

Simulação Direta e Inversa em Transporte de Massa - Adsorção de Biomoléculas em Leitos de Resina

Ana Paula Curty Cuco¹, Antônio J. Silva Neto² e João Flávio V. Vasconcellos³

Instituto Politécnico, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ

CP 97282, 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil

¹lema_ana@iprj.uerj.br, ²ajsneto@iprj.uerj.br, ³jflavio@iprj.uerj.br

Neste trabalho são utilizadas técnicas de problema inverso para determinar alguns parâmetros presentes nas equações diferenciais que governam o processo de adsorção de biomoléculas em leitos de resinas [1,2].

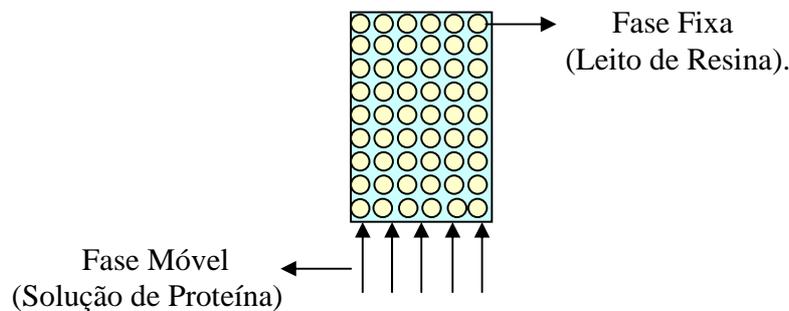


Figura 1: Coluna de adsorção (solução de proteína e resina adsorvente).

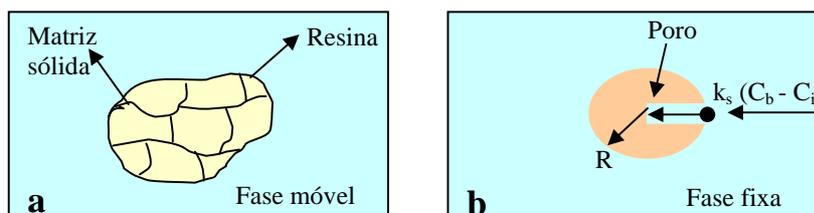


Figura 2: Processo de adsorção sólido-líquido com aplicações em processos biotecnológicos.(a) Representação da partícula de resina (matriz sólida). (b) Representação da transferência de massa da solução para a superfície da resina, e do processo de difusão no interior dos poros da resina.

Os fenômenos de transferência de massa nas fases líquida (solução de proteína) e sólida (resina) são modeladas pelas seguintes equações [3].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{3(1-\varepsilon_b)}{R \varepsilon_b} k_s (c - c_i|_{r=R}) - u \frac{\partial c}{\partial z} \quad (\text{fase líquida}) \quad (1)$$

$$\varepsilon_p \frac{\partial c_i}{\partial t} + \rho_s \frac{\partial q}{\partial t} = D_{eff} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial c_i}{\partial r} \right] \right] \quad (\text{fase sólida}) \quad (2)$$

Com as respectivas condições iniciais e de contorno, onde k_s é o coeficiente de transferência de massa, De_{eff} é a difusividade efetiva do soluto na partícula e R é o raio da partícula, ε_p é a porosidade da partícula, ρ_s é a densidade da partícula, u é a velocidade superficial do fluido, C_i = concentração do soluto no adsorvente, $c(z,t)$ é a concentração do adsorvato, ε_b é a porosidade da coluna de adsorção e t é o tempo.

É aqui empregado o método de volumes finitos para a discretização das equações diferenciais e simular o que se denomina problema direto [3]. Para os casos em que o coeficiente de dispersão axial é extremamente reduzido tem-se uma solução analítica denominada Método de Thomas [4].

O problema inverso é formulado como um problema de minimização, ou seja, busca-se determinar os coeficientes da equação diferencial que minimizem a diferença entre os resultados experimentais e os numéricos. Para este problema de minimização optou-se pelo uso de algoritmos genéticos, que com uma implementação adequada, levam a uma boa aproximação do mínimo global da função a ser minimizada

$$Q = Q(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^{N_d} [C_{calc_i}(\vec{Z}) - C_{med_i}]^2 \quad (3)$$

onde C_{calc} e C_{med} representam respectivamente valores calculados e valores medidos para a concentração na fase móvel, \vec{Z} é o vetor que contém as incógnitas do problema, e N_d é o número total de dados experimentais.

O problema aqui descrito já foi resolvido com métodos determinísticos[1- 4]. A contribuição do trabalho que se encontra em andamento consiste na implementação de um método estocástico. No futuro poderão ser usadas técnicas híbridas combinando métodos determinísticos e estocásticos [5].

REFERÊNCIAS

- [1] Vasconcellos, J. F. V., Silva Neto, A. J. e Santana, C. C., “An inverse mass transfer problem in chromatography systems”, *Inverse Problems in Engineering Symposium*, College Station, EUA (2001).
- [2] Vasconcellos, J. F. V., Silva Neto, A. J. e Santana, C. C., “An Inverse Problem for the Estimation of the Diffusion Coefficient and Adsorption Isotherm in Chromatography”, *XVI Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Uberlândia, Brazil (2001). (in Portuguese)
- [3] Mendes, M. C. S., “Simulação de Adsorção de Proteína em uma Coluna de Cromatografia.”, Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico, UERJ, 2004.
- [4] Folly, F. M., “Um Problema Inverso de Transferência de Massa para a Caracterização de Colunas de Adsorção de Leitos Móveis Simulados Visando Aplicações em Biotecnologia”, Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico, UERJ, 2004.
- [5] Silva Neto, A. J. e Soeiro, F. J. C. P., “Solution of Implicitly Formulated Inverse Heat Transfer Problems with Hybrid Methods, Mini- Symposium Inverse Problems from Thermal/Fluids and Solid Mechanics Applications- 2nd MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Cambridge, EUA, 2003.