

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

A.L.J. BIHAIN<sup>1</sup>, 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. CÂMARA<sup>2</sup>, 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 NETO<sup>3</sup>, 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

---

<sup>1</sup>aluis@iprj.uerj.br;

<sup>2</sup>dcamara@iprj.uerj.br;

<sup>3</sup>ajsneto@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,  $\varepsilon$  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  $\xi$  que se movem ao longo da coluna com a mesma velocidade do fluxo do eluente, conforme pode ser observado na figura 1.

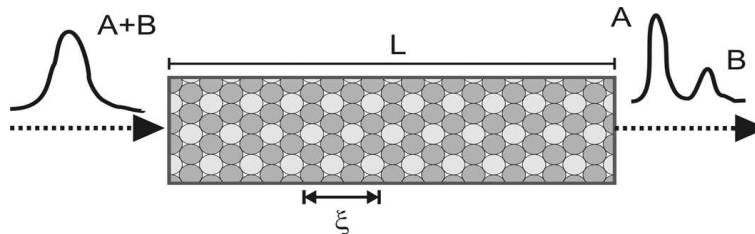


Figura 1: Representação da coluna cromatográfica.

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.

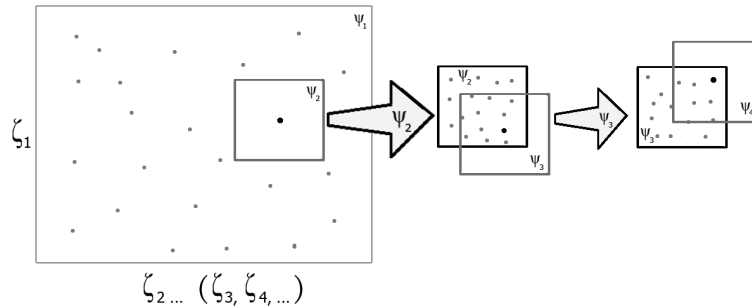


Figura 2: Representação esquemática do algoritmo *R2W*.

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 ( $\zeta$ ) 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  $\zeta_{iL}$  e  $\zeta_{iH}$  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  $\zeta_i$ , 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  $\Psi_1$ , como pode ser visto na figura 2, uma nova fase de buscas  $\Psi_2$  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 ( $\delta$ ) através das relações (2.6) e (2.7), onde  $\zeta_i^*$  corresponde à melhor solução para o parâmetro  $i$  encontrado na fase anterior  $\Psi_1$ .

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

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

Na busca por uma solução melhor uma terceira fase  $\Psi_3$  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.

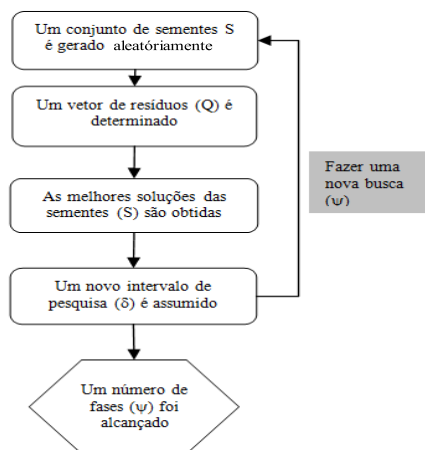


Figura 3: Diagrama representativo do algoritmo  $R2W$ .

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.

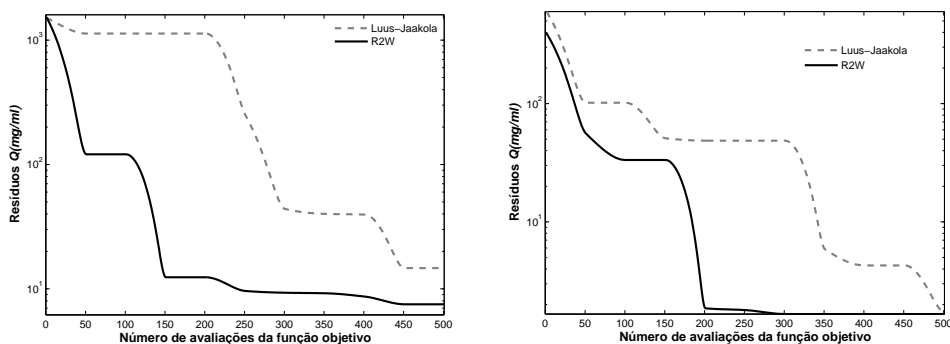
A critério de comparação, o algoritmo Luus-Jaakola também foi utilizado na solução do problema inverso. Os resíduos e os valores ótimos dos parâmetros de transferência de massa  $k_{ads}$  e  $k_{des}$  da equação 2.2 obtidos pelos algoritmos  $R2W$  e Luus-Jaakola podem ser observados na tabela 1. Para 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).

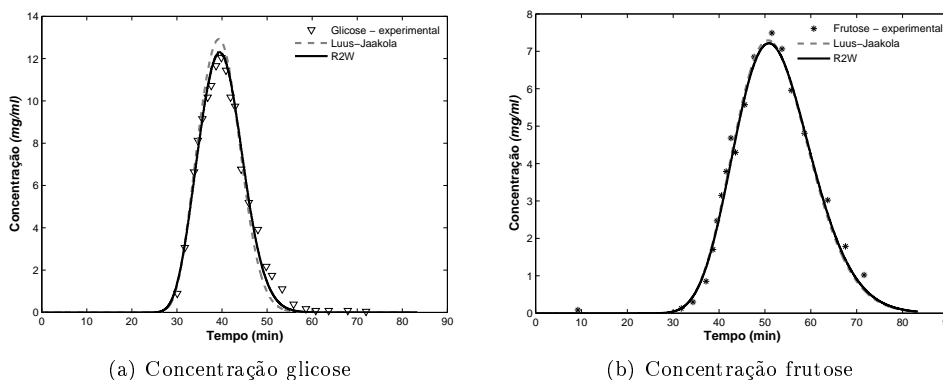


Figura 5: Comparação dos dados experimentais da concentração da glicose 5(a) e frutose 5(b) no soluto [1] com os valores calculados.

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.

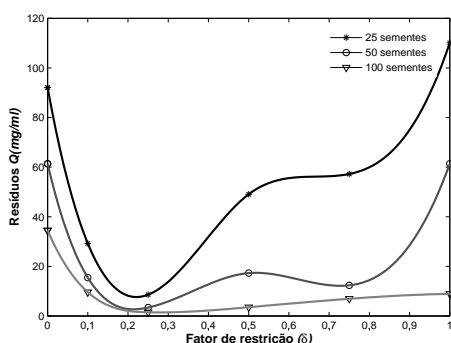
Na figura 6 estão representados os estudos das avaliações dos parâmetros de controle do método problema inverso aplicado no problema direto para a simulação da separação cromatográfica da glicose. Os resultados foram obtidos através de uma média de 3 simulações independentes do algoritmo R2W.

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.

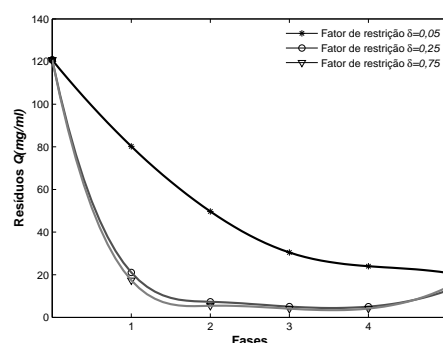
Na figura 6(b) pode ser observado que se existe a necessidade de se encontrar uma solução refinada, o ideal é usar um fator de restrição menor, porém é necessário um número relativamente elevado de fases para se chegar ao resultado. Já com um fator de restrição maior existe a possibilidade de se chegar 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





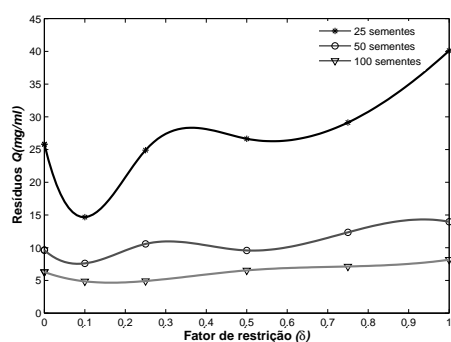
(a) Influência do número de sementes ( $S$ ) e do fator de restrição ( $\delta$ )



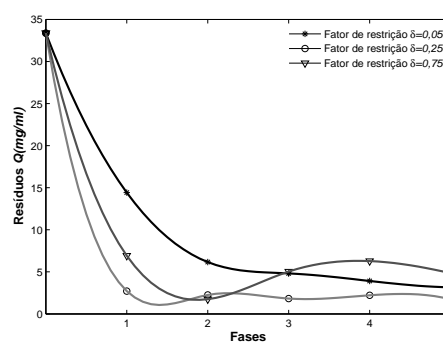
(b) Influência do fator de restrição ( $\delta$ ) e do número de fases

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 ( $\delta$ )



(b) Influência do fator de restrição ( $\delta$ ) 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 6(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.