

# Simulation der Luftfiltration in Mikrostrukturen

Priv-Doz. Dr. Arnulf Latz und Dr. Andreas Wiegmann  
Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Kaiserslautern

## 1. Einleitung

Das Verständnis des Zusammenspiels von Mikrostruktur eines Filtermediums und der Funktionalität des resultierenden Filters (Druckabfall, Permeabilität, Filtereffizienz, Beladungskapazität) ist von großer praktischer Bedeutung. Es existiert eine extensive Literatur über Einzelfasertheorie sowie zu phänomenologischen Ansätzen, wie Eigenschaften des GesamtfILTERmediums zu berechnen sind [1,2,3,4]. In der Einzelfasertheorie können viele Eigenschaften analytisch ausgerechnet werden. Um Informationen über das gesamte Filterverhalten zu bekommen werden jedoch oft stark vereinfachende Annahmen gemacht, wie beispielsweise die Annahme vollkommen periodischer Strukturen. In den meisten Fällen sind die Mikrostrukturen realer Filtermedien jedoch sehr viel komplexer und die wirklich erreichten Filtereigenschaften können gerade von den extremen Abweichungen wie z.B. der inhomogenen Verteilung von Porositäten (Schichtaufbau) abhängen. Das Strömungsfeld in realen Strukturen ist sehr viel komplexer als in noch analytisch erfassbaren Modellen. Das Fraunhofer ITWM verfolgt deshalb seit einigen Jahren die Strategie, die realen Mikrostrukturen aufzulösen und die Strömungs- und Filtrationseigenschaften dieser realen drei dimensional Strukturen zu untersuchen [5,6].

Die Simulation der Partikelfiltration in dreidimensionalen Mikrostrukturen besteht aus den gleichen Komponenten, die in der Realität die Partikelfiltration durch poröse Medien ausmachen. Das dreidimensionale Geometriemodell bildet das Material ab, also beispielsweise Schichten, Porositäten, Fasern, oder Poren, sowie deren Querschnittsgestalt und deren Orientierung [7,8,9]. Der Strömungslöser [10,11,12,13,14] berechnet die Luftströmung durch das Material, welches sich allmählich durch angelagerte Partikel zusetzt. Dabei kann unter anderem das durch die Geometrie des Filtergehäuses gegebene Anströmverhalten als Anfangsbedingungen und Randbedingungen in die Simulation eingehen. Auf dem Geometriemodell und der Luftströmung setzt dann die eigentliche Filtrationssimulation auf. In die Luftströmung werden Schmutzpartikel modelliert, sowie verschiedene Mechanismen der Anlagerung an die Filtergeometrie. Derzeit sind dies die Adhäsion an Fasern, Trägheitseffekte, die Partikel von den Stromlinien der Luftströmung abbringen, thermische Effekte, die vor allem sehr kleine Partikel beeinflussen sowie Siebeffekte. Große Partikel werden in der Materialgeometrie, oder auch zwischen bereits eingelagerten Partikeln eingefangen. Natürlich fehlen noch weitere Effekte wie elektrostatische Eigenschaften und Agglomeration von Partikeln (Beispiel Ruß), die erst in Zukunft in die Modellierung aufgenommen werden. Trotzdem lassen sich bereits jetzt qualitativ richtige Aussagen zur Filtereffizienz und Standzeiten machen und auch Druckverlustkurven simulieren. Wir zeigen als Beispiele von Mikrostrukturen, in denen die Simulation der Filtration möglich ist ein Stapelfaservlies, einen Schaum und eine Membran. Die Filtrationseigenschaften sind bislang erst für Vliese berechnet worden, und werden derzeit auch für Membranen und Schäume erweitert.

## 2.1 Mikrostrukturgenerierung

Dreidimensionale Mikrostrukturen können prinzipiell auf zwei verschiedene Weisen im Rechner generiert werden. Die erste Methode ist, eine bildgebendes Verfahren (Tomographie) einzusetzen, und durch dreidimensionale Bildverarbeitung ein dreidimensionales Abbild im Rechner zu schaffen, in dem die Simulation der Partikelfiltration erfolgt. Abbildung 1 zeigt solche bearbeiteten dreidimensionale Aufnahmen, die für Keramikfilter relativ einfach, für textile Filter aber eher aufwändig zu erstellen sind. Die zweite Methode ist, zunächst ein Materialmodell zu finden, in welches die relevanten Parameter wie Porengrößen, Faserorientierung, Fasergestalt,

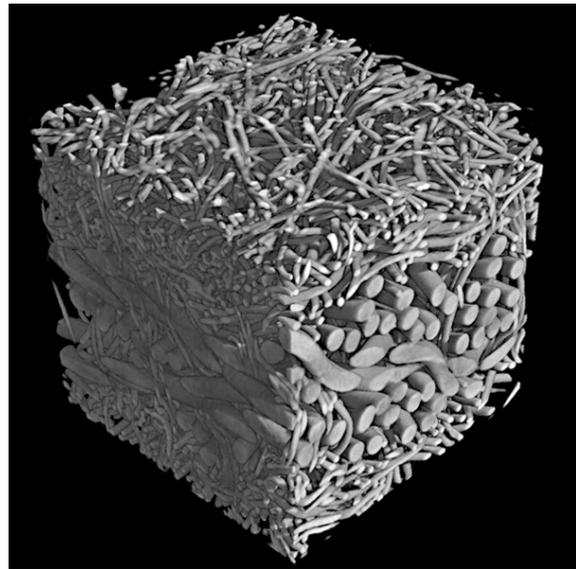
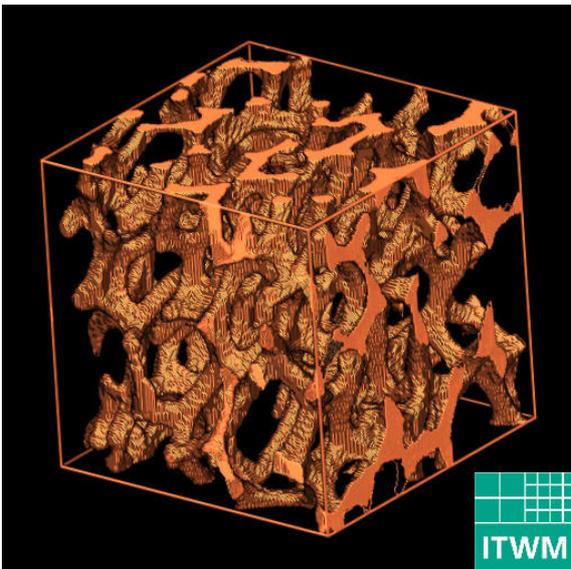


Abb1. Tomographie eines Schaums und Tomographie eines Entwässerungsfilzes.

Faserdurchmesser, Faserkrümmung, Membrandicken, etc. eingehen. Diese Parameter sind bei Berechnungen für ein reales Material zunächst zu bestimmen, ehe dann die Simulation der Partikelfiltration mit Aussagekraft durchgeführt werden kann. Abbildung 2, 3 und 4 zeigen die Realisierung eines Stapelfaservlieses bzw. zwei Membrane, die auf Basis spezifischer Materialmodelle generiert wurden.

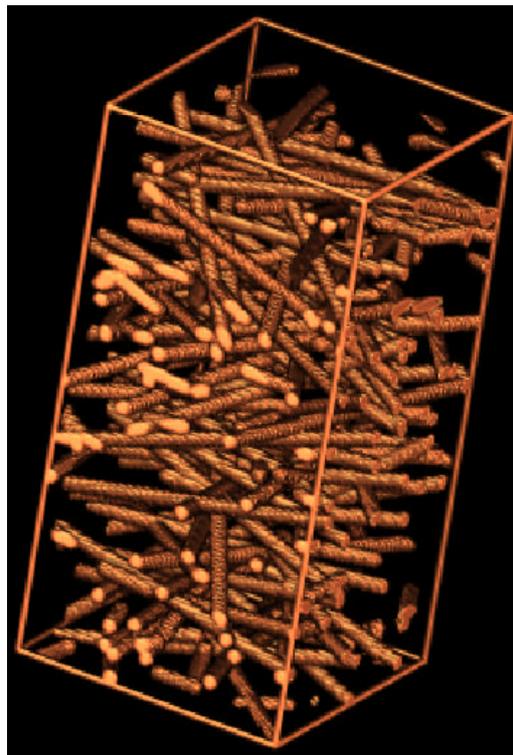


Abb. 2 Modell eines Stapelfaservlieses

Im Falle der Membran ist das Modell periodisch, d.h. ein kleiner sich wiederholender Ausschnitt kann immer wieder passend angeklebt werden. Der Unterschied zwischen den beiden Realisierungen liegt in der Anzahl der Poren pro Einheitszelle ( $4/3$ , bzw.  $6/4$ ) sowie dem unterschiedlichen Radius der Pore auf der Anströmseite. Die Stärke der Modelle liegt darin, das

Materialparameter wie beispielsweise die Porosität variiert werden können, und sich die Auswirkung dieser Veränderung auf das Filterverhalten ohne Herstellung des Materials "virtuell"

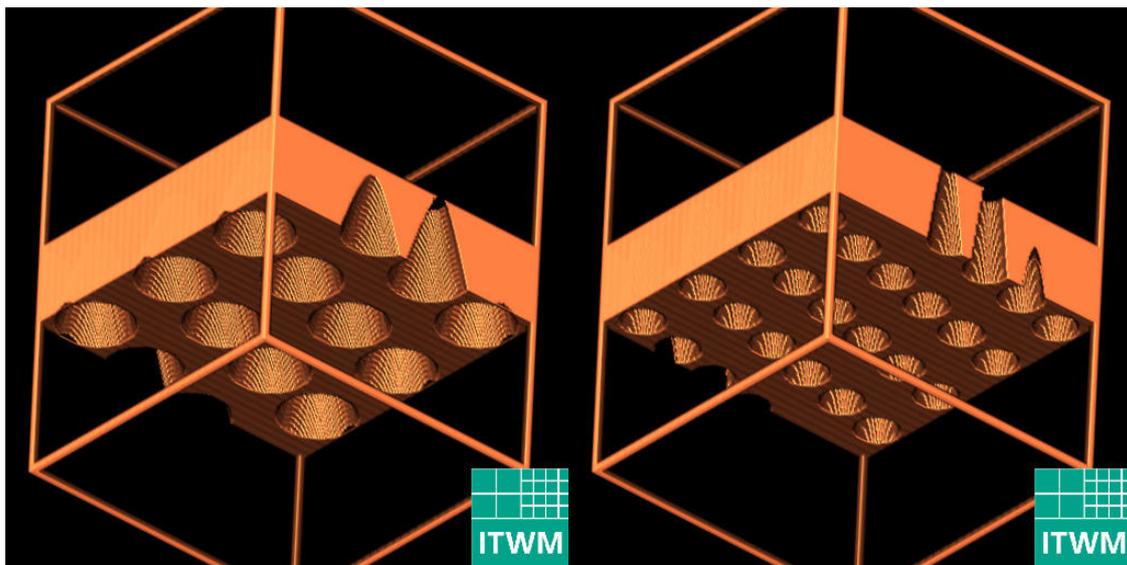


Abb. 3 Modell einer Membran mit wenigen großen Porenöffnungen

Abb. 4 Modell einer Membran mit vielen kleineren Porenöffnungen

ermitteln, und letztendlich sogar optimieren lässt. Im Idealfall müssen dann nur noch die optimierten Materialparameter auf den Herstellungsprozess abgebildet werden, und die Materialentwicklung ist auf die Produktion einiger weniger Proben, die aufgrund der Simulationen als besonders erfolversprechend eingestuft werden, reduziert.

## 2.2 Strömungs- und Partikelsimulation

Ist die Mikrostruktur generiert bzw. als Tomographie gegeben, wird zunächst die Luftströmung durch die Struktur berechnet. Wir benutzen dazu einen am Fraunhofer ITWM entwickelten Lattice Boltzmann Code zur Lösung der dreidimensionalen hydrodynamischen Gleichungen in komplexen Mikrostrukturen. Mit dieser Software wird nicht nur das Strömungsfeld sondern auch die Druckverteilung und der Strömungswiderstand in alle Raumrichtungen bzw. der Permeabilitätstensor berechnet.

Die Dynamik der Teilchen wird berechnet durch Lösen einer stochastischen Differentialgleichung, die sowohl die Inertialeffekte als auch die Einflüsse der Brown'schen Bewegung der Luftmoleküle auf die Teilchen berücksichtigt. Zusätzlich geht in Lösung die direkte Wechselwirkung der Teilchen mit der Mikrostruktur ein. Wie bei einem realen Experiment wird in der Simulation die dreidimensionale Bewegung der Schmutzpartikel in der Luftströmung beobachtet. Bei Kontakt mit der Mikrostruktur verlieren die Teilchen zunächst aufgrund von Reibungseffekten Impuls und Energie. Wenn die Kraft, die die Luft auf die Teilchen ausübt stärker ist als die Adhäsionskraft zwischen Mikrostruktur und Teilchen, kann sich ein Teilchen wieder ablösen und von der Luft weiter transportiert werden. Auf diese Weise werden kleine Teilchen mit großer Wahrscheinlichkeit schon beim ersten Kontakt mit der Mikrostruktur aus der Strömung gefiltert, während große Teilchen sich leichter ablösen können, da sie aufgrund ihrer größeren Masse die Adhäsionskraft leichter überwinden können.

In der Modellierung wird auch berücksichtigt, dass ein Teilchen in einer Faserstruktur Kontakt mit verschiedenen Fasern gleichzeitig haben kann. Deshalb werden insbesondere große Teilchen aufgrund des Siebeffekts in einer Mikrostruktur zurückgehalten. Das Wechselspiel zwischen Adhäsionskraft und Siebeffekt äußert sich in der Simulation darin, dass große Teilchen in der Regel bei einem Kontakt mit nur einer Faser sich relativ leicht ablösen können, aber an Kreuzungspunkten mehrerer Fasern gefangen werden.

## 2.3 Resultate

Wir zeigen Ergebnisse einer Simulation der Filtrationseffizienz, bei der vor allem Inertialeffekt sowie Diffusionsabscheidung eine Rolle spielen. Hier liegt das Hauptinteresse an der Ermittlung der sogenannten „most penetrating particle size“ (mpps) also des Radius des Teilchens mit der größten Eindringtiefe. Als zweites wird das Zusetzen eines Filters aufgrund des Siebeffekts für große Teilchen vorgestellt. Hier interessiert die Beladungsverteilung im Filter.

In der Simulation wurde ein kleiner Ausschnitt von der Größe  $128\ \mu\text{m} * 128\ \mu\text{m} * 256\ \mu\text{m}$  eines Filtermediums mit einem Faservolumenanteil von 10% (Porosität= 90%) betrachtet (siehe Figur 5). Der Druckgradient wurde so gewählt, dass die maximale Geschwindigkeit  $0.04\ \text{m/s}$  betrug.

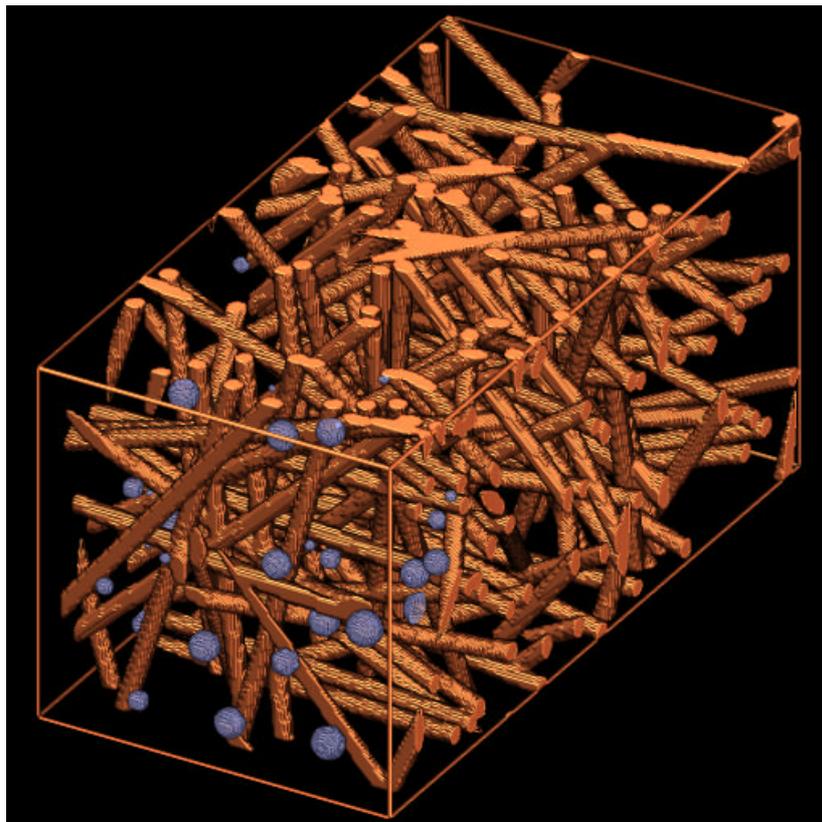


Abb. 5: Stapelfaservlies mit eingelagerten Teilchen.  
Parameter wie im Text beschrieben

Als Viskosität der Luft wurde  $\nu = 1.408 * 10^{-5}\ \text{m}^2/\text{s}$  bei einer Temperatur von  $23\ \text{°C}$  gewählt. Die Filtrationseffizienz wurde unter Annahme perfekter Haftbedingung zwischen Teilchen und Faser für Teilchen mit Durchmesser von  $2\ \mu\text{m}$  bis  $4\ \text{nm}$  berechnet. Als Maß für die Filtrereffizienz wurde das Verhältnis der Teilchen, die aus dem Luftstrom ausgefiltert wurden, zur Gesamtzahl der Teilchen normiert auf die Laufzeit der Teilchen verwendet. Dabei wurde überprüft, dass der qualitative Verlauf der Kurve sich nicht ändert, wenn alternative Definitionen der Filtrereffizienz verwendet werden. Abbildung 6 zeigt den erwarteten Verlauf der Filtrereffizienz mit dem charakteristischen Minimum bei der „most penetrating particle size“. Die Position des Minimums ist in sehr guter Übereinstimmung mit Literaturwerten bei ca.  $0.3\text{-}0.4\ \mu\text{m}$  [1,15,16].

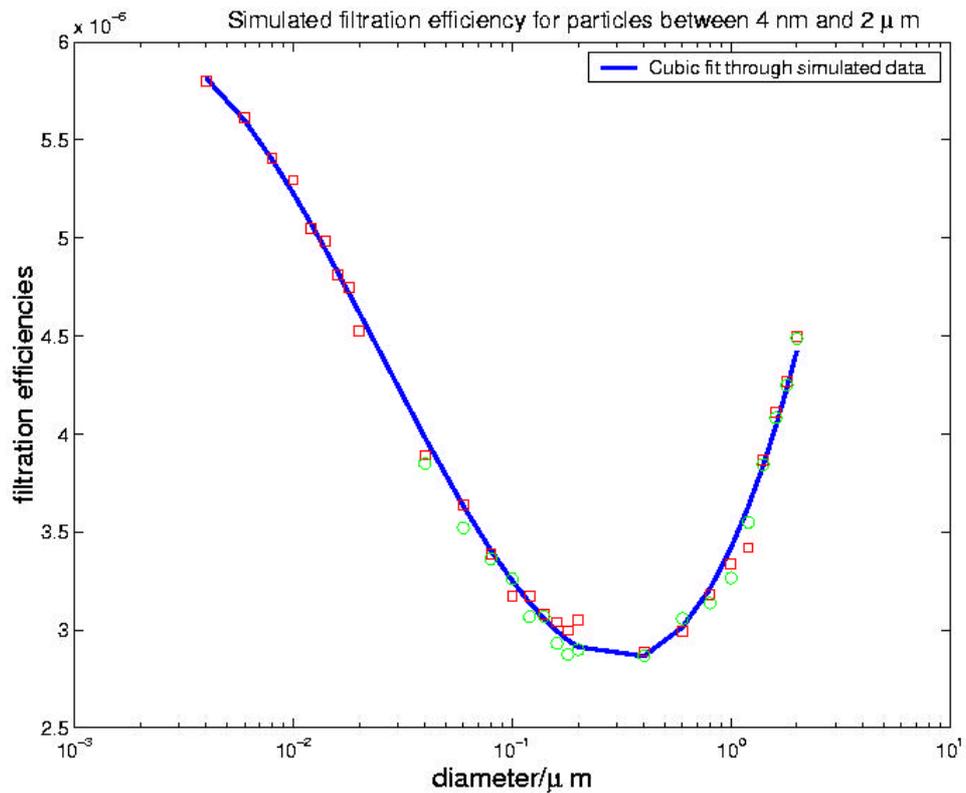


Abb.6: Filtrationseffizient als Funktion des Teilchendurchmessers bei einer durchschnittlichen Strömungsgeschwindigkeit von 0.04 m/s für einen Filter mit 10% Porosität und Faserdurchmesser von 6  $\mu\text{m}$ .

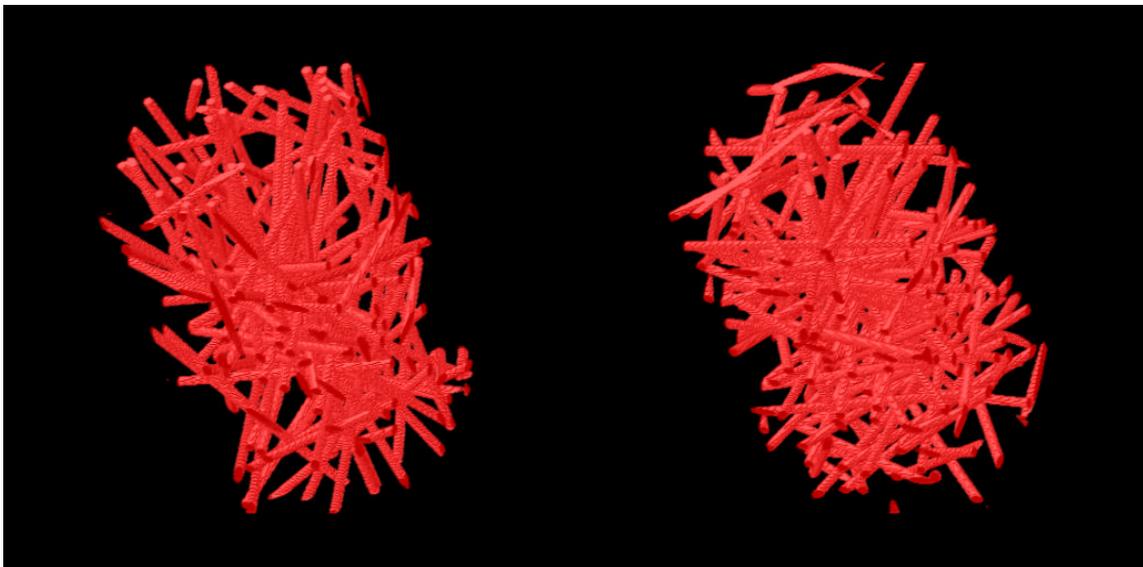


Abb. 7,8: Zwei Geometrien mit gleicher Porosität und gleichem Faserradiendurchmesser aber unterschiedlicher Vorzugsrichtung. Links (Abb. 7) sind die Fasern bevorzugt in Strömungsrichtung, rechts (Abb. 8) bevorzugt senkrecht zur Strömungsrichtung orientiert.

Um den Effekt höherer Geschwindigkeiten sowie den Einfluss der Faserorientierung bei gleicher Porosität zu untersuchen wurden 2 weitere Fasergeometrien mit Porosität von 10% und einem

Faserdurchmesser von  $6\mu\text{m}$  erzeugt. Die Geometrien unterscheiden sich lediglich in der Vorzugsrichtung der Fasern bei sonst gleichen Materialparametern wie z.B. Flächengewicht. (siehe Abbildung 7,8). Während in Abb. 7 die Fasern bevorzugt parallel zur Strömungsrichtung ausgerichtet sind, liegen sie in Abb. 8 hauptsächlich senkrecht zur Strömungsrichtung.

Der Druckgradient wurde in beiden Fällen gleich, aber größer als im ersten Beispiel gewählt. Als Konsequenz ist die mittlerer Geschwindigkeit um einen Faktor 10 höher, nämlich ca.  $0.6\text{ m/s}$ .

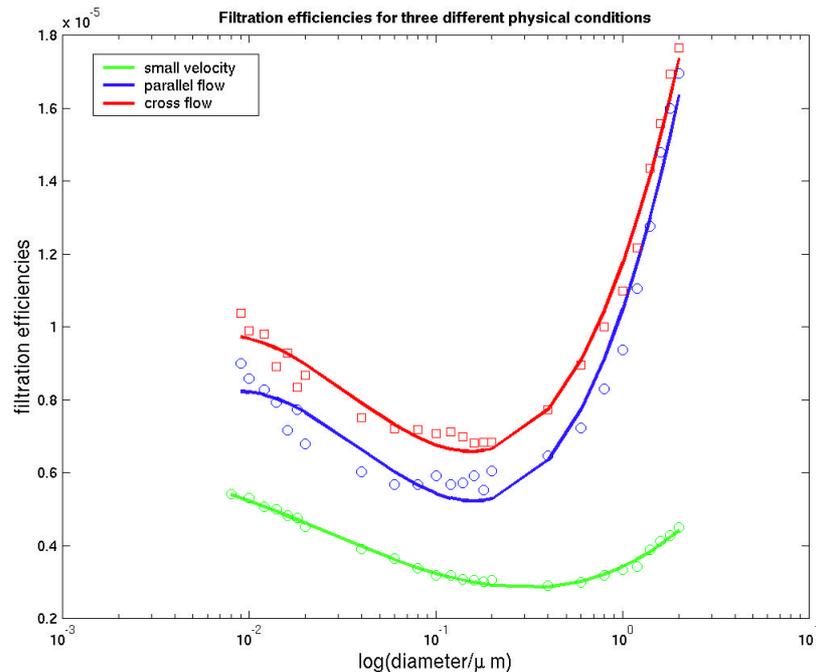


Abb.9: Filtrationseffizienzen für 3 verschiedene physikalische Bedingungen. Alle Kurven sind für gleiche Porosität und gleiche Faserdicke. Die grüne Kurve ist für Strömungsgeschwindigkeit  $v = 0.04\text{ m/s}$ . Die blaue und rote Kurve für  $v = 0.6\text{ m/s}$ . Die Fasern sind in der blauen Kurve bevorzugt parallel bzw. auf der roten Kurve senkrecht zur Strömung orientiert.

Abbildung 9 zeigt die Filtrationseffizienzkurven für alle 3 simulierten Filtergeometrien. Bei höheren Strömungsgeschwindigkeiten ist die mpps wegen der höheren Geschwindigkeit der Teilchen in Übereinstimmung mit Messungen zu kleineren Werten verschoben [1]. Gleichzeitig ist die Filtrationseffizienz bei höheren Geschwindigkeiten insbesondere wegen der größeren Wirksamkeit des Inertialmechanismus höher. Hier ist jedoch zu berücksichtigen, dass ideale Haftbedingung zwischen Fasern und Teilchen angenommen wurden, d.h. wenn die Teilchen einmal in Kontakt mit der Faser gekommen sind, werden sie aus dem Luftstrom herausgefiltert. Ablösungen von Teilchen aufgrund höherer Geschwindigkeiten würden zu einem Absinken der Filtrationseffizienz führen. Die Orientierung der Faser hat keinen gravierenden Einfluss auf die Filtrationseffizienz unter den gegebenen Bedingungen. Im Einklang mit den Erwartungen ist die Effizienz für die Geometrie, bei der die Fasern senkrecht zur Strömungsrichtung liegen, höher als bei häufiger parallel zur Strömungsrichtung liegenden Fasern, weil der effektive Stossquerschnitt für Teilchen verringert wird.

Um das sukzessive Beladen von Filtern zu studieren, führten wir für Demonstrationszwecke eine Simulation in einer kleineren Geometrie aus. Der anfängliche Faservolumenanteil betrug wie oben  $10\%$ , der Faserdurchmesser war  $6\mu\text{m}$ . Im Gegensatz zu oben betrachteten wir jedoch Teilchen mit

einem Durchmesser von 12  $\mu\text{m}$ . Teilchen dieser Größe können immer noch die Geometrie durchdringen, jedoch werden einige besonders an Kreuzungspunkten mehrerer Fasern aufgrund des Siebeffekts gefiltert. Passierte dies, wurde die aufgrund der Partikelanlagerung veränderte Strömung neu berechnet. Dies wiederholten wir solange bis keine Teilchen mehr in die Geometrie eingebracht werden konnten. Die Endkonfiguration ist in Abbildung 10 gezeigt. Fortsetzung der Simulation würde zum Aufbau eines Filterkuchens führen. Man kann in Bild 10 Teilchen identifizieren, die tief in die Geometrie eingedrungen sind. Jedoch konzentriert sich der Großteil der Teilchen in den ersten 20 –30  $\mu\text{m}$ . Die Schmutzaufnahmekapazität des Filters wird deshalb nur unzureichend ausgenutzt.



Abb. 10: Endzustand einer Verschmutzungssimulation  
Faserdurchmesser und Teilchendurchmesser sind 6 bzw. 12  $\mu\text{m}$ . Der Feststoffanteil (Schmutz und Fasern) beträgt 19%

Die Gesamtpermeabilität am Ende der Zusetzungssimulation beträgt weniger als die Hälfte als zum Beginn der Simulation. Der kombinierte Schmutz – Faseranteil beträgt 19%. Abbildung 11 zeigt die Entwicklung der Permeabilität als Funktion des abgelagerten Schmutzanteils. Gezeigt ist auch der Verlauf der Permeabilität des hauptsächlich verschmutzten Teilbereichs des Filters. Unter Annahme einer linearen Relation zwischen dem Reziprok der Permeabilität und dem Druckabfall lässt sich schließen, dass die Druckbelastung des verschmutzten Bereichs 4 mal so hoch wie beim unbeladenen Filter ist. Wir berechneten auch die Permeabilität einer Konfiguration mit der gleichen prozentualen aber homogen verteilten Schmutzbeladung. Diese homogene Konfiguration hat eine vergleichbare Gesamtpermeabilität, aber da sich der Druckabfall über die gesamte Geometrie verteilt ist die lokale mechanische Belastung geringer als bei der inhomogenen Schmutzverteilung. Außerdem können in der homogenen Konfiguration noch zusätzliche Schmutzteilchen aufgenommen werden, während sich auf dem inhomogen beladenen Filter ein Filterkuchen aufbaut.

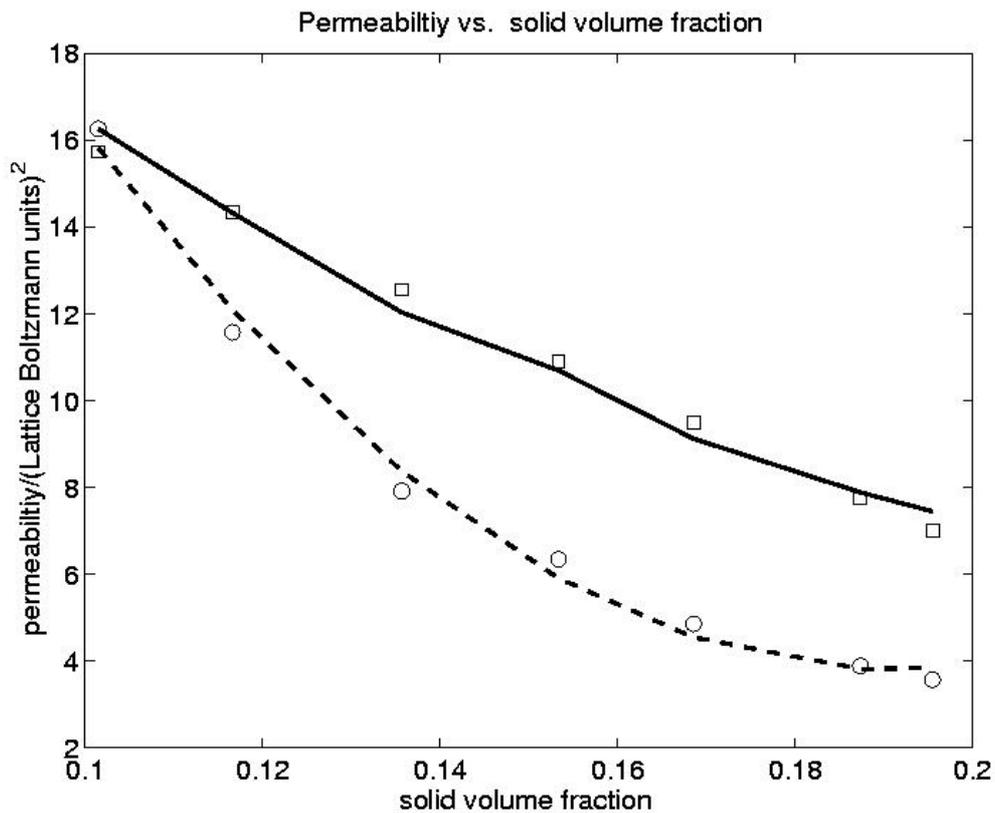


Abb. 11: Permeabilität als Funktion des wachsenden Feststoffanteils aufgrund von Schmutzeinlagerung (durchgezogene Linie) sowie die Permeabilität des vorwiegend zugesetzten Teil des Filtermediums.

### 3. Schlussfolgerungen

Wir haben gezeigt, dass sowohl die Strömung als auch das Filtrationsverhalten (Effizienz, Beladung bis zum Verstopfen) von Mikrostrukturen simulativ bestimmt werden kann. Die wesentliche Neuerung unserer Software liegt in der Auflösung und Behandlung der vollen dreidimensionalen realistischen Struktur von Filtermedien. Dadurch wird es möglich, nicht nur gemittelte Größen zu berechnen sondern im Detail die mikroskopischen Ursachen für Änderungen der Funktionalität eines Filtermediums zu untersuchen und Konsequenzen für die praktische Anwendung zu ziehen. Letztendlich ist das Filtrationsverhalten eines Mediums in der geometrischen Struktur des Mediums sowie der Wechselwirkung der Teilchen sowohl mit der Geometrie als auch mit der Strömung verborgen. Die durch unsere Software möglich gewordene Direktsimulation liefert ein visuell erfassbares Bild der relevanten Prozesse und erlaubt es gezielt die Auswirkung der Änderung der Mikrostruktur oder der Änderung des Teilchenspektrums zu testen. Damit wird virtuelles Materialdesign von Filtermedien möglich.

## Literatur

- [1] R.C. Brown, "Air Filtration, An Integrated approach to the Theory and Application of Fibrous Filters", Pergamon Press, Oxford (1993).
- [2] K. Spurny (Ed.), "Advances in aerosol filtration", CRC Press LLC (1998).
- [3] O. Filippova, D. Hänel. "Lattice-Boltzmann Simulation of Gas-Particle Flow in Filters", Computer & Fluids, vol 7, pp. 697-712, (1997).
- [4] W. Bergmann, I. Corey, "Filtration Theory using Computer Simulations", 24th DOE/NRC Nuclear Air Cleaning and Treatment Conference (1996).
- [5] A. Latz, 2. Bericht zum Projekt der Stiftung Rheinland-Pfalz für Innovation, "Partikel und Wärmetransport durch Strömungen in Mikrostrukturen" (2003).
- [6] A. Latz and A. Wiegmann, "Simulation of fluid particle separation in realistic three dimensional fiber structures", Proceedings FILTECH Europe 2003, I-352 – I-360 (2003).
- [7] J. Ohser u. F. Mücklich, "Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science", John Wiley & Sons (2000)
- [8] Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Jahresberichte 2000 - 2002.
- [9] "The optimal stuff", Fraunhofer Gesellschaft Research News No.4 (2003).
- [10] I. Ginzburg, P. Klein, C. Lojewski, D. Reinel-Bitzer, K. Steiner, „Parallele Partikelcodes für industrielle Anwendungen“, Verbundprojekt im Rahmen des HPSC, Abschlussbericht, ITWM Kaiserslautern, März 2001.
- [11] I. Ginzburg u. K. Steiner, "A Lattice Boltzmann model for free-surface flow and its application to filling process in casting", J. Comp. Phys., **185**, 61 (2003)
- [12] I. Ginzburg u. K. Steiner, "A free-surface Lattice Boltzmann method for modelling the filling of expanding cavities by Bingham fluids", Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, **360**, 453 (2002).
- [13] I. Ginzburg and D. d'Humieres, "Multi-reflection boundary conditions for lattice Boltzmann models", preprint (2002).
- [14] D. Kehrwald, "Numerical Analysis of Immiscible Lattice BGK", Dissertation, Universität Kaiserslautern (2002).
- [15] J. W. Thomas and R. E. Yoder, Aerosol size for maximum penetration through fiberglass and sand filters, AMA Arch. Ind. Health **13**, 545 (1956).
- [16] J. Dymant, Use of Goertz aerosol spectrometer for measuring the penetration aerosols through filters as a function of particle size, Aerosol Sci., **1**, 53 (1970).