

Simulation und Optimierung der Strömung in einem Zell-Mixer

Christoph Drobek, Hermann Seitz

Einführung

In Zusammenarbeit mit einer Firma im Bereich Bioanalytik wurde ein Zell-Mixer für die Bereitstellung von Zellen in Suspension für zelluläre Assays weiter entwickelt.

Da dabei die Zellen nacheinander genutzt werden, müssen sie über mehrere Stunden vital bleiben und werden deshalb in isotonischer Kochsalzlösung in einem Zell-Mixer in Bewegung gehalten.

Bei unzureichender Vermischung im Zellmixer kommt es jedoch zu einem Absinken der Zellen, sodass die Zellen dann am Boden verkleben und schließlich absterben. Der vorhandene Zellmixer soll nun optimiert werden. Da sich in den letzten Jahren numerische Strömungssimulationen (Computational Fluid Dynamics, CFD) als Ergänzung zu experimentellen Untersuchungen der Strömung immer mehr etabliert haben, soll das Verhalten der Strömung im Zell-Mixer mit dem CFD-Solver ANSYS FLUENT 14 simuliert werden.

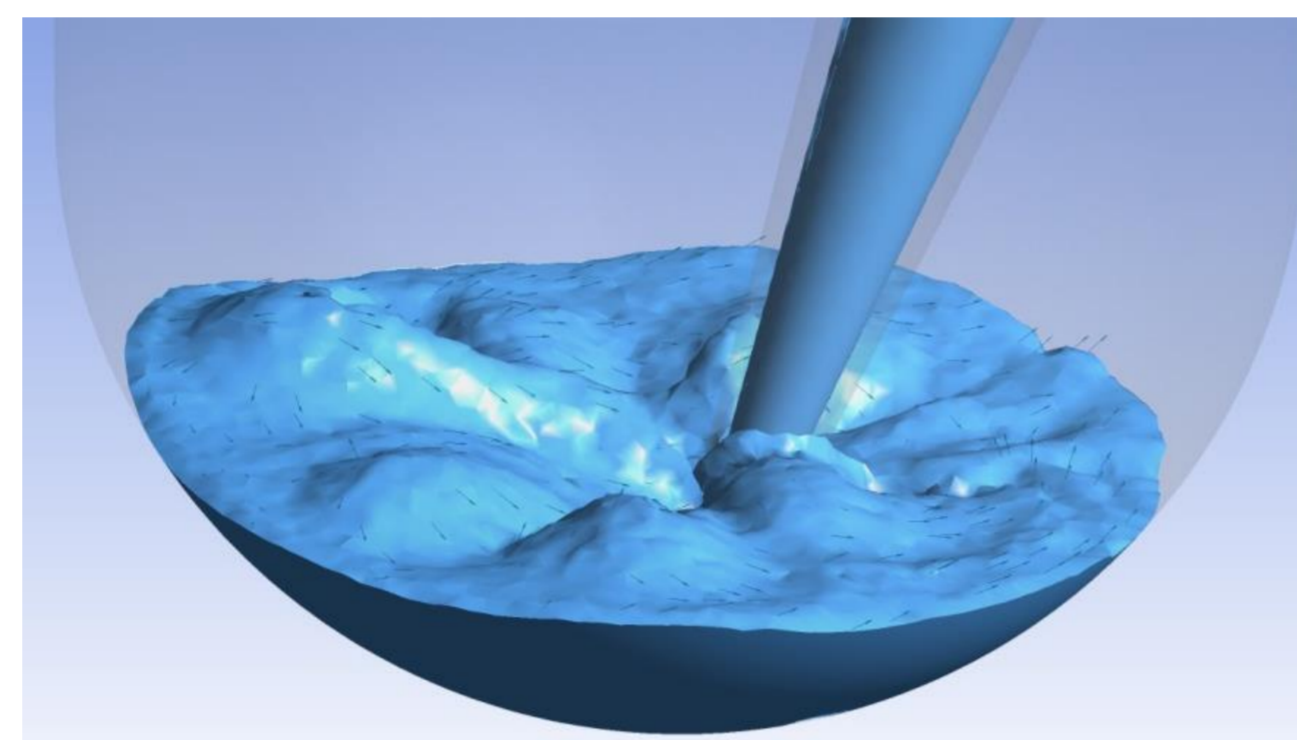


Abb. 1: Durchmischung im Original-Zellmixer (Phasengrenze Kochsalzlösung-Luft dargestellt)

Physikalische Grundlagen

In der CFD werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie, die so genannten Navier-Stokes-Gleichungen, numerisch gelöst. Sie basieren auf der Annahme, dass das zu simulierende Fluid ein Kontinuum darstellt, also es den ihm zur Verfügung stehenden Raum ausfüllt¹. Der eigentlich molekulare Aufbau des Fluids wird dabei vernachlässigt. In ANSYS FLUENT ist die Massenbilanz für die q -te Phase für Mehrphasenströmungen mit n Phasen

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \mathbf{u}_q) = \sum_{p=1}^n \dot{m}_{pq}$$

formuliert². Entsprechend ist die Impulsbilanz für die q -te Phase in ANSYS FLUENT

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q \mathbf{u}_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \mathbf{u}_q \mathbf{u}_q) = -\alpha_q \nabla p + \alpha_q \rho_q \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_q + \sum_{p=1}^n (\mathbf{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \mathbf{u}_q) + \alpha_q \rho_q (\mathbf{F}_q + \mathbf{F}_{Uf,q} + \mathbf{F}_{vm,q})$$

formuliert. Sie basiert grundlegend auf dem zweiten Newtonschen Gesetz ($F = ma$). Die Energiebilanz wird lediglich für kompressible Strömungen oder für Strömungen mit Energietransport benötigt und wird hier nicht näher beschrieben.

Definition der Zielparame-ter

Als Zielparame-ter dienen die Scherrate in der Zellsuspension und ihre Durchmischung. Die Scherrate γ beschreibt, wie sehr sich die Strömungsgeschwindigkeit u quer zur Hauptströmungsrichtung ändert.

$$\gamma = \frac{du}{dy}$$

Es wird angenommen, dass die Zellwände aufgrund zu hoher Scherkräfte in der Zellsuspension aufreißen, sodass das Zellinnere nach außen treten kann, die Zellen absterben und so für die weitere Analyse unbrauchbar werden. Deshalb soll die maximale Scherrate in den neuentwickelten Geometrien die Scherrate des Ausgangssystems nicht überschreiten.

Die Durchmischung der Zellen kann über den Volumenbruch α_{Zellen} der Zellen in der Zellsuspension abgebildet werden. Ohne oder bei ungenügender Durchmischung sinken die Zellen in der Kochsalzlösung mit der Zeit immer weiter ab, verkleben am Boden mit anderen Zellen, reißen auf und sterben ab. Im unteren Bereich des Zell-Mixers erhöht sich dann der Volumenbruch α_{Zellen} , oben nimmt er dagegen ab. Ist die Durchmischung auch über einen längeren Zeitraum gewährleistet, ist der Volumenbruch der Zellen im gesamten Zellmixer nahezu gleich.

Zwischen beiden Parametern liegt ein Zielkonflikt vor. Eine Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit im Zellmixer führt zu einer höheren Durchmischung, also einem homogeneren Zell-Volumenbruch. Jedoch führt eine höhere Strömungsgeschwindigkeit auch zu höheren Gradienten der Strömungsgeschwindigkeit, also höheren Scherraten.

Aufbau des Simulationsmodells

Die in ANSYS FLUENT integrierten Mehrphasenmodelle „Eulerian Model“ und „Volume-Of-Fluid (VOF) Model“ wurden verwendet und hinsichtlich der Zielparame-ter untersucht. Das Eulerian Model eignet sich besonders zur Simulation von sich durchdringenden Phasen, in diesem Fall den Zellen in der Kochsalzlösung. Die Bewegung der Zellen wird hier allerdings nur modelliert, die Zellen sind nicht real vorhanden. Das VOF Model wurde zur Simulation von Mehrphasenströmungen entwickelt, bei denen die Form der Phasengrenze direkt abgebildet werden muss. Die Phasen durchdringen sich also nicht. Das k - ω SST-Modell wurde als Turbulenzmodell benutzt. Die verwendeten Netze (Abb. 2) besitzen 0,5 bis 6 Millionen Zellen. Die für die Simulation nötigen Stoffwerte bei $p = 1 \text{ bar}$ und $\vartheta = 21^\circ\text{C}$ wurden experimentell ermittelt und sind in Tabelle 1 dargestellt.



Abb. 2: Netz der Ausgangs-geometrie

Ergebnisse

Hinsichtlich der Scherrate wurde der vorhandene Zell-Mixer mit einem volumetrisch 10-fach herunterskalierten Modell, einem Modell mit volumetrisch 10-fach herunterskaliertem Tiegel/mit originaler Pipette und mit einem Modell einer horizontalen Doppelpipette verglichen (Abb. 3).

	NaCl-Lsg	Zellen
Dichte ρ [kg m ⁻³]	1004	1200
Dyn. Viskosität η [mPa s]	0,98	var.
Oberflächenspannung σ [N m ⁻¹]	0,0469	-
Kontaktwinkel Θ auf PTFE [°]	126	-

Tab. 1: Stoffwerte NaCl-Lsg, Zellen bei 1bar und 21°C

Dabei wurde bestätigt, dass bei einer Verkleinerung der Pipette der Volumenstrom ebenfalls verkleinert werden muss, da sich ansonsten die Scherrate erhöht. Die maximale Scherrate im komplett skalierten Modell mit ursprünglichem Volumenstrom ist mit $\gamma = 29200 \text{ 1/s}$ nämlich fast dreimal so hoch wie bei der Originalgeometrie. Da die horizontale Doppelpipette die gleichen Abmessungen wie die originale Pipette besitzt, tritt hier mit $\gamma = 10100 \text{ 1/s}$ nahezu die gleiche maximale Scherrate auf wie bei der Originalgeometrie.

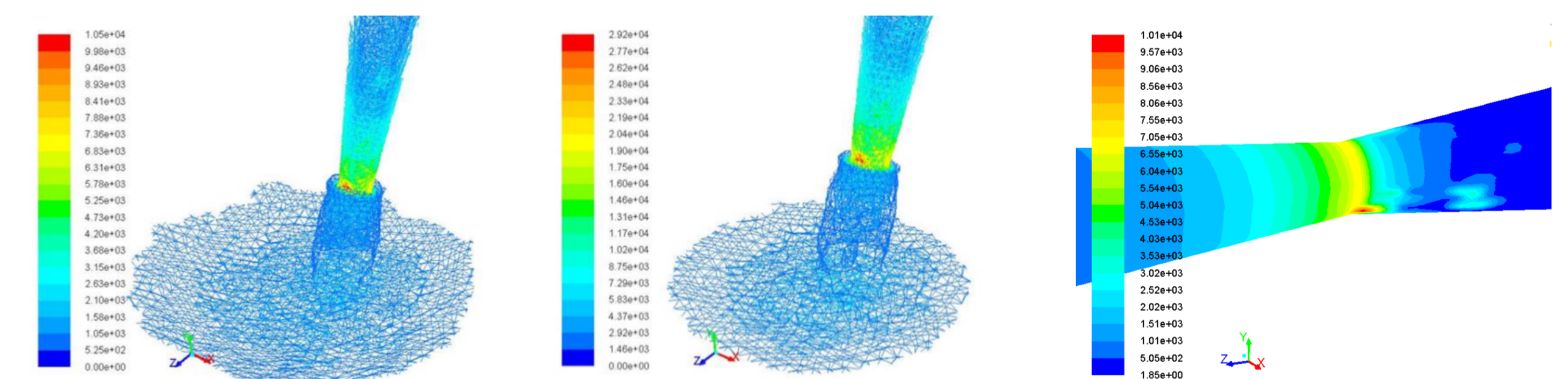


Abb. 3: Vergleich der Scherraten: links: „Originalgeometrie Pipette mit Tiegel“; Mitte: „Volumetrisch 10-fach herunterskaliertes Modell“; rechts: „Horizontale Doppelpipette“

Zur Simulation der Durchmischung der Zellen sind die Modelle „Eulerian Model“ und „VOF Model“ nur bedingt geeignet, da das Eulerian Model die für die Simulation wichtige Grenzfläche Kochsalzlösung-Luft nicht darstellen kann und das VOF Model die Zellen nur mit deutlich höherer Rechenleistung einbeziehen kann. In ANSYS FLUENT ist mit dem „Multi-Fluid VOF Model“ jedoch eine Kombination aus Eulerian Model und VOF Model integriert, mit dem disperse Fluide mit Grenzfläche simulierbar sein sollen, also auch das System Zellen-Kochsalzlösung-Luft. Stabile und physikalisch sinnvolle Lösungen konnten mit diesem Modell jedoch noch nicht erreicht werden.

Ausblick

Zur Bestimmung der Durchmischung als entscheidenden Zielparame-ter müssen weitere Untersuchungen mit dem „Multi-Fluid VOF Model“ durchgeführt werden, um damit physikalisch sinnvolle und stabile Lösungen zu generieren.

Literatur

- [1] Oertel jr, H.; Böhle, M.; Dohrmann, U.: Strömungsmechanik; Vieweg+Teubner; 5. Auflage; 2009
[2] ANSYS, Inc.: Introduction to Multiphase modeling in ANSYS FLUENT; 2010