

Computergestützte Simulation in F&E

Modellrechnungen und Simulationsprogramme steigern die Effizienz im Produktdesign und machen Investitionen in F&E rentabler.

Ob Strömungsberechnung, chemotherapeutische Wirkstoffadressierung oder die Berechnung von Diffusions-Reaktionsprozessen: Die computergestützte Simulation kommt heute in zahlreichen wissenschaftlichen Disziplinen zum Einsatz, von der chemischen Reaktionstechnik bis hin zur Pharmakologie. Es sind die leistungsfähigen Softwarepakete, die diese umfangreichen multiphysikalischen Modell erst möglich machen. Femlab stellt solche Pakete zur Verfügung.

Die computergestützte Simulation gehört zweifelsohne zu den wichtigsten technischen Entwicklungen im 21. Jahrhundert. Durch die Modellierung mit den Methoden der finiten Elemente, der finiten Volumen und der finiten Differenzen hat sich in den letzten zehn Jahren ein Wandel im technischen Design wie auch in der Entwicklung der eingesetzten Verfahren vollzogen. Selbst für anspruchsvolle Modellierungsaufgaben stehen heute vorgefertigte Softwarepakete zur Verfügung, die keine speziellen Numerikkenntnisse mehr voraussetzen und von Fachleuten aus allen Anwendungsbereichen genutzt werden können. Eine wichtige Rolle spielen hierbei auch die Rechnersysteme, die im vergangenen Jahrzehnt immer leistungsfähiger und kostengünstiger geworden sind, denn ohne sie wären solche Fortschritte undenkbar gewesen.

Dieser Artikel veranschaulicht anhand von Beispielen, wie sich mithilfe multiphysikalischer Modelle Aufgaben berechnen lassen, die noch vor wenigen Jahren als unlösbar galten. Alle hier vorgestellten Modelle wurden mit Femlab erstellt, einem auf der Finite-Elemente-Methode basierenden Softwarepaket.

Wie effektiv arbeitet ein Mischer?

Das erste Modell stellt die Mischung zweier Lösungen in einem laminaren statischen Mischer dar.

Ziel ist es, den Mischwirkungsgrad bei verschiedenen Strömungsgeschwindigkeiten und unterschiedlichen Betriebsbedingungen näherungsweise zu bestimmen. Hierzu reicht ein qualitativer Farbplot des Mischvorgangs nicht aus; vielmehr ist eine quantitative Bemessung des Mischwirkungsgrads erforderlich. Dieser lässt sich bestimmen, indem die Varianz der Konzentration für Querschnitte durch den Mischer senkrecht zur Hauptströmungsrichtung berechnet wird. Abbildung 1 zeigt die Konzentrationsverteilung, das Geschwindigkeitsfeld im Mischer und die Varianz der Konzentration für Querschnitte entlang der Längsachse durch den Mischer. Wie in der Abbildung deutlich zu erkennen ist, wird eine hohe Mischwirkung dort erzielt, wo das Fluid eine Schaufel verlässt und auf die nächste, stromabwärts gelegene Schaufel trifft.

Simulation des Wirkstofftransports

Die aktuelle Forschung im Bereich der chemotherapeutischen Wirkstoffadressierung befasst sich unter anderem mit so genannten biokompatiblen magnetischen Nanoträgersystemen. Magnetische Flüssigkeiten, beispielsweise Ferrofluide, können beim Wirkstofftransport im menschlichen Körper wichtige Funktionen übernehmen. Das zweite Beispielmodell zeigt ein externes Mag-

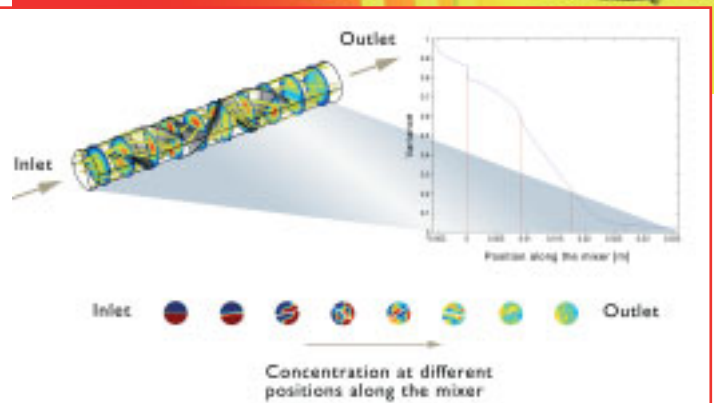
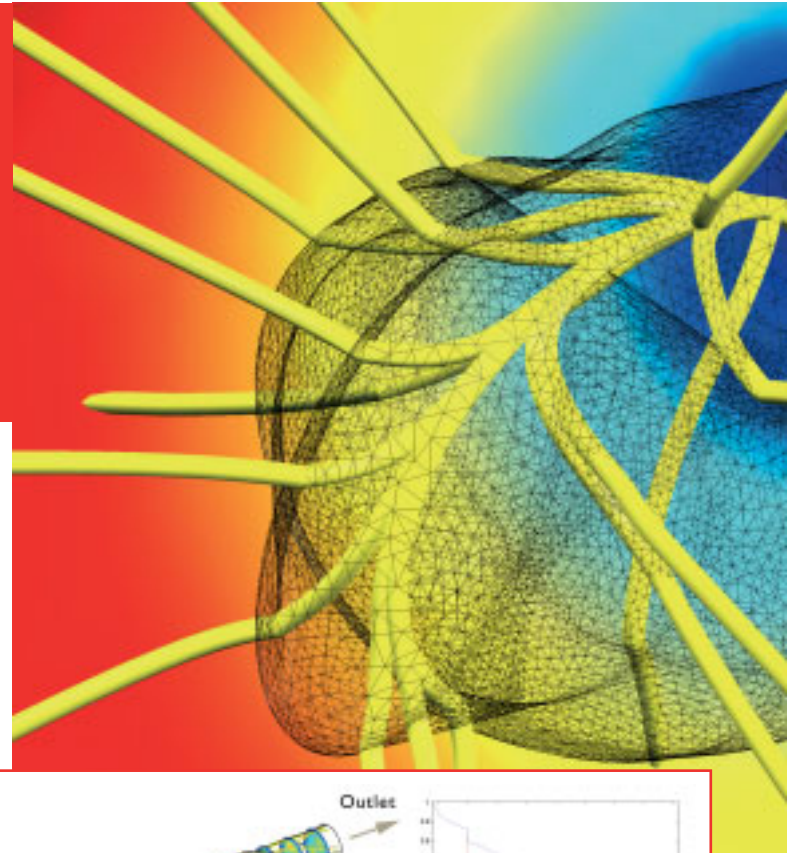


Abb. 1: In diesem Beispiel wird die Strömung in einem statischen Mischer mit gedrehten Schaufeln untersucht. Durch Berechnung der Standardabweichung der Konzentration des gelösten Stoffs wird der Mischwirkungsgrad ermittelt. Die Varianz nimmt bis zur vorletzten Schaufel fast linear ab. Die letzte Schaufel trägt kaum zur Mischung bei und kann somit eventuell entfallen.

netfeld und seine Wechselwirkungen mit einer magnetischen Trägersubstanz im Blutstrom. Anhand des Modells können das externe Magnetfeld, die Wahl des verwendeten Ferrofluids und weitere wichtige Parameter optimiert werden. Abbildung 2 zeigt das Magnetfeld eines Permanentmagneten und das Ge-

schwindigkeitsfeld bei maximaler, durch Herzrhythmus verursachter Strömung im Blutgefäß.

Modell eines Diffusions-Reaktions-Prozesses

Das dritte Modell stammt aus der chemischen Reaktionstechnik und

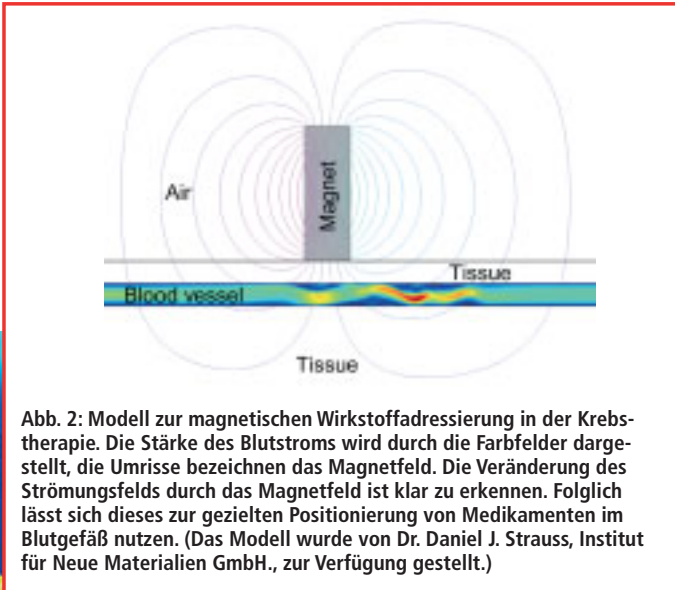


Abb. 2: Modell zur magnetischen Wirkstoffadressierung in der Krebstherapie. Die Stärke des Blutstroms wird durch die Farbfelder dargestellt, die Umrisse bezeichnen das Magnetfeld. Die Veränderung des Strömungsfelds durch das Magnetfeld ist klar zu erkennen. Folglich lässt sich dieses zur gezielten Positionierung von Medikamenten im Blutgefäß nutzen. (Das Modell wurde von Dr. Daniel J. Strauss, Institut für Neue Materialien GmbH., zur Verfügung gestellt.)

erstofflusses und lassen erkennen, dass das Eidotter keinen Sauerstoff verbraucht. Der Sauerstoffverbrauch erfolgt vielmehr im eigentlichen Fischembryo in der Umgebung des Dotters.

Was passiert im Mikrokanalsystem?

Das letzte Modellbeispiel zeigt die durch Druck herbeigeführte Strömung und Elektrophorese in einem Mikrokanalsystem (Abb. 4). Das dem Modell zugrunde liegende Gerät wird häufig als elektrokinetischer Injektor für Probesubstanzen in Biochips verwendet. Es dient dazu, genau festgelegte Mengen dissoziierter Säuren und Salze in das System einzubringen und diese zu transportieren. Im Modell wird ein zusammengedrücktes Injektions-Dreiwegventil während der Fokussierung, Injektion und Trennung untersucht. Die Fokussierung erfolgt mittels einer durch Druck herbeigeführten Strömung in der Probesubstanz und der Pufferlösung.

Hierdurch sammelt sich die gesamte Probesubstanz im Fokussierkanal. Nachdem sich ein stationärer Zustand eingestellt hat, wird der Druck und damit die Strömung aufgehoben und ein elektrisches Feld an die Kanäle angelegt. Dieses elektrische Feld führt dazu, dass sich die dissoziierten Ionen der Probesubstanz im Fokussierbereich rechtwinklig zum Fokussierkanal und durch den Injektionskanal hindurch bewegen. Um eine möglichst saubere Trennung der Ionen der Probesubstanz zu erreichen, wird mit unterschiedlichen Konfiguratio-

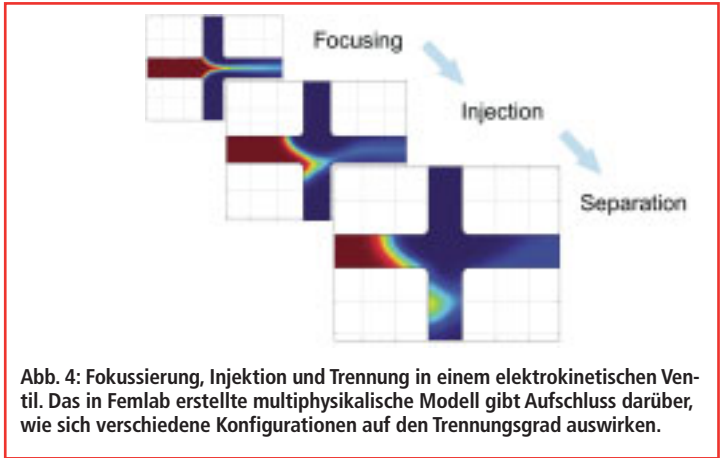


Abb. 4: Fokussierung, Injektion und Trennung in einem elektrokinetischen Ventil. Das in Femlab erstellte multiphysikalische Modell gibt Aufschluss darüber, wie sich verschiedene Konfigurationen auf den Trennungsgrad auswirken.

nen des elektrischen Felds experimentiert.

Modellierung und Experiment erweisen sich als außerordentlich leistungsstarke Kombination, wenn es um neue Erkenntnisse und mehr Effizienz im Produktdesign und in der wissenschaftlich-technischen Forschung und Entwicklung geht. Einfach zu bedienende Softwarepakete wie Femlab tragen überdies zu einer erhöhten Rentabilität von Investitionen in die Entwicklung bei.

PhD (Chemical Engineering) Ed Fontes
Leiter der Abteilung Femlab Applications im Mutterunternehmen Comsol AB, Stockholm.

Daniel Ericsson
arbeitet bei Comsol in Stockholm.

Femlab GmbH
Berliner Straße 4
37073 Göttingen
info@femlab.de
www.femlab.de, www.femlab.com

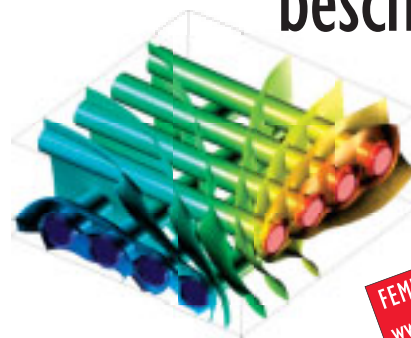
Abb. 3: Sauerstoffpartialdruck in der Umgebung eines Zebrafisch-Embryos im Wasser. Der Sauerstoffverbrauch erfolgt im Körper, der das Dotter umgibt.

ist ein Beispiel für einen typischen Diffusions-Reaktions-Prozess in einem nicht ganz alltäglichen System. Um den Einfluss des Sauerstoffverbrauchs auf einen Zebrafisch-Embryo und dessen Umgebung zu bestimmen, wird das Transport- und Reaktionsverhalten des Sauerstoffs im Embryo analysiert. Anhand des Modells kann untersucht werden, wie sich Veränderungen der Umweltbedingungen, etwa der Konzentration und des pH-Werts des gelösten Sauerstoffs, auf lebende Organismen auswirken.

Der Modellierungsprozess des Fischembryos ist fast derselbe wie der für Transportphänomene in durchlässigen Katalysatorkörnern in der Verfahrenstechnik. Abbildung 3 zeigt den Sauerstoffpartialdruck in der Umgebung eines Zebrafisch-Embryos im Wasser. Die Stromlinien entsprechen der Richtung des Sau-

FEMLAB
Multiphysics Modeling

Würden Sie so einen Wärmetauscher beschreiben?



FEMLAB Konferenz
www.femlab.de/femlab2005

Ja? Dann kennen Sie FEMLAB offensichtlich schon. Nein? Dann möchten wir Sie in die Welt von FEMLAB einladen.

Kostenloses Infopaket inklusive CD unter:
www.femlab.de/vt

FEMLAB is a registered trademark of COMSOL AB.

