

## USO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA A SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM COLUNAS DE ADSORÇÃO

Ana Paula C. Cuco<sup>1</sup>, Antônio J. Silva Neto<sup>2</sup>, Francisco J. C. P. Soeiro<sup>3</sup> e Carlos Alberto Fialho Thompson Leite<sup>4</sup>

Instituto Politécnico, IPRJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ,  
Caixa Postal 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ

E-mail: <sup>1</sup>lema\_ana@iprj.uerj.br, <sup>2</sup>ajsneto@iprj.uerj.br, <sup>3</sup>soeiro@uerj.br, <sup>4</sup>cthompson@iprj.uerj.br

### Introdução

O fenômeno de adsorção de bio-moléculas em leitos de resinas tem sido objeto de intensa atividade de pesquisa tanto do ponto de vista teórico quanto experimental devido a diversas aplicações relevantes nas indústrias farmacêutica e de alimentos.

### Objetivos

De forma a permitir a otimização de processos bem como a passagem da escala de laboratório para a escala piloto e/ou de produção industrial, faz-se necessário o conhecimento dos mecanismos de transferência de massa que ocorrem nas colunas de adsorção sólido-líquido.

Nos modelos matemáticos desenvolvidos para estudo destes fenômenos estão sempre presentes parâmetros físico-químicos ou de processo. O objetivo deste trabalho consiste, portanto, em estimar parâmetros a partir de dados experimentais da concentração na saída da coluna, i. e. a partir das curvas de ruptura.

### Metodologia

Descrevendo genericamente, o processo de adsorção em resinas funciona da seguinte forma: faz-se um fluido passar por uma matriz porosa que tem como característica principal poder atrair ionicamente algum dos componentes presentes naquele fluido. Este componente é atraído e adsorvido pela matriz porosa. Desta forma ocorre a diminuição do nível de concentração deste componente no fluido e o aumento da sua concentração na matriz porosa. Este processo é contínuo e cessa quando a concentração do componente na matriz atinge um valor de saturação, i.e., um máximo permitido.

Para a simulação deste problema é necessário resolver um conjunto de duas equações diferenciais acopladas, uma para a fase líquida

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

onde  $\varepsilon_b$  é a porosidade do leito,  $k_s$  é o coeficiente de transferência de massa,  $c$  é a concentração final de proteína,  $c_i$  é a concentração inicial (experimental) de proteína,  $R$ , o raio da partícula,  $u$  é a velocidade e  $D_L$  é o coeficiente de difusão ao longo da coluna, e outra para a difusão do componente de interesse no interior dos poros da resina

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

onde  $\varepsilon_p$  é a porosidade da partícula,  $\rho_s$  é densidade das partículas adsorventes,  $q$  é a concentração de proteína na partícula sólida, e  $D_{eff}$  é o coeficiente de difusão no interior da partícula.

As Eqs. (1) e (2) representam os modelos dos fenômenos de transferência de massa nas fases móvel e fixa, respectivamente.

A primeira descreve o decaimento da concentração do componente no fluido (depleção). A outra descreve o aumento da concentração até a saturação da concentração do componente na matriz porosa.

Desenvolvido o algoritmo que descreve o comportamento da concentração de um componente no escoamento (Folly, 2004, Mendes, 2004), pode-se ajustar os coeficientes presentes nas equações diferenciais de forma que a solução numérica se aproxime ainda mais dos dados obtidos experimentalmente, utilizando técnicas de problema inverso com uma formulação implícita, algoritmos genéticos (Goldberg, 1989, Molei e Mazucco, 2003) e redes neurais de múltiplas camadas (MLP) treinada com algoritmo de retropropagação (Soeiro et al., 2004). A função objetivo a ser minimizada é:

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

onde  $C_{calc}$  e  $C_{med}$  representam respectivamente valores calculados e valores medidos para a concentração na fase móvel na saída da coluna de adsorção em função do tempo, e  $N_d$  é o número total de dados experimentais.

## Resultados

Até o presente momento foi implementada a solução do problema direto com o algoritmo de Thomas, e conforme pode ser visto na Fig. 1, foi obtida uma boa concordância com os dados experimentais (Silva et al., 1999). Também já foi iniciada a implementação da solução do problema inverso com algoritmos genéticos e redes neurais.

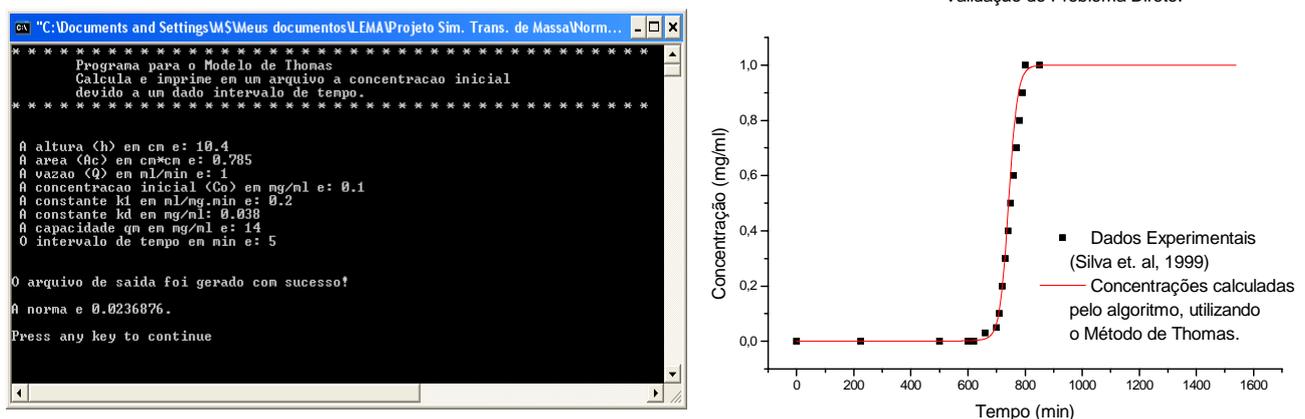


Figura 1- Tela da interface do programa desenvolvido para a solução do problema direto com o modelo de Thomas e validação do resultado.

## Referências

- 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.
- Goldberg, D.E. “Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning” Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts, 1989.
- Mendes, M. C. S., “Simulação de Adsorção de Proteína em uma Coluna de Cromatografia.”, Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico, UERJ, 2004.
- Molei, V. L. D. e Mazucco, J. J. “Algoritmos Genéticos — Uma Abordagem Paralela Baseada em Populações Cooperantes”, III Congresso Brasileiro de Computação – CBCComp, CEFET,PR, Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, 2003.
- Silva, F. R. C., Pereira, J. A. M., Araújo, M. D. e Santana, C. C., “Mass Transfer Parameters Evaluation in Protein Adsorption on Macroporous Resin”, Hungarian Journal of Industrial Chemistry, Vol. 27, pp.183-187, 1999.
- Soeiro, F. J. C. P., Soares, P. O. e Silva Neto, A. J., “Solution of Inverse Radiative Transfer Problems with Artificial Neural Networks and Hybrid Methods”, 13<sup>th</sup> Inverse Problems in Engineering Seminar, pp. 163-169, Cincinnati, EUA, 2004.