

## **Simulation der Rußfiltration und Optimierung des Gefügedesigns im Forschungsvorhaben**

### **„Thermochemisch resistentes Cordierit für Dieselpartikelfilter“ (CorTRePa)**

#### **Abschlussbericht**

Förderkennzeichen:

03X3502C

Bewilligungszeitraum:

1.4.2006 – 31.3.2009

Berichtszeitraum:

1.4.2006 – 31.3.2009

Projektleiter:

Dr. Andreas Wiegmann

Hauptsächlich beteiligte wissenschaftliche Bearbeiter:

Dipl.-Math. Kilian Schmidt

Dr. Stefan Rief

Dr. Andreas Wiegmann

Dr. Dirk Kehrwald

Datum: 30.9.2009

Verteiler: ITWM-Mitarbeiter, PTJ-Otten, Bosch-Engel, HITK-Dohndorf, IKM-Hoffmann,  
MVT-Sommerfeld

Unterschrift:



## 1 Kurze Darstellung

### 1.1 Aufgabenstellung

Ziel war die Entwicklung und Anwendung numerischer Verfahren zur Simulation der Tiefen- und Oberflächenfiltration von Ruß im Filtermedium von Dieselpartikelfiltern. Die Modellierung dieser Phänomene sollte auf den Filternahbereich beschränkt sein, wobei die Mikrostruktur des Substrats aufgelöst werden sollte. Dazu sollte die Werkstoffentwicklung mit einem durch Simulation unterstützten Gefügedesign gekoppelt werden.

Die Simulationen hatten die Vorhersage der Rußabscheidung im Substrat während der Filterbeladung zum Ziel, wobei der einhergehende zeitabhängige Druckabfall über dem Substrat und die korrespondierenden Filtrationswirkungsgrade für variable Substratgeometrien berechnet werden sollten. Technisch wurde ein möglichst hoher Filtrationswirkungsgrad bei einem möglichst niedrigen Druckabfall angestrebt. Die geometrischen Eigenschaften des Substrates waren mit Blick auf diese Kriterien zu optimieren, d.h. auf Basis einer orts- und zeitaufgelösten Berechnung der Rußabscheidung sollte im Filtermedium die Mikrostruktur des Substrats im Hinblick auf die miteinander konkurrierenden Kriterien Filtrationswirkungsgrad und Filtergedruck optimiert werden.

### 1.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das Fraunhofer ITWM ist ein anerkanntes Institut der Fraunhofer Gesellschaft, dessen Kompetenz mathematische Anwendungen für Industrie, Technik und Wirtschaft sind. Dabei liegt ein Schwerpunkt insbesondere auf dem Gebiet von Strömungsvorgängen in komplexen Strukturen. Schon Jahre vor dem Projektbeginn und parallel zu CorTRePa in parallelen Projekten wurde und wird diese Kompetenz systematisch auf das Anwendungsfeld der hoch aufgelösten Modellierung und Simulation der Strömungs- und Anlagerungsprozesse auf der Nano- und Mikroskala in Filtermedien angewendet und erweitert. Die mathematische Beschreibung von Feinstrukturmodellen poröser Materialien wie technischen Textilien, Schäume oder Sinterstrukturen durch stochastische Geometriemodelle, die effiziente Lösung der Navier - Stokes - Gleichungen in der Feinstruktur mit Lattice - Boltzmann - Verfahren sowie die Anlagerungsdynamik von Partikeln und die Filterkuchenbil-

dung (poröse Partikelschicht) werden hierbei zu einem nutzbaren Simulationsinstrument zusammengeführt.

Das Alleinstellungsmerkmal des am ITWM verfolgten Ansatzes war und ist die ganzheitliche Betrachtung der Filtermedienmodellierung, der Strömungssimulation in großen und damit repräsentativen Materialausschnitten sowie der Simulation des Transportes und der Anlagerung von Partikeln. Zu Projektbeginn aktuelle Referenzen sind unter [4, 9, 10, 13, 16] angegeben.

### 1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Die Robert Bosch GmbH agierte als Koordinator des gesamten Verbundprojektes. Das Arbeitsprogramm im AP5 Modellierung und Simulation wurde in Abstimmung mit den einzelnen Projektpartnern, besonders mit der Abteilung CR/ARH der Robert Bosch GmbH und mit dem Institut für Mechanische Verfahrenstechnik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg erstellt und durchgeführt.

Im Projekt sollten optimale Cordierit Varianten für den Einsatz in neuen Dieselrußpartikelfiltern durch Weiterentwicklung und Einsatz von Simulationswerkzeugen gefunden werden. Hierzu sollten am ITWM dreidimensionale Computermodelle der Mikrostruktur von Cordierit - Keramiken mit und ohne Beschichtung generiert werden.

Eine Voraussetzung für eine erfolgreiche Bearbeitung dieses Arbeitspakets ist die virtuelle Generierung der Mikrostruktur verschiedener Cordierite. Sie liegt der eigentlichen Filtrationssimulation zu Grunde. Die Mikrostrukturmodelle sollten zusammen mit berechneten Sehnenlängenverteilungen und Porositäten in einer Datenbank gespeichert werden, so dass der Benutzer sich zu einer vorgegebenen Porosität und Sehnenlängenverteilung entsprechende Modelle aus der Datenbank anzeigen lassen kann. Zur Generierung von faserbasierten Mikrostrukturmodellen gab es zu Projektbeginn das GeoDict Modul FiberGeo, in dem schon einige methodische Vorkenntnisse zur Strukturgenerierung auch von gesinterten Strukturen erarbeitet worden waren.

Anhand der Mikrostrukturmodelle sollte die Abscheidung von Dieselrußpartikeln und der Aufbau von Rußschichten innerhalb der Mikrostruktur der Cordierit - Keramiken simuliert werden, so dass per Simulation der zeitliche Verlauf von Abscheidrate und Druckverlust für verschiedene Cordierit - Varianten bestimmt und optimiert werden kann.

GeoDict enthielt zu Projektbeginn u. a. schon das Modul PoroDict zur Berechnung von Porengrößenverteilungen für dreidimensionale Mikrostrukturmodelle oder zweidimensionale importierte Schliffbilder. PoroDict wurde im Projektverlauf auf Sehnenlängenverteilungen erweitert.

Zur Rekonstruktion der dreidimensionalen Mikrostruktur von Cordierit - Keramiken sollte in GeoDict ein neues Modul SinterGeo eingebaut werden. Von Bosch sollten Schliffbilder und gemessene Porositäten und Permeabilitäten für die zu rekonstruierenden Keramiken zur Verfügung gestellt werden. Die Validierung der mit GeoDict / SinterGeo generierten Modelle sollte durch Vergleich von Sehnenlängenverteilungen von Modellen und Schliffbildern sowie den Vergleich von berechneten und gemessenen Porositäten und Permeabilitäten geschehen.

Keramik-Mikrostrukturmodelle mit Beschichtung sollten nach durch die Robert Bosch GmbH zu spezifizierenden Bedarfs generiert werden.

Einem Trend in der Wissenschaft folgend wurde als zweite Voraussetzung zur Strömungsberechnung die Lattice – Boltzmann – Methode verwendet. Diese Methode ist für geometrisch hoch komplexe Strukturen wie die hier betrachteten Keramiken besonders gut eignet.

Eine besondere Schwierigkeit entsteht dadurch, dass die für das Gegendruckverhalten bedeutende Tiefenfiltration und der nachfolgende Übergang zur Oberflächenfiltration im Inneren des Substrates stattfinden und die kleinsten relevanten Längenskalen durch  $O(10^1\text{nm})$  gegeben sind. Ein experimenteller Zugang ist daher im Allgemeinen nicht möglich. Da die Auflösung aller relevanten Längenskalen in einer einzigen Filtrationssimulation auf einen unverhältnismäßig hohen Rechenaufwand führt, werden hoch auflösende Simulationen als dritte Voraussetzung auf handhabbare Modellgeometrien beschränkt. Das erarbeitete Verständnis und Wissen auf der Nanoskala wird durch eine geeignete Model-

lierung auf die Mikroskala übertragen und für die Filtrationssimulation in realen Filterstrukturen angewendet.

Zur Bestimmung der Permeabilität für dreidimensionale Mikrostrukturmodelle durch Berechnung einer Stokes'schen Strömung stand das GeoDict Modul FlowDict zur Verfügung.

Mit dem GeoDict Modul FilterDict konnte die Abscheidung von Mikropartikeln in Mikrostrukturmodellen simuliert werden. In einem vorangegangenen Projekt wurde GeoDict / FilterDict auch schon für die Simulation von Dieselrußpartikeln mit Durchmessern zwischen 2 und 200 Nanometern eingesetzt, jedoch mit einem vereinfachten Anlagerungsmodell. Die Simulationen waren nicht im Detail anhand von Messungen validiert worden. Die Strömungsberechnungen, die bei Filtrationssimulationen mit GeoDict / FilterDict mit dem Lattice - Boltzmann Code ParPac des Fraunhofer ITWM durchgeführt wurden, sollten noch effizienter gemacht werden hinsichtlich Speicherbedarf, Laufzeit und Handhabung bzw. Ein- / Ausgabeformaten.

GeoDict / FilterDict sollte durch Simulation von Berußungsexperimenten, die bei Bosch durchgeführt werden sollten, getestet und bei Bedarf weiterentwickelt werden. Hierfür sollten von Bosch Abscheidrate- und Druckabfallkurven für die Berußung von Mikrosieben und Keramiken zur Verfügung gestellt werden. Sobald die Rußfiltrationssimulation mit GeoDict / FilterDict hinreichend realistische Ergebnisse lieferte, sollten nach Bedarf seitens Boschs für Mikrostrukturmodelle verschiedener Keramiken Rußfiltrationssimulationen durchgeführt werden zur Identifizierung einer optimalen Keramikvariante.

Für die Generierung der Mikrostrukturmodelle, die Ansteuerung der Datenbank und die Filtrationssimulation sollte das am ITWM zu Projektbeginn bereits seit über 5 Jahren entwickelte Softwarepaket GeoDict benutzt werden.

Um die Relevanz der Simulationen für die Gesamtprojektziele sicherzustellen wurde auch eng mit den anderen Arbeitspaketen Werkstoffentwicklung und Werkstoffcharakterisierung zusammen gearbeitet. Mit der Werkstoffcharakterisierung wurden Anforderungen an zwei- und dreidimensionale Aufnahmen existierender Cordierite aber auch herkömmlicher Russpartikelfiltermaterialien mit zugehörigen Analysen (Porengrößen, Sehnenlängen) erarbeitet und die Ergebnisse für die Strukturgenerierung und den Vergleich von Modellen

und realen Materialien verwendet. Aus der Werkstoffentwicklung kamen wertvolle Impulse, welche Fragestellungen dort am relevantesten sind und die auch schon per Simulation behandelt werden können.

Der Ablauf des Projektes orientierte sich durchgehend eng an der ursprünglichen Planung die sich als geeignet, aber bezüglich des Erreichens des letzten Projektzieles als etwas zu ambitioniert herausstellte.

#### 1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Die Generierung von Mikrostrukturmodellen für Cordierit - Keramiken war zu Projektbeginn im Allgemeinen nur bis zu einem gewissen Gütegrad möglich. Es waren spezielle Algorithmen bekannt, die nur zur Modellierung einer gewissen Klasse von Mikrostrukturen anwendbar sind und Defizite haben bez. Realitätstreue und Weiterverwendbarkeit der Modelle (gleiches Modell mit höherer Auflösung diskretisieren, Strukturvariationen generieren). Entsprechende Strukturgenerierungssoftware war noch im Forschungs-Stadium und nicht kommerziell verfügbar [2, 6, 7, 12, 15].

Die Simulation der Abscheidung von Dieselrußpartikeln anhand von Mikrostrukturmodellen war ebf. noch Forschungsgegenstand. Verschiedene Forschergruppen weltweit arbeiteten auf dem Gebiet, jedoch mit bislang unvollständigen Ergebnissen. Die Simulationen waren nicht realistisch genug bzw. nicht genug abgeglichen mit Messungen, und die Simulationssoftware war noch im Entwicklungsstadium, d.h. nicht verkäuflich und nicht optimal bez. benötigtem Speicher und Rechenleistung [1, 5, 6, 7, 8, 11, 14, 15].

#### 1.5 Verwendete Fachliteratur

- [1] Dillon, H., Stewart, M., Maupin, G. und Gallant, T., *Optimizing the Advanced Ceramic Material for Diesel Particulate Filter Applications*, SAE-Paper 2007-01-1124, 2007
- [2] X. Jia, M. Gan, R.A. Williams und D. Rhodes., *Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities*, Powder Technology, Volume 174, Issues 1-2, pp. 10-13, 2006.
- [3] Hayashi, H., und Kubo, S., *Computer simulation study on filtration of soot particles in diesel particulate filter*, Computers and Mathematics with Applications 55, pp. 1450-1460, 2008

- [4] Kehrwald, D., *Parallel Lattice Boltzmann Simulation of Complex Flow*, Tagungsband des NAFEMS-Seminars „Die Simulation komplexer Strömungsvorgänge“, Niedernhausen bei Wiesbaden (2004.)
- [5] Koltsakis, G.C., Konstantinou, A., Haralampous, O.A. und Samaras, Z.C., *Measurement and intra-layer modeling of soot density and permeability on wall-flow filters*, SAE-Paper 2006-01-0261, 2006
- [6] Konstandopoulos, A.G., Kostoglou, M., Vlachos, N. und Kladopoulou, E., *Progress in Diesel Particulate Filter Simulation*, SAE-Paper 2005-01-0946, 2005
- [7] Konstandopoulos, A. G., Vlachos, N. D. und Patrianakos, G., *Application of Digital Material Methods to Silicon Carbide Diesel Particulate Filters*, SAE-Paper 2007-01-1131, 2006
- [8] Lantermann, U., *Simulation der Transport- und Depositionsvorgänge von Nanopartikeln in der Gasphase mittels Partikel - Monte - Carlo und Lattice - Boltzmann - Methoden*, Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2006
- [9] Latz, A. und Wiegmann, A., *Virtuelles Filtermaterialdesign mit GeoDict / FilterDict*, Laboratory IT User Services 1 (1) 2004
- [10] Latz, A. und Wiegmann, A., *Simulation der Luftfiltration in Mikrostrukturen*, Proceedings des Symposium Textile Filter, Chemnitz (2004)
- [11] Muntean, G. G., Rector, D., Herling, D., Lessor, D. und Khaleel, M., *Lattice-Boltzmann Diesel Particulate Filter Sub-Grid Modeling - a Progress Report*, SAE-Paper 2003-01-0835, 2003
- [12] Politis, M. G., Kikkinides, E. S., Kainourgiakis, M. E. und Stubos, A. K., *A hybrid process-based and stochastic reconstruction method of porous media*, Microporous and Mesoporous Materials 110, S. 92 - 99, 2008
- [13] Schladitz, K., Peters, St., Reinel-Bitzer, D., Wiegmann, A. und Ohser, J., *Design of acoustic trim based on geometric modelling and flow simulation for non-woven*, Computational Materials Science, Volume 38, Issue 1, 2006, pp. 56-66.
- [14] Stewart, M., Rector, D., Muntean, G. G. und Maupin, G., *A mechanistic Model for Particle Deposition in Diesel Particulate Filters using the Lattice-Boltzmann-Technique*, Proceedings of the 28th international Cocoa Beach Conference on advanced Ceramics and Composites, 2004
- [15] Vlachos, N.D., Konstandopoulos, A.G., *Digital materials methods for DPF development*, SAE-Paper 2006-01-0260, 2006
- [16] Wiegmann, A., Rief, St. und Latz, A., *Virtual Material Design and Air Filtration Techniques inside GeoDict and FilterDict*, Jahreskonferenz der American Filtration and Separation Society, Atlanta (2005)

- [17] Yamamoto, K., Satake, S. und Yamashita, H., *Microstructure and particle-laden flow in diesel particulate filter*, International Journal of Thermal Sciences 48, S. 303-307, 2009
- [18] Yang, J., Stewart, M., Maupin, G., Herling, D. und Zelenyuk, A., *Single wall diesel particulate filter (DPF) filtration efficiency studies using laboratory generated particles*, Chemical Engineering Science 64, S. 1625-1634, 2009

## 1.6 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Neben der Zusammenarbeit mit den CorTRePa - Projektpartnern (Bosch, Hermsdorfer Institut für technische Keramiken, Institut für mechanische Verfahrenstechnik der Uni Halle-Wittenberg) gab es wissenschaftlichen Austausch mit dem Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington, USA, und dem Chemical Process Engineering Research Institute, Thessaloniki, Griechenland. Am Fraunhofer Entwicklungszentrum Röntgentechnik (EZRT) und bei der Firma RJL Microanalytic wurden Tomographien von Keramiken erstellt. Diese beiden Institute sind neben dem Fraunhofer ITWM und dem ehemaligen Christian-Doppler Institut in Leoben (Österreich) weltweit führend in der Dieselrußpartikelfiltrationssimulation.

## **2 Darstellung des Projektverlaufs**

### 2.1 Erzielte Ergebnisse

#### 2.1.1 Struktursimulation Keramik

Das Ziel der Mikrostruktursimulation ist immer, aus anderen Daten realistische dreidimensionale Modelle eines Materials zu erstellen, um darauf Eigenschaften ausrechnen zu können. Es ist zu beachten, dass das Modell die Zufälligkeit der realen Struktur nachbilden muss und nicht die exakte Geometrie. Das ist vergleichbar damit, dass unter dem Mikroskop ja auch keine 2 Stellen einer Keramik gleich aussehen, sich aber sehr wohl Eigenschaften wie die mittlere Porengröße, etc. definieren lassen.

Im Falle von Keramiken liegt eine Reihe von Daten standardmäßig aus der Werkstoffcharakterisierung vor, weitere Daten kommen aus der Funktionalitätsmessung der Keramik. Im Detail sind aus der Werkstoffcharakterisierung zweidimensionale Ansichten ver-

füßbar, die per Rasterelektronenmikroskop (REM) oder per Lichtmikroskop aufgenommen sein können. Abbildung 1 zeigt links eine REM-Aufnahme und rechts die Binarisierung dazu. In der Binarisierung werden nur noch schwarze und weiße Pixel verwendet wobei weiße Pixel den Feststoff, also die Keramik, darstellen. Die Binarisierung ist aus zwei Gründen wichtig. Zum ersten wird die Gefügecharakterisierung, also die Bemessung der Eigenschaften, anhand derer die Güte der simulierten Proben erfolgt, daran durchgeführt. Zum anderen sind auch die simulierten Proben binär, allerdings sind die Bilder dreidimensional. Zum Vergleich, eine aktuelle Photokamera hat ca. 4000 x 3000 Bildpunkte oder 12 Megapixel. Eine dreidimensionale Struktur mit 300 x 300 x 300 Bildpunkten hat 27 Megavoxel, wobei ein Voxel (für Volume Cell) das dreidimensionale Pendant zum Pixel ist.

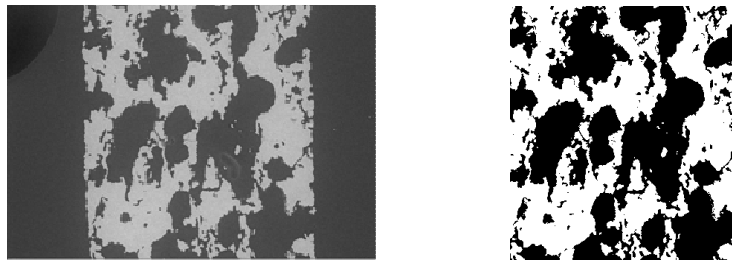


Abbildung 1. REM-Aufnahme (Bosch) einer Wabenwand und deren Binarisierung.

Ausnahmsweise, zum Zwecke der Validierung des Vorgehens, lagen im Projekt auch dreidimensionale Daten zu einer der Proben vor. Diese Aufnahmen sind aufwändiger und teurer und daher bislang nicht standardmäßig in der Gefügecharakterisierung enthalten. Allerdings erlangen diese Art Proben immer mehr an Bedeutung bedingt durch die immer bessere Auflösung und immer niedrigeren Preise sogenannter Mikro - Tomographen.

Anders als im REM entstehen auch bei der Strukturgenerierung dreidimensionale Modelle, die also eher mit Tomographien vergleichbar sind. Abbildung 3 zeigt den Vergleich eines Schliffbildes neben einem dazu passenden dreidimensionalen Modell. Die Ähnlichkeit zur Tomographie in Abbildung 2 zeigt schon visuell die Qualität des Modells.

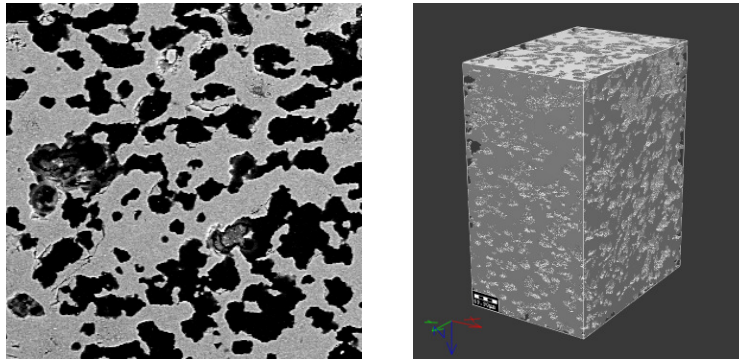


Abbildung 2. REM-Aufnahme (links, Bosch) mit 1,1 µm Auflösung und dreidimensionale Aufnahme (rechts, Fraunhofer EZRT) der gleichen Keramik mit 0,7 µm Auflösung. Das entspricht 0,3 mm x 0,45 mm x 0,57 mm.

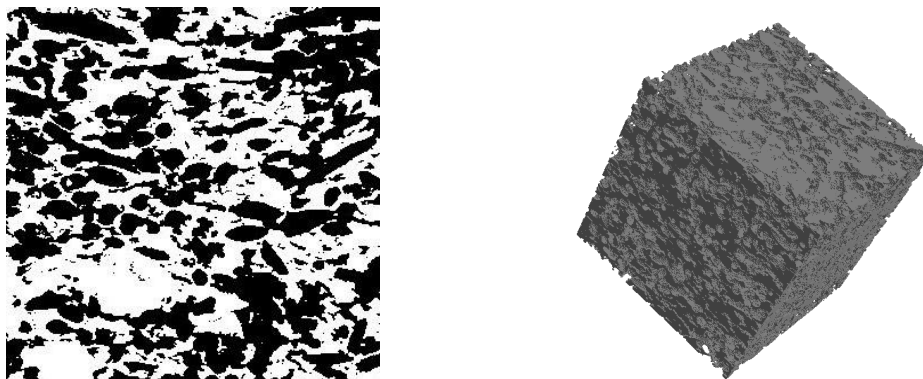


Abbildung 3. REM-Aufnahme (links, Bosch) und dreidimensionales dazu passendes Keramikmodell (rechts).

Während der Projektlaufzeit wurde am Fraunhofer ITWM ein sogenannter 3d Drucker angeschafft, mit dem es möglich ist, generierte Keramikmodelle vergrößert herzustellen. Neben der Möglichkeit, die Keramikstruktur direkt zu sehen und in die Hand zu nehmen besteht damit auch die Möglichkeit, Experimente an simulierten Strukturen durchzuführen. Diese Möglichkeit war in CorTRePa angedacht worden, aber dann als nicht zielführend verworfen worden. Abbildung 4 zeigt neben der Computervisualisierung ein Photo des „dreidimensional gedruckten“ Modells.

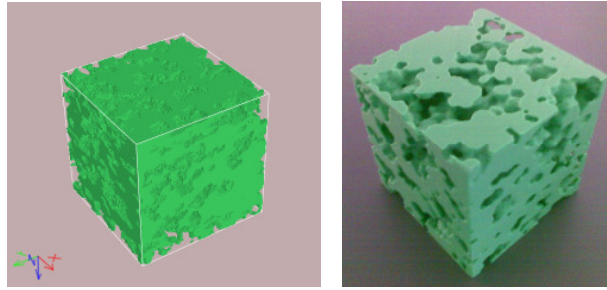


Abbildung 4. Computermodell (links) und dreidimensional gedrucktes Kunststoffmodell (rechts).

Abbildung 5 zeigt abschließend noch einmal die hervorragende Übereinstimmung von Schliffbild, dreidimensionaler Aufnahme und Modell.

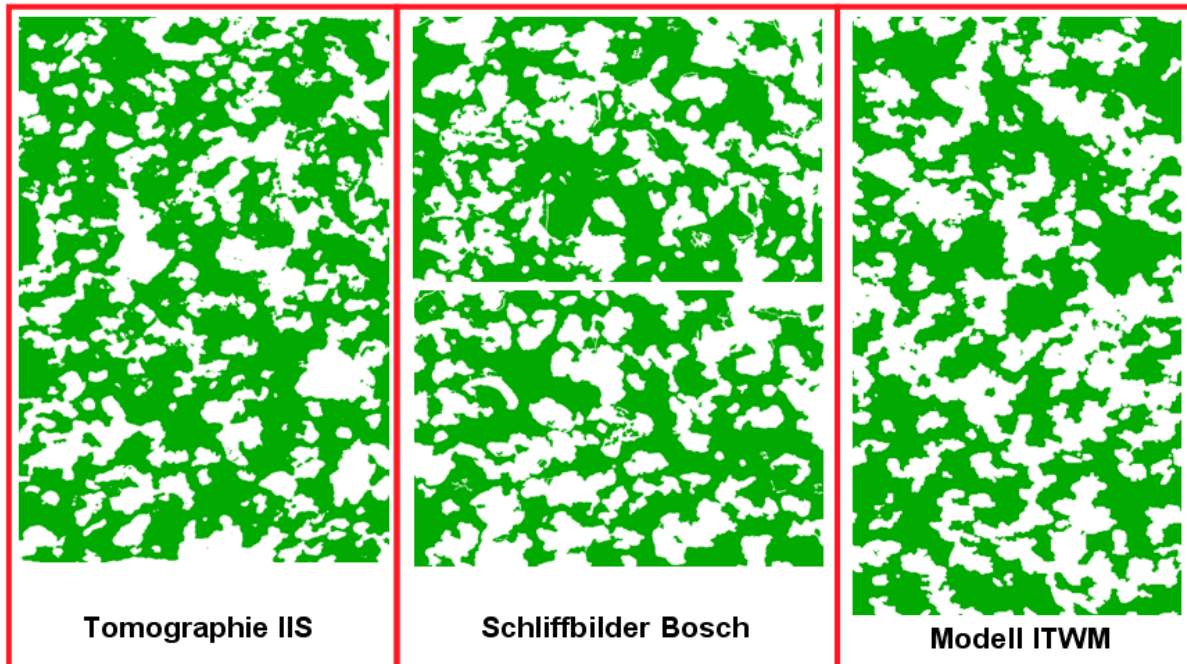


Abbildung 5. Übereinstimmung von 3d Bild (Fraunhofer IIS), Schliffbild (Bosch) und Modell (Fraunhofer ITWM).

Besonders durch die in der Realität nicht mögliche freie Wahl der Auflösung konnten Artefakte bei der Porengrößenbestimmung und Sehnenlängenbestimmung quantifiziert werden, so dass für diese in der Gefügecharakterisierung verwendeten Methoden sinnvolle Einsatzparameter für den Vergleich realer mit simulierten Schliffbildern gefunden werden konnten.

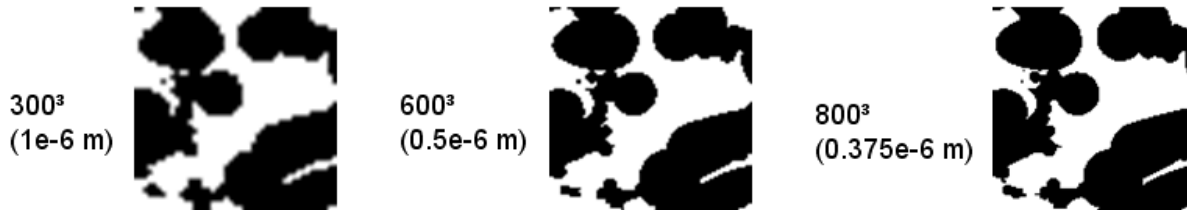


Abbildung 6. Darstellung eines Details einer simulierten Keramik bei unterschiedlichen Auflösungen. Anders als beim REM oder Tomographen, wo die Auflösung bei der physikalischen Aufnahme festgelegt wird, ist das Modell in analytischer Form, als Beschreibung mathematischer Objekte und Operationen gespeichert. Damit lässt sich auch im Nachhinein jede beliebige Auflösung realisieren, indem die „analytische Form“ in eine „diskrete Form“ mit der gewünschten Auflösung abgebildet wird.

Besonders in den Unterschieden in den Details der Oberflächen veranschaulicht Abbildung 6 die möglichen Auswirkungen des Vergleichs unterschiedlicher Auflösungen.

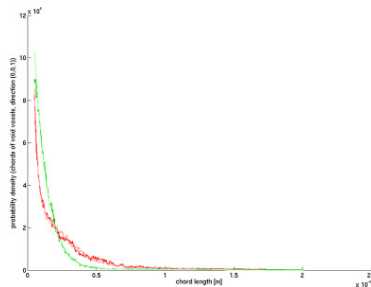


Abbildung 7. Sehnenlängenverteilung in x- und y-Richtung in Schliffbild einer realen Struktur (grün) und Sehnenlängenverteilung in x- und y-Richtung eines Schliffbildes eines Modells (rot). Wenn die Kurven übereinanderliegen, ist das Modell geometrisch validiert.

Als Sehnenlängenverteilung bezeichnet man die Statistik der Längen von schwarzen und weißen Segmenten die entstehen, wenn man ein Bild parallel zu den x- oder y- Achsen, oder auch in 45° durchläuft. Unter geeigneter Skalierung dieser Zahlen (und Vorhandensein von 3d Information) lässt sich mathematisch beweisen, dass Sehnenlängenverteilungen zufällige Objekte eindeutig charakterisieren (siehe Ohser und Mücklich, *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*, Wiley, 2000). Sie ist in der Gefügecharakterisierung ein Standardwerkzeug und wurde daher auch zum Vergleich realer und

generierter Keramiken genutzt. Generell wurden nur Modelle, die optisch gut waren dieser Statistik unterzogen. Abbildung 7 zeigt einen Zwischenzustand, in dem ein isotropes Material (mit grüner Kurve) noch nicht ganz durch ein isotropes Modell (rote Kurve) getroffen wird. Als letzte Stufe der Materialmodell - Validierung erfolgte schließlich der Vergleich von gemessenen und simulierten Porengrößenverteilungen. In der Messung wird in der Quecksilberporosimetrie über die Young-Laplace-Gleichung aus Druck, Oberflächenspannung und Oberflächenkrümmung aus dem unter vorgegebenem Druck austretenden Quecksilbervolumen auf die Porengrößenverteilung geschlossen. Dieser Vorgang wird per Simulation (im GeoDict – Modul PoroDict) nachgestellt, und die Ergebnisse mit der Messung verglichen. Abbildung 8 zeigt den Vergleich verschiedener Algorithmen für unterschiedliche Proben. Die deutlichen Unterschiede in den Messungen lassen sich zumindest qualitativ in der Simulation wiederfinden.

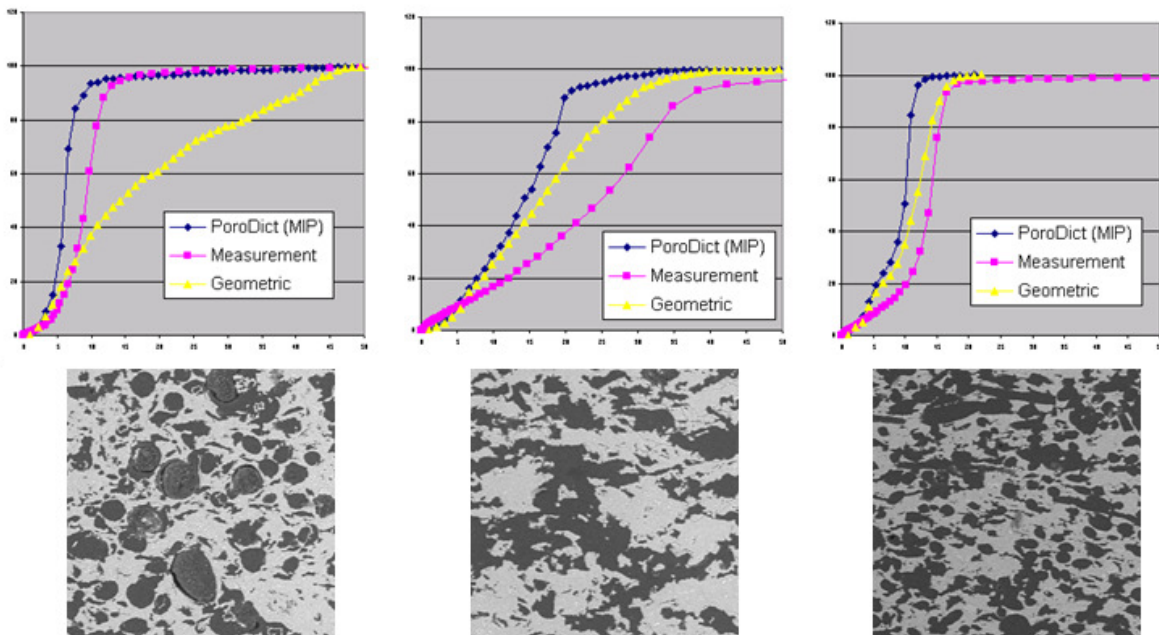


Abbildung 8. Porengrößenvergleich von Messungen mit 2 verschiedenen simulierten Porengrößenmaßen für 3 verschiedene Cordierite.

Die mit GeoDict / SinterGeo generierten Mikrostrukturmodelle können mit beliebig hoher Auflösung diskretisiert werden, sind periodisch und es können Strukturvariationen generiert werden. Die besondere Herausforderung der Strukturgenerierung liegt darin, dass die Parameter zur Strukturgenerierung abstrakt mathematischer Natur sind, also beispielsweise Kugeldurchmesserverteilungen, Parameter morphologischer Operationen, etc. Die in der Gefügecharakterisierung standardmäßig untersuchten Eigenschaften lassen sich

nur indirekt einstellen, nämlich indem man sie an der generierten Struktur ausmisst. Da der Strukturgenerierprozess oft stundenlang dauert und schwierig zu bedienen ist, da die Generierung der Modelle extremes Expertenwissen voraussetzt, wurden die vorhandenen Modelle in einer Datenbank zusammengefasst, die auch von Laien verwendet werden kann. Hier können durch Vorgabe von Materialparametern Strukturen ausgewählt werden, die diesen Parametern entsprechen. Abbildung 9 zeigt die grafische Benutzeroberfläche dieser Datenbank.

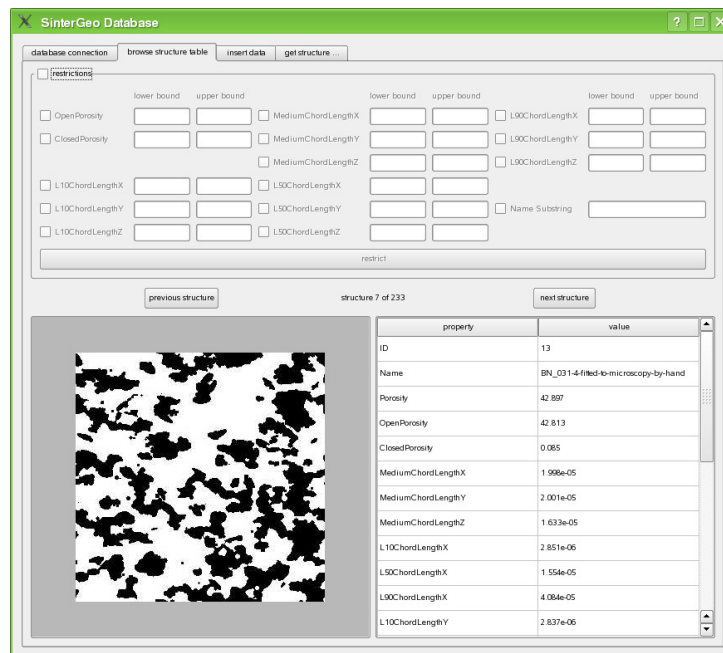


Abbildung 9. Grafische Benutzeroberfläche zur Strukturgenerierungsdatenbank von Keramiken unter GeoDict / SinterGeo.

Dieses GeoDict Modul SinterGeo mit angeschlossener Datenbank für Mikrostrukturmodelle wurde erfolgreich zur Rekonstruktion sechs verschiedener Cordierit Keramikvarianten und einer nicht - Cordierit Referenz (siehe Abbildung 10) eingesetzt. Die Mikrostrukturmodelle wurden validiert durch

1. Vergleich der Sehnenlängenverteilung für Modelle und Schliffbilder,
2. Vergleich der dreidimensionalen Struktur für Modelle und tomographische Aufnahmen,
3. Vergleich der für die Modelle berechneten und an realen Materialproben gemessenen Porosität,

4. Vergleich der für die Modelle berechneten und an realen Materialproben gemessenen Permeabilität (vgl. 2.1.3) und
5. Vergleich der Filtereffizienz und Druckabfallkurve unter Rußbeaufschlagung (vgl. 2.1.3).

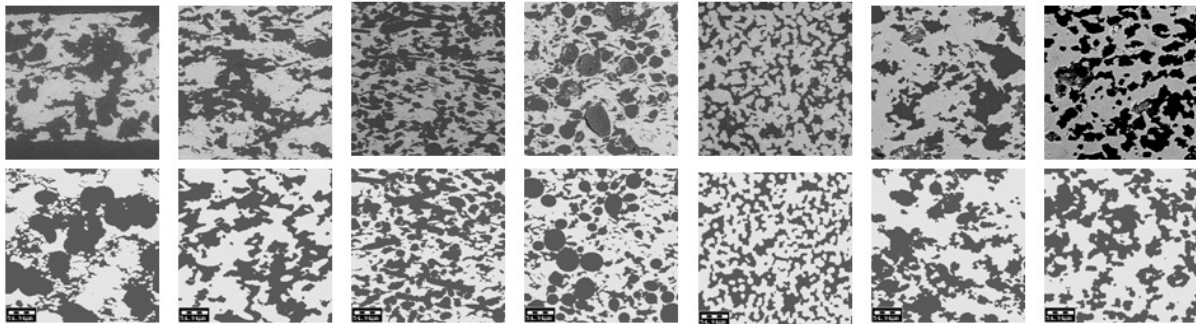


Abbildung 10. Modelle (unten) werden durch Vergleich von Erscheinungsbild und Sehnenlängenverteilung von Schlifffbildern realer Strukturen (oben) sowie gemessenen und berechneten Porositäten, Permeabilitäten, Filtrations-effizienzen und Druckabfallkurven validiert. Erst wenn die Modelle für das bloße Auge zufriedenstellende Qualität haben, werden sie der schärferen, formalen Prüfung durch Sehnenlängenverteilung, Porositätsbestimmung und Permeabilitätsvergleich unterworfen.

### 2.1.2 Struktursimulation Getter

Die Nanostruktur eines Gettermaterials, mit dem bei Bosch Cordierit - Wabenfilter beschichtet wurden, wurde rekonstruiert. Im Prinzip verläuft das Verfahren so wie für das Substrat auch, daher soll hier nicht näher darauf eingegangen werden. Einzig die deutlich andere geometrische Struktur wird in Abbildung 11 dargestellt.

Da die Porengrößen des Getters auf anderen Skalen liegen als die des Substrates, musste in Strömungssimulationen auf sogenannte permeable Voxel, die auch schon zur Modellierung des Rußes verwendet werden, zurückgegriffen werden. Dazu wird in hoch aufgelösten Simulationen in der Getterschicht ein äquivalentes, homogenes Material bestimmt, welches sich gegenüber der Strömung so wie der poröse Getter benimmt.

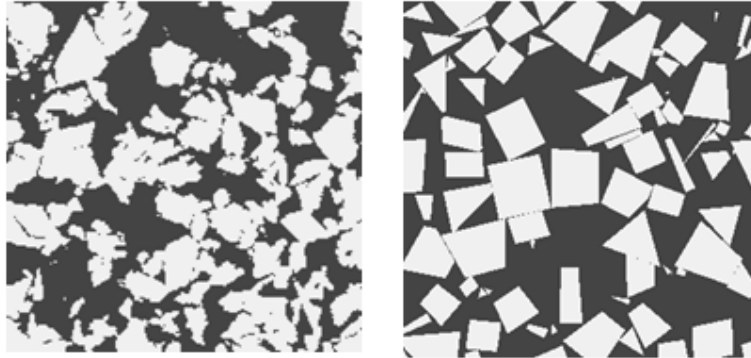


Abbildung 11. Getterschicht, Schliffbild und Modell. Sowohl die Porenstruktur als auch die Kornstruktur sind beim Getter deutlich anders als beim Substrat. Die Strukturgenerierung mit SinterGeo ist aber so allgemein gehalten, dass auch Getterstrukturen damit generiert werden können.

Dessen Eigenschaften werden dann in Simulationen von Substrat und Getter ganzen Bereichen zugewiesen. Abbildung 12 verdeutlicht das Vorgehen. Die verschiedenen dicken Getterschichten sind grün eingezeichnet, grüne Zellen sind weder leer (schwarz) noch voll (weiß) sondern haben die Porosität und Permeabilität des Getters.

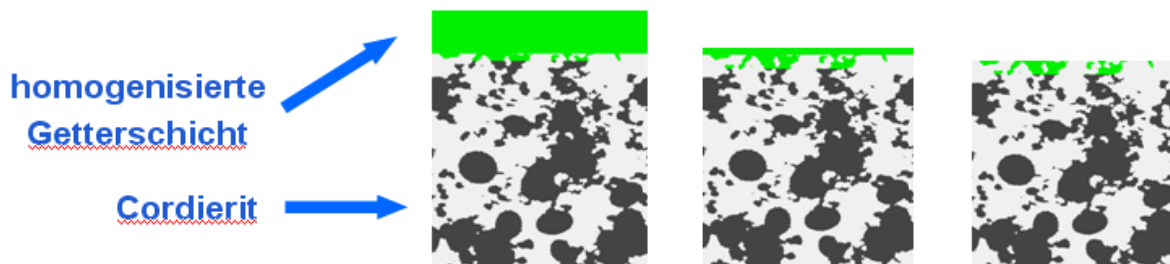


Abbildung 12. Multiskalensimulation: Getter als homogene Schicht mit effektiver Porosität und Permeabilität.

### 2.1.3 Filtrationssimulation

Wenn die Struktur des Filtermediums bekannt ist erfolgt als nächster Validierungsschritt die Berechnung des Druckabfalls und der Vergleich dieses Druckabfalls mit der Leermessung an der Probe, d.h. ohne Rußbeaufschlagung. Abbildung 13 zeigt exemplarisch die berechneten Druckverteilungen im Substrat und im Getter.

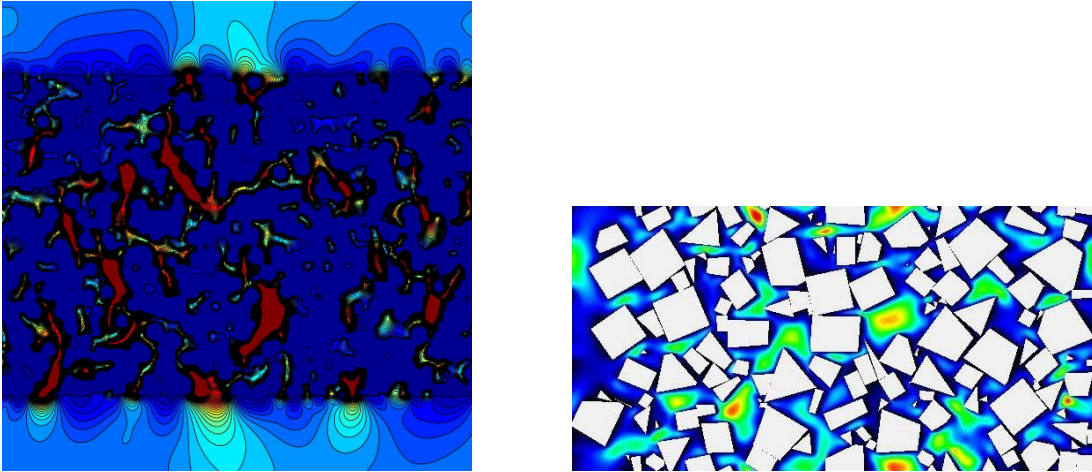


Abbildung 13. Simulierte Druckverteilung in Keramik (links) und Getter (rechts).

Typischerweise gab es beim Druckabfall keine Überraschungen mehr. Das heißt, wenn die simulierten Strukturen die Vergleiche mit der Werkstoffcharakterisierung erfolgreich bestanden hatten, dann stimmte auch der simulierte Druckabfall mit der Funktionalitätsmessung überein. Dies gilt in Übereinstimmung mit der langjährigen Erfahrung des Fraunhofer ITWM mit vielen weiteren Materialien.

Anders sieht es bei der Rußpartikelfiltrationssimulation aus. Da die Rußpartikel deutlich kleiner (ca. 100 nm) als die Poren sind, können sie durch die Simulation nicht aufgelöst werden. Man behilft sich, indem man ihr effektives Verhalten ermittelt. Dazu wird zunächst mit extrem hoher Auflösung das Anlagern von Rußpartikeln an einer sehr einfachen Struktur (eine Faser in Abbildung 14, links) simuliert. Danach wird der angelagerte Ruß von der Faser getrennt und separat analysiert (Abbildung 14, rechts). Dabei wird die Struktur durchströmt und man kann zur geometrisch berechneten Porosität eine Permeabilität zuordnen. Wenn man dann auf der Skala des Substrates simuliert (Abbildung 15), bilden viele Rußpartikel zusammen eine grauen Zelle, die weder voll (blau) noch leer (weiß) ist, sondern eine bestimmte Luftdurchlässigkeit besitzt, die für diesen Anlagerungszustand wie beschrieben vorab simuliert ist. Zu beachten ist, dass die Detailsimulation für verschiedene Anströmgeschwindigkeiten, Partikelgrößenverteilungen etc. jeweils wiederholt werden muss.

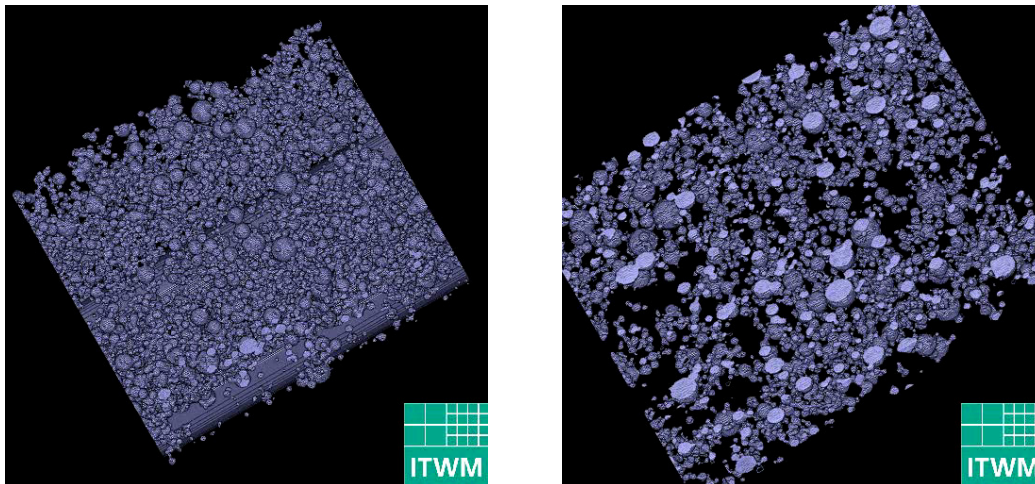


Abbildung 14. Detaillierte Anlagerung von Rußpartikeln an einer Faser (links) und Ausschnitt aus der entstandenen Rußschicht (rechts). Die genaue Struktur dieser Schicht hängt von den Betriebsbedingungen wie beispielsweise der Anströmgeschwindigkeit und der Partikelgrößenverteilung des Rußes ab. Dementsprechend muss auch die Permeabilität dieser Zonen entsprechend der Betriebsbedingungen durch nanoskalige Simulationen ausgewertet werden.

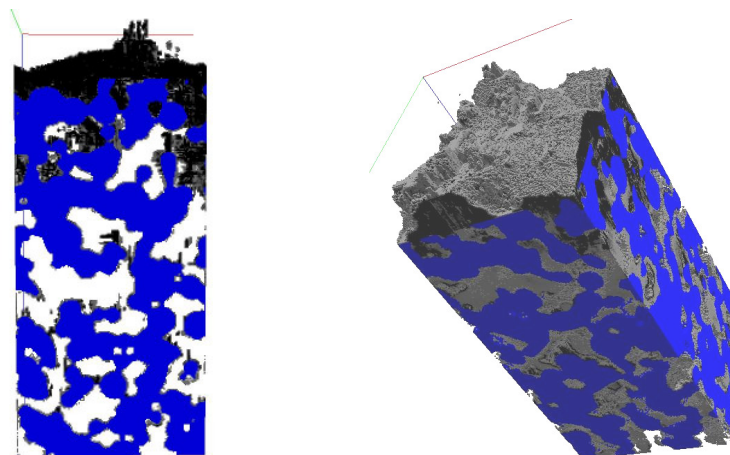


Abbildung 15. Anlagerung von Rußpartikeln im Substrat visualisiert als 2d Schliff (links) und in 3d (rechts). Das Substrat ist blau, die Poren weiß und der Ruß grau dargestellt. Dunklere Grautöne bedeuten niedrigere Porosität und Permeabilität, hellere Grautöne höhere Porosität und Permeabilität. Generell müssen einige Hundert Rußpartikel zusammentreffen, bis eine Rechenzelle dunkelgrau wird.

Bezüglich des effektiven Flugverhaltens der agglomerierten Partikel wurden am MVT in Halle-Wittenberg detaillierte Studien gefahren, deren Ergebnisse direkt in die Simulationen des Fraunhofer ITWM eingehen können.

Beim Betrachten der Details der Simulationen wurde im Projekt klar, dass man für die korrekte Vorhersage der Filtration deutlich besser aufgelöste Strukturen verwenden muss, als zur Bestimmung der Permeabilität notwendig ist. Damit wurde auch klar, dass reale Substrate viel zu zeitaufwändig sind, um die Filtrationssimulation zu entwickeln. Daher wurde im Einvernehmen der Projektpartner ein Zwischenschritt eingeschaltet, nämlich die Vermessung (durch Bosch) und Simulation (durch Bosch und das Fraunhofer ITWM) von Mikrosieben.

Abbildung 16 zeigt die Geometrie eines einzigen Mikrosieblochs. Durch die Regelmäßigkeit der Struktur genügt es, in der Simulation ein einziges Loch zu betrachten. Das führt zu viel kürzeren Rechenzeiten als Simulationen an einer realistischen Keramik. Durch die verkürzten Rechenzeiten werden viel detailliertere Modell- und Parameterstudien möglich. Von Bosch wurden die experimentell bestimmten Abscheidrate- und Druckabfallkurven sowie REM - Aufnahmen von aufgewachsenen Rußschichten in Mikrosieblöchern zur Verfügung gestellt. Aufgrund des ursprünglichen, vereinfachten Anlagerungsmodells des Fraunhofer ITWM wichen die berechneten Rußschichten und die Abscheidrate- und Druckabfallkurven deutlich von den Messwerten ab.

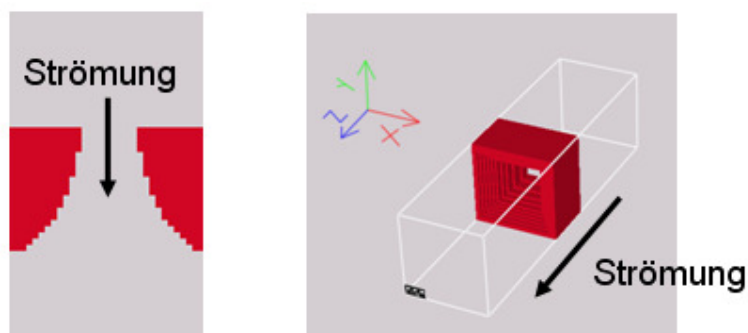


Abbildung 16. Geometrisches Computermodell für die Mikrosiebsimulation.

Deshalb wurde ein genaueres Anlagerungsmodell, agglomerierte Partikel und eine adaptive Zeitschrittweitensteuerung für die Berechnung der Trajektorien sphärischer Nanopartikel sowie ein weiteres spezielles Untermodell für die Abscheidung von Rußagglomeraten

entwickelt und in GeoDict / FilterDict eingebaut. Die Übereinstimmung von Messung und Simulation war dann sehr gut. Im Projekt konnte sie nur für Mikrosiebe und für zeitlich begrenzte Experimente sichergestellt werden, da die benötigte Rechenleistung für die Strömungsberechnung in Keramikmodellen bei dieser hohen Auflösung die Kapazitäten der Rechentechnik am ITWM übersteigt. Es wird davon ausgegangen, dass nur an der Oberfläche der Mikrostruktur die Strömung mit hoher Genauigkeit berechnet werden muss, so dass die benötigte Rechenleistung stark reduziert werden kann. Entsprechende Erweiterungen der ITWM Codes zur Strömungsberechnung erfolgen derzeit in einem Folgeprojekt mit dem Fraunhofer IKTS, konnten aber im Verlauf des CorTRePa - Projekts nicht mehr durchgeführt werden.

Abbildung 17 zeigt Zwischenschritte bei der Verbesserung des Filtrationsmodells. Beim Vergleich mit Focused - Ion - Beam (FIB) - Aufnahmen von Bosch (Dissertation H. Schomburg, siehe auch Abschlußbericht Bosch) fiel auf, dass in der Realität Rußpartikel viel weiter in das Mikrosiebloch eindringen als in den ersten Simulationen. Nachdem unter den Partnern entschieden war, dass dieser Effekt real und kein Artefakt der FIB – Aufnahmen waren, wurden am Fraunhofer ITWM ein genaueres Partikelverfolgen, ein detailliertes Partikelanlagerungsmodell, agglomerierte Partikel (siehe Abbildung 19) und die Möglichkeit, angelagerte Partikel nach der Anlagerung zu drehen, eingeführt (siehe Abbildung 20).

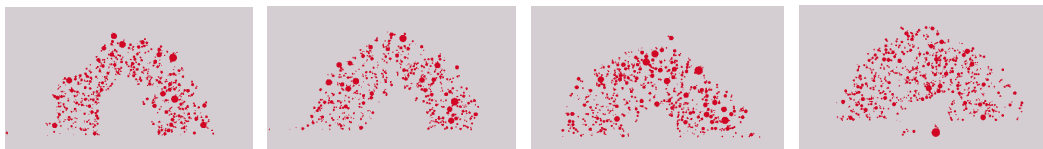


Abbildung 17. Schliffbilder durch mit unterschiedlichen Filtrationsmodellen aufgebaute Rußanlagerungen über einem Mikrosiebloch. Von links nach rechts wird die „Höhe der Brücke niedriger“ bis rechts schließlich auch Ruß im Loch anliegt (vergleiche REM-Aufnahmen im Abschlußbericht von Bosch).

Abbildung 18 zeigt exemplarisch die Darstellungsmöglichkeiten von Rußanlagerung an Mikrosieben. Links ist die simulierte REM – Ansicht zu sehen und rechts der dreidimensionale Schnitt durch das Mikrosieb mit angelagerten Rußpartikeln.

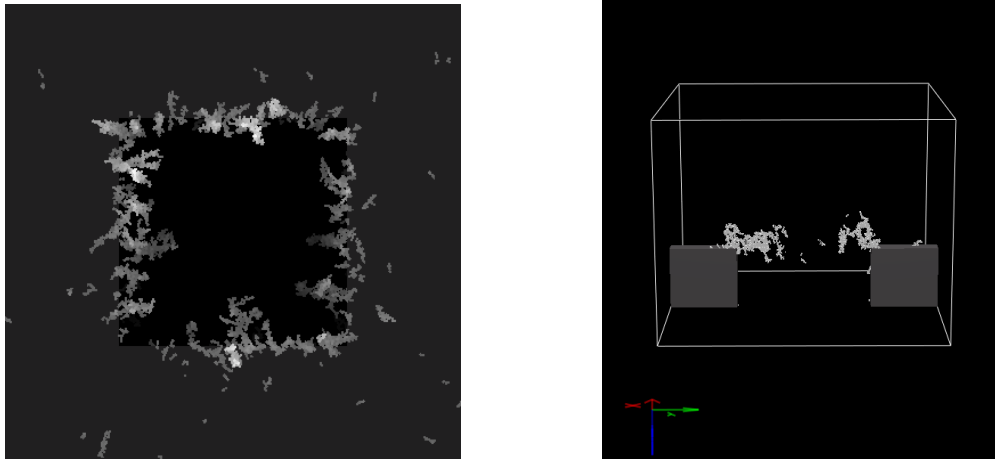


Abbildung 18. REM – Visualisierung mit GeoDict (links) und dreidimensionale Seitenansicht (rechts) der simulierten Anlagerung von Rußpartikeln an einem Mikrosieb.

Die REM – Visualisierung vergleicht man am Besten mit den Ergebnissen in der Dissertation von H. Schomburg, exemplarisch als Abb. 9 im Projektabschlußbericht von Bosch.

Abbildung 19 zeigt den Aufbau von Agglomeraten aus einzelnen Kugeln. Für diese Agglomerate wird in der Simulation der Schwerpunkt bewegt, während sie um diesen Schwerpunkt noch rotieren können. Die genauen Details der Bewegung können aus den Ergebnissen des MVT Halle – Wittenberg übernommen werden.

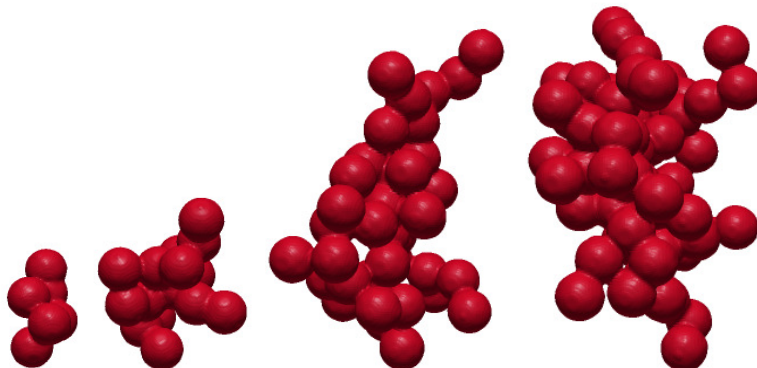


Abbildung 19. Aus Kugeln aufgebaute Agglomerate, die Rußpartikel nachstellen. Ähnlich wie in Simulationen des MVT können verschiedene rundere oder längliche Formen ausgebildet werden, je nach verwendetem Testruß.

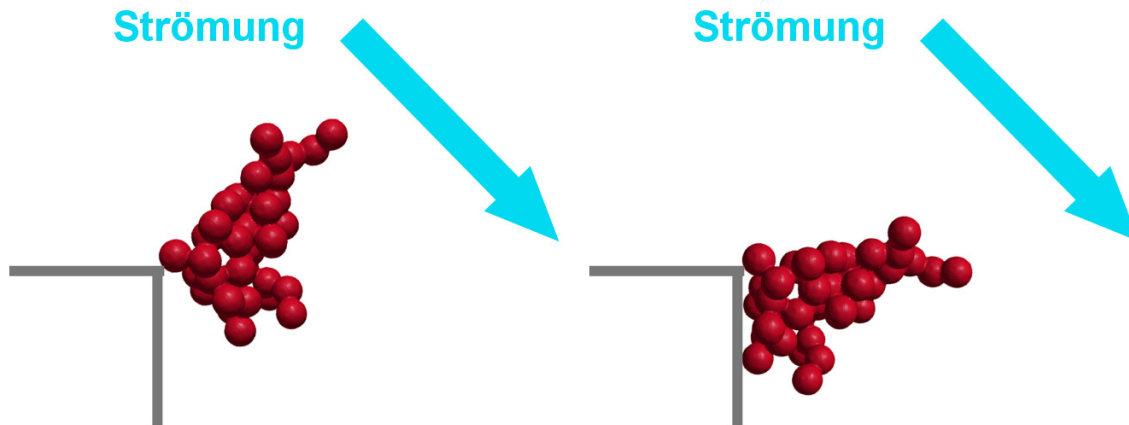


Abbildung 20. Anstoßen eines agglomerierten Partikels an ein Hindernis und Weiterbewegung mit der Strömung. Ein Agglomerat in der dargestellten Form bietet dem Luftstrom so viel Widerstand, dass es sich weiterbewegen kann.

Abbildung 20 illustriert den Bedarf nach Weiterbewegung eines Agglomerates nach der ersten Kollision. Für eine Kugel lässt sich noch sinnvoll annehmen, dass sie einfach haften bleibt. Ein Agglomerat in der dargestellten Form bietet dagegen dem Luftstrom so viel Widerstand, dass es sich weiterbewegen kann.

Nach diesen Verbesserungen fiel der Vergleich mit FIB – Aufnahmen deutlich besser aus (siehe Abbildung 17 ganz rechts). Auch der Vergleich mit gemessenen Druckverlusten war nun quantitativ möglich – siehe Abbildung 21. Leider waren wegen der extrem hohen notwendigen Auflösungen extrem lange Rechenzeiten notwendig, so dass im nächsten Projekt zu dieser Thematik mit dem Fraunhofer IKTS der Fokus wieder auf einer Verbesserung der Strömungsberechnung durch lokal adaptive Gitter gelegt wird.

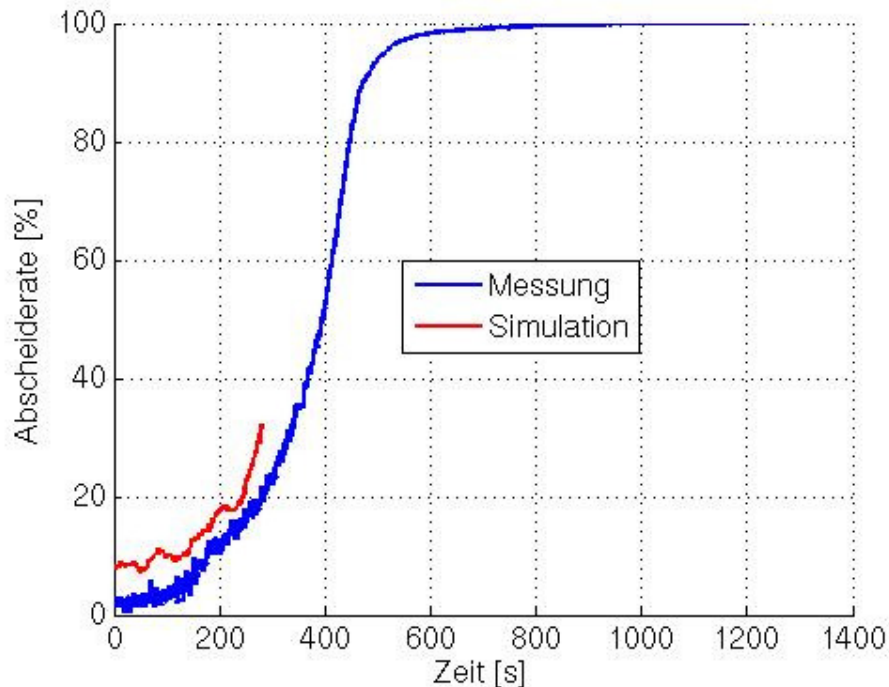


Abbildung 21. Vergleich der simulierten und gemessenen Abscheiderate an einem Mikrosieb.

## 2.2 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die Generierung von Keramik-Mikrostrukturmodellen und die Simulation der Filtration von Dieselrußpartikeln ist auch nach dem Ende des Projektes weiterhin interessant für Entwickler von Dieselpartikelfiltern (Dow, Geo2, Corning, Denso, Eberspächer, Mann + Hummel, Emitec, GKD Gebrüder Kufferath, ...). Zusammen mit dem Fraunhofer IKTS wird am ITWM im Anschluss an das Projekt an dem Themenbereich weitergearbeitet und u. a. die in 2.1 dargestellte Weiterentwicklung der Strömungsberechnung durchgeführt, um die für die Simulation der Filtration von Dieselrußpartikeln benötigte Rechenleistung zu reduzieren.

Die in GeoDict / SinterGeo implementierte Strukturgenerierungsmethode und Datenbank sind auch zur Rekonstruktion anderer Mikrostrukturen als Keramiken (dichte Sinterstrukturen, Schäume, Packungen / Schüttungen, ...) und für die Analyse und Berechnung anderer Materialeigenschaften als Filtereffizienz (Festigkeit, Wärmeleitfähigkeit, akustische Eigenschaften, ...) universell einsetzbar. Bereits während des CorTRePa -

Projekts wurde GeoDict / SinterGeo in weiteren Industrie- und Forschungsprojekten eingesetzt.

GeoDict / FilterDict ist allgemein zur Simulation der Abscheidung von Partikeln in geringer Konzentration aus Gasen oder Flüssigkeiten in Mikrostrukturen geeignet. Der Einbau des hoch aufgelösten Anlagerungsmodells in GeoDict/FilterDict im CorTRePa - Projekt ermöglicht nun hochrealistische Simulationen von Nanopartikel - Abscheidung in Mikrostrukturen bei vertretbarem Rechenaufwand für die Berechnung der Trajektorien der Partikel. Die Simulation von Nanopartikel - Abscheidung ist interessant u. a. für Entwickler von Reinraum- oder Atemschutzfiltern (Dräger, 3M, MSA Auer, Moldex, ...). Diese sind bereits Partner des Fraunhofer ITWM oder können in Zukunft dazu werden.

Erst durch die Anwendung der Software in zukünftigen Projekten entsteht dann der große Nutzen für die Allgemeinheit: bessere Filter, die sowohl weniger Energieverlust bewirken und dabei trotzdem besser filtern.

### 2.3 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Bei anderen Stellen wurde kein Fortschritt im Bereich Simulation der Filtration von Dieselrußpartikeln mit Mikrostrukturmodellen, der über den Stand der Arbeiten am Fraunhofer ITWM hinausgeht, beobachtet. Allerdings zeigt der Hintergrund der letzten Veröffentlichungen [3] seitens Toyota (Japan), die Verwendung der Lattice-Boltzmann Methode in [17] (ebenfalls Japan) sowie die Arbeiten in [18] (USA) einerseits die Richtigkeit des Projekt - Ansatzes und andererseits das internationale und industrienahere Interesse an der im Projekt behandelten Thematik und Filtrationssimulationsmethodik. Auch aktuelle Veröffentlichungen bezüglich der dreidimensionalen virtuellen Strukturgenerierung von Keramiken, [3] (England) und [12] (Griechenland), zeigen die Aktualität und Internationalität der Projekt-Thematik und der Struktursimulationsmethodik.

## 2.4 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

### Konferenzbeiträge

- Emission Solutions in Transportation 2007 Ann Arbour (USA), Rief, S., Kehrwald, D., Schmidt, K., Wiegmann, A., *Virtual Diesel Particulate Filters*.
- World Filtration Congress 2008 Leipzig, Rief S., Schmidt K., Wiegmann A., *Simulation of Ceramic DPF Media, Soot Deposition and Pressure Drop Evolution using GeoDict*.
- Filtech 2009 Wiesbaden, Schmidt K., Rief S., Wiegmann A., Ripperger S., *Simulation of DPF Media, Soot Deposition and Pressure Drop Evolution*, angenommen.
- World congress on Particle Technology 2010 Nürnberg, Schmidt K., Rief S., Wiegmann A., Ripperger, S., *Microstructure Modeling and Simulation of Nanoparticle Deposition*, eingereicht.

### Veröffentlichungen

- Rief S., Kehrwald D., Latz A., Schmidt K. und Wiegmann A, *Virtual Diesel Exhaust Filters: Simulation of the Structure, Exhaust gas flow and particle deposition*, Filtration Volume 9, Number 4, 2009.
- Kilian Schmidt, *Dreidimensionale Modellierung von Filtermedien und Simulation der Partikelabscheidung auf der Mikroskala im Dieselrußpartikelfilter*, Dissertation, Technische Universität Kaiserslautern, Abgabe geplant für 2009

## **3 Erfolgskontrollbericht siehe Anlage**