**Colonne de séparation chromatographique**

Une colonne de séparation chromatographique est un dispositif permettant de séparer, sans réaction chimique, les composants A et B d’un mélange de deux liquides dilués dans l’eau. Il s’agit essentiellement d’un cylindre contenant un solide sous forme de granulés présentant des propriétés d’adsorption différentes pour les deux composants : si on injecte à une extrémité de la colonne un certaine quantité de mélange A + B dilué pendant un intervalle de temps limité, le mélange, en traversant la colonne, voit ses deux composants adsorbés différemment par la phase solide, et le composant présentant la plus grande adsorption séjournera plus longtemps à l’intérieur de la colonne. Il résultera ainsi à la sortie de la colonne deux pics de concentration en les composants A et B à des instants différents, permettant de récolter les deux composants (presque) séparément.



avec  (isotherme de Langmuir)

 (isotherme de Langmuir)

Dans ces équations, et,  sont les concentrations en composants A et B dans la phase liquide et dans la phase solide ;  et  sont les concentrations d’équilibre de A et de B dans la phase solide.

Conditions initiales : 

Conditions aux limites : en  : 

en  : 

avec 



Valeurs numériques :

Vitesse du fluide : 

Longueur de la colonne : 

Porosité : 

Constante d’équilibre : 

Concentration de saturation en phase solide : 

Coefficient de diffusion : 

Coefficient de diffusion : 

Coefficient de transfert de masse : 

Coefficient de transfert de masse : 

Coefficient de l’isotherme de Langmuir : 

Coefficient de l’isotherme de Langmuir : 

Durée de l’injection du mélange : 

**Questions**

1° Construisez le simulateur de ce système d’équations aux dérivées partielles en utilisant les outils les plus simples possibles : intégrateur ode45, schémas de différences finies à nombre minimal de points, nombre de points de grille suffisant. On préservera la structure particulière des équations grâce à l’option ‘Mass’ de l’intégrateur temporel.

Ce simulateur doit vous permettre de visualiser les profils de  et de  en fonction de z pour  avec.

Dès que votre simulateur fonctionne, investiguez l’influence du choix de ces outils sur la qualité de la simulation, tant en qualité qu’en temps de calcul : choix de l’intégrateur temporel, des schémas de différence finies ; on élaborera à ce stade des programmes de calcul de dérivée seconde à sept et neuf points centrés. Ajustez par tâtonnements le nombre de points de grille de manière à rendre vos résultats graphiques indépendants de ce nombre et modifiez vos choix de schémas de différences finies jusqu’à obtention des meilleurs profils graphiques.

2° Lors de l’utilisation des divers intégrateurs temporels, testez quand elle est disponible l’option Jpattern et évaluez-en l’impact sur la simulation. Expliquez votre méthode de calcul de Jpattern.

A l’issue de ces essais, sélectionnez selon vous le « meilleur » simulateur : nombre de points de grille, schémas de différences finies, intégrateur temporel.

3° Si les profils obtenus avec ce simulateur présentent des oscillations qui vous paraissent imputables aux choix de schémas de différences finies que vous avez testés, visualisez l’impact de l’emploi de limiteurs de flux, tant en qualité de résultats graphiques qu’en temps de calcul. Expliquez comment vous tenez compte de ces limiteurs dans le calcul de Jpattern.

4° Observez l’influence de la nature des conditions aux limites sur les profils de  de  en  : visualisez finement ces profils aux alentours de  en comparant les courbes obtenues avec  (C.L. précédentes) et . Commentez les résultats obtenus.

5° Afin d’avoir une meilleure vision de l’effet de séparation des composées A et B, visualisez sur un même graphe et  en fonction de t et mesurez approximativement l’intervalle de temps qui sépare l’arrivée des pics de concentration en ces composés en .