

# UM PROBLEMA INVERSO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA PARA CARACTERIZAÇÃO DE COLUNAS DE ADSORÇÃO

## Flavio Moraes Folly

Instituto Politécnico – IPRJ Universidade do Estado do Rio de Janeiro -UERJ, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil.  
[flaviofolly@ig.com.br](mailto:flaviofolly@ig.com.br)

## Antônio J. Silva Neto

Instituto Politécnico – IPRJ Universidade do Estado do Rio de Janeiro -UERJ, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil  
[ajsneto@iprj.uerj.br](mailto:ajsneto@iprj.uerj.br)

## César Costapinto Santana

Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6066, CEP 13081-970, Campinas, SP, Brasil.  
[santana@feq.unicamp.br](mailto:santana@feq.unicamp.br)

**Resumo:** Neste trabalho é apresentada a formulação e a solução de problema inverso para a determinação de parâmetros físicos químicos visando a caracterização de colunas de adsorção. O problema direto emprega o modelo de Thomas que apresenta bons resultados quando a dispersão axial não é significativa. Uma formulação implícita é adotada para o problema inverso onde se busca minimizar o funcional dos resíduos quadrados entre os valores calculados e aqueles medidos experimentalmente. São apresentados resultados para alguns casos teste sendo feitas então comparações com resultados disponíveis na literatura.

**Palavras Chave:** Problemas Inversos, Adsorção, Transferência de massa, Modelagem computacional.

## 1 – Introdução

A área farmacêutica de drogas quíricas no ano de 2000 movimentou uma cifra de cerca US\$100 bilhões (Santana et al., 2003), este fato tornou os processos biotecnológicos, objeto de intensa atividade de pesquisa principalmente a utilização de processos de adsorção em leito fixo ou leitos móveis simulados (LMS) para a separação e purificação de substâncias (Dünnebiel et al., 2000; Azevedo, 2001; Haaget al., 2001; Minceva e Rodriguez, 2002; Xie et al., 2002; Fricke, 2003).

A utilização de Problemas Inversos para a obtenção de estimativas de parâmetros de interesse ao processo tem se tornado uma alternativa cada vez mais utilizada devido à grande capacidade de processamento dos computadores atuais (Cidade et al., 2000; Vasconcellos et al., 2002; Wanget al., 2002).

A determinação de parâmetros físico-químicos nos processos de adsorção em leito fixo envolve a realização de experimentos em batelada para obtenção de isotermas ou a utilização de métodos de análise frontal. (Silva Jr., 2003), a utilização de um problema inverso neste caso, apresenta uma grande vantagem pela facilidade na obtenção dos dados experimentais necessários para a sua solução.

O presente trabalho tem como objetivo determinar os parâmetros da cinética de adsorção através da solução de um problema Inverso. O problema direto emprega o modelo de Thomas e uma formulação implícita é adotada para o problema inverso onde se busca minimizar o funcional dos resíduos quadrados entre os valores calculados e aqueles medidos experimentalmente.

## 2 – Formulação Matemática e Solução do Problema Direto

A adsorção em uma coluna de leito fixo, esquema mostrado pela Fig. 1, ocorre de acordo com a afinidade entre o adsorvato A (fase móvel) e o adsorvente B (fase fixa). Este equilíbrio pode ser expresso pela equação,

$$A + B \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} AB \quad (1)$$

onde  $k_1$  é a constante relacionada à taxa de adsorção e  $k_2$  a constante da taxa de dessorção. A razão entre estas constantes ( $k_2/k_1$ ) é igual à constante de dissociação  $k_d$ .

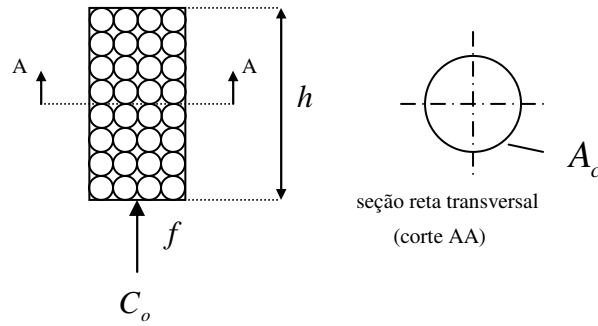


Figura 1 – Esquema de uma coluna de adsorção.

De acordo com Chase (1984) a taxa de transferência de massa do adsorvato para a fase fixa em uma interação descrita pela Eq. (1) pode ser dada por,

$$\frac{\partial q}{\partial t} = k_1 \cdot c \cdot (q_m - q) - k_2 \cdot q \quad (2)$$

onde  $c$  é a concentração do adsorvato na fase móvel,  $q$  é a concentração na fase fixa e  $q_m$  é concentração máxima do adsorvato que o adsorvente pode adsorver (capacidade máxima de adsorção).

A equação da continuidade da fase móvel no modelo proposto é representada por,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{ax} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial t} \quad (3)$$

onde  $D_{ax}$  é o coeficiente de dispersão axial,  $u$  é a velocidade linear,  $x$  a distância axial ao longo do leito e  $t$  o tempo.

Supondo que a dispersão axial na coluna seja desprezível ( $D_{ax} = 0$ ) e que as condições de contorno e iniciais sejam que a coluna (fase fixa) esteja isenta de adsorvato no instante inicial, isto é  $t = 0$ , e o fluxo de alimentação de adsorvato na entrada da coluna ( $C_o$ ) seja constante com o tempo, a solução analítica obtida para as Eqs. (2) e (3) é idêntica àquela obtida por Thomas (1944), sendo expressa da seguinte forma,

$$\frac{C}{C_o} = \frac{J(n/r, nT)}{J(n/r, nT) + [1 - J(n, nT/r) \exp(1 - r^{-1})(n - nT)]} \quad (4)$$

onde os termos  $r$ ,  $n$  e  $T$  são calculados pelas expressões a seguir,

$$r = 1 + C_o / k_d \quad (5)$$

$$n = q_m \cdot k_1 \cdot h \cdot A_c / f \quad (6)$$

$$T = f \cdot t \cdot (k_d + C_o) / A_c \cdot q_m \cdot h \quad (7)$$

A coluna (leito adsorvente) tem altura ( $h$ ) e área da seção transversal  $A_c$ , sendo  $f$  a vazão através da coluna. A função  $J(a, b)$  é expressa por,

$$J(a, b) = 1 - e^{-b} \int_0^a e^{-\xi} I_0(2\sqrt{b\xi}) d\xi \quad (8)$$

em que  $I_0$  é a função de Bessel modificada de primeiro tipo.

De acordo com Thomas (1944) valores de  $J$  podem ser calculados pela série assintótica cujos dois primeiros termos são

$$J(a, b) \approx \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf}(\sqrt{a} - \sqrt{b}) \right] + \frac{\exp\left[1 - (\sqrt{a} - \sqrt{b})^2\right]}{2\pi^{\frac{1}{2}} \left[ (ab)^{\frac{1}{2}} + b^{\frac{1}{2}} \right]} \quad (9)$$

o erro é menor do que 1% quando  $a \cdot b > 36$ .

Os resultados para a concentração na saída da coluna em função do tempo são denominados curvas de ruptura (Fig 2).

Estas curvas serão comparadas com os dados experimentais visando a determinação de parâmetros físico-químicos conforme será escrito na seção 3.

Considerando que uma situação de equilíbrio entre as fases seja atingida se pode de acordo com a Eq. (2) escrever,

$$\frac{\partial q^*}{\partial t} = k_1 \cdot c^* \cdot (q_m - q^*) - k_2 \cdot q^* = 0 \quad (10)$$

onde o símbolo sobrescrito \* representa os valores no equilíbrio.

De acordo com a Eq. (10) a relação das concentrações na fase fixa com a fase móvel é expressa por,

$$q^* = \frac{q_m \cdot c^*}{(k_d + c^*)} \quad (11)$$

A Eq. (11) mostra que a isoterma de adsorção é do tipo não-linear descrito por Langmuir (1916).

### 3 – Formulação Matemática e Solução do Problema Inverso

A formulação que foi utilizada no desenvolvimento da rotina computacional para solução do problema é do tipo implícita onde se busca minimizar o funcional dos resíduos quadrados entre os valores calculados e medidos experimentalmente.

A formulação é mostrada em Silva Neto e Moura Neto (1999), sendo este funcional dado por,

$$Q(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^n \left[ G_{calc_i}(\vec{Z}) - G_{exp_i}(\vec{Z}) \right]^2 \quad (12)$$

onde  $\vec{Z}$  representa o vetor incógnitas,  $G_{calc_i}$  os valores calculados para uma grandeza que pode ser medida experimentalmente  $G_{exp_i}$  sendo  $i = 1, 2, \dots, n$  onde  $n$  é o número total de medidas experimentais disponíveis.

Neste trabalho as grandezas calculadas e medidas experimentalmente correspondem aos valores de concentração na saída da coluna em função do tempo (Curvas de Ruptura), isto é,

$$G_i(t) = C_i / C_o(t) \quad (13)$$

Considerando

$$F_i(\vec{Z}) = G_{calc_i}(\vec{Z}) - G_{exp_i}(\vec{Z}) \text{ para } i = 1, 2, \dots, n \quad (14)$$

escreve-se a Eq. (12) como:

$$Q(\vec{Z}) = F^T F \quad (15)$$

No ponto de mínimo os valores calculados mais se aproximam dos valores experimentais. Escrevendo a equação do ponto crítico,

$$\frac{\partial Q}{\partial Z} = 0 \quad (16)$$

obtem-se da Eq. (12),

$$J^T(\vec{Z}) \cdot F(\vec{Z}) = 0 \quad (17)$$

onde  $J^T$  representa a matriz Jacobiana Transposta.

Fazendo então uma expansão de Taylor e considerando apenas os termos de primeira ordem, tem-se,

$$F(\vec{Z} + \Delta\vec{Z}) = F(\vec{Z}) + J(\vec{Z}) \cdot \Delta\vec{Z} \quad (18)$$

levando a Eq. (18) na Eq. (17) resulta,

$$J^T(\vec{Z}^i) \cdot J(\vec{Z}^i) \cdot \Delta\vec{Z}^i = -J^T(\vec{Z}^i) \cdot F(\vec{Z}^i) \quad (19)$$

Constrói-se então um procedimento iterativo onde partindo de uma estimativa inicial  $\vec{Z}^0$ , novas estimativas são obtidas com ,

$$\Delta\vec{Z}^i = \vec{Z}^{i+1} - \vec{Z}^i \quad (20)$$

onde  $i$  é o contador de iterações e as correções  $\Delta\vec{Z}^i$  são obtidas da solução da Eq. (19)

Levenberg e Marquardt (Marquardt, 1963) propuseram adicionar um fator de amortecimento na diagonal da matriz  $J^T \cdot J$  afim de melhorar a convergência. Desta forma a Eq. (19) é reescrita como,

$$\Delta\vec{Z}^i = \vec{Z}^{i+1} - \vec{Z}^i = -[J^T(\vec{Z}^i) \cdot J(\vec{Z}^i) + \lambda I]^{-1} \cdot J^T(\vec{Z}^i) \cdot F(\vec{Z}^i) \quad (21)$$

#### 4 – Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade em um problema inverso é feita com base nos coeficientes de sensibilidade que são calculados da seguinte forma,

$$\left(\overline{X}_{Z_j}\right)_i = J_{ij} = \frac{\partial G_{calc_i}}{\partial Z_j} \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad k = \text{número de incógnitas} \quad (22)$$

Estes coeficientes representam, portanto a sensibilidade da grandeza calculada e que é também medida experimentalmente, com relação às incógnitas que se deseja determinar. Observe que os coeficientes de sensibilidade definidos pela Eq. (22) correspondem aos elementos da Matriz Jacobiana.

Para se comparar os vários coeficientes de sensibilidade relativos às diferentes incógnitas, que podem possuir diferentes unidades e ordens de grandeza, é conveniente trabalhar com os coeficientes de sensibilidades modificados,

$$\left(X_{Z_j}\right)_i = J_{ij} = Z_j \cdot \frac{\partial G_{calc_i}}{\partial Z_j} \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad k = \text{número de incógnitas.} \quad (23)$$

## 5 – Resultados e Discussões

### 5.1 – Referências de parâmetros

Os valores dos parâmetros que serviram como neste trabalho são mostrados na Tab. 1.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados na solução de um problema inverso usando o modelo simplificado de Thomas.

Variáveis	Caso 1 (Chase, 1984)	Caso 2 (Pereira, 1999)	Caso 3 (Silva, 2000)
Substância	Lisozima	$\beta$ -Galactosidase	Inulinasas
$h$ - Altura da coluna (cm)	10,4	3,2	8,0
$A_c$ - Área transversal (cm <sup>2</sup> )	0,785	0,196	0,196
$f$ - vazão (ml/min)	1,0	1,0	0,35
$C_o$ - concentração Inicial (mg/ml)	0,1	0,104	1,45
$q_m$ - capacidade máxima de adsorção	14 mg/ml	32,98 mg/ml	4165,69 UA/ml. g
$k_d$ - constante de dissociação	0,025 mg/ml	0,04 mg/ml	94,80 UA/ml
$k_1$ - constante de adsorção	0,20 ml/mg . min	3,68 ml/mg . min	0,005 ml/UA . min

Nota: Os parâmetros  $k_d$ ,  $q_m$  e  $k_1$  foram obtidos através de experimentos em batelada utilizando a equação para a isoterma de Langmuir

### 5.2 - Validação do Problema Direto

Foi escrita uma rotina computacional para a solução do problema direto com o modelo de Thomas [ Eqs. (4) a (7) ].

Foram utilizados os valores dos trabalhos de Pereira (1999) e Chase (1984) visando à validação da rotina criada, na obtenção das curvas de ruptura mostradas nas Fig. 2 e Fig. 3 estas curvas são idênticas àquelas obtidas pelos respectivos autores em seus trabalhos.

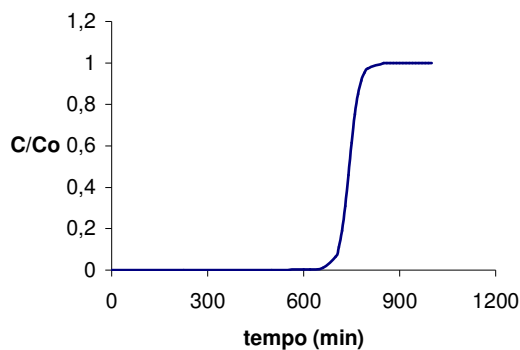


Figura 2 – Curva de Ruptura para a Lisozima (Caso 1)

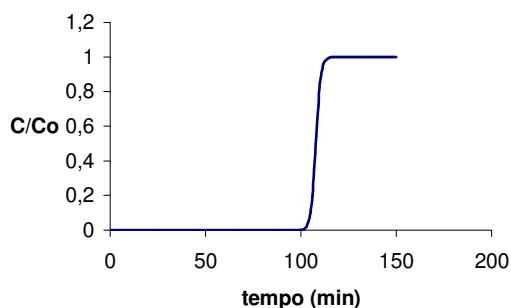


Figura 3 – Curva de Ruptura para a  $\beta$ -Galactosidase (Caso 2).

### 5.3 – Análise de Sensibilidade e Análise Paramétrica $q_m$ $k_d$ $k_1$

Uma outra rotina computacional foi feita para a análise de sensibilidade e solução do problema inverso. Os dados experimentais utilizados foram obtidos a partir dos trabalhos de Pereira (1999) – Caso 2 e Silva (2000) – Caso 3.

A variação dos coeficientes de sensibilidade para os parâmetros  $k_d$ ,  $q_m$  e  $k_1$  para o Caso 2 é apresentada na Fig 4.

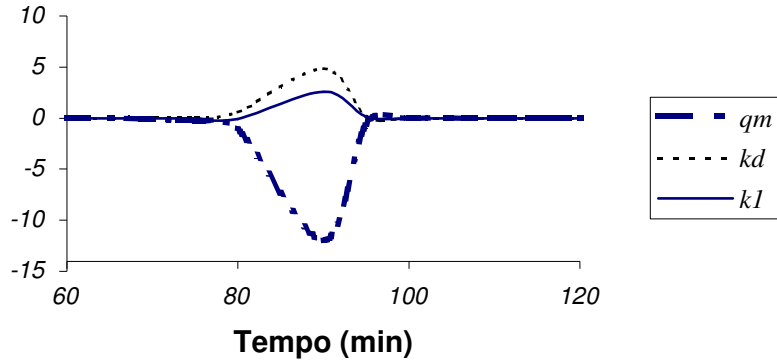


Figura 4 – Variação dos coeficientes de sensibilidade com o tempo. (Caso 2)

A variação dos coeficientes de sensibilidade para o Caso 3 é apresentado na Fig 5,

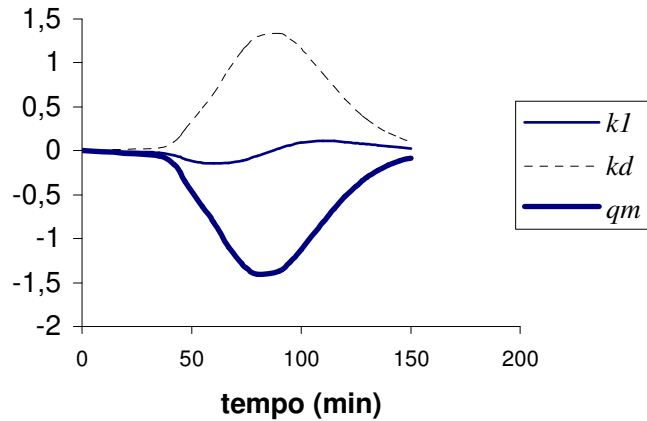


Figura 5 – Variação dos Coeficientes de sensibilidade com o tempo (Caso 3)

A Fig. 4 e a Fig. 5 mostram que a sensibilidade ao parâmetro  $k_1$  é bem pequena se comparada à dos outros dois parâmetros evidenciados  $k_d$ ,  $q_m$ .

Fazendo uma Análise Paramétrica para os valores obtidos no Caso 2 confirma-se o observado na Fig. 4; a sensibilidade à constante de adsorção  $k_1$  é pequena, isto fica evidenciado na Fig. 6 onde utilizando uma variação de 5 % nos valores de  $k_1$  as respectivas curvas de ruptura ficam praticamente inalteradas.

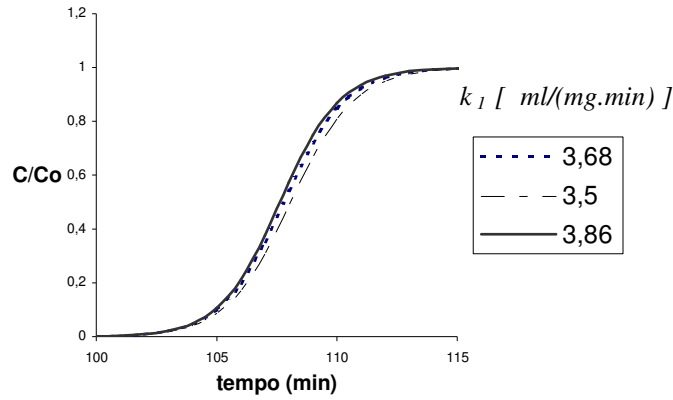


Figura 6 –Curvas de ruptura para diferentes valores da constante de adsorção

A Fig. 7 confirma que a sensibilidade à capacidade máxima de adsorção  $q_m$  é elevada conforme apresentado na Fig 4 pois uma variação de 5 % nos valores de  $q_m$  levam a curvas de ruptura com uma variação significativa.

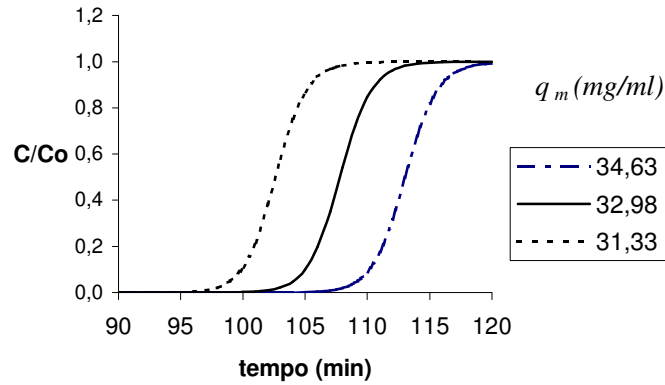


Figura 7 - Curvas de ruptura para diferentes valores da capacidade máxima de adsorção

A Fig. 8 confirma o observado na Fig. 4 de que a sensibilidade à constante de dissociação  $k_d$  no Caso 2 é maior do que aquela para  $k_1$  e significativamente inferior àquela para  $q_m$ . Para obter as curvas mostradas na Fig. 8 também foi realizada uma variação de  $\pm 5\%$  no parâmetro  $k_d$ .

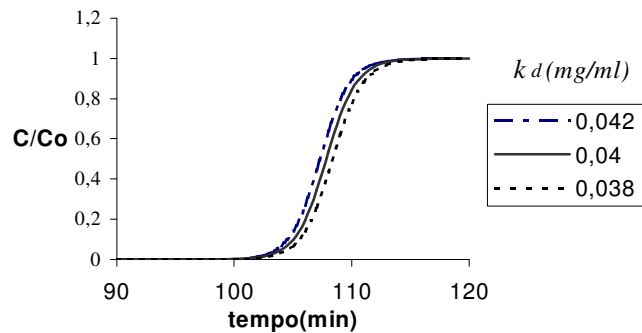


Figura 8 – Curvas de ruptura para diferentes valores da constante de dissociação

### 5.4 – Solução do Problema Inverso

Utilizando a rotina para resolução do problema inverso procurou-se determinar as variáveis  $k_d$ ,  $q_m$  visto que a sensibilidade ao parâmetro  $k_1$  é muito pequena.

É necessário fornecer ao programa estimativas iniciais dos parâmetros a serem encontrados. Foram aqui utilizados os valores encontrados nos trabalhos de Chase (1884), Pereira (1999) e Silva (2000).

Uma vez que ocorreram mínimos locais, foram realizadas diversas corridas do programa visando encontrar o menor valor para o somatório do resíduo dos mínimos quadrados  $Q(\vec{Z})$ .

Para o Caso 1 foram obtidas as estimativas apresentadas na Tab. 3:

Tabela 3 – Valores dos parâmetros da cinética de adsorção obtidos pela solução do problema inverso.

	$k_d$ (mg / ml)	$q_m$ (mg / ml)
Problema inverso	0,029	14
Chase (1984)	0,025	14

O valor de  $k_1$  foi considerado fixo em 0,2 ml/mg . min.

A Fig 9 mostra as curvas de ruptura obtidas: experimentalmente (Chase, 1984), com o modelo de Chase (1984) e com a solução do problema inverso.

A Fig 10 mostra as isotermas de adsorção relativas ao Caso 1.

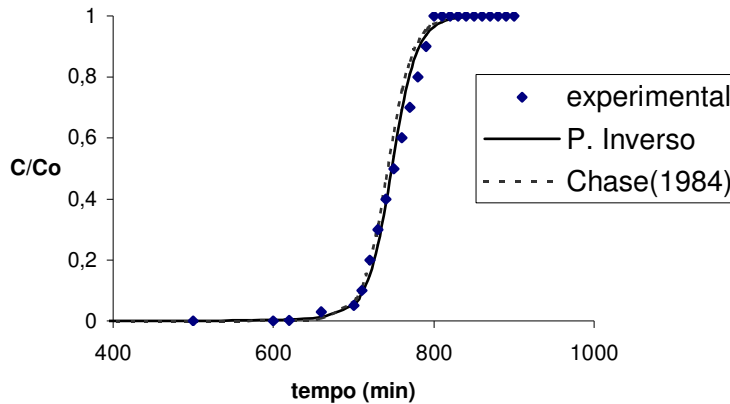


Figura 9 – Curvas de ruptura para a Lisozima – Caso 1

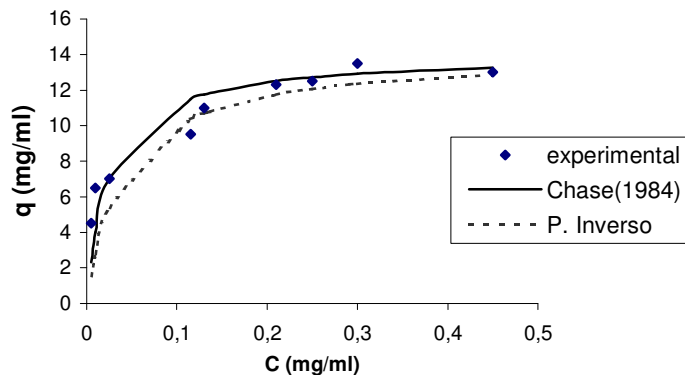


Figura 10 – Isotermas de adsorção para a Lisozima (Caso 1)



Para o Caso 2 foram encontrados os valores mostrados na Tab. 4, após realizar diversas corridas procurando um ajuste para o parâmetro  $k_1$  que forneceram o menor valor para  $Q(\vec{Z})$ . O valor de  $k_1$  ficou então em 3,0 ml/mg . min.

Tabela 4 – Valores dos parâmetros da cinética de adsorção obtidos pela solução do problema inverso.

	$k_d$ (mg / ml)	$q_m$ (mg / ml)
Problema inverso	0,123	33
Pereira (1999)	0,04	32,98

A divergência encontrada para os valores de  $k_d$ , evidenciada na Tab. 4, mostra que neste caso o fator de dispersão axial não deve ser desprezado.

A Fig. 11 mostra uma comparação entre as curvas de ruptura construídas considerando os valores obtidos por Pereira (1999), aqueles obtidos pela aplicação do Problema inverso e os dados experimentais.

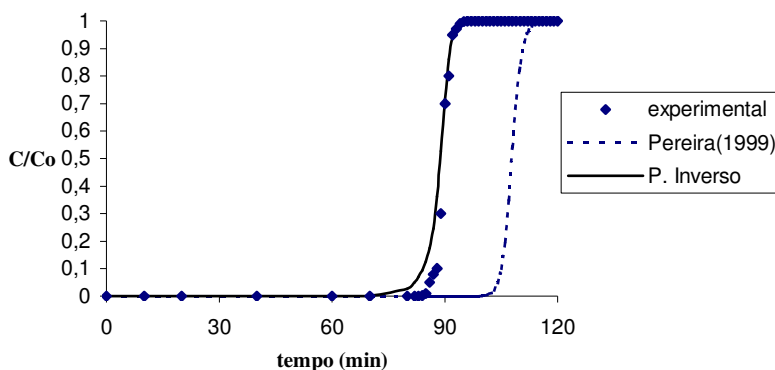


Figura 11 – Curvas de ruptura – para  $\beta$ -Galactosidase (Caso 2)

A curva obtida a partir dos valores gerados pelo uso do problema inverso se adapta muito bem àquela gerada pelos dados experimentais enquanto a curva gerada pelo método da construção das isotermas realizado por Pereira (1999) apresenta um tempo de retenção maior. Os parâmetros encontrados por Pereira (1999) apresentam uma curva de ruptura bem ajustada quando utilizado o modelo completo, vide Eq. (3), que considera a influência da dispersão axial.

A Fig 12 mostra uma comparação das isotermas de Langmuir também geradas a partir de valores experimentais, valores calculados pelas estimativas obtidas na solução do problema inverso e valores obtidos por Pereira (1999) através do ajuste da isoterma.

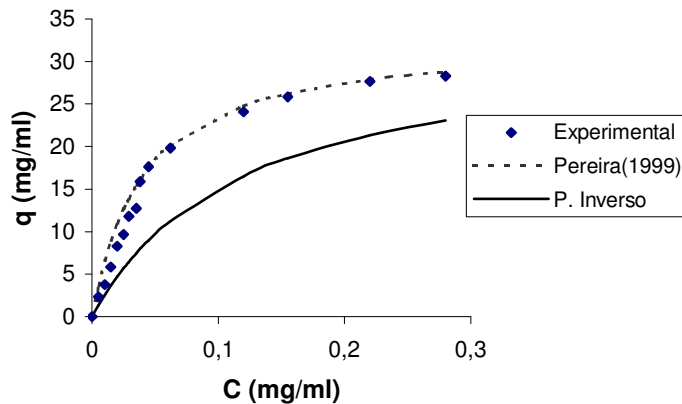


Figura 12 – Isotermas de adsorção – para a  $\beta$ -Galactosidase (Caso 2)

Observa-se neste caso que a curva gerada pelo problema inverso não se adequou perfeitamente aos valores experimentais devido ao método de Thomas utilizado se basear em um modelo simplificado que considera o fator de dispersão axial desprezível.

Aplicando a rotina computacional ao Caso 3 com os dados experimentais obtidos por Silva (2000) obteve-se os valores mostrados na Tab. 5,

Tabela 5 – Valores dos parâmetros da cinética de adsorção obtidos pela solução do problema inverso

	$k_d$ (UA / ml)	$q_m$ (UA / ml . g)
Problema inverso	253,77	5002,87
Silva (2000)	94,80	4165,69

A constante de adsorção  $k_1$  considerada neste caso teve seu valor determinado em 0,001 ml. / UA. min após diversas rodadas para encontrar o menor valor para  $Q(\vec{z})$ .

Da mesma forma que na Tab. 4 , encontramos divergência entre dados obtidos mostrando que neste caso a influência da dispersão axial também não deve ser desprezada.

A Fig. 13 mostra as Curvas de Ruptura construídas considerando: os dados experimentais (Silva, 2000), os parâmetros calculados no problema inverso e pelos parâmetros obtidos por Silva (2000) utilizando o modelo de Thomas (vide Eq 4 a 7).

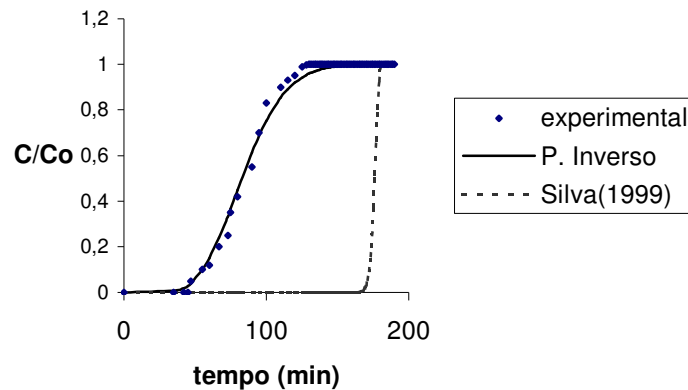


Figura 13 – Curvas de ruptura para inulinases (Caso 3)

Neste caso a curva de ruptura obtida utilizando os valores dos parâmetros encontrados por Silva (2000) não se ajustou bem aos valores experimentais, embora ele tenha obtido um ajuste adequado quando considerou o modelo completo, vide Eq. (3) que não despreza o fator de dispersão axial.

A Fig. 14 destaca mais uma vez um distanciamento dos valores obtido pelo problema inverso usando o método de Thomas e os valores medidos experimentalmente na construção das isotermas.

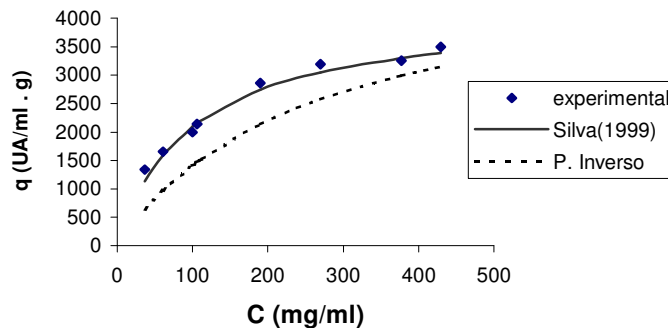


Figura 14 – Isotermas de adsorção para inulinases (Caso 3)

A tabela 6 mostra os valores da constante de dessorção  $k_2$  calculados a partir dos valores obtidos de  $k_d$  e  $k_1$  vide Eq. (1).

Tabela 6 – Valores para as constantes de dessorção

Caso	$k_2$ (min. <sup>-1</sup> )	
	Valores calculados a partir dos dados dos Autores	Valores calculados a partir dos dados do problema inverso
Chase(1984)	0,005	0,006
Pereira (1999)	0,147	0,369
Silva (2000)	0,474	0,254

## 6 – Conclusões

Do trabalho realizado conclui-se que:

- A resolução do Problema inverso utilizando o método de Thomas não requer maiores esforços computacionais.
- Uma grande vantagem da utilização do Problema inverso na estimativa dos parâmetros físico-químicos é um menor esforço experimental em relação a outros métodos característicos principalmente quando os substratos a serem trabalhados são de custo elevado.
- Os valores dos parâmetros obtidos utilizando o método de Thomas apresentaram consistência quando o valor da constante de dissociação é menor que  $10^{-2}$ , pois nestes casos a influência da dispersão axial pode ser desprezada (vide Fig 9 e 10 e Tab. 6).
- De forma a tratar problemas em que a dispersão axial não pode ser desprezada (vide Figs. 11 a 14), será necessária uma extensão a este trabalho visando desenvolver rotinas computacionais para a aplicação de um problema inverso considerando o modelo completo apresentado na Eq. (3).

## 7- Lista de Referências

- Azevedo, D.C.S., 2001, "Separation/Reaction in Simulated Moving Bed", Tese de doutorado, Universidade do Porto.
- Chase, H.A., 1984, "Prediction of the performance of preparative affinity chromatography", 1984, Journal of Chromatography, 297, pp. 179-202.
- Cidade, G.A.G., Anteneodo, C., Roberty, Nilson C., 2000, "A generalized approach for the atomic force microscopy image restoration with bregman distances as Tikhonov regularization terms", Inverse problems in engineering , 8, pp. 457-472
- Dünnebier, G; Fricke, J; Klatt K.U., 2000, "Optimal design and operation of Simulated Moving Bed Chromatographic Reactors", Ind. Eng. Chem. Res, 39, pp. 2290-2304.
- Haag j; Wouwer A.; Lehoucq S; Saucedo P., 2001, "Modeling and simulation of a SMB chromatographic process designed for enantioseparation", Control Eng. Practice, 9, pp. 921-928.
- Langmuir, I., 1916, "The constitution and fundamental properties of solids and liquids", Journal of American Society, 38, pp. 2263-2295.
- Marquardt, D.W., 1963, "An algorithm for least-squares estimation of non linear parameters", J. Soc. Industrial Applied Math., 11, pp. 431-441.
- Minceva M., Rodríguez A.E., 2002, "Modeling and Simulation of a Simulated Moving Bed for the separation of p-Xylene", Industrial Engineering Chemistry Research, 41, pp. 3454-3461.
- Pereira, J.A.M., 1999, "Adsorção de beta-galactosidase de *Scopulariopsis* sp. Em resina trocadora de íons objetivando a purificação e a ampliação de escala.", Tese de doutorado, Universidade de Campinas – SP
- Santana, C.C., Azevedo, D.C.S., Rodrigues, A.E., 2003, "Cromatografia Contínua em leito móvel Simulado", Cap. 10 do livro Separação de Produtos na Indústria Biotecnológica, em impressão.
- Silva, F.R.C., 2000, "Estudo da adsorção de inulinases em colunas com resinas de troca iônica: parâmetros experimentais e modelagem", Tese de doutorado, Universidade de Campinas – SP
- Silva Jr. I.J., 2003, "Estudo cinético e de equilíbrio na separação cromatográfica dos enantiômeros da cetamina em triacetato de celulose microcristalina", Tese de mestrado, Universidade de Campinas – SP.
- Silva Neto. A.J.; Moura Neto, F.D., 1999, "Escolha de modelos – Problemas Inversos em Engenharia", Notas de aula do mini curso técnico, XII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional – CNMAC, Santos -SP
- Fricke J., 2003, "A new method supporting the design of simulated moving bed chromatographic reactors", Chem. Engineering and Processing, 42, pp. 237-248.
- Thomas, H., 1944, "Heterogeneous ion exchange in flowing system", Journal of American Society, 66, pp. 1664-1668
- Vasconcellos, J.F.V., Silva Neto, A.J., Santana, C.C., Soeiro, F.J.C.P., 2002, "Parameter estimation in solid-liquid adsorption with a stochastic global optimization method", 4th International Conference on Inverse Problems in Engineering, Rio de Janeiro , Brasil.

- Wang, J., Siva Neto, A.J., Moura Neto, F.D., Su, J., 2002, "Function estimation with Alivanov's regularization method in linear and nonlinear heat conduction problems", Applied Mathematical Modeling, 26, pp. 1093-1111
- Xie Y., Sungyong M., Kim J., Nien-Hwa Wang L., 2002, "Standing Wave Design and Experimental Validation of a Tandem Simulated Moving Bed Process for Insulin Purification", Biotechnology. Progress, 18, pp. 1332-1344.

## AN INVERSE MASS TRANSFER PROBLEM FOR ADSORPTION COLUMNS CHARACTERIZATION

### **Flavio Moraes Folly**

Instituto Politécnico – IPRJ Universidade do Estado do Rio de Janeiro -UERJ, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil  
[flaviofolly@ig.com.br](mailto:flaviofolly@ig.com.br)

### **Antônio J. Silva Neto**

Instituto Politécnico – IPRJ Universidade do Estado do Rio de Janeiro -UERJ, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil  
[ajsneto@iprj.uerj.br](mailto:ajsneto@iprj.uerj.br)

### **César Costapinto Santana**

Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6066, CEP 13081-970, Campinas, SP, Brasil  
[santana@feq.unicamp.br](mailto:santana@feq.unicamp.br)

**Abstract.** This work presents the formulation and solution of an inverse problem for the determination of physico-chemical parameters in order to characterize adsorption columns. In the direct problem formulation the Thomas model is used, and it provides good results for the cases in which axial dispersion is not relevant. An implicit formulation is used for the inverse problem in which we look for the minimization of the functional of squared residues between calculated and measured values of the solute concentration at the exit of the adsorption column. Results are presented for a few test cases as well as comparisons with results available in the literature.

*Keywords: Inverse Problems, Adsorption, Mass Transfer, Computational modeling.*