

染色过程对流扩散动力学模型研究*

陈亮亮, 金福江

华侨大学信息科学与工程学院, 福建泉州 (362021)

E-mail: jinfujiang@163.com

摘要: 本文针对染料在染浴中的扩散问题, 建立了染色过程对流扩散动力学模型, 并运用特征差分算法对该模型进行了分析求解, 通过对动力学方程的求解我们可以得到染浴中各点的染料浓度随时间的值。此外, 从对流扩散过程和纯扩散过程的比较中我们还可以得到在流动染液中染料的扩散速度主要取决于染液的流动的结论。

关键词: 染料扩散, 对流扩散方程, 特征差分方法

中图分类号: TS

1. 引言

染料经流动的染液向纤维表面的扩散过程是染色过程的重要步骤, 此扩散过程对染料的上染速率和上染质量都有重要影响。目前国内外对此扩散过程的研究主要有以下几方面:

(1) 菲克扩散定理^[3]

在染液静止时研究染料扩散通常用菲克定理, 菲克定理分为第一和第二定理。菲克第一定理主要用于研究稳态扩散过程(扩散介质中各点的浓度不变), 而菲克第二定理则可以用来研究非稳态扩散。

(2) 苏联人克里切夫斯基对染料在染浴中扩散过程的研究^[2]

克里切夫斯基研究了在染液层流流动时的对流扩散情况, 在他的书中有介绍层流状态下的对流扩散方程:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = D \nabla^2 c \quad (1)$$

但是他并没有给该方程确定染色过程中的初始条件和边界条件, 也没有介绍对流扩散方程的推导过程, 更没有研究该方程在定解条件下的解。他通过对方程(1)的定性分析后指出在实际染色过程中由于分子扩散系数 D 很小(约为 $10^{-7} \sim 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$) 因此染色过程中运动液体的传质较分子扩散占很大的优势即在染浴中染料扩散主要依靠染液流动来进行, 稳态情况下即 $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ 时在整个搅拌着的液体中染料的浓度不变。

(3) 对扩散过程中发生的化学反应(如染料的水解反应等)的研究, 一般的染整书籍都有介绍染料在染浴中发生的化学反应。

由研究现状可以看出以往对染料在染浴中扩散过程的研究往往只单独考虑分子扩散或染料在染液中发生的一些化学反应, 苏联人克里切夫斯基虽有考虑到染液流动对扩散的影响, 但他只进行了稳态分析, 对于染料扩散的过渡过程只做了有限的定性分析。对此本文运用对流扩散理论研究了在染液进行一维流动时染料的扩散情况, 对染料扩散的过渡过程及稳态情况进行了定量的分析, 得到了染色过程中染浴里各点的染料浓度随时间的值, 详细地说明了染液流动对染料扩散的影响。

1

*福建省科技计划重点项目(批准号: 2006H0031)

2 扩散动力学模型

在实际染色中，布条在转布轮和水流的带动下转动。由于布条长，布轮转速较慢，（布条转一周需要几分钟），因此布条大部分时间浸泡在染液里。在染色过程中染液的流动可以等价于平行于布条和垂直于布条两个方向的流动。平行于布条的流速主要使染料在液面扩散，让染料在染液表面均匀分布，而染料向布料表面的扩散过程主要受垂直于布条流速的影响。因此本文主要研究在垂直于布面流速下染料向布料表面的一维扩散过程。在仅考虑垂直于布面的流速时染液流动情况如图 1 所示：

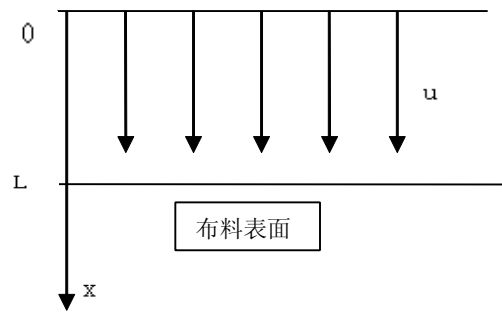


图 1 染料的一维对流扩散图

以液面作为 $x=0$ 的面，染液以速度 u 直于布料流动。布料距液面的距离为 L 。在实际染色过程中染料都是缓慢均匀的加入到缸内的（一般加料时间长达 20 分钟）因此可以假设液体表面的浓度恒定，即 $x=0$ 处浓度恒为 C_0 ，布料表面的浓度假设恒为 0。设从加料时开始计时即在 $t=0$ 时染浴中各点的浓度为 0。

下面推导染料的一维对流扩散方程

推导过程做以下假设：

- (1) 分子扩散系数为一常数
- (2) 染液流动情况为层流；
- (3) 染料的随流输移和分子扩散是相互独立的可以叠加的过程
- (4) 染料分子的存在不改变流体质点的流动特性，因此不影响流场。
- (5) 在流动过程中每个流体质点所含有的染料分子数量保持不变，流体质点之间不会发生染料分子的转移。因此染料的输移完全是流体质点运动的结果。

(6) 由于染料在染液中发生的化学反应很微弱对染料扩散过程影响较小，因此这里不考虑化学反应的作用。

扩散方程的建立：

在本论文中流速为 $\mathbf{u} = (u)$ ，染料浓度为 $\mathbf{c}(x, t)$ 。染料的扩散通量为 $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x, t)$ 。又设由于生物，化学等各种因数使控制体内染料的生产率（单位时间单位体积的产生量）为 F_c 。在流场中取定一个如图 2 的系统（它的体积可以是任意的），该系统在流动过程中 t 时刻所占的空间为控制体 $V(t)$ 。

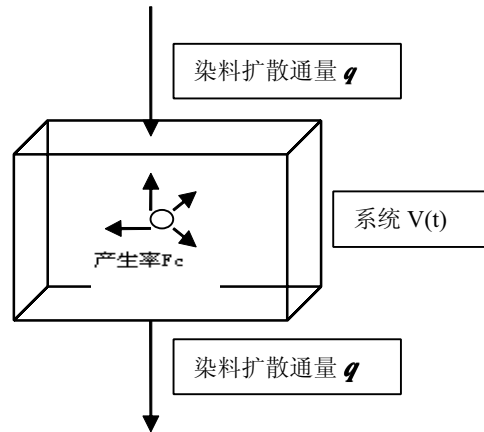


图2 染料在系统中的扩散示意图

对于这个包含固定流体质点的系统 $V(t)$ ，由染料质量守恒有：

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} c dV = - \iint_{S(t)} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS + \iiint_{V(t)} F_c dV \quad (2)$$

式中 $V(t)$ 为系统在时间 t 时所占据的体积， $S(t)$ 为 $V(t)$ 的表面积， \mathbf{n} 为表面单位法线向量。 \mathbf{q} 为染料分子扩散通量。

在系统内应用雷诺输运方程得到：

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} c dV = \iint_{S(t)} c \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \iiint_{V(t)} \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad (3)$$

对式 (2) 应用高斯公式得到：

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} c dV = - \iiint_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \iiint_{V(t)} F_c dV \quad (4)$$

对式 (3) 应用高斯公式得到：

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V(t)} c dV = \iiint_{V(t)} \nabla \cdot (c\mathbf{u}) dV + \iiint_{V(t)} \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad (5)$$

由方程 (4) 和 (5) 可以推导出

$$\iiint_{V(t)} \nabla \cdot (c\mathbf{u}) dV + \iiint_{V(t)} \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \iiint_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \iiint_{V(t)} F_c dV$$

即： $\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + F_c \quad (6)$

在实际中可以把染液当成不可压缩流体即 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$
 将场量恒等式 $\nabla \cdot (c\mathbf{u}) = c\nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla c$ 和 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ 代入式 (6) 得到

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = -\nabla \cdot \mathbf{q} + F_c \quad (7)$$

再将一维扩散的菲克第一定理表达式 $\mathbf{q} = -D \frac{\partial c}{\partial x}$ 代入到式 (7) 得到：

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = -D \frac{\partial c}{\partial x} + F_c \quad (8)$$

式 (8) 即为层流状态下的对流扩散方程。

由于本课题中不考虑化学反应因此 $F_c = 0$ 。将本文的条件 $\mathbf{u} = (u)$ ， $c = c(x, t)$ ，和 $F_c = 0$ 代入式 (8) 得到染色过程一维对流扩散动力学方程：

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad t > 0, 0 < x < l \quad (9)$$

u 是 x 方向的染液流速。

在式 (9) 中如果速度为零则得到一维分子扩散方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad t > 0, 0 < x < l \quad (10)$$

式 (9) 即为通常所说的一维扩散时的菲克第二定理表达式。

根据式 (9) 及染色过程的边界和初始条件就得到本文的一维对流扩散动力学模型：

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, t > 0, 0 < x < l \\ c(x, 0) = 0, 0 < x < l \\ c(0, t) = C_0, c(l, t) = 0, t \geq 0 \end{cases} \quad (11)$$

3 扩散方程的求解

3.1 对流扩散方程的求解

染料在染液中的扩散系数为 $10^{-7} \sim 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$ [2]，相对于染液流速来说很小，因此本论文涉及到的对流扩散方程是对流占优的。

层流扩散方程的求解是流体力学中的一个重要内容，层流扩散方程的求解主要有差分法和有限元法。有限元法适合于几何、物理上比较复杂的问题，对于一维对流扩散方程的求解通常用差分法。常用的差分方法主要有以下几种：

1)、中心显格式 [4]

该格式为显式格式编程简单，精度高，但是稳定条件苛刻，本论文的对流占优扩散方程不满足稳定条件。

2)、迎风差分格式 [4]

该格式为显式格式易编程也适合对流占优的情形但精度差。

3)、crank-nicholson 型隐式格式 [4]

该格式为隐式格式，精度好，稳定性好，但在求解对流占优问题时易引起数值震荡和数值扩散。文献 [5] 和 [6] 虽然对 crank-nicholson 算法进行了改进使之在求解对流占优的扩散方程时避免了数值震荡和数值扩散问题但求解过程过于复杂，不易编程。

根据本论文中扩散方程对流占优的特点，综合考虑算法的稳定性，精度等因素。这里采用文献 [7] 提出的适合对流占优扩散问题的特征差分法。此算法是绝对稳定的，可以避免数值震荡，数值扩散较小，比常用的指数格式 [9] 精确。此外，文献 [8] 提出的算法效果虽然和文献 [7] 接近但文献 [8] 的算法太复杂，难以编程求解。本文所用的特征差分算法如下：

设空间坐标 x 的取值范围为 $[0, l]$ ，时间范围是 $[0, T]$ ，将空间 $[0, l]$ 和时间 $[0, T]$ 离散，建立差分网格：

$x_j = jh, \quad t_n = n\tau, \quad j = 0, 1, \dots, J, \quad n = 0, 1, \dots, N$ 满足 $Jh = l, N\tau = T$ 。 x_j 表示空间第 j 个点与原点的距离， t_n 表示第 n 个时间点距初始时刻的时间。 h 为空间差分步长， τ 为时间差分步长。该算法的差分格式为：

$$rc_{j+1}^{n+1} - (1+2r)c_j^{n+1} + rc_{j-1}^{n+1} = -(1-p)c_{j-k}^n - pc_{j-k-1}^n \quad (11)$$

其中 c_j^n 为与原点距离为 jh 的点在时刻 $n\tau$ 的浓度值。 r, p 为算法中引入的中间变量

$p = \frac{U_0\tau}{h} - k$, $k = [\frac{U_0\tau}{h}]$, $[\frac{U_0\tau}{h}]$ 表示取整, $r = \alpha D \frac{\tau}{h^2}$, $\alpha = \frac{1}{1+R}$, $R = \frac{U_0 h}{2D}$ 。 U_0 为染液的流速, D 为染料的扩散系数。

3.2 纯分子扩散方程的求解

本文中为了方便分析比较, 也对纯分子扩散方程进行了求解(即流速为零的情况)。纯扩散情形的算法比较多, 这里采用文献[10]介绍的最简显式格式。该算法的精度为 $o(\tau + h^2)$ 稳定条件是 $r = \frac{D\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ 。染料在染液中扩散时扩散系数 D 很小大约为 $10^{-7} \sim 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$, 因此通常情况下均满足稳定条件。

4 数值结果的分析与讨论

在数值求解时各参数取值如下:

扩散系数取 NaCl 在稀薄水溶液中温度为 50°C 时的扩散系数: $2.63 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$ [1]; x 的范围为 $[0, 1]$ (单位是厘米); $C_0 = 5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $h = 0.05$, $\tau = 0.02$ 。

经编程求解可以得到染浴中各点的浓度随时间的值。例如: 当 $u = 1 \text{ cm/s}$ 时, 在 $x = 0.95 \text{ cm}$ 处和 $x = 0.4 \text{ cm}$ 处的浓度变化曲线为(时间单位为秒):

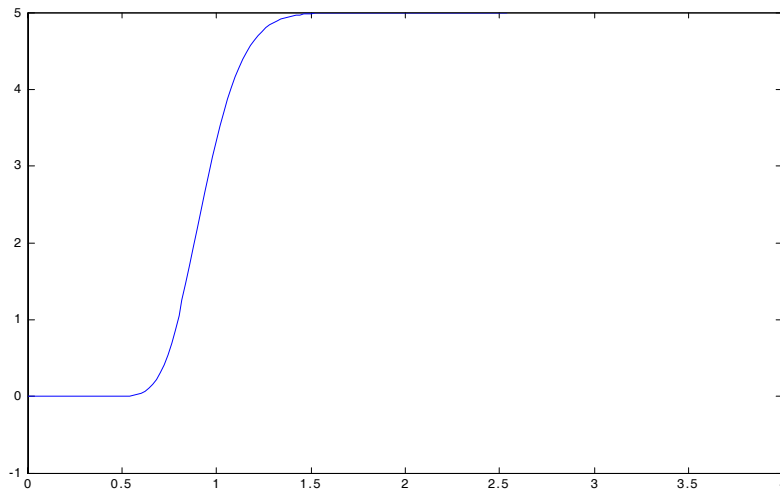


图3 染液流速为 1 cm/s 时布料表面附近 ($x = 0.95 \text{ cm}$) 浓度变化曲线

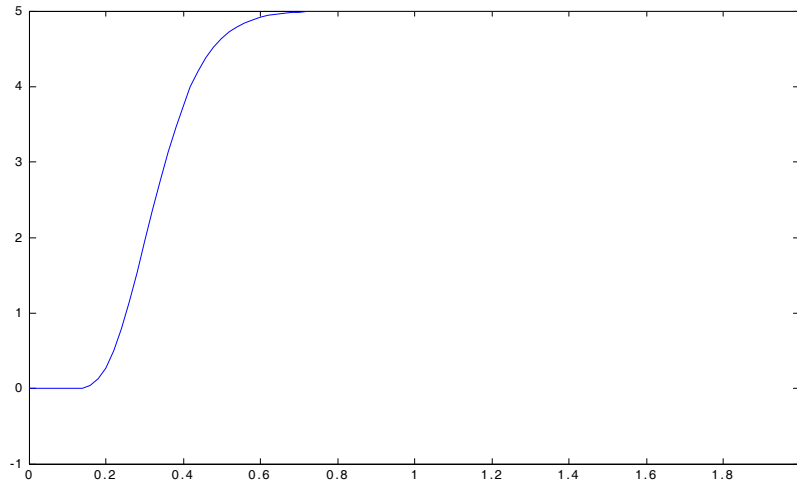


图4 染液流速为 1 cm/s 时 $x=0.4$ 处的浓度变化曲线

未考虑染液流动即在纯扩散情况下在 $x=0.95\text{ cm}$ 处的浓度变化曲线为 (时间单位为秒):

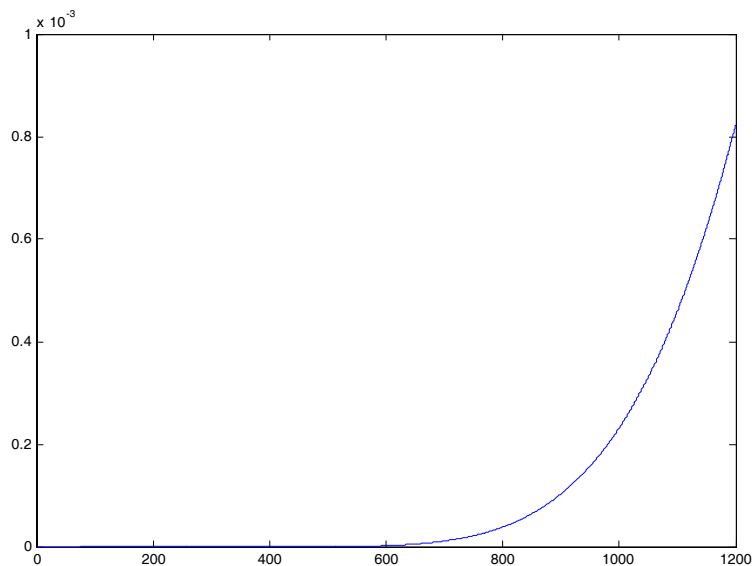


图5 未考虑染液流动时布料表面附近 ($x=0.95\text{ cm}$) 浓度变化曲线

对比图 3、5 可以看出, 在染液缓慢的流动情况下布料表面附近的浓度就迅速上升, 流速为 1 cm/s 时仅经过 1.5 秒就达到了最大值, 相反未考虑染液流动的扩散过程则异常缓慢, 20 分钟布料表面附近的浓度还未到 $1 \times 10^{-3}\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。由此可以清楚地说明染料在染液中扩散时染液流速对扩散过程起决定性作用, 浓度上升速率几乎只取决于染液流速。

5 结论

本文运用流体力学理论建立了染料在染液中的对流扩散动力学模型, 并选择了合适的数值算法求出了该动力学模型的数值解。

通过求解对流扩散动力学模型, 我们可以得到染色过程染浴中各点的染料浓度随时间的值, 为进一步研究染色过程染料浓度的数学模型提供了理论依据。本文的研究结果还进一步表明流速对染料在染液中的扩散速度起决定性作用。因此我们在实际印染过程中可以适当的增加转轮的转速和喷口的水压来增加染液流速进而提高上染速率。

参考文献

- [1] 章梓雄, 董曾南. 粘性流体力学[M], 北京: 清华大学出版社, 1998, 1-20, 299-303.
- [2] [苏]克里切夫斯基, 染色和印花过程的吸附与扩散[M], 高敬琼译。北京: 纺织工业出版社, 1985, 65-81.
- [3] 黑木宣彦(日), 染色理论化学(上册)[M], 陈水林译, 北京: 纺织工业出版社 1981, 39-79, 130-154.
- [4] 陆金甫, 关治. 偏微分方程数值解法[M], 北京: 清华大学出版社, 1987, 1-49, 165-171.
- [5] 曾晓艳, 陈建业, 孙乐林. 对流扩散方程的一种新型差分格式[J], 数学杂志, 2003, 23(1): 37-42.
- [6] 刘扬. 对流扩散方程的新型 Crank-Nicholson 差分格式[J], 数学杂志, 2005, 25(4): 463-467.
- [7] 陆金甫, 刘晓遇, 杜正平. 对流占优扩散问题的一种特征差分方法[J], 清华大学学报(自然科学版), 2002, 42(8): 1125-1127.
- [8] 黄素珍, 张鲁明. 对流扩散方程的一种高精度特征差分格式[J], 南京师大学报(自然科学版), 2005, 28(2): 38-41, 70.
- [9] 陆金甫, 顾丽珍, 陈景良. 偏微分方程差分方法[M], 高等教育出版社, 1988, 236-239.
- [10] 邓建中, 刘之行. 计算方法[M], 西安交通大学出版社(第2版), 2001, 271-282.

A study on convection-diffusion Kinetics model in dyeing processes

Liangliang Chen, Fu jiang Jin

College of Information Science and Engineering, HuaQiao University, Quanzhou ,Fujian 362021

Abstract

In this paper, considering the convection-diffusion processes of the dyestuff we presented a convection-diffusion kinetics model in dyeing processes . Then we solved the convection-diffusion kinetics model by characteristic-difference method. By solving the convection-diffusion kinetics equation ,we can know the chroma of dyestuff in everywhere at any time in the dyebath. On the other hand ,comparing the processes of convection-diffusion with the processes of diffusion we can conclude that the diffusion rate of dyestuff is mainly lied on the velocity of fluid dyebath.

Keywords: dyestuff diffusion, convection-diffusion equations, characteristic-difference method