

Avaliação da Rotina Inversa $R2W$ na Estimação de Parâmetros de Transferência de Massa no Processo de Adsorção de Glicose e Frutose

A.L.J. BIHAIN¹, Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, DEMEC, Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, IPRJ - UERJ, 28625-530 Nova Friburgo, RJ, Brasil

L.D.T. CÂMARA², Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, DEMEC, Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, IPRJ - UERJ, 28625-530 Nova Friburgo, RJ, Brasil

A.J. SILVA NETO³, Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, DEMEC, Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, IPRJ - UERJ, 28625-530 Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo. As técnicas inversas são ferramentas muito utilizadas na determinação dos parâmetros envolvidos na modelagem de processos industriais. Neste trabalho o método *Random Restricted Window (R2W)* é empregado na estimação dos parâmetros de transferência de massa envolvidos na cromatografia da separação da glicose e frutose a partir do suco de caju. O $R2W$ é um método estocástico simples, que analisa a função custo a partir de estimativas aleatórias pertencentes a um domínio definido para os parâmetros que se deseja ajustar, assumindo novas buscas aleatórias através de uma janela de domínio restrito próxima aos melhores candidatos à solução do problema de interesse. Na modelagem do processo cromatográfico foi utilizada uma nova abordagem fenomenológica, chamada de "velocidade da frente de convecção", a qual mostrou potencial na caracterização da coluna cromatográfica. Nesta, a velocidade da fase móvel (líquida) é considerada o fator dominante no transporte das moléculas ao longo da coluna. O método $R2W$ mostrou-se eficaz na obtenção dos parâmetros do modelo fornecendo uma ótima concordância entre os resultados da simulação computacional e os dados experimentais.

Palavras-chave. Problema Inverso, Algoritmo $R2W$, Cromatografia.

1. Introdução

A estimativa dos parâmetros desconhecidos em um modelo matemático a partir de dados experimentais constitui um problema inverso e é um passo muito importante

¹aluis@iprj.uerj.br;

²dcamara@iprj.uerj.br;

³ajsneto@iprj.uerj.br;

para uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos em muitas áreas de aplicação [18]. A abordagem inversa é uma técnica muito utilizada em diversas áreas da ciência, como na modelagem de processos industriais, processos cromatográficos, etc. [3]. Nos problemas de identificação de parâmetros de modelos teóricos em engenharia química, muitos autores tem utilizado ferramentas como o algoritmo de Luus-Jaakola[11], Levenberg-Marquardt [12] entre outros métodos.

A cromatografia é um método físico-químico de separação fundamentada na migração diferencial dos componentes de uma mistura, que ocorre devido a diferentes interações entre duas fases imiscíveis, a fase móvel e a fase estacionária [9].

Entre os processos cromatográficos existentes, o Leito Móvel Simulado (LMS) tem sido muito aplicado em misturas de difícil separação devido à eficiência do mesmo. Em função da aplicabilidade do LMS, muitos estudos vem sendo desenvolvidos com diferentes abordagens [15, 17]. Na modelagem do fenômeno, em geral são considerados diversos fatores, entre eles, dispersão axial, transferência de massa entre o fluido e a partícula, difusão intrapartícula e as cinéticas de adsorção e dessorção.

Neste trabalho foi proposta uma nova abordagem fenomenológica chamada "velocidade da frente de convecção" para descrever o processo de transferência de massa na cromatografia de adsorção da glicose e frutose presentes no suco de caju. Para estimar os parâmetros de adsorção e dessorção a partir dos dados experimentais [1], uma rotina inversa de otimização simples foi utilizada, o método Random Restricted Window (*R2W*) [3].

A rotina *R2W* é baseada em uma busca aleatória, que tem o domínio de busca reduzido de acordo com o quadrado dos resíduos entre os valores calculados com a simulação computacional e os dados experimentais. O método *R2W* possui algumas peculiaridades com relação ao Algoritmo Genético (GA) e ao método de Luus-Jaakola (LJ), que restringem a região de busca de acordo com as melhores soluções obtidas a partir de estimativas aleatórias.

A abordagem fenomenológica "velocidade da frente de convecção" mostrou-se efetiva na caracterização da coluna cromatográfica para a separação de glicose e frutose presentes no suco de caju, assim como o método *R2W* foi eficiente na obtenção dos parâmetros do modelo.

2. Modelagem

2.1. Problema Direto

O Leito Móvel Simulado (LMS) é um processo contínuo de separação de moléculas por cromatografia, no qual a modelagem e simulação podem ser utilizadas para encontrar as melhores condições operacionais para a separação. Entretanto a caracterização da coluna cromatográfica é uma etapa prévia e importante na determinação dos principais parâmetros utilizados em diferentes processos cromatográficos, assim como no LMS.

Em um processo cromatográfico por adsorção líquido-sólido, a transferência de massa baseia-se no gradiente de concentração de moléculas entre as fases sólida e líquida, onde as moléculas do eluente (fase líquida) são adsorvidas pela fase sólida

ocupando os sítios ativos na superfície desta. O limitante do processo é a capacidade máxima de adsorção de moléculas pela fase sólida.

Para descrever a transferência de massa que ocorre no processo cromatográfico uma nova abordagem chamada "velocidade da frente de convecção" foi desenvolvida. Esta considera que a velocidade da fase líquida é o fator dominante no transporte das moléculas ao longo da coluna cromatográfica [5]. Portanto o primeiro passo assumido na discretização foi a velocidade da fase líquida, seguido da transferência de massa entre a fase líquida e sólida. A velocidade da fase líquida foi obtida através do fluxo volumétrico da fase móvel através do meio poroso,

$$v = \frac{Q}{\varepsilon A_T} \quad (2.1)$$

onde v é a velocidade da fase líquida, Q é a vazão volumétrica, ε é a porosidade e A_T é a área total da coluna.

Para o cálculo da transferência de massa, a coluna cromatográfica foi discretizada em volumes de controle de comprimento ξ que se movem ao longo da coluna com a mesma velocidade do fluxo do eluente, conforme pode ser observado na figura 1.

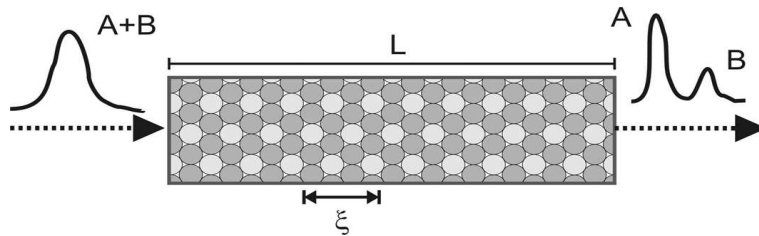


Figura 1: Representação da coluna cromatográfica.

Para caracterizar a cinética de transferência de massa do soluto entre a fase líquida e a fase sólida foi assumido o modelo global de cinética de transferência de massa,

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{\xi} = -k_{ads} \cdot C + k_{des} \cdot q \quad (2.2)$$

onde, C é a concentração na fase líquida, q é a concentração na fase sólida, t é o tempo, k_{ads} é a constante cinética de adsorção e k_{des} é a constante cinética de dessorção.

Entre as principais características do modelo "velocidade da frente de convecção", podemos citar a facilidade de implementação e análise e ainda o mesmo necessita conhecer poucos dados operacionais do problema real. Porém ainda para conhecer as constantes cinéticas referentes às substâncias a serem separadas, se faz necessária a aplicação de uma rotina inversa.

2.2. Problema Inverso

A análise do problema inverso constitui uma área multidisciplinar de pesquisa, com um grande número de aplicações em diferentes campos da ciência [10, 13, 16]. As técnicas inversas são de grande importância no estudo da adsorção, para a obtenção dos parâmetros dos modelos usados para simular esse fenômeno. Muitos estudos dessa natureza podem ser encontrados com diferentes abordagens, como por exemplo a aplicação de métodos determinísticos [19, 20] e métodos evolutivos com procedimentos aleatórios [4, 14], os quais mostraram que a combinação da análise de erros com uma rotina inversa pode ser satisfatória para uma estimativa de parâmetros com boa precisão.

Neste trabalho os dados experimentais correspondentes à separação da glicose e frutose presente no suco de caju, realizada em uma unidade LMS composta por um conjunto de onze colunas cromatográficas em série [1], foram ajustados ao modelo do problema direto apresentado anteriormente.

Para a obtenção dos parâmetros do modelo, foi usado o método *Random Restricted Window (R2W)* [3], que é considerado um método estocástico simples, o qual utiliza um algoritmo de busca com uma distribuição aleatória. A figura 2 mostra uma representação esquemática do algoritmo.

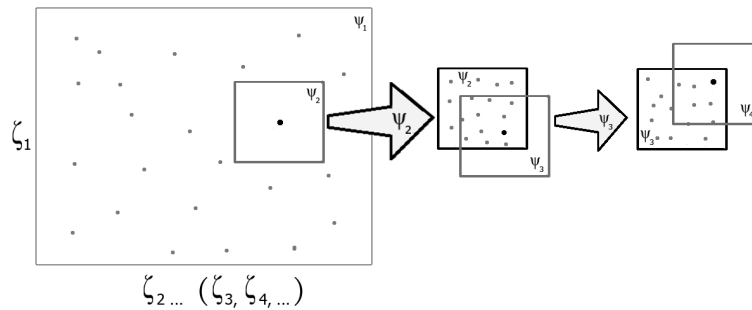


Figura 2: Representação esquemática do algoritmo *R2W*.

Na formulação do problema inverso de transferência de massa considerado nesse trabalho, busca-se minimizar uma função objetivo dado pela soma dos resíduos quadrados entre os valores experimentais e os valores calculados para a variável observável.

O algoritmo aleatório *R2W*, analisa a função objetivo a partir de estimativas aleatórias (ζ) pertencentes a um domínio definido (Z) para os parâmetros que se deseja obter, escolhendo as melhores soluções nos intervalos de valores estimados para os parâmetros em que a função objetivo apresenta menor resíduo,

$$Z = f(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \dots) \quad (2.3)$$

$$\zeta_i = \zeta_{iL} + R(\zeta_{iH} - \zeta_{iL}) \quad (2.4)$$

onde ζ_{iL} e ζ_{iH} representam respectivamente o menor e o maior valor do parâmetro, ou seja, o intervalo ao qual as estimativas pertencem, sendo R um número aleatório no intervalo $0 \leq R \leq 1$.

O procedimento representado na equação (2.4) é repetido para cada parâmetro ζ_i , obtendo valores aleatórios pertencentes ao domínio definido conforme o número de sementes S desejadas.

Após gerar todas as estimativas aleatórias pertencentes a um domínio para os parâmetros conforme o número de sementes definidos a priori, os resultados das simulações são comparados com os dados experimentais a fim de encontrar as melhores soluções. Para descobrir quais os valores para os parâmetros apresentam as melhores soluções é feita uma avaliação da soma dos resíduos quadrados (Q),

$$Q = \sum_{i=1}^{np} (C_{exp_i} - C_{sim_i})^2 \quad (2.5)$$

onde C_{exp} , C_{sim} , e np correspondem respectivamente aos dados experimentais do processo de adsorção, os dados simulados pelo modelo e o número de dados experimentais.

Após a busca aleatória inicial Ψ_1 , como pode ser visto na figura 2, uma nova fase de buscas Ψ_2 é realizada em uma janela de domínio restrito, próxima às melhores solução obtidas na fase anterior, sendo o novo intervalo de busca definido pelo fator de restrição (δ) através das relações (2.6) e (2.7), onde ζ_i^* corresponde à melhor solução para o parâmetro i encontrado na fase anterior Ψ_1 .

$$\zeta_L = \zeta_i^* - \delta(\zeta_i^*) \quad (2.6)$$

$$\zeta_H = \zeta_i^* + \delta(\zeta_i^*) \quad (2.7)$$

Na busca por uma solução melhor uma terceira fase Ψ_3 é realizada, repetindo o procedimento das etapas (2.6) e (2.7), realocando a janela de domínio restrito. Esse procedimento é mantido até que seja realizado um número de fases definido a priori.

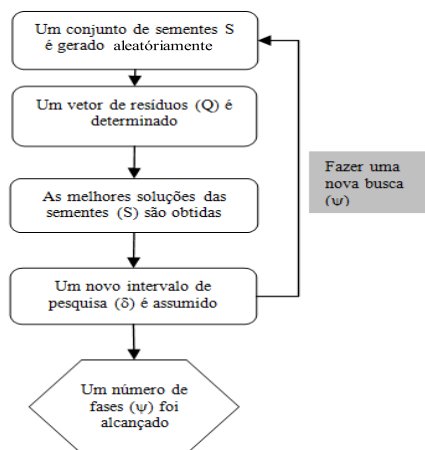


Figura 3: Diagrama representativo do algoritmo $R2W$.

O algoritmo $R2W$ representado no diagrama da figura 3 é um método evolucionário de busca. Pois o mesmo é um tipo de algoritmo evolutivo que constitui um método eficiente de otimização estocástica. Esse algoritmo realiza busca em uma população de possíveis soluções para o problema e utiliza uma estratégia de sobrevivência procurando as regiões em que melhor se adapta, ou seja, procura as regiões onde potencialmente estão as melhores soluções para poder refinar os resultados.

O algoritmo $R2W$ possui algumas características em comum com o algoritmo Luus-Jaakola e o Algoritmo Genético, pois ambos são métodos estocásticos de otimização. Entre estes o algoritmo $R2W$ possui uma semelhança maior com o Luus-Jaakola, pois ambos geram estimativas aleatórias dentro de um domínio de busca pré-estabelecido, entretanto no Luus-Jaakola, as restrições do domínio são realizadas ao longo das avaliações da função objetivo, enquanto no $R2W$ o domínio é reduzido somente na primeira fase, mantendo-se constante a área da região de busca nas fases posteriores.

3. Resultados e Discussões

Com a intenção de se avaliar a potencialidade da abordagem fenomenológica "velocidade da frente de convecção", e do algoritmo $R2W$ na solução do problema inverso, serão utilizados dados experimentais referentes a um pulso de concentração de uma amostra de (300ml)[1] de suco de caju injetado em uma coluna cromatográfica. Vale ressaltar ainda que a amostra do suco de caju é composta basicamente por uma mistura binária de glicose e frutose.

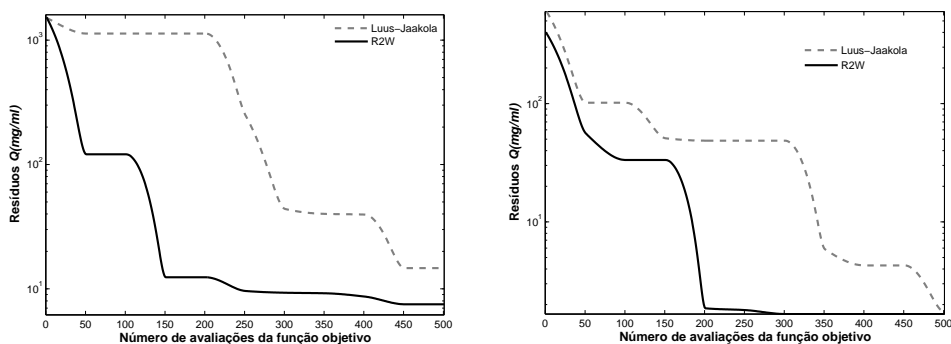
A critério de comparação, o algoritmo Luus-Jaakola também foi utilizado na solução do problema inverso. Os resíduos e os valores ótimos dos parâmetros de transferência de massa k_{ads} e k_{des} da equação 2.2 obtidos pelos algoritmos $R2W$ e Luus-Jaakola podem ser observados na tabela 1. Para a execução do algoritmo $R2W$ foram usados $\delta = 0,08$, $S = 100$ e $\Psi = 3$ e o domínio de pesquisa para os

dois componentes da mistura foi $0 \leq k_{ads} \leq 0.4$.

Tabela 1: Parâmetros ótimos de adsorção e dessorção para a glicose e frutose.

Algoritmo	Componente	k_{ads}	k_{des}	Resíduo Q	Tempo Proc. em s
R2W	Glicose	0,01511	0,02810	6,18058	60,04
	Frutose	0,01454	0,01332	1,66883	56,41
Luus-Jaakola	Glicose	0,01749	0,03359	14,67762	99,99
	Frutose	0,01463	0,01353	1,74073	93,27

Comparando na tabela 1 os resíduos que cada método apresentou, pode ser observado que para o caso estudado o *R2W* apresentou um melhor desempenho, além de ter tempo de processamento inferior ao Luus-Jaakola. Para realizar estes ajustes, foram feitas 500 chamadas da função objetivo para cada algoritmo e para cada componente da mistura. A evolução do resíduo nas avaliações da função objetivo para cada um dos casos é apresentada na figura 4.



(a) Evolução da função objetivo no ajuste dos parâmetros para glicose.

(b) Evolução da função objetivo no ajuste dos parâmetros para frutose.

Figura 4: Evolução da função objetivo através dos métodos Luus-Jaakola e R2W.

A partir dos resultados apresentados na figura 4, é possível afirmar que o algoritmo *R2W* no caso estudado se aproxima mais rapidamente do valor mínimo da função objetivo e ainda ao final das avaliações chega a um valor absoluto de resíduo quadrado menor se comparado ao Luus-Jaakola.

A figura 5 mostra a correlação dos dados experimentais [1] com as simulações feitas a partir da abordagem fenomenológica do problema direto usando os parâmetros ajustados pelos métodos *R2W* e Luus-Jaakola. Os resultados estão em termos da concentração do soluto na fase líquida em função do tempo (em minutos).

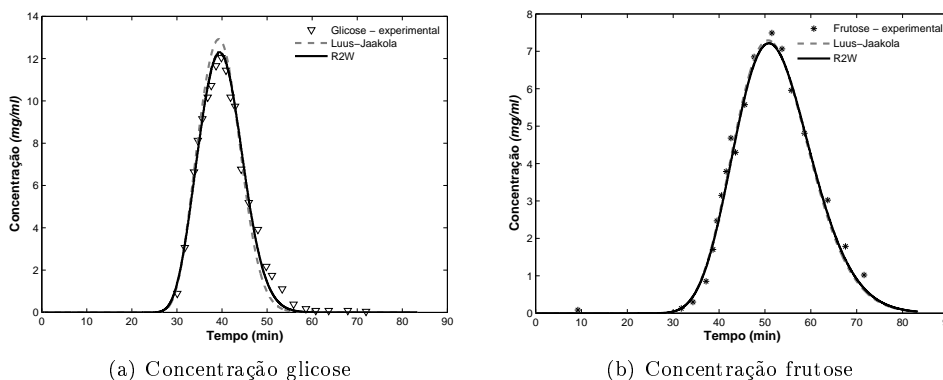


Figura 5: Comparação dos dados experimentais da concentração da glicose 5(a) e frutose 5(b) no soluto [1] com os valores calculados.

Os resultados apresentados graficamente na figura 5 mostram o bom desempenho da abordagem "velocidade da frente de convecção" na representação da separação cromatográfica da glicose e da frutose presente no suco de caju, pois a simulação apresenta um perfil semelhante ao perfil dos dados experimentais. Assim como reafirma o bom desempenho do algoritmo R2W frente ao Luus-Jaakola para o problema abordado.

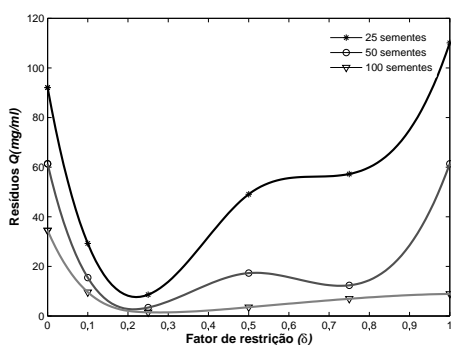
Para melhor entender o comportamento do algoritmo R2W e descobrir a melhor forma de operar o mesmo, uma avaliação dos parâmetros de controle do método foi realizada para cada componente da amostra de suco de caju. Para a análise de sensibilidade apresentada nas figuras 6 e 7, foi utilizado o mesmo conjunto de sementes para a inicialização do gerador aleatório.

Na figura 6 estão representados os estudos das avaliações dos parâmetros de controle do método problema inverso aplicado no problema direto para a simulação da separação cromatográfica da glicose. Os resultados foram obtidos através de uma média de 3 simulações independentes do algoritmo R2W.

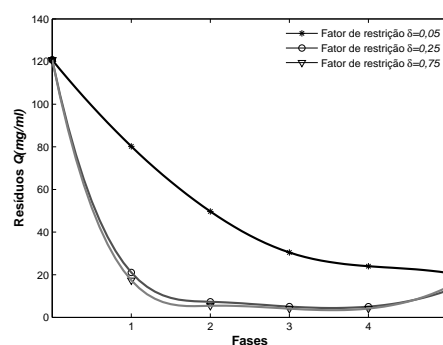
Na figura 6(a) é possível observar que existe uma relação inversamente proporcional entre o número de sementes e o resíduo, pois quando foi aumentado o número de sementes no algoritmo R2W, foram obtidas constantes para a glicose que resultaram em um resíduo menor entre a simulação e os dados experimentais. Como o método é estocástico, podemos dizer que quanto maior a quantidade de sementes, maior é a chance de obtermos bons resultados, ou seja, se encontrará constantes que vão resultar em menores resíduos.

Na figura 6(b) pode ser observado que se existe a necessidade de se encontrar uma solução refinada, o ideal é usar um fator de restrição menor, porém é necessário um número relativamente elevado de fases para se chegar ao resultado. Já com um fator de restrição maior existe a possibilidade de se chegar próximo à solução rapidamente, porém obter um resultado com boa precisão é pouco provável, pois o método ficará andando em torno da solução, pelo motivo de que este estará trabalhando com uma escala maior do que a da solução.

Na figura 7 podem ser observados os resultados dos estudos das avaliações dos



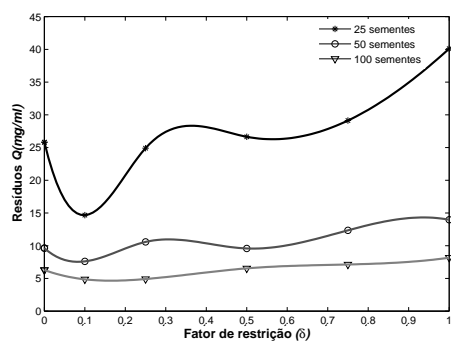
(a) Influência do número de sementes (S) e do fator de restrição (δ)



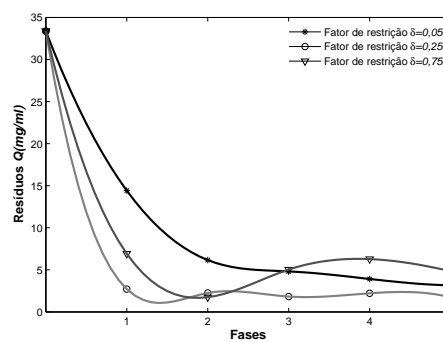
(b) Influência do fator de restrição (δ) e do número de fases

Figura 6: Avaliação dos parâmetros no método $R2W$, na busca das constantes de adsorção e dessorção da glicose.

parâmetros de controle do método $R2W$ para o ajuste dos parâmetros k_{ads} e k_{des} do modelo da equação (2.2) para a adsorção da frutose adsorvida do suco de caju através do processo cromatográfico.



(a) Influência do número de sementes (S) e do fator de restrição (δ)



(b) Influência do fator de restrição (δ) e do número de fases

Figura 7: Avaliação dos parâmetros no método $R2W$, na busca das constantes de adsorção e dessorção da frutose.

Os resultados da figura 7(a) são semelhantes àqueles apresentados na figura 6(a), o que reafirma que aumentando o número de sementes, tem-se um resíduo menor, pois o aumento do número de sementes no $R2W$ faz com que aumente a densidade de estimativas no domínio levando a uma melhor solução.

Outra observação que pode ser feita a partir das figuras 7(a) e 6(a) é que usar um fator de restrição maior do que 0.5 não é recomendado, pois nesta faixa de valores o método começa a se distanciar da solução ótima.

A semelhança entre os resultados da figura 7(b) com 7(b) reafirma a hipótese

que, quanto se deseja uma solução refinada a melhor estratégia a ser adotada é, escolher um fator de restrição relativamente pequeno e um elevado número de fases.

Na tabela 2 é apresentada uma comparação dos valores das constantes de equilíbrio da glicose (k_{gli}) e da frutose (k_{fru}) obtidas através de dois modelos com diferentes abordagens.

Tabela 2: Comparação das constantes de equilíbrio.

	Modelo [1]	Este Trabalho <i>R2W</i>	Este Trabalho LJ
k_{gli}	0,28	0,53	0,52
k_{fru}	0,60	1,09	1,08
$\frac{k_{fru}}{k_{gli}}$	2,14	2,06	2,08

Na abordagem usada em [1], considera-se os efeitos da transferência de massa no interior da partícula, tanto na fase líquida como na fase sólida, enquanto a utilizada neste trabalho considera que a velocidade da fase líquida é o fator dominante na transferência de massa.

É possível notar que apesar dos valores de k_{gli} e k_{fru} encontrados pelas duas abordagens serem diferentes, a relação entre os mesmos é semelhante, o que mostra que o modelo "velocidade da frente de convecção", apesar de considerar um número menor de fatores, é capaz de relacionar as concentrações dos componentes nas fases sólida e líquida de forma similar à modelagem clássica utilizada em [1].

4. Conclusões

A abordagem fenomenológica chamada "velocidade da frente de convecção" empregada neste trabalho para a simulação do processo de separação por adsorção da glicose e frutose presentes no suco de caju, possui potencial para ser usado na caracterização da coluna cromatográfica devido à simplicidade de implementação e à necessidade de um menor número de parâmetros em relação aos modelos clássicos.

O algoritmo *R2W* usado na solução do problema inverso mostrou-se efetivo na obtenção das constantes de adsorção e dessorção tanto da glicose como da frutose, levando a boas soluções, as quais apresentaram um resíduo reduzido na correlação das simulações com os dados experimentais.

O algoritmo *R2W* além de ser um método simples de implementar computacionalmente, mostrou um desempenho ligeiramente melhor e tempo de processamento inferior ao do algoritmo Luus-Jaakola na obtenção dos parâmetros de adsorção e dessorção estudados.

A avaliação dos parâmetros do algoritmo *R2W* mostrou que a busca pela solução ideal é dependente do fator de restrição, número de fases e número de sementes aleatórias. A análise mostrou também que se o fator de restrição assumir valores maiores que 0,5 o algoritmo se distancia da solução ótima e ainda quando é aumentado o número de sementes aumenta a possibilidade de obter boas soluções com um

número reduzido de fases.

Agradecimentos Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPERJ, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, e da CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.

Abstract. Inverse techniques are tools widely used in the determination of parameters involved in the modelling of industrial processes. In the present work the method Restricted Random Window (*R2W*) is employed to estimate the parameters of mass transfer involved in the chromatographic separation of glucose and fructose from cashew apple juice. The *R2W* is a simple stochastic method, that evaluates the cost function for random estimates within the domain for the parameters to be adjusted, with new random searches performed within a restricted domain in the vicinity of the best solution candidates for the problem of interest. In the chromatographic process a new approach phenomenological is used, called "front velocity", which considers as the dominant factor in the molecules transfer in chromatographic columns the liquid phase velocity. The *R2W* method has shown to be effective in the model parameters determination yielding a good agreement between the computational simulation and experimental data.

Keywords. Inverse Problem, Algorithm R2W, Chromatography.

Referências

- [1] D.C.S. Azevedo, A. Rodrigues, Chromatography Applied to the Separation/Purification of Fructose from Cashew Apple Juice, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 17 (2000), 4-7.
- [2] L.D.T. Câmara, D.A.G. Aranda, Cheaction Kinetic Study of Biodiesel Production from Fatty Acids Esterification with Ethanol, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Volume N°50 (2011), 2544-2547.
- [3] L.D.T. Câmara, A.J. Silva Neto, Inverse Stochastic Characterization of Adsorption Systems by a Random Restricted Window (*R2W*) Method, em "International Conference on Engineering Optimization (ENGOPT)", ENGOPT, 2008, Rio de Janeiro - RJ, 2008.
- [4] L.D.T. Câmara, C.C. Santana, A.J. Silva Neto, Kinetic Modeling of Protein Adsorption With a Methodology of Error Analysis, *Journal of Separation Science.*, Volume N°30 (2007), 688-692.
- [5] L.D.T. Câmara, Chromatographic Columns Characterization for SMB (Simulated Moving Bed) Separation of Glucose and Fructose, em "8th European Congress of Chemical Engineering", Berlin, Germany, p 108-2011.
- [6] M.C.M. Castoldi, L.D.T. Câmara, D.A.G. Aranda, Kinetic Modeling of Sucrose Hydrogenation in the Production of Sorbitol and Mannitol with Ruthenium and Nickel-Raney catalysts, *Reaction Kinetics and Catalysts Letters*, Volume N°98 (2009), 83-89.

- [7] D.P. Costa, L.D.T. Câmara, M.Irizar-Mesa, O. Llanes-Santiago, D.C. Rodríguez, A.J. Silva Neto, Inverse and Direct Modeling Applied in the Estimation of Kinetic Parameters of BSA Adsorption, *Ingeniería Electronica Automática y Comunicaciones*, Volume N°1 (2009), 41-47.
- [8] A.P.C. Cuco, A.J. Silva Neto, H.F. Campos Velho, F.L. Souza, Solution of an Inverse Problem with an Epidemic Genetic Algorithm and the Generalized, *Extremal Optimization Algorithm*, *Inverse Problems in Science and Engineering*, 17/3 (2009), 289-302.
- [9] A.L.G. Degani, Q.B. Cass, P.C. Vieira, Cromatografia um breve ensaio, *Química Nova Escola*, n°7, 1998.
- [10] F.L. de Souza, F.M. Ramos, P. Paglione, R.M. Girardi, A New Stochastic Algorithm for Design Optimization, *AIAA Journal*, 41/9 (2003), 1808-1818.
- [11] F.S. Lobato, V. Steffen Jr., Algoritmo de Luus-Jaakola Aplicado a um Problema Inverso de Fermentação Batelada Alimentada, *TEMA Tend. Mat. Apl. Comput.* 9, No. 3 (2008), 417-426.
- [12] J. Lugon Jr., A.J. Silva Neto, Estimativa de Isotermas de Adsorção Gás-Líquido Usando a Abordagem de Problema Inverso, *TEMA Tend. Mat. Apl. Comput.* 3, No. 2 (2002), 161-170.
- [13] S. M. Al-Marzoug, R. J. W. Hodgson, Application of Luus-Jaakola optimization method to the desing of optical coatings, *Proceedings of the 8th WSEAS International Conference on Evolutionary Computing*. Vancouver, British Columbia, Canada, June 19-21, (2007), 229-234.
- [14] M.Irizar-Mesa, O. Llanes-Santiago, F.H. Fernández, D.C. Rodríguez, A.J. Silva Neto and L.D.T. Câmara, An Approach to Parameters Estimation of a Chromatography Model Using a Clustering Genetic Algorithm Based Inverse Model, *Soft Computing*. 15 (2011), 963-973.
- [15] A.K. Mostafazadeha, M. Sarshara, S. Javadiana, M.R. Zarefardc, Z.A. Haghhighid, Separation of fructose and glucose from date syrup using resin chromatographic method: Experimental data and mathematical modeling, *Separatio and Purification Technology*. 79 (2011), 72-78.
- [16] I. Poplewska, W. Piatkowski, D. Antos, Effect of temperature on competitive adsorption of the solute and the organic solvent in reverse-phase liquid chromatography, *Journal of Chromatography A*. 1103 (2006), 284-295.
- [17] I.J. Silva Junior, M.A.G. Santos, V. Veredas, C.C. Santana, Experimental Determination of Chromatographic Separation Parameters of Ketamine Enantiomers on MCTA, *Journal of Separation and Purification Technology*. 43 (2005), 103-110.
- [18] A. Tarantola, Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation, SIAM, Paris, France, 2005.

- [19] J.F.V. Vasconcellos, A.J. Silva Neto, C.C. Santana, Estimativa do Coeficiente de Difusão e da Isoterma de Adsorção em Processo de Separação de Proteínas, em “4º Encontro de Modelagem Computacional,” Nova Friburgo - RJ, 2002.
- [20] J.F.V. Vasconcellos, A.J. Silva Neto, C.C. Santana, An Inverse Mass Transfer Problem in Solid-Liquid Adsorption Systems, *Inverse Problems in Engineering.*, 11/5 (2003), 391-408.