

---

# Simulation von Nanofasern und Filtrationsprozessen



Liping Cheng

Stefan Rief

Andreas Wiegmann



10. Symposium „Textile Filter“

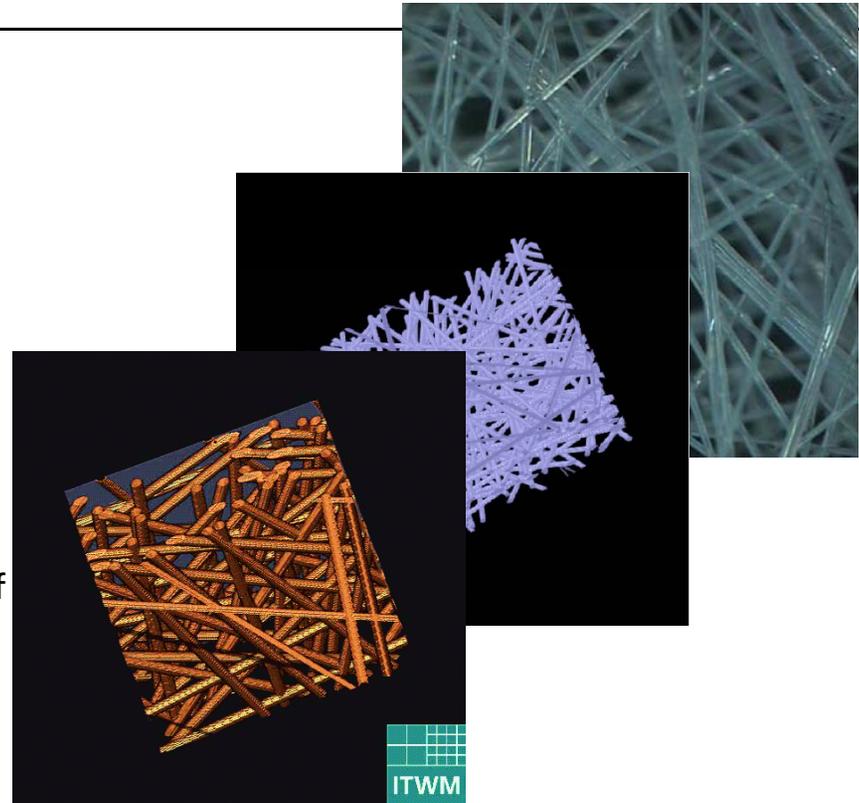
Chemnitz, 9.-10. März 2010.

Wir danken für die Unterstützung des BMBF unter FKZ 13N9861.

---

## Vorschau

- Einführung
- Virtuelles Design von Filtermedien
- Geometrisches Modell mit Nanofasern
- Filtrationssimulation
- Schlupfströmung
- Implementierung und Einfluss von Schlupf
- Zusammenfassung



# Einführung

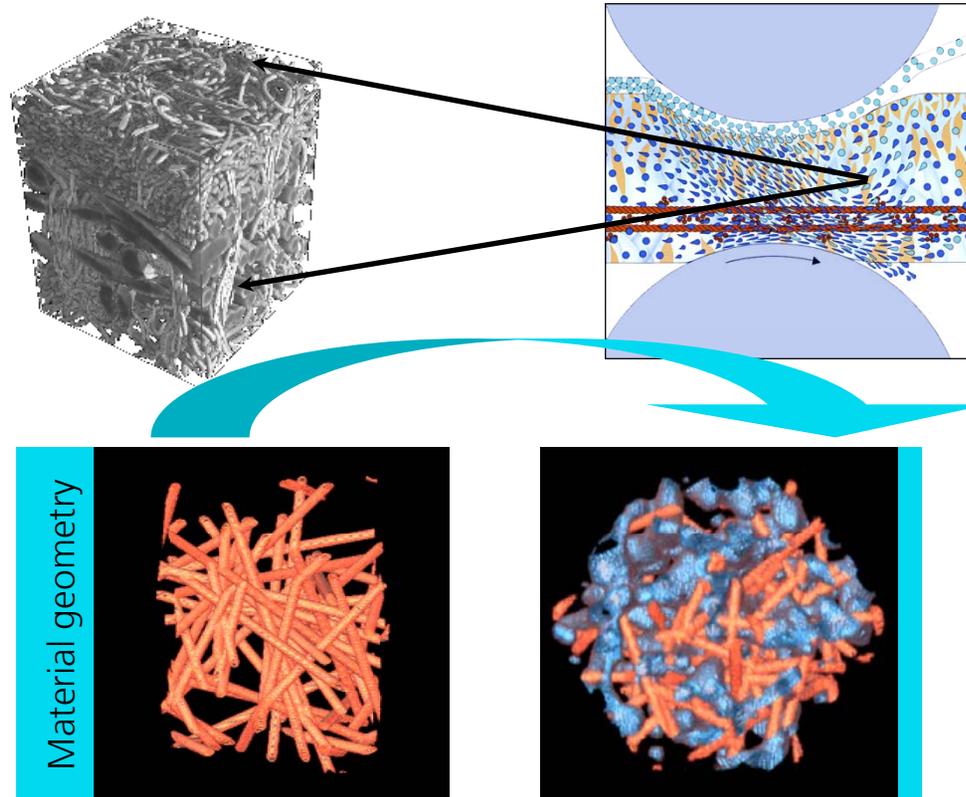
---

- Filtermedien mit Nanofasern: Was und warum?
  - Nonwoven Hersteller sprechen bei Fasern mit Durchmesser unter  $1\mu\text{m}$  von Nanofasern
  - Nanofasern verbessern die Filtereffizienz bei relativ geringem Druckverlustanstieg
  - In Labor- und Feldversuchen zeigen Medien mit Nanofasern bessere Standzeiten und höhere Schmutzkapazitäten als gewöhnliche Filtermedien.
  - Vorteile und Kosten müssen gegeneinander abgewogen werden
- Zu berücksichtigende Physik
  - Strömung
  - Partikeladhäsion
  - Partikelanlagerung
  - ...
- Herausforderungen an die Simulation
  - Die notwendige Auflösung erfordert gewaltige Rechenleistung und Speicher
  - Schlupfrandbedingungen statt Hafttrandbedingung auf den Faseroberflächen

# Methodik

## ➤ Der Zyklus des virtuellen Filtermediendesigns

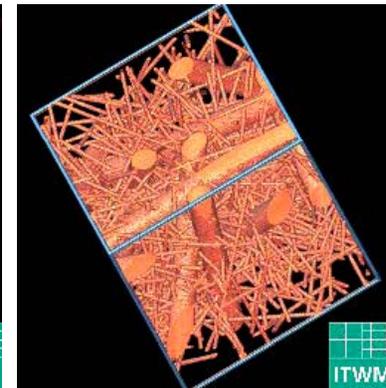
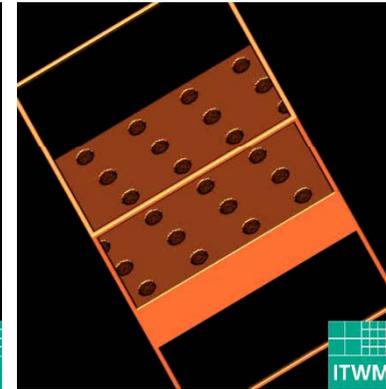
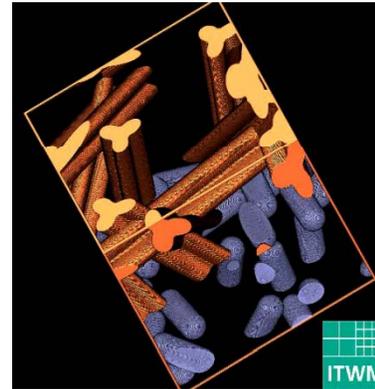
1. Finde Parameter für reales existierendes Medium
2. Generiere dazu die 3d Struktur
3. Löse die Stokeschen Gleichungen in dieser Struktur
4. Berechne die Filtereffizienz für diese Struktur
5. Ändere die Materialparameter
6. Gehe zurück zu 2.



# Methodik

## ➤ Designparameter für Nonwoven Filtermedien

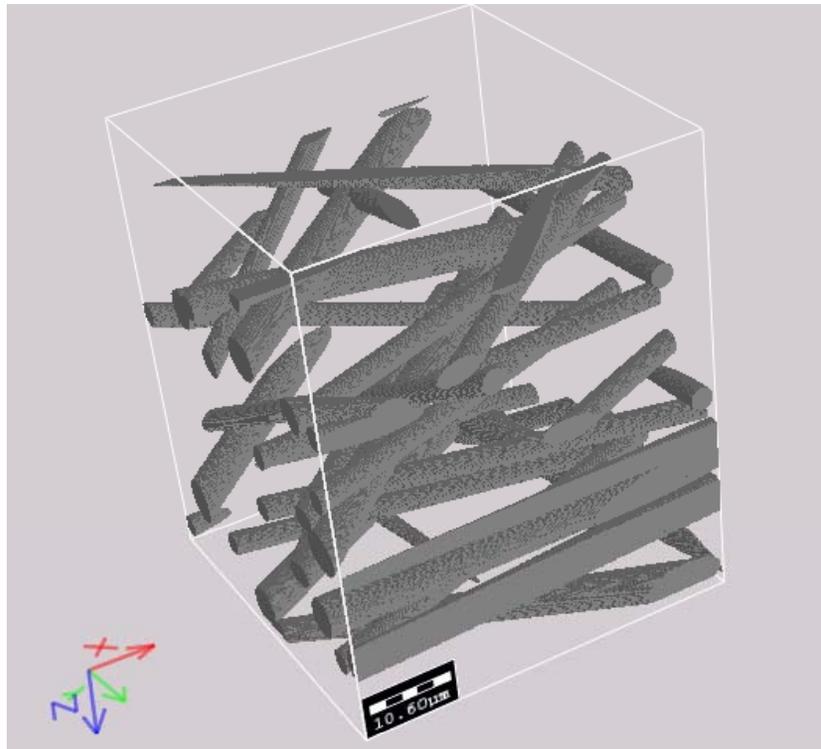
1. Schichtdicke
2. Schichtweise Porosität
3. Schichtweise Faserdurchmesser
4. Schichtweise Anisotropie
5. Schichtweise Faserquerschnitte
6. Kombination mit anderen Schichttypen, z.B. porösen Membranen
7. (Nicht)überlappende Fasern
8. Faserkrümmung
9. Unendlich lange Fasern
10. Genügend großes Rechenggebiet, um „repräsentativ“ zu sein.
11. Auflösung muss hoch genug sein im Vergleich zu Strömung und Partikeln



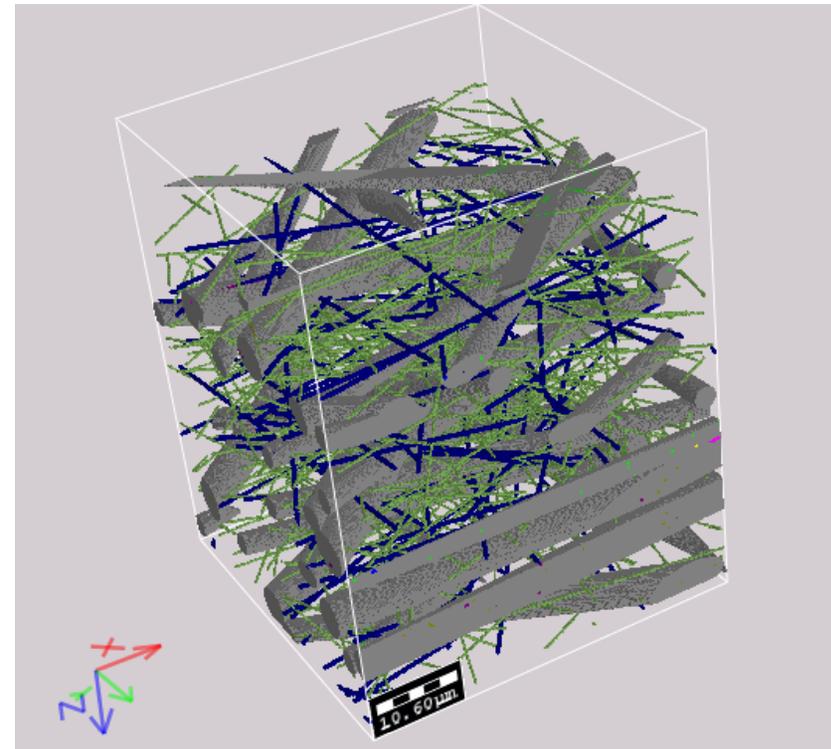
# Mikrofasern und Nanofasern

Medium 1: volumetrisch äquivalent verteilte 3 und 5  $\mu\text{m}$  Fasern; 10% Vol. %

Medium 2: Medium 1 + Nanofasern 300, 500 nm (gesamt Vol. 11%)



Medium 1



Medium 2

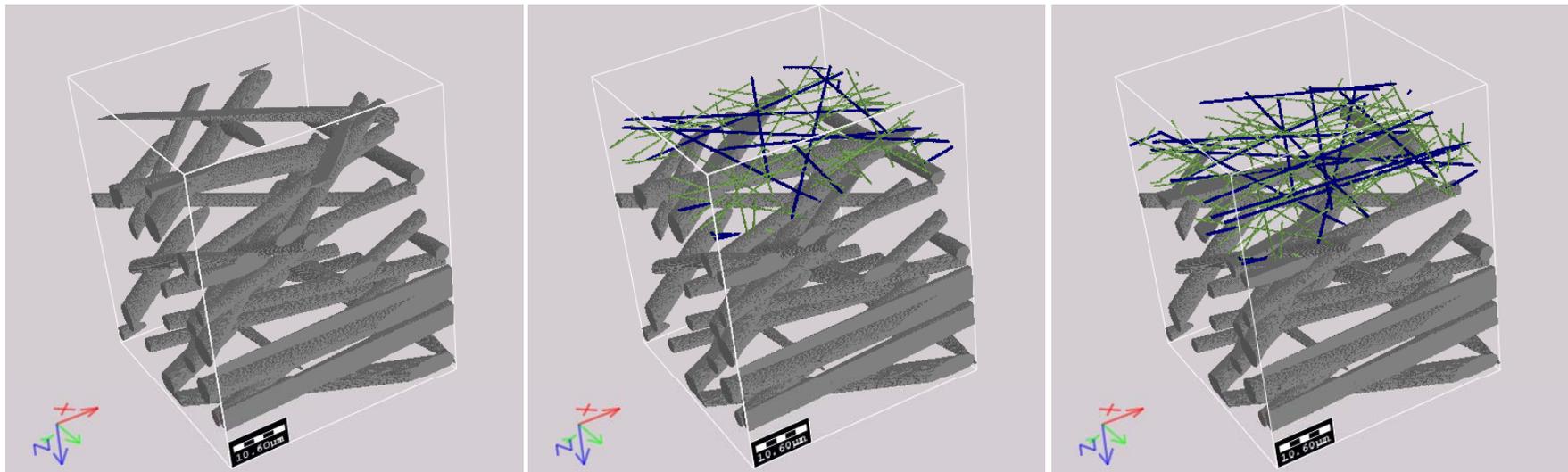
## Microfasern und Nanofaserschicht

---

Medium 1: wie Medium 1, andere Faserpositionen

Medium 3: Medium 1, oberste 5  $\mu\text{m}$  durch Nanofasern ersetzt

Medium 4: Medium 1, oberste 10  $\mu\text{m}$  durch Nanofasern ersetzt



Medium 1

Medium 3

Medium 4

## Methodik

---

### ➤ Eulersche Beschreibung der stationären Stokesströmung Hafttrandbedingung (kein Schlupf)

$$-\mu\Delta\vec{u} + \nabla p = 0 \text{ (momentum balance)}$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \text{ (mass conservation)}$$

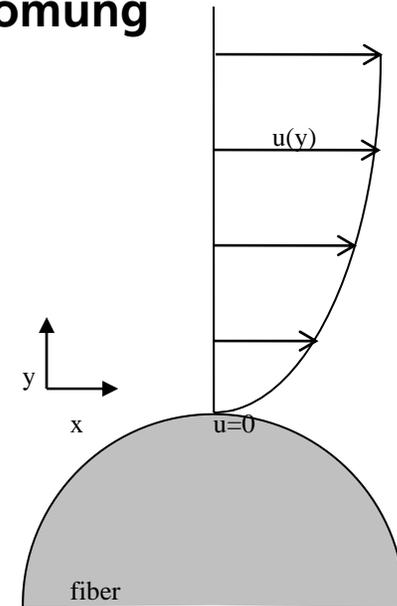
$$\vec{u} = 0 \text{ on } \Gamma \text{ (no-slip on fiber surfaces)}$$

$$P_{in} = P_{out} + c \text{ (pressure drop is given)}$$

$\mu$  : fluid viscosity,

$\vec{u}$  : velocity, periodic,

$p$  : pressure, periodic up to pressure drop in flow direction.

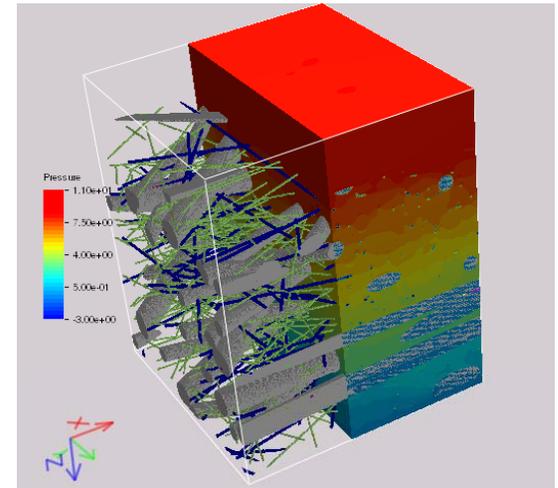
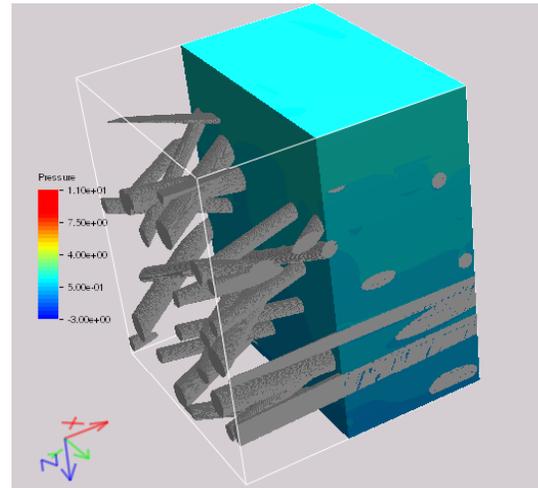


# Mikrofasern und Nanofasern

Medium 1

Medium 2

Druckverlust

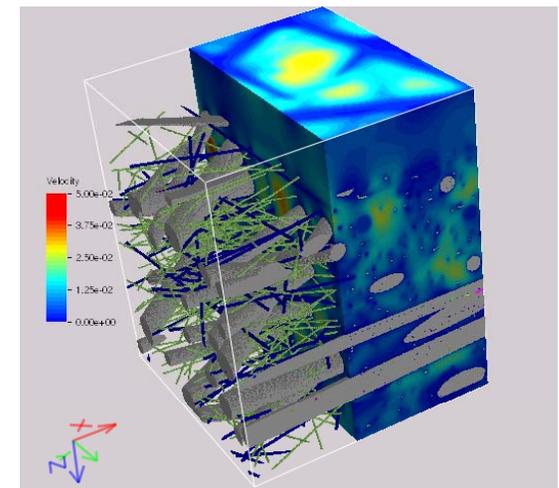
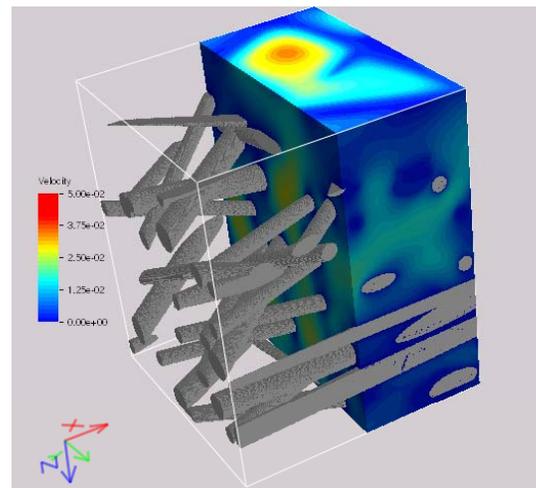


$\Delta P = 1.45 \text{ Pa}$

$\Delta P = 8.25 \text{ Pa}$

bei Anströmges-  
chwindigkeit 0.01m/s

Geschwindigkeit



# Methodik

---

## ➤ Partikelbewegung

$$d\vec{v} = -\gamma \times (\vec{v}(\vec{x}(t)) - \vec{u}(\vec{x}(t))) dt + \sigma \times d\vec{W}(t),$$

$$d\vec{x} = \vec{v}(\vec{x}(t)) dt,$$

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

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

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

$\vec{u}$  : Fluidgeschwindigkeit

$\vec{v}$  : Partikelgeschwindigkeit

$t$  : Zeit

$T$  : Temperatur

$\gamma$  : Reibungskoeffizient

$R$  : Partikelradius

$\rho$  : Fluid-Dichte

$\mu$  : Fluid-Viskosität

$\bar{w}$  : Wiener Maß (3d)

$k_b$  : Boltzmannkonstante

$m$  : Partikelmasse

$Kn$  : Knudsenzahl

[Latz & Wiegmann, Filtech 2003]

---

# Methodik

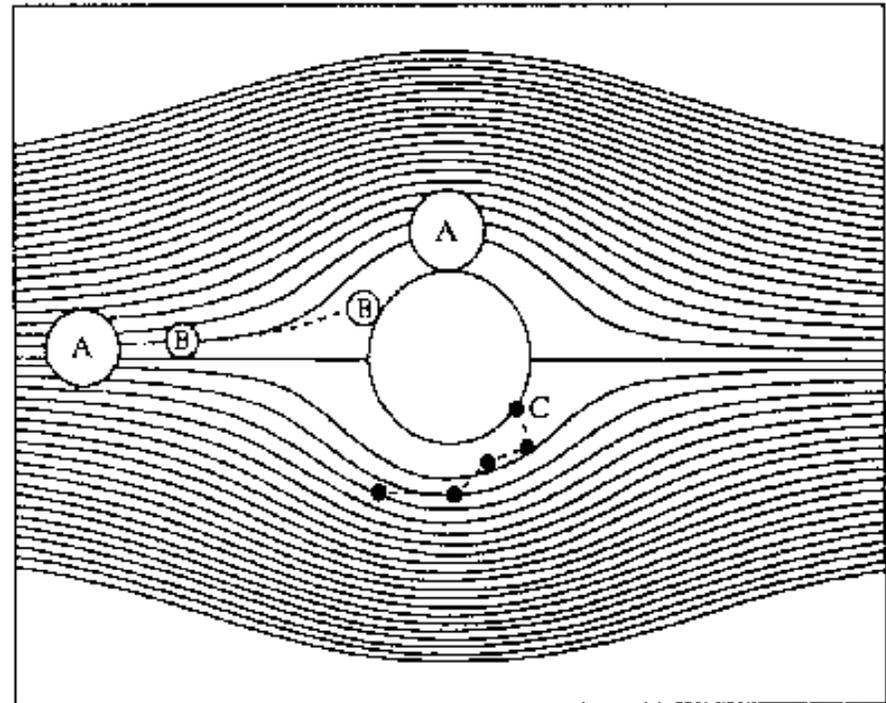
---

## ➤ Filtrationsmechanismen

**A:** Sperreffekt

**B:** Trägheit

**C:** Brownsche Diffusion



# Methodik

---

## ➤ 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

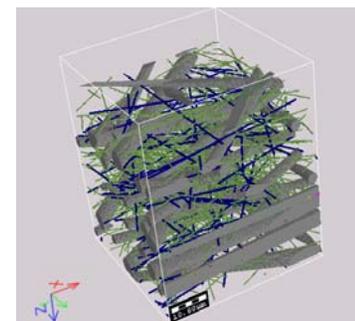
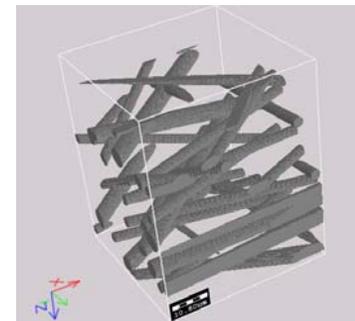
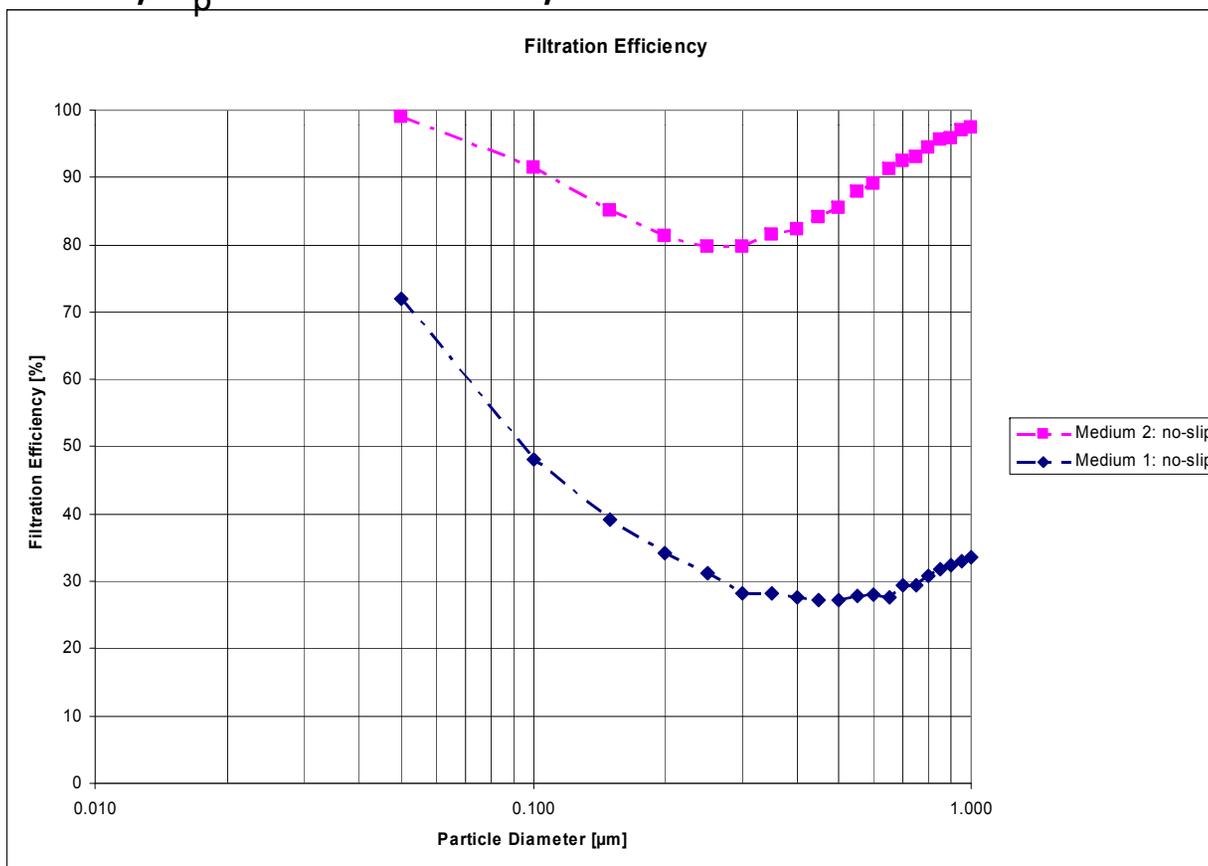
# Mikrofasern und Nanofasern

➤ Druckverlust

Medium	1	2
$\Delta P$	1.45	8.25

➤ Luft bei 20°C

➤ NaCl,  $d_p$  50 bis 1000 nm;  $v = 1$  cm/s

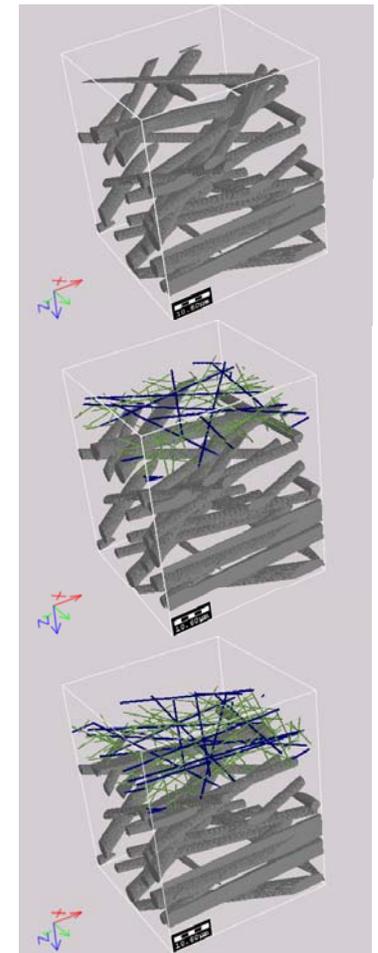
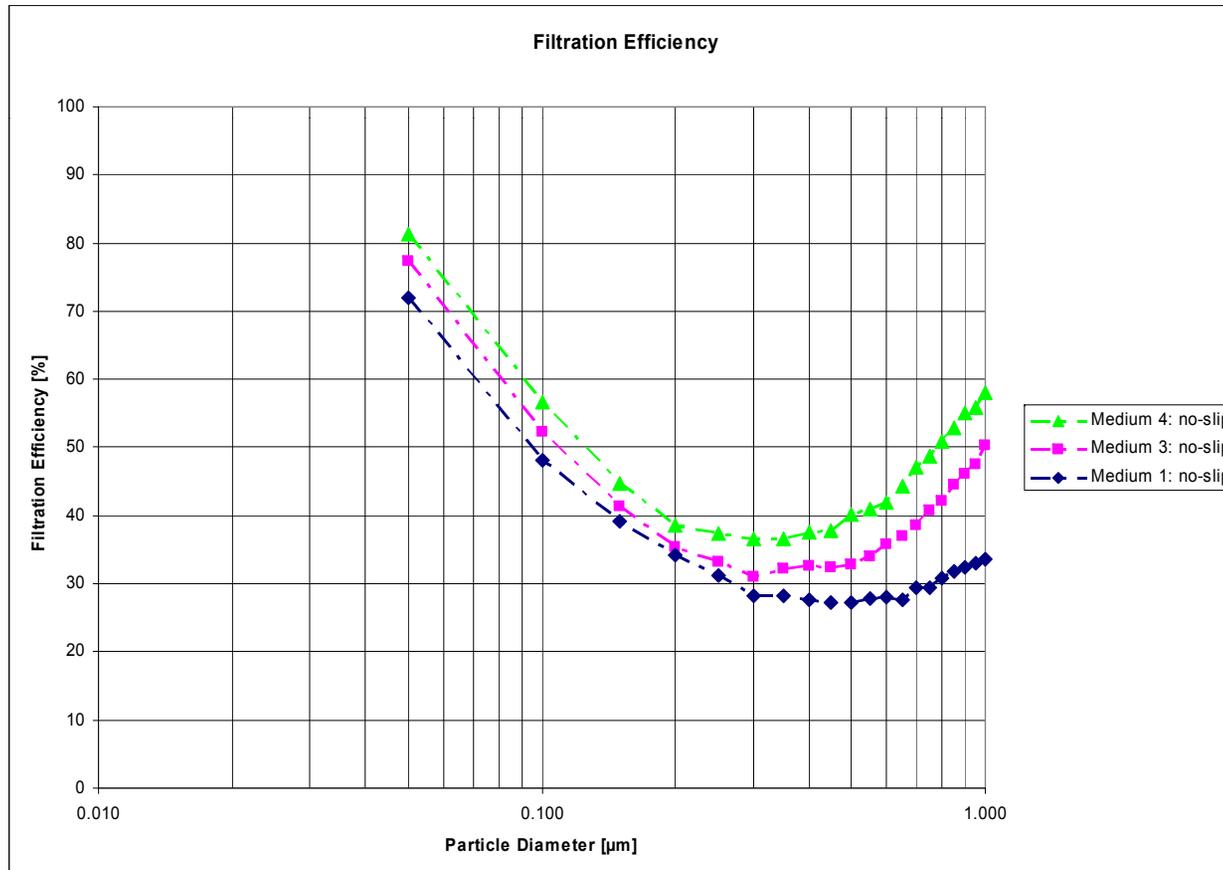


# Mikrofasern und Nanofasern

## ➤ Druckverlust

Medium	3	4	5
$\Delta P$	1,45	1,99	2,16

## ➤ Filtereffizienz



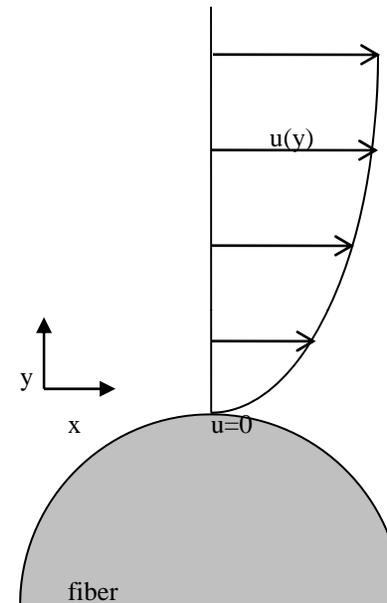
## Schlupfrandbedingung

Schlupfrandbedingungen modellieren die Geschwindigkeit parallel (tangential) zur Oberfläche und proportional zur Scherspannung [1,2]

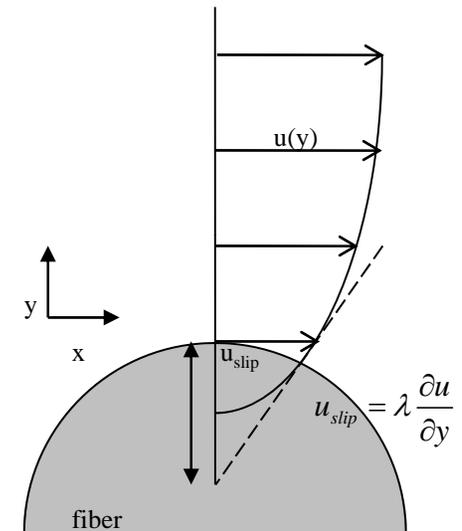
$$u = \lambda \frac{\partial u}{\partial y}$$

$\lambda$  ist die Schlupflänge bzw. der Schlupfkoeffizient

**Annahme: Schlupflänge für Luft bei 20°C ist ~ 100 nm.**



Haft  
Randbedingung



Schlupf  
Randbedingung

[1] C. L. M. H. Navier, Mem. Acad. R. Sci. Inst. France 1, 414 (1823).

[2] S. Goldstein, Modern Developments in Fluid Dynamics (Dover, New York, 1965), vol. 2, p. 676

# Methodik

## ➤ Eulersche Beschreibung der stationären Stokesströmung Haftrandbedingung und Schlupfrandbedingung

$$-\mu\Delta\vec{u} + \nabla p = 0 \text{ (momentum balance)}$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \text{ (mass conservation)}$$

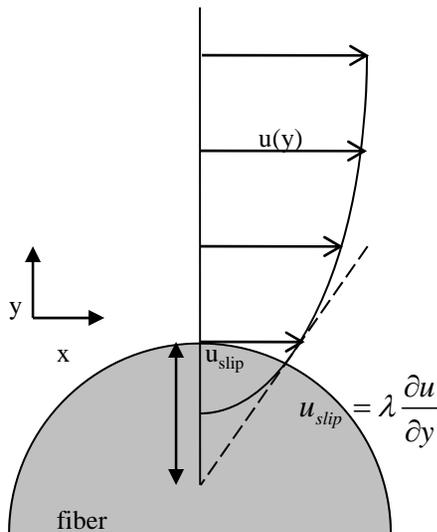
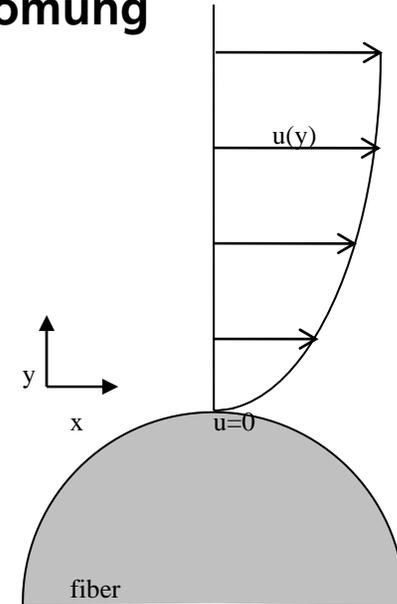
$$\vec{u} = 0 \text{ on } \Gamma \text{ (no-slip on fiber surfaces)}$$

$$P_{in} = P_{out} + c \text{ (pressure drop is given)}$$

$\mu$  : fluid viscosity,

$\vec{u}$  : velocity, periodic,

$p$  : pressure, periodic up to pressure drop in flow direction.



$$-\mu\Delta\vec{u} + \nabla p = 0 \text{ (momentum balance)}$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \text{ (mass conservation)}$$

$$\vec{n} \cdot \vec{u} = 0 \text{ on } \Gamma \text{ (no flow into fibers)}$$

$$\vec{t} \cdot \vec{u} = -\lambda\vec{n} \cdot \nabla (\vec{u} \cdot \vec{t}) \text{ on } \Gamma \text{ (slip flow along fibers)}$$

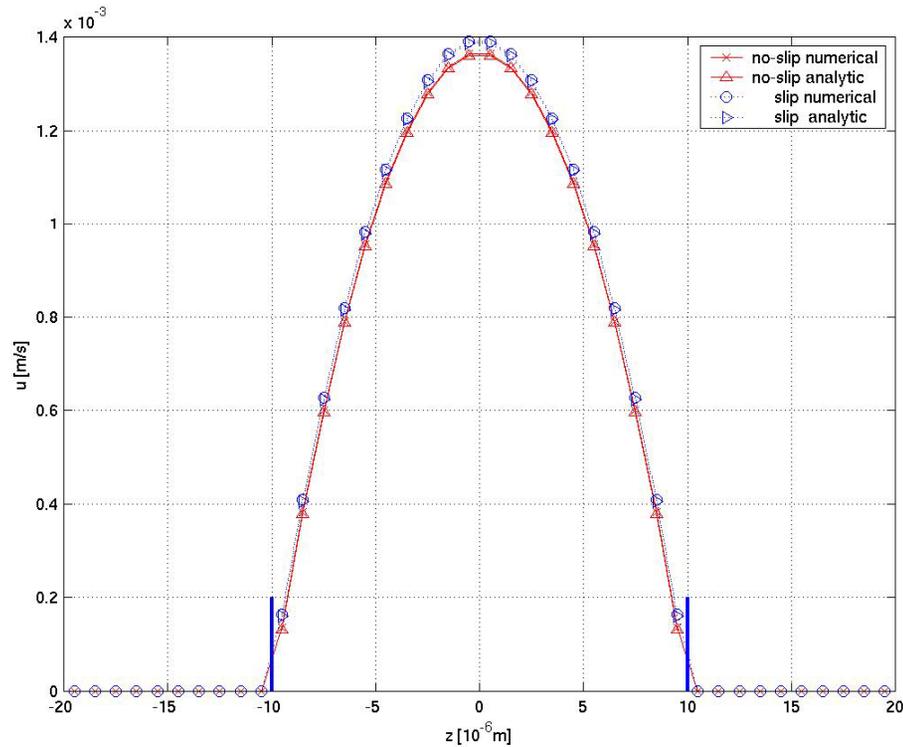
$$P_{in} = P_{out} + c \text{ (pressure drop is given)}$$

$\vec{n}$  : normal direction to the fiber surface,

$\lambda$  : slip length,

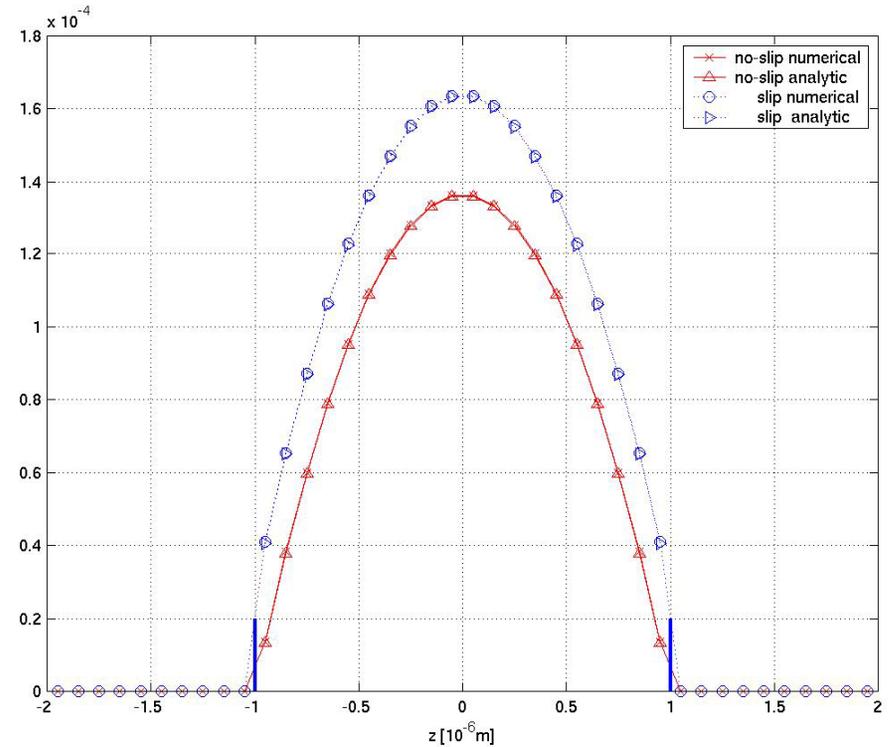
$\vec{t}$  : any tangential direction with  $\vec{t} \cdot \vec{n} = 0$ .

## Benchmark: parabelförmiges Poiseuille Profil (Strömung zwischen zwei parallelen unendlichen Platten)



Abstand der Platten = **20** $\mu\text{m}$ ;

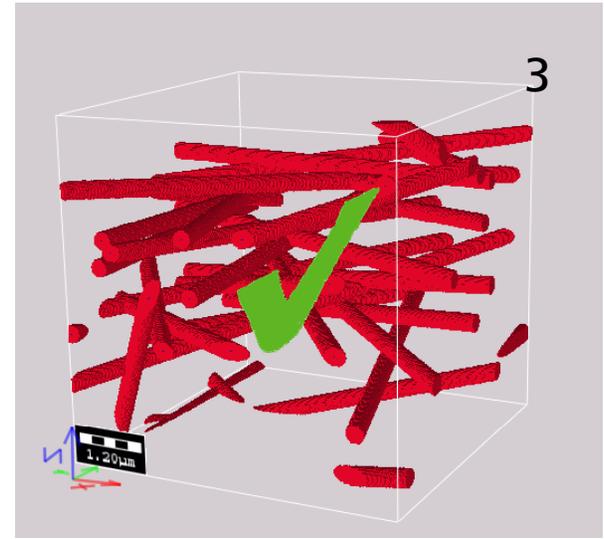
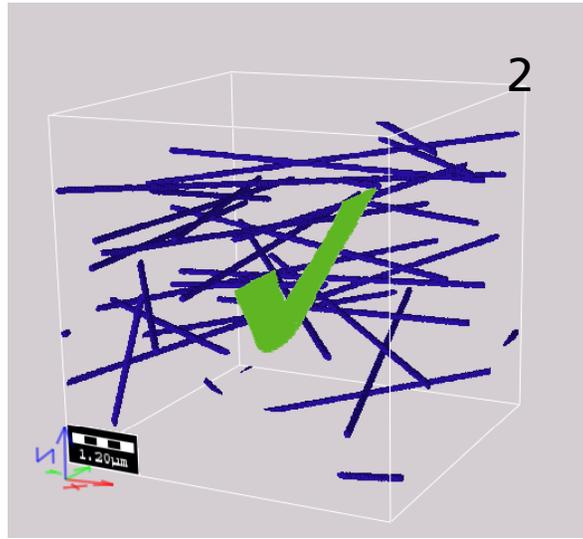
$\lambda = 100 \text{ nm}$ ;  $dp/L = 5000 \text{ Pa/m}$ ;



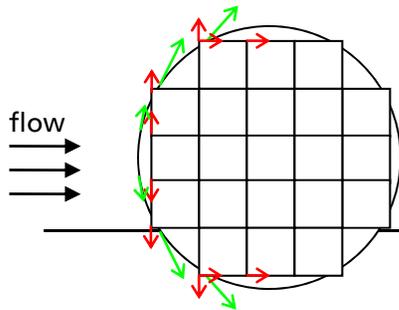
Abstand der Platten = **2** $\mu\text{m}$ ;

$\lambda = 100 \text{ nm}$ ;  $dp/L = 5000 \text{ Pa/m}$ ;

# 3 Wege, Schlupfströmungen zu simulieren



- Schlupfrandbedingung

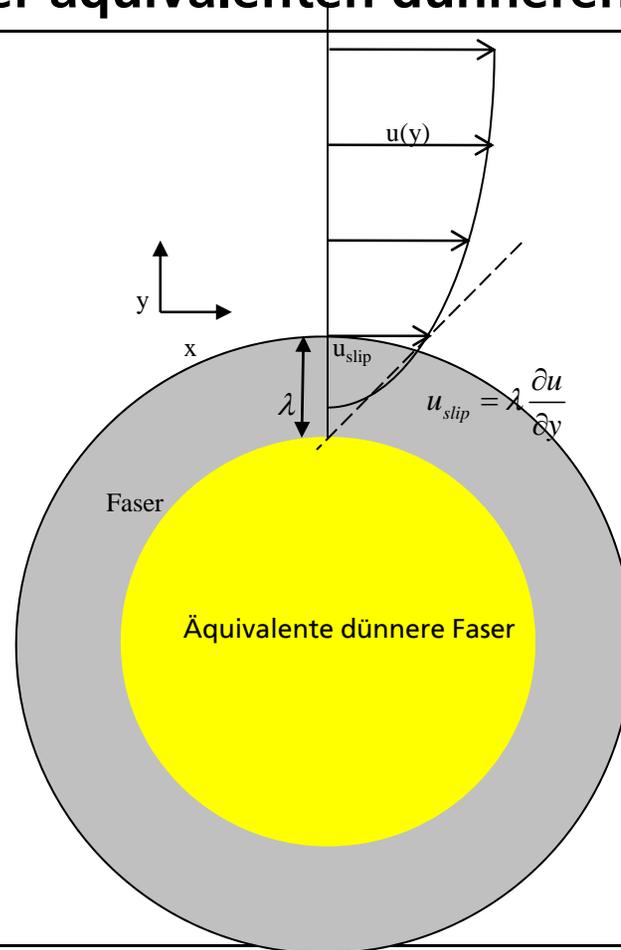


- Äquivalente dünnere Fasern mit Hafttrandbedingung
- Schnell
- Benötigt 1 für Filtration

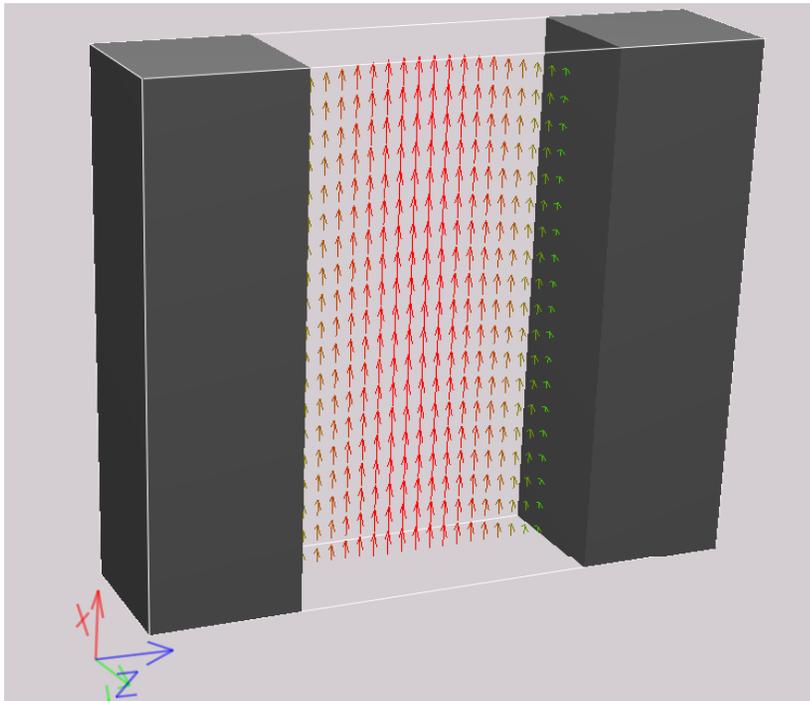
- Äquivalente permeable Fasern
- Langsamer
- Kann auch Filtration

# Bestimmung der äquivalenten dünneren Faser

---

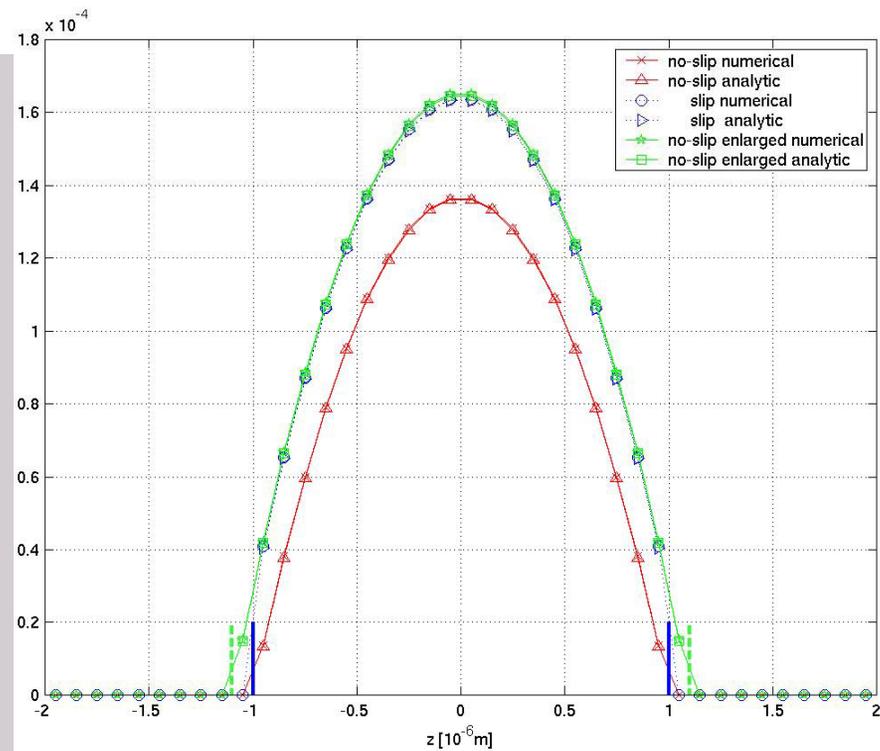


## Benchmark: parabelförmiges Poiseuille Profil (Strömung zwischen zwei parallelen unendlichen Platten)



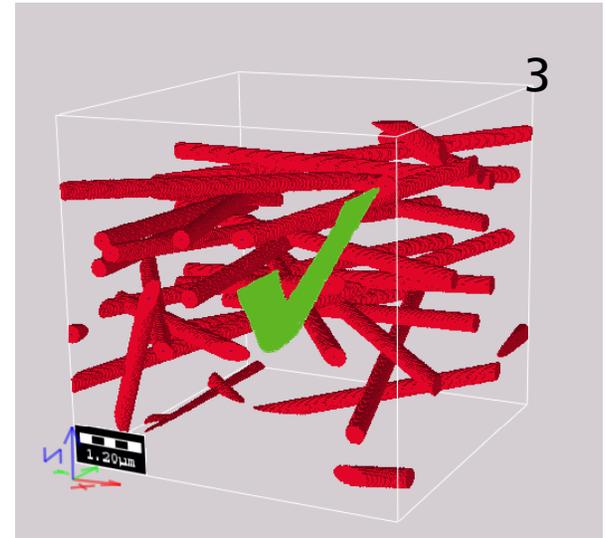
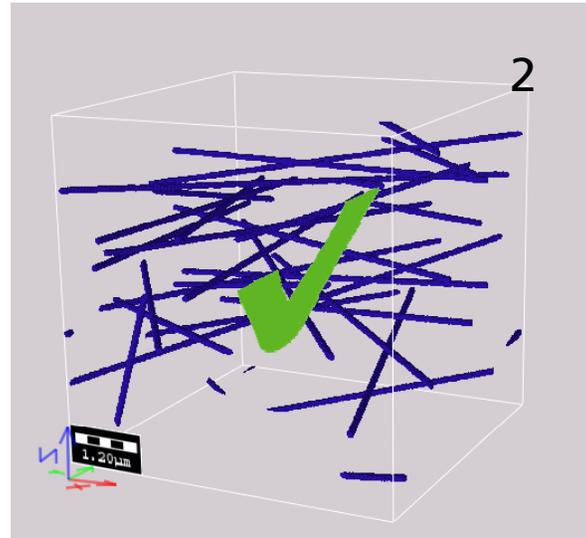
Abstand der Platten =  $2\mu\text{m}$ ;

$\lambda = 100\text{ nm}$ ;  $dp/L = 5000\text{ Pa/m}$ ;

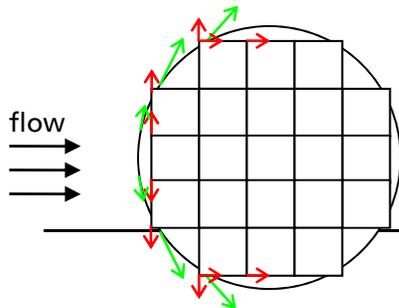


Die Pore vergrößert bis zur grünen Linie.

# 3 Wege, Schlupfströmungen zu simulieren



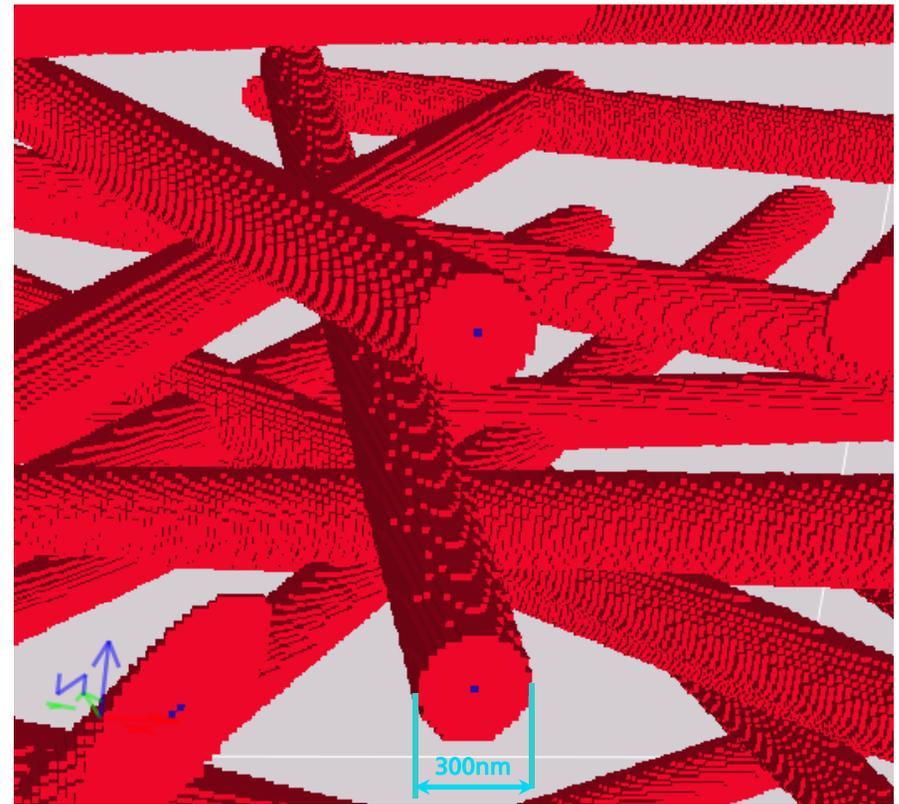
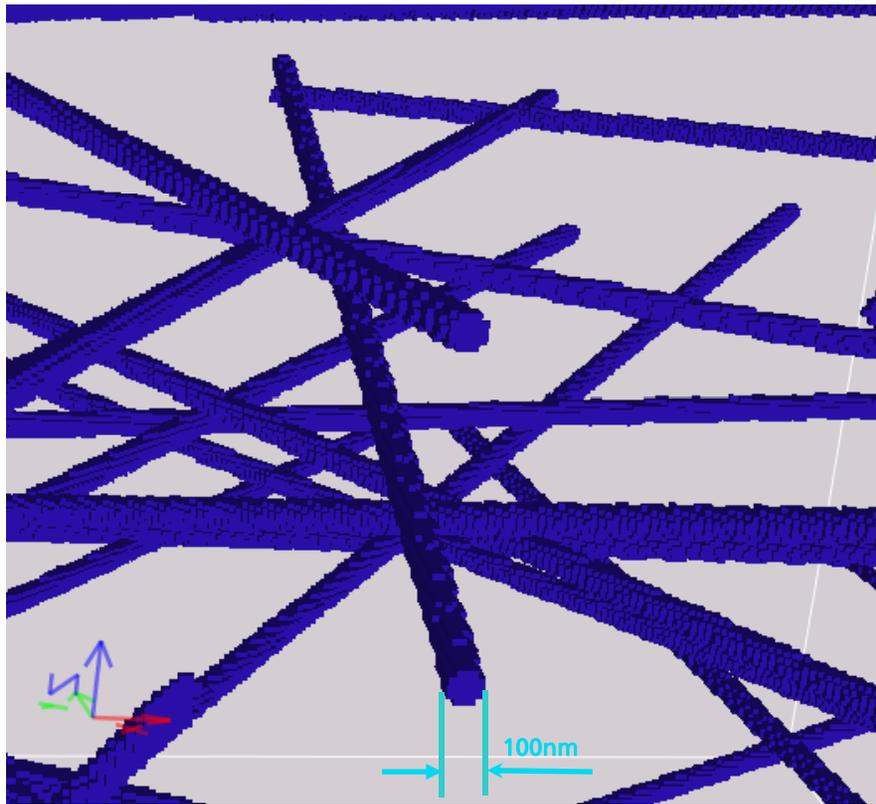
- Schlupfrandbedingung



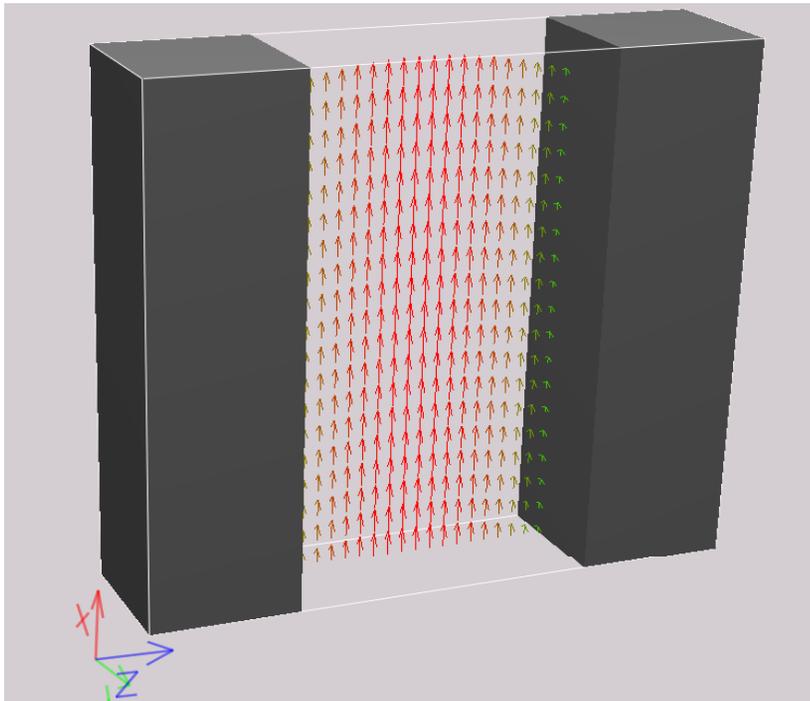
- Äquivalente dünnere Fasern mit Hafttrandbedingung
- Schnell
- Benötigt 1 für Filtration

- Äquivalente permeable Fasern
- Langsamer
- Kann auch Filtration

## Detail: Äquivalente dünnere und äquivalente permeable Fasern

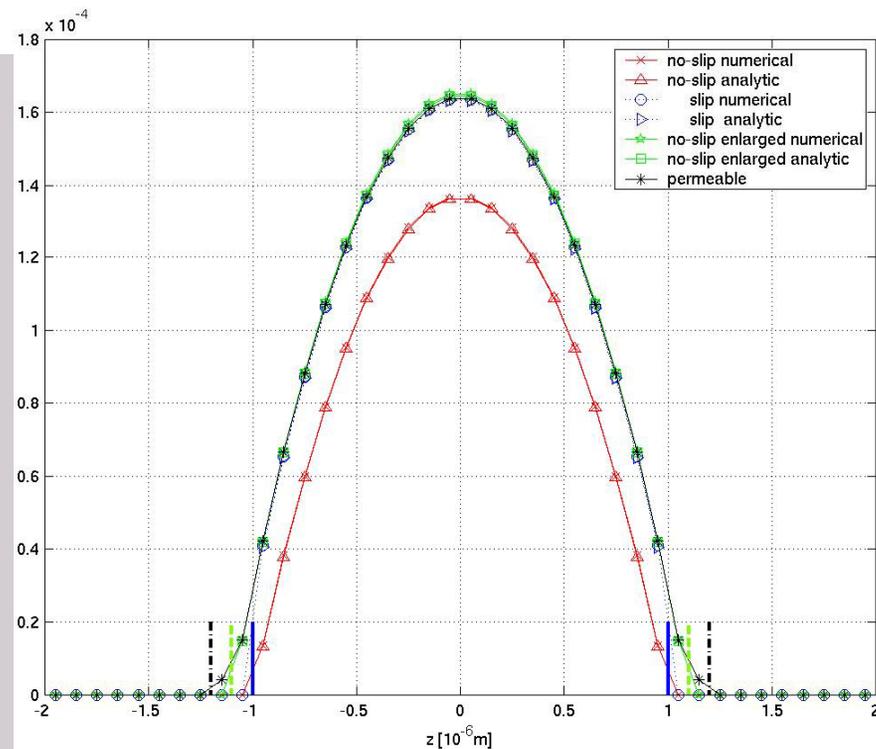


## Benchmark: parabelförmiges Poiseuille Profil (Strömung zwischen zwei parallelen unendlichen Platten)



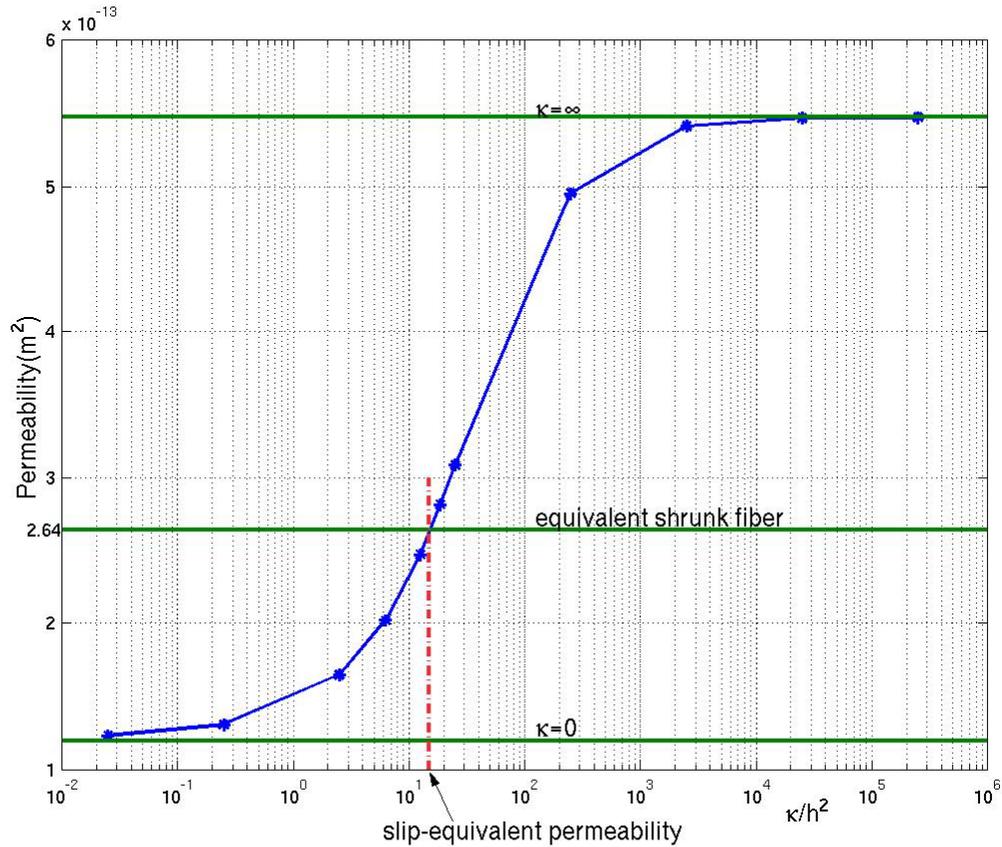
Abstand der Platten =  $2\mu\text{m}$ ;

$\lambda = 100\text{ nm}$ ;  $dp/L = 5000\text{Pa/m}$ ;

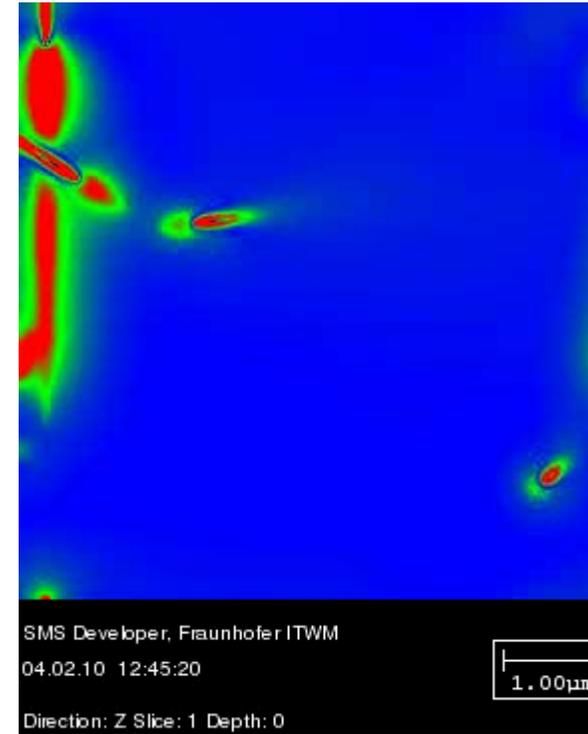


Permeable Zonen (blau - schwarz), äquivalente Permeabilität wird über gleich mittlere Strömungsgeschwindigkeit bestimmt.

# Bestimmung der Permeabilität der äquivalenten permeablen Fasern



Voxellänge: 20nm  
 Größe: 300 x 300 x 300



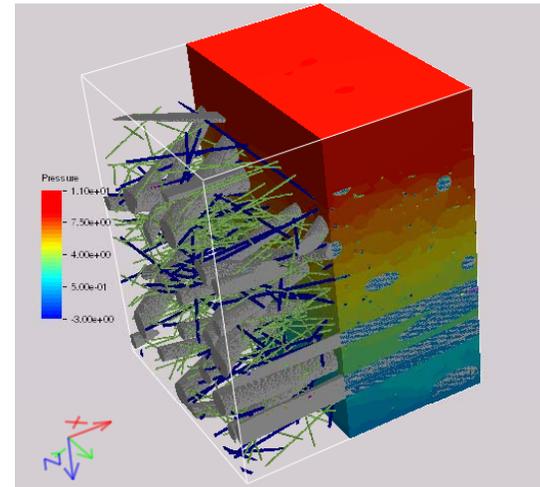
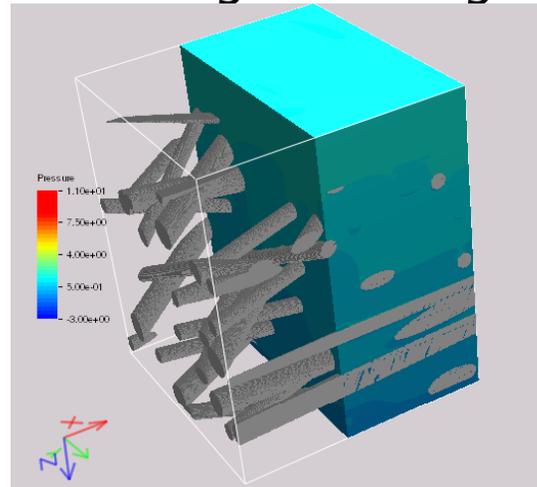
Red: 0.00001    Blue: 0.00000

Differenz der Strömungsgeschwindigkeiten für äquivalente permeable Fasern und äquivalente dünnere Fasern

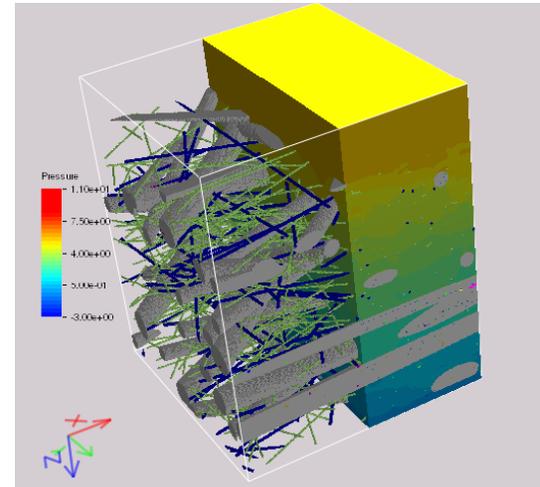
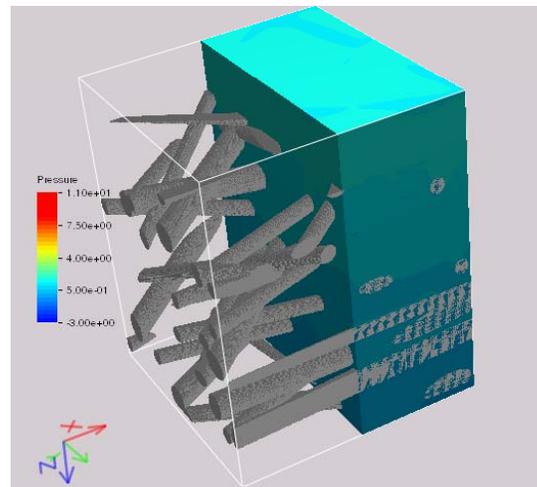
# Mikrofasern und Nanofasern

Druckverlust bei Anströmgeschwindigkeit 0.01m/s

No\_slip



Slip



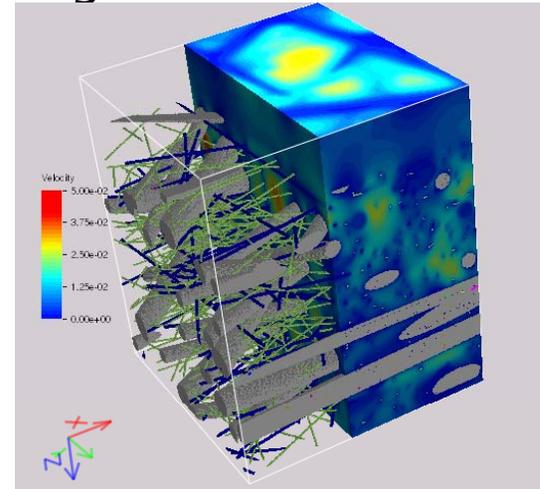
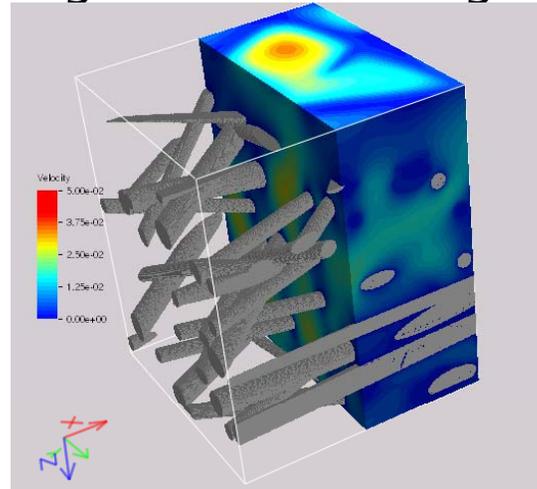
Medium 1: diff 7.6%

Medium 2: diff 34%

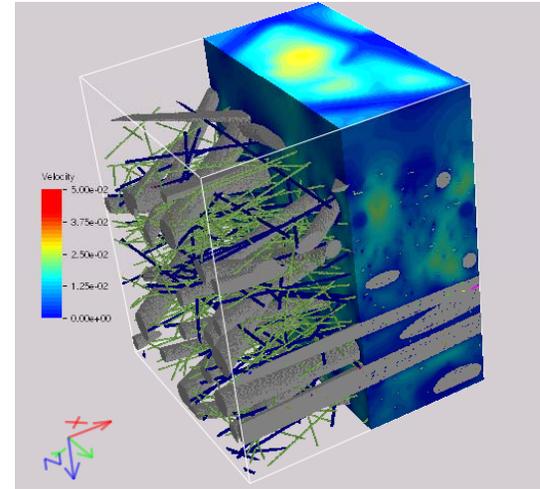
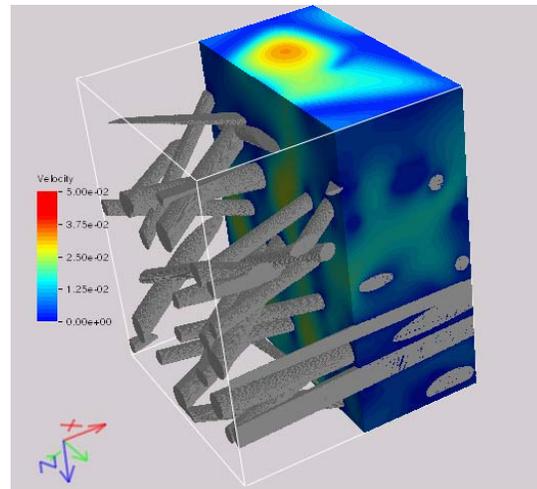
# Mikrofasern und Nanofasern

Lokale Geschwindigkeit bei Anströmgeschwindigkeit 0.01m/s

No\_slip



Slip



Medium 1

Medium 2

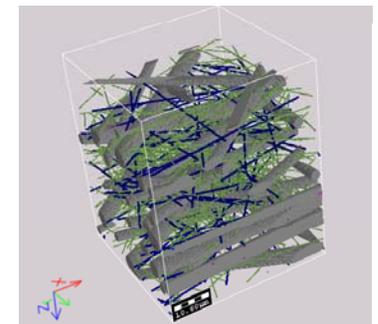
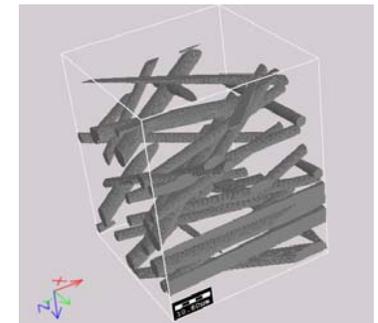
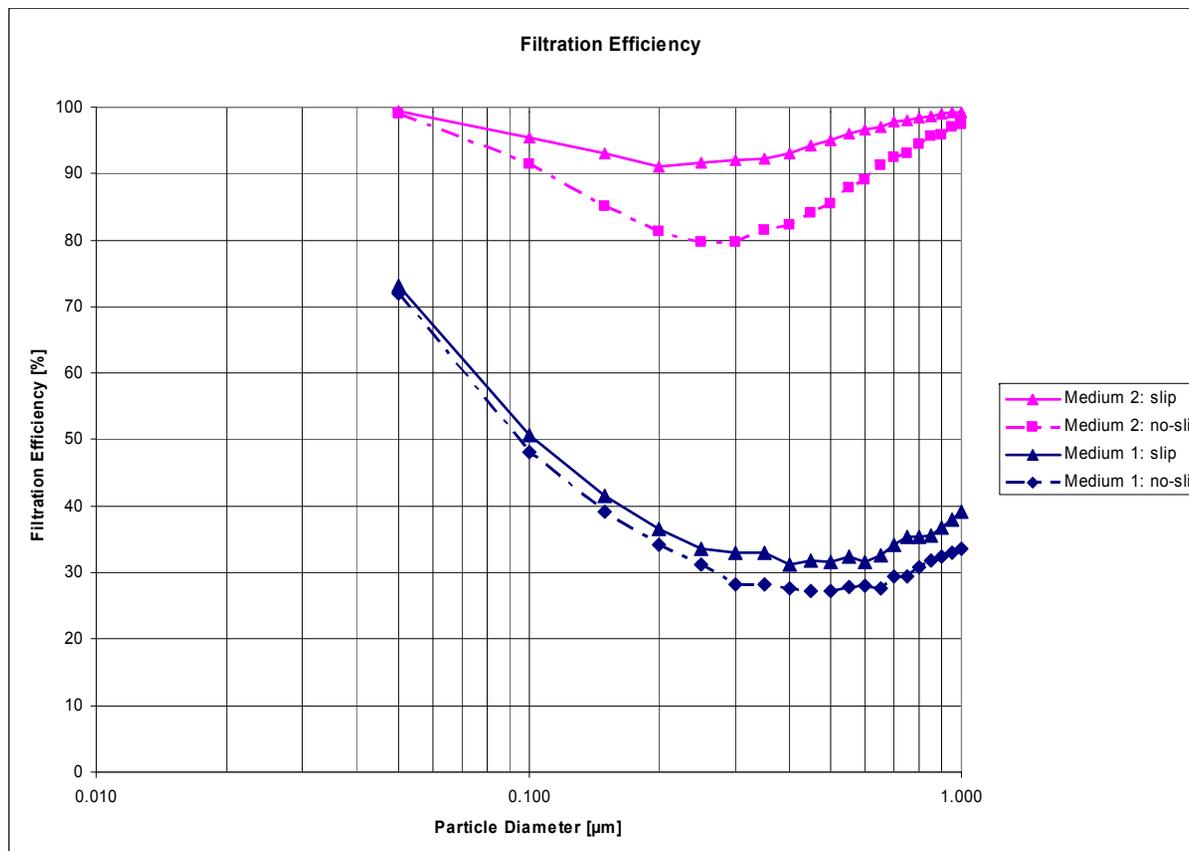
# Schlupf verbessert Druckverlust und Filtereffizienz

## ➤ Druckverlust

bei 1 cm/s

Media	1	2
$\Delta P$ (no-slip)	1.45	8.25
$\Delta P$ (slip)	1.34	5.44

## ➤ Filtrationseffizienz



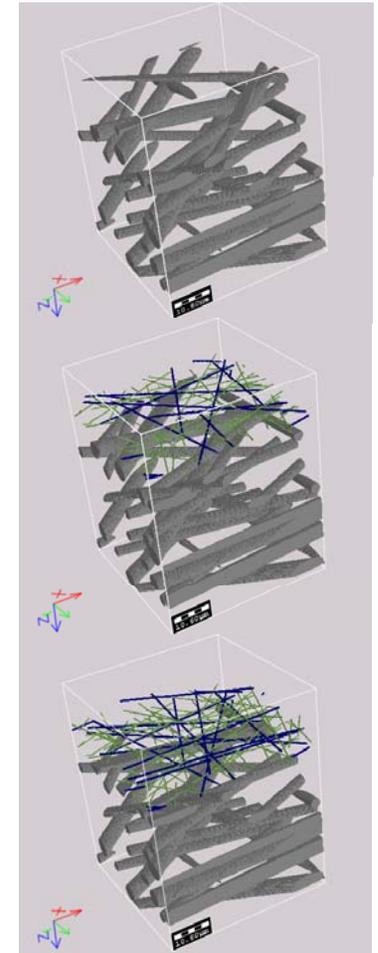
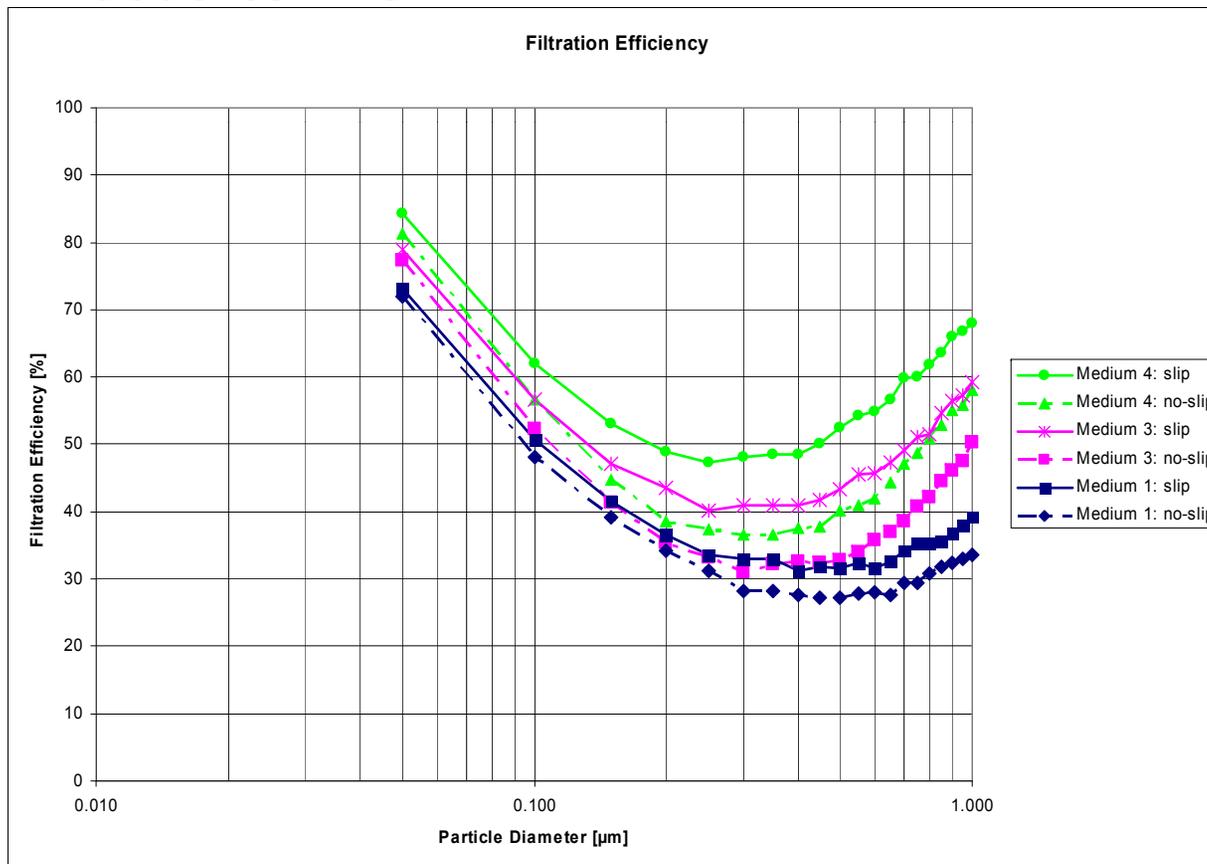
# Schlupf verbessert Druckverlust und Filtereffizienz

➤ Druckverlust

bei 1cm/s

Media	1	3	4
$\Delta P(\text{no-slip})$	1.45	1.99	2.16
$\Delta P(\text{slip})$	1.34	1.63	1.68

➤ Filtrationseffizienz



## Zusammenfassung

---

- Simulation des Druckverlustes und der Filtereffizienz
- Modelle für Nanofasern "verteilt" und "auf der Oberfläche"
- Nanofasern verbessern die Filtereffizienz, erhöhen den Druckverlust
- Schlupfrandbedingung auf äquivalenten dünneren bzw. permeablen Fasern
- Berechnungen auf dünneren Fasern ergeben Permeabilität äquivalenter Fasern
- Schlupf verbessert die Filtereffizienz und den Druckverlust

---

**Wenn Sie mehr wissen wollen:**

**GEO** DICT

**[www.geodict.com](http://www.geodict.com)**



## **Danksagung:**

Wir danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) für die Unterstützung unter dem FKZ 13N9861, im

Verbundprojekt: Nano-Meltblown-Fasern für Filtermedien (NaBlo) - Teilvorhaben: Modellierung, Simulation und Optimierung von Meltblownprozess und Nanofaserfiltermedien.