

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
COORDENÇÃO DO CURSO DE ENGENHARIA TÊXTIL
ENGENHARIA TÊXTIL**

STÉFANIE CAROLINE PEREIRA DEKKER

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DIFUSÃO DE
CORANTES EM FIBRAS TÊXTEIS E ESTIMATIVA DO COEFICIENTE
DE DIFUSÃO MÁSSICA VIA ALGORITMO GENÉTICO**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

APUCARANA

2018

STÉFANIE CAROLINE PEREIRA DEKKER

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DIFUSÃO DE
CORANTES EM FIBRAS TÊXTEIS E ESTIMATIVA DO COEFICIENTE
DE DIFUSÃO MÁSSICA VIA ALGORITMO GENÉTICO**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado como requisito à obtenção
do título de Bacharel em Engenharia
Têxtil, da Universidade Tecnológica
Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Gylles Ricardo
Ströher

APUCARANA

2018

Ministério da Educação
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Campus Apucarana
COENT – Coordenação do curso superior em Engenharia Têxtil

TERMO DE APROVAÇÃO

Título do Trabalho de Conclusão de Curso:
Modelagem e simulação do processo de difusão de corantes em fibras têxteis e estimativa do coeficiente de difusão mássica via algoritmo genético

Por

STÉFANIE CAROLINE PEREIRA DEKKER

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi apresentado aos doze dias do mês de junho do ano de dois mil e dezoito, às quinze horas, como requisito parcial para a obtenção do título de bacharel em Engenharia Têxtil do curso de Engenharia Têxtil da UTFPR – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. A candidata foi arguida pela banca examinadora composta pelos professores abaixo assinado. Após deliberação, a banca examinadora considerou o trabalho aprovado.

PROFESSOR(A) GYLLES RICARDO STROHER – ORIENTADOR

PROFESSOR (A) GISELY LUZIA STROHER – EXAMINADOR(A)

PROFESSOR(A) FABRÍCIO MAESTÁ BEZERRA – EXAMINADOR(A)

*A Folha de aprovação assinada encontra-se na Coordenação do Curso.

RESUMO

DEKKER, Stéfanie Caroline Pereira. **Modelagem e simulação do processo de difusão de corantes em fibras têxteis e estimativa do coeficiente de difusão mássica via algoritmo genético**. 2017. 46 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Engenharia Têxtil, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, 2018.

O presente trabalho estudou a difusão de corante em fibras têxteis utilizando-se uma metodologia teórica. O processo de difusão do corante na fibra foi modelado por meio da segunda Lei de Fick da difusão, em coordenadas cilíndricas para o caso unidimensional em regime não estacionário. A solução do modelo matemático foi obtida via solução analítica. Adicionalmente, por meio de uma otimização de uma função objetivo, utilizando-se o método de mínimos quadrados, foi estimado o coeficiente de difusividade mássica efetivo do processo de tingimento, nesta etapa foi utilizado a meta-heurística de algoritmos genéticos. Foi realizado, inicialmente, uma breve avaliação da implementação da solução analítica e da implementação do algoritmo genético para familiarização com as ferramentas e, por fim, um ajuste teórico – experimental para determinação do coeficiente de difusão. A partir dos resultados obtidos pode-se concluir que o modelo utilizado descreve adequadamente o processo de tingimento, o algoritmo genético mostrou-se uma ferramenta robusta e que tende a solucionar problemas em que métodos convencionais ou determinísticos podem falhar e os coeficientes de difusão encontrados no presente trabalho proveram resíduos menores dos que os coeficientes encontrados na literatura.

Palavras-chave: Difusão mássica, tingimento, modelagem matemática, algoritmo genético.

ABSTRACT

DEKKER, Stéfanie Caroline Pereira. **Modeling and simulation of the dye diffusion process in textile fibers and the mass diffusion coefficient estimation via genetic algorithm.** 2017. 46 pages. Textile Engineering Dissertation – Federal Technological University of Paraná, Apucarana, 2018.

This work studied the diffusion of dye in textile fibers using a theoretical methodology. The diffusion of dye in fiber was modeled by the second Fick's Law of diffusion in cylindrical coordinates for the unidimensional case in steady state regime. The solution of the mathematical model was obtained by analytical solution. Furthermore, the effective mass diffusivity coefficient of the dyeing process was estimated by means of an optimization of an objective function, using the least squares method. In order to optimize the function, it was used a kind of meta-heuristic, the genetic algorithm. At first, it was carried out a brief evaluation of the implementation of the analytical solution and the implementation of the genetic algorithm in order to understand the tools. And then a theoretical - experimental adjust was made to determine the diffusion coefficient. Thus, it can be concluded that the dyeing process can be well described by means of analytical solution, the genetic algorithm has proved to be a robust tool that tends to solve problems in which conventional or deterministic methods can fail and the diffusion coefficients found in this work provided smaller residuals than the coefficients found in the literature.

Keywords: Mass diffusion, dyeing, mathematical modeling, genetic algorithm.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Fases do tingimento	12
Figura 2: Etapas do tingimento.....	13
Figura 3: Mecanismo do algoritmo genético.....	16
Figura 4: Inicialização da população	17
Figura 5: Representação da seleção por roleta.....	18
Figura 6: Operador <i>crossover</i>	19
Figura 7: Mecanismo de mutação	20
Figura 8: Avaliação da solução analítica	24
Figura 9: Função unidimensional avaliada	25
Figura 10: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.....	26
Figura 11: Função bidimensional avaliada	28
Figura 12: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.....	29
Figura 13: Função tridimensional avaliada	31
Figura 14: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.....	32
Figura 15: Determinação do coeficiente de difusão do Caso A: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	36
Figura 16: Determinação do coeficiente de difusão do Caso B: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	36
Figura 17: Determinação do coeficiente de difusão do Caso C: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	37
Figura 18: Determinação do coeficiente de difusão do Caso D: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	38
Figura 19: Determinação do coeficiente de difusão do Caso E: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	38
Figura 20: Determinação do coeficiente de difusão do Caso F: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	38
Figura 21: Determinação do coeficiente de difusão do Caso G: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.	39

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros avaliados do A.G.....	22
Tabela 2: Características das fibras.	34
Tabela 3: Comparativo de resultados Vidart (2013) e o Presente Trabalho.....	34
Tabela 4: Comparativo de resultados Moraes (2010) e o Presente Trabalho.	35

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	8
1.1 OBJETIVOS.....	8
1.1.1 Objetivo Geral.....	8
1.1.2 Objetivos Específicos.....	9
2 REFERENCIAL TEÓRICO	10
2.1 PROCESSO DO TINGIMENTO	10
2.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DIFUSÃO	14
2.3 ALGORITMO META-HEURÍSTICO PARA OTIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES OBJETIVO.....	15
2.3.1 Algoritmo genético	16
3 METODOLOGIA.....	21
3.1 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO.....	21
3.1.1 Solução analítica.....	21
3.2 ALGORITMO GENÉTICO	22
3.3 DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO MÁSSICA	23
3.4 IMPLEMENTAÇÃO	23
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	24
4.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA	24
4.2 ALGORITMOS GENÉTICOS	25
4.2.1. Função Unidimensional.....	25
4.2.2. Função Bidimensional	28
4.2.3. Função tridimensional	31
4.2.4. Função de Mínimos Quadrados	34
4.3 DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO	34
5 CONCLUSÃO.....	40
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	42
ANEXO A-RAÍZES DA EQUAÇÃO 8	46

1 INTRODUÇÃO

A Indústria têxtil do tingimento é responsável por uma grande parte da poluição de corpos hídricos (GUARATINI; ZANONI, 1999), isso ocorre, pois, os processos necessitam de uma grande quantidade de água limpa e o efluente possui presença de altas cargas residuais de corantes e auxiliares de processamento (KHATRI *et al.*, 2015).

Dessa maneira, um dos grandes desafios da indústria têxtil tem sido a busca por processos de tingimento mais sustentáveis que visam maior economia de água e diminuição da geração de efluentes (XIAO *et al.*, 2017). Para tal, as indústrias têxteis têm buscado aperfeiçoar seus equipamentos, processos e produtos (MELO, 2005).

De acordo com a teoria de difusão mássica, o corante é conduzido para o tecido devido principalmente a diferença da concentração entre banho e tecido. Reddy *et al.* (1995) acredita que o mecanismo que limita a transferência de corante da solução de tingimento para um tecido é a difusão. Ferus-Comelo (2002) explica que isso ocorre porque a etapa de difusão é a mais lenta do processo de tingimento e, portanto, determina a velocidade global do processo.

Neste contexto, torna-se interessante o aprimoramento da compreensão do processo de difusão mássica em um tecido. Dessa forma, o presente trabalho irá modelar o processo de difusão mássica de corante em uma fibra de geometria cilíndrica e assim, por meio de simulações numéricas, determinar a solução das equações do modelo matemático.

1.1 OBJETIVOS

Fundamentado pelo tema proposto, são estabelecidos os objetivos deste trabalho.

1.1.1 *Objetivo Geral*

Avaliar o processo de difusão mássica de corantes em fibras têxteis por meio de modelagem matemática e de simulações numéricas e determinar o coeficiente de difusão mássica por meio de algoritmo genético.

1.1.2 *Objetivos Específicos*

- Definir o modelo matemático unidimensional e em regime não permanente;
- Definir condições de contorno;
- Definir condição inicial;
- Obter a solução analítica do modelo matemático;
- Estimar o coeficiente de difusividade mássica do modelo de transferência de massa por meio de uma função objetivo e de programação via algoritmo genético.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste capítulo será apresentado o referencial teórico acerca do processo de difusão mássica de corantes em fibras têxteis, serão apresentados o processo de tingimento, modelagem matemática da difusão, e o algoritmo meta-heurístico para a determinação do coeficiente de difusão mássica.

2.1 PROCESSO DO TINGIMENTO

O tingimento de substratos têxteis vem sendo praticado pelo homem por muitos séculos (SALEM, 2010), sendo o primeiro registro encontrado na China com data de 2600 a.C. (PEZZOLO, 2007). Inicialmente o processo começou de modo empírico (SALEM, 2010) e utilizando corantes derivados de folhas, ramos, raízes, frutos ou flores de várias plantas e de substâncias extraídas de animais (GUARATINI; ZANONI, 1999).

A utilização de corante natural é uma tarefa complexa que contempla várias etapas, dentro delas a obtenção dos extratos dos materiais colorantes, a aplicação de mordente para a fixação da cor e o tingimento propriamente dito (PEZZOLO, 2007). Existem vários tipos de mordente, são eles, cinzas vegetais, alúmen, tártato, urina, ferrugem, vinagre, etc e eles podem ser aplicados antes, durante ou após o tingimento propriamente dito (PEZZOLO, 2007). A grande variabilidade do processo resulta em inúmeros problemas de tingimento, tais como má reprodutibilidade e má solidez (SALEM, 2010).

Ao acaso, Perkin, em 1856, revolucionou a química dos corantes por meio da síntese do primeiro corante sintético, a malveína (SALEM, 2010). O corante de cor violeta muito viva foi resultado da tentativa de sintetizar o quinino por oxidação da anilina com bicromato de potássio (SALEM, 2010). Esse acontecimento despertou atenção e estimulou outros químicos a realizarem experimentos parecidos (CLARK, 2011). Nos cem anos seguintes, foram sintetizados milhares de corantes em laboratórios dentro dos quais cerca de 1500 tiveram aplicação industrial (FIADEIRO, 1993).

Os corantes sintéticos são compostos orgânicos que possuem vários grupos funcionais e a cor é dada devido o deslocamento de elétrons em estados excitados

das ligações químicas (ALVES, 2015). Os cromóforos são os grupos químicos responsáveis pela cor, os auxocromos, pela intensidade do brilho (MORAES, 2010) e os solubilizantes, pelo grau de solubilidade do corante (SALEM, 2010). Os corantes são compostos que dão cor ao material por meio da retenção seletiva da luz em comprimentos de onda definidos (ALVES, 2015).

Os corantes podem ser classificados de acordo com a sua estrutura química como azo, antraquinona, nitrofenol, vinilsulfônico, triazina, entre outros ou de acordo com sua aplicação como direto, reativo, sulfuroso, a tina, básico, catiônico, ácido, disperso (GUARATINI; ZANONI, 1999; SALEM, 2010).

Segundo Salem (2010) e Alves (2015) as propriedades necessárias para os corantes usados na indústria têxtil são:

- Cor intensa;
- Afinidade¹;
- Solubilidade em água;
- Fixação²;
- Solidez³.

O atual processo de tingimento consiste em várias etapas. Essas etapas são escolhidas a partir do tipo de fibra têxtil que se deseja tingir e também do tipo de corante utilizado para o processo. Além disso, leva-se em consideração a destinação final do produto e os custos de processamento (GUARATINI; ZANONI, 1999).

Os principais requisitos de um tingimento eficiente são: boa uniformidade de cor e boa penetração do corante para que a ligação corante-fibra desenvolvida seja estável e possua boa resistência e solidez suficiente para impedir que o corante saia durante o uso dos artigos, por exemplo, durante as lavagens domésticas (ALVES, 2015).

O objetivo do tingimento é dar aos artigos têxteis um aspecto mais agradável, agregar valor e responder as necessidades da moda (ALVES, 2015). Define-se tingimento como uma alteração físico-química do substrato, por meio de corantes, de modo que a luz refletida provoque uma percepção de cor (SALEM, 2010). Outra

¹ Força de atração entre o corante e o substrato.

² Corante que permanece na fibra após todas etapas de tingimento.

³ Permanência da cor na fibra.

definição é a aplicação de cor no o substrato têxtil de forma que possua durabilidade e uniformidade de cor (LADCHUMANANANDASIVAM, 2008).

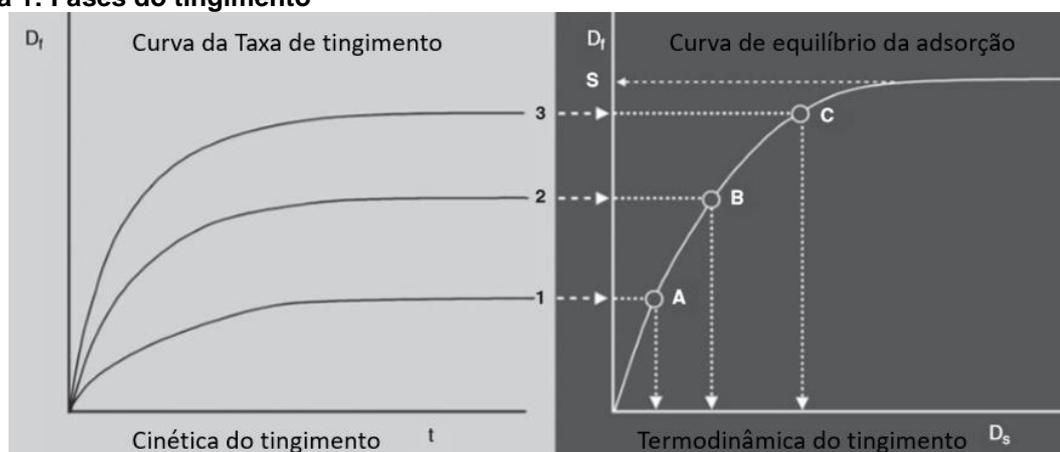
Existem dois tipos de processo de aplicação de corante, os chamados de descontínuo ou por esgotamento e de contínuo ou por foulardagem.

O processo de tingimento descontínuo se caracteriza pela utilização de equipamentos em que o substrato fique em constante contato com a solução de tingimento (VIDART, 2013) e o transporte da solução para a fibra é dado pela substantividade do corante (LANGE, 2004). Esse transporte acontece até que se atinja o equilíbrio ou até que a fibra sature (MORAES, 2010).

Já no processo contínuo a solução de corante é aplicada no material têxtil por impregnação, espremida mecanicamente e em seguida ocorre a fixação (SALEM, 2010). Nesse tipo de aplicação são utilizadas baixas relações de banho e não é necessário que o corante apresente substantividade, ou seja, não é necessário o deslocamento do corante da solução para a fibra uma vez que ocorre a ação mecânica de espremedura (SALEM, 2010).

Quanto ao estudo do mecanismo de tingimento no momento em que ele acontece, existem duas abordagens: (i) no equilíbrio e (ii) antes do equilíbrio. Na fase do equilíbrio estuda-se a termodinâmica do tingimento, no que diz respeito a fixação do corante. Já na fase cinética, que é a fase anterior ao equilíbrio, é estudado como o corante é levado até a fibra (BRUKINSHAW, 2016). A Figura 1 ilustra essas fases.

Figura 1: Fases do tingimento



Fonte: Adaptado de Brukinshaw, 2016.

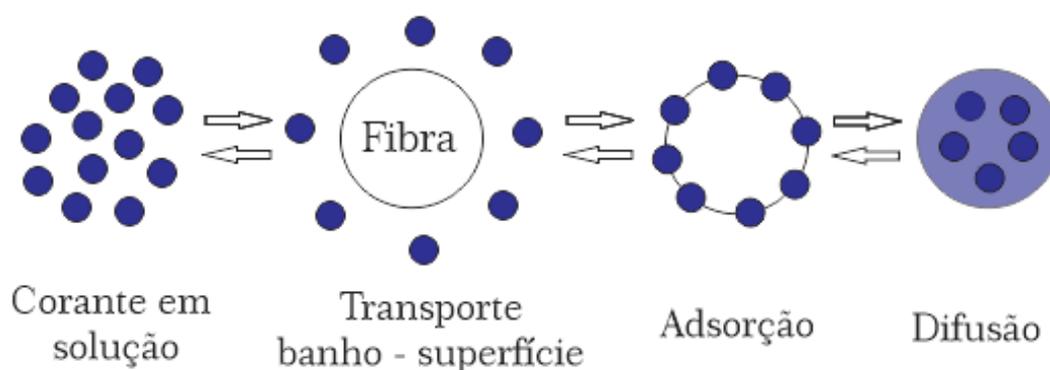
A cinética do tingimento estuda a velocidade de deslocamento do corante para a superfície da fibra, a velocidade de adsorção e de difusão do corante e a

influência do pH, da temperatura, e da concentração de corante e sais sobre essas velocidades (SALEM, 2010).

Já a etapa da termodinâmica estuda os fatores que motivam a fixação do corante, chamado de afinidade (SALEM, 2010).

Dentro da divisão das fases do tingimento, Segundo Vidart (2013) ainda existe a divisão do processo de tingimento em três etapas, (i) a migração de corante do banho de tingimento para a superfície do substrato têxtil, (ii) adsorção da molécula de corante na superfície do substrato e (iii) difusão de corante da superfície do substrato para seu interior e dependendo do corante uma etapa adicional que é a fixação. A Figura 2 ilustra essas etapas.

Figura 2: Etapas do tingimento



Fonte: Adaptado de Salem, 2010

Quando a fibra é imersa em um banho de tingimento, as moléculas de corante se movem da solução em direção a fibra, e a rapidez com que esse fenômeno ocorre depende da substantividade corante-fibra (BRUKINSHAW, 2016). A substantividade pode ser definida como a atração entre corante e fibra na qual resulta a adsorção de corante e dependendo tanto de propriedades físico-químicas das fibras e dos corantes quanto propriedades da solução como, por exemplo, agitação e temperatura (BRUKINSHAW, 2016).

Difusão é o processo no qual a matéria é transportada de uma parte do sistema para outra, devido movimento randômico das moléculas (CRANK, 1979). Assim, de acordo com a teoria de difusão mássica, o corante é conduzido para o tecido devido principalmente a diferença da concentração entre banho e tecido (REDDY *et al.*, 1995)

A quantidade de corante absorvido pelo tecido é chamada de esgotamento e é expressa como proporção da quantidade de corante presente no início do banho em relação a quantidade no final do processo (BRUKINSHAW, 2016).

2.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DA DIFUSÃO

Em 1885 Fick propôs seu famoso modelo de transferência de massa que supunha que a taxa de transferência de um componente através de uma unidade de área de um material é proporcional ao gradiente de concentração medido normal ao material (BRUKINSHAW, 2016). Assim, tem-se a primeira lei de Fick da difusão, representada pela Eq. (1), onde J é o fluxo de difusão, $\partial C^f / \partial x$ é o gradiente de concentração de corante na fibra e D é o coeficiente de difusão mássica e o sinal negativo é consequência do sentido do gradiente de concentração, que é oposto ao fluxo.

$$J = -D \frac{\partial C^f}{\partial x} \quad \text{Eq. (1)}$$

O processo de difusão, segundo Burkinshaw (2016), é descrito pelas leis de Fick. A primeira lei de Fick da difusão descreve a taxa de transferência em fluxo estacionário. No entanto, a primeira lei não descreve como a concentração do corante varia no tempo, mas para o tingimento essa propriedade é importante uma vez que durante o processo, a concentração do banho vai diminuindo enquanto que a concentração no substrato têxtil vai aumentando (BRUKINSHAW, 2016). A segunda lei de Fick da difusão representada pela Eq. (2) contorna este problema.

$$\frac{\partial C^f}{\partial t} = D \nabla^2 C^f \quad \text{Eq. (2)}$$

Que em coordenadas cilíndricas, para o caso unidimensional, é dada pela Eq. (3).

$$\frac{\partial C^f}{\partial t} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial C^f}{\partial r} + \frac{\partial^2 C^f}{\partial r^2} \right] \quad \text{Eq. (3)}$$

A Eq. (3) é uma equação diferencial parcial de duas variáveis e requer uma condição inicial e duas condições de contorno que definem a geometria do sistema e as condições físicas do tingimento (BRUKINSHAW, 2016). A condição inicial é dada pela Eq. (4) e as condições de contorno para a Eq. (3) são dadas pelas Eqs. (5) e (6).

$$C(r, 0) = 0 \quad \text{Eq. (4)}$$

De acordo com Ready *et al.* (1995), a primeira condição de contorno considera que não há fluxo de massa no centro da fibra, assim:

$$\left. \frac{\partial C^f}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad \text{Eq. (5)}$$

E a condição de contorno para a superfície da fibra é dada pela Eq. (6).

$$L \left. \frac{\partial C^s}{\partial r} \right|_{r=R} = DAN \left. \frac{\partial C^f}{\partial r} \right|_{r=R} \quad \text{Eq. (6)}$$

em que, L é a relação de banho, C^s é a concentração de corante na solução, A é a área de superfície da fibra, N é o número de cilindros e R o raio da fibra.

2.3 ALGORITMO META-HEURÍSTICO PARA OTIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES OBJETIVO

Existem equações em que métodos exatos para soluções de problemas não são viáveis e dessa forma os métodos meta-heurísticos tentam encontrar soluções boas em um tempo computacional viável (NETO, 2016).

Meta-heurísticas são métodos de solução que utilizam procedimentos capazes de escapar de mínimos locais e realizar uma busca robusta no espaço

complexo de soluções de um problema (GLOVER; KOCHENBERGER, 2003). Um exemplo de algoritmo de otimização meta-heurístico é o algoritmo genético.

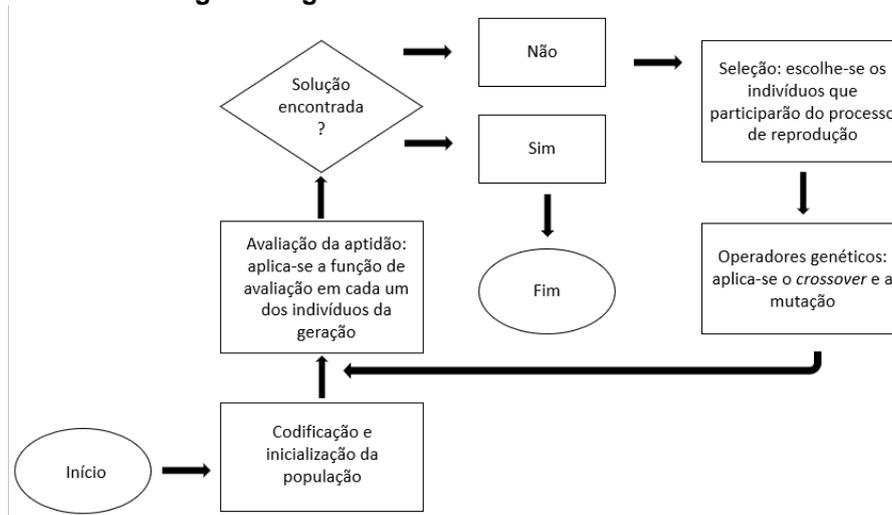
2.3.1 Algoritmo genético

Segundo Goldberg (1989) algoritmos genéticos (A.G.) são algoritmos de busca, computacionalmente simples, baseado na teoria de seleção natural e na genética. É uma heurística que tende a encontrar ótimas soluções ou ficar próximo delas (LINDEN,2012).

O algoritmo genético é um método no qual utiliza operadores probabilístico, ou seja, é um método não determinístico e por esse motivo, é considerado uma ferramenta robusta (BODENHOFER, 2003).

Os algoritmos genéticos, segundo Rosa e Luz (2009), atuam da seguinte maneira. Primeiro é gerado, de forma randômica, uma população constituída por um conjunto de indivíduos, ou seja, possíveis soluções para o problema. Durante o processo evolutivo, os indivíduos são avaliados quanto sua aptidão no ambiente. Uma porcentagem dos mais adaptados continuam e uma outra porcentagem é descartada. Os indivíduos que permanecem terão as características alteradas por meio da geração de filhos ou mutação. Esse mecanismo de avaliação, geração de filhos e mutação continua até que uma solução satisfatória seja encontrada. A Figura 3 ilustra o funcionamento do algoritmo genético.

Figura 3: Mecanismo do algoritmo genético



Fonte: Autor, 2018

Em geral um algoritmo genético é constituído por diversas etapas sendo elas inicialização, função aptidão, seleção, cruzamento, mutação, atualização e finalização (ROSA; LUZ, 2009).

Ainda existe uma etapa que antecede ou ocorre simultaneamente à inicialização que é a codificação. Essa etapa é necessária para traduzir a informação do problema para uma linguagem que o computador possa entender. Dessa forma, é necessário escolher adequadamente uma representação para os indivíduos da população. Segundo Zini (2009), a codificação mais utilizada é a binária, pois a aplicação dos operadores genéticos de recombinação e mutação são mais simples de serem empregadas (SOUZA, 2014).

A Inicialização do algoritmo é a criação da população inicial. Essa etapa é tipicamente feita por meio de funções aleatórias, pois visa fornecer maior biodiversidade (LUCAS, 2002). Um exemplo de inicialização de população pode ser visto na Figura 4.

Figura 4: Inicialização da população

População

0	0	0	1	0	0	0	1
0	1	0	0	0	0	0	1
0	0	1	1	0	0	1	1
0	1	0	1	0	1	0	0

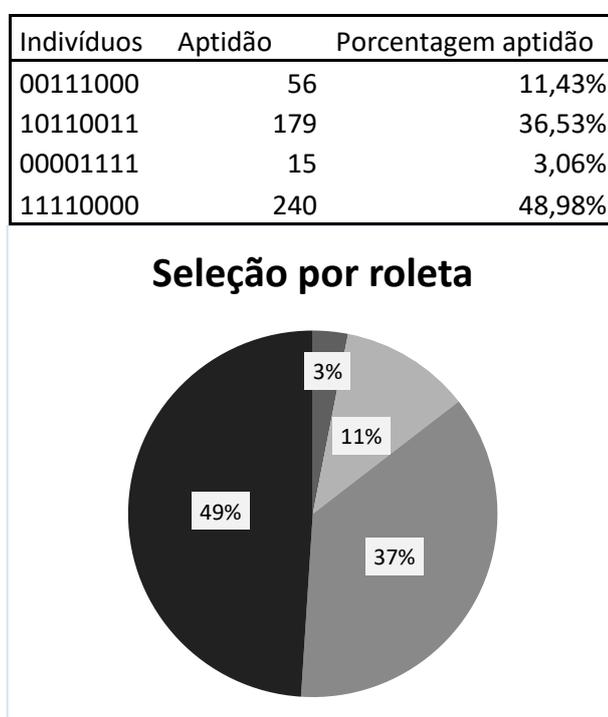
Fonte: Autor, 2018

Segundo Pozo *et al.* [s.d.], a avaliação da aptidão de cada indivíduo da população é calculada por meio de uma função objetivo. Essa é a etapa mais importante do A.G., pois mede o quão perto o indivíduo está da solução desejada (POZO *et al.* [s. d.]) e dessa maneira, aumenta ou reduz sua probabilidade de ser selecionado para a reprodução (CATARINA, 2009).

A finalidade da seleção é escolher os indivíduos que irão reproduzir. A realização dessa escolha deve ser feita de maneira que os indivíduos com maior

adaptabilidade possuem maiores chances de reprodução (CATARINA, 2009). Existem vários métodos de escolha, por roleta, por torneio, por dizimação, porém o mais utilizado é a roleta. Nesse método são atribuídas seções de uma roleta, proporcional a sua aptidão, a cada indivíduo da população, ou seja, quanto maior a aptidão, maior a seção da roleta. Dessa forma, cada vez que a roleta 'gira' ela escolherá um indivíduo apto a ir para a próxima geração. Esse esquema pode ser visto na Figura 5 em que é atribuído à uma população inicial, seções de uma roleta.

Figura 5: Representação da seleção por roleta



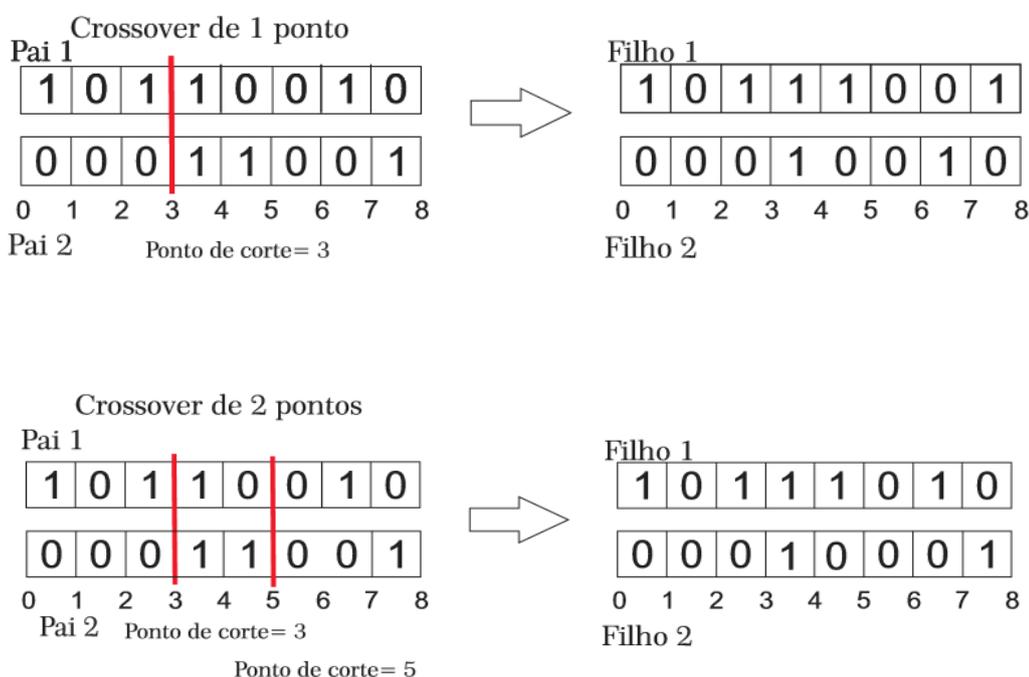
Fonte: Autor, 2018

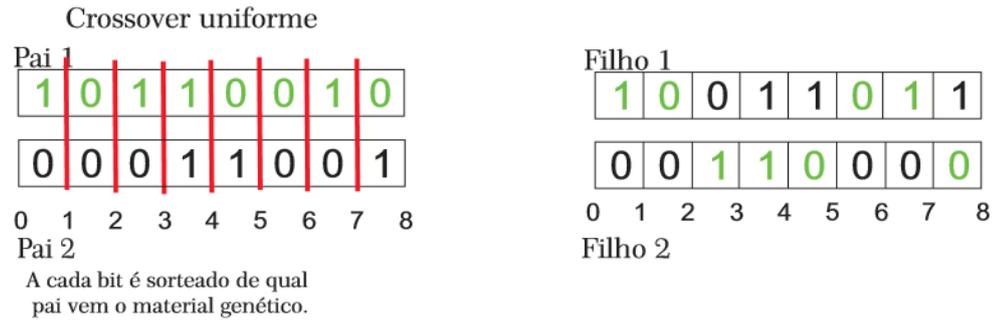
Na etapa da seleção também é possível a utilização da ferramenta de elitismo. Essa ferramenta garante que o melhor indivíduo de uma geração vá para a próxima geração fazendo com que a população inicial da nova geração já esteja bem adaptada, possibilitando uma convergência mais rápida do algoritmo (CATARINA, 2009). Mitchell (1999) ainda afirma que a ferramenta melhora o desempenho do A.G. uma vez que os melhores indivíduos podem ser perdidos durante o processo de *crossover* e mutação caso o algoritmo não possua o elitismo.

Após a seleção vem a etapa de cruzamento ou *crossover*, nessa etapa um par de cromossomos, chamados de pais, irão se recombinar e gerar novos indivíduos, os filhos, que formarão a próxima geração (ROSA; LUZ, 2009).

Existem vários tipos de operadores de cruzamento dos genes, os mais simples são os de um ponto, de dois pontos e o uniforme. O *crossover* de um ponto reparte os pais em um ponto de corte do *string*, selecionado de forma randômica, em duas partes e permuta uma delas para gerar o filho (BODENHOFER, 2003). O *crossover* de dois pontos reparte os pais em três partes e um dos filhos fica com a parte central de um dos pais e as partes externas do outro pai e vice-versa (POZO *et al.* [s.d.]). O *crossover* uniforme, de forma randômica, permuta cada *bit* do *string*, ou seja, seleciona se o filho 1 recebe o primeiro bit do pai 1 ou do pai 2 e o que não foi selecionado vai para o filho 2 e isso ocorre até os filhos possuam a mesma quantidade de bits que os pais (LUCAS, 2002). Os tipos de *crossover* estão representados na Figura 6.

Figura 6: Operador *crossover*

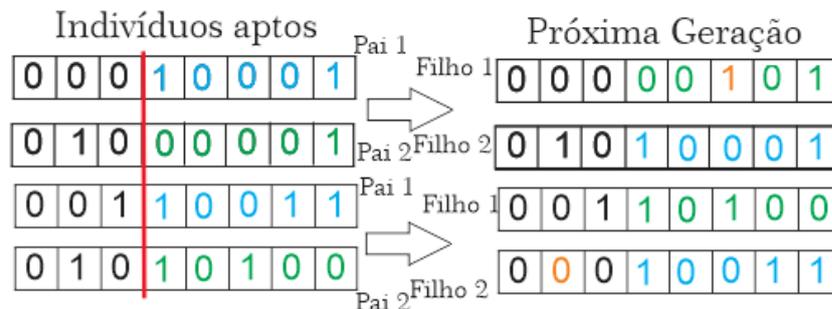




Fonte: Autor, 2018

A mutação segundo Carr (2014) é responsável por produzir diversidade e prevenir que o algoritmo encontre apenas um máximo local ao invés de um máximo global. Essa operação ocorre por meio da troca de bits do cromossomo ou indivíduo (MITCHELL, 1999). Contudo a mutação deve ocorrer com baixa probabilidade, pois pode levar a lentidão de convergência do algoritmo (CARR, 2014). O mecanismo da mutação está representado na Figura 7.

Figura 7: Mecanismo de mutação



Fonte: Autor, 2018

Na etapa de atualização, a população antiga é substituída pela nova população e essa segue para a próxima geração (ROSA; LUZ, 2009). Esse processo ocorre até que os critérios de parada sejam satisfeitos.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo será apresentado a metodologia adotada para avaliação do processo de difusão mássica de corantes em fibras têxteis, para a implementação e avaliação do algoritmo genético e para a determinação do coeficiente de difusão mássico.

3.1 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Para a resolução da Eq. (3), afim de determinar a concentração de corante na fibra ao longo do tempo, foi utilizado o método analítico.

3.1.1 Solução analítica

Na solução analítica para a Eq. (3) juntamente com as condições de contorno e inicial, Eqs. (4, 5, 6), é dada, segundo Reddy *et al.* (1995) e Crank (1979) pela Eq. (7), em que a quantidade total de soluto na fibra, M_t , após o tempo t é expressa como uma fração do valor correspondente M_∞ .

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\alpha(1 + \alpha)}{4 + 4\alpha + \alpha^2 q_n^2} \exp\left(-\frac{Dq_n^2 t}{a^2}\right) \quad \text{Eq. (7)}$$

em que q_n são as raízes positivas e não nulas da Eq. (8) e, no anexo A, são dados os seis primeiros q_n

$$\alpha q_n J_0(q_n) + 2J_1(q_n) = 0 \quad \text{Eq. (8)}$$

e $\alpha = \text{volume solução}/\text{volume cilindro} = V_{total}/\pi r^2 h n_{cilindros}$, $a = r =$ raio das fibras, $h =$ altura das fibras cilíndricas, $N =$ número de cilindros, $V_{total} =$ volume total da solução.

3.2 ALGORITMO GENÉTICO

Um algoritmo genético foi implementado tomando como base o proposto por Linden (2008), subseqüentemente, avaliou-se o desempenho do algoritmo para diversas funções objetivos. Foi escolhido funções multidimensionais com vários pontos de mínimos e máximos locais, representadas pelas Eq. (9), (10) e (11).

$$f(x) = |x \operatorname{sen}(x) + x \operatorname{cos}(2x)|, \quad 0 \leq x \leq 10 \quad \text{Eq. (9)}$$

$$f(x, y) = |20 + x^2 + y^2 - 10(\operatorname{cos}(2\pi x) + \operatorname{cos}(2\pi y))|, \quad -1 \leq x, y \leq 1 \quad \text{Eq. (10)}$$

$$f(x, y, z) = |x^2 + y^2 + z^2| - 5, \quad 1,2 \leq x, y, z \leq 5,12 \quad \text{Eq. (11)}$$

O algoritmo foi programado de maneira genérica o que possibilita a troca de parâmetros do AG, a saber: número de bits, número de indivíduos, tamanho da geração, tipo de *crossover*, presença de mutação, probabilidade de mutação e presença ou não de elitismo.

Dessa forma criou-se oito casos de conjunto de parâmetros do A.G. como mostrado na Tabela 1. Assim, foram avaliados a influência do tipo de *crossover* nos casos 1 a 3, a influência número de indivíduos nos casos 3 e 4, a influência da presença de mutação nos casos 3 e 5, a influência da probabilidade de mutação nos casos 5, 6 e 7 e a influência do elitismo nos casos 3 e 8. Sendo que os demais parâmetros foram fixados para cada caso.

Tabela 1: Parâmetros avaliados do A.G.

Caso	Número de Bits	Número de indivíduos	Tamanho da Geração	Tipo de Crossover	Mutação (%)	Elitismo
1	20	20	100	Um ponto	0,05	Habilitado
2	20	20	100	Dois pontos	0,05	Habilitado
3	20	20	100	Uniforme	0,05	Habilitado
4	20	60	100	Dois pontos	0,05	Habilitado
5	20	20	100	Dois pontos	0,01	Habilitado
6	20	20	100	Dois pontos	0,10	Habilitado
7	20	20	100	Dois pontos	0	Habilitado
8	20	20	100	Dois pontos	0,05	Desabilitado

Fonte: Autor, 2018

3.3 DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO MÁSSICA

O coeficiente de difusividade mássica foi estimado por meio do método de mínimos quadrados, sendo basicamente representado pela função objetivo descrito pela Eq. (12).

$$Resíduo = \sum_{i=1}^n (valor\ experimental - valor\ simulado)^2 \quad Eq. (12)$$

em que os valores experimentais foram obtidos da literatura e os valores simulados via solução analítica do modelo (Eqs. (3) a (6)).

A minimização da função objetivo proveu o coeficiente de difusividade mássica, sendo que esta minimização foi realizada utilizando-se a meta heurística de algoritmos genéticos descrito na seção 2.3.

3.4 IMPLEMENTAÇÃO

Para a execução do presente trabalho foi utilizado o ambiente de programação *Matlab*. Entretanto, é importante frisar, que não se fez uso do *toolbox* de equações diferenciais parciais, de otimização ou de funções de otimização disponíveis no *Matlab*, todas as soluções ou algoritmos necessários para o desenvolvimento do presente trabalho foram implementados pelo autor.

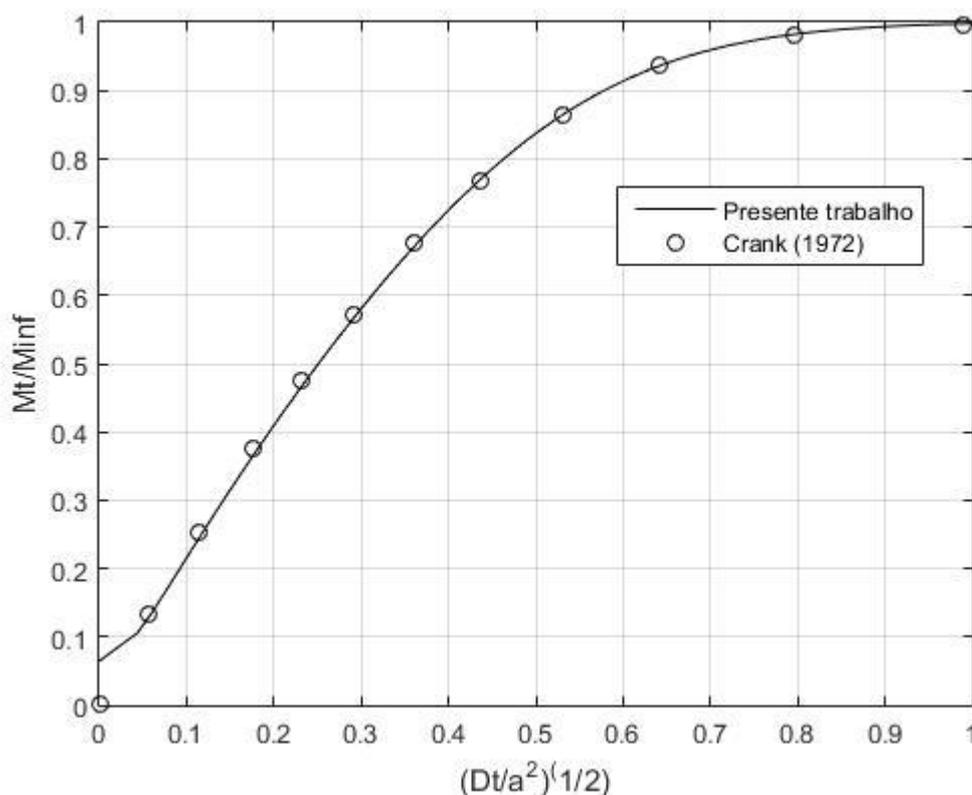
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para melhor apresentação dos resultados obtidos no presente trabalho optou-se em subdividir esta seção em Solução Analítica, Algoritmo Genético e Determinação do coeficiente de difusão.

4.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA

Foi implementado, segundo a seção 3.1, um código no qual determina a concentração teórica de corante na fibra ao longo do tempo. Dessa maneira, para a verificação do código implementado, comparou-se o perfil da razão M_t/M_∞ em função de $(Dt/a^2)^{1/2}$ obtidos com os dados disponíveis em Crank (1979).

Figura 8: Avaliação da solução analítica



Fonte: Autor, 2018

A Figura 8 indica que o código implementado para a solução analítica está coerente, uma vez que os valores obtidos no presente trabalho concordam com os

valores disponíveis em Crank (1972). Dessa forma, pode-se utilizar o código para as próximas análises.

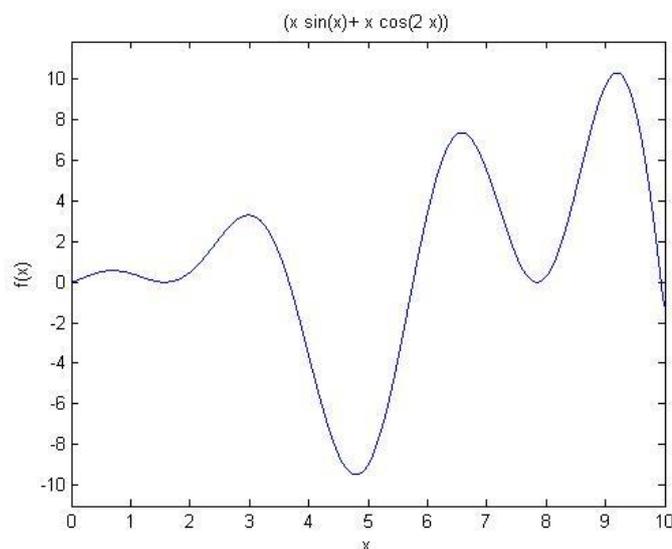
4.2 ALGORITMOS GENÉTICOS

Para avaliação da implementação do A.G. e também para familiarização dos parâmetros ajustáveis dos algoritmos genéticos, testou-se o mesmo para algumas funções multimodais.

4.2.1. Função Unidimensional

Com o intuito de compreender uma das finalidades principais dos algoritmos genéticos, a busca do máximo absoluto de funções, na Figura 9 é dado o gráfico da Eq. (9) sendo que o máximo absoluto é dado em $f(9,2041) = 10,3368$.

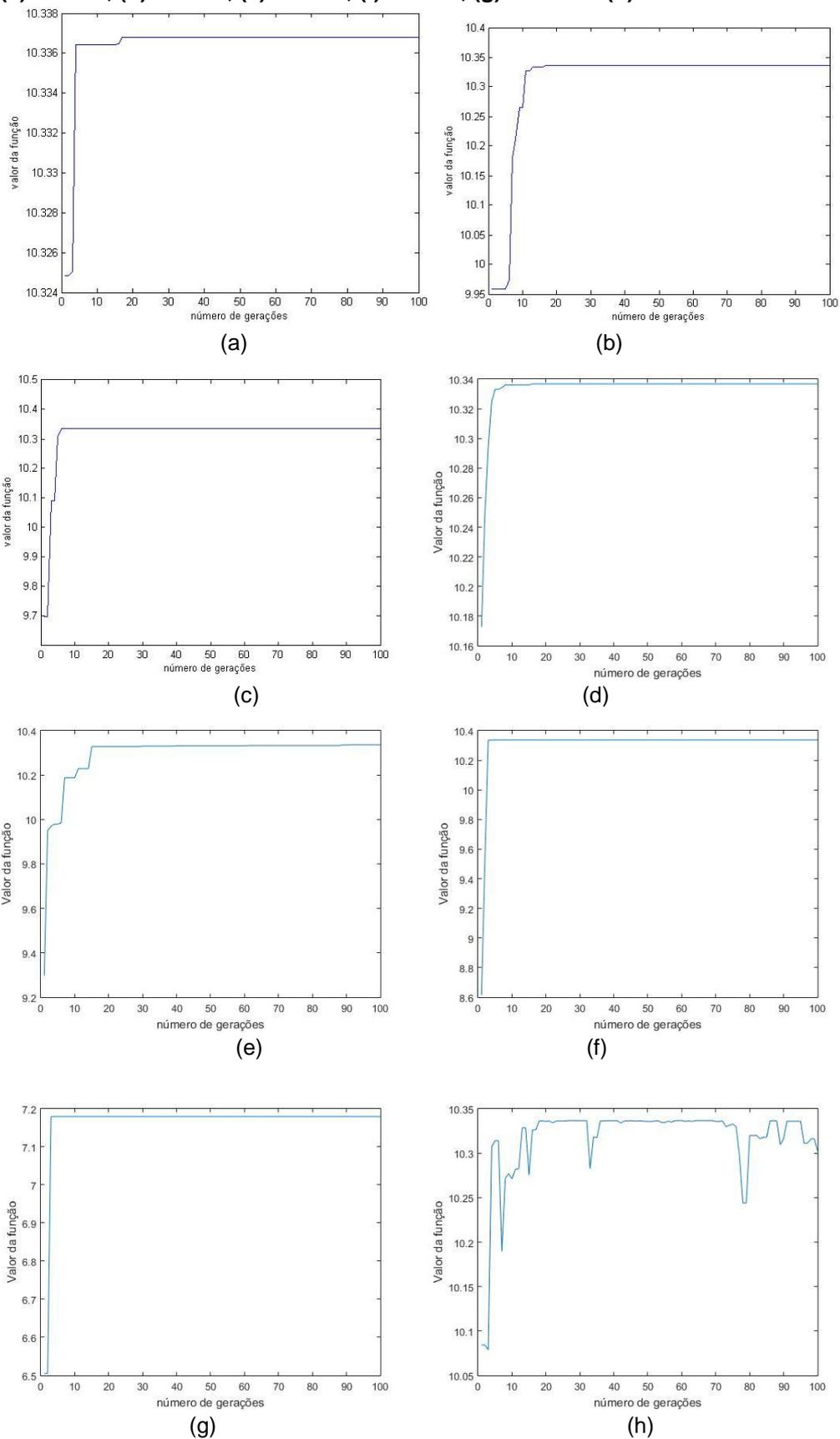
Figura 9: Função unidimensional avaliada



Fonte: Autor, 2018

O desempenho do algoritmo genético foi testado com os parâmetros indicados na Tabela 1. Os resultados para cada caso são mostrados nas Figuras 10 (a) a (h), nestas são dados os valores máximos da Eq. (9) obtidos em cada geração. É importante ressaltar que o algoritmo genético não é modelo determinístico. Dessa forma, cada vez que o programa for executado um novo histórico de gerações pode ser obtido.

Figura 10: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.



Fonte: Autor, 2018

Em relação à influência do tipo de *crossover*, as Figuras 10 (a), (b) e (c), indicam que o *crossover* uniforme, nas condições testadas, se mostrou mais eficiente, uma vez que em apenas 6 gerações foi determinado corretamente o ponto de máximo absoluto. Nota-se que com os outros dois *crossovers* testados foram necessários aproximadamente 2,6 vezes mais gerações, o que implica num tempo computacional maior. Isso pode ter ocorrido pois o *crossover* uniforme tende a alcançar resultados superiores graças a grande diversidade de combinação.

As Figuras 10 (b) e (d), comparam a influência do número de indivíduos, os resultados indicaram que o aumento do número de indivíduos das populações não favoreceu o processo de busca pelo melhor indivíduo, uma vez que ao aumentar o número de indivíduos resultou em um mesmo número de gerações necessárias para convergência do A.G. Tal comportamento não era esperado, pois com o aumento do número de indivíduos maior seriam as chances de ser gerado um superindivíduo.

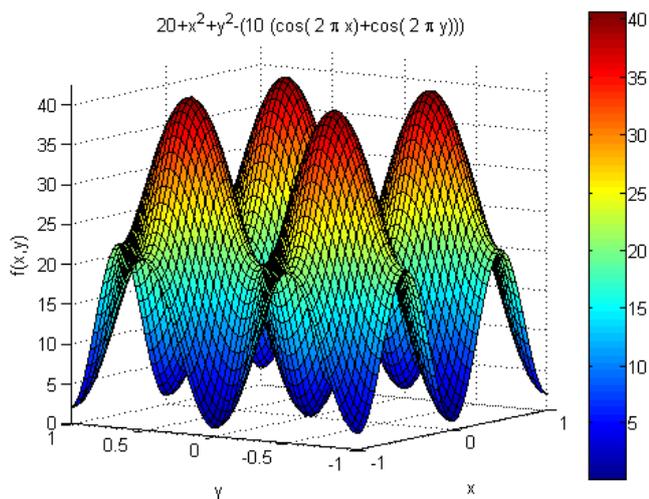
Quanto a influência da probabilidade de mutação, as Figuras 10 (e) e (f) mostraram que um leve aumento da porcentagem de mutação pode conduzir a uma busca mais rápida enquanto que uma leve diminuição da probabilidade de mutação pode levar a lentidão da convergência. Nas condições testadas, em apenas 4 gerações o caso 6 já encontrou o ponto de máximo global, no caso 5 foram necessárias 15 gerações e no caso 7 não encontrou o máximo global. Já a não utilização da probabilidade de mutação, observada na Figura 10 (g), pode levar a não maximização da função. O aumento da taxa de probabilidade de mutação deve ser feito de modo cauteloso, uma vez que uma alta probabilidade conduzirá numa busca aleatória, contudo, a não utilização da probabilidade de mutação pode levar o algoritmo a ficar preso em um máximo local devido a não introdução de novo material genético.

Com o operador de elitismo desabilitado, nota-se, por meio da Figura 10 (h), que a qualidade da otimização varia ao longo das gerações. Isso ocorre, pois, a ferramenta elitismo garante que o melhor indivíduo vá para as próximas gerações e assim garante que a qualidade das próximas gerações permaneça a mesma ou então aumentem. Dessa forma, essa característica se torna importante para determinar corretamente quando há convergência do algoritmo.

4.2.2. Função Bidimensional

O máximo absoluto da função pode ser visto na Figura 11 que representa graficamente a Eq. (10) sendo que o máximo absoluto é dado em $f(0.5026, 0.5024) = 40.5025$.

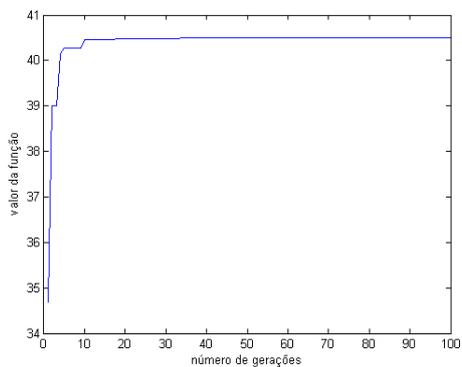
Figura 11: Função bidimensional avaliada



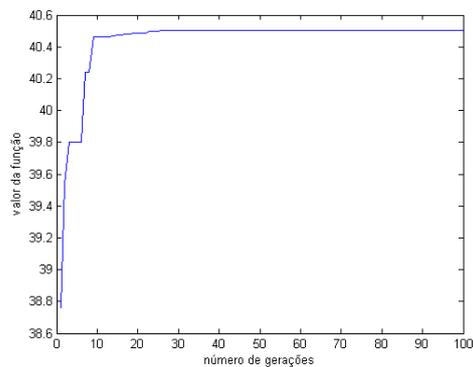
Fonte: Autor, 2018

O desempenho do algoritmo genético foi testado com os parâmetros indicados na Tabela 1. Os resultados para cada caso são mostrados nas Figuras 12 (a) a (h), nestas são dados os valores máximos da Eq. (10) obtidos em cada geração.

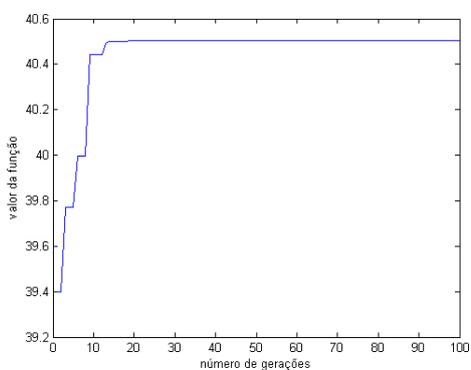
Figura 12: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.



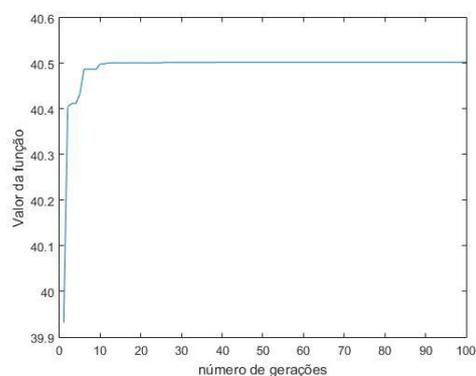
(a)



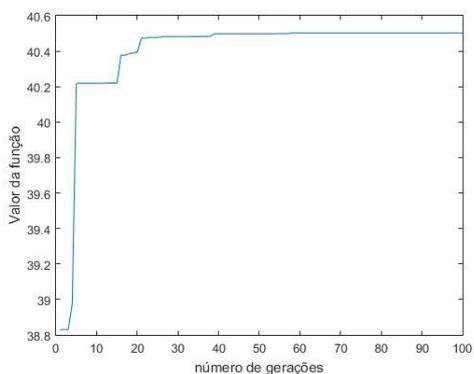
(b)



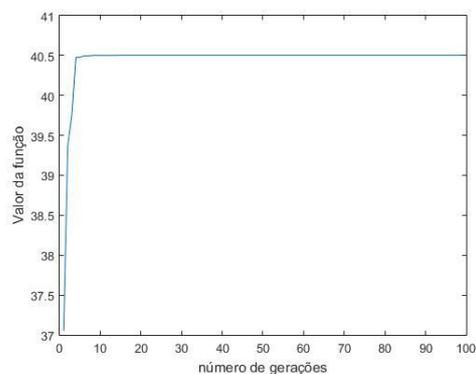
(c)



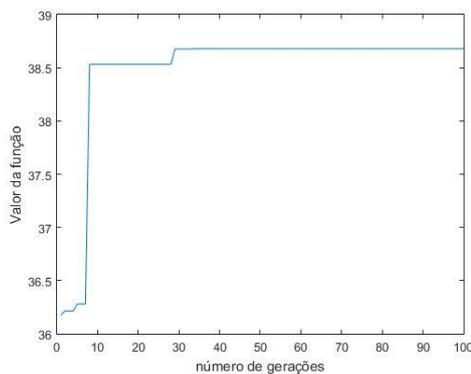
(d)



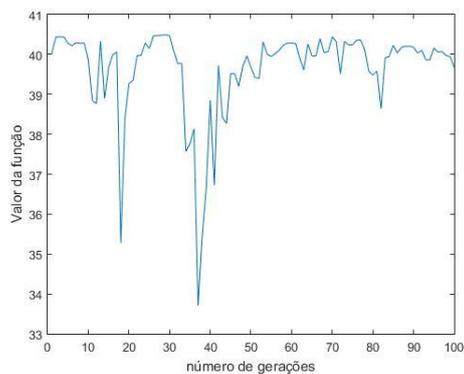
(e)



(f)



(g)



(h)

Fonte: Autor, 2018.

Em relação à influência do tipo de *crossover*, as Figuras 12 (a), (b) e (c), indicam que o *crossover* de dois pontos, nas condições testadas, se mostrou mais eficiente, uma vez que em apenas 26 gerações foi determinado corretamente o ponto de máximo absoluto enquanto que no *crossover* de 1 ponto, foram necessárias 33 gerações e o uniforme, 83. Nota-se que ao comparar o resultado do teste da influência do *crossover* utilizando a função objetivo unidimensional, com o utilizando a função objetivo bidimensional, o *crossover* uniforme no primeiro cenário implicou num tempo computacional maior do que o segundo cenário. Isso pode ter ocorrido pois o algoritmo genético não é um modelo determinístico além do fato do *crossover* de dois pontos ser mais rápido uma vez que existem menos sorteios por geração.

Para as Figuras 12 (b) e (d), foram comparadas a influência do número de indivíduos, os resultados indicaram que o aumento do número de indivíduos das populações favoreceu o processo de busca pelo melhor indivíduo, já que ao aumentar o número de indivíduos resultou em uma diminuição de 14 gerações necessárias para convergência do A.G. Tal comportamento era esperado, pois com o aumento do número de indivíduos maior são as chances de ser gerado um superindivíduo. Nota-se que com a função objetivo unidimensional tal acontecimento não foi observado. E novamente, isso pode ter ocorrido pois o algoritmo genético não é um modelo determinístico.

Quanto a influência da probabilidade de mutação, as Figuras 12 (e) e (f) mostraram que um leve aumento da porcentagem de mutação pode conduzir a uma busca mais rápida. Nas condições testadas, em apenas 8 gerações o caso 6 já encontrou o ponto de máximo global, enquanto que o caso 5 foram necessárias 57 gerações. Já em relação a não utilização da probabilidade de mutação, a Figura 12 (g) indica que o algoritmo não atingiu o máximo global pois em 100 gerações o valor da função é de aproximadamente 38,7. É interessante comentar que sem a ferramenta de mutação não ocorre a promoção de biodiversidade por meio de introdução de novo material genético, o que pode levar o algoritmo a ficar preso em um máximo local e não atingir o máximo global.

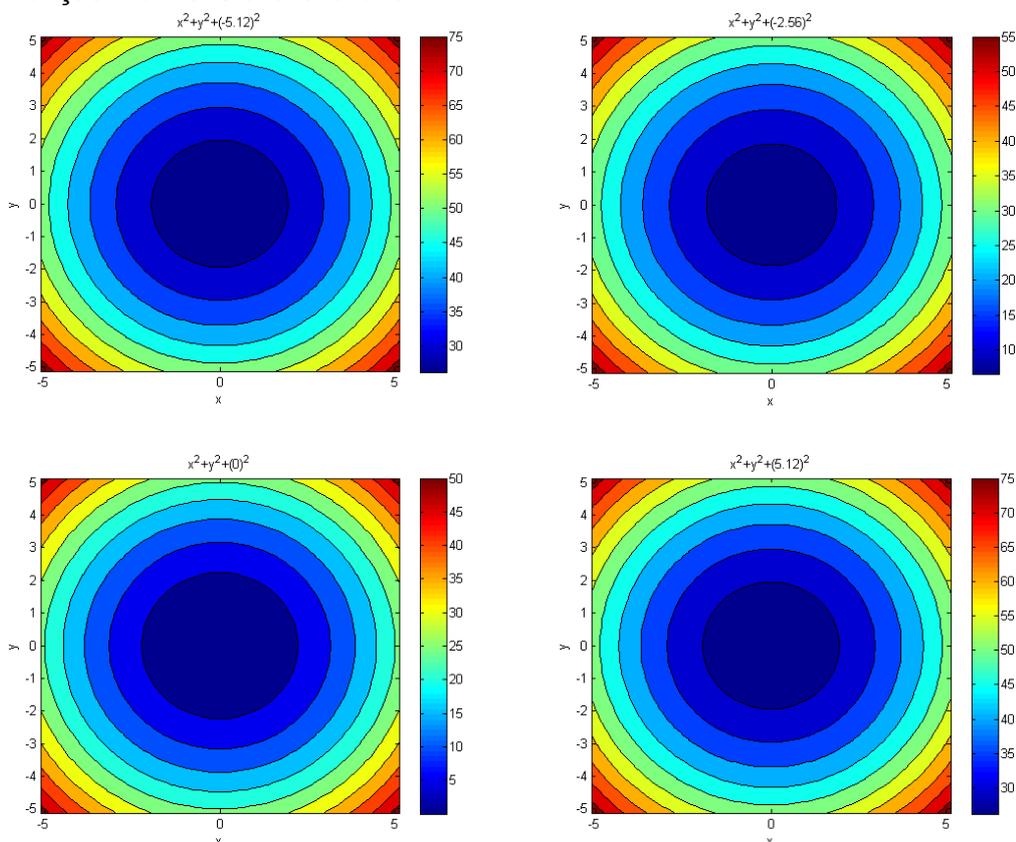
Por meio da Figura 12 (h), nota-se que o elitismo é essencial para garantir a qualidade de otimização do A.G. e importante para facilitar a interpretação da figura uma vez que ao se encontrar o valor no qual maximize a função estudada, o valor da função se torna constante ao longo das gerações.

Observa-se que com uma função unidimensional, a mudança de parâmetros não causa mudanças muito bruscas na quantidade de gerações necessárias para a convergência enquanto que na função bidimensional as mudanças são mais visíveis, ou seja, reforça a importância do estudo dos parâmetros para melhorar a eficiência e diminuir o tempo de processamento com funções mais onerosas computacionalmente.

4.2.3. Função tridimensional

Avaliou-se, então, o comportamento do algoritmo genético para a Eq. (11). Para tal, foi primeiramente necessário determinar o máximo absoluto da função que pode ser observado na Figura 13 onde $f(-5.12, -5.12, -5.12) \approx 75$ ou $f(5.12, 5.12, 5.12) \approx 75$. (=78.6432)

Figura 13: Função tridimensional avaliada

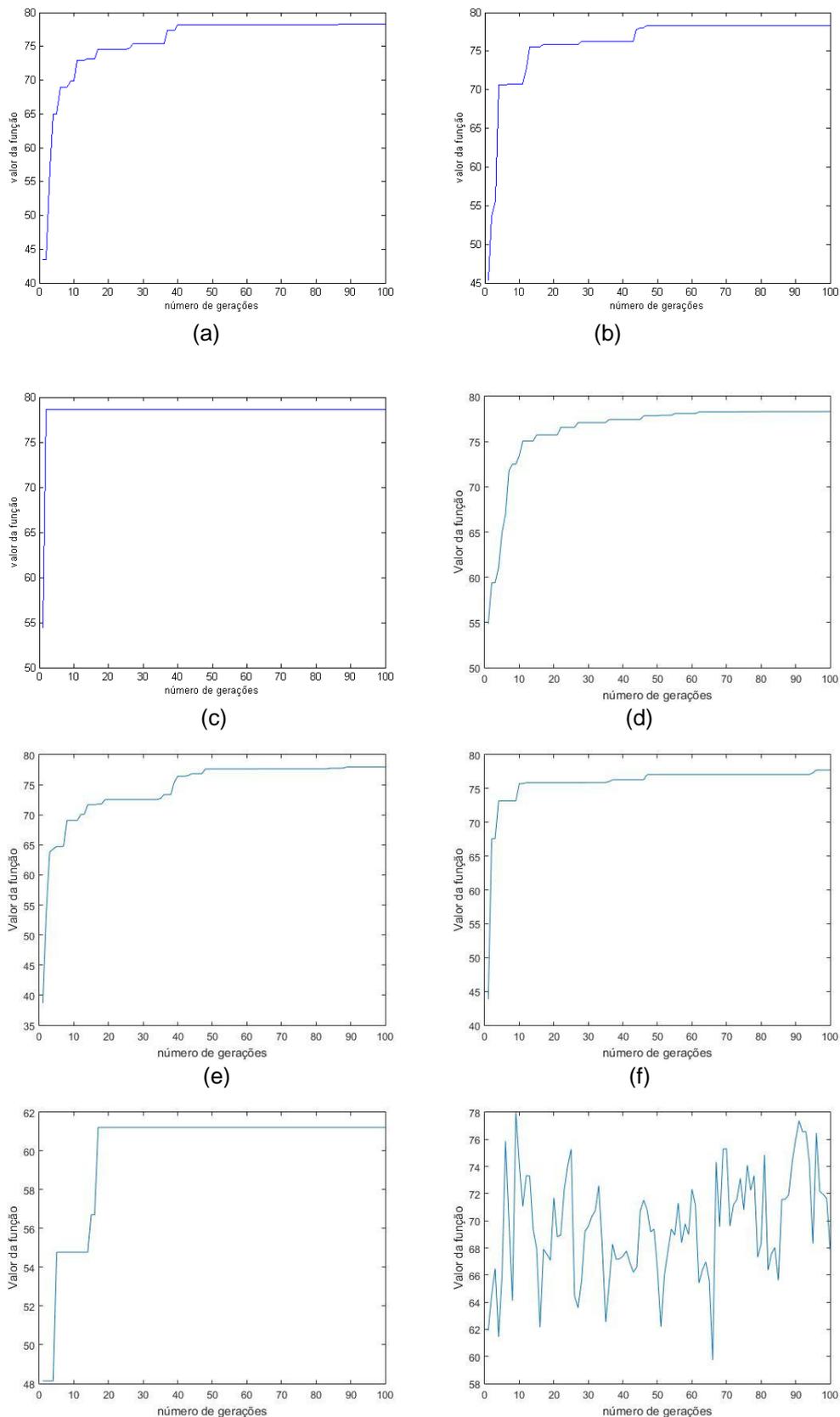


Fonte: Autor, 2018.

O desempenho do algoritmo genético foi testado com os parâmetros indicados na Tabela 1. Os resultados para cada caso são mostrados nas Figuras 14

(a) a (h), nestas são dados os valores máximos da Eq. (11) obtidos em cada geração.

Figura 14: Desempenho do algoritmo considerando os parâmetros da Tabela 1: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3, (d) Caso 4, (e) Caso 5, (f) Caso 6, (g) Caso 7 e (h) Caso 8.



(g)
Fonte: Autor, 2018.

(h)

Em relação à influência do tipo de *crossover*, as Figuras 14(a), (b) e (c), indicam que o *crossover* multiponto nas condições testadas, se mostrou mais eficiente, uma vez que em apenas 3 gerações foi determinado corretamente o ponto de máximo absoluto enquanto que no *crossover* de 1 ponto, foram necessárias 40 gerações e o de dois pontos, 47. Nota-se que o *crossover* uniforme obteve desempenho superior aos outros tipos o que indica que a grande diversidade de combinação pode ser benéfica para alcançar resultados superiores em funções mais onerosas computacionalmente.

Nas Figuras 14 (b) e (d), foi comparado a influência do número de indivíduos, os resultados indicaram que o aumento do número de indivíduos das populações desfavoreceu o processo de busca de pelo melhor indivíduo, uma vez que o número de gerações necessárias aumentou em 15 unidades.

Quanto a influência da probabilidade de mutação, as Figuras 14 (e) e (f) mostraram que o aumento da porcentagem de mutação levou ao aumento do número de gerações necessários para a convergência do A.G. Esse resultado era esperado pois quando a probabilidade de mutação aumenta, o algoritmo tende a possuir um tempo de processamento maior uma vez que quanto maior o índice, mais aleatória é a busca. Já quando não há a probabilidade de mutação, a Figura 14 (g) indica que o algoritmo não convergiu.

Por meio da Figura 14 (h) nota-se que sem a presença do elitismo, o valor máximo da função foi encontrado apenas uma vez. É interessante comentar que para a função unidimensional, o caso 8 encontrou o valor máximo da função em várias gerações, já para a função bidimensional, o caso 8 encontrou poucas vezes o valor no qual maximiza a função, enquanto que para a função tridimensional o valor que maximiza a função foi encontrado somente uma vez, isso indica que com o aumento da complexidade da função, torna-se importante a presença do elitismo para assegurar a convergência do A.G.

4.2.4. Função de Mínimos Quadrados

Por meio do estudo dos parâmetros do algoritmo genético, verifica-se a importância de definir adequadamente os parâmetros de um algoritmo genético para que o tempo de processamento seja reduzido, principalmente para problemas em que a função de avaliação seja onerosa computacionalmente.

Deve-se ressaltar que em todas as funções avaliadas, o A.G. encontrou com êxito o máximo global, isso indica que o código implementado está coerente. Dessa forma, as escolhas dos parâmetros do algoritmo genético para que a minimização da função objetivo e a determinação do coeficiente de difusão possam dispendir menos tempo computacional e obter bons resultados, foi baseada nas seções 4.2.1., 4.2.2. e 4.2.3. Optou-se, então, por utilizar taxa de mutação de 0,05, 20 indivíduos, *crossover* de dois pontos e habilitar o elitismo.

4.3 DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO

Os resultados das seções anteriores indicam que as implementações da solução analítica e do algoritmo genético estão coerentes, dessa maneira, por meio da função objetivo de mínimos quadrados, determinou-se os coeficientes de difusão D_{ab} para cada caso estudado. As condições utilizadas foram as mesmas de Vidart (2013) e Moraes (2010), sumarizadas na Tabela 2 e os resultados do D_{ab} e do Resíduo são mostrados nas Tabelas 3 e 4, para cada caso e autor.

Tabela 2: Características das fibras.

Autor	r (cm)	h (cm)	V_{total} (mL)	N	α
Vidart (2013)	0,0145	15,5	50	724	6,7455
Moraes (2010)	0,03055	12,07	25	447	1,508

Fonte: adaptado de Vidart (2013) e Moraes (2010).

Tabela 3: Comparativo de resultados Vidart (2013) e o Presente Trabalho.

Caso	Corante	Vidart (2013)		Presente Trabalho	
		D_{ab} (cm ² /s)*10 ⁵	Resíduo	D_{ab} (cm ² /s)*10 ⁷	Resíduo
(A)	Vermelho Cosmos Bezaktiv S-C	1.38	1.1267e-09	1.5985	4.9556e-10

(B)	Marinho Cosmos Bezaktiv S-C.	1.25	8.5127e-10	1.4603	4.3975e-10
(C)	Laranja Cosmos Bezaktiv S-C.	1.44	8.6055e-10	1.6785	5.4027e-10

Fonte: Autor, 2018.

Tabela 4: Comparativo de resultados Moraes (2010) e o Presente Trabalho.

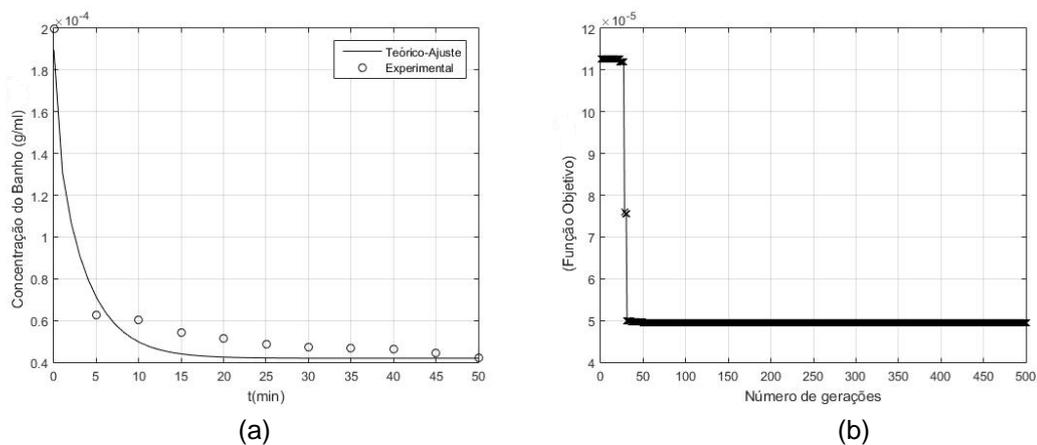
Caso	Corante	Moraes (2010)		Presente Trabalho	
		Dab (cm ² /s)*10 ⁷	Resíduo	Dab (cm ² /s)*10 ⁷	Resíduo
(D)	BEZAKTIV S-MAX	1.4389	0.0713	5.3309	0.0017
(E)	BEZAKTIV S-LF	1.7490	0.0026	1.9470	0.0024
(F)	Drimaren CL-R	1.1227	0.0422	2.2422	0.0105
(G)	Drimaren X/GN	2.8475	0.0129	5.3309	0.0017

Fonte: Autor, 2018.

Por meio dos resultados das Tabelas 3 e 4 observa-se que os valores de coeficiente de difusão obtidos no presente trabalho proveram valores de resíduos menores que os obtidos por meio dos coeficientes de Vidart (2013) e Moraes (2010). Estes resultados sinalizam que o algoritmo genético implementado no presente trabalho se mostrou adequado para o problema em questão. Vidart (2013) e Moraes (2010) utilizaram como método de minimização da função de mínimos quadrados o algoritmo de Newton Raphson. O método Newton-Raphson consiste em aplicar sucessivamente uma fórmula, obtendo assim uma sequência de pontos a qual convergirá a uma raiz de uma função (AMARAL *et al*, 2005). Mais especificamente, esse método aplica o conceito de derivada como fórmula para a convergência. Ao se utilizar tal fórmula, com o mesmo conjunto de entrada de dados, só é possível obter um só resultado, ou seja, é um método determinístico e essa característica faz com que o algoritmo de Newton Raphson potencialmente possa ficar retido em um mínimo local e não em um mínimo absoluto, fato que potencialmente não ocorre ao utilizar-se o algoritmo genético.

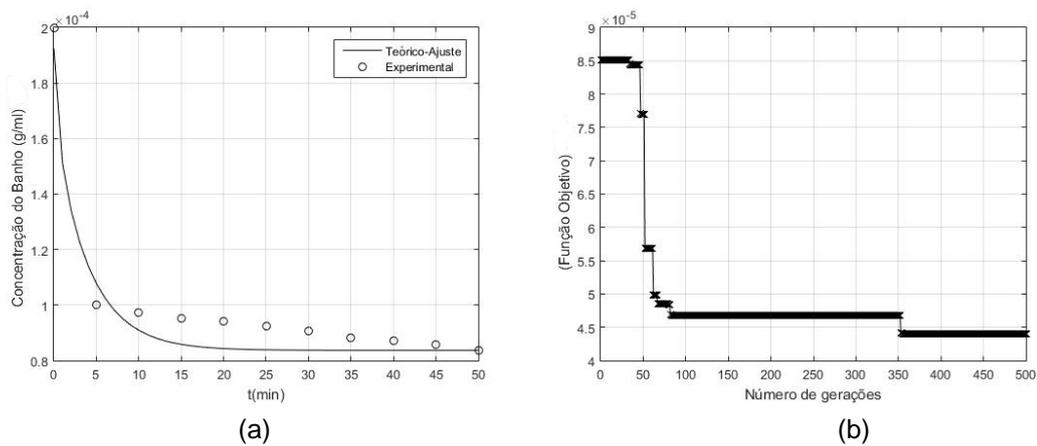
Nas Figuras 17 a 19 pode-se verificar uma comparação entre o perfil de tingimento experimental, com dados retirados de Vidart (2013), e o perfil do ajuste teórico da solução analítica com coeficiente de difusão provido pelo algoritmo genético. Além disso, pode-se verificar o desempenho do algoritmo genético para cada caso indicado na Tabela 3.

Figura 15: Determinação do coeficiente de difusão do Caso A: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



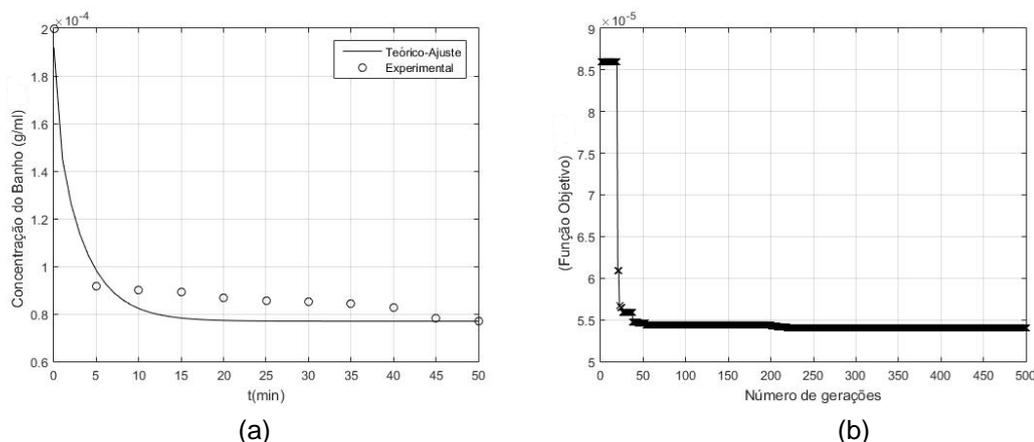
Fonte: Autor, 2018.

Figura 16: Determinação do coeficiente de difusão do Caso B: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



Fonte: Autor, 2018.

Figura 17: Determinação do coeficiente de difusão do Caso C: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



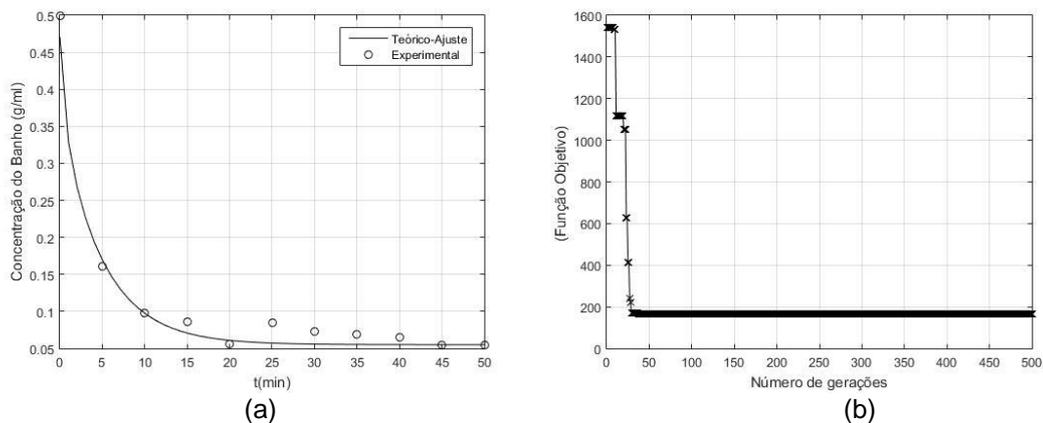
Fonte: Autor, 2018.

As Figuras 15 a 17 (a) mostram a concentração de corante no banho ao longo do tempo, ou seja, o perfil de cinética do tingimento. A curva em linha contínua representa o ajuste teórico da modelagem matemática do tingimento por meio da solução analítica com o coeficiente de difusão ajustado por meio do algoritmo genético, em comparação com os valores experimentais disponíveis em Vidart (2013). Por meio das figuras 15, 16 e 17 (a) nota-se que o modelo teórico foi bem ajustado ao valor experimental.

Já as Figuras 15, 16 e 17 (b) indicam que 500 gerações se mostraram adequadas para a minimização da Eq. (12), uma vez que a partir de 350 gerações já não se pode observar variação do valor de função objetivo.

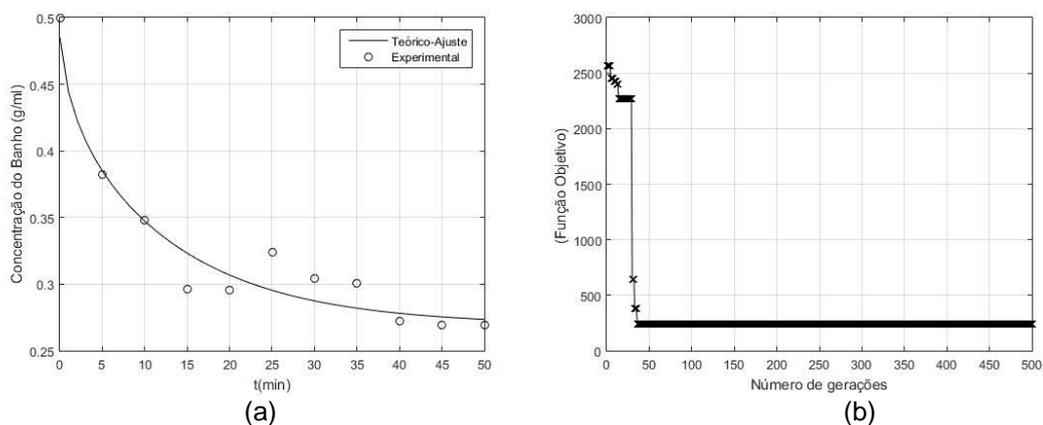
Nas Figuras 18 a 21 pode-se verificar uma comparação entre o perfil de tingimento experimental, com dados retirados de Moraes (2010), e o perfil do ajuste teórico da solução analítica com coeficiente de difusão provido pelo algoritmo genético. Além disso pode-se verificar o desempenho do algoritmo genético para cada caso indicado na Tabela 4.

Figura 18: Determinação do coeficiente de difusão do Caso D: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



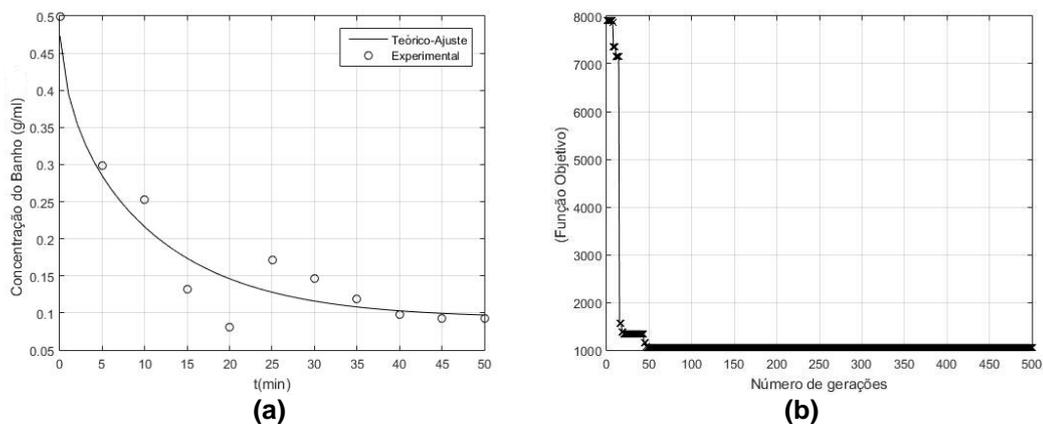
Fonte: Autor, 2018.

Figura 19: Determinação do coeficiente de difusão do Caso E: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



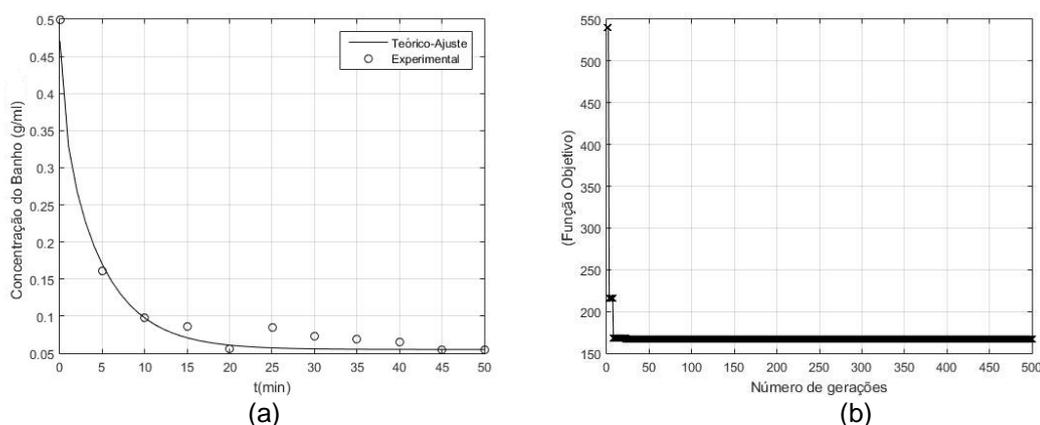
Fonte: Autor, 2018.

Figura 20: Determinação do coeficiente de difusão do Caso F: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



Fonte: Autor, 2018.

Figura 21: Determinação do coeficiente de difusão do Caso G: (a) ajuste teórico-experimental, (b) comportamento do algoritmo genético.



Fonte: Autor, 2018.

As Figuras 18, 19, 20 e 21 (a) mostram a concentração de corante no banho ao longo do tempo, ou seja, o perfil de cinética do tingimento. A curva é dada pelo ajuste teórico da modelagem matemática do tingimento por meio da solução analítica com o coeficiente de difusão ajustado por meio algoritmo genético em comparação com os valores experimentais. E é possível notar que o modelo teórico foi bem ajustado aos valores experimentais.

Já as Figuras 18, 19, 20 e 21 (b) indicam que 500 gerações se mostraram adequadas para a minimização da Eq. (12), uma vez que a partir de 50 gerações já não se pode observar variação do valor de função objetivo.

5 CONCLUSÃO

O presente trabalho abordou o estudo da difusão mássica em fibra têxtil de geometria cilíndrica com o intuito de aprimorar a compreensão do tingimento além de servir como base para estudos de otimização do processo. Para a compreensão do processo, a difusão foi modelada por meio da segunda lei de Fick e o perfil de difusão mássica foi obtido por metodologia de solução analítica. Além disso, para cada tipo de corante avaliado, o modelo teórico foi ajustado, por meio do algoritmo genético, aos dados experimentais do tingimento e assim determinou-se o coeficiente de difusão. O estudo foi dividido em três etapas, a saber, implementação da solução analítica, implementação do algoritmo genético e determinação do coeficiente de difusão e pode-se concluir que:

- O código de solução analítica implementado está coerente e descreve bem o processo de difusão do corante em fibras têxteis;
- O algoritmo genético é uma robusta ferramenta que tende a encontrar soluções para problemas em que métodos convencionais ou determinísticos podem falhar;
- É necessário ajustar os parâmetros do A.G. para obter-se boa qualidade de solução;
- O *crossover* uniforme tende a obter soluções superiores devido a introdução de maior biodiversidade, porém pode dispendir maior tempo computacional devido grande número de sorteios. Já o *crossover* de dois pontos tende a dispendir menos tempo computacional e obtém boas soluções;
- O aumento do número de indivíduos pode levar a lentidão da convergência;
- Um leve aumento da porcentagem de mutação pode levar a uma convergência mais rápida devido introdução de novo material genético, mas deve-se tomar cuidado, pois um aumento muito elevado pode potencialmente levar a uma busca aleatória;
- Uma leve diminuição da porcentagem de mutação pode levar a uma lentidão da convergência;

- A não utilização da ferramenta mutação pode levar o algoritmo a ficar retido em um máximo ou mínimo local;
- A ferramenta elitismo é primordial para garantir a qualidade da solução e facilitar a visualização da convergência;
- O algoritmo genético mostrou-se uma ferramenta adequada para a determinação do coeficiente de difusão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALVES, S. A. P. **Estudo preliminar sobre utilização de hidrolisado de colágeno no tingimento de algodão.** 2015. 71 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Instituto Superior de Engenharia do Porto, Porto, 2015.

AMARAL, C; SOUZA, M; CATALAN, T. **Um estudo do método de Newton-**

BODENHOFER, U. **Genetic Algorithms: theory and applications.** 3rd edition. Lecture notes. Fuzzy Logic Laboratorium Linz-Hagenberg, 2003

BURKINSHAW, S. M. **Physico-chemical aspects of textile coloration.** Bradford: John Wiley & Sons in association with the Society of Dyers and Colorists, 2016.

CARR, J. **An introduction to genetic algorithm.** 2014. Disponível em: <<https://karczmarczuk.users.greyc.fr/TEACH/IAD/GenDoc/carrGenet.pdf>>

CATARINA, A. S. SAHGA - **Um algoritmo genético híbrido com representação explícita de relacionamentos espaciais para análise de dados geoespaciais.** 2009. 120 f. Tese (Doutorado em computação aplicada) – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2009.

CLARK, M. (Ed.). **Handbook of textile and industrial dyeing: Principles, processes and types of dyes.** Oxford, Cambridge, Philadelphia and New Delhi: Woodhead Publishing Limited, 2011.

CRANK, J. **The mathematics of diffusion.** 2 ed. United States: Oxford University Press, 1979.

FERUS-COMELO, M. **Control of the adsorption of dyes on cotton.** 2002. Thesis (Doctor of Philosophy) – The University of Leeds. The Department of Colour Chemistry.

FIADEIRO, J. M. F. P. **O tingimento de materiais têxteis: de arte a ciência.** Covilhã, 1993. Oração de sapiência, proferida no dia da universidade em 30 de abril de 1993.

GLOVER, F. e KOCHENBERGER, G. A. **Handbook of Metaheuristics**. Kluwer Academic Publishers, Boston. 2003.

GOLDBERG, D. E. **Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning**. Reading: Addison-Wesley, 1989.

GUARATINI, C. C. I.; ZANONI, M.V.B. **Corantes têxteis**. Química Nova, v. 23, p. 71-78, 2000.

KHATRI, A.; PEERZADA, M. H.; MOHSIN, M.; WHITE, M. **A review on development in dyeing cotton fabrics with reactive dyes for reducing effluent pollution**. Journal of Cleaner Production, v. 87, p 50-57, 2015.

LADCHUMANANANDASIVAM, R. **Processos Químicos Têxteis – Tingimento Têxtil**, v. 3. UFRN, 2008.

LANGE, C. R. **Estudo das condições operacionais do processo de tingimento de fibra mista acrílico/algodão em bobina cruzada**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2004. Florianópolis.

LINDEN, R. **Algoritmos Genéticos**. 3ed. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna Ltda. 2012

LUCAS, D. C. **Algoritmos Genéticos: uma introdução**. Apostila para a disciplina de Ferramentas de Inteligência Artificial. 2002.

MELO, A. R. **Otimização do recurso de água em lavadores contínuos da indústria têxtil**. 2005. 219 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.

MITCHELL, M. **An Introduction to Genetic Algorithms**. 5.ed. Cambridge: MIT Press. 1999.

MORAES, C. M. **Estudo da difusão de corantes reativos em tecido de algodão**. 2010. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

NETO, A. A. F. **Meta-heurísticas de otimização tradicionais e híbridas utilizadas para construção de comitês de classificação.** 2016. 196 f. Tese (Doutorado em sistemas e computação) – Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2016.

PEZZOLO, D. B. **Tecidos: história, tramas, tipos e usos.** São Paulo: Senac SP, 2007.

POZO, A.; CAVALHEIRO, A. de F.; ISHIDA, C.; SPINOSA, E.; RODRIGUES, E. M. **Computação Evolutiva.** Apostila do Grupo de Pesquisas em Computação Evolutiva. [s.d.].

REDDY, M.; LEE, G.; MCGREGOR, R.; JASPER, W. **Modeling of the Batch Dyeing Process.** Proceedings of the American Control Conference, p. 2180-2184. Washington, 1995.

REIS, C. Z. dos; REVELLO, J. H. P. **Tingimento de fibras de algodão com corantes reativos.** ACTA Ambiental Catarinense, [s. l.], v.7, n.1, jan/jun, 2008.

ROSA, T. de O.; LUZ, H. S. **Conceitos Básicos de Algoritmos Genéticos: Teoria e Prática.** In: XI Encontro de Estudantes de Informática do Tocantins, 2009, Palmas. Anais do XI Encontro de Estudantes de Informática do Tocantins. Palmas: Centro Universitário Luterano de Palmas, 2009. p. 27-37. Disponível em: <<http://tinyurl.com/ylouf6>>

SALEM, V. **Tingimento têxtil: fibras, conceitos e tecnologias.** São Paulo: Blucher: Golden Tecnologia, 2010.

SOUZA, G. P. K. de. **Otimização de funções reais multidimensionais utilizando algoritmo genético contínuo.** 2014. 70 f. TCC (Graduação) - Curso de Ciência da Computação, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2014.

VIDART, J. M. M. **Simulação da difusão de corantes reativos em fibras de algodão.** Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Campinas. Programa de Pós- Graduação em Engenharia Química, 2013. Campinas

XIAO, H.; ZHAO, T. LI, C.; LI, M. **Eco-friendly approaches for dyeing multiple type of fabrics with cationic reactive dyes.** Journal of Cleaner Production, v. 165, p. 1499-1507, 2017.

ZINI, E. de O. C. **Algoritmo genético especializado na resolução de problemas com variáveis contínuas e altamente restritos.** 2009. 151 f. Tese (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Universidade Estadual Paulista, Ilha solteira, 2009.

ANEXO A-RAÍZES DA EQUAÇÃO 8

Raízes de $\alpha q_n J_0(q_n) + 2J_1(q_n) = 0$

Absorção fracionada	α	q_1	q_2	q_3	q_4	q_5	q_6
0	∞	2.4048	5.5201	8.6537	11.7915	14.9309	18.0711
0.1	9.0000	2.4922	5.5599	8.6793	11.8103	14.9458	18.0833
0.2	4.0000	2.5888	5.6083	8.7109	11.8337	14.9643	18.0986
0.3	2.3333	2.6962	5.6682	8.7508	11.8634	14.9879	18.1183
0.4	1.5000	2.8159	5.7438	8.8028	11.9026	15.0192	18.1443
0.5	1.0000	2.9496	5.8411	8.8727	11.9561	15.0623	18.1803
0.6	0.6667	3.0989	5.9692	8.9709	12.0334	15.1255	18.2334
0.7	0.4286	3.2645	6.1407	9.1156	12.1529	15.2255	18.3188
0.8	0.2500	3.4455	6.3710	9.3397	12.3543	15.4031	18.4754
0.9	0.1111	3.6374	6.6694	9.6907	12.7210	15.7646	18.8215
1.0	0	3.8317	7.0156	10.1735	13.3237	16.4706	19.6159