

ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DE UMA UNIDADE DE LEITO MÓVEL SIMULADO NA SEPARAÇÃO DE ENANTIÔMEROS - REGIME TRANSIENTE

Eduardo Alberto Borges da Silva – eduardo@labsin.ufsc.br

Selene M. A. Guelli Ulson de Souza – selene@labsin.ufsc.br

Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, LABSIN - Laboratório de Simulação Numérica de Sistemas Químicos
88.040-900, Florianópolis, SC, Brasil

Resumo. *O modelo matemático transiente de uma unidade de leito móvel simulado é apresentado. O modelo considera a permutação dos pontos de entrada e saída das correntes fluidas da unidade a cada tempo de permutação, e é do tipo escoamento contínuo com dispersão axial para a fase fluida. É empregada a aproximação de força motriz linear para descrever a transferência de massa entre as fases fluida e sólida. É simulada a separação cromatográfica de enantiômeros de bi-naftol e analisado o comportamento transiente de uma unidade de leito móvel simulado com diferentes números de subseções nesta separação. Para solução das equações diferenciais do modelo é utilizado o método de volumes finitos com o esquema WUDS. É estudado o efeito do coeficiente de transferência de massa global sobre o desempenho do leito móvel simulado no processo de separação.*

Palavras-chave: *Leito móvel simulado, Modelagem, Transiente*

1. INTRODUÇÃO

A concepção do leito móvel simulado (LMS) começou a ser conhecida a partir de 1961, quando surgiu a primeira patente sobre esta tecnologia pela *Universal Oil Products (UOP)*. Conhecida como tecnologia SORBEX, uma ‘família’ de processos foi desenvolvida pela UOP para uma variedade de separações industrialmente importantes (PAREX, OLEX, EBEX e MOLEX - separação e/ou recuperação de compostos petroquímicos; e SAREX - recuperação de frutose de misturas de glucose e frutose) (Ruthven e Ching, 1989).

Uma das aplicações mais recentes da tecnologia de LMS relaciona-se à tecnologia quirál. A separação de enantiômeros é um ponto importante, particularmente no campo relacionado à saúde. É conhecido que os isômeros podem exibir valores terapêuticos completamente diferentes, e até opostos, e por esta razão há grande interesse de companhias farmacêuticas na separação de isômeros para o desenvolvimento de novos medicamentos (Guest, 1997). Devido aos baixos fatores de separação envolvidos, a obtenção de compostos enantiomericamente puros por técnicas convencionais, como a cromatografia de eluição, é difícil, e portanto, a cromatografia em LMS aparece como uma técnica promissora para a

produção industrial de isômeros ópticos. Zhong e Guiochon (1997) apontam diversas vantagens do emprego da unidade de LMS na separação de enantiômeros, mas também mencionam alguns inconvenientes na aplicação desta tecnologia na indústria farmacêutica, principalmente com relação ao grau de complexidade do projeto do LMS, sua operação e otimização.

No processo contracorrente simulado, esquematizado na Fig. 1, o adsorvente está contido em colunas idênticas, conectadas em série, denominadas subseções. A unidade é dividida em quatro seções: seção 1, entre a entrada de eluente e retirada do extrato; seção 2, entre os pontos de retirada de extrato e da alimentação; seção 3, entre os pontos de alimentação e de retirada do refinado; e seção 4, entre os pontos de retirada de refinado e de recirculação do eluente. O artifício utilizado para simular o escoamento contracorrente das fases acarreta em um deslocamento, a cada tempo de permutação (t^*), das seções 1, 2, 3 e 4 ao longo da unidade.

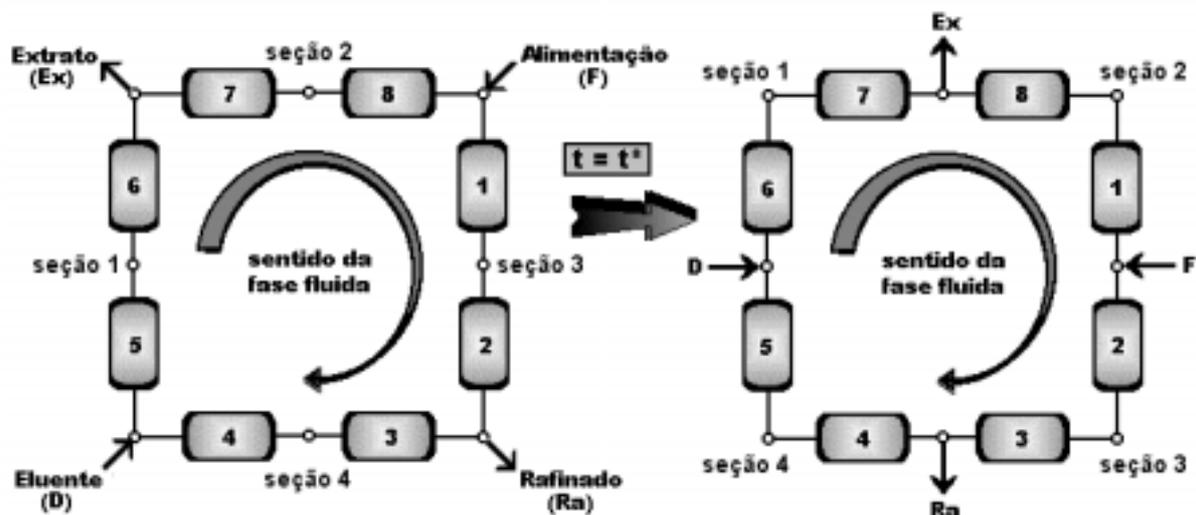


Figura 1 – Unidade de leito móvel simulado; esquema representativo da permutação das correntes de admissão e coleta na unidade.

Para realizar a separação de duas espécies, por exemplo, cada seção da unidade de leito móvel simulado deve executar funções específicas. São elas:

- ◆ seção 1. Sua função é a dessorção da espécie química mais retida da fase sólida.
- ◆ seção 2. Deve ocorrer a dessorção da espécie menos retida.
- ◆ seção 3. É a zona de adsorção do componente mais fortemente retido.
- ◆ seção 4. É a zona de regeneração do eluente. Sua função é adsorver a espécie menos retida.

A adequada operação da unidade depende diretamente da execução correta destas funções em cada seção, sendo a seleção das vazões de fluido e de tempo de permutação, estabelecendo a velocidade do sólido nas seções, fatores determinantes neste aspecto. De forma geral, o sucesso das separações realizadas por unidades de leito móvel simulado depende fortemente de dois aspectos: a escolha correta da fase estacionária e do eluente, e a escolha correta das condições de operação. De fato, como em qualquer processo adsorptivo, a dificuldade da separação é uma função da adsorvidade relativa dos componentes a serem separados e da ação do eluente sobre o adsorvente escolhido. Quanto ao segundo aspecto, devido a sua complexa configuração física, a experimentação em laboratório pode ser uma tarefa complicada e desgastante. Muitas técnicas vem sendo propostas para se conseguir condições

de operação adequadas para a unidade de leito móvel simulado. Estas técnicas referem-se às ferramentas de modelagem e simulação dos fenômenos e processos envolvidos.

Muitos avanços têm se conseguido na modelagem do leito móvel simulado para prever seu desempenho e obtenção dos perfis internos de concentração para uma dada condição de operação. Em geral, os modelos teóricos podem ser agrupados em duas categorias: aqueles que representam a verdadeira configuração de uma unidade de leito móvel simulado, e aqueles que representam uma unidade de leito móvel verdadeiro equivalente. Poucos pesquisadores têm adotado a primeira forma de modelagem para o leito móvel simulado, por razões relacionadas ao tempo computacional envolvido, mas algumas importantes informações sobre os processos são obtidas considerando a verdadeira concepção do leito móvel simulado.

O objetivo deste trabalho é modelar uma unidade de leito móvel simulado considerando a permutação das correntes de entrada e saída da unidade, nas colunas de leito fixo. O modelo é utilizado para simular operações em unidades de LMS com diferentes números de subseções na separação cromatográfica de enantiômeros de 1,1'-bi-2-naftol. O trabalho envolve o estudo da operação transiente destas unidades, bem como o efeito do coeficiente de transferência de massa efetivo global no desempenho do processo de separação.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

Para desenvolver um modelo matemático que permita descrever o comportamento dinâmico de uma unidade de LMS, é necessário efetuar balanços diferenciais de massa sobre um volume de controle de uma subseção da unidade e sobre a partícula adsorvente. Para a formulação do modelo, define-se as seguintes hipóteses: (i) todo o processo é isotérmico; (ii) a convecção e a dispersão radial são negligenciadas; (iii) ocorre dispersão axial no leito, considerada pelo coeficiente de dispersão axial (D_a); e (iv) o coeficiente de dispersão axial, as velocidades intersticiais e a porosidade das colunas são constantes ao longo das colunas de leito fixo.

De acordo com estas considerações, o balanço mássico no volume de controle de uma subseção k , onde k refere-se a todas as subseções presentes no arranjo da unidade de LMS considerada, para a espécie i , onde i refere-se a todas as espécies envolvidas no processo, fornece a seguinte equação de conservação para fase fluida:

$$\frac{\partial(C_{ik})}{\partial t} + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial(\bar{q}_{ik})}{\partial t} + v_k \frac{\partial(C_{ik})}{\partial z} - D_a \frac{\partial^2(C_{ik})}{\partial z^2} = 0 \quad (1)$$

onde C_{ik} e \bar{q}_{ik} são as concentrações mássicas nas fases fluida e sólida, respectivamente, v_k é a velocidade intersticial e ε é a porosidade do leito. As variáveis t e z referem-se ao tempo e à coordenada axial, respectivamente.

A solução da Eq. (1) requer informações pertinentes à transferência de massa do componente i da fase fluida para a fase adsorvente. Neste trabalho é utilizada uma aproximação que representa a taxa de transferência de massa da espécie i da fase fluida para a fase adsorvente. Tal aproximação é conhecida como aproximação da força motriz linear (LDF). A expressão da taxa linear é dada como,

$$\frac{\partial(\bar{q}_{ik})}{\partial t} = k_t (q_i^* - \bar{q}_{ik}) \quad (2)$$

onde q_i^* é a concentração da espécie i na fase sólida em equilíbrio com a concentração da

espécie i na fase fluida e k_t é o coeficiente de transferência de massa global. O coeficiente de transferência de massa global representa a resistência à transferência de massa no sistema, e pode agrupar mais de um efeito de resistência à transferência de massa.

A isoterma de equilíbrio de adsorção da espécie i no processo considerado permite correlacionar a concentração da espécie i na fase sólida em equilíbrio com a concentração desta mesma espécie na fase fluida.

As condições iniciais e de contorno pertinentes às equações diferenciais do modelo matemático são:

$$\text{Condição inicial}(t = 0): \quad C_{ik} = \bar{q}_{ik} = 0 \quad (3)$$

Condição de contorno:

$$\blacklozenge \quad z = 0 \quad (t > 0)$$

$$v_k C_{ik,o} = v_k C_{ik} \Big|_{z=0^+} - D_a \frac{\partial(C_{ik})}{\partial z} \Big|_{z=0^+} \quad (4)$$

onde $C_{ik,o}$ é a concentração de entrada da espécie i na coluna k .

$$\blacklozenge \quad z = L_C \quad (t > 0)$$

$$\frac{\partial(C_{ik})}{\partial z} \Big|_{z=L_C} = 0 \quad (5)$$

onde L_C é o comprimento de uma subseção do LMS.

As relações que caracterizam a dependência temporal das condições de contorno no sistema, visto que se considera a permutação das correntes fluidas, são as seguintes:

✓ para colunas dentro de uma seção e para os nós do extrato e do refinado:

$$C_{ik+1,o} = C_{ik} \quad (6)$$

✓ para o nó do eluente:

$$C_{ik+1,o} = \frac{v_4}{v_1} C_{ik} \quad (7)$$

✓ para o nó da alimentação:

$$C_{ik+1,o} = \frac{v_F}{v_3} C_{iF} + \frac{v_2}{v_3} C_{ik} \quad (8)$$

As variáveis C_{iF} e v_F são a concentração da espécie i e a velocidade na corrente de alimentação na unidade, respectivamente; e v_1 , v_2 , v_3 e v_4 são as velocidades intersticiais da fase fluida nas seções 1, 2, 3 e 4 do leito móvel simulado, respectivamente.

Como o modelo matemático proposto para o LMS considera a permutação das correntes

externas, cada coluna ou leito executa diferentes funções, dependendo da sua localização (seção). Conseqüentemente, as condições de contorno para cada coluna muda após o final de cada tempo de permutação. Esta dependência temporal das condições de contorno leva a um estado estacionário cíclico para este sistema.

2.1 Método de Solução

As equações do modelo matemático da unidade de LMS foram transformadas do sistema de coordenadas cilíndricas para o sistema de coordenadas generalizadas, e posteriormente aproximadas a equações algébricas usando o Método de Volumes Finitos (Maliska, 1995), com a aplicação das funções de interpolação WUDS ('*Weight Upwind Difference Scheme*'). As equações discretizadas foram implementadas em programa computacional onde os sistemas de equações algébricas geradas foram resolvidos pelo método MSI ('*Modified Strongly Implicit*'). A malha computacional empregada nas simulações foi a malha 100x10 e o tamanho de passo de tempo de integração foi de 1 segundo.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para corroborar o programa desenvolvido foi simulada a separação cromatográfica de enantiômeros de 1,1'-bi-2-naftol, onde utiliza-se o 3,5-dinitrobenzoiil fenilglicina covalentemente incorporado à sílica gel como fase estacionária e heptano-isopropanol 72/28% (volume/volume) como eluente. As condições de operação e parâmetros físicos e de equilíbrio são obtidos dos trabalhos de Pais *et al.* (1997a, b, 1998), que tem avaliado o desempenho de unidades de LMS neste processo, e alguns aspectos relacionados à simulação destes equipamentos.

As condições experimentais para a unidade piloto de LMS utilizadas por Pais *et al.* (1997a) estão presentes na Tabela 1. Pais *et al.* (1998) simularam este processo considerando os efeitos da transferência de massa e da dispersão axial para o LMS utilizado. Os parâmetros do modelo também estão presentes na Tabela 1 e podem ser encontrados em detalhes em Silva (2000).

Quanto ao equilíbrio de adsorção, foram usadas isotermas do tipo bi-Langmuir (Pais *et al.*, 1997a),

$$q_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + 0,0336C_A + 0,0466C_B} + \frac{b_i C_i}{1 + C_A + 3C_B} \quad (9)$$

com $i=A, B$, onde B representa o enantiômero mais adsorvido e A o enantiômero menos adsorvido. Na Eq. (9), $a_A=2,69$, $b_A=0,1$, $a_B=3,73$ e $b_B=0,3$.

Na Tabela 1, Q_C é a vazão volumétrica da corrente C ($C =$ refinado (R), extrato (Ex), eluente (El) e alimentação (F)).

Os resultados numéricos obtidos neste trabalho, utilizando todas as informações pertinentes ao processo apresentadas na Tabela 1, fornecem perfis numéricos de concentração dos isômeros de bi-naftol que são comparados com os melhores resultados obtidos por Pais *et al.* (1998). Na Fig. 2 pode-se visualizar esta comparação, entre os perfis numéricos de concentração, e os dados experimentais apresentados por Pais *et al.* (1998) para os isômeros.

Os dados experimentais que definem o perfil de concentração para as espécies na unidade de LMS piloto foram coletados na metade de um intervalo de tempo de permutação, quando a unidade já encontrava-se em estado cíclico estacionário e, portanto, trata-se de um perfil instantâneo de concentração. Assim como os dados experimentais, os perfis de concentração numéricos também são referentes a valores de concentração a 50% do tempo de permutação.

Tabela 1 – Condições de operação e parâmetros do modelo da separação de enantiômeros de bi-naftol em uma unidade de LMS.

Condições de Operação		Parâmetros	
$C_{A,o}$	2,9 kg/m ³	Coef. transf. massa (k_t)	0,1 s ⁻¹
$C_{B,o}$	2,9 kg/m ³	Coef. dispersão axial (D_a)	2,92.10 ⁻⁷ m ² /s
Q_F (alimentação)	6,067.10 ⁻⁸ m ³ /s		
Q_D (eluente)	3,575.10 ⁻⁷ m ³ /s	Número de Colunas	8 (2-2-2-2)
Q_R (refinado)	1,515.10 ⁻⁷ m ³ /s	Comprimento(L_C)	0,105 m
Q_E (extrato)	2,667.10 ⁻⁷ m ³ /s	Diâmetro (d)	0,026 m
$Q_{Recirculação}$	5,897.10 ⁻⁷ m ³ /s	Porosidade(ϵ)	0,4
t^*	165 s		

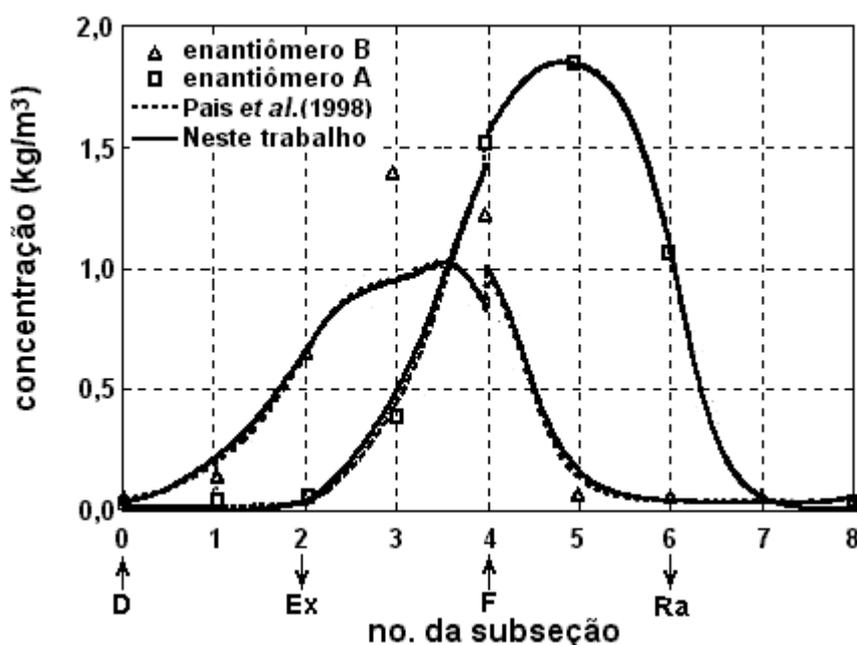


Figura 2 – Perfil de concentração dos isômeros de bi-naftol na fase líquida no estado cíclico estacionário; (□) e (△) representam pontos experimentais para o enantiômero menos adsorvido (A) e mais adsorvido (B), respectivamente (Pais *et al.*, 1998); (---) representam os perfis obtidos numericamente por Pais *et al.* (1998); e (—) representa os perfis obtidos numericamente pela metodologia proposta (malha 100x10).

Pela análise da Fig. 2 observa-se que os resultados numéricos apresentam uma boa concordância com os dados experimentais, exceto para a concentração do enantiômero mais adsorvido na seção 2. A variação da vazão interna nesta seção, ou ainda a descrição aproximada do equilíbrio de adsorção binária foram duas das razões apontadas por Pais *et al.* (1997a, b, 1998) para justificar este desvio.

A descrição do comportamento de uma unidade de LMS pode ser realizada de três maneiras: a evolução exata dos perfis de concentração na unidade, perfis de concentração média, calculados em cada intervalo de permutação das correntes externas na unidade, e perfis

de concentração instantânea, avaliados exatamente na metade dos intervalos de permutação (Pais *et al.*, 1998; Chu e Hashim, 1995). Estas três formas de representar o comportamento de uma unidade de LMS estão ilustradas na Fig. 3, para 4, 8 e 12 subseções na unidade.

A Fig. 3 mostra as formas de descrição do comportamento da unidade quanto à concentração das espécies na corrente de refinado e de extrato na separação de uma mistura racêmica de enantiômeros de bi-naftol para unidades de LMS compostas de 4, 8 e 12 subseções. Neste estudo, o comprimento das seções para as três unidades de LMS é mantido constante. O tempo de permutação é escolhido de forma a ficar constante a razão comprimento de uma subseção e o tempo de permutação. Estes valores estão ilustrados na Tabela 2.

Tabela 2 – Unidades de LMS com números de subseções diferentes.

n ^o de subseções	L_j (m)	L_C (m)	t^* (s)	L_C/t^* (m/s)
4	0,21	0,21	360,0	$5,83 \cdot 10^{-4}$
8	0,21	0,105	180,0	$5,83 \cdot 10^{-4}$
12	0,21	0,07	120,0	$5,83 \cdot 10^{-4}$

Para todas as três unidades utilizou-se as mesmas condições de operação – exceto tempo de permutação e comprimento das subseções – e parâmetros do modelo presentes na Tabela 1.

Em seus estudos, Pais *et al.* (1998) mostraram que o aumento do número de subseções em uma unidade de LMS torna a equivalência entre esta e uma unidade de leito móvel verdadeiro (LMV) cada vez maior, e que no caso de um número infinito de subseções, com o tempo de permutação infinitesimal, a similaridade seria perfeita. De fato, ao observar a Fig. 3, verifica-se que a amplitude do perfil transiente exato de concentração começa a reduzir para ambas as espécies, conforme se aumenta o número de subseções. O que se espera é que este perfil transiente aproxime-se a uma linha à medida que faz-se o número de subseções tender a infinito. Assim chegar-se-ia a um perfil de concentração para as espécies idêntico ao de uma unidade de LMV no seu estado estacionário característico. É evidente que as concentrações médias e instantâneas na metade do tempo de permutação para as espécies na unidade tendem a coincidir-se, quando a variação da concentração no intervalo de permutação torna-se menor.

Na Tabela 3 estão ilustradas a pureza e a recuperação das espécies nas correntes de refinado e de extrato na separação, usando as respectivas unidades com número de subseções indicado. A pureza é definida como a fração ou percentual ponderal da concentração da espécie desejada na corrente considerada, corrente de extrato ou de refinado, em relação às demais espécies na corrente. A recuperação é definida como a fração ou percentual ponderal da vazão mássica da espécie desejada na corrente considerada em relação à vazão mássica alimentada da espécie. Os valores das variáveis de desempenho de separação – pureza e recuperação – para o LMS com maior número de subseções é levemente superior aos valores encontrados para o LMS composto de oito subseções. A escolha da quantidade de subseções a ser utilizada no sistema deve levar em conta os aspectos econômicos e o grau de pureza desejado no processo.

As condições de operação e alguns parâmetros presentes na Tabela 1 são utilizados para simular a separação de isômeros de bi-naftol e analisar o efeito do coeficiente de transferência de massa global efetivo sobre o processo. Os resultados estão apresentados na Fig. 4, onde os perfis de concentração no estado cíclico estacionário para as duas espécies de enantiômeros envolvidos são mostrados para os valores de coeficiente de transferência de massa global efetivo de $0,1 \text{ s}^{-1}$ e $0,03 \text{ s}^{-1}$.

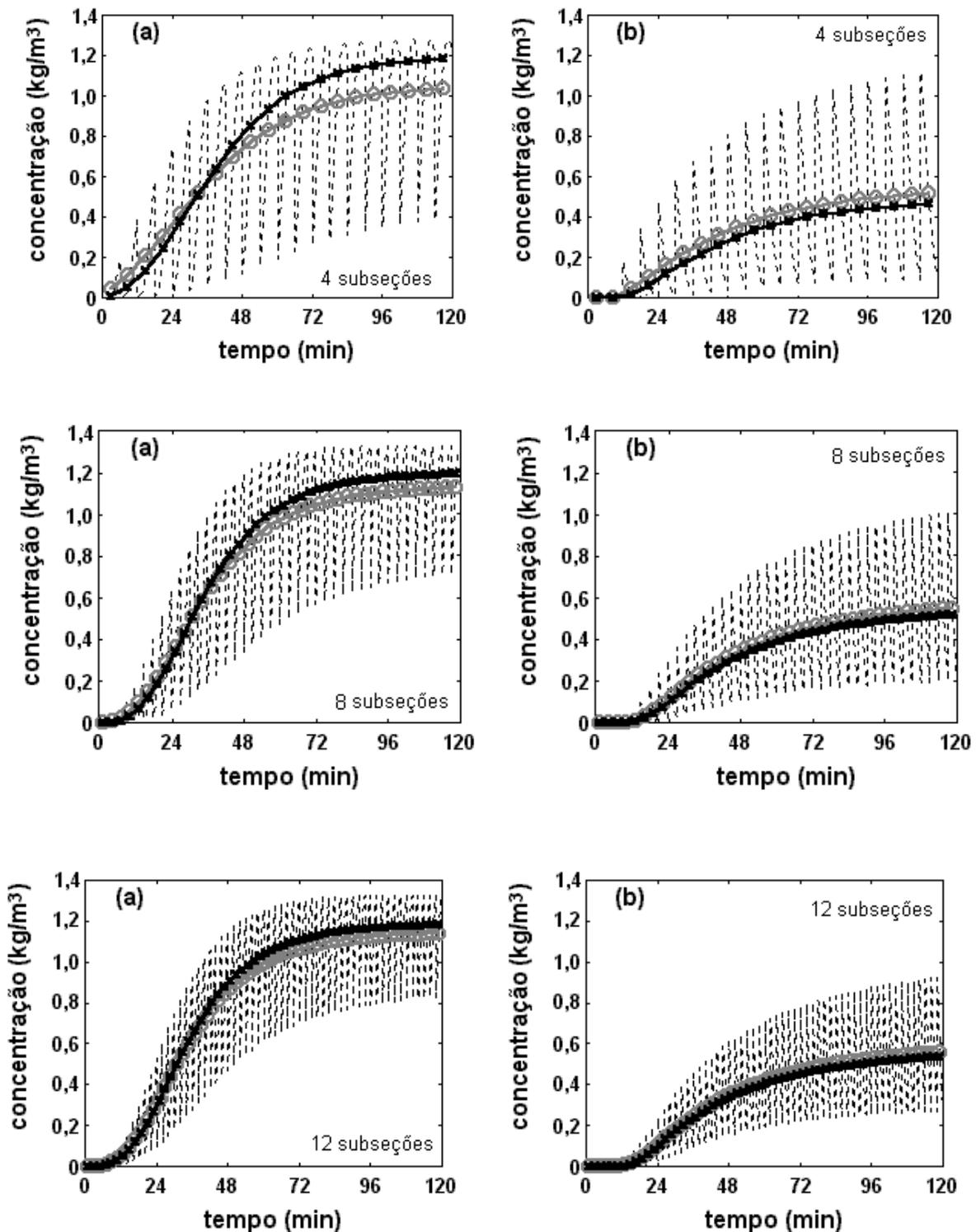


Figura 3 – Perfis de concentração de isômeros de bi-naftol em uma unidade de LMS com 4, 8 e 12 subseções (a) isômero menos adsorvido na corrente de refinado, (b) isômero mais retido na corrente de extrato; (---) perfil de concentração transiente exato na unidade, (⊕) perfil de concentração média no intervalo de permutação, (⊗) perfil de concentração instantâneo na metade do intervalo de permutação.

Tabela 3 – Pureza e recuperação dos isômeros de bi-naftol para as unidades de LMS com diferentes números de subseções.

nº de subseções	Pureza (%)		Recuperação (%)	
	Extrato	Rafinado	Extrato	Rafinado
4	90,9	86,4	85,6	91,4
8	97,3	91,6	92,1	97,4
12	98,3	93,9	93,5	98,2

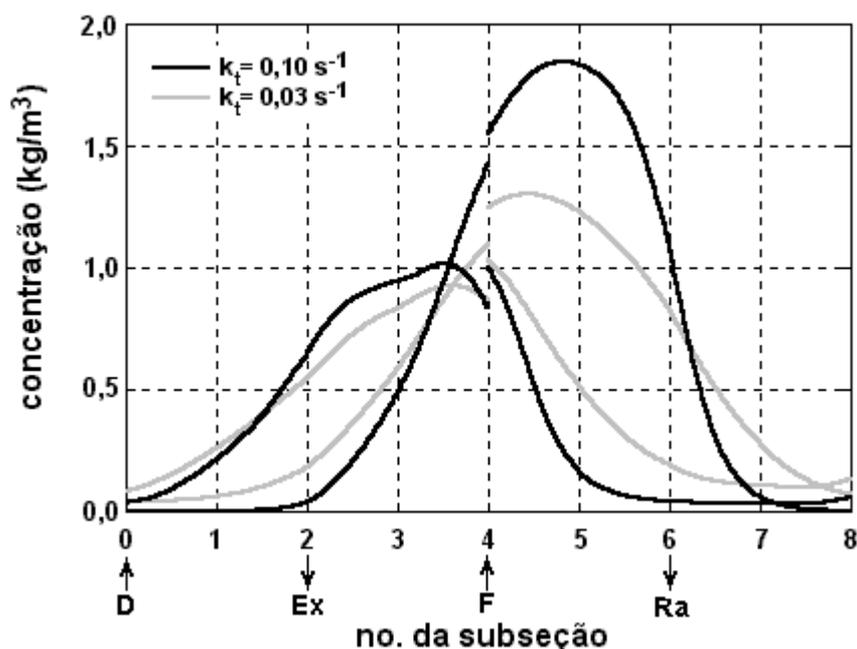


Figura 4 – Influência do coeficiente de transferência de massa global efetivo sobre o perfil de concentração, no estado cíclico estacionário, na unidade de LMS.

Pela análise da Fig. 4, verifica-se uma melhor separação dos isômeros recuperados nas correntes de refinado e extrato para o coeficiente de transferência de massa global efetivo (k_t) mais elevado. O parâmetro k_t reflete a resistência à transferência de massa das espécies entre as fases fluida e adsorvente no sistema. Altos valores deste parâmetro indicam uma resistência menor, podendo melhorar a eficiência da separação.

4. CONCLUSÃO

O comportamento transiente de unidades de LMS na separação de enantiômeros 1,1'-bi-2-naftol foram estudados, utilizando a modelagem matemática proposta neste trabalho. O modelo matemático considera a verdadeira concepção de uma unidade de LMS, isto é, a permutação das correntes externas da unidade em tempos pré-definidos. O modelo permitiu obter a descrição exata do comportamento de uma unidade de LMS em relação ao perfil de concentração das espécies envolvidas, obtido ao longo do tempo operacional no processo de separação dos enantiômeros de bi-naftol. Observou-se que o número de subseções presentes na unidade é um importante parâmetro a ser considerado no projeto destas unidades. Consegue-se uma aproximação a uma unidade de LMV com um grande número de subseções na unidade de LMS, com ótimos desempenhos, mas é necessário, na prática, observar o custo

e a complexidade operacional, para se determinar o número de subseções adequado para cada aplicação.

Os perfis de concentração numéricos obtidos foram comparados com os experimentais e numéricos dos enantiômeros de bi-naftol apresentados por Pais *et al.* (1998) e mostraram estar em grande concordância. A resistência à transferência de massa foi estudada neste processo através da variação do parâmetro coeficiente de transferência de massa global. Um aumento deste parâmetro, reduzindo a resistência à transferência de massa, melhora o desempenho da unidade na separação.

REFERÊNCIAS

- Chu, K. H. and Hashim, M. A., 1995, Simulated countercurrent adsorption processes: a comparison of modelling strategies, *The Chemical Engineering Journal*, 56, pp. 59-65.
- Guest, D. W., 1997, Evaluation of simulated moving bed chromatography for pharmaceutical process development, *J. Chromatog. A*, 760, pp. 159-162.
- Maliska, C. R., 1995, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC – Livros Técnicos e Científicos S.A., Rio de Janeiro.
- Pais, L. S., Loureiro, J. M. and Rodrigues, A. E., 1997a, separation of 1,1'-bi-2-naphthol enantiomers by continuous chromatography in simulated moving bed, *Chem. Eng. Sci.*, 52, pp. 245-257.
- Pais, L. S., Loureiro, J. M. and Rodrigues, A. E., 1997b, Modeling, simulation and operation of a simulated moving bed for continuous chromatographic separation of 1,1'-bi-2-naphthol enantiomers, *J. Chromatog. A*, 769, pp. 25-35.
- Pais, L. S., Loureiro, J. M. and Rodrigues, A. E., 1998, modeling strategies for enantiomers separation by smb chromatographic, *A. I. Ch. E. Journal*, 44, pp. 561-568.
- Ruthven, D. M. and Ching, C. B., 1989, Counter-current and simulated counter-current adsorption separation processes, *Chem. Eng. Sci.*, 44, pp. 1011-1038.
- Silva, E. A. B., 2000, *Modelagem e simulação numérica de uma unidade de leito móvel simulado*, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil.
- Zhong, G. and Guiochon, G., 1997, Simulated moving bed chromatography. comparison between the behaviors under linear and nonlinear conditions, *Chem. Eng. Sci.*, 52, pp. 4403-4418.

BEHAVIOR ANALYSIS OF A SIMULATED MOVING BED UNIT IN ENANTIOMERS SEPARATION – TRANSIENT FLOW

Abstract. *The transient mathematical model of a simulated moving bed unit is presented. The model considers the switching of the inlet and outlet points of the fluid streams of the unit at each switching time. It is considered the plug flow with axial dispersion to fluid phase. It is used the linear driving force approximation to related the mass transfer between the fluid and solid phases. It is simulated the chromatography separation of bi-naphtol enantiomers and analyzed the transient behavior of a simulated moving bed unit with different subsections numbers in this separation. In order to resolve the differential equations of the model it is utilized the finite volume method with the WUDS scheme. It is analyzed the influence of the overall mass transfer coefficient on performance of the simulated moving bed in the separation process.*

Keywords: *Simulated moving bed, Modeling, Transient*