

文章编号: 0253-9721(2008)07-0061-04

针织物染色上染率动力学模型

汤仪平, 金福江

(华侨大学 信息科学与工程学院, 福建 泉州 362021)

摘要 为了给染料上染纤维配以较为准确的数学模型, 以希尔公式为基础, 结合实验数据分析, 采用多项式曲线拟合, 建立上染率动力学模型。以活性 RR-红、弱酸性绿 GS 和分散红玉 S-2GFL 分别上染针织物为例, 利用建立的上染率动力学模型以及希尔公式计算这 3 组染料不同时刻对应的上染率, 并与实际测得的上染率进行比较。结果表明, 新建的上染率动力学模型其计算结果略优于希尔公式, 特别是当染料上染接近平衡状态时预测的上染率与实际的测量值更为吻合。

关键词 染色; 上染率动力学; 希尔公式; 曲线拟合

中图分类号: TS 193 文献标识码: A

Kinetics model for simulating dye uptake rate during knitted fabric dyeing

TANG Yiping, JIN Fujiang

(College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Quanzhou, Fujian 362021, China)

Abstract For accurate computation of the dye uptake rate of the fiber, this paper has developed a kinetics model for simulating the dye uptake rate by using multiple curve-fitting in combination with experimental data analysis on the basis of Hill equation. Knitted fabrics are dyed with Reactive Red RR, Weak Acid Green GS and Disperse Crimson S-2GFL respectively and the dye uptake rates at different times of these three groups of dyes are computed using this kinetics model and Hill equation and the results obtained are compared with the practical values measured. It showed that this new model is slightly advantageous over Hill equation, and in particular, the predicted dye uptake rate by the model is more agreeable with the actual value when up-taking of dye nearing the state of balance.

Key words dyeing; kinetics of dye uptake rate; Hill equation; curve fitting

对染料上染纤维的过程配以较准确的数学模型, 直观地反映染色曲线, 是染色动力学研究的方向。通过研究染色上染动力学来掌握染色机制, 进而预测和控制纺织材料的染色效果, 以达到提高生产效率和染色质量, 降低能耗和生产成本的目的。近年来, 国内外的学者都加强了建立染色过程中各类染料对不同纤维上染数学模型的研究。其中, 希尔(Hill)公式^[1]较为常见, 但由于希尔公式所得结果为无穷级数, 计算比较困难, 如果仅取希尔公式的前几项之和而略去其余各项, 计算结果与原来的结果会存在偏差。因此, 为了给染料上染纤维配以准确而且计算简便的数学模型, 本文在希尔公式的基础上, 结合试验数据分析, 采用多项式曲线拟合^[2-3],

建立针织物染色过程上染率动力学模型。以活性染料、酸性染料和分散染料等各种染料上染纤维过程为例, 将该上染率动力学模型运用到各个染色过程中, 通过将上染率动力学模型计算结果与实测的上染率进行比较, 证明所建上染率动力学模型的可行性。

1 模型的建立

染色过程中, 扩散动力学方程描述了染料向纤维扩散的特性^[4]。前人对扩散过程已做了很多研究, 国内有关染色动力学数学模型报道较少, 在菲克第二定律基础上, 国外染料应用学者进行的染色

收稿日期: 2007-08-03 修回日期: 2008-03-23

基金项目: 福建省科技计划重点项目(2006H0031)

作者简介: 汤仪平(1983-), 男, 博士生。研究方向为染色过程控制。金福江, 通讯作者, E-mail: jinfujiang@163.com。

动力学经典方程式较多,其中,希尔公式较为常见。

假定纤维在无限染浴,并看作无限圆柱,忽略两端扩散,并假设扩散系数为一常数,则希尔由菲克第二定律导出:

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-v_n^2 Dt/a^2)}{v_n^2} = 1 - 4 \left\{ \frac{1}{5.785} e^{-5.785 Dt/a^2} + \frac{1}{30.47} e^{-30.47 Dt/a^2} + \frac{1}{74.89} e^{-74.89 Dt/a^2} + L \right\} \quad (1)$$

式中: D 为扩散系数; t 为染色时间; a 为纤维半径; M_t 为 t 时刻的上染率; M_∞ 为平衡上染率。

式(1)由希尔导出,所以被称为希尔公式,它适用于无限染浴中染料在圆柱状纤维中的扩散情况,但由于其结果为一无穷级数,计算比较困难。因此,本文在希尔公式原有函数关系的基础上,并根据文献[5]中 M_t/M_∞ 与 Dt/a^2 的关系,对 M_t/M_∞ 与 Dt/a^2 进行曲线拟合,构造新的数学模型。文献[5]所列举的 M_t/M_∞ 与 Dt/a^2 关系是威克斯达夫(T Vickerstaff)通过大量由无限染浴向有限体积圆柱中的扩散实验得到的数据,然后根据 M_t/M_∞ 与 Dt/a^2 一一对应的实验数据制成表格,它在实际计算中得到广泛的应用,特别是在求取扩散系数的应用中,就可以方便地得到 M_t/M_∞ 对应的 Dt/a^2 值。

本文采用多项式曲线拟合,其结果如图 1 所示。

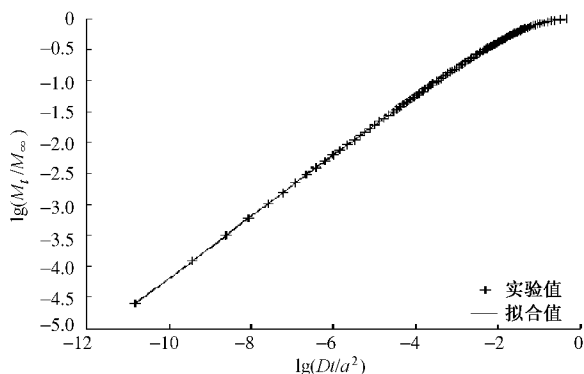


图 1 $\lg(Dt/a^2)$ 与 $\lg(M_t/M_\infty)$ 的关系

Fig.1 Relation between $\lg(Dt/a^2)$ and $\lg(M_t/M_\infty)$

利用 MatLab 软件,得到一元多项式回归方程:

$$\lg\left(\frac{M_t}{M_\infty}\right) = -0.0001 \times \lg^5\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0025 \times \lg^4\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0305 \times \lg^3\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.1858 \times \lg^2\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0836 \times \lg\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0136 \quad (2)$$

其标准残差 $S = 0.0335$ 。

由式(2)可得:

$$M_t = M_\infty g \exp\left\{ -0.0001 \times \lg^5\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0025 \times \lg^4\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0305 \times \lg^3\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.1858 \times \lg^2\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0836 \times \lg\left(\frac{Dt}{a^2}\right) - 0.0136 \right\} \quad (3)$$

式(3)即为本文所求的上染率动力学模型,式中,扩散系数 D ,纤维半径 a 以及平衡上染率 M_∞ 都可以通过实验获得,它们均为常数。因此,由式(3)可知,在染料上染纤维过程中,通过测定染色时间 t 便可直接推算 t 时刻对应的上染率,从而直观地反映染料上染情况。因为式(2)的 S 值很小,表明其拟合质量较高,所以,式(3)的预测精度也比较高,即本文所求的上染率动力学模型较为精确。

由于希尔公式以及威克斯达夫实验都是假定纤维在无限染浴,所使用纤维的截面是圆柱状的,所以本文的上染率动力学模型也只适用于圆柱状纤维的染色过程。

2 实例验证

2.1 原料和仪器

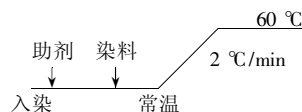
原料:活性红 RR、弱酸性绿 GS、分散红玉 S-2GFL;元明粉(Na_2SO_4)、纯碱(Na_2CO_3);醋酸、醋酸钠、分散剂 WA;18.45 tex 纯棉、38.85 dtex 柞蚕水缂丝、4.45 tex 聚醚型氨纶裸丝。

仪器:H-24SE 打样机;X752A 型分光光度计;烧杯、容量瓶等。

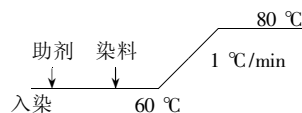
2.2 实验方法

2.2.1 实验内容

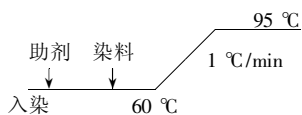
工艺处方 1:活性红 RR 0.1%(o. w. f);元明粉 20%;纯碱 10%;浴比 1:10;染色温度 60 °C。其工艺曲线为



工艺处方 2:弱酸性绿 GS 1.0%(o. w. f);元明粉 20%;pH 值 4~5;浴比 1:100;染色温度 80 °C。其工艺曲线为



工艺处方 3: 分散红玉 S-2GFL 0.2% (o. w. f); pH 值 4~6; 浴比 1:50; 染色温度 95 °C。其工艺曲线为



2.2.2 上染率的测试

采用 X752A 型分光光度计对染前和不同时刻

染液的吸光度 A_0 及 A_n 进行测试, 利用式(4)计算不同染色时刻染料的上染率。

$$\text{上染率} = (1 - A_n/A_0) \times 100\% \quad (4)$$

2.2.3 实验结果

分别利用式(3)和希尔公式计算这 3 组染料在不同时刻对应的上染率, 并与实际测得的染色上染率进行比较, 结果如表 1 所示。

表 1 上染率的预测值与实测值比较

Tab.1 Comparison between the values of uptake rate

上染时间/ min	活性红 RR			弱酸性绿 GS			分散红玉 S-2GFL		
	$M_1/\%$	$M_2/\%$	$M_3/\%$	$M_1/\%$	$M_2/\%$	$M_3/\%$	$M_1/\%$	$M_2/\%$	$M_3/\%$
5	58.50	34.22	34.41	13.72	27.13	27.26	65.31	62.41	62.29
10	68.40	46.08	46.27	19.61	36.65	36.80	85.99	78.90	79.24
15	73.90	54.14	54.20	30.00	43.21	43.29			
20				38.73	48.17	48.13	94.55	92.10	91.84
25				39.41	52.06	51.90			
30	75.90	68.32	68.01	48.73	55.15	54.91	95.00	95.59	95.03
35				50.39	57.63	57.36			
40	77.90	73.27	73.07	58.73	59.61	59.37	95.33	95.20	95.84
45				58.82	61.20	61.02			
50	77.40	76.29	76.35						
55	76.70	77.32	77.53						
60	78.40	78.13	78.46				94.55	89.85	96.10
70	79.70	79.25	79.75				94.50	86.31	96.11
80							94.05	82.60	96.12

注: ① M_1 、 M_2 、 M_3 分别为染料上染过程实际测得的上染率、应用希尔公式计算得到的上染率(在计算时只取其前 3 项)和应用上染率动力学模型计算得到的上染率(即式(3)的计算结果); ② 活性红 RR、弱酸性绿 GS、分散红玉 S-2GFL 的平衡上染率 M_∞ 分别为 81.00%、70.67% 和 96.12%; ③ 活性红 RR、弱酸性绿 GS、分散红玉 S-2GFL 的 D/a^2 分别为 0.008 6、0.007 6 和 0.023 7 min^{-1} 。

2.3 结果分析

从表 1 可以看出, 3 种染料在染色初期, 利用本文建立的上染率动力学模型和希尔公式计算所得的结果与实际测得的上染率相比都存在一定的偏差, 而在染色中期和后期, 2 种计算法的结果与实际上染率基本一致, 这主要与扩散系数 D 的求取有关。当染色材料和工艺条件确定下来时, 一般认为扩散系数随之确定下来, 即扩散系数 D 为一定值, 但实际上, 扩散系数 D 不仅与染料特性及染料浓度有关, 而且还与染色环境如 pH 值、助剂等有关。随着染色过程的推进, 染料浓度、染液的 pH 值及助剂量都在发生变化, 扩散系数 D 也在变化, 即扩散系数 D 并不是定值。尽管如此, 通常将不同时间的 D_i 取平均值 \bar{D} 作为整个染色过程的扩散系数, 近似地把 \bar{D} 作为染料上染率快慢的衡量指标。因此, 在染色初期预测的上染率与实际值存在偏差是正常的, 而且此时的偏差并不会影响对染色过程的控制, 因

为对染色过程的控制主要是对染色中期和后期上染率的控制。

另一方面, 本文建立的上染率动力学模型的计算结果略优于希尔公式, 特别是当染料上染接近平衡状态时预测的上染率与实测值更为吻合。此时预测的精度越高, 越有利于控制染色过程的上染率。

由此可见, 本文所建立的的上染率动力学数学模型基本符合实际的上染情况, 满足染色过程控制的要求。

3 结 语

本文以活性染料、酸性染料和分散染料上染纤维为例, 证明该上染率动力学模型是切实可行的, 可以直观反映染色过程的上染情况。该数学模型预测的结果与希尔公式的计算结果相比, 更接近实际值。

(下转第 68 页)

它不但克服希尔公式计算复杂的缺点,而且在染色平衡态附近的预测精度也高于希尔公式。

总之,本文得到的上染率动力学模型基本符合实际上染情况,表征了纤维染色动力学的过程,而且适用于不同类型染料上染针织物的染色过程,具有一定的通用性。另外,该模型虽然只面向圆柱状纤维的染色过程,但其研究结论证明了针织物染色过程上染率的可预测性,为染色过程控制奠定了基础,同时本文中的建模方法对平板状纤维染色的建模研究也具有一定的参考价值。

FZXB

参考文献:

- [1] 格·叶·克里切夫斯基. 染色和印花过程的吸附与扩散[M]. 高敬琮, 译. 北京: 纺织工业出版社, 1985: 82 - 140.
- [2] 赵静, 但琦. 数学建模与数学实验[M]. 北京: 高等教育出版社, 2000: 199 - 222.
- [3] 刘承平. 数学建模方法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2002: 24 - 33.
- [4] 黑木宣彦. 染色理论化学[M]. 陈水林, 译. 北京: 纺织工业出版社, 1981: 130 - 154.
- [5] 金咸穰. 染整工艺实验[M]. 北京: 中国纺织出版社, 1982: 74 - 93.