Design und Betrieb präparativer chromatographischer Trennprozesse

15346 N

Die präparative Chromatographie hat sich zu einem Standardverfahren bei der Aufarbeitung von hochwertigen Produkten entwickelt. Obwohl eine Vielzahl von Verfahrensvarianten mit deutlich höheren Produktausbeuten existiert, dominiert in der industriellen Praxis die einfache Batch-Trennung. Die Gründe hierfür liegen zum einen in der mangelnden Erfahrung der Prozessentwickler mit anderen Verfahrenskonzepten. Zum anderen sind zum Zeitpunkt der Prozessentwicklung in der Regel nur sehr geringe Substanzmengen verfügbar, so dass die verfahrenstechnische Auswahl eines chromatographischen Trennverfahrens sowie dessen Auslegung häufig auf der Basis von nur wenigen Trennversuchen im analytischen Maßstab vorgenommen werden muss.

Ziel dieses Forschungsprojektes war daher die Entwicklung einer computergestützten heuristisch-numerischen Methode zur Prozessauswahl. Dabei soll für ein gegebenes chromatographisches System aus stationärer und mobiler Phase der optimale Prozess ausgewählt und dessen Betriebsbedingungen optimiert werden.

Die Methodik gliedert sich in drei Teile. Die Bestimmung der Isothermen- und Stofftrans-portparameter des chromatographischen Systems, die Auswahl der geeigneten Prozesse auf Basis der bestimmten Parameter und abschließend die Optimierung der Betriebsbedingung durch Prozesssimulation.

Für die Bestimmung der Isothermen- und Stofftransportparameter wurden vier Experimente entwickelt, die es ermöglichen, die Werte in ausreichender Genauigkeit vorherzusagen. Dabei handelt es sich um Pulsversuche, bei denen Substanzgemisch, Reinstoff bzw. eine Tracersubstanz injiziert werden. Die Auswertung der erhaltenen Chromatogramme erfolgt dann mittels Computational Intelligence Methoden.

Für die Erstellung der Heuristiken wurden verschiedene künstliche Stoffsysteme durch systematische Variation der Isothermen- und Stofftransportparameter erzeugt. Für alle Systeme wurden die optimalen Prozesskonzepte, Betriebs- und Designparameter durch Simulationen bestimmt und miteinander verglichen. Aus den Resultaten wurden Regeln für eine Prozessauswahl abgeleitet und ein Entscheidungsbaum entwickelt.

Im letzten Schritt wurden für die durch Heuristiken ausgewählten Prozesse die Betriebs- und Designparameter optimiert und der kostengünstigste Prozess ausgewählt. Durch die vorgeschaltete Einschränkung der Prozesskonzepte sowie die Einbindung von Heuristiken in die Optimierung kann der Simulationsaufwand und die damit verbundene Zeit gegenüber einer rigorosen Optimierung deutlich reduziert werden.

Im Gegensatz zur etablierten Isothermenbestimmung mit Hilfe von Durchbruchkurven wird der Substanzverbrauch um über 70 % reduziert. Eine durch heuristisch-numerische Methoden unterstützte Auslegung ermöglicht so die schnelle Gegenüberstellung verschiedener Prozesskonzepte. Laut durchgeführten Berechnungen ist je nach Trennproblem eine deutliche Produktivitätssteigerung gegenüber einem Upscale der Labormethode möglich. Für kleine Trennfaktoren und Retentionszeiten liegt diese beispielsweise bei bis zu 100 %. Dadurch können auch die Kosten stark reduziert werden.

Bearbeitet wurde das Forschungsthema von 10/07 bis 06/10 an der **Technischen Universität Dortmund, Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen, Lehrstuhl für Anlagen- und Prozesstechnik** (Emil-Figge-Straße 70, 44221 Dortmund, Tel.: 0231/755-2338) unter Leitung von Prof. Dr. G. Schembecker (gleichzeitig Leiter der Forschungsstelle).

--> TIB

Gefördert durch:

Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Das IGF-Vorhaben Nr. 15346 N der Forschungsvereinigung DECHEMA, Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.