Simulationen mittels einer Multi-Skalen-Optimierung zu generieren.

20 Eine vorteilhafte Ausführungsform besteht darin, dass das Raumelement und/oder ein Raumsegment zwei oder mehr Rasterelemente umfasst oder hieraus gebildet ist:

Das „Rasterelement“ meint ein digitales Element oder Abschnitt eines Gitter(-elements) oder Raster(-elements), das als mathematische ein- oder mehrteilige Formel und/oder
25 Algorithmus einen dreidimensionalen (Unter-)Raum des Raumelements oder Raumsegments repräsentiert und beschreibt. Das Rasterelement kann digitale Rasterknoten umfassen, die diskrete, mathematisch beschriebene Punkte innerhalb des Rasterelements oder auf diesem repräsentieren und beschreiben, welche die definierten Verbindungspunkte für Designelemente darstellen. Das Rasterelement ist mit Blick auf die
30 unendliche Anzahl von möglichen Raster- oder Gitterelementen eines Raumelements eine Verminderung der Dimensionalität. Vorliegend ist ein Rasterelement eine geometrisch kleinere Einheit als ein Raumsegment, so dass ein Raumsegment zwei oder mehr Rasterelemente umfassen kann.

35 Ein Rasterelement kann insb. mind. eine Gruppe von Rasterknoten (Rasterknotengruppe) umfassen, wobei die Rasterknoten einer Rasterknotengruppe in einem definierten,

mathematisch beschriebenen mind. zweidimensionalen insb. dreidimensionalen Abhängigkeit voneinander (Rasterweite) und/oder vom Rasterelement bzw. dem Raumelement stehen. So können die Rasterknoten einer ersten Rasterknotengruppe eine erste Rasterweite aufweisen und die Rasterknoten einer zweiten Rasterknotengruppe eine zweite Rasterweite aufweisen. Durch die Bestimmung der Rasterweite kann bereits eine Vorfestlegung für eine mögliche Dichte der Belegung mit Designelementen erfolgen und damit auch der Aufwand zur Erstellung eines CAD-Modells beeinflusst werden. Die Rasterknoten bzw. die Gruppe der möglichen, zulässigen Rasterknoten sind mit Blick auf die unendliche Anzahl möglicher Punkte im Raumelement eine Verminderung der Dimensionalität.

In analoger Weise besteht eine Ausführungsform darin, dass analog zum Rasterelement, das Raumelement und/oder das Raumsegment eine definierte Anzahl von Rasterknoten und/oder Rasterknotengruppen aufweist.

Vorteilhafterweise kann ein Rasterelement einer Längsachse und/oder Hauptströmungsrichtung zugeordnet werden, welcher die Designelemente in ihrer jeweiligen Ausrichtung nicht widersprechen dürfen und/oder von welcher die Designelemente bezüglich ihres Ausleitungszweiges nur in einem definierten Bereich abweichen dürfen, bspw. um 90° bis 270° .

Unter einem „Designelement“ ist ein mathematisch beschriebenes Modell eines Strömungsabschnitts oder einer Strömungseinheit gemeint. Ein Designelement ist somit definiert als

- eine Anzahl von Parametern oder Attributen, die eine maßstäbliche und angepasste Geometrie ermöglichen, in Abhängigkeit von einem vordefinierten Set von relevanten Geometrieparametern, wie der Strömungsdurchmesser und/oder die Länge eines Kanals oder Kanalabschnitts und
- ein Set von Gleichungen, die eine Abschätzung oder Berechnung von zentralen Prozessvariablen ermöglichen, wie den Druckverlust, Wärmeübergang, Stoffaustausch/-übergang, als Funktion der relevanten geometrischen Parameter und Randbedingungen, wie Zuflussmengen.

Ein Designelement kann auch einen Kanalknoten aus zwei oder mehr Strömungskanälen umfassen. Das Designelement bildet und definiert

- eine Bilanzgrenze für thermodynamische Effekte, bspw. in z-Richtung, der Hauptströmungsrichtung, und quer hierzu, in radialer Richtung (2D) und

5 - einen geometrischen Körper mit entsprechender Ausdehnung (3D) im Raum.

Insbesondere kann jedes einzelne Designelement als standardisiertes Designelement ausgelegt sein. Hierbei meint „standardisiertes Designelement“, dass dieses Designelement gemäß gängiger technischer Regeln und Standards definiert und ausgelegt ist, insb. hinsichtlich Wandstärken, Materialauswahl und/oder

10 Fertigungsparametern, in Abhängigkeit von Druck, Temperatur, Spannungen und/oder Kontaktmedien.

Der große Vorteil der Nutzung von standardisierten Designelementen ist, dass das erzeugte CAD-Modell aus den standardisierten Designelementen immer oder fast immer
15 eine hinreichende Festigkeit und Sicherheit aufweisen wird. Insb. ist es damit möglich, dass für das CAD-Modell kein oder nur noch sehr geringe zusätzliche (pauschale) Sicherheitszuschläge für bspw. Wandstärken vorgenommen werden müssen. Der Apparat kann somit insgesamt leichter und wirtschaftlicher hergestellt werden. Insbesondere sind weniger Iterationsschritt bis zum finalen, optimalen CAD-Modell erforderlich.

20

Vorzugsweise wird dieses Modell eines Designelementes mittels des Primärmodells an die CAD-Software übergeben, insb. automatisch von der Erstellungssoftware für das Primärmodell an die CAD-Software bereitgestellt und/oder von dieser als Datensatz eingelesen und verarbeitet.

25

Hierbei werden im ersten Ausrichtungsschritt eine definierte Anzahl von Designelementen sowie deren Typen ausgewählt und eine erste Ausrichtung vorgenommen, indem zwischen jeweils mindestens zwei Designelementen die Strömungswege von der
mindestens einen Ausleitungsöffnung zu mind. einer definierten stromabwärts

30 befindlichen Einleitungsöffnung eines weiteren Designelements bestimmt werden, bzw.

ein Strömungsweg in analoger Weise von einem Ausleitungsweig zu einem Einleitungsweig bestimmt wird. Vorzugsweise erfolgt die vorgenannte Verbindung über ein Rohr- oder Strömungselement, insb. immer zwingend über ein Rohr- oder Strömungselement. Mit anderen Worten wird im ersten Ausrichtungsschritt eine logische,

35 funktionale Verknüpfung von Designelementen vorgenommen, indem einem Ausgang eines Designelementes ein konkreter Eingang eines weiteren Designelements zugeordnet

wird. Auf diese Weise werden die Strömungswege des jeweiligen Apparates ohne geometrische Festlegung definiert. Vorzugsweise werden alle Leitungswege auf diese Weise festgelegt.

- 5 Im zweiter Ausrichtungsschritt als Teil der Anordnung, werden die Designelemente im Raumelement, mindestens einem Raumsegment und/oder mindestens einem Rasterelement geometrisch in mindestens zwei Raumrichtungen, insb. in drei Raumrichtungen angeordnet.
- 10 Vorteilhafterweise ist der erste Ausrichtungsschritt integraler Bestandteil der vorstehend genannten ersten Teilphase zur physikalisch-thermodynamischen Optimierung. Weiterhin ist vorteilhafterweise der zweite Ausrichtungsschritt Teil der zweiten Teilphase zur geometrischen Optimierung.
- 15 Durch diese Bestimmung der Strömungswege wird insbesondere der strukturelle Grundaufbau des zu simulierenden oder zu fertigenden Apparates in einer ersten Näherung festgelegt und damit auch die Komplexität mit Blick auf alle potentiell möglichen Varianten stark eingegrenzt. Mit der Länge und Art des Strömungsweg wird auch die Verweilzeit der strömenden Stoffe bestimmt. Mit der Bildung des Primärmodells kann
20 weiterhin in sehr vorteilhafterweise und gut geführter Art und Weise der fachliche Erfahrungs- und Kenntnisschatz des jeweiligen Nutzers vor der Eingabe in die CAD-Software übernommen werden.

- Die „Bereitstellung“ ist vorliegend nicht einschränkend zu verstehen, und meint die
- 25 Zurverfügungstellung von entsprechenden Daten, ausführbaren Programmpaketen in einem zugänglichen Datenspeicher oder Datenspeichermedium. Weiterhin meint Bereitstellung auch die Übernahme der Daten und/oder ausführbaren Programmpakete aus einem Datenspeicher oder Datenspeichermedium und Bereitstellung in oder für das Programmmodul bei der Nutzung der MSO-Software zur nutzergesteuerten und/oder
30 automatisierten Verarbeitung mittels der MSO-Software. Insgesamt ist vorliegend unter „übergeben“ oder „bereitstellen“ einer Datei, eines Programmpaketes und/oder Softwarepaketes gemeint, dass dieses auch in mehreren Teilen und/oder mittelbar übergeben werden kann, insb. nach einem mind. teilweisen Zwischenspeichern in einem Datenspeicher. Insbesondere meint „übergeben“, „bereitstellen“ oder „Bereitstellung“,
35 dass dies computerimplementiert mittels mind. eines Prozessors oder mindestens einer Prozessoreinheit erfolgt.

Bei der Anordnung der Designelemente erfolgt eine Topologieoptimierung (TO) bzw. könnte „Anordnung“ im Rahmen des Definitionsschrittes auch als Topologieoptimierung bezeichnet werden.

5

Es hat sich als besonderer Vorteil herausgestellt, dass das Herunterbrechen auf eine einfache verfahrenstechnische Simulation, insb. der vordefinierten Designelement, eine schnellere und für den Nutzer vereinfachte Möglichkeit eröffnet, die übergeordnete (gesamte) Reaktorstruktur (Superstruktur, Gesamttopologie) zu optimieren. Es hat sich auf der Eingabeseite eine vereinfachte Nutzerführung ergeben, weil komplexere, dreidimensionale Elemente als eine Art Vorentwurf nutzbar sind, wobei im Stand der Technik immer nur ein kleiner Teil einer (Teil-)Geometrie optimiert werden kann, z.B. nach Auswertung einer Festigkeitssimulation. Dies hat zum Teil seine Ursache in den sehr hohen Rechnerleistungen, wenn parallel viele Systemparameter verändert werden. Weiterhin kann ein Nutzer das simulierte Ergebnis (eines CAD-Modells oder einer Festigkeitssimulation) leichter interpretieren und ggf. nötige Veränderungen von einzelnen Systemparametern abschätzen. Dies ist möglich, weil Veränderungen an bspw. Parametern der Designelemente und/oder veränderte Verknüpfungen der Designelemente für den Fachmann mind. eine grobe Abschätzung hinsichtlich des gesamten Primärmodells erlauben. Somit wurde auch eine verbesserte Nutzerführung auf der Ausgabeseite, insb. des CAD-Modells bzw. der CAD-Software erreicht.

Vorteilhafterweise werden die Daten des Primärmodells gespeichert und sind dem Nutzer angezeigt, wie bspw. in einer 2D-, 3D-Ansicht oder tabellarischen Art und Weise. Diese verbesserte Nutzerführung ermöglicht dem Nutzer eine „manuelle“ Nachkontrolle. Somit kann die Anzeige des Primärmodells dem Nutzer aufzeigen, dass das Programmmodul bzw. die MSO-Software als erster „Optimierer“ einige Kanäle sehr kurz gemacht hat, entsprechend der zulässigen Physik. Der Nutzer könnte dann aus Gründen bspw. der Sicherheit, einer verbesserten Bauraumausnutzung etc. Änderungsbedarf sehen. Diese Änderungen können vom Nutzer direkt im Programmmodul am Primärmodell erfolgen, vor Übergabe an die CAD-Software, indem bspw. die Länge mind. eines Designelements oder einer Gruppe von Designelementen vergrößert wird. Nachfolgend kann im nächsten Schritt die 3D-Optimierung des Raumelements mittels des Programmmoduls gleich mit den gewünschten Daten (Vorgaben) gestartet werden. Zwischen den vorgelagerten Softwareschritten gibt es also Möglichkeit zur „manuellen“ Feinjustierung, die eine deutlich verbesserte Nutzerführung auf der Eingabeseite darstellt.

Vorteilhafterweise kann der Definitionsschritt weiterhin die folgenden Teilphasen umfassen:

- 5 - Erste Teilphase: Physikalisch-thermodynamische Optimierungsphase (erste Dimensionalität/-sverringung) und
- Zweite Teilphase: Geometrische Optimierungsphasen (zweite Dimensionalität/-sverringung)

10 In der Ersten Teilphase werden ausschließlich oder im Wesentlichen alle relevanten physikalischen und/oder thermodynamischen Abhängigkeiten betrachtet und mathematisch beschrieben. In der Zweiten Teilphase wird ausschließlich die geometrische Anordnung und Abhängigkeiten betrachtet und im dreidimensionalen Raum, insb. in einem Raumelement und/oder -segment definiert.

15

Bei einer vorteilhaften Ausführungsform werden vor der Bestimmung der Strömungswege von zwei Designelementen im Ersten Ausrichtungsschritt, die Designelemente auf Rasterknoten und/oder in Rasterknotenräumen positioniert.

20 Die Anordnung kann insb. über eine Eingabeeinheit, wie einen Monitor, insb. einen berührungssensitiven Monitor erfolgen, in dem das Programmmodul über Funktionen wie wie drag & drop per hold manipulierbar ist.

Die Ausgabe des Primärmodells kann vorliegend eine Datei sein, die jedes geeignete
25 Datenformat aufweisen kann oder ein ausführbares Softwareprogramm oder Programmprodukt ist. Das Primärmodell ist vorteilhafterweise eine von der CAD-Software importierbare und bearbeitbare Datei und/oder ein von der CAD-Software ausführbares Programmpaket. Das Primärmodell bzw. der Primärmodellreport stellt anders ausgedrückt einen weiteren Systemparameter oder eine Gruppe von Systemparametern der CAD-
30 Software dar, der sehr umfassend die Variantenvielfalt der CAD-Software vordefiniert und/oder begrenzt, und somit die Erstellungsgeschwindigkeit erhöht.

Aufgrund dieser sehr weitreichenden Vorfestlegung kann die Zeit für die Erstellung eines CAD-Modells stark verkürzt werden, so dass auch eine mehrfache Erstellung eines CAD-
35 Modells nach zwischenzeitlicher Evaluation, Systemparameteranpassung und Neuerstellung in sehr kurzen Zeiträumen möglich wird und/oder weniger Iterationen

erforderlich sind. Insbesondere durch standardisierte Designelemente wird schneller das finale, optimale CAD-Modell erlangt.

Eingangs zum Verfahren findet durch einen Nutzer eine Basiseingabe statt

- 5 (Basiseingabeschritt), in dem bspw. die gewünschte Synthese, der Synthesetyp und ggf. weitere grundlegende Vorgaben und Festlegungen vorgenommen werden. Diese grundlegenden Vorgaben und Festlegungen können insb.

- die Produktionskapazität des Apparates sein (Output),
- zulässige Prozessdaten, wie Stoffströme und deren Zustände,
- 10 - ein maximal zulässiger Eduktstrom mind. eines Edukts,
- geforderte Nachhaltigkeitswerte, wie der zulässige Energieverbrauch und/oder
- der maximal zur Verfügung stehende Bauraum oder Anschlusspunkte in mind. einer Raumrichtung.

- 15 Diese Basiseingaben in dem Basiseingabeschritt, werden über ein geeignetes Interface vorgenommen, wie einen Monitor, einen Computer und/oder einen Leitstand und sind in der Regel mindestens teilweise manuell durch einen Nutzer vorzunehmen.

- 20 Anders ausgedrückt umfasst der Definitionsschritt für ein vorteilhaftes computerimplementiertes Verfahren zur Erstellung eines CAD-Modells das Folgende:

- Bereitstellung mind. eines digitalen Raumelements;
- Bereitstellung digitaler Designelemente;
- 25 - ggf. Bereitstellung von chemisch-physikalischen Stoff- und/oder Reaktionsdaten/-banken;
- Eingabe von Rahmenparametern in die MSO-Software, wie insb. die gewünschte chemische Reaktion und gewünschte Produktionskapazität;

30

- **Erste Teilphase:**

- a) Festlegung der Rahmenparameter,
bspw. die Dimensionen des digitalen Raumelements, Abmessung des Bauraums;
- b) Festlegung vereinfachender Annahmen für die Randbedingungen,
- 35 bspw.

- Wahl einer konstanten Außentemperatur an diskreten Orten (Achsrichtung), d.h. bspw.:
 - nur radiale Temperaturgradienten,
 - keine Wärmeleitung im Festkörper in Achsrichtung, d.h. in Strömungsrichtung
- 5 bzw. innerhalb des strömenden Stoffgemisches,
- kein Wärmebeeinflussung zw. Designelementen, etc.
- keine Wechselwirkungen zw. den Designelementen
- ggf. weitere;
- c) Eingabe weiterer Rahmenparameter,
 - 10 bspw. Reaktionskinetik, Parameter zur Berechnung physikalischer Stoffeigenschaften, Randbedingungen für Variablen wie zB zulässiger Bereich für die Reynoldszahl, verfügbares Energieniveau des Wärmetauschmediums, etc.;
- d) Festlegung der zu berücksichtigenden Designelemente nach Typen der Designelemente,
 - 15 bspw. auch max. zulässige Anzahl, wie bspw. nur Trennelemente, Anzahl der Layer für mind. ein Reaktorsegment und/oder als Vorgabe für den nachfolgenden Ausrichtungsschritt, Definition von Auswahlmöglichkeiten pro Reaktorsegment für den anschließenden Iterations- und/oder Optimierungsschritt;
- 20 e) **Erster Ausrichtungsschritt**, umfassend die jeweilige Auswahl der Designelement-Typen pro Reaktorsegment als Teil der Anordnung;
- f) Physikalisch-thermodynamische Optimierung, bspw.
 - Ermittlung von Durchmesser, Längen, Anzahl paralleler Designelemente, d.h. „viele kleine“ vs. „wenige große“ und/oder Ermittlung der Kombination der
 - 25 gewählten Designelemente-Typen, insb. die Bestimmung der benötigten Anzahl an Designelementen je Designelement-Typen pro Rasterelement und/oder Raumsegment;
- g) Feedback an den ersten Ausrichtungsschritt zur iterativen Bestimmung einer optimalen Kombination an Designelementen;
- 30 h) Ausgabe der optimalen Kombination als Primärmodellreport, an Nutzer (m5) m1-m4 optional, dann a1 und/oder a2 (Iteration).

Hierbei werden die Schritte a) bis d) der ersten Teilphase insbesondere durch den Nutzer manuell vorgenommen, wobei die MSO-Software auf Basis der bereits erfolgten Auswahl und Festlegungen dem Nutzer Vorschläge für noch nötige Festlegungen in selben oder

35 nachfolgenden Schritten unterbreiten kann. Die Schritte e) bis h) werden vorrangig von

der MSO-Software aufgrund ausführbarer Programme automatisiert oder weitgehend automatisiert vorgenommen. Hierbei gelten die Schritte e) bis h) auch als automatisiert, wenn durch die MSO-Software der Nutzer bedarfsweise zu einer Freigabe, Auswahl oder einer sonstigen Aktion (Entscheidung) über eine Eingabeeinheit, wie einen Monitor, eine Tastatur etc., aufgefordert wird.

Mit Blick auf Schritt d) wird somit eine Art Superstruktur definiert, indem der MSO-Software immer eine Art Paket an Designelementen übergeben wird, und softwareseitig vorgesehen ist, dass genau ein Designelement-Typ davon auswählen muss. Diese Pakete werden in Hauptströmungsrichtung hintereinander angeordnet als Art grober, scheibenweiser Bauplan des Apparates aus diversen, limitierten Auswahlmöglichkeiten.

Zweite Teilphase

- i) ggf. Eingabe weiterer Rahmenparameter in die MSO-Software,
bspw. minimal einzuhaltender Abstand zwischen zwei Designelementen;
 - j) **Zweiter Ausrichtungsschritt**
 - k) Optimierung der Verbindung aller Designelement-Ausgänge mit den nachfolgenden Eingängen, sodass Randbedingungen aus der ersten Teilphase eingehalten werden und sich keine Designelemente überschneiden, bspw. einschließlich der vorher bestimmten Mindestlängen der Strömungsrohre, Mindestabstände zwischen Designelementwänden;
 - l) Erzeugung eines Python-Skripts als Primärmodellreport zur Weitergabe an die CAD-Software;
 -
 - **Erzeugung des CAD-Modells**
 - i. Einlesen des Primärmodellreports im Format als Python.py-Datei (Anweisungsskript) oder Excel-Datei (Start NX, MSO-Software);
 - ii. ggf. weitere, manuelle Ausrichtungen, bspw. Rotation, Neigung, Verschiebung in x-y-z Richtung, sonstige Eingriffe ohne Optimierungspfad ohne Rückkopplung, einsetzen einer Sensorschnittstelle;
 - iii. Speicherung des CAD-Modells u/o Ausgabe/Anzeige.
- Hierbei wird der Schritte a) der zweiten Teilphase insbesondere durch den Nutzer manuell vorgenommen. Die Schritte b) bis c) der zweiten Teilphase werden vorrangig von der

MSO-Software aufgrund ausführbarer Programme automatisiert oder weitgehend automatisiert vorgenommen. Der Schritt c) kann manuell oder automatisiert erfolgen. Hierbei gelten Schritte auch als automatisiert, wenn durch die MSO-Software der Nutzer bedarfsweise zu einer Freigabe, Auswahl oder einer sonstigen Aktion (Entscheidung)
5 über eine Eingabeeinheit, wie einen Monitor, eine Tastatur etc., aufgefordert wird.

Die vorstehend genannten Schritte zur Erzeugung des CAD-Modells i) – iii) erfolgen insb. manuell unter Verwendung der CAD-Software und/oder können von dieser mindestens teilweise manuell durchgeführt werden.

10

Vorliegend meint „Rahmenparameter“ jeden Parameter, jede funktionale Abhängigkeit und/oder mathematischen Zusammenhang (Algorithmus), die zur Erstellung (Simulation) des Primärmodells vorteilhaft sein können und dem Programmmodul bzw. der MSO-Software zur Erstellung des Primärmodells zur Verfügung gestellt werden. Diese
15 umfassen insbesondere die Reaktionsgleichung des bestimmungsgemäßen chemischen Verfahrens, die geforderte Produktionskapazität und zugehörige oder abgeleitete physikalische, thermodynamische und/oder chemische Größen, strömungsdynamische Größen, Energiemengen und -flüsse sowie Angaben zum Massentransport/-strömen. Weiterhin umfasst „Rahmenparameter“ geometrische Vorgaben und Dimensionen des
20 Apparates. Hierbei stellen mindesten ein Teil der Parameter Grenzwerte dar, bezüglich derer ein Optimum und/oder eine Verbesserung ermittelt werden soll. Die Rahmenparameter können mind. teilweise automatisiert aus Datenbanken zur Verfügung gestellt werden, bspw. von der MSO-Software in Datenbanken abgerufen werden. Weiterhin kann mind. ein Teil der Rahmendaten über geeignete Interfaces, wie einen
25 Computer, manuell selektiert und/oder vorgegeben werden. Rahmenparameter können mit Systemparametern mind. teilweise identisch sein und/oder Systemparameter können mind. teilweise aus Rahmenparametern abgeleitet sein, insb. aufgrund eines mathematischen Zusammenhangs abgeleitet sein. Rahmenparameter können weiterhin Parameter oder Parameterwerte sein, mit denen Designelemente beschrieben und/oder
30 dimensioniert werden.

Weiterhin kann mind. ein Teil der Rahmenparameter über geeignete Interfaces, wie einen Computer, Monitor und/oder Terminal, manuell selektiert und/oder automatisiert vorgegeben werden.

35

Auf wenn hierin etwas verkürzt in der Regel nur „Parameter“, „Parameterauswahl“, „Parameterbereitstellung“ und vergleichbare Ausdrücke verwendet werden, insb. auch in Bezug auf „Systemparameter“ oder „Rahmenparameter“, soll hierunter immer auch ein „Parameterbereich“ und vorrangig ein Parameterwert verstanden werden, der für eine

5 Variable einer beschreibenden mathematischen Funktion als absoluter Wert oder als Wertebereich eingefügt wird.

Bei einer vorteilhaften Ausführungsform werden vor der Bestimmung der Strömungswege von zwei Designelementen im Ersten Ausrichtungsschritt, die Designelemente auf

10 Rasterknoten und/oder in Rasterknotenräumen positioniert.

Bei einer alternativen Ausführungsvariante kann vorgesehen werden, dass der Definitionsschritt mittels eines Programmmoduls der Erstellung des CAD-Modells vorgelagert ist, wobei der Definitionsschritt insb. Folgendes umfasst:

- 15
- Festlegung einer definierten Anzahl von Designelementen im Raumelement und/oder
 - Festlegung von mind. zwei Raumsegmenten im Raumelement und einer definierten Anzahl von Designelementen in dem jeweiligen Raumsegment,
 - 20 • Anordnung der definierten Anzahl von Designelementen in dem Raumelement und/oder den mind. zwei Raumsegmenten, umfassend die Bestimmung
 - der räumlichen Lage der Designelemente im Raumsegment,
 - der Ausrichtung von mind. zwei Designelementen zueinander und
 - von mind. einem Strömungsweg zwischen den mind. zwei
 - 25 Designelementen, wobei der Strömungsweg insb. als ein Strömungselement darstellendes Designelement ausgebildet sein kann.

Hierbei kann die „Festlegung“ sowohl die Auswahl der Art nach und der Häufigkeit nach umfassen.

30 Das Raumsegment stellt dabei einen Teil- oder Unterraum des Raumelements dar, in welchem ein definierter Prozessschritt erfolgt, wie beispielsweise eine (reine) Strömungstrennung, eine Durchleitung, eine Mischung, eine Strömungskombination (Zusammenführung). Diese Prozessschritte stellen Basisprozessschritte dar. Weiterhin

35 kann ein weiterer, definierter Prozessschritt erfolgen, wie bspw. eine Reaktion, eine

Strömungssteuerung, wie bspw. eine Strömungsdrosselung, Verlangsamung (Verweilschritt) oder Beschleunigung oder ein Wärmeaustausch. Diese weiteren Prozessschritte können auch als Sub-Prozessschritte angesehen werden, weil diese in der Regel zusätzlich und insbesondere parallel zu einem der vorgenannten (Basis-)
5)Prozessschritte erfolgen.

Auch wenn vorliegend zwischen einem Strömungssegment oder einem Strömungselement und den sonstigen Segmenten oder Elementen unterschieden wird, ist dies grundsätzlich nicht einschränkend zu verstehen, da im Regelfall in jedem Segment
10 und in jedem Element und/oder jedem Zweig eines Elements ein Stoff oder ein Stoffgemisch als Fluid strömt. So stellt bspw. ein langgestreckter Ausleitungszweig eines Kombinationselement, nachfolgend kurz "Kombielement" genannt, funktional ein Strömungselement dar oder eine Gruppe von Ausleitzweigen stellen bspw. ein Strömungssegment dar.

15 Um diesbezüglich diskrete, unterscheidbare Elemente zu definieren ist es vorteilhaft, wenn ein Einleitungszweig oder Ausleitungszweig eines Elementes, das kein Strömungselement ist, eine definierte maximale Erstreckung hat, die ein Bruchteil einer Dimension des Elements oder eines das Element umschließenden Raumes ist, welches
20 kein Strömungselement ist. Weisen die Einleitungszweige eines Kombielements beispielsweise einen runden Querschnitt mit den Durchmesser D_1 und D_2 auf, wobei $D_1 > D_2$, und stehen die Ausleitungszweige im Winkel α zueinander, so entspricht der Durchmesser des Ausleitungszweigs D_3 vorteilhafterweise $D_1/\cos(\alpha)$ und die Länge des Einleitungszweigs entspricht maximal der Länge $D_3/2$.

25 Eine vorteilhafte Ausführungsform eines kontinuierlich arbeitenden Strömungsreaktors kann beispielsweise die folgende Abfolge von Raumsegmenten aufweisen:

- 30 - Einleitungssegment zur Einleitung von zwei oder mehr Stoffströmen und eines fluiden Katalysators,
- Kombinationssegment zur Zusammenführung der einzelnen Stoffströme (Edukte, fließfähiger Katalysator),
- Trennsegment zur Aufteilung des Stoffgemisches auf eine Mehrzahl von Leitungen,
- Strömungs- und Reaktorsegment zur Reaktion des strömenden Stoffgemisches in der
35 Mehrzahl der Leitungen,
- Kombinationssegment zur Zusammenführung der Mehrzahl der Leitungen und

- Ausleitungssegment zur Ausleitung des Stoffgemisches insb. des Produktes aus dem Konti-Reaktor.

Hierbei ist vorteilhafterweise mind. das kombinierte Strömungs- und Reaktorsegment
5 auch ein Wärmetauschsegment. Es kann Vorteile haben, auch das Kombinationssegment und/oder das Trennsegment zusätzlich als Wärmetauschsegment auszubilden.

Vorteilhafterweise ist mind. zwischen zwei der vorgenannten Reaktorsegmente ein Strömungssegment angeordnet, in dem im Wesentlichen nur die Durchleitung des
10 jeweiligen Stoffgemisches erfolgt, ggf. in Kombination mit einer chemischen Reaktion und/oder einem Wärmetausch.

Vorteilhafterweise wird ein Reaktorsegment bezüglich einer der beiden folgenden Sub-Segmenttypen festgelegt:

15

- Vollsegment
- Hohlraumsegment

Im Falle des Vollsegmentes wird dieses von den Kanälen der Designelemente durchdrungen. So sind bspw. bei einem Wärmetauschsegment, das als Vollsegment
20 ausgebildet ist, die Designelemente von Wärmetauscherkanälen begleitet und haben mind. eine gemeinsame Kanalwand oder einen gemeinsamen Kanalwandabschnitt.

Im zweiten Fall eines Hohlraumsegmentes wird ein größerer Innenraum oder Abschnitt
25 von freitragenden Leitungen überbrückt oder durchdrungen. So sind bspw. bei einem Wärmetauschsegment, das als Hohlraumsegment ausgebildet ist, die als Rohrleitungen ausgebildeten Designelemente oder deren Rohr- oder Leitungsabschnitte freitragend und werden von einem Wärmefluid umströmt, das im Innenraum frei strömen kann und wobei auf diese Weise der Wärmetausch erfolgt. Die Rohre oder Leitungen, die den WT-Raum
30 durchdringen, können mittels Verstrebungen statisch optimiert sein. Diese statische Optimierung kann im Rahmen der Erstellung des Primärmodells, des CAD-Modells und/oder im Rahmen einer FEM-Analyse erfolgen.

Alternativ kann das Hohlraumsegment auch ein offener Abschnitt sein und die
35 freitragenden Leitungen überbrücken den Abschnitt und bilden mind. einen Teil einer

Halte- und Tragstruktur. Diese Ausführungsform kann vorteilhaft sein, wenn nur ein sehr geringer oder kein Wärmeabtransport erforderlich ist.

5 Somit können vorteilhafterweise die Reaktorsegmente auch Kombinationssegmente aus zwei oder mehr der genannten Reaktorsegmente sein, wie bspw. vorstehend genannt.

Die Festlegung und Definition eines Reaktorsegmentes kann auch implizit erfolgen, indem die jeweiligen Designelemente oder Sub-Designelemente über das Programmmodul im Raumelement angeordnet werden. Bei der Anordnung in Zweiten Ausrichtungsschritt, 10 kann insb. auch die räumliche Lage als die Festlegung einer Position eines markanten Geometrieelements des Designelements im Reaktorelement bzw. einem Reaktorsegment erfolgen. Das Geometrieelement kann bspw. ein Mittelpunkt, ein Schwerpunkt, ein Innenraummittelpunkt oder eine Achse eines Designelements sein, die in einem kartesischen System, wie ein kartesischen x-y-z-System, angeordnet werden. Die 15 Position kann hierbei auch ein Teilbereich des Raumelements und/oder des Raumsegments sein, wie ein Rasterelement, in dem die Position vorkommen kann. Weiterhin kann der Zweite Ausrichtungsschritt auch einen Raumbereich betreffen (Rasterelement), in dem ein oder mehrere Designelemente mit ihrer gesamten physikalischen Ausdehnung angeordnet sind bzw. angeordnet sein müssen.

20

So kann bspw. die Zweite Ausrichtung darin bestehen, dass alle Auslassäste von Trennelementen in einem Trennsegment parallel zueinander angeordnet sein müssen und alle Einlassäste von Kombielementen eines beabstandet angeordneten Kombinationssegment ebenfalls parallel zueinander ausgerichtet sein müssen, und dass 25 weiterhin alle verbindenden Strömungselemente, die auch Reaktorelemente sind,

- parallel zueinander und zu einer zentralen Reaktorachse sein müssen,
- maximal um einen definierten Winkelgrad von einer zentralen Reaktorachse abweichen dürfen oder
- 30 • dass per Definition nur jeder Auslass eines Trennelementes mit genau einem Einlass eines Kombielementes verbunden sein muss, ohne die jeweiligen Aus- und Einlasspaare festzulegen.

Die vorstehend beispielhaft genannten Varianten eines Reaktors führen zu 35 unterschiedlichen Primärmodellen und nachfolgend zu Simulationen der CAD-Software,

die unterschiedlich aufwändig sind, und zwar aufsteigend vom ersten Primärmodell bis zum dritten Primärmodell-Modell aufgrund der ansteigenden Freiheitsgrade.

Die Erste Ausrichtung meint weiterhin die konkrete Führung des Wärmetauscherfluids relativ zum Designelement im Falle eines Wärmetauschelements. Dies kann im Gleichstrom, Gegenstrom oder als Queranströmung erfolgen.

Bei einer vorteilhaften Ausführungsform des Verfahrens ist es vorgesehen, dass Ausleitung und Einleitung in dieser Art paarweise festgelegt werden, wobei zwischen solchen paarweisen Aus- und Einleitungen ausschließlich Strömungselemente angeordnet sind. Deren Verlauf ist bei einer Ausführungsform durch das Primärmodell weiter nicht festgelegt.

Auf diese Weise kann ein Nutzer oder das Programmmodul bspw. in Abhängigkeit von der jeweiligen Reaktion, die in dem Apparat ablaufen soll, Festlegungen treffen, die aus Erfahrungswissen und/oder aus einer Look-up-Tabelle entnehmbar sind. Ist bspw. bekannt, dass bei einer stark exothermen Additionsreaktion wie bspw. die Alkoxylierung eines Alkoxyats aus Ethylenoxid oder Propylenoxid schon nach sehr kurzer Reaktionsstrecke eine weitgehende Beruhigung der Reaktion und damit nur noch sehr geringe Abwärme entsteht, kann bspw. nach Symmetriegesichtspunkten eine weitgehende Festlegung des in Strömungsrichtung hinteren Reaktorteils erfolgen, wohingegen die aufgrund der Wärmeentwicklung kritischen zentralen Raumsegmente eine geringere Vorfestlegung erfahren, so dass die nachfolgenden Simulationen in einem größeren digitalen Raum nach optimalen Lösungen suchen können.

Von der Erfindung ist somit auch umfasst, bei der Bildung des Primärmodells gespeicherte Look-up-Tabellen und/oder eine trainierte oder trainierbare ML-Software einzusetzen, die in einem Bereitstellungsschritt Primärmodell-Parameter für die Erstellung des Primärmodells bereitstellt, wie

- die Anzahl und Art von Raumsegmenten und/oder der Designelemente, ggf. in/für ein spezielles Raumsegment,
- den zulässigen Grad der (Vor-)Festlegung für ein Raumsegment, bspw. aufgrund von hohen Wärmetransporterfordernissen, Druckniveau, Druckgradienten, aufwändigen Mischaufgaben, etc. oder

- sonstige vorbekannte Anforderungen der zur Rede stehenden Reaktion, wie sonstige physikalische, thermodynamische, prozesstechnische und/oder chemische Randbedingungen.

- 5 Bei einer Ausführungsform des Verfahrens kann insb. ein Vorteil darin bestehen, wenn die Eingabe von Systemparametern für die CAD-Software mind. teilweise mittelbar im und/oder über das Programmmodul erfolgt. Diese über oder in dem Programmmodul einzugebende Systemparameter umfassen insb. die Reaktion/-skinetik, strömungsmechanische Parameter, verfahrenstechnische Parameter und/oder
- 10 geometrische Parameter. Hierbei kann die Reaktionskinetik neben der eigentlichen stofflichen Synthese auch den Energieverlauf, nötige oder mögliche Phasen/-änderungen und/oder nötige oder mögliche Drücke/Druckverläufe umfassen. Über die Eingabe können durch das Programmmodul softwareseitig beispielsweise die Vorgabe von zulässigen Temperaturbereichen, Druckbereichen, Phasenzuständen und/oder Produktmassen als
- 15 Parameter bereitgestellt oder vorgeschlagen werden. Alternativ oder zusätzlich können von einem Bediener verfahrenstechnische Parameter und/oder geometrische Parameter eingegeben und/oder angepasst werden. Das Programmmodul kann die vorgenannten Parameter aus einer Datenbank entnehmen oder mittels einer trainierten Auswerte- und Analysesoftware berechnen und/oder bereitgestellt bekommen, die bspw. als ML-
- 20 Software (Machine Learning-Software), DL-Software (Deep-Learning-Software) oder KI-Software (Künstliche Intelligenz) ausgebildet ist. Hierbei kann das Programmmodul selbst als Auswerte- und Analysesoftware ausgebildet sein und/oder als eine solche arbeiten.

- Bei einer Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass der
- 25 Definitionsschritt und/oder die Erzeugung des Primärmodells und/oder des PMR mittels einer MSO-Software und/oder eines Programmpakets in einer universellen, höheren Programmiersprache erfolgt, bspw. C++, Python oder Rust.

- Die MSO-Software ist insb. zur Topologieoptimierung (TO), zur physikalisch-
- 30 thermodynamischen Optimierung und/oder zur geometrischen Optimierung ausgebildet und weist vorteilhafterweise Funktionen zur elementbasierten Eingabe und über geeignete Interfaces und/oder Eingabeeinheiten auf, wie einen Monitor, Keyboard, berührungssensitiven Monitor, Computer-Mouse und/oder Computer-Joystick.

- 35 Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass die bereitgestellten Designelemente als unterschiedliche Designelemente-Typen

ausgebildet sind, umfassend mind. ein Rohrleitungs- oder Strömungselement und mind. eines der folgenden Designelemente-Typen:

- Kombielement, insb. T-Kombielement, Y-Kombielement oder Baum-Kombielement;
- Trennelement, insb. T-Trennelement, Y-Trennelement oder Baum-Trennelement oder
- 5 - Mischelement als statisches Mischelement.

Das Kombielement dient dem Zusammenführen von zwei Stoffströmen und hat hierfür mind. zwei Einleitungsarme und mind. einen Ausleitungsarm. Bei einem einfachen, mathematisch leicht beschreibbaren Design weist das T-Kombielement zwei

10 Einleitungsarme und einen Ausleitungsarm auf, wobei die beiden Einleitungsarme jeweils im 90° Winkel zum Ausleitungsarm und zueinander fluchtend angeordnet sind. Bei einer ebenfalls einfachen Ausführungsform des Y-Kombielements, weist dieses zwei Einleitungsarme und einen Ausleitungsarm auf, wobei die beiden Einleitungsarme zum Ausleitungsarm einen Winkel von 120° bis 150° aufweisen. Das Baum-Element ist

15 in analoger Weise ein mehrfaches T- oder Y-Kombielement, mit drei oder mehr Einleitungsarmen und mind. einem Ausleitungsarm. Die Anzahl der Ausleitungsarme ist mind. eins und immer um einen Arm geringer als die Anzahl der Einleitungsarme.

Das Trennelement dient der Aufteilung in zwei oder mehr Stoffströme und weist hierfür

20 mind. zwei Ausleitungsarme auf. Die Strömungsführung ist invertiert und analog zu dem vorgenannten Kombielement.

Das statische Mischelement dient der Vermischung von Stoffen oder Stoffströmen entlang eines Strömungskanal, im Unterschied zu der Vermischung die bspw. in dem

25 Kombielement durch die Zusammenführung von zwei Stoffströmen erfolgt. Hierfür ist das Mischelement als solches gewunden, verwunden und/oder weist im Innenraum strömungsleitende Elemente auf, wie bspw. Strömungsteiler, statische Mischelemente, Strömungsbrecher, Querschnittsveränderungen. Die Querschnittsveränderungen können Änderungen bzgl. der Geometrie und/oder Ausrichtung der durchströmbar

30 Querschnittsfläche betreffen. Die Querschnittsfläche als zur Hauptströmungsrichtung, nachfolgend Strömungsrichtung genannt, senkrecht stehende Fläche, kann beispielsweise eine quadratische oder ovale Form aufweisen, die um die Längsachse tordiert ist. Der Vorteil einer solchen Geometrie oder vergleichbarer Geometrien ist, dass diese sehr leicht mathematisch beschreibbar und damit effektiv simulierbar ist, bei gleichzeitig effektiver

35 Vermischung auf kurzem Leitungsweg. Alternativ oder zusätzlich kann die Dimension der durchströmbar Querschnittsfläche mind. zwei Größen aufweisen.

Eine weitere Sonderform eines Designelementes bildet ein Sternelement, welches eine identische Anzahl von Einleitungszweigen und Ausleitungszweigen hat.

- 5 Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass mind. ein Designelement als eines der folgenden Designelemente-Subtypen ausgebildet ist:
- Reaktorelement,
 - Steuerelement, wie bspw. ein Drosselement oder Düsenelement,
 - 10 - Katalysatorelement und/oder
 - Wärmetauschelement, insb. Doppelmantelelement.

- Hierbei meint die Ausbildung als „Designelemente-Subtypen“, dass diese Designelemente dem Grunde nach ein Kombielement, ein Trennelement oder ein Mischelement sind oder
- 15 als solche beschrieben werden können und zusätzlich die Merkmale der genannten Subtypen aufweisen.

- Das Reaktorelement wird insb. dadurch bestimmt, dass mind. zwei Stoffströme zusammengeführt werden, analog einem Kombielement, wobei hierdurch mind. zwei
- 20 Ausgangsstoffe (Edukte) und/oder mind. ein Ausgangsstoff und ein Hilfsstoff zusammengeführt werden, so dass eine chemische Reaktion und die Synthese eines Produktes erfolgt.

- Das Steuerelement wird insb. dadurch bestimmt, dass hierdurch die
- 25 Strömungsgeschwindigkeit und/oder der Druck des strömenden Fluids gezielt zur beeinflussen, wie bspw. ein Drosselement (Durchmesserverringerung auf einer Teilstrecke), ein Düsenelement (Durchmessererweiterung, Diffusor), etc. Auf diesem Wege kann eine Nutzer auf Basis vorhandener Kenntnisse des Nutzers gezielt bspw. das Eindüsen eines flüssigen Stoffs (bspw. Edukt) in einen gasförmigen Stoff(-gemisch)
- 30 vorsehen. Hierdurch wird eine schnelle, strukturierte Eingabe wesentlicher Merkmale des Apparates für den Nutzer möglich.

- Ein Katalysatorelement wird dadurch bestimmt, dass eine als katalysatorwirkende Beschichtung auf mind. einer Teilfläche der inneren Oberflächen vorliegt und/oder
- 35 Katalysatormaterial Schüttung, Einbauten oder Packung angeordnet sind.
- Vorteilhafterweise kann nach Art der Anordnung, wie Wandbeschichtung oder Einbauten,

die erforderliche Konzentration an Katalysatormaterial als Parameter vom Nutzer vorgegeben werden. Auf diese Weise kann der Nutzer die Art eines Reaktors vordefinieren. Hierdurch wird eine schnelle, strukturierte Eingabe wesentlicher Merkmale eines Reaktors für den Nutzer möglich.

5

Ein Wärmetauschelement, insb. Doppelmantelelement wird dadurch bestimmt, dass die Geometrie eine optimale Wärmezufuhr- oder -abfuhr ermöglicht. Vorteilhaft kann eine Ausführung als Doppelmantelelement sein, sodass ein flüssiger Stoff (bspw. ein Kühlmedium) als zusätzliches Wärmetransportmedium verwendet werden kann.

10

Hierbei ist "Produkt" nicht einschränkend zu verstehen und meint jeglichen Stoff, auch jede Vorstufe eines Stoffes, der mind. zeitweise aus dem mind. einen Ausgangsstoff gebildet wird. Der als oder mit dem weiteren Stoffstrom eingeleitete Hilfsstoff kann bspw. ein strömungsfähiger Katalysator sein oder ein Stoff, der reaktionsstartende Bedingungen herstellt.

15

Der Hilfsstoff kann bspw.

20

- eine Säure oder Lauge sein, mittels welcher eine die Synthese fördernde oder startende pH-Wert-Anpassung erfolgt,
- ein Lösungsmittel mit einer höheren Temperatur als der das mind. ein Edukt führende Stoffstrom, so dass mittels der Temperaturerhöhung im gebildeten Stoffgemisch ein die Synthese förderndes oder startendes Temperaturniveau eingestellt wird und/oder
- ein für die jeweilige Synthese inerter, fließ- oder förderfähiger Füllstoff, der beispielsweise zur Verbesserung der rheologischen Eigenschaften des Stoffgemisches dient.

25

Im Unterschied zu dem Reaktorelement, bei dem ggf. ein strömungsfähiger Katalysator mit mind. einem Edukt strömend in Kontakt gebracht wird und weiterströmt, umfasst ein Katalysatorelement mind. einen immobilen Katalysator auf einer Teillänge oder Teilstrecke des Katalysatorelements.

30

Hierzu ist der ortsfeste, immobile Katalysator insb. in Form einer Katalysatorbeschichtung auf einem Teilabschnitt der Innenwand und/oder auf mind. einem ortsfesten

35

Trägerelement angeordnet. Alternativ oder zusätzlich kann der Katalysator auch als Formkörper oder Schüttung ortsfest im Katalysatorelement angeordnet sein.

Schließlich zeichnet sich ein WT-Element dadurch aus, dass zusätzlich zu den
5 Stoffströmen und deren inhärenten, eingetragenen Energiegehalten und/oder chemisch-physikalisch gegenseitigen Beeinflussung durch exotherme oder endotherme Reaktionen, eine äußere thermische Beeinflussung auf mind. einer Teillänge durch mind. ein zusätzliches Wärmemittel bzw. eine Wärmetauschvorrichtung erfolgt. Dies kann insb. eine Begleitheizung oder Begleitzühlung sein. Vorzugsweise ist dies ein Strömungskanal, in
10 dem das jeweiligen Wärmemedium strömbar ist, wie ein wässriges oder ölhaltiges Kühl- oder Heizmittel. Bei einer Ausführungsform umschließt der Strömungskanal einen ein Stoffgemisch führenden Kanal oder Kanalzweig mind. teilweise auf mind. einer Teillänge. Bei einer vorteilhaften Ausführungsform ist ein Stoffgemisch führender Kanal oder Kanalzweig vollständig von dem Wärmetauschkanal umschlossen.

15 Es ist unmittelbar einsichtig, dass die jeweiligen Raumsegmente mit den vorgenannten Designelementen oder Sub-Designelementen korrelieren. Insb. ist es für die Erstellung des Primärmodells vorteilhaft, wenn in einem Typ eines Raumsegmentes nur die analogen Designelemente bzw. Sub-Design-Elemente desselben Typs angeordnet sind.

20 Somit können vorteilhafterweise mittels des Programmmoduls bzw. der MSO-Software in einem Strömungssegment nur Strömungselemente, in einem Kombinationssegment nur Kombielemente, in einem Trennsegment nur Trennelemente usw. angeordnet werden. Das Analoge gilt für die sonstigen Segmente, Kombisegmente, sonstige Designelemente und Sub-Designelemente.
25

Auf diese Weise wird insb. durch Eingabe einer definierten Anzahl von Designelementen und Sub-Designelementen die Erstellung des Primärmodells im Programmmodul beschleunigt und nachfolgend die Erzeugung des CAD-Modells durch die CAD-Software
30 stark vereinfacht und beschleunigt, die diese Vorfestlegung als Eingangsparameter übernimmt und somit hinsichtlich möglicher Varianten stark eingeschränkt ist.

Diese primäre Rahmenstruktur des Apparates, in welcher der Apparat als Reaktorelement und Reaktorsegmente eingeteilt wird oder die sekundäre Rahmenstruktur, in welcher den
35 Reaktorsegmenten eine definierte Anzahl von Designelementen und/oder Sub-Designelementen eingeteilt und definiert wird, kann über eine Eingabeeinheit von einem

Bediener manuell und auf Basis von Fachkenntnissen vorgenommen werden. Alternativ oder zusätzlich kann nach Eingabe bspw. erster Ausgangsbedingungen, eine der beiden Rahmenstrukturen vorgeschlagen werden, die vorteilhafterweise über eine Eingabeeinheit anpassbar ist.

5

Die ersten Ausgangsbedingungen sind bspw. die chemische Reaktion und/oder das Produkt, ausgehend von bekannten Edukten und Katalysatoren. Weitere erste Ausgangsbedingungen können bspw. maximale äußere Abmessungen oder minimale Produktmengen sein.

10

Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass

- die Ausgabe des CAD-Modells, insb. als eine sty-Datei, an eine Programmeinheit zur Simulation der Festigkeit des Apparates erfolgt, und wobei
- durch die Programmeinheit zur Simulation der Festigkeit eine Festigkeitssimulation erfolgt.

15

Die Programmeinheit zur Simulation der Festigkeit ist vorteilhafterweise eine Finite-Element-Simulation. Die Festigkeitssimulation dient insb. dazu neben der physikalischen Machbarkeit aufgrund bspw. der gewählten Werkstoffen, der äußeren und inneren

20 mechanischen Belastungen, thermischen Einflüsse, auch gesetzlich oder behördlich geforderte Festigkeits- und Sicherheitsanforderungen sicherzustellen. Insb. kann eine Festigkeitssimulation als Ergebnis aufzeigen, dass eine potentiell positive strömungstechnische Struktur aus Festigkeitsgründen nicht realisierbar ist, und geänderte Strömungswege mit ggf. größerem Abstand gewählt werden müssen, um eine

25 entsprechend größere, sicherere Wandstärke zu ermöglichen.

Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil erlangt werden durch

- Erzeugung eines Konstruktionsdatensatzes für ein additives Fertigungsverfahren zur

30 physikalischen Herstellung des Apparates mittels der CAD-Software und

- Ausgabe des Konstruktionsdatensatzes an einen Datenspeicher, eine Ausgabeeinheit und/oder eine Programmeinheit eines Computers.

Vorteilhafterweise erfolgt die Ausgabe des Konstruktionsdatensatzes an eine Speichereinheit und/oder Programmeinheit eines Steuerungsprogramms einer additiven Fertigungsverfahren.

- 5 Insgesamt kann die Erzeugung der Modelle, wie bspw. des Primärmodells, CAD-Modells und/oder Konstruktionsdatensatzes, mind. teilweise durch einen Computer und/oder ein verteiltes (Computer-)System aus mehr als einem Computer oder Prozessor erfolgen. Die zwei oder mehr Computer des verteilten Systems stehen vorteilhafterweise leitungsgebunden oder leitungsungebunden datenleitend miteinander in Verbindung.
- 10 Hierbei können erforderliche Datenspeicher direkt oder mittelbar Teil des verteilten Systems sein. Vorliegend ist der Konstruktionsdatensatz mind. teilweise der Steuerdatensatz für den Betrieb der Fertigungsverfahren für den Apparat.

- Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass
- 15 die Erzeugung des Konstruktionsdatensatzes mindestens teilweise in einer der nachfolgenden Softwareeinheiten oder Programmpaketen erfolgt:
- CAD-Software und/oder - Steuerungssoftware für eine additive Fertigungsverfahren zur Herstellung des Apparates.

- 20 Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass die Designelemente vordefinierte digitale Designelement-Modelle sind, die mittels eines definierten Algorithmus und mind. einem definierten Designelement-Parameter mind. teilweise mathematisch beschrieben und in einem Datenspeicher gespeichert sind.

- 25 Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass das vordefinierte Designelement-Modell und/oder der definierte Algorithmus eine verminderte Dimensionalität aufweist.

- Das Primärmodell und/oder die Designelemente bzw. die Designelement-Modelle weisen
- 30 hierbei vorteilhafterweise eine eingeschränkte Dimensionalität auf. Die eingeschränkte Dimensionalität betrifft insb. die Begrenzung der zulässigen Geometrien, Abmessungen, Wärme- und Masseströme. Die eingeschränkte Dimensionalität betrifft insb. die Vereinfachung der das Designelement geometrisch beschreibenden mathematischen Gleichung(en) (Formgleichungen) und/oder der das Stoffsystem chemisch oder
- 35 physikalisch beschreibenden mathematischen Gleichung(en) (Stoffgleichungen), insb. die

Stoffgleichungen für die mathematische Beschreibung der Strömung, der jeweiligen chem. Reaktion, der Temperatur und/oder des Wärmeübergangs.

- Vorzugsweise wird diese eingeschränkte Dimensionalität der Designelemente mittels des
- 5 Primärmodells an die CAD-Software übergeben.

- Es kann eingabeseitig als verbesserte Nutzerführung für die vereinfachte, schnelle Erstellung eines CAD-Modells vorteilhaft sein, wenn die eingeschränkte Dimensionalität auch die Festlegung der Verwindung und/oder des Durchdringungsgrades betrifft. So
- 10 kann es für die CAD-Modellbildung und für ein nachfolgendes Upscaling (vom Labormaßstab bis zum Industriemaßstab) vorteilhaft sein, wenn nur ein sehr geringes oder überhaupt kein Durchdringen von Strömungselementen durch andere Designelemente zugelassen wird. Weiterhin kann es vorteilhaft sein, wenn die Verwindung und/oder Umschlingung von zwei Designelementen im Rahmen der
- 15 Primärmodell-Erstellung festgelegt wird. Insb. kann es in analoger Weise vorteilhaft sein, wenn die Durchdringung, Verwindung und/oder Umschlingung eines Designelements, wie eines Reaktorelementes, eines Kombielementes oder eines Trennelementes mit dem Subtyp eines Wärmetauschelementes hinsichtlich der Geometrie des Wärmetauschkanaals festgelegt wird. So kann es vorteilhaft sein, um eine hinreichende Gestaltungsfreiheit zur
- 20 Erstellung eines CAD-Modells bei gleichzeitiger Einschränkung der Dimensionalität zu erreichen, den Umschlingungsgrad (min.-max.) eines Strömungszweiges eines Designelementes festzulegen, insb. im Bereich von mind. 180° bis 360° und/oder mind. eine gemeinsame Zwischenwand, bei nicht runden Strömungszweigen/-kanälen.
- 25 Vorteilhafterweise erlauben die Designelemente und hieraus abgeleitete Primärmodell erleichterte behördliche Genehmigungsprozesse, weil der Art nach gleiche Apparate in unterschiedlichen Größe oder Leistungsklassen, durch die vergleichbaren Primärmodell auch in der finale Ausbildung auf Basis eines CAD-Modells baulich ähnlicher zueinander sind. Bspw. kann das techn. Design eines in jeder Hinsicht sehr kleiner Laborreaktors
- 30 (kontinuierlich, wenige Liter/Std) für eine stark exotherme Reaktion mit einer multiplen inneren verflochtenen Kanalstruktur für das Reaktionsgemisch und Wärmetauschmedium, nicht auf einen Reaktor im Industriemaßstab (mehrere Tonnen/Tag) übertragen werden. Mittels der vergleichbaren Designelemente und des vergleichbaren Primärmodells, ist eine Übertragbarkeit bei bspw. Größenänderungen wesentlich leichter möglich.

Die eingeschränkte Dimensionalität umfasst weiterhin eine eingeschränkte Parametrisierbarkeit, so dass bspw.

- als Querschnitt einer Leitung oder eines Kanals nur runde, quadratische, rechteckige oder ovale Querschnitte zugelassen sind, d.h. durch eine kleine Anzahl an Parametern beschreibbare Geometrien,
- als Verbindung keine Durchdringung durch ein anderes Element zugelassen ist und/oder
- relativ zum Rasterelement und/oder einer Hauptachse keine oder nur eine eingeschränkte Varianz bzgl. der Änderungen der Strömungsrichtung und/oder des Strömungsquerschnitts zulässig ist.

Eine weitere vorteilhafte Ausführungsform des Verfahrens sieht vor, dass im Definitionsschritt mind. eine Sensorhalterung oder mind. eine Gruppe von Sensorhalterungen bestimmt wird. Die Bestimmung einer Sensorhalterung umfasst vorteilhafterweise die Festlegung des Sensors oder Sensortyps und/oder des Messortes.

Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, das Folgende vorzusehen:

- einen Fertigungsschritt eines Apparates auf Basis des CAD-Modells bzw. des Konstruktionsdatensatzes als additive Fertigung des Apparates;
- einen Testschritt, wobei im Testschritt der gefertigte Apparat mindestens eine Zeit lang betrieben wird, insb. bestimmungsgemäß betrieben wird, und Sensordaten mittels mind. einem Sensor erfasst und einer Auswerteeinheit zugeleitet werden, und wobei in
- einem Auswerteschritt mittels der Auswerteeinheit die erfassten Sensordaten ausgewertet werden und basierend auf dem Ergebnis der Auswertung das CAD-Modell des gefertigten und getesteten Apparats
- als final definiert wird,
- als teilweise den Erfordernissen entsprechend definiert wird und/oder
- mind. ein Parameter verändert und/oder mind. eine der Erzeugungen und/oder einer der nachfolgenden Schritte erneut durchgeführt werden.

Bei einer vorteilhaften Ausgestaltung einer iterativen Entwicklung und/oder Fertigung des Apparates kann vorgesehen werden, für

- mind. einen Testschritt des zu fertigenden Apparats eine Sensorhalterung und/oder eine erste Gruppe von Sensorhalterungen vorzusehen, und
- für mind. einen nachfolgenden Testschritt und/oder für den als final definierten Apparat eine unterschiedliche Sensorhalterung und/oder einer unterschiedlichen Gruppe von

Sensorhalterungen vorzusehen. Es kann insbesondere vorteilhaft sein und die Erstellung des finalen CAD-Modells sowie die Herstellung des Apparates beschleunigen, wenn eine geringere Anzahl von Sensorhalterungen für den als final definierten Apparat.

- 5 Somit kann bei der iterativen Erstellung des finalen CAD-Modells in einer ersten Phase, vorsorglich und zur maximalen Sicherheit eine in gewisser Weise übergroße Anzahl von Sensoren vorgesehen werden, bis empirisch eine hinreichende Sicherheit bzgl. des technischen Designs des Apparates erlangt wurde. Für das finale CAD-Modell, das Grundlage für den Fertigungsdatensatz bildet, werden gemäß dieser Ausführungsform nur
10 noch die Sensoren vorgesehen, die für den sicheren Betrieb und Steuerung des Apparates erforderlich sind.

- Hierbei meint „bestimmungsgemäß“, dass der Apparat bei den chemischen und physikalischen Bedingungen betrieben wird, insb. einschließlich der realen chemischen
15 Reaktion, die bestimmungsgemäß beabsichtigt und/oder erwartbar sind. Dagegen kann der Apparat auch „nicht-bestimmungsgemäß“ betrieben werden, indem dieser bspw. nur mit einem einzigen, nichtreagierenden Fluid oder Stoffgemisch durchströmt wird, um nur den realen Wärmetransport aus den Reaktionselementen zum Wärmetauschmedium und sensorisch zu erfassen.

- 20 Ein vorteilhaftes Verfahren kann darin bestehen, dass einem Apparat, der im Testschritt nicht als final definiert wurde, im Rahmen dieses Testschrittes oder eines nachfolgenden Teststrittes eine definierte, angepasste Eignung als finale Eignung zugeordnet wird.

- 25 Hierbei meint „angepasste Eignung“, dass die relevanten Prozess- und Verfahrensparameter bereitgestellt werden, unter denen der Apparat betrieben werden kann. Dies hat den großen Vorteil, dass der bereits gefertigte und mittels der Sensoren vermessene Apparat nicht verschrottet werden muss, sondern ggf. für einen zweckmäßigen, vorteilhaften Betrieb zur Herstellung von Produkten genutzt werden kann.
30 Die eingeschränkte Eignung kann bspw. eine Limitierung der Stoffmengen (Edukte) pro Zeiteinheit und/oder eine erhöhte Wärmetauschkleistung betreffen.

- Bei einer weiteren Ausführungsform des Verfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass mindestens eine Simulation und/oder ein Modell ausgewertet und in Abhängigkeit vom
35 Ergebnis der Auswertung die Erstellung der Simulation bzw. des Modells mind. ein weiteres Mal, also insb. mind. zweifach, durchgeführt wird, nach zielgerichteter,

automatischer und/oder deterministischer Abänderung von mind. einem Parameter eines vorlaufenden (Verfahrens-)Schritts der jeweiligen Simulation oder des jeweiligen Modells erneut durchgeführt wird, um einen Apparat (100) und/oder das Modell, insb. CAD-Modell, für einen Apparat (100) hinsichtlich mind. eines technischen Parameters zu verbessern,

5 wobei

- die ausgewertete Simulation eine Festigkeitssimulation, eine Strömungssimulation und/oder eine thermodynamische Simulation ist und
- das ausgewertete Modell das Primärmodell, das CAD-Modell und/oder der Konstruktionsdatensatz ist.

10

Insbesondere bei einer solchen iterativen, schrittweisen Entwicklung von Apparaten, die ggf. eine Testphase im Labor oder Technikum erfordern, hat sich die (weitgehende) Beschränkung auf die jeweils nachlaufende Anpassung des Primärmodells als besonders vorteilhaft erwiesen, weil ein schnelle Verständnis sowohl für die Auswertung des vorlaufenden Iterationsschritts als auch für die Abschätzung der technischen Einflüsse optimierender Anpassungen der Parameter des Primärmodell und nachlaufend des hieraus von der Software erstellten CAD-Modell für einen Nutzer gegeben ist.

15

Hierbei meint „Auswertung“ und „mind. eine weitere Durchführung“, dass bspw. durch die Simulation aufgezeigte technische Schwächen, Mängel und/oder Risiken, sowie ggf. das Unterschreiten von behördlich oder gesetzlich geforderte Grenzwerten, von dem Nutzer bspw. zielgerichtet in einem weiteren Definitionsschritt eine Änderung eines entsprechenden Parameters eines Designelements und damit nachfolgenden des Primärmodells (zweite Primärmodell) und des hieraus gebildeten CAD-Modells(zweite CAD-Modell) erfolgt. Der Vorschlag oder die Eingabe von geänderten (mind. einem) Parametern kann auch automatisch durch die MSO-Software, die jeweilige Simulationssoftware oder einen andere geeignete Software oder Programmpakte zur Verfügung gestellt werden. Änderung von mind. einem Parameter in mind. einem vorgelagerten Verfahrensschritt erfolgt insofern zielgerichtet, automatisch und deterministisch, dass basierend auf dem aufgezeigten Mängel oder der aufgezeigten Schwäche, mind. eine Parameter gezielt geändert (festgelegt) wird, um die jeweilige Simulation und/oder das betroffene Modell hinsichtlich genau dieses Mangels oder Schwäche zu verbessern, insb. zu optimieren. Die Automation kann hierbei durch eine softwarebasierte Darstellung und/oder Nutzerführung erreicht werden, die bspw. eine textliche oder farbliche Darstellung sein kann. Vorteilhafterweise erfolgt die Darstellung durch eine textliche Anzeige des mind. einen zu ändernden Parameters und/oder

20

25

30

35

Vorschlag (Anzeige) des neuen, geänderten Parameters. Dies erfolgt besonders vorteilhaft direkt im Ansichtsmodus der jeweiligen modellbildenden oder simulationsschaffenden Software, Im Vorliegensfall einer geeigneten Software- oder Datenschnittstelle der jeweiligen modellbildenden oder simulationsschaffenden Software zur MSO-Software, wird unmittelbar und gezielt mind. ein Parameter zur Erstellung eines verbesserten Primärmodells und nachfolgend eines verbesserten, mängelfreien Modells und/oder Simulationsergebnisses.

Insb. kann es vorteilhaft sein, wenn nach Erstellung eines CAD-Modells dieses evaluiert wird und bedarfsweise ein angepasstes, weiteres Primärmodell erstellt wird, auf dessen Basis ein neues CAD-Modell und/oder ein neuer Fertigungsdatensatz erstellt wird. Alternativ oder zusätzlich kann nach einer FEM-Analyse ein neues Primärmodell oder ein neues CAD-Modell erstellt werden, nach Anpassung mind. eines relevanten Parameters.

Der Vorteil dieses erfindungsgemäßen Verfahrens zeigt sich insbesondere bei einem solchen iterativen, mehrstufigen Entwicklungs- und Fertigungsverfahren, bei dem auf der rein digitalen Datenebene von Primärmodell, CAD-Modell und/oder FEM-Analyse ggf. mehrfache Simulations- und Optimierungsschritte erfolgen können und zusätzlich oder alternativ ein realer, nicht-digitaler Apparat betrieben und getestet werden kann und auf beiden Ebenen Anpassungen von Parameter und Durchführung der nachfolgenden Schritte beschleunigt vorgenommen werden kann. Der Betrieb oder der Betriebsschritt kann somit auch ein Testschritt sein.

Vorteilhafterweise kann das Verfahren dahingehend verbessert werden, dass eine Identifikation vorteilhafter Messstellen zur Überwachung und zum sicheren Betrieb des Apparates erfolgt und die zugehörigen Sensorhalterungen im Primärmodell für einen Testschritt und/oder einen als final definierten Apparat vorgesehen werden kann. Hierdurch wird die Sicherheit des finalen Apparates und dessen Betrieb erhöht, neben der Beschleunigung der Entwicklung durch stark verkürzte Simulations- und/oder Erstellungsschritte der Modelle, insb. stark verkürzte Erstellungszeiten des finalen, optimalen CAD-Modells und des hieraus abgeleiteten Fertigungsdatensatzes für einen Apparat.

Von der Erfindung ist weiterhin ein Herstellungsverfahren zur Fertigung eines Apparates mittels eines additiven Fertigungsverfahrens und einer additiven Fertigungsverfahren umfasst, wobei die additive Fertigungsverfahren mittels eines Konstruktionsdatensatzes

gesteuert wird, und wobei der Konstruktionsdatensatz auf einem CAD-Modell basiert, das gemäß einem Verfahren erstellt wurde, das nach einer der genannten Ausführungsformen oder Variante ausgebildet ist.

- 5 Hierbei meint "basiert" insbesondere, dass der Konstruktionsdatensatz eine unmittelbare Ableitung oder wesentliche Teildatenmenge des CAD-Modells ist und/oder hieraus erzeugt wurde.

Bei einer Ausführungsform des Herstellungsverfahrens kann ein Vorteil darin bestehen,
10 dass der Apparat zur Führung eines Stoffsystems mit mind. zwei Stoffströmen geeignet ist, insb. ein Reaktor zur Synthese mind. eines Produkts aus mind. einem Ausgangsstoff (Edukt) mind. eines Stoffstroms.

Dies betrifft insbesondere Stoffströme für stark exotherme Reaktionen, die aus
15 Sicherheitsüberlegungen häufig stark überdimensioniert werden.

Bei einer weiteren Ausführungsform des Herstellungsverfahrens kann ein Vorteil darin bestehen, dass das additive Herstellungsverfahren ein laserinduziertes Pulverschmelzverfahren ist.

20

Es hat sich somit als großer Vorteil herausgestellt, einen Apparat mind. teilweise mittels eines additiven Herstellungsverfahrens und gemäß einem Herstellungsverfahren nach einem der hierin genannten Ausführungsformen und Varianten herzustellen.

- 25 Dies insb., wenn der Apparat ein Reaktor ist, der aus der folgenden Gruppe genommen ist: Rohrreaktor, Reaktor mit Reaktions- und Wärmetauschanälen bzw. Wärmetauschräumen, Kontireaktor, Kolonne mit mind. einem Zwischenboden.

Schließlich ist von der Erfindung auch ein Speichermedium betroffen, das ein
30 ausführbares Programm oder Programmmodul zur mind. teilweisen Durchführung eines computer-implementierten Verfahrens zur Herstellung eines CAD-Modells und/oder einen Konstruktionsdatensatz aufweist, wobei

- das computerimplementierte Verfahren nach einer der hierin beschriebenen Ausführungsformen oder Varianten ausgebildet ist und/oder
- 35 - der Konstruktionsdatensatz auf Basis des computerimplementierten Verfahrens nach einer der hierin beschriebenen Ausführungsformen oder Varianten erzeugt wurde.

Nachfolgend wird die erfindungsgemäße Lösung anhand von Ausführungsbeispielen im Detail beschrieben. Es zeigen:

- 5 Fig. 1 eine erste Ausführungsform des Verfahrens als Blockfließbild,
- Fig. 2 eine zweite Ausführungsform des Verfahrens als Blockfließbild,
- 10 Fig. 3 eine weitere Ausführungsform des Verfahrens als schematisches Fließbild und
- Fig. 4 in vier Teildarstellungen Designelemente in einer perspektivischen Darstellung.
- 15 Das in der Figur 1 gezeigte, computerimplementierte Verfahren umfasst einen Definitionsschritt 200 zur Erstellung eines Primärmodells für einen Apparat 100, einen Eingabeschritt von Systemparametern 210, zwei Datenspeicher 250, 260, einen CAD-Erstellungsschritt 300, einen Eingabeschritt von Systemparametern 310, einen
- 20 Ausgabeschritt 350 des CAD-Modells, zwei Gates G, einen Fertigungsschritt 400 und die Erstellung des Fertigungsdatensatzes 401 für die Fertigungsvorrichtung, die vorliegend ein laserinduziertes 3D-Pulverbettdruckverfahren ist.

In dem Definitionsschritt 200 werden in einer MSO-Software erste Systemparameter 210 über ein Eingabemodul eingegeben, auf deren Basis weitere Systemparameter aus der

25 Datenbank 260 bezogen werden. Die von einem Benutzer eingegebenen ersten Systemparameter 210 sind die Reaktion, hier eine Baeyer-Villinger-Oxidation, die gewünschten Produktmengen pro Zeiteinheit. Die MSO-Software steht mit der Datenbank 262 in Verbindung, die weitere relevante Systemparameter zur Erstellung des Primärmodells auf Basis von entsprechenden Abhängigkeiten umfasst und bereitstellt.

30 Die MSO-Software steht weiterhin mit der Datenbank 262 in Verbindung, die eine Mehrzahl von parametrisierbaren Designelementen 220 umfasst (Fig. 4). Die Designelemente 220 sind vordefiniert und lassen nur eine sehr begrenzte Anzahl von Parameteränderungen zu, wie bspw. Parameteränderung zur Anpassung von

35 Kanaldurchmessern und Kanallängen.

Das im Definitionsschritt 200 erstellt Primärmodell 202, umfasst vollständige Sätze an beschreibenden Differentialgleichungen für die Geometrien und den bestimmungsgemäßen Betrieb des Apparates 100, hier die stark exotherme Baeyer-Villinger-Oxidation, wobei der Apparat 100 ein kontinuierlicher Reaktor ist. Die Sätze an Differentialgleichungen und/oder algebraischen Gleichungen beschreiben mathematisch:

- die Reaktionskinetik,
- die innere Kanalstruktur für die jeweiligen Massen der Stoffströme,
- die Energieflüsse aus freiwerdenden Energien aus der exothermen Reaktion und abzuleitende Energien über WT-Medien und
- die wesentlichen geometrischen äußeren Abmessungen.

Die Sätze von Differentialgleichungen umfassen damit auch die vordefinierten Designelemente 220 (Fig. 4) und deren Anordnung in einem Raumelement 250, sowie dortige Raumsegmente 252 und/oder definierte Rasterknoten 254.

Im vorliegenden Ausführungsbeispiel des Verfahrens ist ein Teil des Eingabeschrittes von ersten Systemparametern 210 im Definitionsschritt 200, die manuelle Ergänzung und Anordnung von einer systemseitig vorgeschlagenen Anzahl an Designelementen 220 in ebenfalls vorgeschlagenen Raumsegmenten 252 eines Raumelements 250 (Fig. 4) dargestellt.

Das Primärmodell 202 wird durch die MSO-Software bereitgestellt und von der CAD-Software im CAD-Erstellungsschritt 300 als Systemparameter angewendet. In dem Verfahren, wie es die Fig. 1 zeigt, erfolgt eine weitere Eingabe von Systemparametern 310 über ein nicht dargestelltes Interface vorbereitend zum CAD-Erstellungsschritt 300 durch einen Nutzer.

Das erstellte CAD-Modell 302 wird von der CAD-Software bereitgestellt und an die Betriebs- und Steuerungssoftware der Fertigungsvorrichtung 420 übergeben, die basierend hierauf in einem Erstellungsschritt 410 einen Fertigungsdatensatz generiert.

In dem beispielhaften, computerimplementierten Verfahren sind zwei Entscheidungstore (Gates, G) vorgesehen:

Ein erstes Gate G1 ist nach dem CAD-Ausgabe- und Evaluationsschritt 350 vorgesehen. Wird in dem CAD-Ausgabe- und Evaluationsschritt 350 eine ungewünschte Abweichung von Vorgaben am CAD-Modell 302 festgestellt, wird dieses CAD-Modell 302 ganz oder in Auszügen, insb. bzgl. der unzulässigen Abweichungen als Systemparameter 210 für
5 einen weiteren, angepassten Definitionsschritt 200 oder als Systemparameter 310 für einen weiteren, angepassten CAD-Erstellungsschritt 300 vorgesehen.

In dem zweiten Gate G2 kann eine Auswertung erfolgen, die je nach Art und/oder Schwere der unzulässigen Abweichung die Veranlassung eines weiteren CAD-
10 Erstellungsschritt 300 oder eines weiteren Definitionsschrittes 200 mit nachlaufenden CAD-Erstellungsschritt 300 erfordert. In dem dargestellten Beispiel wird durch das zweite Gate G2 eine unzulässige Abweichung hinsichtlich Apparatefestigkeit erneut dem CAD-Erstellungsschritt 300 zugeführt, alle andere unzureichenden oder grenzwertigen Abweichungen werden erneut dem Definitionsschritt 200 als nachlaufende, ergänzende
15 Simulationsparameter zugeleitet. Hieran schließt sich ein erneuter CAD-Erstellungsschritt 300 an.

Das Verfahren nach Fig. 2 weist analog dem Beispiel nach Figur 1 Folgendes auf: einen Definitionsschritt 200 zur Erstellung eines Primärmodells für einen Apparat 100, einen
20 Eingabeschritt von Systemparametern 210, zwei Datenspeicher 260, 262, einen CAD-Erstellungsschritt 300, einen Eingabeschritt von Systemparametern 310, einen Ausgabeschritt 350 des CAD-Modells, Gates G, eine Fertigungsschritt 400 und die Erstellung des Fertigungsdatensatzes 401 für die Fertigungsvorrichtung, die vorliegend ein laserinduziertes 3D-Pulverbettdruckverfahren ist.

25

Im Unterschied zum Beispiel, wie es in der Fig. 1 gezeigt ist, erfolgt nach dem Ausgabeschritt 350 des CAD-Modells 302 ein Simulations- und Evaluationsschritt, vorliegend eine FEM-Simulation 500, an die sich ein Gate G3 anschließt. Weiterhin erfolgt nach der Fertigung des Apparates 100n ein Betriebsschritt 600, in dem der Apparat 100n
30 betrieben wird, insb. bestimmungsgemäß oder weitgehend bestimmungsgemäß betrieben wird. An diesen Betriebsschritt 600 schließt sich ein weiteres Gate G4 an.

Das computerimplementierte Verfahren der Fig. 2 umfasst weiterhin die Einbindung einer Auswerte- und Analyseeinheit 450, in der insbesondere die relevanten Systemparameter,
35 das Primärmodell, das CAD-Modell, der Ergebnisdatensatz der FEM-Simulation 500, der Fertigungsdatensatz und/oder die Messdaten aus dem Betriebsschritt 600 erfasst und

ausgewertet werden. Die Auswerte- und Analyseeinheit 450 ist als KI-Software (Künstliche Intelligenz Software) ausgebildet, kann mindestens teilweise ein Neuronales Netzwerk umfassen oder unter Nutzung eines Neuronalen Netzwerkes eine Datenanalyse und eine Ergebniserstellung vornehmen. Der Betriebsschritt 600 stellt somit einen
5 Testschritt 460 dar.

Die Auswerte- und Analyseeinheit 450 stellt die Ergebnisdaten einem oder beiden Datenspeichern 260, 262 zur Verfügung, wie mit den strichpunktierten Linien und Pfeilen angedeutet ist. Die Auswerte- und Analysesoftware 450 kann auch ausgebildet sein und
10 entsprechend verbunden sein (nicht dargestellt), um Systemparameter im Definitionsschritt, im CAD-Erstellungsschritt und/oder im Erstellungsschritt des Fertigungsdatensatzes 410 auszuwählen und/oder vorzuschlagen.

Die Gate G1-4 haben jeweils analoge Funktionen, nämlich beim Unterschreiten oder
15 Überschreiten eines Sollwertes oder Sollwertebereiches, einen nächsten Iterationsschritt zu veranlassen. Der Apparat 100n+1 ist der finale Apparat, der gem. einer Soll-Spezifikation ausgebildet ist und der keinem weiteren Iterationsschritt unterworfen werden muss, bzw. dessen Primärmodell, CAD-Modell und Fertigungsdatensatz der Soll-Spezifikation entsprechen.

20 Vorliegend wird der Fertigungsdatensatz 410 für die Fertigungsvorrichtung 420, die laserinduzierte 3D-Pulverbettdruckvorrichtung, im Fertigungsschritt 400 erstellt, wobei alternativ der Fertigungsdatensatz 410 mind. teilweise auch durch die CAD-Software als Teil der CAD-Erstellung 300 erstellt wird.

25 Das Verfahren gem. Fig. 2 kann weitergebildet sein, indem der finale Apparat 100n+1 nicht identisch mit dem bereits tauglichen Apparat 100n ausgebildet wird, durch ein n+1tes Primärmodell, ein n+1tes CAD-Modell und/oder n+1ter Fertigungsdatensatz. Hierbei können Elemente, Anbauten und/oder insb. Sensorhalterungen verändert und
30 angepasst werden, die nur zu temporären Analyse- und Entwicklungszwecken (zusätzlich) vorgesehen wurden, wie bspw. eine Vielzahl von Messstellen und Sensorhalterungen, die im Regelbetrieb vollständig überflüssig sind. Weiterhin können für den Apparat 100n+1 mechanische Befestigungs- und Haltestrukturen zur äußerlichen Anbringung vorgesehen werden, die für die Auslegung irrelevant sind und bspw. den
35 Fertigungsschritt 400 komplizierter und zeitaufwändiger gestalten würden.

Es ist für den Fachmann unmittelbar ersichtlich und vorgesehen, dass jeder der genannten Schritte mit einem Computer oder durch ein verteiltes Computersystem oder -netzwerk ausgeführt wird, auf dem eine für den jeweiligen Schritt geeignete Software und/oder Programmstruktur ausführbar ist. Die Computer sowie die Datenspeicher
5 können weiterhin über kabelgebundene und/oder kabelungebundene Kommunikationsnetzwerke miteinander datenleitend verbunden sein. Die Datenspeicher sind insb. nicht-flüchtige Speicher und können ganz oder teilweise in einem Computer integriert sein.

10 Figur 3 zeigt ein Ausführungsbeispiel für die Schritte zur Simulation eines Strömungsrohrreaktors für die Alkoxylierung (Synthese) eines Alkoxylat aus den beiden Edukten Ethylenoxid (EO) in ersten Stoffstrom und Alkylphenol im zweiten Stoffstrom mit voreingemischtem Multimetallcyanidkomplex-Katalysator oder Alkali- und Erdalkalimetallhydroxid-Katalysator, umfassend einen Definitionsschritt 200 und den
15 CAD-Erstellungsschritt.

Der Definitionsschritt 200 ist in zwei Teilphasen I, II aufteilbar und umfasst einen Basiseingabeschritt 150, in dem die vorgenannte Synthese und/oder deren wesentlichen Parameter und ggf. weitere Basiseingaben, wie die gewünschte Produktionskapazität in
20 kg/s von einem Nutzer festgelegt, d.h. in dem Programmmodul bzw. der dortigen MSO-Software eingegeben wird.

Die weiteren Basiseingaben waren: Stoffparameter zur Beschreibung des thermodynamischen Verhaltens des Stoffsystems, Spezifikationen der
25 Eduktmassenströme hinsichtlich Druck, Temperatur, Massenfluss und Zusammensetzung, Auswahl der zu berücksichtigenden Designelementtypen in der Optimierung, Raumelementbeschränkungen, Festlegung der gewünschten Diskretisierungsfeinheit der Algebra- bzw. Differentialgleichungen.

30 Der Definitionsschritt 200 ist zweiphasig und umfasst in der Teilphase I

- den Schritt 240 der Festlegung der Designelemente 220 nach Art und Anzahl, nämlich zwei Trennelemente 226, drei Kombielemente 224 und sieben Strömungselemente 222;
- 35 - den Schritt 242 der Festlegung der Dimensionen der Designelemente 220, gezeigt am Beispiel eines Trennelementes 226, bei dem alleinig die Länge L des

Einleitungszweiges und der identische Durchmesser D der Ausleitungszweige 236 zur Parametrisierung zur Verfügung stehen und

- den Schritt 244 der Anordnung der Designelemente 220 zueinander, so dass eine am Ende der ersten Stufe des Definitionsschritts 200 eine erste Metastruktur des Kontireaktors gebildet wird, in der alle parametrisierbaren Dimensionen der Designelemente 220 sowie die Zuordnung von Ausgangsöffnungen 232 zu Eingangsöffnungen 230 und verbindende Strömungselementen 222 festgelegt sind.
- Weiterhin erfolgt die thermodynamische Optimierung, die in der Figur 3 nicht dargestellt ist.

In der zweiten Teilphase II des Definitionsschrittes 200 erfolgt die geometrische Optimierung, indem eine Anordnung der vorgenannten Designelemente 220 gem. der festgelegten ersten Metastruktur in dem bereitgestellten quaderförmigen Raumelement 250 erfolgt.

Bereits hier zeigt sich der Vorteil, dass nachfolgend im CAD-Erstellungsschritt 300, zwischen den Trennelementen 226 und den Kombielementen 224 nur Strömungselemente 222, nämlich Rohrleitungen oder rohrförmigen Kanälen zugelassen werden, so dass der Erstellungsaufwand stark verringert und somit beschleunigt wird.

Weiterhin müssen im Rahmen der CAD-Erstellung keine weiteren analogen Design- oder Funktionselemente beachtet werden.

Vorliegend wurden durch die MSO-Software die folgenden fünf Raumsegmente vorgeschlagen: ein links angeordnetes Einleitungssegment, Kombinationssegment, ein mittig angeordnetes Strömungs- und Reaktionssegment und ein rechtsangeordnetes Ausleitungssegment. Weiterhin wurden von der MSO-Software die zugehörigen Designelemente 220 in den dafür vorgesehenen Raumsegmenten 252 angeordnet.

Vorliegend sind die Strömungselemente 222 in der Längserstreckung (x-Richtung) zur Bereitstellung einer ausreichenden Reaktionsdauer größer als die Längserstreckung (x-Richtung) des Strömungssegmentes, so dass keine windungsfreie, gerade Verbindung zw. Trennelementen 226 und Kombielementen 224 möglich ist. Dies ist im Rahmen der Erstellung des Primärmodells 202 zulässig, die Ermittlung und Simulation der optimalen Geometrie erfolgt nachlaufend bei der Erstellung des CAD-Modelles 302. Im Rahmen der räumlichen Optimierung in der zweiten Stufe des Definitionsschrittes 200, können neben der Positionierung der Designelemente 220 auf den Rasterknoten 254 des Raumelements

250 bzw. der Rastersegmente 252, insb. auch die Lage und Ausrichtung von Zu- und Ableitungen in ihrer Lage und Raumausrichtung bestimmt werden, um ggf. benachbarte Bauteile zu berücksichtigen.

- 5 Im Definitionsschritt 200 wird final das Primärmodell 202 erstellt und Primärmodellreport 204 (PMR) zur Übernahme durch die CAD-Software für den CAD-Erstellungsschritt 300 bereitgestellt. Der PMR 204 ist eine txt-Datei und umfasst die Lösungen der relevanten Gleichungen sowie die zulässigen Grenzwerte verbleibender Variablen.
- 10 In dem gezeigten Beispiel umfasst der im Programmmodul mit der MSO-Software erstellte PMR 204 bereits alle erforderlichen Eingabedaten für den Erstellungsschritt 300 des CAD-Modells 302 für den Apparat 100, so dass die MSO-Software den PMR 204 unmittelbar der CAD-Software übermittelt und diese basierend hierauf eine CAD-Modell 302 erstellt. Wie in dem rechten Rahmen angedeutet, umfasst das CAD-Modell 302
- 15 miteinander verschlungene und kreuzende Strömungselemente 222, wobei sich diese Designelemente 220 nicht durchdringen oder in der sonstigen inneren oder äußeren Geometrie verändern, da dieser Freiheitsgrad in dem bzgl. der Dimensionalität verringerten Designelementen 220 nicht zugelassen ist.
- 20 Die im CAD-Erstellungsschritt 300 genutzte CAD-Software, welche eine exportierbare .sty Datei als CAD-Modell 302 erzeugt.

- In der Fig. 4 sind drei Grundformen von Designelementen 220 dargestellt, das Strömungselement 222 im Teilbild I., ein Kombielement 224, als Y-Kombielement, im
- 25 Teilbild II. und ein Teilungselement 226, als Y-Teilungselement, im Teilbild III.

- Das Teilbild IV. zeigt ein weiteres Teilungselement 226, in der Form eines T-Teilungselementes. Alle Designelemente 220 weisen gemäß Definition eine oder mehrere Eingangsöffnungen 230 und eine oder mehrere Ausgangsöffnungen 232 auf, so dass
- 30 hierdurch die Strömungsrichtung festgelegt ist. Es versteht sich, dass das in dem Teilbild IV. gezeigte Designelement 220 bei der Invertierung der Definition der Öffnungen 230, 232 ein T-Kombielement darstellt, wie es analog für die Designelemente der Teilbilder II. und III. gegeben ist.

Die Teilungselemente 226 weisen je einen Einleitungszweig 234 und zwei Ausleitungszweige 236 auf und die Kombielemente 224 je zwei Einleitungszweige 234 und einen Ausleitungszweig 236.

Bezugszeichenliste

	100	Apparat
5	150	Basiseingabeschritt
	200	Definitionsschritt zur Erstellung des Primärmodells
	202	Primärmodell
	204	Primärmodellreport (PMR)
10	210	Systemparametereingabe
	220	Designelement
	222	Rohrleitungs- oder Strömungselement
15	224	Kombielement
	226	Trennelement
	240	Schritt zur Festlegung von Anzahl und/oder Art der Designelemente
	242	Schritt zur Festlegung der Dimensionen der Designelemente
20	244	Schritt zur Festlegung der Anordnung der Designelemente zueinander
	230	Eingangsöffnung
	232	Ausgangsöffnung
	234	Einleitungszweig
25	236	Ausleitungszweig
	250	Raumelement
	252	Raumsegment
	254	Rasterknoten
30	260	Datenspeicher
	262	Datenspeicher
	264	Speichereinheit der Fertigungsvorrichtung
35	300	CAD-Erstellungsschritt
	302	CAD-Modell

	310	Systemparametereingabe
	350	CAD-Modellausgabe und -evaluation
5		
	400	Fertigungsschritt von 100
	410	Erstellung Fertigungsdatensatz
	420	Fertigungsvorrichtung
10		
	450	Auswerteeinheit
	460	Testschritt
	500	FEM-Simulation/-Analyse
	600	Betrieb von 100
15		
	D	Durchmesser
	L	Länge
20		

Ansprüche

1. Computer implementiertes Verfahren zur Erstellung eines CAD-Modells (302)
5 für einen ein Stoffsystem führenden Apparat (100), wobei
- das Stoffsystem mind. zwei Stoffströme umfasst und
 - der Apparat ein Wärmetauscher, ein Reaktor zur Synthese mind. eines Produkts aus mind. einem Ausgangsstoff mind. eines Stoffstroms oder eine Kolonne mit mind. einem Zwischenboden ist, wobei der Reaktor aus der
10 folgenden Gruppe genommen ist: Rohrreaktor, Reaktor mit Reaktions- und Wärmetauschanälen bzw. Wärmetauschräumen und/oder Kontireaktor, umfassend die Schritte:
- a. Eingabe von Systemparametern in eine CAD-Software (200);
 - b. Erstellung des CAD-Modells (302), umfassend eine dreidimensionale und
15 mehrfachphysikalische Simulation des Stoffsystems;
 - c. Ausgabe des CAD-Modells (302) an eine Ausgabeeinheit, Auswerteeinheit und/oder eine Speichereinheit (260, 262);
- gekennzeichnet durch**
- d. mind. einen Definitionsschritt (200) mittels eines Programmmoduls,
20 welcher der Erstellung des CAD-Modells vorgelagert ist, wobei der Definitionsschritt Folgendes umfasst:
 - i. Bereitstellung mind. eines digitalen Raumelements (250),
 - ii. Bereitstellung digitaler Designelemente (220),
 - 25 iii. Anordnung der Designelemente im Raumelement (250),
 - iv. Ausgabe eines Primärmodells (202) als ein weiterer Systemparameter;
 - e. Erzeugung des CAD-Modell (302) mittels der CAD-Software unter Anwendung
30 des Primärmodells (202) als weiteren Systemparameter, und wobei der Definitionsschritt (200) mittels des Programmmoduls der Erstellung des CAD-Modells (302) vorgelagert ist; wobei
 - f. der Schritt der Anordnung des Definitionsschritts (200) Folgendes umfasst:
- 35

- Auswahl einer definierte Anzahl von Designelementen (220);
 - Erster Ausrichtungsschritt, indem zwischen jeweils mindestens zwei Designelementen (220) die Strömungswege von der mindestens einen Ausleitungsöffnung zu mind. einer definierten stromabwärtsbefindlichen Einleitungsöffnung eines weiteren Designelements (220) bestimmt werden; und
 - Zweiter Ausrichtungsschritt, indem mind. ein Teil der Designelemente (220) im Raumelement (250), mindestens einem Raumsegment (252) und/oder mindestens einem Rasterelement geometrisch in mindestens zwei Raumrichtungen, insb. in drei Raumrichtungen angeordnet werden.
2. Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass das Programmmodul eine ausführbaren Multi-Skalen-Optimierungssoftware (MSO-Software) umfasst und/oder daraus gebildet ist, wobei die MSO-Software ausgebildet ist, um das Primärmodell durch eine physikalische Simulation mittels einer Multi-Skalen-Optimierung zu generieren, wobei Multi-Skalen-Optimierung die thermodynamische und geometrische Optimierung des technischen Designs des Apparates (100) als Primärmodell meint.
3. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass die Eingabe von Systemparametern für die CAD-Software mind. teilweise mittelbar im und/oder über das Programmmodul erfolgt, insb. vollständig über das Programmmodul erfolgt.
4. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass der Definitionsschritt (200) und/oder die Erzeugung des Primärmodells (202) mittels einer MSO-Software und/oder eines MSO-Programmpakets erfolgt.
5. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass die bereitgestellten Designelemente (220) als unterschiedliche Designelemente-Typen ausgebildet sind, umfassend mind. ein Rohrleitungselement (222) und mind. eines der folgenden Designelemente-Typen:

- Kombielement (224), insb. T-Kombielement und/oder Y-Kombielement;
 - Trennelement (226), insb. T-Trennelement und/oder Y-Trennelement oder
 - Mischelement als statisches Mischelement.
- 5 6. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche,, dadurch gekennzeichnet, dass mind. ein Designelemente (220) als eines der folgenden Designelemente-Subtypen ausgebildet ist:
- Reaktorelement,
 - Steuerelement, wie bspw. ein Drosselement oder Düsenelement,
 - 10 - Katalysatorelement und/oder
 - Wärmetauschelement, insb. Doppelmantелеlement.
7. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass
- 15 - die Ausgabe des CAD-Modells (302), insb. als eine sty-Datei, an eine Programmeinheit zur Simulation der Festigkeit des Apparates (100) erfolgt, und wobei
- durch die Programmeinheit zur Simulation der Festigkeit eine Festigkeitssimulation erfolgt, insb. eine Finite-Element-Simulation.
- 20
8. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, gekennzeichnet durch Erzeugung eines Konstruktionsdatensatzes für eine additives Fertigungsverfahren zur physikalischen Herstellung des Apparates (100) mittels der CAD-Software und
- 25 Ausgabe des Konstruktionsdatensatzes an einen Datenspeicher (260, 262), eine Ausgabeeinheit und/oder eine Programmeinheit eines Computers, insb. an eine Speichereinheit (264) und/oder Programmeinheit eines Steuerungsprogramms einer additiven Fertigungsverfahren (420).
- 30 9. Verfahren nach Anspruch 8, dadurch gekennzeichnet, dass die Erzeugung des Konstruktionsdatensatzes mindestens teilweise in einer der nachfolgenden Softwareeinheiten oder Programmmodule erfolgt:
- CAD-Software und/oder
 - Steuerungssoftware für eine additive Fertigungsverfahren (420) zur
 - 35 Herstellung des Apparates (100).

10. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass das mind. ein Designelement (220) ein vordefiniertes digitales Designelement-Modell ist, das mittels eines definierten Algorithmus und mind. einem definierten Designelement-Parameter mind. teilweise mathematisch beschrieben und in einem Datenspeicher (260, 262) gespeichert ist.
11. Verfahren nach Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, dass das vordefinierte Designelement-Modell und/oder der definierte Algorithmus eine verminderte Dimensionalität aufweist.
12. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, gekennzeichnet durch
- einen Fertigungsschritt eines Apparates (100) auf Basis des CAD-Modells (302) bzw. des Konstruktionsdatensatzes als additive Fertigung des Apparates (100);
 - einen Testschritt (460), wobei im Testschritt (460) der gefertigte Apparat (100) mindestens eine Zeitlang betrieben wird, insb. bestimmungsgemäß betrieben wird, und Sensordaten mittels mind. einem Sensor erfasst und einer Auswerteeinheit (450) zugeleitet werden, und wobei in
 - einem Auswerteschritt mittels der Auswerteeinheit (450) die erfassten Sensordaten ausgewertet werden und basierend auf dem Ergebnis der Auswertung das CAD-Modell (302) des gefertigten und getesteten Apparats (100)
 - als final definiert wird,
 - als teilweise den Erfordernissen entsprechend definiert wird und/oder
 - mind. ein Parameter verändert und/oder mind. eine der Simulationen und/oder einer der nachfolgenden Schritte erneut durchgeführt werden.
13. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass mind. eine Simulation und/oder ein Modell ausgewertet und in Abhängigkeit vom Ergebnis der Auswertung die Simulation und/oder die Modellbildung mind. zweifach durchgeführt wird, nach zielgerichteter, automatischer und/oder deterministischer Abänderung von mind. einem Parameter eines vorlaufenden (Verfahrens-)Schritts der jeweiligen Simulation oder des jeweiligen Modells erneut durchgeführt wird, um einen Apparat (100) und/oder das Modell, insb. CAD-Modell, für einen Apparat (100) hinsichtlich mind. eines technischen Parameters zu verbessern, wobei

- die ausgewertete Simulation eine Festigkeitssimulation, eine Strömungssimulation und/oder eine thermodynamische Simulation ist und
- das ausgewertete Modell das Primärmodell, das CAD-Modell und/oder der Konstruktionsdatensatz ist.

5

14. Herstellverfahren zur Fertigung eines Apparates (100) mittels eines additiven Fertigungsverfahrens und einer additiven Fertigungsverfahren (420), wobei die additive Fertigungsverfahren (420) mittels eines Konstruktionsdatensatzes gesteuert wird,

10

dadurch gekennzeichnet, dass

der Konstruktionsdatensatz auf einem CAD-Modell (302) basiert, das gemäß einem Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 13 erstellt wurde.

15. Herstellungsverfahren nach Anspruch 14, dadurch gekennzeichnet, dass der Apparat (100) zur Führung eines Stoffsystems mit mind. zwei Stoffströmen geeignet ist, insb. ein Reaktor zur Synthese mind. eines Produkts aus mind. einem Ausgangsstoff (Edukt) mind. eines Stoffstroms.

15

16. Herstellungsverfahren nach Anspruch 14 oder 15, dadurch gekennzeichnet, dass das additive Herstellungsverfahren ein laserinduziertes Pulverschmelzverfahren ist.

20

17. Speichermedium umfassend ein ausführbares Programm oder Programmmodul zur mind. teilweisen Durchführung eines computerimplementierten Verfahrens zur Herstellung eines CAD-Modells (302) und/oder einen Konstruktionsdatensatz,

25

dadurch gekennzeichnet, dass

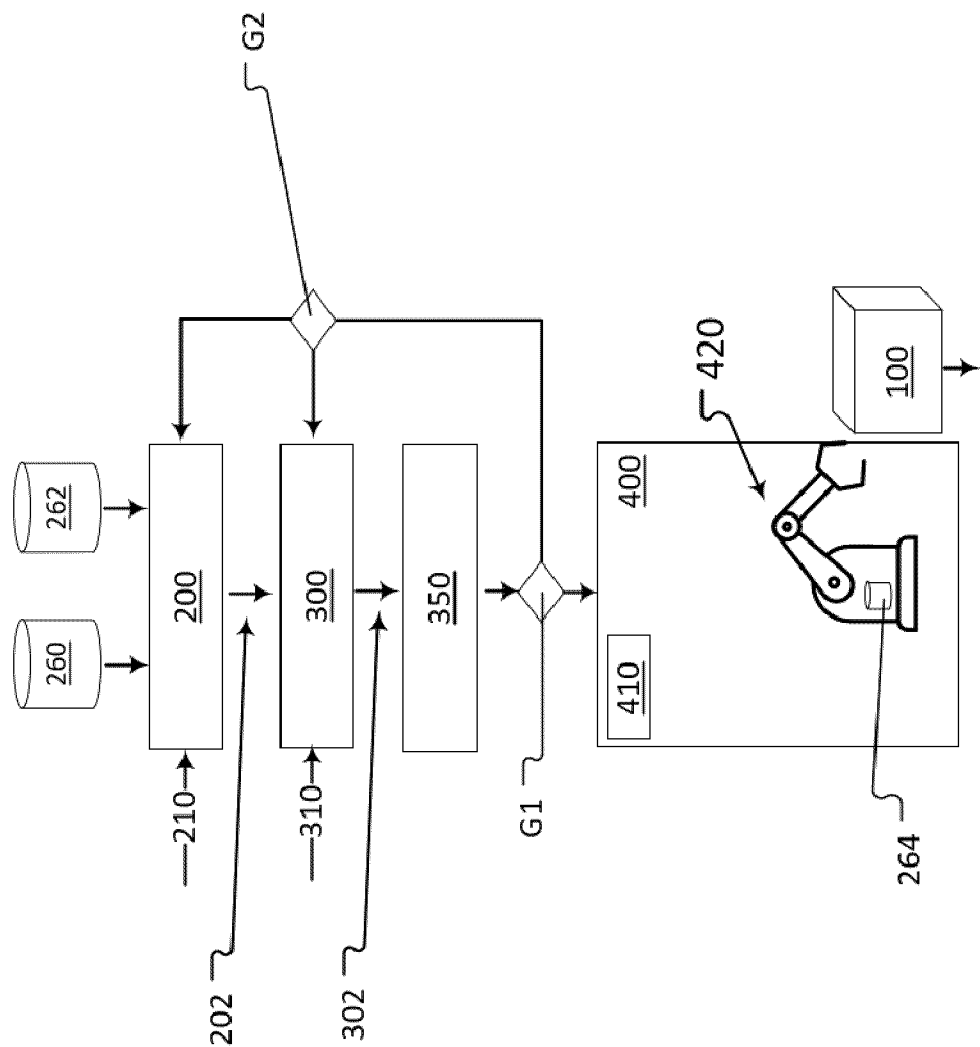
- das computerimplementierte Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 12 ausgebildet ist und/oder

- der Konstruktionsdatensatz auf Basis des computerimplementierten

30

Verfahrens nach einem der Ansprüche 1 bis 13 erzeugt wurde.

Fig. 1



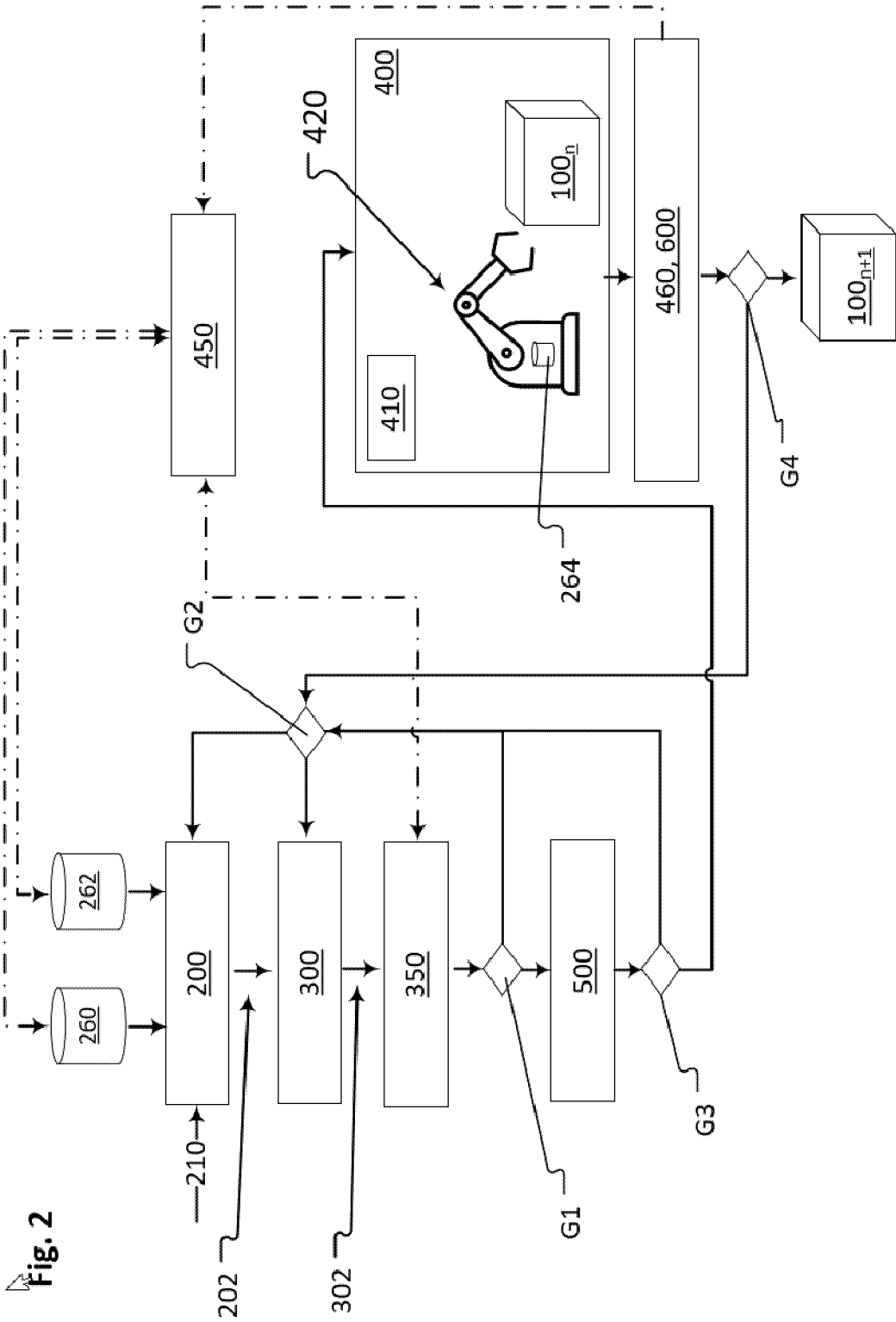


Fig. 3

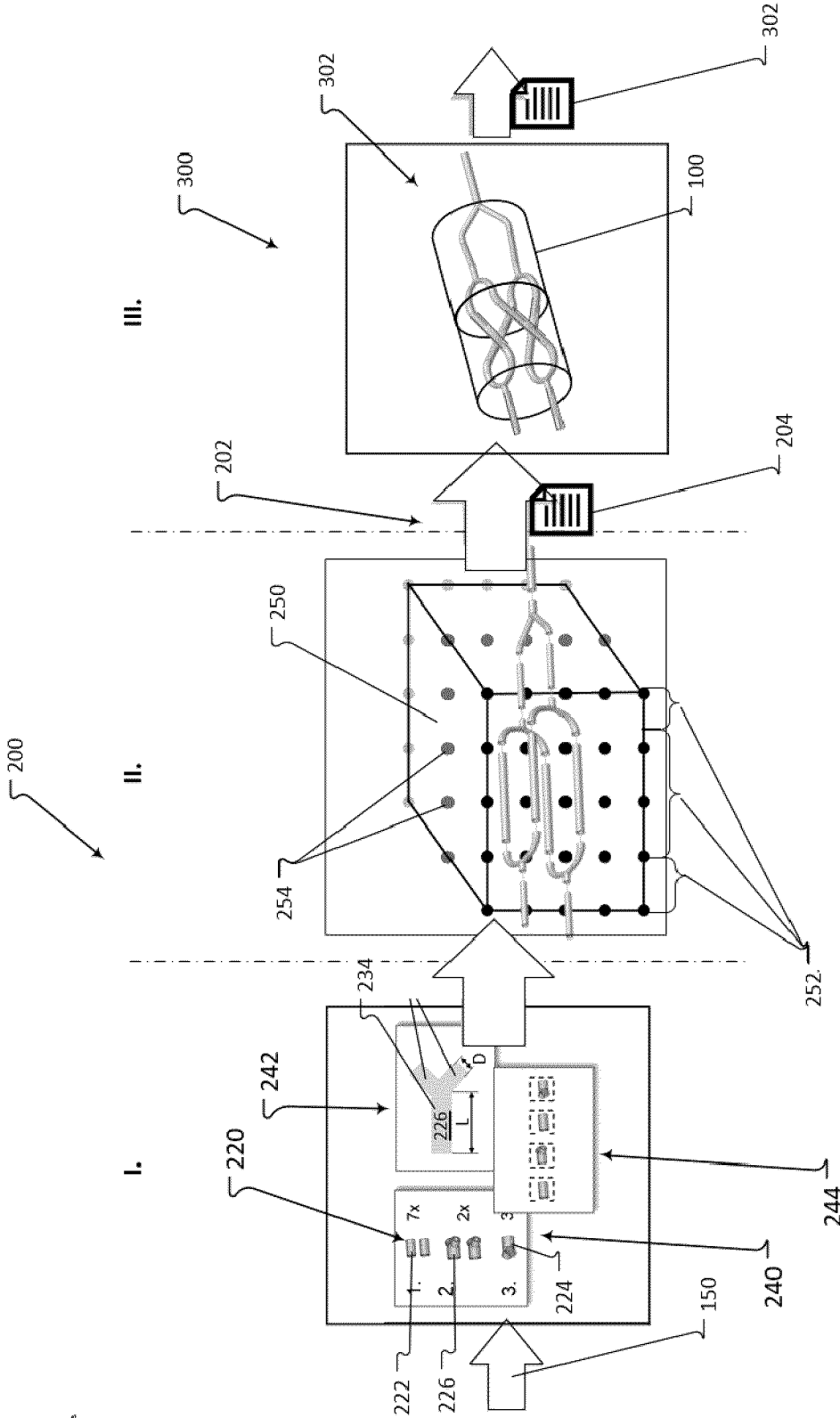
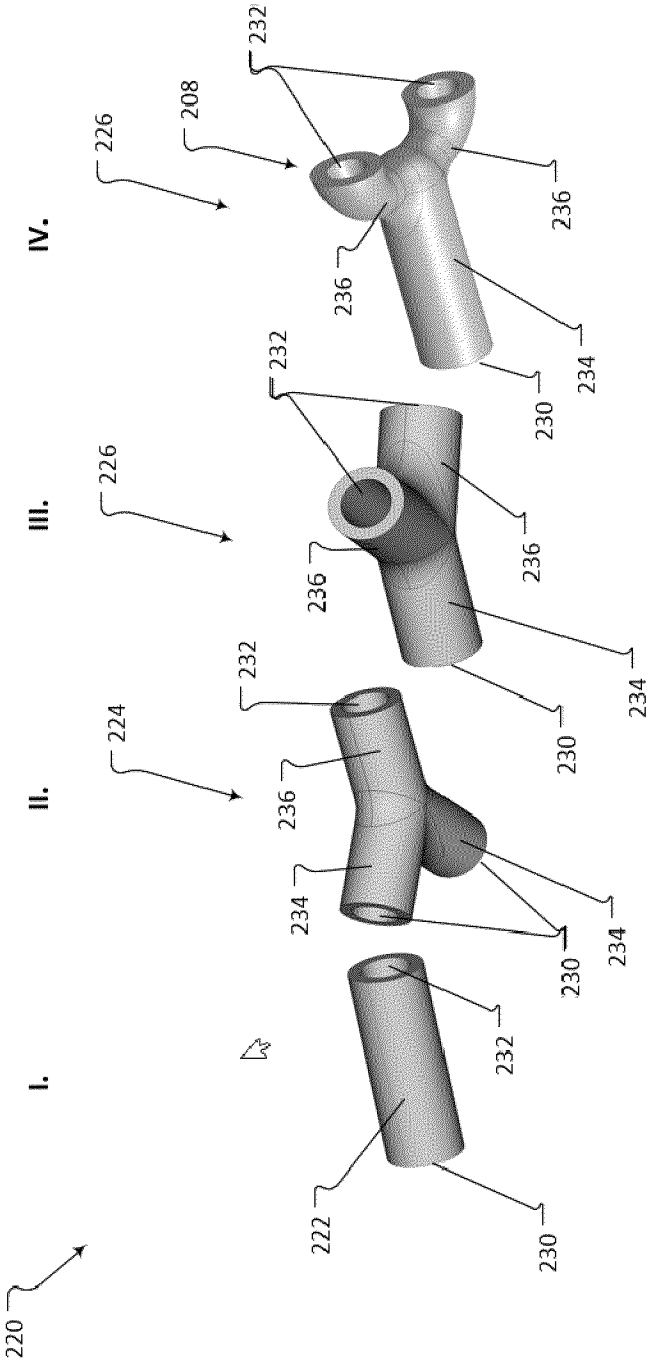


Fig. 4



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/EP2024/065260

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>G06F 30/23</i> (2020.01)i; <i>B33Y 50/00</i> (2015.01)i; <i>G05B 19/4099</i> (2006.01)i; <i>G06F 111/06</i> (2020.01)n; <i>G06F 111/20</i> (2020.01)n; <i>G06F 113/08</i> (2020.01)n; <i>G06F 113/10</i> (2020.01)n; <i>G06F 113/14</i> (2020.01)n According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G06F; B33Y; G05B Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	DE 102015115409 A1 (CHOREN IND GMBH [DE]) 12 January 2017 (2017-01-12) claims 1,2,3,4,5 paragraphs [0006] - [0007], [0010], [0032], [0017], [0012], [0027], [0028], [0032], [0048] - [0049], [0054], [0057] paragraphs [0033], [0035], [0039] paragraphs [0024], [0032], [0033], [0051] the whole document	1-17
☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 23 August 2024		Date of mailing of the international search report 03 September 2024
Name and mailing address of the ISA/EP European Patent Office p.b. 5818, Patentlaan 2, 2280 HV Rijswijk Netherlands (Kingdom of the) Telephone No. (+31-70)340-2040 Facsimile No. (+31-70)340-3016		Authorized officer Dapp, Wolfgang Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No.

PCT/EP2024/065260

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
DE	102015115409	A1	12 January 2017	CN	106339522	A	18 January 2017
				DE	102015115409	A1	12 January 2017

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

INV. G06F30/23 B33Y50/00 G05B19/4099
ADD. G06F111/06 G06F111/20 G06F113/08 G06F113/10 G06F113/14

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
G06F B33Y G05B

Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	DE 10 2015 115409 A1 (CHOREN IND GMBH [DE]) 12. Januar 2017 (2017-01-12) Ansprüche 1,2,3,4,5 Absätze [0006] - [0007], [0010], [0032], [0017], [0012], [0027], [0028], [0032], [0048] - [0049], [0054], [0057] Absätze [0033], [0035], [0039] Absätze [0024], [0032], [0033], [0051] das ganze Dokument -----	1 - 17

☐ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen ☒ Siehe Anhang Patentfamilie

- * Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

"E" frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist
- "T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung:: die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung:: die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche 23. August 2024	Absendedatum des internationalen Recherchenberichts 03/09/2024
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Bevollmächtigter Bediensteter Dapp, Wolfgang

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

PCT/EP2024/065260

Formblatt PCT/ISA/210 (Anhang Patentfamilie) (April 2005)