

SIMULACION DE COLUMNAS CROMATOGRAFICAS UTILIZANDO UN PERFIL PARABOLICO EN LA FASE SOLIDA

Marco A. Núñez, Roberto Z. Guzmán* y Arturo Aguilar-Aguila Acuña®

Departamento de Ing. Química y Metalurgia. Universidad de Sonora
Rosales y Blvd. Transversal, Col. Centro, Hermosillo, Sonora, 83000, MEXICO
Fax (62) 592105, e-mail manunez@huatabampo.iq.uson.mx

*Departamento de Ing. Química, Universidad de Arizona, Estados Unidos
®Centro de Investigación en Biotecnología, U.A.E.M., México

Palabras clave: cromatografía, modelos matemáticos, perfil parabólico

Introducción. En el desarrollo de un modelo general de cromatografía cuya solución numérica esté basada en el uso de esquemas de diferencias finitas con mallas espaciales de tamaño variable, la eliminación de la ecuación de balance de masa para la partícula sólida puede simplificar en gran medida el modelo a resolver.

En el presente trabajo se aplica una aproximación de perfil parabólico de concentración para la fase sólida de forma que la integración sobre la distancia radial no es necesaria, y se simulan las curvas de ruptura y elución de una columna cromatográfica utilizando técnicas de diferencias finitas de red fija como una etapa en el desarrollo de un modelo general de cromatografía en base a redes numéricas espaciales de paso variable.

Metodología. El Modelo General de Sólido Homogéneo de Cromatografía Líquida (1) se simplificó utilizando una aproximación de perfil parabólico para la fase sólida (2). Se emplearon condiciones límite apropiadas para Análisis Frontal y Elución. La relación entre las concentraciones en fase sólida y fase líquida se expresó por medio de isoterma lineal y de Langmuir. La Ecuación de Balance de Masa para la fase líquida se discretizó empleando un esquema de Crank-Nicolson de red fija. La subrutina DLSTR de IMSL se aplicó para la solución del sistema tridiagonal de ecuaciones resultante. La ecuación representando el cambio respecto al tiempo de la concentración promedio de la partícula fué discretizada utilizando un método de diferencias finitas explícito. Las isotermas de equilibrio relacionaron las concentraciones de ambas fases en la superficie del sólido.

Resultados y Discusión. Los valores de parámetros utilizados en la simulación de la columna cromatográfica se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros utilizados en la simulación.	
Concentración adimensional de alimentación, C_n	1.0
Tiempo de Operación	$4 \theta_p$
Tiempo de Inyección (moda elución), T_{inj}	$0.1 \theta_p$
Relación de Porosidad, F	0.4
Constante de la Isoterma Lineal, k	2.0
Constante de Langmuir, a	1.42
Constante de Langmuir, b	0.34
Número de Biot, Bi	15.0
Parámetro R_T	200.0
Número de Peclet, Pe	50-5000

En todas las corridas numéricas realizadas el Número de Peclet se utilizó como parámetro de sensibilidad, ya que los gradientes de concentración, tanto en moda frontal como elución, se vuelven más bruscos a medida que este grupo adimensional se incrementa. En la Figura 1 se presentan resultados típicos de la simulación empleando la aproximación de perfil parabólico para la fase sólida, en el caso de alimentación a la columna tipo análisis frontal.

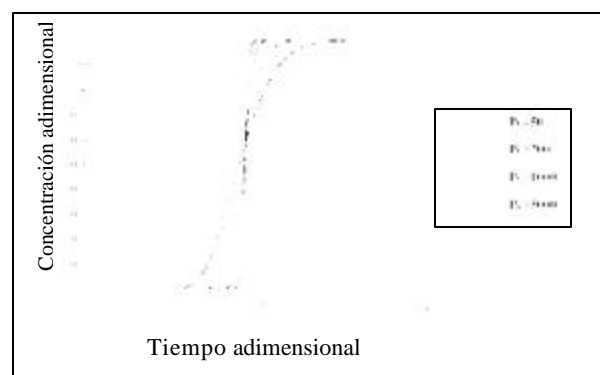


Fig. 1. Alimentación tipo análisis frontal, isoterma lineal.

Conclusiones. Se aplicó un modelo matemático que utiliza la suposición de perfil de concentración parabólico en la fase partícula sólida a la simulación de la dinámica de una columna cromatográfica. Este trabajo puede considerarse como una etapa en el desarrollo de un modelo general de cromatografía cuya solución numérica esté basada en el uso de redes adaptables para la dirección axial de la columna, sin requerimiento de integración para la dirección radial de la partícula sólida.

Agradecimientos. Apoyo financiero de la Universidad de Sonora y Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT).

Bibliografía.

- Yang, C.M. y Tsao, G.T. (1982). Packed Bed Adsorption Theories and Their Applications to Affinity Chromatography. En: *Advances in Biochemical Engineering*, Fiechter, A. Springer-Verlag. New York. 25: 1.
- Yang, R.T. y Doong, S.J. (1985) Gas Separation by Pressure Swing Adsorption: A Pore-Diffusion Model for Bulk Separation. *A.I.Ch.E. Journal*, 31 (11): 1829-1842.