
Design von Filtermedien via simulation

Andreas Wiegmann, PhD

wiegmann@itwm.fhg.de

Dipl. Math. Stefan Rief

rief@itwm.fhg.de

Priv. Doz. Dr. Arnulf Latz

latz@itwm.fhg.de

Symposium >> Textile Filter <<

Chemnitz, 7. März 2006.



I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf

II. Filtermedien

III. Strömung und elektrisches Feld

IV. Schmutzmodell und Schmutztransport

V. Ablagerung

VI. Standzeit

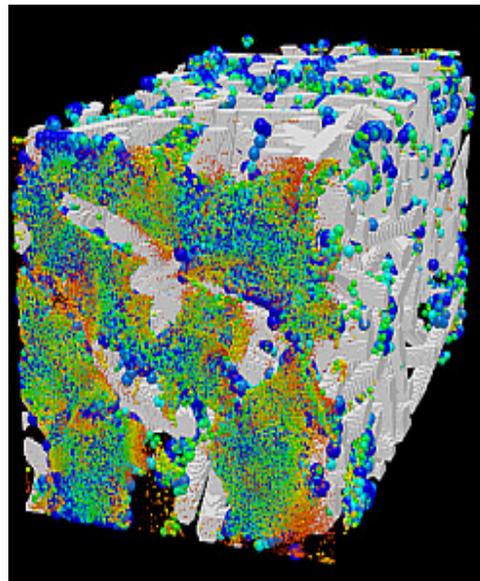
VII. Nanomodell

VIII. Zusammenfassung

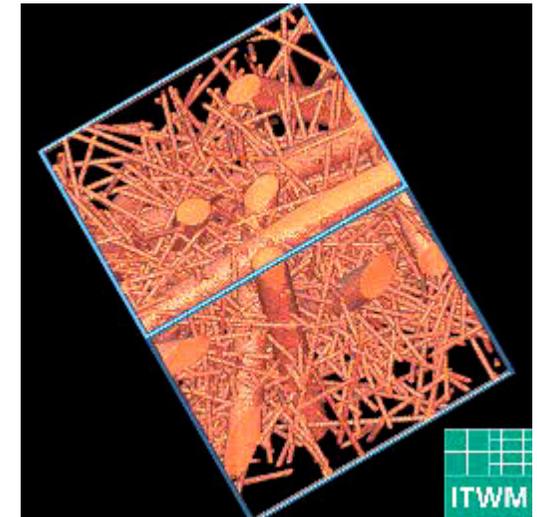
I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf

1. Bestimme Parameter für existierendes Material
2. Generiere Volumenbild für diese Parameter
3. Löse Stokes (-Brinkmann) Gleichungen
4. Löse elektrisches Potential
5. Löse Partikeltransport & -anlagerung
6. Bestimme Filtereffizienz, Druckabfall / Lebensdauer
7. Neue Materialparameter

REM



Generiert



Zugesetzter Nonwoven

Übersicht

I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf

II. Filtermedien

III. Strömung und elektrisches Feld

IV. Schmutzmodell und Schmutztransport

V. Ablagerung

VI. Standzeit

VII. Nanomodell

VIII. Zusammenfassung

II. Was macht ITWMs designbare virtuelle Medien aus?

Das reale **poröse Medium** / **Verbundwerkstoff** [z.B. **Nonwoven** / **Kohlefaserverstärkung**]

Das mathematische **Modell** mit wenigen Parametern [z.B. Faserdurchmesser, usw.]

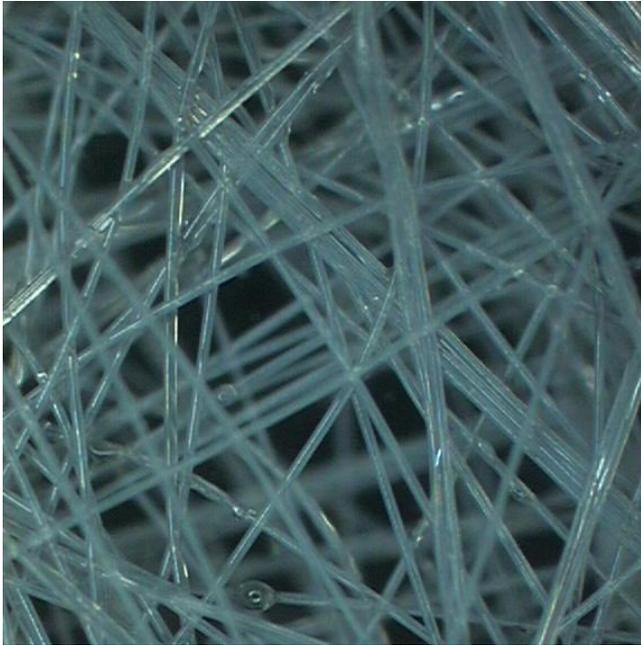
Die **Realisierung** als Volumenbild, **unabhängig vom Modell**

Die **Validierung**

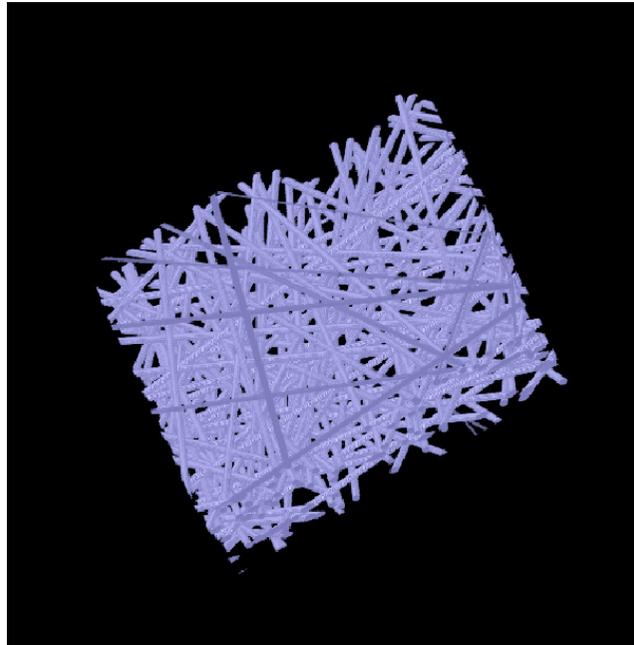
- Ansicht [2d & 3d Visualisierung, Vergleich mit Mikroskopie und Tomographie]
- Geometrische Analyse [z.B. Porosität, Porengrößenverteilung, usw.]
- Übereinstimmung der berechneten Eigenschaften mit Messergebnissen

Das **Design**; basierend auf den Modellparametern, nicht auf den Volumenbildern

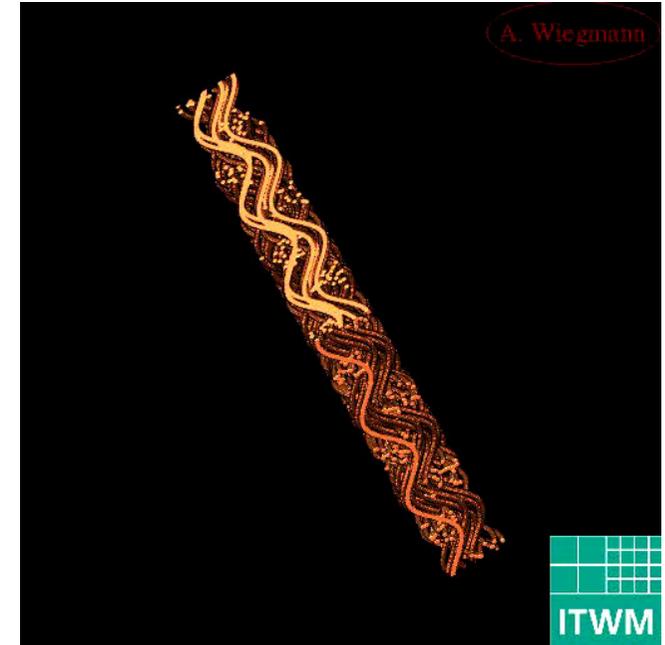
II. Materialmodelle für Nonwoven, Gewebe & Gradientenstrukturen



Mikroskopie



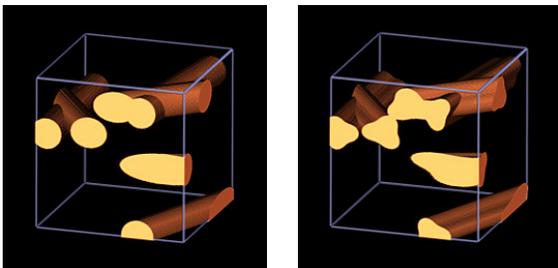
Modell eines Nonwoven



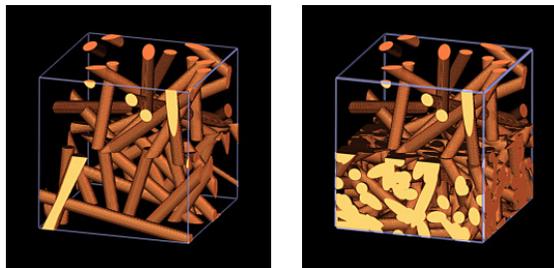
Modell eines Multifilament Gewebe

Beispiele möglicher Variationen

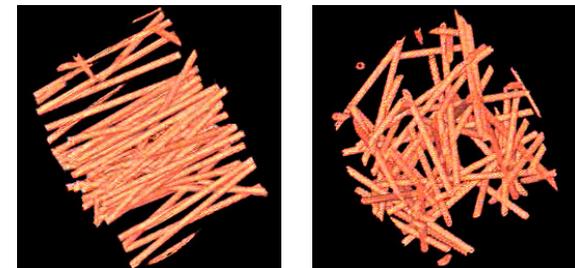
• Faserquerschnitte



• Geschichteter Aufbau

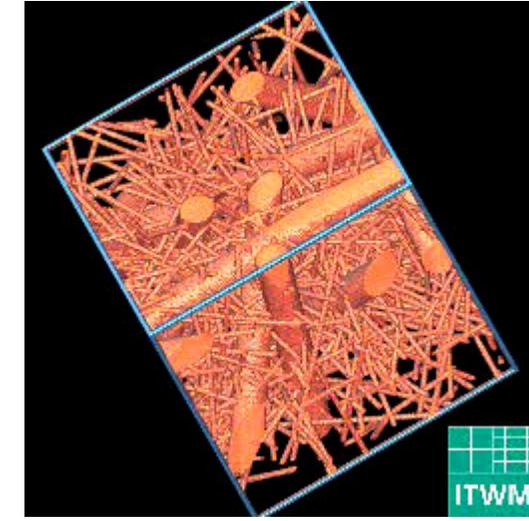
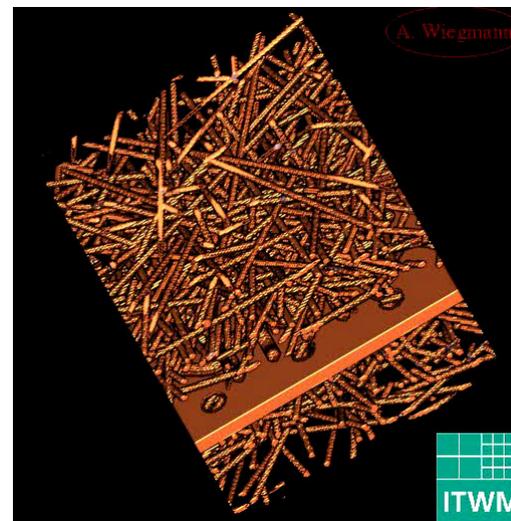
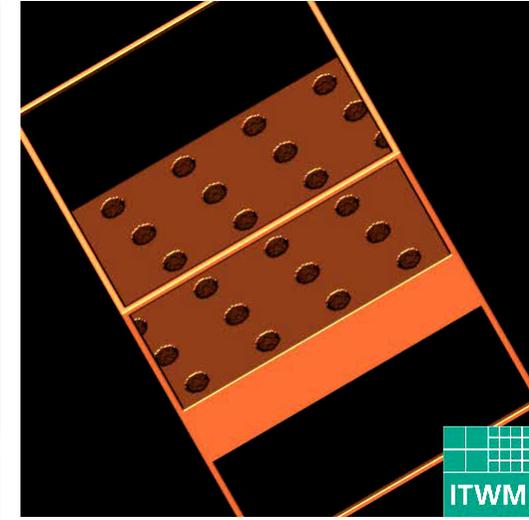
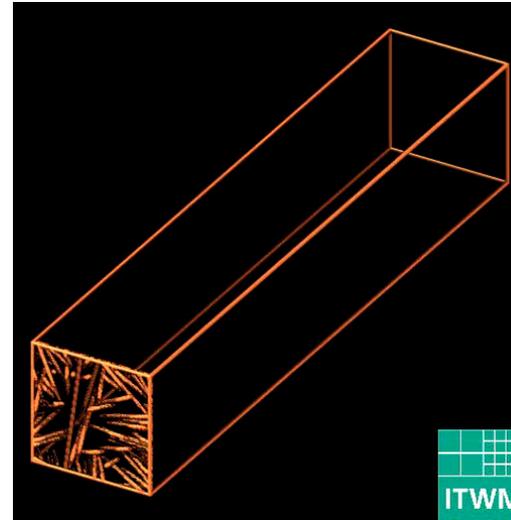


• Faservorzugsrichtungen



II. Simulations- und Designparameter von Filtermedien

1. Nonwovenmodell
2. Sintermodell
3. Schichten
4. Schichtdicken
5. Porosität
6. Faserdurchmesser
7. Faservorzugsrichtungen
8. Fiberquerschnittsformen
9. Faserüberlappung, -verschmelzung
10. Kräuselung
11. Faserlänge
12. ...



Übersicht

- I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf
- II. Filtermedien
- III. **Strömung und elektrisches Feld**
- IV. Schmutzmodell und Schmutztransport
- V. Ablagerung
- VI. Standzeit
- VII. Nanomodell
- VIII. Zusammenfassung

III. Strömung & elektrisches Feld:

Für **geringe Partikelanzahlen** kann die **Rückwirkung auf die Strömung und das elektrische Feld vernachlässigt werden.**

Das Fluid wird durch die **Viskosität μ** modelliert. Beispiele:

Öl bei -25°C : $\mu = 1.50e+0 \text{ kg/(m s)}$

Blut bei 22°C : $\mu = 2.00e-2 \text{ kg/(m s)}$

Luft bei 20°C : $\mu = 1.84e-5 \text{ kg/(m s)}$

Das Modell liefert u. a. die mittlere Strömungsgeschwindigkeit. Diese wird durch den Druckabfall bestimmt. Dieser wird durch eine Volumenkraft modelliert, beispielsweise für 200 Pa, Probendicke L:

$$f = \frac{200 \text{ Pa}}{L}$$

Das elektrische Feld wird aus angenommenen Oberflächenladungen errechnet.

III. Strömung: Navier-Stokes-Brinkmann Gleichungen

$$-\mu\Delta\vec{u} + \nabla\vec{u} \cdot \vec{u} + \kappa^{-1}\vec{u} + \nabla p = \vec{f} \quad (\text{Momentengleichung})$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (\text{Masseerhaltung})$$

$$\vec{u} = 0 \quad \text{on } \Gamma \quad (\text{no-slip auf Faseroberflächen})$$

$\vec{f} = (0, 0, f)$: Kraft in Strömungs(z)-richtung,

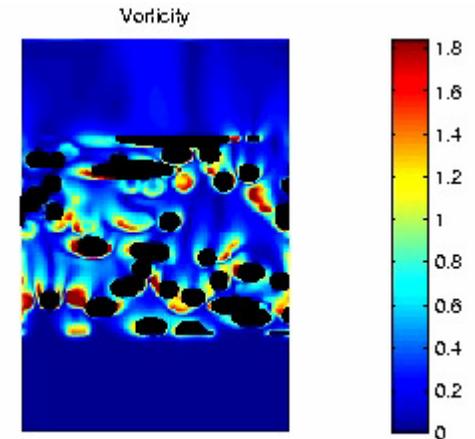
κ : Permeabilität poröser Voxel ,

\vec{u} : Geschwindigkeit,

μ : Viskosität,

p : Druck und

Γ : Feststoffoberflächen.



**Schliffbildsequenz
der Vortizität**

Strömung wird unter Annahme periodischer Randbedingungen berechnet (Gebiet groß genug (REV), vorne leere Zellen).

III. Elektrisches Feld: Poissongleichung für das Potential

$$\Delta u = \rho \chi (\delta\Omega) : \text{Poissongleichung}$$

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla u : \text{Feldgleichung}$$

$\delta\Omega$: Rand des Fasergebietes (Oberflächen),

ρ : Quellstärke,

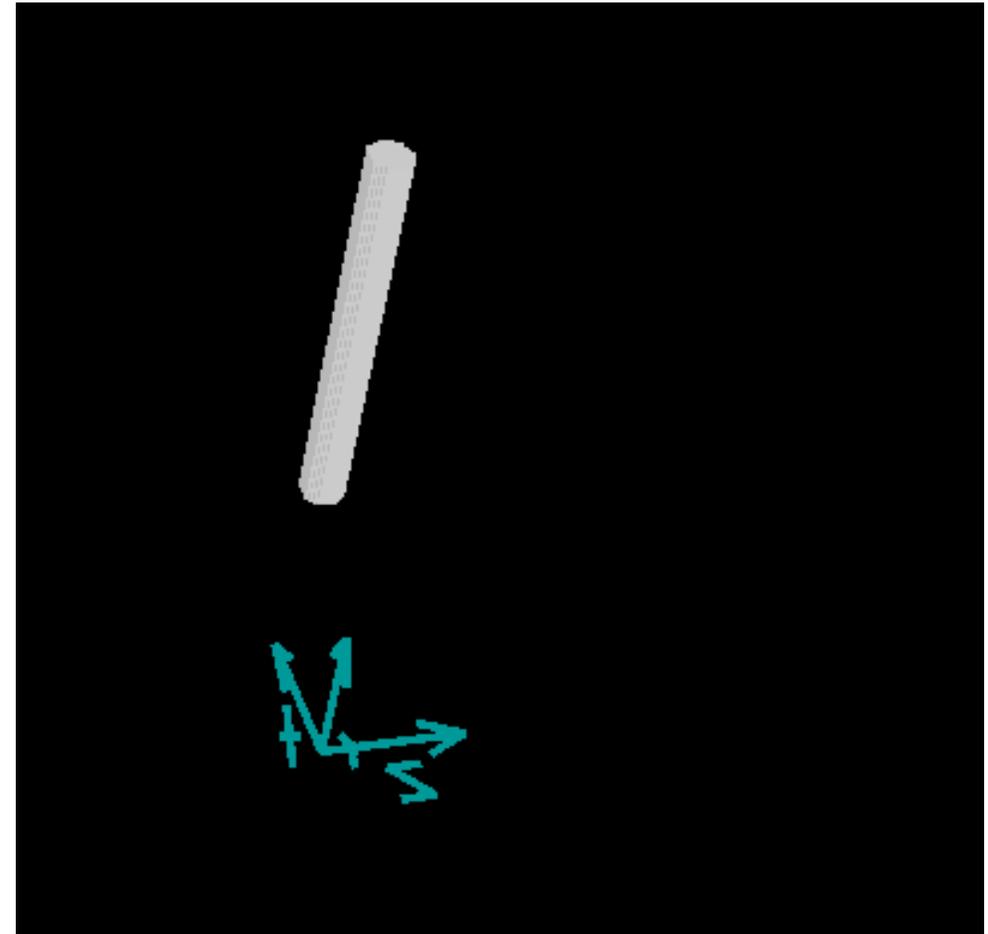
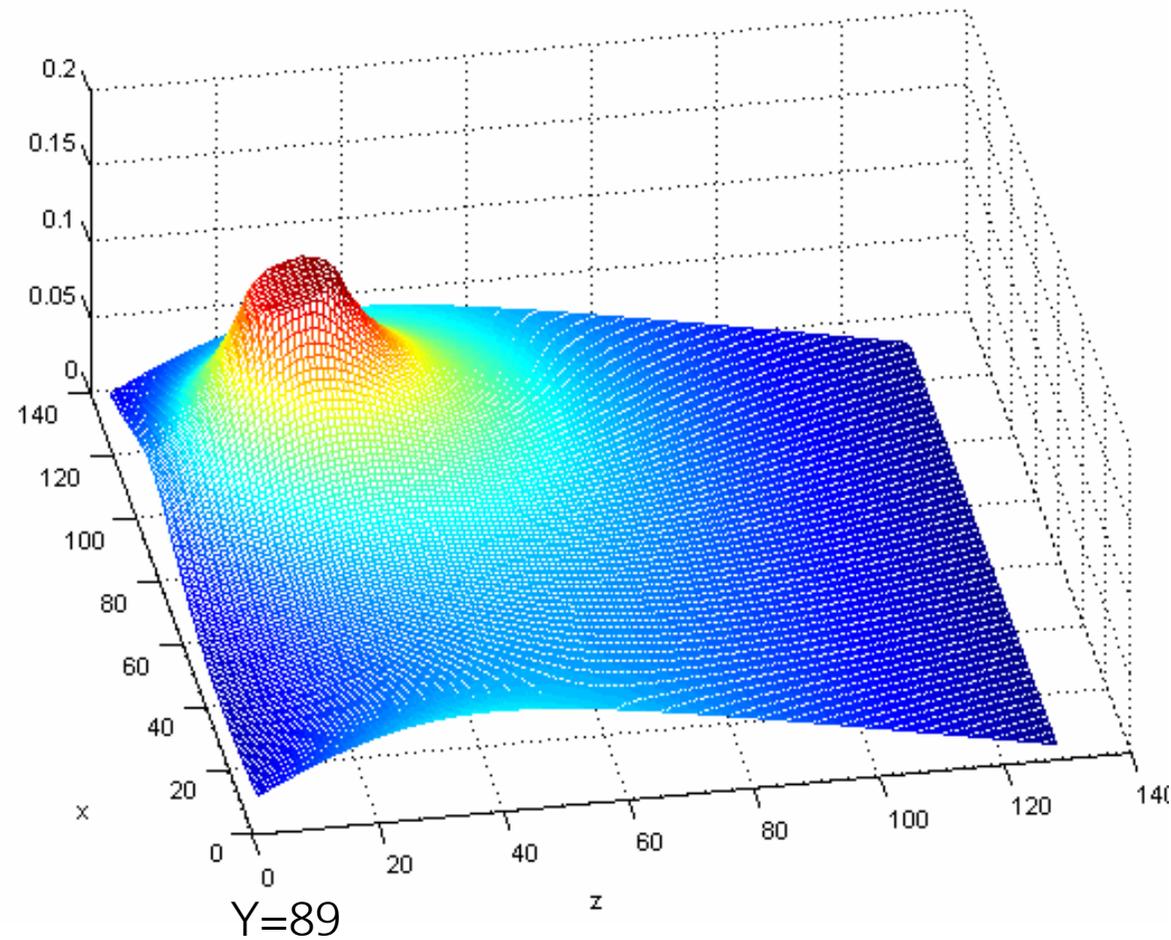
χ : Oberflächen Dirac-Deltafunktion,

u : das elektrische Potential,

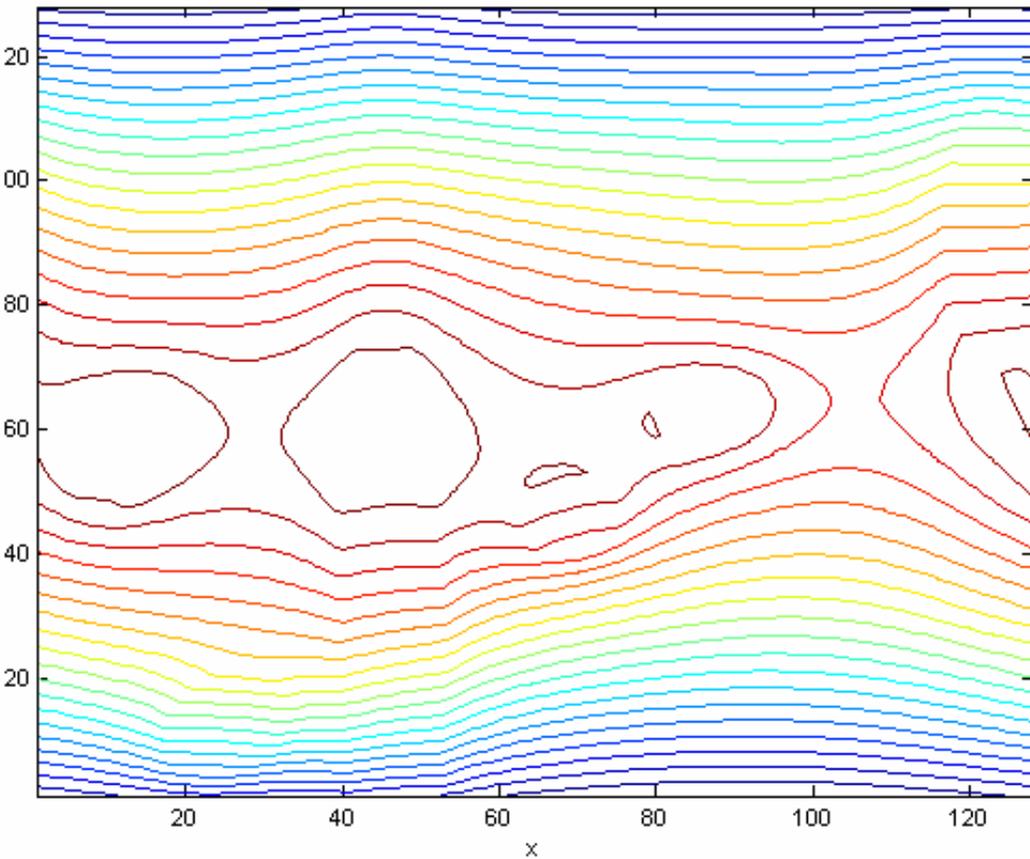
$\vec{\mathbf{E}}$: das elektrische Feld (Gradient des Potentials).

Lösung erfolgt mit periodischen Randbedingungen in Materialebenenrichtungen und Nullrandbedingungen in geeigneten Abständen vom Medium.

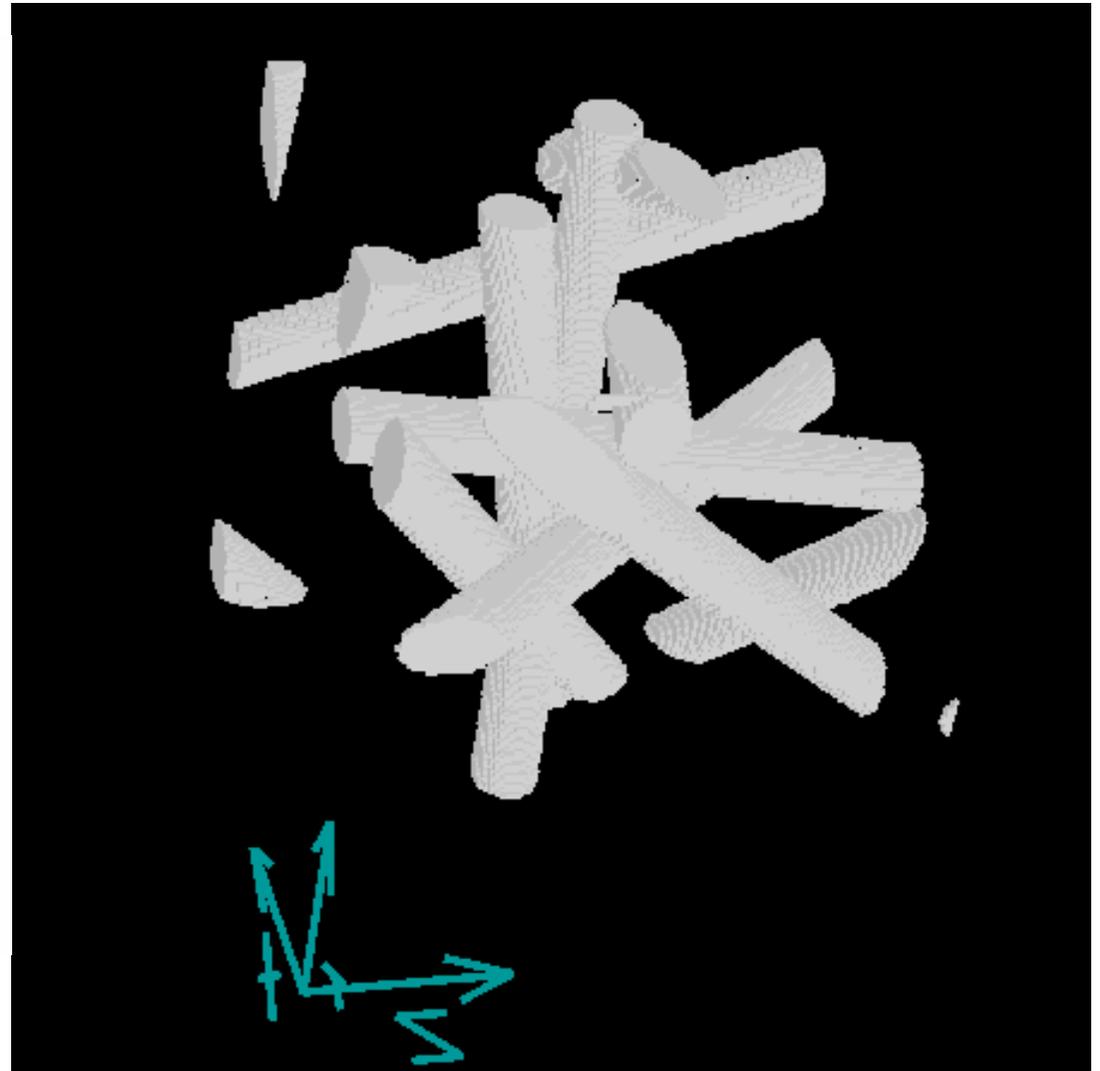
III. Elektrisches Potential (SchliffY=89) einer Einzelfaser



III. Elektrisches Potential (Schliff Y=89) zufälliger Fasern



Y=89



GEO DICT
FILTER DICT


Fraunhofer Institut
Techno- und
Wirtschaftsmathematik

Chemnitz,
7. März 2006

Übersicht

- I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf
- II. Filtermedien
- III. Strömung und elektrisches Feld
- IV. **Schmutzmodell und Schmutztransport**
- V. Ablagerung
- VI. Standzeit
- VII. Nanomodell
- VIII. Zusammenfassung

IV. Schmutzmodell

- **Wahrscheinlichkeitsverteilung von Durchmessern Kugelförmiger Partikel aus einem Material**
- **Größe und Material definieren die Partikelmasse**
- **Partikel bewegen sich über Reibung mit der Strömung**
- **Partikel diffundieren im Fluid, abhängig von ihrer Größe und von der Temperatur**
- **Partikel bewegen sich abhängig von ihrer Ladung und vom elektrischen Feld**

IV. Lagrange'sche Beschreibung der Partikelbewegung

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma \times (\vec{v}(\vec{x}) - \vec{v}_o(\vec{x})) + \frac{Q\vec{E}_o(\vec{x})}{m} + \sigma \times \frac{d\vec{W}(t)}{dt}$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}$$

$$\gamma = 6\pi\rho\mu\frac{R}{m}$$

$$\sigma^2 = \frac{2k_B T \gamma}{m}$$

$$\langle dW_i(t), dW_j(t) \rangle = \delta_{ij} dt$$

t : Zeit

\vec{x} : Partikelposition

\vec{v} : Partikelgeschwindigkeit

R : Partikelradius

m : Partikelmasse

Q : Partikelladung

T : Umgebungstemperatur

k_B : Boltzmannkonstante

$d\vec{W}(t)$: 3d Wahrscheinlichkeits (Wiener) maß

\vec{E}_o : Elektrisches Feld

\vec{v}_o : Fluidgeschwindigkeit

ρ : Fluiddichte

μ : Fluidviskosität

GEO DICT

FILTER DICT



Fraunhofer
Institut
Techno- und
Wirtschaftsmathematik

Chemnitz,

7. März 2006

Übersicht

- I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf
- II. Filtermedien
- III. Strömung und elektrisches Feld
- IV. Schmutzmodell und Schmutztransport
- V. **Ablagerung**
- VI. Standzeit
- VII. Nanomodell
- VIII. Zusammenfassung

V. Filtrationsmechanismen

Filtration durch:

A: Nähe der Stromlinie

B: Trägheit

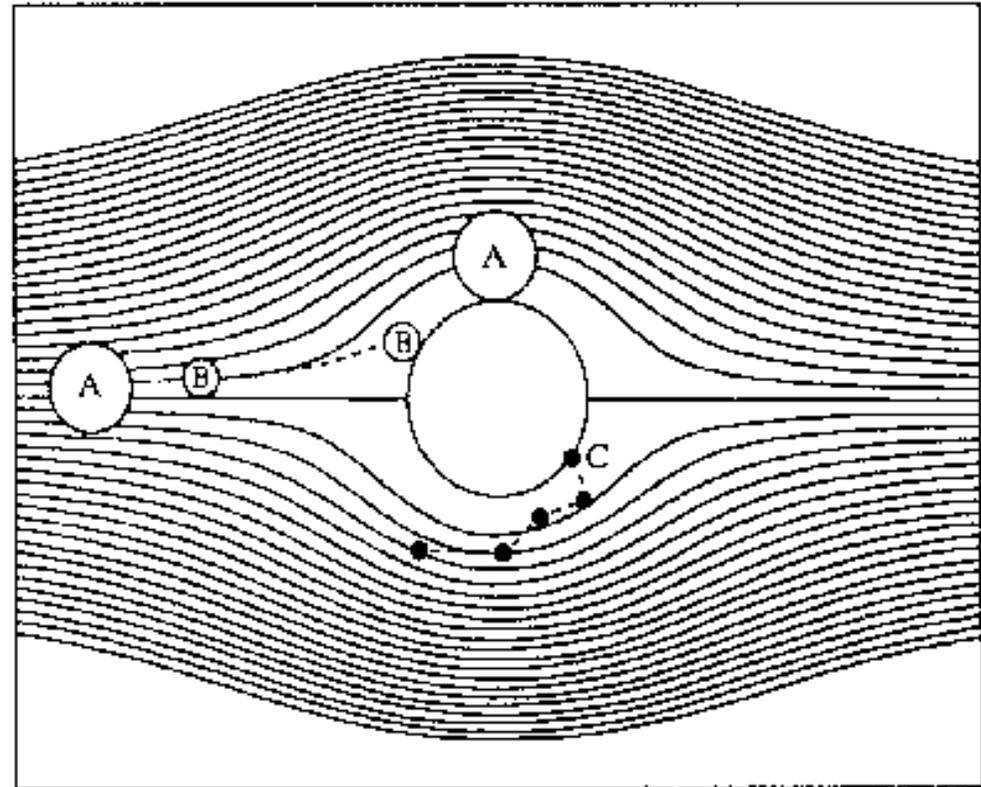
C: Diffusion

D: Elektrostatische Ladung

E: Siebeffekt

G: bereits angelagerte Partikel

H: andere Effekte
(Schwerkraft,...)



**Detektiere Kollisionen von Partikeln mit Fasern
und bereits abgelagerten Partikeln!**

V. Modell der Filtereffizienz

A) Teststaub:

Kugelradien
Spezifisches Gewicht
Elektrische Ladungen



B) Fluid:

Viskosität
Dichte
Temperatur
Mittlere Geschw.



C) Nonwoven:

Elektrische Ladungen
No-slip Randbedingungen



D) Effizienz:

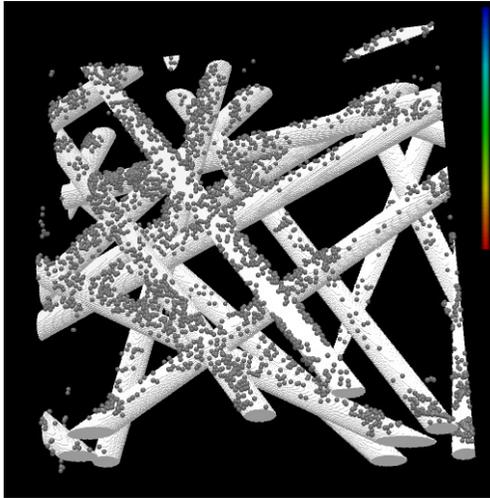
Strömung & Druckabfall: B & C
Elektrisches Feld: C
Reibung: A & B
Diffusion: A & B
Kollisionen: A & C
Adhäsion: A & C
Elektrische Anziehung: A & C
Partikelpfade: A, B & C

E) Anlagerung durch: Adhäsion

- Trägheit
- Diffusion
- Elektrische Anziehung

Siebeffekt

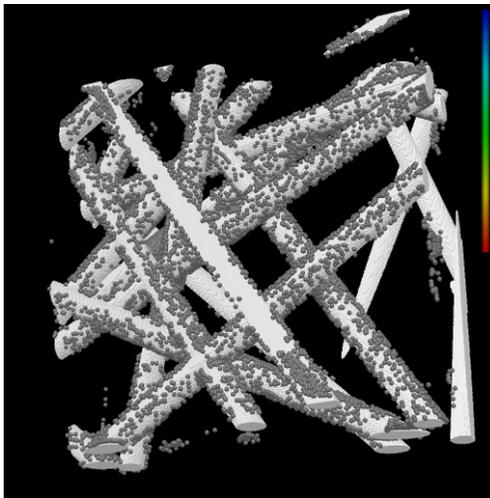
V. Simulationsergebnisse mit und ohne elektrische Ladung



Partikelanlagerung ohne elektrische Ladung

Vorderansicht

Rückansicht

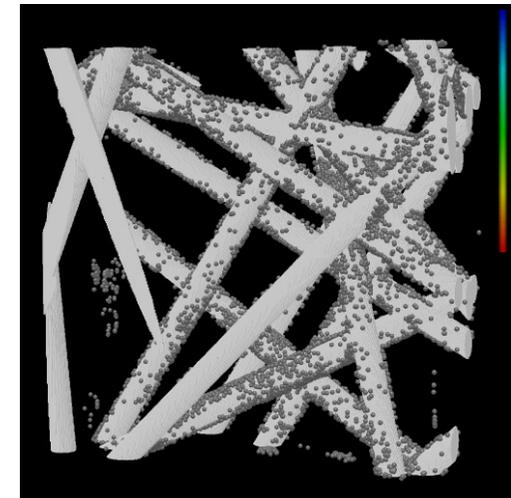


Partikelanlagerung unter Einfluss elektrischer Ladung

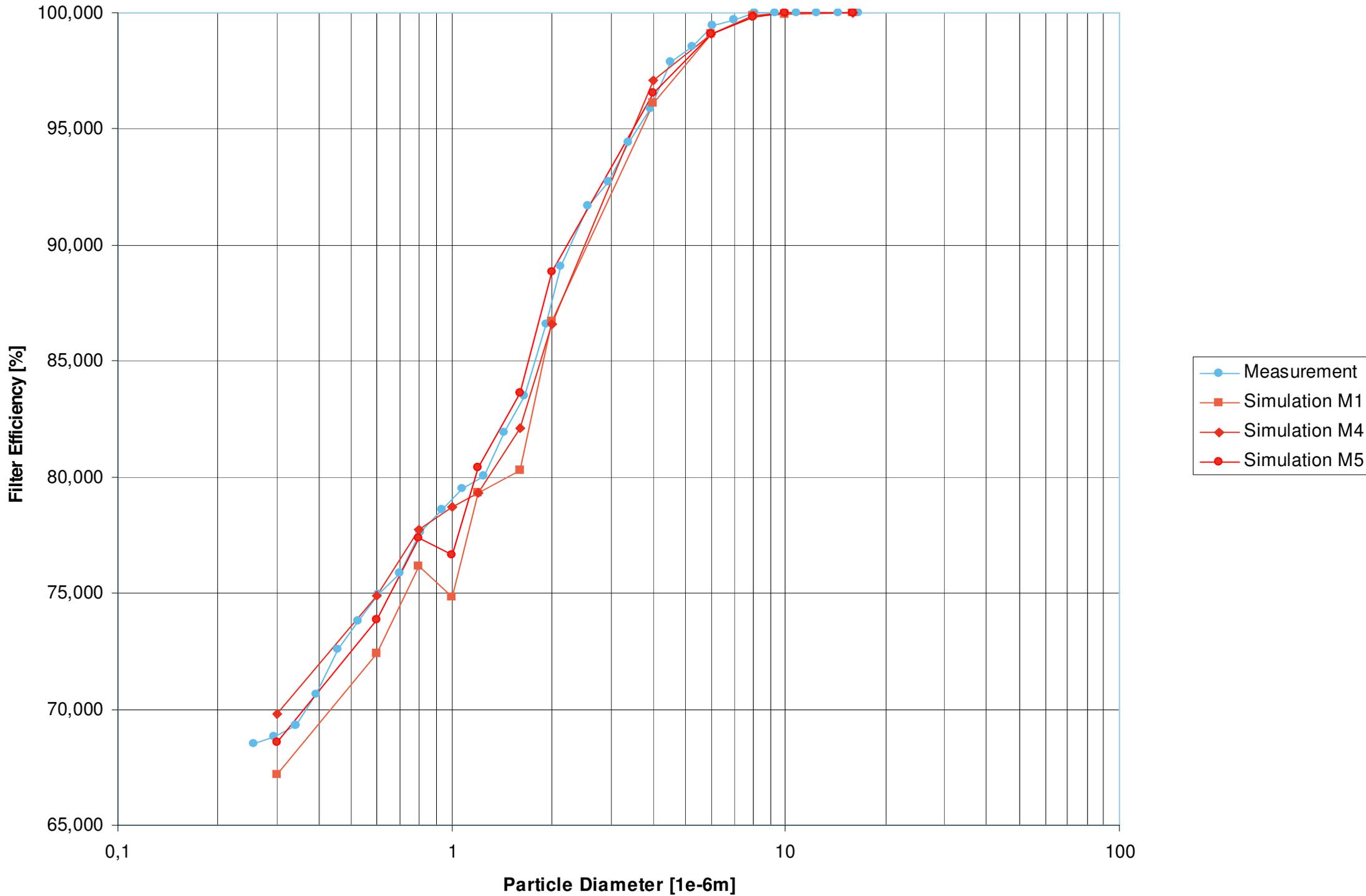
Effizienz um ca. 50% erhöht.

Vorderansicht

Rückansicht

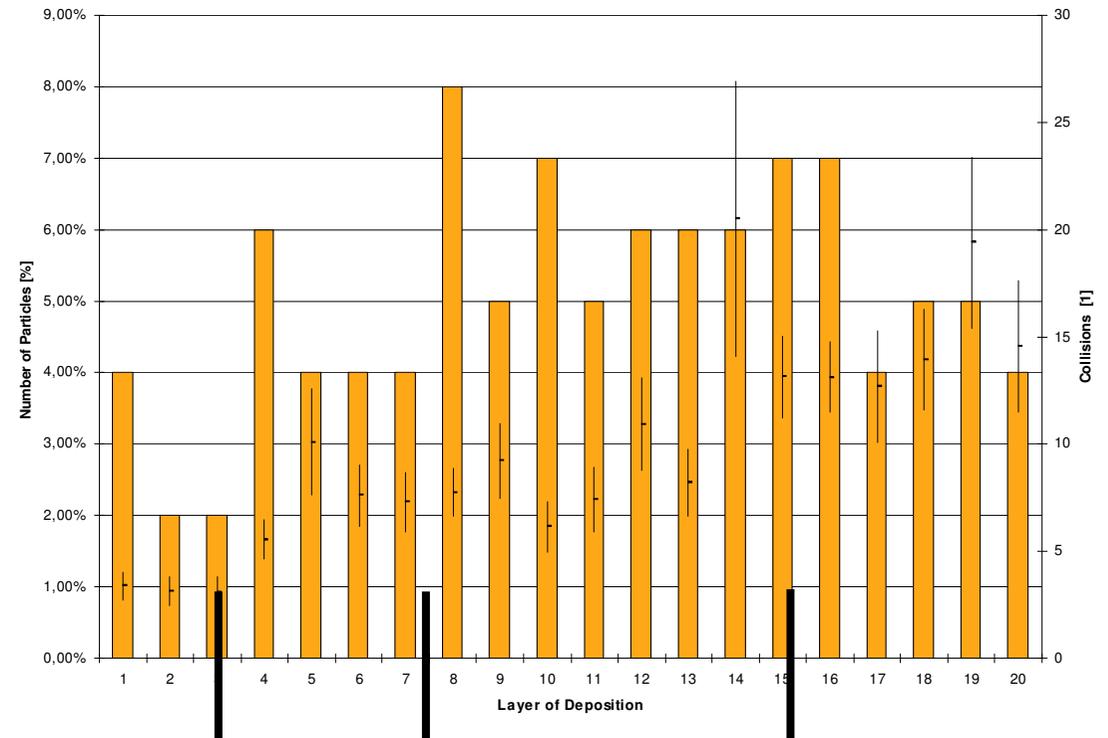


Filter Efficiency

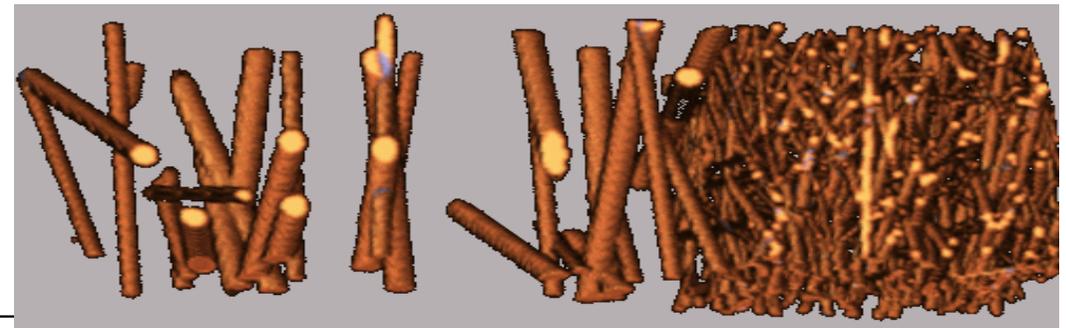


V. Anlagerungsdiagramm

- Einteilung in 20 Schichten von 64 μ m Dicke
- Orange: Partikelanzahlen
- Schwarz: Mittelwert und Standardabweichung der Kollisionen
- Beispiel: Schicht 15 enthält 7% der abgelagerten Partikel. Im Mittel hatten diese 13 Kollisionen mit Standardabweichung 1.9
- 4 Schichten des Gradientenmaterials abgetrennt durch



Einströmseite



Übersicht

- I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf
- II. Filtermedien
- III. Strömung und elektrisches Feld
- IV. Schmutzmodell und Schmutztransport
- V. Ablagerung
- VI. **Standzeit**
- VII. Nanomodell
- VIII. Zusammenfassung

VI. Entkopplung der Strömungssimulation und Partikelbewegung

Annahme: die Partikeldichte ist sehr niedrig

- Die Partikel bewegen sich unabhängig, sie kollidieren nur mit dem Filtermedium.
- Wenn sich viele Partikel angelagert haben wird die Strömung stark verändert.
- In der Standzeitsimulation wird das Volumenbild regelmäßig um die deponierten Partikel erweitert, und das Strömungsfeld darin neu berechnet.
- Spätere Partikelbewegung wird aufgrund des neuen Strömungsfeldes berechnet; die Partikelanlagerung erfolgt aufgrund des neuen Volumenbildes.

VI. Standzeitmodell

G) Multipass:

Nicht abgelagerte Partikel ändern die Eingangspartikelgrößenverteilung

A) Teststaub:

Kugelradien
spezifisches Gewicht
elektrische Ladungen

B) Fluid:

Viskosität
Dichte
Temperatur
Mittlere Geschw.

C) Nonwoven geometry:

Electrostatic charges
No-slip boundary conditions

D) Effizienz:

Drömung & Druckabfall: B & C
Elektrisches Feld: C
Diffusion: A & B
Kollisionen: A & C
Adhäsion: A & C
Elektrische Anziehung: A & C
Partikelpfade: A, B & C

E) Anlagerung durch:

Adhäsion

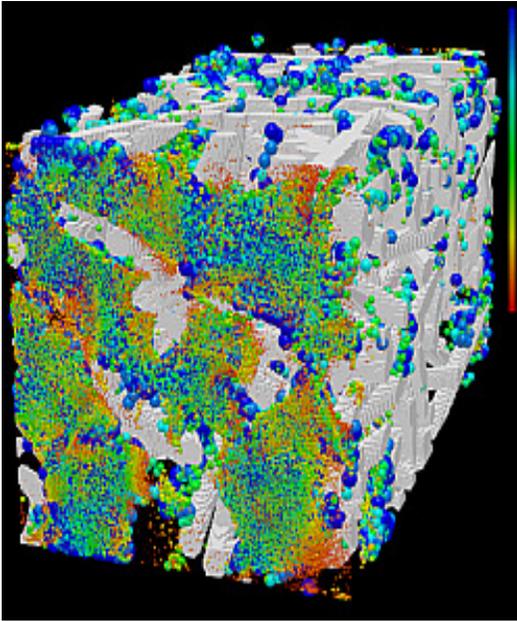
- Trägheit
- Diffusion
- Elektrische Anziehung

Siebeffekt

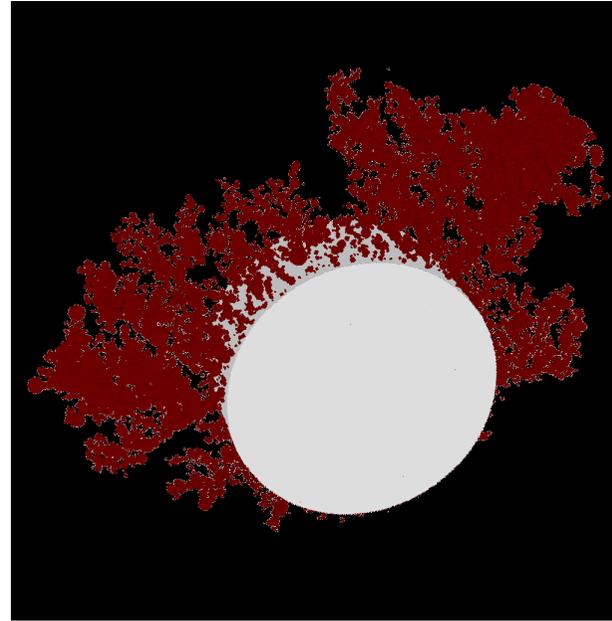
F) Zusetzung:

Abgelagerte Partikel definieren neues Volumenbild einschließlich poröser Voxel

VI. Beladung eines Nonwoven, Keramik; Dendriten auf einer Einzelfaser

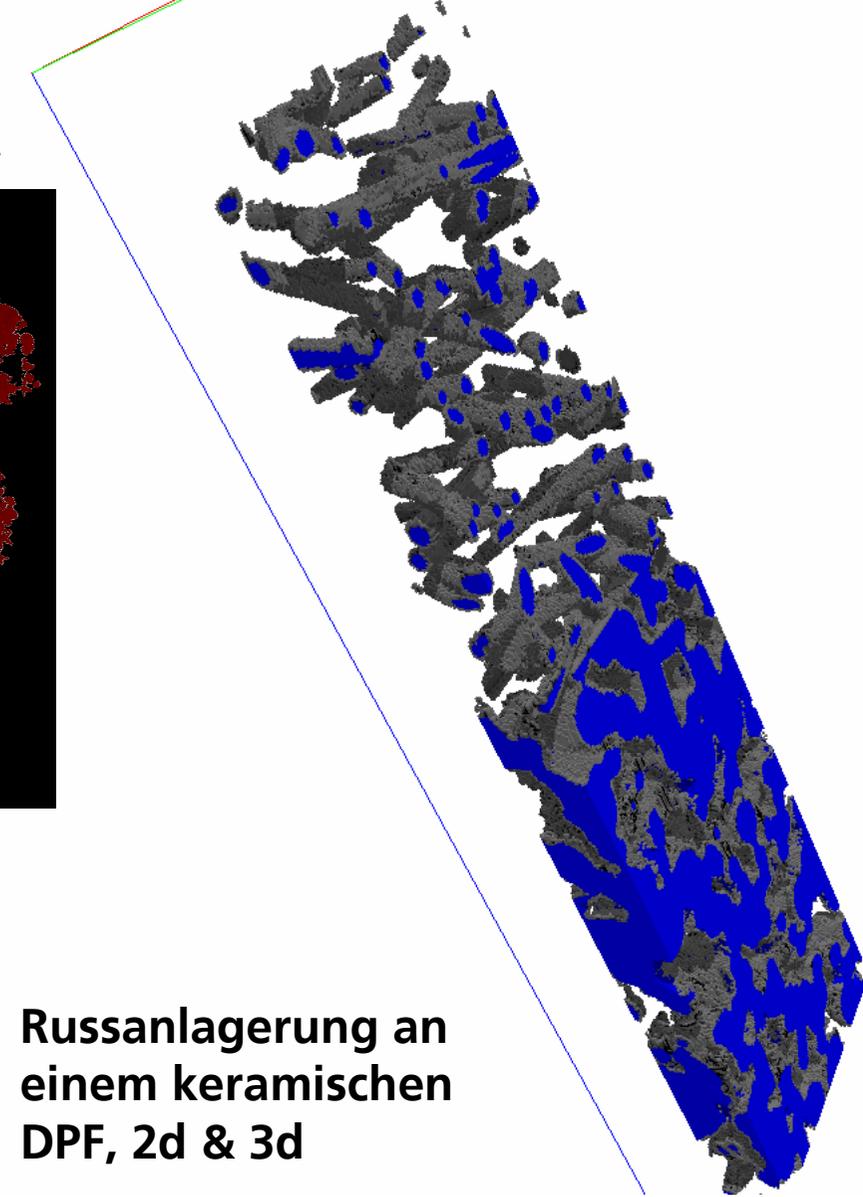


Beladener Nonwoven



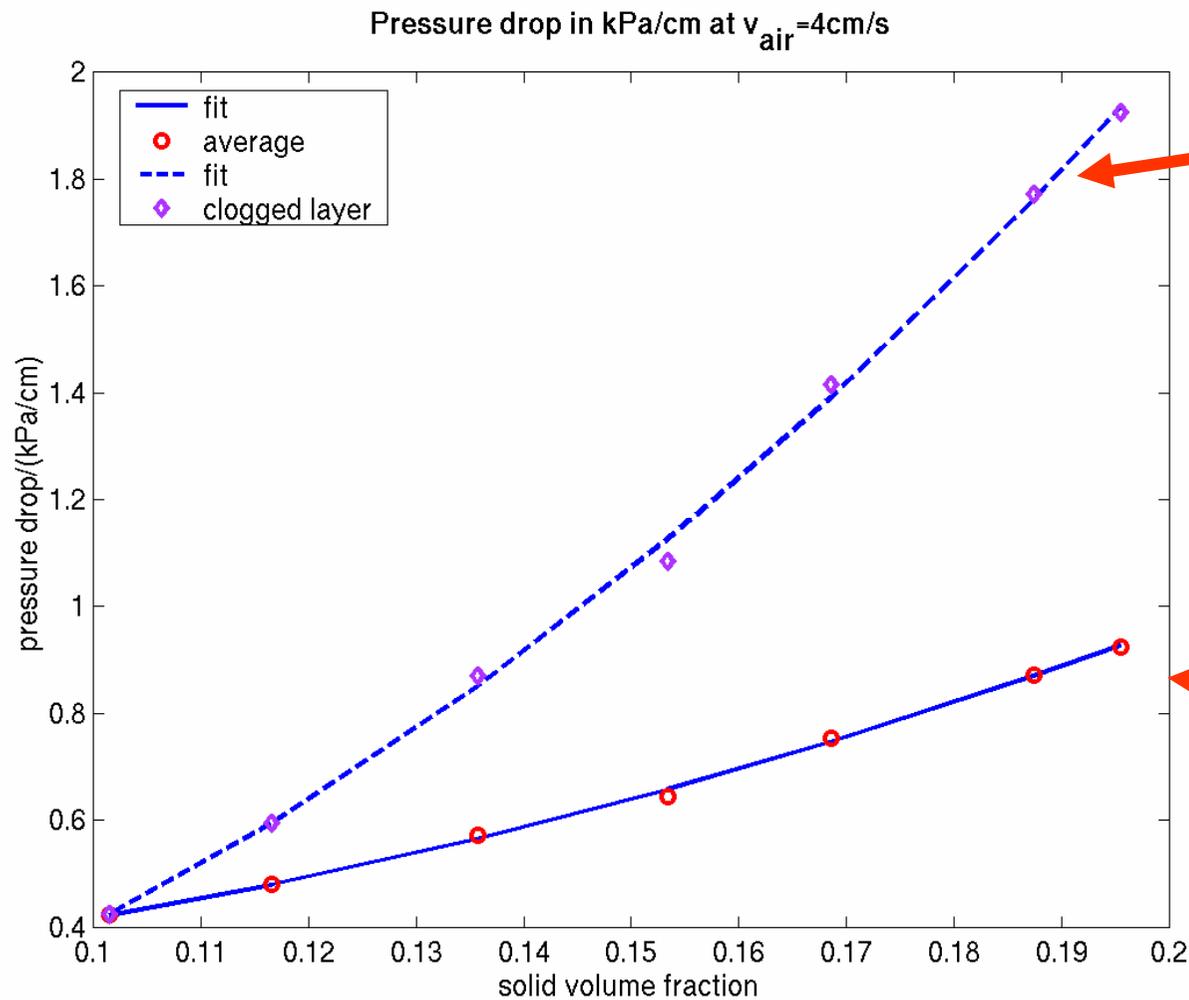
Russanlagerung an
einer Einzelfaser

Anlagerung sowohl am
Material als auch an zuvor
abgelagerten Partikeln



Russanlagerung an
einem keramischen
DPF, 2d & 3d

VI. Zeitverlauf des Druckabfalls



Im beladenen Teil
der Probe

Im Mittel über
die gesamte Probe

Übersicht

I. Der virtuelle Materialdesignkreislauf

II. Filtermedien

III. Strömung und elektrisches Feld

IV. Schmutzmodell und Schmutztransport

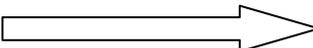
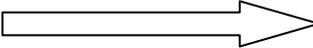
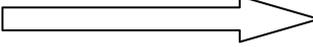
V. Ablagerung

VI. Standzeit

VII. Nanomodell

VIII. Zusammenfassung

VIII. Zusammenfassung

Komplexität realer Textilien  hoch aufgelöste Volumenbilder
"Langsame" Strömung  Stokesgleichungen
Niedrige Partikelkonzentration  Felder unabhängig von den Partikeln

Materialmodell & Schmutzmodell

Strömungsfeld und Elektrisches Feld

Partikelanlagerung: Druckabfall, Effizienz und Standzeit Simulation

Ergebnisse: Modelle, vorhergesagte Filtereigenschaften, optimierte Medien

Modelle und Gleichungen sind Standard. Neu ist Vollständigkeit des Ansatzes.

Schwierigkeiten: Bestimmung der Parameter, hohe Auflösung für große Ausschnitte.

Ziele: Belastbarkeit, wenig Bedarf an Kalibrierung bei neuen Anwendungen. **Neue Materialien werden hergestellt und Vorhersagen werden verifiziert.**