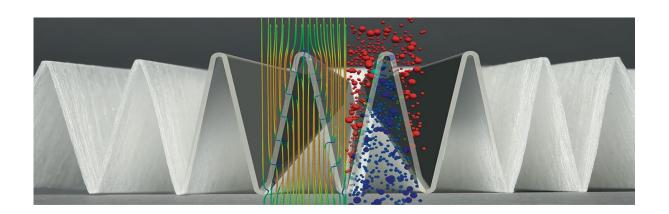


### Online-Industrieworkshop

## Digitalisierung in der Trenntechnik

### Simulation - Machine Learning - Industrie 4.0

Dienstag, 6.10.2020 Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM



Programm – Abstracts – Teilnahmeliste



### Die Veranstaltung

Es gibt kaum Bereiche in Forschung, Technik und Wirtschaft, die sich nicht mit den Fragen Digitale Transformation, Künstliche Intelligenz, Digitaler Zwilling, Industrie 4.0 oder Internet of Things beschäftigen – auch für die Filtration und Separation sind diese Themen relevant: Einiges ist bereits auf den Weg gebracht worden, aber die Möglichkeiten zu Einsatz und nutzbringender Kombination von Simulation und Machine Learning mit der Sensorik und Steuerung von Apparaten bzw. Verfahren sind noch längst nicht ausgeschöpft.

Um den Gedanken- und Informationsaustausch zwischen Wissenschaft, anwendungsnaher Forschung und industrieller Praxis in der Trenntechnik zu diesem Thema zu fördern, veranstaltet das Leistungszentrum "Simulations- und Software-basierte Innovation" am 6.10.2020 den Industrieworkshop "Digitalisierung in der Trenntechnik – Simulation – Machine Learning - Industrie 4.0".

In dieser Veranstaltung können sich Unternehmen über die aktuellen Forschungsaktivitäten und Entwicklungen auf diesen Gebieten informieren. Die Fachleute aus der industriellen Praxis sind herzlich dazu eingeladen, mit ihren Fragen und in den Diskussionen ihre Wünsche und Erwartungen an diese neuen Technologien zu thematisieren

### Das Leistungszentrum "Simulations- und Softwarebasierte Innovation"

Mit Leistungszentren verfolgt die Fraunhofer-Gesellschaft das Ziel der nachhaltigen Standortentwicklung. Das Fraunhofer-Konzept setzt dabei auf bestehende Kooperationen mit relevanten Akteuren aus der Wissenschaft und die regionale Vernetzung in die Wirtschaft. Dabei werden alle Dimensionen einbezogen: Forschung und Lehre, Nachwuchsförderung, übergreifende Infrastrukturen, Innovation und Transfer in KMU und Großunternehmen. Das Konzept versteht sich als Instrument der innovations- und verwertungsorientierten Exzellenzsicherung in Schlüssel-themen für ausgewählte Regionen. Die Wissenschaftsstadt Kaiserslautern bietet eine bundesweit einzigartige Infrastruktur im Bereich der IT- Forschung und insbesondere der Hardware-, Software- und Netzwerk-basierten digitalen Technologien. Weitere Informationen zum Leistungszentrum finden Sie unter

www.leistungszentrum-simulation-software.de



### Programm

Chair: Ralf Kirsch, Fraunhofer ITWM

10.00	Beginn und Begrüßung			
SESSION 1				
10.10	Digitalisierung in der Filtertechnik - Simultane Messung der lokalen Partikelemission von Schlauchfilteranlagen mittels kostengünstigen Feinstaubsensoren  Peter Bächler, Gas-Partikel-Systeme, MVM, KIT			
10.30	Realisierung eines webbasierten Softwaresystems zur Messung und Regelung einer Wirbelschichtanlage Philipp Grohn, Mechanische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern			
10.50	Automatisierung der Partikelklassierung mittels modellbasierter Regelung einer Röhrenzentrifuge Tabea. Sinn, Verfahrenstechnische Maschinen, MVM, KIT			
11.10	Machine Learning zur Analyse von Filtermedien und ein kurzer Überblick über die Filtersimulation  Mehdi Azimian, Math2Market GmbH			
11.30	Experimentelle Charakterisierung und 3D Simulation der mechanischen Eigenschaften von Filtermedien Vanessa Puderbach, Mechanische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern			
Mittagspause				
SESSION 2				
13.00	Methodenentwicklung für die aufgelöste numerische Simulation der mechanischen Flüssigkeitsabtrennung in Dekantierzentrifugen Helene Wettich, Verfahrenstechnische Maschinen, MVM, KIT			
13.20	Microscale simulations of water separation from diesel using hydrophobic wire screens  Omar Elsayed, Mechanische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern/Fraunhofer ITWM			
13.40	DNSlab: Simulation mikroskaliger Fluid- und Partikelprozesse durch CFD-DEM-Kopplung Kilian Schmidt, it4e GmbH			



14.00	Einsatz und Potential von open-source Lösertechnologie im Bereich der Strömungssimulation für Filtrationsanwendungen Ulrich Heck, DHCAE Tools GmbH			
14.20	Simulation von Umlagerungsvorgängen reaktiv-inerter Partikelstrukturen in Wandstromfiltern Nicolas Hafen, Gas-Partikel-Systeme, MVM, KIT			
Pause				
SESSION 3				
15.00	Simulation von Chromatographie mit sphärischen Beads			
	Sebastian Osterroth, Fraunhofer ITWM			
15.20	Machine learning and model order reduction for predicting the efficiency of catalytic filters  Oleg Iliev, Fraunhofer ITWM			
15.40	Entwicklung eines grey box model mit neuronalem Netzwerk am Beispiel der Dekantierzentrifuge Philipp Menesklou, Verfahrenstechnische Maschinen, MVM, KIT			
16.00	Adaptronik in der Filtertechnik - Charakterisierung der Partikelstrukturablösung bei Dehnung einer Filterfaser Lukas Poggemann, Gas-Partikel-Systeme, MVM, KIT			
16.20	Programmierbare Materialien als Basis für adaptive Filtergewebe			
	Stefan Rief, Fraunhofer ITWM			
Zusammenfassung und Verabschiedung, Veranstaltungsende ca. um 16.45 Uhr				



#### **Abstracts**

Session 1 Vortrag 1

# Digitalisierung in der Filtertechnik – Simultane Messung der lokalen Partikelemission von Schlauchfilteranlagen mittels kostengünstigen Feinstaubsensoren

#### Peter Bächler

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) E-Mail: peter.baechler@kit.edu

#### **Abstract**

überwachungspflichtigen Schlauchfilteranlagen wird häufig lediglich Gesamtemission am Kamin gemessen. Lecks und andere Fehlstellen leisten hierbei einen signifikanten Beitrag zur Partikelemission der Anlagen [1]. Kostengünstige Feinstaubsensoren haben das Potential die Prozessüberwachung von Oberflächenfiltern zu verbessern [2]. Hierfür wurden alle Filterschläuche in einer Filteranlage im Technikumsmaßstab mit einem Feinstaubsensor ausgestattet, um lokal und zeitgleich die Partikelemission zu messen und den Emissionsbeitrag einzelner Filterschläuche zu bestimmen. An jedem Schlauch wird der charakteristische Emissionspeak bei der zugehörigen Abreinigung detektiert. Die Gesamtemission besteht hierbei qualitativ aus der Überlagerung der einzelnen Emissionspeaks. Durch den Einbau von Filterschläuchen mit offenen Nähten lassen sich lokale Emissionsunterschiede detektieren, was das Potential für die Prozessüberwachung und die dadurch mögliche Digitalisierung der Anlagen aufzeigt [3].

- [1] O. Kurtz, J. Meyer, G. Kasper, The contribution of small leaks in a baghouse filter to dust emission in the PM<sub>2.5</sub> range A system approach, Particuology, 30: 40-52, 2017
- [2] P. Bächler, J. Meyer, A. Dittler, Characterization of the emission behavior of pulse-jet cleaned filters using a low-cost particulate matter sensor, *Gefahrstoffe Reinhaltung der Luft*, 79 (11-12): 443-450
- [3] P. Bächler, J. Szabadi, J. Meyer, A. Dittler, Simultaneous measurement of spatially resolved particle emissions with high temporal resolution in a pilot plant scale baghouse filter applying distributed low-cost particulate matter sensors, *Journal of Aerosol Science* (2020), doi: https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2020.105644



# Realisierung eines webbasierten Softwaresystems zur Mess- und Regelung einer Wirbelschichtanlage

#### **Philipp Grohn**

Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Technische Universität Kaiserslautern

E-Mail: <a href="mailto:philipp.grohn@mv.uni-kl.de">philipp.grohn@mv.uni-kl.de</a>

#### Abstract

In verschiedensten Industriezweigen ist das Coating von Feststoffteilchen mit Hüllsubstanzen ein wichtiger Produktionsschritt. Hierzu kommt häufig Wirbelschichttechnik zum Einsatz, bei der ein Fluid von unten nach oben das Schüttgut durchströmt und dabei fluidisiert [1, 2]. Charakterisierend ist die meist intensive Vermischung der Feststoffteilchen bei veraleichsweise hohen Gasgeschwindigkeiten. Dies führt zu permanenten Druckschwankungen, welche analysiert werden können, um eine Aussage über die Stabilität des Prozesses zu gewinnen [2,3]. Um solch eine Anlage überwachen und steuern zu können, eröffnet die Industrialisierung 4.0 neue Möglichkeiten und Wege. Am Lehrstuhl der Mechanischen Verfahrenstechnik an der Technischen Universität Kaiserslautern ist eine neuartige Anlage zum Fluidisieren und Coating von Partikeln digital vernetzt worden. Durch ein webbasiertes, einheitliches Steuerungssystems kann mithilfe eines internetfähigen Endgeräts eine genaue Kontrolle und Regelung der Anlage und Prozessparamater gewährleistetet werden. Durch diese neue Form des Steuerungssystems ist eine ortsunabhängige Fernwarte des Prozesses möglich. Die aufgenommenen Daten unterschiedlicher Versuche sind überall abrufbar und werden zum Teil direkt im Fenster des Steuerungssystems visualisiert dargestellt. Dies vereinfacht die Abschätzung des aktuellen Prozesspunktes und optimiert sowie vereinfacht die Kontrolle der Anlage. Es werden die verschiedenen physischen Komponenten des Steuersystems zur Mess- und Regelung der Anlage erläutert sowie der Aufbau des webbasierten Softwaresystems erklärt. Abschließend werden die einzelnen Fenster des Softwaresystems gezeigt.

- [1] Krause, J.P.: Easy Coating, 2011. Vieweg+Teubner Verlag |Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH 2011
- [2] Heinrich S, Dosta M, Antonyuk S (2015) Multiscale Analysis of a Coating Process in a Wurster Fluidized Bed Apparatus. In: Mesoscale Modeling in Chemical Engineering Part I, vol 46. Elsevier, pp 83–135
- [3] Salikov V, Heinrich S, Antonyuk S et al. (2015) Investigations on the spouting stability in a prismatic spouted bed and apparatus optimization. Advanced Powder Technology 26(3): 718–733. doi: 10.1016/j.apt.2015.02.011



# Automatisierung der Partikelklassierung mittels modellbasierter Regelung einer Röhrenzentrifuge

#### Tabea Sinn

Gruppe Verfahrenstechnische Maschinen am Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik (MVM), Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

E-Mail: tabea.sinn@kit.edu

#### Abstract

Zur Separation bestimmter Partikeln aus einer Mischsuspension ist ein Klassierprozess in Zentrifugen zweckmäßig. Dabei ist zuverlässiges Einhalten von Produktspezifikationen wie der Partikelgrößen wichtig, was durch Einstellen optimaler Betriebsparameter erreicht wird.

Röhrenzentrifugen bieten stärkste Abtrennbedingungen, um selbst Nanopartikel zu klassieren. Jedoch führt die Akkumulation separierter Partikel zu sich stetig verändernden Separationsbedingungen. Dem muss durch Regelung der Betriebsparameter entgegengewirkt werden, um kontinuierlich die gewünschte Produktqualität zu gewährleisten. Die komplexen Vorgänge in der Zentrifuge motivieren eine modellbasierte Regelung, deren Grundlage ein Echtzeit-Prozessmodell darstellt. Es liefert Vorhersagen zum Prozessverhalten, aus welchen mit Optimierungsverfahren Richtwerte für Betriebseinstellungen ermittelt werden. Kontrolliert durch on-line Messtechnik kann so permanent das gewünschte Klassierungsergebnis erreicht werden.



# Machine learning for the analysis of filter media, and a short overview of the filter simulation

#### Mehdi Azimian

Math2Market GmbH, Kaiserslautern E-Mail: info@math2market.de

#### Abstract

The study of the nano/micro structure of the filter media is the starting point to understand, analyze and optimize a filter. The first simulation step on the media scale consists of processing of CT-scan images of a real media to prepare a detailed 3D nano/micro structure model of the filter media. Nano/micro CT-scans are a powerful tool to gain deep insights and ideas for innovation and for quality control in material engineering. GeoDict provides the tools for a better understanding of CT-images and paves the way to overcome the challenges of modern material engineering. Nonwovens are used in many industries, including fibrous media for filtration, glass or carbon-fiber reinforced plastics used in mechanical applications, or gas-diffusion layers used in fuel cells. The performance of nonwovens is governed mainly by the spatial distribution, orientation, length, curvature and center line of the individual fibers. For fibrous media with binder, the volume/weight percentage and the spatial distribution of the binder material are also essential. With GeoDict, binder can be segmented from fibers in CTscans even if they have the same gray values. Using nonwoven micro-structures modelled with GeoDict, a neural network is trained to label binder with artificial 3D scans, for which the distribution of the binder is known. After the training, the neural network also recognizes the binder in 3D scans of real nonwovens, which were scanned with µCT or FIB-SEM. The results are high-precision detection and analyses of the binder distribution in the nonwovens that occur during production. The same method is applied to identify individual fibers in complex micro-structures. Once all fibers are identified, detailed insights into the properties of fibers in a material are obtained. For example, the trajectory of a fiber after deposition in a nonwoven, the length of fibers in glass fiber-reinforced plastic, or local deformations of fibers in weaves. The geometrical parameters of a filter media are identified precisely, and the fiber and pore characteristics are computed respectively. Afterwards, the fluid flow through the filter media to obtain the permeability, followed by the transport of particles and deposition of particles, are simulated with the FlowDict and FilterDict modules. The simulations provide all the specifics on deposition location, fractional filtration efficiencies and pressure drop over time [1]. A short overview regarding the modeling and simulation of filtration at different scales with GeoDict is presented.

[1] M. Azimian, C. Kühnle, A. Wiegmann, Design and optimization of fibrous filter media using life-time multi-pass simulations, Chemical Engineering & Technology 41, No. 5 (2018) 1-9. doi.org/10.1002/ceat.201700585



# Experimentelle Charakterisierung und 3D Simulation der mechanischen Eigenschaften von Filtermedien

#### Vanessa Puderbach

Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Technische Universität Kaiserslautern

E-Mail: vanessa.puderbach@mv.uni-kl.de

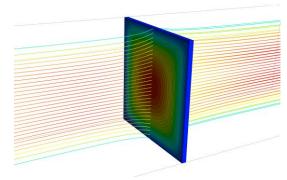
#### **Abstract**

Zwei typische Anwendungen von Filtermedien sind Öl- oder Kraftstofffilter, bei denen beispielsweise Verunreinigungen in Form von Schmutzpartikeln mithilfe des Filtermediums aus dem Fluid abgetrennt werden. Je nach Anwendung erfüllen die Filtermedien unterschiedliche Kriterien. Sie lassen sich durch ihre mechanischen Eigenschaften charakterisieren. Dazu gehören unter anderem die Zugfestigkeit, der Elastizitätsmodul und die Biegesteifigkeit [1]. Auch die Porosität, die Dicke und die Permeabilität beeinflussen das Prozessverhalten des Materials. Werden Filtermittel durchströmt, kommt es zur Verformung des gesamten Materials und der Mikrostruktur zwischen den Fasern.

In dieser Arbeit werden die mechanischen Eigenschaften unterschiedlicher Filtermedien untersucht. Die ermittelten strukturmechanischen Eigenschaften dienen als Parameter für die Simulation der Verformung von Filtermedien bei der Durchströmung. Hierzu werden CFD-Simulationen (Computational Fluid Dynamics) und CSM-Löser (Computational Structural Mechanics) miteinander gekoppelt.







Links: Zugversuche zur Bestimmung von E-Modul und Poissonzahl. Rechts: 3D-Simulation der strömungsinduzierten Verformung einer Flachprobe eines Filtermediums in einem Strömungskanal mit quadratischem Querschnitt. Dargestellt sind die Fluidstromlinien und der Betrag der Verschiebung im Medium.

[1] S. Backer, D.R. Petterson, Some Principles of Nonwoven Fabrics1, Textile Research Journal 30 (1960) 704–711. <a href="https://doi.org/10.1177/004051756003000912">https://doi.org/10.1177/004051756003000912</a>.



# Methodenentwicklung für die aufgelöste numerische Simulation der mechanischen Flüssigkeitsabtrennung in Dekantierzentrifugen

#### **Helene Wettich**

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Email: helene.wettich@kit.edu

#### **Abstract**

Die Prozessindustrie steht vor vielfältigen Herausforderungen. Durch den wachsenden Anspruch an Nachhaltigkeit steigt die Nachfrage nach effizienter Ressourcennutzung und gleichzeitig optimaler Nutzung der zur Verfügung stehenden Produktionsanlagen bei höchster Produktqualität. Viele der eingesetzten Verfahren basieren auf Erfahrungen und sind unflexibel und nicht detailliert genug. Kleinste Änderungen im Prozessverhalten können zu einer Verringerung der Produktqualität oder gar zum Stillstand der kompletten Produktionskette führen.

Im Bereich der Fest-Flüssig-Trennung sind diese Herausforderungen gleichermaßen relevant. Zur Abtrennung von feinsten Feststoffpartikeln aus Flüssigkeiten kommen im Industriemaßstab häufig kontinuierlich arbeitende Dekantierzentrifugen zum Einsatz. Das Design dieser Apparate basiert auf vereinfachten Black-Box-Modellen für den stationären Zustand. Sowohl das physikalische Verhalten des Trennprozesses als auch die Sedimentbildung und dessen Transport finden hierbei keine Berücksichtigung. Für die Wahl eines geeigneten Apparates sowie die optimale Einstellung der Betriebsparameter sind eine Vielzahl an Experimenten im Pilotmaßstab notwendig. Änderungen der Materialeigenschaften der Ausgangssuspensionen können jedoch zu einem deutlich abweichenden Prozessverhalten führen, sodass andere Betriebsparameter für einen optimalen Betrieb des Apparates erforderlich sind.

Einen wesentlichen Beitrag zu einer nachhaltigen Entwicklung kann hier die voranschreitende Digitalisierung leisten. Die CFD-Simulation unter Berücksichtigung der Sedimentation, der Kuchenbildung und des Feststofftransports ermöglicht die aufgelöste Betrachtung der physikalischen Vorgänge im Trennapparat. Ausgangspunkt für die Modellbildung sind Versuche im Labormaßstab. Dieser Ansatz wird im Rahmen dieser Präsentation vorgestellt.



# Microscale simulations of water separation from diesel using hydrophobic wire screens

#### **Omar Elsayed**

Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern / Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserslautern

E-Mail: <u>elsayed@itwm.fhg.de</u>

#### **Abstract**

Liquid-liquid separation systems are vital for many applications: power generators, automotive, hydraulic lines, etc. In the special case of diesel fuel, the trend towards sustainable fuel production and reduction of hazardous emissions lead to the increasing usage of ultra-low-sulfur diesel and bio-diesel. Such fuels exhibit a significantly low surface tension coefficient between the diesel and the inevitable water content, rendering the removal of the water more difficult. On the microscale, the individual droplets are considered. In the free flow region, water droplets are much smaller than the hydrodynamic length scale and their motion is mainly due to the flow. After coalescence at the hydrophobic separator screen, gravitational forces are dominant and separation by drainage occurs. Both coalescence and drainage influence the over-all differential pressure and the distribution of the local flow speed near the mesh, which in turn changes the transport of the water droplets towards the mesh.

In order to treat the interaction correctly, a robust and accurate computation of the surface tension forces are mandatory. This means that special has to be taken when the (local) curvature of the diesel-water interface is computed. A corresponding method will be presented. In addition, the simulation of the drainage, including the interaction of the separator and the falling droplets will be discussed. These results help to understand the different aspects that control the performance of the separator and to build a macroscopic model that is capable of estimating the performance of the separator in a specific application.



# DNSlab: Simulation mikroskaliger Fluid- und Partikelprozesse durch CFD-DEM Kopplung

#### Kilian Schmidt

IT for Engineering (it4e) GmbH, Kaiserslautern *E-Mail: kilian.schmidt@it4e-gmbh.com* 

#### **Abstract**

Mikroskalige Fluid- und Partikelprozesse, insbesondere wie bei der Abscheidung fester Partikel aus Gasen oder Flüssigkeiten in porösen Filtermedien, werden durch die Wechselwirkungen zwischen Fluid, Partikeln und Mikrostruktur bestimmt: Druckkraft und viskose Kraft bei der Umströmung der Partikel durch das Fluid, Volumenverdrängung durch die Partikel und Impulsübertragung von den Partikeln auf das Fluid, Partikel-Partikel und Partikel-Struktur Kollisionen sowie Haftkräfte, Haft- und Gleitreibung. Diese Wechselwirkungen können mit CFD-DEM gekoppelten Modellierungsansätzen beschrieben werden.

Der Beitrag erläutert verschiedene in DNSlab implementierte Varianten der CFD-DEM Kopplung und zeigt beispielhafte DNSlab Simulationen mikroskaliger Filterprozesse. Bei der 1-Weg gekoppelten CFD-DEM Simulation wird die Rückwirkung der Partikel auf die Strömung vernachlässigt, wodurch die benötigte Rechenleistung stark reduziert werden kann. Bei der 2-Weg gekoppelten CFD-DEM Simulation wird mit der Lattice-Boltzmann-Methode die Umströmung jedes einzelnen Partikels berechnet, was einen höheren Rechenaufwand erfordert, aber auch den Prozess genauer abbildet. Abschließend wird ein Ausblick auf eine sogenannte 1½-Weg Kopplung gegeben, die einen - insbesondere für industrielle Anwendungen - optimalen Kompromiss zwischen der 1-Weg und der 2-Weg Kopplung darstellt.



Abb. 1: 1-Weg gekoppelte CFD-DEM Simulation der Abscheidung fester polydisperser Partikel an einem Mikrofaservlies. Durch Modellierung von Haftkraft, Haft- und Gleitreibung werden Partikelabscheidung und -wiederablösung bei variierender Strömungsgeschwindigkeit abgebildet.

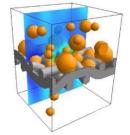


Abb. 2: 2-Weg gekoppelte CFD-DEM Simulation der Abscheidung und Rückspülung fester polydisperser Partikel an einem Gewebe. Die Umströmung jedes

einzelnen Partikels wird berechnet.

- [1] Hund, D.; Schmidt, K.; Ripperger, S.; Antonyuk, S.: Direct numerical simulation of cake formation during filtration with woven fabrics. Chemical Engineering Research and Design 139 (2018) S. 26-33
- [2] Schmidt, K.; Hund, D.; Ripperger, S.; Antonyuk, S.: Coupling of the Lattice-Boltzmann method and the discrete element method to model the separation of solid particles from liquids by porous media. FILTECH 2018 Proceedings
- [3] Petersen, L.: Untersuchung der Tiefenfiltration wässriger Suspensionen mit Vliesen. Doktorarbeit, TU Kaiserslautern, 2016



### Einsatz und Potential von open-source Lösertechnologie im Bereich der Strömungssimulation für Filtrationsanwendungen

#### Ulrich Heck

DHCAE Tools GmbH, Krefeld E-Mail: ulrich heck@dhcae-tools.de

#### Abstract

Vorgestellt wird eine Erweiterung für Filtrationsanwendungen auf der Makroskala mit einem Euler-Lagrangeschen Ansatz und einer porösen Filtermediums- und Kuchenformulierung auf Basis der open-source Toolbox OpenFOAM. Im optimierten Lagrangeschen Partikeltransport werden insbesondere Kräfte aus Dichteunterschieden zwischen Partikeln und kontinuierlicher Strömung wie z.B. Schwerkraft, Trägheit oder lokale Partikel-Wand-Wechselwirkungen berücksichtigt. Die Erweiterung beinhaltet lokale Modelle für die Ablagerung, die Porosität und die Permeabilität bei der Tiefenfiltration und dem Kuchenaufbau sowie einen iterativen Ansatz zur Berücksichtigung der Interaktion zwischen der Widerstandserhöhung durch örtliche Partikelablagerung und der Verlagerung der kontinuierlichen Strömung. Auf Basis der Filtrationsmodellierung werden Beispiele zur Modellübertragung von der Mikro- auf die Makroskala sowie ein Anwendungsfall einer Schlauchfilteranlage mit mehr als 1000 Einzelfiltern vorgestellt.

[1] Ulrich Heck, Martin Becker, A flexible approach for meso-scale filtration modelling based on Open-Source CFD, Konferenzband FILTECH-Konferenz 2019, Köln



### Simulation von Umlagerungsvorgängen reaktiv-inerter Partikelstrukturen in Wandstromfiltern

#### Nicolas Hafen

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

E-Mail: nicolas.hafen@kit.edu

#### **Abstract**

Wandstromfilter werden größtenteils Abgasnachbehandlung in der Verbrennungsmotoren verwendet. Ruß wird dabei im Filter abgeschieden unddurch eine kontinuierliche oder periodische Regeneration mittels Oxidation wieder aus diesem entfernt. Ein Inert-Anteil verbleibt jedoch im Filter und bildet unterschiedliche Ablagerungsmuster. In Abhängigkeit dieser Muster kann es neben einer Verbesserung des Abscheidegrads auch zu einem Anstieg des Druckverlusts kommen. Ursächlich für die Ausbildung einzelner Muster sind Umlagerungsvorgänge während der Regeneration durch das Ablösen einzelner Partikel-Agglomerate von der Filteroberfläche. Der Ablöseprozess und die anschließende Resuspension in die Strömung der einzelnen Agglomerate wird von dem Verhältnis zwischen hydrodynamischen und adhäsiven Kräften bestimmt (Wang et al. 2020). Mit Hilfe der Homogenised Lattice Boltzmann Methode (HLBM) werden aufgelöste Partikelsimulationen im Rahmen der open source Software OpenLB (Krause et al. 2020) durchgeführt. Hiermit werden die beschriebenen Kräfte ermittelt und Ablöse- und Umlagerungsvorgängen von Partikeln und Partikel-Agglomeraten detailliert untersucht.

- [1] Krause et al. (2020). OpenLB Open source lattice Boltzmann code. Computers & Mathematics with Applications.
- [2] Wang et al. (2020). The origin, transport, and evolution of ash in engine particulate filters. Applied Energy, 263, 114631.



### Simulation von Chromatographie mit sphärischen Beads

#### **Sebastian Osterroth**

Abteilung Strömungs- und Materialsimulation, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

E-Mail: sebastian.osterroth@itwm.fraunhofer.de

#### Abstract

Die Trennung einer Komponente aus einer Mixtur mittels Chromatographie ist ein wichtiger Prozess bei der Aufbereitung von Zielstoffen. In der Flüssigchromatographie werden hauptsächlich sphärische Beads, die in Säulen gepackt werden, benutzt.

Bei der Modellierung werden Effekte wie Dispersion, Konvektion, Porendiffusion, Adsorption oder Desorption betrachtet. Hierbei kann man zwischen vereinfachten, effektiven Modellen und einer genauen Beschreibung aller Effekte unterscheiden. Die genaue Wahl des Modells hängt von den Fragestellungen des Anwenders ab. Wichtig ist z.B. die Bestimmung von Parametern aus Messdaten. Hier tragen Modellierung und Simulation zur beschleunigten Parameteridentifikation bei und helfen die Anzahl an Experimenten zu verringern. Dabei ist es insbesondere möglich die Modelle an spezifische Herausforderungen anzupassen auch in Hinblick auf das Design.

Der Vortrag zeigt wie solche Fragestellungen mit mathematischen Hilfsmitteln und Optimierung gelöst werden können.



# Machine learning and model order reduction for predicting the efficiency of catalytic filters

#### **Oleg Iliev**

Abteilung Strömungs- und Materialsimulation, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

E-Mail: oleg.iliev@itwm.fraunhofer.de

#### **Abstract**

Reactive mass transport in porous media in presence of catalyst is the basis for many industrial processes and systems, such as e.g. fuel cells, photovoltaic cells, catalytic filters for exhaust gases, etc. The modeling and simulation of the pore scale reactive transport can help optimize the design of catalytic components, as well as to help optimize the process control.

The development of efficient and robust solvers for simulation of the chemical conversion rate using modern algorithms, including 3D direct numerical simulation, model order reduction, data-based methods of machine learning (ML), is essential to achieve fast, reliable predictive models.

In this presentation we will present algorithms and software for pore scale simulation of reactive flow, and will elaborate on some recent results from direct simulation in 3D-CT image of a piece of a membrane from catalytic filter. Adopting model reduction and machine learning approaches to pore scale simulation of reactive flow will be discussed next.

#### Collaborators:

Torben Prill, Pavel Gavrilenko, Pavel Toktaliev, Daria Fokina (Fraunhofer ITWM);

Robert Greiner, Martin Votsmeier (Umicore and TU Darmstadt)



# Entwicklung eines grey box model mit neuronalem Netzwerk am Beispiel der Dekantierzentrifuge

#### Philipp Menesklou

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) E-Mail: philipp.menesklou@kit.edu

#### **Abstract**

Kontinuierlich arbeitende Dekanterzentrifugen werden häufig zur Fest-Flüssig-Trennung in der chemischen Industrie und im Bergbau eingesetzt. Simulationstools können bei der Auslegung und Optimierung des Trennapparates helfen. In diesem Vortrag wird ein gra box model zur Simulation der mechanischen Entwässerung eines feindispersen Produktes in Dekanterzentrifugen diskutiert. Das white box model ist dabei ein dynamisches Prozessmodell das numerisches und welches [1], Sedimentationsverhalten, die Sedimentkonsolidierung und den Sedimenttransport berücksichtigt. Das black box model ist ein mit experimentellen Daten trainiertes neuronales Netzwerk. Das Simulationswerkzeug ist nun einerseits in der Lage, die Genauigkeit des Modells zu erweitern, andererseits können bisher nicht modellierte Effekte mit Hilfe von Trainingsdaten durch das neuronalen Netz berücksichtigt werden.

[1] P. Menesklou, H. Nirschl, and M. Gleiss, 'Dewatering of finely dispersed calcium carbonate-water slurries in decanter centrifuges: About modelling of a dynamic simulation tool', *Separation and Purification Technology*, vol. 251, p. 117287, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.seppur.2020.117287.



# Adaptronik in der Filtertechnik - Charakterisierung der Partikelstrukturablösung bei Dehnung einer Filterfaser

#### Lukas Poggemann

Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) E-Mail: lukas.poggemann@kit.edu

#### Abstract

Während des Filtrationsprozesses mit Tiefenfiltern steigt der Druckverlust über den Speicherfilter mit der abgelagerten Partikelmasse im Filter an (Kanaoka und Hiragi 1990). Bisher wurde das Ablösen von Partikelstrukturen nur an statischen Fasern mit Anströmgeschwindigkeiten > 10 m/s beobachtet (Löffler 1972). Die Einführung einer zeitlich veränderlichen/adaptiven Struktur könnte in Kombination mit einer Anströmung < 1 m/s, vorhandene Partikelstrukturen während des Filtrationsprozesses in tiefere Regionen des Filters überführen. Somit ließe sich die Nutzungsdauer bei gleichbleibender Filtereffizienz von Tiefenfiltersystemen verlängern. Um die Größe und das Ablöseverhalten von etwaigen Partikelstrukturen von einer dehnbaren Filterfaser zu charakterisieren, wurde eine einzelne Faser gezielt Beladen und im Anschluss bei verschiedenen Dehngeschwindigkeiten und Anströmgeschwindigkeiten gedehnt. Durch den Dehnvorgang der Faser und das gleichzeitige Anströmen im betriebsrelevanten Bereich v < 1 m/s konnte Ablösung und Umlagerung von Partikelstrukturen beobachtet werden.

- [1] Kanaoka, C.; Hiragi, S. (1990): Pressure Drop Of Air Filter With Dust Load (21), S. 127–137.
- [2] Löffler, F. (1972): Abblasen von an Filterfasern abgeschiedenen Feststoffteilchen. In: *Verfahrenstechnik* (6), S. 3–7.



# Programmierbare Materialien als Basis für adaptive Filtergewebe Stefan Rief

Abteilung Strömungs- und Materialsimulation, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern

E-Mail: <u>stefan.rief@itwm.fraunhofer.de</u>

#### **Abstract**

Globale Herausforderungen wie Klimawandel, erneuerbare Energien oder individuelle Mobilität erhöhen die Notwendigkeit einer effizienteren und nachhaltigeren Nutzung unserer Ressourcen. Programmierbare Materialien haben das Potenzial, einen Paradigmenwechsel einzuleiten, da sie durch ihre innere Gestaltung Systemfunktionen übernehmen können. Dies ermöglicht eine verstärkte Funktionsintegration bei gleichzeitiger Reduzierung der Systemkomplexität. Programmierbare Werkstoffe sind Materialien, deren innere Struktur so gestaltet und hergestellt ist, dass Eigenschaften und Verhalten durch äußere Stimuli, wie beispielsweise Temperaturänderungen oder chemische Stoffe, gesteuert und reversibel verändert werden können. Additive Verfahren ermöglichen die gezielte Herstellung dieser Strukturen im Mikrometerbereich.

In diesem Vortrag liegt der Schwerpunkt auf dem Einsatz programmierbarer Materialien im Bereich der Flüssigfiltration und der effektiven Filterreinigung. Bei der Filtration ist es wünschenswert, eine hohe Filtrationseffizienz, einen niedrigen Druckverlust und eine haben. Staubspeicherkapazität Ein niedriaer hohe ZU Druck Energieeinsparungen und niedrigen Betriebskosten. Die Staubspeicherkapazität gewährleistet eine effiziente Nutzung der Betriebskapazität. Wenn bestimmte Grenzwerte erreicht sind, wird der Rückspülschritt durchgeführt, um das Filtermedium von abgelagertem Staub zu reinigen. Dadurch kann der Filter mehrere Filtrationszyklen verwendet werden. Die Rückspülung wird das Medium jedoch nicht vollständig reinigen, und die motivierende Frage lautet: Welches Potenzial besteht, die Rückspüleffizienz durch aeometrische Veränderungen des Filtermediums unter Verwendung programmierbarer Materialien zu verbessern? Rückspüleffizienz bedeutet kurze Regenerationszeit, geringer Verbrauch an Wasser und minimale Partikelrückstände.

Wir beantworten die obige Frage mit Hilfe von Modellierung und Computersimulation. Im ersten Schritt wird die Staubbeladung simuliert, bis ein bestimmter Druckverlust oder eine bestimmte Staubspeicherkapazität erreicht ist. Dann werden das Filtermedium und die abgelagerten Staubpartikel einem Rückspülsimulationsschritt unterzogen. Die Analyse der lokalen Strömungsverhältnisse in der Nähe der abgelagerten Partikel zeigt dann auf, wo Änderungen der Porenmorphologie vorgenommen werden müssen, um die Strömungsgeschwindigkeiten um die Partikel zu erhöhen, damit diese die Adhäsionskräfte leichter überwinden können. Eine weitere Rückspülsimulation auf der Basis des modifizierten Mediums zeigt, wie gut die erwarteten Eigenschaften erfüllt werden. Im Sinne einer Optimierungsschleife müssen diese Schritte iterativ wiederholt werden.



### Teilnahmeliste

Nachname	Vorname	Firma, Institution
Azimian	Mehdi	Math2Market GmbH
Bächler	Peter	Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)
Baumann	André	Hochschule Heilbronn
Becker	Jürgen	Math2Market GmbH
Berger	Simon	Hochschule Heilbronn
Brockmann	Mashia	TU Bergakademie Freiberg
Buchwald	Thomas	TU Bergakademie Freiberg
Cheng	Liping	Math2Market GmbH
Dietemann	Bastien	Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM
Dittler	Achim	Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)
Elsayed	Omar	Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM / TU Kaiserslautern
Esser	Simon	TU Bergakademie Freiberg
Funke	David	Hengst SE
Grohn	Philipp	TU Kaiserlautern
Hafen	Nicolas	Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)
Heck	Ulrich	DHCAE Tools GmbH
Hoch	Dennis	Hochschule Heilbronn
Iliev	Oleg	Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM



Jüngling Natalie Hochschule Heilbronn

Keck Sabine J.H. Ziegler GmbH

Kerner Maximilian TU Kaiserlautern

Khamassi Jamel Industrial Science GmbH powered by IAV

Kirsch Ralf Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik

**ITWM** 

Knefel Markus GKD - Gebr. Kufferath AG

Kraft Torsten Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM

Lauer Viktor HYDAC FluidCareCenter GmbH

Lehmann Martin MANN+HUMMEL GmbH

Lösch Philipp TU Kaiserlautern

Löwer Erik TU Bergakademie Freiberg

Menesklou Philipp Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)

Niessner Jennifer Hochschule Heilbronn

Nirschl Hermann Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)

Osterroth Sebastian Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik

**ITWM** 

Otto John HYDAC FluidCareCenter GmbH

Peuker Urs TU Bergakademie Freiberg

Planas Barbara Math2Market GmbH

Poggemann Lukas Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)

Puderbach Vanessa TU Kaiserlautern



Rief Stefan Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik

**ITWM** 

Schick Maike GKD - Gebr. Kufferath AG

Schmidt Kilian IT for Engineering (it4e) GmbH

Sinn Tabea Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)

Stiborsky Mark Freudenberg Technology Innovation SE & Co. KG

Tassone Marco HYDAC FluidCareCenter GmbH

Wartlick Karl ARGO-HYTOS GmbH

Weiser Thomas ARGO-HYTOS GmbH

Wettich Helene Karlsruher Insitut für Technologie (KIT)

Wigger Stefan Junker-Filter GmbH