

<https://eventos.utfpr.edu.br/sei/sei2018>

## Implementação de Interface Computacional para Determinação do Coeficiente de Difusividade Mássica de Corantes em Tecidos Têxteis

### Implementation of Computational Interface for Determination of Density Diffusivity of Dyes in Textile Tissues

**Fernando dos Santos Freitas**  
[fernandofreitas@alunos.utfpr.edu.br](mailto:fernandofreitas@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

**Gylles Ricardo Ströher**  
[gyllesrs@utfpr.edu.br](mailto:gyllesrs@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

**Gisely Luzia Ströher**  
[gisely@utfpr.edu.br](mailto:gisely@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

#### RESUMO

O presente trabalho teve como objetivo implementar uma interface computacional, denominada de FiberTex, baseada na segunda lei de Fick da difusão mássica que realiza a determinação do coeficiente de difusão,  $D_{ab}$ , de corantes em fibras têxteis cilíndricas. A solução do modelo matemático para a difusão não permanente foi obtida por meio de uma metodologia analítica e a determinação do  $D_{ab}$  por meio do método de mínimos quadrados utilizando o algoritmo Simplex de otimização. A partir de dados experimentais de ensaios de tingimento disponíveis na literatura os resultados obtidos indicaram que a interface é capaz de prover o  $D_{ab}$  corretamente. A interface provê ao usuário a distribuição de concentração do corante na fibra, a comparação gráfica entre os dados experimentais e do modelo matemático, e também o coeficiente de correlação,  $R$ .

**PALAVRAS-CHAVE:** Tingimento. Coeficiente de Difusão Mássica. Otimização.

#### ABSTRACT

ABSTRACT: The goal of this work was to implement a computational interface, called FiberTex, based on Fick's second law of mass diffusion, which determines the diffusion coefficient,  $D_{ab}$ , of dyes in cylindrical textile fibers. The solution of the mathematical model for non-steady state diffusion was obtained using an analytical methodology and the determination of the  $D_{ab}$  through the method of least squares using the optimization simplex algorithm. From the experimental data of dyeing tests available in the literature the obtained results indicated that the interface is able to provide the  $D_{ab}$  correctly. The interface provides to the user the concentration distribution of the dye in the fiber, a graphical comparison between the experimental data and of mathematical model, and also the correlation coefficient,  $R$ .

**KEYWORDS:** Dyeing. Coefficient of Mass Diffusion. Optimization.

**Recebido:** 23 ago. 2018.

**Aprovado:** 13 set. 2018.

#### Direito autoral:

Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



## INTRODUÇÃO

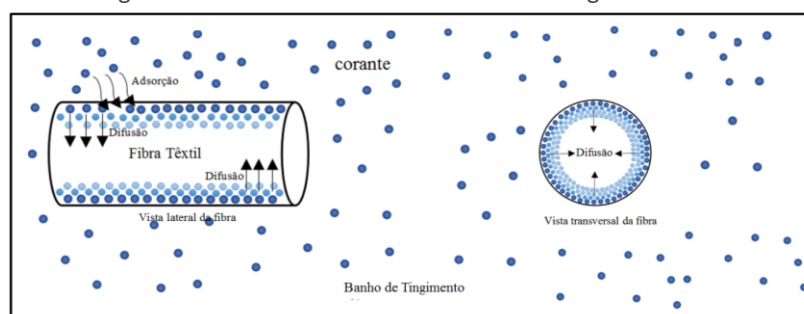
A tintura de tecidos é uma técnica muito antiga e por isso, a variedade de corantes disponíveis comercialmente é enorme. A moderna tecnologia no tingimento consiste de várias etapas que são escolhidas de acordo com a natureza da fibra têxtil, características estruturais, disponibilidade do corante para aplicação, considerações econômicas e muitas outras.

O desenvolvimento de novos corantes e fibras têxteis, bem como a necessidade de maior competitividade das indústrias têxteis, vem forçando de forma significativa a geração de novos métodos de tingimento e influenciando de maneira fundamental a geração de novas tecnologias de tingimento. O objetivo principal destes avanços tecnológicos é propiciar melhores condições termodinâmicas e cinéticas ao tingimento (GUARATINI, 2000).

Quando todo o material fibroso é imerso numa solução de um corante as partículas de corantes se adsorvem na superfície externa do material, difundindo pelos canais capilares formados pelos espaçamentos das fibras. O processo de adsorção continua até o momento em que um equilíbrio entre o corante em solução e aquele na fibra se estabelece. Este momento de equilíbrio caracteriza a completa penetração do corante dentro do material fibroso (TWARDOKUS, 2004).

O ensaio experimental em que é realizada a imersão da fibra têxtil no banho de tingimento está representada na Figura 1. Comumente, o corante é diluído em um banho de solução em que a concentração é monitorada ao longo do tempo de tingimento, informações detalhadas deste tipo de ensaio podem ser obtidas em MORAES, 2010 e VIDART, 2013.

Figura 1 – Fibra Têxtil durante o banho de tingimento



Fonte: Autoria própria (2018).

Neste contexto, o presente estudo teve como objetivo propor uma metodologia para determinar os coeficientes de difusão de corantes por meio de dados de ensaios experimentais do tempo e concentração de corante na solução de tingimento com a finalidade de reduzir efluentes gerados e maximizar o rendimento no processo de tingimento e prover uma interface computacional intuitiva, a FiberTex, para o setor da área têxtil que trabalha com tingimento.

## MÉTODOS

### MODELAGEM MATEMÁTICA DA DIFUSÃO DE CORANTE

Assumindo uma estrutura cilíndrica para as fibras, a equação de difusão para a variação de concentração do corante na fibra pode ser descrita como:

$$\frac{\partial C^f}{\partial t} = D_{ab} \left[ \frac{\partial^2 C^f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C^f}{\partial r} \right] \quad (1)$$

onde  $C^f$  é a concentração de corante na fibra,  $D_{ab}$  a constante de difusão,  $r$  é a coordenada espacial e  $t$  é o tempo.

A condição de contorno da Equação (1) é dada pela Equação (2), considerando a simetria da concentração com o raio e o centro das fibras:

$$\frac{\partial C^f}{\partial r} = 0, \quad \text{para } r = 0 \quad (2)$$

O banho de tingimento é um sistema fechado, desta forma, a taxa de redução da concentração de corante na solução é igual a taxa de difusão do corante na superfície da fibra. Partindo deste princípio e assumindo uma agitação eficiente, a condição de contorno da superfície da fibra é dada pelas Equações (3) e (4).

$$L \frac{\partial C^s}{\partial t} = D_{ab} \cdot S \cdot N_c \cdot \frac{\partial C^f}{\partial r}, \quad \text{para } r = a \quad (3)$$

$$C_f(t) = KC_0^s, \quad \text{para } r = a \quad (4)$$

onde  $a$  é o raio da fibra,  $L$  é a relação de banho,  $C^s$  a concentração de corante na solução,  $C^f$  a concentração de corante nas fibras,  $N_c$  o número de cilindros,  $D_{ab}$  o coeficiente de difusão,  $S$  a área superficial das fibras e  $K$  o coeficiente de distribuição.

## SOLUÇÃO ANALÍTICA

Supondo que, o cilindro ocupa um espaço  $r < a$ , durante a seção transversal em que o banho da solução está imerso em  $S$  (excluindo o espaço ocupado pelo cilindro). A concentração do soluto na solução é sempre uniforme e inicialmente  $C_0$ . O cilindro é inicialmente livre de soluto. A quantidade total de soluto  $M_t$ , no cilindro no instante de tempo  $t$  é expresso pela fração correspondendo à quantidade de  $M_\infty$ , quantidade de corante na fibra após um tempo infinito, conforme Equação (5) (CRANK, 1979).

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\alpha(1+\alpha)}{4+4\alpha+\alpha^2 q_n^2} \cdot e^{-\frac{Dq_n^2 \cdot t}{a^2}} \quad (5)$$

Em que  $\alpha$  é a razão dos volumes da solução e das fibras cilíndricas, obtido pela Equação (6), e  $q_n$  raízes positivas e diferentes de zero, obtidas pela Equação (7).

$$\alpha = \frac{\text{volume}_{\text{solução}}}{\text{volume}_{\text{cilindro}}} = \frac{V_{\text{total}}}{\pi r^2 h N_{\text{cilindros}}} \quad (6)$$

$$\alpha q_n J_0(q_n) + 2 \cdot J_1(q_n) = 0 \quad (7)$$

onde  $J_0$  é a função Bessel de ordem zero e  $J_1$  função Bessel de primeira ordem.

## DETERMINAÇÃO DO $D_{ab}$

A interface proposta *FiberTex*, Difusão em Fibra Têxtil, determina computacionalmente o coeficiente de difusão,  $D_{ab}$ , em fibras de tecido têxtil. Para execução de tal tarefa definiu-se uma função objetivo ( $FO$ ) baseada no método de mínimos quadrados, podendo ser dada pela Equação (8).

$$FO(D_{ab}) = \sum_{n=1}^{\infty} (C_{Teórico} - C_{Experimental})^2 \quad (8)$$

O valor de  $D_{ab}$  que proverá o menor valor da  $FO(D_{ab})$  fornecerá o melhor ajuste do perfil de concentração teórica com relação à experimental.

Subsequentemente, é realizado o cálculo do coeficiente de correlação de Pearson,  $R$ , entre os valores teóricos (T) e os experimentais (E), Equação (9). O coeficiente  $R$  varia entre -1 e 1, o sinal indica a direção, se a correlação é positiva ou negativa, e o valor indica a força da correlação, valores acima de 0.9 indicam uma correlação muito forte entre os dados teóricos e experimentais (MUKAKA, 2012)

$$R = \frac{\sum(C_E - \bar{C}_E)(C_T - \bar{C}_T)}{\sqrt{[\sum(C_E - \bar{C}_E)^2][\sum(C_T - \bar{C}_T)^2]}} \quad (9)$$

## MÉTODO DE OTMIZAÇÃO

Para determinação do mínimo absoluto da  $FO(D_{ab})$ , foi utilizado o Método Simplex proposto por Nelder e Mead (MATHEWS, 2004). O algoritmo Simplex pertence a uma classe mais geral de algoritmos de pesquisa direta e que não faz uso de derivadas, portanto trata-se uma técnica de otimização não linear, baseada no método de otimização livre de derivada, *Derivative-Free Optimization* (DFO). O Simplex busca, a partir de uma primeira solução básica viável, percorrer de forma iterativa os vértices de um polígono até alcançar uma solução considerada ótima para o problema. Constitui-se de um método que minimiza uma função de  $M$  variáveis que, por sua vez, depende da comparação da função nos seus  $(M + 1)$  vértices de um simplex geral seguido pela recolocação do vértice com o valor mais alto por outro ponto de menor valor na função objetivo. O próprio simplex adapta-se à paisagem local e contrai-se a um mínimo local final. De um ponto de vista computacional, esse método mostra-se ser compacto e efetivo (GOMES, 2017).

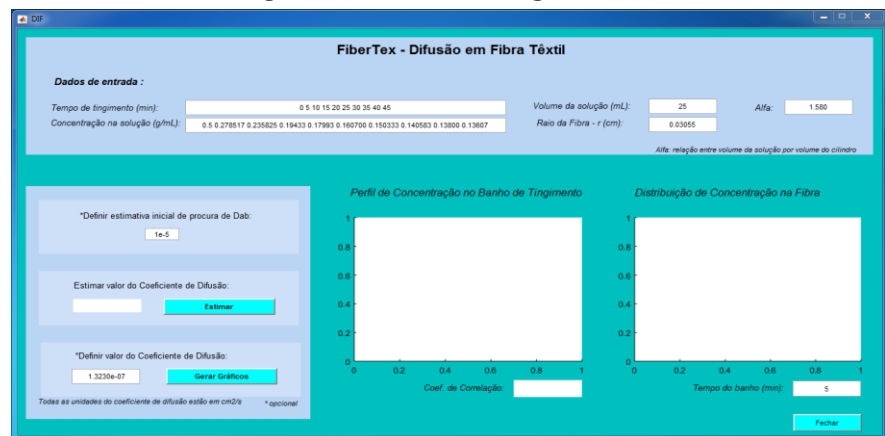
## INTERFACE COMPUTACIONAL

A interface do aplicativo, Figura 2, foi proposta com o intuito de facilitar e agilizar o dia-a-dia de uma rotina de trabalho, pensou-se também, sobretudo, em uma interface intuitiva, para que além de atender as necessidades do usuário seja de fácil utilização em que o grau de conhecimento requerido do usuário que utilize o programa seja mínimo. Outro fator importante à implementação da interface é a carência de indústrias em obter licença de programas computacionais técnicos.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a realização da simulação computacional baseada na segunda lei da difusão de Fick, implementou-se uma interface computacional mostrada na Figura 2, com uma reposta direta de inserção de dados e obtenção do respectivo valor de difusividade mássica do corante em análise. Na interface outras informações também são exibidas, como: perfil de concentração no banho de tingimento, distribuição de concentração na fibra e coeficiente de correlação entre os dados teóricos e experimentais.

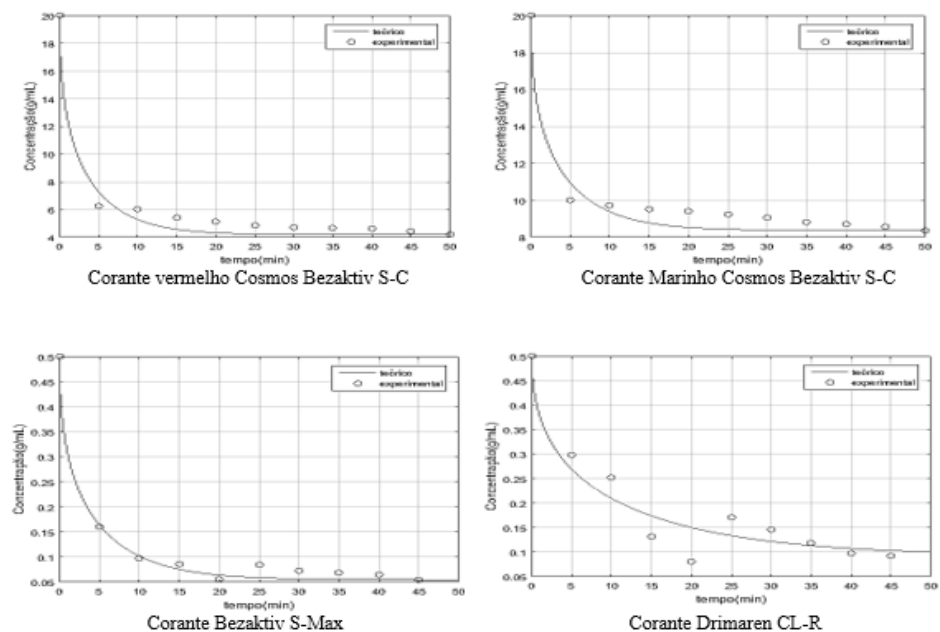
Figura 2 – Interface do Programa



Fonte: Autoria própria (2018).

A partir de dados de ensaios experimentais de tempo e concentração de corante no banho de tingimento, existentes na indústria têxtil obtidos pela literatura, MORAES e VIDART, foi possível realizar a simulação e determinar os valores dos coeficientes de difusão,  $D_{ab}$ , e gerar o perfil de concentração pelo tempo de tingimento, Figura 3.

Figura 3 – Perfis de Concentração de Corante pelo Tempo de Tingimento



Fonte: Autoria própria (2018).

Observou-se um decaimento da concentração de corante no banho de tingimento ao longo do tempo, Figura 3, onde os valores simulados concordam satisfatoriamente com os dados experimentais.

Os dados, requeridos pela interface, para gerar os perfis de concentração foram apresentados na Tabela 1, os testes foram realizados para quatro tipos diferentes de corantes a fim de comparar os resultados obtidos com os já existentes.

Tabela 1 – Valores para Gerar Arquivo de Dados

Corante	$V_{\text{solução}} - (\text{mL})$	Raio – $r(\text{cm})$	$\alpha$
Vermelho Cosmos Bezaktiv S-C	50	0,0145	6,75
Marinho Cosmos Bezaktiv S-C			
Bezaktiv S-Max	25	0,03055	1,58
Drimaren CL-R			

Fonte: Autoria própria (2018).

Com valores de  $D_{ab}$  disponível na literatura e os obtidos pela interface computacional realizou-se os devidos cálculo já mencionados para obter os respectivos valores da função objetivo a ser minimizada,  $FO(D_{ab})$ . Os resultados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Resultados Obtidos da Literatura e pela Interface Computacional

Corante	Literatura			Interface		
	$D_{ab}$ ( $\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ ) $\times 10^7$	$FO$	R	$D_{ab}$ ( $\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ ) $\times 10^7$	$FO$	R
Vermelho Cosmos Bezaktiv S-C.	138	11,49	0,990	1,29	4,92	0,993
Marinho Cosmos Bezaktiv S-C.	125	8,63	0,988	1,16	4,31	0,988
Bezaktiv S-Max.	0,95	0,019	0,948	3,25	0,0014	0,997
Drimaren CL-R.	0,66	0,038	0,957	1,34	0,011	0,962

Fonte: Autoria própria (2018).

Observou-se para todos os casos que a função objetivo  $FO(D_{ab})$ , Equação (8), foi melhor minimizada com os valores de coeficiente de difusão obtidos da interface computacional. Os resultados de  $D_{ab}$  provenientes da interface estiveram na mesma ordem de grandeza para os dois últimos corantes utilizados em MORAES e cem vezes menor em comparativo com os dois primeiros de VIDART.

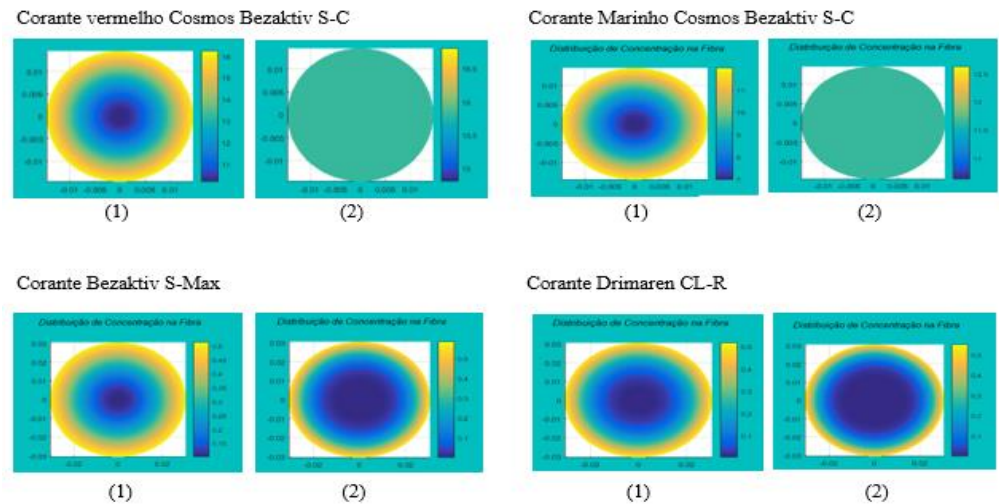
Utilizando um microcomputador com a configuração Windows 7 Ultimate, processador Intel® Core™ i3-2310M CPU @ 2.10 GHz, memória (RAM) de 4 GB, sistema operacional de 64 Bits, o tempo de processamento para a convergência do valor de  $D_{ab}$  foi em média 30 a 60 segundos, contudo deve ficar claro que esse tempo depende fortemente da capacidade de processamento do computador utilizado, assim variações em relação ao tempo de processamento podem ocorrer.

Também foi possível comparar a distribuição de concentração na fibra têxtil para os corantes testados, em que pôde-se verificar, para um tempo de 5 minutos, que a concentração de corante é maior na superfície da fibra, diminuindo gradativamente até o centro da mesma, que está isenta de corante. Ao se



comparar a distribuição de concentração na fibra com valores de  $D_{ab}$  obtidos da interface com os da literatura, mostrado na Figura 4, observou-se que, para o tempo especificado, os dois primeiros corantes, com o  $D_{ab}$  da literatura, a fibra estaria praticamente isenta de corante, e para os dois últimos, a concentração de corante na fibra é menor com os  $D_{ab}$  obtidos da interface.

Figura 4 – Perfis de Concentração de Corante na Fibra  
(1)  $D_{ab}$  obtido da interface, (2)  $D_{ab}$  obtido da literatura



Fonte: Autoria própria (2018).

É opcional que o usuário forneça uma estimativa inicial para o coeficiente de difusão mássica  $D_{ab}$ , uma vez que a interface já disponibiliza um valor default baseado na faixa do valor numérico para o  $D_{ab}$ . Caso o usuário opte por trocar o valor default a interface realiza um aprimoramento desta estimativa inicial antes do valor ser redirecionado para o Simplex. Nesse aprimoramento, gera-se uma faixa de valores, com base em uma estimativa de referência fixada pelo algoritmo, em que, com o auxílio de uma função de mínimos, seleciona o  $D_{ab}$  no qual têm-se o menor valor para a função objetivo, tendo então uma nova estimativa inicial melhorada. Este aprimoramento acarreta em um leve aumento de tempo de processamento computacional, porém provê uma melhora substancial na convergência do Simplex.

## CONCLUSÃO

No presente trabalho foi obtida a solução matemática para um problema baseado na segunda lei de Fick da difusão por meio da solução analítica do modelo e com o método de mínimos quadrados associado ao algoritmo Simplex. A solução implementada foi verificada com a solução de outros autores e os resultados indicaram concordância entre os valores de  $D_{ab}$  obtidos. O método Simplex mostrou-se eficiente para os dados experimentais testados convergindo para um valor mínimo satisfatório da função objetivo. Os resultados obtidos apresentaram boa concordância com os dados experimentais em que foi possível obter coeficientes de correlação,  $R$ , maior que 0.9 para os testes realizados. Adicionalmente a interface se mostrou de fácil utilização e certamente contribuirá para setores de tingimento da indústria têxtil assim como para pesquisas no meio acadêmico.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Fundação Araucária pela bolsa de extensão; À Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Apucarana por ser minha fonte de pesquisa e aprendizagem.

## REFERÊNCIAS

CRANK, John. **The mathematics of diffusion**. Oxford university press, 1979.

GOMES, F. I. F. N. et al. ESTRATÉGIA HÍBRIDA DE OTIMIZAÇÃO SEM DERIVADAS PARA A INVERSÃO COMPLETA DA FORMA DA ONDA. **HOLOS**, v. 33, n. 2, p. 2-34, 2017.

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

MATHEWS, John H. et al. **Numerical methods using MATLAB**. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall, 2004.

MORAES, C.M. **Estudo da difusão de corantes reativos em tecido de algodão**. Dissertação, Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2010.

MUKAKA, Mavuto M. A guide to appropriate use of correlation coefficient in medical research. **Malawi Medical Journal**, v. 24, n. 3, p. 69-71, 2012.

TWARDOKUS R. G. **Reuso de Água no Processo de Tingimento da Indústria Têxtil**. Dissertação, Engenharia Química do Centro Tecnológico da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis SC, 2004.

VIDART, Jacyara Moreira Martins et al. Simulação da difusão de corantes reativos em fibras de algodão. 2013.