

Forschungspraktikum, Bachelorarbeit, Masterarbeit

# Modellbasierte Bestimmung des optimalen Gradientenelutionsmodus in der Flüssigkeitschromatographie

## Motivation und Problemstellung

Die Chromatographie ist ein wichtiges Instrument in der Analytik um Konzentrationen von verschiedensten Komponenten zu bestimmen. Um die Auflösung der Trennung zu verbessern, werden chromatographische Säulen häufig im Gradientenelutionsmodus betrieben. Das bedeutet, dass sich die Zusammensetzung des Eluenten am Eingang der Säule über der Zeit ändert. In der Regel werden lineare Gradienten verwendet. Wir möchten uns allerdings nicht auf lineare Gradienten beschränken, sondern die Zusammensetzung des Eluenten als Funktion der Zeit optimal bestimmen. Dazu möchten wir die mathematische Methode der Optimalsteuerung nutzen, die wir bereits zur Bestimmung von optimalen Gradienten in der stationären Phase einer Chromatographiesäule nutzen.

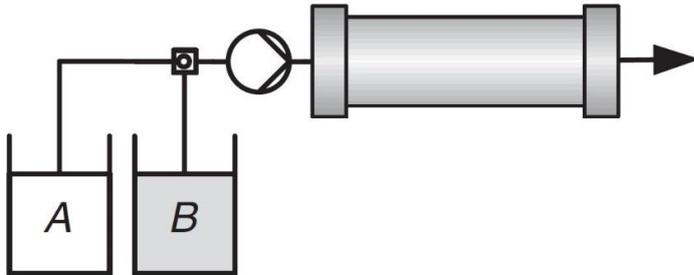


Abb. 1: Skizze eines chromatographischen Prozesses, bei dem der Feed aus zwei Eluenten A und B besteht.

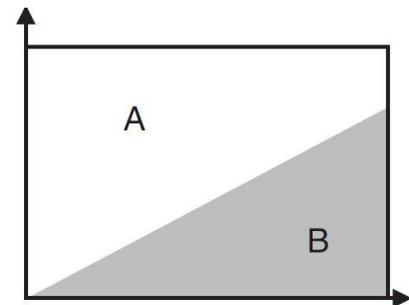


Abb. 2: Linear Gradient der Zusammensetzung aus Eluent A und Eluent B.

## Arbeitspakete

Es existiert bereits ein Matlab Modell, das die chromatographische Trennung simuliert. Weiterhin ist die Methode der Optimalsteuerung bereits implementiert. Die Aufgabe in dieser Arbeit wird zunächst sein, passende Fallstudien aus der Literatur zu finden, auf die unser Ansatz anwendbar ist. Um die ausgewählten Fallstudien zu lösen, muss auch das bereits implementierte Modell entsprechend angepasst werden. Ziel der Arbeit ist es, optimale Gradienten der Eluentenzusammensetzung für die einzelnen Fallstudien mittels des mathematischen Modells zu finden und dadurch die Prozessperformance zu verbessern.

## Das erwartet dich

Im Rahmen dieser Arbeit kannst du dich in die mathematische Modellierung und Optimierung in der Verfahrenstechnik einarbeiten. Die erlernten Methoden sind breit auf verschiedenste Unit Operations anwendbar. Programmierkenntnisse sind nicht gefordert, sondern können im Rahmen dieser Arbeit erlernt und vertieft werden. Weiterhin lernst du die Chromatographie kennen, die auch als thermisches Trennverfahren in der Pharma-, Lebensmittel-, und Chemieindustrie eingesetzt wird.

## Technische Universität München

Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik

Alexander Eppink (EG30)

Gregor-Mendel-Straße 4, 85354 Freising

alexander.eppink@tum.de