ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 2000
Seria: GÓRNICTWO z. 246 Nr kol. 1480

Heinz HÖLTER
HÖLTER B. O. S. Consulting Arge, Gladbeck, Niemcy

DENATEC - THEORETISCHE GRUNDLAGEN EINES MATHEMATISCHEN MODELLS

DENATEC – PODSTAWY TEORETYCZNE MODELU MATEMATYCZNEGO

Streszczenie. Procesy oczyszczania powietrza z organizmów biologicznych, a także drobnych substancji pylistych realizowane są w oparciu o wysoko sprawne urządzenie o nazwie Denatec. Stanowi ono kompleksowy system oparty na wzajemnym powiązaniu dynamiki przepływu przez reaktor gazów z elektryczną teorią pola. W publikacji zaprezentowano teorię pola elektrycznego w zastosowaniu do realizacji procesów oczyszczania gazów. Prezentowane równania uwzględniają niejednorodności oddziaływania sił pola na zachowanie się poszczególnych zjonizowanych cząstek, a w tym i bakterii. Autor traktując pole elektrostatyczne jako pole źródłowe określa efekty w nim zachodzące.

1. Einführung

Denatec ist ein komplexes System, dessen physikalische Grundlagen in der Strömungsdynamik, der elektrischen Feldtheorie wie in der Gastheorie begründet sind.

2. Potentialgleichungen des elektrischen Feldes

Um die physikalische Verkettung der strömungsdynamischen Problemstellung mit der Elektrostatik weiter zu erläutern, wird auf: Kapitel 6: Ebene Potentialströmung verwiesen.

Die Gleichungen 6.2 ff zeigen in ihrem inhomogenen Teil die Wirkung der Feldkräfte (*f*) auf das Bewegungsverhalten letztlich der einzelnen Partikel: Moleküle, Großmoleküle, positive/negative lonen, Elektronen, nicht zuletzt der Bakterien selbst.

Aus den Grundgesetzen lassen sich die folgenden Eigenschaften des elektrostatischen Feldes erkennen: das elektrostatische Feld ist ein Quellenfeld. Die Aussage in Differentialform ergibt sich durch einen Grenzübergang für verschwindendes Volumen:

$$\lim_{V \to 0} \frac{1}{V} \oint_A D \, dA = \operatorname{div} D = \rho \tag{2.1}$$

Das elektrostatische Feld ist wirbelfrei. Führt man eine Ladung Q auf einem geschlossenen Weg k im elektrostatischen Feld, so wird insgesamt weder Arbeit geleistet noch gewonnen:

$$W = Q\oint_k Eds = \oint_k Fds = 0 \tag{2.2}$$

Wird die Ladung jedoch zwischen zwei Punkten 1 und 2 verschoben, so ergibt sich eine endliche, aber wegunabhängige Arbeit:

$$W = Q\int_1^2 Eds \neq 0 \tag{2.3}$$

Das Integral ergibt mit

$$\int_1^2 Eds = \phi 1 - \phi 2 = \cup 12 \tag{2.4}$$

die Potentialdifferenz, d.h. die Spannung U 12 zwischen den Punkten 1 und 2. In der Umkehrung dieser Gleichung kann die Feldstärke allgemein als Gradient des Potentials dargestellt werden:

$$E = -\mathrm{grad}\phi \tag{2.5}$$

Ausgehend von o.g. Gleichungen ergibt sich für konstantes so $E\varepsilon_0, \varepsilon_r$ durch Eliminieren von D und E:

$$\mathrm{div}\{\varepsilon r(-\mathrm{grad}\phi)\} = \rho \tag{2.6}$$

$$\mathrm{divgrad}\phi = \Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon 0 \varepsilon r} \tag{2.7}$$

Der Laplacesche Operator lautet für Kartesische Koordinaten:

$$\Delta = \frac{\delta 2}{\delta x2} + \frac{\delta 2}{\delta y2} + \frac{\delta 2}{\delta z2}$$

Gleichung 2.7 ist die Poissonsche Potentialgleichung des raumladungsbehafteten Feldes, für das raumladungsfreie Feld ($\rho = 0$) folgt daraus:

$$\Delta\phi = 0 \tag{2.8}$$

Der Laplaceschen Potentialgleichung des raumladungsfreien Feldes. Durch die beiden Gleichungen (2.7) und (2.8) sind sämtliche elektrostatische Felder in mathematisch exakter Form beschrieben.

3. Ladungsträgerbewegung im Gas

Neben der Analyse der strömungsdynamischen Charakteristika der Denatec, der Behandlung der mathematischen Beschreibungsmechanismen des Feldes, bleibt - ebenso in

Kurzfassung der Umriß des Themas "Ladungsträgerbewegung im Gas", mit ihren inhärenten Prozessen der lonisation, der Anregung und der Anlagerung.

Hier interessiert insbesondere die "gerichtete Driftgeschwindigkeit" erzeugt durch das elektr.Feld und überlagert der Brownschen Molekularbewegung mit Maxwellverteilung:

$$v^2 = \frac{\delta}{4}\frac{3kT}{2m}\left[\sqrt{1-\frac{1}{\delta}\left(\frac{qE\lambda m}{\frac{3}{2}kT}\right)^2}-1\right] \tag{3.1}$$

bzw. in Kurzfassung:

für $q\,E\,\lambda\,m >> \frac{3}{2}kT\sqrt{\delta}$ folgt daraus

$$v = \text{const}\ \sqrt{E} \tag{3.2}$$

In (3.2) ist "E " der Feldvektor des "superpositionierten optimierten Feldes".

Dieses komplexe Feld wird numerisch mit einem auf der Methodik des "Finiten-Elemente-Differenzenverfahrens" berechnet (s.u.).

Gleichung (3.1) wird schrittweise numerisch integriert, um die Partikel-Flugbahnen in dem jeweiligen, individuellen Denatec-Design zu bestimmen.

4. Stossionisation

Die Ladungsträgervermehrung geschieht im Gas im wesentlichen durch Stoßionisationsprozesse. Für die Grundvorstellung kann wieder das Modellgas herangezogen und der zentrale, hier aber unelastische Stoß zweier Kugeln betrachtet werden. Hierbei wird der Zustand des zu Beginn ruhenden Teilchens 2 verändert, d.h. die potentielle Energie verändert sich um Δ Wpot. Aus dem Energie- und Impulserhaltungssatz kann die maximale, auf das Teilchen 2 übertragene poten-tielle Energie Δ Wpot. ermittelt werden, wenn W die kinetische Anfangsenergie des bewegten Teilchens 1 ist:

$$\frac{\Delta\,W\,pot}{W} = \frac{m2}{m1+m2} \tag{4.1}$$

Ein Elektron (m 1 >> m2) gibt damit in diesem Modell seine gesamte Energie an ein Molekül ab, während ein lon (m1 ≈ m2) nur 50 % seiner Bewegungsenergie abgibt. Für einen direkten lonisationsprozeß muß ΔW pot ≥ WI oder für die stufenweise lonisation muß

W pot ≥ WA und Wpot ≥ WI - WA sein. Elektronen sind daher für die Stoßionisation wesentlich wirksamer. Darüber hinaus ist die Energie der Elektronen im Gas wegen der wesentlich größeren wirksamen freien Weglänge λ*m und der etwa um den Faktor 5,6 größeren mittleren freien Weglänge größer als die der lonen. **Für die Ladungsvermehrung im Gas ist daher im allgemeinen nur der Elektronenstoß zu beachten.** Lonen können eine nennenswerte Ladungsträgervermehrung nur an Feststolffgrenzflächen bewirken.

Sucht man die lonisation auf der Strecke dx in Gegenrichtung des elektrischen Feldes, so wird:

$$\frac{ds}{dx} = \frac{v}{vE}$$

wobei vE die gerichtete, feldabhängige Driftgeschwindigkeit ist, die lonisationswahrscheinlichkeit aller NA Elektronen:

$$W_i = \left[\int_{v=0}^{v=\infty} \frac{dN(v)}{dv} \alpha_{st}(v) \frac{v}{v_E} \right] n_s dx \tag{4.2}$$

Die lonisationswahrscheinlichkeit dieser N_A Elektronen auf der Strecke dx ist aber nach Definition des Stoßionisationskoeffizienten:

$$W_i + N_A \alpha dx$$

Mit (4.2) wird

$$\frac{\alpha}{n_s} = \frac{1}{N_A} \int_{v=0}^{v=\infty} \frac{dN(v)}{dv} \alpha_{st}(v) \frac{v}{v_E} dv \tag{4.3}$$

5. Flugbahn- und Feldberechnung zur Dimensionierung eines Elektrostatischen Filters (Kooperation mit der Universität Dortmund)

In einem herkömmlichen Klimaanlagefilter wird die Zuluft durch Filtermaterial gefiltert. Der auf diesem Filtermaterial abgeschiedene Staub stellt einen Nährboden für Mikroorganismen dar. Zusätzlich zum hohen Druckverlust, den solche Filtermaterialien mit sich bringen, kommt es durch das Durchwachsen der Mikroorganismen zu einer Anreicherung von Mikroorganismen in der Raumluft. Eine kühle und gesunde Raumluft soll ein denaturierendes Elektrostatisches - Filter - System mit lonisationsgitter und denaturierender Niederschlags-elektrode liefern. Für Luftgeschwindigkeiten von 1 m/s konnte der Nachweis erbracht werden, daß eine Konfiguration gefunden wurde, bei der 99 % der Staubpartikel aus der Zuluft gefiltert werden können. Ziel muß es sein, flexibel auf Kundenwünsche reagieren zu können und mit Hilfe eines CAD-Verfahrens Filterentwürte so zu realisieren, dass auch bei

höheren Luftgeschwindigkeiten eine optimale Filterung der Zuluft bei kompakter Filterbauweise gegeben ist.

Dazu ist folgende Vorgehensweise geplant:

Nach 2-D-Flugbahnberechnungen der vorliegenden Filterauslegung wird eine Optimierung der Anordnung vorgenommen. Flugbahn- und Feldberechnungen mit dem Blick auf ausreichende Wahrscheinlichkeit auf Eintritt und Ablauf eines Ionisationsprozesses für optimierte Anordnungen (s.u.), sind dann die Basis für ein mathematisches Modell. Dieses soll abschließend in ein CAD - Verfahren implementiert werden.

5.1. Numerische Berechnung elektrostatischer Felder

Aus den vorangegangenen Abschnitten ist zu ersehen, dass eine geschlossene Lösung der Potentialgleichung nur für relativ einfache Feldformen möglich ist. Viele technisch interessante und effiziente Elektrodensysteme für Denatec sind auf diese Weise nicht berechenbar, ihr elektrostatisches Feld kann daher nur mit Hilfe numerischer Näherungsmethoden bestimmt werden. Dazu wurden das Differenzenverfahren, die Finite-Elemente-Methode und das Ersatzladungsverfahren entwickelt. Diese Verfahren sind heute so leistungsfähig, dass grundsätzlich beliebig komplizierte Geometrien berechnet werden können. Der Aufwand an Rechenzeit und Speicherplatzbedarf kann dabei sehr groß werden. Vielfach läßt sich dieser Aufwand aber schon durch geringfügige Vereinfachungen der Elektrodengeometrie wesentlich verringern, insbesondere wenn eine Beschränkung auf Rotationssymmetrie möglich ist.

Zwei numerische Feldberechnungsmethoden - das Verfahren der Finiten Elemente und das Differenzenverfahren - lösen die Potentialgleichung näherungsweise mit Hilfe der Aufteilung des Feldraumes in Gitterelemente. Beim Differenzenverfahren wird der Potentialverlauf durch einen Differenzenansatz in jedem Element approximiert, bei dem Verfahren der Finiten Elemente wird eine Energieminimierung über den gesamten Feldraum durchgeführt.

Eine andere Möglichkeit zur Lösung der Potentialgleichung ist die Superposition von Teillösungen. Sie wird bei der Ersatzladungsmethode angewendet. Die Linearität der Potentialgleichung ermöglicht die Bestimmung von Partikulärlösungen, die in der Überlagerung die Randbedingungen erfüllen. Die Partikulärlösungen sind die Potentialfunktionen von Ladungen. Das Ladungssystem bildet Äquipotentialflächen, die näherungsweise die Elektroden nachbilden und deshalb auch den Potential- und Feldverlauf im Feldraum zwischen den Elektroden beschreiben.

In jüngster Zeit ist ein grundsätzlich neues Verfahren als stochastische Realisierung des Mittelwertansatzes der Potentialtheorie auf der Basis einer Monte-Carlo-Simulation ertüchtigt worden.

5.2. Finite Elemente-Methode

Die Methode der Finiten Elemente ist inzwischen in mehrere technische Fachgebiete eingegangen: ursprünglich diente sie zur Lösung von Extremwertaufgaben der Variationsrechnung.

Für die Berechnung elektrostatischer Felder ist von Belang, dass die Funktion ϕ, die unter vorgegebenen Randbedingungen das Energiefunktional für ein bestimmtes Volumen V

$$F_E = \int_v \frac{1}{2} \varepsilon o \varepsilon_v (\mathrm{grad}\phi)^2 \, dV \tag{5.1}$$

minimiert, die Lösung der Laplaceschen Potentialgleichung ist. Allgemeiner gesagt: das elektrostatische Feld bildet sich so aus, daß sein Gesamtenergieinhalt minimal wird.

Für eine Berechnung wird der Feldraum durch Elemente diskretisiert, z.B. durch Dreiecke für zweidimensionale Probleme oder durch Tetraeder für dreidimensionale Felder, da diese Formen auf einfache Weise eine örtlich begrenzte weitere Unterteilung des Gitternetzes in Bereichen großer Feldänderungen ermöglichen. Innerhalb der Elemente wird der Verlauf des Potentials Φ (x,y,z) approximiert.

6. Ebene Potentialströmung

Es wird die Driftbewegung der Ladungsträger in ihrer Bewegungs-Kinematik anhand der "Ebenen Potentialströmung" ermittelt.

Die Untersuchungen erfolgen in der $\underline{z}$-Ebene für $\underline{z} = z_0, z_1, \ldots, z_n$ mit $\underline{x}$ in Stromrichtung und $\underline{y} = \perp \underline{x}$.

Betrachtet wird die Bewegung der einzelnen "Ladungsträger" durch numerische Integration des folgenden Differentialgleichungssystems bei Variation:

- der Ladungsgröße (Q i)
- der Molekular-Masse (M)
- der kinetischen Anfangsenergie beim Eintritt in das Filter bzw. nach den "Dissoziationsvorgängen (v_{ix})"
- der Molekulardichte bzw. des Druckes

- der geometrischen Eintrittshöhe des jeweiligen Ladungsträgers bezogen auf das gewählte kartesische Koordinatensystem der Abbildung ($Y = Y_0, Y_1, \ldots\ldots\ldots Y_n$)

Die Bewegungskinematik beeinflussende dominante äußere Kraft ist das elektrostatische Potentialfeld. Dieses bildet sich durch Superpositionierung einzelner Felder, denen gemeinsam es ist bzw. näherungssweise es sein sollte, dass Feldkräfte in z-Richtung - im Driftraum des Filters - gegen Null gehen.

Des weiteren ist eine anzunehmende Interferenz zwischen sich bildender Raumladung und elektrostatischem Potentialfeld zu berücksichtigen, verursacht durch die an den "Sprühelektroden" austretenden "Elektronen" (Feldemission) in ihrer Reaktion mit den Molekülen der vorbeiströmenden Luft, d.h. der auftretenden mehrstufigen Reaktionen, insbesondere der Elektronen mit den Sauerstoff- und Stickstoffmolekülen der Luft.

Ein dadurch nicht auszuschließender Aufbau von wirksamer Raumladung und damit einer örtlichen Umbildung des elektrischen Feldes und damit eines eventuellen Abbaus elektrischer Feldenergie ist zu berücksichtigen.

Der o.g. Aufbau einer örtlichen Raumladung nahe der Kathode (s. Abbildung S. 11 a) ist bei Zugrundelegung des Coulombintegrals:

$$\underline{\phi}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \iiint_v \frac{\rho(\underline{r}')}{|\underline{r} - \underline{r}'|} dv'$$

zu betrachten in Abhängigkeit:

- der Geometrie / konstruktiver Auslegung der Kathode (Sprühelektrode)
- der angelegten Spannung $5 < U \leq 30 / 35$ [KV]

Hinweis

1. Ein wesentliches Auslegungskriterium der Denatec ist ihre Niederschlagseffizienz-Optimierung. Dazu ist eine der notwendigen Voraussetzungen, eine ausreichende Anzahl von Elektronen aus der Sprühelektrode (Kathode) durch ein entsprechendes elektrostatisches Feld (Feldemission) zu erzeugen.

   Zum Lösen von der Metalloberfläche der Kathode benötigt ein Elektron eine bestimmte stoffabhängige Energie, die mindestens gleich der sog. Ablöse- oder Austrittsarbeit ist.

   Um dazu die Spannung klein zu halten, endet die Kathode bei einer bestimmten Rasterform in "feinen Spitzen".

Die Moleküle, die in dem sog. "Ionisationsraum" der Denatec aus den Klimakanälen eintreffen:

- Sauerstoff- und Stickstoffmoleküle der Luft,
- Bakterien und Viren,
- Staub, etc.

treffen mit unterschiedlichen Anfangsgeschwindigkeiten

$$\left(V_{xo} = 1../.< 10\frac{m}{s}\right)\text{ein}$$

Nach dem "Maxwellschen Äquipartitionsprinzip" läßt sich eine "mittlere Stoßzahl" der Moleküle - zunächst angenommen bei Abwesenheit von Elektronen - im sog. Ionisationsraum bestimmen.

Daraus läßt sich dann die notwendige Anzahl von Elektronem zumindest überschläglich - ermitteln, die notwendig ist, um jene Moleküle (N_{Mol} / $V_{Ionisation}$) "durch Stoßenergie" zu erregen / ionisieren, deren Niederschlag mit bestimmter Effizienz angestrebt wird. (Diese physikalischen Betrachtungen geschehen an anderer Stelle.)

Der mehrstufige "Ionisationsprozeß" benötigt eine Reaktionszeit $\leq$ ca. 20 - 30 µs. Die Lösungen des Differentialgleichungs-Systems werden die "Driftbahnen" von Elektronen und Ladungsträgern (Ionem) auf dem Weg zur Niederschlagselektrode sein.

2. Das elektrostatische Potentialfeld wird entlang des "Driftraumes" im Filter durch Superpositionierung von Einzelfeldern gebildet. Die endgültige Anordnung der Einzelfelder wird jeweils festgelegt. Die Lösungen des nachfolgenden Differentialgleichungssystems für die "Ebene Potentialströmung" werden Aufschluß auch über optimale Größe und Anordnung der Einzelfelder - vektoriell addiert - geben.

Gesucht ist das "Design": kompakt und niederschlagseffizient.

Die rechnerische Simulation soll dazu Aufschluß geben unter Berücksichtigung des multivalenten Einflusses allen o.g. Parameter und der Varianz der Koeffizienten.

Gleichungssystem: Ebene Potentialströmung

Die o.g. hydrodynamischen Grundgleichungen vereinfachen sich in ihrer Lösung für ebene, inkompressible Strömung - eine solche Annahme darf im vorliegenden Fall als zulässig bezeichnet werden hinsichtlich

Kontinuität:

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0 \tag{6.1}$$

Eulergleichung (in modifizierter Form):

$$\frac{du}{dt}=-\frac{1}{\rho}\frac{\delta p}{\delta x}+\eta\left(\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}+\frac{\delta^2 u}{\delta y^2}\right)+f_x$$

$$\frac{dv}{dt}=-\frac{1}{\rho}\frac{\delta p}{\delta y}+\eta\left(\frac{\delta^2 v}{\delta x^2}+\frac{\delta^2 v}{\delta y^2}\right)+f_y \tag{6.2}$$

Hinweis

1. In 6.2 ist die Gravitationskraft vernachlässigt.
2. α ist die "Kraft" auf die einzelnen in der z-Ebene "driftenden Ladungsträger" , die gemäß.

$$\alpha \triangleq K_e = \underline{E}\cdot Q_{RES}$$ ausgeübt wird.

Recenzent: Prof. dr hab. inż. Janusz W. Wandrasz

Omówienie

Procesy oczyszczania powietrza z organizmów biologicznych, a także drobnych substancji pylistych realizowane są w oparciu o wysoko sprawne urządzenie o nazwie Denatec. Stanowi ono kompleksowy system oparty na wzajemnym powiązaniu dynamiki przepływu przez reaktor gazów z elektryczną teorią pola. W publikacji zaprezentowano teorię pola elektrycznego w zastosowaniu do realizacji procesów oczyszczania gazów. Prezentowane równania uwzględniają niejednorodności oddziaływania sił pola na zachowanie się poszczególnych zjonizowanych cząstek, a w tym i bakterii. Autor traktując pole elektrostatyczne jako pole źródłowe określa efekty w nim zachodzące.

Na przebieg zjawisk zachodzących w polu elektrostatycznym istotny wpływ ma zagadnienie dynamiki przepływów i jego powiązanie z inherentnymi procesami jonizacji. Problem ten dotyczy zagadnień występujących w teorii "ruchu nośników ładunków w gazie", a w szczególności zagadnieniach "ukierunkowanej prędkości unoszenia" jonów wytworzonych przez pole elektryczne z uwzględnieniem ruchu cząstek wg teorii Browna i Maxwella.

Wzrost liczby nośników ładunków w gazie powstaje w wyniku zderzeń cząstek. Zderzenia te traktować można jako sprężyste zderzenie dwu kulek, przy czym spełniona być musi zasada zachowania pędu i energii. Zjawisko to nazywa się jonizacją zderzeniową zachodzącą w przypadku, gdzie jeden elektron oddaje jednej cząstce całkowitą swoją energię. Ponieważ energia elektronów w gazie jest większa od energii jonów, w procesie "mnożenia ładunków" uwzględnić należy tylko zderzenia elektronów.

W oparciu o współpracę z Uniwersytetem w Dortmundzie opracowano teorię obliczenia toru lotu cząstek w polu elektrycznym w celu uzyskania możliwości zwymiarowania filtru elektrostatycznego. Autor porównuje również zasadę działania filtru tradycyjnego, w którym na materiale filtracyjnym osadzony pył stanowi pożywkę dla rozwoju mikroorganizmów i w konsekwencji powoduje wzrost mikroorganizmów w powietrzu pomieszczenia. Analizowane jest również zagadnienie spadku ciśnienia w filtrze jonizacyjnym i tradycyjnym.

W oparciu o uzyskane rezultaty opracowano model matematyczny pozwalający na numeryczne obliczanie pól elektrostatycznych. Model ten pozwala na odejście od stosunkowo prostych form pola do zagadnień skomplikowanych uwzględniających systemy elektrod stosowane w filtrze Denatec. Daje możliwość uproszczenia geometrii elektrod, co w istotny sposób wpływa na wymaganą moc komputera stosowanego do procesu projektowania i obliczeń. Sam model opiera się na dwu metodach obliczania pola, tj. metodzie elementów skończonych i metodzie różnicowej z uwzględnieniem superpozycji rozwiązań cząstkowych. Publikacja prezentuje każdą z omawianych metod i jej zastosowanie w obliczeniach. Autor zwraca uwagę , że znaczącym kryterium ukształtowania filtru Denatec jest optymalizacja jego skuteczności osadczej, co związane jest z możliwością wytworzenia wymaganej ilości elektronów z elektrody koronującej (katody). Katoda ta dla umożliwienia utrzymania niskiego napięcia zakończona jest, przy określonej formie rastera, "cienkimi końcami". W oparciu o "zasadę ekwipatrycji energii Maxwella" dla dopływających do filtru cząstek tlenu, azotu, bakterii i wirusów, pyłu itd. określić można " przeciętną liczbę zderzeń" i wymaganą ilość elektronów. Rozwiązaniami systemu równań różniczkowych są "tory unoszenia" elektronów i nośników ładunków (jonów) na drodze do elektrody osadczej. W ten sposób możliwa jest optymalizacja całego układu i dobór wymiarów geometrycznych filtru.