

Simulation einer Multikapillarsäule

Abschlussvortrag Diplomarbeit

Elisabeth Böhmer

Technische Universität Dortmund
Fakultät für Informatik
Lehrstuhl 11

22. September 2015

Betreuer:

Prof. Dr. Sven Rahmann
Prof. Dr. Jörg Rahnenführer

Gliederung

- 1 Einleitung
- 2 Gaschromatographie
- 3 2-Zustände Modell
- 4 3-Zustände Modell
- 5 Zusammenfassung und Ausblick



ooooo

oooo

Worum geht es?

Allgemeines zur Chromatographie

- Verfahren zur Auftrennung von Stoffgemischen

Allgemeines zur Chromatographie

- Verfahren zur Auftrennung von Stoffgemischen
- Verteilung der Analyten zwischen mobiler und stationärer Phase

Allgemeines zur Chromatographie

- Verfahren zur Auftrennung von Stoffgemischen
- Verteilung der Analyten zwischen mobiler und stationärer Phase
- Varianten:
 - ▶ Flüssigchromatographie
 - ▶ Gaschromatographie

Allgemeines zur Chromatographie

- Verfahren zur Auftrennung von Stoffgemischen
- Verteilung der Analyten zwischen mobiler und stationärer Phase
- Varianten:
 - ▶ Flüssigchromatographie
 - ▶ Gaschromatographie
 - Gepackte Säulen
 - Kapillarsäulen

Prinzip der Gaschromatographie

○ mobile Phase ● Analyt



stationäre Phase

Prinzip der Gaschromatographie

○ mobile Phase ● Analyt



stationäre Phase

Prinzip der Gaschromatographie

○ mobile Phase ● Analyt



Prinzip der Gaschromatographie

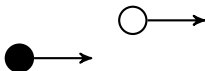
○ mobile Phase ● Analyt



Lösung

Prinzip der Gaschromatographie

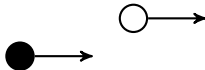
○ mobile Phase ● Analyt



stationäre Phase

Prinzip der Gaschromatographie

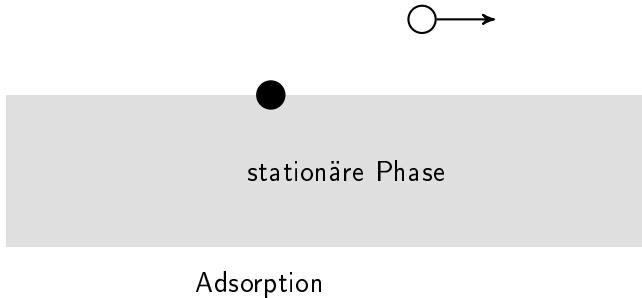
○ mobile Phase ● Analyt



stationäre Phase

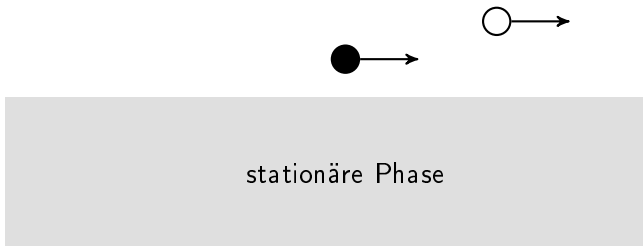
Prinzip der Gaschromatographie

○ mobile Phase ● Analyt



Prinzip der Gaschromatographie

○ mobile Phase ● Analyt

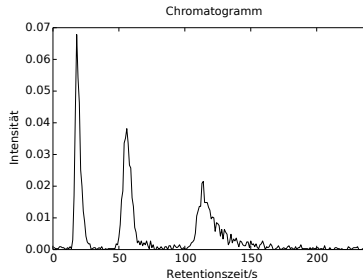


Nach Durchlaufen der Säule

- Detektion der austretenden Substanzen
- Detektion der Menge, keine Unterscheidung der Substanzen

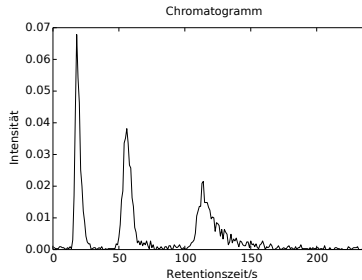
Nach Durchlaufen der Säule

- Detektion der austretenden Substanzen
- Detektion der Menge, keine Unterscheidung der Substanzen
- Spektrogramm aus mehreren Peaks



Nach Durchlaufen der Säule

- Detektion der austretenden Substanzen
- Detektion der Menge, keine Unterscheidung der Substanzen
- Spektrogramm aus mehreren Peaks



- Alternativ: Weitere Analyse durch zum Beispiel
 - ▶ Massenspektrometrie (MS)
 - ▶ Ionen-Mobilitäts-Spektrometrie (IMS)

Charakteristika der Peaks

Peak charakterisiert durch:

- Lage des Maximums

Charakteristika der Peaks

Peak charakterisiert durch:

- Lage des Maximums
- Form
 - ▶ Idealfall: Gaußkurve
 - ▶ Abweichung: Fronting, Tailing
 - ▶ Quartilskoeffizient

Charakteristika der Peaks

Peak charakterisiert durch:

- Lage des Maximums
- Form
 - ▶ Idealfall: Gaußkurve
 - ▶ Abweichung: Fronting, Tailing
 - ▶ Quartilskoeffizient
- Breite
 - ▶ IQR

Ziel

Gesucht:

- Entsprechung von Peakcharakteristika zu Simulationsparametern

$$F : [0,1]^x \rightarrow \mathbb{R}^y$$

$$y = 3$$

x je nach Modell

TODO Unbekannte Funktion

Modell für die Chromatographie

Prinzip:

Modell:

Modell für die Chromatographie

Prinzip:

- 2 Phasen: stationär und mobil

Modell:

- 2 Zustände: s und m

Modell für die Chromatographie

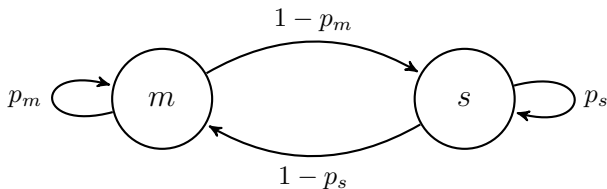
Prinzip:

- 2 Phasen: stationär und mobil
- Wechsel dazwischen, bzw. Verweilen in der Phase

Modell:

- 2 Zustände: s und m
- Wechselwahrscheinlichkeiten
 - ▶ $s \rightarrow s : p_s$
 - ▶ $s \rightarrow m : 1 - p_s$
 - ▶ $m \rightarrow m : p_m$
 - ▶ $m \rightarrow s : 1 - p_m$

Graphische Darstellung des Modells



Simulationseckdaten

	MCC	Simulation
Länge der Säule	20 cm	1000 Raumschritte
	1 Raumschritt \equiv 0,2 mm	
Durchlaufzeit Trägergas	0,1 s \equiv 2 m/s	1000 Zeitschritte
	1 Zeitschritt \equiv 0,1 ms	
Geschwindigkeit Trägergas	2 m/s	1 Raumschritt / Zeitschritt
Dauer des Experiments	240 s	2 400 000 Zeitschritte

TODO Tabelle

Grenzen des 2-Parameter Modells

- Zu späten Zeitpunkten wird Minimalbreite nicht unterschritten

Grenzen des 2-Parameter Modells

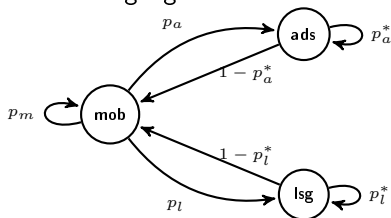
- Zu späten Zeitpunkten wird Minimalbreite nicht unterschritten
- Peaks nur als Gaußkurven, kein Tailing
 - ▶ Eigentlich “perfekt”, aber nicht realistisch

Weitere mögliche Modelle

- Bisher keine Unterscheidung zwischen Adsorption und Lösung

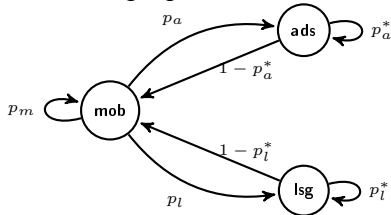
Weitere mögliche Modelle

- Bisher keine Unterscheidung zwischen Adsorption und Lösung
- Weiterer stationärer Zustand
 - ▶ Keine Übergänge zwischen den stationären Zuständen

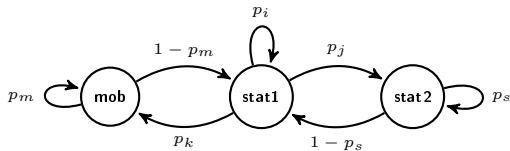


Weitere mögliche Modelle

- Bisher keine Unterscheidung zwischen Adsorption und Lösung
- Weiterer stationärer Zustand
 - ▶ Keine Übergänge zwischen den stationären Zuständen



- ▶ Neuer Zustand als Zwischenzustand



Zusammenfassung

Ausblick