

# Simulation und virtuelles Design von Filtermedien und Filterelementen

---

Stefan Rief, Oleg Iliev, Dirk Kehrwald, Arnulf Latz, Konrad Steiner, Andreas Wiegmann

## Abstract

In search of optimum filter performance, computer simulation has turned out to be an effective tool to answer complex design questions of filter media and filter elements. Therefore, at the Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM) a comprehensive simulation approach is pursued. This approach covers the virtual generation of geometries as well as the development of simulation tools for fluid flow and particle transport inside the filters. In the following, we will present in detail the current methods for filter simulation and point out the possibilities and the potential of the approach by real examples.

## Zusammenfassung

Im Streben nach optimaler Filterleistung zeigt sich die Computersimulation mehr und mehr als ein erfolgreiches Mittel, komplexe Designfragen von Filtermedien und Filterelementen zu beantworten. Am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) wird deshalb ein ganzheitlicher Simulationsansatz verfolgt, der beginnend bei der virtuellen Geometriegenerierung bis hin zur Entwicklung von Simulationswerkzeugen für Strömung und Partikeltransport in Filtern reicht. Nachfolgend werden wir die entwickelten Methoden zur Filtersimulation im Detail vorstellen und an Beispielen aus der Praxis die Möglichkeiten und das Potential des Ansatzes verdeutlichen.

## 1. Einleitung

Filtration spielt in vielen Bereichen des täglichen Lebens eine entscheidende Rolle. Sei es nun als Kaffeefilter, in Klimaanlage oder zur Luftreinhaltung von Operationsälen – Filter verrichten überall ihren Dienst. In der technischen Anwendung und in der industriellen Fertigung sind sie unabkömmlich. Reinraumatmosphäre, Abgasreinigung, Filtration von Blut und Fruchtsäften seien hier als Stichworte genannt. Im Automobilbau nehmen Filter eine exponierte Stellung ein. Rußpartikelfilter sind seit Jahren im Blickpunkt des Interesses. Auch sind Motorzulufte und die Reinigung der Ölkreisläufe aus Sicht des Herstellers aktuelle Themen. Für den Autofahrer unmittelbar am wichtigsten ist die Reinhaltung des Fahrzeuginnenraums durch Geruchs- und Pollenfilter.

Die Anforderungen an den Filter sind vielfältig und teilweise konträr. Neben einer hohen und möglichst langen Abscheideleistung soll der Druckabfall gering sein. Im Fahrzeugbau ist die Einhaltung des zur Verfügung stehenden Bauraums sehr wichtig. Den strengen Anforderungen steht eine Vielzahl von Möglichkeiten gegenüber, Filtermedium und Filterelement zu designen. Dies ist umso problematischer, als die Auswirkungen des Designs auf die Filtereigenschaften oft nicht in hinreichender Genauigkeit im Voraus bekannt sind. Die Herstellung und experimentelle Untersuchung von Prototypen kann aus diesen Gründen langwierig und teuer sein.

Mit den Zielen, Designzyklen zu verkürzen und Kosten zu reduzieren, werden am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) seit Jahren Simulationsmethoden und Softwaretools entwickelt, mit denen virtuelles Materialdesign möglich ist (s. [3], [10]). Unter dem Schlagwort *Mikrostruktursimulation* werden virtuelle Geometriemodelle für Nonwovens, Gewebe, Sinterstrukturen, Schäume und Membranen entwickelt, deren typische Längenskalen im Mikrometerbereich liegen und auch vom Computermodell aufgelöst werden. Wählt man nun einen repräsentativ großen Ausschnitt aus dem Medium, werden mit Hilfe von Computerprogrammen zur Strömungsberechnung effektive Eigenschaften wie Permeabilitäten und Strömungswiderstände bestimmt. In Kombination mit einem Code zur Partikelsimulation werden Anfangsabscheidegrade und komplette Filterstandzeiten berechnet. Ein zweiter Ansatz wird mit der Makrosimulation von Filtern verfolgt. Hier wird das poröse Filtermedium nicht mehr mikrostrukturell aufgelöst, sondern in den Gleichungen und Programmen mit Effektiveneigenschaften, wie z.B. dem Strömungswiderstand, berücksichtigt. Diese Effektiveneigenschaften können zum einem aus der Mikrostruktursimulation kommen, aber auch durch Experimente gegeben sein. Mit Hilfe der Makrosimulation sind aufgrund des vereinfachten Ansatzes ganze Filterelemente berechenbar. Abschließend sei bemerkt, dass anstelle der virtuellen Geometriemodelle auch Geometrien auf Basis von CAD-Daten oder Computertomographien für die Simulation benutzt werden können.

In Abschnitt 2 und 3 werden die Methoden der virtuellen Geometriegenerierung und Simulationstechnik detailliert beschrieben und anhand von Beispielen aus der Praxis das Potential des Ansatzes verdeutlicht. Schließlich geben wir einen Ausblick auf unsere eigenen Arbeiten und die Filtersimulation im Allgemeinen.

## 2. Virtuelle Filtergeometrien

Ausgangspunkt einer jeden Filtersimulation ist ein realistisches dreidimensionales Computermodell der zu simulierenden Struktur. Besonders im Hinblick auf Materialdesign ist die Möglichkeit der ausschließlich computerbasierten Generierung von Filtermedien ein besonders wichtiger Punkt. Nichtsdestotrotz sind die aufsetzenden Simulationsprogramme in der Lage, direkt auf CAD-Daten oder Computertomographien zu rechnen. Diese Flexibilität wird durch ein gleichmäßiges Würfelgitter erreicht, welches typischerweise eine Größe zwischen 1 bis 100 Millionen Zellen besitzt.

Bei der Simulation von Filtermedien hat man es zumeist mit synthetischen Nonwovens, Geweben oder Sinterstrukturen zu tun. In Bild 2.1 und 2.2 sind typische Beispiele von generierten Strukturen dargestellt. Alle Geometrien sind mit dem am Fraunhofer ITWM entwickelten Strukturgenerator **GeoDict** [15] erzeugt. Nachfolgend werden die Methoden der Strukturgenierung am Beispiel von virtuellen Nonwovens, Geweben und Sinterstrukturen vorgestellt. Abschnitt 2 schließt mit Bemerkungen zu Vergleichsmöglichkeiten von realen und virtuellen Strukturen.

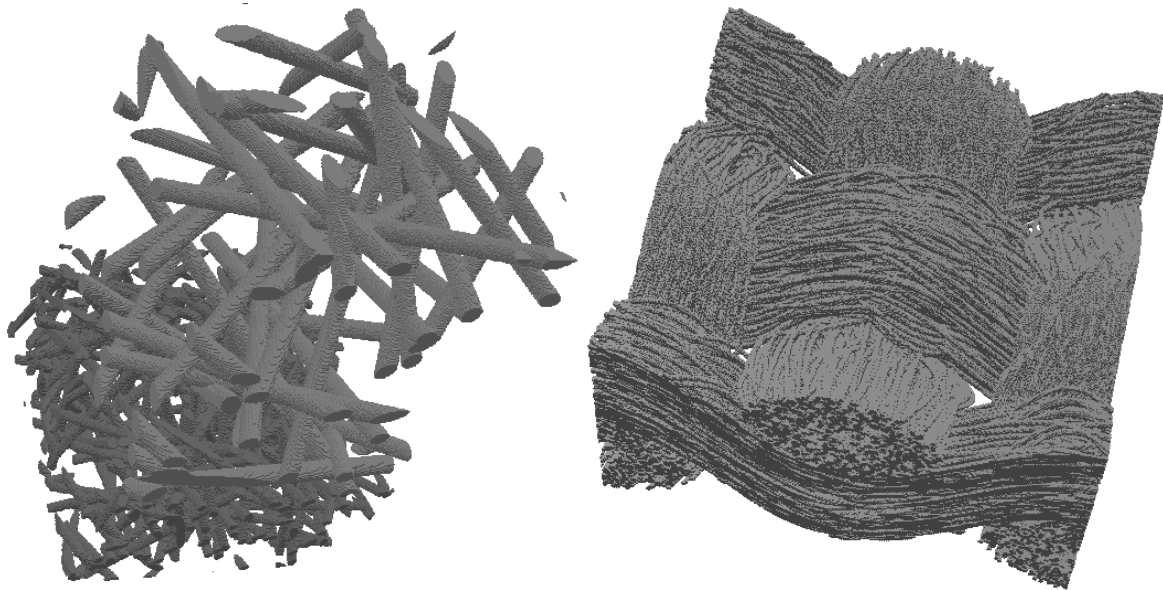


Bild 2.1: Virtuelle Strukturen: Nonwoven mit Gradientenstruktur (links) und Gewebe mit Leinwandbindung (rechts)

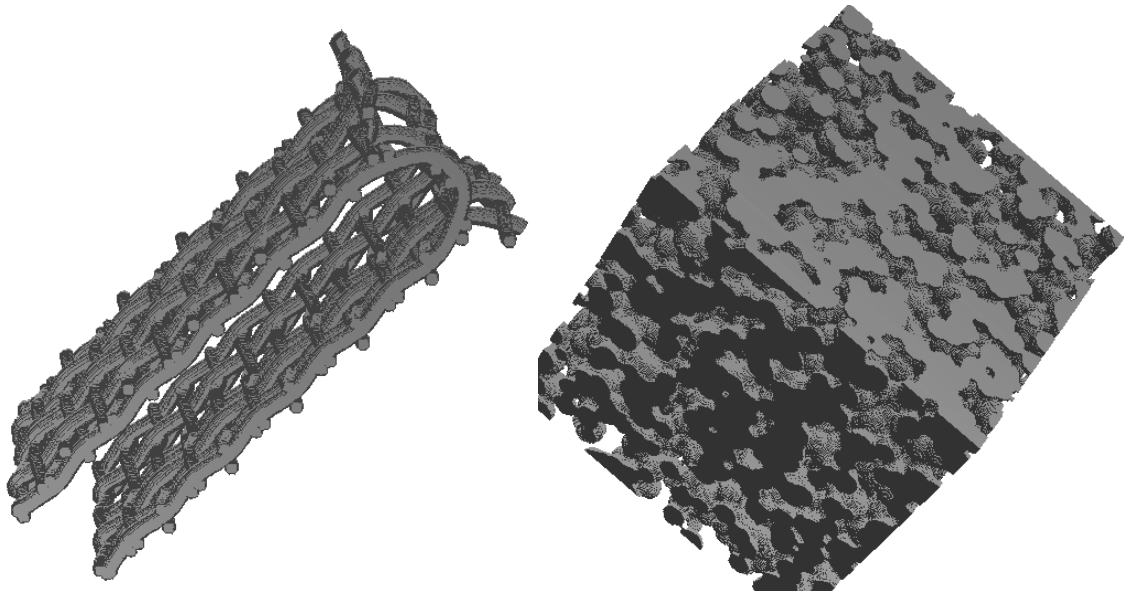


Bild 2.2: Virtuelle Strukturen: Drahtgewebe (links) und Sinterkeramik (rechts)

## 2.1 Virtuelle Nonwoven

Grundlage der virtuellen Erzeugung eines Nonwoven ist ein stochastischer Fasergenerator [11], der mit einer Vielzahl praxisrelevanter Parameter gesteuert wird. Einstellbar sind die Porosität bzw. der Faseranteil der resultierenden Struktur, Fasermaterialien, Faserlängen, Faserquerschnitte, Fasermischungsverhältnisse und die Faserorientierung. Die Faserorientierung kann beispielsweise benutzt werden, um eine durch den Herstellungsprozess bedingte Ausrichtung der Fasern in einer Ebene nachzustellen. Spezifiziert werden muss schließlich noch eine repräsentative Gesamtgröße der Geometrie. *Repräsentativ* bedeutet, dass die auf der Geometrie berechneten Eigenschaften keine signifikanten Änderungen mehr erfahren, auch wenn man die Geometrie vergrößert. Die in Bild 2.1. gezeigten Geometrien sind beispielsweise für den Strömungswiderstand als repräsentativ zu sehen. Bei der Simulation

von Filtermedien bedeutet repräsentativ häufig, dass man das Medium in der Durchströmungsrichtung voll auflöst und lateral einen hinreichend großen Ausschnitt wählt. Die Größenordnung der benötigten Würfelgitter lässt sich anhand eines Beispiels abschätzen: Gegeben sei ein Filtermedium mit 1.5 mm Dicke und feinsten Fasern von 20  $\mu\text{m}$  Durchmesser. Für eine aussagefähige Strömungssimulation sollte der Faserdurchmesser mit mindestens 4 Würfeln aufgelöst sein. Man benötigt somit Würfel mit 5  $\mu\text{m}$  Kantenlänge, also 300 Würfel in Strömungsrichtung. Bei ähnlicher lateraler Größe kommt man mit Ein- und Ausströmgebieten auf die eingangs bereits erwähnten mehrere Millionen Zellen umfassenden Gitter.

Nach Spezifikation der Eingabeparameter werden mittels mehrerer Zufallsprozesse die Faserparameter ausgewählt. Konkret werden ein Punkt und die Richtung der Faser bestimmt und anschließend die Faser entsprechend ihrer weiteren Parameter in das Würfelgitter eingetragen. Dies geschieht solange, bis der spezifizierte Faseranteil erreicht ist. Kann der Faseranteil innerhalb einer einstellbaren Toleranz nicht erzielt werden, startet der Fasergenerator mit geänderter Initialisierung der Zufallsgeneratoren erneut. Die Algorithmen sind so konstruiert, dass Fasermischungsverhältnisse und Faserorientierung entsprechend der Spezifikation in der resultierenden Geometrie wieder zu finden sind. Da mittels eines Computers nur Pseudozufallsprozesse abgebildet werden können, ist durch entsprechend vorgebbare Initialisierung der Zufallsgeneratoren auch die Reproduzierbarkeit der Struktur gegeben.

## **2.2 Virtuelle Gewebe**

Die im Vergleich zu den Nonwoven regelmäßigeren Gewebe erfordern die Vorgabe von deterministischen Regeln, nach denen sie generiert werden. Ist eine repräsentative Größe gewählt, muss die Anzahl und Lage von Kett- und Schussfäden und damit die Bindungsart vorgegeben werden. In Bild 2.1 ist rechts die virtuelle Struktur einer Leinwandbindung zu sehen. Weiterhin ist hier ein Garn modelliert, welches aus einer Vielzahl von Einzelfasern besteht. Schaut man genau hin, ist auch eine gewisse Zufälligkeit der Einzelfaserlagen zu erkennen. Die Berücksichtigung solcher herstellungsbedingter Unregelmäßigkeiten ist für die Generierung realistisch aussehender Strukturen mit entsprechenden Materialeigenschaften entscheidend.

## **2.3 Virtuelle Sinterstrukturen**

Die Generierung von Sinterstrukturen erfolgt in zwei Schritten: Mit Hilfe des stochastischen Fasergenerators (s. Abschnitt 2.1) werden Zylinder- und Kugelpackungen mit gewünschter Porosität erzeugt. Die Kugeln entstehen dabei als Fasern der Länge Null mit abgerundeten Faserenden. Im zweiten Schritt kommen dann so genannte morphologische Operationen [11] zum Einsatz. Dabei werden mittels Dilatation (=Ausdehnung) und anschließender Erosion (=Schrumpfung) die Sinterhalse zwischen den einzelnen Körnern in die Struktur eingebracht. Da die Vorgehensweise zumindest aus geometrischer Sicht dem Sinterprozess ähnlich ist, hat es sich bei der Nachstellung realer Sintermaterialien als günstig herausgestellt, sich bei der Wahl der Zylinder und Kugeln an Form und Größe der Sinterkörner zu orientieren.

## 2.4 Geometrien mit effektiver Mikrostruktur

Beim Übergang der Simulation von Filtermedien zu der Betrachtung von Filterelementen vergrößert sich die zu simulierende Geometrie typischerweise um ein oder zwei Größenordnungen. In diesem Fall ist es sehr aufwendig, mit der voll aufgelösten Mikrostruktur zu arbeiten. Bei vielen Fragestellungen rund um den Filter ist zudem die Mikrostruktur gar nicht von Interesse. Als Beispiel sei die Frage nach dem Strömungswiderstand eines Filterelements angeführt, wenn der Strömungswiderstand des Filtermediums, aus dem es besteht, bekannt ist. In diesen Fällen reicht es aus, eine effektive Mikrostruktur zu generieren. *Effektiv* bedeutet, dass nur die makroskopische Lage des Filtermediums in das Würfelgitter eingetragen und nicht mehr die Mikrostruktur aufgelöst wird. Beispielsweise könnte man die linke Struktur in Bild 2.2 als metallisches Stützgewebe mit Drahtstärken im Bereich von 0.5 mm interpretieren und sich leicht eine Filteranwendung überlegen, in der ein Vlies dem Lauf der Falten folgt.

## 2.5 Komplexe Geometrien

Die in den Abschnitten 2.1 bis 2.4 beschriebenen Verfahren zur Generierung von virtuellen Strukturen können als elementare Bausteine für noch komplexere Geometrien verstanden werden. Durch den generischen Ansatz des Würfelgitters sind Schichtungen von Nonwovens zur Erzeugung von Gradientenmedien problemlos machbar (vgl. Bild 2.1, links). Ein weiteres Beispiel für eine komplexe Geometrie ist ein Nonwoven mit eingebrachtem Binder (Bild 2.3). Auch diese Struktur entsteht durch Anwendung der Morphologie.

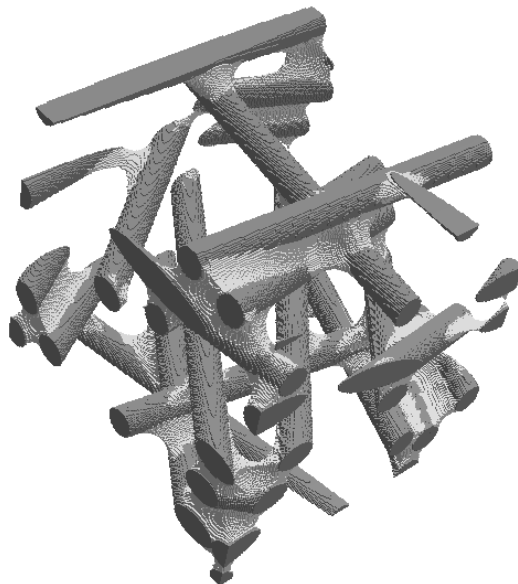


Bild 2.3: Virtuelles Nonwoven mit eingebrachtem Binder

Gerade im Hinblick auf das virtuelle Materialdesign sei auf eine weitere interessante Möglichkeit hingewiesen: Computertomographien realer Materialien sind typischerweise auf einem Würfelgitter gegeben. Besitzt nun ein reales Medium mehrere Lagen, kann man eine davon durch eine virtuelle Lage ersetzen und so per Simulation die Auswirkungen studieren. Die Möglichkeiten sind hier extrem vielfältig.

## 2.6 Vergleichsmöglichkeiten von realen und virtuellen Strukturen

Virtuelle Strukturen, die mit dem Ziel, reale Strukturen nachzubilden, generiert werden, sind am besten zu beurteilen, wenn man ein reales Pendant mittels 2D oder 3D Bildgebendem Verfahren vergleichend dagegen halten kann. Der Vergleich ist notwendig, da die Eingabeparameter für die Strukturgenerierung teilweise nur mittelbar auf gewünschte Eigenschaften der Struktur Einfluss nehmen. So kann man beispielsweise die Porosität eines Nonwovens direkt eingeben und der Algorithmus stellt sicher, dass die Struktur diese Porosität innerhalb einer ebenfalls einstellbaren Toleranzgrenze erfüllt. Anders sieht es mit Parametern wie Sehnenlängen- oder Porengrößenverteilungen, spezifischen Oberflächen oder Faserorientierung aus. Mittels Bildanalyseverfahren lassen sich diese Eigenschaften aber an der realen und der virtuellen Struktur finden und vergleichen. Häufig kommt es dabei vor, dass man zwar viele geometrische Eigenschaften schon erfüllt hat, einige wenige aber noch verbesserbar sind. Aufgrund der Echtzeitgenerierung der virtuellen Strukturen hat man typischerweise nach wenigen Iterationen und damit kurzer Zeit eine gute Übereinstimmung mit der realen Struktur gefunden.

Nach der geometrischen Analyse der virtuellen Strukturen kommt im nächsten Schritt häufig ein messtechnischer Vergleich von Strömungswiderständen. Dies zählt in der Industrie zu einem Standardmessverfahren und ist auch simulationstechnisch an zahlreichen Beispielen validiert, so dass man bei korrekter Geometriegenerierung mit Abweichungen in den Strömungswiderständen unter zehn Prozent rechnen kann. Oft wird dieser Wert noch unterschritten.

## 3. Filtersimulation

Die Fragestellungen im Bereich der Filtration sind vielfältig. Sie reichen von der Lösung reiner Strömungsprobleme über die Bestimmung initialer Fraktionsabscheidegrade bis hin zur kompletten Standzeitsimulation eines Filters.

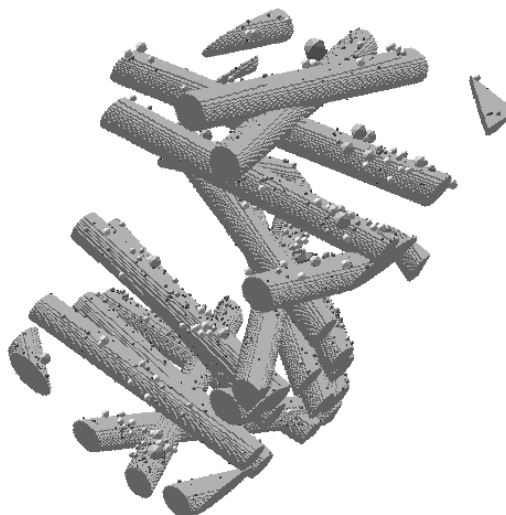


Bild 3.1: Simulation eines bestaubten Fasermediums

Am Fraunhofer ITWM stehen deshalb die Strömungsberechnung, die Berechnung der Partikelbahnen durch den Filter sowie die Behandlung von Kollision und Partikeldeposition im Fokus der Entwicklung. In Luftfiltern spielen darüber hinaus elektrosta-

tische Effekte häufig eine wichtige Rolle. Wir werden hierauf aus Platzgründen nur wenig eingehen und verweisen stattdessen auf [12], [14] sowie auf Abschnitt 4. Nachfolgend werden die aktuell entwickelten Methoden und einsatzbereiten Softwaretools **GeoDict** [15] und **SuFIS** [7] beschrieben.

### 3.1 Simulation der Strömung

Für langsame Strömungen, wie sie für die meisten Filteranwendungen typisch sind, eignen sich Strömungslöser auf Basis der Stokes-Gleichungen. Dieses Gleichungssystem beschreibt die Strömung eines rein viskosen, inkompressiblen Fluids unter Vernachlässigung der Trägheit. In Gestalt je einer Erhaltungsgleichung für den Impuls und die Masse sind sie nachfolgend in der Geschwindigkeits-Druck-Formulierung notiert:

$$-\mu\Delta\vec{u} + \nabla p = \vec{f}, \text{ (Impulserhaltung)} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \text{ (Massenerhaltung)} \quad (2)$$

+ Randbedingungen.

In Gleichung (1) und (2) bezeichnet  $\vec{u}$  die Geschwindigkeit,  $p$  ist der Druck und  $\vec{f}$  die Kraftdichte. In der Praxis müssen für die Lösbarkeit des Gleichungssystems noch Randbedingungen spezifiziert werden, die beispielsweise durch Ein- und Ausströmbedingungen gegeben sind. Zur Lösung der Stokes-Gleichungen sind zwei Implementierungen vorhanden. Der erste Löser basiert auf einem Lattice-Boltzmann-Verfahren [4]. Der zweite Ansatz ist eine Finite-Differenzen-Diskretisierung in Kombination mit der schnellen Fourier-Transformation [13].

Ist die Trägheit für die Strömung relevant, z.B. im Fall schneller Strömung, benutzt man die Navier-Stokes-Gleichungen. Sie besitzen im Vergleich zu den Stokes-Gleichungen einen zusätzlichen konvektiven Term in der Impulserhaltungsgleichung:

$$-\mu\Delta\vec{u} + (\rho\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} + \nabla p = \vec{f}, \text{ (Impulserhaltung)} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \text{ (Massenerhaltung)} \quad (4)$$

+ Randbedingungen.

In Gleichung (3) bezeichnet  $\rho$  die Dichte des Fluids. Auch für diesen Gleichungstyp sind zwei Computercodes vorhanden. Zum einen kann der schon im Stokes-Fall benutzte Lattice-Boltzmann-Code [4] im Navier-Stokes-Modus eingesetzt werden. Darüber hinaus wurde im Rahmen der Dissertation von V. Laptev [8] ein Finite-Volumen-Code entwickelt.

Für die Kopplung von freien Strömungen mit Strömungen in porösen Medien wird eine Navier-Stokes-Brinkmann-Gleichung verwendet:

$$-\mu\Delta\vec{u} + (\rho\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} + \mu K^{-1}\vec{u} + \nabla p = \vec{f}, \text{ (Impulserhaltung)} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \text{ (Massenerhaltung)} \quad (6)$$

+ Randbedingungen.

$K^{-1}$  ist hier der Kehrwert der Permeabilität (=Strömungswiderstand). Im freien Gebiet ist dieser Wert Null, so dass Gleichung (5) auf Gleichung (3) reduziert wird. Im porö-

sen Medium ist  $K^{-1}$  typischerweise relativ groß und die Geschwindigkeit  $\vec{u}$  klein. Die ersten zwei Terme in Gleichung (5) können vernachlässigt werden und wir erhalten mit guter Näherung die Darcy-Gleichung:

$$\vec{u} = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \vec{f}). \quad (7)$$

Das Gesetz von Darcy beschreibt die Proportionalität zwischen Geschwindigkeit und Druckabfall in porösen Medien und wurde 1856 experimentell gefunden (vgl. [2]). Es ist auch mittels mathematischer Homogenisierungsverfahren theoretisch herleitbar (s. [1], [5]). Durch Kombination der Gleichungen für eine freie und eine poröse Strömung sind nun genau Simulationen von Filtern mit effektiver Mikrostruktur (s. Abschnitt 2.4) oder Subgitter-Modellierung von beispielsweise Ruß (s. Abschnitt 3.3) möglich. Beide Codes zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen kommen in entsprechend modifizierter Form zum Einsatz.

### 3.2 Simulation der initialen Filtereffizienz – Partikeltransport und Anlagerung

Zur Bestimmung der initialen Filtereffizienz wird in einer modellierten oder tomographierten Filtergeometrie die Fluidströmung berechnet. Dies geschieht nach der Bestimmung des Strömungsregimes entsprechend der Beschreibung des vorangehenden Abschnitts. Anschließend beginnt die eigentliche Partikelsimulation. Dabei werden unter den Annahmen einer niedrigen Partikelkonzentration und einer rückwirkungsfreien Partikelbewegung sphärische Teilchen in einem zu definierenden Einströmgebiet zufällig platziert. Die Partikelgrößenverteilung wird ebenfalls in Form einer Wahrscheinlichkeitsverteilung vorgegeben. In Bezug auf eine statistisch stabile Auswertung muss für die Berechnung von Filtereffizienzen eine hinreichend große Anzahl von Partikeln gewählt werden. Erfahrungswerte liegen hier im Bereich von einigen Tausend Partikeln.

Der Partikeltransport erfolgt entsprechend dem Zweiten Newtonschen Gesetz:

$$\vec{F} = m\vec{a}, \quad (8)$$

wobei  $\vec{F}$  die Kraft auf das Teilchen,  $m$  seine Masse und  $\vec{a}$  die resultierende Beschleunigung des Partikels bezeichnet.

Das Teilchen bewegt sich unter dem Einfluss seiner eigenen Trägheit, der Reibung mit dem Fluid sowie diffusiv als Folge der Brownschen Bewegung. Des Weiteren kann eine elektrostatische Anziehung oder Abstoßung die Partikelbahn beeinflussen. Abgesehen von der Massenträgheit, die Gleichung (8) inhärent ist, werden die aufgeführten Effekte als sich überlagernde Kraftkomponenten betrachtet. Gleichung (8) geht dabei in Gleichung (9) über und bildet mit Gleichung (10) ein stochastisches gewöhnliches Differentialgleichungssystem für die Bewegung eines Partikels:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma(\vec{v}(\vec{x}(t)) - \vec{u}(\vec{x}(t))) + \sigma \frac{d\vec{W}(t)}{dt} + \frac{q\vec{E}(\vec{x}(t))}{m}, \quad (9)$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}. \quad (10)$$



Dabei bezeichnet  $t$  die Zeit,  $\vec{x}$  den Ort und  $\vec{v}$  die Geschwindigkeit des Partikels. Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (9) beschreibt mit  $\gamma$  als Reibungskoeffizient die Reibungskraft, die proportional zur Differenzgeschwindigkeit des Partikels und des ihn umgebenden Fluids ist. Der Koeffizient  $\gamma$  nimmt für langsam umströmte, kugelförmige Partikel den Wert aus Gleichung (11) an:

$$\gamma = \frac{6\pi\mu R}{m}. \quad (\text{Stokes-Reibung}) \quad (11)$$

$R$  steht hier für den Partikelradius. Der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung (9) steht für den Einfluss der Brownschen Bewegung, beschrieben durch einen dreidimensionalen Wiener-Prozess  $\vec{W}$ . Ist  $T$  die Temperatur und  $k_B$  die Boltzmann-Konstante gilt nach dem Fluktuations-Dissipations-Theorem:

$$\sigma^2 = \frac{2k_B\gamma T}{m}. \quad (12)$$

Der dritte Term in Gleichung (9) beschreibt den Einfluss des elektrostatischen Feldes  $\vec{E}$  auf die Partikelbahn;  $q$  steht dabei für die Ladung des Partikels. Für weitere Details der Modellierung verweisen wir auf [9], [14]. Das Gleichungssystem (9) und (10) wird mittels eines impliziten Euler-Verfahrens zeitdiskret gelöst.

Neben der Partikelbewegung spielt das Anlagerungsmodell eine entscheidende Rolle. Algorithmisch ist für die Berechnung der initialen Abscheidegrade eine Kollisionsdetektion notwendig. Es wird also in jedem Zeitschritt kontrolliert, ob eine Kollision der Oberfläche des Partikels mit der Geometrie stattgefunden hat. Im Falle einer Kollision wird das Partikel als angelagert protokolliert, ansonsten setzt es seine Bahn fort. Nach Beendigung des Simulationslaufs werden die initialen Abscheidegrade als Verhältnis der Anzahl der angelagerten Partikel zu der Anzahl der aufgegebenen Partikel bestimmt. Dies geschieht also in völliger Analogie zu den Auswertungen am Versuchsstand. Die Auswertung ist auch partikelgrößenabhängig durchführbar (s. Bild 3.2).

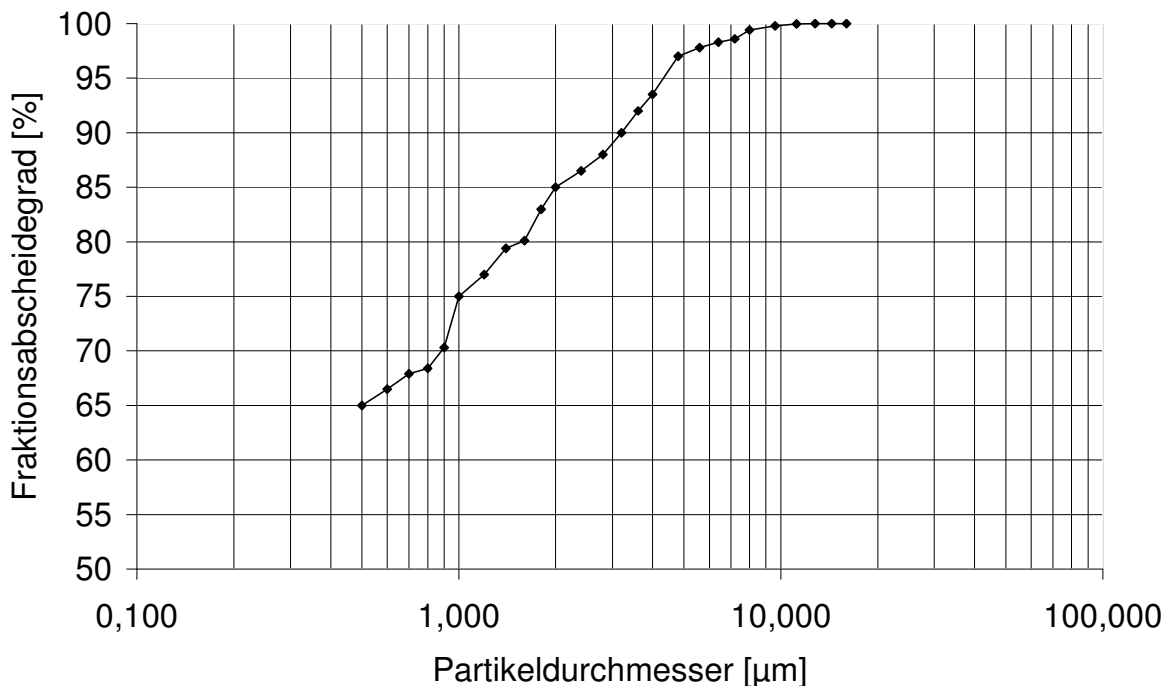


Bild 3.2: Simulation der initialen Filtereffizienz eines Gradientenfiltermediums

Darüber hinaus bietet die Simulation Einblicke, die experimentell nur schwer zu gewinnen sind. So kann beispielsweise eine Statistik erstellt werden, wo und in welcher Menge Partikel einer gewissen Größe im Filtermedium abgeschieden wurden (s. Bild 3.3). Bemerkungen zu Erweiterungen des Anlagerungsmodells folgen in Abschnitt 4.

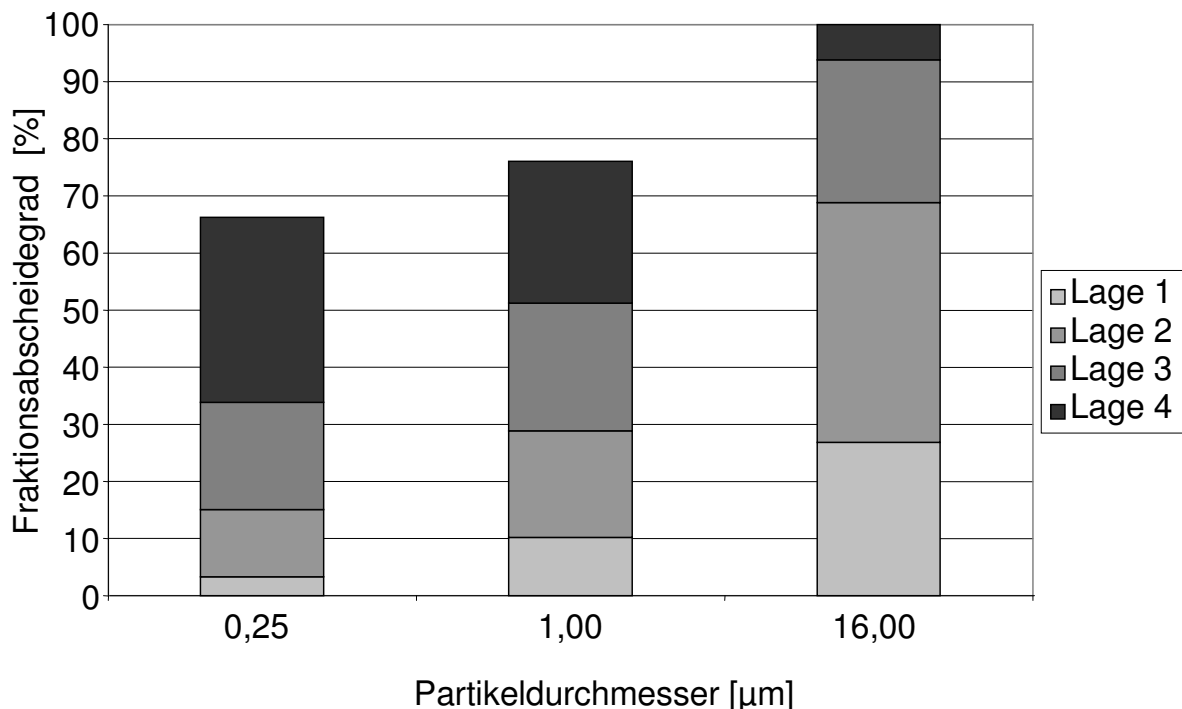


Bild 3.3: Kumulativer Fraktionsabscheidegrade für drei Partikelfractionen bzgl. der vier Lagen eines Gradientenfiltermediums; Faserdurchmesser von Lage 1 zu Lage 4 abnehmend

### 3.3 Simulation der Filterstandzeit – Solide und poröse Anlagerungsart

Die Simulation der Filterstandzeit beruht auf der Iteration der in Abschnitt 3.2 vorgestellten Simulationsschritte, d.h. Strömungsberechnung und Partikeltransport. Im Gegensatz zur Simulation der initialen Fraktionsabscheidegrade muss zwischen den Iterationen die Filtergeometrie durch deponierte Partikel *modifiziert* werden. Im Modell besitzt dazu jeder Würfel des Gitters die Information über seinen aktuellen Füllgrad. Ist der Füllgrad gleich Null, befindet sich kein Partikel im Würfel. Ist der Füllgrad größer als Null, hat sich ein Teilchen ganz oder teilweise im Würfel angelagert. Es gibt nun zwei grundsätzlich verschiedene Arten, wie die Information über den Füllgrad nachfolgende Strömungs- und Partikelsimulationen beeinflusst. Wir nennen den ersten Modus die *solide Anlagerungsart*. Sie wird benutzt, wenn der typische Partikeldurchmesser größer oder gleich der Gitterweite ist. Erreicht der Füllgrad eines Würfels den Wert Eins, wird er auf *solide* geschaltet und wirkt forthin für den Strömungslöser als festes Hindernis analog der initialen Geometrie. Des Weiteren tritt dieser Würfel im Partikeltransport als Würfel auf, an dem deponiert werden kann. Die zweite und so genannte *poröse Anlagerungsart* findet Verwendung, wenn die Größenordnung der Partikel die Gitterweite deutlich unterschreitet. Angelagerte Partikel sind in diesem Fall durch das Gitter nicht mehr individuell darstellbar und werden als Beitrag zum Aufbau einer porösen Struktur betrachtet. Konkret wirkt ab einem gewissen Füllgrad der *poröse* Würfel auf die Strömung durch eine Permeabilität oder einen

Strömungswiderstand. Für die Strömungssimulation muss folglich der Navier-Stokes-Brinkmann-Ansatz (vgl. Gleichung (5) und (6)) gewählt werden. Die Behandlung poröser Würfel in der Partikelsimulation erfolgt analog der soliden Anlagerungsart mit dem Unterschied, dass der maximale Füllgrad typischerweise sehr viel kleiner als Eins ist. Ein entscheidender Punkt bei Standzeitsimulationen mit poröser Anlagerungsart ist die Wahl der Parameter, d.h. der maximale Füllgrad und die Permeabilität der sich aufbauenden porösen Struktur. Wie in Abschnitt 3.4 am Beispiel eines Rußpartikelfilters gezeigt wird, können Simulationen auf hinreichend kleiner Längenskala im soliden Anlagerungsmodus entsprechende Daten liefern. Die direkte Verwendung experimenteller Daten ist ebenfalls möglich.

### 3.4 Beispiel: Simulation eines Rußpartikelfilters

Am Beispiel der Simulation eines Rußpartikelfilters sollen die Simulationsmethoden nochmals verdeutlicht werden. Ziel ist die Berechnung des Gegendruckverhaltens des Filtermediums aus Bild 3.4 bei Rußbeladung. Die unbeladene (=hellgraue) Struktur besteht aus einem keramischen Substrat mit Faserauflage. Beide Geometrien sind virtuell mit den Methoden aus Abschnitt 2.1, 2.3 und 2.5 erzeugt. Die Auflösung beträgt  $1\ \mu\text{m}$ , die Gesamtgeometrie hat eine Gittergröße von  $150 \times 150 \times 650$  Würfeln und damit reale Abmessungen von  $150\ \mu\text{m} \times 150\ \mu\text{m} \times 650\ \mu\text{m}$ . Die virtuelle Struktur besitzt bzgl. Porosität und Sehnenlängenverteilung sehr ähnliche Eigenschaften wie das reale Medium, was durch Anpassung der Generierungsparameter und Abgleich mit REM-Aufnahmen innerhalb weniger Iterationen möglich ist. Neben der rein geometrischen Analyse wird der experimentell gemessene Gegendruck bis auf wenige Prozent Abweichung durch die Simulation bestätigt.

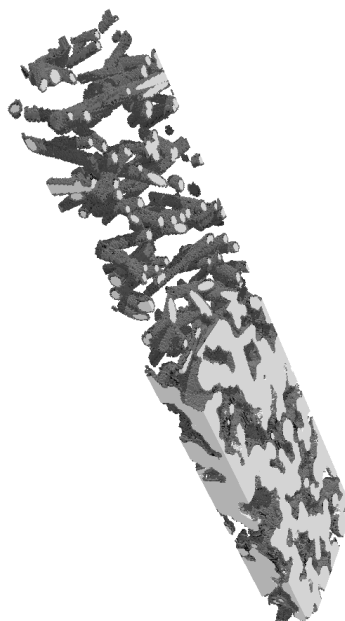


Bild 3.4: Simulierte Rußanlagerung in einem Partikelfilter

Der typische Rußpartikeldurchmesser liegt im Bereich von  $50 - 100\ \text{nm}$ , also weit unterhalb der Kantenlänge eines Würfels von  $1\ \mu\text{m}$ . Es kommt für die Simulation somit die Standzeitsimulation mit poröser Anlagerungsart zum Einsatz. Wie in Abschnitt 3.3 bereits erwähnt, stellt sich die Frage nach den Parametern des Subgitter-Modells. In unserem Beispiel werden zur Bestimmung des maximal möglichen Füllgrads und der Permeabilität hoch aufgelöste Einzelfasersimulationen durchgeführt (s. Bild 3.5).

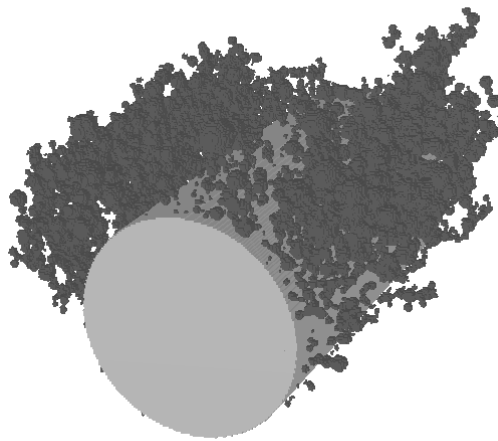


Bild 3.5: Simulierte Rußdeposition an einer Einzelfaser

Die Auflösung beträgt 10 nm und löst somit die Partikel hinreichend genau auf. Um in unserem bisherigen Sprachgebrauch zu bleiben, wird durch eine Standzeitsimulation mit solider Anlagerungsart der Aufbau der Rußschicht an der Einzelfaser nachgestellt. Hat sich eine hinreichend dicke Schicht aufgebaut, wird deren Porosität bestimmt und die Permeabilität durch eine Strömungssimulation berechnet. Im Beispiel liegt die Porosität bei ungefähr 15 %, die Permeabilität im Bereich von  $10^{-3}$  Darcy. Beide Parameter werden nun in der eigentlichen Standzeitsimulation eingesetzt. Das simulierte Gegendruckverhalten mit dem typischen S-förmigen Verlauf beim Übergang von Tiefen- zur Oberflächenfiltration deckt sich qualitativ sehr gut mit experimentellen Beobachtungen. Die Oberflächenfiltration findet in diesem Fall an der Oberfläche des Substrats statt.

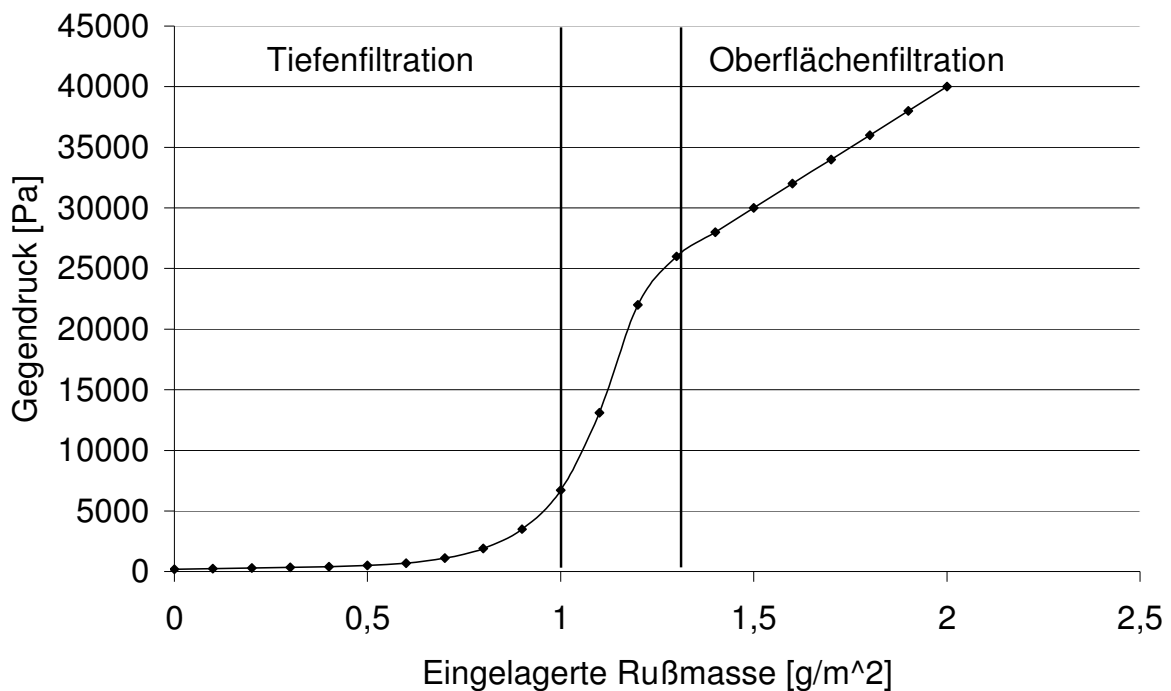


Bild 3.6: Typisches Gegendruckverhalten eines Partikelfilters

Abschließend sei zu diesem Beispiel bemerkt, dass eine Simulation des Substrats ohne Faserauflage einen schnelleren Übergang der Filtrationsregime aufzeigt. Das

Substrat alleine besitzt also einen schnelleren Gegendruckanstieg bei minimal geringem initialen Gegendruck bedingt durch die fehlenden Fasern. Damit ist das Design mit Faserauflage dem Design ohne Faserauflage vorzuziehen. Ein qualitativ gleiches Ergebnis liefert das Experiment.

### 3.5 Simulationstools: GeoDict und SuFiS

Die in Abschnitt 2 und 3.1 bis 3.3 beschriebenen Verfahren zur Simulation von Fragestellungen rund um den Bereich *Filter* finden Eingang in zwei Softwaretools des Fraunhofer ITWM. Das erste Tool mit der Bezeichnung **GeoDict** [15] ist ein modulares Softwarepaket zur Berechnung vieler Fragestellungen im Bereich Mikrostruktursimulation. Für die Filtration besonders von Bedeutung sind die Module zur Generierung und Bearbeitung von virtuellen und realen Geometriedatensätzen. Des Weiteren umfasst es Methoden zur Bestimmung von Porengrößenverteilungen, von absoluten und relativen Permeabilitäten, sowie von Strömungswiderständen, welche für die Bewertung und Validierung virtueller Strukturen eingesetzt werden können. Speziell für Filteranwendungen ist das Modul **FilterDict** konzipiert, welches alle vorgestellten Verfahren des Partikeltransports und der Partikelanlagerung beinhaltet und über eine graphische Benutzeroberfläche zur Verfügung stellt.

Das zweite Tool **SuFiS** (= Suction Filter Simulation) [7] ist spezialisiert auf die Berechnung von Ölströmungen durch gekoppelte freie und poröse Gebiete nach dem Navier-Stokes-Brinkmann-Ansatz (vgl. Gleichung (5) und (6)). Es umfasst eine CAD-Schnittstelle und kann als Auslegungstool für Filter nach Art des Getriebefilters in Bild 3.7 eingesetzt werden. Detaillierte Einsichten in Strömungsverhältnisse und Auswirkungen von Designänderungen, wie beispielsweise Verlagerung der Stützrippen für das Filtermedium, können studiert werden. Für weitere Details verweisen wir auf [6].

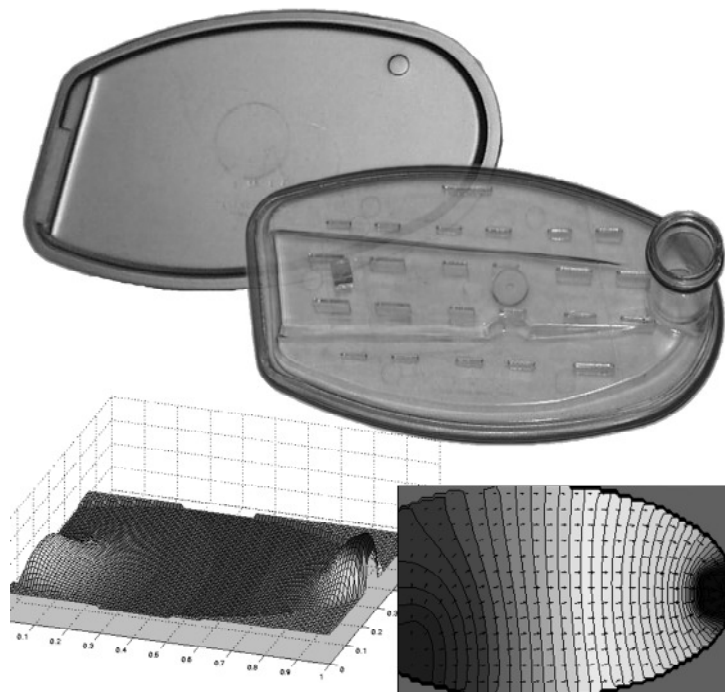


Bild 3.7: Simulation eines Saugfilters mit **SuFiS** – Filtergehäuse ohne Filtermedium (oben), simulierte Druck- und Geschwindigkeitsverteilung im Filtermedium (unten)

## 4. Gegenwart und Zukunft der Filtrationssimulation

Wie in den Abschnitten 2 und 3 dargestellt, ist schon heute in Sachen Filtrationssimulation vieles möglich. Mit den drei Grundbausteinen der virtuellen Generierung von Filtermedien und Filterelementen, der Strömungssimulation und der Simulation des Partikeltransports lassen sich Druckabfälle, Strömungswiderstände, Fraktionsabscheidegrade und komplette Standzeiten eines Filters berechnen. Die Simulation liefert dabei Daten, die direkt mit dem Experiment vergleichbar sind. Darüber hinaus bietet sie aber auch Einblicke, die heute mit dem Experiment nicht oder nur sehr aufwendig erzielt werden können. Am Fraunhofer ITWM wird weiterhin besonderer Wert gelegt, die Simulationsmöglichkeiten durch die Softwaretools **GeoDict** und **SuFiS** einem breiten Anwenderkreis zur Verfügung zu stellen.

Für die Zukunft haben wir zwei Entwicklungsaspekte im Auge: Zum einen die anwendungsbezogene Bereitstellung der Simulationsmethoden in Form von Softwaretools und zum anderen die Erweiterung der Modellierungsansätze. Unter den ersten Punkt fällt beispielsweise die Nachstellung standardisierter Prüfverfahren wie dies für Singlepass-Tests schon getan ist. Ein weiteres Beispiel ist die Partikelsimulation unter Berücksichtigung elektrostatischer Effekte. Dies ist zwar prinzipiell möglich, allerdings steht einer einfachen Anwendung die oft unklare Ladungsverteilung im Medium und auf den Partikeln entgegen. Hier fällt auch der Messtechnik eine entscheidende Rolle zu. Die Erweiterung der Modellierungsansätze konzentriert sich vor allem auf den Partikeltransport und das Anlagerungsverhalten. So sind Erweiterungen bzgl. beliebiger Partikelformen, Partikelspin, Partikel-Partikel-Wechselwirkungen, direktes Wiederablösen nach Kollision oder Wiederablösung bei Standzeitsimulationen durch massiv geänderte Strömungsverhältnisse im Fokus. Die Kopplung der Längenskalen und damit die Erweiterung der Subgitter-Modellierung, wie sie für poröse Rußanlagerung bereits vorhanden ist, werden zukünftig von eminenter Bedeutung sein. Es kommen in aktuellen Filtermedien immer häufiger Nanofasern zum Einsatz, dagegen steht die Anforderung, komplette Filter zu simulieren. Es sind damit Längenskalen zu überbrücken, die sich um  $10^9$  Größenordnungen unterscheiden. Mittelfristig sehen wir auch die Modellierung der Partikelrückwirkung auf das Fluid und Fluid-Struktur-Interaktion als praxisrelevante Themen an.

## Literatur

- [1] J. Bear: *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Elsevier, New York (1972).
- [2] H. Darcy: *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*, Dalmont, Paris, 1856.
- [3] Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), Kaiserslautern, Jahresberichte 2000 - 2005.
- [4] I. Ginzburg, P. Klein, C. Lojewski, D. Reinel-Bitzer, K. Steiner: *Parallele Partikelcodes für industrielle Anwendungen*, Verbundprojekt im Rahmen des HPSC, Abschlussbericht, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) Kaiserslautern, März 2001.
- [5] U. Hornung: *Homogenization and Porous Media*, Interdisciplinary Applied Mathematics Series, Springer-Verlag, New York, 1997.
- [6] O. Iliev, V. Laptev: *On Numerical Simulation of Flow through Oil Filters*, J. Computers and Visualization in Science, 6, S.139-146, 2004.
- [7] O. Iliev: *SuFiS – Suction Filter Simulation*, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), nach <http://www.itwm.fraunhofer.de>, (Abruf: 17.08.2006).

- [8] V. Laptev: *Numerical Solution of Coupled Flow in Plain and Porous Media*, Dissertation, Universität Kaiserslautern, 2004.
- [9] A. Latz: *Partikel- und Wärmetransport durch Strömungen in Mikrostrukturen*, 2. Bericht zum Projekt der Stiftung Rheinland-Pfalz für Innovation, 2003.
- [10] A. Latz und A. Wiegmann: *Filtermaterialdesign per Software*, Laboratory IT User Service, 1/04, 2004.
- [11] J. Ohser u. F. Mücklich: *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*, John Wiley & Sons, 2000.
- [12] S. Rief, A. Latz, A. Wiegmann: *Research Note: Computer Simulation of Air Filtration Including Electric Surface Charges in 3-Dimensional Fibrous Microstructures*, Filtration, Vol. 6, No. 2, 2006.
- [13] A. Wiegmann: *A Fast Fictitious Force 3D Stokes Solver*, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), Kaiserslautern, in Vorbereitung.
- [14] A. Wiegmann, A. Zemitis: *Electrostatic Fields for Filtration Simulations in Fibrous Air Filter Media*, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), Kaiserslautern, in Vorbereitung.
- [15] A. Wiegmann: *GeoDict*, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM), nach <http://www.geodict.com>, (Abruf: 17.08.2006).

## Autoren / The Authors

Dr. Stefan Rief, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

Dr. Dirk Kehrwald, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

Priv.-Doz. Dr. Oleg Iliev, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

Priv.-Doz. Dr. Arnulf Latz, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

Dr. Konrad Steiner, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

Dr. Andreas Wiegmann, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern