

Flera dagars experiment – på ett knapptryck

Låt säga att du lyckats framställa en ny kemisk komponent som har potential att fungera som ett läkemedel. Själva framställningsprocessen var ganska kostsam och nu måste du hitta på ett sätt att rena upp din produkt. Hade det inte varit smidigt om en programvara löste det automatiskt?

Att ta fram metoder för upprensning av komponenter är ofta en tidskrävande och kämpig process. Processen kräver först ett flertal experiment med små mängder prov, vilket utförs i småskaliga labb. När sagda småskaliga labb fått kläm på tekniken är det dags att testa den i en större skala. Men om nu komponenten som ska renas är dyr att framställa blir denna process snabbt kostsam. Det är här mjukvaran i denna studie kan komma till användning. För hade det inte varit smidigare att utifrån enbart ett fåtal experiment låta en dator simulera och bygga en modell som beskriver experimentens utfall istället? Och när vi ändå håller på, varför inte låta datorn styra den experimentella uppställningen och köra experimentet åt oss?

Denna studie tar ett steg i denna riktning. En mjukvara har tagits fram som menar till att automatisera denna process genom att köra två experiment på en vätskekromatografmaskin. Utifrån den data som ges av experimentet kan mjukvaran anpassa en modell till den komponent som undersökts. I vätskekromatografi sker själva separationen i en adsorptionskolonn där olika komponenter fastnar olika hårt. Det är just denna effekt som modellen av komponenten syftar på att beskriva. Hela processen sker per automatik, så fort en användare startar programmet. Det är bara att trycka på en knapp och invänta ett resultat! Eftersom enbart två experiment utförs innan mjukvaran kan sättas igång behövs det inte mycket av den dyra komponenten, vilket gör att kostnaderna kan hållas nere.

Resultatet av mjukvaran som skapats i denna studie är ett robust program – det vill säga det klarar svåra bedömningar och når alltid ett tillräckligt bra. För de nio olika fall som undersöktes i denna studie hittade mjukvaran en noggrann modell i alla fallen. När en modell väl skapats så kan denna användas för att simulera experiment innan de utförs. På så sätt kan en användare simulera sig fram till en lämplig separationsteknik, istället för att utföra flertal experiment. När man väl har hittat en metod som uppfyller ens krav kan denna valideras genom att köra ett riktigt experiment. Det faktiska experimentet kan sedan jämföras med simuleringen. Genom att utföra simuleringar går det även att förutspå komponentens beteende under andra betingelser t ex ändrat flöde eller ändrad elueringsmetod. Därmed kan man skapa sig en djupare förståelse för hur komponenten beter sig för den specifika adsorptionskolonnen i vätskekromatografisystemet. Tidsåtgången för att nå en bra separationsmetod och antalet experiment kan reduceras.