



دانشگاه گیلان
۱۳۵۳_۱۹۷۴

چاپ اول

تألیف:
رنزو شیء می، زیومینگ ژائو
ترجمه:
دکتر جواد مختاری
استاد دانشکده فنی دانشگاه گیلان
سیده آمنه سیادت

مدل سازی، شبیه سازی و کنترل فرآیند رنگرزی

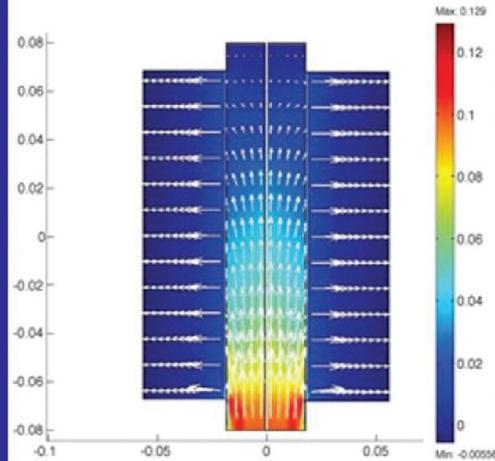
مدل سازی، شبیه سازی و کنترل
فرآیند رنگرزی

Modelling, Simulation and Control of the Dyeing Process

By:
Renzo Shamey, Xiaoming Zhao
Translated by:
Javad Mokhtari, Ph. D
Seyedeh Ameneh Siadat

اداره چاپ و انتشارات دانشگاه گیلان

University of Guilan Press



تألیف: رنزو شیء می
زیومینگ ژائو
ترجمه: دکتر جواد مختاری
سیده آمنه سیادت



ISBN: 978-600-153-214-6



مدل سازی، شبیه سازی و کنترل فرآیند رنگرزی

تألیف:

رنزو شی می، زیومینگ ژائو

ترجمه:

دکتر جواد مختاری

استاد دانشکده فنی دانشگاه گیلان

سیده آمنه سیادت

انتشارات دانشگاه گیلان

۱۳۹۸



شابک: ۶- ۲۱۴ - ۱۵۳ - ۶۰۰ - ۹۷۸

سرشناسه	: شمی، رنزو Shamey, R. (Renzo)
عنوان و نام پدیدآور	: مدل سازی، شبیه سازی و کنترل فرآیند رنگرزی / رنزوشی می، زیو مینگ ژائو؛ ترجمه جواد مختاری، سیده آمنه سیادت؛ ویراستار علمی محمدعلی صالحی؛ ویراستار ادبی هوشنگ سپهری.
مشخصات نشر	: رشت: دانشگاه گیلان، انتشارات، ۱۳۹۸.
مشخصات ظاهری	: ۳۱۳ ص: مصور.
شابک	: 978-600-153-214-6
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: عنوان اصلی: Modelling, simulation and control of the dyeing process, 2014.
یادداشت	: کتابنامه.
موضوع	: رنگ و رنگرزی -- نوآوری
موضوع	: Dyes and dyeing -- Technological innovations
موضوع	: رنگ و رنگرزی -- شبیه سازی کامپیوتری
موضوع	: Dyes and dyeing -- Computer simulation
موضوع	: رنگ و رنگرزی
موضوع	: Dyes and dyeing
شناسه افزوده	: جاتو، شیائومینگ
شناسه افزوده	: Zhao, Xiaoming
شناسه افزوده	: مختاری، جواد، ۱۳۴۷ -، مترجم
شناسه افزوده	: سیادت، سیده آمنه، ۱۳۶۹ -، مترجم
شناسه افزوده	: صالحی، محمدعلی، ۱۳۵۴ -، ویراستار
شناسه افزوده	: دانشگاه گیلان. انتشارات
رده بندی کنگره	: TP۹۱۰
رده بندی دبیری	: ۶۶۷/۳
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۸۵۱۴۰۵

اداره چاپ و انتشارات دانشگاه گیلان

نام کتاب	: مدل سازی، شبیه سازی و کنترل فرآیند رنگرزی
مولفان	: رنزوشی می، زیو مینگ ژائو
مترجمان	: دکتر جواد مختاری، سیده آمنه سیادت
ویراستار علمی	: دکتر محمد علی صالحی
ویراستار ادبی	: هوشنگ سپهری
نوبت چاپ	: اول، ۱۳۹۸
ناشر	: انتشارات دانشگاه گیلان
شمارگان	: ۱۰۰۰ جلد
قیمت	: ریال

* هر گونه چاپ و تکثیر فقط در اختیار انتشارات دانشگاه گیلان است.*

فهرست مطالب

أ	پیشگفتار مؤلف
ح	پیشگفتار مترجمان
خ	تعریف لغات
س	واژه نامه
۱	۱. مقدمه ای بر رنگرزی و اتوماسیون سالن رنگرزی
۱	۱.۱. مقدمه
۱	۱.۱.۱. الیاف نساجی
۴	۲.۱.۱. رنگزاها
۷	۳.۱.۱. رنگرزی
۸	۴.۱.۱. مراحل مختلف رنگرزی مواد نساجی
۹	۲.۱. عوامل موثر بر کیفیت رنگرزی
۱۱	۳.۱. مشکلات عملی موجود در کنترل فرآیند رنگرزی
۱۱	۱.۳.۱. نرخ رنگرزی
۱۲	۲.۳.۱. نرخ جریان
۱۳	۳.۳.۱. مرحله اولیه رنگرزی
۱۳	۴.۳.۱. انواع رنگزا/ لیف و بررسی مهاجرت رنگزا
۱۴	۵.۳.۱. عوامل موثر بر یکنواختی رنگرزی
۱۴	۶.۳.۱. اندازه گیری یکنواختی
۱۴	۴.۱. ماشین آلات رنگرزی بسته نخ
۱۵	۱.۴.۱. الزامات رنگرزی بسته نخ برای رنگرزی یکنواخت
۱۶	۲.۴.۱. محفظه رنگرزی
۱۸	۳.۴.۱. حمل کننده بسته نخ
۱۸	۴.۴.۱. پمپها
۱۹	۵.۴.۱. دستگاههای گرمایشی
۱۹	۶.۴.۱. دستگاههای جریان مایع و برگشت جریان
۲۰	۷.۴.۱. مخازن جانبی و نمونه برداری
۲۱	۵.۱. مشکلات در رنگرزی بسته نخ
۲۲	۱.۵.۱. اثر گردش محلول در رنگرزی

۲۴	۲.۵.۱. جریان انبوه
۲۴	۳.۵.۱. جریان پراکنده
۲۵	۴.۵.۱. اثر جریان‌های پراکنده و انبوه
۲۵	۵.۵.۱. اثر شکل و تراکم بسته در رنگرزی یکنواخت
۲۷	۶.۵.۱. اثر نرخ جذب رنگزا از محلول
۳۰	۶.۱. اتوماسیون در سالن رنگرزی
۳۱	۱.۶.۱. کنترل دما
۳۲	۲.۶.۱. کنترل رمق‌کشی
۳۴	۳.۶.۱. نمودارهای رمق‌کشی
۳۷	۴.۶.۱. تجزیه و تحلیل رویکرد مهندسی شیمی
۳۸	۷.۱. منابع
۴۶	۲. اصول اساسی در فرآیند رنگرزی
۴۶	۱.۲. مقدمه
۴۷	۲.۲. انتقال رنگزا از حجم محلول به سطح لیف
۵۲	۳.۲. جذب سطحی رنگزاها توسط الیاف نساجی
۵۲	۱.۳.۲. جذب سطحی از محلول
۵۳	۲.۳.۲. ایزوترم‌های جذب سطحی
۵۷	۳.۳.۲. بیان دینامیکی عمومی جذب و واجذب رنگزا توسط الیاف
۵۹	۴.۳.۲. تمایل ذاتی استاندارد یک رنگزا
۶۶	۴.۲. نفوذ رنگزا به درون بخش داخلی لیف
۶۶	۱.۴.۲. پدیده‌های نفوذ
۶۸	۲.۴.۲. قوانین فیک در فرآیند نفوذ
۷۰	۳.۴.۲. عوامل موثر بر نفوذ
۷۱	۵.۲. نرخ رنگرزی
۷۴	۶.۲. منابع
۸۲	۳. انتقال رنگزا در سیستم‌های سیال
۸۲	۱.۳. مقدمه
۸۳	۲.۳. ویژگی‌های سیال در دورنمای سه بُعدی
۸۳	۱.۲.۳. رفتار مکانیکی یک سیال

۸۵	۲.۲.۳. جریان آرام
۸۶	۳.۲.۳. تعادل تکانه
۸۸	۳.۳. جریان‌ها در محیط‌های متخلخل
۸۸	۱.۳.۳. تعریف محیط‌های متخلخل
۹۱	۲.۳.۳. معادله تعادل تکانه در محیط‌های متخلخل
۹۳	۳.۳.۳. نفوذپذیری
۹۷	۴.۳. انتقال جرم در اثر جابه‌جائی در سیستم سیال
۹۷	۱.۴.۳. پراکندگی جابه‌جائی
۱۰۱	۲.۴.۳. پراکندگی با جذب سطحی در محیط‌های متخلخل
۱۰۳	۳.۴.۳. پراکندگی در جریان آرام: پراکندگی تیلور
۱۰۴	۴.۴.۳. مدل‌های پراکندگی
۱۰۶	۵.۳. انتقال رنگزا در رنگرزی
۱۰۷	۱.۵.۳. مطالعات مک‌گریگور
۱۰۹	۲.۵.۳. مطالعات هافمن و مولر
۱۱۱	۳.۵.۳. مطالعات نابس و رن
۱۱۲	۴.۵.۳. مطالعات برلی و وای
۱۱۴	۵.۵.۳. مطالعات تلجین
۱۱۶	۶.۵.۳. مطالعات شانون و همکارانش
۱۱۹	۷.۵.۳. مطالعات شارف و کارست به همراه گروهشان
۱۲۰	۶.۳. منابع
۱۲۶	۴. پیشرفت مدل‌های نظری رنگرزی
۱۲۶	۱.۴. مقدمه
۱۲۷	۱.۱.۴. مدل‌ها بر پایه پراکندگی جابه‌جائی
۱۲۸	۲.۱.۴. مدل‌ها بر پایه مکانیک سیالات
۱۲۹	۳.۱.۴. مدل‌ها بر پایه پراکندگی جابه‌جائی و مکانیک سیالات
۱۳۰	۲.۴. شرح سیستم و فرضیات اساسی
۱۳۰	۱.۲.۴. شرح سیستم
۱۳۲	۲.۲.۴. فرضیات اساسی
۱۳۴	۳.۲.۴. تعریف هندسه سیستم

۱۳۶	۳.۴. توسعه مدل ریاضی
۱۳۶	۱.۳.۴. مشتق معادله دیفرانسیلی انتقال رنگزا با جذب در رنگرزی بسته نخ
۱۴۲	۲.۳.۴. مدل سازی جریان سیال درون بسته
۱۴۵	۳.۳.۴. مدل سازی جریان سیال در لوله
۱۴۸	۴.۴. منابع
۱۵۰	۵. حل معادلات دینامیکی در فرآیند انتقال رنگزا
۱۵۰	۱.۵. مقدمه
۱۵۱	۲.۵. روش های عددی
۱۵۱	۱.۲.۵. روش های تفاضل محدود
۱۵۳	۲.۲.۵. روش های امان محدود
۱۵۶	۳.۲.۵. نرم افزار متلب
۱۵۶	۳.۵. خلاصه معادلات مدل سازی
۱۵۷	۱.۳.۵. معادلات جریان
۱۵۷	۲.۳.۵. معادلات انتقال جرم
۱۵۸	۴.۵. راه حل های عددی معادلات
۱۵۸	۱.۴.۵. پارامترهای استفاده شده در شبیه سازی
۱۵۹	۲.۴.۵. معادلات مدل سیال
۱۶۳	۳.۴.۵. معادلات مدل انتقال جرم
۱۶۶	۵.۵. منابع
۱۶۸	۶. شبیه سازی فرآیند رنگرزی
۱۶۸	۱.۶. مقدمه
۱۶۸	۲.۶. رفتار جریان سیال در رنگرزی
۱۶۸	۱.۲.۶. اثر تنش های برشی بر انتقال کلی تکانه در سیال
۱۷۸	۲.۲.۶. اثر نرخ جریان بر سرعت جریان سیال درون بسته
۱۸۰	۳.۲.۶. ارتباط بین نرخ جریان و فشار محلول
۱۸۲	۴.۲.۶. اثر ابعاد بسته
۱۸۴	۵.۲.۶. اثر نفوذپذیری بسته
۱۸۸	۶.۲.۶. اثر دمای محلول
۱۸۸	۳.۶. رفتار دینامیکی انتقال جرم در رنگرزی بسته

۱۸۹	۱.۳.۶. اثر عوامل جذب بر رنگرزی بسته
۱۹۹	۲.۳.۶. اثر عوامل جابه‌جائی
۲۰۲	۳.۳.۶. اثر عوامل پراکندگی
۲۰۵	۴.۳.۶. اثر عوامل بسته
۲۰۹	۵.۳.۶. مقایسه رفتار رنگرزی برای نمودارهای مختلف از ورود تدریجی مواد
۲۱۳	۴.۶. نتیجه‌گیری‌ها از نتایج شبیه‌سازی
۲۱۵	۱.۴.۶. عامل جذب
۲۱۶	۲.۴.۶. عامل جابه‌جائی
۲۱۶	۳.۴.۶. عامل پراکندگی
۲۱۶	۴.۴.۶. هندسه بسته
۲۱۷	۵.۴.۶. رنگرزی مداوم (تدریجی)
۲۱۸	۵.۶. منابع
۲۱۹	۷. اصول کنترل در فرآیندهای رنگرزی
۲۱۹	۱.۷. مقدمه
۲۲۰	۲.۷. مقدمه‌ای بر کنترل فرآیند
۲۲۴	۳.۷. الگوریتم‌های کنترل
۲۲۴	۱.۳.۷. حالت‌های کنترل کننده ناپیوسته
۲۲۶	۲.۳.۷. حالت‌های کنترل کننده پیوسته
۲۳۰	۳.۳.۷. حالت‌های کنترل ترکیبی
۲۳۳	۴.۷. پردازش آنالوگ و دیجیتال
۲۳۴	۵.۷. کاربرد عملی در یک عملیات آزمایشگاهی
۲۳۷	۱.۵.۷. اندازه‌گیری و کنترل دما
۲۳۸	۲.۵.۷. اندازه‌گیری و کنترل جریان
۲۴۰	۳.۵.۷. حسگرهای فشار
۲۴۰	۴.۵.۷. کنترل ورود تدریجی مواد شیمیائی
۲۴۰	۵.۵.۷. اندازه‌گیری غلظت رنگزا
۲۴۱	۶.۵.۷. کنترل و اندازه‌گیری pH
۲۵۲	۷.۵.۷. خطای یون سدیم
۲۵۴	۸.۵.۷. اثر حضور لیف و pH درونی لیف

۲۵۷	۹.۵.۷. خطای اسید
۲۵۷	۱۰.۵.۷. سایر منابع احتمالی
۲۵۸	۱۱.۵.۷. آب مقطر یا آب با خلوص بالا
۲۵۹	۶.۷. اندازه‌گیری و کنترل pH در سیستم رنگریزی
۲۵۹	۱.۶.۷. کالیبراسیون
۲۶۱	۲.۶.۷. اندازه‌گیری مقادیر pH توسط کامپیوتر و pH سنج
۲۶۱	۳.۶.۷. پیشرفت نرم افزار برای کنترل pH
۲۶۲	۴.۶.۷. کنترل بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده‌ی ورود تدریجی مواد
۲۶۶	۵.۶.۷. کنترل بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده‌ی تغییرات pH
۲۷۱	۶.۶.۷. ارتباط بین غلظت یونی و pH
۲۷۴	۷.۶.۷. خلاصه استراتژی کنترل
۲۷۵	۷.۷. استراتژی کنترل تغذیه پیش‌رو
۲۷۶	۱.۷.۷. محاسبه نرخ رمق‌کشی مجموعه با استفاده از یک دمای معین
۲۸۴	۲.۷.۷. اصلاح مدل نظری
۲۸۶	۳.۷.۷. ارزیابی عملکرد مدل با استفاده از شبیه‌سازی‌ها
۲۸۸	۴.۷.۷. ارزیابی عملکرد مدل با استفاده از ماشین‌آلات رنگریزی
۲۸۹	۵.۷.۷. مقایسه کلی نمودارهای مختلف کنترل
۲۹۰	۸.۷. تقدیر و تشکر
۲۹۰	۹.۷. منابع
۲۹۳	۸. اندازه‌گیری و کنترل رنگریزی
۲۹۳	۱.۸. مقدمه
۲۹۵	۱.۱.۸. قانون بیر- لامبرت
۲۹۶	۲.۸. اندازه‌گیری بی وقفه غلظت رنگزا
۲۹۶	۱.۲.۸. ابزارآلات
۲۹۷	۲.۲.۸. کالیبراسیون رنگزاهای تک و ترکیبی
۲۹۹	۳.۲.۸. صحت، دقت و نرخ‌های نمونه
۳۰۹	۳.۸. پردازش داده‌ها و ابزارهایی برای تجزیه و تحلیل و تفسیر داده‌های بی وقفه نظارت رنگزا
۳۱۱	۴.۸. نتیجه‌گیری
۳۱۲	۵.۸. منابع

پیشگفتار مؤلف

رنگ یکی از مهم‌ترین معیارها در تولید و فروش منسوجات است. این امر به‌طور چشمگیری بر حجم فروش تاثیر می‌گذارد و همچنین به‌طور مستقیم با رضایتمندی مشتری مرتبط است. تقاضای بازار و مد مستلزم آن است که رنگرها توانایی فراهم کردن شیدهای^۱ متنوع در دوره‌های زمانی نسبتاً کوتاه را داشته باشند. نیاز به کاهش زمان رنگری در طول اطمینان از حفظ استانداردها، استفاده از استراتژی‌های کنترل پیشرفته را ضروری می‌سازد. این امر مستلزم نظارت دقیق و کنترل پارامترهایی است که اثر متقابل رنگزا با الیاف در حمام رنگری را تحت تاثیر قرار می‌دهد و بنابراین یکی از مهم‌ترین جنبه‌های تولید در زنجیره عرضه نساجی است. هدف این کتاب معرفی توسعه و کاربرد سیستم‌های نظارت و کنترل قابل اعتماد برای رنگری الیاف نساجی به‌منظور حصول فرآیندهای رنگری است که هم مقرون به صرفه و هم سازگار با محیط زیست هستند. پارامترهای تاثیرگذار مختلف، از جمله دما، جهت و جریان سیال، pH و غلظت رنگزا در حمام رنگری، در کنترل بی‌وقفه و از پیش تنظیم شده‌ی رمق‌کشی متداول (همه محتویات در داخل حمام رنگری) و همین‌طور افزایش تدریجی محتویات حمام رنگری و مواد کمکی بحث می‌شود و نقش آنها در کنترل رمق‌کشی رنگزا و یکنواختی رنگزا نمایان می‌شود. از نظر مدل‌سازی، کتاب حاضر به‌طور کلی بر رنگری به روش رمق‌کشی^۲ (به‌خصوص فرآیندهای رنگری با ماشین رنگری بیم یا بوبین رنگ کنی) تمرکز دارد، به‌طوری‌که آنها اجازه می‌دهند تا اصول مهندسی شیمی حاکم بر راکتورهای بستر ثابت در رنگری منسوجات شبیه‌سازی شوند. برخی از مدل‌های نسبتاً آسان نیز می‌توانند جهت کاربرد در دیگر ماشین آلات و فرآیندها مورد اصلاح قرار گیرند.

کاربرد نمودارهای رمق‌کشی از پیش تنظیم شده (خطی، درجه دوم یا نمایی) در رنگری الیاف نساجی و همچنین مزایا و معایب مرتبط با استفاده از این روش‌ها بررسی می‌شود. محاسبه نرخ رمق‌کشی رنگزا در این فرآیندها براساس مدل‌های ریاضی مختلف بیان می‌شود. الگوریتم‌های کنترل تغذیه پیش‌رو معرفی و کاربردشان در تعیین نرخ بهینه رمق‌کشی رنگزا در حمام رنگری براساس شرایط حمام رنگری شرح داده می‌شوند. همچنین، مدل‌سازی کنترل حمام رنگری با افزایش مرحله‌ای رنگزا یا مواد شیمیائی به آن (روش‌های رنگری تدریجی) بررسی می‌شود. مانع اصلی در

¹ Shades

² Batch

تجاری‌سازی این روش هزینه‌ی بالای سرمایه‌گذاری و نیاز بالقوه برای طراحی مجدد ماشین‌آلات رنگرزی بوده است. با این حال، کاهش قابل توجه در هزینه اجزای سازنده، از جمله اسپکتروفوتومترها و نیز افزایش قدرت محاسبات در هزینه‌های پایین، این روش را تا حدودی رونق بخشیده است. در واقع، تعدادی از شرکت‌ها در ایالات متحده و شرق دور (چین، تایوان، کره جنوبی و ...) آخرین فناوری‌ها را برای بهبود نرخ‌های رنگرزی محصولات تولیدی بی نقص خود به کار می‌گرفتند.

با توجه به این نگرش‌ها، کتاب حاضر به ۸ فصل تقسیم می‌شود. فصل ۱ مفهوم رنگرزی منسوجات بر پایه مرور مختصری بر انواع مختلف رنگزاها و الیاف و نیز برهم‌کنش بین رنگزاها و مجموعه لیفی را معرفی می‌کند. روش کنترل فرآیندهای رنگرزی بر اساس نمودارهای دما- زمان متداول و همچنین براساس کنترل نرخ رمق‌کشی رنگزا در زمان واقعی معرفی می‌شود. سپس، فرآیندهای رنگرزی نخ و پارامترهای موثر بر جذب و نفوذ رنگزا به درون بوبین نخ توصیف می‌شوند. ایزوترم‌های مختلف جذب و عواملی که بر رنگرزی الیاف موثر بوده است نیز بررسی می‌شوند. همچنین، استراتژی‌های مختلف کنترل بر پایه ارزیابی مقدار رنگزای موجود در حمام رنگرزی به‌طور خلاصه ارزیابی می‌شوند.

فصل ۲ اصول اساسی فرآیند رنگرزی را ارائه می‌دهد. سپس، برخی از جنبه‌های کمی سینتیک و تعادل رنگرزی، شامل تمایل استاندارد رنگزاها و نرخ رنگرزی مورد بررسی قرار می‌گیرد. تغییر در پتانسیل شیمیائی رنگزا در حالت استاندارد از محلول به لیف به‌دلیل حضور الکترولیت بیان می‌شود. انتقال رنگزا در حمام رنگرزی شامل جذب و واجذب توصیف شده و ایزوترم‌های مختلف جذب مورد بررسی قرار می‌گیرد. بیان دینامیکی عمومی جذب و واجذب رنگزا توسط الیاف نساجی معرفی می‌شود. سپس، پدیده‌های نفوذ و مدل‌های بیان‌کننده نفوذ رنگزا به درون الیاف نساجی مورد ارزیابی قرار می‌گیرند.

در فصل ۳، زمینه‌های نظری برای توصیف مکانیکی پدیده‌های جریان در کانال باز و محیط‌های متخلخل بیان می‌شود. آثار مربوطه تشریح و معادلات حاکم بر جریان توضیح داده می‌شوند. مفاهیم اساسی پراکندگی، جابه‌جائی و نفوذ روشن و مدل‌های توصیف‌کننده این فرآیندها ارزیابی می‌شوند. سپس، نقش جریان متراکم و پراکنده در انتقال رنگزا به درون محیط بسته و اثر پارامترهای جریان بر مدل‌سازی نفوذ و پراکندگی رنگزا مورد بررسی قرار می‌گیرند و مدل‌های مختلف شامل خواص جریان ارزیابی می‌شوند.

فصل ۴ مدل‌های نظری را برای شبیه‌سازی فرآیندهای رنگرزی از نتیجه‌گیری مهم مختصر بر پایه مدل‌های پراکندگی جابه‌جائی و مکانیک سیالات و همچنین مدل‌های توصیف کننده هر دوی انتقال رنگزا و پدیده‌ی جریان در طول رنگرزی را ارائه می‌دهد. با استفاده از مفاهیم نظری مورد بحث در فصل‌های گذشته، این سیستم به‌وسیله مجموعه‌ی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی توصیف می‌شود. قانون داریسی^۱، معادلات ناویر-استوکس^۲ و برینکمن^۳ مورد بررسی قرار می‌گیرند. همچنین، شرایط مرزی و اولیه تعریف و شرح داده می‌شوند. راه حل‌های این مدل‌ها که رفتار دینامیکی سیستم را تحت شرایط داده شده از سرعت جریان و پارامترهای رنگرزی ارائه می‌دهند نیز مقایسه می‌شوند.

فصل ۵ آزمایشی از راه‌حل‌های عددی مدل‌های رنگرزی را ارائه می‌دهد که می‌تواند به شرایط مختلف اعمال شود. همچنین، کاربرد نرم افزارهای تحلیلی در حل سیستم‌های غیرخطی مراتب بالا که هم زمان با معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی پیوند خورده است شرح داده می‌شوند. روش‌های تفاضل محدود و المان محدود معرفی می‌شوند. همچنین، تقسیم‌بندی هندسی مجموعه لیفی به واحدهای کوچک از یک شکل ساده (یا می‌ش) نیز مورد بررسی قرار می‌گیرد. شکل‌های چند ضلعی به کار رفته جهت تعریف المان‌ها نیز به اختصار شرح داده می‌شوند. هندسه‌های مشخص، شرایط مرزی و مش سیستم برای تعیین راه حل‌های معادلات جریان و یا مدل‌های انتقال جرم استفاده می‌شوند.

در فصل ۶ نتایج حاصل از شبیه‌سازی فرآیند رنگرزی بسته‌ی نخ براساس مدل‌های مختلف ارائه شده است. در این بخش توضیح داده می‌شود، در حالی که قانون داریسی فرض می‌کند که تنها نیروی محرکه برای جریان در یک محیط متخلخل، گرادیان فشار است و انتقال کلی حرکت توسط تنش برشی در سیال نادیده گرفته می‌شود، معادلات برینکمن می‌توانند برای توسعه قانون داریسی جهت انتقال گرانیو^۴ در تعادل تکانه^۵ و سرعت در جهت‌های فضایی به عنوان متغیرهای وابسته به کار گرفته شوند. این مدل‌ها، همچنین تاثیر سرعت و جهت جریان، نفوذپذیری بسته نخ و نمودارهای ورود رنگزا بر توزیع رنگزا، را شرح داده و اعتبار آنها را مورد بررسی قرار می‌دهند.

¹ Darcy's Law

² Navier-Stokes

³ Brinkman

⁴ Viscous transport

⁵ Momentum balance

قسمت اول فصل ۷ انواع اصلی استراتژی‌های کنترل را معرفی می‌کند. روش‌های ریاضی کنترل پارامترهای مختلف رنگرزی، به‌خصوص اندازه‌گیری pH، تاثیر پارامترهای مختلف بر pH و گسترش استراتژی‌های کنترل pH مورد بررسی قرار می‌گیرند. همچنین، کارایی استراتژی‌های مختلف کنترل در نتیجه رنگرزی، با استفاده از یک ماشین بوبین رنگ کنی آزمایشگاهی به‌طور مختصر بررسی می‌شود. کنترل فرآیند رنگرزی بر طبق رمق‌کشی از پیش تنظیم شده است و سایر نمودارها نیز شرح داده می‌شود. استراتژی‌های کنترل نشان داده شده در این فصل از مزیت کنترل کننده‌های دیجیتال و آنالوگ پایه استفاده می‌کنند و به خوانندگان توصیه می‌شود که دیگر کنترل کننده‌های پیچیده در دسترس و همچنین برنامه‌های نرم افزاری پیشرفته را برای تسهیل این فرآیند در نظر بگیرند.

جای خوشحالی است که ما فصل ۸ را که توسط پروفیسور وارن جاسپر^۱ از دانشگاه ایالتی کارولینای شمالی و دکتر ملیح گونای^۲ نوشته شده است، در این کتاب آوردیم که این پژوهشگران نظارت حمام رنگرزی در زمان واقعی را در انواع ماشین آلات رنگرزی پوشش می‌دهند. آنها در مورد اصول فناوری نظارت حمام رنگرزی که امکان تجزیه و تحلیل و کنترل فرآیند رنگرزی را فراهم می‌کند، بحث می‌کنند و از قانون بیر^۳ برای تعیین مقدار رنگزا در حمام رنگرزی حتی در مخلوط استفاده می‌کنند. در ادامه اصل جمع‌پذیری و شکل‌پذیری طیفی مورد بررسی قرار می‌گیرد و کاربردشان در محاسبه نرخ و مقدار رمق‌کشی رنگزا از حمام رنگرزی شرح داده می‌شود. آنها نتیجه می‌گیرند که چنین فناوری اندازه‌گیری می‌تواند در رفع علل ریشه‌ای در بازتولید شید که ممکن است از تغییر در قدرت رنگ، پارچه یا فرآیند رنگرزی رخ دهد، کمک کند.

انجام فعالیت‌های مرتبط و مستندات بعدی آن که منجر به نوشتن این کتاب شده، بیش از ۲ دهه زمان برده است. نوشتن این کتاب بدون انجام تحقیقات اولیه تحت راهنمایی دکتر ج. اچ. نابس^۴ از گروه شیمی رنگ دانشگاه لیدز بریتانیا در اوایل ۱۹۹۰ امکان‌پذیر نبود. دکتر نابس کاربرد نرم افزار کامپیوتری Quick Basic 4.5 را برای کنترل ماشین‌آلات رنگرزی در مقیاس آزمایشگاهی در اواخر دهه ۱۹۸۰ در دانشگاه لیدز گسترش داد. این کار توسط تعدادی از پژوهشگران، از جمله یکی از نویسندگان این کتاب،

¹ Professor Warren Jasper

² Melih Günay

³ Beer's law

⁴ J. H. Nobbs

طی یک دوره ۱۰ ساله گسترش یافت. این نرم افزار برخی از مدل‌های مورد بحث در بخش‌های خاصی از این کتاب را شامل می‌شود. ما از تعداد زیادی از دانشجویان تحصیلات تکمیلی، همکاران و دوستان کمک دریافت کردیم که از آنها قدردانی می‌شود. همچنین، از دکتر جووان لین^۱ برای همکاری در رسم برخی شکل‌ها و آقای ام. زُبیر^۲ برای همکاری در جمع‌آوری منابع سپاسگزاریم.

بر این باوریم که این کتاب، باید منبع خوبی از اطلاعات نه تنها برای دانشگاهیان و پژوهشگران بلکه برای متخصصان رنگرزی، کارشناسان و فناوران، مهندسان، طراحان ماشین‌آلات رنگرزی نساجی و صنایع وابسته باشد.

رنزو شی می

ایالت کارولینای شمالی

زیومینگ ژائو

دانشگاه پلی تکنیک تیانجین

¹ Juan Lin

² M. Zubair

پیشگفتار مترجمان

رنگرزی فرآیندی شیمیایی است که باید تمامی مراقبت‌های لازم در آن به عمل آید و در صورت بروز هرگونه مشکلی امکان برگشت فرآیند وجود نداشته و اصلاح کیفیت محصول نیز مستلزم انجام هزینه‌های گزافی خواهد بود که از توجیه اقتصادی برخوردار نمی‌باشد. به‌طور کلی رنگرزی فرآیند پیچیده‌ای است که درک عمیق آن نیاز به دانش کافی از شیمی- فیزیک و فرایندهای نفوذ و جذب و خواص فیزیکی و شیمیایی الیاف مورد رنگرزی و مواد رنگرزی دارد. همانگونه که در پیشگفتار نویسندگان نیز ذکر شده، هدف اصلی این کتاب معرفی توسعه و کاربرد سیستم‌های نظارت و کنترل قابل اعتماد برای رنگرزی الیاف نساجی به‌منظور حصول فرآیندهای رنگرزی است که هم مقرون به صرفه بوده و هم سازگار با محیط زیست باشند. لذا ضرورت وجود منبعی علمی به زبان فارسی نه تنها برای دانشگاهیان و پژوهشگران بلکه برای متخصصان رنگرزی، کارشناسان و فناوران، مهندسان، طراحان ماشین‌آلات رنگرزی نساجی و صنایع وابسته همواره احساس می‌شده است.

در ترجمه این کتاب نهایت تلاش بر وفاداری به متن اصلی صورت پذیرفته جزء در موارد نادر که ضرورت‌های زبان فارسی موجب آن شده است.

دکتر جواد مختاری (عضو هیئت علمی دانشکده فنی، دانشگاه گیلان)

سیده آمنه سیادت (دانشجوی دکتری مهندسی نساجی دانشکده فنی، دانشگاه گیلان)

تعریف لغات

تمایل ذاتی^۱: بیانی کمی است و اختلاف بین پتانسیل شیمیائی رنگزا در حالت استاندارد خود در لیف و پتانسیل متناظر آن در حمام رنگریزی را نشان می‌دهد. توجه: تمایل ذاتی معمولاً با واحد کالری (ژول) بر مول بیان می‌شود. از نظر کیفی استفاده از این لغت در هم‌ترازی با یک ماهیت درونی نادرست است.

روش فرآیند غیر مداوم^۲: فرآیند مواد به صورت انبوه که در آن هر دسته به مرحله‌ای از فرآیند طی یک زمان مشخص وارد می‌شود. این روش متفاوت از روش فرآیند مداوم^۳ است.

رنگریزی بیم^۴: رنگریزی مواد نساجی پیچیده شده روی یک غلتک مشبک توخالی (ماشین بیم) است که از طریق این شبکه‌ها، محلول رنگزا به گردش در می‌آید.

وینچ/بک^۵: مخزنی در باز که در گذشته از چوب یا آهن ساخته می‌شد و امروزه از فولاد ضدزنگ، جهت فرآیندهای مرطوب^۶ مواد نساجی است.

بازده رنگی^۷: عمق رنگی به دست آمده در زمانی است که وزن استاندارد از مواد رنگزا بر روی کالا و در شرایط مشخص اعمال می‌شود.

نفوذ^۸: حرکت مولکول‌های رنگزا از سطح لیف به درون آن است.

زمان تعادل^۹: t_e : زمانی است که در آن رمق کشی رنگزا کاهش می‌یابد و شروع می‌کند به ثابت شدن - تا زمانی که به حد نهایی رمق کشی خود $E(t_e)$ می‌رسد.

¹ Affinity

² Batchwise processing

³ Continuous processing

⁴ Beam dyeing

⁵ Beck/winch

⁶ Wet processing

⁷ Colour yield

⁸ Diffusion

⁹ Equilibrium time t_e

رمق کشی^۱: درصد رنگزایی است که به کالا مهاجرت کرده است. درصد رmq کشی تابعی از غلظت اولیه $C(0)$ و غلظت لحظه‌ای $C(t)$ است (اگر مایعی در طول رنگرزی اضافه نشود) و به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\% \text{ رmq کشی} = 1 - C(t) / C(0) \times 100$$

رمق کشی نهایی مقدار رmq کشی در انتهای رنگرزی است.

نرخ رmq کشی $\Delta E / \Delta T$: با محاسبه نرخ متوسط رmq کشی بین زمان‌های شروع رنگرزی و زمان تعادل تعیین می‌شود:

$$\% \text{ نرخ رmq کشی} = \frac{E(t_e) - E(t_s)}{t_e - t_s}$$

رمق کشی، نرخ (٪) بیشینه^۲: مقدار نرخ بیشینه (٪) رmq کشی است. این نرخ یک مقدار بحرانی است که اغلب یکنواختی رنگرزی را تحت تاثیر خود قرار می‌دهد.

رمق کشی، دما برای نرخ (٪) رmq کشی بیشینه: دمایی که در آن نرخ بیشینه (٪) رmq کشی اتفاق می‌افتد. در نزدیکی این دما، نرخ رmq کشی کاهش می‌یابد و بر یکنواختی تاثیرگذار خواهد بود.

ثبات^۳: مشخصه مقاومت در برابر شرایط مختلف (مانند شستشو، نور، سایش، مواد شیمیایی، بخارهای بخارهای گازی) است. توجه: در مقیاس استاندارد، پنج نمره معمولاً به رسمیت شناخته می‌شود، از ۵، نشان دهنده بدون تاثیر، به ۱، به شدت تغییر یافته است. برای ثبات نوری، ۸ نمره استفاده می‌شود، ۸ نشان دهنده بالاترین درجه ثبات است.

¹ Exhaustion

² Exhaustion, Maximum % rate

³ Fastness

تثبیت^۱: بی تحرکی مولکول‌های رنگزا در درون لیف. توجه: برای این فرآیند، روش‌های مختلفی شامل "نامحلول سازی" (به‌عنوان مثال رنگزاهای خمی و گوگردی در پنبه؛ اتصال دهنده‌های پلیمری با رنگدانه‌ها) "پیوندهای شیمیایی" (مانند پیوندهای هیدروژنی برای رنگزاهای مستقیم در پنبه) "پیوندهای یونی" (مانند رنگزاهای اسیدی در پشم و نایلون، و رنگزاهای کاتیونی در اکریلیک) "پیوند کووالانسی" (مانند رنگزاهای ری‌اکتیو در پنبه) و محلول در لیف (مانند رنگزاهای دیسپرس در پلی‌استر، نایلون و استات) وجود دارد.

پارچه خاکستری (پارچه خام)^۲: پارچه‌های بافته شده یا کش بافت زمانی که از دستگاه بافندگی خارج می‌شوند (قبل از هرگونه سفیدگری، رنگریزی یا تکمیل) این خاصیت را دارا هستند. با این وجود برخی از این پارچه‌ها، ممکن است حاوی نخ‌های رنگی یا تکمیل شده نیز باشند. توجه: در برخی از کشورها، به‌ویژه در امریکای شمالی، از لغت (گریج به معنی پارچه خام) استفاده می‌شود. برای پارچه‌های بافته شده، اغلب اصطلاح "loomstate"^۳ به‌طور متناوب به کار می‌رود. در تجارت پارچه‌های کتان و توری نیز اغلب از اصطلاح "پارچه‌های قهوه‌ای"^۴ استفاده می‌شود.

ماشین رنگریزی جت^۵: الف) ماشینی برای رنگریزی پارچه در حالت طنابی است که در آن پارچه از طریق یک گذرگاه باریک (که حاوی محلول رنگزای در گردش با سرعت بالا است) عبور می‌کند. ب) ماشینی برای رنگریزی کالا است که در آن کالا به جای روش‌های مکانیکی توسط جت‌های محلول به گردش در می‌آید.

مرسریزاسیون^۶: عمل آوری منسوجات سلولزی در قُرم نخ یا پارچه با محلول غلیظ قلیایی سود سوزآور است، که به موجب آن الیاف متورم شده، استحکام و تمایل جذب رنگزای این مواد افزایش و زبردست بهبود می‌یابد. این فرآیند نام خود را از کاشف خود، جان مرسر^۷ (۱۸۸۴) گرفته است.

¹ Fixation

² Grey (greige)

^۳ پارچه‌های بافته شده که هنوز پایدارسازی، تثبیت و رنگریزی نشده‌اند.

⁴ Brown goods

⁵ Jet- dyeing machine

⁶ Mercerisation

⁷ John Mercer

رنگرزی بسته نخ^۱: نوعی روش رنگرزی است که در آن محلول رنگرزی به صورت شعاعی از بسته نخ پیچیده شده به گردش در می‌آید. توجه: بسته های پیچیده شده شامل فتیله به شکل تاپس و یا دوک نخ هستند.

رنگرزی تکه‌ای^۲: رنگرزی به شکل پارچه.

شستشو^۳: عمل‌آوری مواد نساجی در محلول‌های آبی یا دیگر محلول‌ها به منظور حذف چربی‌های طبیعی، واکس‌ها، پروتئین‌ها و دیگر مواد تشکیل دهنده و نیز کثیفی، روغن و دیگر ناخالصی‌ها.

عوامل کمپلکس‌ساز^۴: ماده شیمیائی قادر به واکنش با یون‌های فلزی است تا آنها بخشی از یک آنیون آنیون کمپلکس شوند. این اصل برای استخراج یون‌های کلسیم از آب سخت، یون‌های آهن (II) و نیز مس از محلول‌های سفیدکننده‌ی پراکسیدی و یون‌های فلزی مختلف از حمام‌های رنگرزی است، از طریق تشکیل یک کمپلکس محلول در آب که در آن فلز در حالت غیر یونیزه شونده نگه داشته و استفاده می‌شود.

شید^۵: (الف) واژه‌ی متداولی است که عموماً جهت توصیف رنگ یا عمق خاصی مانند شید کم عمق، شید ۲٪، شید مد یا حالت به‌کار می‌رود. (ب) برای آوردن تغییرات نسبتاً کوچک در رنگ کالا در رنگرزی با اضافه کردن مقادیر کمتری از رنگزا، به‌ویژه با هدف رنگ همانندی یک الگوی داده شده با دقت بیشتر.

زمان t_s و دمای $T(t_s)$ جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی^۶: زمان و دمای متناظر با رنگرزی که در آن رنگزا شروع به رفتن بر روی پارچه در یک نرخ فزاینده می‌کند. به‌خصوص در الیاف مصنوعی در دمای انتقال شیشه‌ای که در آن الیاف آزاد و باز می‌شوند و در نتیجه به مولکول‌های رنگزا اجازه می‌دهد تا در مناطق آمورف لیف نفوذ کنند. دانستن زمان و دمای این نقطه ممکن است اجازه دهد تولید

¹ Package dyeing

² Piece-dyeing

³ Scouring

⁴ Sequestering agent

⁵ Shade

⁶ Strike time t_s and temperature $T(t_s)$

کنندگان لیف، الیاف مختلف را با هدف مخلوط کردن و کنترل کیفیت مقایسه کنند. همچنین ممکن است اطلاعاتی را به منظور مقایسه ریخت شناسی لیف و بلورینگی ارائه دهد.

جذب^۱: حذف و یا از بین بردن رنگزا و مواد تکمیلی از لیف.

تمایل^۲: جاذبه بین کالا و رنگزا و یا دیگر کالاها تحت شرایط دقیق آزمایش که به موجب آن رنگزا به طور انتخابی توسط کالا از سیستم خارج می شود.

سطح فعال / عامل فعال سطحی^۳: یک ماده، محلول یا پراکنده در مایع است که باعث کاهش کشش سطحی مایع می شود.

¹ Stripping

² Substantivity

³ Surfactant/surface active agent

واژه نامه

متغیرهای وابسته به جذب، نفوذ و پراکندگی

K	ضریب جذب سطحی
D, D_{dif}	ضرب نفوذ
D, D_{dis}	ضریب پراکندگی
α	قابلیت پراکندگی
R_d	نرخ نفوذ
λ_i	ضریب جذبی
k_I, K_a	ثابت نرخ برای جذب
k_{-I}, K_d	ثابت نرخ برای واجذب
t_m	زمان جذب

متغیرهای وابسته به ورود تدریجی مواد

t_p	زمان افزودن تدریجی مواد
CV	سرعت کنترل دیفرانسیلی
$\%E$	رمق کشی (%)
Q	پارامتر کنترل عمومی برای تمامی نمودارهای رmq کشی
$T(t_j)$	دمای حمام رنگرزی در زمان t_j
$A(t)$	جذب حمام رنگرزی در زمان t
$Knxt$	نرخ هدف تطبیق یافته
$cdrv$	مشتق غلظت محاسبه شده
$Tave$	دمای کنونی
$ExhRate$	نرخ رmq کشی مطلوب (کسر / دقیقه)
K_a, K_b	ثابت‌های تفکیک اسیدها و بازها
K_{set}	ثابت نرخ مورد نظر
T_{set}	دمای مورد نظر

K_{ave}	ثابت نرخ فعلی مرتبه اول
V_{dos}	نرخ ورود تدریجی مواد در هر زمان
$Trmp$	نرخ افزایش دما
V	حجم کلی محلولی که به تدریج افزوده شده
f_i	بردارهای مولفه‌های طیفی رنگزاهای مجزا
V_T	سرعت در دمای T
V_0	سرعت در دمای صفر درجه سلسیوس
	متغیرهای وابسته به مجموعه لیفی
S_F	تراکم لیف
S_p	تراکم بسته نخ
ε, ξ	تخلخل یا حفره‌های محیط متخلخل
A_{solid}	مساحت فاز جامد و یکپارچه در یک مقطع عرضی از سطح
A_{voids}	مساحت فاز حفره در یک مقطع عرضی از سطح
k_D	نفوذپذیری داری
d	دنیر لیف
h, L	ارتفاع بسته نخ
r_i	شعاع داخلی بسته نخ
r_0	شعاع خارجی بسته نخ
k	نفوذپذیری
S	فاکتور شکل
K_S	نفوذپذیری مخصوص
S_0	سطح مخصوص یا مساحت سطح موادی که از قسمت متخلخل تشکیل می شوند
P_i	فشار کل در درون بسته نخ
P_0	فشار کل در بیرون بسته نخ

متغیرهای وابسته به جریان سیال

\dot{J}_{dis}	شار پراکندگی
Q	نرخ جریان
P	فشار هیدرودینامیکی
V_b, V_x	سرعت واقعی در درون خلل و فرج‌ها یا حفره‌ها (سرعت روزنه‌ای)
v	سرعت متوسط جریان انبوه
U	سرعت انبوه
k_D	ثابت تناسب
J_c	شار جابه‌جائی ناشی از جریان انبوه
V_i	ضریب جابه‌جائی
$U(u, v, w)$	سرعت جریان متقاطع
ρ	چگالی سیال
D_i	ضرب پراکندگی
U_x	جابه‌جائی صفحه ناشی از نیرو
$J_{x, in}$	شار رنگزا در جهت جریان ورودی
$J_{x, out}$	شار رنگزا در جهت جریان خروجی
D_h	قطر هیدرولیکی
K_0	ثابت کوزنی
d	قطر لوله
γ	ازدیاد طول برشی
τ	تنش برشی
η	گرانروی برشی
V_s	سرعت سطحی سیال
F_x	نیروی کل وارد بر یک صفحه
u	سرعت (یا بردار سرعت) جریان
u_l	بردار سرعت در محیط متخلخل (بسته نخ)
μ, η	گرانروی سیال

ض

q	حجم جریان بر زمان و مساحت بسته نخ
J	شار کل
V_r, V_θ	مؤلفه‌های میدان سرعت
F	نرخ جریان حجمی

متغیرهای وابسته به کنترل کننده عمومی

P	خروجی کنترل کننده
P_0	خروجی کنترل کننده بدون خطا
E	سیگنال خطا
C_M	مقدار اندازه‌گیری شده
P_i	خروجی از پیش تنظیم شده از کنترل کننده
C_{sp}	مقدار (مناسب) از نقطه شروع
KD	ثابت بهره مشتقی
E_i	مقدار خطای دستگاه
K_p	ثابت تناسب بین خطا و خروجی کنترل کننده

متغیرهای عمومی

A	جذب
A	مساحت
$A_0, A_1, \dots \quad B_0, B_1, \dots$	ثابت‌ها
x, r	فاصله
h	فاصله بین گره‌ها
g	گرانش
n	مرتبه چند جمله‌ای الحاقی
l	طول مسیر عبور نور از محلول
P	فشار
j	شاخص مسافت

T	دما
T_k	دما (کلوین)
A	ثابت آرنیوس
$\kappa(F)$	تعداد شرط ماتریس
ε	ضریب خاموشی رنگزا، قابلیت جذب
I_0	شدت نور اولیه یا شار فوتون ورودی به سل جریان
I	شدت نور خروجی از سل جریان
R_e	عدد رینولدز
n	بردار نرمال واحد
R	ثابت عمومی گاز
t	زمان
n	شاخص زمان
V	حجم

متغیرهای وابسته به سینتیک و ترمودینامیک

E_a	انرژی فعال‌سازی رنگرزی
$-\Delta\mu^0$	تمایل ذاتی استاندارد مرتبط با جذب
ΔH^0	تغییر آنتالپی استاندارد
ΔS^0	تغییر آنتروپی استاندارد
μ	پتانسیل شیمیایی
μ_s	پتانسیل شیمیایی رنگزا در محلول
μ_f	پتانسیل شیمیایی رنگزا در لیف
a_s	فعالیت شیمیایی رنگزا در محلول
a_f	فعالیت شیمیایی رنگزا در لیف
μ_s^0	پتانسیل شیمیایی استاندارد برای رنگزا در حالت استاندارد خود در محلول
μ_f^0	پتانسیل شیمیایی استاندارد برای رنگزا در حالت استاندارد خود در لیف
F	فاز لیف درونی

S	فاز محلول آبی بیرونی
V	حجم درونی قابل دسترس از لیف
E	مقداری که توسط آن انرژی یک ملکول فعال از میانگین انرژی ملکول های حل شده، تجاوز می کند

متغیرهای وابسته به pH و پتانسیل

E	پتانسیل مشاهده شده
pH_t	pH در زمان t
pH_0	pH در شروع فرآیند
E_0	پتانسیل استاندارد
pH_f	pH هدف در پایان فرآیند
a_{H^+}	فعالیت یون های هیدروژن در محلول
$[CL]_s$	غلظت یون های کلر در محلول
$[Na^+]_s$	غلظت یون های سدیم در محلول
ϵ	ثابت دی الکتریک
K_w	ثابت تفکیک برای آب
Z_i	بار یون، ظرفیت یون i
u, I	قدرت یونی
A^0	پارامتر اندازه یون (در انگستروم)
C_{H^+}	غلظت مولال یون هیدروژنی در محلول
M_0	مولاریته محلول اولیه
$E^{0'}$	پتانسیل ثابت شده پایدار شامل پتانسیل درونی مرجع

متغیرهای وابسته به مقدار رنگزا در محلول و لیف

C_f, V, Q, A	غلظت رنگزای جذب شده
C_m	مقدار رنگزای جذب شده توسط لیف در پایان جذب
C	غلظت
$C_s, [D^Z]_s, C$	غلظت رنگزا در محلول

C_t	غلظت رنگزا در حمام رنگرزی و در زمان t
C_{ini}	غلظت رنگزا در تانک اختلاط و در شروع رنگرزی
C_l	غلظت رنگزا در تانک اختلاط و در زمان t
C_0	غلظت اولیه رنگزا در حمام رنگرزی
M	جرم رنگزا بر روی لیف
M_p	جرم رنگزا بر روی لیف در حجم کنترل شده دیفرانسیلی طی زمان δt
M_f	جرم رنگزا در محلول در حجم کنترل شده دیفرانسیلی طی زمان δt
C_{max}, v^*	تعداد بیشینه مکان‌های جذبی اشغال شده توسط مولکول‌های رنگزا
F	مقدار ماده جذب شده بر روی جاذب
C_i	غلظت رنگزا i ام در مخلوط
$[D^z]_F$	غلظت رنگزا بر روی لیف در حالت تعادل
$cnow$	غلظت فعلی
$cset$	غلظت مورد نظر
$C'(t)$	غلظت رنگزای اندازه‌گیری شده در زمان t
M_F	جرم رنگزای جذب شده بر جرم لیف، در زمان t و صفحه x
$cnxt$	غلظت هدف
$cstart$	غلظت واقعی در شروع
C_{in}	مقدار غلظت مایع درست قبل از ورود به درون بسته نخ
C_{out}	مقدار غلظت مایع درست قبل از خروج از بسته نخ
C_L	غلظت حجمی در مایع- رنگزا در زمان t و در صفحه x درون بسته نخ

۱. مقدمه‌ای بر رنگرزی و اتوماسیون سالن رنگرزی

چکیده: این فصل مفهوم رنگرزی منسوج را براساس بررسی مختصری از انواع مختلف رنگزاها و الیاف و برهم‌کنش بین رنگزاها و الیاف، و نحوه کنترل فرآیندهای رنگرزی براساس نمودارهای دما- زمان متداول و همچنین براساس کنترل نرخ رمق‌کشی رنگزا بیان می‌کند. سپس فرآیند رنگرزی بسته نخ و پارامترهای مؤثر بر جذب و نفوذ رنگزا در درون بسته‌ها معرفی می‌شود. ایزوترم‌های مختلف جذب به طور خلاصه مورد بررسی قرار گرفته و عوامل مؤثر بر رنگرزی الیاف مورد بحث قرار می‌گیرند. استراتژی‌های مختلف کنترل براساس ارزیابی مقدار رنگزا در حمام رنگرزی، به‌طور خلاصه مورد بررسی قرار می‌گیرند.

کلمات کلیدی: رنگرزی، رنگزاها، الیاف نساجی، کیفیت رنگرزی، نرخ رنگرزی، یکنواختی، دستگاه‌های رنگرزی، رنگرزی بسته نخ، اتوماسیون رنگرزی، نمودارهای رمق‌کشی.

۱.۱. مقدمه

رنگرزی فرآیندی است بسیار پیچیده همراه با پدیده‌های مختلفی که با هم اتفاق می‌افتند. این پدیده زمینه‌های مختلفی از علوم از جمله شیمی، فیزیک، مکانیک، شیمی فیزیک، مکانیک سیالات، ترمودینامیک و غیره را در بر می‌گیرد [۱]. ارائه یک فرآیند رنگرزی مؤثر معمولاً نگرانی‌هایی را نیز به‌دنبال دارد از جمله: طراحی ماشین‌آلات، انتخاب رنگزاهایی با خواص سازگاری، استفاده از نمودارهای pH نسبت به زمان، انتخاب نسبت حجم حمام رنگرزی به وزن کالا، نرخ جریان و زمان‌های برگشت جهت جریان و طراحی نمودارهای دما نسبت به زمان [۲].

۱.۱.۱. الیاف نساجی

لیف با نسبت بالای طول به قطر و نیز توسط استحکام و انعطاف پذیری‌اش مشخص می‌شود. الیاف ممکن است منشأ طبیعی داشته باشند و یا از پلیمرهای مصنوعی یا طبیعی تشکیل شده باشند. الیاف به شکل‌های مختلف در دسترس هستند. الیاف استیپل^۱ کوتاه هستند، با نسبت طول به قطر تقریباً ۱۰^۳ تا ۱۰^۴، در حالی‌که برای فیلامنت‌های ممتد این نسبت حداقل چندین میلیون است [۳]. شکل و

¹ Staple fibres

ویژگی‌های یک لیف طبیعی مانند پنبه ثابت است اما برای الیاف مصنوعی طیف گسترده‌ای از خواص توسط طراحی‌های مختلف ایجاد می‌شود. تغییرات بسیاری شامل الیاف کوتاه در طول‌های مختلف، فیلامنت‌های ممتد تکی (مونوفیلامنت‌ها) و یا نخ‌های متشکل از چندین فیلامنت (چند فیلامنتی‌ها) در دسترس است. الیاف یا فیلامنت‌ها ممکن است براق، مات یا نیمه مات بوده و یا ضخیم، ظریف یا فوق العاده ظریف باشند، همچنین سطح مقطع آنها نیز می‌تواند دایروی یا هر سطح مقطع دیگری، مستقیم یا موجدار، با قاعده یا اصلاح شیمیائی شود و نیز جامد یا توخالی باشد.

الیاف طبیعی دارای یک‌سری معایب ذاتی هستند. آنها تغییرات زیادی در طول، ظرافت، شکل، موج و جعد و دیگر ویژگی‌های فیزیکی وابسته به محل و شرایط رشد خود نشان می‌دهند. الیاف حیوانی و گیاهی حاوی مقادیر قابل توجه و متغیری از ناخالصی‌هایی بوده که حذف آنها قبل از رنگرزی ضروری است و فرآیندهای زیادی را در بر می‌گیرند. الیاف مصنوعی از نظر ویژگی‌های فیزیکی بسیار یکنواخت هستند. تنها ناخالصی آنها وجود مقادیر کم پلیمرهایی با وزن مولکولی پایین با قابلیت انحلال‌پذیری پایین و برخی مواد شیمیائی و روان‌سازهای سطحی که برای تسهیل فرآیند اضافه می‌شوند. حذف ناخالصی‌ها در این الیاف در مقایسه با دشواری‌های موجود در خالص‌سازی الیاف طبیعی نسبتاً آسان است [۴].

جذب آب یکی از ویژگی‌های کلیدی لیف نساجی است. الیاف سلولزی یا پروتئینی آبدوست هستند و مقدار زیادی آب جذب می‌کنند که این موجب تورم شعاعی لیف می‌شود. با این حال، الیاف مصنوعی آبریز شامل پلی استر تقریباً هیچ آبی جذب نمی‌کنند و متورم نمی‌شوند. ویژگی آبدوستی و یا آبریزی یک لیف، بر انواع رنگزایی که جذب خواهد کرد، تاثیر می‌گذارد [۵]. توانایی رنگرزی شدن به طیف گسترده‌ای از شیدها و عمق‌ها یک نیاز کلیدی برای تقریباً تمام مواد نساجی است.

یکی از ویژگی‌های مهم لیف نساجی، رطوبت‌بازیافتی آن است که وزن آب جذب شده به ازای هر واحد وزن لیف کاملاً خشک است، هنگامی که در تعادل با هوای اطراف، در یک دما و رطوبت نسبی مشخص باشد. مقدار رطوبت‌بازیافتی در الیاف با افزایش رطوبت نسبی زیاد می‌شود اما با افزایش دمای هوا کاهش می‌یابد. جذب آب توسط لیف گرما (گرمازا) آزاد می‌کند و به همین دلیل در دماهای بالاتر کمتر مورد پسند خواهد بود. گرمای آزاد شده اغلب نتیجه تشکیل پیوندهای هیدروژنی بین مولکول‌های آب و گروه‌های مناسب در لیف است [۶]. مقدار آب باقی مانده‌ی نهایی در الیاف متورم توسط

خشک کننده نسبت به جذب آب توسط الیاف خشک، بیشتر است. الیافی که امروزه در دسترس هستند ممکن است همچنان که در شکل ۱.۱ نشان داده شد، طبقه‌بندی شوند.



شکل ۱.۱. طبقه‌بندی الیاف.

برای الیاف آبدوست مانند پشم، پنبه، ویسکوز مقادیر رطوبت بازیافتی نسبتاً بالا به‌طور قابل توجهی وزن ناخالص مقدار معینی از لیف را تحت تأثیر قرار می‌دهد. مقادیر رطوبت بازیافتی نسبتاً بالا در رنگرزی مهم است.

عموماً مقادیر رنگزاهای به‌کار گرفته شده به‌صورت درصد وزنی موادی که رنگرزی می‌شوند، بیان می‌شود. بنابراین ۱٪ رنگرزی یعنی ۱ گرم از رنگزا برای هر ۱۰۰ گرم از لیف که معمولاً تحت شرایط

محیط وزن می‌شوند. برای الیاف آبدوست، تغییر وزن الیاف با تغییر شرایط جوی نیز یک عامل مهم تأثیرگذار در تکرارپذیری رنگ در رنگ‌رزی‌های مکرر است.

۲.۱.۱. رنگ‌ها

رنگ‌ها ماده‌ای است که توانایی بخشیدن رنگ خود به کالا (مانند پشم) را دارد. رنگ‌ها باید در محیط‌های کاربردی معمولاً آب و نیز در طی فرآیندهای رنگی کردن محلول باشد. همچنین باید به مواد تحت رنگ‌رزی تمایل نشان دهد و از محلول آبی جذب شود [۷].

برای نفوذ به درون لیف، رنگ‌ها باید به صورت تک مولکولی در آب باشند. این رنگ‌ها اغلب آنیون‌های رنگی، برای مثال نمک‌های سدیم اسیدهای سولفونیک هستند. آنها همچنین ممکن است کاتیونی مانند ماوین^۱ و یا به صورت مولکول‌های خنثی با حلالیت کم در آب مانند رنگ‌های دیسپرس باشند. رنگ‌ها باید تحت شرایط رنگ‌رزی به لیف جاذبه داشته باشد به طوری که محلول به تدریج از رنگ‌ها تهی شود. در اصطلاح رنگ‌رزی، رنگ‌ها به لیف تمایل دارد و از حمام رنگ‌رزی رمق‌کشی می‌شود. چهار مشخصه اصلی رنگ‌ها عبارت‌اند از:

- رنگ شدید
- حلالیت در آب در برخی مواقع در طول چرخه رنگ‌رزی
- تمایل به لیفی که قرار است رنگ‌رزی شود.
- خواص ثباتی قابل قبول رنگ‌رزی‌های انجام شده.

ساختارهای مولکول‌های رنگ‌ها در مقایسه با ساختار اغلب ترکیبات آلی بسیار رایج پیچیده هستند. با وجود پیچیدگی آنها، ساختارهای رنگ‌ها یک تعداد ویژگی‌های مشترک دارند. بیشتر مولکول‌های رنگ‌ها حاوی تعدادی حلقه‌های معطر مانند بنزن یا نفتالین هستند که در یک سیستم کاملاً متصل به یکدیگر قرار گرفته‌اند. این یعنی یک توالی طولانی از پیوندهای یگانه و دوگانه یک درمیان بین اتم‌های کربن و دیگر اتم‌ها در سرتاسر اغلب ساختارهای رنگ‌ها وجود دارد. این نوع آرایش اغلب به عنوان کروموفور یا واحد رنگ دهنده نامیده می‌شود. سیستم مزدوج جابه‌جایی وسیع الکترون‌های π از پیوندهای دوگانه را اجازه می‌دهد و در نتیجه سبب اختلافات کم در انرژی بین اوربیتال‌های مولکولی اشغال شده و اشغال

¹ Mauveine

نشده برای این الکترون‌ها می‌شود. دست کم پنج یا شش پیوند دوگانه مزدوج در ساختار مولکولی برای یک ترکیب رنگریزی شده مورد نیاز هستند [۹].

جدول ۱.۱ طبقه بندی‌های جزئی رنگزاها را که در کالر ایندکس^۱ ارائه شده است، نشان می‌دهد. به‌منظور به‌دست آوردن نتیجه‌ای مطلوب، باید طبقه رنگزای مناسب برای لیف همراه با شرایط رنگریزی خاص مورد استفاده قرار گیرد. ۱۰ طبقه عمده و مهم از رنگزاها شامل اسیدها، متال کمپلکس‌ها، دندان‌های، مستقیم، خمی، گوگردی، ری اکتیو، کاتیونی، دیسپرس و رنگزاهای آزوئیکی هستند. برخی از این ۱۰ طبقه‌ی عمده از رنگزاهای نشان داده شده در جدول ۱.۱ می‌توانند برای رنگریزی همان نوع لیف مورد استفاده قرار گیرند، اما شرایط متفاوتی مورد نیاز است. برای مثال رنگزاهای اسیدی، متال کمپلکس، دندان‌های و ری اکتیو همگی می‌توانند برای رنگریزی پشم مورد استفاده قرار گیرند. با این حال، ممکن است یک نوع رنگزا برای یک فرآیند رنگریزی مشخص ترجیح داده شود، به‌عنوان مثال رنگزاهای دیسپرس برای الیاف پلی‌استر.

جدول ۱.۱. طبقه بندی رنگزاها مطابق با ساختار شیمیایی و کاربردشان.

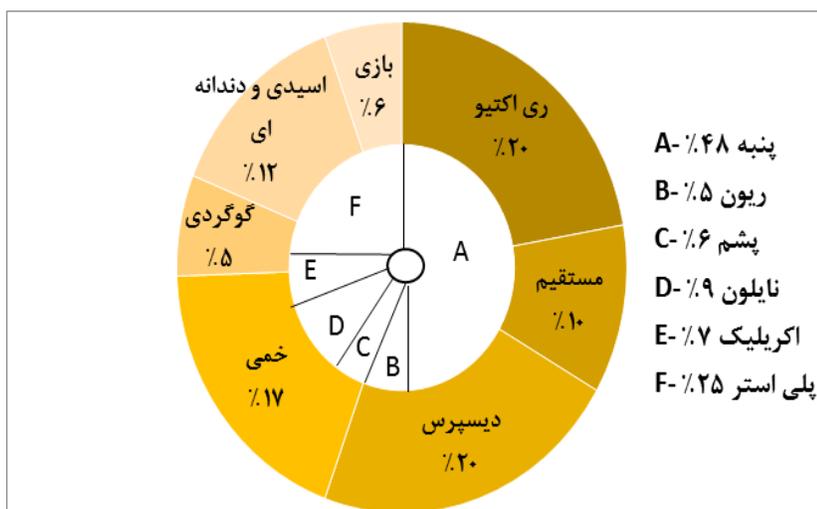
طبقه‌بندی رنگزاها مطابق با ساختار شیمیایی	طبقه‌بندی رنگزاها مطابق با کاربردشان در نساجی
رنگزاهای آزو	رنگزاهای اسیدی
رنگزاهای آنتراکینون	رنگزاهای آزوئیکی
رنگزاهای هیترو سایکلی	رنگزاهای بازی
رنگزاهای ایندیگوئیدی	رنگزاهای مستقیم
رنگزاهای نیترو	رنگزاهای دیسپرس
رنگزاهای فتالوسیانینی	رنگزاهای دندان‌های
رنگزاهای پلی متینی	رنگدانه‌ها
رنگزاهای استیلینی	رنگزاهای ری اکتیو
رنگزاهای گوگردی	رنگزاهای گوگردی
تری فنیل متان	رنگزاهای خمی

¹ Colour Index

عوامل متعددی در انتخاب رنگزا برای رنگی کردن مواد نساجی در یک شید خاص وجود دارد [۱۰]. برخی از این عوامل عبارت‌اند از:

- نوع لیفی که رنگرزی می‌شود.
- شکل الیاف نساجی و درجه یکنواختی مورد نیاز- رنگرزی یکنواخت برای الیاف آزاد، که در نهایت مخلوط می‌شوند، نسبت به پارچه از اهمیت کمتری برخوردار است.
- خواص ثباتی مورد نیاز برای هر فرآیند تولید بعدی و برای استفاده نهایی خاص.
- روش رنگرزی که استفاده می‌شود، هزینه‌های کلی و ماشین آلات در دسترس.
- رنگی واقعی درخواست شده توسط مشتری.

شکل ۲.۱ تقریبی نسبی از مصرف سالانه انواع عمده الیاف و رنگزاهای تخمین زده شده برای سال ۲۰۰۰ را نشان می‌دهد. نمودار گرد داخلی اطلاعات و نیز طول‌های بخش بیرونی پیراشکی درصدهای نسبی انواع مختلف رنگزاهای مورد استفاده را نشان می‌دهد.



شکل ۲.۱. میزان نسبی مصرف سالانه الیاف و رنگزاهای تخمین زده شده در سال ۲۰۰۹ (تولید الیاف 10^9 kg/year ، مصرف رنگزا 10^7 kg/year).

۳.۱.۱. رنگریزی

هنگامی که یک لیف نساجی در محلول رنگزا در شرایط مناسب غوطه ور می‌شود، لیف رنگی می‌شود، رنگ محلول کاهش می‌یابد و رنگریزی رخ می‌دهد [۹]. رنگریزی واقعی زمانی رخ می‌دهد که با کاهش غلظت رنگزا در حمام رنگریزی، رنگزا جذب لیف شود و الیاف رنگی حاصله مقاومت مناسبی در برابر خارج شدن رنگزا طی فرآیند شستشو با آب از خود نشان دهند [۱۱].

این امر فقط اشباع ساده لیف نساجی با رنگزا نیست که در طول فرآیند رنگریزی رخ می‌دهد. رنگزا توسط لیف و در نتیجه یک برهمکنش شیمیایی جذب می‌شود. بسیاری از رنگزاها برای منسوجات محلول در آب هستند و مولکول‌های آنها به یون‌های با بار مثبت و منفی یونیزه می‌شوند. جذب رنگزا توسط لیف به طبیعت رنگزا و ساختار شیمیایی آن بستگی دارد. قوی‌ترین اتصالات بین رنگزا-لیف، پیوند کوالانسی است، برهمکنش مهم دیگر جاذبه‌ی الکترواستاتیک است و موقعی اتفاقی می‌افتد که یون رنگزا و لیف دارای بارهای مخالف باشند. همچنین در تمامی فرآیندهای رنگریزی، نیروهای واندروالس، پیوندهای هیدروژنی و برهمکنش‌های آبگریزی حضور دارند. قدرت ترکیبی این برهمکنش‌های بین مولکولی به‌عنوان تمایل ذاتی رنگزا به لیف نامیده می‌شود. تمایل رنگزا^۱ اصطلاحی کمتر مشخص است و اغلب برای نشان دادن میزان رمق‌کشی استفاده می‌شود. این اصطلاح جاذبه بین لیف و رنگزا تحت شرایط دقیق است جایی که در آن رنگزا به‌طور انتخابی از محیط توسط لیف جذب می‌شود. الیاف نساجی مختلف نیاز به انواع متنوعی از رنگزاها دارند و به‌طور کلی رنگزاهایی که برای یک نوع لیف مناسب هستند الیاف دیگر را به‌طور موثر رنگریزی نمی‌کنند [۵].

بیشتر فرآیندهای رنگریزی منسوجات در ابتدا شامل انتقال مواد شیمیایی رنگی، و یا پیش ماده آن، از محلول آبی به سطح لیف است که به این فرآیند جذب سطحی گفته می‌شود. از آنجا، رنگزا ممکن است به آرامی در درون لیف نفوذ کند. این اتفاق در خلل و فرج‌ها یا بین مولکول‌های پلیمر لیف، بسته به ساختار درونی الیاف، رخ می‌دهد. فرآیند کلی جذب سطحی و نفوذ رنگزا به درون لیف، جذب درونی نامیده می‌شود. جذب درونی یک فرآیند برگشت‌پذیر است. لذا در طول شستشو، رنگزا می‌تواند از مواد رنگریزی شده به محیط آبی باز گردد، این فرآیند، واجذب یا دفع نامیده می‌شود. علاوه بر جذب درونی مستقیم، رنگی کردن لیف ممکن است شامل رسوب یک رنگزا در داخل لیف، یا واکنش شیمیایی آن با

¹ Substantivity of the dye

لیف نیز شود، این دو نوع فرآیند سبب ثبات شستشویی بهتر می‌شوند، زیرا آنها اساساً فرآیندهای برگشت‌ناپذیر هستند.

یکنواختی، یکسانی توزیع رنگزا (و بنابراین رنگ) در منسوجات است. دو مکانیزم اصلی در رنگرزی ناپیوسته یکنواخت تاثیر می‌گذارد [۱۲]. یکی از آنها جذب اولیه رنگزا در طول فرآیند رنگرزی است و دیگری مهاجرت رنگزا پس از جذب اولیه روی لیف است. جذب یکنواخت اولیه منجر به رنگرزی یکنواخت می‌شود. جذب نایکنواخت ممکن است تصحیح شود اگر مهاجرت کافی انجام شود [۱۳]. مکانیزم‌ها به وسیله افزودن رنگزاها و مواد شیمیایی، کالاهای نساجی و پارامترهای فرآیند رنگرزی مانند pH حمام رنگرزی، نسبت محلول، نرخ جریان و دما کنترل می‌شوند [۱۴].

رنگرزی یک فرآیند کاملاً فیزیکی مانند چاپ یا فرآیندهای رنگی کردن دیگر نیست که شامل کاربرد فیزیکی رنگدانه‌هاست. مشکلات زیادی در مواجهه با کنترل تغییرات فیزیکی شیمیایی که در طول رنگرزی، به منظور به حداکثر رساندن عواملی همچون بهبود عملکرد رنگی، رنگرزی یکنواخت، نفوذ، ثبات رنگی و غیره، رخ می‌دهد. لذا یک سری فناوری‌های فرعی در استفاده از مواد کمکی شیمیایی مخصوص در آماده‌سازی برای رنگرزی و در فرآیند رنگرزی به تنهایی، مانند افزودنی‌ها و عملیات بعدی^۱ وجود دارد [۱۵].

۴.۱.۱. مراحل مختلف رنگرزی مواد نساجی

الیاف نساجی می‌توانند در مراحل مختلف مانند الیاف آزاد، تاپس^۲، توو^۳، نخ، پارچه یا پوشاک در طول فرآیند، رنگرزی شوند. الزامات یکنواختی در رنگرزی الیاف آزاد نسبت به رنگرزی نخ‌ها و یا دیگر حالت‌ها از دشواری کمتری برخوردار هستند، چون پردازش بعدی الیاف آزاد مخلوطی از الیاف رنگرزی شده حاصل می‌کند، به‌عنوان مثال استفاده از فرآیندهای کاردینگ یا گیلینگ^۴ یکنواختی رنگ حاصله را بهبود می‌بخشد. برای رنگرزی نخ، یکنواختی بسیار مهم است زیرا در هر حال نخ تبدیل به پارچه با استفاده از حلقوی یا بافندگی و یا تبدیل به فرش خواهد شد، هرگونه نایکنواختی در رنگرزی نخ خود را در کالای تکمیل شده نشان خواهد داد [۱۶].

¹ After- treatments

² Top

³ Tow

⁴ Carding or Gilling

۲.۱. عوامل مؤثر بر کیفیت رنگرزی

هدف از رنگرزی موفقیت آمیز، رسیدن به یک شید مورد نظر، در قیمت مناسب و با یکنواختی کافی، چه رنگرزی الیاف آزاد، نخ یا پارچه همراه با ثبات رنگی کافی از نظر تقاضای مصرف کننده و نیز فرآیند پردازش بدون هیچ گونه تأثیر منفی بر کیفیت لیف، است [۱۷]. در بین اینها، سطح قابل قبول جذب رنگزای یکنواخت در تمامی قسمت های کالا ممکن است مهم ترین معیار باشد [۱۸]. فرآیند رنگرزی معمولی ممکن است به مراحل مختلف تقسیم شود که به صورت زیر است:

- ایجاد تعادل بین مولکول های رنگزای تجمع یافته و تک مولکول در محلول
- نفوذ رنگزای تک مولکولی به لایه ی مرزی نفوذی در سطح لیف
- نفوذ رنگزا از طریق لایه ی مرزی در سطح لیف
- جذب سطحی رنگزا در سطح لیف
- نفوذ رنگزا به درون لیف
- واجذب و جذب مجدد رنگزا (مهاجرت).

این مراحل یک سیستم تعادلی برگشت پذیر تشکیل می دهند. هر یک از این ۶ مرحله می تواند یکنواختی رنگرزی را تحت تأثیر قرار دهند [۱۹]. تجزیه و تحلیل کامل کمی از تأثیر عوامل متعدد بر یکنواختی رنگرزی نیازمند توسعه مدل های ریاضی دربرگیرنده تعداد قابل توجهی از پارامترها است. به هر حال، این کار بسیار دشواری است [۲۰]. برای کاربردهای عملی، ابتدا ممکن است سعی شود متغیرهای گوناگون که تصور می شود تأثیر بیشتر بر یکنواختی دارند شناسایی شود و سپس توسعه مدل به اثرات این متغیرهای خیلی مهم محدود شود.

معادله دونان^۱ شامل ۹ عامل است [۱۹]: غلظت رنگزا در لیف، غلظت رنگزای به کار برده شده، نسبت محلول به وزن کالا، توزیع یونها بین محلول و لیف، بار یونی مولکول رنگزا، حجم درونی لیف، تمایل ذاتی رنگزا، ثابت گاز و دمای رنگرزی. همه با هم، این اصطلاحات شرایط حمام رنگرزی را توصیف می کنند.

¹ Donnan equation

هاروی^۱ و پارک^۲ [۱۲] پیشنهاد کردند که برای به‌دست آوردن رنگرزی‌هایی تکرار پذیر در آزمایشگاه، نیمه صنعتی و مقیاس صنعتی، باید عوامل زیر در فرآیند رنگرزی تحت کنترل و اندازه‌گیری شوند:

- کیفیت آب مصرفی
- آماده‌سازی کالا
- رنگ‌پذیری کالا
- وزن کالا
- وزن رنگزها و مواد شیمیائی
- روش توزیع رنگزها و مواد شیمیائی
- انتخاب رنگزها
- استانداردسازی رنگزها
- مقدار رطوبت رنگزها
- مقدار رطوبت کالا در توزین
- مواد افزودنی حمام رنگرزی
- نسبت محلول به وزن کالا
- pH حمام رنگرزی
- ترتیب رفت و برگشت جریان ماشین
- نمودار زمان/دما

هین^۳ [۱۲] پیشنهاد کرده که برای یک ترکیب لیف-رنگزای داده شده، عوامل مهم تاثیرگذار بر درجه یکنواختی در رنگرزی بسته نخ شامل موارد زیر است:

- نرخ گردش محلول رنگزا و برگشت آن
- تراکم و شکل بسته نخ
- نرخ جذب رنگزا نسبت به دما، زمان، pH و دیگر عوامل.

¹ Harvey

² Park

³ Heane

و ثوقی^۱ [۲۳] نتیجه‌گیری کرد که در یک عملیات رنگرزی بسته نخ پارامترهای بسیار مهم و مؤثر بر یکنواختی می‌توانند به صورت زیر دسته بندی شوند:

- ساختار و شکل بسته نخ
- تراکم و تخلخل بسته نخ
- نرخ جریان (نرخ گردش) محلول رنگزا
- جهت جریان محلول رنگزا در بسته‌های نخ
- نرخ و نحوه رمق‌کشی حمام رنگرزی
- نرخ افزایش دما
- pH حمام رنگرزی
- حضور کندکننده‌ها، یکنواخت کننده‌ها و دیگر عوامل شیمیایی.

می‌توان دید که توافق کاملی بین نویسندگانی که روی موضوع اهمیت هر یک از عوامل مؤثر بر یکنواختی رنگرزی مطالعه کرده‌اند، وجود ندارد. پژوهشگران مختلف تأکید متفاوتی بر هر یک از عوامل فوق و نیز بر عواملی که در بالا ذکر نشده، قرار داده‌اند. همچنین ممکن است اختلاف نظر در مورد مکانیسمی که هر یک از این عوامل عمل می‌کنند، وجود داشته باشد. علاوه بر این، لازم به ذکر است که پارامترهای موجود در این لیست کاملاً مستقل نیستند، و در بعضی موارد تأثیر دو مورد از این عوامل می‌تواند به عنوان یک اثر در نظر گرفته شود.

۳.۱. مشکلات عملی موجود در کنترل فرآیند رنگرزی

در دستیابی به رنگرزی کیفی با در نظر گرفتن کنترل فرآیند رنگرزی مشکلات عملی زیادی وجود دارد.

۱.۳.۱. نرخ رنگرزی

نرخ‌های رنگرزی اهمیت کاربردی بیشتری نسبت به رمق‌کشی در تعادل دارند، زیرا ادامه رنگرزی برای رسیدن به تعادل عموماً غیراقتصادی است. زمان‌های رنگرزی طولانی عموماً خطراً آسیب به لیف و تجزیه رنگزا را به ویژه در دماهای رنگرزی بالاتر، افزایش می‌دهد. از سوی دیگر، رنگرزی‌های بسیار سریع معمولاً سبب خواهد شد رنگ نایکنواخت باشد [۱۰]. این بدان معنی است که رنگرزی نباید خیلی کند

¹ Vosoughi

و یا خیلی سریع باشد. برای اینکه رنگزها مقرون به صرفه استفاده شوند و به مقدار خیلی کم ممکن در پساب سالن رنگرزی هدر رود، رنگرز ترجیح می‌دهد که درجه رمق‌کشی بالا در یک زمان رنگرزی نسبتاً کوتاه باشد. با این وجود، رنگرزی باید کنترل شود به طوری که خیلی سریع نباشد که ایجاد رنگرزی یکنواخت دشوار شود.

شیب منحنی رمق‌کشی اطلاعات مربوط به نرخ رنگرزی را ارائه می‌دهد. با این وجود، تعیین این منحنی‌ها مستلزم کار زیاد است و منحنی‌ها به شرایط رنگرزی و ماهیت کالا بستگی دارند. نرخ رنگرزی تحت تأثیر دما و مواد شیمیایی مانند نمک‌ها و اسیدها قرار می‌گیرد، همگی نیز بر رمق‌کشی نهایی تأثیر می‌گذارند. تمایز واضحی از اثرات متغیرهای فرآیند بر نرخ رنگرزی و رمق‌کشی نهایی در تعادل ضروری است.

۲.۳.۱. نرخ جریان

در فرآیند رنگرزی، رساندن رنگزا از محلول به سطح الیاف/ نخ‌ها به دو طریق می‌تواند اتفاق بیفتد، یا با نفوذ محلول آبی رنگزا از طریق سیال و یا به واسطه حرکات جابه‌جائی سیال که محلول تهی شده را با محلول تازه جایگزین می‌کند [۲۴]. نفوذ نسبت به انتقال جابه‌جائی رنگزا فرآیندی بسیار آهسته است، به جزء در سرعت‌های بسیار کم جریان مایع.

با این حال، راه حل دقیق برای مسئله نفوذ جابه‌جائی به سطح جامد ابتدا مستلزم حل معادلات هیدرودینامیکی حرکت سیال (معادلات ناویر^۱ - استوکس^۲) برای شرایط مرزی مناسب با سرعت جریان اصلی و هندسه سیستم است. این راه حل سرعت سیال را در هر نقطه و در هر زمان در درون لوله‌ها و مجموعه نخ مشخص می‌کند. سپس لازم است مقادیر مناسب برای سرعت‌های سیال موضعی را در معادله نفوذ جابه‌جائی که باید برای شرایط مرزی مرتبط با شکل بسته، غلظت اصلی رنگزا و جذب‌ها در سطح جامد حل شود جایگزین کرد. این روش حتی برای جریان ثابت از طریق یک بسته ساده شکل بسیار دشوار است [۲۴].

^۱ Navier

^۲ Stokes

۳.۳.۱. مرحله اولیه رنگرزی

نرخ اولیه رنگرزی (شیب اولیه رمق‌کشی در برابر زمان) سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه^۱ نامیده می‌شود. سرعت سریع جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی اغلب منجر به نایکنواختی اولیه می‌شود و باید برای رنگزاهایی که نمی‌توانند از مناطق پررنگ به مناطق کم‌رنگ در پارچه مهاجرت کنند، اجتناب شود. برای رنگزاهایی با سرعت سریع جذب در مراحل اولیه، شرایط رنگرزی باید نرخ اولیه رمق‌کشی را محدود کرده و در نتیجه یکنواختی رنگرزی را بهبود بخشد. سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه به دمای رنگرزی، pH رنگرزی و حضور هرگونه ماده کمکی بستگی دارد.

حتی برای رنگزاهایی با سرعت جذب در مراحل اولیه متوسط و کم، یکنواختی در رنگرزی برای انبوه لیف به ندرت در طول مراحل اولیه عملیات به‌دست می‌آید. این امر به‌دلیل بی‌نظمی در ساختمان مواد، در بسته لیف، در توزیع ناخالصی‌های باقیمانده و همچنین به‌علت تفاوت در دما و نرخ جریان محلول در تماس با لیاف است.

۴.۳.۱. انواع رنگزا/ لیف و بررسی مهاجرت رنگزا

انواع مختلفی از لیاف نساجی مستلزم رنگزاهای متنوعی هستند و به‌طور کلی رنگزاهایی که برای یک نوع لیف مناسب هستند انواع دیگر لیاف را به‌طور موثر رنگرزی نخواهد کرد [۱۱].

هر چه تمایل رنگزا به لیفی که رنگرزی می‌شود بیشتر باشد، درجه بالاتری از رمق‌کشی را در تعادل به همراه دارد و اغلب رنگزاهایی با تمایل بالا، نرخ جذب بالایی را در ابتدا ارائه خواهند داد. تمایل "جاذبه" بین رنگزا و لیاف است که به موجب آن رنگزا به‌طور انتخابی توسط لیف جذب می‌شود و غلظت رنگزا در حمام رنگرزی به کاهش می‌یابد.

بدیهی است که توانایی رنگزا برای مهاجرت و ایجاد رنگ یکنواخت، تحت شرایط رنگرزی مشخص، یک ویژگی مهم است. این ویژگی می‌تواند بر هر نایکنواختی اولیه در اثر سرعت جذب در مراحل اولیه سریع غلبه کند. مهاجرت رنگزا نشان می‌دهد که رنگزا می‌تواند از لیاف رنگرزی شده پررنگ خارج شده و دوباره در نواحی رنگرزی شده کم رنگ جذب شود. این ویژگی در رنگرزی بسته نخ که بسیار رنگ یکنواخت در سرتاسر بسته ضروری بوده، مهم است. اگرچه مهاجرت برای رنگرزی یکنواخت مهم

¹ Strike

است اما دو اشکال عمده دارد. نخست، رنگزاهای با توانایی بیشتر برای خروج از الیاف رنگرزی شده در اثر مهاجرت عموماً بدین معنی است که رنگرزی‌ها ثبات کمتری به شستشو خواهند داشت. رنگزاهای با ثبات شستشویی بسیار بالا اساساً رنگزاهای غیرقابل مهاجری هستند که برای آنها رنگرزی یکنواخت بستگی به کنترل بسیار دقیق نرخ جذب رنگزا توسط مواد دارد. مشکل دوم با مهاجرت رنگزاهای آن است که مهاجرت خوب ممکن است باعث رمق‌کشی کمتر شود، این نیز به دلیل توانایی رنگزاهای برای خروج از الیاف است.

۵.۳.۱. عوامل مؤثر بر یکنواختی رنگرزی

همانگونه که اشاره شده است رنگرزی یک فرآیند بسیار پیچیده همراه با پدیده‌های خیلی مختلفی است که به‌طور هم‌زمان رخ می‌دهند. نایکنواختی می‌تواند در اشکال زیادی، مثل نایکنواختی بین دو طرف، انتها و بین لایه‌های بسته نخ به وجود آید. دلایل آن به اندازه تعداد اثرات است. تجزیه و تحلیل کمی تاثیر پارامترهای مختلف بر یکنواختی در رنگرزی نیز کاری بسیار دشوار است، زیرا آن نیازمند توسعه مدل‌های ریاضی در بردارنده‌ی تعداد قابل توجهی از پارامترها خواهد بود. برای بررسی انتقال رنگزا در سرتاسر بسته نخ نیز به حل معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی غیرخطی نیازمند خواهد بود. با توجه به منابع و مقالات، مطالعات اندکی در این زمینه صورت گرفته است.

۶.۳.۱. اندازه‌گیری یکنواختی

اندازه‌گیری یکنواختی و دلایل آن مشکل است، گرچه اندازه‌گیری‌های عینی پیشنهاد شده است. توانایی یکنواختی رنگزاهای به‌طور مرتب تحت مجموعه ثابتی از شرایط بررسی می‌شود، با این حال اثر تغییر شرایط کمتر گزارش می‌شود. به‌طور مشابه، تمایز بین یکنواختی در سرعت جذب در مراحل اولیه رنگرزی و یکنواختی در اثر مهاجرت معمولاً بررسی نمی‌شود.

۴.۱. ماشین‌آلات رنگرزی بسته نخ

رنگرزی بسته نخ فرآیندی انتخابی در این کتاب است، عمدتاً به دلیل اینکه فرآیند رنگرزی نخ نیاز به درجه‌ای بیشتر کنترل فرآیند دارد تا حصول مواد با درجه بالایی از یکنواختی رنگ را میسر سازد. علاوه بر این، رنگرزی بسته نخ می‌تواند پاسخ سریع به تقاضای بازار و همین‌طور منع انباشت مقادیر زیادی از مواد رنگرزی شده را که از نظر اقتصادی مقرون به صرفه نخواهد بود، برآورده کند.

این فرآیند به صورت بسته نخ و یا کلاف^۱ انجام می‌شود. در مقایسه با رنگریزی کلاف، رنگریزی بسته نخ مزایای مختلفی از جمله کاهش هزینه‌های تولید و همچنین استانداردهای بالاتری از یکنواختی را در بر می‌گیرد. با استفاده از رنگریزی بسته نخ می‌توان درجه‌ی بالایی از تکرارپذیری به دست آورد. به‌طور کلی، مزایای فوق‌ممكن است به‌صورت زیر خلاصه شوند [۲۵]:

- کاهش در میزان ضایعات از جمله رنگزا و مواد شیمیائی
- سرعت‌های بالاتر در پیچش دوک و حذف گره از کلاف نخ
- صرفه جویی در انرژی، آب، رنگزا، مواد شیمیائی، کارگر و فضا
- قابلیت رنگریزی در دمای بالا
- خشک کردن سریع ممکن است
- قابلیت کنترل و یکنواختی بهتر
- فرآیند می‌تواند به راحتی اتوماتیک شود.

با این حال، عیب عمده رنگریزی بسته نخ، وجود دو مرحله پیچش در تولید است که موجب افزایش زمان و نیز هزینه‌های فرآیند می‌شود.

اتوماسیون در صنعت رنگریزی رشد سریعی را شاهد بوده است. سیستم‌های کاملاً اتوماتیک زیادی به بازار معرفی شده است. برخی از این ماشین‌آلات قادر به بارگیری و تخلیه مخازن رنگریزی با مواد بسته نخ در سرعت‌های بسیار بالا هستند. این سیستم‌ها توسط تورنتون^۲ بازنگری می‌شوند [۲۶].

۱.۴.۱. الزامات رنگریزی بسته نخ برای رنگریزی یکنواخت

دستیابی به رنگریزی یکنواخت موفقیت آمیز در سیستم رنگریزی بسته نخ بسیار وابسته به مراقبت‌های صورت گرفته در طول مرحله آماده‌سازی است. بنابراین تراکم بسته و یکنواختی آن در میان عوامل تاثیرگذار بر نتیجه فرآیند رنگریزی است. نخ باید به یک شکل مناسب، به عنوان مثال، پنی‌ری، کیکی، مخروطی یا موشکی شکل پیچیده شود. هر دو قالب‌های فلزی و پلاستیکی در صنعت رنگریزی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

¹ Hank

² Thornton

اولین ماشین رنگرزی نخ در سال ۱۸۸۲ توسط اتو برمایر^۱ ساخته شد، او یک حمام باز با جهت جریان سیال از سمت درون به بیرون بسته نخ استفاده کرد [۲۷]. بعدها در طراحی ماشین‌آلات، حرکت معکوس پمپ برای تغییر جهت جریان سیال مورد استفاده قرار گرفت و حمام رنگرزی محصور شد. گردش یکنواخت مایع، نرخ جریان سیال و تغییر در جهت جریان سیال نیز از عوامل مهمی در یکنواختی ماده به دست آمده هستند. گردش مایع توسط نیروی اعمالی به آن از طریق دوک سوراخ‌دار و بسته نخ به دست می‌آید. جهت جریان سیال دو طرفه برای افزایش یکنواختی رنگرزی حاصله متصور شده است [۲۸].

ماشین‌های رنگرزی بسته بندی نخ‌ها نیاز به چند قسمت ضروری دارند. اینها توسط نویسندگان مختلف در نظر گرفته شده است [۲۸، ۲۹]. ویلز^۲ این قسمت‌ها را به صورت زیر خلاصه کرده است [۲۸]:

- محفظه رنگرزی
- حمل کننده بسته نخ
- پمپ‌ها (گردشی و ثانویه)
- دستگاه‌های گرمایشی
- دستگاه‌های جریان مایع و برگشت جریان.

مخازن گسترش و نمونه‌برداری نیز توسط برخی از نویسندگان به عنوان بخش‌های مهم دیگری از دستگاه رنگرزی در نظر گرفته می‌شود. هر یک از این موارد به طور خلاصه در زیر بررسی می‌شوند.

۲.۴.۱. محفظه رنگرزی^۳

از آنجائی که تقریباً تمام ماشین‌آلات رنگرزی مدرن تحت فشار قرار می‌گیرند، لذا محفظه رنگرزی و یا دیگ پخت (کی‌یر)^۴ باید قادر به انجام عملیات در دماهای بالا تا ۱۴۰°C باشد. این امر مستلزم آن است که دیگ پخت، فشار تا ۴.۵ بار را تحمل کند. معمولاً فولاد ضدزنگ در طراحی ماشین‌آلات استفاده

¹ Otto Bermaier

² Wyles

³ The dyeing vessel

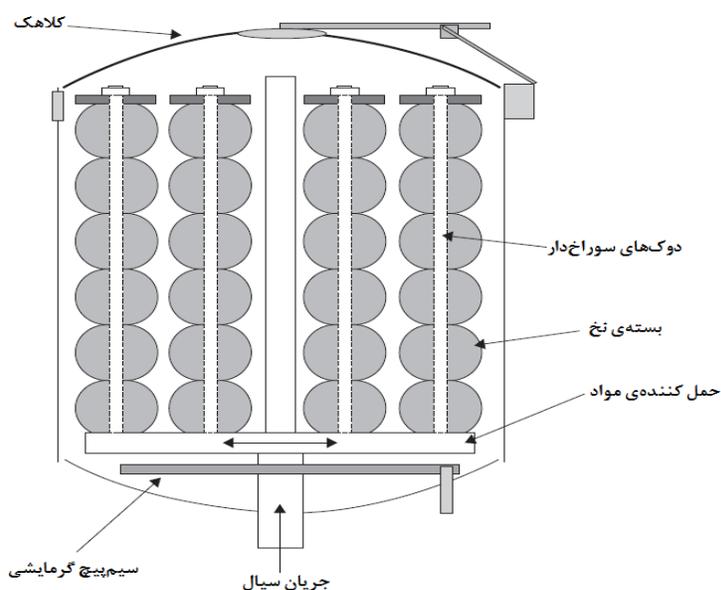
⁴ Kier

می‌شود. وزن بسته و نیز ملزم می‌کند که دیگ پخت وزن تا ۵ تن را تحمل کند. ارتفاع و قطر بزرگ‌ترین محفظه‌های رنگرزی بسته تا ۲ متر هستند.

درب محفظه رنگرزی بسیار سنگین است و با فشار هوا (نئوماتیکی) عمل می‌کند. امروزه بارگیری و تخلیه بسته در برخی از کارخانه‌ها به‌طور اتوماتیک انجام می‌شود و بنابراین در بسیاری از طراحی‌ها، ماشین‌آلات در زیر همکف قرار می‌گیرند و از یک مونوریل برای حمل ربات‌ها جهت بارگیری و تخلیه ماشین استفاده می‌شود.

طرح‌های دیگر برای محفظه رنگرزی برخی توجه‌ها را جلب کرده است. یکی از این طرح‌ها محفظه رنگرزی افقی توسط اُپِم^۱ را معرفی می‌کند [۲۵].

نمایش کلی از یک محفظه رنگرزی بسته را می‌توان در شکل ۳.۱ مشاهده کرد.



شکل ۳.۱. نمایش کلی از مخزن رنگرزی.

^۱ OBEM

۳.۴.۱. حمل‌کننده بسته نخ

پس از پیچش نخ بر روی قالب‌ها جهت تشکیل بسته نخ، این بسته‌ها بر روی دوک‌های سوراخ‌داری که اجازه عبور مایع به لیف را می‌دهند، قرار می‌گیرند. یک کلاهک انتهایی نیز برای جلوگیری از خروج جریان مایع از بالای دوک و فشرده‌سازی بسته‌ها بر روی هم جهت اطمینان از نفوذپذیری یکنواخت به درون بسته استفاده می‌شود.

تعداد کل دوک‌ها به ازای هر حمل‌کننده، توسط قطر کلی بسته‌ای که رنگرزی شده، تعیین می‌شود. تعداد بسته‌ها به ازای هر دوک متغیر بوده اما معمولاً در حدود ۸ تا ۱۰ عدد است.

۴.۴.۱. پمپ‌ها

ماشین‌آلات رنگرزی ممکن است بیش از یک پمپ داشته باشند. یکی از این پمپ‌ها، پمپ گردش اصلی است که معمولاً در کف دیگ پخت، در فاصله هر چه نزدیک‌تر به مرکز، قرار می‌گیرد تا اتلاف جریان اصطکاکی را کاهش دهد. این پمپ‌ها ممکن است گریز از مرکز یا محوری باشند.

در بررسی پمپ‌ها توسط هورن^۱ [۳۰]، تأکید می‌شود که هر نوع پمپ مورد استفاده، فشار تولید شده باید برای تغییر متوسط در حجم جریان ثابت باشد. این به‌طور معمول نتیجه نشت از ستون‌های دوک است و هنگامی مشاهده می‌شود که دوک‌های طویل با نسبت‌های بالای مایع مورد استفاده قرار گیرند.

پمپ‌های ثانویه معمولاً گریز از مرکز هستند و برای تحت فشار قرار دادن کل سیستم از طریق مکش مایع از انتهای دیگ پخت و تغذیه آن به پمپ اصلی استفاده می‌شوند. خلا، که در نتیجه حباب‌های جریان حاصل در دماهای بالا در قسمت فشار کم پمپ، نیز ممکن است اجتناب شود اگر کل سیستم حتی هنگام رنگرزی در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد تحت فشار قرار گیرد.

پمپ‌های دیگری نیز جهت تزریق رنگزا و مواد شیمیایی به ماشین رنگرزی بسته نخ استفاده می‌شوند. تعداد پمپ‌های کمکی بر روی ماشین‌آلات بستگی به تعداد ورودی‌های موجود جهت تزریق مواد شیمیایی مختلف در کل مرحله رنگرزی دارد.

¹ Horn

۵.۴.۱. دستگاه‌های گرمایشی

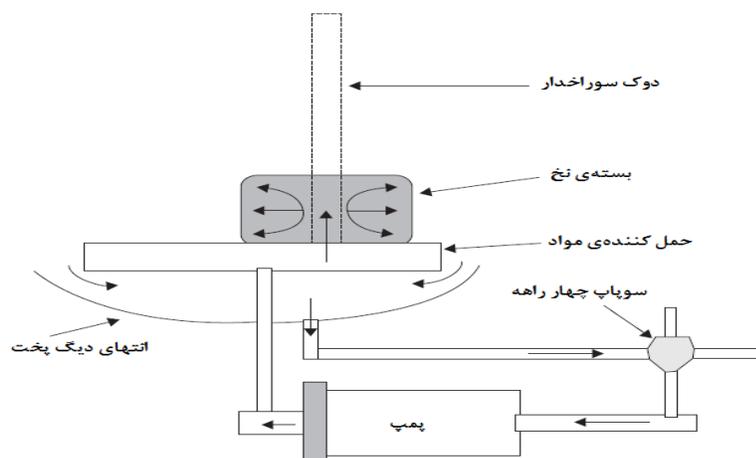
روش‌های مختلف گرمایشی در طراحی ماشین‌آلات رنگرزی مورد استفاده قرار گرفته است. اولین مدل‌ها تزریق بخار داغ به داخل محفظه رنگرزی استفاده کردند. این سیستم‌ها کاستی‌های زیادی مانند اثر زردی بر روی بسته‌های نخ (در نتیجه زنگ زدگی ماشین‌آلات رنگرزی در اثر بخار)، تغییر در نسبت مایع کلی و کانال شدن بسته‌های مجاور ورودی بخار داشتند. بنابراین در طراحی‌های جدید، بخار از طریق لوله‌های ماریپچ بسته قرار گرفته در ته دیگ پخت عبور می‌کند. این سیستم هنوز هم استفاده می‌شوند و در بسیاری از موارد آب خنک کننده نیز به همان لوله‌های ماریپچ پمپ می‌شود موقعی که لازم است دمای محفظه رنگرزی کاهش یابد.

روش‌های متعددی برای کنترل گرمایش و سرمایش سیستم به کار رفته که در موارد بسیار پیشرفته از یک ریزپردازنده استفاده می‌شود. نمونه‌هایی از این پیشرفت‌ها توسط تولیدکنندگان مختلف به بازار عرضه شده است [۳۱، ۳۲].

۶.۴.۱. دستگاه‌های جریان مایع و برگشت جریان

برای اینکه رنگرزی انجام شود، باید محلول رنگرزی به بسته نخ برسد. این امر توسط هدایت محلول رنگرزی از طریق دوک‌های سوراخ‌دار و قالب‌ها و در ادامه از بسته‌های نخ انجام می‌شود. این روش، جریان سیال درون به بیرون نامیده می‌شود. جذب رنگزای بالا در سطوح بسیار قابل دسترس به محلول رنگرزی جاری می‌تواند موجب رنگرزی نایکنواخت شود، که این امر سبب رنگرزی بیش از حد در برخی نواحی می‌شود که برطرف کردن آن معمولاً فرآیندی طولانی و در برخی موارد تقریباً غیرممکن است.

برگشت جهت جریان سیال توسط نویسندگان زیادی بحث شده است. این کار با استفاده از پمپ‌های جریان محوری که در آن کل سیستم پمپاژ معکوس می‌شود و یا با استفاده از سوپاپ‌های چهار راهه در هنگام استفاده از پمپ‌های مرکز گریز امکان پذیر شده است. شکل ۴.۱ نمایش کلی از این نوع جریان سیال در سرتاسر بسته نخ را نشان می‌دهد.



شکل ۴.۱. نمایش کلی از جریان سیال در ماشین رنگرزی.

در پمپ‌های محوری، برگشت جهت جریان سیال ممکن است موجب اتلاف زمان چشمگیری، به‌ویژه هنگام برگشت‌های متعدد به‌کار رفته، شود. در سیستم جدید بحث شده توسط سیگارا^۱ [۳۳]، یک دستگاه پیستون مانند در داخل دیگ پخت به‌کار می‌رود که اجازه برگشت جریان به‌صورت متناوب و موثرتر را می‌دهد.

۷.۴.۱. مخزن جانبی و نمونه‌برداری

در برخی از ماشین‌آلات رنگرزی بسته نخ، یک مخزن نمونه‌برداری خارجی نیز گنجانده می‌شود. این مخزن معمولاً جهت شناسایی مشکلاتی که ممکن است در طول رنگرزی رخ دهد، به‌کار می‌رود. با این حال، علی‌رغم مراقبت‌های صورت گرفته، دوباره فراهم کردن شرایط دقیق محفظه رنگرزی کاری بسیار دشوار است و بنابراین تشخیص‌ها لزوماً درست نیستند. روش‌های دیگری نیز استفاده شده که در جای دیگر تشریح می‌شوند [۲۸].

مخزن جانبی برای دو هدف مهم افزایش رنگزا و دیگر مواد شیمیایی به حمام رنگرزی و نیز برای نگه داشتن حجم اضافه شده محلول حمام رنگرزی در دماهای بالا استفاده می‌شود.

¹ Cegarra

۵.۱. مشکلات در رنگرزی بسته نخ

یکنواختی یکی از مهم‌ترین عوامل موفقیت هر روش رنگرزی است. در مورد رنگرزی بسته نخ، در نتیجه جذب رنگزای بالا در سطوح بسیار قابل دسترس به مایع جاری، رنگرزی بیش از حد در برخی نواحی مشاهده می‌شود که برطرف کردن آن معمولاً فرآیندی پرهزینه و طولانی و در برخی موارد نیز تقریباً غیرممکن است.

به‌منظور غلبه بر این مشکل، افزودن مواد یکنواخت‌کننده و نیز برگشت جریان در نظر گرفته شده است. با این حال، در بعضی موارد، مانند رنگرزی الیاف سلولزی با مواد رنگزای ری‌اکتیو و یا رنگرزی الیاف اکریلیک با مواد رنگزای کاتیونی، نایکنواختی حتی با افزودن مواد کندکننده کاتیونی در رنگرزی الیاف اکریلیکی و یا دیگر مواد کمکی در رنگرزی الیاف سلولزی هنوز بیش از حد قابل قبول است. در همین حال، مسئله هزینه کلی، که با افزودن این مواد به حمام رنگرزی افزایش می‌یابد، همچنان باقی است. علاوه بر این، این مواد همیشه دوستدار محیط زیست نیستند.

برای یک ترکیب لیف-رنگزای داده شده، عوامل مهم موثر بر درجه رنگرزی نایکنواخت می‌توانند نشان داده شوند [۲۲]:

- نرخ گردش محلول رنگزا و برگشت آن
- تراکم بسته و شکل آن
- نرخ جذب رنگزا نسبت به دما، زمان، pH و عوامل دیگر.

طبقه‌بندی دیگری براساس دو مجموعه از عوامل توسط بائر^۱ ارائه می‌شود [۳۴]. اینها به‌عنوان «عوامل جانبی فرمول» مانند نسخه رنگرزی، نوع لیف و غیره یا «عوامل جانبی تولید» مانند نرخ گردش مایع، دستگاه رنگرزی بسته و شکل مواد نساجی توصیف می‌شوند. برخی از عوامل دیگر، از قبیل نسبت سازگاری رنگزاها و غیره نیز می‌توانند بررسی شوند. در این مطالعه، این عوامل به‌صورت مفصل بررسی نمی‌شوند.

¹ Bauer

۱.۵.۱. اثر گردش محلول در رنگرزی

نویسندگان مختلف تاثیر نرخ جریان محلول در رنگرزی را بررسی کرده‌اند. ویکراستاف^۱ بیان کرد که [۴]، به علت غلظت پایین تر رنگزا در نزدیکی سطح لیف یا وجود رنگزای به دام افتاده در فضاهای بین نخ در مقایسه با حمام رنگرزی خارجی، نرخ رنگرزی به بازده انتقال رنگزا به مواد که یا به وسیله گردش محلول از طریق ماده و یا به وسیله حرکت ماده نسبت به محلول، رنگرزی می‌شوند، بستگی دارد.

مک‌گریگور^۲ و پیترز^۳ [۳۵] روند انتقال جرم را بررسی و دو لایه مرزی تعریف کردند. لایه مرزی هیدرودینامیکی به عنوان لایه‌ای تعریف می‌شود که در آن سرعت محلول از صفر به ۹۹ درصد سرعت جریان اصلی افزایش می‌یابد. همچنین لایه‌ای که در آن غلظت رنگزا در سطح لیف تا ۹۹٪ نسبت به جریان اصلی افزایش می‌یابد، به عنوان لایه مرزی نفوذی نامیده می‌شود. این لایه به عنوان لایه مایع محسوب می‌شود که مانع عبور رنگزا از محلول حمام رنگرزی به سطح لیف می‌شود. آنها نشان دادند که افزایش در جریان سرعت اصلی و یا کارایی گردش محلول ضخامت لایه مرزی نفوذی را کاهش داد و بنابراین نرخ رنگرزی را افزایش داد. آنها جریان اصلی پیدا کردند که در آن نرخ رنگرزی با افزایش سرعت، افزایش نمی‌یابد و ضخامت لایه مرزی نفوذ می‌تواند صفر در نظر گرفته شود.

بکمن^۴ و هافمن^۵ [۳۶] ارتباط بین نرخ جریان محلول و نرخ رمق‌کشی را مطالعه کردند. آنها نشان دادند که غلظت نسبی رنگزا درون بسته نخ با نرخ که در آن محلول در سرتاسر بسته جریان می‌یابد، تغییر کرد. اختلاف در غلظت محلول در سرتاسر بسته با غلظت آن در سطح لیف توسط ایزوترم جذب مربوط بود، در حالی که نرخ رمق‌کشی در موقعیت مشخصی در درون بسته با غلظت موضعی محلول^۶ در سطح لیف متناسب بود. بنابراین، نرخ کلی رمق‌کشی و یکنواختی رنگرزی به نرخ رمق‌کشی داخل بسته بستگی داشت. برای نرخ کلی جریان داده شده، حداکثر نرخ مجاز رمق‌کشی وجود داشت که فراتر از آن درجه نایکنواختی دیگر قابل قبول نخواهد بود. همچنین بیان شد که تفاوت در نرخ موضعی جریان

¹ Vickerstaff

² McGregor

³ Peters

⁴ Beckmann

⁵ Hoffmann

⁶ local liquor concentration

محلول ناشی از عواملی مانند ساختار ماده‌ای که رنگری می‌شود منجر به درجه‌ای از ناپیکنواختی خواهد شد.

هسلر^۱ [۳۷] دریافت که یکنواختی بستگی به کثرت تماس بین محلول رنگزا و لیف دارد. بولتون^۲ و کرَنک^۳ [۳۸] ارتباط بین نرخ رمق‌کشی و نرخ جریان را توسعه دادند و نتیجه گرفتند که به شرطی که بسته لیف آسیب نبیند و یا از هم نپاشد، نرخ جریان بالاتر، رنگری بهتری را حاصل می‌کند. هین^۴ و همکارانش [۲۲] نیز به نتایج مشابه‌ای دست یافتند.

ویتاکر^۵ [۳۹] نتیجه گرفت در جریان سیال یک بعدی، جهت جریان از بیرون به درون بسته ارجح است، زیرا شعاع بسته کاهش می‌یابد و در نتیجه محلول رنگزا از مساحت سطح کوچک‌تری عبور می‌کند. با این حال، برای بسته‌های ناپایدار، به دلیل جمع‌شدگی و از هم‌پاشیدگی^۶، جهت جریان از سمت درون به بیرون ترجیح داده می‌شود.

تاثیر برگشت جریان سیال بر کیفیت رنگری حاصل نیز توسط پژوهشگران مختلف بحث شده است. کلیفورد^۷ [۴۰] اثر جریان سیال بالا بر یکنواختی و از هم‌پاشیدگی بسته را مطالعه کرد و نتیجه گرفت که به‌طور مشخص بسته‌های آزاد و سست به احتمال زیاد در جهت جریان یک‌طرفه^۸ تغییر شکل می‌دهند. او همچنین بیان کرد که برگشت جریان در هر گردش^۹ منجر به حصول یکنواختی بهتری می‌شود. سپس کاربونل^{۱۰} [۴۱] تاثیر تکرار برگشت جریان را مطالعه و مشخص کرد که برگشت‌های مکرر نسبت به چرخش یکنواختی ضعیف‌تری حاصل می‌کند، زیرا مرکز بسته هرگز به‌طور کامل با محلول رنگزا اشباع نمی‌شود.

¹ Hasler

² Bolton

³ Crank

⁴ Heane

⁵ Whittaker

⁶ Shrinkage and distortion

⁷ Clifford

⁸ One- directional flow

⁹ Circulation

¹⁰ Carbonell

هسلر [۳۷] ادعا کرد که، اگر جریان در انتهای هر گردش کامل معکوس شود، افزایش چهار برابری نرخ رمق‌کشی می‌تواند مشاهده شود. با این حال، بکمن و هافمن [۳۶] نتیجه گرفتند که یک برگشت در هر چهار تا هشت گردش، یکنواختی مطلوبی فراهم می‌کنند. رن [۴۲] و ایلیت^۱ [۴۳] پیشنهاد کردند که یکنواختی احتمالاً رابطه معکوسی با تعداد برگشت جریان سیال دارد. آنها همچنین تلاش کرده‌اند تا اثر نرخ جریان سیال و برگشت جریان بر یکنواختی حاصل را مدل‌سازی کنند. بحث‌های بوهرر^۲ [۴۴] نشان می‌دهد که جریان در یک جهت منجر به اثرات منفی بر کیفیت رنگرزی نمی‌شود.

توجه به تاثیر جریان پراکنده و انبوه^۳ نیز مورد توجه قرار گرفته است. هنگامی که سیال در بستر بسته‌بندی شده جریان می‌یابد، دو پدیده جریان ایفای نقش می‌کنند: اینها به عنوان جریان انبوه و پراکنده شناخته می‌شوند. این جریان‌ها همچنین مراحل تعیین نرخ را ایجاد می‌کنند به‌ترتیبی که نرخ کلی انتقال رنگزا به نقطه‌ای مشخص بر روی سطح لیف در زمان خاص را تعیین می‌کنند. برلی [۴۵-۴۷] یک مدل فرآیند رنگرزی را که شامل این اثرات بود، توسعه داد. ماهیت این جریان‌ها به‌طور مفصل در زیر تشریح می‌شود.

۲.۵.۱. جریان انبوه

هنگامی که سیال در سرتاسر یک بسته استوانه‌ای شکل از ورودی تا خروجی پمپاژ می‌شود، فرآیند فیزیکی عمده که به انتقال سیال کمک می‌کند، جریان انبوه است. در ساده‌ترین حالت، سیال به‌طور یکنواخت در امتداد شعاع بسته با جریان انبوه حرکت می‌کند.

۳.۵.۱. جریان پراکنده

جریان پراکنده به علت عبور نایکنواخت جریان در درون بسته به‌وجود می‌آید. این جریان به المان‌های سیال مجاور اجازه می‌دهد تا به‌طور مستمر از یکدیگر جدا و یا مخلوط شوند همچنان که سیال به‌صورت انبوه بین الیاف و از طریق بسته عبور می‌کند. این جریان‌ها بر جریان اصلی سیال (جریان انبوه) منطبق می‌شوند.

¹ Illett

² Bohrer

³ Bulk and dispersive flow

برای وارد کردن تأثیر جریان پراکنده در مدل فرآیند رنگریزی، قانون فیک^۱ می‌تواند به کار رود. در روش مشابه به ضریب نفوذ مولکولی^۲ (D)، جریان‌های پراکنده می‌توانند به وسیله ضریب پراکندگی^۳ (D_{dis}) تشریح شوند [۴۵] یعنی:

$$R_d = -D_{dis} \cdot (dC/dr) \quad [۱-۱]$$

که در آن R_d نرخ کلی نفوذ (انتقال پراکنده) و dC/dr گرادیان غلظت موضعی هستند.

فرآیند پراکنده ترکیبی از اختلاط فیزیکی است که به دلیل عبور جریان از مسیرهای به‌طور تصادفی قرار گرفته در بسته با دیگر مشارکت‌ها از انتشار گردابی^۴ در جت‌ها است و در اثر انقباض‌ها و انبساط‌های ناگهانی در دیگ پخت فعال می‌شوند.

۴.۵.۱. اثر جریان‌های پراکنده و انبوه

برلی [۴۷-۴۵] در مدل خود نشان داد که سرعت تهی بهینه جریان محلول، که حداقل سرعتی است که در آن حتی توزیع رنگزا در محلول پیرامون نخ‌های مجزا رخ می‌دهد، می‌تواند به دست آید. به دلیل ماهیت غیرخطی معادلات در مدل و پیچیدگی آنها، هنوز این مدل در یک سیستم کنترل فرآیند عملی استفاده نشده است.

۵.۵.۱. اثر شکل و تراکم بسته در رنگریزی یکنواخت

بسته‌ها در معرض نیروهای مکانیکی، هیدرواستاتیکی و هیدرولیکی مختلفی هستند. لذا باید قادر به تحمل این نیروهای جابه‌جائی و همچنین جریان داغ محلول رنگزا باشند. تراکم بسته نخ باید تا جای ممکن یکنواخت باشد، چراکه این ارتباط مستقیمی با کیفیت رنگریزی دارد. چگالی بسته برای به دست آوردن جریان مناسب محلول رنگزا و جلوگیری از کانال کردن در همان زمان، باید بهینه می‌شود. نفوذپذیری بسته‌ها در همان بار برای اطمینان از عمل‌آوری یکنواخت نخ در سرتاسر محفظه رنگریزی

^۱ Fick's law

^۲ Molecular diffusion coefficient

^۳ Dispersion coefficient

^۴ انتشار گردابی: مهاجرت و مبادله بخش‌هایی از سیال که در نتیجه حرکت اغتشاشی شان در اعداد رینولدز بالا اتفاق می‌افتند.

باید یکسان باشد. مک‌گریگور [۴۸] شیمی فیزیک رنگزای نفوذپذیری بسته‌های نخ را مطالعه و معادلاتی را نیز ارائه داد که قادر به تخمین مقدار جریان سیالی که از نخ عبور کرده، در برابر مقداری که از اطراف آن عبور کرده، است. وثوقی [۲۳] تاثیر نفوذپذیری بسته‌ی نخ را مورد مطالعه قرار داد و این اثرات را در مدل برلی^۱ فرآیند رنگرزی به‌کار گرفت.

اثر تراکم بسته بر میزان نایکنواختی نیز به‌وسیله‌ی هین و همکارانش^۲ [۲۲] مورد مطالعه قرار گرفت. او تاکید کرد که میزان نایکنواختی ارتباط خطی مستقیمی با تراکم بسته دارد.

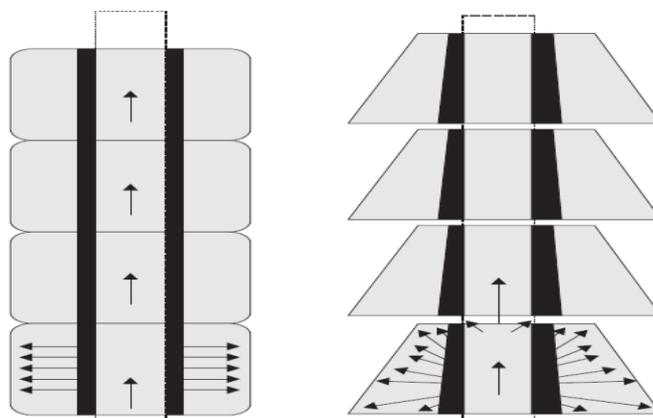
دنتون^۳ [۴۹] اثر شکل بسته‌ی پیچیده شده بر الگوی جریانی درون تک تک بسته‌ها را بررسی کرده است. او تایید کرد که بسته‌های استوانه‌ای شکل ویژگی‌های جریان بهتر نسبت به بسته‌های مخروطی دارند. این نتیجه‌ی شکل جریان در بسته‌های مخروطی است که شامل هر دو بردار محوری و شعاعی^۴ است. جریان در بسته‌های مخروطی را می‌توان در شکل ۵.۱ مشاهده کرد. وی نشان داد [۵۱-۵۰] که نسبت نرخ‌های جریان سیال در مناطقی که جریان بیشترین بود به نرخ‌های جریان در مناطقی که جریان کمترین بود، ۲۲:۱ و در برخی موارد ۴۰:۱ بود. بنابراین، او نتیجه گرفت که اولین گام برای جلوگیری از این تفاوت‌ها استفاده از بسته‌های استوانه‌ای شکل است که با هم در پایه و بالا فشرده می‌شوند.

¹ Burley model

² Heane *et al.*

³ Denton

⁴ Axial and radial vectors



شکل ۵.۱. جریان سیال در درون بسته‌های مخروطی و استوانه‌ای شکل (برگرفته از دنتون [۵۱]).

هنگامی که بسته‌ها روی فنرهای به هم فشرده پیچانده می‌شوند، تغییرات تراکم می‌تواند به حداقل برسد. با این حال، مهم است که اشاره شود حتی تغییرات موضعی کوچک در تراکم بسته به‌طور مستقیم بر یکنواختی نهایی به‌دست آمده در هر سیستم رنگرزی تاثیر می‌گذارد.

۶.۵.۱. اثر نرخ جذب رنگزا از محلول

چرخه رنگرزی در یک روش رمق‌کشی معمولی می‌تواند به‌صورت زیر تقسیم بندی کرد:

- رمق‌کشی
- نفوذ
- فاز مهاجرت.

در مرحله رمق‌کشی، رنگزا از محلول رنگرزی به سطح لیف حرکت می‌کند، جایی که کم و بیش به‌طور مساوی پخش می‌شود. در مرحله نفوذ، رنگزای رمق‌کشی شده بر روی سطح لیف و نواحی محیطی به داخل لیف نفوذ می‌کند و خود را به‌طور یکنواخت توزیع می‌کند. در مرحله مهاجرت، مولکول‌های رنگزا از مکان‌هایی با غلظت بیشتر به مکان‌هایی با غلظت کمتر می‌روند. بنابراین، پیشنهاد شد که [۵۲] رنگرزی یکنواخت می‌تواند با به‌کارگیری یکی از روش‌های زیر به‌دست آید:

- کنترل ساده‌تر در ابتدای رنگرزی و اجازه دادن مدت زمانی طولانی‌تر برای مهاجرت

- کنترل دقیق رنگریزی در طول مرحله رمق‌کشی با کنترل دما، pH، مواد کمکی و الکتروولیت‌ها.

روش اول محدودیت‌هایی دارد، زیرا رنگریزی یکنواخت فقط موقعی می‌تواند به دست آید که مهاجرت مولکول‌های رنگزا در سیستم امکان‌پذیر است. این ممکن است برای رنگریزی پشم با مواد رنگزای "اسیدی لولینگ"^۱ و یا اکریلیک با مواد رنگزای مکسیلون ام^۲ در نظر گرفته شود [۵۳]. روش دوم از کاربردهای گسترده‌تر برخوردار است، زیرا اغلب سیستم‌های رنگریزی اجازه نمی‌دهند تصحیح نایکنواختی به کمک مهاجرت در مراحل انتهایی چرخه رنگریزی انجام شود. این مورد زمانی اتفاق می‌افتد که تمایل زیادی بین رنگزا و لیف وجود دارد، به عنوان مثال در مورد رنگریزی پشم با مواد رنگزای اسیدی میلینگ^۳، اکریلیک با مواد رنگزای کاتیونی و یا پنبه با مواد رنگزای ری‌اکتیو.

مفهوم منحنی رمق‌کشی بهینه توسط گروه‌های مختلفی پیرو تعریف "نرخ رنگریزی بحرانی"^۴، که نباید برای رنگریزی یکنواخت از آن تجاوز کرد، بررسی شد.

بولتون و کرنک [۳۸] نرخ آرام رمق‌کشی در ابتدا و به دنبال آن افزایش نرخ رمق‌کشی حمام رنگریزی را تایید کردند. کاربونل و همکارانش [۴۱] سعی کردند تا شرایط ماشین‌آلات رنگریزی را به رفتار رنگزاها ارتباط دهند و مقادیر از نظر ریاضی تعریف شده وابسته به غلظت، مواد کمکی و تمایل لیف را به کار بردند. این روش تنها در سیستم رنگزای دیسپرس^۵ قابل کاربرد یافت شد.

سیگار^۶ [۵۴] پیشنهاد کرد که یک منحنی رمق‌کشی خطی، رنگریزی یکنواخت حاصل می‌کند. او "رنگریزی ایزو ری اکتیو"^۷ را به عنوان رنگریزی با نرخ جذب ثابت معرفی کرد، جایی که با تغییر کوچک در زمان (dt) یک تغییر نسبی غلظت در حمام رنگریزی (dc_t) خواهد بود؛ یعنی:

¹ Acid levelling

² Maxilon M

³ Acid milling

⁴ Critical dyeing rate

⁵ Disperse dye

⁶ Cegarra

⁷ Isoreactive dyeing

$$dCt / dt = C_m / t_m \quad [۲-۱]$$

که در اینجا C_m مقدار رنگزای جذب شده توسط لیف در انتهای زمان فرآیند جذب (t_m) است.

معادله اصلاح شده توسط سیگارا-پونته^۱ [۵۴]، با در نظر گرفتن معادله آرینوس^۲، به ارائه روشی برای محاسبه نرخ رمق‌کشی هدف در هر زمان داده شده (t_i) منجر شد. روتیگر^۳ و همکارانش و سیاگریست^۴ [۵۴-۵۷] نشان دادند که یک پارامتر رنگرزی مهمی، V_{sig} ، شناخته شده به‌عنوان نرخ رنگرزی بحرانی، برای هر سیستم کالا/ماشین وجود دارد. آنها نتیجه گرفتند که این اتفاق در یک زمان خاص اتفاق می‌افتد که نتایج آن فقط یکنواختی است، صرف نظر از مکانیزم رنگرزی و نرخ گرمادهی. بنابراین به نظر می‌رسد که برای رنگرزی یکنواخت، نرخ رنگرزی همیشه باید کمتر از نرخ بحرانی باشد و اگر کوتاه‌ترین زمان ممکن مورد نظر باشد، در این صورت منحنی رمق‌کشی بهینه تابعی خطی از زمان رنگرزی است. آنها ادعا کردند که V_{sig} تقریباً با افزایش نرخ جریان محلول رنگرزی افزایش می‌یابد. هسلر [۳۷] پیشنهاد کرد که نرخ یکنواخت جذب منجر به رنگرزی یکنواخت خواهد شد، و برای رسیدن به این، مقدار رنگزای خارج شده در هر گردش باید ثابت باقی بماند، و در نتیجه منحنی رمق‌کشی خطی نیز به‌دست می‌آید. بیان شد که نسبت تفاوت بین غلظت ورودی و خروجی بسته به متوسط غلظت محلول رنگرزی باید به کمتر از یک مقدار مشخص کنترل شود اگر حصول رنگرزی یکنواخت مد نظر باشد.

بکمن و هافمن [۳۶] تشخیص دادند که نسبت بزرگ‌تر نرخ رمق‌کشی به نرخ گردش محلول رنگرزی، اختلاف غلظت بزرگ‌تری را بین مکان‌های مختلف در درون بسته ایجاد می‌کنند. آنها بیان کردند که برای نرخ ثابت گردش محلول رنگرزی، برای به حداقل رساندن اختلاف غلظت، رمق‌کشی باید با زمان خطی باشد.

تحقیقات توسط تعدادی از گروه‌ها در مورد چگونگی دستیابی به منحنی رمق‌کشی خطی با تغییرات دما-زمان پیش‌بینی شده انجام شد.

¹ Cegarra-Puente

² Arrhenius equation

³ Ruttiger

⁴ Siegrist

بروکس^۱ [۵۸] نشان داد که برای یک جهت جریان داده شده در درون بسته نخ، اختلاف غلظت در شعاع بسته متناسب با نرخ کلی رمق‌کشی رنگزای به‌کار رفته به‌دست آمد. برای نرخ ثابتی از تقلیل رنگزا، این اختلاف غلظت باید در طول رنگرزی ثابت باقی بماند. این موضوع شک و تردید جدی در مورد تابع خطی بودن منحنی رمق‌کشی بهینه ایجاد کرده است. او اظهار داشت که نه منحنی‌های رمق‌کشی خطی و نه نمودار زمان/دما توصیه شده توسط تولیدکنندگان رنگزا بهترین یکنواختی را در رنگرزی حاصل نمی‌کنند. او نشان داد که منحنی‌های نمایی و منحنی‌های رمق‌کشی متناسب با ریشه دوم زمان (t) یکنواختی بهتری در مقایسه با مدل‌های قبلی ارائه می‌دهند.

مدلی^۲ و هولد استوک^۳ [۵۹] "نظریه تخلیه ساده"^۴ را ارائه دادند که این نظریه پیشنهاد می‌کند یک نمودار غیرخطی که در آن نرخ جذب رنگزا به‌وسیله یک لایه در بسته متناسب با غلظت رنگزا در محلول رنگرزی در آن نقطه است، بیشترین رنگرزی یکنواخت را ارائه می‌دهد.

رن [۴۲] نمودارهای رمق‌کشی را بررسی کرد و به‌طور نظری و تجربی نتیجه گرفت که نمودار رمق‌کشی درجه دوم به احتمال زیاد یکنواختی بهتری نسبت به دیگر نمودارها حاصل می‌کند. کنترل رمق‌کشی فرآیند رنگرزی برای به‌دست آوردن نمودارهای مختلف در فصل هفتم بحث خواهد شد.

۶.۱. اتوماسیون در سالن رنگرزی

کنترل فرآیندهای رنگرزی مسیر طولانی را از زمان تنظیم دستی دریچه بخار، تنها روش کنترل دمای موجود در اوایل دهه ۱۹۵۰، طی کرده است. از آن به بعد، فنآوری کنترل فرآیند رنگرزی نسبتاً سریع از عملیات دستی ساده به ماشین‌آلات کنترل شده با کامپیوتر پیشرفته، در دهه‌های بعدی توسعه یافته است. همچنان که استفاده از چنین تجهیزات افزایش یافته است، محدوده کاربرد گسترش یافته است که شامل وظایفی نظیر پر کردن، تخلیه و افزودن مواد شیمیایی و رنگزا به دستگاه رنگرزی و همین‌طور برنامه‌ریزی زمان/دما است [۲، ۶۰].

¹ Brooks

² Medley

³ Holdstock

⁴ Simple depletion theory

پیشرفت در تجهیزات باعث کاهش هزینه واقعی سیستم‌های کنترل می‌شود. در دسترس بودن تجهیزات پیچیده‌تر و قدرتمند بدون افزایش عمده قیمت خرید، باعث می‌شود که کنترل تعداد زیادی از پارامترها در فرآیند رنگرزی مقرون به صرفه باشد.

مزایای اتوماسیون و کنترل به‌خوبی ثبت شده است [۶۱]، اما آنها می‌توانند به‌صورت کاتالوگ شامل مزایای زیر در بیابند [۶۲]:

- افزایش در بهره‌وری
- بهبود در کیفیت با کاهش در اتلاف مواد
- تکرارپذیری بهبود یافته
- انعطاف‌پذیری افزایش یافته
- صرفه جویی در رنگزها، مواد شیمیایی و نیروی کار
- کاهش کلی در هزینه‌های فرآیند

۱.۶.۱. کنترل دما

در عمل، کنترل دما هنوز معمول‌ترین روش مورد استفاده برای کنترل نرخ در صنعت رنگرزی است. نرخ رنگرزی تا حد زیادی وابسته به دما است، در همه موارد با افزایش دمای افزایش می‌یابد، اما رمق‌کشی نهایی ممکن است بسته به سیستم رنگرزی خاص افزایش یا کاهش یابد [۴]. همچنین، نرخ که دما افزایش می‌یابد، یکی از مهم‌ترین عواملی شناخته می‌شود که یکنواختی رنگرزی را تعیین می‌کند. طرح‌های زمان/دما برای کاربرد رنگزا در کالاهای مناسب معمولاً در کارت‌های الگوی ارائه شده توسط تولیدکنندگان رنگزا به‌عنوان راهنمای رنگرزی تنظیم می‌شوند. در این حالت عملی عمده‌تاً، طرح پیشنهادی برای تغییر دمای حمام رنگرزی معمولاً شامل مراحل زیادی است که هر کدام با نرخ تغییر دما به‌صورت °C/min مشخص می‌شوند. چنین طرحی معمولاً به‌عنوان یک برنامه یا منحنی زمان/دما نامیده می‌شود و عمده‌تاً بر اساس اطلاعات تجربی تولیدکننده رنگزا برای یک لیف داده شده است.

با این وجود، کنترل زمان/دما، لزوماً کنترل فرآیند رنگرزی را بیان نمی‌کند، زیرا این پارامتر بدون هیچ اشاره‌ای به شرایط ماده تحت فرآیند در آن نقطه زمانی بررسی می‌شود و فرض نادرستی که گرفته می‌شود آن است که شرایط رنگرزی صرفاً وابسته به تابع زمان/دما هستند [۳۷]. کنترل دما در رنگرزی روش غیرمستقیم کنترل نرخ رمق‌کشی رنگزا به لیف است؛ بدون اطلاعات درباره نرخ واقعی رمق‌کشی

در طول یک رنگرزی خاص، فرآیند نمی‌تواند بهینه شود. به‌طور ایده‌آل، دمای محلول رنگرزی باید بر طبق نرخ واقعی رمق‌کشی رخ داده طی فرآیند رنگرزی تنظیم شود.

۲.۶.۱. کنترل رمق‌کشی

رنگرزی یا به‌صورت یک فرآیند رمق‌کشی پاتیلی^۱ و یا به‌صورت یک فرآیند آغشته‌سازی^۲ و تشبیت مداوم انجام می‌شود. در رنگرزی رمق‌کشی، تمامی مواد در تماس با کل محلول رنگرزی است و از محلول رنگرزی الیاف رنگزها را جذب می‌کنند. بنابراین، غلظت رنگزا در حمام رنگرزی به تدریج کاهش می‌یابد. درجه رمق‌کشی حمام رنگرزی به‌صورت تابعی از زمان نرخ و مقدار فرآیند رنگرزی را توصیف می‌کند. برای یک رنگزای واحد^۳، رمق‌کشی به‌صورت جرم رنگزای جذب شده توسط ماده، تقسیم بر جرم اولیه کل رنگزا در حمام رنگرزی تعریف می‌شود. برای یک حمام رنگرزی با حجم ثابت:

$$\% \text{ رمق کشی} = (C_0 - C_t) / C_0 \quad [3-1]$$

که در آن C_0 و C_t به ترتیب غلظت‌های رنگزا در حمام رنگرزی در ابتدا و در زمان t طول فرآیند هستند.

منحنی‌های رمق‌کشی، مانند آنچه که در شکل ۶.۱ نشان داده شد، می‌تواند در یک دمای رنگرزی ثابت یا تحت شرایطی که دما و سایر متغیرهای رنگرزی تغییر می‌کند، تعیین شود. برای بسیاری از رنگرزی‌ها، افزایش تدریجی دمای رنگرزی، احتمالاً به کمک افزایش مواد شیمیایی مانند اسیدها یا نمک‌ها، نرخ رمق‌کشی را کنترل می‌کند. در مواردی که رنگزها در الیاف عمیق رنگرزی شده قادر نیستند به حمام رنگرزی واجذب شده و سپس به الیاف با عمق کمتر توزیع شوند، چنین کنترلی ضروری است برای اطمینان از اینکه رنگ نهایی تا حد امکان یکنواخت است [۵]. چنین توزیع مجدد رنگزها مهاجرت نامیده می‌شود.

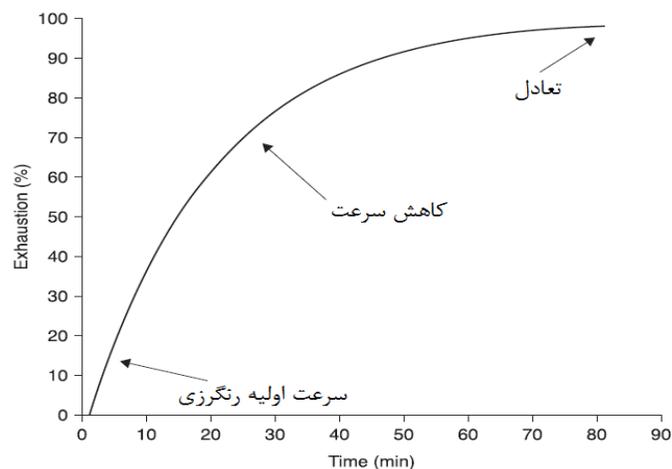
شیب منحنی رمق‌کشی رنگرزی (شکل ۶.۱)، نرخ رنگرزی در هر لحظه در طی فرآیند را تعیین می‌کند. اگر رنگرزی به مدت طولانی ادامه یابد، نرخ رنگرزی به تدریج کاهش می‌یابد تا اینکه تعادل

¹ Batch exhaustion process

² Impregnation and fixation process

³ Single dye

جائی که هیچ رنگزایی توسط لیف جذب نشود، به دست می‌آید. اکنون تعادلی بین نرخ‌های جذب و واجذب رنگزا وجود دارد. رمق‌کشی تعادلی حداکثر رمق‌کشی ممکن تحت شرایط داده شده است. عدم هر افزایش بعدی در رمق‌کشی لزوماً به معنای آن نیست که یک تعادل واقعی وجود دارد. ممکن است رنگزای در محلول در تعادل با رنگزای قرار گرفته در سطوح بیرونی الیاف باشد. تعادل واقعی تنها زمانی وجود دارد که رنگزا در محلول در تعادل است با رنگزایی که به‌طور کامل به مرکز لیف نفوذ کرده است. رنگرزی‌ها به ندرت به این نقطه ادامه می‌یابند، زیرا رسیدن به آن ممکن است مدت زیادی طول بکشد. در واقع، بسیاری از رنگرزی‌های تجاری به سختی به نقطه رمق‌کشی ثابت می‌رسند [۱۵].



شکل ۶.۱. رمق‌کشی حمام رنگرزی به صورت تابعی از زمان.

دو روش اساسی برای رسیدن به رنگرزی رمق‌کشی یکنواخت در هر سیستم رنگزا / لیف وجود دارد؛ اولی با مهاجرت رنگزا و دومی با رمق‌کشی رنگزای کنترل شده [۵۸]. اولین روش شامل رمق‌کشی تمام رنگزا بر روی لیف و سپس اجازه دادن به آن برای مهاجرت بین الیاف به منظور یکنواخت کردن رنگرزی است. اینها رنگزاهایی هستند که قادر به مهاجرت از لیف به محلول رنگرزی هستند و سپس مجدداً به لیف منتقل می‌شوند. این توزیع مجدد رنگزا، یکنواختی رنگرزی را بهبود می‌بخشد و به‌طور معمول موقعی که محلول رنگ در حالت جوش است، انجام می‌شود. در این روش رنگزا به‌طور کامل بر روی کالا رمق‌کشی نمی‌شود که این می‌تواند به تکرارپذیری رنگ ضعیف هدایت کند، و بنابراین برای افزودن‌های رنگزا برای تصحیح فام نهایی اغلب ضروری هستند.

روش دوم آن است که اطمینان حاصل شود که رنگزا از ابتدای رنگرزی به‌طور یکنواخت رمق‌کشی می‌شود. در این روش، نرخ رنگرزی با تغییر پارامترهای حمام رنگرزی با نرخ کنترل شده کنترل می‌شود به‌طوری که رنگزا بر روی نخ به‌طور یکنواخت در سراسر بسته قرار می‌گیرد. کنترل دقیق این پارامترها، مانند دمای رنگرزی، pH یا مقدار الکترولیت و نرخ جریان، غیره، برای به‌دست آوردن رنگرزی‌های یکنواخت و به‌خوبی نفوذ کرده اغلب ضروری است. این امر ضروری است اگر رنگزای در ابتدا جذب شده قادر نیست از مناطق خیلی زیاد رنگرزی شده به مناطق ضعیف رنگرزی شده در طول فرآیند مهاجرت کند.

۳.۶.۱. نمودارهای رمق‌کشی

تغییر غلظت رنگزا در حمام رنگرزی در طول فرآیند رنگرزی به‌عنوان نمودار رمق‌کشی بیان می‌شود، و شکل این نمودار توسط بسیاری از پژوهشگران پذیرفته شده است که بزرگ‌ترین عامل تعیین‌کننده در یکنواختی رنگرزی است [۶۳، ۵۹، ۵۸].

کنترل رمق‌کشی به منظور نظری و نیز در آزمایشگاه‌ها توسط پژوهشگران زیادی توسعه یافته است. پژوهشگران پیشین دانش سینتیک رنگرزی را برای ابداع نمودار زمان/دما استفاده کردند تا یک نمودار رمق‌کشی ویژه‌ای را ارائه دهند؛ اما پژوهشگران بعدی روی کنترل مستقیم نرخ رمق‌کشی تلاش کردند.

مطالعات مبنای نظری رابطه بین یکنواختی رنگرزی و نرخ جذب رنگزا به‌وسیله کالای نساجی توسط بولتون^۱ و کرنک^۲ [۳۹] در سال ۱۹۵۲ مطرح شد و در دهه ۱۹۶۰ توسط سیگارا و همکارانش [۶۳] و کربونیل و گروهش [۶۴] ادامه یافت. از آن زمان به بعد، تحقیقات زیادی در زمینه روش کنترل رمق‌کشی حمام رنگرزی به‌منظور بهبود یکنواختی انجام شده است [۶۷-۶۴، ۲۳]. این موضوع حوزه اختلاف نظر زیاد در میان پژوهشگران بوده است.

¹ Boulton

² Crank

نمودار رمق‌کشی خطی

کربونیل و همکارانش یک بیان ریاضی نمودارهای رمق‌کشی مختلف را توسعه دادند و اقدام به محاسبه نمودارهای زمان/دما عملی کردند که منجر به نمودارهای رمق‌کشی خطی می‌شود [۴۱]. سیگارا و همکارانش پژوهش‌های بسیاری را برای برقراری روابط سینتیکی دقیق جهت انجام رنگرزی‌های "ایزو ری اکتیو"، که در آن رنگرزی‌ها نمودار رمق‌کشی خطی دارند، انجام دادند [۶۸، ۵۴].

سپس سیگارا و همکارانش این رویکرد را به‌منظور به‌کارگیری آن در رنگرزی‌هایی با افزایش مداوم (یا تدریجی) رنگزا به حمام رنگرزی اصلاح کردند [۷۲-۶۹]. این رنگرزی‌ها در دمای ثابت با استفاده از یک نمودار افزودن رنگزای از پیش تعیین شده برای حصول رمق‌کشی خطی انجام شد. این روش به‌عنوان رنگرزی تدریجی^۱ تعریف شد که می‌تواند برای کنترل جذب رنگزا تدریجی به‌کار رود. به‌طوری‌که از احتمال جذب سریع اولیه و جذب غیرعادی که احتمالاً سبب رنگرزی‌های نایکنواخت شود، جلوگیری می‌کند. در عمل، این روش اغلب برای بهبود یکنواختی، هنگامی که تمام رنگزها در ابتدای فرآیند اضافه می‌شوند، به‌کار می‌رود. هسلر [۳۷] معتقد بود که رمق‌کشی خطی به احتمال زیاد منتج به یکنواختی می‌شود و یک استراتژی کنترل جهت اتوماسیون ماشین رنگرزی ارائه کرد. به‌طوری‌که درصد رمق‌کشی در هر گردش هرگز از مقدار بحرانی برای یکنواختی بیشتر نمی‌شود.

دیگر نمودارهای رمق‌کشی

بروکس^۲ استفاده از نمودارهای رمق‌کشی خطی را زیر سوال برد. او ایده ای را مطرح کرد جذب سریع در شروع فرآیند و به دنبال آن کاهش تدریجی رمق‌کشی باید نتیجه بهتری نسبت به نمودار خطی ارائه دهد. استدلال او این بود که بخش بحرانی مرحله رمق‌کشی، مرحله نهایی است، زمانی که مقدار خارج شده از حمام در مقایسه با باقیمانده بزرگ است و منجر به ریسک نایکنواختی بزرگ‌تر می‌شود. او دو نمودار از این نوع را مورد بررسی قرار داد: منحنی نمایی و منحنی رمق‌کشی متناسب با ریشه دوم زمان.

کار تجربی بروکس نشان داد که هر دوی نمودارهای نمایی و ریشه دوم بهبود واضحی نسبت به هر دوی نمودار خطی و شیب دمایی ثابت استاندارد رنگرزی ارائه می‌دهند. او همچنین توصیه کرد که تلاش‌ها برای ابداع یک سیستم نظارت غلظت قابل اطمینان و سیستم کنترل رمق‌کشی انجام شود.

¹ Integration dyeing

² Brooks

بکمن و هافمن از ایده‌های بروکس در مورد نرخ رمق‌کشی بالا در شروع رنگرزی و سپس کم شدن آن حمایت کردند. با این وجود، آنها به دلیل محدودیت‌های ناشی از درک ناقص از شرایط دقیق ماده‌ای که رنگرزی می‌شود، نمودار رمق‌کشی خطی را توصیه کردند [۷۳].

مدلی و هولداستوک [۵۹] مدل ریاضی فرآیند رنگرزی، معرفی شده به‌عنوان "نظریه تخلیه ساده"^۱ را گسترش دادند. با استفاده از این نظریه، آنها قادر بودند نشان دهند که نمودار رمق‌کشی نمایی باید به همان دلایل استدلال تجربی بروکس یکنواختی بهینه حاصل کند، که در انتهای مرحله رمق‌کشی خطر نایکنواختی بیشترین است. کار آنها همچنین شامل توسعه یک سیستم نظارت حمام رنگرزی تجاری به منظور به‌کارگیری کار نظری‌شان به یک موقعیت سالن رنگرزی واقعی می‌باشد [۷۴].

رن [۴۲] در همکاری با نابس^۲ یک مدل نظری فرآیند رنگرزی بسته ارائه داد؛ که می‌تواند تفاوت کمی کردن اختلاف بین مقدار رنگزا در درون و بیرون بسته در کل چرخه رنگرزی، که به پیشنهاد نوع جدید نمودار رمق‌کشی بهینه هدایت می‌کند، نمودار درجه دوم، به کار رود.

همچنین کار آزمایشگاهی روی کنترل رمق‌کشی حمام رنگرزی با استفاده از ماشین رنگرزی با جریان شعاعی در مقیاس آزمایشگاهی انجام شد [۴۳] و نتایج آن، یافته‌های مدل نظری را تایید کرد. به‌طور خاص، مشخص شد که نمودار درجه دوم نسبت به نمودار رمق‌کشی نمایی، که در واقع نسبت به نمودار خطی ارجح بود، قابل ترجیح باشد. تمامی رنگرزی‌های روش رمق‌کشی کنترل شده، یکنواختی بهتری نسبت به روش رنگرزی استاندارد (شیب دمایی ثابت) ارائه دادند. این کار توسط ایلت [۴۳] ادامه یافت، و او راه حل ریاضی مدل رن-نابس را بهبود بخشید و آن را به ماشین‌هایی جریان محوری به کار برد.

اگرچه در این حوزه، کارهای نظری زیادی انجام شده است، اما هنوز هیچ توافقی در مورد نمودار رمق‌کشی بهینه، یا حتی آیا کنترل انحصاری نرخ رمق‌کشی در واقع بهینه‌سازی فرآیند کلی است یا نه، به دست نیامده است. همان‌طور که بکمن و هافمن [۳۶] بیان می‌کنند، مزیت اندکی در توسعه نظارت پیچیده و استراتژی‌های کنترل وجود دارد اگر نمودار هدف به روشنی تعریف نشود. همچنین، با وجود

¹ Simple depletion theory

² Nobbs

اینکه نرخ رمق‌کشی به‌طور دقیق کنترل می‌شود، هنوز هم ممکن است نایکنواختی به‌دلیل دیگر مشکلات مرتبط با ماشین‌آلات فرآیند، مانند هم‌زدن ضعیف یا تفاوت در دمای بین قسمت‌های مختلف ماشین، رخ دهد. در این موارد، یکنواختی قابل قبول ممکن است فقط با استفاده از مواد یکنواخت کننده شیمیائی که بهبود مهاجرت رنگزا را فراهم می‌کنند، به‌دست آید.

۴.۶.۱. تجزیه و تحلیل رویکرد مهندسی شیمی

وای^۱ [۷۵] به‌همراه برلی^۲ و همکارانش [۷۶] مدل ریاضی پیچیده‌ای را با استفاده از اصول شناخته شده در مهندسی شیمی توسعه دادند. آنها بسته نخ را به‌صورت یک راکتور شیمیائی بستر ثابت در نظر گرفتند. فرآیندهای جابه‌جائی، پراکندگی، جذب و واجذب رنگزا به بسته الیاف و از آن مدل‌سازی می‌شوند، در حالی که همچنین افزودن رنگزا به تانک اختلاط و نیز خروج احتمالی رنگزا از تانک مد نظر قرار می‌گیرد [۶۶]. به‌علاوه آنها مدل راکتور بستر ثابت را توسعه دادند و دو معادله برای فرآیندهای جریان شعاعی و محوری تعریف کردند [۷۶]. شبیه‌سازی‌های نمونه نشان داد که مزایا شامل کاهش زمان رسیدن به رنگرزی یکنواخت و دستیابی سریع‌تر به تعادل است.

وثوقی^۳ [۲۳] کار برلی و همکارانش را ادامه داد. معادلات او برای توصیف نفوذ رنگزا به درون لیف توسعه یافت. این معادلات با استفاده از شرایط مرزی مناسب جهت حصول روابطی بی‌بُعد برای هر دو جریان‌های شعاعی و محوری به‌صورت عددی حل شد.

تلجین^۴ [۷۷] توصیف ریاضی انتقال جرم جابه‌جائی در فرآیندهای جریان محلول اطراف یک لیف منفرد و از طریق یک لایه الیاف را بیان کرد که تخمین نظری نرخ انتقال جرم جابه‌جائی در فرآیندهای مایع عمل‌آوری منسوج را فراهم می‌کند.

کارهای ذکر شده در بالا که تاثیر شرایط رنگرزی بر سینتیک جذب رنگزا را تشریح می‌کنند، یا عامل پراکندگی جذب را نادیده می‌گیرند و یا نمی‌توانند سرعت جریان در درون بسته را مشخص کنند. جزئیات در فصل بعدی بحث خواهد شد.

¹ Wai

² Burley

³ Vosoughi

⁴ Telegin

۷.۱. منابع

1. Shamey R., Nobbs J.H. (2000), 'The Application of Feedforward profiles in the Control of Dyeing Machinery' *Textile Chemist and Colorist*, **32**, 2, 47–52.
2. Nobbs J.H. (1997), 'Control Parameters in Dyeing Machinery Operation' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **107**, 430–3.
3. Johnson A. (1989), *Theory of Coloration of Textiles*, SDC, Bradford.
4. Vickerstaff T. (1968), *The Physical Chemistry of Dyeing*, 2nd edn, Oliver and Boyd.
5. Broadbent A. (2002), *Basic Principles of Textile Coloration*, SDC, Bradford.
6. Shore J. (1990), *Colorants and Auxiliaries*, SDC, Bradford.
7. Aspland J.R. (1993), 'The Application of Ionic Dyes to Ionic Fibers: Nylon, Silk and Wool and Their Sorption of Anions' *Textile Chemist and Colorist*, **25**, 3, 55–9.
8. Hoffmann F. (1990), 'Levelness in Yarn Dyeing: Advances in Theory and Practice' *Textile Chemist and Colorist*, **22**, 11–16.
9. Welham A. (2000) 'The Theory of Dyeing (and the Secret of Life)' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **116**, 140–3.
10. Warnet S.B. (1995), *Fiber Science*, Prentice Hall.
11. Hearle J. (1993), *Physical Properties of Textile Fibers*, 3rd edn, The Textile Institute.
12. Lewin M. (1983), *Handbook of Fibre Science and Technology*, Volume 1, Prescott Inc.

13. Nettles J. (1983), *Handbook of Chemical Specialties*, Prescott Inc.
14. Kulkarni S.V. (1986), *Textile Dyeing Operations*, Noyes Publications.
15. Bird C., Boston W. (1972), *The Theory of Coloration of Textiles*, SDC, Bradford.
16. Parton K. (1997), 'The Dyeing of Wool: Past, Present and Future' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **113**, 341–3.
17. Brooks J.H. (1972), 'Levelness in the Dyeing of Wool Yarn and Fabric' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **88**, 184–6.
18. Yuan C.Q., Bide M. (1998), 'Textiles and the Environment from AATCC' *Textile Chemist and Colorist*, **30**, 62–5.
19. Huang C., Yu W. (1999), 'Control of Dye Concentration, pH, and Temperature in Dyeing Processes' *Textile Research Journal*, **69**, 914–18.
20. Gailey I. (1989), *International Dyer and Textile Printer*, **5**, 31.
21. Harvey H.N, Park J. (1989), 'Automation in the Dyeing Laboratory and Its Influence on Accuracy in Batch Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **105**, 207–11.
22. Heane D.G., Hill T.C., Park J., Shore J. (1979), 'Package Dyeing of Acrylic Fibre Yarn: Important Parameters which Influence Level Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **95**, 125–42.
23. Vosoughi M. (1985), 'Numerical Simulation of Packed Bed Adsorption applied to a Package Dyeing Machine' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
24. Chen H.L, Noel C.J. (1995), 'Experimental Methods for the Analysis of Dye Desorption' *Textile Chemist and Colorist*, **95**, 27, 2, 23–7.

25. Park J. (1981), *A Practical Introduction to Yarn Dyeing*, SDC, Bradford.
26. Thornton A. (1994), 'Fully automated yet versatile systems' *International Dyer*, **5**, 25.
27. Obermaier O., German Patent 23, 117 (6.10.1882).
28. Wyles D.H. in Duckworth C. (ed.) (1983), *Engineering in Textile Coloration*, Dyers Company Publications Trust.
29. Fleming R., Gaunt J.F. (1977), 'Developments in Package Dyeing' *Rev. Prog. Coloration and Related Topics*, **8**, 47–59.
30. Horn P.J. (1965), 'Specific Problems in the Dyeing of Cellulosic Fibres in Circulating– liquor Machines' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 262–8.
31. Beacon Controls Ltd, Technical Pamphlet, 14–18 Campus Road, Bradford, West Yorkshire, BD7 1HR.
32. Zella Instrumentation & Control Ltd, Technical Pamphlet, Brunel Drive, Northern Road Industrial Estate, Newark- on-Trent, Nottinghamshire, NG24 2EQ.
33. Cegarra J. (1973), 'A New Package Dyeing Apparatus' *Melliand Textilberichte*, **54**, 394; *Melliand Textilberichte* English Edition, **2**, 4, 306–8.
34. Bauer K.H., Boxhammer J., Kockett D., Toldrian P. (1979), 'Verfahren und Gerät zur Optimierung und Regelung des Farbauszugs bei Badfärbungen; Technik und praktische Erfahrungen in der PAC-Färberei. 1. Teil' *Textilveredlung*, **14**, 183.
35. McGregor R., Peters R.H. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing I – The Diffusional Boundary Layer in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 393–400.

36. Beckmann W., Hoffmann F. (1977), 'The Relationship Between Liquor Flow and Levelness in Package and Beam Dyeing', *Textile Chemist and Colorist*, **9**, 10, 22–7.
37. Hasler R. (1975), 'Optimizing Package, Beck and Jet Dyeing' *Textile Chemist and Colorist*, **7**, 36–9.
38. Boulton J., Crank J. (1952), 'Package Dyeing I—A Theoretical Model and its Relation to Technical Practice' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **68**, 109–16.
39. Whittaker J. (1961), 'Practical Problems in Preparation and Dyeing of Cross-wound Packages' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **77**, 690–9.
40. Clifford F. (1972), 'Rapid Reversal-A Technique for Increasing Quality of Dyestuff Application' *American Dyestuff Reporter*, **61**, 40.
41. Carbonell J., Hasler R., Walliser R., Knober W. (1973), 'Mathematical Relationship between Dyeing Kinetics and Liquor Throughput and Their Effect on the Homogeneity of Dye Distribution of the Fiber' *Melliand Textilberichte*, **54**, 68; *Melliand Textilberichte* English Edition, **2**, 1, 62–7.
42. Ren J. (1985), 'A Thesis on the Development of a Mathematical Model of the Batch Dyeing Process and its Application to the Simulation and Computer Control of A Dyeing Machine' PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, Leeds University.
43. Ilett S.J. (1990), 'Investigation of the Package Dyeing Process Using a Fixed Bed Reactor as a Model System' PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, Leeds University.
44. Bohrer E.S. (1991), 'The Importance of Short Liquor Technology and Synchronised Dyeing in the Batchwise Dyeing of Fabric and Yarn' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **107**, 212–15.

45. Burley R. (1990), Pollution Seminar 'Engineer Your Way Out', Edinburgh, Heriot-Watt University.
46. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1987), 'Modelling the Dynamic Behaviour of a Packed- bed Adsorber' *Journal of the Textile Institute*, **19**, 164–88.
47. Burley R.W., Rattee I.D., Flower J.R. (1969), 'Mass- transfer Processes in Hankdyeing Machines I—Theory and Experimental Studies' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **85**, 187–92.
48. McGregor R., Peters R.H. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing I- The Diffusional Boundary Layer in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 393–400.
49. Denton M.J. (1959), 'An Electrolytic Tank for the Investigation of Fluid Flow Patterns in Yarn Packages' *Journal of the Textile Institute*, **50**, T521–T527.
50. Denton M.J. (1963), 'Flow Patterns In Package Dyeing' *J. Text Institute*, **54**, T406–T408.
51. Denton M. (1964), 'The Permeability of Cross-Wound Cotton Yarn Packages' *Journal of the Textile Institute*, **55**, T228– T242.
52. Carbonell J., Hasler R., Walliser R., 'Chem. Phys. Chem. Anwendungstech. Grenzflächenaktiver Stoff' Ber. Inst. 6 Kongr. (11–25. 9. 1972), Band 3, 383–403.
53. Giles C.H. (1974), 'A Laboratory Course in Dyeing', 3rd edn. S.D.C., Bradford.
54. Cegarra J., Puente P., Valdeperas J. (1976), 'Isoreactive Dyeing Systems' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **92**, 327–31.

55. Ruttiger W., Ehlert J. (1972), 'The Critical Dyeing Speed – an Identification Value of Processing Technique for the Time Saving and Even Dyeing on the Apparatus' *Textil-Praxis*, **27**, 10, 609–16.
56. Ruttiger W., Wolf H. (1974), 'Possibilities and Limitations of Rapid Dyeing Techniques' *Melliand Textilberichte*, **55**, 10, 876–9; *Melliand Textilberichte* English Edition, **3**, 10, 762–5.
57. Siegrist G. (1977), 'Developments in Rapid- dyeing Methods and Machinery' *Review of Progress in Coloration and Related Topics*, **8**, 24–35.
58. Brooks J.H. (1975), 'The Effect of the Shape of the Exhaustion Curve on Levelness of Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **91**, 394–8.
59. Medley J.A., Holdstock C.R. (1980), 'The Choice of Optimum Dye Exhaustion Profiles in the Direct Control of Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **96**, 286–92.
60. Lewis D. (1992), *Wool Dyeing*, SDC, Bradford.
61. Bialik Z., Park J., Walker D.C. (1979), 'Control Engineering in the Dyeing and Finishing Industry' *Review of Progress in Coloration and Related Topics*, **10**, 55–60.
62. Park J. (1985), 'Developments in Dyeing Process Control' *Review of Progress in Coloration and Related Topics*, **15**, 1–5.
63. Cegarra P., Puente P. (1967), 'Considerations on the Kinetics of the Dyeing Process of Polyester Fibers with Dispersed Dyes' *Textile Research Journal*, **37**, 343–50.
64. Carbonell J., Haster R., Walliser R. (1974), 'Circulating Liquor Dyeing in a New Light' *Melliand Textilberichte*, **55**, 149; *Melliand Textilberichte* English Edition, **3**, 2, 110–13.

65. Hoffmann F., Mueller F. (1979), 'Model Calculations on Levelness in Package Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **95**, 178–86.
66. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical Simulation of an Axial Flow Package Dyeing Machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33–9.
67. Nobbs J.H., Ren J. (1985), Proceedings of 29th Hungarian Textile Conference, Budapest.
68. Cegarra J., Puente P., Valldeperas J. (1974), 'Characteristics of Acrylic Fibers and Kinetics of Dyeing with Cationic Dyes' *Textile Chemist and Colorist*, **6**, 8, 23–7.
69. Cegarra J., Puente P., Valldeperas J., Pepió M. (1988), 'Dyeing by Integration' *Textile Research Journal*, **58**, 645–53.
70. Cegarra J., Puente P., Valldeperas J., Pepió M. (1989), 'Kinetic Aspects of Dye Addition in Continuous Integration Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **105**, 349–55.
71. Cegarra J., Puente P., Valldeperas J. (1992), 'Dyeing Wool Packages with Continuous Dosage of Dye' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **108**, 86–9.
72. Cegarra J., Enrich F., Pepió M., Puente P. (1999), 'Modelling of integration dyeing of a wool package with acid dyes' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **115**, 92–4.
73. Beckmann W., Hoffmann F. (1988), 'Sistemi colorimetrici per la realizzazione dei procedimenti di tintura' *Tintoria*, **85**, 70.
74. Holdstock C.R. (1988), 'The Measurement and Control of Dyebath Exhaustion' PhD Thesis, University of Leeds, UK.

75. Wai P.P.C. (1984), 'Dynamic Behaviour of a Reactive Packed Bed Adsorption System' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
76. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1987), 'Process Engineering Approach to Dyeing Machinery—A Study of Package Dyeing Machine Dynamics' *Chem. Eng. Res. Des.*, **65**, 505–13.
77. Telegin F.Y. (1988), 'Convective Mass Transfer in Liquid Treatment Processes' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **114**, 49–55.

۲. اصول اساسی در فرآیند رنگرزی

چکیده: فصل دوم اصول اساسی فرآیند رنگرزی را ارائه می‌دهد؛ این فصل با برخی جنبه‌های کمی سینتیک‌ها و تعادل رنگرزی، شامل تمایل استاندارد رنگزها، در ارتباط است. تغییر در پتانسیل شیمیایی رنگزا در حالت استاندارد از محلول به لیف به دلیل حضور الکترولیت‌ها بیان می‌شود. انتقال رنگزا در حمام رنگرزی شامل جذب و واجذب توصیف شده است و ایزوترم‌های مختلف جذب سطحی مورد بررسی قرار می‌گیرند. سپس بیان دینامیکی عمومی جذب و واجذب رنگزا توسط الیاف نساجی معرفی می‌شود. پدیده‌های نفوذ و مدل‌های بیان کننده نفوذ رنگزا در داخل الیاف نساجی نیز مورد ارزیابی قرار می‌گیرند.

کلمات کلیدی: انتقال رنگزا، جذب و واجذب، جذب سطحی، ایزوترم‌های جذب سطحی، تمایل استاندارد رنگزها، نفوذ، لایه مرزی نفوذی، قوانین فیک^۱.

۱.۲. مقدمه

نظریه رنگرزی طیف گسترده‌ای از موضوعات، عمدتاً در حوزه شیمی فیزیک، را در بر می‌گیرد. برخی از موضوعات به حساب آمده در نظریه رنگرزی عبارت‌اند از:

- حالت رنگزها در محلول و در لیف در طول رنگرزی و بعد از رنگرزی.
- سرعت فرآیندهای رنگرزی و چگونه این‌ها توسط انتقال جرم رنگزا از حمام رنگرزی به سطح مشترک رنگزا-لیف و توسط نفوذ رنگزا از سطح مشترک به درون لیف تحت تاثیر قرار می‌گیرند.
- پدیده‌های اتفاق افتاده در سطح مشترک رنگزا-لیف، شامل جذب سطحی مولکول‌های رنگزا و اثرات پتانسیل‌های سطحی.
- ماهیت برهم کنش بین مولکول‌های رنگزا و لیف که عمدتاً دارای منشاهای ذاتی هستند.
- رفتار رنگرزی به صورت یک تعادل ترمودینامیکی و توصیف آن برحسب متغیرهای ترمودینامیکی.

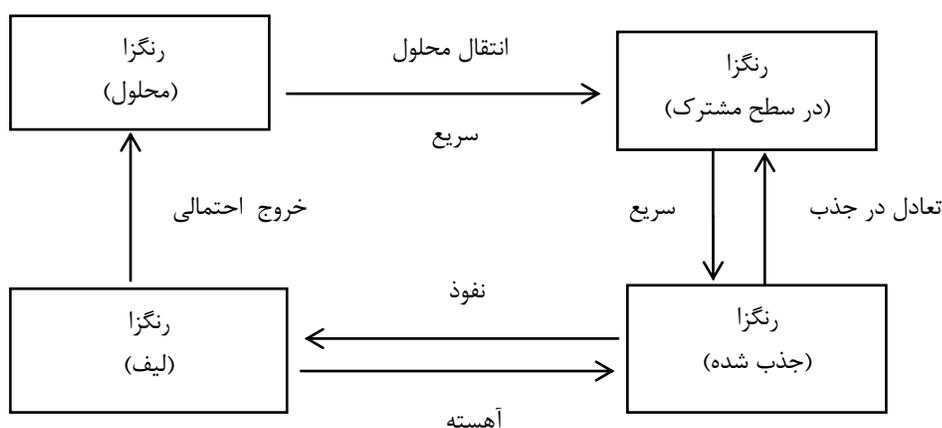
¹ Fick's laws

- نظریه ساختار لیف و چگونه این بر نرخ‌ها و تعادل رنگری تاثیر می‌گذارد.

مفاهیم اساسی این موضوعات به‌طور گسترده در یک‌سری انتشارات بررسی شده است [۴-۲]. با توجه به هدف اصلی کار حاضر، این فصل برخی جنبه‌های کمی تعادل رنگری و سینتیک‌ها را معرفی خواهد کرد.

۲.۲. انتقال رنگزا از حجم محلول به سطح لیف

رنگری فرآیندی است که زمان می‌برد. انتقال مولکول رنگزا از محلول رنگری به درون الیاف معمولاً شامل انتقال جرم اولیه از محلول رنگزا به سطح لیف (جذب رنگزا بر روی سطح لیف) و سپس نفوذ رنگزا به درون لیف به حساب آورده می‌شود (شکل ۱.۲). رنگزای نفوذ کرده ممکن است خارج شده و دوباره به حمام رنگری وارد شود. این فرآیند ادامه یافته تا تعادل حاصل شود.



شکل ۱.۲. انتقال رنگزا از محلول به درون لیف.

انتقال رنگزا از حجم محلول به سطح لیف سریع است؛ سرعت اکثر اوقات با افزایش نرخ جریان بیشتر می‌شود؛ تعادل جذبی سریع است، بنابراین معمولاً فرض می‌شود که نرخ کلی رنگری به نرخ نفوذ رنگزا به درون الیاف بستگی دارد. کنترل نامناسب نرخ جذب رنگزا منتج به رنگری‌های ناپیکنواخت خواهد شد، مگر اینکه رنگزا بتواند متعاقباً از منطقه رنگری شده با عمق زیاد به مناطق رنگی با عمق کم در بسته نخ مهاجرت کند [۳]. بنابراین کنترل دو مرحله اول فرآیند، یعنی انتقال جرم اولیه از حجم

محلول به سطح لیف و جذب رنگزا بر روی سطح، برای به دست آوردن توزیع یکنواخت رنگزا در سرتاسر بسته مهم است.

هنگامی که یک لیف، نخ یا تکه‌ای پارچه در محلول رنگزا غوطه‌ور می‌شود، سرعتی که در آن رنگزا جذب شده به‌طور کلی وابسته به شدتی است که محلول هم‌زده می‌شود و هنگامی که هم‌زدن شدید است تمایل به دستیابی به مقدار بیشینه دارد [۵]. تاثیر هم‌زدن بر سرعت رنگرزی الیاف با رنگزاهای مختلف توسط تعدادی پژوهشگر مورد بررسی قرار گرفت. در رنگرزی پشم با رنگزاهای اسیدی و پنبه با رنگزاهای مستقیم نشان داده شد که، زمانی که هم‌زدن افزایش می‌یابد، سرعت رنگرزی بیشتر شده و تمایل دارد تا در سرعت‌های بالاتر چرخش، مستقل از سرعت عمل کنند.

نگرانی اساسی در رنگرزی منسوجات اطمینان حاصل کردن از آن است که مایع رنگزا به تمامی نقاط بسته نفوذ کند، و تا جای ممکن به‌طور یکنواخت در درون آن توزیع شود. در مورد رنگرزی بوبین^۱، بوبین^۱، این برای هر بسته و به‌طور مساوی بین یک بسته و دیگری به‌کار می‌رود. در رنگرزی بوبین نخ، به‌طور ایده‌آل بوبین‌های هم‌شکل و همانند تحت یک فشار مشترک قرار می‌گیرند و هر بوبین جریان یکسان مایع را دریافت کرده و فرآیند مشخصی را سپری می‌کند. با این حال در عمل، بوبین‌ها به‌دلیل تغییرات در تنش و عوامل دیگر در پیچش به مقدار بیشتر یا کمتری در سفتی و اندازه تغییر می‌کنند. این تغییرات از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا در فرآیندهای مرطوب، بسته‌های متراکم‌تر نسبت به انواع آزادتر آن کمتر توسط محلول نفوذ می‌کنند و تفاوت‌ها در سرعت جریان می‌تواند به اختلافات شدید^۲ در رنگرزی سوق یابد. در رنگرزی عرض باز بسته، باید از یکنواختی در سرتاسر عرض بسته و به‌علاوه لایه‌های درونی و بیرونی طاقه اطمینان حاصل کرد. تغییرات دمایی در درون ماشین آلات که منتج به تغییرات در نفوذپذیری رنگزاها در سرتاسر طاقه و به‌علاوه لایه‌های درونی و بیرونی بسته شده باید به‌دقت کنترل شود. در رنگرزی طنابی^۳، مانند رنگرزی ناپیوسته بسته‌ها در جت و وینچ، حرکت بسته در درون ماشین‌آلات و زمان و دمای اقامت باید به‌دقت کنترل شود، زیرا این پارامترها جذب رنگزا توسط بسته را تحت تاثیر قرار می‌دهند. علاوه بر این، مایع رنگرزی باید به‌طور یکنواخت هم‌زده شود تا از حضور یکنواخت رنگزا در بسته در سراسر فرآیند رنگرزی اطمینان حاصل شود.

¹ Package dyeing

² Shade

³ Rope dyeing

تأثیر هم‌زدن در افزایش سرعت جذب وابسته به اندازه‌گیری‌های همه جانبه بر روی پیچیدگی هیدرودینامیکی سیستم است. متأسفانه، با این حال، جریان در سرتاسر مجموعه لیف^۱ را نمی‌توان با هر روش ساده‌ای توصیف کرد (به‌دلیل پیچیدگی زیاد در تعیین جریان مایع در سرتاسر الیاف، نخ‌ها یا پارچه) [۵].

علی‌رغم پیچیدگی‌های سیستم‌های واقعی، برخی اصول حاکم بر فرآیند ممکن است با بررسی سیستم‌های ساده‌تر روشن شوند، به‌عنوان مثال یک صفحه صاف یا فیلمی از مواد غوطه‌ور شده در مایع رنگزا که در آن جهت جریان موازی با صفحه است. در تماس با مایع رنگزا، رنگزا توسط فیلم جذب می‌شود، به‌طوری‌که محلول مجاور با کمبود رنگزا مواجه شده و در این صورت رنگزا توسط پراکندگی از حجم محلول به سطح منتقل می‌شود، اما مقدار منتقل شده توسط سرعتی که در آن رنگزا از فیلم جریان یافته اصلاح می‌شود.

محاسبه سرعتی که در آن الیاف بتوانند رنگزا را جذب کنند، نیازمند درک الگوی جریان مایع قبل از تجزیه و تحلیل نفوذی است که ممکن است سعی شود. بررسی‌های تجربی جریان مایع رنگزا از طریق جرم لیف منجر به این نتیجه شده که، در سرعت‌های معمول به‌کار رفته در رنگرزی، جریان خطی ارجح‌تر از جریان آشفته است، بنابراین توجه‌ها ممکن است به شرایط جریان خطی محدود شود [۶، ۷].

چندین مقاله درباره تأثیر سرعت جریان بر رنگرزی در هر دو جنبه نظری و عملی منتشر شده است. مشخص می‌شود که سرعت‌های بالاتر جریان مایع رنگزا در سرتاسر یک بسته منتج به یکنواختی بهتری در رنگرزی می‌شود. بولتون و کرنک [۸] مدل نظری بسته نخ را توصیف کردند و جذب یکنواخت رنگزا در بسته نخ را مورد بحث قرار دادند. آنها اهمیت تأثیرات سرعت جریان و سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی^۲ و ویژگی‌های یکنواختی رنگزا را نشان دادند. همچنین نتایج حاصل از تجربیات عملی را نیز از منظور مدل نظری بررسی کرده بودند [۹].

عامل مهم دیگر، لایه مرزی نفوذی، لایه رویی که مقاومت در برابر عبور رنگزا از حجم حمام رنگرزی در آن اتفاق افتاد، موضوع نشریات متعددی بوده است [۱۰، ۱۱] و به‌طور مختصر توسط مک‌گریگور و

¹ Fibrous assemblies

² Rate of strike

پیترز بررسی می‌شود [۱۲]. مایع رنگزایی که در سطح لیف نساجی جریان داشته، گرادبان سرعت را افزایش می‌دهد. در ناحیه نزدیک به سطح لیف، سرعت حمام رنگرزی از آنچه که در جریان اصلی وجود داشته نسبت به آنچه که در سطح لیف موجود است کاهش می‌یابد. ناحیه تغییر سرعت به‌عنوان لایه هیدرودینامیکی اشاره می‌شود.

اهمیت لایه مرزی نفوذی در اثر دارسی بر روی نرخ‌های جذب و واجذب استوار است. لایه‌های مرزی نفوذی برای به تاخیر انداختن یا کاهش نرخ‌های جذب و واجذب رنگزا توسط لیف عمل می‌کنند (با افزایش ضخامت لایه تاثیر افزایش می‌یابد). اگر سرعت جریان حمام رنگرزی از طریق جرم منسوج یکنواخت نباشد، در آن صورت نرخ جذب رنگزا یکنواخت نخواهد بود و به نایکنواختی در رنگرزی سوق می‌یابد [۱۳]. با افزایش رقم‌کشی در تعادل حمام رنگرزی، تاثیر لایه مرزی نفوذی بر جذب رنگزا افزایش می‌یابد. این واقعیت با رفتار مشاهده شده‌ی سیستم‌های رنگرزی تجاری سازگار است. به‌عنوان مثال، در بسیاری از موارد مشخص شده که رنگزاهایی با تمایل بالا منتج به رقم‌کشی تعادلی بالایی می‌شود و به سختی به‌طور یکنواختی به‌کار می‌روند. مشخص شده که با افزایش در سرعت جریان، ضخامت لایه مرزی نفوذی کاهش می‌یابد و در نتیجه انتقال جرم به سطح بیشتر می‌شود. اعتقاد بر این است که سهم بسیار زیادی از نایکنواختی مشاهده شده به‌علت تفاوت‌های نرخ جریان در مناطق مختلف الیاف نساجی است. الیاف سلولزی در محلول‌های آبی بار الکتریکی منفی بر روی سطح خود به‌دست می‌آورند، که در آن لایه نفوذی با بار الکتریکی دوگانه شکل می‌گیرد [۱۴]. جذب و واجذب رنگزاهای آنیونیکی بر روی سلولز را می‌توان با افزودن الکترولیت‌ها تحت تاثیر قرار داد که این امر پتانسیل الکتریکی بر روی سطح لیف را جبران می‌کند. همچنین، الکترولیت‌های افزوده شده می‌توانند روند جذب و واجذب رنگزا را با شکستن ساختار پیوندی H آب تسهیل کنند، که این می‌تواند رنگزاهای آنیونیکی و مکان‌های یونی بر روی سطح لیف را هیدراته و آبدار کند [۱۵].

ساختار فیزیکی الیاف، مانند سلولز، تا حد زیادی روند جذب و واجذب رنگزا را تحت تاثیر قرار می‌دهد. حجم قابل دسترس لیف برای رنگزا به‌طور کلی حجم درونی قابل دسترس (V) نامیده می‌شود، که نشان دهنده فضای درونی خالی یا خلل و فرج در درون لیف است. در ترمودینامیک جذب و واجذب، V به‌صورت حجم فاز درونی در هر کیلوگرم لیف خشک (L/Kg) بیان می‌شود [۱۶]. تعیین حجم درونی

لیف تا حد زیادی محاسبه تمایل ذاتی استاندارد^۱ مرتبط با جذب و واجذب ($\Delta\mu$) را تحت تاثیر قرار می‌دهد. نشان داده شد که می‌توان V را براساس مدل جذب رنگ دو فازی، بیان شده در یک فرم لگاریتمی خطی، بر طبق روش آزمون-خطا تعیین کرد [۲۴-۱۷]. حضور یکنواخت محلول رنگزا در الیاف نساجی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

دنتون^۲ [۲۵] مسئله حذف هوای به‌دام افتاده در درون بوبین و در طول فرآیند ترشوندگی^۳ را بررسی کرد. همچنین هِدفیلد و لمین^۴ [۲۶] تاثیر هوا (ناشی از کف کردن) را بر نفوذپذیری بوبین‌ها مطالعه کردند.

ویتاکر^۵ [۲۷] انواع بوبین‌ها را در استفاده کلی مورد بررسی قرار داد و خواستار توجه به مراقبت‌های مورد نیاز در آماده سازی آنها شد. فاکس^۶ [۲۸] عوامل عمده ی دخیل در تولید نخ‌های رنگی با کیفیت بالا را به‌طور مختصر بیان کرد و برخی کاستی‌ها را که می‌تواند از استفاده بسته‌های نامناسب ناشی شود مورد بررسی قرار داد.

مهم است که، در طول مرحله انتقال رنگزا از محلول رنگرزی به سطح لیف، تلاش‌هایی باید صورت پذیرد تا اطمینان حاصل شود که نرخ جریان حمام رنگرزی از طریق جرم منسوج در طول فرآیندهای رمق‌کشی یکنواخت باشد. با این حال، علی‌رغم تلاش‌های بسیار، یکنواختی جریان حمام را در تمامی موارد نمی‌توان تضمین کرد، زیرا مسئله جریان از طریق بسته‌ها بسیار پیچیده است، و به‌طور مفصل در جای دیگری بحث می‌شود [۲۹]. از این رو رنگرز باید روش‌هایی را به‌کار گیرد تا نایکنواختی‌های اجتناب‌ناپذیری که در مراحل اولیه فرآیند رنگرزی رخ داده است، تمایل به یکنواخت شدن داشته باشند. همان‌طور که قبلاً اشاره شد، شاید موثرترین روش بالا بردن "سطح انرژی" سیستم با استفاده از دماهای رنگرزی بالاتر و یا مواد شیمیائی کمکی است تا مهاجرت رنگزا را تسهیل کند.

¹ Standard affinity

² Denton

³ Wetting- out process

⁴ Hadfield and Lemin

⁵ Whittaker

⁶ Fox

۳.۲. جذب سطحی رنگزها توسط الیاف نساجی

۱.۳.۲. جذب سطحی از محلول

جذب سطحی از محلول در بسیاری از موارد تجربی مهم است. در فرآیندهای رنگرزی، لازم است تا تمایزی بین جذب سطحی و جذب درونی صورت گیرد. جذب سطحی به یک غلظت بیش از حد در سطح اشاره داشته، در حالی که جذب درونی بر توزیع کمابیش یکنواخت ماده حل شده در فاز جامد دلالت دارد. در این فرآیندها فاز جامد به‌عنوان "جاذب سطحی" یا "جاذب درونی" و ماده حل شده (یا انواع دیگر) به‌عنوان "ماده جذب شده در سطح"^۱ یا "ماده جذب شده در درون"^۲ شناخته می‌شوند. در برخی موارد ممکن است به دلیل کمبود داده‌ها، تشخیص بین جذب سطحی و درونی مشکل باشد و یا ممکن است مشخص نشود که کدام فرآیند در حال رخ دادن است؛ لذا اصطلاح کلی "جذب" به‌کار می‌رود [۲]. این احتمال وجود دارد که جذب سطحی در تمامی سطوح اتفاق بیفتد.

اگر گونه‌های مولکولی به‌طور کامل سطح جاذب را با یک لایه از مولکول‌ها (یا یون‌ها) اشباع کنند، جذب سطحی به‌عنوان جذب سطحی تک مولکولی یا یک مولکولی شناخته می‌شود. از سوی دیگر، تشکیل چندین لایه می‌تواند اتفاق بیفتد، که در آن حالت به‌صورت جذب سطحی چند مولکولی اشاره می‌شود. حالت دوم (آخرین حالت)، بدون شک، در رنگرزی الیاف نایلونی با رنگزهای اسیدی مونوسولفونه شده رخ می‌دهد، که در آن اعتقاد بر این است که تجمع رنگزا در درون الیاف اتفاق می‌افتد.

در عمل، ۲ نوع جذب سطحی وجود دارد [۲]. برهم‌کنش ماده جذب شده با سطح ممکن است به سادگی از طریق نیروهای جاذب فیزیکی، یعنی نیروهای بین مولکولی، اتفاق بیفتد، و این نوع از جذب سطحی به‌عنوان جذب سطحی فیزیکی شناخته می‌شود. این جذب بر روی سطوح اتفاق می‌افتد که در آن ظرفیت مورد نیاز اتم‌ها در سطح، از قبل توسط پیوند با اتم‌های مجاور اشباع شده است. اگر، از طرفی دیگر، یک سطح غیراشباع باشد، در آن صورت، اتم‌ها در سطح به‌طور کامل توسط پیوند با اتم‌های مجاور اشباع نشده و جذب شیمیایی یا جذب سطحی شیمیایی رخ می‌دهد. در اینجا، پیوندهای شیمیایی بین ماده جاذب و سطح شکل می‌گیرند.

¹ Adsorbate

² Absorbate

جذب سطحی فیزیکی به سرعت رخ می دهد، زیرا به هیچ انرژی فعال سازی نیازمند نیست. به همین دلیل این جذب مستقل از دما نیز است [۳]. جذب شیمیایی، یک واکنش شیمیایی است، که ممکن است به انرژی فعال سازی قابل ملاحظه ای نیازمند باشد، در این حالت جذب در یک نرخ مناسبی تنها بالاتر از یک دمای مشخص ادامه خواهد یافت. در بسیاری از حالت های جذب سطحی، ایجاد تمایز بین دو نوع با توجه به نرخ فرآیند مشکل است. برای یک سطح بسیار غیراشباع، انرژی فعال سازی صفر یا بسیار کوچک است و جذب شیمیایی می تواند حتی در دماهای پایین نیز به سرعت اتفاق بیفتد. بنابراین، جذب سطحی سریع لزوماً دلالت بر جذب سطحی فیزیکی ندارد.

۲.۳.۲. ایزوترم های جذب سطحی

یک ایزوترم جذب، غلظت ماده جذب شده بر روی سطح جامد را نسبت به غلظت در سیال اطراف (هنگامی که سیستم در تعادل در دمای ثابت است) نشان می دهد [۳۰]. نمودار نشان دهنده ایزوترم جذب رنگرزی غلظت رنگزای جذب شده بر روی لیف را (C_f در g/kg یا mol/kg) در برابر غلظت محلول (C_s در g/l یا mol/l) رسم می کند. ایزوترم های جذب برای اطلاعاتی که آنها از مکانیزم رنگرزی به دست می آورند مفید هستند. ۳ نوع اصلی از ایزوترم های جذب رنگرزی وجود دارد که معمولاً به صورت ایزوترم های نرنست^۱، لانگمیر^۲ و فروندلیچ^۳ معرفی می شوند. اکثر سیستم های رنگرزی در بردارنده تنها جذب سطحی، کاملاً برگشت پذیر هستند [۳۱]. ایزوترم های تعادلی، توسط جذب سطحی رنگزا از محلول بر روی الیاف رنگ نشده در ابتدا ایجاد شده که برابر با آنها می هستند که با خروج رنگزا از الیاف رنگرزی شده به درون حمام رنگرزی در ابتدا تهی به دست آمده اند. ایزوترم نرنست ساده ترین است و توسط معادله ۲-۱ بیان می شود [۳۲]:

$$C_f = kC_s \quad [۱-۲]$$

که در آن K ثابت است. این معادله همچنین توصیف کننده توزیع یا تفکیک ماده حل شده بین ۲ حلال امتزاج ناپذیر است. نمودار C_f در برابر C_s تا نقطه متناظر با اشباع رنگزا در طیف خطی است.

¹ Nernst

² Langmuir

³ Freundlich

ایزوترم لانگمیور برای جذب سطحی بر روی مکان‌های مشخصی در جامد، که اغلب تنها به تعداد محدودی وجود دارد، به کار می‌رود [۳]. چنین موقعیتی در رنگرزی نایلون، پشم و ابریشم با رنگزاهای اسیدی ساده توسط یک مکانیزم تبادل یون وجود دارد [۲۳]. ایزوترم جذب لانگمیور به راحتی استنتاج می‌شود. نرخ واجذب تنها به کسر مکان‌های اشغال شده بستگی دارد (C_f/C_{max}). نرخ جذب رنگزا به درون لیف از محلول به کسر مکان‌های اشغال نشده وابسته است ($1 - C_f/C_{max}$) و غلظت رنگزا در محلول نیز (C_s) است. در تعادل، ۲ نرخ مخالف با هم برابر هستند و می‌توانند توسط معادله ۲-۲ نشان داده شوند.

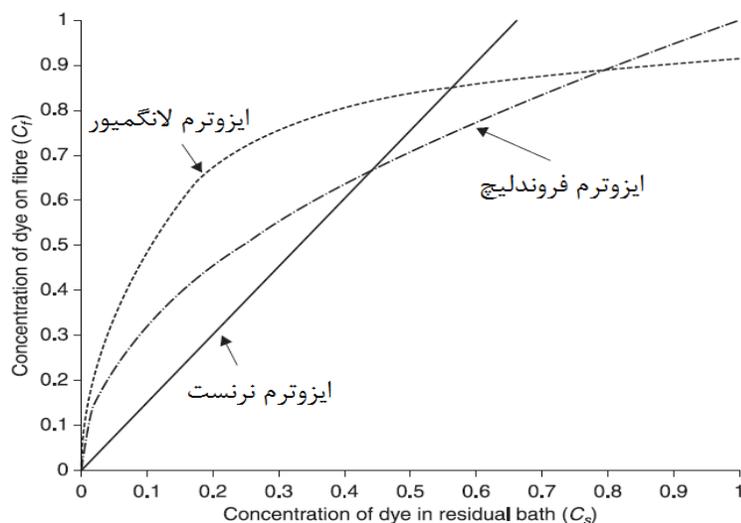
$$k_1 \left(1 - \frac{C_f}{C_{max}} \right) C_s = k_{-1} \frac{C_f}{C_{max}} \quad [۲-۲]$$

که در آن k_1 و k_{-1} به ترتیب ثابت‌های نرخ برای جذب و واجذب هستند، و C_{max} تعداد حداکثری مکان‌های جذب است که مولکول‌های رنگزا می‌توانند در الیاف اشغال کنند. بازسازی این رابطه به معادله ۳-۲ منجر می‌شود.

$$\frac{C_f}{C_{max}} = \frac{KC_s}{1 + KC_s} \quad [۳-۲]$$

که در آن K برابر با مقدار k_1/k_{-1} است. نمودار C_f برحسب C_s برای ایزوترم لانگمیور، که در شکل ۲.۲ مشخص شده، به روشنی نشان می‌دهد هنگامی که تمامی مکان‌های جذب در دسترس اشغال شوند الیاف با رنگزا اشباع می‌شود. تعداد حداکثری مکان‌ها در لیف را می‌توان از شیب نمودار خطی C_f/C_{max} برحسب C_s مطابق با معادله ۴-۲ تعیین کرد.

$$\frac{C_s}{C_f} = \frac{C_s}{C_{max}} + \frac{1}{KC_{max}} \quad [۴-۲]$$



شکل ۲.۲. ایزوترم جذب سطحی.

ایزوترم نرنست (نشان داده شده در معادله ۲-۱) را می توان به صورت حالت خاص ایزوترم لانگمیور برای شرایطی که KC_s بسیار کمتر از واحد است، در نظر گرفت. برای این حالت، قسمت آغازین منحنی ایزوترم لانگمیور خطی است، که این برای ایزوترم نرنست الزامی است.

ایزوترم فروندلیچ برای شرایطی که جذب رنگزا بر روی لیف توسط تعداد مکان های جذبی مشخص محدود نشده و همچنین لیف با رنگزا اشباع نشده، به کار می رود. سیستم برای حالتی که یون رنگزا و سطح لیف نوع یکسان بار الکتریکی را داشته باشند، یکی است. معادله تجربی توصیف کننده این ایزوترم در معادلات ۲-۵ الف، یا ۲-۵ ب، نشان داده می شود [۳۴]:

$$C_f = kC_s^\alpha \quad [۲-۵ الف]$$

یا:

$$\log(C_f) = \log(k) + \alpha \log(C_s) \quad [۲-۵ ب]$$

که در آن k ثابت است، و توان α اغلب برای جذب سطحی رنگزاهای آنیونی بر روی الیاف سلولزی دارای ارزشی در حدود ۰/۵ است [۱]. مقدار رنگزای جذب شده توسط الیاف پنبه‌ای بستگی به مساحت سطح منافذ در دسترس دارد. در ابتدا، مولکول‌های رنگزا بر روی سطوح منافذ با قابلیت دسترسی بالا جذب شده، اما به‌طور فزاینده رنگزا باید به درون مناطق با دسترسی کمتر نفوذ کند، از این‌رو فرآیند جذب سطحی بسیار مشکل است. مولکول‌های رنگزا حتی ممکن است بر روی لایه‌ای از مولکول‌های رنگزای از پیش جذب شده بر روی سطوح منافذ جذب شوند، و چندین لایه از رنگزا بر روی لیف ایجاد کنند. مشتق ایزوترم فروندلیچ مسیر ساده‌ای را مانند آنچه که برای ایزوترم لانگمیور نشان داده شده، دنبال نمی‌کند.

فرض می‌شود که هر سیستمی را که مدل شبیه‌سازی برای آن به‌کار رفته بتوان توسط یکی از ۳ ایزوترم‌های نرنست، فروندلیچ و لانگمیور یا توسط ترکیبی از آنها نشان داد [۳۵]. برای مثال، رنگرزی بسیاری از الیاف مصنوعی با رنگزاهای دیسپرس از ایزوترم نرنست پیروی می‌کند [۳۶، ۳۷]. رنگزا به لیف منتقل شده در حالی که محلول است، اما هنگام انتقال از حمام آبی تنها کمی انحلال دارد.

به‌طور کلی صحیح است که ایزوترم جذب رنگزا در غلظت‌های پایین رنگزا، خطی باشد [۳۸]. در این شرایط مولکول‌های رنگزا مثل اینکه به‌صورت محلول در درون لیف باشند رفتار می‌کنند و بین لیف و حمام رنگرزی تقسیم می‌شوند، به‌طوری‌که در هر دمایی، نسبت رنگزا در لیف به رنگزا در محلول ثابت می‌ماند. انحرافات معمولاً در غلظت‌های نسبتاً بالا رخ می‌دهد، اما رفتار خطی ایده‌آل با رنگزاهای دیسپرس و در طیف گسترده غلظت مشاهده می‌شود. از سوی دیگر، غلظت‌های بالای رنگزاهای مستقیم و خمی بر روی الیاف سلولزی معمولاً ایزوترم‌های نوع فروندلیچ را نشان می‌دهند [۳۱]؛ این ظاهراً به‌دلیل پیامد تجمع مولکولی رنگزا در درون الیاف اتفاق می‌افتد.

ایزوترم‌های جذب نوع لانگمیور تنها هنگامی که تعداد محدود مکان‌های رنگی در درون لیف قابل دسترس باشد، مشاهده می‌شوند. در این حالت غلظت رنگزا در پلیمر به حداکثر سطح محدود کنندگی می‌رسد به‌طوری‌که غلظت رنگزا در حمام افزایش می‌یابد. این رفتار نمونه‌ای از رنگرزی اسیدی لولینگ بر روی پشم و ابریشم است [۴۰، ۴۱].

۳.۳.۲. بیان دینامیکی عمومی جذب و واجذب رنگزا توسط الیاف

در طول فرآیندهای رنگرزی، غلظت‌های رنگزا در حمام و بر روی سطح لیف در یک نقطه مشخص در هر زمان ممکن است در تعادل با یکدیگر نباشد؛ بنابراین یک مدل دینامیکی مورد نیاز است تا وابستگی زمانی غلظت‌های رنگزا بر روی سطح لیف را نشان دهد. به‌منظور شبیه‌سازی فرآیندهای رنگرزی منسوجات در سیستم‌های مختلف مطلوب است تا یک بیان کلی توصیف‌کننده ارتباط بین مقدار رنگزای جذب شده بر روی سطح الیاف و مقدار رنگزای باقیمانده در حمام رنگرزی پایه‌گذاری شود.

رفتار جذب و واجذب مولکول‌های رنگزا بر روی بستر به‌طور کلی با استفاده از مدل‌های ایزوترم شرح داده می‌شود. تمایل استاندارد مرتبط با جذب و واجذب ($\Delta\mu$) نیز برای بیان رفتار رنگزاهای مختلف در یک سیستم خاص یا همان رنگزا بر روی بسترهای مختلف به‌کار می‌رود.

جذب و واجذب فرآیندی پیچیده است، که توسط برهم‌کنش بین رنگزا-لیف کنترل می‌شود و شامل انواع مختلف نیروهای بین مولکولی مانند فعل و انفعالات الکترواستاتیکی (یونی) [۴۲-۴۴]، واندروالس (لاندون) [۴۶-۴۵]، قطبی (پیوندهای هیدروژنی) [۵۰-۴۷] و آبگریزی (پیوندهای تعاونی) [۵۴-۵۱] است. نیروهای برهم‌کنش درگیر در سیستم جذب و واجذب به ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی رنگزاها و بسترها وابسته هستند. به‌طورکلی جذب سطحی رنگزا به درون الیاف را می‌توان توسط مکانیزم زیر نشان داد:

رنگزا. لیف \longleftrightarrow رنگزا + لیف

این به بیان نرخ برگشت‌پذیر رنگزا-لیف اشاره دارد که در معادله ۲-۶ الف. نشان داده می‌شود:

$$\frac{d[\text{رنگ} \cdot \text{لیف}]}{dt} = K_a [\text{رنگ}] [\text{لیف}] - K_d [\text{رنگ} \cdot \text{لیف}] \quad [۲-۶ \text{ الف}]$$

در معادله ۲-۶ الف. لیف سطح جذب نشده را نشان می‌دهد که می‌توان آن را با کسر کردن غلظت رنگزا بر روی الیاف (V) از ظرفیت جاذب کل (V^*) بیان کرد، رنگزا غلظت رنگ در محلول را نشان می‌دهد (C)، رنگزا. لیف بر غلظت رنگزا بر روی الیاف (V) دلالت دارد، K_a ثابت سرعت جذب و K_d ثابت سرعت واجذب هستند. از این‌رو، سرعت را می‌توان توسط معادله ۲-۶ ب. بیان کرد:

$$\frac{dv}{dt} = K_a C(v^* - v) - K_d v \quad [۶-۲ \text{ ب}]$$

از نظر کمیت درجه‌بندی شده f ، رابطه بالا می‌تواند فرم نشان داده شده در معادله ۷-۲ الف. را اتخاذ کند:

$$\frac{d[\text{رنگ} \cdot \text{لیف}]}{dt} = K_a [\text{رنگ}] [\text{لیف}] - K_d [\text{رنگ} \cdot \text{لیف}] \quad [۷-۲ \text{ الف}]$$

که در آن a و b ثابت هستند. معادله ۷-۲ الف. بیان دینامیکی عمومی مرتبط با غلظت رنگزا بر روی الیاف و در محلول رنگرزی است. با تنظیم $df/dt = 0$ معادله ۷-۲ الف. را می‌توان به یک بیان تعادل عمومی که در معادله ۷-۲ ب. نشان داده شده، کاهش داد:

$$f = \frac{KC^a}{1+bKC^a} \quad [۷-۲ \text{ ب}]$$

که در آن $K = K_d/K_a$ ضریب جذب است. این بیان تعادل عمومی (معادله ۷-۲ ب.) را می‌توان به شکل‌های ساده‌تری که در ادامه ذکر شده خلاصه کرد:

ایزوترم نرنست هنگامی که $a=1$ و $b=0$

ایزوترم فروندلیچ هنگامی که $0 < a < 1$ و $b=0$

و ایزوترم لانگمیر هنگامی که $a=1$ و $b=1$.

باید تاکید کرد که، اگرچه معادله ۷.۲ شکل پیچیده‌ی ایزوترم‌های جذب است که پارامترهای بسیاری را شامل می‌شود، با این حال برای مطالعه عددی پدیده‌های جذب بسیار مناسب است، زیرا یک عبارت ریاضی ساده را برای توصیف سیستم‌های مختلف جذب استفاده می‌کند. در اینجا ما این نوع بیان عمومی را به‌عنوان بخشی از مدل شبیه‌سازی توصیف شده برای فرآیند رنگرزی بوبین نخ استفاده می‌کنیم.

۴.۳.۲. تمایل ذاتی استاندارد یک رنگزا

تبادل رنگرزی معمولاً برحسب پتانسیل شیمیائی مورد بحث قرار می‌گیرد. پتانسیل شیمیائی به صورت تغییر در انرژی آزاد سیستم تعریف می‌شود و هنگامی رخ می‌دهد که ترکیب یک فاز توسط یک مقدار مولی واحد از ماده تغییرات کند، تمامی دیگر متغیرها مانند دما، فشار و مقادیر مولفه‌های دیگر ثابت باقی می‌مانند. پتانسیل شیمیائی سیستم مشخصه‌ای است که به پارامترهای ویژه‌ای مانند دما یا ولتاژ وابسته است. این‌ها به ترتیب جهت و نرخ انتقال دما، یا جهت و اندازه انتقال بار (جریان) را تعیین می‌کنند [۲].

تبدیل در دما و فشار ثابت رخ می‌دهد، به طوری که ماده از سطح با پتانسیل شیمیائی بالاتر به پایین تر منتقل می‌شود تا تعادل به دست آید. در مورد رنگرزی، اگر پتانسیل شیمیائی رنگزا در محلول بالاتر از پتانسیل شیمیائی آن در لیف باشد، رنگزا به لیف منتقل خواهد شد. چنانچه پتانسیل شیمیائی محلول افت کند، این پتانسیل در لیف افزایش می‌یابد. در تعادل، پتانسیل شیمیائی رنگزا در لیف برابر با پتانسیل شیمیائی رنگزا در محلول است [۱] و منجر به روابط نشان داده شده در معادله ۸-۲ می‌شود:

$$\begin{aligned}\mu_s &= \mu_s^0 + RT \ln(a_s) \\ \mu_f &= \mu_f^0 + RT \ln(a_f)\end{aligned}\quad [۸-۲]$$

در این معادلات، μ_s و μ_f به ترتیب پتانسیل‌های شیمیائی رنگزا در محلول و در لیف هستند و a_s و a_f نیز غلظت‌های موثر یا فعال‌های مربوطه هستند. μ_f^0 و μ_s^0 به ترتیب پتانسیل‌های شیمیائی استاندارد برای رنگزا در حالت استاندارد در محلول و در لیف هستند. حالت‌های استاندارد شرایطی هستند که در آن فعالیت رنگزا در هر فاز واحد و یک^۱ است. R ثابت جهانی گاز و T نشان دهنده دمای مطلق است. در تعادل، $\mu_f = \mu_s$ است و در نتیجه معادلات ۹-۲ الف. و ۹-۲ ب. را می‌توان استنتاج کرد:

$$\mu_f - \mu_s = 0 = \mu_f^0 - \mu_s^0 + RT \ln\left(\frac{a_f}{a_s}\right)\quad [۹-۲ الف]$$

در نتیجه:

¹ Unity

$$-\Delta\mu^0 = \mu_f^0 - \mu_s^0 = -RT \ln\left(\frac{a_f}{a_s}\right) \quad [۹.۲ \text{ ب}]$$

تمایل ذاتی استاندارد یک رنگزا برای لیف ($-\Delta\mu^0$) به صورت اختلاف پتانسیل‌های شیمیایی استاندارد رنگزا در دو فاز تعریف می‌شود و به صورت معادله ۲-۱۰ الف. نشان داده می‌شود [۳]:

$$-\Delta\mu^0 = -(\mu_f^0 - \mu_s^0) = RT \ln\left(\frac{a_f}{a_s}\right) = RT \ln(K) \quad [۱۰.۲ \text{ الف}]$$

که در آن K ثابت تعادل برای رنگرزی است.

تمایل ذاتی استاندارد ارزیابی تمایل رنگزا به حرکت از حالت استاندارد خود در محلول به حالت استانداردش در لیف است (هر دو در فعل و انفعالی واحد). در رنگرزی به منظور برخورداری از ثابت تعادل بالا، پتانسیل شیمیایی استاندارد در محلول باید بزرگ‌تر از پتانسیل شیمیایی استاندارد در لیف باشد، و بنابراین هنگامی که $K > 1$ است مقدار تمایل ذاتی استاندارد ($-\Delta\mu^0$) مثبت می‌شود [۱].

مسئله تعیین تمایلات ذاتی در رنگرزی یافتن عباراتی مناسب برای فعل و انفعالات یا غلظت‌های موثر رنگزا در لیف (a_f) و در محلول (a_s) است. این امر مشکل است و معمولاً غلظت‌های مولار باید جایگزین شوند. برای مثال، در رنگرزی الیاف مصنوعی با رنگزای دیسپرس غیریونی خالص در تعادل، معادله ۲-۱۰ ب. ممکن است به کار رود:

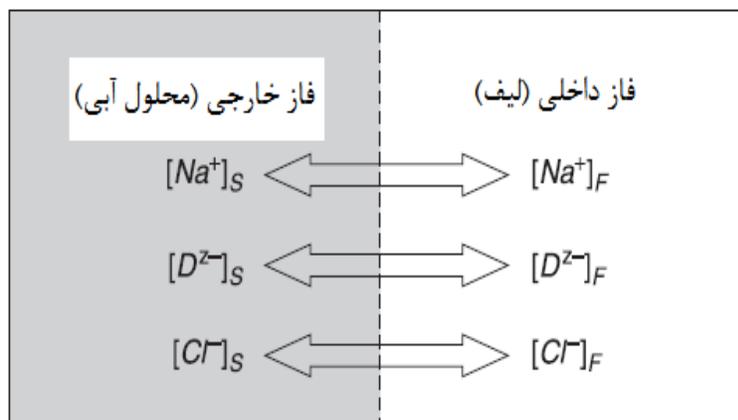
$$-\Delta\mu^0 = RT \ln\left(\frac{C_f}{C_s}\right) \quad [۱۰.۲ \text{ ب}]$$

ثابت تعادل برای رنگرزی با رنگی دارای تمایل ذاتی مشخص تنها بستگی به دما داشته و توسط $K = C_f/C_s$ تعیین می‌شود. این دقیقاً شرایط توصیف شده توسط ایزوترم نرنست است که در آن تمایل ذاتی را می‌توان به طور مستقیم با فرض اینکه عبارت C_f/C_s تقریب درستی از خارج قسمت عبارت a_f/a_s باشد، محاسبه کرد [۵۷].

معادله برای تمایل ذاتی استاندارد نشان می‌دهد که اگر عبارت $(-\Delta\mu^\circ)$ مثبت باشد، ثابت تعادل رنگریزی با افزایش دما کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، اگرچه رسیدن به تعادل در دماهای پایین طولانی‌تر است، اما رنگزای بسیاری در دماهای پایین جذب می‌شوند. می‌توان فرض کرد که، در طول محدوده دمایی کوچک، تمایل ذاتی استاندارد مستقل از دما عمل می‌کند، اگرچه تغییرات دمایی باید در مطالعات دقیق‌تری مورد بررسی قرار گیرند [۱].

فعل و انفعالات رنگزا در لیف را نمی‌توان به‌طور مستقیم تعیین کرد، و هیچ گزینه‌ای مگر جایگزینی فعل و انفعالات با غلظت‌های رنگزای مشتق شده از ایزوترم‌ها وجود ندارد. برای انواع مختلف رنگزاها، حالت‌های استاندارد مختلفی معمولاً وجود دارد، به‌طوری‌که تمایلات ذاتی یک رنگزا برای انواع مختلف الیاف را اغلب نمی‌توان به‌طور مستقیم مقایسه کرد. اگرچه این رویکرد ترمودینامیکی از دیدگاه دانشگاهی رضایت‌بخش است، اما بنابر برخی فرضیات نامعلوم پایه‌ریزی شده است [۳۱].

به‌عنوان مثال، از مدل جذب دو فازی برای توصیف فرضیات فرآیند استفاده می‌شود که در آن سیستم جذب رنگزاهای آنیونیکی بر روی سلولز دو فاز دارد، الیاف سلولزی درونی فاز (F) و محلول آبی بیرونی فاز (S)، و هر یون جذب شده بر روی سطح لیف برای حل در فاز درونی بررسی می‌شود [۳]. شکل ۳.۲ توزیع یون‌ها در تعادل و در سیستم جذب دو فازی حاوی یک رنگزای آنیونیکی (Na_2D) و سدیم کلراید ($NaCl$) را نشان می‌دهد [۵۸-۵۹]. پتانسیل شیمیائی (μ) رنگزای آنیونیکی (Na_2D) را می‌توان برحسب فعالیتش (a)، همان‌طور که در معادله ۲-۸ نشان داده شده، بیان کرد.



شکل ۳.۲. توزیع یون‌ها در سیستم جذب تعادلی دو فازی.

به دلیل تفاوت موجود بین پتانسیل‌های شیمیایی رنگزا بر روی لیف (μ_f) و در محلول آبی (μ_s)، آنیون‌های رنگزا تمایل به حرکت از محلول آبی بر روی لیف را داشته تا پتانسیل شیمیایی Na_2D در هر دو طرف مرز لیف یکسان شود (خط عمود در شکل ۳.۲)؛ که در آن تعادل در جذب^۱ همان طور که در معادله ۹-۲ بیان شد به دست می‌آید.

تغییر در پتانسیل شیمیایی رنگزا در حالت استاندارد از محلول آبی به لیف به عنوان تمایل ذاتی استاندارد جذب رنگزا ($-\Delta\mu^\circ$)، همان طور که در معادله ۹-۲ ب. نشان داده شد، شناخته می‌شود.

اگرچه ممکن است برای محاسبه فعل و انفعالات رنگزا در محلول آبی از معادله دبای- هوکل^۲ استفاده شود، اما صحت آن فرض به کارگیری یون‌های کروی کوچک در محلول‌هایی با قدرت یونی در مجموع پایین است [۶۰]. توسعه سیستم به منظور محاسبه شعاع یون‌های رنگزا ممکن است به دلیل ساختار مولکول‌های رنگزا بسیار دقیق و کارآمد نباشد. علاوه بر این، حمام‌های رنگرزی بسیاری علی‌رغم دارا بودن قدرت یونی پایین هنوز مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. با این وجود، موضوع چالش برانگیز این

¹ Sorption equilibrium

² Debye-Hückel equation

است که هیچ روش مستقیمی به منظور میسر کردن محاسبه فعل و انفعالات رنگزا در لیف گزارش نشده است.

در معادله ۲-۹ ب، $\Delta\mu^\circ$ - شاخص تمایل رنگزا به حرکت از محلول آبی به لیف، هنگامی است که در حالت استاندارد خود در هر فاز است. بنابراین این شاخص را می‌توان به عنوان نیروی محرکه در سینتیک‌های فرآیند جذب به حساب آورد. از آنجائی که فعل و انفعالات رنگزا در معادله ۲-۹ ب، مستلزم حرکت آزادانه یون‌های سدیم و به علاوه آنیون‌های رنگزا است، لذا غلظت سدیم کلراید ($NaCl$) می‌تواند تعادل جذب را تحت تاثیر قرار دهد. با دانستن غلظت‌های یون سدیم در لیف $[Na^+]_F$ و در محلول آبی $[Na^+]_S$ می‌توان $\Delta\mu^\circ$ را به‌طور تجربی تعیین کرد.

از آنجائی که $NaCl$ و Na_2D الکترولیت‌هایی قوی هستند و در محلول‌های آبی به‌طور کامل از هم تفکیک هستند، لذا فعل و انفعالات رنگزا در حالت کلی را می‌توان به کمک معادله ۲-۱۱ تقریب کرد:

$$\alpha_S = [D^{z-}]_S [Na^+]_S^z \quad [11-2]$$

$[D^z]_S$ و $[Na^+]_S$ به ترتیب غلظت‌های رنگزا و یون‌های سدیم در محلول هستند و z بار یونی رنگزا است.

اگر حجم محلول آبی به‌طور چشمگیری بیشتر از حجم درونی قابل دسترس لیف باشد، در آن صورت $[Na^+]_S$ را می‌توان به‌منظور معادل کردن با مجموع تمامی یون‌های مخالف در محلول آبی، شامل رنگزا و یون‌های کلرید، که در معادله ۲-۱۲ نشان داده شد، بررسی کرد:

$$[Na^+]_S = z[D^z]_S + [Cl^-]_S \quad [12-2]$$

تعیین α_F بر خلاف α_S پیچیده است. معمولاً، در تعادل غلظت رنگزا بر روی لیف $[D^z]_F$ ، به راحتی برحسب مول بر کیلوگرم لیف خشک بیان می‌شود و براساس یا عمق رنگزا در محلول آبی یا در خروج از لیف تقریب زده می‌شود. در معادله ۲-۹ ب، تمامی عبارات غلظت برحسب مول بر لیتر بیان می‌شوند، و

بدین منظور فاکتور V برحسب لیتر بر کیلوگرم با هدف تبدیل $[D^{z-}]_F$ و $[Na^+]_F$ به پایه حجمی بیان می‌شود. بنابراین فعل و انفعالات رنگزا در لیف با استفاده از معادله ۲-۱۳ تقریب زده می‌شود:

$$\alpha_F = \frac{[D^{z-}]_F [Na^+]_F^z}{V^{z+1}} \quad [۱۳-۲]$$

که در آن فاکتور V حجم درونی قابل دسترس لیف است و نشان دهنده مجموع منافذ داخلی یا فضاهای خالی در درون لیف است. فاکتور V معمولاً با هدف مقایسه و تفاوت ساختارهای مختلف لیف به کار می‌رود [۲۴-۱۸].

حل معادله ۲-۱۳ نیاز به تعیین فاکتور V و $[Na^+]_F$ دارد، که نمی‌توان آنها را به‌طور مستقیم اندازه گیری کرد. به‌طور کلی $[Na^+]_F$ به کمک شرط خنثی‌سازی الکتریکی در لیف (معادله ۲-۱۴) و با به‌کارگیری تعادل دونان^۱ بین لیف و محلول آبی (معادله ۲-۱۵) که به‌صورت معادله ۲-۱۶ نیز بیان شد تعیین می‌شود.

$$[Na^+]_F = z[D^{z-}]_F + [Cl^-]_F \quad [۱۴-۲]$$

$$\frac{[Na^+]_F [Cl^-]_F}{V^2} = [Na^+]_S [Cl^-]_S \quad [۱۵-۲]$$

$$[Na^+]_F = 0.5 \left\{ z[D^{z-}]_F + (z^2[D^{z-}]_F^2 + 4V^2[Na^+]_S [Cl^-]_S)^{0.5} \right\} \quad [۱۶-۲]$$

به‌منظور تعیین V ، معادله ۲-۹ ب. معمولاً در فرم لگاریتمی بسط می‌یابد (معادله ۲-۱۷). با تنظیم V ، یک ارتباط خطی بین $\ln(\alpha_F)$ و $\ln(\alpha_F)$ می‌توان به‌دست آورد. با این حال، ملاحظاتی باید صورت پذیرد تا اطمینان حاصل شود که نه تنها بهترین خط مستقیم عبوری از شیب واحدی برخوردار است، بلکه همچنین $\Delta\mu$ به‌دست آمده از معادله ۲-۱۸ نیز باید برای تمامی نقاط داده‌ها ثابت و بدون تغییر باقی بماند. بهترین خطها معمولاً به کمک روش آزمون و خطا و از طریق تعیین مقدار اختیاری برای

¹ Donnan equilibrium

فاکتور V به دست می‌آیند، و اغلب مستلزم محاسبات ریاضی پیچیده هستند؛ علاوه بر این، طرح $\log\text{-log}$ داده‌های جذب نسبت به تغییرات V چندان حساس نیستند.

$$\ln \alpha_F = \ln \alpha_S + \frac{-\Delta\mu^\circ}{RT} \quad [17.2]$$

$$-\Delta\mu^\circ = RT \ln \left(\frac{[D^{z-}]_F [Na^+]_F^z}{V^{z+1} [D^{z-}]_S [Na^+]_S^z} \right) \quad [18.2]$$

به منظور ساده‌سازی در تعیین V و $-\Delta\mu^\circ$ ، مدلی را می‌توان با بازسازی مجدد معادله ۲-۱۸ به معادله ۲-۱۹ و با جانشینی معادله ۲-۱۶ در معادله ۲-۱۹ توسعه داد و نهایتاً به معادله ۲-۲۰ دست یافت.

$$[D^{z-}]_S = \frac{[Na^+]_F^z}{[Na^+]_S^z V^{z+1} e^{\left(\frac{-\Delta\mu^\circ}{RT}\right)}} [D^{z-}]_F \quad [19.2]$$

$$[D^{z-}]_S = \frac{[D^{z-}]_F \left\{ z[D^{z-}]_F + (z^2[D^{z-}]_F^2 + 4V^2[Na^+]_S[Cl^-]_S)^{0.5} \right\}^z}{2^z [Na^+]_S^z V^{z+1} e^{\left(\frac{-\Delta\mu^\circ}{RT}\right)}} \quad [20.2]$$

معادله ۲-۲۰ را می‌توان به منظور توصیف جذب تعادلی رنگزاهای آنیونیکی بر روی سلولز در حضور غلظت نامحدود الکترولیت به کار برد و با کمک غلظت نسبتاً بالای کلرید سدیم در حمام رنگری آن را تقریب زد که این کار در عمل امکان‌پذیر است. در معادله ۲-۲۰، $[D^{z-}]_S$ تنها تابع $[D^{z-}]_F$ است، زیرا z و $[Cl^-]_S$ شناخته شده هستند، $[Na^+]_S$ را می‌توان از معادله ۲-۱۲ محاسبه کرد، و V و $-\Delta\mu^\circ$ نیز ثابت هستند. در این مدل غیرخطی، V و $-\Delta\mu^\circ$ دو پارامتر مدل هستند که می‌توانند با انطباق مدل به داده‌های جذب تخمین زده شوند.

یکی از جنبه‌های مهم جذب تعادلی رنگزها بر روی الیاف بررسی ترمودینامیک‌های رنگری است. مقادیر $-\Delta\mu^\circ$ معمولاً برای محاسبه تغییر آنتالپی استاندارد ($-\Delta H^\circ$) و تغییر آنتروپی استاندارد (ΔS°)

از روابط ترمودینامیکی خطی ارائه شده در معادله ۲-۲۱ به کار می‌روند. الگوی خطی $-Δμ^{\circ}/T$ در برابر $1/T$ را نیز می‌توان با هدف اعتباربخشی به عملکرد چنین مدل‌های غیرخطی به کار برد.

$$\frac{-\Delta\mu^{\circ}}{T} = \frac{-\Delta H^{\circ}}{T} + \Delta S^{\circ} \quad [21.2]$$

۴.۲. نفوذ رنگزا به درون بخش داخلی لیف

۱.۴.۲. پدیده‌های نفوذ

علی‌رغم تاثیری که هم‌زدن محلول بر نرخ رنگرزی داشته است، پژوهشگران گذشته بخش قابل توجه اطلاعات را درباره سینتیک‌های رنگرزی گردآوری کردند و تاثیر هم‌زدن را نادیده گرفتند. پژوهشگران ترغیب شدند تا اطلاعات مفید و مختصری را درباره ویژگی‌های مربوط به رنگرزی طیف رنگزاها به دست آورند، تا در عمل رنگرز بتواند مقادیر کمی رنگزاهایی که در تعادل جذب شده و نرخ‌های نسبی‌ای که در آن رنگزاها جذب شده است، تعیین کند. به‌ویژه، بررسی شد که اگر رنگرز تمایل به رنگرزی دو یا چند رنگزا در مخلوط را داشت، بتواند مخلوط‌های سازگاری را با انتخاب رنگزاهایی با نرخ یکسان مشخصات رنگرزی به دست آورد. در پژوهش‌های گذشته، استدلال کافی بر این فرض استوار بود که چون ضرایب نفوذ رنگزاها در الیاف چندین هزار بار کمتر از آن در حمام رنگرزی بوده است، لذا نرخ‌های رنگرزی را می‌توان بررسی کرد تا توسط نفوذ در الیاف کنترل شوند [۵۷].

نفوذ، فرآیندی است که توسط آن ماده از یک بخش سیستم به بخش دیگر، در نتیجه حرکات تصادفی مولکول‌ها، انتقال می‌یابد. فرآیند مکانیکی نفوذ شامل حرکت مولکول‌های پر جنب و جوش در سراسر حفره‌ها و فضاهای خالی بین مولکول‌ها در محیط است. حرکت مولکول‌ها در راستای گرادیان غلظت، یعنی از مناطقی با غلظت بیشتر به غلظت کمتر، اتفاق می‌افتد. این نهایتاً منجر به برابری در پتانسیل شیمیایی و غلظت در سرتاسر سیستم می‌شود [۲]. هر چه مولکول‌های نفوذ کننده پیچیده‌تر و بزرگ‌تر باشند، فرآیند طولانی‌تری باید انتخاب شود تا غلظت برابری در هر دو محیط به دست آید.

از آنجاکه بیش از یک فاز وجود دارد، پتانسیل شیمیایی نفوذ از طریق سیستم، تنها هنگامی که تعادل دینامیکی واقعی به دست آمده است، ثابت باقی می‌ماند، اگرچه غلظت‌ها در هر فاز ممکن است به‌طور قابل ملاحظه‌ای با یکدیگر فرق کنند. در فرآیندهای رنگرزی یک فاز در ابتدا شامل لیف یا

فیلامنت است و فاز دیگر معمولاً مایع رنگزا است که در آن لیف رنگری نشده غوطه‌ور می‌شود. اگرچه ظاهراً یک فرآیند انتقال رنگزای ساده از محلول به بخش داخلی لیف روی داده، اما مکانیزم رنگری در تمامیت خود بسیار پیچیده است.

لازم است برای مطالعه نفوذ برحسب مدل‌های ساده، قبل از هرگونه پیشرفتی به بررسی‌های تجربی یا واقعی سیستم‌های رنگری موجود پرداخت. به دلیل پیچیدگی‌های فرآیند نفوذ، سیستم‌های رنگری واقعی براساس شرایط ایده‌آل و ساده‌ای مورد مطالعه قرار می‌گیرند، اما این مدل‌های ساده یا محدودیت‌های فراوانی دارد و یا شرایط تحمیل شده آنها را موظف به انجام عملیات ریاضی می‌سازد.

به‌طور کلی دو مدل برای توصیف نفوذ رنگزاها به درون الیاف به کار می‌رود. اولی مدل منفذی است، که در آن حرکت رنگزاهای حل شده در نتیجه نفوذ به درون منافذ الیاف که با آب پر شده، توصیف می‌شود. در این مدل، ضرایب نفوذ به شدت به تعداد و اندازه منافذ در لیف در شرایط رنگری ثابت بستگی دارند. فرض جهت کاربرد این مدل آن است که منافذ الیاف در مقایسه با ابعاد مولکولی مولکول‌های رنگزا بزرگ‌تر هستند، و در نتیجه شبکه منافذ به رنگزاها دسترسی دارند [۲].

مدل دوم مدل حجم آزاد نامیده می‌شود، که در آن نفوذ رنگزا در حجم‌های خالی مناطق غیر کریستالی الیاف اتفاق می‌افتد. این حجم خالی توسط حرکت بخش‌هایی از زنجیره‌های پلیمری شکل می‌گیرد، فرآیند در دمای انتقال شیشه‌ای لیف شروع می‌شود. جابه‌جایی در حجم آزاد در مناطق غیر کریستالی نفوذ مولکول‌هایی را که به اندازه کافی کوچک هستند رواج می‌دهد [۱].

مدل منفذی عمدتاً برای نفوذ رنگزاها به درون الیاف آبدوست از محلول آبی که در آن الیاف به‌طور محسوسی متورم شده است اتخاذ می‌شود. لذا این مدل حاکی از آن است که آب پر شده در کانال‌های الیاف، یک مسیر انتقالی را برای مولکول‌های رنگزا جهت رسیدن به مکان‌های جذبی خود فراهم می‌آورد [۶۱].

با این حال پیترز^۱ و اینگاملز^۲ [۶۲] نتیجه گرفتند که مدل منفذی در تمامیت خود نمی‌تواند مورد پذیرش قرار گیرد. مکانیزم حجم آزاد عمدتاً هنگامی که الیاف آبریز رنگرزی می‌شوند حاکم است.

هاری^۳ و زولینگر^۴ [۶۳] گفتگوها بر روی دو مدل ذکر شده را در رابطه با رنگرزی الیاف پشمی و سلولزی خلاصه کردند. رنگرزی الیاف سلولزی بر حسب مدل ماتریس متخلخل درک بهتری را به همراه دارد، درحالی که رفتار پشم و ابریشم تقریباً به مدل حجم آزاد نزدیک است. با این حال، رونر^۵ [۶۴] خاطر نشان کرد که شواهد کافی برای تایید مدل حجم آزاد یا مدل منفذی وجود ندارد، و به‌طور کلی این مدل‌ها نشان دهنده یک نسخه بیش از حد ساده‌ی شرایط واقعی هستند.

نفوذ غالباً با رنگزاهای نسبتاً ساده مانند رنگزاهای آزوی سولفونه شده آنیونیکی از طبقه رنگزاهای مستقیم و اسیدی لولینگ مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. همچنین حجم قابل توجه فعالیت‌ها با رنگزاهای ری‌اکتیو انجام شده است، علی‌رغم این واقعیت که رنگزاهای ری‌اکتیو در نهایت توسط واکنش‌های شیمیایی با لیف بی‌حرکت می‌شوند. انواع دیگر واکنش‌ها، به‌ویژه آنهایی که شامل افزایش زیاد در جرم مولکولی رنگزاهای هستند، مطالعه رفتار نفوذ را بسیار بغرنج می‌سازند. در نتیجه پیامد آن موجب شده تا، کار کمتری با رنگزاهای کرومی، خمی، گوگردی و آزوئیکی صورت پذیرفته است [۳۸].

۲.۴.۲. قوانین فیک در فرآیند نفوذ

در رفتارهای نظری نفوذ، معمول است که مهاجرت رنگزا برحسب ضریب نفوذ $D(m^2/s)$ مشخص شود. ضرایب نفوذ معمولاً با به‌کارگیری قوانین فیک تعیین می‌شوند. اندازه‌گیری مستقیم ضرایب نفوذ را می‌توان با تعیین نرخ حذف رنگزا از محلول یا با مشاهده مستقیم مهاجرت رنگزا در درون بسترهای مختلف انجام داد. ضرایب نفوذی که توسط روش‌های مستقیم (مانند تغییرات در غلظت حمام رنگرزی با زمان) اندازه‌گیری شده‌اند برخی اوقات به‌عنوان ضرایب نفوذ "ظاهری"^۶ مشخص می‌شوند. چنین

¹ Peters

² Ingamells

³ Hori

⁴ Zollinger

⁵ Rohner

⁶ 'Apparent' diffusion coefficients

ضرایب نفوذی ممکن است لزوماً نشان دهنده نرخ‌هایی که در آن فرآیندهای نفوذ اولیه در سطح مولکولی در درون الیاف اتفاق افتاده است، نباشند.

نظریه و کاربرد قوانین فیک به‌طور گسترده در نوشتارهای علمی و در تعداد قابل توجه متون استاندارد مورد بحث قرار گرفته است [۶۵، ۳۱، ۳-۱]. قانون اول فیک ادعا می‌کند که، در شرایط حالت پایدار، کمیت dS یک ماده که به سرتاسر مساحت واحد صفحه واقع شده در x در فاصله زمانی dt نفوذ کرده متناسب با گرادیان غلظت (dc/dx) و ضریب نفوذ D است که در معادله ۲-۲۲ نشان داده می‌شود:

$$\frac{dS}{dt} = -D \frac{dC}{dx} \quad [22-2]$$

قانون دوم فیک نرخ تغییر غلظت رنگزا در نقطه x با زمان را بیان می‌کند که در معادله ۲-۲۳ نشان داده می‌شود:

$$\frac{dC}{dt} = D \frac{d^2C}{dx^2} \quad [23-2]$$

معادلات فیک را می‌توان با روش‌های مختلفی تلفیق کرد تا ارزیابی ضرایب نفوذ داده‌های تجربی میسر باشد. حل کامل معادلات فیک مشکلات محاسباتی قابل توجهی را نشان می‌دهد که به‌دلیل شمار متغیرهای درگیر است. معمول است که محاسبات با ایجاد یک تعداد از فرضیات ساده شوند.

اگرچه الیاف می‌توانند طیفی از شکل‌ها و مقاطع عرضی را دارا باشند، اما معمولاً آنها با مقطع عرضی دایروی و طول بی‌نهایت جهت ساده‌سازی در محاسبات فرض می‌شوند. فرضیات معمول دیگر به‌صورت زیر هستند:

- ضریب نفوذ تنها با دما تغییر می‌کند.
- یک تعادل آنی بین رنگزا در محلول و در لیف وجود دارد.
- جذب رنگزا تنها توسط نفوذ کنترل می‌شود.
- ایزوترم جذب رنگزا خطی است [۶۶].

علی‌رغم انحرافات آشکار از رفتار ایده‌آل در الیاف طبیعی، معمول است که در رفتارهای نظریه‌ی فرآیند نفوذ از فرضیات ساده مشترکی که در الیاف مصنوعی به‌کار رفته استفاده شود. اگرچه نتایج، ارزیابی‌های کیفی را از ضرایب نفوذ فراهم می‌آورد، اما برخی احتیاطات همچنان باید در تفسیر دقیق معنای آنها به‌کار گرفته شود. اترز^۱ [۶۶] خاطر نشان کرد که عدم ارزیابی پیش‌نیازها برای به‌کارگیری ریاضی معادلات نفوذ مشتق شده از قوانین فیک احتمالاً منجر به انتشار ضرایب نفوذی می‌شود که از دقت کمی برخوردارند. با این حال، این شدنی است که مقادیر برای بیان ویژگی‌های نسبی نفوذ رنگرها مورد نیاز هستند.

۳.۴.۲. عوامل موثر بر نفوذ

مشاهده شده است که، با بسیاری انواع الیاف، رنگرزی‌هایی با قابلیت یکنواختی بالا معمولاً با رنگزایی که بسیار سریع به درون الیاف نفوذ کرده است به‌دست می‌آیند [۶۷، ۳۱]. به‌عبارتی دیگر، رنگزایی با قابلیت نفوذ سریع معمولاً ویژگی ثبات شستشویی^۲ دارند که نسبت به آنهایی که آهسته‌تر نفوذ کرده‌اند، کمتر است. بنابراین باید توافقی بین ثبات شستشویی و یکنواختی برای بسیاری اهداف عملی برقرار شود.

نرخ نفوذ ویژگی مشخص رنگزا است، که مستقل از ساختار لیف، نرخ جریان محلول و حجم حمام رنگرزی و تا حد زیادی مستقل از رنگزا و غلظت الکترولیت است. بنابراین نفوذ رنگزا به لیف نقش مهمی را در اتمام موفقیت آمیز عملیات رنگرزی ایفا می‌کند، به‌طوری‌که در آن نفوذ کامل فیلامنت‌ها به‌دست آمده و نیز در آن مهاجرت رنگزا، شامل نفوذ رنگزا به درون و بیرون فیلامنت، مانند یک عامل کلیدی است، همچنین نرخ نفوذ رنگزاهای خاص و مشخص نیز ممکن است به‌عنوان یک راهنما برای رفتار رنگرزی آنها استفاده شود [۵]. به‌طور کلی رنگزایی که سریعاً نفوذ می‌کنند، ویژگی‌های نفوذی و یکنواختی مطلوبی را از خود نشان می‌دهند و به آسانی به‌کار خواهند رفت، درحالی‌که رنگزایی با نفوذ آهسته، ویژگی‌های معکوسی را نشان می‌دهند.

اطلاعات اساسی از اندازه‌گیری نفوذ درک مفیدی را در مورد مکانیزم‌های رنگرزی و ویژگی‌های مواد رنگرزی شده فراهم آورده است. با این حال، به‌علت ساختارهای پیچیده الیاف، به‌ویژه در الیاف طبیعی،

¹ Etters

² Wet- fastness

رفتارهای نظری مفصل برای توصیف جذب رنگزاها به سختی توسعه می‌یابند. نفوذ رنگزا از منظر پدیده‌شناسی مشاهده و شرح داده شده است، اما هنوز به‌طور کامل در سطح مولکولی شناخته شده نیست. بهترین تطابق بین نظریه و آزمایش با لیف ویسکوز ریون، به‌عنوان یک پلیمر طبیعی که بیشترین شباهت را به پلیمرهای مصنوعی داشته، به‌دست آمده است [۳۸]. روش‌های جدیدی برای تعیین مستقیم طریقه‌های نفوذ، به‌ویژه در الیاف کراتین، در حال توسعه و تکامل هستند که دارای پتانسیلی برای فراهم کردن هرچه روشن‌تر اطلاعات در مورد چگونگی ورود رنگزاها به الیاف طبیعی است و اینکه نهایتاً در چه وضعی در درون الیاف قرار می‌گیرند.

پژوهش حاضر فرض می‌کند که یک تعادل آنی بین رنگزاها در محلول و در لیف وجود دارد. بنابراین برای رنگرزی یکنواخت، یکنواختی توزیع رنگزا در سرتاسر مجموعه لیف و در طول رنگرزی، نگرانی عمده محسوب می‌شود.

۵.۲. نرخ رنگرزی

اگرچه نرخ نفوذ رنگزا به درون لیف از اهمیت بالایی برخوردار است، اما نرخ کلی رنگرزی در شرایطی مشابه با آنچه که در عمل به‌کار رفته اغلب با فرض اینکه دارای اهمیتی برابر و یا حتی بیشتر برای رنگرز بوده مورد بررسی قرار می‌گیرد [۳]. نرخ رنگرزی را می‌توان به‌عنوان نرخ اندازه‌گیری شده‌ای که رنگزا حمام را ترک کرده، بیان کرد که این خود عاملی مهم در تعیین میزان نایکنواختی در توزیع رنگزا در سرتاسر جرم لیف است و همیشه در مراحل ابتدای رنگرزی خود را نشان می‌دهد. به‌منظور دستیابی به ایده نرخ رنگرزی که در عمل پیش‌بینی شده، همواره تلاش‌های بسیاری برای دنبال کردن جذب رنگزا در شرایطی مشابه با آنچه که در عمل به‌کار رفته، صورت پذیرفته است.

اصول کلی برخی اندازه‌گیری‌ها به‌خوبی وضع می‌شود. فرآیند رنگرزی در شرایط مناسب اجرا می‌شود و مقدار رنگزا بر روی لیف یا مقدار باقیمانده در محلول به‌طور مداوم و در فواصل زمانی مشخص توسط روش‌های کالریمتری تخمین زده می‌شود. نتایج معمولاً برحسب درصد رمق‌کشی حمام ($\%E$) بیان می‌شوند، که این درصد نسبت رنگزای جذب شده بر روی لیف در یک زمان معین (C_t) به مقدار رنگی که در ابتدا در حمام حضور داشته (C_0) است. در عمل دما رنگرزی اغلب با زمان تغییر می‌کند، اما برای نرخ اندازه‌گیری شده این دما معمولاً ثابت نگه داشته می‌شود تا ایزوترم زمان/ جذب به‌دست آید.

مشاهدات نشان می‌دهد که، اگر نرخ‌های رنگرزی اندازه‌گیری شده در شرایط عملی با نرخ‌های نفوذ همان رنگزها در درون لیف مقایسه شوند، در آن صورت ارتباط بسیار اندکی نمایان می‌شود. ارتباط بین تمایل ذاتی، نرخ نفوذ و نرخ رنگرزی توسط ویگراستاف^۱ بررسی شد [۳]. او نتیجه گرفت که، در محاسبه نرخ رنگرزی، اگر تمایل ذاتی بین رنگزا و لیف بالا باشد، در آن صورت نرخ رنگرزی باید به تمایل ذاتی و بازده گردش محلول، یا بر ضریب نفوذ محلول در حمام راکد وابسته باشد. با این حال، چنانچه تمایل ذاتی پایین باشد، نرخ رنگرزی باید با نرخ نفوذ رنگزا به درون لیف وابسته باشد.

نرخ رنگرزی به‌طور چشمگیری توسط دمای حمام رنگرزی تحت تاثیر قرار می‌گیرد، افزایش در تمامی موارد با افزایش در دما [۵، ۳]. تاثیر دما بر نرخ رنگرزی ممکن است در یک روش کمی با تعیین انرژی فعال‌سازی^۲ فرآیند بیان شود. برای این هدف بهتر است تا نرخ نفوذ در لیف نسبت به نرخ رنگرزی کل در نظر گرفته شود، زیرا نفوذ رنگزا به سرتاسر لیف ضریب دمائی بالاتری نسبت به نفوذ از طریق فاز محلول دارد. تعداد مولکول‌هایی که قادر به نفوذ به درون مجموعه لیف در هر لحظه هستند با غلظت ماده حل شده و عبارت نمایی $e^{-E/RT}$ متناسب هستند، و E مقداری است که توسط آن انرژی یک مولکول فعال شده از میانگین انرژی مولکول حل شده فراتر می‌رود.

صرف نظر از عامل دما، نرخ رنگرزی توسط تعداد پارامترهای دیگری نیز تحت تاثیر قرار می‌گیرد، از جمله عوامل مکانیکی مانند ساختار مواد: اعم از اینکه لیف، نخ یا پارچه آزاد است یا نه؛ حجم حمام رنگرزی یا نسبت حمام به کالا؛ نرخ هم‌زدن یا گردش حمام؛ تمایل رنگزا به لیف، به دنبال آن با غلظت رنگزا؛ pH؛ و مقدار الکترولیت حمام رنگرزی. به‌طور طبیعی، در هر بررسی از ویژگی‌های نسبی مجموعه رنگزها، اندازه‌گیری باید به دقت در شرایط استاندارد صورت پذیرد، اما نمی‌توان فرض کرد که تغییر در هر یک از این عوامل به یک میزان بر هر رنگزا در مجموعه تاثیر خواهد گذاشت. این به‌ویژه در مواردی با تغییرات در pH و عوامل غلظت مشاهده می‌شود [۶۸].

به‌خوبی پذیرفته شده که نرخ رنگرزی در عمل به‌طور قابل توجهی وابسته به بازدهی است که در آن حمام رنگرزی از طریق بوبین در حال رنگرزی به گردش در آمده است [۲]. تاثیر هم‌زدن در افزایش

¹ Vickerstaff

² Activation energy

نرخ جذب رنگزا، با این حال، نیازمند ارزیابی‌های وسیعی بر روی پیچیدگی هیدرودینامیکی سیستم، که در بخش اول این فصل بحث شد، است.

نرخ رنگریزی، به صورت متمایز از ضریب نفوذ، با مساحت سطح الیافی که در حمام رنگریزی حضور داشته، متناسب است. مساحت سطح فیلامنت متناسب با ریشه دوم دنیر لیف ($d^{1/2}$) است. نرخ‌های رنگریزی نیز با ساختار فیزیکی الیاف مانند جهت‌گیری و تبلور وابسته هستند، و بدین دلیل برخی روابط تنها به الیافی که تقریباً در این جهات همانند هستند به کار می‌رود.

در عمل، رنگریزی در ماشین‌آلات مختلفی انجام می‌شود که در آنها نسبت حجم مایع رنگزا به جرم الیاف، یعنی نسبت حمام به کالا، ممکن است به طور وسیع از حدود ۱:۱ تا ۱:۴۰ تغییر کند. به طور کلی، هنگامی که نسبت محلول کاهش یابد، نرخ رنگریزی افزایش می‌یابد [۵].

بار الکتریکی بر روی لیف نیز می‌تواند بر نرخ‌های که رنگزاها در سطح لیف جذب می‌شوند تاثیر گذارد. برای مثال، الیاف پشم و ابریشم بار مثبت را در pH پایین فرض می‌کنند، و این شدیداً جذب رنگزایی با بار منفی در سطح لیف را تسهیل می‌کند. از طرف دیگر، پنبه به سرعت در آب بار منفی می‌گیرد، بنابراین، هنگامی که با رنگزاهای آنیونیکی رنگریزی می‌شود، مانع بیشتر برای جذب رنگزا است [۱]. اثرات دافعه ایجاد شده با افزودن الکترولیت خنثی به حمام رنگریزی کاهش می‌یابد.

پژوهشگران مختلفی تاثیر شرایط رنگریزی، مانند نرخ جریان، غلظت رنگزا در حمام رنگریزی و دما، را بر نرخ رنگریزی بررسی کردند و به بیان فرآیند به صورت کمی و عددی کوشیدند [۷۱-۶۹، ۵۶]. فرضیات اساسی مورد استفاده در برخی آثار شامل موارد زیر است:

- مایع - رنگزا به خوبی هم‌زده می‌شود به طوری که غلظت رنگزا در سرتاسر مایع یکنواخت به دست می‌آید.
- چگالی و سرعت جریان در درون مجموعه‌های لیفی یکنواخت و مستقل از زمان فرض می‌شوند.
- انتقال رنگزا از یک سمت به سمت دیگر محیط، هماهنگ با جریان پراکنده است.

برخی مدل‌های پیشنهاد شده با شیمی فیزیک جابه‌جائی رنگزا، نفوذ و جذب در رنگرزی سروکار دارند. این مدل‌ها ارتباط بین پارامترهای رنگرزی و کیفیت به‌دست آمده از مواد رنگرزی شده را تعریف کرده و به‌طور مفصل در فصل ۳ بحث می‌کنند.

۶.۲. منابع

1. Broadbent A. (2002), *Basic Principles of Textile Coloration*, SDC, Bradford.
2. Johnson A. (1989), *Theory of Coloration of Textiles*, SDC, Bradford.
3. Vickerstaff T. (1954) 'Cellulose- dyeing Equilibria with Direct Dyes' *The Physical Chemistry of Dyeing*, 2nd edn, Oliver and Boyd, London, pp. 191–256.
4. Lewis D. (1992), *Wool Dyeing*, SDC, Bradford.
5. Crank J., Park G. (1968), *Diffusion in Polymers*, Academic Press.
6. Crank J. (1964), 'The Permeability of Cross-Wound Cotton Yarn Packages' *Journal of the Textile Institute*, **55**, T228.
7. Fretland W. (1997), 'Controlling Fiber and Flow in Yarn Dyeing' *American Dyestuff Reporter*, **86**, 9, 42–6.
8. Boulton J., Crank J. (1952), 'Package Dyeing I – A Theoretical Model and its Relation to Technical Practice' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **68**, 109–16.
9. Armfield W., Boulton J., Crank J. (1956), 'II – The Effect of Liquor Ratio on Direct Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **72**, 278–86.

10. Etters J.N. (1981), 'The Diffusional Boundary Layer: Some Implications for the Dyeing Technologist' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **97**, 170–9.
11. Etters J.N. (1991), 'The Influence of the Diffusional Boundary Layer on Dye Sorption from Finite Baths' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **107**, 114–16.
12. McGregor R., Peters R.H. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing I – The Diffusional Boundary Layer in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 393–400.
13. Etters J.N. (1995), 'Kinetics of Dye Sorption: Effect of Dyebath Flow on Dyeing Uniformity' *American Dyestuff Reporter*, January **84**, 1, 38.
14. Schmickler W. (1996), 'Electronic Effects in the Electric Double Layer' *Chemical Reviews*, **96**, 8, 3177–200.
15. Rattee I.D. (1974), 'The Role of Water in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **90**, 10, 367–72.
16. Sumner H.H. (1989), 'Thermodynamics of Dye Sorption' in: Johnson A., editor, *The Theory of Coloration of Textiles*, 2nd edn, Society of Dyers and Colourists, Bradford, pp. 255–372.
17. Willis H.F., Warwicker J.O., Standing H.A., Urquhart A.R. (1945), 'The Dyeing of Cellulose with Direct Dyes, Part II: The Absorption of Chrysophenine by Cellulose Sheet' *Transactions of the Faraday Society*, **41**, 506–41.
18. Marshall W.J., Peters R.H. (1947), 'The Heats of Reaction and Affinities of Direct Dyes for Cuprammonium Rayon, Viscose Rayon and Cotton' *Journal of the Society of Dyers and Colourists* **63**, 12, 446–61.
19. Peters R.H., Vickerstaff T. (1948), 'The Adsorption of Direct Dyes on Cellulose' *Proceedings of the Royal Society (London)* A192, 292–308.

20. Standing H.A. (1954), 'The Direct Dyeing of Cellulose: a Method for the Analysis of Equilibrium Absorption Data in terms of Current Quantitative Theories' *Journal of the Textile Institute*, **45**, 1, T21 – 9.
21. Holmes F.H. (1958), 'The Absorption of Chrysophenine G by Cotton: A Test of Quantitative Theories of Direct Dyeing' *Transactions of the Faraday Society*, **54**, 1172–8.
22. Carrillo F., Lis M.J., Valldeperas J. (2002), 'Sorption Isotherms and Behaviour of Direct Dyes on Lyocell Fibres' *Dyes and Pigments*, **53**, 2, 129–36.
23. Ibbett R.N., Phillips D.A.S., Kaenthong S. (2006), 'Evaluation of a Dye Isotherm Method for Characterisation of the Wet- state Structure and Properties of Lyocell Fibre' *Dyes and Pigments*, **71**, 3, 168–77.
24. Ibbett R.N., Phillips D.A.S., Kaenthong S. (2007), 'A Dye- adsorption and Water NMR Relaxation Study of the Effect of Resin Cross- linking on the Porosity Characteristics of Lyocell Solvent- spun Cellulosic Fibre' *Dyes and Pigments*, **75**, 3, 624–32.
25. Denton M.J. (1962), 'The Wetting-Out of Yarn Packages' *J. Text Institute*, **53**, T477 – T488.
26. Hadfield H., Lemin D. (1961), 'Foam, Flow, and Level Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **77**, 198–205.
27. Whittaker J. (1961), 'Practical Problems in Preparation and Dyeing of Cross- wound Packages' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **77**, 690–9.
28. Fox M.R. (1962), 'Practical Aspects of Vat Dyeing of Cotton Yarn Packages' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **78**, 393–404.

29. McGregor R. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing II – The Mechanism of Fluid Flow through Textiles and its Significance in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 429–38.
30. Trotman E. (1975), *Dyeing and Chemical Technology of Textile Fibres*, 5th edn, Charles Griffin Co. Ltd.
31. Bird C.L. (1972), *The Theory and Practice of Wool Dyeing*, SDC, Bradford.
32. Bird C.L., Partovi H.K., Tabbron G. (1959), 'The Dyeing of Cellulose Acetate with Disperse Dyes VIII – Determination of Fibre Saturation Values' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **75**, 600–4.
33. Aspland J.R. (1993), 'The Application of Ionic Dyes to Ionic Fibers: Nylon, Silk and Wool and Their Sorption of Anions' *Textile Chemist and Colorist*, **25**, 3, 55–9.
34. Giles C.H. (1973), 'The History and Use of the Freundlich Adsorption Isotherm' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **89**, 287–91.
35. Schuler M.J. (1982), 'The Physical Chemistry of Dyeing: Enigma and Understanding' *Textile Chemist and Colorist*, **14**, 13–21.
36. Eppers J.N. (1994), 'Sorption of Disperse Dye by Polyester Fibers: Boundary Layer Transitional Kinetics' *Textile Research Journal*, **64**, 406–13.
37. White H.J. Jr (1960), 'Some Theoretical Considerations of the Dyeing of Cellulose Acetate with Disperse Dyes' *Textile Research Journal*, **30**, 5, 329–38.
38. Brady P.R. (1992), 'Diffusion of dyes in natural fibres' *Rev. Prog. Coloration*, **22**, 58.

39. Aspland J.R. (1992), 'A series on dyeing. Chapter 3/ Part 1. Vat dyes and their application' *Textile Chemist and Colorist*, **1**, 22–4.
40. Sivaraaja Iyer S.R., Srinivasan D. (1984), 'The Influence of Temperature on the Thermodynamics of Acid Dye Adsorption on Wool Fibres' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **100**, 63–6.
41. Mitsuishi M., Yaqi T., Jian X., Hamada K., Ishiwatari T. (1992), 'Silk Dyeing in Acid Dyes: Results of Equilibrium and Kinetic Studies for the Mixture Dyeing of Silk with Acid Dyes' *Textile Asia* **23**, 4, 92–5.
42. Sevim A.M., Hojiyev R., Gül A., Çelik M.S. (2011), 'An Investigation of the Kinetics and Thermodynamics of the Adsorption of a Cationic Cobalt Porphyrine onto Sepiolite' *Dyes and Pigments*, **88**, 1, 25–38.
43. D'Ilario L., Francolini I., Martinelli A., Piozzi A. (2009), 'Insight into the Heparin- Toluidine Blue (C.I. Basic Blue 17) Interaction' *Dyes and Pigments*, **80**, 3, 343–8.
44. Auxilio A.R., Andrews P.C., Junk P.C., Spiccia L. (2009), 'The Adsorption Behavior of CI Acid Blue 9 onto Calcined Mg-Al Layered Double Hydroxides' *Dyes and Pigments*, **81**, 2, 103–12.
45. Yue Y., Chen X., Qin J., Yao X. (2009), 'Characterization of Interaction between C.I. Acid Green 1 and Human Serum Albumin: Spectroscopic and Molecular Modeling Method' *Dyes and Pigments*, **83**, 2, 148–54.
46. Ding F., Huang J., Lin J., Li Z., Liu F., Jiang Z., Sun Y. (2009), 'A Study of the Binding of C.I. Mordant Red 3 with Bovine Serum Albumin Using Fluorescence Spectroscopy' *Dyes and Pigments*, **82**, 1, 65–70.
47. Bird J., Brough N., Dixon S., Batchelor S.N. (2006), 'Understanding Adsorption Phenomena: Investigation of the Dye-Cellulose Interaction' *Journal of Physical Chemistry B*, **110**, 39, 19557–61.

48. Ding F., Li N., Han B., Liu F., Zhang L., Sun Y. (2009), 'The Binding of C.I. Acid Red 2 to Human Serum Albumin: Determination of Binding Mechanism and Binding Site Using Fluorescence Spectroscopy' *Dyes and Pigments*, **83**, 2, 249–57.
49. Yamaki S.B., Barros D.S., Garcia C.M., Socoloski P., Oliveira O.N., Atvars T.D.Z. (2005), 'Spectroscopic Studies of the Intermolecular Interactions of Congo Red and Tinopal CBS with Modified Cellulose Fibers' *Langmuir*, **21**, 12, 5414–20.
50. De Clerck K., Rahier H., Van Mele B., Westbroek P., Kiekens P. (2007), 'Dye–Fiber Interactions in PET Fibers: Hydrogen Bonding Studied by IR-Spectroscopy' *Journal of Applied Polymer Science*, **106**, 3, 1648–58.
51. An W., Jiao Y., Dong C., Yang C., Inoue Y., Shuang S. (2009), 'Spectroscopic and Molecular Modeling of the Binding of Meso-tetrakis (4-hydroxyphenyl) porphyrin to Human Serum Albumin' *Dyes and Pigments*, **81**, 1, 1–9.
52. Nemethy G., Scheraga H.A. (1962), 'Structure of Water and Hydrophobic Bonding in Protein, Part III: the Thermodynamic Properties of Hydrophobic Bonds in Proteins' *Journal of Physical Chemistry*, **66**, 10, 1773–89.
53. Maruthamuthu M., Sobhana M. (1979), 'Hydrophobic Interactions in the Binding of Polyvinylpyrrolidone' *Journal of Polymer Science: Polymer Chemistry Edition*, **17**, 10, 3159–67.
54. Yang Y., Ladisch C.M. (1993), 'Hydrophobic Interaction and its Effect on Cationic Dyeing of Acrylic Fabric' *Textile Research Journal*, **63**, 5, 283–9.
55. Wai P.P.C. (1984), 'Dynamic Behaviour of a Reactive Packed Bed Adsorption System' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.

56. Vosoughi M. (1993), 'Numerical Simulation of Packed Bed Adsorption Applied to a Package Dyeing Machine' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
57. Alberghina G., Longo M.L., Torreet M. (1983), 'Adsorption Thermodynamics and Diffusion of Disperse Anthraquinone Dyes in Acetate Fibre' *Dyes and Pigments* **4**, 49–58.
58. Xu C., Shamey R. (2013) 'Nonlinear Modeling of Equilibrium Sorption of Selected Anionic Adsorbates from Aqueous Solutions on Cellulosic Substrates: Part 1: Model Development' *Cellulose*, **19**, 3, 615–25.
59. Xu C., Shamey R., (2013) 'Nonlinear Modeling of Equilibrium Sorption of Selected Anionic Adsorbates from Aqueous Solutions on Cellulosic Substrates: Part 2: Experimental Validation' *Cellulose*, **19**, 3, 627–33.
60. Debye P., Hückel E. (1923), 'The Theory of Electrolytes. I. Lowering of Freezing Point and Related Phenomena' *Physikalische Zeitschrift*, **24**, 185–206.
61. Hori T., Kamon N., Kojima H., Rohner R.M. Zollinger H. (1987), 'Structure Correlation between Diffusion Coefficients of Simple Organic Compounds and of Anionic and Cationic Dyes in Water' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **103**, 265–70.
62. Peters R.H., Ingamells W. (1973), 'Theoretical Aspects of the Role of Fibre Structure in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **89**, 397–405.
63. Hori T., Zollinger H. (1986), 'Role of Water in the Dyeing Process' *Textile Chemist and Colorist*, **18**, 10, 19–25.
64. Rohner R.M., Zollinger H. (1986), 'Porosity versus Segment Mobility in Dye Diffusion Kinetics-A Differential Treatment: Dyeing of Acrylic Fibers' *Textile Research Journal*, **56**, 1–13.

65. McGregor R. (1974), *Diffusion and Sorption in Fibres and Films*, vol. 1, London Academic Press.
66. Ethers J.N. (1980), 'Diffusion equation made easy' *Textile Chemist and Colorist*, **12**, 140–5.
67. Boulton J. (1938), 'A Classified List of Direct Dyes for Use with Viscose Rayon' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **54**, 268–73.
68. Bird C. and Boston W. (1975), *The Theory and Practice of Wool Dyeing*, SDC, Bradford.
69. Ren J. (1985), 'A Thesis on the Development of a Mathematical Model of the Batch Dyeing Process and its Application to the Simulation and Computer Control of a Dyeing Machine' PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, Leeds University.
70. Burley R. Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical Simulation of an Axial Flow Package Dyeing Machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33–9.
71. Telegin F.Y. (1998), 'Convective Mass Transfer in Liquid Treatment Processes' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **114**, 49–55.

۳. انتقال رنگزا در سیستم‌های سیال

چکیده: زمینه‌های نظری برای توصیف مکانیکی پدیده‌های جریان در کانال باز و محیط‌های متخلخل بیان می‌شود. آثار مربوطه تشریح و معادلات حاکم بر جریان توضیح داده می‌شوند. مفاهیم اساسی پراکندگی، جابه‌جائی و نفوذ روشن و مدل‌های توصیف کننده این فرآیندها ارزیابی می‌شوند. نقش جریان متراکم و پراکنده در انتقال رنگزا به درون محیط بسته و اثر پارامترهای جریان بر مدل‌سازی نفوذ و پراکندگی رنگزا مورد بررسی قرار می‌گیرند و مدل‌های مختلف شامل خواص جریان ارزیابی می‌شوند.

کلمات کلیدی: جریان آرام^۱، جریان پراکنده، جریان انبوه، محیط متخلخل، نفوذپذیری، پراکندگی جابه‌جائی، نفوذ، پراکندگی، پراکندگی تیلور، جابه‌جائی، تعادل تکانه^۲، قانون دارسی، مدل ناویر-استوکس، راکتور بستر ثابت، MIM، STM، CDE.

۱.۳. مقدمه

همان‌طور که در فصل دوم نیز اشاره شد، وقتی که مواد نساجی در محلول رنگزا غوطه‌ور می‌شوند، نرخی که رنگزا برداشت می‌شود، وابسته به میزانی است که مایع هم‌زده می‌شود، و وقتی هم‌زدن شدید باشد، به مقدار بیشینه خود می‌رسد. متأسفانه، این پدیده را نمی‌توان در هر مدل ساده‌ای با مجموعه‌های لیف، به‌علت پیچیدگی گسترده تعریف جریان مایع از میان مواد نساجی شرح داد. رنگرزی الیاف، نخ‌ها یا پارچه‌ها را می‌توان به‌عنوان انتقال جرم در یک محیط متخلخل، که با معادله پراکندگی جابه‌جائی تعریف می‌شود، تلقی کرد [۱].

نظریه‌هایی که برای استخراج معادلات دیفرانسیلی ماکروسکوپی استفاده شده‌اند، انتقال محلول را از طریق محیط متخلخل توصیف می‌کنند که ممکن است به دسته‌های مختلف طبقه بندی شوند [۲]. گسترده‌ترین نظریه استفاده شده برای پراکندگی - جابه‌جائی مواد شیمیائی در محیط متخلخل براساس مکانیک سیالات است [۳]. در این بخش ما مفاهیم مربوط به مکانیک سیالات، محیط متخلخل و انتقال

¹ Laminar flow

² Momentum balance

جرم در هر دو سیستم مایع و محیط متخلخل را معرفی می‌کنیم. این مفاهیم، مبانی نظری را برای مدل‌سازی فرایند رنگرزی فراهم می‌کنند.

۲.۳. ویژگی‌های سیال در دورنمای سه بُعدی

۱.۲.۳ رفتار مکانیکی یک سیال

رفتار مکانیکی و خواص مواد ممکن است برحسب تنش برشی (τ) (نیرو در واحد سطح، Pa) و ازدیاد طول برشی (γ) (عبارتی بی بُعد که مربوط به تغییر مکان است) تعریف شود. اینها به نیروی کل وارد بر صفحه (F_x) و تغییر مکان (U_x) مربوط هستند و در شکل ۱.۳ و معادلات ۱-۳ و ۲-۳ نشان داده شده‌اند [۴]:

$$\tau = \frac{F_x}{A_y} \quad [۱-۳]$$

$$\gamma = \frac{U_x}{h_y} = \frac{dU_x}{dy} \quad [۲-۳]$$

پاسخ ماده، در عبارات رابطه بین تنش برش و کرنش برشی، خواص مکانیکی را که ماده ممکن است طبقه بندی شود، تعریف می‌کند. اگر ماده بین صفحات کاملاً جامد سخت باشد، بدون توجه به مقدار نیروی اعمال شده حرکت نمی‌کند (مگر اینکه شکسته شود). بنابراین معادله ۳-۳ را می‌توان برای تعریف این ماده به کار برد:

$$\gamma = 0 \quad [۳-۳]$$

از سوی دیگر، اگر مولکول‌های ماده آنقدر از هم دور باشند که تاثیر ناچیزی بر همدیگر اعمال کنند (به‌عنوان مثال گاز کم فشار)، صفحه را می‌توان توسط نیروی اندکی به حرکت در آورد و معادله ۴-۳ را برای بیان این ماده شرح داد:

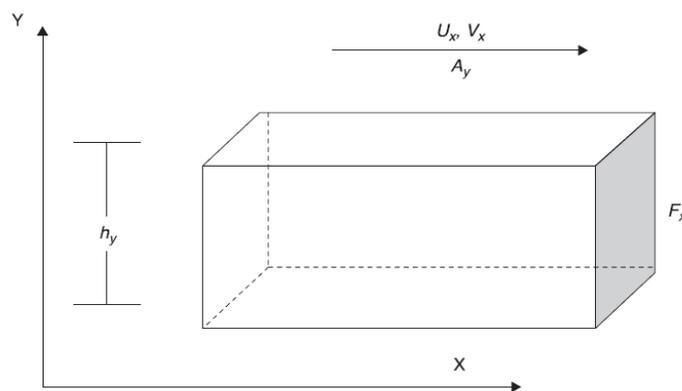
[۴-۳]

$$\tau = 0$$

این ماده یک سیال لزج (سیال پاسکالی) نامیده می‌شود، بنابراین، اگر مولکول‌ها جاذبه قابل توجهی نشان دهند، به طوری که آنها پس از یکدیگر حرکت کنند (به‌عنوان مثال گرادیان سرعت) متناسب با نیروی اعمالی (مانند تنش برشی) است، ماده یک سیال نیوتنی نامیده شد [۴] و توسط معادله ۵-۳ توصیف می‌شود.

[۵-۳]

$$\tau = \eta \dot{\gamma}$$



شکل ۱.۳. تنش برشی ساده بین صفحات موازی.

که در آن داریم:

$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt} = \frac{dV_x}{dy} = \frac{V_x}{h_y}$$

[۶-۳]

η گرانیوی^۱ سیال است که ابعاد Ft/L^2 با واحدهای متناظر $\text{Kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$ یا Pa s دارد. متداول‌ترین سیالات با ساختار ساده نیوتونی هستند مثل آب، هوا، روغن و غیره.

¹ Viscosity

۲.۲.۳. جریان آرام^۱

این یک واقعیت تجربی است که یک سیال در حال جریان در یک لوله کوچک یا در سرعت پایین توسط مکانیزم جریان آرام عمل می‌کند، و همچنین جریان گرانی^۲ یا خطی نامیده می‌شود. لایه‌های سیال روی یکدیگر بدون هیچ‌گونه تداخل میکروسکوپی می‌لغزند، و سرعت در جریان یکنواخت میکروسکوپی در هر نقطه ثابت است. در سرعت‌های بالاتر، جریان آشفته می‌شود؛ با حرکت گردابی بین لایه‌ها تداخل وجود دارد، و حتی در جریان کلی پایا سرعت در یک نقطه در محدوده مقدار میانگین نوسان دارد.

در اندازه‌های متفاوت لوله مدور و سیالات مختلف استفاده شده، می‌توان دریافت که جریان آرام عموماً وجود دارد وقتی که نسبت بی‌بعد $(du\rho/\mu)$ کمتر از ۲۱۰۰ است، و وقتی نسبت بزرگتر از حدود ۴۰۰۰ است جریان آشفته ایجاد می‌شود، با یک ناحیه گذار در بین آن [۵]. این نسبت عدد رینولدز (Re) نامیده می‌شود:

$$Re = \frac{du\rho}{\mu} \quad [۷-۳]$$

که در آن d قطر لوله، u سرعت جریان، ρ چگالی سیال و μ گرانی^۳ سیال هستند.

اهمیت فیزیکی عدد رینولدز را بهتر می‌توان ارزیابی کرد اگر دوباره به صورت زیر مرتب شود:

$$Re = \frac{du\rho}{\mu} = \frac{\rho u^2}{\mu \frac{u}{d}} \quad [۸-۳]$$

صورت کسر، شار حرکت "لختگی" است که توسط سیال در طول لوله در جهت محور اعمال می‌شود. مخرج کسر متناسب با تنش برشی گرانی^۴ در لوله است، که معادل با شار تکانه^۵ "گرانی" قائم

^۱ Laminar flow

^۲ Viscous flow

^۳ Viscosity

^۴ Viscous shear stress

^۵ Momentum flux

بر جهت جریان، یعنی در جهت شعاع است. بنابراین عدد رینولدز نسبت شار تکانه ناشی از اینرسی (در جهت جریان) به شار تکانه ناشی از تنش‌های گرانیو^۱ (در جهت شعاع) است.

چون نیروهای گرانیو^۲ نمایانگر نیروهای جاذب بین مولکولی هستند، آنها پایدارند. در حالی که نیروهای اینرسی تمایل به جدا کردن عناصر سیال از هم دارند و ناپایدار هستند. بنابراین کاملاً منطقی است که جریان پایدار (آرام) باید در اعداد رینولدز پایین که نیروهای گرانیو غلبه می‌کنند رخ دهد، در حالی که جریان ناپایدار (آشفته) در اعداد رینولدز بالا که در آن نیروهای اینرسی غالب هستند، رخ می‌دهد.

همچنین جریان‌های آرام توسط گرانیوی حاکم هستند و مستقل از چگالی سیال هستند، در حالی که جریان‌های کاملاً آشفته توسط چگالی سیال حاکم بوده و اساساً در سطوح آشفته‌گی بالا مستقل از گرانیوی سیال هستند. برای سیالات جریان یافته نزدیک مرزهای جامد (مانند لوله‌های داخلی) نیروهای گرانیو در مجاور مرزها تسلط می‌یابند، در حالی که برای جریان‌های آشفته (اعداد رینولدز بالا) نیروهای اینرسی در ناحیه دور از مرز حاکم هستند.

در اینجا ما هر دو جریان آرام و آشفته از سیال نیوتنی در لوله‌ها (قبل از مرز مجموعه لیف)، و سیال آرام در محیط متخلخل را بررسی کردیم.

۳.۲.۳. تعادل تکانه

پایستگی اصل تکانه یک رویکرد مشترک برای سیستم متشکل از یک حجم مکعبی (دیفرانسیلی) انتخابی با هر محدوده جریان^۳ است. با محاسبه جابه‌جائی تکانه در سراسر سطح، تمام مولفه‌های احتمالی تنش در هر سطح و در تمامی سطوح، و نیروهای دیگر (مانند گرانش)، یک فرم میکروسکوپی کلی از معادله تکانه را می‌توان استخراج کرد، که در معادله ۳-۹ نشان داده شده و در تمامی نقاط هر سیال معتبر است.

¹ Viscous stresses

² Viscous forces

³ Flow field

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho g \quad [۹-۳]$$

که در آن چگالی سیال، u میدان سرعت، p فشار و g گرانش را نشان می‌دهند. وقتی با معادلات مناسب ارتباط دهنده مولفه‌های تنش برشی ($\vec{\tau}$) به مولفه‌های سرعت متصل شود، حاصل آن مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیلی است که با شرایط مرزی مناسب، برای مولفه‌های سرعت به صورت تابعی از زمان و مسافت می‌توانند حل شوند. در جریان‌های آرام، مولفه‌های تنش برشی تنها به گرادین‌های سرعت از طریق یک معادله رئولوژیکی مناسب وابسته هستند. به‌عنوان مثال، برای سیالات نیوتنی، معادله رئولوژیکی از حالت یک بُعدی تعمیم یافته است:

$$\vec{\tau} = \eta [(\nabla u) + (\nabla u)^T] \quad [۱۰-۳]$$

که η گرانروی سیال است. هنگامی که برای حذف مولفه‌های تنش از معادله تکانه استفاده شود، نتیجه معادلات ناویر-استوکس نامیده می‌شود [۴].

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla u + (\nabla u)^T) + \rho (u \cdot \nabla) u + \nabla p = F \quad [۱۱-۳]$$

این معادلات به جریان آرام از هر سیال نیوتنی در هر سیستم اعمال می‌شوند و نقطه شروعی برای حل دقیق بسیاری از مسائل جریان سیال هستند. با این حال، تعداد مسائل جریان که برای راه حل‌های تحلیلی امکان‌پذیر است نسبتاً محدود است، بنابراین روش‌های کامپیوتری عددی برای بسیاری از مسائل عملی مورد نیاز است.

معادلات ناویر-استوکس برای توصیف تمام انواع جریان تراکم‌ناپذیر نیوتنی، شامل جریان آشفته فرض می‌شود. با این حال، مدل‌سازی جریان آشفته توسط معادلات ناویر-استوکس در اکثر کاربردهای مهندسی غیرعملی است، زیرا نیازمند آن است که حتی کوچک‌ترین جریان‌های گردابی رفع شوند. برای رفع این جریان‌های گردابی، نیاز است که تعداد گره‌های مورد نیاز بسیار بزرگ شوند. علاوه بر این، جریان ثابت و پایا نمی‌شود، چون به‌نظر می‌رسد گره‌ها به‌طور تصادفی با جریان حرکت کنند. این نوع از شبیه‌سازی‌های وابسته به زمان از نظر تعداد عملیات و حافظه مورد نیاز، بسیار سخت و دشوار و بسیار

بزرگ هستند و توسط اکثر رایانه‌ها کنترل می‌شوند. بنابراین لازم است تا از مدل‌های ساده شده‌ای برای مدل‌سازی جریان آشفته استفاده شود.

۳.۳. جریان‌ها در محیط‌های متخلخل

دینامیک‌های سیالات در محیط‌های متخلخل به دلیل اهمیت‌شان برای کاربردهای مهندسی و محیط زیست، موضوع مطالعات تجربی و نظریه متعددی شده‌اند. در رنگرزی بسته نخ، محلول رنگزا یا هوا باید به‌طور یکنواخت درون یک بسته و همچنین بین یک بسته و بسته دیگر توزیع شود. این بدین معناست که سیال باید در نرخ یکسانی در سرتاسر فضاهای متخلخل از مجموعه لیف جریان یابد. این بخش به‌طور خلاصه ویژگی‌های اصلی محیط‌های متخلخل، نفوذپذیری این محیط‌ها و الگوهای جریان سیال در بسته‌های نخ را بررسی می‌کند.

۱.۳.۳. تعریف محیط‌های متخلخل

محیط متخلخل را به‌عنوان یک جامد، یا مجموعه‌ای از اجزای جامد، با فضای باز کافی در درون جامدها و یا اطراف آن می‌توان تعریف کرد تا سیال را برای عبور دادن از درون یا اطراف آنها قادر سازد.

روش‌های نظری مختلفی برای توصیف محیط متخلخل وجود دارد. در یک حالت به‌صورت یک جامد پیوسته و یکپارچه با سوراخ‌هایی بر روی آن است. سوراخ‌ها ممکن است به هم متصل (نفوذپذیر) و یا غیرمتصل (نفوذناپذیر) باشند. حالت دیگر، مجموعه‌ای از ذرات جامد در یک بستر فشرده است، که سیال می‌تواند از میان فضاهای خالی بین ذرات عبور کند که به‌عنوان غیریکپارچه نامیده می‌شود. هر دو این مفاهیم به‌عنوان پایه و اساسی جهت پیشرفت معادلات استفاده می‌شوند که رفتار جریان سیال را توضیح می‌دهند [۵].

یکی از ویژگی‌های کلیدی محیط متخلخل میزان تخلخل (ε) است که مطابق با معادله ۳-۱۲ تعریف می‌شود.

$$\varepsilon = \frac{\text{Total vol.} - \text{Solids vol.}}{\text{Total volume}} = 1 - \frac{A_{\text{solid}}}{A} = \frac{A_{\text{voids}}}{A} \quad [۳-۱۲]$$

که A_{solid} مساحت فاز جامد در یک مقطع عرضی از مساحت کل A است. میزان تخلخل ε از نظر ماکروسکوپی حجم موثر از منفذ محیط را مشخص می‌کند، زیرا به‌طور مستقیم به اندازه منافذ نسبت به ماتریس مربوط می‌شود.

تعیین سرعت‌ها در محیط‌های متخلخل مهم است. به‌طوری‌که سرعت دسترسی به سیستم، سرعت سطحی سیال (V_s) نامیده می‌شود و در معادله ۳-۱۳ نشان داده می‌شود:

$$V_s = \frac{Q}{A} \quad [۱۳-۳]$$

و سرعت واقعی در درون منافذ یا فضاهای خالی (سرعت روزنه ای V_i) توسط معادله ۳-۱۴ شرح داده می‌شود:

$$V_i = \frac{Q}{\varepsilon A} = \frac{V_s}{\varepsilon} \quad [۱۴-۳]$$

در رابطه فوق Q نرخ جریان است (بر حسب m^3/s).

چون سیال در محیط متخلخل مسیر آشفته‌ای در سراسر کانال‌هایی با اندازه متغیر دنبال می‌کند، یک روش توصیف رفتار جریان در خلل و فرج‌ها، ملاحظه مسیر جریان به‌صورت یک "لوله غیر مدور"^۱ است. این به تعریف مناسبی از قطر هیدرودینامیکی (D_h) نیاز دارد که در معادله ۳-۱۵ نشان داده می‌شود:

$$D_h = 4 \frac{\text{Flow volume}}{\text{Wetted surface area}} \\ = \frac{4 \times \varepsilon \times (\text{Bed volume})}{(\text{No. particles})(\text{Surface area / Particle})} \quad [۱۵-۳]$$

^۱ Non-circular conduit

و در آن:

$$\begin{aligned} \text{No. particles} &= \frac{(\text{Bed volume})(\text{Fraction of solids in bed})}{\text{Volume / Particle}} \\ &= \frac{\text{Bed volume}(1-\varepsilon)}{\text{Volume / Particle}} \end{aligned} \quad [16-3]$$

جایگزینی معادله ۱۶-۳ در معادله ۱۵-۳ منجر به معادله زیر می‌شود:

$$D_h = 4 \left(\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \right) \left(\frac{1}{a_s} \right) \quad [17-3]$$

که (حجم ذره) / (مساحت سطح ذره) $a_s =$ است. اگر ذرات کروی با قطر d باشند، سپس $a_s = 6/d$ می‌شود. بنابراین برای محیط متشکل از ذرات کروی یکنواخت، رابطه ۱۷-۳ را می‌توان به صورت زیر ارائه داد:

$$D_h = \frac{2d\varepsilon}{3(1-\varepsilon)} \quad [18-3]$$

قطر هیدرولیکی و سرعت سطحی را می‌توان به تعریف عدد رینولدز محیط متخلخل وارد کرد که در معادله ۱۹-۳ ارائه می‌شود:

$$N_{Re} = \frac{D_h V_s \rho}{\mu} = \frac{2d\varepsilon}{3(1-\varepsilon)} \frac{V_s}{\varepsilon} \rho = \frac{2dV_s \rho}{3(1-\varepsilon)\mu} \quad [19-3]$$

معمولاً ثابت عدی (۲/۳) کاهش می‌یابد و عدد رینولدز محیط متخلخل بدون فاکتور عددی تعریف می‌شود:

$$N_{RePM} = \frac{dV_s \rho}{(1-\varepsilon)\mu} \quad [20-3]$$

هنگامی که $N_{RePM} < 10$ باشد، جریان را می‌توان به صورت یک جریان آرام در نظر گرفت.

در زمینه تکمیل نساجی و فرآیندهای شستشو، مجموعه لیف، به شکل نخ یا پارچه، به عنوان نوعی محیط متخلخل می‌توانند عمل کنند. دنتون^۱ [۶] الگوی جریان را در رنگرزی بسته نخ با رسم نرخ جریان در برابر افت فشار برای ۳ بسته با تراکم‌های مختلف برای جریان هوا و برای جریان محلول رنگزا مطالعه کرد و مشاهده کرد که این‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای در محدوده عملی خطی بودند. او نتیجه گرفت که جریان در درون بسته‌ها از نوع جریان آرام است. این نتیجه‌گیری براساس معادله تعادل تکانه در محیط‌های متخلخل است.

۲.۳.۳. معادله تعادل تکانه در محیط‌های متخلخل

تجزیه و تحلیل ارائه شده در اینجا مربوط به حرکت سیالات در سراسر محیط‌های متخلخل است؛ معادله شرح دهنده حرکت (تعادل تکانه) از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. پیرو کار اصلی انجام شده توسط هنری دارسی^۲، تعاریف ریاضی جریان مایع در محیط‌های متخلخل براساس قانون دارسی است [۴]. این قانون بیان می‌کند که نرخ جریان حجمی محلول (Q) در سرتاسر یک نمونه از مواد متخلخل متناسب با اختلاف فشار هیدرواستاتیکی Δp در سراسر نمونه، به طور معکوس متناسب با طول L نمونه، و متناسب با مساحت مقطع عرضی A است. قانون دارسی به آسانی و به صورت زیر بیان شده است:

$$Q = k_D A \frac{\Delta p}{L} \quad [۲۱-۳]$$

در معادله ۲۱-۳ ثابت تناسب k_D نفوذ پذیری دارسی مواد است.

مقدار Q/A دیمانسیون LT^{-1} دارد و سرعت دارسی (u) نامیده می‌شود. از این رو معادله ۳ بُعدی کلی برای قانون دارسی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$u = -\frac{k}{\eta} \nabla p \quad [۲۲-۳]$$

¹ Denton

² Henry Darcy

در معادله $k = k_D \eta$ نفوذ پذیری محیط‌های متخلخل نشان داده می‌شود، η گرانیوی سیال، p فشار و u سرعت جریان سطحی از سیال را نشان می‌دهد. نفوذپذیری k ، که به‌عنوان ثابت در نظر گرفته می‌شود، یک خاصیت ذاتی از محیط متخلخل است. سرعت در قانون داریسی (u) در واقع یک سرعت متوسط در سرتاسر مقطع عرضی است. بنابراین، نمودار سرعت جریان داریسی در محیط متخلخل یک شکل مسطح در جهت جریان دارد، که نشان دهنده سرعت ثابت است.

اگرچه قانون داریسی اولین بار از روی تجربه و مشاهده منتشر شد، اما بعدها با دقت زیادی از معادله نایپر-استوکس مشتق شد. در حالی که معادله نایپر-استوکس قابلیت توصیف جریان در هندسه‌های دقیق در مقیاس منفذ را دارد، قانون داریسی به‌طور متوسط جریان بیش از یک حجم مشخص است. کاربرد قانون داریسی روشی استاندارد برای توصیف جریان سیال تک فاز در محیط‌های متخلخل میکروسکوپی نامنظم و همگن ماکروسکوپیک است [۸، ۷].

جریان سیال در فرآیندهای رنگرزی عملی، شامل رنگرزی بسته نخ، در ماهیت خود خطی شکل فرض شده و اغلب توسط قانون داریسی توصیف می‌شود [۹-۱۱، ۶].

علی‌رغم آنکه هیچ‌گونه شواهد نظری جهت اثبات این رفتار وجود ندارد، پژوهشگران ادعا می‌کنند که پیش‌بینی‌های مدل عموماً سازگاری خوب با داده‌های تجربی را نشان می‌کند.

در بیشتر ماشین‌آلات رنگرزی بسته نخ، محلول رنگزا از میان لوله و مجموعه نخ پمپ می‌شود. از آنجائی که جریان از لوله (در حالت عمودی) به سمت مجموعه نخ (در حالت موازی) است، هنوز نامشخص است که انتقال کلی تکانه توسط تنش‌های برشی در سیال ناچیز است. علاوه بر این، نخ‌ها نرم و منعطف بوده و قادر به تحمل تغییر شکل قابل توجه هستند. تغییر شکل بسته‌های نرم با چگالی کم، به خصوص در سطح بسته، به‌علت نرخ جریان بالاتر و تغییر جهت جریان که در این سطح مشترک نرم اتفاق می‌افتد بسیار قابل توجه است. بنابراین ویژگی‌های جریان در سرتاسر این نوع از محیط متخلخل متفاوت از آنهایی که در یک محیط متخلخل سخت مانند ماسه سنگ هستند که جریان توسط قانون داریسی شرح داده شد. قانون داریسی فرض می‌کند که تنها نیروی محرک برای جریان در یک محیط متخلخل گرادیان فشار است، و انتقال کلی تکانه توسط تنش برشی در سیال قابل اغماض است.

برای محاسبه کشش گرانرو^۱ در طول دیواره‌های مرزی، اغلب معادله برینکمن^۲ استفاده می‌شود [۱۲]. معادله برینکمن جریان را در محیط‌های متخلخل در مواردی که انتقال تکانه توسط تنش‌های برشی در سیال نادیده گرفته نشده، توصیف می‌کند. این مدل شامل عبارتی است که برای انتقال گرانرو در تعادل تکانه محاسبه می‌شود و سرعت‌ها را در جهت‌های فضایی به‌عنوان متغیرهای وابسته معرفی می‌کند.

$$\nabla p = -\frac{\eta}{k}u + \eta\nabla^2 u \quad [۲۳-۳]$$

η گرانروی سیال، u بردار سرعت و p فشار را نشان می‌دهد. نفوذپذیری ساختار متخلخل همان طور که در قانون دارسی ذکر شده، k علامت‌گذاری می‌شود.

عبارت $(-u\eta/k)$ در معادله ۲۳-۳ مقاومت دارسی است، و عبارت $(\eta\nabla^2 u)$ مقاومت گرانرو^۳ است، نیروی محرکه هنوز هم گرادیان فشار در نظر گرفته می‌شود. وقتی نفوذپذیری (k) پایین باشد، مقاومت دارسی بر مقاومت ناویر-استوکس غلبه می‌کند و معادله ۲۳-۳ به قانون دارسی تبدیل می‌شود. بنابراین معادله برینکمن مزیت ملاحظه هر دو کشش گرانرو در طول دیواره و اثرات دارسی با محیط متخلخل خود را دارد. علاوه بر این، چون معادله برینکمن مشتقات مرتبه دوم از u را دارد، می‌تواند شرایط عدم لغزش را در مرز سطوح جامد از ماده متخلخل (مانند دیواره‌های یک راکتور بسته) اجرا کند، در حالی که قانون دارسی نمی‌تواند. از آن منظر، معادله برینکمن بسیار دقیق‌تر از قانون دارسی است.

۳.۳.۳. نفوذپذیری

نفوذپذیری یک محیط متخلخل، که توسط قانون دارسی تعریف شد [۱۳]، نفوذپذیری دارسی k_D نام‌گذاری شد، که دیمانسیون $M^{-1}L^3T$ دارد. بنابراین، نفوذپذیری هم به ماده و هم به سیال بستگی دارد. برای نفوذ جریان‌هایی که از نظر هندسی مشابه هستند (در عمل، محلول‌های نیوتنی در جریان آرام و در محیط‌های غیرمتورم ساکن)، نفوذپذیری دارسی k_D به‌طور معکوس با گرانروی سیال η تغییر

¹ Viscous drag

² Brinkman

³ Viscous resistance

می‌کند. بنابراین، نفوذپذیری ذاتی (k) را می‌توان به صورتی که در معادله ۳-۲۴ نشان داده شد، تعریف کرد [۱۴، ۴]:

$$k = k_D \eta \quad [۲۴-۳]$$

در رابطه بالا k مشخصه ماده مستقل از سیال به کار رفته برای اندازه‌گیری آن است؛ واحد نفوذپذیری k در سیستم SI، (m^2) است. تغییر k با دما عمدتاً توسط تغییرات گرانیوی کنترل می‌شود [۱۴]. به طوری که:

$$\frac{dk}{dT} = -k \frac{d \ln \eta}{dT} \quad [۲۵-۳]$$

نفوذپذیری به توزیع اندازه منافذ بستگی دارد، زیرا اندازه‌های ورودی، خروجی و طول دیواره‌های منافذ، مقاومت‌های اصلی جریان را تشکیل می‌دهند. نفوذپذیری تنها پارامتری است که مقدار رسانایی یک ساختار را منعکس می‌کند.

نفوذپذیری و تخلخل به هم وابسته هستند. برای مثال، اگر تخلخل صفر باشد، در آن صورت نفوذپذیری نیز صفر است. با این حال، نفوذپذیری را نمی‌توان به تنهایی از تخلخل پیش‌بینی کرد، زیرا پارامترهای دیگر، که حاوی اطلاعات بیشتری در مورد ساختار منافذ است نیز آن را تحت تاثیر قرار می‌دهد.

در منطقه جریان آرام، جریان سیال در سرتاسر مجموعه‌ای از نخ‌ها توسط فرم مناسبی از قانون دارسی و به کمک چندین پژوهشگر توضیح داده شد [۹-۱۱، ۶]. نظریه‌های مختلفی که از ضریب نفوذپذیری در این معادله ممکن است پیش‌بینی شود، از مفاهیم متفاوت ماهیت جریان سیال آغاز می‌شود [۱۵، ۱۶].

نظریه‌های مویینگی به فضاها یا منافذ موجود در جامد متخلخل تمرکز دارد، و شباهت نسبی را بین سیستم منفذی پیچ در پیچ منافذ جامد و استوانه‌ای شکل از مجموعه لوله‌های مویین بیان می‌کند.

معروف‌ترین معادله از این نوع، معادله کوزنی-کارمن^۱ است [۹، ۱۵] که عبارتی برای ضریب نفوذپذیری به‌عنوان تابعی از ساختار متخلخل ارائه می‌دهد:

$$k = \frac{1}{K_0 S_0^2} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \quad [۲۶-۳]$$

که در آن ε بیانگر تخلخل یا فضای خالی محیط متخلخل، S_0 سطح مخصوص یا مساحت سطح ماده که بدنه متخلخل را در واحد حجم تشکیل می‌دهد و K_0 یک مقدار ثابت است که به ثابت کوزنی معروف است.

ثابت کوزنی اساساً یک فاکتور تصحیحی است که برای محاسبه و جهت‌گیری سیستم منفذی استفاده می‌شود. برای مقادیر تخلخل بالا، نفوذپذیری واقعی، که به‌طور تجربی تعیین شد، معمولاً کمتر از مقدار پیش‌بینی شده توسط معادله کوزنی-کارمن است و مقادیر K_0 بسیار بالایی به‌دست آمد. این امر را می‌توان به تغییر تدریجی مکانیزم جریان از جریان موئینگی به یک محدوده انبوهی از موانع نسبت داد. در این ناحیه با تخلخل‌های بالا، نظریه‌های دراگ^۲ برای محاسبه نفوذپذیری بسیار مناسب هستند [۱۵].

نتایج تجربی نشان داد که نظریه کوزنی-کارمن وقتی که تخلخل کمتر از ۰/۸ در محیط متخلخل است، بسیار کارآمد است [۱۷]. با این حال، برای محیط‌هایی با تخلخل بالاتر، معادله کوزنی-کارمن به‌خوبی توسط نتایج تجربی پشتیبانی نشده است [۱۸، ۱۹]. پژوهش‌های دنتون [۶] نشان داد که، چون تخلخل بسته‌های نخ بین ۰/۱ و ۰/۷ است، معادله کوزنی-کارمن را می‌توان در بررسی فرآیندهای رنگری بسته‌ی نخ به‌کار برد.

دنتون سپس نفوذپذیری محیط‌های متخلخل را در حالت کلی به نفوذپذیری مخصوص K_S توسط معادله‌ای که در بردارنده فاکتور شکل S است مرتبط ساخت. بنابراین:

^۱ Kozeny-Carman equation

^۲ Drag theories

$$\frac{Q}{\Delta P} = K_s \frac{S}{\mu} \quad [27-3]$$

او در ادامه رابطه‌ای را برای محاسبه مقدار فاکتور شکل برای بسته‌های پنی‌ری استوانه‌ای ارائه داد که در معادله ۲۸-۳ نشان داده می‌شود.

$$S = \frac{2\pi h}{\ln \frac{r_o}{r_i}} \quad [28-3]$$

در معادله فوق h ارتفاع و r_i و r_o به ترتیب شعاع‌های داخلی و خارجی بسته هستند. اگر نفوذپذیری بسته پنی‌ری شکل اندازه‌گیری شود، می‌توان نفوذپذیری مخصوص آن را محاسبه و اثرات دانستیه بسته، تنش پیچشی و ویژگی‌های نخ را مقایسه کرد.

بحث بالا روشی از ارزیابی نفوذپذیری یک محیط متخلخل به‌طور تجربی توسط اندازه‌گیری افت فشار و نرخ جریان در سیستم‌ها را که این اندازه‌گیری‌ها ممکن هستند فراهم می‌کند. در فرآیندهای رنگرزی بسته نخ، سرعت جریان سیال معمولاً در سرتاسر فضاهای متخلخل بسته بسیار آهسته است و به‌علت باریکی مسیرها، ممکن است جریان آرام فرض شود. در ادامه، نفوذپذیری بسته‌هایی که در جهت عرضی پیچاند شده ممکن است توسط روابط نظری مبتنی بر قانون داریسی و معادله کوزنی-کارمن استنتاج شوند.

به‌طور کلی، چون نفوذپذیری کاهش می‌یابد، افزایش افت فشار در عرض بسته برای حفظ نرخ جریان مطلوب مورد نیاز است [۱۹]. اختلاف در تراکم بسته نخ منجر به تغییر در نفوذپذیری می‌شود، که به‌طور مستقیم بر رفتار جریان با بسته تاثیر قرار می‌دهد. ارتباط بین تراکم بسته و نفوذپذیری توسط دنتون و برای بسته‌های نخ پنبه‌ای مورد بحث قرار گرفته است [۶]. ارتباط بین تخلخل-نفوذپذیری را می‌توان در انواع دیگر محیط‌های متخلخل لیفی و از مطالب چاپی دیگر بررسی کرد [۲۰، ۵، ۴]. تامل و بررسی دقیق این کارها فراتر از حوزه ارائه شده در اینجا است.

به منظور استفاده از یک مدل عددی جهت پیش‌بینی رفتار جریان با بسته‌های نخ واقعی، که عمدتاً بی‌نظم هستند، برخی از روش‌های تخمین نفوذپذیری بسته مورد نیاز است. به‌طور کلی، این پارامتر یک تابع پیچیده از فاکتورهایی مانند: نوع نخ، مشخصات بسته از جمله نایکنواختی موضعی، بزرگی و جهت جریان است. در اینجا برای ساده‌سازی فرض شد که تراکم بسته یکنواخت است، و نفوذپذیری با مکان بسته تغییری نمی‌کند.

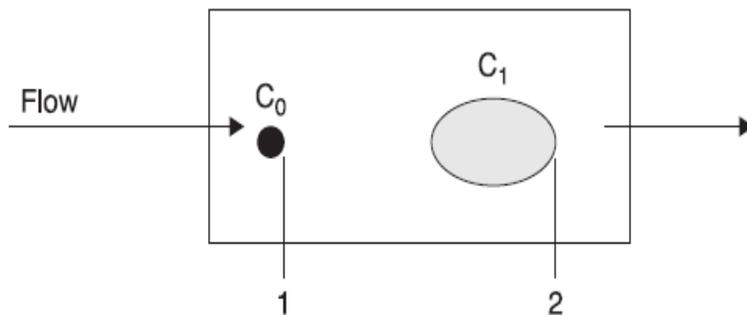
۴.۳. انتقال جرم در اثر جابه‌جائی در سیستم سیال

تعارف متنوعی از جابه‌جائی، نفوذ و پراکندگی در میان پژوهش‌ها و حوزه‌های مختلف وجود دارد، که اغلب موجب سردرگمی می‌شوند. لذا برای مدل‌سازی فرآیند انتقال جرم در سیستم‌های واقعی باید یک تعریف روشنی ابتدا تهیه شود.

۱.۴.۳. پراکندگی جابه‌جائی

در حالی‌که جریان سیال در سرتاسر کالا در سرعت داده شده (۷)، در عمل یک موقعیت عادی است، شرح مسئله حتی در یک فضای یک بُعدی با سیال‌های با ویژگی‌های یکنواخت کاملاً پیچیده است. زیرا اختلاط عموماً هم در جهت طولی (در جهت جریان) و هم در جهت عرضی (عمود بر جریان) اتفاق می‌افتد. حال فرض کنید در $t=0$ یک "نقطه" از سیال انتخابی (مانند رنگزا) در غلظت c_0 به جای کل سطح، تزریق شود. این موقعیت به‌صورت شماتیکی در شکل ۳.۲ نشان داده می‌شود. هنگامی‌که نقطه از سمت چپ (سطح ۱) به سمت راست (سطح ۲) با جریان حرکت کند، در ادامه در جهت جریان و عمود بر آن پخش خواهد شد و در سطح ۲ نقطه به درون یک بیضی با غلظت‌های مختلف در سراسر آن منتقل می‌شود [۴].

چندین روش برای به دست آوردن معادلات دیفرانسیل جزئی وجود دارد که شرح دهنده رفتار غلظت ناحیه اختلاط به‌صورت تابعی از زمان و مکان است، برای مدل کردن پدیده‌ای که در شکل ۳.۳ نشان داده شده است.



شکل ۲.۳. پراکندگی جابه‌جائی.

سه پدیده مختلف در این فرآیند درگیر هستند:

- نفوذ، یک فرآیند تصادفی ناشی از حرکت مولکولی است، که مستقل از سرعت جریان است؛ بنابراین نفوذ نقطه‌ای را در سطح ۱ به وجود می‌آورد که در یک شکل دایره‌ای در سطح ۲ پخش می‌کند.
- پراکندگی، در جریانی که در آن لایه‌هایی با سرعت‌های مختلف وجود دارد اتفاق می‌افتد، که سرعت جریان وابسته است، و بنابراین شکل بیضی‌وار در سطح ۲ به وجود می‌آورد. سرعت جریان بالاتر یک شکل بیضوی مسطح و پهن‌تر در سطح ۲ ایجاد خواهد کرد.
- جابه‌جائی، جنبش مولکول‌ها ناشی از جریان است، که موجب حرکت ماده از سطح ۱ به سطح ۲ می‌شود.

نفوذ

از مهم‌ترین فرآیندها در پراکندگی، نفوذ مولکولی است، که یک حالت خاص پراکندگی است وقتی که سرعت سیال صفر است [۱۳]. مولکول‌ها در حالت مایع ساکن نیستند، حتی اگر سرعت سیال توده‌ای صفر است، چون مولکول‌ها در حرکت مداوم بسر می‌برند. میزان شار ناشی از حرکت تصادفی مولکول‌ها به‌وسیله معادله ۳-۲۹ ارائه می‌شود [۲۱]:

$$j_{dif} = -D_{dif} \frac{\partial c}{\partial x} \quad [29-3]$$

D_{dif} ضریب نفوذ، c غلظت نفوذ کننده و x فاصله را نشان می دهد. اگر جهت بعد از هر برخورد تصادفی انتخاب شود، در آن صورت متوسط مربع فاصله طی شده متناسب با زمان است و ثابت تناسب، ضریب نفوذ مولکولی بیان می شود. در اصطلاحات ریاضی، این ارتباط به صورت قانون دوم فیک (به یاد دانشمند شیمی دان و فیزیکدان آلمانی فیک) شناخته شده و در معادله ۳-۳۰ نشان داده می شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{dif} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad [3-30]$$

معادله فوق تغییر غلظت در طول زمان، در یک نقطه داده شده، متناسب با شیب گرادیان غلظت، با حرکت از مناطق با غلظت بالا به پایین است. این قانون بیان ریاضی ساده از نتیجه ماکروسکوپی حرکات تصادفی است.

پراکندگی

پراکندگی در هر نوع جریانی که در آن لایه‌هایی با سرعت‌های مختلف وجود داشته، رخ می دهد. این یک فرآیند توزیع یا پهن‌شدگی نمودارهای غلظت ناشی از مکانیزم‌هایی بوده که در آن شار متناسب با گرادیان غلظت است، است [۲۲].

$$j_{dis} = -D_{dis} \frac{\partial c}{\partial x} \quad [3-31]$$

که در آن D_{dis} ضریب پراکندگی است، که به سرعت جریان وابسته است، c غلظت مواد شیمیائی و x فاصله را نشان می دهند. در اینجا اصطلاح "پراکندگی" به روند توزیع یا گسترش نمودارهای غلظت اشاره دارد و ناشی از مکانیزم‌هایی است که در آن شار متناسب با گرادیان غلظت است. پراکندگی به توزیع اندازه ذرات رنگ‌ها یا پیگمنت‌ها، که یکی دیگر از مفاهیم مورد استفاده در فناوری رنگ است، وابسته نیست.

شایان ذکر است که پراکندگی فرآیندی است که در آن جرم اجزاء حفظ می شود. معادله بقای جرم نمونه‌ها (اجزاء) شامل پارامتری با انحراف شار نمونه‌ها است. اگر شار به گرادیان غلظت وابسته باشد،

سپس معادله بقای جرم مشتقات فضایی مرتبه دوم غلظت را خواهد داشت. بنابراین پراکندگی مشتقات فضایی مرتبه دوم غلظت (یا اشباع) را به معادله بقای جرم اضافه خواهد کرد.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{dis} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad [33-3]$$

در این مدل، از شباهت قانون فیکِ نفوذ استفاده می‌شود، که به موجب آن ضریب پراکندگی، D_{dis} ، تعیین و برای ارائه انتقال کلی مواد به جای ضریب نفوذ مولکولی فیک به کار می‌رود.

برخی مطالعات چاپ شده به اندازه‌گیری و محاسبه ضرایب پراکندگی طولی و جانبی در کالاهای بسته‌بندی شده‌ی مواد مختلف می‌پردازد [۲۳-۲۵]. تاثیر ضرایب پراکندگی بر خواص فیزیکی و کاربردی، مانند توزیع اندازه ذرات، طول ستون، سرعت سیال و ... نیز بررسی شده است [۲۶، ۲۷].

جابه‌جائی

جابه‌جائی فرآیندی است که در آن مواد شیمیائی با توجه به حرکت انبوه سیال منتقل می‌شود، و فرض می‌شود که سریع‌ترین حالتِ انتقالات شیمیائی در مایع باشد. شار ناشی از جریان انبوه است:

$$J_c = v c \quad [33-3]$$

که در آن v سرعت متوسط جریان انبوه است. معمولاً، غلظت در جهت حرکت سیال کاهش می‌یابد.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} \quad [34-3]$$

این سه پدیده نفوذ، پراکندگی و جابه‌جائی فرض می‌شود جمع‌پذیر بوده و مستقل باشند [۲۷]. حضور جریان عرضی احتمال اینکه مولکول مرحله نفوذ را در سمت راست یا چپ اتخاذ کند تحت تاثیر قرار نداد و فقط چیزی را به آن مرحله می‌افزود. بنابراین، مجموع شار ماده حل شده:

$$\begin{aligned} J &= j_c + j_{dis} + j_{dif} \\ &= v c - D_{dif} \frac{\partial c}{\partial x} - D_{dis} \frac{\partial c}{\partial x} \end{aligned} \quad [35-3]$$

یا، با ترکیب دو عبارت قبلی:

$$J = v c - D \frac{\partial c}{\partial x} \quad [۳۶-۳]$$

D در این معادله از منظور ریاضی شبیه به نفوذ است، اما بزرگ‌تر از چیزی است که توسط نفوذ به تنهایی مشاهده شد. آن ضریب پراکندگی نامیده می‌شود، با این حال باید تاکید کرد که مکانیزم‌های جابه‌جائی و نفوذ را شامل می‌شود. D همچنین به‌صورت ضریب نفوذ-پراکندگی نیز شناخته می‌شود. اگر پراکندگی به نظر برسد که با سرعت افزایش یابد، در آن صورت اغلب به‌صورت یک عبارت کلی ارائه می‌شود: $D_{dis} = \alpha v$ که در آن α عامل پراکنده کننده است، که یک خاصیت اساسی سیستم است.

باید توجه شود که تفاوت بین D_{dif} و D_{dis} آن است که D_{dif} با سرعت تغییر نمی‌کند، در حالی که D_{dis} با سرعت سیال تغییر می‌کند. فرم کلی D به‌صورت زیر است:

$$D = D_{dif} + \alpha v \quad [۳۷-۳]$$

کرامرز^۱ و آلبردا^۲ [۲۸] مدل سل مخلوط را برای مطالعه پاسخ نوسانی جریان مداوم در لوله رنگری به‌کار بردند و با ترکیب معادلات نفوذ/جابه‌جائی رابطه زیر را به‌دست آوردند:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + s \quad [۳۸-۳]$$

که در آن s تمامی شرایط موجود در منبع و مخزن که در محیط واقعی رخ داده، بیان می‌کند.

۲.۴.۳. پراکندگی با جذب سطحی در محیط‌های متخلخل

وقتی که یک محلول رنگزا از بسته ی نخ عبور می‌کند، آن فرآیند انتقال شیمیائی در یک محیط متخلخل است. با فرض آنکه تراکم بسته یکنواخت است و تخلخل (ϵ) بسته ثابت باشد، معادله ۳-۳۹ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

¹ Kramers

² Albrede

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + s \quad [39-3]$$

حرکت مواد شیمیائی مختلف در طول یک جریان امتزاج پذیر در محیط متخلخل، همراه با پراکندگی و جذب سطحی، موضوع مورد علاقه در بسیاری از زمینه‌ها، مانند مهندسی شیمی، مهندسی نفت، فیزیک خاک و آب شناسی است. این موضوع را می‌توان به‌عنوان مشکلی در پراکندگی به حساب آورد زیرا برخی مواد پراکنده کننده ممکن است با پیش‌روی در پراکندگی بی حرکت شوند، و یا این‌که می‌توان آن را به‌عنوان مشکلی در سینتیک‌های شیمیائی نیز دانست که در این حالت نرخ واکنش بستگی به نرخ فراهم سازی یکی از واکنش دهنده‌ها توسط پراکندگی دارد. بنابراین نفوذ ممکن است در درون منافذ یک جسم جامدی که امکان جذب برخی مواد نفوذی را دارد، اتفاق افتد و یا ممکن است از طریق یک ثابت کننده موجب جذب مولکول‌ها به مکان‌های ثابت در محیط شود.

وقتی پراکندگی با جذب درونی همراه شود، در آن صورت معادله ۳-۳۹ در یک بُعد با افزودن عبارت نرخ که در معادله ۳-۴۰ نشان داده شده اصلاح می‌شود [۴].

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial c}{\partial x} + r(c, t) \quad [40-3]$$

عبارت $r(c, t)$ می‌تواند بیانگر یک واکنش همگن در محلول، فرآیند جذب- واجذب در محیط، یا یک واکنش ناهمگن با محیط باشد.

بررسی جریان یک بُعدی، که سیال جایگزین شده ویژگی‌های یکسانی با سیال جابه‌جا شده دارد، و هر دو سیال امتزاج‌پذیر هستند، صورت پذیرفته است. سیال جایگزین شده شامل ماده حل شده، مانند رنگزا است، که می‌تواند به درون و یا بیرون یک محیط، مانند مجموعه لیف نساجی، جذب و یا واجذب شود. اگر F مقدار ماده جذب شده بر روی جاذب (مقدار ماده شیمیائی در محیط یا مقدار رنگزا بر روی منسوجات) در واحد حجم باشد، آنگاه معادله ۳-۴۰ در یک بُعد به‌صورت زیر نوشته می‌شود: [۴، ۲۹-۳۲].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial c}{\partial x} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial F}{\partial t} \quad [۴۱-۳ الف]$$

که در آن ε تخلخل محیط و v_x سرعت درون شبکه‌ای جریان در محیط متخلخل است.

در فرآیند یک بُعدی، و برای یک ضریب پراکندگی مستقل از غلظت، فرم کلی معادله ۴۱-۳ الف می‌شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V_i \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda_i \frac{\partial c}{\partial t} \quad [۴۱-۳ ب]$$

که در آن ضرایب D_i ، V_i و λ_i به ترتیب مقدار پراکندگی، جابه‌جائی و مشخصات جذب سطحی سیستم را نشان می‌دهند.

معادلات فوق، براساس بقای جرم برای انتقال مواد شیمیائی، معادله جابه‌جائی - پراکندگی - جذب ($CDSE$) را به دست می‌آورد (معادله ۴۱-۳ و مشتقات آن)، که به طور گسترده در کاربردهای صنعتی استفاده می‌شود، از جمله رنگرزی [۳۳]. تعداد زیادی از پژوهشگران عبارت ($D \partial^2 c / \partial x^2$) را در معادله ۴۱-۳ ب. پراکندگی یا نفوذ نام‌گذاری کردند، و D معمولاً به عنوان یک ثابت تلقی می‌شود. در شرایط این تجزیه و تحلیل، پراکندگی برای توصیف این پدیده‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد، و نفوذ یک حالت خاص پراکندگی زمانی که سرعت سیال صفر است، در نظر گرفته می‌شود.

۳.۴.۳. پراکندگی در جریان آرام: پراکندگی تیلور

تیلور [۳۴] فرآیند توزیع مقدار کمی جوهر در درون یک لوله که در آن آب در نرخ ثابتی جریان داشته را بررسی کرد. او پراکندگی را با اندازه‌گیری جذب نور درخشان، توسط جوهر، از طریق لوله سنجید. او نتیجه گرفت که تناسب و تقارن از طریق برهم‌کنش بین جابه‌جائی (حرکت جرم، با نمودار سرعت سهموی) و نفوذ اتفاق می‌افتد. او همچنین اشاره داشت که پراکندگی به علت (نفوذ + جابه‌جائی) کمتر از پراکندگی ناشی از تنها جابه‌جائی است (اگرچه این پراکندگی می‌توانست بیشتر از پراکندگی ناشی از تنها نفوذ باشد). به عبارتی دیگر، یک فرآیند تصادفی (نفوذ) غیرمترقبه بودن کل سیستم (پراکندگی) را کاهش می‌دهد.

کلید تجزیه و تحلیل تیلور آن است که نفوذ یک پیامده اصلی دارد و آن اینکه مولکول‌ها همیشه در یک مسیر خطی باقی نمی‌مانند (مسیر توسط یک مولکول مشخص در غیاب نفوذ ادامه خواهد یافت). مولکول‌های نزدیک دیواره (سرعت = صفر) به سمت مرکز نفوذ خواهند کرد، و آنهایی که در مرکز هستند به سمت دیواره نفوذ خواهند کرد. این گستردگی ماده حل شده را که تنها اگر جابه‌جائی وجود داشته منتج خواهند شد، کاهش می‌دهد [۳۵]. در بیانات تیلور، زمان لازم برای ظاهر شدن اثرات قابل اندازه‌گیری، با توجه به انتقال جابه‌جائی، در مقایسه با "زمان فروپاشی" طولانی است که در طی آن تغییرات شعاعی غلظت به کسر مقدار اولیه آنها از طریق فرآیند نفوذ مولکولی کاهش می‌یابد.

در رنگرزی منسوجات، مجموعه لیف معمولاً به‌عنوان یک محیط متخلخل در نظر گرفته می‌شود، و در آن فرض بر این است که:

- برخی مسیرهای جریان طولانی‌تر از بقیه هستند، به‌علت توزیع پیچ خوردگی و
- برخی مسیرهای جریان سریع‌تر از مابقی مسیرها جریان می‌یابند، به‌علت اختلافات در اندازه منفذ.

این دو شرط می‌توانند توسط مفهوم زمان طی شده با هم تلفیق شوند. بنابراین، نظر تیلور مربوط می‌شود به: پراکندگی مانند نفوذ ظاهر خواهد شد اگر اختلاط (نفوذ) کافی بین مسیرهای زمانی کوتاه و بلند وجود داشته باشد. و اختلاط ناکافی باشد، پراکندگی عمدتاً به‌دلیل جابه‌جائی خواهد بود و احتمالاً نفوذی به‌نظر نخواهد آمد.

۴.۴.۳. مدل‌های پراکندگی

بر اساس بحث بالا، ما می‌توانیم سه بیان ریاضی مشترک را از پراکندگی در رنگرزی نتیجه بگیریم.

مدل CDE (معادله جابه‌جائی - پراکندگی)، که همچنین به‌عنوان **ADE (معادله جابه‌جائی افقی در اثر حرکت سیال - پراکندگی)** نیز شناخته شده است

این مدل بیان ریاضی ساده‌ی مشاهدات تیلور است. اگر مرکز جرم ماده حل شده در سرعت یکسانی به‌عنوان متوسط شار آب حرکت کند، و پخش شدگی طبیعی باشد، در آن صورت غلظت جسم حل شده در یک نقطه در طول زمان به‌صورت زیر تغییر می‌کند:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad [۴۲-۳]$$

هنگامی که پخش‌شدگی مانند نفوذ باشد، عرض ماده حل شده "ارتفاع" متناسب با جذر مربع زمان افزایش می‌یابد؛ این مشخصه فرآیند نفوذ است. به‌طور عقلانی CDE به اندازه کافی شبیه به لوله تیلور است که می‌توان آن را به‌عنوان تنها جریان موجود در یک لوله تصور کرد.

STM (مدل لوله - جریان)

این مدل شبیه به حالت جریان سریع در لوله تیلور است: که در آن زمان کافی برای تبادل نفوذ بین خطوط جریان وجود ندارد و بنابراین در نظر گرفته می‌شود که هر خط جریان به‌طور مستقل عمل می‌کند. اگر توزیع سرعت شناخته شده باشد، در آن صورت پراکندگی را می‌توان پیش بینی کرد. در این مورد مرکز جرم ماده حل شده هنوز هم در سرعت یکسانی به‌عنوان متوسط شار آب حرکت می‌کند، اما پراکندگی به‌طور خطی با زمان، به جای جذر مربع زمان، افزایش می‌یابد. این مشخص می‌کند که فرآیند نفوذی نیست. به‌طور عقلانی می‌توان آن را به‌صورت جریان در چند لوله موازی و در قطرهای مختلف دید.

MIM (مدل متحرک - ثابت)

این شرایط هنگامی رخ می‌دهد که جریان در سرتاسر محیط‌های متخلخل وجود دارد و ماده حل شده به درون یا بیرون مجموعه‌ها نفوذ کند. چنین مدلی معمولاً برای بیان حرکت ماده حل شده از طریق منسوجات مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مدل فرض می‌شود که آب از طریق برخی بخش‌های تخلخل کل، ناحیه متحرک، جریان می‌یابد، و از طریق مابقی بخش‌ها، ناحیه ثابت، جریان نمی‌یابد. تبادل نفوذ بین نواحی متحرک و ثابت تاثیر ویژه‌ای در کاهش حرکت ماده حل شده دارد. بنابراین ماده حل شده در سرعت یکسانی مثل آب حرکت نمی‌کند، اما در همان روش سنجیده می‌شود: رابطه بین سرعت با فاصله خطی است. در نتیجه مفهوم عامل تاخیری (ϵ) را می‌توان معرفی کرد. اگر ماده حل شده آهسته‌تر از آب حرکت کند، از سرعتش کاسته می‌شود، و چنین عاملی را می‌توان در CDE ضمیمه کرد:

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - s \quad [۴۳-۳]$$

انتقال رنگزا در فرآیند رنگرزی تقریباً همواره توسط یکی از مدل‌های بالا یا با تغییرات در آنها مورد استفاده قرار می‌گیرد. مرور کلی مطالب چاپی در بخش بعدی ارائه می‌شود.

۵.۳. انتقال رنگزا در رنگرزی

چندین محقق مدل‌های مختلفی را برای فرآیند رنگرزی تعریف کردند. برخی کارکنان بر کنترل هم‌زمان فرآیند رنگرزی تمرکز کردند، که در آن تعدادی عوامل ساده شده باید استفاده شوند تا مدل را تا حد ممکن هر چه ساده‌تر حفظ کنند. کارکنان دیگر به بررسی جامع تاثیر پارامترهای مختلف فرآیند بر رنگرزی تمرکز کردند.

مدل‌هایی با اهمیت ویژه‌ای هستند که قادرند شرایط درون حمام رنگرزی و الیاف رنگرزی شده را به توزیع رنگزا درون آنها، در حین و نیز در پایان فرآیند رنگرزی ارتباط دهند. مدل‌ها برای رنگرزی ناپیوسته ممکن است به ۲ نوع تقسیم شوند [۳۶]:

- مدل‌های ریاضی دقیق: در این مدل‌ها بررسی جامعی بر روی تاثیر پارامترهای مختلف رنگرزی، شامل هر دوی جریان سیال پراکنده و انبوه، صورت می‌گیرد. این پارامترها سپس به قوانین فیزیکی- شیمیایی فرآیند رنگرزی مرتبط می‌شوند. بنابراین معادلات دیفرانسیلی پیچیده‌ای منتج می‌شوند. ساده‌سازی‌های عمده‌ای در این مدل به منظور حل این معادلات به صورت هرچه صریح و روشن مورد نیاز خواهد بود، و در نتیجه راه حل‌های عددی مورد استفاده قرار می‌گیرند.
- مدل‌های ریاضی کاهش یافته: این مدل‌ها را می‌توان به ۲ گروه عمده تقسیم کرد:
 - مدل‌هایی که براساس قوانین فیزیکی- شیمیایی هستند و فرآیند رنگرزی را توصیف می‌کنند، و معادلات ریاضی را به طور صریح و روشن معرفی می‌کنند، اما این مدل‌ها در توصیف جریان مایع رنگزا در اطراف ماشین‌آلات رنگرزی و در درون بسته محدودیت دارند. این مدل‌ها به طور کلی با هدف تعیین شرایط رنگرزی احتمالی برای ارائه منحنی رمق‌کشی مطلوب و مشخص مورد استفاده قرار می‌گیرند.

– مدل‌هایی که شرایط رنگرزی را شبیه‌سازی می‌کنند که در آنها هیچ مهاجرت رنگرزایی رخ نداده است، و جریان سیال تنها توسط یک مکانیزم انبوه اتفاق می‌افتد. این مدل‌ها براساس معادلات ریاضی صریح و روشن پایه‌گذاری می‌شوند که اجازه تعیین یکنواختی درون بسته را برای یک سناریوی رنگرزی در "بدترین حالت" می‌دهند. از آنجائی که تعدادی عوامل ساده‌سازی در این مدل استفاده می‌شود، معادلات تعریف شده توسط این مدل‌ها عموماً آسان‌تر هستند.

۱.۵.۳. مطالعات مک گریگور^۱

مک گریگور [۳۷] شاید اولین نفری بود که پیشنهاد داد معادله نفوذ جابه‌جائی در دو بُعد را می‌توان برای بیان سرعت تغییر غلظت در محلول به صورت مجموع بخش‌ها از نفوذ ماده حل شده و بخش‌ها از حرکت عناصر محلول از یک نقطه به نقطه دیگر استفاده کرد. او معادله نفوذ جابه‌جائی را در نماد برداری به کار برد.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (v \cdot \text{grad})c = D\nabla^2 c \quad [۴۴-۳]$$

که در آن c غلظت رنگزا در محلول، t زمان، D ضریب نفوذ محلول آبی (یا ضریب پراکندگی به صورتی که در بخش ۳.۳. تعریف شد) و v بردار نشان دهنده سرعت حرکت سیال است.

مک گریگور رویکرد لویچ^۲ [۳۸] را در حل مسئله نفوذ جابه‌جائی برای یک صفحه صاف غوطه‌ور شده در جریان ثابت محلول (غلظت c^∞) در سرعت جریان اصلی v^∞ با در نظرگیری تنها یک مدل دو بُعدی ادامه داد. در این مدل، مختصات y بر سطح عمود است و مختصات x موازی با آن و در جهت جریان است، مبدا سیستم مختصات در نقطه شروع صفحه واقع شده است. او فرض کرد که $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$ ، یعنی نفوذ عمدتاً در جهت یا خارج از سطح در امتداد محور y رخ می‌دهد، در نتیجه معادله ۴۴-۳ شکل بسیار ساده‌تری را به خود می‌گیرد. علاوه بر این، او سپس حالت پایدار نفوذ جابه‌جائی ($\frac{\partial c}{\partial t} = 0$) را در نظر گرفت؛ بنابراین:

¹ McGregor

² Levich

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} = v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} \quad [۴۵-۳]$$

حداکثر شار ممکن ماده حل شده برای سطح، یا بیشینه نرخ ممکن رنگرزی با حل معادله ۴۵-۳ برای شرایط مرزی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} c &\rightarrow c_0 \text{ as } y \rightarrow \infty \\ c &= 0 \text{ at } y = 0 \end{aligned} \quad [۴۶-۳]$$

با این حال، همان طور که مک‌گریگور نشان داد [۳۷]، راه حل را تا مشخص نبودن رفتار v_x و v_y نمی‌توان به دست آورد. این مستلزم آن است که معادلات هیدرودینامیکی حرکت سیال از پیش حل شده، یا اینکه شکل خاصی از راه حل فرض شده باشد.

فعالیت او بیشتر با حل معادلات ناویر-استوکس سروکار داشت. در مسئله نفوذ جابه‌جائی ذکر شده در بالا، لویچ قادر بود نشان دهد که معادله ۱۱-۳ را می‌توان ساده و حل کرد، زیرا، در یک جریان حالت پایدار، کمیت‌های $\frac{\partial v_x}{\partial t}$ و $\frac{\partial v_y}{\partial t}$ صفر هستند، همچنین رابطه روبه‌رو برقرار است $\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}$ ، و نیروهای خارجی نادیده گرفته می‌شوند. در نتیجه، معادله ۱۱-۳ برای جهت x را می‌توان به صورت زیر کاهش داد:

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \quad [۴۷-۳]$$

و معادله پیوستگی می‌شود:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad [۴۸-۳]$$

با پیروی از شرایط مرزی:

$$v_x = v_y = 0 \text{ at } y = 0$$

$$v_x \rightarrow v_0 \text{ as } y \rightarrow \infty$$

[۴۹.۳]

لویچ این مجموعه معادلات را به منظور ارائه عباراتی برای v_x و v_y که بتوانند در معادله ۳-۴۵ جایگزین شوند، حل کرد و سپس مسئله نفوذ جابه‌جائی را به صورت صحیح و کامل جواب داد.

فعالیت مک گریگور پیچیدگی کامل برخی مشکلات ذاتی را در پیش‌بینی دقیق تاثیر نرخ جریان بر نرخ رنگریزی نشان داد. مدل لایه مرزی نفوذی ذکر شده در مقاله او را می‌توان به عنوان ساده‌ترین و مفیدترین راه حل برای حل مشکل یافت.

۲.۵.۳. مطالعات هافمن^۱ و مولر^۲

هافمن و مولر [۳۹] مدل ریاضی ساده‌ای را که شامل جریان یکنواخت در سرتاسر بسته و نفوذ فیک^۳ رنگزا درون لیف است گسترش دادند. توزیع رنگزا درون بسته و درجه یکنواختی در شرایط ساده شده‌ای، محاسبه می‌شوند. در مطالعه آنها، نویسندگان قاعده کلی پایداری جرم درون بسته را به کار بردند، که این قاعده جابه‌جائی رنگزا توسط جریان مایع و نفوذش درون لیف را به هم مرتبط می‌سازد. مطالعات هافمن و مولر در قالب زیر نوشته شد:

$$\left(1 - \frac{s_p}{s_f}\right) \frac{\partial C_L}{\partial t} = -q \frac{\partial C_L(x,t)}{\partial x} - s_p \frac{\partial M_F}{\partial t} \quad [۵۰-۳]$$

C_L غلظت حجمی در مایع رنگزا در زمان t در صفحه x و در درون بسته است، M_F جرم رنگزای جذب شده بر جرم لیف، در زمان t و در صفحه x ، s_p تراکم بسته، s_f تراکم لیف و q حجم جریان بر زمان و مساحت بسته را نشان می‌دهند.

نفوذ رنگزا از سطح به درون الیاف از معادله دوم فیک پیروی می‌کند و برای نفوذ شعاعی به درون یک سیلندر دایره‌ای همگن به صورت زیر اعمال می‌شود:

¹ Hoffman

² Mueller

³ Fickian diffusion

$$\frac{\partial C_F(r, x, t)}{\partial t} = D(t) \left[\frac{\partial^2 C_F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_F}{\partial r} \right] \quad [51-3]$$

جرم رنگزای جذب شده توسط جرم واحد الیاف در زمان t و مکان x به وسیله معادله زیر ارائه می‌شود:

$$M_F(x, t) = \frac{2}{r_F^2 \rho_F} \int_0^{r_F} C_F(r, X, t) r dr \quad [52-3]$$

برای حل معادله ۳-۵۰، نویسندگان سپس فرض کردند که یک رابطه خطی بین C_F و C_L (غلظت رنگزای بر روی الیاف) وجود دارد:

$$C_F(r_F, x, t) = k C_L(x, t) \quad [53-3]$$

نویسندگان این مجموعه معادلات را با شرایط اولیه و شرایط مرزی مناسب برای حالت‌های رنگرزی پایدار، و جریان یکنواخت مایع بدون هیچ گونه برگشتی حل کردند. روش تبدیل لاپلاس برای حل مورد استفاده قرار گرفت، و معادلات تبدیل به روشنی حل شدند.

نتایج در تعدادی نمودار ارائه شدند، که توزیع رنگزا را در زمان‌های مختلف، در طول ضخامت کل بسته، و همچنین در طول شعاع هر لیف مشخص و در مکان‌های مختلف در بسته نشان داد. بنابراین، فرآیند رنگرزی را می‌توان آشکارا از مختصر نتایج به‌دست آمده توسط شبیه‌سازی مدل، تجزیه و تحلیل کرد.

می‌توان مشاهده کرد که، اگرچه مطالعات هافمن و مولر مینا و اساسی در دستیابی دقیق به توصیف توزیع رنگزا در هر مکان در سیستم به‌طور مکانیکی بود، اما برخی فرضیات، مانند: یکنواختی جریان مایع، خطی بودن رابطه جذب، و نادیده گرفتن عبارت پراکندگی در حین انتقال رنگزا و غیره کاملاً بازدارنده و دست و پاگیر بودند، و اینها اعتبار مدل‌شان را در طیف گستره‌ای محدود کرد.

۳.۵.۳. مطالعات نایس^۱ و رِن^۲

نایس و رِن [۴۰، ۴۱] مدلی را برای تعیینِ عددیِ کلِ خطای رسوبِ رنگرزی گسترش دادند. مدل ریاضی آنها معادله پراکندگی جابه‌جائی را که شرح دهنده موازنه جرم بین رنگزا در مایع و رنگزا در لیف در یک زمان و مکان معین درون بسته بود، به‌کار گرفت.

$$\xi \frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(r,t)}{\partial r^2} - \frac{F}{2\pi r L} \frac{\partial C(r,t)}{\partial r} - (1-\xi) \frac{\partial M(r,t)}{\partial t} \quad [۵۴-۳]$$

که در آن $C(r,t)$ و $M(r,t)$ به‌ترتیب غلظت رنگزا در مایع و بر روی لیف در فاصله r از مرکز بسته در زمان t هستند، L ارتفاع، ξ فضای خالی بسته، F نرخ جریان حجمی و D ضریب پراکندگی برای حرکت مایع رنگزا در بسته هستند.

رِن [۴۱] و ایلِت^۳ [۴۲] تاثیر جریان پراکنده را در رنگرزی بسته نخ بحث کردند. جریان پراکنده برای کاهش گرادیان غلظت مایع رنگزا که از طریق بسته جریان یافته در نظر گرفته می‌شود، و منجر به توزیع بسیار یکنواخت رنگزا در مایع درون بسته نخ می‌شود. از آنجائی که آنها در نظر داشتند تا مدل رنگرزی در بدترین حالت را گسترش دهند، لذا از تاثیر جریان پراکنده چشم‌پوشی کردند و نتایج ناشی از مدل سازی‌شان نیز توزیع بسیار نایکنواخت رنگزا را نسبت به آنچه در عمل اتفاق افتاده است، نشان خواهد داد.

علاوه بر این، آنها فرض کردند که نرخ جذب رنگزا از سینتیک‌های مرتبه اول پیروی می‌کند، و ثابت تناسب ممکن است با زمان تغییر کند.

$$\left(\frac{1-\xi}{\xi} \right) \frac{\partial M(r,t)}{\partial t} = K(t)C(r,t) \quad [۵۵-۳]$$

بنابراین، معادله ۵۴-۳ به‌صورت زیر ساده شد:

¹ Nobbs

² Ren

³ Ilett

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = -\frac{F}{2\pi r L \xi} \frac{\partial C(r,t)}{\partial r} - K(t)C(r,t) \quad [56-3]$$

$K(t)$ توسط نویسندگان به‌عنوان تابعی از زمان و مستقل از غلظت‌های موضعی رنگزای C و F فرض شد. تصدیق شد که این فرض ممکن نیست در شرایط واقعی کاملاً درست باشد، اما آنها باور داشتند که فرض فوق تقریب درستی در موارد خاص نخ‌های اکریلیکی رنگرزی شده با رنگزاهای کاتیونی خواهد بود.

نابس و همکارانش فعالیت در بهینه‌سازی فرآیند رنگرزی را به‌صورت کامل ادامه دادند، از جمله کنترل متغیرهای دیگر مانند: نرخ جریان، برگشت جریان و افزایش کنترل شده رنگزاهای و مواد کمکی. [۴۳، ۴۴]. این رویکرد به الگوریتم‌های کنترلی بسیار انعطاف‌پذیر نیاز دارد، و به جای تبعیت از یک چرخه ساده‌ی از پیش تنظیم شده به وضعیت کنونی عکس‌العمل نشان می‌دهد.

۴.۵.۳. مطالعات پرلی^۱ و وای^۲

پرلی و وای [۴۵] مدلی را برای توصیف انتقال رنگزا در سیستم رنگرزی بسته نخ ارائه دادند. مکانیزم‌های پراکندگی، جابه‌جایی، جذب و واجذب رنگزا به درون و از بسته الیاف را شامل شد. معادلات حاکم بر توصیف توزیع رنگزا در بسته نخ شامل یک معادلات دیفرانسیل است:

$$\varepsilon \left(\frac{\partial C}{\partial T} + U \frac{\partial C}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \right) = (1 - \varepsilon) \frac{\partial Q}{\partial T} \quad [57-3]$$

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial Q}{\partial T} = \varepsilon k_a (Q_M - Q)C - (1 - \varepsilon) k_d Q \quad [58-3]$$

که در آن C و Q به‌ترتیب غلظت رنگزا در مایع و بر روی لیف هستند، ε فضای خالی بسته، U سرعت انبوه و D ضریب پراکندگی برای حرکت مایع در بسته نخ هستند. معادله ۳-۵۷ از موازنه جرمی رنگزا در هر نقطه در بسته، با به حساب آوردن فرآیندهای جریان انبوه، پراکندگی محوری و حذف رنگزا از

¹ Burley

² Wai

مایع، مشتق می‌شود. آنها فرض کردند که فرآیند هم‌دما است (سازگار با شیوه‌های صنعتی) و جریان یکنواخت و محوری است.

معادله (۳-۵۸) فرآیندهای جذب و واجذب را در سطح لیف با ضرایب جذب و واجذب k_a و k_d و همچنین Q_M مقدار اشباع حداکثری لیف را تعیین می‌کند. این معادله در حالت پایدار به ایزوترم جذب لانگمیر سوق می‌یابد.

موازنه جرمی رنگزا در ورودی و خروجی بسته شرایط مرزی تعریف شده‌ای را توسط دانک ورتس^۱ ارائه می‌دهد.

$$U(C - C_{in}) = DC_X \text{ at } X=0 \quad [۵۹.۳]$$

$$U(C - C_{out}) = DC_X \text{ at } X=1 \quad [۶۰.۳]$$

در مشتق‌گیری از این معادلات، نویسندگان فرض کردند که حجم مایع به صورت آنچه که به کالا وارد شده، عبور کرده است و یا از آن خارج شده حفظ شد. C_{in} و C_{out} به ترتیب مقادیر غلظت مایع درست قبل از ورود به درون بسته و درست بعد از خروج از آن هستند.

برلی و همکارانش مجموعه معادلات فوق را توسط روش‌های تفاضل محدود حل کردند و نتایج را در قالب تعدادی نمودار که نشان دهنده تغییرات در غلظت رنگزا در نقاط مختلف ماشین‌آلات رنگریزی با گذر زمان بوده، ارائه دادند. تلاش‌هایی برای نشان دادن تاثیر تعداد ماشین‌آلات طراحی شده و شرایط عملیات بر نتیجه‌ی رنگریزی صورت گرفت.

مدل برلی و همکارانش از نظر تعداد موقعیت‌های عملیاتی در نظر گرفته شده جامع و فراگیر است. رویکرد سیستماتیک با آنچه که در تجزیه و تحلیل مهندسی برخی پیچیدگی‌های عملی به کار رفته است، مشخص می‌شود، اما مدل برلی برای سازگاری سینتیک‌های مختلف جذب رنگزا مانند آنهایی که با تجزیه خطی یا ایزوترم‌های فروندلیچ در ارتباط هستند، طراحی شد. همچنین، در معادلات ۳-۱۳ و ۳-۴۱ سرعت درون شبکه‌ای (U) تعریف نشد.

¹ Danckwerts

و ثوقی [۳۲] کار برلی و وای را ادامه داد، و بیشتر مدلی را برای توصیف نفوذ رنگزا به درون لیف گسترش داد. این معادلات به صورت عددی با استفاده از شرایط مرزی مناسب برای به دست آوردن روابطی بی بُعد برای جریان‌های محوری و جریان‌های شعاعی حل شد.

۵.۵.۳. مطالعات تلجین^۱

تلجین [۴۶] تاکید کرد که، به منظور شبیه‌سازی انتقال جرم در رنگرزی، معادلات گسترش یافته باید با یک معادله برای انتقال جابه‌جائی در بسته نخ همراه شوند:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{X_0 + X} \frac{\partial}{\partial X} [(X_0 + X)UC] \quad [۶۱-۳]$$

$$U = \frac{U_0 X_0}{X_0 + X} \quad [۶۲-۳]$$

U سرعت جریان مایع در هر نقطه در طول X است و C و A به ترتیب غلظت رنگزا در مایع و بر روی لیف هستند. لازم به ذکر است که آنها همچنین مؤلفه پراکندگی را نیز نادیده گرفتند.

اگرچه این پژوهشگران تشخیص دادند که جابه‌جائی نقش بسیار مهمی را در انتقال رنگزا در سیستم سیال ایفا می‌کند، اما آنها برای تعریف سرعت جریان درون کانال آزاد و مجموعه نخ در طول رنگرزی برای استفاده در یک فرم ریاضی دقیق و درست موفق نبودند. به منظور بررسی انتقال جرم جابه‌جائی برای مواد نساجی، بیان ریاضی این انتقال در روند جریان محلول در اطراف یک لیف و از طریق یک لایه لیف توسط تلجین پیشنهاد شد [۴۷]، او یک لیف استوانه‌ای را با جریان مایع متقاطع با رنگزای حل شده، مدل‌سازی کرد. فرآیند نفوذ ثابت در نزدیکی سطح سیلندر در مورد یک لایه مرزی نازک توسط معادله ۳-۶۳ توصیف شد، که در مختصات قطبی است:

$$V_r \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{V_\theta}{r} \frac{\partial C}{\partial \theta} = 0 \quad [۶۳-۳]$$

^۱ Telegin

برای شرایط مرزی:

$$C(R, \theta) = C_0, C(\infty, \theta) = C_s, C(r, 0) = C(r, \pi) = C_s \quad [۶۴-۳]$$

مولفه‌های V_r و V_θ به‌عنوان راه حل معادلات ناویر-استوکس ثابت برای جریان مایع در اطراف یک لیف تعیین شدند [۳۹]. نویسندگان سپس آنچه که آنها ادعا می‌کردند تقریب اُسین^۱ بود را برای توصیف مولفه‌های میدان سرعت V_r و V_θ و همچنین فشار هیدرولیکی P استفاده کردند:

$$V_r = \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\nu}{U} \frac{\partial \chi}{\partial r} - \chi \cos \theta \quad [۶۵-۳]$$

$$V_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \frac{\nu}{Ur} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} + \chi \sin \theta \quad [۶۶-۳]$$

$$P = -\rho U \frac{\partial \varphi}{\partial r} \cos \theta \quad [۶۷-۳]$$

که در آن توابع φ و χ مطابق با معادلات ۶۸.۳ و ۶۹.۳ تعیین شدند:

$$\varphi = A_0 \ln r + A_1 \frac{\cos \theta}{r} + A_2 \frac{\cos 2\theta}{r^2} + \dots \quad [۶۸-۳]$$

$$\chi = -U + \exp\left(\frac{Ur}{2\nu} \cos \theta\right)$$

$$\left[B_0 K_0\left(\frac{Ur}{2\nu}\right) + B_1 \frac{\partial}{\partial x} K_0\left(\frac{Ur}{2\nu}\right) + B_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{Ur}{2\nu}\right) + \dots \right] \quad [۶۹-۳]$$

در آن $A_0, A_1, \dots, B_0, B_1, \dots$ ثابت‌هایی هستند که باید در شرایط مرزی زیر صدق کنند:

¹ Oseen's approximation

$$V_r(R, \theta) = V_\theta(R, \theta) = 0 \quad [۷۰-۳]$$

$$P(R, \theta) = 2\mu \frac{\partial V_r(R, \theta)}{\partial r} \quad [۷۱-۳]$$

برای محاسبات بیشتر، تلجین در نظر داشت که لازم است حرکت مایع در نزدیکی سطح سیلندر به روش ساده‌تری توصیف شود. او روش پُرتودیاکونو^۱ را دنبال کرد، با استفاده از ویژگی‌های تابع K° برای استدلال‌های کوچک، و انجام تبدیلات لازم با استفاده از معادلات $۳-۶۵ - ۳-۶۷$ و با در نظرگیری معادلات $۳-۶۸ - ۳-۷۱$ ، عبارات زیر را به دست آورد:

$$V_r = \frac{U \cos \theta}{\gamma - 2 \ln(Re)} \left[-1 + 2 \ln \left(\frac{r}{R} \right) + \left(\frac{R}{r} \right)^2 \right] \quad [۷۲-۳]$$

$$V_\theta = \frac{U \sin \theta}{\gamma - 2 \ln(Re)} \left[-1 - 2 \ln \left(\frac{r}{R} \right) + \left(\frac{R}{r} \right)^2 \right] \quad [۷۳-۳]$$

که در آنها $\gamma = 1 - 2C + 2 \ln 4 \approx 2.61816$ و $C \approx 0.5772$ (ثابت اویلر) است.

مطالعه تلجین و همکارانش پیشرفت بسیاری را در تاثیر عامل جابه‌جائی بر معادله پراکندگی جابه‌جائی با تعریف سرعت جریان به کمک اصل ریاضی دقیق و درست فراهم کرد. با این حال، از آنجائی که نویسندگان تلاش کردند نتایج را با استفاده از روش‌های تحلیلی به دست آورند، راه‌حل دقیق مسئله $۳-۶۳$ برای یک سطح جامد را می‌توان تنها در جائی که محلول با سرعت ثابتی از یک شی با شکل هندسی ساده جریان یافته است، به دست آورد.

۶.۵.۳. مطالعات شانون^۲ و همکارانش

شانون و همکارانش [۱۱] مدل جریانی را گسترش دادند که، با استفاده از روش تفاضل محدود، نمودارهای فشار و سرعت را براساس هندسه بسته تعریف شده توسط کاربر، نمودار نفوذپذیری و خواص

^۱ Protodiakonov's method

^۲ Shannon

سیال پیش‌بینی می‌کند. مدل جریان توسط تلفیق معادله پیوستگی برای جریان سیال در محیط متخلخل به‌دست آمد:

$$\varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} = -(\nabla \rho v_0) \quad [74-3]$$

و طبق قانون دارسی:

$$v_0 = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho g) \quad [75-3]$$

که در آن v_0 به سرعت سطحی سیال، ρ چگالی سیال، μ گرانروی سیال، ε تخلخل بسته نخ، k نفوذپذیری بسته نخ، p فشار، g نیروی بدنه و t زمان اشاره دارند.

نویسندگان بیشتر کمیت موجود در پرانتز را در سمت راست معادله ۷۵-۳ به‌صورت زیر تعریف کردند:

$$p = \nabla p - \rho g \quad [76-3]$$

سپس آنها معادلات ۷۴-۳ - ۷۶-۳ را با هم ادغام کردند تا رابطه زیر به‌دست آید:

$$\varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \left(\frac{\rho k}{\mu} \nabla p \right) \quad [77-3]$$

برای هندسه استوانه‌ای شکل و پیوسته (تقارن محوری)، جریان‌های تراکم ناپذیر، معادله ۷۷-۳ ممکن است ساده‌تر شود تا رابطه زیر به‌دست آید:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_r(r, z) \frac{\partial p(r, z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_r(r, z) \frac{\partial p(r, z)}{\partial z} \right) = 0 \quad [78-3]$$

$k_z(r,z)$ و $k_r(r,z)$ به ترتیب نفوذپذیری‌ها در جهت‌های شعاعی و محوری هستند، که با موقعیت بسته تغییر می‌کنند. برای بسته ایزوتروپیک، k_r و k_z با هم برابر و مستقل از موقعیت خود در بسته هستند. در این حالت، معادله ۳-۷۸ به معادله لاپلاس کاهش می‌یابد:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p(r,z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 p(r,z)}{\partial z^2} = 0 \quad [۷۹-۳]$$

این معادله ممکن است با استفاده از روش جداسازی متغیرها، تحت شرایط مرزی زیر برای جریان از طریق بسته نخ حل شود [۱۱]:

$$p(r=r_i, z) = p_i \quad [۸۰-۳]$$

$$p(r=r_o, z) = p_o \quad [۸۱-۳]$$

$$p(r>r_i, z=0) = p_o \quad [۸۲-۳]$$

$$p(r>r_i, z=h) = p_o \quad [۸۳-۳]$$

که در آن r_i و r_o به ترتیب شعاع داخلی و خارجی بسته، h ارتفاع بسته و p_i و p_o فشارهای کل در درون و بیرون بسته هستند.

حل با استفاده از روش‌های تفاضل محدود به دست آمد. مدل منتج شده به کاربر اجازه می‌دهد تا فشارهای بالا دست و پایین دست، هندسه بسته (شعاع داخلی، شعاع خارجی و ارتفاع)، نفوذپذیری‌های محوری و شعاعی و سرعت سیال را مشخص کند. نفوذپذیری‌های محوری و شعاعی متغیر به منظور شبیه‌سازی تأثیرات تراکم بسته تعیین می‌شوند.

مطالعه شانون و همکارانش برای بررسی اثر هندسه و نفوذپذیری بسته بر ویژگی‌های جریان درون آن ارزشمند است. با این حال، آنها ویژگی‌های جریان را قبل از نزدیک شدن به سطح بسته در نظر نگرفتند، که اگر قابل توجه باشد، می‌تواند رفتار جریان در سیستم را تحت تأثیر قرار دهد.

۷.۵.۳. مطالعات شارف^۱ و کارست^۲ به همراه گروهشان

شارف و همکارانش [۱۰] معادله تکانه جریان را برای توصیف سرعت جریان نسبت به مکان و زمان، و همچنین فشار سیال نسبت به ویژگی‌های فیزیکی خود (گرانروی سینماتیکی، چگالی)، برای شرایط مرزی و اولیه داده شده، به کار گرفتند. پایستگی تکانه برای سیالات تراکم‌ناپذیر توسط معادله ناویر-استوکس شرح داده می‌شود:

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + (v \nabla) v \right) = \bar{k} - \nabla p + \mu \Delta v \quad [۸۴-۳]$$

که در آن p فشار استاتیکی، v سرعت، μ گرانروی دینامیکی، ρ چگالی هستند و k شامل نیروهای بدنه خارجی است که نویسندگان آن را به‌عنوان نیروهای اصطکاکی محیط متخلخل که توسط بوبین نخ نشان داده شده است، در نظر گرفتند.

آنها بیشتر فرض کردند که جریان در سرتاسر بوبین‌های نخ آرام است و افت فشار متناسب با سرعت است. بنابراین، گرانروی اغتشاشی و آشفته نادیده گرفته شد. مدل محیط‌های متخلخل برای توصیف بوبین‌های نخ در محاسبات در ادامه به قانون داریسی کاهش یافت. افت فشار در هر یک از سه مختصات (x, y, z) درون ناحیه متخلخل توسط رابطه زیر ارائه می‌شود:

$$\bar{k} = \frac{u}{\alpha} v \quad [۸۵-۳]$$

که در آن a نفوذپذیری به‌دست آمده از فشار دیفرانسیلی تجربی اندازه‌گیری شده در لوله رنگرزی است، μ گرانروی مایع و v مولفه سرعت در جهت x, y, z است.

همراه با معادله پیوستگی، آنها یک سیستم معادلات را شکل دادند که باید با توجه به شرایط مرزی و شرایط اولیه مناسب حل شود. نتایج شبیه‌سازی اطلاعاتی را در مورد فشار استاتیکی و توزیع سرعت در هر بخش از لوله رنگرزی فراهم می‌آورد.

¹ Scharf

² Karst

کارست و همکارانش برای مدل‌سازی جریان مایع رنگزا در رنگرزی بسته‌ای و شعاعی و همچنین برای تعیین اینکه چطور پارامترهای مشخص جریان مایع را در سرتاسر مجموعه لیف تحت تاثیر قرار می‌دهند، از دینامیک سیال محاسباتی (CFD)^۱ استفاده کردند.

لازم به ذکر است که، از بین مدل‌های اشاره شده در بالا، مطالعات هافمن و مولر، نابس و رن، برلی و وای و نیز وثوقی بر انتقال رنگزا از طریق بسته در حین رنگرزی تمرکز دارد، در حالی که مطالعات شانون و همکارانش، شارف و گروهش و نیز کارست و دوستانش بر بررسی ویژگی‌های جریان درون بسته متمرکز است. مک گریگور و تلجین ویژگی‌های جریان را در مدل پراکندگی جابه‌جائی‌شان، با وجود برخی محدودیت‌ها، بررسی کردند. این مدل‌ها در فصل ۴ بیشتر مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۶.۳. منابع

1. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1987), 'Process Engineering Approach to Dyeing Machinery—A Study of Package Dyeing Machine Dynamics', *Chem. Eng. Res. Des.*, **65**, 505 – 13.
2. Sposito, G., Gupta, V.K., Bhattacharya, R.N., 'Foundational theories of solute transport in porous media: A critical review' in G.F. Pinder (ed.) (1983), *Flow through Porous Media*, CML Publishing, Ltd, Southampton, England, pp. 76 – 85.
3. Bear J. (1972), *Dynamics of Fluids In Porous Media*, American Elsevier, New York .
4. Greenkorn R.A. (1983), *Flow Phenomena in Porous Media: Fundamentals and Applications in Petroleum, Water and Food Production*, Marcel Dekker Inc., New York.
5. Darby R. (1996), *Chemical Engineering Fluid Mechanics*, Marcel Dekker, Inc., New York.

¹ Computational Fluid Dynamics (CFD)

6. Denton M. (1964), 'The Permeability of Cross-Wound Cotton Yarn Packages' *Journal of the Textile Institute*, **55**, T228 – T242.
7. Adler P. (1992), *Porous Media: Geometry and Transport*, Butterworth-Heinemann, Stoneham MA.
8. Sahimi M. (1995), *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*, VCH, Boston.
9. McGregor R. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing II– The Mechanism of Fluid Flow through Textiles and its Significance in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 429 – 38.
10. Scharf S., Cleve E., Bach E., Schollmeyer E., Naderwitz P. (2002), 'Three-Dimensional Flow Calculation in a Textile Dyeing Process' *Textile Research Journal*, **72**, 9, 783 – 8.
11. Shannon B., Hendrix W., Smith B., Montero G. (2000), 'Modeling of supercritical fluid flow through a yarn package' *Journal of Supercritical Fluids*, **19**, 1, 87 – 99.
12. Brinkman, H.C. (1947), 'The Calculation of the Viscous Force Exerted by a Flowing Fluid on a Dense Swarm of Particles' *Appl. Sci. Res.*, **A1**, 27 – 34.
13. www.owl.net.rice.edu/~ceng671/CHAP2.pdf , date accessed April 13 2014.
14. www.cmse.ed.ac.uk/MSE3/Topics/MSE-permeability.pdf, date accessed April 13 2014.
15. Van Den Brekel L.D.M and De Jong E.J. (1989), 'Hydrodynamics in Packed Textile Beds' *Textile Research Journal*, **59**, 433 – 40.

16. Kim A.S., Stolzenbach K.D. (2002), 'The Permeability of Synthetic Fractal Aggregates with Realistic Three-Dimensional Structure' *Journal of Colloid and Interface Science*, **253**, 2, 315 – 28.
17. Fowler J.S., Hertel K.L. (1940), 'Flow of a Gas through Porous Media' *J. Appl. Phys.*, **11**, 496 – 502.
18. Lord E. (1955), 'Air Flow through Plugs of Textile Fibres Part 1—General Flow Relations' *Journal of Textile Institute*, **46**, T191 – T213.
19. Fretland W. (1997), 'Controlling Fiber and Flow in Yarn Dyeing' *Am. Dyestuff Reporter*, **86**, 9, 42 – 46.
20. Higdon J.J.L., Ford G.D. (1996), 'Permeability of Three Dimensional Models of Fibrous Porous Media' *J. Fluid Mech.*, **308**, 341 – 61.
21. Crank J. (1975), *The Mathematics of Diffusion*, 2nd edn, Clarendon Press.
22. Burley R., Flower J. (1991), 'Dynamic Behaviour of Dyeing Machinery and Computer Simulation—Some Examples' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **107**, 434 – 8.
23. Kushalkar K.B, Pangarkar V.G. (1990), 'Liquid Holdup and Dispersion in Packed Columns' *Chem. Eng. Science*, **45**, 759 – 63.
24. P. Legentilhomme, J. Legrand, J. Comiti. (1989), 'Axial dispersion in electrolyte flow through anisotropic packed bed' *Journal of Applied Electrochemistry*, **19**, 2, 263 – 70.
25. Van Swaaij W.P.M., Charpentier J.C., Villermaux J. (1969), 'Residence Time Distribution in the Liquid Phase of Trickle-Flow Process' *Chemical Engineering Science*, **24**, 1083 – 95.

26. Han N.W, Bhakta J. (1985), 'Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: Effect of column length and particle size distribution' *AICHE J*, **31**, 277 – 88.
27. <http://lawr.ucdavis.edu/classes/ssc107/SSC107Syllabus/chapter6-01.pdf>, date accessed 13 April 2014.
28. Kramers H., Albreda G. (1953), 'Frequency response analysis of continuous flow systems' *Chem. Eng. Science*, **2**, 173 – 81.
29. Sherman W.R. (1964), 'The Movement of a Soluble Material during the Washing of a Bed of Packed Solids' *AICHE Journal*, **10**, 855 – 60.
30. Wai P.C. (1984), 'Dynamic Behaviour of a Reactive Packed Bed Adsorption System' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
31. Ma, Z., Guiochon, G. (1991), 'Application of Orthogonal Collocation on Finite Elements in the Simulation of Non-Linear Chromatography' *Comput. Chem. Engng*, **15**, 6, Pergamon, 415 – 26.
32. Vosoughi M. (1993), 'Numerical Simulation of Packed Bed Adsorption Applied to a Package Dyeing Machine' PhD Thesis, Heriot Watt University, UK.
33. http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/html/final-20.html, date accessed 13 April 2014.
34. Taylor G.I. (1953), 'Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly Through a Tube' *Proc. Roy. Soc.*, CCXIX 186.
35. Cussler E.L. (1997), *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
36. Shamey M.R. (1997), 'The Computer Control of Continuous Addition Dyeing of Cotton with Reactive Dyes', PhD Thesis, Leeds University, UK.

37. McGregor R., Peters R.H. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing I – The Diffusional Boundary Layer in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 393 – 400.
38. Levich V.G. (1962), *Physicochemical Hydrodynamics*, Prentice-Hall Inc.
39. Hoffmann F., Mueller P.F. (1979), 'Model Calculations on Levelness in Package Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **95**, 5, 178 – 86.
40. Nobbs J., Ren J. (1984), Proceedings of the 13th IFATCC Conference, London.
41. Ren, J. (1985), 'A Thesis on the Development of a Mathematical Model of the Batch Dyeing Process and its Application to the Simulation and Computer Control of a Dyeing Machine' PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, Leeds University.
42. Ilett S. (1990), 'Investigation of the Package Dyeing Process Using a Fixed Bed Reactor as a Model System' PhD thesis, Leeds University, UK.
43. Nobbs, J.H. (1991), 'Control Parameters in Dyeing Machinery Operation' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **107**, 430 – 3.
44. Flower J., Burley R., Nobbs J. (1994), 'New Control Strategies for Batch Dyeing Operations Using Mathematical Modelling and Simulation' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **110**, 167 – 9.
45. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical Simulation of an Axial Flow Package Dyeing Machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33 – 9.
46. Telegin F.Yu., Shormanov A.V., Melnikov B.N. (1997), 'Description of Kinetic Regularities of the Dyeing Process by the Use of Sorption Curve Moments' in: Moryganov, A.P., editor, *Textile Chemistry – Theory*,

Technology, Equipment, Nova Sci. Publishers, Inc., Commack, New York, pp. 87 – 115.

47. Telegin F.Yu. (1998), 'Convective mass transfer in liquid treatment processes' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **114**, 49 – 55.
48. Karst D., Yang Y., Rapp W.A. (2003), 'Modeling Dye Liquor Flow in Fabric Beam Dyeing and Yarn Package Dyeing', *Proceeding of Industry Simulation Conference*, Valencia, Spain, 457–61.

۴. پیشرفت مدل‌های نظری رنگرزی

چکیده: فصل ۴ مدل‌های نظری را برای شبیه‌سازی فرآیند رنگرزی، از نتیجه‌گیری مهم مختصر بر پایه مدل‌های پراکندگی جابه‌جائی و مکانیک سیالات و همچنین مدل‌های توصیف کننده هر دوی انتقال رنگزا و پدیده جریان در طول رنگرزی را ارائه می‌دهد. با استفاده از مفاهیم نظری مورد بحث در فصل‌های گذشته، این سیستم به‌وسیله مجموعه معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی توصیف می‌شود. مدل‌های مورد بررسی عبارت‌اند از معادلات دارسی، ناویر-استوکس و برینکمن. همچنین، شرایط مرزی و اولیه تعریف و شرح داده می‌شوند. راه حل‌های این مدل‌ها که رفتار دینامیکی سیستم را تحت شرایط داده شده از سرعت جریان و پارامترهای رنگرزی ارائه می‌دهند نیز مقایسه می‌شوند.

کلمات کلیدی: پراکندگی جابه‌جائی، مکانیک سیالات، هندسه رنگرزی بسته نخ، مدل‌سازی جریان سیال در رنگرزی، قانون دارسی، معادلات ناویر-استوکس.

۱.۴. مقدمه

در فصل قبل یک تعداد تعاریف ریاضی فرآیند رنگرزی، که توسط پژوهشگران مختلف توسعه یافته، معرفی شد. راه حل معادلات مدل می‌تواند نتایجی را در قالب توزیع رنگزا در سرتاسر سیستم در هر زمان و در طول فرآیند رنگرزی ارائه دهد، که این راه حل بینش و فهم مفیدی را در عملیات رنگرزی بسته نخ در اختیار می‌گذارد. این مدل‌ها را می‌توان به ۳ گروه زیر طبقه‌بندی کرد:

- مدل‌ها بر پایه پراکندگی جابه‌جائی: این مدل‌ها تنها انتقال رنگزا را در طول رنگرزی توصیف می‌کنند. مدل‌ها شامل آثار هافمن و مولر [۱]، نابس و رن [۲-۳]، برلی و وای [۴-۵] و وثوقی [۶] هستند.
- مدل‌ها بر پایه مکانیک سیالات: این مدل‌ها تنها پدیده‌های جریان را در طول رنگرزی توصیف می‌کنند. مدل‌ها شامل آثار شانون و همکارانش [۶]، شارف و گروهش [۸]، کارست و همکارانش [۹] هستند.
- مدل‌هایی که توصیف کننده هر دوی انتقال رنگزا و پدیده‌ی جریان در طول رنگرزی هستند. آثار مک گریگور [۱۰] و تلجین [۱۱] را می‌توان در این دسته قرار داد.

۱.۱.۴. مدل‌ها بر پایه پراکندگی جابه‌جائی

مدل هافمن و مولر [۱] تعدادی از پارامترهای رنگرزی را با کیفیت رنگرزی مرتبط می‌سازد. هافمن و مولر جریان یکنواخت مایع از طریق بوبین و نفوذ فیکی رنگزا را در درون الیاف فرض کردند. توزیع رنگزا در درون بسته و درجه نایکنواختی برای شرایط ثابت رنگرزی، دما، pH و غلظت الکترولیت محاسبه شد. با این حال، مدل این پژوهشگران به نرخ ثابت جریان مایع محدود بود. آنها همچنین از عامل پراکندگی چشم پوشی کردند، و تنها یک ارتباط جذب خطی بین غلظت رنگزا در محلول و بر روی الیاف را در نظر گرفتند.

آثار ناپس و پرن [۲] برخلاف هافمن و مولر راه حلی را که فراهم آورنده غلظت رنگزا در هر مکان در بسته و در هر زمان باشد نشان نمی‌دهد. این آثار ارتباطی را بین یک تعداد متغیرها و نایکنواختی رنگرزی ارائه می‌دهند. سپس نمایش کلی کنترل توسعه یافته و تعریف شده توسط پژوهشگران در دستیابی به هر یک از ۳ منحنی رقم‌کشی - خطی، نمایی یا درجه دوم - با اندازه‌گیری مستقیم و لحظه‌ای شرایط حمام رنگرزی و تغییر دما معطوف شد.

آثار برلی و همکارانش [۴-۵] و وثوقی [۶] یک تعداد شرایط عملیاتی مهم مانند برگشت جریان، تاخیرات زمانی و افزایش (و جذب) محلول رنگزا در طول فرآیند، را در یک تجزیه و تحلیل جامع و دقیق بر پایه اصول مهندسی شیمی، که به‌عنوان روش *MIM* در بخش ۳.۳. طبقه‌بندی می‌شود، در بر می‌گیرد. آثار آنها همچنین توسط فنون عددی قوی برای رسیدگی به مسائل ریاضی پیچیده پشتیبانی می‌شود. با این حال، مدل شبیه‌سازی از تجزیه و تحلیل مراحل مختلف جذب سطحی رنگزا، شرایط مرزی متغیر ناشی از غلظت متغیر رنگزا در محلول و ضریب پراکندگی متغیر ناشی از شرایط رنگرزی متنوع ناتوان است.

یکی از ضعف‌های عمده مدل‌های ذکر شده آن است که خواص جریان را در طول رنگرزی در یک فرم ریاضی دقیق تعریف نمی‌کنند، چراکه، برای هر دو روش *STM* و *MIM*، راه حل دقیق مسئله نفوذ جابه‌جائی برای یک سطح جامد نخست نیازمند حل معادلات هیدرودینامیکی حرکت سیال برای شرایط مرزی مناسب در برابر سرعت جریان اصلی و شکل بسته است. محدودیت دیگر آثار این پژوهشگران آن است که در مطالعات‌شان شبیه‌سازی‌هایی مانند شرایط مرزی متغیر و ضرایب پراکندگی متغیر را که وضعیت‌هایی کاملاً رایج در عمل رنگرزی هستند، در نظر نگرفته‌اند.

۲.۱.۴. مدل‌ها بر پایه مکانیک سیالات

آثار شانون و همکارانش [۷] را می‌توان برای بررسی تاثیر هندسه و نفوذپذیری بسته بر خواص جریان درون بوبین نخ به کار گرفت، زیرا مطالعه‌شان می‌تواند برای پیش‌بینی نمودارهای فشار و سرعت بر پایه هندسه بسته تعریف شده توسط کاربر، نمودار نفوذپذیری و ویژگی‌های سیال استفاده شود. با این حال، مدلی که با ترکیب معادله پیوستگی برای جریان سیال در محیط متخلخل و قانون داریسی به دست آمده بود، تنها سیستم در درون محدوده بوبین را در نظر گرفت و جریان قبل از نزدیک شدن به سطح بسته را به حساب نیاورد، که این اگر قابل ملاحظه باشد، می‌تواند رفتار جریان را در سیستم به‌دلیل تعیین شرایط مرزی تحت تاثیر قرار دهد.

شارف و همکارانش [۸] براساس معادلات ناویر-استوکس، محلول‌های تراکم ناپذیر و متلاطم را در طول فرآیند رنگرزی شبیه‌سازی کردند. آنها فرض کردند که جریان از طریق بوبین‌ها خطی است و بسته نخ را نیز با استفاده از یک مدل متخلخل توصیف کردند. نتایج شبیه‌سازی اطلاعاتی را از فشار استاتیکی و توزیع سرعت در هر بخش لوله رنگرزی فراهم آورد. با این حال، به دلیل فرضیات محدود مورد استفاده در این مدل، از جمله رفتار مستقیم نیروهای اصطکاکی محیط متخلخل که توسط بوبین نخ به‌صورت نیروی بدنه خارجی در معادلات ناویر-استوکس نشان داده شده، ممکن است تنها در یک محدوده اندک شرایط رنگرزی به کار رود.

آثار کارست و همکارانش [۹] دینامیک سیال محاسباتی (*CFD*) را برای مدل‌سازی جریان مایع رنگزا در طول رنگرزی بیم^۱ و رنگرزی بسته نخ و برای تعیین آنکه چگونه پارامترهای معین جریان مایع از طریق بسته‌ها را تحت تاثیر قرار می‌دهند، به کار گرفت. روش *CFD* امکان سازگاری برخی شکل‌های پیچیده، تجزیه و تحلیل‌های سه بُعدی و پارامترهای متغیر را ممکن می‌سازد.

آثار این سه گروه بر توصیف رفتار جریان در طول رنگرزی، بر پایه مکانیک سیالات متمرکز است. آثار این پژوهشگران اطلاعات مفیدی را برای بررسی انتقال رنگزا در طول رنگرزی فراهم آورد. با این حال، هندسه‌های سیستم آنها نسبتاً ساده بودند، زیرا آنها جریان را تنها در محیط‌های متخلخل (مجموعه منسوجات) مدل‌سازی کردند. رفتار جریان در کانال باز (لوله) در نظر گرفته نشد، که این موجب سختی در تعریف شرایط مرزی شد.

¹ Beam dyeing

۳.۱.۴. مدل‌ها بر پایه پراکندگی جابه‌جائی و مکانیک سیالات

مک‌گریگور [۱۰] سعی کرد تا عامل جریان را برای پراکندگی جابه‌جائی رنگزا در رنگری به حساب آورد. او احتمالاً اولین نفری بود که دریافت به‌منظور بررسی پراکندگی جابه‌جائی رنگزا در طول رنگری، به حل معادله هیدرودینامیکی حرکت سیال نیاز بوده است. این راه حل سرعت سیال را در هر نقطه و در هر زمان مشخص کرد. لذا ضروری است تا مقادیر مناسبی برای سرعت‌های سیال موضعی در معادله پراکندگی جابه‌جائی جایگزین شوند، که این باید برای شرایط مرزی مرتبط با شکل مانع، غلظت جریان اصلی ماده حل شده یا رنگزا، و برای شرایط جذب در سطح جامد حل شود. با این حال، بنا بر گفته مک‌گریگور، این روش حتی برای جریان ثابت عبوری از موانع با شکل‌های ساده نیز بسیار دشوار است. او تنها پیچیدگی برخی مشکلات اساسی در پیش‌بینی درست اثر نرخ جریان بر نرخ رنگری را نشان دهد. علاوه بر این، از آنجائی که مک‌گریگور روش *CDE* (بخش ۳.۳ را ببینید) را برای مدل کردن پراکندگی جابه‌جائی رنگزا به کار گرفت، لذا تحقیقاتش در این حیثه تنها توانست در مدل‌سازی پراکندگی رنگزا در محلول نسبت به پراکندگی رنگزا از طریق بسته مورد استفاده قرار گیرد.

گروه تلجین [۱۱] حجم قابل توجه مطالعات خود را بر روی پراکندگی جابه‌جائی مواد حل شده در رنگری انجام دادند. بخشی از مطالعات اولیه در سال ۱۹۹۷، روش *CDE* را به کار گرفت، اما مدل ساده شده انتقال رنگزا، که مشابه با آثار مک‌گریگور است و روش *MIM* [۱۲] را برای مدل کردن انتقال رنگزا در درون محلول به کار گرفته است، نیز استفاده شد. مدل با بیان ریاضی دقیق جریان بر پایه مکانیک سیالات همراه بود. با این حال، مطالعات او تنها می‌تواند توصیف انتقال جرم جابه‌جائی را از جریان سیال به سطح لیف در طول رنگری، بدون توجه به عامل جذب، ارائه دهد. محدودیت روش تحلیلی او موجب می‌شود تا فعالیتش تنها برای شرایط خطی و هندسه‌های ساده سیستم مناسب باشد.

از مطالب ذکر شده در بالا می‌توان مشاهده کرد که، به‌منظور بررسی رفتار دینامیکی سیستم رنگری بسته نخ، مدل جامع‌تری، که انتقال جرم را شرح دهد، همراه با یک بیان ریاضی دقیق برای جریان بر پایه مکانیک سیالات، مورد نیاز است. مطالعه انتقال رنگزا در محلول و در محیط‌های متخلخل و جذب توسط الیاف، همراه با بیان دقیق ویژگی‌های جریان در هر دوی لوله و بوبین، موضوع بسیار پیچیده‌ای است و وظیفه اصلی در مطالعه حاضر است. مدل ریاضی که در این فصل توسعه یافته با هدف ارائه توصیف بسیار کامل فرآیند رنگری بسته و بررسی دقیق شرایطی که ارتباط بیشتری با مشکلات عملی موجود در تجزیه و تحلیل، طراحی و کنترل رنگری بسته نخ داشته، در نظر گرفته می‌شود.

۲.۴. شرح سیستم و فرضیات اساسی

۱.۲.۴. شرح سیستم

در فصل ۲، ماشین‌های رنگرزی بسته‌ای متداول شرح داده شدند. در این فصل مدل ریاضی عملکرد ماشین بوبین رنگ کنی در مقیاس آزمایشگاهی توسعه می‌یابد.

به‌منظور برخورداری از قابلیت انعطاف‌پذیری، ماشین به‌صورت ۳ واحد مجزا طراحی شده است [۱۳]:

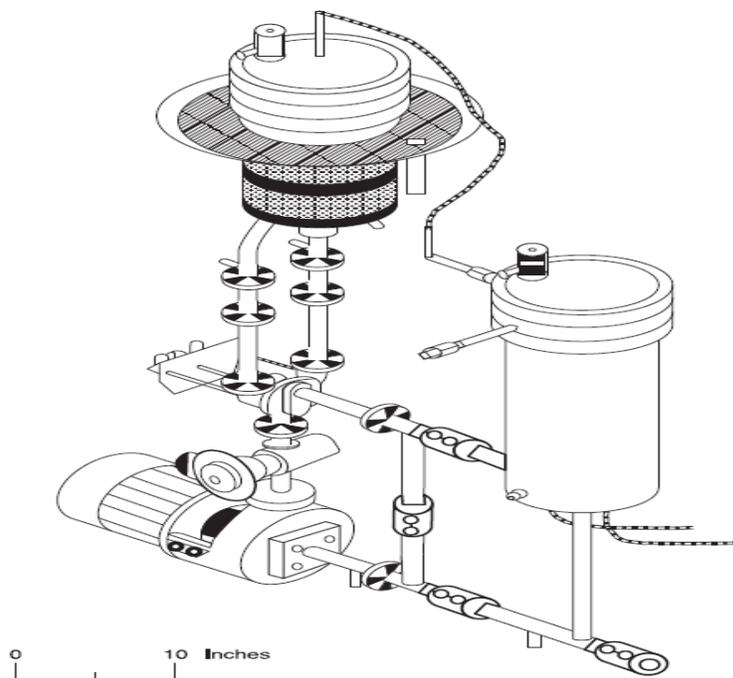
- پاتیل^۱ (تانک اصلی). بخشی از ماشین است که حاوی بسته پیچ خورده‌ی الیاف در حال رنگرزی است.
- کنترل جریان و مدول برگشتی. این بخش ماشین شامل پمپ، دریچه کنترل بخار و یک سوپاپ از ۴ مسیر جریان برگشتی است.
- تانک اختلاط^۲ (استوک^۳). قبل از شروع چرخه رنگرزی محلول رنگزا در تانک اختلاط ترکیب می‌شود. این تانک همچنین به‌عنوان یک تانک انبساط در طول دمادهی به محلول رنگزا نیز عمل می‌کند.

بخش‌های فوق در پیکربندی که در شکل ۱.۴ نشان داده شده به یکدیگر متصل می‌شوند. پاتیل برای نگهداری دو بسته، یکی در بالای دیگری، بر روی دوک مرکزی طراحی می‌شود. رنگزاها (و مواد افزودنی) همگی ممکن است در شروع فرآیند رنگرزی به حمام اضافه شوند، یا ممکن است به‌طور مرحله‌ای یا تماماً پس از شروع چرخش محلول بر طبق طرح‌های مختلف تقسیم‌بندی ارائه شده توسط نرخ‌های جریان ورودی در توابع مختلف زمان اضافه شوند. در حالت دوم، یک ظرف نسبتاً کوچکی که به‌عنوان "تانک اضافی" اشاره شده مورد استفاده قرار می‌گیرد، که حاوی محلول غلیظ شده رنگزاها است و از طریق یک دریچه اضافی به حمام اصلی متصل می‌شود. همچنین ممکن است مایع رنگزا در هر زمان در طول عملیات با باز کردن دریچه تخلیه از سیستم خارج شود.

¹ Kier

² Mixing tank

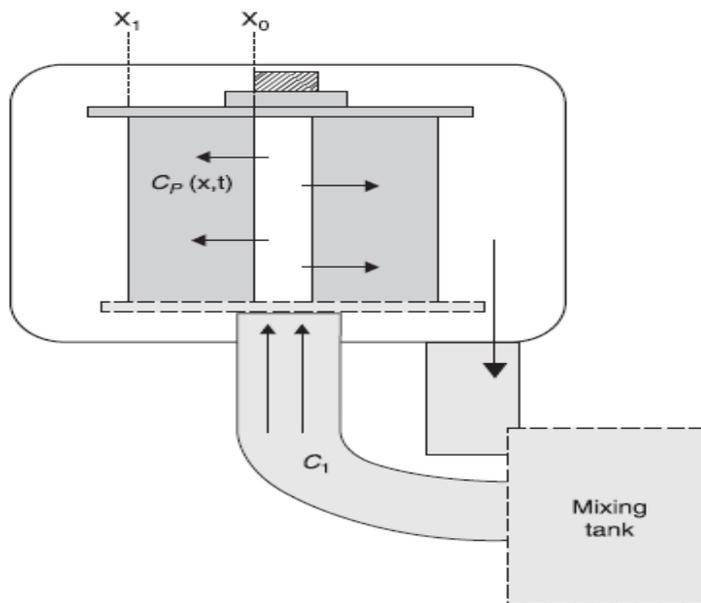
³ Stock



شکل ۱.۴. ماشین رنگرزی ناپیوسته در مقیاس آزمایشگاهی.

نرخ گردش مایع از طریق سیستم را می‌توان اندازه گرفت، و این نرخ گردش ممکن است با تغییر سرعت پمپ نیز تغییر کند. دما در درون ماشین را می‌توان توسط یک سیستم گرمایشی با ورودی هیدرولیکی قابل تنظیم و توسط آب خنک کننده تغییر داد، که آب می‌تواند از طریق سیم‌پیچ‌های نصب شده در سیستم عبور کند. ماشین رنگرزی همچنین به یک سیستم کنترل دمایی قابل برنامه‌ریزی نیز مجهز است که می‌تواند برنامه‌های زمان/دمایی از پیش تنظیم شده‌ای را ارائه دهد. جریان مایع از طریق بسته ممکن است شعاعی باشد، همان‌طور که در شکل ۲.۴ نشان داده شده، و جریان تنها از سمت درون به بیرون اشاره می‌شود. وظیفه لوله اتصال پاتیل و تانک اختلاط است. جزئیات بیشتر در مورد روش و استراتژی کنترل در فصل ۵ ارائه می‌شود.

در طول رنگرزی، محلول رنگزا از طریق لوله و مجموعه نخ پمپ می‌شود، که متشکل از یک شکل سه بُعدی با فضای روزنه‌ای پر شده با محلول رنگزا است. این در محیط بسته جرم لیف است که جذب سطحی رنگزاها در آن اتفاق می‌افتد.



شکل ۲.۴. چرخه جریان در ماشین رنگرزی بسته نخ.

۲.۲.۴. فرضیات اساسی

فرآیند مدلسازی ریاضی حوزه‌ای است که در آن فرضیات همواره به‌عنوان یک نقش کلیدی پذیرفته شده‌اند. برای بررسی فرآیند رنگرزی به منظور کمی، یک سری شرایط اساسی ممکن است فرض شود، که به‌صورت زیر بیان می‌شوند:

- (۱) بسته‌ها به‌طور یکنواخت پیچیده می‌شوند به‌طوری‌که تراکم و تخلخل بسته در سرتاسر بسته و نیز در وسط آنها یکسان است.
- (۲) تراکم و تخلخل بسته‌ها در طول فرآیند رنگرزی ثابت باقی می‌ماند.
- (۳) حمام رنگرزی یک سیال تراکم‌ناپذیر در نظر گرفته می‌شود؛ بنابراین، چگالی حمام رنگرزی در شرایط هم‌دما ثابت است.

- ۴) حمام رنگرزی یک سیال نیوتنی در نظر گرفته می‌شود؛ در نتیجه، گرانروی در شرایط همدمای ثابت است.
- ۵) حمام رنگرزی در طول فرآیند رنگرزی به خوبی هم‌زده می‌شود، به طوری که غلظت رنگزا در عرض ورودی بسته در سراسر حمام رنگرزی می‌تواند یکنواخت اتخاذ شود.
- ۶) انتقال محلول رنگزا در سراسر مجموعه لیفی توسط مدل *MIM* نشان داده می‌شود. بنابراین، رساندن رنگزا از حمام رنگرزی به سطح الیاف در هر مکان در بسته، در نظر گرفته می‌شود که شامل اثرات افزایشی از دو نوع پدیده‌های انتقال: جریان جابه‌جائی و جریان پراکندگی از طریق محیط‌های متخلخل باشد.
- ۷) غلظت رنگزا در سطح لیف وابسته به غلظت رنگزا در محلول درون بسته (غلظت حمام رنگرزی موضعی) مطابق با ایزوترم جذب تعادل رنگرزی است.
- ۸) جذب سطحی رنگزا و هر گونه مواد شیمیائی با الیاف در مقایسه با فرآیند نفوذ بسیار سریع‌تر اتفاق می‌افتد؛ بنابراین، می‌توان فرض کرد که تعادل موضعی بین بخش‌های آزاد و بی‌تحرك ماده نفوذ کننده وجود دارد.
- ۹) دما از طریق حمام رنگرزی، یعنی بسته‌ها و محلول رنگزا، در تمامی زمان‌ها ثابت و یکنواخت است.

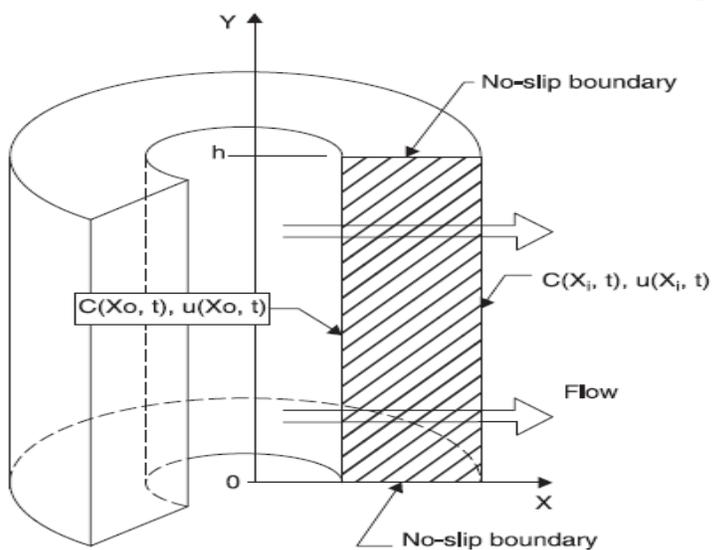
فرضیات اساسی تدوین شده واقعی‌تر از فرضیات هافمن و همکارانش، برلی، وای و وثوقی است، با این حال ممکن است برخی از این فرضیات هنوز هم دقیقاً درست نباشند. فرضیات ۱ و ۲ شرایط ساده شده موقعیت‌های واقعی هستند، زیرا بسته‌ها ممکن نیست که کاملاً یکنواخت پیچیده شوند، و همچنین تراکم و تخلخل بسته نیز ممکن است در طول فرآیند رنگرزی با توجه به جریان حمام و دما تغییر کند. با این حال، تامل و بررسی تغییرات در تراکم و تخلخل بسته در طول فرآیند رنگرزی به مطالعه جامع‌تر تاثیرات این گونه متغیرها و آنهایی که در این کتاب پرداخته نشده نیازمند است.

فرضیات ۳ و ۴ عقلانی هستند و در عمل نیز پذیرفته شده‌اند. فرض ۵ نیز واقع بینانه است، به خصوص برای ماشین‌های بوبین رنگ کنی در مقیاس آزمایشگاهی، زیرا حرکت چرخشی پمپ معمولاً با هدف ایجاد اختلاط موثر مایع آزاد در ماشین رنگرزی صورت می‌پذیرد.

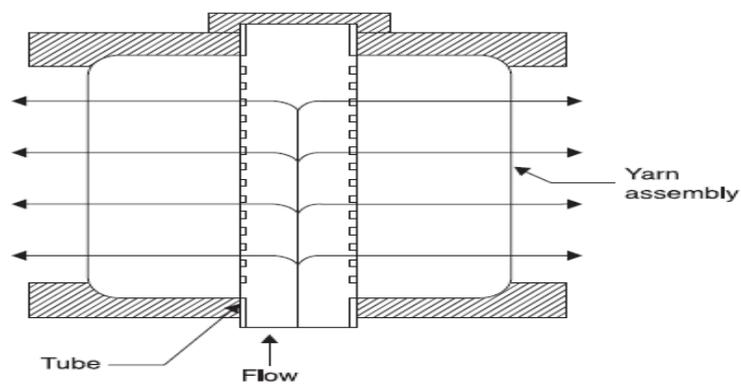
با این حال، فرض بسیار مهم فرض ۶ است، زیرا این فرض جابه‌جائی و پراکندگی را از هم جدا می‌کند. فرضیات ۷ و ۸ یکپارچگی بیشتر عامل جذب سطحی را در مدل نشان می‌دهند. با توجه به نظریه و عمل، این فرضیات منطقی هستند. این فرضیات اساسی، و تعاریف ویژه برای برخی حالت‌های خاص، مبنایی را برای مدل‌سازی ریاضی فرآیند رنگریزی فراهم می‌آورد.

۳.۲.۴. تعریف هندسه سیستم

برای ماشین رنگریزی بسته نخ که در بالا توصیف شد، تعریف روشن هندسه سیستم در شکل ۳.۴ نشان داده می‌شود. فرض می‌شود که محلول رنگزا از طریق بسته در طول فرآیند رنگریزی جابه‌جا می‌شود و جهت جریان عمود بر لایه‌های نخ در بسته است. شکل ۴.۴ هندسه سیستم ساده شده‌ای را در دو بُعد نشان می‌دهد.

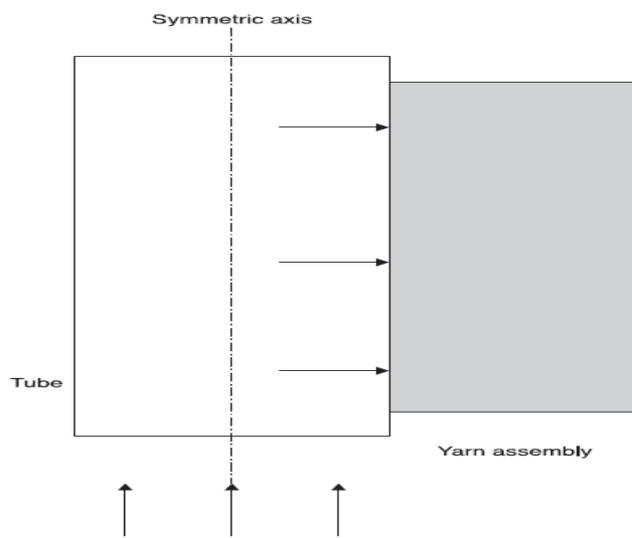


شکل ۳.۴. جریان از طریق بسته.



شکل ۴.۴. جریان از طریق بسته در دو بُعد.

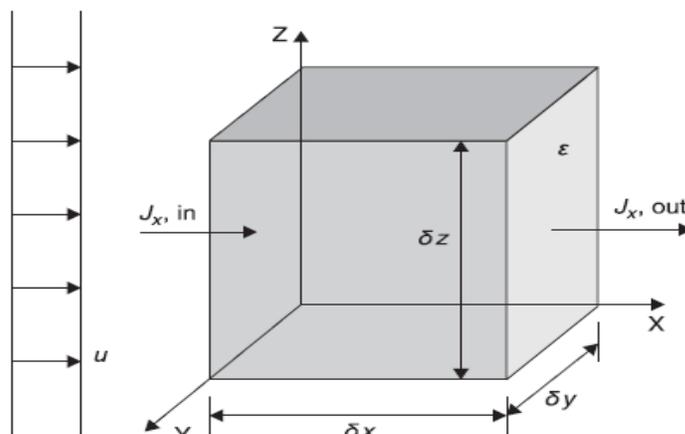
برای ساده‌سازی در محاسبات، فرض می‌شود که فرآیند برای هر دوی انتقال جرم و رفتار جریان در هر دو طرف محور تقارن یکسان است. بنابراین، هندسه سیستم را می‌توان به صورتی که در شکل ۵.۴ نشان داده شده بسیار ساده کرد. تنها سمت چپ خط محور تقارن به صورت هندسه سیستم شرح داده شده در اینجا در نظر گرفته می‌شود.



شکل ۵.۴. هندسه سیستم در دو بُعد.

۳.۴. توسعه مدل ریاضی

براساس هندسه سیستم تعریف شده در بخش قبل، یک حجم کنترل شده دیفرانسیلی سیستم ممکن است، به صورتی که در شکل ۶.۴ نشان داده شده، معرفی شود.



شکل ۶.۴. حجم کنترل شده دیفرانسیلی سیستم.

در این شکل، $J_{x, in}$ و $J_{x, out}$ به ترتیب شار رنگزا در سطوح ورودی و خروجی جریان در جهت x هستند، و ϵ تخلخل بسته است، که توسط معادله ۳-۱۲ و در اینجا توسط معادله ۴-۱ تعریف می‌شود.

$$\epsilon = \frac{\text{Total vol.} - \text{Vol. solids}}{\text{Total volume}} = 1 - \frac{A_{\text{solid}}}{A} = \frac{A_{\text{voids}}}{A} \quad [۱-۴]$$

۱.۳.۴. مشتق معادله دیفرانسیلی انتقال رنگزا با جذب در رنگرزی بسته نخ

مشتق معادله انتقال رنگزا در درون بسته بر اصل انطباق متکی است: جابه‌جائی و پراکندگی را می‌توان به هم اضافه کرد اگر از نظر خطی مستقل باشند. از فصل قبل، نشان داده شد که پراکندگی یک فرآیند تصادفی ناشی از جنبش مولکول‌ها است. به دلیل پراکندگی، هر مولکول در زمان δt یا یک گام به چپ و یا یک گام به راست حرکت خواهد کرد (یعنی $\pm \delta x$). به دلیل جابه‌جائی، نیز هر مولکول به اندازه $u \delta t$ در جهت جریان عرضی حرکت خواهد کرد. این فرآیندها صریحاً مستقل و افزایشی هستند؛ حضور جریان عرضی احتمال این را که مولکول یک گام به راست یا چپ نفوذ خواهد کرد تحت تاثیر قرار نمی‌دهد؛ و

صرفاً چیزی را به این مرحله می‌افزاید. حرکت کلی مولکول $u\delta t \pm \delta x$ است، و لذا شار کلی در جهت x (J_x)، شامل انتقال جابه‌جائی و عبارت پراکندگی، باید به‌صورت زیر باشد:

$$J_x = uC + q_x \quad [۲-۴]$$

ترکیب معادله بالا با معادله ۳-۳ رابطه زیر را ارائه می‌دهد:

$$J_x = uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \quad [۳-۴]$$

هنگامی که موازنه جرم به‌صورت یک جزء سیستم چند جزئی در نظر گرفته شود، در آن صورت موازنه جرم کلی را می‌توان به‌صورت معادله ۴-۴ نشان داد [۱۴]:

$$\text{نرخ جرم کل در بیرون} - \text{نرخ جرم کل در درون} = \text{نرخ تجمع جرم کل} \quad [۴-۴]$$

قانون شار نشان داده شده در شکل ۳.۴ و قانون بقای جرم نشان داده شده در شکل ۴.۴ را نمی‌توان با همدیگر همراه با حجم کنترل شده دیفرانسیلی (CV) که در شکل ۶.۴ به تصویر کشیده شده، جهت استنتاج معادله انتقال رنگزا مورد استفاده قرار داد. برای سمت چپ معادله ۴-۴، معادله ۵-۴ نشان داده می‌شود:

$$\text{نرخ تجمع رنگزای کل موجود در محلول در CV} = \text{نرخ تجمع رنگزای کل در CV} + \text{نرخ تجمع رنگزای کل بر روی الباف در CV} \quad [۵-۴]$$

که در آن:

$$\text{نرخ تجمع رنگزای کل موجود در محلول در CV طی زمان } \delta t = \frac{\delta M_p}{\delta t} \quad [۶-۴]$$

و:

$$\text{نرخ تجمع رنگزای کل بر روی الیاف در CV طی زمان } \delta t = \frac{\delta M_f}{\delta t} \quad [۷-۴]$$

در اینجا δM_p مقدار رنگزای موجود در محلول در یک حجم کنترل شده دیفرانسیلی و طی زمان δt است و δM_f مقدار رنگزا بر روی الیاف در یک حجم کنترل شده دیفرانسیلی و طی زمان δt است. اگر C_p به صورت غلظت رنگزا در محلول در یک حجم کنترل شده دیفرانسیلی (CV) تعریف شود، در آن صورت C_f غلظت رنگزا بر روی لیف در CV و V حجم CV هستند، بنابراین:

$$M_p = C_p \varepsilon V = C_p \varepsilon \delta x \delta y \delta z \quad [۸-۴]$$

$$M_f = C_f (1 - \varepsilon) V = C_f (1 - \varepsilon) \delta x \delta y \delta z \quad [۹-۴]$$

در نتیجه، سمت چپ معادله ۴-۴ می‌شود:

$$\frac{\delta M_p}{\delta t} + \frac{\delta M_f}{\delta t} = \varepsilon \frac{\delta C_p}{\delta t} \delta x \delta y \delta z + (1 - \varepsilon) \frac{\delta C_f}{\delta t} \delta x \delta y \delta z \quad [۱۰-۴]$$

پراکندگی جرمی - جابه‌جائی در درون و بیرون CV شارش می‌یابد، بر پایه معادله ۴-۳، که برای جهت x می‌توان به صورت زیر نشان داد:

$$J_{x, in} = u C_p - D \left. \frac{\partial C_p}{\partial x} \right|_1 \quad [۱۱-۴]$$

$$J_{x, out} = u C_p - D \left. \frac{\partial C_p}{\partial x} \right|_2 \quad [۱۲-۴]$$

در اینجا مکان‌های ۱ و ۲ سطوح جریان ورودی و خروجی در شکل ۶.۴ هستند. به منظور به دست آوردن شار جرم کل، J_x با مساحت سطح CV ($\delta y \delta z = A$) ضرب می‌شود. بنابراین، شار شبکه (سمت راست معادله ۴-۴) در جهت x می‌شود:

$$J_{x, in} - J_{x, out} = \left(uC_p - D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta y \delta z - \left(uC_p - D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \Big|_2 \delta y \delta z \quad [۱۳-۴]$$

در ادامه، لازم است تا روشی جهت ارزیابی $J_{x, out}$ یا J_x در نقطه ۲ تعیین شود؛ برای انجام این امر، یک بسط سری‌های تیلور خطی را می‌توان مورد استفاده قرار داد. فرم کلی بسط سری‌های تیلور در معادله ۴-۱۴ نشان داده می‌شود [۱۵]:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} \delta x + HOTS \quad [۱۴-۴]$$

که در آن HOTS مخفف جملات مراتب بالاتر^۱ است. جایگزینی $J_{x, out}$ برای $f(x)$ در بسط سری‌های تیلور منتج می‌شود به:

$$uC_p \Big|_2 = uC_p \Big|_1 + \frac{\partial(uC_p)}{\partial x} \Big|_1 \delta x + HOTS \quad [۱۵-۴]$$

$$D \frac{\partial C_p}{\partial x} \Big|_2 = D \frac{\partial C_p}{\partial x} \Big|_1 + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta x + HOTS \quad [۱۶-۴]$$

برای بسط سری‌های تیلور خطی، HOTS نادیده گرفته می‌شود. جایگزینی معادلات ۴-۱۵ و ۴-۱۶ در معادله شار شبکه معادله ۴-۱۳، و حذف زیرنویس ۱، روابط زیر را می‌دهد:

$$uC_p \Big|_1 - uC_p \Big|_2 = - \frac{\partial(uC_p)}{\partial x} \delta x \quad [۱۷-۴]$$

و

^۱ Higher-order terms

$$-D \left. \frac{\partial C_p}{\partial x} \right|_1 + D \left. \frac{\partial C_p}{\partial x} \right|_2 = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \delta x \quad [۱۸-۴]$$

بنابراین، شار شبکه برای جهت x می‌شود:

$$-\frac{\partial(uC_p)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [۱۹-۴]$$

برای جهت‌های y و z روند مشابه است، اما با v و w برای مولفه‌های سرعت، داریم:

$$-\frac{\partial(vC_p)}{\partial y} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial y} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [۲۰-۴]$$

$$-\frac{\partial(wC_p)}{\partial z} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad [۲۱-۴]$$

با جایگزینی معادلات ۴-۱۰، ۴-۱۹ - ۴-۲۱ در معادله ۴-۴، و با میل دادن متغیرهای δt ، δx ، δy و δz به سمت صفر، نتایج زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1-\varepsilon) \frac{\partial C_f}{\partial t} &= -\frac{\partial(uC_p)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial x} \right) \\ -\frac{\partial(vC_p)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial y} \right) &- \frac{\partial(wC_p)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C_p}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad [۲۲-۴]$$

یا در نماد برداری:

$$\varepsilon \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1-\varepsilon) \frac{\partial C_f}{\partial t} = -\nabla \cdot (UC_p) + \nabla \cdot (D\nabla C_p) \quad [۲۳-۴]$$

که در آن سرعت جریان عرضی $U=(u,v,w)$ است. سپس معادله ۴-۲۲ (یا ۴-۲۳) با تابع شرح دهنده ارتباط بین C_p و C_f ترکیب شده، تا معادله ۴-۲۴ حاصل شود:

$$\frac{dC_f}{dt} = K_a C^a (1 - bC_f) - K_d C_f \quad [۲۴.۴]$$

$$f = \frac{KC^a}{1 + bKC^a} \quad [۲۵.۴]$$

$$C_f = \frac{KC_p}{1 + KC_p} \quad [۲۶.۴]$$

در اینجا a و b ثابت هستند و $K=K_a/K_b$ ضریب جذب سطحی است.

به منظور حل معادله ۴-۲۳، شرایط مرزی مناسبی باید تعریف شود. با توجه به توضیحات سیستم و هندسه بسته، نشان داده شده در شکل ۳.۴، جریان جابه‌جائی احتمالاً نسبت به نفوذ در جهت جریان بسیار بزرگ‌تر است، و انتقال رنگزا توسط نفوذ ممکن است در این جهت و در سمت جریان ورودی نادیده گرفته شود. مگر آنکه انتقال اصلی رنگزا در درون بسته با جابه‌جائی اتفاق بیفتد، در آن صورت شار در جهت ورود برای شرایط مرزی می‌شود:

$$J \cdot n = U C_1 \cdot n \quad [۲۷.۴]$$

C_1 غلظت رنگزا در محلول در زمان t است و n بردار نرمال واحد است. معادله ۴-۲۷ (در جهت x) نشان می‌دهد که:

$$u C_p(0, t) - D \frac{\partial C_p}{\partial x} = u C_1 \quad [۲۸.۴]$$

همچنین، فرض اینکه گرادیان‌ها در سطح خروجی کوچک هستند نیز منطقی است. به طوری که:

$$\frac{\partial C_p(l, t)}{\partial x} = 0 \quad [۲۹.۴]$$

در تمامی دیگر مرزها، شرایط به صورت زیر فرض می‌شود:

$$J \cdot n = 0$$

[۳۰-۴]

در عمل، این رابطه دلالت دارد بر اینکه گرادیان‌های غلظت در عرض این مرزها صفر هستند، زیرا عبارت جابه‌جائی حذف می‌شود. علاوه بر این، غلظت در $t=0$ برابر با صفر است، که این شرط اولیه زیر را ارائه می‌دهد:

$$C_p(x, 0) = 0$$

[۳۱-۴]

بنابراین شرح کلی تغییر غلظت فاز جامد و سیال در یک زمان و مکان داده شده، مشتق می‌شود. حل هم‌زمان این معادلات رفتار دینامیکی واقعی یک ماشین بوبین رنگ‌کنی را برحسب غلظت فاز جامد و سیال برای زمان و مکان داده شده در سرتاسر بوبین ارائه خواهد داد.

باید توجه کرد که، چون این سیستم یک مدل سه بُعدی است، لذا مناسب است تا از تجزیه و تحلیل به روش اِلمان محدود برای بررسی رفتار دینامیکی سیستم‌ها با هر هندسه مختلف بسته، یا هر جهت جریانی استفاده شود (با تعیین هندسه بسته کاملاً همسان، و شرایط مرزی مناسب). جزئیات بیشتر در ادامه فصل بحث و بررسی می‌شوند.

۲.۳.۴. مدل‌سازی جریان سیال درون بسته

برای محاسبه معادله ۴-۲۳، توزیع سرعت جریان درون بسته $U=(u,v,w)$ باید تعریف شده باشد. این معادله شامل معادله حرکت سیال در محیط‌های متخلخل است. همان‌طور که در فصل ۳ بحث شد، قانون دارسی و معادله برینکمن می‌توانند برای توصیف رفتار جریان درون بسته مورد استفاده قرار گیرند.

به‌منظور ساده‌سازی در تعریف شرایط مرزی سیستم، شاخص مرزی که در شکل ۷.۴ نشان داده شده به‌کار می‌رود. جریان در دامنه متخلخل (مجموعه نخ) را می‌توان با استفاده از قانون دارسی بیان کرد:

$$u_1 = -\frac{k}{\eta} \nabla p_1 \quad [۳۲-۴]$$

$$\nabla \cdot u_1 = 0 \quad [۳۳-۴]$$

که در آن k نفوذپذیری محیط متخلخل، η گرانروی سیال، p_1 فشار و u_1 بردار سرعت در محیط متخلخل (مجموعه نخ) هستند.

فرض می‌شود که سیال از مرزهای بیرونی ۷ و ۸ (نشان داده شده در شکل ۷.۴) عبور نکند. بردار سرعت در مرزها صفر تنظیم می‌شود، که این مطابق با شرط عدم لغزش^۱ است:

$$u = 0 \quad [۳۴.۴]$$

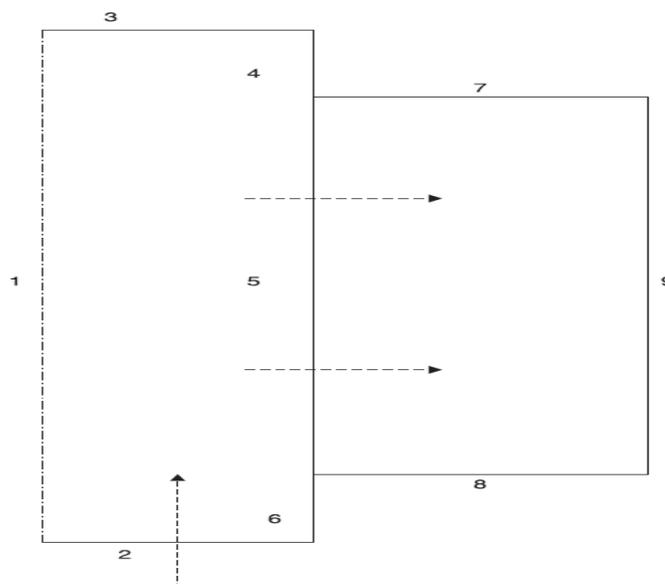
برای مرز ۵، جریان مشخص عمود بر مرز توسط معادله ۴-۳۵ ارائه می‌شود:

$$-\frac{k}{\eta} \nabla p_1 \cdot n = u \quad [۳۵.۴]$$

u سرعت در جهت x است، که متغیری وابسته است و نیاز دارد تا در فاز مایع آزاد^۲ تعیین شود.

^۱ No-slip

^۲ Free liquor



شکل ۷.۴. شاخص مرزی سیستم.

به منظور بررسی تاثیر تنش‌های برشی بر خواص جریان در مجموعه نخ، معادلات برینکمن برای مدلسازی جریان در محیط متخلخل استفاده می‌شوند، که این در معادلات ۳۶-۴ و ۳۷-۴ نشان داده می‌شود.

$$u_2 = -\frac{k}{\eta} \nabla p_2 + \eta \nabla^2 u_2 \quad [۳۶-۴]$$

$$\nabla \cdot u_2 = 0 \quad [۳۷-۴]$$

شرایط مرز ۵ برای معادلات ۳۶-۴ و ۳۷-۴ به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$u_2 = u, v_2 = v \quad [۳۸-۴]$$

در اینجا u و v به ترتیب سرعت در جهت‌های x و y هستند. این سرعت‌ها متغیرهایی وابسته هستند، که نیاز دارند تا در فاز مایع آزاد تعیین شوند.

باید توجه کرد که در معادله ۴-۳۸ سرعت در هر دو جهت x و y براساس رویکرد معادله برینکمن در نظر گرفته می‌شود.

برای مرز ۹، فشار صفر تنظیم می‌شود و شرایط مطلق، که در آن مولفه‌های سرعت در جهت مماس با t تنظیم شده، مورد استفاده قرار می‌گیرند.

$$u \cdot t = 0 \quad [۳۹-۴]$$

$$p = 0 \quad [۴۰-۴]$$

شرایط برای مقدار فشار در مرز ۹ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$p_1 = p_0 \quad [۴۱-۴]$$

می‌توان مشاهده کرد که u ، v و p در عمل به ترتیب سرعت‌های جریان سیال و فشار در سطح بین لوله بوبین و مجموعه نخ^۱ هستند، که در شکل ۵.۴ نشان داده شده‌اند.

تا زمانی که مقادیر u ، v و p مشخص نباشند، راه حلی را برای معادلات ۴-۳۲ و ۴-۳۶ نمی‌توان به دست آورد. این مستلزم آن است که معادلات هیدرودینامیکی حرکت سیال پیش از این حل شوند، یا اینکه فرم خاص راه حل در نظر گرفته شود. بنابراین، توصیف روشن رفتار جریان قبل از ورود مجموعه نخ (یعنی مایع در لوله) مورد نیاز است.

۳.۳.۴ مدل سازی جریان سیال در لوله

به منظور مدل سازی رفتار جریان مایع آزاد (مایع درون لوله)، معادله ناویر-استوکس به کار می‌رود تا سرعت جریان و توزیع فشار را درون مجرای بوبین شرح دهد (شکل ۵.۴ را ببینید).

فرم کلی معادله ناویر-استوکس در فصل قبل بحث شد. در نماد برداری، می‌توان آن را به صورت معادله ۴-۴۲ نشان داد:

¹ Yarn assembly

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla u + (\nabla u)^T) + \rho (u \cdot \nabla) u + \nabla p = F \quad [۴۲-۴]$$

که در آن η گرانروی دینامیکی، ρ چگالی، u میدان سرعت، p فشار و F میدان نیروی حجمی مانند گرانش هستند. باید توجه کرد که این فرمول‌بندی برای تغییرات در گرانروی مجاز است. برای بسیاری سیالات، گرانروی برشی (η) به‌طور قابل توجهی وابسته به دما است، و هرگاه تفاوت‌های دمایی قابل ملاحظه‌ای در دامنه جریان وجود داشته باشد، لازم است تا گرانروی برشی به‌عنوان تابعی از مکان به‌حساب آورده شود. با این حال، فرض می‌شود که محلول رنگزا در ماشین‌های رنگرزی به‌خوبی هم‌زده می‌شود و تفاوت‌های دمایی برای گرانروی برشی به اندازه کافی کوچک هستند تا در سرتاسر سیال یکنواخت اتخاذ شوند، در این حالت معادله ۴-۴۲ می‌شود:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \eta \nabla^2 u + \rho (u \cdot \nabla) u + \nabla p = F \quad [۴۳-۴]$$

علاوه بر این، فرض می‌شود که چگالی محلول رنگزا تقریباً ثابت است، که این به عنوان سیال تراکم ناپذیر اشاره می‌شود. سپس معادله بقای جرم به معادله زیر کاهش می‌یابد:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad [۴۴-۴]$$

در رنگرزی بوبین، محلول رنگزا از طریق لوله و مجموعه نخ بوبین پمپ می‌شود، که این متشکل از یک شکل سه بُعدی با فضای روزنه‌ای پر شده از محلول رنگزا است. بنابراین، فرض منطقی آن است که، در درون مجرای بوبین، تاثیر میدان نیروی حجمی خارجی مانند گرانش نادیده گرفته شود. در نتیجه، برای جریان حالت پایدار می‌توان گفت که:

$$-\eta \nabla^2 u + \rho (u \cdot \nabla) u + \nabla p = 0 \quad [۴۵-۴]$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad [۴۶-۴]$$

این معادله به وضوح شکل خاص معادله حالت برای سیال است. بنابراین، برای یک سیال تراکم ناپذیر (حالتی از محلول رنگزا)، مشروط بر اینکه شرایط مرزی به اندازه کافی شناخته شده باشند، معادلات ۴-۴۵ و ۴-۴۶ برای تعیین $U=(u,v,w)$ و p در درون مجرای بوبین مناسب هستند.

شرط مرزی برای مرز ۱ (نشان داده شده در شکل ۳.۴) در حالت تقارن تنظیم می‌شود، و معین می‌کند که هیچ مولفه سرعتی عمود بر این مرز وجود ندارد، یعنی:

$$u \cdot n = 0 \quad [47-4]$$

فرض می‌شود که سیال از مرزهای بیرونی ۳، ۴ و ۶ عبور نمی‌کند. بردار سرعت در مرزها صفر تعیین می‌شود، که این مطابق با شرط عدم لغزش است:

$$u = 0 \quad [48-4]$$

بردار سرعت در مرز ۲، به عنوان مرزی با جریان ورودی، میدان سرعت سیال به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$u \cdot n = (u_0, v_0) \quad [49-4]$$

از آنجائی که جریان تنها در جهت y است، لذا سرعت جریان ورودی در مرز ۲ را می‌توان v_0 تعیین کرد و سرعت در جهت x را صفر تنظیم کرد. شرایط برای مرز ۵، توسط تنظیمات زیر و با هدف به هم پیوستن قانون داریسی (یا معادله برینکمن) و کمیت فشار، تعریف می‌شود:

$$p = p_1 \quad [50-4]$$

در اینجا p_1 (یا p_2) یکی از متغیرهای وابسته در قانون داریسی (یا معادله برینکمن) است.

معادلات حاکم بر انتقال رنگزا، که شامل عوامل جابه‌جائی، نفوذ و جذب هستند، با شرح جریان در هر دو مایع آزاد (مایع رنگزای درون مجرای بوبین) و محیط‌های متخلخل (بوبین نخ) ادغام می‌شوند، تا

یک مدل ریاضی کاملی برای ماشین‌آلات بسته نخ ایجاد کنند. راه‌حل‌های مدل رفتار دینامیکی سیستم را در شرایط داده شده‌ی نرخ جریان و پارامترهای رنگرزی بیان می‌کند. نتایج عمدتاً به صورت گرافیکی، به منظور بیان تغییرات غلظت رنگزا بر روی لیف طی زمان و مکان برای یک جریان داده شده، نشان داده می‌شوند.

۴.۴. منابع

1. Hoffmann F., Mueller P.F. (1979), 'Model Calculations on Levelness in Package Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **95**, 5, 178 – 86.
2. Nobbs J.H., Ren J. (1984), Proceedings of the 13th IFATCC Conference, London, UK.
3. Ren J. (1985), 'A Thesis on the Development of a Mathematical Model of the Batch Dyeing Process and its Application to the Simulation and Computer Control of a Dyeing Machine' PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, Leeds University.
4. Wai P.P.C. (1984), 'Dynamic Behaviour of a Reactive Packed Bed Adsorption System' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
5. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical Simulation of an Axial Flow Package Dyeing Machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33 – 9.
6. Vosoughi M., 'Numerical Simulation of Packed Bed Adsorption Applied to a Package Dyeing Machine' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
7. Shannon B., Hendrix W., Smith B., Montero G. (2000), 'Modeling of Supercritical Fluid Flow through a Yarn Package' *Journal of Supercritical Fluids*, **19**, 1, 87–99.

8. Scharf S., Cleve E., Bach E., Schollmeyer E., Naderwitz P. (2002), 'Three-Dimensional Flow Calculation in a Textile Dyeing Process' *Textile Research Journal*, **72**, 9, 783 – 8.
9. Karst D., Yang Y., Rapp W.A. (2003), 'Modeling Dye Liquor Flow in Fabric Beam Dyeing and Yarn Package Dyeing', *Proceeding of Industry Simulation Conference*, Valencia, Spain, 457 – 61.
10. McGregor R. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing II – The Mechanism of Fluid Flow through Textiles and its Significance in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 429 – 38.
11. Telegin F.Yu., Shormanov A.V., Melnikov B.N. (1997), 'Description of Kinetic Regularities of the Dyeing Process by the Use of Sorption Curve Moments' in: Moryganov, A.P., editor, *Textile Chemistry – Theory, Technology, Equipment*, Nova Sci. Publishers, Inc., Commack, New York, pp. 87 – 115.
12. Telegin F.Y. (1998), 'Convective Mass Transfer in Liquid Treatment Processes' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **114**, 49 – 55.
13. Ridgway A. (1991), *Pilot-Scale Package Dyeing Machine – an Overview*, Department of Colour Chemistry and Dyeing, University of Leeds.
14. Ramirez W. (1997), *Computational Methods for Process Simulation*, 2nd edn, Reed Educational & Professional Publishing Ltd.
15. Stroud K. (1987), *Engineering Mathematics*, 3rd edn, Macmillan Education Ltd.

۵. حل معادلات دینامیکی در فرآیند انتقال رنگزا

چکیده: فصل ۵ آزمایشی از راه‌حل‌های عددی مدل‌های رنگرزی ارائه می‌دهد که می‌تواند شرایط مختلفی را در برگیرد. شبیه‌سازی عددی سیستم شامل استفاده از نرم افزار متلب برای حل سیستم‌های غیرخطی مرتبه بالا که به‌طور هم‌زمان با معادلات دیفرانسیلی جزئی جفت شده است. روش‌های تفاضل محدود و المان محدود معرفی شدند. تقسیم‌بندی هندسه مجموعه لیف به واحدهای کوچک از یک شکل ساده (یا می‌ش) آزمایش شد. شکل‌های چند وجهی به کار رفته برای تعریف المان به‌طور خلاصه شرح داده شده است. هندسه‌های تعریف شده، شرایط مرزی و می‌ش سیستم راه‌حلی را برای معادلات جریان یا مدل‌های انتقال جرم فراهم می‌کنند.

کلمات کلیدی: روش‌های تفاضل محدود (FDM)، روش‌های المان محدود (FEM)، معادلات انتقال جرم، راه‌حل‌های عددی، می‌ش مجموعه لیف.

۱.۵. مقدمه

مجموعه معادلات ریاضی ارائه شده در فصل ۴ را می‌توان در یک ناحیه خاص با مجموعه‌ای از شرایط مرزی برای یک متغیر مناسب حل کرد. چنین مدل‌هایی را می‌توان برای پیش‌بینی ویژگی جریان در طول رنگرزی و تغییر توزیع رنگزا در سراسر بسته به‌علت تغییر شرایط رنگرزی استفاده کرد، برای کمک به طراحی برنامه‌های رنگرزی بهینه، مدل‌ها همچنین می‌توانند برای مطالعه عوامل موثر بر جذب رنگزا استفاده شوند و درک بهتری از رفتار و مکانیسم‌های فرآیند به‌دست آورند. با استفاده از چنین مدل‌هایی، شبیه‌سازی و مطالعه شرایط آزمایشی که تکرار در آزمایشگاه یا در عمل دشوار است، ممکن می‌شود.

شبیه‌سازی‌های محاسباتی نقش فزاینده‌ای در طراحی و بررسی سیستم‌های فنی ایفا می‌کنند و در طیف وسیعی از برنامه‌های کاربردی استفاده می‌شوند. نتایج شبیه‌سازی می‌تواند به کاربر کمک کند تا کیفیت فرآیند را بهبود بخشد، زمان‌های توسعه را کوتاه کند و هزینه بهینه‌سازی فرآیند را کاهش دهد. به‌طور خاص، اثرات تغییرات طراحی را بلافاصله توسط شبیه‌سازی در طول فرآیند توسعه، و نه فقط پس از مجموعه‌ای از اندازه‌گیری‌های پرهزینه سعی و خطا می‌توان دید [۱].

۲.۵. روش‌های عددی

برای به دست آوردن راه‌حل‌های معادلات درگیر، روش‌ها و راه‌حل‌های تحلیلی محدود به هندسه‌های ساده و خواص پراکندگی ثابت است. به عبارت دیگر، آنها به طور دقیق به شکل خطی معادلات پراکندگی و شرایط مرزی اعمال می‌شوند [۲]. این می‌تواند یک محدودیت شدید باشد، زیرا انتقال رنگزا در طول رنگرزی اغلب به‌طور محسوس غیر خطی است.

حل معادلات ریاضی به‌طور دقیق‌تر در شرایط آزمایشگاهی و عملی با روش‌های تحلیل عددی امکان‌پذیر است. در طول نیم قرن گذشته، رشد قدرت و در دسترس بودن کامپیوترهای دیجیتال منجر به افزایش استفاده از مدل‌های واقعی ریاضی در علوم و مهندسی شده است. تحلیل عددی بخاطر افزایش پیچیدگی برای حل این مدل‌های دقیق‌تر ریاضی جهان مورد نیاز است.

محدوده‌های تحلیل عددی حوزه دانشگاهی رسمی از مطالعات ریاضی کاملاً نظری به مسائل علوم رایانه‌ای است [۳]. اخیراً، پیشرفت قابل توجهی در زمینه تحلیل عددی و در ساخت برنامه‌های کامپیوتری کارآمد برای به دست آوردن راه‌حل‌های عددی اتفاق افتاده است. یک گزارش دقیق از تجزیه و تحلیل عددی فراتر از محدوده این کتاب است.

شبیه‌سازی عکس‌العمل فرآیند رنگرزی سیال رنگزای در گردش را می‌توان با حل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی انجام داد. در بسیاری از مسائل مهندسی شیمی، شبیه‌سازی‌های واقعی عددی تا به امروز، از روش‌های تفاضل محدود و روش‌های المان محدود به‌دست آمده است. این‌ها به‌طور خلاصه در بخش‌های زیر شرح داده می‌شود.

۱.۲.۵. روش‌های تفاضل محدود

روش تفاضل محدود (FDM) یکی از روش‌های استفاده شده برای حل معادلات دیفرانسیلی است که از نظر تحلیلی حل کردن آن دشوار و یا غیر ممکن است. فرمول کلی به‌صورت زیر است:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{p(x) - p(x - \Delta x)}{\Delta x} \quad [۱-۵]$$

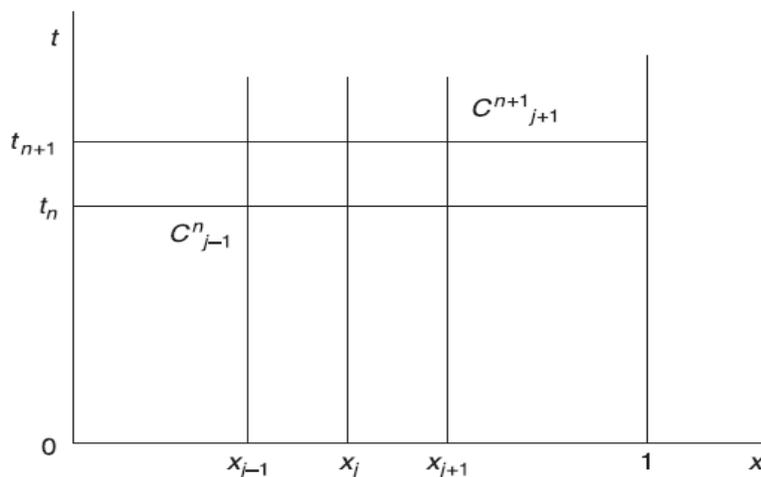
در واقع می‌توان از معادله بالا برای تشخیص معادله دیفرانسیلی با مشتقات جزئی (PDE) و پیاده‌سازی روش عددی برای حل PDE استفاده کرد. برای مثال، اگر محاسبه راه‌حل‌های عددی معادله جذب-پراکندگی-جابجائی (CDSE)، رجوع شود به معادله ۳-۴۱ ب. که در زیر نیز نشان داده شده) نیاز باشد:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V_i \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda_i \frac{\partial c_F}{\partial t} \quad [۲-۵]$$

که در آن بازه ستون نامحدود است (یعنی D_i برابر با صفر و $(c_F = f_i(c_1, c_2, \dots))$ ، معادله را می‌توان با معادله تفاضل محدود (معادله ۳-۵) جایگزین کرد:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + V_i \frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{\Delta x} + \lambda_i \frac{c_{Fj}^{n+1} - c_{Fj}^n}{\Delta t} = 0 \quad [۳-۵]$$

که n و j به ترتیب شاخص‌های زمان و مکان هستند و Δt و Δx نیز به ترتیب میزان افزایش زمان و مکان هستند. برای این تبدیل، محدوده راه‌حل به صورت یک ناحیه مستطیلی بی‌مرز $0 < x < 1$ و $t > 0$ به صورتی که در شکل ۱.۵ نشان داده شده، در نظر گرفته می‌شود.



شکل ۱.۵. نقاط مش برای حل عددی معادلات دیفرانسیلی با استفاده از روش FDM.

FDM یک فن مدل‌سازی بسیار متنوع است، که برای کاربران جهت درک و پیاده‌سازی نسبتاً آسان است. FDM یک فن زمان-مکان است، که می‌تواند غلظت رنگزا را در هر مکان در محدوده محاسباتی در یک چارچوب زمانی مشخص پیدا کند.

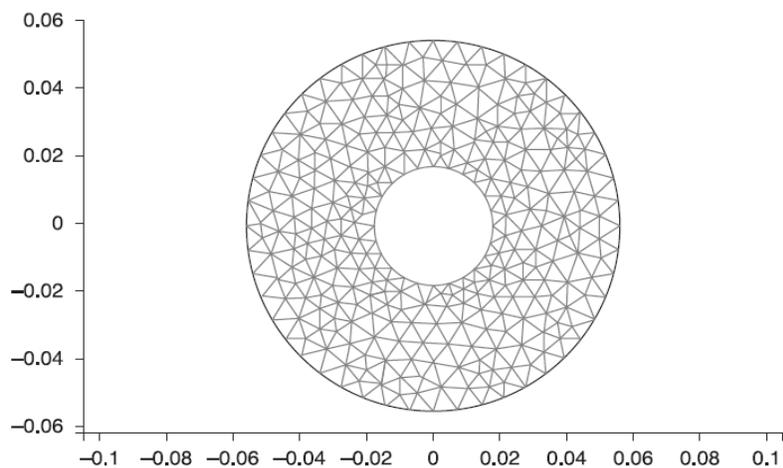
برلی^۱ و گروهش [۴]، وای [۵] و ووثوقی [۷] معادلات مدل انتقال رنگزا جابه‌جائی را به‌وسیله FDM حل کردند و نتایج را در قالب تعدادی نمودارهای نشان دهنده تغییرات در غلظت رنگزا در نقاط مختلف در ماشین‌آلات رنگرزی با زمان بیان کردند. شانون و همکارانش [۷] از روش تفاضل محدود برای حل معادلات مدل جریان استفاده کردند، که فشار و نمودارهای سرعت براساس هندسه بسته تعریف شده توسط کاربر، نمودار نفوذپذیری و ویژگی‌های سیال را پیش‌بینی کردند. FDM به خوبی در برابر مشکلات عمل می‌کند، که آنها مدل‌های دو بعدی با هندسه‌های ساده شده سیستم هستند. با این حال، برای مدل‌های سه بعدی، موقعیت‌های غیر خطی و هندسه‌های ناخوشایند، افزایش قابل توجهی در کار محاسباتی برای تلاش‌های شبیه‌سازی براساس روش‌های کارآمدتر مورد نیاز است.

۲.۲.۵. روش‌های المان محدود

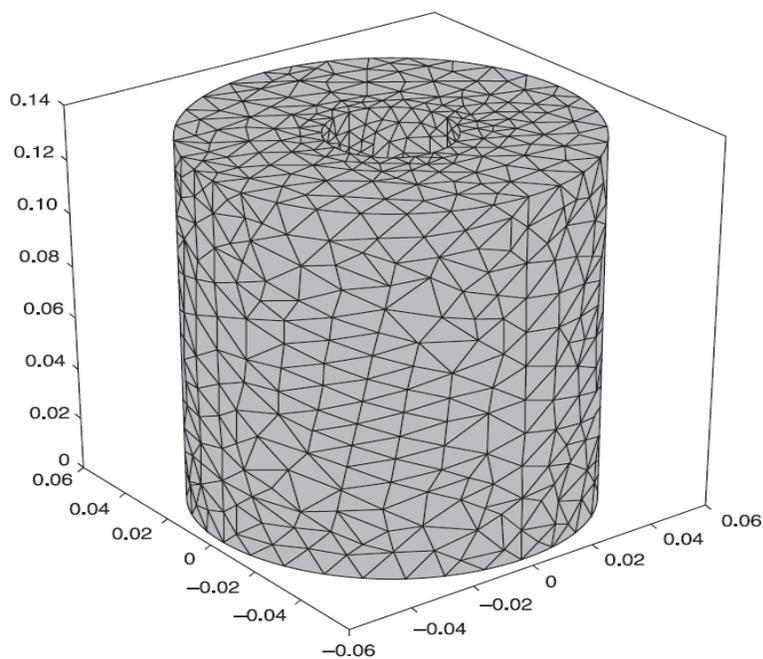
روش المان محدود (FEM) یک فن عددی است که راه‌حل‌های تقریبی برای معادلات دیفرانسیلی داده که مسائل مربوط به فیزیک و مهندسی را مدل می‌کند [۸]. در نمایش کلی تفاضل محدود ساده، روش المان محدود نیاز به تعریف مسئله در یک فضای هندسی (یا دامنه) دارد تا به یک تعداد متناهی از نواحی کوچک‌تر (یا می‌ش) تقسیم شود. در روش تفاضل محدود، می‌ش شامل سطرها و ستون‌هایی از خطوط عمود بر هم هستند (شکل ۱.۵ را ببینید)؛ اما در روش المان محدود، هر بخش منحصر به فرد بوده و ضرورتی بر عمود بودنشان نیست. برای مثال، سه ضلعی یا چهارضلعی‌ها را می‌توان در دو بُعد (همان‌طوری که در شکل ۲.۵ نشان داده شد) و چهار وجهی‌ها و شش وجهی را در سه بُعد (شکل ۳.۵ را ببینید) استفاده کرد. در هر المان محدود، متغیرهای ناشناخته (به‌عنوان مثال غلظت، سرعت و غیره) به کمک توابع مشخصی تقریب زده می‌شوند؛ این توابع می‌توانند بسط‌های چند جمله‌ای خطی یا مراتب بالاتر باشند، که به مکان‌های هندسی (گره‌های^۲) استفاده شده برای تعریف شکل المان محدود وابسته هستند.

¹ Burley

² Nodes



شکل ۲.۵. می‌ش بسته نخ به منظور حل عددی مسائل با استفاده از روش FEM در ۲ بُعد.



شکل ۳.۵. می‌ش بسته نخ به منظور حل عددی مسائل با استفاده از روش FEM در ۳ بُعد.

برخلاف روش‌های تفاضل محدود، معادلات حاکم بر روش المان محدود در هر المان محدودی انتگرال‌گیری می‌شود و راه‌حل آن در سرتاسر دامنه مسئله جمع می‌شود. به‌طوری‌که نتیجه عملیات، مجموعه معادلات خطی محدود برحسب مجموعه پارامترهای نامشخص در طول هر المان به‌دست می‌آید. راه‌حل این معادلات با استفاده از فنون جبر خطی به نتیجه می‌رسد. لیجت^۱ و لیو^۲ مزایای روش المان محدود را به‌صورت زیر خلاصه کردند:

- FEM به‌طور آسان‌تری با هندسه فیزیکی تطابق دارد در حالی که با اختلاف محدود هندسه سیستم معمولاً با فاصله‌بندهای شطرنجی^۳ تنظیم می‌شود.
- اعمال شرایط مرزی به دلایل هندسی، آسان‌تر است.
- این روش برای استفاده در فاصله‌بندهای شطرنجی متغیر آسان‌تر است، به این ترتیب المان‌های کوچک در نواحی مورد علاقه یا در جریان به سرعت در حال تغییر استفاده می‌شوند و المان‌های بزرگ در نواحی با علاقه‌مندی کمتر یا در جریانی که آهسته تغییر می‌کند به‌کار می‌روند.
- نوشتن برنامه‌های کلی ساده‌تر است که به هر هندسه و تعداد زیاد موقعیت‌های مختلف فیزیکی بدون نیاز به تغییر کد برای هر مورد خاص اعمال می‌شود.

با این حال، FEM، مانند هر روش دیگری، نقاط ضعفی داشته، که عمدتاً شامل موارد زیر است:

- ورود داده‌ی شبکه زمان‌بر است، اگرچه برنامه‌های تولید شبکه ممکن است این فرآیند را به‌طور قابل ملاحظه‌ای کوتاه کند.
- زمان‌های محاسباتی طولانی هستند، به‌ویژه برای مسائل پیچیده و مسائل سه بعدی.
- تحلیل‌گر باید یک اندازه المان را پیدا کند تا PDE حاکم در همه جا تقریباً رضایت‌بخش باشد.

فعالیت شرح داده شده در اینجا از روش المان محدود برای توانایی آن در حل کارآمد پدیده‌های غیر خطی با مش مشبک غیریکنواخت، سهولت کنترل شرایط مرزی متغیر، ضریب وابسته به غلظت، و پایه

¹ Liggett

² Liu

³ Grid spacing

نظری محکم آن استفاده می‌کند. اگر چه یک مدل FEM سه بعدی کامل ایجاد می‌شود، بررسی توانایی محاسباتی سیستم فعلی، یک مدل FEM دو بعدی به‌طور عمده برای انجام شبیه‌سازی استفاده می‌شود. براساس این کار، شبیه‌سازی یک مدل سه بعدی FEM بسیار ساده است. جنبه‌های زیر با جزئیات بیشتر مورد بحث قرار می‌گیرند:

- مدل FEM توسعه یافته، شامل طرح‌های کلی تشخیص عددی، با مِش‌بندی مناسب برای شبیه‌سازی و بررسی پدیده‌های جریان در سیستم به‌کار می‌رود.
- سیستم شبیه‌سازی FEM کامل، شامل شرایط مرزی متغیر، گسترش می‌یابد، و انتقال جرم غیرخطی گنجانده می‌شود.

۳.۲.۵. نرم افزار متلب

متلب یک محیط محاسباتی یکپارچه پیشرفته است که شامل محاسبات عددی، تجسم پیشرفته و زبان برنامه نویسی سطح بالا است [۱۰]. متلب در اصل برای این‌که یک آزمایشگاه ماتریس شود، توسعه یافت. قابلیت‌های آن در سال‌های اخیر به شدت افزایش یافته است و امروزه در میان ابزارهای پیشرو برای محاسبات مهندسی قرار گرفته است. به‌دلیل آنکه دستورات متلب شبیه به مفاهیم روش مهندسی هستند که در ریاضیات بیان می‌شوند، نوشتن برنامه‌های کامپیوتری در متلب سریع‌تر از نوشتن کد کامپیوتر در زبان‌هایی مانند ++C/C است. همچنین، متلب قابلیت گرافیکی بسیار عالی را فراهم می‌کند که برای استفاده آسان است.

نرم افزار متلب شامل مجموعه اساسی روال ریاضی و همچنین جعبه ابزارهای اختیاری است که زمینه‌های کاربردی خاص مهندسی مانند کنترل فرآیند، بهینه‌سازی، پردازش سیگنال و ریاضی نمادین را پوشش می‌دهد. این همچنین دارای یک جعبه ابزار است که بسیاری از روش‌های الگوریتم عددی (NAG) را در اختیار قرار می‌دهد [۱۱]. متلب یک محیط محاسباتی راحت برای حل مسائل شبیه‌سازی فرآیند، پیشنهاد می‌دهد، و در اینجا به‌کار می‌رود.

۳.۵. خلاصه معادلات مدل‌سازی

ویژگی جریان و انتقال جرم در طول رنگرزی، ممکن است توسط مجموعه معادلاتی که در زیر خلاصه شده شرح داده شوند.

۱.۳.۵. معادلات جریان

جریان مایع آزاد در لوله را توسط معادلات ۴-۴۵ و ۴-۴۶ می‌توان توصیف کرد که در اینجا خلاصه شده:

$$-\eta \nabla^2 u + \rho(u \cdot \nabla)u + \nabla p = 0 \quad [۴-۵]$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad [۵-۵]$$

که η گرانروی دینامیکی، ρ چگالی، u میدان سرعت و p فشار هستند.

جریان مایع از طریق بسته متخلخل را می‌توان توسط قانون دارسی (معادلات ۴-۳۲ و ۴-۳۳) و معادله برینکمن (معادلات ۴-۳۶ و ۴-۳۷) توصیف کرد، که اینها نیز به صورت زیر خلاصه می‌شوند:

$$u_1 = -\frac{k}{\eta} \nabla p_1 \quad [۶-۵]$$

$$\nabla \cdot u_1 = 0 \quad [۷-۵]$$

$$u_2 = -\frac{k}{\eta} \nabla p_2 + \eta \nabla^2 u_2 \quad [۸-۵]$$

$$\nabla \cdot u_2 = 0 \quad [۹-۵]$$

که P_1 ، P_2 و u_1 به ترتیب بردارهای فشار و سرعت هستند، زمانی که جریان در بسته متخلخل به ترتیب توسط قانون دارسی و معادله برینکمن شرح داده می‌شود؛ k نفوذپذیری بسته متخلخل است و η گرانروی سیال را نشان می‌دهد.

۲.۳.۵. معادلات انتقال جرم

موازنه جرم دیفرانسیلی رنگزا، با توجه به هر دوی جریان جابه‌جائی و جریان پراکنده رنگزا در مایع، و نیز جذب توسط ییاف، معادله زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\varepsilon \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1-\varepsilon) \frac{\partial C_f}{\partial t} = -\nabla \cdot (UC_p) + \nabla \cdot (D \nabla C_p) \quad [۱۰-۵]$$

ارتباط بین غلظت رنگزا در سطح لیف و در مایع در تماس با هر نقطه بسته در هر زمان ممکن است به‌طور کلی توسط معادله زیر بیان شود:

$$\frac{dC_f}{dt} = K_1 C^a (1 - bC_f) - K_2 C_f \quad [11-5]$$

$$C_f = \frac{KC^a}{1 + bKC^a} \quad [12-5]$$

که C_f و C_p به ترتیب غلظت‌های رنگزا در مایع و روی الیاف در زمان t هستند، U بردار سرعت جریان در بسته، D ضریب پراکندگی، ε تخلخل بسته، K_1 ثابت نرخ جذب سطحی، K_2 ثابت نرخ واجذب، a و b ثوابت و $K (= K_1/K_2)$ ضریب جذب سطحی هستند.

۴.۵. راه حل‌های عددی معادلات

۱.۴.۵. پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی

پارامترهای ذکر شده در جدول ۱.۵ برای شبیه‌سازی فرآیندهای رنگرزی استفاده شد.

جدول ۱.۵. مقادیر پارامتر عمومی استفاده شده در شبیه‌سازی.

پارامتر	مقدار	مقدار مرجع در ارزیابی
بسته		۴/۱
شعاع داخلی	۰/۰۱۸ m	
شعاع خارجی	۰/۰۵۶ m	
ارتفاع	۰/۱۳۶ m	
میزان تخلخل	۰/۵ m	
نفوذپذیری محلول رنگزا	$۳/۸e^{-11} m^2$	۳/۹ ، ۳/۱۱
چگالی (۳۰ °C)	$۹۹۶ Kgm^{-3}$	۳/۶
گرانروی (۳۰ °C)	$۷/۹۸e^{-4} N.s/m^2$	۳/۶
نرخ جریان	۲۰-۶۰ I/Kg.min	۳/۱۹

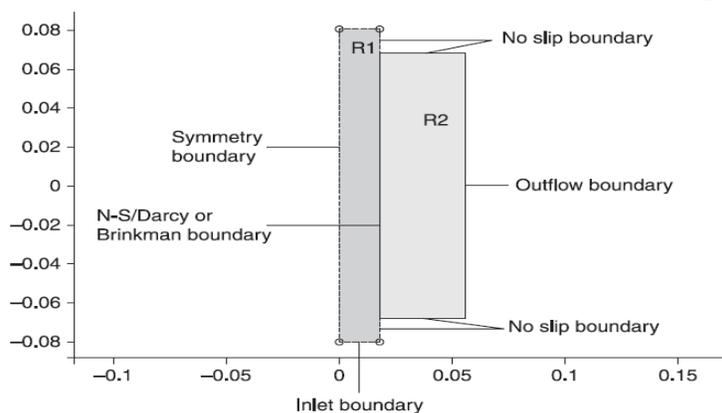
۲.۴.۵. معادلات مدل سیال

اتصال جریان محیط آزاد با جریان محیط متخلخل یک کاربرد مشترک در زمینه مهندسی شیمی است. رایج‌ترین روش برای تعیین جریان محیط آزاد و متخلخل در یک سیستم، پیوند دادن قانون داریسی است، که برای اثرات گرانشی^۱ با معادلات ناویر-استوکس حساب نمی‌شود. با این حال، با توجه به توزیع اندازه منفذ محیط متخلخل و ویژگی‌های سیال، نادیده گرفتن اثرات گرانشی همیشه مناسب نیست. معادلات برینکمن برای انتقال تکانه از طریق اثرات گرانشی و از طریق گرادیان‌های فشار در محیط متخلخل محاسبه می‌شود و می‌توان به‌عنوان بسط قانون داریسی در نظر گرفت [۱۲].

جریان مایع رنگزا در یک کانال باز (لوله) و در یک بسته متخلخل در تلاش برای نشان دادن ویژگی‌های ترکیبی جریان در درون سیستم در اینجا متصل شدند. جریان در درون سیستم توسط معادله ناویر-استوکس در ناحیه آزاد و قانون داریسی و معادلات برینکمن در ناحیه متخلخل توصیف می‌شود.

هندسه سیستم

سیستم مورد مطالعه در مدل جریان یک مقطع عرضی دو بُعدی لوله با یک لایه متصل شده به بسته نخ متخلخل است (شکل ۵.۴ و ۴.۵ را ببینید). جریان در لوله با نمودار سرعت یکنواختی در طول زمان شبیه‌سازی وارد می‌شود.



شکل ۴.۵. دامنه مدل شده و نشانه‌هایی برای شرایط مرزی در مدل جریان.

¹ Viscous effects

شرایط مرزی

دامنه مدل شده و نشانه‌هایی برای شرایط مرزی در شکل ۴.۵ نشان داده می‌شوند. شرایط مرزی برای معادلات ناویر-استوکس به شرح زیر است:

$u.n=0$	مرز متقارن
$u.n=u_0$	ورودی
$u=0$	عدم لغزش
$p=p_1$	مرز دارسی / ناویر-استوکس
$p=p_2$	مرز برینکمن / ناویر-استوکس

فشار در خروجی، به‌عنوان مرجع، روی صفر تنظیم می‌شود. فشار در مرز بین کانال و ناحیه متخلخل نشان می‌دهد که فشار در سراسر این سطح مشترک پیوسته است. شرایط مرزی متناظر برای قانون دارسی به‌صورت زیر است:

$u_1=0$	عدم لغزش
$u_1 . t=0$	خروجی
$p_1=0$	خروجی
$u_1=u$	مرز دارسی / ناویر-استوکس

شرایط مرزی متناظر برای معادلات برینکمن به‌صورت زیر هستند:

$u_2=0$	عدم لغزش
$u_2 . t=0$	خروجی
$p_2=0$	خروجی
$u_2=u$	مرز دارسی / ناویر-استوکس

این شرایط به این معنی است که اجزاء بردار سرعت در سراسر سطح مشترک بین کانال و ناحیه متخلخل پیوسته هستند.

میش

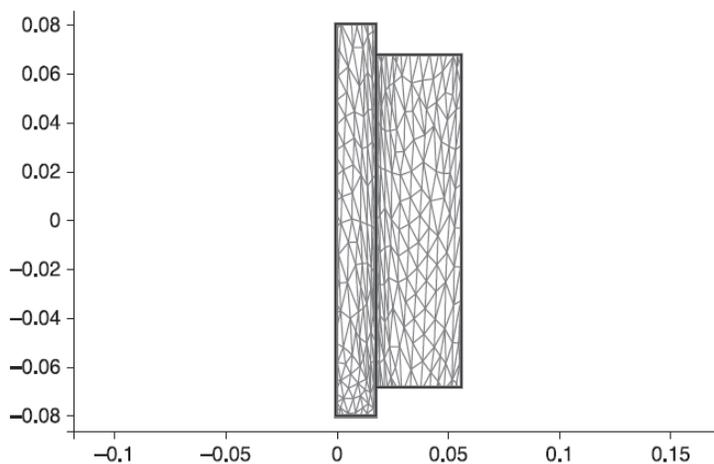
نقطه شروع برای روش المان محدود می‌شود است که یک جزء از هندسه درون واحدهای کوچک از یک شکل ساده است. در یک فضای دو بُعدی، دامنه فیزیکی (یا مسئله) به زیرمجموعه یا المان‌هایی تقسیم می‌شود. بسیاری از شکل‌های چند ضلعی را می‌توان برای تعریف المان‌ها استفاده کرد. ساده‌ترین ساختار هندسی که به آسانی با سطوح نامنظم منطبق می‌شود، مثلث است و یکی از رایج‌ترین المان‌های شکل‌هایی است که امروزه استفاده می‌شود.

المان انتخاب شده در اینجا یک مثلث متشکل از گره‌های سه رأسی است. دانستن مکان بهینه قرارگیری و اندازه المان‌ها بیشتر از علم، یک هنر است. به‌طور کلی، المان‌های بیشتری در آن نواحی از دامنه فیزیکی قرار می‌گیرد که انتظار می‌رود عملکرد آنها به سرعت تغییر کند. المان‌هایی که در شکل از دو طرف متقارن (متساوی الاضلاع) هستند دقیق‌تر از المان‌های مثلثی باریک و بلند هستند. این نتیجه‌ای از این واقعیت است که خطا $e(x)$ در یک تقریب المان محدود مانند زیر رفتار می‌کند [۸]:

$$|e(x)| \leq ch^{n+1} \quad |e(x)| \leq ch^{n+1}$$

که C ثابت است، n مرتبه چند جمله‌ای الحاقی و h فاصله بین گره‌ها است. تولید می‌شود قبل از اینکه یک می‌ش مناسب به دست آید، ممکن است چندین آزمایش را انجام دهد. راه‌حل‌های معادلات غیرخطی، به‌ویژه آنهایی که تحت تاثیر جریان و همرفت قرار می‌گیرند، ممکن است به چندین می‌ش بندی مجدد قبل از تعیین یک راه‌حل مناسب نیاز داشته باشند.

به‌منظور حل نمودار سرعت در نزدیکی سطح مشترک بین کانال باز و دامنه متخلخل، می‌ش ظریف‌تری در این مرز مورد نیاز است. می‌ش نهایی در شکل ۵.۵ و جدول ۲.۵ نشان داده می‌شود.



شکل ۵.۵. می‌ش برای سیستم مدل جریان.

جدول ۲.۵. دانش آماری می‌ش برای مدل جریان.

	مش توسعه یافته
۹۱۰۸	تعداد درجات آزادی
	مش زمینه
۹۷۶	تعداد بندها
۱۵۵	تعداد المان‌های مرز
۱۸۸۶	تعداد المان‌ها
۲۶۰	حداکثر مساحت المان: $5/10744 e^{-005}$ برای هر المان
۱۸۵۴	حداقل مساحت المان: $4/52643 e^{-007}$ برای هر المان
$1e^{-6}$	تولرانس مکرر

۳.۴.۵. معادلات مدل انتقال جرم

برای حل عددی معادلات مدل انتقال جرم با استفاده از روش المان محدود، در ابتدا سیستم باید به وضوح تعریف شود. روش المان محدود براساس تقریب عددی متغیرهای وابسته در یک مکان گره‌ای خاص است، که در آن مجموعه معادلات جبر خطی به‌طور هم‌زمان معرفی شده و می‌تواند به روش مستقیم یا تکراری حل شود.

هندسه سیستم

دو شکل هندسی برای مدل انتقال جرم در نظر گرفته می‌شود. یکی از آنها مستطیل است، که مقطع عرضی بسته نخ در جهت محور است، در شکل ۴.۵ نشان داده شده، و دیگری شکل دایره‌ای است، که مقطع عرضی بسته در جهت شعاع است، و در شکل ۲.۵ نشان داده می‌شود. برای هندسه مستطیلی شکل، فرض شد که ویژگی‌های بسته بین لایه‌ها در جهت محور بسته یکسان هستند، معادلات مدل انتقال جرم را می‌توان در یک بُعد با زمان حل کرد. این روش تا حد زیادی محاسبه زمان را کاهش می‌دهد.

شرایط مرزی

در بسته‌های متخلخل، یا برای فرآیندهای غشائی پراکنده-محرك، که تحت تغییرات فشار قرار نمی‌گیرند، اغلب ممکن است مولفه جابه‌جائی بردار شار نادیده گرفته شود. این عبارت شار را با محدود کردن آن به انتقال توسط پراکندگی ساده می‌کند.

معادلات زیر شرایط مرزی حاکم در معادلات مدل انتقال جرم را بیان می‌کند.

$$J_x \cdot n = v(C - C_1) \quad [۱۳-۵]$$

$$J_x \cdot n = 0 \quad [۱۴-۵]$$

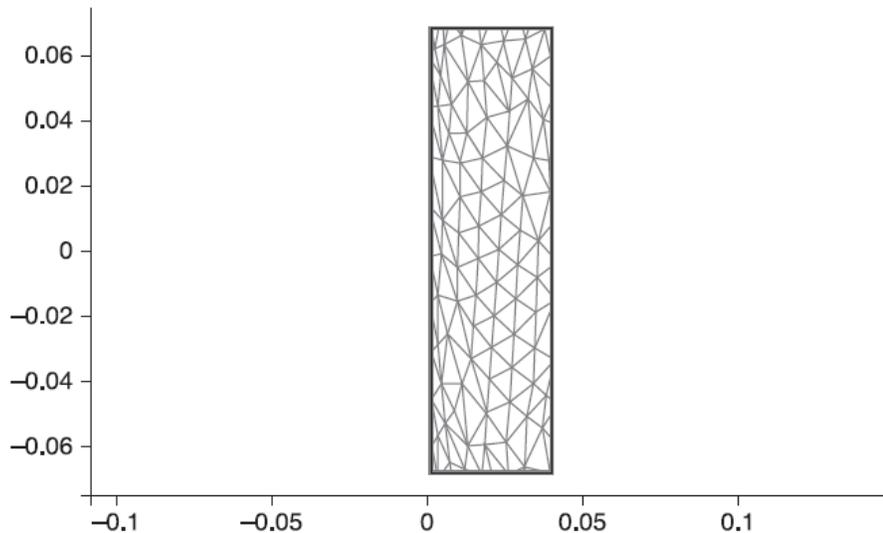
$$J_x \cdot n = f_0(t) \quad [۱۵-۵]$$

عبارت اول (نشان داده شده در معادله ۱۳-۵) شار را در مرز تعیین می‌کند. شرایط نیازمند آن است که شرایط جریان و غلظت در خارج از مرز توده سیال مشخص باشد. معادله ۱۴-۵ یک مرز غیر قابل

نفوذی را نشان می‌دهد و بیان می‌کند که شار در عرض این مرز صفر است. معادله ۵-۱۵ بیان می‌کند که شار در سرتاسر یک مرز توسط تابع دلخواهی از f تعیین می‌شود. این شرایط را برای مدل کردن رنگرزی یکپارچه و یا افزایش مرحله‌ای و تثبیت رنگزا می‌توان استفاده کرد، که در آن مرز، سطح بسته را بیان می‌کند و f عبارتی برای ورود تدریجی مواد^۱ است.

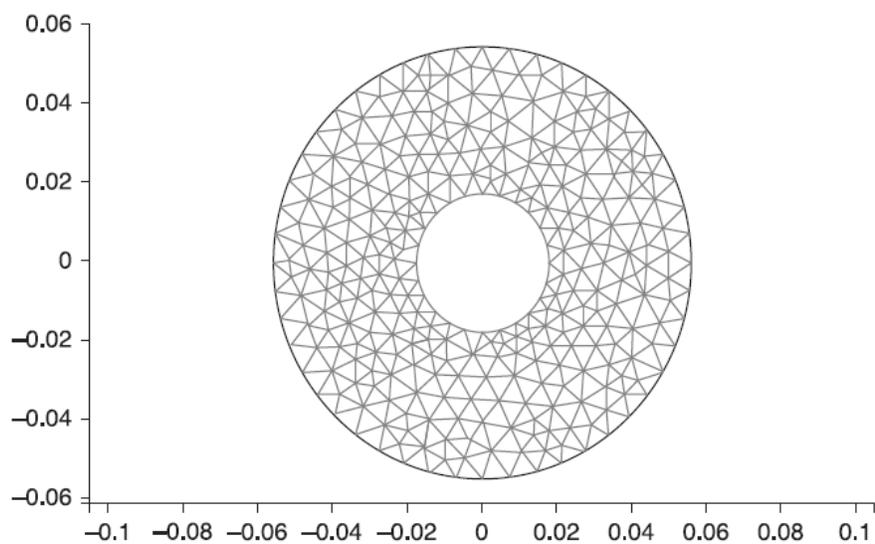
میش

شکل‌های ۶.۵ و ۷.۵ نتایج مش را برای هر دو شکل هندسی و برای مدل انتقال جرم نشان می‌دهند. جزئیات مش‌ها در جداول ۳.۵ و ۴.۵ ارائه می‌شوند.



شکل ۶.۵. مش برای مدل انتقال جرم (هندسه مستطیلی شکل).

¹ Dosing



شکل ۷.۵. مش برای مدل انتقال جرم (هندسه دایره‌ای شکل).

جدول ۳.۵. دانش آماری مش برای مدل انتقال جرم (هندسه مستطیلی شکل).

مش توسعه یافته	
۴۹۳	تعداد درجات آزادی
	مش زمینه
۱۳۴	تعداد بندها
۴۰	تعداد المان‌های مرز
۲۲۶	تعداد المان‌ها
۸۵	حداکثر مساحت المان: $4/18872 e^{-005}$ برای هر المان
۲۱۰	حداقل مساحت المان: $9/07971 e^{-006}$ برای هر المان
$1e^{-6}$	تولرانس مکرر

جدول ۴.۵. دانش آماری مش برای مدل انتقال جرم (هندسه دایره‌ای شکل).

مش توسعه یافته	
۳۲۱۶	تعداد درجات آزادی
مش زمينه	
۴۲۴	تعداد بندها
۸۸	تعداد المان‌های مرز
۷۶۰	تعداد المان‌ها
۲۷۲	حداکثر مساحت المان: $2/96813 e^{-005}$ برای هر المان
۷۰۲	حداقل مساحت المان: $1/84878 e^{-006}$ برای هر المان
$1e^{-6}$	تلرانس مکرر

براساس هندسه تعریف شده در بالا، شرایط مرزی و مش سیستم، می‌توان معادلات مدل جریان و مدل انتقال جرم را حل کرد.

۵.۵. منابع

1. Ramirez W. (1997), *Computational Methods for Process Simulation*, 2nd edn, Reed Educational & Professional Publishing Ltd.
2. Levich V. (1962), *Physicochemical Hydrodynamics*, Prentice-Hall, Inc.
3. Van Hentenryck P., Michel L., Deville Y. (1997), *Numerica A Modeling Language for Global Optimization*, The MIT Press.
4. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical simulation of an axial flow package dyeing machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33 – 9.

5. Wai P.P.C. (1984), 'Dynamic behaviour of a reactive packed bed adsorption system' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.
6. Vosoughi M. (1993), 'Numerical simulation of packed bed adsorption applied to a package dyeing machine' PhD Thesis, Heriot Watt University, UK.
7. Shannon B., Hendrix W., Smith B., Montero G. (2000), 'Modeling of supercritical fluid flow through a yarn package' *Journal of Supercritical Fluids*, **19**, 1, 87 – 99.
8. Pepper D., Heinrich J. (1992), *The Finite Element Method*, Hemisphere Publishing Corporation.
9. Liggett J., Liu P. (1983), *The Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow*, George Allen & Unwin Ltd.
10. <http://www.mathworks.com> , accessed 9 April 2014.
11. Zhang Z., Yang Z. (1997), *Master Matlab*, Beijing Air and Space University Press (in Chinese).
12. Bear J. (1972), *Dynamics of Fluids In Porous Media*, American Elsevier, New York.

۶. شبیه‌سازی فرآیند رنگرزی

چکیده: نتایج شبیه‌سازی فرآیند رنگرزی بسته‌ی نخ براساس مدل‌های مختلف ارائه می‌شود. قانون دارسی فرض می‌کند که تنها نیروی محرکه برای جریان در یک محیط متخلخل گرادیان فشار است، و انتقال کلی حرکت توسط تنش برشی در سیال نادیده گرفته می‌شود. معادلات برینکمن برای گسترش قانون دارسی و به‌منظور انتقال گرانیو در تعادل تکانه و سرعت‌ها در جهت‌های فضایی به عنوان متغیرهای وابسته به کار گرفته می‌شوند. این مدل‌ها، همچنین تاثیر سرعت و جهت جریان، نفوذپذیری بسته و نمودارهای ورود تدریجی رنگزا بر توزیع رنگزا، را توصیف و اعتبار آنها را مورد بررسی قرار می‌دهند.

کلمات کلیدی: انتقال جرم دینامیکی در رنگرزی، عوامل جابه‌جائی، سرعت جریان، رنگرزی مداوم^۱.

۱.۶. مقدمه

براساس معادلات مدل مشتق شده در فصل ۴، و روش‌های عددی معرفی شده در فصل ۵، نتایج شبیه‌سازی کامپیوتری رنگرزی بسته‌های منسوج در این فصل بیان و بحث می‌شوند. نتایج عمدتاً در قالب‌های گرافیکی نشان داده می‌شوند

۲.۶. رفتار جریان سیال در رنگرزی

همان‌طور که در فصل ۳ گفته شد، رفتارهای دینامیکی سیال جریان مایع در بسته نخ بر یکنواختی به‌دست آمده از بسته‌های رنگرزی شده تاثیر می‌گذارد. بدین ترتیب، شناخت جریان از طریق بسته نخ به‌منظور دستیابی به یکنواختی طی فرآیندهای رنگرزی مرطوب، ملزم و حیاتی است.

۱.۲.۶. اثر تنش‌های برشی بر انتقال کلی تکانه در سیال

جریان سیال در فرآیندهای رنگرزی عملی، شامل رنگرزی بسته نخ، فرض می‌شود که در ماهیت خود بسیار موثر است و توسط قانون دارسی شرح داده می‌شود. علی‌رغم این حقیقت که هیچ مدرک نظری

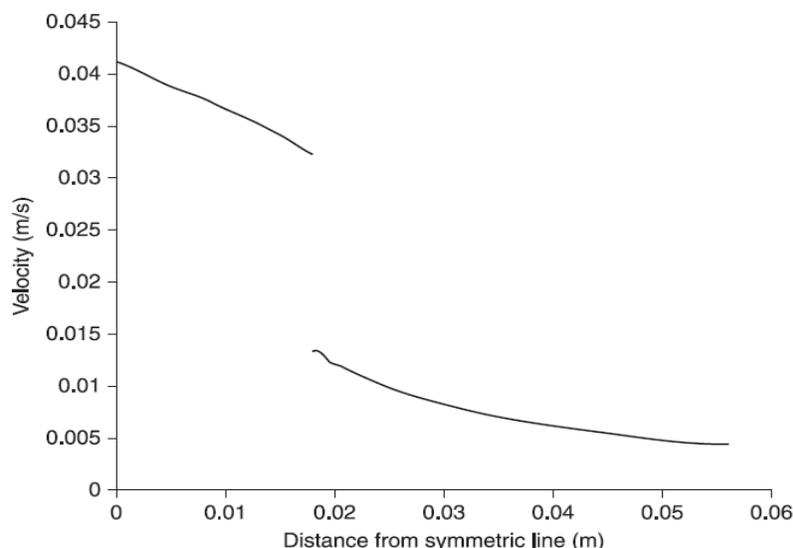
¹ Integration dyeing

جهت اثبات این رفتار وجود ندارد، اما پژوهشگران ادعا می‌کنند که پیش‌بینی‌های مدل معمولاً سازگاری خوبی را با داده‌های تجربی نشان می‌دهد.

در بیشتر ماشین‌آلات بوبین رنگ‌کنی، محلول رنگزا از طریق لوله و مجموعه نخ بسته پمپ می‌شود، که این متشکل از یک شکل سه بُعدی با فضای روزنه‌ای پر شده با محلول رنگزا (که به صورت نمایش کلی در شکل ۲.۴ نشان داده شده) است. جریان از لوله (در حالت عمودی) به سمت مجموعه نخ (در حالت موازی) است. هنوز معلوم نیست که آیا انتقال کلی حرکت توسط تنش‌های برشی در سیال نادیده گرفته می‌شود یا خیر. قانون داریسی فرض می‌کند که تنها نیروی محرکه برای جریان در یک محیط متخلخل گرادیان فشار است، و انتقال کلی حرکت توسط تنش برشی در سیال نادیده گرفته می‌شود. در بررسی فرآیند رنگ‌گری، مهم است تا شناخت بهتر جریان از طریق بسته نخ، و تاثیر تنش برشی بر خواص جریان به دست آید.

تصویر چاپی I (بخش رنگی بین صفحات ۱۷۷ تا ۱۸۰ را ببینید) توزیع سرعت جریان را در هر دوی لوله و مجموعه نخ نشان می‌دهد، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل (بسته نخ) توسط قانون داریسی شرح داده می‌شود. رنگ و طول پیکان سفید بر مقدار سرعت دلالت دارد؛ پیکان‌های سفید جهت سرعت را نشان می‌دهند. تغییر جهت سرعت در عرض سطح مشترک بین لوله و مجموعه نخ قابل رویت است. سرعت‌ها در اینجا برای جهت‌های x و y در یک مدل دو بُعدی تعریف می‌شوند. با این حال، براساس مفروضات به کار رفته در قانون داریسی، که به سادگی از تاثیر تنش برشی چشم پوشی کرده، معادله ۴-۳۵ برای تعریف مرز استفاده می‌شود.

شکل ۱.۶ توزیع سرعت را از طریق مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ نشان می‌دهد (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$). نمودار به دست آمده نشان می‌دهد که سرعت در عرض سطح مشترک بین لوله و مجموعه نخ پیوسته نیست. این حاکی از آن است که تغییر قابل توجه در سرعت جریان به طور ناگهانی در ناحیه نسبتاً نزدیک به سطح نخ‌ها رخ می‌دهد.



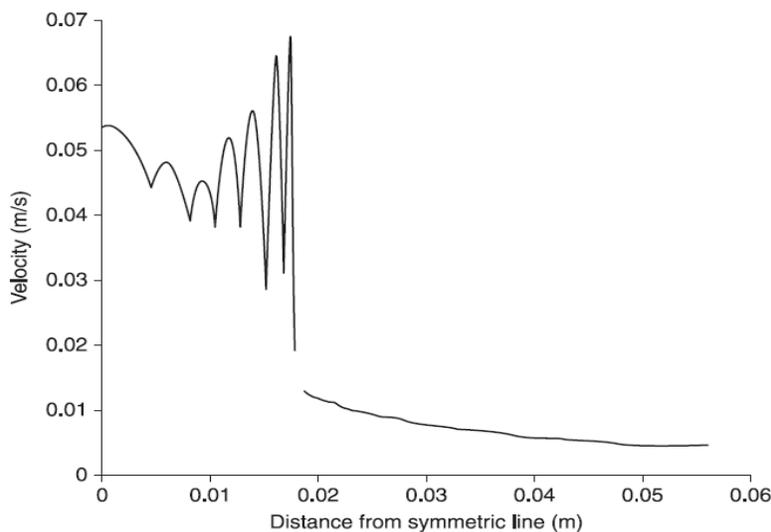
شکل ۱.۶. توزیع سرعت جریان در مقطع عرضی لوله و بوبین نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$ ، که در آن جریان در محیط متخلخل توسط قانون دارسی شرح داده می‌شود.

برای بررسی تاثیر تنش برشی بر رفتار جریان در سرتاسر بسته، معادلات ۴-۳۶ و ۴-۳۷، همراه با شرایط مرزی مناسب به صورتی که توسط معادلات ۴-۳۸-۴-۴۱ تعریف شده است، می‌توان با استفاده از رویکرد برینکمن برای سیال در محیط‌های متخلخل حل کرد.

از تصویر چاپی II می‌توان مشاهده کرد که سرعت هم در مقدار و هم در جهت، توزیع مشابهی با آنچه که در تصویر چاپی I نشان داده شده دارد، هنگام معرفی نرخ جریان ورودی یکسان (0.1 m/s) مانند شبیه‌سازی صورت گرفته در تصویر چاپی I. جزئیات نمودار سرعت را می‌توان در شکل ۲.۶ مشاهده کرد.

شکل ۲.۶ نشان می‌دهد که سرعت تقریباً در عرض سطح مشترک بین لوله و مجموعه نخ پیوسته است، با یک کاهش شدید درست قبل از سطح بسته نخ متخلخل. علاوه بر این، توزیع سرعت در فاز لوله نوسانی است، نشان دهنده ویژگی‌های مختلف جریان، که این حالت احتمالاً در مقایسه با آنچه که در

شکل ۱.۶ نشان داده شد به واقعیت نزدیکتر است. با این حال، توزیع سرعت در فاز مجموعه نخ تقریباً مشابه با آنچه در شکل ۱.۶ مشخص شده است.

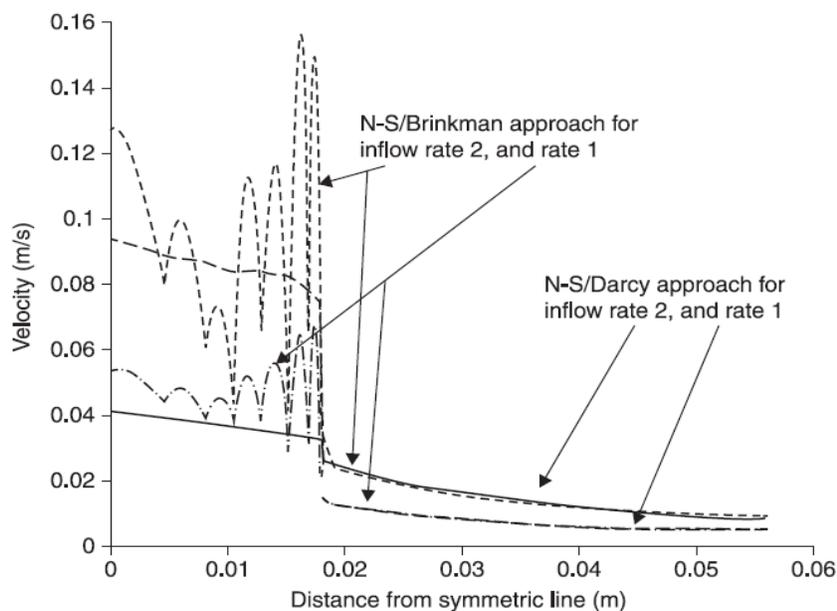


شکل ۲.۶. توزیع سرعت جریان در مقطع عرضی لوله و بوبین نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، که در آن محیط متخلخل توسط معادله برینکمن شرح داده می‌شود.

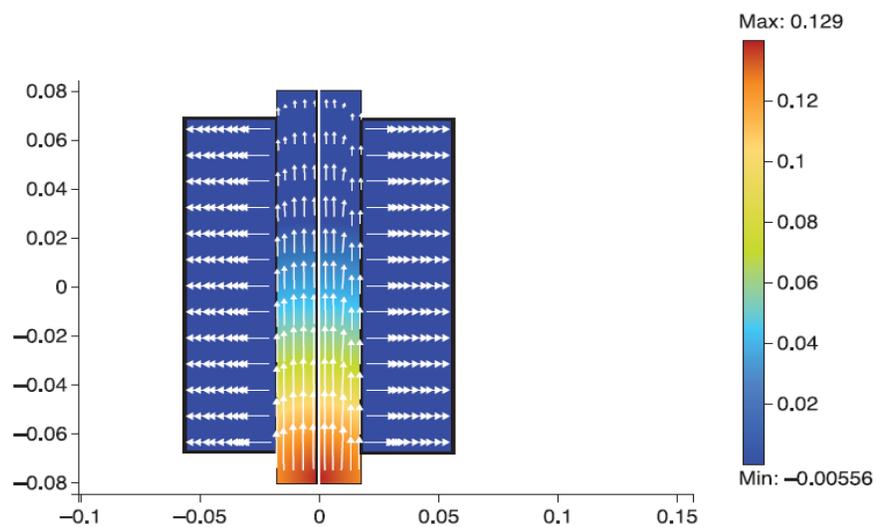
این نگرش مهمی است که نشان می‌دهد، به کمک شرایط به کار رفته در شبیه‌سازی، تنش برشی تاثیر بسیار ضعیفی بر ویژگی‌های جریان درون مجموعه نخ دارد. شبیه‌سازی نشان می‌دهد که استفاده از قانون داریسی برای تعریف جریان مایع رنگرزی در سرتاسر بسته نخ کاملاً معقول و منطقی است. همچنین شبیه‌سازی نشان می‌دهد که نرخ جریان در درون نخ بسیار پایین است. زیرا، در عمل، در ماشین بوبین رنگ‌کنی مرزهای ۳، ۴، ۶، ۷ و ۸ دقیقاً از شرط عدم لغزش پیروی نمی‌کنند، این می‌تواند به سرعت‌های بسیار پایین‌تری در محیط‌های متخلخل نسبت به آنچه که از نتایج حاصل از این شبیه‌سازی پیشنهاد شده است منجر شود. همچنین شکل ۳.۶ اعتبار قانون داریسی را زمانی که نرخ‌های مختلف جریان در یک محدودی انتخابی اعمال شده، نشان می‌دهد.

در شکل ۳.۶، خط ممتد و خط تیره به ترتیب بر سرعت جریان در نرخ‌های جریان 0.1 m/s و 1 m/s دلالت دارند، با استفاده از روش داریسی/ناویر-استوکس. خط نقطه چین-خط چین و خط نقطه

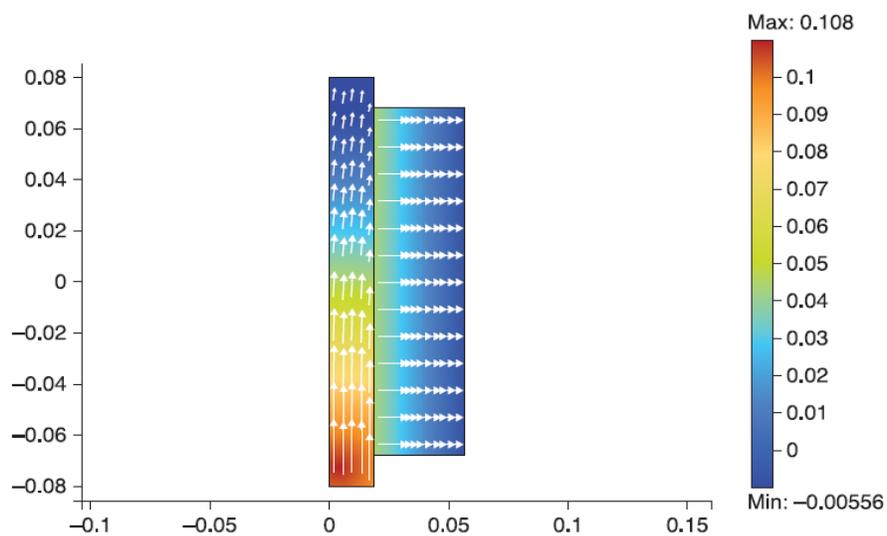
چین نیز به ترتیب بر سرعت جریان در نرخ‌های جریان 0.1 m/s و 0.2 m/s اشاره دارند، با استفاده از روش برینکمن / ناویر- استوکس. این شکل نشان می‌دهد که نمودار جریان محلول رنگرزی درون لوله برای روش برینکمن / ناویر- استوکس دارای نوسان است، در حالی که هنگام به‌کارگیری روش داریسی / ناویر- استوکس سرعت جریان در هر دو نرخ جریان ورودی کاملاً پایدار و ثابت است. با این حال، سرعت جریان درون مجموعه نخ، در هر دو نرخ جریان ورودی، و با استفاده از روش برینکمن / ناویر- استوکس و داریسی / ناویر- استوکس تقریباً یکسان است.



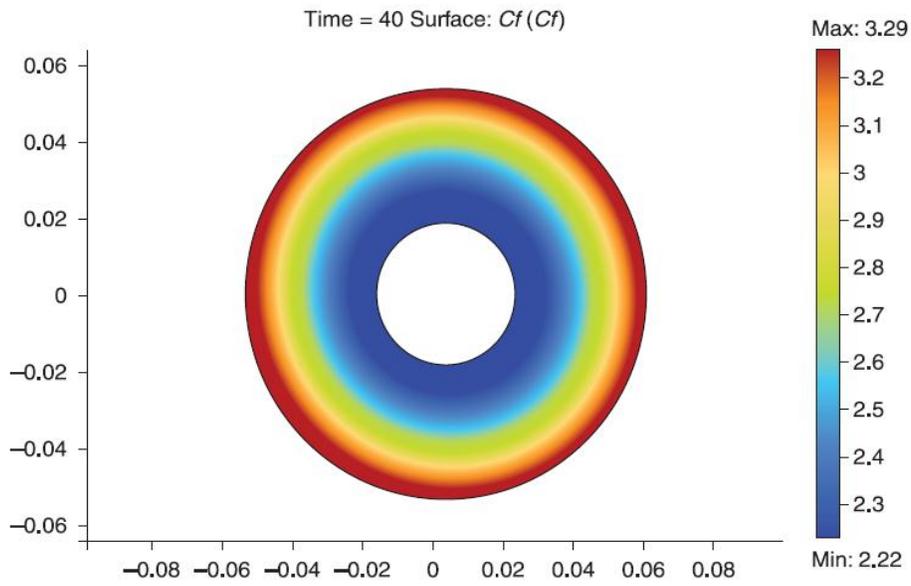
شکل ۳.۶. مقایسه روش‌های برینکمن / ناویر- استوکس و داریسی / ناویر- استوکس.



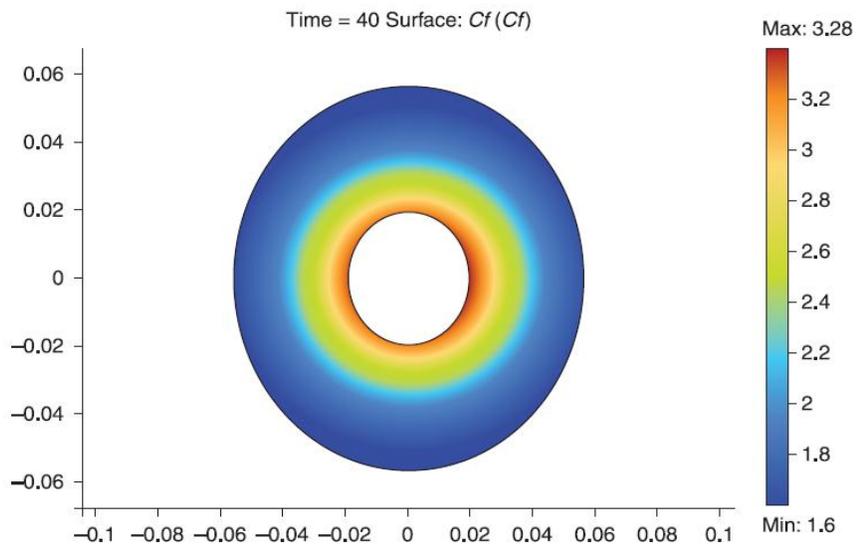
تصویر چابی I (فصل ۶) توزیع سرعت جریان در لوله و بوبین نخ، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط قانون دارسی توصیف می‌شود.



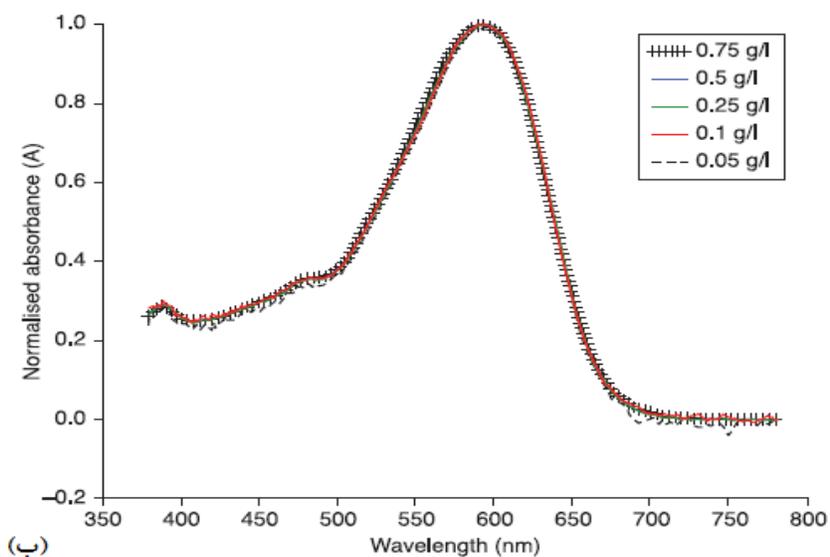
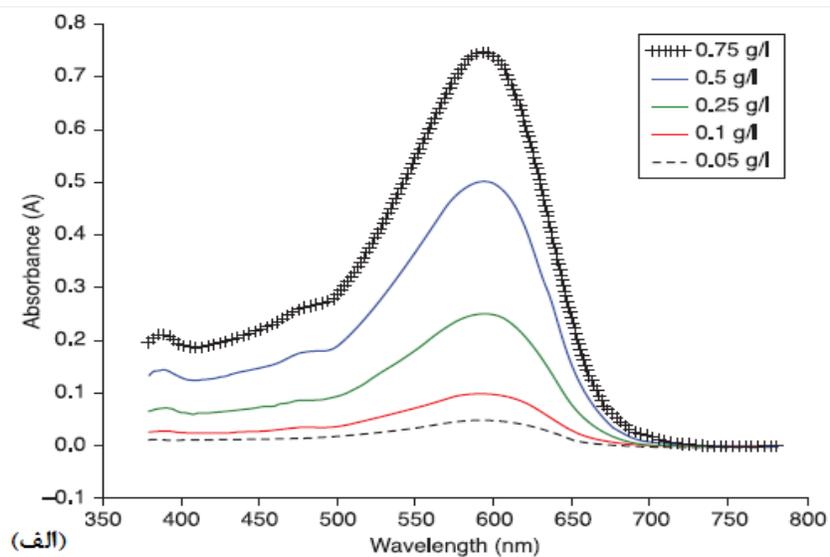
تصویر چابی II (فصل ۶) توزیع سرعت جریان در لوله و بوبین نخ، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط معادله برینکمن توصیف می‌شود.



تصویر چاپی III (فصل ۶) توزیع رنگزا برای جهت جریان خارج به داخل.

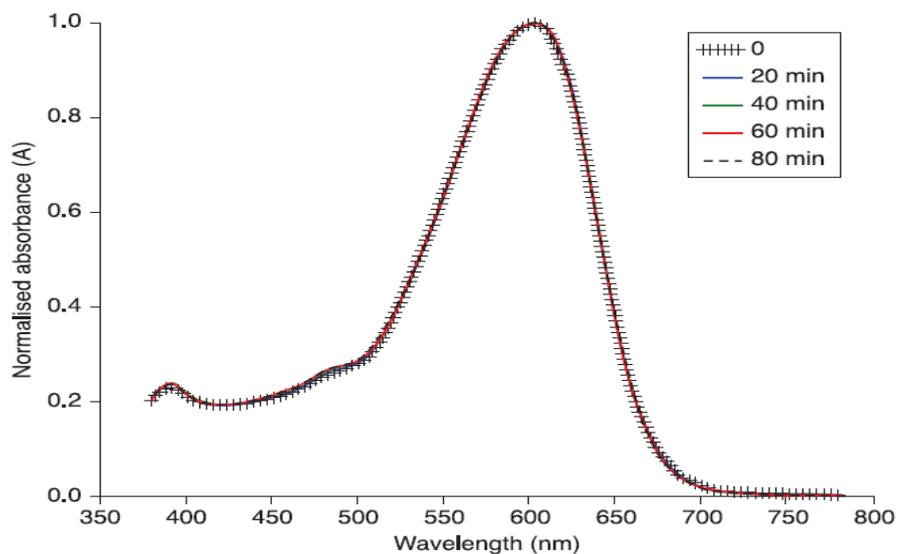


تصویر چاپی IV (فصل ۶) توزیع رنگزا برای جهت جریان داخل به خارج.

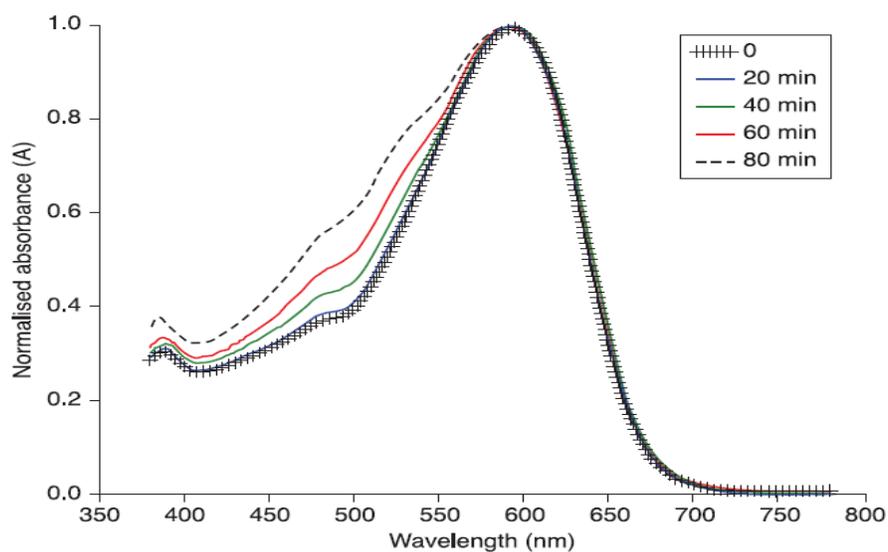


تصویر چاپی V (فصل ۸) طیف‌های واقعی و نرمالیزه شده‌ی رمازول سیاه^۱. (الف) طیف‌های واقعی، (ب) طیف‌های نرمالیزه شده.

¹ Remazol Black



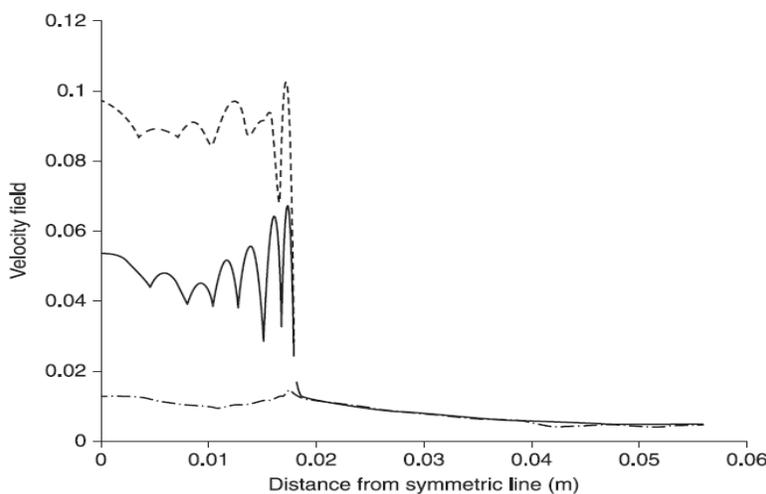
تصویر چاپی VI (فصل ۸) طیف نرمالیزه شده‌ی حمام رنگ‌رزی در طول رنگ‌رزی رنگزای ری‌اکتیو سیاه ۱۰۹.



تصویر چاپی VII (فصل ۸) طیف حمام رنگ‌رزی برای رنگ‌رزی رنگزای ری‌اکتیو رمازول سیاه. تغییر در شکل به‌دلیل شکل‌گیری طیف‌ها است.

شکل ۴.۶ از همان نتایج شبیه‌سازی که در شکل ۲.۶ نشان داده شد، با نمودارهای سرعت جریان سیال، استفاده کرد، که در آن جریان در بسته نخ متخلخل توسط معادله برینکمن اما در خطوط مقاطع عرضی مختلف در سرتاسر بسته تعیین می‌شود. خط ممتد همانند شکل ۲.۶ است، یعنی وسط بسته (تصویر چاپی I، خط $y=0$)، خط نقطه چین در نزدیکی بالای بسته ($y=0/06$) است و خط تیره در نزدیکی انتهای بسته ($y=-0/06$) است.

از شکل ۴.۶ مشخص است که، اگرچه نمودارهای سرعت درون مایع آزاد (لوله) نسبت به نمودارهای سرعت در خطوط مقاطع عرضی مختلف، متفاوت هستند، اما نمودارهای سرعت درون بسته متخلخل تقریباً با نمودارهای سرعت در خطوط مقاطع عرضی مختلف یکسان هستند. اگرچه روش برینکمن انتقال گرانی در تعادل تکانه را به حساب می‌آورد و سرعت‌ها را در جهت‌های فضایی به عنوان متغیرهای وابسته معرفی کرده است، اما این مستلزم آن است که توزیع‌های فشار درون مایع آزاد بر توزیع‌های سرعت جریان درون بسته متخلخل غالب باشند. همچنین این نتیجه اعتبار قانون داریسی را برای تعیین جریان درون بسته متخلخل تحت شرایطی از گستردگی پارامترهای مورد استفاده در این شبیه‌سازی اثبات می‌کند، زیرا با فرض قانون داریسی که تنها نیروی محرکه برای جریان در محیط متخلخل گرادیان فشار است در توافق است.



شکل ۴.۶. نمودارهای سرعت در خطوط مقاطع عرضی مختلف (تصویر چاپی I را ببینید، خطوط $0/06$ و $0/06$ ، که در آن جریان در بسته متخلخل توسط معادله برینکمن تعریف می‌شود.

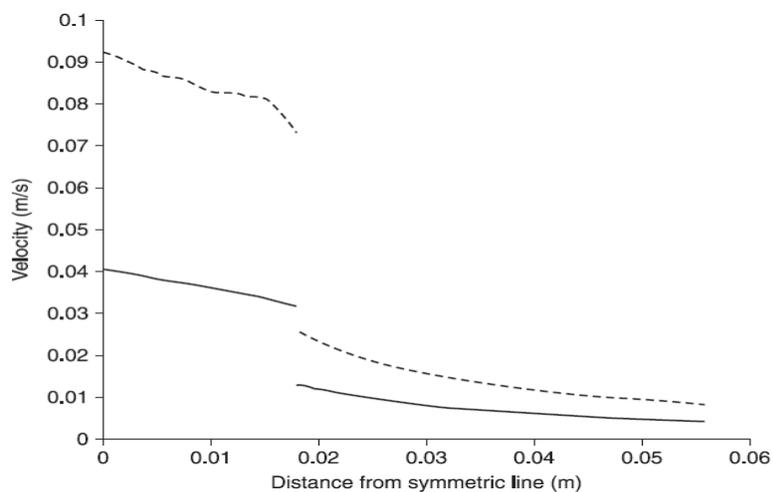
پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی مبتنی بر روال معمول در رنگرزی بسته نخ هستند، یعنی نرخ جریان بیش از حد بالا نیست و نفوذپذیری بسته بسیار پایین است. در چنین شرایطی، نتایج شبیه‌سازی عددی ثابت می‌کند که انتقال حرکت توسط تنش‌های برشی را می‌توان نادیده در نظر گرفت؛ بنابراین، قانون دارسی یک رویکرد منطقی جهت مدل کردن ویژگی‌های جریان است. این نتیجه به خوبی در این زمینه شناخته شده است، اما در اینجا براساس یک مدل ریاضی مطمئن و دقیق اثبات می‌شود.

۲.۲.۶. اثر نرخ جریان بر سرعت جریان سیال درون بسته

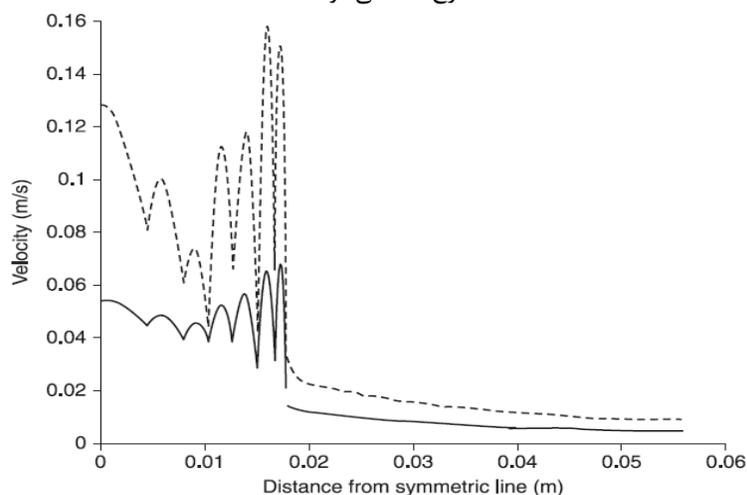
به‌منظور بررسی تاثیر پراکندگی جابه‌جائی رنگزا در طول رنگرزی یکنواخت، سرعت سیال در هر نقطه و در هر زمان مورد نیاز است. با این حال، اندازه‌گیری جریان در نقاط مختلف بسته‌های متخلخل با شکل‌های متنوع در عمل غیر ممکن است. علاوه بر این، حل معادلات ریاضی حاکم بر جریان سیال در محیط‌های متخلخل شکل‌های پیچیده نیز بسیار دشوار است.

مدل ریاضی ارائه شده در فصل ۴ امکان توصیف توزیع سرعت جریان را درون بسته در طول رنگرزی پیشنهاد می‌دهد. شکل‌های ۵.۶ و ۶.۶، توزیع سرعت را در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در نرخ‌های مختلف جریان ورودی محلول نشان می‌دهند، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل به ترتیب توسط قانون دارسی و معادله برینکمن شرح داده می‌شود.

در شکل‌های ۵.۶ و ۶.۶ خطوط ممتد بر سرعت جریان در نرخ جریان 0.1 m/s دلالت دارد، در حالی که خطوط نقطه چین - خط چین حاکی از سرعت جریان در نرخ 0.2 m/s هستند. این شکل‌ها نشان می‌دهند که، به‌منظور تعریف رفتار جریان درون بسته متخلخل برای هر دو رویکرد قانون دارسی و معادله برینکمن، نرخ جریان ورودی بالاتری فراهم شده است، که سرعت بالاتری را در مجموعه نخ به دست می‌آورد، اما توزیع سرعت جریان بسیار کمتری را در عرض بسته به دست خواهد آورد. علاوه بر این، نرخ جریان بالاتر موجب جریان نوسانی بیشتری در لوله می‌شود، و متعاقباً تاثیر تنش برشی را بر ویژگی‌های جریان افزایش می‌دهد، که این احتمالاً یکی از دلایل توجیه سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی است.



شکل ۵.۶. توزیع‌های سرعت سیال در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در نرخ‌های مختلف جریان ورودی محلول، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط قانون دارسی شرح داده می‌شود.



شکل ۶.۶. توزیع سرعت در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در نرخ‌های مختلف جریان ورودی محلول، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط معادله برینگمن شرح داده می‌شود.

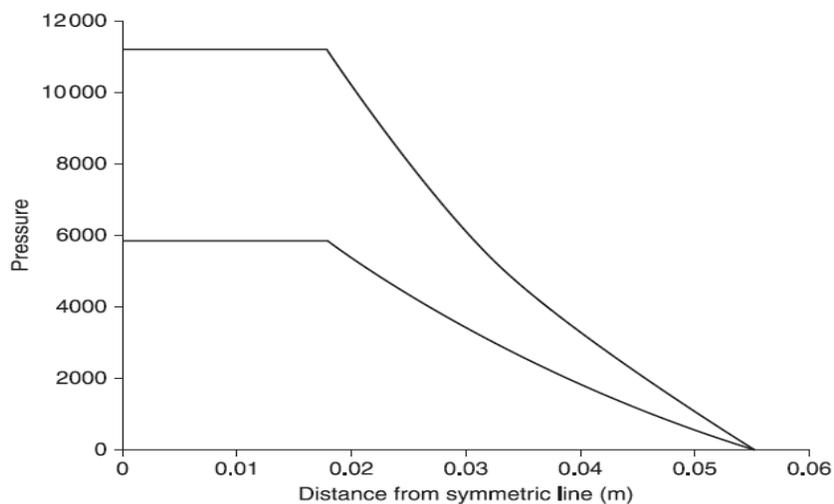
در عمل، سرعت جریان درون مجموعه نخ را می‌توان با افزایش نرخ جریان ورودی افزایش داد (شکل ۷.۴ را ببینید، مرز ۲). با این حال، از آنجایی که نرخ جریان بالاتر به توزیع نایکنواختی سرعت جریان در سرتاسر مجموعه نخ منجر خواهد شد، و توزیع یکنواخت سرعت جریان در دستیابی به یک رنگرزی یکنواخت مهم و اساسی است، لذا نرخ جریان بالا مورد استفاده قرار نمی‌گیرد.

توزیع‌های سرعت در سراسر مقاطع عرضی مختلف لوله و مجموعه نخ ممکن است ویژگی‌های متفاوتی داشته باشد (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در حالی که نمودارهای سرعت مشابه‌ای را درون بسته متخلخل از خود نشان دهد.

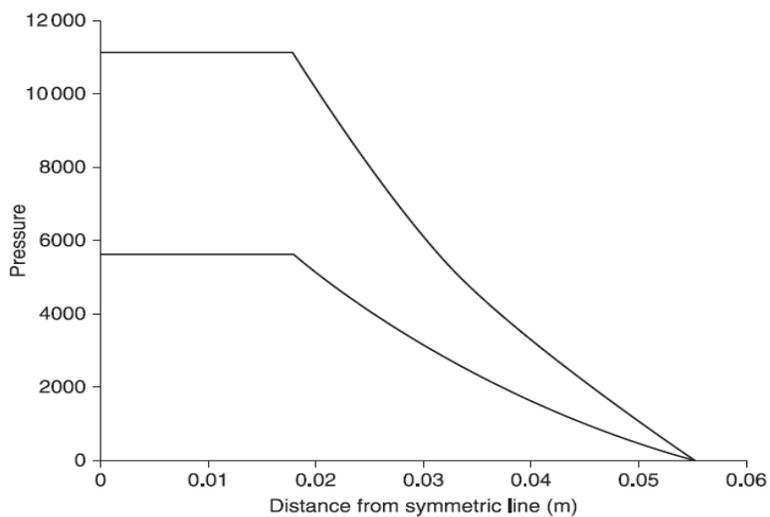
۳.۲.۶. ارتباط بین نرخ جریان و فشار محلول

مدل جریان معرفی شده در این مطالعه نمی‌تواند تنها نمودار برای سرعت جریان درون بسته نخ را ارائه دهد؛ بلکه همچنین نمودارها برای فشار در سرتاسر بسته را نیز به‌طور مستقیم نشان می‌دهد. اندازه‌گیری سرعت جریان در بخش‌های مختلف بسته‌های متخلخل در عمل ممکن نیست، در حالی که اندازه‌گیری فشارها در درون و بیرون بسته کاملاً راحت و آسان است. به‌منظور اعتباربخشی به نتایج عددی مدل‌سازی جریان، ارتباط بین نرخ جریان و فشار محلول در سرتاسر سیستم مورد نیاز است.

شکل‌های ۷.۶ و ۸.۶ توزیع فشار را در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I، خط $y=0$)، در نرخ‌های جریان ورودی محلول $0/1$ m/s و $0/2$ m/s نشان می‌دهند، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل به‌ترتیب توسط قانون دارسی و معادله برینکمن شرح داده می‌شود.



شکل ۷.۶. توزیع فشار در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در نرخ‌های مختلف جریان ورودی محلول، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط قانون دارسی شرح داده می‌شود.



شکل ۸.۶. توزیع فشار در سرتاسر مقطع عرضی لوله و مجموعه نخ (تصویر چاپی I را ببینید، خط $y=0$)، در نرخ‌های مختلف جریان ورودی محلول، که در آن جریان در محیط‌های متخلخل توسط معادله برینکمن شرح داده می‌شود.

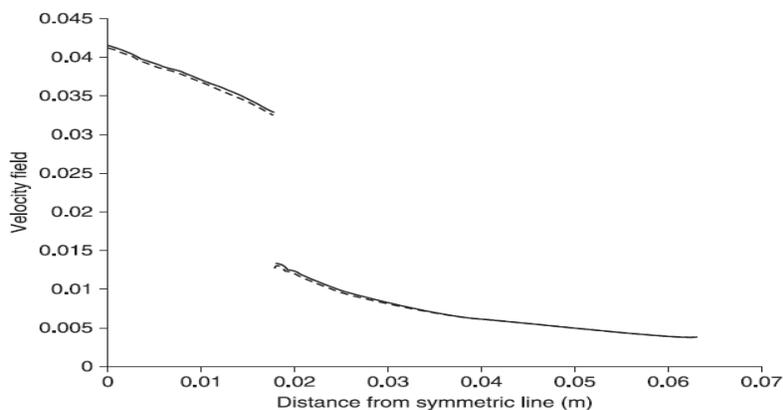
می‌توان مشاهده کرد که در هر دو روش، نمودارهای فشار درون مایع آزاد (لوله) کاملاً پایدار هستند و در نرخ‌های مختلف جریان ورودی تقریباً ثابت هستند؛ نمودارهای فشار درون بسته متخلخل تقریباً در نرخ‌های مختلف جریان ورودی به طور خطی کاهش می‌یابند.

نتایج این شبیه‌سازی برای نمودارهای فشار اعتبار بیشتر قانون داریسی را برای تعریف جریان سیال در بسته متخلخل، در محدوده انتخاب شده‌ی نرخ جریان و نفوذپذیری بسته، نشان می‌دهد، که این فرضیات تعبیه شده برای قانون داریسی را معرفی می‌کند. همچنین این نتایج را می‌توان برای طراحی دستگاه‌های رنگرزی بسته نخ، مانند انتخاب جنس لوله براساس پیش‌بینی فشار استاتیکی در نرخ‌های مختلف جریان، و انتخاب جریان‌سنج و حسگر^۱ فشار براساس محدوده شبیه‌سازی‌شان مورد استفاده قرار داد.

۴.۲.۶. اثر ابعاد بسته

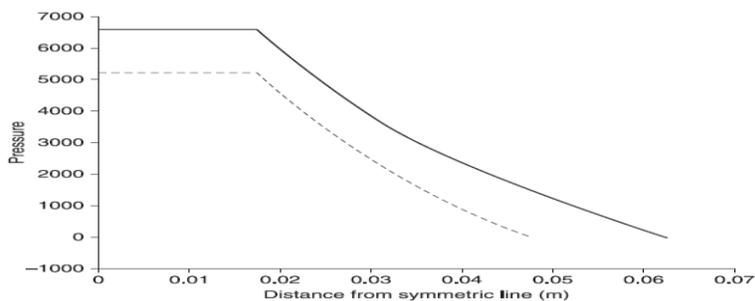
اثر ضخامت بسته بر نمودار سرعت جریان را می‌توان در شکل‌های ۹.۶ و ۱۰.۶ مشاهده کرد. در شکل ۹.۶، قطرهای لوله ثابت نگه داشته شدند؛ ضخامت بسته از ضخامت بسته استاندارد هم ۲۰٪ افزایش و هم کاهش یافت. خطوط ممتد نمودار سرعت را هنگامی که ضخامت بسته 0.0304 m است نشان می‌دهند، در حالی که خطوط خط تیره نمودارهای سرعت را هنگامی که ضخامت بسته 0.0456 m است ارائه می‌دهند. نتایج نشان می‌دهند هنگامی که ضخامت بسته تغییر می‌کند و نرخ جریان ورودی و قطر لوله ثابت باقی می‌ماند هیچ تفاوت مشخصی در نمودارهای سرعت وجود ندارد.

¹ sensor



شکل ۹.۶. نمودارهای سرعت جریان برای ضخامت‌های مختلف بسته جایی که نرخ جریان ورودی و اندازه لوله ثابت باقی می‌مانند.

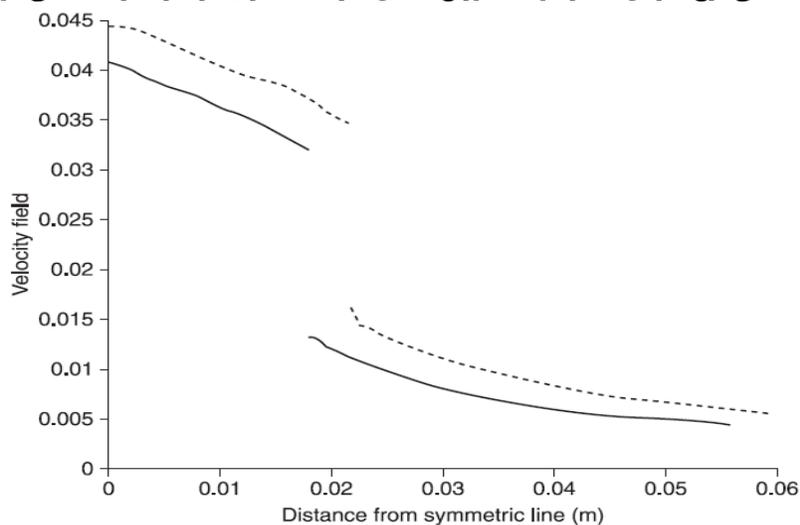
این نتیجه مستلزم آن است که تغییر جزئی در ضخامت بسته (برای مثال ۲۰٪) بر رفتار جریان در هر دوی مایع آزاد (لوله) و بسته متخلخل توسط تغییر در افت فشار درون سیستم تاثیر نگذارد. این نتیجه‌گیری در شکل ۱۰.۶ نشان داده می‌شود، که آن تغییر در فشار درون لوله و بسته متخلخل را هنگامی که ضخامت بسته تغییر کرده است نشان می‌دهد. خطوط ممتد نمودار فشار را هنگامی که ضخامت بسته ۰/۰۴۵۶ m است، ارائه می‌دهند، در حالی که خطوط خط تیره نمودارهای فشار را هنگامی که ضخامت بسته ۰/۰۳۰۴ m است، نشان می‌دهند. می‌توان مشاهده کرد که فشار درون سیستم با افزایش ضخامت بسته برای ثابت نگه داشتن نرخ جریان در سرتاسر بسته متخلخل افزایش خواهد یافت.



شکل ۱۰.۶. نمودارهای فشار برای ضخامت‌های مختلف بسته جایی که نرخ جریان ورودی و اندازه لوله ثابت باقی می‌مانند.

شکل ۱۱.۶ نتیجه شبیه‌سازی نمودار میدان سرعت برای قطرهای مختلف لوله است، در حالی که ضخامت بسته ثابت باقی می‌ماند.

در شکل ۱۱.۶، ضخامت بسته و سرعت جریان ورودی ثابت باقی ماندند، و قطرهای مختلف لوله استفاده شدند. خط ممتد همانند شکل ۱.۶ است، در حالی که خط نقطه چین نمودارهای سرعت را در شرایط مشابه با آنچه در شکل ۱.۶ استفاده شده است نشان می‌دهد، اما با ۲۰٪ قطر لوله بزرگ‌تر. نتیجه نشان می‌دهد هنگامی که قطر لوله افزایش یافته میدان سرعت بزرگ‌تری برای هر دوی لوله و بسته متخلخل به دست می‌آید. با این حال، افزایش میدان سرعت به‌طور مستقیم با افزایش اندازه لوله موجب نمی‌شود، اما با نرخ جریان بالاتر، سرعت جریان ورودی ثابت باقی می‌ماند. این نتیجه با بخش ۲.۱.۶ سازگار است: یعنی نرخ جریان بالاتر موجب توزیع میدان سرعت بالاتری در سرتاسر بسته می‌شود.



شکل ۱۱.۶. نمودارهای سرعت جریان برای قطرهای مختلف لوله.

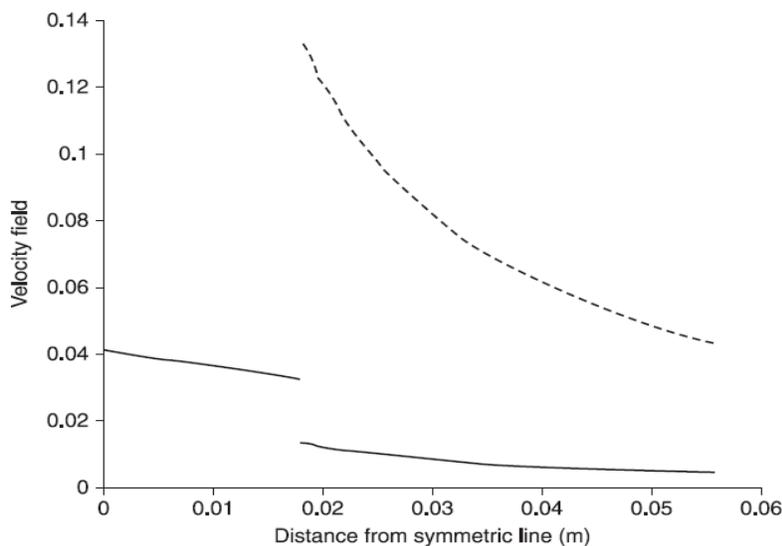
۵.۲.۶. اثر نفوذپذیری بسته

تفاوت‌ها در تراکم بسته نخ موجب تغییرات در تخلخل و نفوذپذیری می‌شود، که این به‌طور مستقیم رفتار جریان را درون بسته تحت تاثیر قرار می‌دهد. دنتون این ارتباط را برای بسته‌های نخ پنبه‌ای مورد توجه قرار داد [۱]. همچنین ارتباط بین نفوذپذیری-تخلخل برای انواع مختلف محیط‌های متخلخل لیفی از مطالب چاپی در دسترس هستند [۲-۳].

همان‌طور که قبلاً بحث شده، قانون دارسی تنها در شرایط نفوذپذیری پایین بسته متخلخل معتبر است. با این حال، هیچ اطلاعات کمی (که چطور نفوذپذیری پایین باید باشد) از مطالب چاپی در دسترس نیست. مطالعه فعلی بر این دیدگاه برای دستیابی به محدوده نفوذپذیری که در آن قانون دارسی معتبر است، معطوف است.

در شکل ۱۲.۶، چهار خط نشان دهنده توزیع میدان سرعت جریان سیال در هر دوی مایع آزاد و بسته متخلخل در مقطع عرضی $y=0$ وجود دارند. پارامترها در جدول ۱.۵ استفاده می‌شوند، اما با نفوذپذیری‌های مختلف بسته، یعنی $۱۰^{-۱۱} * ۳/۸$ ، $۱۰^{-۱۰} * ۱$ ، $۱۰^{-۹} * ۳/۶$ و $(m^2) * ۱۰^{-۹} * ۳/۸$. جریان درون بسته متخلخل توسط قانون دارسی تعریف می‌شود.

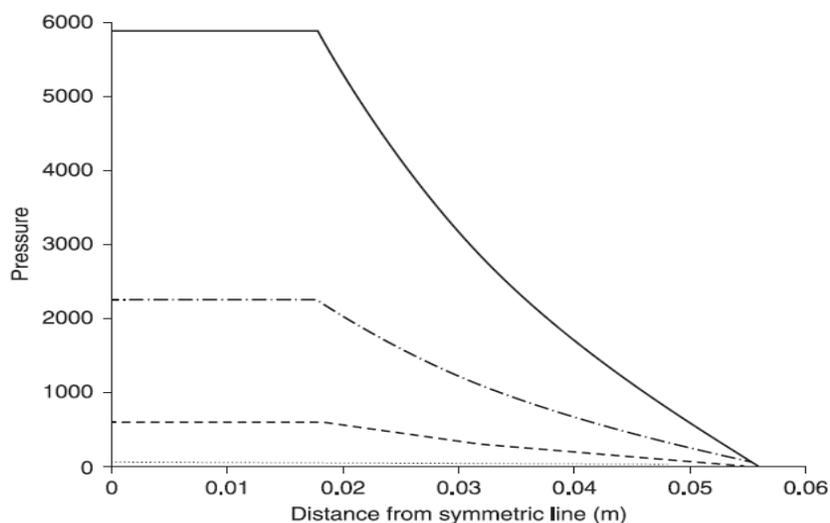
از شکل ۱۲.۶ می‌توان مشاهده کرد که نمودارهای میدان سرعت درون لوله (مایع آزاد) و بسته متخلخل تقریباً برای نفوذپذیری‌های مختلف بسته یکسان هستند، اگر نفوذپذیری کمتر از $۱۰^{-۹} * ۳/۶$ باشد. این بدین دلیل است که، اگر نرخ جریان ورودی ثابت باقی بماند، افزایش نفوذپذیری بسته موجب کاهش افت فشار در سرتاسر بسته خواهد شد (شکل ۱۳.۶ را ببینید).



شکل ۱۲.۶. توزیع میدان سرعت در نفوذپذیری مختلف بسته.

هنگامی که نفوذپذیری بسته اندکی بالاتر است (برای مثال $10^{-9} * 3/8$)، شکل ۱۳.۶ نشان می‌دهد که نمودار میدان سرعت درون لوله یکسان باقی می‌ماند؛ با این حال، درون بسته متخلخل نمودار میدان سرعت به‌طور چشمگیری تغییر می‌کند (خطوط خط چین). در این حالت نمودار میدان سرعت بزرگ‌تر از حدی می‌شود که باید باشد. این دلالت دارد بر آن که قانون داریسی برای توصیف رفتار جریان برای بسته‌هایی با نفوذپذیری بسیار بالا، معتبر نیست.

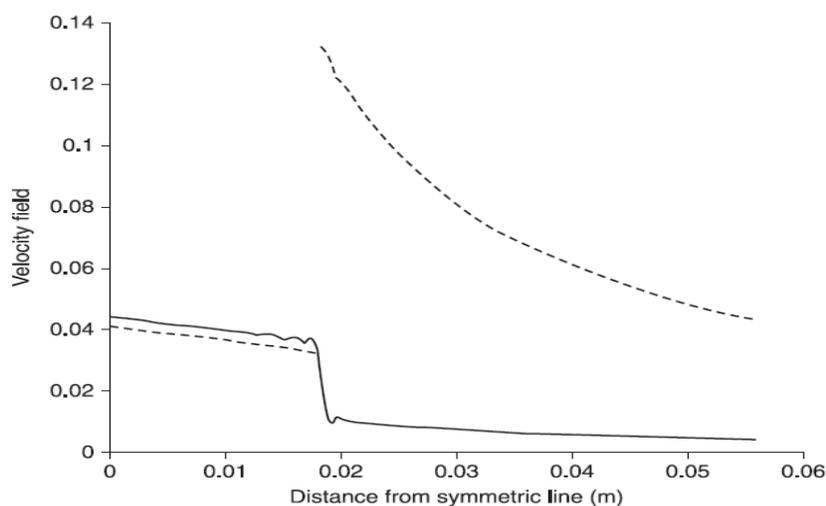
شکل ۱۳.۶ نمودارهای فشار را هنگامی که نفوذپذیری بسته تغییر می‌کند نشان می‌دهد. خطوط ممتد، نقطه چین-خط چین، نقطه چین و خط چین نمودارهای فشار را در سرتاسر لوله و بسته متخلخل در مقطع عرضی $y=0$ نشان می‌دهند (در مقادیر نفوذپذیری مختلف بسته: به ترتیب $10^{-11} * 3/8$ ، $10^{-10} * 1$ ، $10^{-9} * 3/6$ و $10^{-9} * 3/8$ m^2). نتایج عددی نشان می‌دهد که افت فشار با افزایش در نفوذپذیری بسته کاهش می‌یابد. با این حال، یک استثنا وجود دارد هنگامی که نفوذپذیری بسته $10^{-9} * 3/8$ (خطوط خط چین) است، که در آنجا فشار بالاتر از هنگامی است که نفوذپذیری بسته $10^{-9} * 3/6$ (خطوط نقطه چین) است. این رفتار همچنین نشان می‌دهد که برای شبیه‌سازی فعلی قانون داریسی هنگامی که نفوذپذیری بسته بالا است (یعنی $10^{-9} * 3/8$) نامعتبر می‌شود.



شکل ۱۳.۶. نمودارهای فشار در نفوذپذیری مختلف بسته.

باید توجه کرد که مقدار فشار جریان سیال در هر طرف بسته را می‌توان اندازه گرفت، و اندازه‌گیری‌ها را برای بررسی مدل به آسانی استفاده کرد. برای مثال، شبیه‌سازی عددی نشان داد هنگامی که نفوذپذیری بسته $10^{-9} * 3/6$ است روند کلی (یعنی افت فشار با افزایش در نفوذپذیری بسته کاهش می‌یابد) معتبر است، اما فشارهای کمتر از ۱۰۰ پاسکال در عمل ممکن است واقع بینانه نباشند، که این دلالت دارد بر اینکه قانون داری در عمل ممکن است در محدوده نفوذپذیری پایین‌تر بسته نسبت به آنهایی که بر شبیه‌سازی عددی دلالت داشتند، معتبر و موثق باشد.

شکل ۱۴.۶ تفاوت در توزیع سرعت جریان را در سرتاسر بسته هنگامی که نفوذپذیری بسته $10^{-9} * 3/8$ است مقایسه می‌کند و جریان را در بسته متخلخل توسط قانون داری (خطوط خط چین) و معادله برینکمن (خطوط ممتد) توصیف می‌کند. خطوط خط چین نتیجه یکسانی را با دو مورد قبلی نشان می‌دهد، که در آن هنگامی که نفوذپذیری بسته بیشتر از $10^{-9} * 3/8$ است قانون داری برای توصیف جریان در بسته متخلخل معتبر نیست. با این حال، خط ممتد نشان می‌دهد که معادله برینکمن هنوز هم برای تعریف جریان در سرتاسر بسته متخلخل معتبر است، زیرا نمودار سرعت جریان (خط ممتد) در سرتاسر هر دوی مایع آزاد (لوله) و بسته متخلخل همچنان در یک محدوده قابل قبولی است.



شکل ۱۴.۶. اثبات اعتبار قانون داری در محیط‌های متخلخل.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که معادلات برینکمن قانون داری را توسعه می‌دهند تا شامل عبارتی باشد که برای انتقال گرانی در تعادل تکانه به حساب آورده می‌شود و سرعت‌ها را در جهت‌های فضایی به عنوان متغیرهای وابسته معرفی کند. این رویکرد به نظر می‌رسد که نسبت به قانون داری بسیار قوی‌تر باشد، زیرا در سراسر طیف گسترده‌ی نرخ‌های جریان، و برای نفوذپذیری‌های مختلف محیط‌های متخلخل معتبر است.

۶.۲.۶. اثر دمای محلول

چگالی و گرانی مایع با افزایش دما کاهش می‌یابند. در نتیجه، تغییرات دمایی موجب می‌شود تا رفتار جریان تغییر کند؛ از این رو، هر دوی چگالی و گرانی مایع پارامترهای مهم در تعریف ویژگی‌های جریان هستند.

شکل ۱۵.۶ تاثیر دما را بر رفتار جریان نشان می‌دهد. خطوط ممتد و خط چین نمودارهای سرعت جریان را در سرتاسر لوله و بسته متخلخل به ترتیب در ۳۰ و ۷۰°C نشان می‌دهند. شبیه‌سازی عددی نشان می‌دهد که دما بالاتر، موجب سرعت جریان بالاتر در هر دوی مایع آزاد (لوله) و بسته متخلخل می‌شود. علاوه بر این، دماهای بالاتر موجب جریان نوسانی در فاز مایع آزاد نیز می‌شوند.

طبق نتایج عددی، تاثیر دما مایع بر خواص جریان کاملاً قابل قبول است. برخلاف این حقیقت که تغییر نفوذپذیری محیط متخلخل با دما بررسی نشده است. بنابراین دما بالاتر برای انتقال جریان سیال در هر دوی مایع آزاد و محیط‌های متخلخل، همچنین انتقال جرم در سیستم سیال، مناسب است.

۳.۶. رفتار دینامیکی انتقال جرم در رنگرزی بسته

فرآیند انتقال جرم درون بسته‌های نخ متخلخل به عوامل بسیاری بستگی دارد، از جمله جذب (سیستم‌های رنگزا/ لیف، ثابت جذب)، جابه‌جائی (نرخ جریان سیال و جهت جریان)، پراکندگی، پارامترهای بسته نخ (ضخامت/ تراکم/ تخلخل) و عوامل دیگر (دما، غیره). شبیه‌سازی عددی، بر پایه معادلات مدل مشتق شده در فصل ۴، روش قدرتمندی را برای بررسی رفتار دینامیکی انتقال جرم در رنگرزی بسته در شرایط مختلف رنگرزی فراهم می‌آورد.

برای ارزیابی کیفیت رنگرزی، دو جنبه رنگرزی باید در نظر گرفته شود: نرخ جذب رنگزا بر روی الیاف و یکنواختی توزیع رنگزا در سرتاسر بسته. غلظت رنگزا در خط انتهای بسته (سمت خروج جریان)

(CDEP) با زمان را می‌توان برای نشان دادن نرخ جذب رنگزا مورد استفاده قرار داد، اگر هیچ برگشت جریانی در طول رنگرزی به کار نرود. همچنین، نتایج شبیه‌سازی فرصتی را جهت فرموله کردن یک مقیاس بی بُعد برای پیش‌بینی یکنواختی رنگرزی بسته لیفی استوانه‌ای شکل فراهم می‌آورد. این مقیاس نشانگر فاکتور توزیع رنگزا (DDF) است، که این نسبت پایین‌ترین به بالاترین غلظت رنگزا بر روی الیاف در بسته در زمانی است که یکنواختی بررسی می‌شود، است. هنگامی که هیچ گونه برگشت جریانی در طول رنگرزی استفاده نشود، DDF برابر با نسبت غلظت رنگزا بر روی الیاف (C_f) در خط شروع و انتهای بسته است، یعنی:

$$DDF = C_f(l,t)/C_f(0,t)$$

منطقی است بر این تاکید شود که DDF نسبت بین غلظت رنگزا بر روی الیاف در خط شروع و انتهای بسته و، بنابراین، مشخصات ناپکنواختی رنگرزی را نشان می‌دهد.

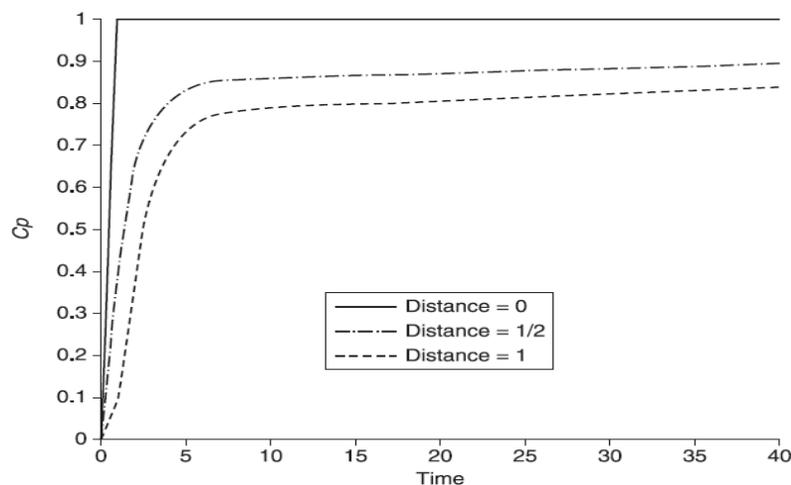
CDEP یک مقدار مطلق است، که غلظت رنگزا را در لایه انتهایی (سمت خروج جریان) بسته در زمان t نشان می‌دهد، در حالی که زاویه بین خط مماس منحنی و مختصات زمان، نرخ جذب رنگزا را ارائه می‌دهد. DDF، از طرفی دیگر، یک عبارت نسبی است. مقادیر نهایی DDF بر درجه یکنواختی در زمان t اشاره دارند، و منحنی‌ها تغییر توزیع رنگزا را در سرتاسر بسته نشان می‌دهند. هر دوی CDEP و DDF ممکن است برای ارزیابی کیفیت رنگرزی مورد استفاده قرار گیرند.

۱.۳.۶. اثر عوامل جذب بر رنگرزی بسته

رفتار رنگرزی برای ایزوتروم‌های مختلف جذب

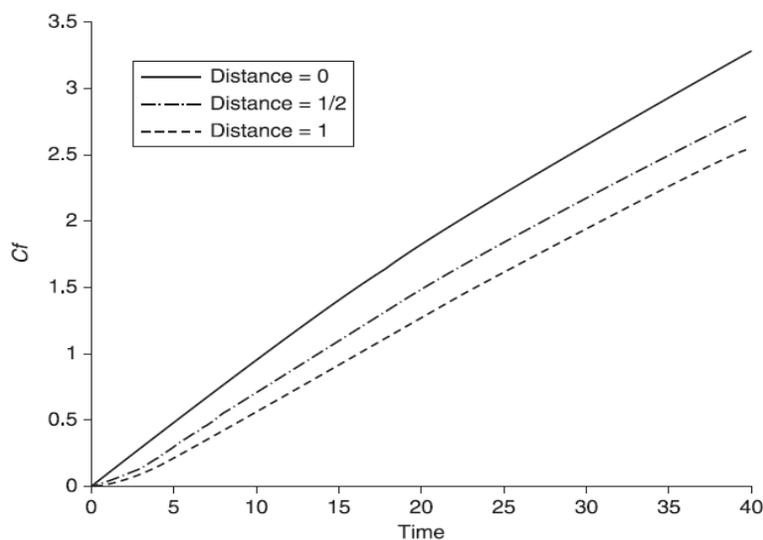
همان‌طور که در فصل ۲ بحث شد، فرض بر این است که هر سیستم رنگرزی را که مدل شبیه‌سازی برای آن به کار می‌رود بتوان توسط یکی از سه ایزوتروم‌های (نرست، فروندلیچ یا لانگمیور)، یا توسط ترکیبی از آنها نشان داد. برای مثال، رنگرزی الیاف مصنوعی بسیاری با رنگزاهای دیسپرس از ایزوتروم نرست پیروی می‌کند؛ غلظت‌های بالای رنگزاهای خمی و مستقیم بر روی الیاف سلولزی معمولاً ایزوتروم‌های نوع فروندلیچ را نشان می‌دهند؛ و رنگزاهای اسیدی لولینگ بر روی الیاف پروتئینی از ایزوتروم‌های لانگمیور پیروی می‌کنند. به‌کارگیری یکی از روابط هم‌دما این را میسر می‌سازد تا هر نوع سیستم رنگرزی با هر ترکیب رنگزا/لیفی را شبیه‌سازی کرد.

شکل‌های ۱۶.۶ و ۱۷.۶ توزیع‌های غلظت رنگزا را در مایع و بر روی الیاف در سرتاسر بسته، برای ایزوترم جذب نوع نرنست، نشان می‌دهند. در شکل ۱۶.۶، به ترتیب خط ممتد غلظت رنگزا را در مایع (C_p) در ورودی بسته با زمان، خطوط خط چین - نقطه چین C_p را در وسط بسته، و خطوط خط چین C_p را در انتهای بسته نشان می‌دهند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که غلظت رنگزا در سرتاسر بسته (C_p) در زمان کوتاهی (حدود ۵ واحد زمانی) به سرعت افزایش می‌یابد، اما افزایش بیشتر در خطوط میانی و انتهایی بسته کاملاً آهسته است. تفاوت در C_p در سرتاسر بسته اندکی تا ۴۰ واحد زمانی کاهش می‌یابد، نشان داده می‌شود که، در شرایط به کار رفته در شبیه‌سازی، توزیع نایکنواخت رنگزا در مایع از طریق بسته ممکن است طی یک دوره زمانی طولانی توسعه یابد.



شکل ۱۶.۶. غلظت رنگزا در مایع (C_p) در خط ورودی، میانه و خروجی بسته در برابر زمان فرآیند، برای ایزوترم جذب نوع نرنست.

شکل ۱۷.۶ نمودارهای توزیع غلظت رنگزا را بر روی الیاف در ورودی (خطوط ممتد)، میانه (خطوط خط چین - نقطه چین) و در انتهای بسته (خطوط خط چین) در برابر زمان نشان می‌دهد. می‌توان مشاهده کرد که C_f در لایه‌های مختلف بسته تقریباً به‌طور خطی با زمان افزایش می‌یابد، اما تفاوت‌های C_f در لایه‌های مختلف، که ممکن است برای نشان دادن توزیع یکنواخت رنگزا در عرض بسته مورد استفاده قرار گیرد، به نظر می‌رسد اندکی با زمان تا ۴۰ واحد زمانی افزایش یابد، و نشان دهنده توزیع نایکنواختی رنگزا بر روی الیاف در سرتاسر بسته در شرایط شبیه‌سازی به کار رفته است.

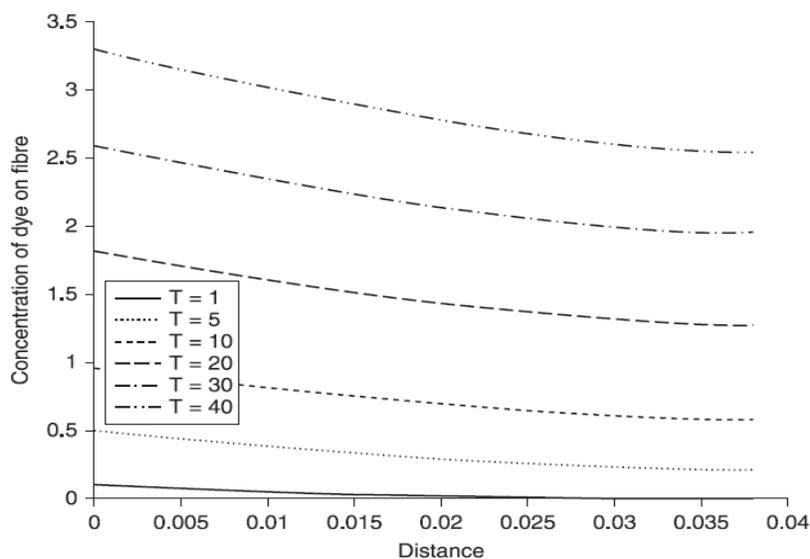


شکل ۱۷.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف (C_f) در خط ورودی، میانه و خروجی بسته در برابر زمان فرآیند، برای ایزوترم جذب نوع نرنست.

از نتایج نشان داده شده در شکل‌های ۱۶.۶ و ۱۷.۶، می‌توان نتیجه‌گیری کرد که، در شرایط شبیه‌سازی فعلی، توزیع نایک‌نواخت رنگزا هم در مایع و هم بر روی لیف از طریق بسته در مرحله ابتدای رنگرزی وجود خواهد داشت.

شکل ۱۸.۶ بیشتر توزیع‌های غلظت رنگزا را بر روی الیاف در زمان‌های مختلف آشکار می‌سازد.

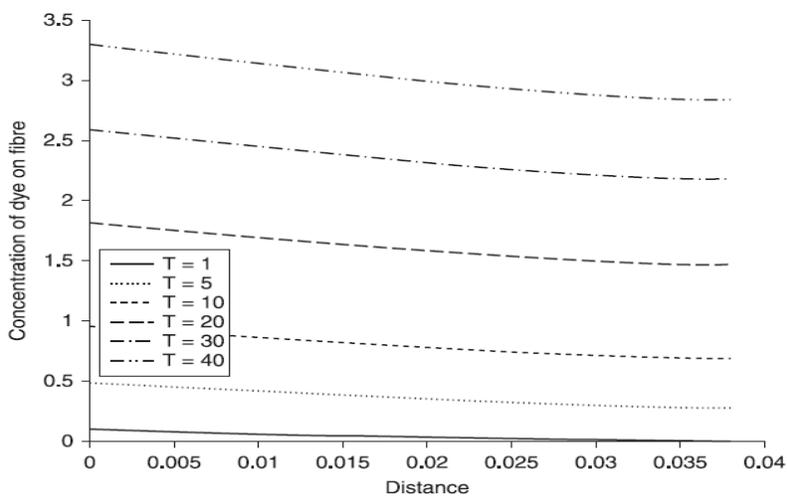
شکل ۱۸.۶ غلظت رنگزا را بر روی الیاف (C_f) در سرتاسر بسته در واحدهای زمانی ۱، ۵، ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۴۰ نشان می‌دهد. می‌توان مشاهده کرد که غلظت رنگزا بر روی لیف در سرتاسر بسته با زمان افزایش می‌یابد، اما با اختلاف بین C_f در خط ورودی و خروجی بسته، که این می‌تواند نشانگر یکنواختی رنگرزی در سرتاسر بسته باشد، به نظر می‌رسد که در برابر زمان تا ۴۰ واحد زمانی نسبتاً ثابت باقی بماند.



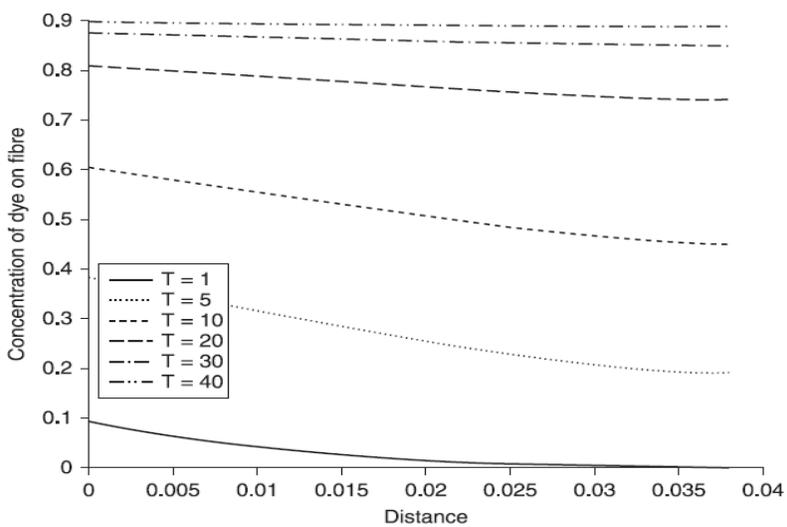
شکل ۱۸.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف (C_f) در سرتاسر بسته در برابر زمان، برای ایزوترم جذب نوع نرنست.

شکل‌های ۱۶.۶-۱۸.۶ نتایج شبیه‌سازی را هنگامی که جذب سطحی رنگزاها توسط الیاف از ایزوترم جذب نرنست پیروی کرده نشان می‌دهند. شکل‌های ۱۹.۶ و ۲۰.۶ غلظت رنگزای جذب شده توسط الیاف (C_f) را در سرتاسر بسته در واحدهای زمانی ۱، ۵، ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۴۰ به ترتیب برای ایزوترم‌های جذب نوع فروندلیچ و لانگمیور نشان می‌دهند.

نتایج نشان داده شده در شکل‌های ۱۸.۶-۲۰.۶ ثابت می‌کند که، برای سیستم‌های رنگرزی با ایزوترم‌های مختلف جذب، ارائه دهنده ترکیبات مختلف رنگزا/لیف، رفتارهای رنگرزی متفاوت هستند. سیستم‌هایی با ایزوترم جذب نوع فروندلیچ بالاترین C_f را در ۴۰ واحد زمانی ارائه می‌دهند، نشان دهنده نرخ جذب رنگزای بالاتر به دست آمده در طول رنگرزی. سیستم‌هایی با ایزوترم جذب نوع نرنست نتیجه مشابهی با ایزوترم فروندلیچ ارائه می‌دهند، اما با C_f کمی پایین‌تر در خط خروجی بسته. این اشاره به یکنواختی اندکی ضعیف‌تر در توزیع رنگزا در سرتاسر بسته دارد.



شکل ۱۹.۶. C_f در سرتاسر بسته در زمان‌های مختلف، برای ایزوترم جذب نوع فروندلیچ.

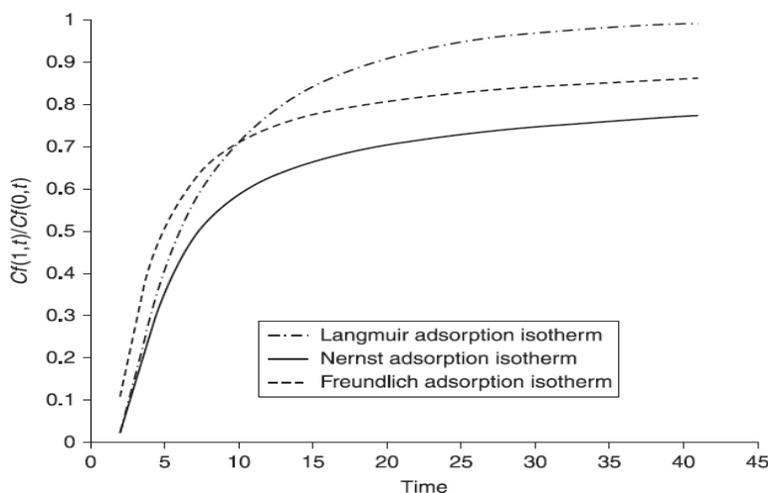


شکل ۲۰.۶. C_f در سرتاسر بسته در زمان‌های مختلف، برای ایزوترم جذب نوع لانگمیور.

با این حال سیستم‌هایی با ایزوترم جذب نوع لانگمیور، رفتار متفاوتی را در شرایط مشابه ارائه می‌دهند.

از شکل ۲۰.۶ می‌توان مشاهده کرد که سیستم رنگرزی با ایزوترم جذب نوع لانگمیور C_f پایین‌تری را در هر دو طرف بسته در زمان رنگرزی مشابه (۴۰ واحد زمانی) در مقایسه با دو سیستم رنگرزی دیگر به‌دست می‌آورد، نشان‌دهنده نرخ جذب رنگزای بسیار آهسته‌ی به‌دست آمده است. با این حال، تفاوت در C_f بین دو طرف بسته پس از مدت زمانی کوتاه (۲۰ واحد زمانی) بسیار اندک ظاهر می‌شود، که این یعنی یکنواختی بهتری نسبت به دو سیستم رنگرزی دیگر به‌دست آمده بود.

شکل ۲۱.۶، DDF را در برابر زمان رنگرزی برای سه ایزوترم مختلف جذب نشان می‌دهد. مشخص است که، برای سه سیستم رنگرزی مختلف، DDF در ۱۰ واحد زمانی اول به سرعت افزایش می‌یابد، و پس از آن با گذشت زمان به تدریج بر مقدارش افزوده می‌شود. سیستم رنگرزی بر پایه ایزوترم جذب لانگمیور بهترین نتیجه DDF را (خطوط خط چین - نقطه چین) بعد از ۱۰ واحد زمانی نشان می‌دهد، که این یعنی در شرایط شبیه‌سازی بهترین مهاجرت رنگزا از طریق لایه‌های بسته رخ می‌دهد. از طرفی دیگر، نتیجه برای سیستم بر پایه ایزوترم جذب نرنست (خطوط ممتد)، ضعیف‌ترین توزیع رنگزا را از طریق بسته در طول زمان شبیه‌سازی مورد بررسی پیشنهاد می‌دهد. نتایج برای سیستم رنگرزی بر پایه ایزوترم جذب فروندلیچ (خطوط خط چین) نشان می‌دهد که بهترین مهاجرت رنگزا در مرحله ابتدای رنگرزی (با ۱۰ واحد زمانی) به‌دست می‌آید، و سپس DDF به آرامی در طول مدت زمان شبیه‌سازی باقیمانده افزایش می‌یابد.

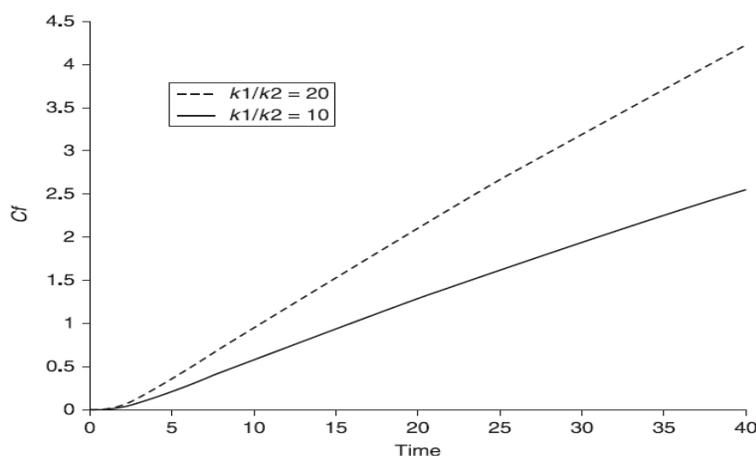


شکل ۲۱.۶. مقایسه DDF برای ایزوترم‌های مختلف جذب.

ضریب جذب

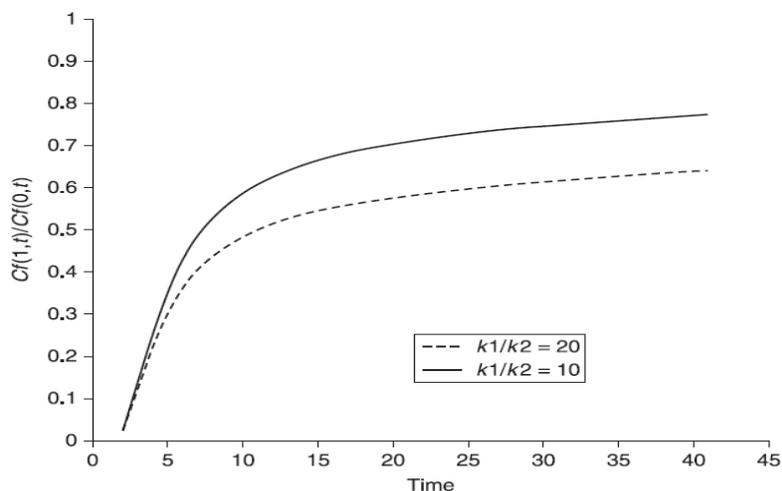
یک دیدگاه جالب توجه جذب تاثیر ثابت سرعت جذب ($k=k_1/k_2$) بر فرآیند رنگرزی است. همان طور که قبلاً اشاره شده، k_1 و k_2 به ترتیب ثابت‌های سرعت جذب و واجذب هستند. بنابراین $k(k_1/k_2)$ ضریب واقعی جذب است، که ویژگی‌های جذب را برای ترکیبات مختلف رنگزا/لیف شرح می‌دهد.

در شکل ۲۲.۶، خطوط خط‌چین و ممتد غلظت رنگزا را بر روی الیاف در خط انتهایی بسته (CDEP) نشان می‌دهد، که در آن ضرایب جذب به ترتیب ۲۰ و ۱۰ هستند. ضریب جذب بالاتر ($k=k_1/k_2$) منجر به نرخ جذب رنگزای بالاتری در طول زمان ابتدای شبیه‌سازی می‌شود. یکنواختی توزیع رنگزا در عرض بسته در شکل ۲۳.۶ نشان داده می‌شود.



شکل ۲۲.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف در خط انتهایی بسته با زمان، بر طبق ایزوترم جذب نوع نرنست.

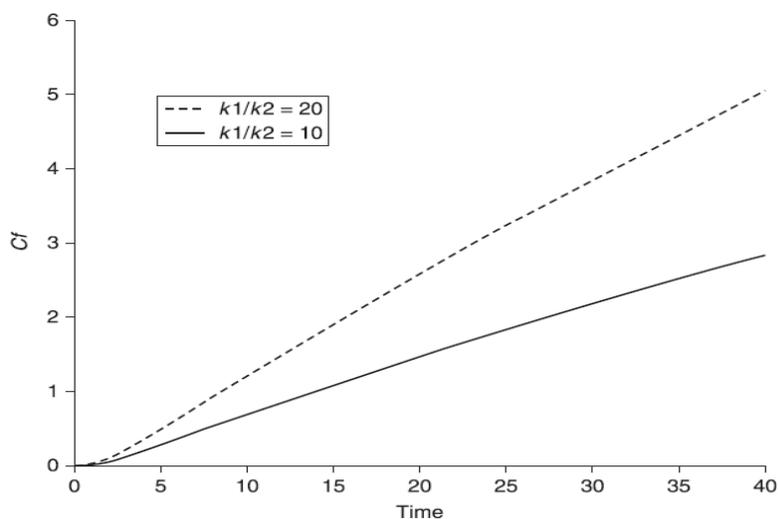
شکل ۲۳.۶ نشان می‌دهد که DDF در هر دو نرخ از ضرایب جذب در ۱۰ واحد زمانی به شدت افزایش می‌یابد، اما وقتی افزایش بسیار آهسته می‌شود، نشان می‌دهد که مرحله ابتدای رنگرزی برای رنگرزی یکنواخت بسیار مهم است. نتیجه جالب توجه آن است که رنگرزی با ضریب جذب بالاتر (خطوط خط‌چین) یکنواختی ضعیف‌تری در توزیع رنگزا از طریق بسته، در مقایسه با رنگرزی با ضریب جذب پایین‌تر (خطوط ممتد) ارائه می‌دهد.



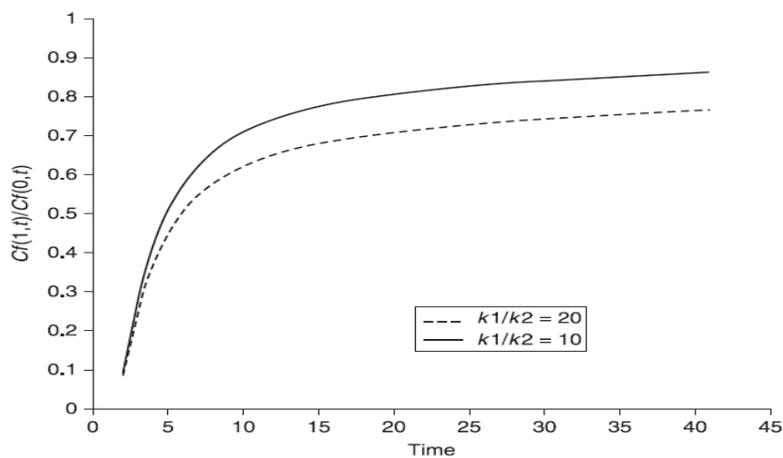
شکل ۲۳.۶. DDF در برابر زمان برای ضرایب مختلف جذب و ایزوترم جذب نوع نرنست.

نتایج شبیه‌سازی اشاره دارد بر این‌که ارتباط نزدیکی بین ضریب جذب و نرخ جذب رنگزا وجود دارد. مقادیر بالای ضرایب جذب منجر به زمان رنگرزی کوتاه و نایکنواختی ابتدایی بالای رنگرزی‌های بسته منسوج می‌شوند. در مقابل، مقادیر ضریب جذب پایین با خطر ریسک کمتری از نایکنواختی در رنگرزی همراه است اما نرخ جذب رنگزا را در طول فرآیند کاهش می‌دهد.

نتایج بالا از شکل‌های ۲۲.۶ و ۲۳.۶ استنتاج می‌شوند، برای ایزوترم‌های جذب نوع نرنست. در مورد ایزوترم‌های جذب فروندلیچ، شبیه‌سازی روند یکسانی را برای هر دوی CDEP و DDF (شکل‌های ۲۴.۶ و ۲۵.۶ را ببینید) نشان می‌دهد، اگرچه سیستم رنگرزی با ایزوترم جذب فروندلیچ به نظر می‌رسد تا توزیع رنگزای بهتری را از طریق بسته ارائه دهد.



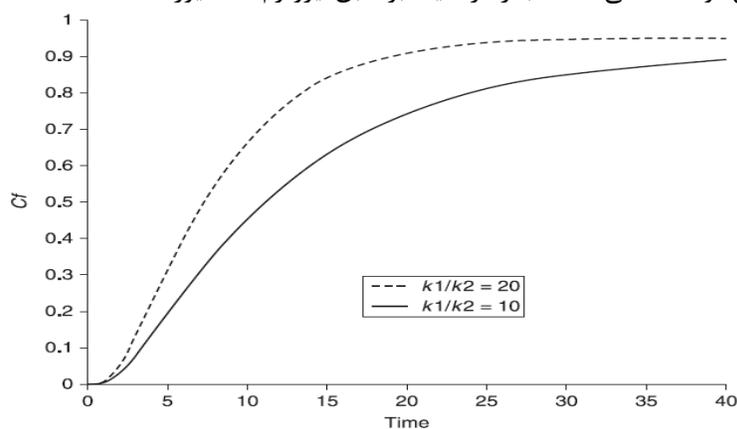
شکل ۲۴.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف در خط انتهایی بسته با زمان، برای ایزوترم جذب نوع فروندلیچ.



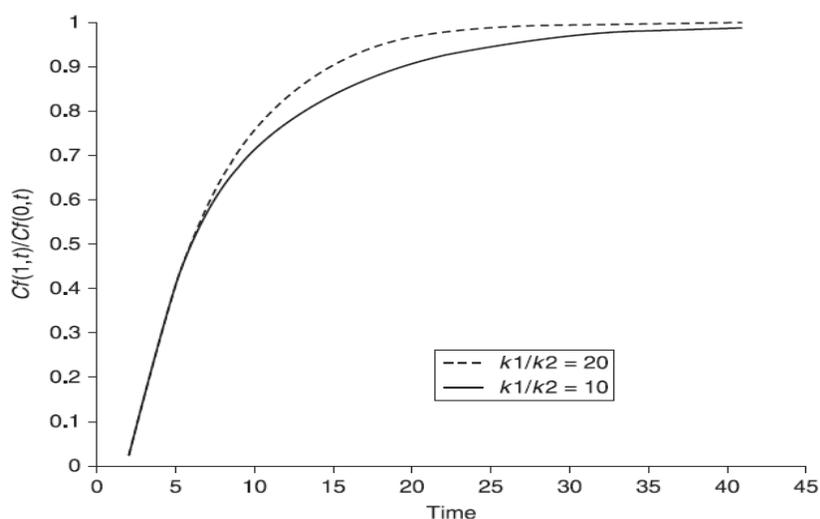
شکل ۲۵.۶. DDF در برابر زمان برای ضرایب مختلف جذب و ایزوترم جذب نوع فروندلیچ.

شکل‌های ۲۶.۶ و ۲۷.۶ رفتار متفاوتی را در مورد سیستم‌های رنگریزی بر پایه ایزوترم جذب لانگمیور نشان می‌دهند. ضریب جذب بالاتر موجب CDEP بالاتر می‌شود، اگرچه CDEP به آرامی افزایش می‌یابد و پس از ۴۰ واحد زمانی تنها به ۰/۹۳ می‌رسد. علاوه بر این، از نظر یکنواختی توزیع رنگزا، ضریب جذب بالاتر منجر به DDF پایین‌تر نمی‌شود. برعکس، ضریب جذب بالاتر مقدار DDF کمی بالاتری را

ارائه می‌دهد و منجر به افزایش نرخ جذب رنگزا بدون هیچ گونه تاثیر منفی بر یکنواختی توزیع رنگزا از طریق بسته می‌شود، هنگامی که جذب رنگزا/لیف بر طبق ایزوترم لانگمیر است.



شکل ۲۶.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف در خط انتهایی بسته با زمان، بر طبق ایزوترم جذب نوع لانگمیر.



شکل ۲۷.۶. DDF در برابر زمان برای ضرایب مختلف جذب و ایزوترم جذب نوع لانگمیر.

تا اینجا، از نتایج شبیه‌سازی نشان داده شده در شکل‌های ۱۶.۶ - ۲۷.۶، می‌توان نتیجه‌گیری کرد که رنگرزی‌هایی با ایزوترم‌های مختلف جذب، نشان دهنده ترکیبات مختلف رنگزا/لیف، تفاوت‌هایی را

در نرخ جذب رنگزا و یکنواختی توزیع رنگزا از طریق بسته در مرحله ابتدای رنگری نشان می‌دهند. سیستم‌های رنگری بر پایه ایزوترم جذب فروندلیج بالاترین نرخ جذب رنگزا را نشان می‌دهند، در حالی که سیستم‌های رنگری بر پایه ایزوترم جذب لانگمیور بهترین یکنواختی توزیع رنگزا را در عرض بسته نشان می‌دهند.

ضریب جذب بالاتر در رنگری منجر به نرخ جذب رنگزای بالاتر، و یکنواختی ضعیف‌تر توزیع رنگزا از طریق بسته می‌شود، مگر برای سیستم‌ها بر پایه ایزوترم جذب لانگمیور. این نتیجه با رفتار مشاهده شده از سیستم‌های رنگری تجاری سازگاری است. برای مثال، در بسیاری از موارد شناخته می‌شود که رنگزاهایی با تمایل ذاتی بالا منتج به رمق‌کشی تعادلی بالا می‌شوند و برای به کارگیری به‌طور یکنواخت سخت هستند.

برای طراحی یک سیستم کنترل آنلاین برای رنگری عملی بسته، فرم ساده شده‌ی مدل بسیار مهم خواهد بود. استراتژی‌های کنترل بر پایه "سناریو در بدترین حالت"^۱ [۴] معمولاً به کنترل پارامترهای کلیدی که بر نتیجه فرآیند تاثیر می‌گذارند یا تعریف می‌کنند، نیاز است، مثالی مناسب وجود یکنواختی توزیع رنگزا در عرض بسته در فرآیند رنگری بسته است. زیرا سیستم‌های رنگری بر پایه جذب نرنست ضعیف‌ترین یکنواختی توزیع رنگزا را از طریق بسته نشان می‌دهند، ارتباط جذب خطی ممکن است برای ارائه سیستم رنگری هر ترکیب رنگزا/لیف استفاده شود. این ممکن است به‌عنوان رویکردی منطقی برای ساده‌سازی مدل کلی رنگری مورد مطالعه قرار گیرد، به‌خصوص زمانی که ارتباط خطی برای جذب رنگزا، روشی ساده‌تر در مدل‌سازی فرآیند رنگری باشد.

۲.۳.۶. اثر عوامل جابه‌جائی

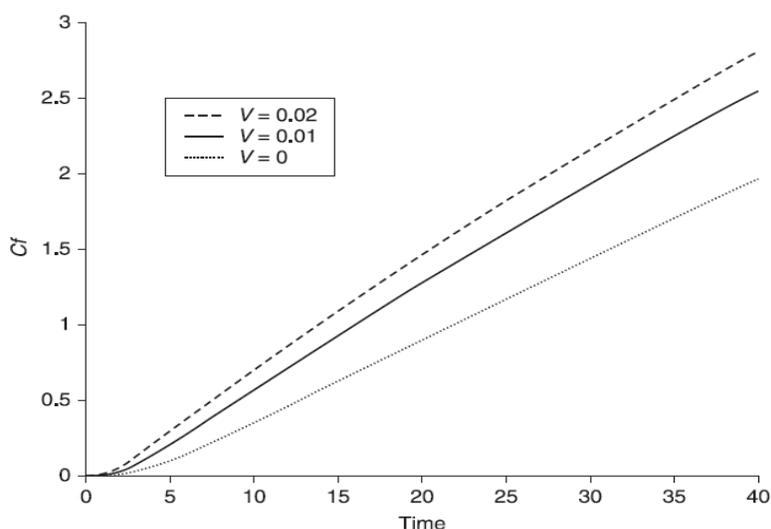
نرخ جریان

به‌خوبی مقرر می‌شود که نرخ رنگری در عمل به‌طور قابل توجهی وابسته به بازدهی است که در آن مایع رنگزا از طریق مواد در حال رنگری به گردش در می‌آید. سرعت جریان مایع در رنگری بسته نقش نسبتاً مهمی را در رنگری ایفا می‌کند، زیرا این همچنین می‌تواند ماهیت توزیع رنگزا را در سرتاسر بسته متخلخل نخ در طول رنگری تعیین کند.

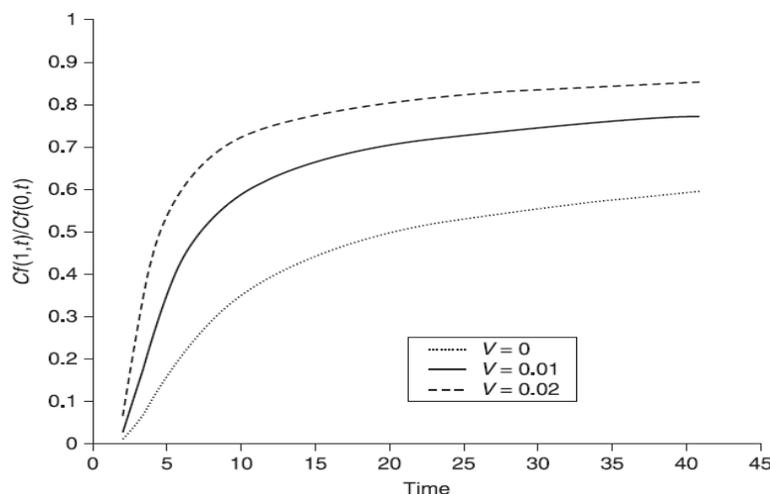
¹ The worst case scenario

در رنگرزی عملی، محدوده نرخ جریان نرمال ممکن است بین ۲۰ و ۶۰ l/min.Kg باشد، که این معادل با نرخی در حدود ۰/۲ - ۰/۱ m/s در سمت جریان ورودی مجرای بسته ماشین بوبین رنگ‌کنی است. با توجه به نتایج شبیه‌سازی از بخش قبل، نرخ جریان درون بسته متخلخل ممکن است در محدوده ۰/۰۲ - ۰/۰۱ m/s در نظر گرفته شود.

شکل ۲۸.۶ غلظت رنگزا را بر روی الیاف در سمت جریان خروجی بسته در برابر زمان نشان می‌دهد، جایی که سرعت جریان در درون بسته به ترتیب: ۰ (خطوط نقطه چین)، ۰/۰۱ (خطوط ممتد) و ۰/۰۲ m/s (خطوط خط چین - نقطه چین) است. رابطه جذب از ایزوترم نرنست پیروی می‌کند. نتیجه شبیه‌سازی نشان می‌دهد که تفاوت در نرخ جریان به‌طور چشمگیری جذب رنگزا را تحت تاثیر قرار نمی‌دهد. برای مثال، هنگامی که سرعت جریان درون بسته تا ۱۰۰٪ افزایش می‌یابد، یعنی از ۰/۰۱ تا ۰/۰۲ m/s، CDEP در ۴۰ واحد زمانی تنها تا ۱۰٪ افزوده می‌شود، یعنی از ۲/۵ تا ۲/۷۵. با این حال، هنگام $V=0$ ، تفاوت در جذب رنگزا کاملاً زیاد است، در مقایسه با سرعت جریان در محدوده نرمال. همچنین شکل ۲۹.۶ اثر عامل جابه‌جایی را در رنگرزی برحسب DDF نشان می‌دهد.



شکل ۲۸.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف در سمت جریان خروجی بسته، جایی که سرعت جریان درون بسته به ترتیب ۰، ۰/۰۱ و ۰/۰۲ m/s است.



شکل ۲۹.۶. یکنواختی توزیع رنگزا از طریق بسته، جایی که سرعت جریان درون بسته به ترتیب ۰، ۰/۰۱ و ۰/۰۲ m/s است.

در شکل ۲۹.۶، خطوط نقطه‌چین، ممتد و خط‌چین DDF را در برابر زمان نشان می‌دهند، جایی که سرعت‌های جریان درون بسته به ترتیب ۰، ۰/۰۱ و ۰/۰۲ m/s هستند. نتایج نشان می‌دهد که یکنواختی توزیع رنگزا از طریق بسته با افزایش در سرعت جریان درون بسته بهبود می‌یابد. افزایش در DDF در ۱۰ واحد زمانی اول برای سرعت‌های جریان ۰/۰۱ و ۰/۰۲ m/s سریع است، و سپس به تدریج به ۰/۷۸ و ۰/۸۶ افزایش می‌یابد. این یعنی افزایش ۱۰۰ درصدی در سرعت جریان موجب افزایش ۱/۰۲٪ در DDF می‌شود. این نتیجه دلالت دارد بر آن که در نرخ‌های جریان به قدر کافی بالا (درون محدوده عملی نرمال) یکنواختی رنگرزی به‌طور قابل توجهی با تغییر در نرخ جریان تحت تاثیر قرار نخواهد گرفت.

هنگامی که سرعت جریان صفر است، عامل جابه‌جایی در رنگرزی در نظر گرفته نمی‌شود. در این حالت DDF در پایان زمان شبیه‌سازی حدوداً به ۰/۶ می‌رسد. تفاوت در DDF برای مواردی با جابه‌جایی و بدون آن، برای سرعت‌هایی در محدوده عملی، به بزرگی ۰/۳۰ - ۰/۴۳ است. این نتیجه، همچنین آنچه در شکل ۲۹.۶ نشان داده شده، پیشنهاد می‌دهد که عامل جابه‌جایی هنگام مدل‌سازی فرآیند رنگرزی نباید نادیده گرفته شود.

شکل‌های ۲۸.۶ و ۲۹.۶ تنها نتایجی که در آن رابطه جذب از ایزوترم نرنست پیروی می‌کند را نشان می‌دهند. رنگرزی‌هایی که در آن روابط جذب از دو ایزوترم دیگر پیروی کرده روند مشابه‌ای را به‌طوریکه در شکل‌های ۲۸.۶ و ۲۹.۶ نشان داده، ارائه می‌دهند، اگرچه برای رنگرزی با جذب لانگمیر هر دوی CDEP و DDF به نظر می‌رسد که با تغییر در نرخ جریان حتی در کمترین مقدار تغییر می‌کنند. این دلالت دارد بر آن‌که، در این شرایط، نرخ جریان رنگرزی را بیش از حد تحت تاثیر قرار نمی‌دهد.

جهت جریان

جهت جریان در طول رنگرزی نیز گمان می‌شود که یکی دیگر از عوامل مهم موثر بر فرآیند رنگرزی است. به دلیل جذب رنگزا توسط الیاف، مایع رنگزا از بسته متخلخل عبور می‌کند، نرخ جذب تحت تاثیر قرار خواهد گرفت؛ این در ورودی بسته نسبت به نقطه خروج از آن بیشتر خواهد بود.

تصاویر چاپی III و IV در صفحه ۱۷۸ توزیع غلظت رنگزا را بر روی الیاف درون بسته برای هر دو جهت جریان، یعنی جهت‌های خارج به داخل و داخل به خارج نشان می‌دهند. تفاوت در انتقال رنگزا بین این دو الگوی جهت جریان واضح است. باید توجه شود که در شرایط یکسان DDF در زمان ۴۰ برای جهت جریان خارج به داخل ۰/۶۷ است، در حالی‌که برای جهت داخل به خارج این مقدار تنها ۰/۴۹ است.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که جهت جریان خارج به داخل برای مهاجرت رنگزا در عرض بسته در مقایسه با جهت داخل به خارج ترجیح داده می‌شود. این ممکن است به دلیل هندسه بسته باشد. هنگامی‌که مایع در جهت خارج به داخل از طریق بسته جریان می‌یابد، با یک سطح تماس بسیار بزرگتر موثر در جذب رنگزا توسط الیاف مواجه می‌شود، در مقایسه با جهت مخالف.

۳.۳.۶. اثر عوامل پراکندگی

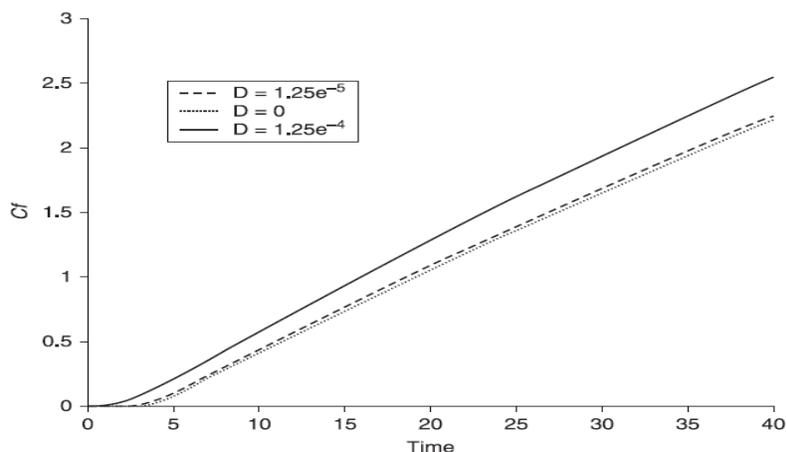
ضریب پراکندگی

در مدل انتقال جرم، عامل پراکندگی فرض می‌شود که برای کاهش گرادیان غلظت مایع رنگزای جریان یافته از طریق بسته باشد، در نتیجه منجر به توزیع بسیار یکنواخت مایع رنگزا درون بسته می‌شود. با این حال، بررسی‌های گزارش شده از تاثیر عامل پراکندگی بر نرخ رنگرزی، بسیار اندک هستند. برلی و

همکارانش^۱ [۵] و وثوقی [۶] ضریب پراکندگی را برای توصیف انتقال پراکنده رنگزا در مدل فرآیندهای رنگرزی منسوج در معادلات ریاضی منظم به حساب آوردند؛ با این حال، اهمیت گنجاندن این پارامتر بر نتیجه رنگرزی روشن نشد.

شکل‌های ۳۰.۶ و ۳۱.۶ نتایج شبیه‌سازی هر دوی CDEP و DDF را در برابر زمان نشان می‌دهند، که در آن ضرایب پراکندگی به ترتیب $10^{-4} * 1/25$ ، $10^{-5} * 1/25$ و 0 (بدون هیچ گونه جذبی) هستند.

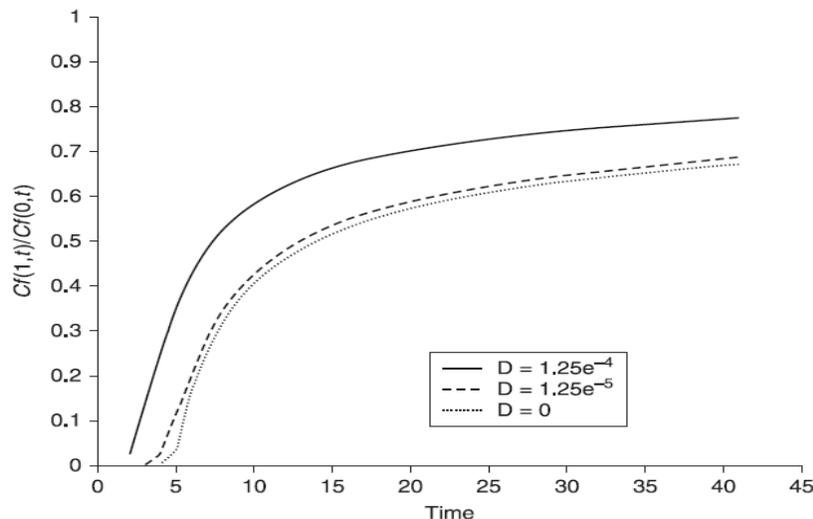
شکل ۳۰.۶ نشان می‌دهد که افزایش در ضریب پراکندگی به سختی نرخ جذب رنگزا بر روی الیاف را پس از یک زمان بسیار کوتاه (۵ واحد زمانی) تغییر می‌دهد، اگرچه این ضریب مقدار CDEP را تا اندازه‌ای در طول فرآیند می‌افزاید. این تاثیر جزئی است، زیرا افزایش ۱۰ برابری در ضریب پراکندگی تنها موجب افزایش ۱۳/۴٪ در CDEP می‌شود. هنگامی که ضریب پراکندگی صفر است، یعنی هنگامی که عبارت پراکندگی در سیستم نادیده گرفته می‌شود، مقدار نهایی CDEP تنها اندکی کمتر از زمانی که ضریب پراکندگی $10^{-5} * 1/25$ است، می‌شود. نتیجه این شبیه‌سازی به این معنی است که عبارت پراکندگی نقش مهمی را بر حسب نرخ جذب رنگزا ایفا نمی‌کند.



شکل ۳۰.۶. غلظت رنگزا بر روی الیاف در خط انتهایی بسته در برابر زمان، با استفاده از ضرایب پراکندگی مختلف و ایزوترم جذب نوع نرنست.

¹ Burley *et al.*

شکل ۳۱.۶ نشان می‌دهد که اثر ضریب پراکندگی بر یکنواختی توزیع رنگزا در عرض بسته مشابه با اثر آن بر نرخ جذب رنگزا است، یعنی DDF به همان اندازه که ضریب پراکندگی افزایش می‌یابد، صعود می‌کند. این سازگار با فرض پذیرفته شده‌ای است که در آن یکنواختی افزایش یافته در توزیع مایع رنگزا درون بسته با کاهش گرادیان غلظت مایع رنگزای جریان یافته از طریق بسته به دست می‌آید.



شکل ۳۱.۶. DDF در برابر زمان برای ضرایب مختلف پراکندگی و ایزوترم جذب نوع نرنست.

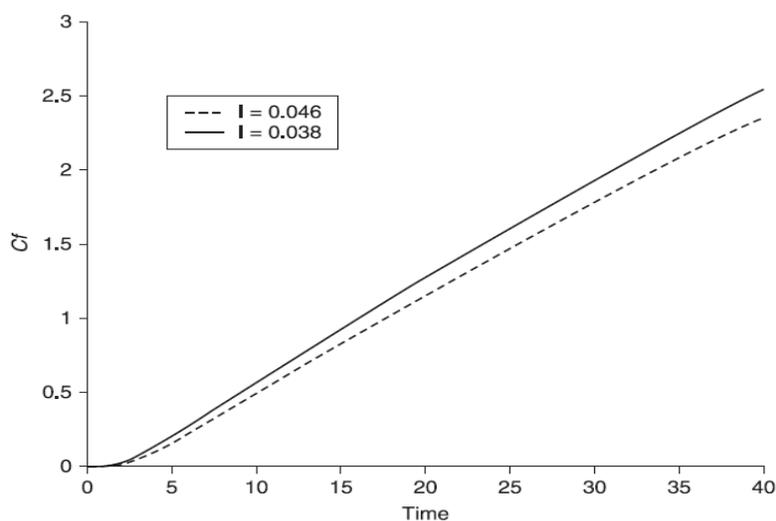
برای سیستم‌های رنگرزی بر پایه انواع ایزوترم جذب فروندلیچ و لانگمیر، نتایج مشابه‌ای برای هر دوی CDEP و DDF به دست می‌آید، سپس نشان داده می‌شود که ضریب پراکندگی بالاتر منجر به جذب رنگزای بیشتر و یکنواختی بهتر توزیع رنگزا در عرض بسته می‌شود، اگرچه تاثیر به نظر می‌رسد اندک باشد.

همچنین این نتایج از منظر نظری پیشنهاد می‌دهند که عبارت پراکندگی برای جذب رنگزا و یکنواختی، در مقایسه با نتایج به دست آمده از رنگرزی هنگامی که عبارت پراکندگی نادیده گرفته می‌شود، سازگار است.

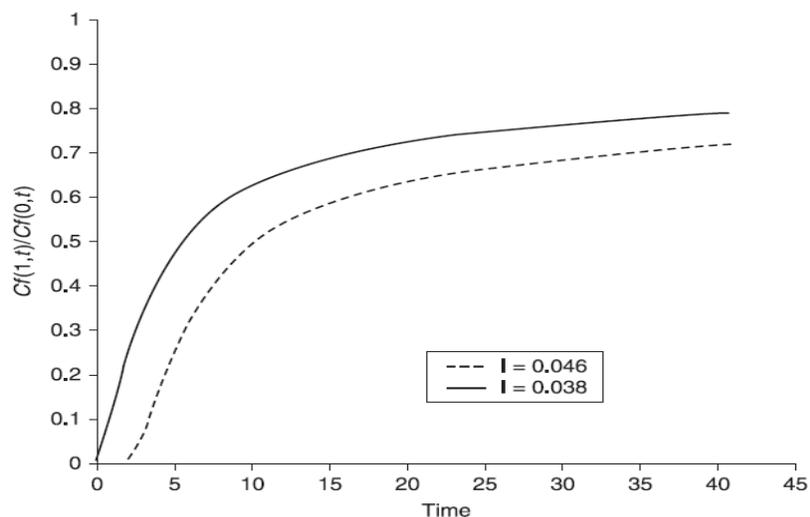
۴.۳.۶. اثر عوامل بسته

ضخامت بسته

ضخامت بسته، یا مسافتی که مایع رنگزا باید در جهت جریان مایع نفوذ کند، متغیر مهمی است که باید هنگام مدل‌سازی فرآیند رنگرزی در نظر گرفته شود. خطوط ممتد و خط‌چین در شکل ۳۲.۶ CDEP را با زمان نشان می‌دهد، که در آن ضخامت‌های بسته به ترتیب 0.038 m و 0.046 m هستند. نتایج نشان می‌دهد که تاثیر ضخامت بسته بر نرخ جذب رنگزا چشمگیر است، زیرا افزایش 21% در ضخامت بسته منجر به کاهش 8% در CDEP در 40 واحد زمانی می‌شود. سپس شکل ۳۳.۶ اثر ضخامت بسته بر رنگرزی برحسب DDF را نشان می‌دهد. خطوط ممتد و خط‌چین DDF را در برابر زمان نشان می‌دهند، که در آن ضخامت‌های بسته به ترتیب 0.038 m و 0.046 m هستند. می‌توان مشاهده کرد که افزایش 21% در ضخامت بسته منجر به کاهش DDF به بیش از 10% در طول زمان شبیه‌سازی می‌شود، نشان می‌دهد که بسته ضخیم‌تر موجب بدتر شدن واضح یکنواختی رنگرزی خواهد شد. اثر ضخامت بسته بر رنگرزی الیاف دنبال‌کننده انواع دیگر ایزوترم‌های جذب به نظر می‌رسد که مشابه با حالتی باشد که پیشتر بحث شد، به طوری که در شکل‌های ۳۲.۶ و ۳۳.۶ نشان داده می‌شود.



شکل ۳۲.۶. CDEP در برابر زمان برای ضخامت‌های مختلف بسته و ایزوترم جذب نوع نرنست.

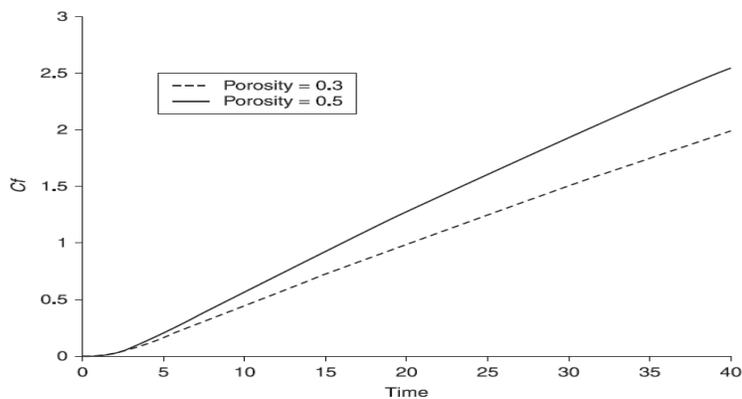


شکل ۳۳.۶. DDF در برابر زمان برای ضخامت‌های مختلف بسته و ایزوترم جذب نوع نرنست.

تخلخل بسته

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، تراکم و تخلخل بسته به دقت با هم وابسته هستند. تراکم بالای بسته در بسته با تخلخل پایین منتج می‌شود. در عمل، محدوده نرمال تخلخل بسته بین ۰/۳ و ۰/۵ است، اگرچه در برخی موارد این می‌تواند بین ۰/۱ و ۰/۷ باشد. شکل‌های ۳۴.۶ و ۳۵.۶ اثر تخلخل بسته را بر رنگرزی هنگامی که تخلخل‌های بسته ۰/۵ و ۰/۳ هستند نشان می‌دهند.

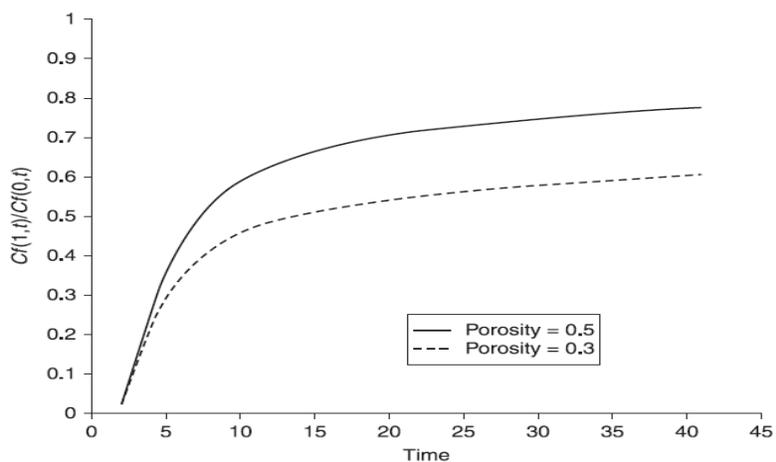
در شکل ۳۴.۶، خطوط ممتد و خط‌چین غلظت رنگزا بر روی الیاف را در خط انتهایی بسته در زمان t هنگامی که تخلخل بسته به ترتیب ۰/۵ و ۰/۳ است، نشان می‌دهند. نتایج شبیه‌سازی نمایان می‌کند که تخلخل بسته به شدت جذب رنگزا را در طول رنگرزی تحت تاثیر قرار می‌دهد، به‌طوری‌که کاهش ۴۰٪ (از ۰/۵ به ۰/۳) در تخلخل بسته موجب کاهش ۲۳/۱٪ در CDEP طی ۴۰ واحد زمان شبیه‌سازی می‌شود.



شکل ۳.۴.۶. CDEP در برابر زمان برای تخلخل‌های مختلف بسته، براساس ایزوترم جذب نرنست.

شکل ۳.۵.۶ نشان می‌دهد که اثر تخلخل بسته بر یکنواختی توزیع رنگزا در عرض بسته نیز قابل توجه است. برای مثال، هنگامی که تخلخل بسته تا ۴۰٪ کاهش می‌یابد، یعنی از ۰/۵ به ۰/۳، DDF تا ۲۳٪ کاهش می‌یابد، یعنی از ۰/۷۸ به ۰/۶.

بنابراین، بر طبق نتایج شبیه‌سازی، هر دوی ضخامت و تخلخل بسته متغیرهای مهمی هستند، که به شدت فرآیند رنگرزی را تحت تاثیر قرار می‌دهند. اثر ضخامت و تخلخل بسته بر رنگرزی برای دو نوع دیگر ایزوترم جذب مشابه است.



شکل ۳.۵.۶. DDF در برابر زمان برای تخلخل‌های مختلف بسته، براساس ایزوترم جذب نرنست.

برای ساده‌سازی مدل، پژوهشگران در این حیطه معمولاً در نظر می‌گیرند نخ به‌طور یکنواخت در سرتاسر بسته پیچیده شود، و از اینرو تخلخل ثابتی در این مدل‌های انتقال جرم فرض می‌شود. با این حال، در عمل، نخ ممکن است در لایه‌های درونی به‌طور محکم و در لایه‌های بیرونی بسیار آزادانه پیچیده شود، یا بالعکس. تجزیه و تحلیل حاضر فرض می‌کند که تخلخل تابعی از مسافت است، یعنی:

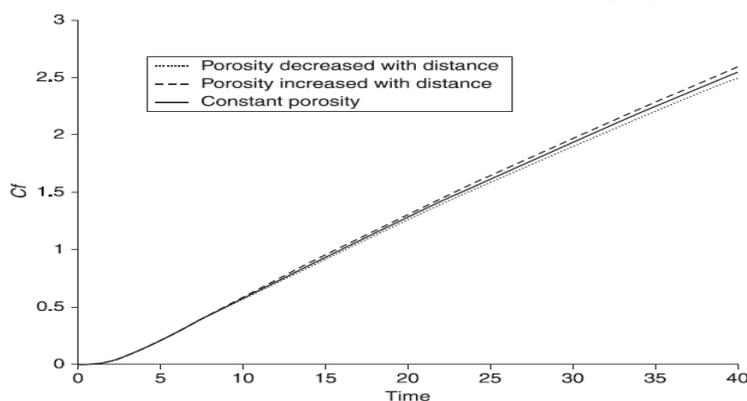
$$\varepsilon = f(x) \quad [۱-۶]$$

در مورد رابطه خطی بین ε و x معادله ۱-۶ می‌شود:

$$\varepsilon = m + nx \quad [۲-۶]$$

که در آن ε تخلخل بسته است، x فاصله از سمت ابتدای بسته در جهت جریان، m و n ثابت هستند. به وضوح رابطه بین ε و x ممکن است از انواع دیگر توابع پیروی کند، اما این حالت در اینجا در نظر گرفته نمی‌شود.

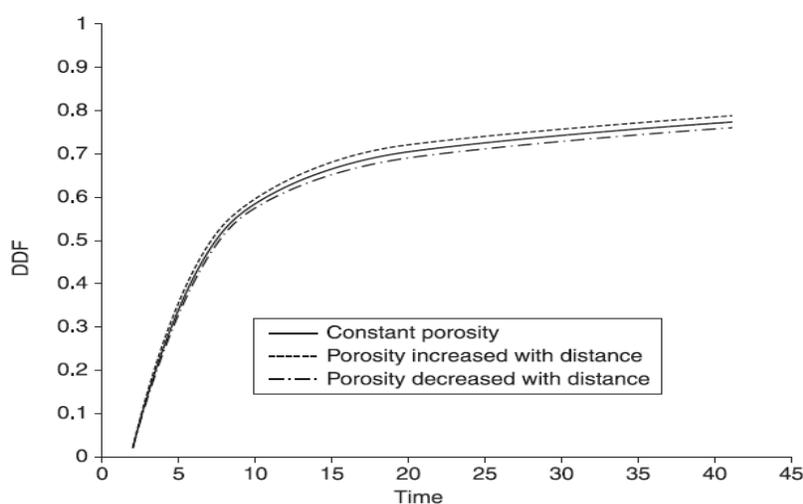
شکل ۳۶.۶ تاثیر تغییر تخلخل در عرض لایه‌های بسته را بر رفتار انتقال رنگ‌زا نشان می‌دهد. منحنی‌های نقطه‌چین و خط‌چین CDEP به ترتیب هنگامی که تخلخل بسته به‌طور خطی از ۰/۵ به ۰/۴۶۲ کاهش و یا از ۰/۵ به ۰/۵۳۸ افزایش یافته است (یا تراکم بسته افزایش و کاهش یافته) با فاصله از عرض بسته در جهت جریان نشان می‌دهند. خط ممتد، CDEP را نشان می‌دهد در جایی که تخلخل بسته (یا تراکم) ثابت باقی می‌ماند.



شکل ۳۶.۶. CDEP در برابر زمان جایی که تخلخل به‌طور خطی با فاصله از ابتدای بسته در جهت جریان تغییر می‌کند.

نتیجه شبیه‌سازی نشان می‌دهد که تغییرات در تخلخل بسته اثر کمی بر جذب رنگزا دارد. با این حال، رنگرزی‌هایی که در آن تخلخل با فاصله در جهت جریان افزایش یافته، اندکی بهتر ویژگی جذب رنگزا را ارائه می‌دهند، در حالی که رنگرزی‌هایی که در آن تخلخل با فاصله در جهت جریان کاهش یافته اندکی ضعیف‌تر ویژگی جذب رنگزا را نشان می‌دهند.

تاثیر تغییر در تخلخل بسته بر DDF مشابه با اثر آن بر CDEP است، بر طبق شکل ۳۷.۶. رنگرزی‌هایی که در آن تخلخل بسته به‌طور خطی با فاصله در جهت جریان افزایش یافته، بهترین DDF را نشان می‌دهند (خطوط خط‌چین). در حالی که رنگرزی‌هایی که در آن تخلخل بسته به‌طور خطی با فاصله در جهت جریان کاهش یافته ضعیف‌ترین DDF را به نمایش می‌گذارند (خطوط نقطه‌چین)، اما تفاوت جزئی است.



شکل ۳۷.۶. DDF در برابر زمان جایی که تخلخل بسته به‌طور خطی با فاصله از ابتدای بسته در جهت جریان تغییر می‌کند.

۵.۳.۶. مقایسه رفتار رنگرزی برای نمودارهای مختلف از ورود تدریجی مواد

در طول رنگرزی، غلظت رنگزا در تانک اختلاط (C_I) را می‌توان با ورود تدریجی مقدار مناسب رنگزا به درون سیستم کنترل کرد. اگر C_I تابعی از زمان باشد، در آن صورت موجب یک شرط مرزی متغیر در

خط ابتدای بسته (در جهت جریان) می‌شود. در این شرایط، راه‌حل مدل را می‌توان برای ارزیابی نمودارهای مختلف از ورود تدریجی رنگزا استفاده کرد. این راه حل را می‌توان برای نشان دادن یک استراتژی کنترلی مناسب برای فرآیند رنگرزی مورد استفاده قرار داد.

در شبیه‌سازی‌های مورد بحث در اینجا سه نوع نمودار مختلف ورود تدریجی مواد بررسی می‌شوند، که می‌توانند به‌عنوان تابعی از زمان رنگرزی به‌صورتی که در معادلات ۳-۶ تا ۵-۶ نشان داده شده بیان شوند.

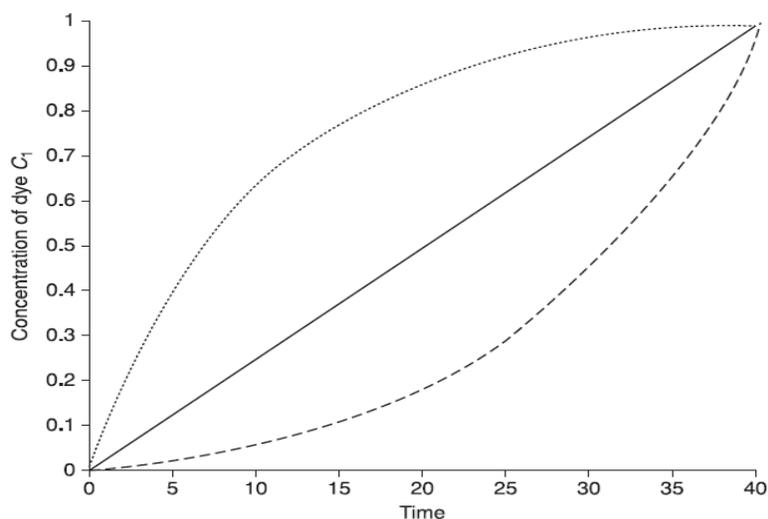
$$\text{خطی: } C_1 = C_{ini} + a \times t \quad [3-6]$$

$$\text{نمایی: } C_1 = C_{ini} + 1 - \exp((-t-b)/d) \quad [4-6]$$

$$\text{درجه دوم: } C_1 = C_{ini} + (t/e)^2 \quad [5-6]$$

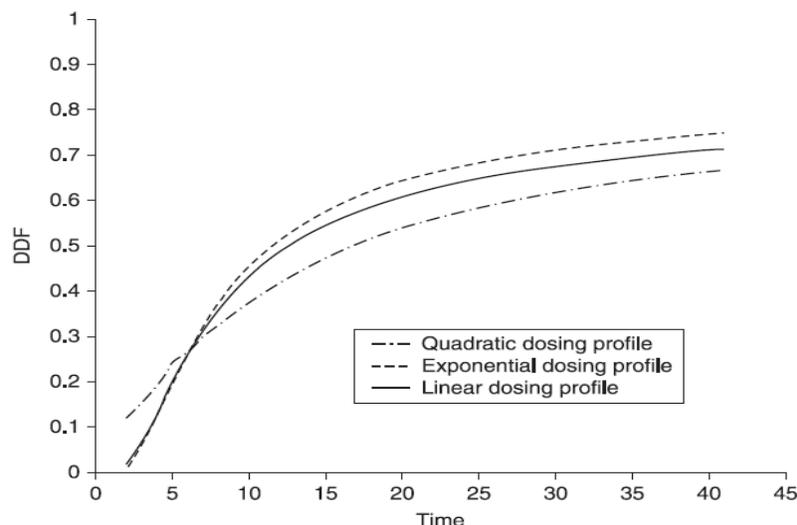
که در آن C_1 غلظت رنگزا در تانک اختلاط در زمان t C_{ini} غلظت اولیه رنگزا در تانک اختلاط، و a ، b ، d ، e ثابت‌ها هستند، که شکل منحنی‌ها را تعیین می‌کنند.

شکل ۳۸.۶ سه نمودار مختلف ورود تدریجی مواد برای غلظت اولیه صفر رنگزا در تانک اختلاط و طی زمان ورود تدریجی ۴۰ نشان می‌دهد. خطوط ممتد، نقطه‌چین و خط‌چین به‌ترتیب نمودارهای خطی، نمایی و درجه دوم از ورود تدریجی مواد را نشان می‌دهند.



شکل ۳۸.۶. نمودارهای خطی (خطوط ممتد)، نمایی (خطوط نقطه‌چین) و درجه دوم (خطوط خط‌چین) از ورود تدریجی مواد.

نمودار DDF در برابر زمان رنگرزی برای سه نمودار مختلف از ورود تدریجی مواد، در شکل ۳۹.۶، نشان می‌دهد که روندهای DDF در برابر زمان رنگرزی مشابه هستند. برای تمامی سه روش از ورود تدریجی مواد، DDF تنها در ۱۵ واحد زمانی اول فرآیند رنگرزی به سرعت افزایش یافته و سپس به تدریج در طول زمان ورود تدریجی مواد افزایش می‌یابد، تا به مقادیر نهایی به ترتیب ۰/۶۷، ۰/۷۱ و ۰/۷۴ برسد. این نشان می‌دهد که، برای الگوریتم‌های به کار رفته در ورود تدریجی مواد، مهاجرت سریع رنگزا در سرتاسر بسته را می‌توان تنها در یک دوره زمانی کوتاه بعد از شروع ورود تدریجی مواد به دست آورد، و پس از آن ورود تدریجی مواد تاثیر کمی بر توزیع رنگزا دارد؛ بنابراین کنترل یکنواختی ممکن است به عوامل دیگری مانند دما، pH و غیره وابسته باشد.



شکل ۳۹.۶. تاثیر نمودارهای مختلف از ورود تدریجی مواد بر یکنواختی توزیع رنگزا در سراسر بسته، براساس ایزوترم جذب نرنست.

مقایسه عوامل توزیع بعد از ۴۰ واحد زمان نشان می‌دهد که نمودار درجه دوم (خطوط نقطه‌چین و خط‌چین) مقدار DDF بهتری را در طول ۶ واحد زمانی اول از ورود تدریجی مواد ارائه می‌دهند، و پس از آن نرخ DDF در طول زمان ورود تدریجی مواد برای تمامی نمودارها کاهش می‌یابد. پس از اتمام ورود تدریجی مواد، نمودار نمایی تزریق رنگزا (خطوط خط‌چین) توزیع رنگزای بهتری را در عرض بسته (۰/۷۴) ارائه می‌دهد، در مقایسه با نمودارهای خطی و درجه دوم از ورود تدریجی مواد، که تنها به ترتیب به مقادیر ۰/۷۱ و ۰/۶۷ دست می‌یابند. اگرچه استفاده از روش‌های مختلف ورود تدریجی مواد منتج به درجات مختلف یکنواختی می‌شود، اما تفاوت در DDF بین روش‌های مختلف تنها کمتر از ۵٪ است.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که در حالت رنگرزی مداوم^۱، که در آن رنگزاها و مواد کمکی به طور پیوسته به درون حمام رنگرزی طی یک دوره زمانی وارد می‌شوند، نمودار درجه دوم از ورود تدریجی مواد روش ترجیح داده شده‌ای در طول مرحله ابتدای رنگرزی خواهد بود، زیرا نرخ تزریق رنگزا به آرامی شروع می‌شود. بعد از ۷ واحد زمانی افزایش نرخ ممکن است برای توزیع یکنواخت رنگزا (همان‌طور که

^۱ Integration dyeing

در شکل ۳۶.۶ نشان داده شد، خطوط خطچین) بسیار سریع باشد، و نمودار نمایی از ورود تدریجی مواد ممکن است روش ترجیح داده شده‌ای محسوب شود، زیرا بهترین نتیجه DDF را نشان می‌دهد. این نتیجه ممکن است با کاهش تدریجی نرخ ورود تدریجی مواد ایجاد شود (شکل ۳۷.۶، خطوط نقطه‌چین). بنابراین، نمودار ایده‌آل از ورود تدریجی مواد ممکن است بر پایه افزایش تدریجی نرخ ورود (درجه دوم) و پس از آن به‌کارگیری کاهش تدریجی نرخ ورود مواد (نمایی) باشد. با این حال، از آنجائی که تفاوت در DDF برای نمودارهای مختلف از ورود تدریجی مواد قابل توجه نیست (کمتر از ۵٪ در این حالت)، لذا نمودار خطی ورود تدریجی مواد می‌تواند یک رویکرد منطقی برای استفاده در رنگرزی مداوم به‌علت آسانی آن در عمل باشد. نتیجه‌گیری مشابهی را می‌توان از نتایج شبیه‌سازی برای دو نوع دیگر روابط جذب استنباط کرد.

۴.۶. نتیجه‌گیری‌ها از نتایج شبیه‌سازی

نتیجه‌گیری‌های زیر ممکن است از نتایج شبیه‌سازی ویژگی‌های جریان مایع رنگزا در طول فرآیند رنگرزی استنتاج شوند:

- معادلات برینکمن قانون دارسی را گسترش داده تا شامل عبارتی باشد که انتقال گرانو در تعادل تکانه را به حساب آورد و سرعت‌ها در جهت‌های فضایی را به‌عنوان متغیرهای وابسته معرفی کند. این رویکرد نسبت به استفاده‌ی تنها از قانون دارسی بسیار قوی‌تر است، زیرا می‌تواند در یک طیف گسترده‌تر نرخ‌های جریان و نفوذپذیری‌های بسته متخلخل به‌کار رود.
- نرخ جریان مایع رنگزا در سراسر بسته معمولاً بالا نیست، زیرا نفوذپذیری بسته معمولاً پایین است، انتقال تکانه توسط تنش‌های برشی را می‌توان نادیده در نظر گرفت. بنابراین، به‌کارگیری قانون دارسی یک رویکرد منطقی برای مدل کردن ویژگی‌های جریان است.
- هر چه نرخ جریان مایع وارد شده به بسته بیشتر باشد، سرعت مایع درون مجموعه نخ بیشتر می‌شود. با این حال، توزیع یکنواخت سرعت در عرض بسته ممکن است در سرعت‌های جریان مایع بالاتر با هم سازگار شوند. اگر ما فرض کنیم که توزیع یکنواخت سرعت جریان درون بسته به‌طور مستقیم با نتایج یک رنگرزی یکنواخت مرتبط باشد، در آن صورت می‌توان استنباط کرد که به‌کارگیری نرخ جریان بالا لزوماً در عمل سودمند نیست.

- نرخ جریان مایع بالا موجب جریان نوسانی بیشتری در دوک خواهد شد، که این تاثیر تنش‌های برشی بر ویژگی‌های جریان را افزایش می‌دهد. این احتمالاً دلیل جذب رنگزا در مراحل ابتدای رنگرزی نیز است.
- همچنین نرخ جریان مایع بالا موجب افزایش فشار درون هر دوی لوله و بسته متخلخل خواهد شد. افزایش در فشار می‌تواند منجر به از ریخت افتادگی و قیفی شدن بسته شود، که این می‌تواند به نتایج رنگرزی ناپیکنواخت نیز سوق یابد، و در نتیجه مطلوب نیست.
- توزیع‌های سرعت جریان درون مجموعه نخ متخلخل نسبت به توزیع‌های سرعت جریان درون مایع آزاد به گردش در آمده در دوک به وسیله فشار غالب است. این نتیجه با استفاده از معادلات برینکمن به دست می‌آید. همچنین اعتبار قانون داریسی را در توصیف جریان درون محیط متخلخل ثابت می‌کند، زیرا با فرض داریسی که در آن تنها نیروی محرکه برای جریان در محیط متخلخل گرادیان فشار است سازگار است.
- تغییرات جزئی در ضخامت بسته (برای مثال، ۰.۲۰٪) به‌طور چشمگیری ویژگی‌های جریان را در مایع آزاد (لوله) و بسته نخ متخلخل تحت تاثیر قرار نمی‌دهد، اما گرادیان فشار را درون سیستم تغییر خواهد داد.
- برای یک سرعت جریان داده شده، افزایش قطر لوله موجب افزایش در سرعت جریان خواهد شد. این موجب میدان سرعت بزرگ‌تری در هر دوی لوله و بسته متخلخل خواهد شد. در نتیجه، به‌طور نظری، در محدوده‌های عملی، قطرهای بزرگ‌تر لوله به دلیل سرعت‌های مرتبط با جریان بالاتر درون بسته متخلخل ترجیح داده خواهند شد.
- اگر نرخ جریان ورود به بسته ثابت نگه داشته شود، افزایش نفوذپذیری بسته افت فشار را در عرض بسته کاهش خواهد داد. با این حال، نمودارهای میدان سرعت درون لوله و بسته متخلخل برای نفوذپذیری‌های مختلف معمول در بسته به‌طور چشمگیری متفاوت نخواهد بود.
- افزایش دما مایع رنگرزی موجب سرعت جریان بالاتر در هر دوی لوله و بسته متخلخل خواهد شد، اما این افزایش همچنین منتج به جریان نوسانی در ناحیه مایع آزاد نیز خواهد شد. استفاده از دماهای بالای محلول رنگرزی می‌تواند انتقال جرم را تسهیل کند و انتقال جریان سیال در مایع آزاد و به علاوه محیط متخلخل را بهبود ببخشد. بدیهی است که، این

به ماهیت ترکیب رنگزا/ لیف در شرایط مورد مطالعه وابسته خواهد بود. جنبه‌های ترمودینامیکی دیگر رنگرزی که توسط دما تحت تاثیر قرار می‌گیرند در نظر گرفته نشده‌اند. نتیجه‌گیری‌های زیر نیز ممکن است از نتایج شبیه‌سازی بر پایه تجزیه و تحلیل انتقال جرم استنتاج شوند.

۱.۴.۶. عامل جذب

رنگرزی ترکیبات مختلف رنگزا/ لیف را می‌توان با یک تعداد ایزوتروم‌های جذب نشان داد. تجزیه و تحلیل شبیه‌سازی‌ها بر پایه ایزوتروم‌های مختلف جذب نرخ‌های متفاوت جذب رنگزا و یکنواختی توزیع رنگزا را در بسته در طول مراحل ابتدای رنگرزی برای نمودارهای مختلف جذب نشان می‌دهد:

- نتایج بر پایه، رنگرزی‌های دنبال کننده ایزوتروم جذب فروندلیچ بالاترین نرخ جذب رنگزا را نشان می‌دهند، در حالی که رنگرزی‌ها بر پایه ایزوتروم جذب لانگمیور بهترین یکنواختی توزیع رنگزا را در سرتاسر لایه‌های بسته عرضه می‌دارند. رنگرزی‌های ارائه شده توسط ایزوتروم جذب نرنست ضعیف‌ترین یکنواختی توزیع رنگزا در عرض بسته نشان می‌دهد.
- از آنجائی که شبیه‌سازی‌ها بر پایه ایزوتروم جذب نرنست ضعیف‌ترین نتایج یکنواختی را ارائه می‌دهد، لذا بدترین حالت استراتژی کنترل سناریو بر پایه ایزوتروم جذب نرنست می‌تواند برای کنترل رنگرزی هر ترکیب رنگزا/ لیفی مورد استفاده قرار گیرد. این به یک مدل‌سازی ساده شده و سیستم روش کنترل منتج خواهد شد، زیرا ایزوتروم نرنست یک ارتباط خطی بین پارامترهای کنترل و اندازه‌گیری ارائه می‌دهد.
- ضریب جذب بالاتر در رنگرزی منجر به نرخ جذب رنگزای بالاتر و توزیع کمتر رنگزا از طریق بسته (یکنواختی ضعیف) خواهد شد. با این حال، این امر برای ایزوتروم جذب لانگمیور حفظ نمی‌شود، که در آن استفاده از ضرایب جذب بالاتر به افزایش نرخ جذب رنگزا کمک می‌کند و مانع توزیع یکنواخت رنگزا در سرتاسر بسته نمی‌شود.

۲.۴.۶. عامل جابه‌جائی

اصطلاح جابه‌جائی نقش مهمی را در توازن انتقال جرم ایفا می‌کند:

- برای یک محدوده نرمال سرعت جریان، تفاوت در مقدار DDF هنگامی که اصطلاح جابه‌جائی به حساب آورده می‌شود و یا نمی‌شود می‌تواند به ۳۰ تا ۴۳٪ برسد. این دلالت دارد بر آنکه اصطلاح جابه‌جائی نباید در مدل‌سازی فرآیند رنگرزی نادیده گرفته شود.
- نرخ رنگرزی معمولاً با افزایش نرخ جریان افزایش می‌یابد. با این حال، در عمل، تغییرات جزئی نرخ جریان، هنگامی که نرخ‌های جریان معمولی استفاده می‌شوند، نرخ رنگرزی را به‌طور قابل توجهی تحت تاثیر قرار نمی‌دهند.
- جهت جریان "خارج به داخل" برای انتقال بهینه رنگزا در عرض بسته در مقایسه با جهت جریان "داخل به خارج" مطلوب‌تر است. این می‌تواند به علت مساحت سطح افزایش یافته در بیرون در مقایسه با سطح درونی بسته باشد، که به نوبه خود تماس بین مولکول‌های رنگزا و الیاف را در سطح مشترک بیرونی افزایش خواهد داد.

۳.۴.۶. عامل پراکندگی

با توجه به عامل پراکندگی نتیجه‌گیری‌های زیر قابل توجه هستند:

- نتایج شبیه‌سازی، از منظر نظری، ثابت می‌کند که استفاده از اصطلاح پراکندگی در مدل رنگرزی نتایج فرآیند رنگرزی را برحسب جذب و یکنواختی رنگزا بهبود می‌بخشد.
- افزایش اندازه ضرایب پراکندگی در شبیه‌سازی‌ها منجر به افزایش جذب‌های رنگزا و درجه بهبود یافته‌ی توزیع رنگزا در عرض بسته می‌شود. با این حال، تفاوت‌های ثبت شده در نتایج شبیه‌سازی حداقل بود. بنابراین، به‌منظور ساده‌سازی مدل انتقال رنگزا ممکن است منطقی باشد که اثر پراکندگی نادیده گرفته شود.

۴.۴.۶. هندسه بسته

هندسه بسته نقش بسیار مهمی را در یکنواختی فرآیند رنگرزی ایفا کرده و بر پارامترهای دیگر تاثیر می‌گذارد. به‌طور مشخص به نکات زیر باید توجه کرد:

- ضخامت بسته به‌طور قابل توجهی بر نتیجه فرآیند رنگرزی با تاثیرگذاری بر هر دوی CDEP و DDF موثر است. برای مثال، افزایش ۲۱٪ در ضخامت بسته DDF را تا ۱۰٪ در طول زمان

شبیه‌سازی کاهش می‌دهد. افزایش شعاع بسته به‌طور معکوس یکنواختی فرآیند رنگ‌رزی را تحت تاثیر قرار خواهد داد، و بنابراین یک توافق عملی باید در نظر گرفته شود.

- تخلخل بسته به شدت بر جذب رنگ‌زا در طول فرآیند رنگ‌رزی تاثیر می‌گذارد. کاهش تخلخل بسته هر دوی نرخ جذب رنگ‌زا و DDF را کاهش می‌دهد.
- پیچش بسته‌های نخ با تراکم نایکنواخت می‌تواند منجر به نمودارهای انتقال رنگ‌زای جالب توجه‌ای شود. برای مثال، افزایش تخلخل بسته (تراکم کاهش یافته) در جهت جریان مایع، بر طبق نمودار خطی از پیش تنظیم شده متناظر با سرعت جریان، مقدار DDF بهتری را ارائه می‌دهد. در مقابل، شبیه‌سازی رنگ‌رزی بسته‌هایی که تخلخل به‌طور خطی در جهت جریان مایع کاهش می‌یابد (تراکم افزایش یافته)، مقادیر DDF ضعیف‌تری را نشان می‌دهد. با این حال، لازم به ذکر است که تفاوت ظاهری در مقادیر DDF قابل توجه نیست.

۵.۴.۶. رنگ‌رزی مداوم (تدریجی)

همان‌طور که پیش از این اشاره شد، تعداد رویکردهای متفاوتی برای معرفی رنگ‌ها به مجموعه لیفی به کار برده شده است. در به اصطلاح رنگ‌رزی مداوم، اثر پارامترهای موثر بر نتیجه رنگ‌رزی باید به‌دقت در نظر گرفته شود. نتیجه‌گیری‌های زیر باید مورد توجه قرار گیرند:

- در رنگ‌رزی مداوم (افزایش مداوم و پیوسته)، استفاده از روش‌های مختلف جهت ورود تدریجی مواد نمودارهای انتقال رنگ‌زای مختلفی را ارائه می‌دهد؛ با این حال، تفاوت در عبارت DDF بین روش‌های مختلف از ورود تدریجی مواد کمتر از ۰.۵٪ است.
- نتایج شبیه‌سازی آشکار می‌سازد که نمودار ایده‌آل از ورود تدریجی مواد ممکن است مستلزم افزایش اولیه غلظت رنگ‌زا بر طبق نمودار درجه دوم از ورود تدریجی مواد باشد و با کاهش تدریجی نرخ ورود مواد بر طبق نمودار نمایی ادامه یابد. با این حال، مقادیر DDF به‌دست آمده برای نمودارهای مختلف از ورود تدریجی مواد به‌طور قابل توجهی متفاوت نیستند، و در نتیجه روش کنترل ساده شده براساس نمودار خطی از ورود تدریجی مواد برای کاربردهای عملی شامل رنگ‌رزی‌های مستمر افزایشی پیشنهاد داده خواهد شد.

۵.۶. منابع

1. Denton M.J. (1962), 'The Wetting-Out of Yarn Packages' *J. Text Institute*, **53**, T477 – T488.
2. McGregor R. (1965), 'The Effect of Rate of Flow on Rate of Dyeing II– The Mechanism of Fluid Flow through Textiles and its Significance in Dyeing' *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **81**, 429 – 38.
3. Crank J. (1964), 'The Permeability of Cross-Wound Cotton Yarn Packages' *Journal of the Textile Institute*, **55**, T228.
4. Shamey, M.R. (1997), 'The Computer Control of Continuous Addition Dyeing of Cotton with Reactive Dyes' PhD Thesis, Leeds University, UK.
5. Burley R., Wai P.C., McGuire G.R. (1985), 'Numerical simulation of an axial flow package dyeing machine' *Appl. Math. Modelling*, **9**, 1, 33 – 9.
6. Vosoughi M. (1993), 'Numerical simulation of packed bed adsorption applied to a package dyeing machine' PhD Thesis, Heriot-Watt University, UK.

۷. اصول کنترل در فرآیندهای رنگریزی

چکیده: فرآیندهای رنگریزی بسیاری شامل تکرار روش‌های خاص یا توالی وقایع هستند که می‌توانند مدل‌سازی و در نتیجه کنترل شوند. قسمت اول فصل ۷ انواع اصلی استراتژی‌های کنترل را معرفی می‌کند. روش‌های ریاضی کنترل پارامترهای مختلف رنگریزی سپس توضیح داده می‌شوند. به‌خصوص اندازه‌گیری pH، تاثیر پارامترهای مختلف بر pH و گسترش استراتژی‌های کنترل pH مورد بررسی قرار می‌گیرند. همچنین، کارایی استراتژی‌های مختلف کنترل در نتیجه رنگریزی، با استفاده از یک ماشین بوبین رنگ کنی آزمایشگاهی به‌طور مختصر بررسی می‌شود. کنترل فرآیند رنگریزی بر طبق رمق‌کشی از پیش تنظیم شده و سایر نمودارها نیز شرح داده می‌شود.

کلمات کلیدی: الگوریتم‌های کنترل، حالت‌های کنترل ناپیوسته، حالت‌های کنترل پیوسته، حالت‌های کنترل ترکیبی، پردازش آنالوگ و دیجیتال، اندازه‌گیری و کنترل pH، کنترل رنگریزی.

۱.۷. مقدمه

سیستم‌های کامپیوتری را که به‌طور مستقیم در تولید فعالیت دارند می‌توان به دو ناحیه نظارت و کنترل تقسیم کرد. در اغلب موارد هر دو توابع توسط سیستم یکسانی اجرا می‌شوند؛ با این حال، هدف اولیه سیستم کنترل معمولاً برای تعیین و کنترل شرایط و پارامترهایی که می‌توانند کنترل شوند مورد توجه قرار می‌گیرد.

به معنای وسیع، مراحل مختلف در صنعت نساجی چندین دهه کنترل شده‌اند. با این حال، استفاده از سیستم‌های کامل کنترل بازخورد^۱ معمولاً به بخش‌های مشخص ماشین‌آلات، مانند دمای سیالات در رنگریزی و فرآیندهای تکمیل محدود شده است [۱].

مهم‌ترین فعالیت‌ها در طول دهه‌های گذشته بر کامپیوتری کردن فرآیندهای مرطوب در زمینه رنگریزی ناپیوسته بوده است. این امر به احتمال زیاد به دلیل این واقعیت است که رنگریزی‌های ناپیوسته معمولاً شامل تکرار "شیوه‌های" مشخص یا توالی گام به گام وقایع هستند.

¹ Complete feedback control systems

بررسی اولیه تحولات در مهندسی کنترل توسط میلروی^۱ [۲] نشان داد که استفاده از روش‌های کنترل PID (تناسبی، انتگرالی و مشتقی؛ بعداً توضیح داده می‌شوند) برای عملکرد سوپاپ‌ها منجر به شیوه بهینه کنترل خواهد شد. در حال حاضر شرایط حمام رنگرزی را می‌توان برای ارائه نمودارهای داده شده کنترل کرد. چندین محقق پیشرفت‌ها در این حوزه را بازنگری کرده‌اند، به طوری که می‌توان در مقالات دیگر آن را یافت [۷-۳].

قسمت اول این فصل انواع اصلی استراتژی‌های کنترل را که معمولاً در سیستم‌های مختلفی به کار رفته، معرفی می‌کند. سپس، روش‌های ریاضی ایجاد کنترل را در سیستم رنگرزی توضیح می‌دهد. همچنین کارآیی فرآیند رنگرزی شبیه‌سازی شده نیز براساس استراتژی مشخص کنترل به طور مختصر و به صورت مثالی بررسی می‌شود، و، در نهایت، برخی نتایج رنگرزی‌های عملی براساس استفاده از این مدل‌ها بازنگری می‌شوند.

به منظور آزمایش کارآیی مدل ریاضی داده شده، نمودار زمان/دما یا رنگرزی متداول ممکن است در ابتدا به عنوان یک سیستم مرجع مورد استفاده قرار گیرد. در نمودار تنظیم شده سیستم رنگرزی را می‌توان برای نظارت مورد استفاده قرار داد که در آن دمای ثابت افزایش یافته تا به جوش برسد، یا یک دمای تنظیم شده، ممکن است به کار رود و کارآیی ماشین نظارت و بررسی شود. سپس منحنی‌های رمق‌کشی کنترل شده را می‌توان در چارچوب نتایج به دست آمده از نمودارهای تنظیم شده مورد تجزیه و تحلیل قرار داد. نرخ مطلوب رمق‌کشی را می‌توان براساس تغییر در دمای تنظیم شده محاسبه کرد. این روش یک سیستم کنترل شناخته شده‌ای را به صورت الگوریتم تغذیه پیش‌رو استفاده می‌کند. کارآیی سیستم کنترل بر پایه یک برنامه شبیه‌سازی است و استفاده از نمودارهای مختلف رمق‌کشی برای رنگرزی الیاف نساجی است، به علاوه محاسن و کاستی‌های هر روش نیز، به طور مختصر بحث می‌شوند.

۲.۷. مقدمه‌ای بر کنترل فرآیند

هدف اصلی کنترل فرآیند ایجاد یک متغیر کنترل شده برای باقی ماندن در یک مقدار مشخص یا نزدیک به آن مورد نظر است [۸]. هنگامی که متغیرها دینامیکی هستند، اقدام اصلاحی باید به طور

¹ Mylroi

پیوسته برای ثابت نگه داشتن متغیرها در سازگاری با هم صورت پذیرد. این موردی در کنترل پارامترهای مختلف در رنگرزی منسوجات است، شامل pH، دما، جهت/ جریان سیال، تزریق‌های متعدد مواد کمکی شیمیائی و رنگزها، و، البته، غلظت رنگزا در مایع رنگرزی.

اصطلاح "سامان‌دهی"^۱ عمل حفظ کمیت را شرح می‌دهد. بنابراین، می‌توان گفت که کنترل فرآیند یک متغیر دینامیکی را سامان‌دهی می‌کند. این از اهمیت بسیاری برخوردار است، زیرا مقادیر چرخه فرآیند در برخی موارد باید دقیقاً در یک مقدار ثابت از پیش تنظیم شده یا نزدیک به آن باقی بمانند. به‌عنوان مثال، کنترل pH در برخی فرآیندهای رنگی کردن منسوجات می‌تواند بسیار مهم باشد، و یک مقدار نامناسب ممکن است به‌طور معکوس کیفیت محصول را تحت تاثیر قرار دهد یا حتی ممکن است منجر به نابودی پارچه شود.

به‌طور کلی، اندازه‌گیری به تبدیل برخی متغیرها به اطلاعات نئوماتیکی یا الکتریکی مشابه اشاره دارد. کنترل کننده در حلقه کنترل به دو مقدار نیاز دارد: نمونه اندازه‌گیری شده‌ی متغیر دینامیکی و نمونه مقدار مورد نظر از آن متغیر، دومی به‌عنوان مقدار مطلوب^۲ اشاره شده است. در نتیجه، فرآیند کنترل شامل مقایسه‌ای بین این دو مقدار است و اقدامی برای رساندن مقدار اندازه‌گیری شده به مقدار مطلوب مورد نیاز است.

سیگنال خطا^۳ تفاوت بین مقدار اندازه‌گیری شده C_M و مقدار مورد نظر C_{SP} است، همان‌طور که در معادله ۱-۷ نشان داده می‌شود:

$$E = C_M - C_{SP} \quad [۱-۷]$$

نمایش کلی چرخه فرآیند در شکل ۱.۷ نشان داده می‌شود.

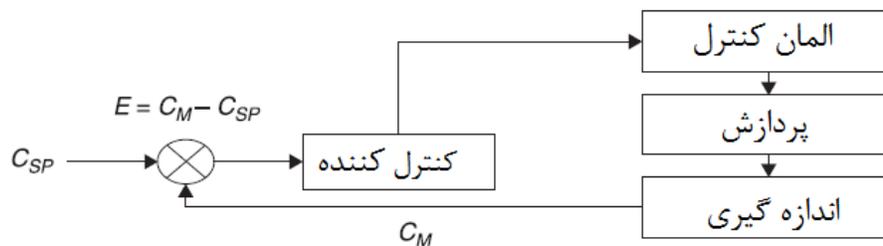
به‌طور کلی، مقدار مطلوب C_{SP} با انحراف مجاز C در یک مقدار نرمال بیان می‌شود. هر چه انحراف مجاز بزرگ‌تر باشد، سیستم آسان‌تر کنترل می‌شود. با این حال، این مقدار نمی‌تواند نسبت به خطای اصلی سیستم کوچک‌تر باشد. انحراف مجاز ممکن است برای پارامترهای مختلف کنترل شده متغیر بوده

^۱ Regulation

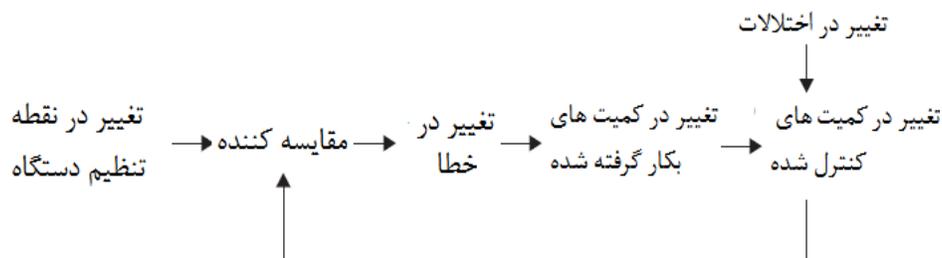
^۲ Setpoint

^۳ Error signal

و به سطح دقت نیازمند باشد. شکل ۲.۷ جریان سیگنال را در یک سیستم کنترل بازخورد نشان می‌دهد.



شکل ۱.۷. تصویر نمایش کلی حلقه کنترل.



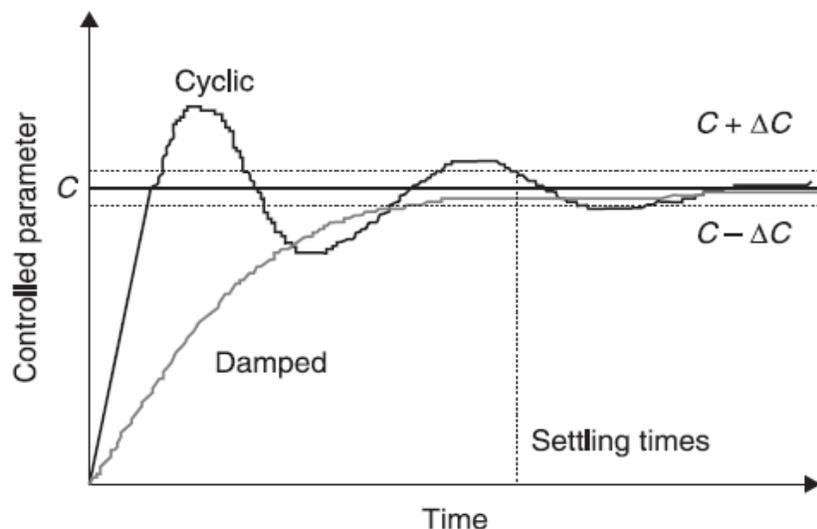
شکل ۲.۷. جریان سیگنال در یک سیستم کنترل بازخورد (از گریدی^۱ و ماک^۲ [۱]).

مقدار مطلوب ممکن است در طول کنترل فرآیند برای ارائه یک مقدار جدید تغییر کند. فرآیند کنترل باید قادر به ارائه متغیر دینامیکی برای این مقدار جدید باشد. دستیابی به مقدار مطلوب می‌تواند به صورت تناوبی یا میرا^۳ باشد. در سیستم اول قبل از این که مقدار در نقطه مطلوب تثبیت شود یک تعداد نوسانات ممکن است اتفاق بیفتد. با این حال، در سیستم دوم مقدار متغیر دینامیکی هرگز از مقدار مطلوب فراتر نرفته یا متحمل نوساناتی نمی‌شود، اما به مقدار مطلوب در یک منحنی شبه مجانب نزدیک می‌شود، همان‌طور که در شکل ۳.۷ نشان داده شده است.

¹ Grady

² Mock

³ Damped



شکل ۳.۷. مقایسه روش‌های کنترل تناوبی و میرا.

زمان استقرار حداقل زمان مورد نیاز برای رساندن متغیر دینامیکی به محدوده‌های خطای مجاز است [۹]. در برخی موارد، این زمان می‌تواند یک تاخیر زمانی بسیار کوتاه باشد، و در موارد دیگر، ممکن است در حد چند ثانیه در نظر گرفته شود. مثالی از مورد دوم زمان استقرار مورد نیاز برای اندازه‌گیری pH در حمام رنگرزی بعد از تزریق اسید یا قلbia است. در برنامه کنترل pH معمول چند ثانیه ممکن است برای زمان استقرار قبل از این که مقادیر توسط کامپیوتر گزارش شوند مجاز باشد. فرو بردن یا بیرون کشیدن پروب pH ممکن است با ارسال سیگنال الکتریکی به سوپاپ تحت فشار (نئوماتیکی) صورت پذیرد. سیم‌پیچ‌های گرم‌کننده و خنک‌کننده ممکن است با استفاده از اطلاعات الکتریکی ساده روشن (ON) یا خاموش (OFF) شوند، و پمپ‌های به کار رفته برای تزریق مواد شیمیایی ممکن است به‌طور مشابه کنترل شوند.

در طول مرحله نظارت، سیستم برای ارائه گزارشهای دوره‌ای معمولاً در پایان هر فاصله‌ی زمانی برنامه ریزی می‌شود. اطلاعات جمع‌آوری شده سپس برای ارزیابی کارایی سیستم مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرند.

۳.۷. الگوریتم‌های کنترل

۱.۳.۷. حالت‌های کنترل کننده ناپیوسته

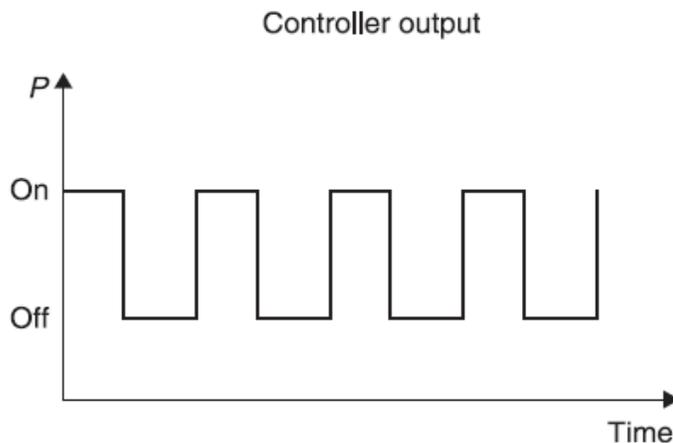
حالت دو وضعیت‌ی یا کنترل روشن- خاموش

این مثالی از یک حالت ناپیوسته است؛ این حالت ساده‌ترین و ارزان‌ترین است. در این روش کنترل، دستگاه به سادگی بسته به شرایط سیستم روشن یا خاموش می‌شود. اگرچه نمی‌توان یک معادله تحلیلی نوشت، اما این حالت را می‌توان با جملات منطقی نشان داد، همان‌طور که در معادله ۲-۷ مشخص شده است. برای مثال، اگر دما پایین تر از مقدار مطلوب باشد، گرمکن‌ها روشن می‌شوند، و اگر دما برابر یا بالاتر از مقدار مطلوب باشد، گرمکن‌ها خاموش می‌شوند.

$$P = \begin{cases} 100\% & E_p > 0 \\ 0\% & E_p < 0 \end{cases} \quad [۲-۷]$$

که در آن P خروجی کنترل کننده را به صورت درصد مقیاس کل نشان می‌دهد و E_p خطا است که به صورت درصد محدود‌های از مقدار مطلوب است. نمایش این روش کنترل را می‌توان در شکل ۴.۷ یافت.

به‌طور کلی حالت کنترل دو وضعیت‌ی برای سیستم‌های بزرگ مقیاس با نرخ‌های فرآیند آهسته بهتر به کار می‌رود. این روش منجر به نوسانات متغیری در مقدار مطلوب می‌شود، و بنابراین، در مواردی که از حد معین فراتر رفتن مجاز نیست، روش روشن- خاموش نمی‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. این روش در کنترل لوازمات خانگی بسیاری، مانند کنترل فر به کار می‌رود.



شکل ۴.۷. روش کنترل روشن-خاموش (برگرفته از جانسون [۸]).

حالت چند وضعیتی

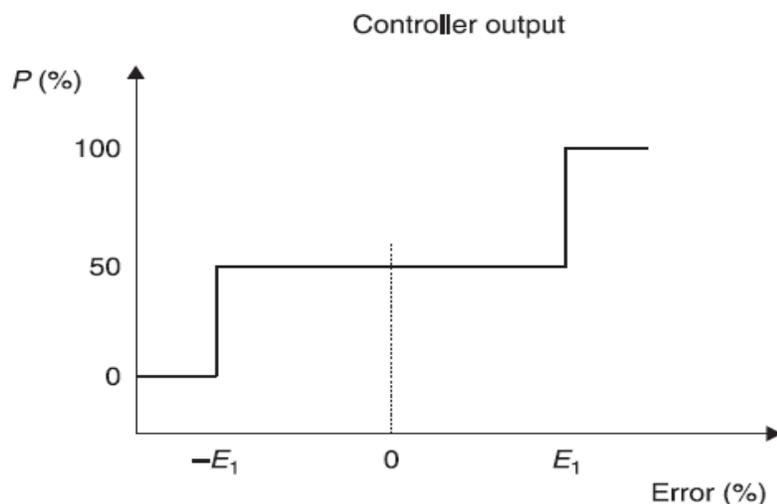
این حالت کنترل بر پایه گسترش حالت دو وضعیتی با افزودن چندین واسطه برای تنظیم خروجی کنترل کننده است. این حالت توسط معادله ۳-۷ نشان داده می‌شود.

$$P = P_i \quad E_p > |E_i| \quad [3-7]$$

P_i مقادیر خروجی از پیش تنظیم شده را نشان می‌دهد و E_i مقدار خطای دستگاه برای $i = 1, 2, \dots, n$ است. متداول‌ترین مثال کنترل کننده سه وضعیتی است، که در آن:

$$P = \begin{cases} 100\% & E_p > E_1 \\ 50\% & -E_1 < E_p < E_1 \\ 0\% & E_p < -E_1 \end{cases} \quad [4-7]$$

شکل ۵.۷ این مدل را به‌طور گرافیکی نشان می‌دهد. این حالت کنترل معمولاً نیازمند یک المان کنترل نهایی بسیار پیچیده است زیرا باید بیش از دو تنظیم داشته باشد.



شکل ۵.۷. عملکرد کنترل کننده سه وضعیتی (برگرفته از جانسون [۸]).

۲.۳.۷. حالت‌های کنترل کننده پیوسته

کنترل تناسبی

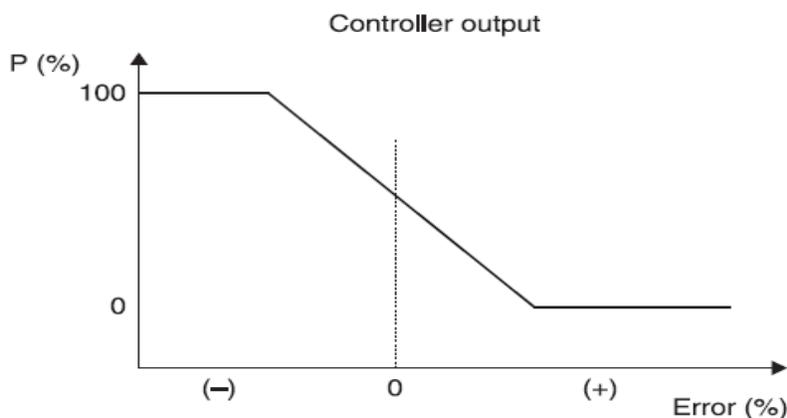
در حالت کنترل دو وضعیتی خروجی مقدار ۱۰۰٪ یا ۰٪ را دارد، و متناسب با خطا بیشتر یا کمتر از مقدار تعیین شده است. در حالت چند وضعیتی، تعداد بخش‌های خروجی کنترل کننده افزایش می‌یابد. در حالت کنترل تناسبی، یک رابطه خطی صاف میان خروجی و خطا وجود دارد. بنابراین، تطابق یک به یکی بین هر مقدار خروجی کنترل کننده و خطا وجود دارد. این حالت را می‌توان به صورتی که در معادله ۵-۷ نشان داده شده بیان کرد.

$$P = K_P E_P + P_0 \quad [۵-۷]$$

که در آن P_0 خروجی کنترل کننده بدون خطا (٪) است و K_P ثابت تناسب بین خطا و خروجی کنترل کننده است.

در این حالت کنترل، کنترل کننده قدرت بالایی را به گرم‌کن اعمال می‌کند اگر دما بسیار پایین‌تر از مقدار مطلوب باشد، و قدرت اعمالی هنگامی که دما به مقدار مطلوب برسد کاهش می‌یابد. همچنین

کنترل تناسبی به‌عنوان کنترل گذرا اشاره می‌شود، زیرا از تغییرات شدید ذاتی در حالت کنترل‌کننده ناپیوسته اجتناب می‌ورزد. این حالت کنترل را می‌توان به‌صورتی که در شکل ۶.۷ نشان داده شده است بیان کرد.



شکل ۶.۷. نمایش کلی حالت تناسبی کنترل (برگرفته از جانسون [۱۸]).

ثابت تناسبی ناحیه نسبی را تعیین می‌کند. یکی از مشخصه‌های مهم کنترل تناسبی این است که خطای باقیمانده دائمی را در نقطه عملیاتی متغیر کنترل شده هنگامی که تغییر در شرایط سیستم اتفاق افتاده است ارائه می‌دهد. این خطا به‌عنوان انحراف شناخته می‌شود. همچنین این خطا استفاده از کنترل تناسبی را در فرآیندهایی با تاخیرات زمانی کوچک تا متوسط محدود می‌کند، جایی که تغییرات شدید در شرایط بعید است رخ دهد.

کنترل انتگرالی

در این حالت کنترل، نرخ تغییر در خروجی کنترل‌کننده بستگی به مقدار خطا دارد (شکل ۷.۷ را ببینید). این حالت اغلب به‌عنوان اقدامی برای تنظیم مجدد دستگاه اشاره می‌شود. از منظور تحلیلی، حالت انتگرالی کنترل را می‌توان به‌صورتی که در معادله ۶-۷ نشان داده شده است بیان کرد.

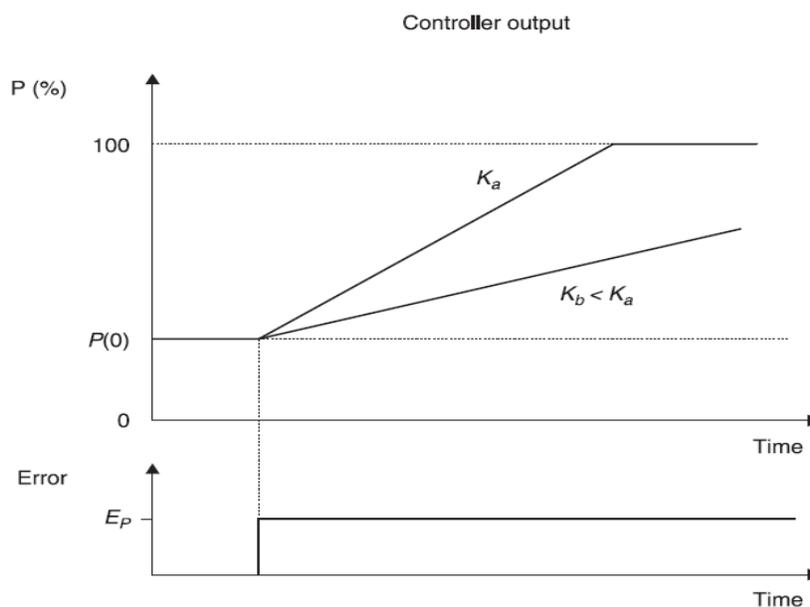
$$\frac{dP}{dt} = K_I \cdot E_p \quad [۶-۷]$$

که در آن dP/dt نرخ تغییر خروجی کنترل کننده است و K_I ثابتی است که نرخ را به خطا مربوط می‌سازد. انتگرال‌گیری از معادله ۶-۷ منجر به دستیابی به شکل واقعی خروجی کنترل کننده در هر زمان می‌شود، به‌صورتی که در معادله ۷-۷ نشان داده شده است.

$$P = K_I \int_0^t E_P dt + P(0) \quad [7.7]$$

که در آن $P(0)$ خروجی کنترل کننده در زمان $t=0$ است.

در این حالت کنترل، مقدار P خروجی بستگی به سابقه خطاها از زمانی که مشاهدات در $t=0$ شروع شده دارد. برای یک خطای ثابت، مقادیر K_I مختلف مقادیر متفاوت P را به‌صورت تابعی از زمان ارائه می‌دهند. نرخ‌های سریع‌تر توسط مقادیر بزرگ‌تر K_I فراهم می‌آیند در نتیجه موجب خروجی بسیار بیشتر کنترل کننده در یک زمان مشخص (پس از این که خطا تولید شده) می‌شوند. ارتباط بین مقادیر خروجی و خطا برای دو مقدار مختلف K_I در شکل ۷.۷ نشان داده می‌شود.



شکل ۷.۷. حالت انتگرالی کنترل (برگرفته از جانسون [۸]).

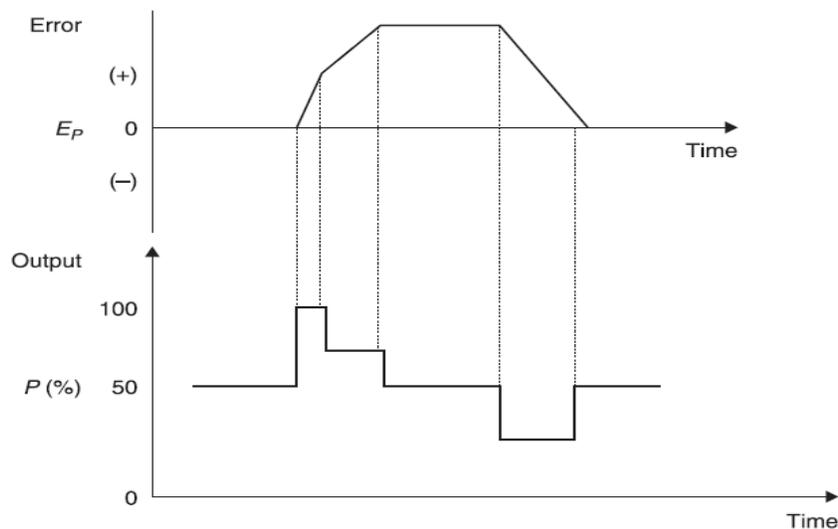
در حالت انتگرالی، مقدار خروجی در ابتدا بسیار سریع تغییر می‌کند، اما هنگامی که خطا کاهش یافته نرخ تغییر خروجی نیز کاهش می‌یابد. به‌طور معمول حالت انتگرالی به تنهایی مورد استفاده قرار نمی‌گیرد، استثنا برای سیستم‌هایی با فواصل زمانی کوچک وجود دارد.

کنترل کننده مشتقی

در این حالت، خروجی کنترل کننده بستگی به نرخ تغییر خطا دارد. همچنین این حالت کنترل به‌عنوان کنترل پیش‌بینانه یا نرخ‌ی نیز اشاره می‌شود. خروجی در این حالت کنترل هنگامی که خطا صفر و یا ثابت است هیچ مقداری ندارد، و بنابراین این حالت را نمی‌توان به تنهایی مورد استفاده قرار داد. این حالت را می‌توان توسط معادله ۷-۸ بیان کرد.

$$P = K_D \frac{dE_p}{dt} \quad [۷-۸]$$

که در آن K_D ثابت بهره مشتقی است و dE_p/dt نرخ تغییر خطا است. در این حالت، برای نرخ داده شده‌ی تغییرات خطا مقدار مشخص خروجی کنترل کننده وجود دارد. این حالت کنترل در شکل ۸.۷ نشان داده می‌شود.



شکل ۸.۷. نمایش کلی حالت کنترل کننده مشتقی (برگرفته از جانسون [۸]).

۳.۳.۷. حالت‌های کنترل ترکیبی

در بیشتر موارد صنعتی ترکیب روش‌های کنترل که پیش از این معرفی شد برای تطابق با الزامات خاص داده شده مورد نیاز هستند. در بخش‌های بعد این روش‌ها توضیح داده می‌شوند.

کنترل تناسبی-انتگرالی (PI)

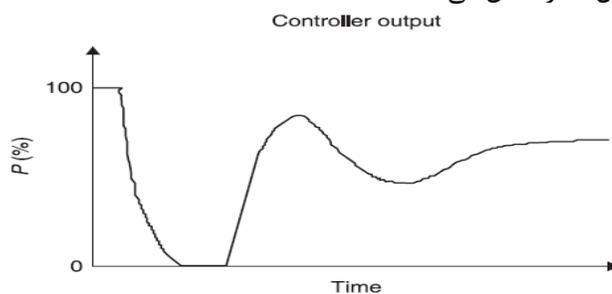
این حالت کنترل نتیجه ترکیب روش‌های تناسبی و انتگرالی است، و می‌توان آن را توسط معادله ۹-۷ بیان کرد.

$$P = K_P E_P + K_P K_I \int_0^t E_P dt + P_I(0) \quad [9.7]$$

که در آن مقدار عبارت انتگرالی در $t=0$ است.

مزیت اصلی این روش آن است که حالت انتگرالی مقدار انحراف ذاتی را به حساب نمی‌آورد در حالی که تناسب بین خطا و مقدار خروجی را حفظ می‌کند. ویژگی انتگرالی به خطا اجازه می‌دهد تا پس از تغییر عملکرد دستگاه صفر شود و به‌طور موثر تنظیم مجدد خروجی خطای صفر را پس از تغییر عملکرد دستگاه فراهم می‌کند.

به‌دلیل ماهیت این حالت کنترلی، می‌توان آن را در سیستم‌هایی که تغییرات عملکردی مکرر یا بزرگ اتفاق افتاده است به‌کار برد. با این حال، با توجه به زمان انتگرال‌گیری، فرآیند باید برای جلوگیری از نوساناتی که با تخطی در انتگرال به وجود آمده است نسبتاً آهسته تغییر کند. نقطه ضعف دیگر این حالت کنترل حضور تخطی قابل توجه خطا و خروجی در طول راه اندازی فرآیند رنگرزی ناپیوسته است. شکل ۹.۷ حالت کنترل PI را نشان می‌دهد.



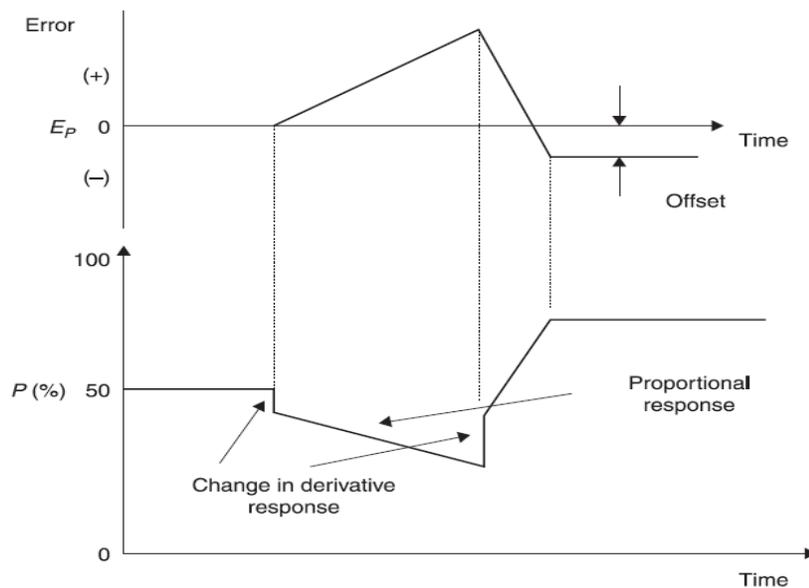
شکل ۹.۷ نمایش کلی کنترل PI (برگرفته از جانسون [۸]).

کنترل تناسبی- مشتقی (PD)

در این حالت کنترل، ترکیب زنجیروار حالت‌های کنترل تناسبی و مشتقی استفاده می‌شود. این حالت کاربردهای صنعتی بسیاری دارد، و می‌توان آن را به‌صورتی که در معادله ۱۰-۷ نشان داده شد بیان کرد.

$$P = K_P E_P + K_P K_D \frac{dE_P}{dt} + P_0 \quad [10-7]$$

انحرافات ایجاد شده توسط جنبه تناسبی حالت کنترل را نمی‌توان به حساب نیاورد. با این حال، تغییرات سریع عملکرد دستگاه را می‌توان تا زمانی که انحرافات ایجاد شده در یک سطح قابل قبولی است کنترل کرد. این حالت در شکل ۱۰-۷ نشان داده می‌شود.



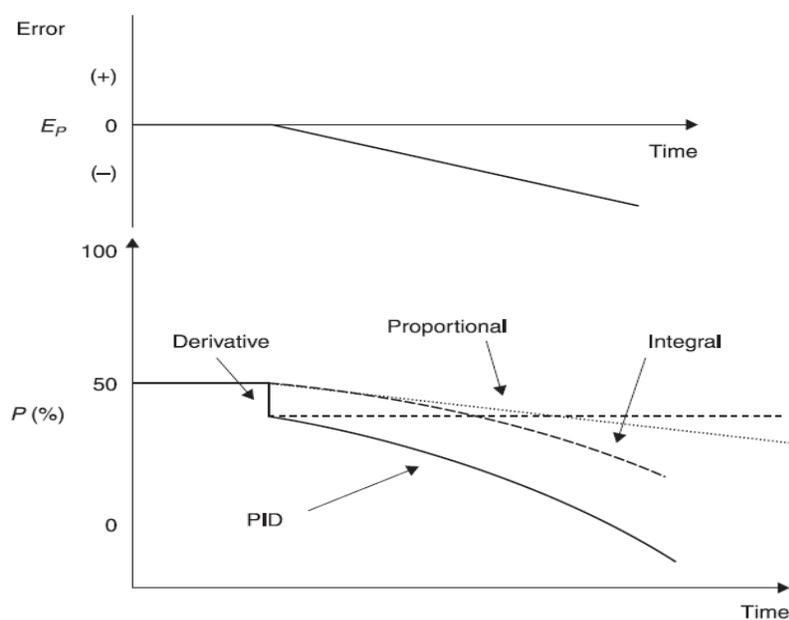
شکل ۱۰-۷ نمایش کلی کنترل PD (برگرفته از جانسون [۸]).

کنترل تناسبی-انتگرالی-مشتقی (PID)

کنترل PID یا سه حالتی یکی از حالت‌های قدرتمند اما پیچیده عملیاتی است. این روش ترکیبی از حالت‌های کنترل تناسبی، انتگرالی و مشتقی است و در نتیجه مزایای هر یک از این سیستم‌های کنترلی را به همراه دارد. حالت PID را می‌توان توسط معادله ۷-۱۱ ارائه داد.

$$P = K_p E_p + K_p K_i \int_0^t E_p dt + K_p K_D \frac{dE_p}{dt} + P_i(0) \quad [۷-۱۱]$$

ویژگی انتگرالی، انحرافات را به حساب نمی‌آورد در حالی که حالت مشتقی پاسخ سریعی را فراهم می‌کند. با این حال، کنترل‌کننده‌های PID برای تنظیم شدن دشوار هستند. کنترل‌کننده‌های PID گران قیمت هستند، اما اگر به درستی تنظیم شوند بهترین سیستم کنترل را ارائه می‌دهند. نمایش کلی این حالت کنترل را می‌توان در شکل ۷-۱۱ مشاهده کرد.



شکل ۷-۱۱. نمایش کلی حالت کنترل PID (برگرفته از جانسون [۸]).

۴.۷. پردازش آنالوگ و دیجیتال

در یک فرآیند آنالوگ، متغیر توسط یک سیگنال الکتریکی تناسبی نشان داده می‌شود. این سیگنال یک آنالوگ تغییرپذیر است. مقادیر اندازه‌گیری شده با سیگنال‌های آنالوگ به سیستم کنترل برگشت داده می‌شوند. برای مثال، کاربرد کنترل آنالوگ را می‌توان در کنترل نرخ ورود تدریجی مواد شیمیایی با پمپ اندازه‌گیری^۱ استفاده کرد. به‌طور کلی کنترل آنالوگ نیازمند توجه‌های ویژه‌ای است.

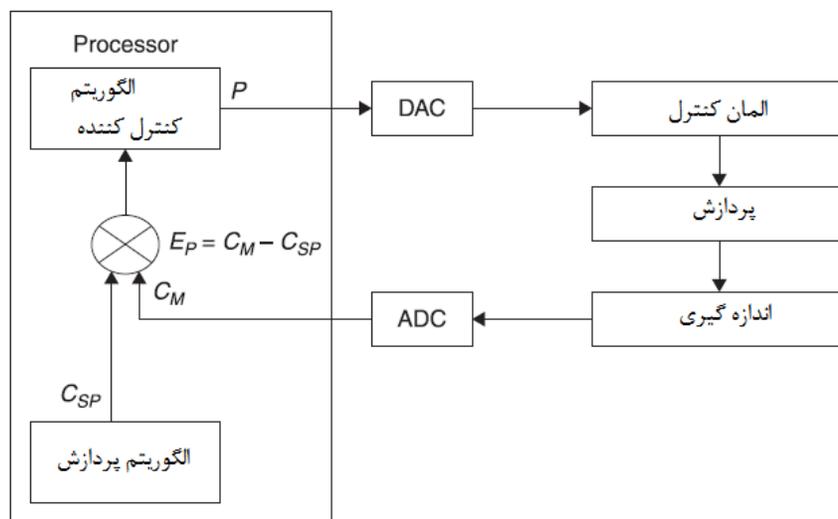
با این حال، در پردازش دیجیتال تمامی اطلاعات حمل شده در حلقه کنترل فرآیند به سیگنالی که در ماهیت خود دوگانه یا باینری^۲ است (اعداد صفر و یک) کُدگذاری می‌شود. سیگنال‌های الکتریکی توسط باینری صفر، علامت‌گذاری شده با L، متناظر با ولت‌های صفر یا توسط باینری ۱، علامت‌گذاری شده با H، متناظر با ولت‌هایی در حدود ۵ نشان داده می‌شوند. گرمکن‌ها، سیم‌پیچ‌های خنک‌کننده و پروب pH مثال‌های المان‌هایی هستند که ممکن است با سیگنال‌های دیجیتالی کنترل شوند.

مقدار متغیر دینامیکی به‌صورت چند کُدگذاری سطوح باینری نشان داده می‌شود. اطلاعات در سیستم رمزنگاری دیجیتالی را می‌توان از طریق حلقه کنترل با ۲ روش: حالت انتقال موازی و حالت انتقال پیاپی، منتقل کرد. در روش اول یک سیم جداگانه برای هر رقم باینری در کلمه مورد نیاز است، در حالی که در روش دوم توالی زمانی پالس‌ها در طول یک سیم تمامی کلمه را انتقال می‌دهد.

مبدل آنالوگ به دیجیتال (ADC) ورودی آنالوگ را رمزنگاری می‌کند. این ابزارها برای محدوده مشخص ورودی‌های سیگنال طراحی می‌شوند. مبدل دیجیتال به آنالوگ (DAC) پردازش معکوسی را ارائه می‌دهد. نمایش کلی چرخه فرآیند شامل ADC و DAC را می‌توان در شکل ۱۲.۷ مشاهده کرد.

¹ Metering pump

² Binary



شکل ۱۲.۷. حلقه کنترل فرآیند مورد استفاده در کامپیوتر.

۵.۷. کاربرد عملی در یک عملیات آزمایشگاهی

برای ارائه یک مثال عملی، مشخصات کلی یک ماشین بوبین رنگ‌کنی آزمایشگاهی و روش‌های کنترل المان‌های مختلف در بخش‌های زیر نشان داده می‌شوند. جدول ۱.۷ مشخصات کلی ماشین را ارائه می‌دهد. جدول ۲.۷ توصیف ارتباطات دیجیتالی ابزارهای مختلف را در هر واحد رابط نشان می‌دهد. جدول ۳.۷ لیست ارتباطات آنالوگ ابزارهای مختلف را در هر واحد رابط فراهم می‌آورد.

جدول ۱.۷. مشخصات کلی محفظه بوبین رنگ‌کنی آزمایشگاهی.

مشخصات	محدوده
حجم کل با یک بسته در درون	$16/8 \pm 0/1$ l
حجم بدون بسته	$20 \pm 0/1$ l
مجموع قدرت گرمکن‌ها	۱۱۰۰۰ W
نرخ صعود دما به 70°C در دمای اتاق	$4/5 \pm 0/1$ $^\circ\text{C}/\text{min}$

$۳/۷۵ \pm ۰/۰۱ \text{ } ^\circ\text{C}/\text{min}$	نرخ صعود دما به $۱۰۰ \text{ } ^\circ\text{C}$ در $۷۰ \text{ } ^\circ\text{C}$
$۲/۸ \pm ۰/۱ \text{ } ^\circ\text{C}/\text{min}$	نرخ صعود دما به $۱۴۰ \text{ } ^\circ\text{C}$ در $۱۰۰ \text{ } ^\circ\text{C}$
$۳۸ \pm ۱ \text{ } ^\circ\text{C}$	دمای تعادل
$۱۴۰ \pm ۱ \text{ } ^\circ\text{C}$	دمای بیشینه
$۰/۳۵ \pm ۰/۰۱ \text{ } ^\circ\text{C}/\text{min}$	قدرت هوای خنک کننده
$۲/۲۵ \pm ۰/۰۱ \text{ } ^\circ\text{C}/\text{min}$	نرخ خنک کننده در $۱۰۰ \text{ } ^\circ\text{C}$ به $۵۰ \text{ } ^\circ\text{C}$
$۰/۷۵ \pm ۰/۰۱ \text{ } ^\circ\text{C}/\text{min}$	نرخ خنک کننده در $۵۰ \text{ } ^\circ\text{C}$ به $۳۸ \text{ } ^\circ\text{C}$
$۰ -۶۰ \pm ۱ \text{ l}/\text{min}$	محدوده نرخ جریان سیال با بسته در درون
$۰ -۷۸ \pm ۱ \text{ l}/\text{min}$	محدوده نرخ جریان سیال بدون بسته
$۰ -۱۴/۰ \pm ۰/۱$	محدوده اندازه گیری pH
$۳۰ \text{ lbs}/\text{in}^2 \text{ (} \Delta/5 \text{ kg}/\text{cm}^2\text{)}$	حداکثر فشار آزمایش شده در ماشین اصلی
$۰ -۱۰۰۰ \pm ۱ \text{ ppm}$	محدوده اندازه گیری غلظت رنگزا
۱	تعداد حداکثری بسته ها

جدول ۲.۷. مثال‌های ارتباطات دیجیتال برای ابزارهای مختلف در هر واحد رابط.

درگاه B	درگاه A	شماره بیت ^۱
سوپاپ ماسوره‌ای، تانک پر شده	۱/۵ kw	گرمنن نواری کوچک
سوپاپ ماسوره‌ای، تانک زهکشی	۱/۵ kw	گرمنن نواری کوچک
سوپاپ ماسوره‌ای، برگشت جریان	۳ kw	گرمنن نواری بزرگ
سوپاپ ماسوره‌ای، تهویه اصلی	۲/۵ kw	گرمنن میله‌ای
سوپاپ ماسوره‌ای، تهویه پاتیل (کی‌یر)	۲/۵ kw	گرمنن میله‌ای
سوپاپ ماسوره‌ای		پروب pH ورودی/ خروجی
پمپ ورود تدریجی مواد ۳ #		پمپ ورود تدریجی مواد ۱ #
پمپ ورود تدریجی مواد ۳ #	۵/۵ kw	سیم پیچ آب خنک‌کننده

^۱ BIT No

جدول ۳.۷. مثال‌های ارتباطات آنالوگ ابزارهای مختلف در هر واحد رابط.

شماره بیت	ورودی آنالوگ	خروجی آنالوگ
۰	pH سنج	مبدل جریان به فشار
۱	دما، روبه پاتیل	پمپ ورود تدریجی مواد # ۴
۲	دما، انتهای پاتیل	هدایت سنج
۳	دما، تانک اختلاط	غیرقابل استفاده
۴	پروب رسانایی	غیرقابل استفاده
۵	فشارسنج # ۱	غیرقابل استفاده
۶	فشارسنج # ۲	غیرقابل استفاده
۷	جریان سنج	غیرقابل استفاده

۱.۵.۷. اندازه‌گیری و کنترل دما

این فرآیند را می‌توان به دو بخش تقسیم کرد: اندازه‌گیری و کنترل دما. بخش اول ممکن است شامل تعدادی پروب‌های مقاوم (یعنی پلاتین ۱۰۰ یا مشابه آن) باشد که می‌تواند در پایین و بالای پاتیل اصلی و در پایین تانک اختلاط قرار گیرد. این پروب‌ها دمای معرف کل سیستم را فراهم می‌آورند؛ با این حال، در صورت لزوم موقعیت‌شان را می‌توان تغییر داد. این پروب‌ها ممکن است به‌طور مشابه به واحد رابط متصل شوند، یعنی از طریق پایانه‌های ۱-۳. همچنین اتصال می‌تواند به واحد آشکارساز دیجیتال صورت پذیرد.

گرمایش ممکن است توسط چندین گرمکن نواری فراهم شود. در مثال ماشین بوبین رنگ‌کنی آزمایشگاهی توصیف شده، کل خروجی گرما ۱۱ kW است. موقعیت‌های مختلفی ممکن است برای دستیابی به خروجی مطلوب به کار رود، شامل دو گرمکن ۱/۵ کیلو وات و یک گرمکن ۳ کیلو وات در اطراف پاتیل اصلی و دو گرمکن میله‌ای ۲/۵ کیلو وات در انتهای تانک اختلاط. صفحه کلید کنترل

ممکن است برای کنترل دستی این واحدها منظور شود. با این حال، گرمکن‌ها می‌توانند از طریق رابط نیز کنترل شوند. جدول ۲.۷ نشان می‌دهد که رابط در این حالت شامل ۸ خروجی با سطح TTL^۱ است، یعنی بیت‌های ۰ تا ۷. بیت‌های ۰ تا ۴ به گرمکن‌ها متصل می‌شوند. در این پیاده‌سازی، اعداد صحیح با دقت ۱ را می‌توان برای ذخیره‌سازی وضعیت گرمکن‌ها استفاده کرد.

خنک‌سازی ممکن است با استفاده از گردش آب سرد در سیم‌پیچ‌های واقع در اطراف تانک اختلاط صورت پذیرد. همچنین سیم‌پیچ می‌تواند به‌طور خودکار از طریق اتصال دیجیتال به رابط، اتصال بیت ۷ از درگاه A، عمل کنند. الگوریتم‌های کنترلی با هدف کنترل دما با جزئیات بیشتری بعداً شرح داده می‌شوند.

سیستم PID ممکن است برای کنترل گرمایش/سرمایش مورد استفاده قرار گیرد، ظرفیت گرمایی گرمکن‌ها و اثر پمپ اصلی در گردش باید به حساب آورده شود و نرخ سرمایش ماشین نیز باید محاسبه شود. زمان پاسخ سیستم نیز باید اندازه‌گیری شود. همان‌طور که اشاره شد، سیستم توصیف شده در اینجا قادر به کنترل دما در محفظه رنگرزی تا دقت $\pm 0.2^\circ\text{C}$ است.

۲.۵.۷. اندازه‌گیری و کنترل جریان

انواع مختلف جریان سنجه‌ها در دسترس هستند که برای تعیین نرخ‌های جریان سیال در محفظه استفاده می‌شوند. مثالی از آن دستگاه الکترومغناطیسی است که اجازه اندازه‌گیری در لوله را با حداقل انسداد جریان می‌دهد. برگشت جریان را می‌توان با استفاده از سوپاپ‌های دریچه هوا که به‌صورت دستی یا دیجیتالی عمل می‌کنند، انجام داد، یعنی بیت ۲ درگاه B. قرائت مستقیم اندازه‌گیری جریان از طریق صفحه نمایش دستگاه انجام شد. همچنین این قرائت می‌تواند توسط کامپیوتر از طریق اتصال آنالوگ به بیت ۷ ورودی آنالوگ، وارد سیستم شود. شکل ۱۳.۷ تصویر جریان سنجه به‌کار رفته در این مطالعه است.

¹ TTL-level



شکل ۱۳.۷. جریان سنج الکترومغناطیسی متصل به ماشین بوبین رنگ کنی آزمایشگاهی.

اتصال لوله فرعی ممکن است جدا کردن تانک اختلاط از مابقی محفظه رنگریزی استفاده شود؛ بدین ترتیب نسبت‌های کم مایع را نیز می‌توان ایجاد کرد. با این حال، حلقه جریان سیال در سراسر لوله‌ها را می‌توان به وسیله سوپاپ‌های تحت فشار (یا نئوماتیکی) کنترل کرد که سیال را از درون به بیرون بسته‌های نخ، یا بالعکس، هدایت می‌کند. این ممکن است با کمک یک سوپاپ چهار راهه قرار گرفته در انتهای پاتیل صورت پذیرد. سوپاپ تهویه ممکن است برای هدایت مایع موجود در بالای پاتیل به تانک اختلاط به کار رود، و وقتی پاتیل پر است این سوپاپ بسته می‌شود. سوپاپ‌ها ممکن است به‌طور دستی از طریق جعبه کنترل یا از طریق اتصالات به رابط، که در مثال جدول ۲.۷ بیت‌های ۵-۰ درگاه B هستند، کنترل شوند. تمامی سوپاپ‌های تویی تحت فشار بر روی ماشین ممکن است با محرک‌های دوطرفه نصب شوند. محرک‌ها ممکن است توسط سوپاپ‌های ماسوره‌ای فنری / مغناطیسی کنترل شوند (یعنی ۵/۲). عبارت ۵/۲ سوپاپی با ۵ درگاه و ۲ موقعیت را نشان می‌دهد. سوپاپ‌های ماسوره‌ای متصل می‌شوند به‌طوری‌که مطمئن‌ترین موقعیت تنظیم شود؛ این بدین معناست که، برای مثال، سوپاپ‌های پشتیبان فشار متصل می‌شوند به‌طوری‌که اگر خرابی در سوپاپ مغناطیسی رخ دهد باز شوند.

۳.۵.۷. حسگرهای فشار

حسگرهای فشار ممکن است برای گزارش افت فشار در عرض بسته در صورت رنگرزی تحت فشار، برای مثال در نقاط ورودی و خروجی پاتیل، نصب شوند. همچنین حسگرها ممکن است به صفحه نمایش مجهز باشند. قرائت فشار ممکن است از طریق اتصالات آنالوگ، به‌عنوان مثال بیت‌های ۵ و ۶ در جدول ۳.۷، به‌دست آید. همچنین حسگرهای فشار را می‌توان برای اندازه‌گیری خواص جریان بسته‌ها به‌وسیله اندازه‌گیری افت فشار در عرض بسته به‌کار برد. مهم است تا توجه شود که، به‌منظور رعایت مقررات ایمنی، محفظه رنگرزی باید قبل از هرگونه تلاشی که در رنگرزی تحت فشار انجام می‌شود به دقت بررسی شود.

۴.۵.۷. کنترل ورود تدریجی مواد شیمیائی

چندین پمپ ممکن است به محفظه رنگرزی برای انتقال مایع (به‌عنوان مثال رنگ‌ها و مواد کمکی) به حمام در طول فرآیند رنگرزی بدون قطع روند کلی متصل شوند. مقدار انتقال توسط پمپ‌ها را می‌توان با توجه به طول متغیر حرکت رفت و برگشت آنها کنترل کرد. نرخ حرکت رفت و برگشت در هر دقیقه را می‌توان تنظیم کرد به‌طوری‌که نرخ انتقال مایع و به علاوه حجم آن در هر رفت و برگشت را بتوان تغییر داد. پمپ‌ها را می‌توان با یک سیگنال آنالوگ یا دیجیتال کنترل کرد. اگر سیگنال خروجی از رابط سیگنال ولتاژ باشد و اتصال به سیگنال جاری نیاز داشته باشد، در آن صورت به یک مدار به‌منظور ارائه تغییرات لازم برای عملیات در حال اجرای پمپ نیاز خواهد بود. در حالت اتصال آنالوگ، به‌عنوان مثال بیت ۱ خروجی آنالوگ در جدول ۳، برنامه کنترلی می‌تواند نرخ انتقال مایع را با توجه به الزامات حمام رنگرزی تنظیم کند.

نقطه انتقال پمپ‌ها باید در یک فاصله قابل توجهی از پمپ اصلی در گردش قرار گیرد، زیرا اثر مکش پمپ اصلی می‌تواند به‌طور جدی عملکرد اندازه‌گیری پمپ‌ها را برای ورود تدریجی مواد تحت تاثیر قرار دهد.

۵.۵.۷. اندازه‌گیری غلظت رنگزا

یک تعداد روش‌ها به‌طور متداول برای تجزیه و تحلیل غلظت رنگزا در حمام رنگرزی در دسترس هستند. در یک مثال، سل انعکاسی از جنس فولاد ضدزنگ را می‌توان در بخش اصلی خط لوله نصب کرد تا اجازه دهد اندازه‌گیری‌های نیمه مستمر انجام شود. پشت سل ممکن است خمیده و بسیار

صیقلی باشد تا اجازه انعکاس طول مسیر چندگانه را دهد، این سل برای طیف گسترده‌ی غلظت‌های ممکن رنگزا در مایع مورد نیاز است. جلوی سل ممکن است دریچه‌ای از جنس کوارتز قرار داده شود تا اجازه دهد مشاهدات بصری مایع در طول فرآیند رنگرزی انجام گیرد. با این حال، اگر سلی با دریچه‌ای از جنس کوارتز استفاده شود، باید تمیز نگه داشته شود؛ به طوری که هرگونه رسوب بر روی سطح آن تاثیر معکوسی بر مقادیر روشنایی و در نتیجه غلظت اندازه‌گیری شده رنگزا خواهد گذاشت.

انواع مختلف اندازه‌گیری‌ها ممکن است به منظور به دست آوردن قرائت‌ها به سل وصل شده باشند، و یک سری قرائت‌ها نیز باید برای اطمینان از صحت انجام گیرند. داده‌های پردازش شده ممکن است شامل انعکاس طیفی برای هر رنگزا، و به علاوه مقادیر $L^*a^*b^*$ و XYZ آنها باشند. اندازه‌گیری باید به طور معمول، با توجه به نوع و مشخصات دستگاه، به منظور کاهش تغییر ولتاژ دستگاه و به حداقل رساندن خطا کالیبره شود. قرائت‌ها ممکن است توسط نرم افزار هم‌زمان با نظارت فرآیند رنگرزی در فواصل زمانی کوتاه به عنوان مثال یک بار در هر دقیقه صورت پذیرد، فرآیند اندازه‌گیری و بازخورد در مجموع تنها چند ثانیه به طول می‌انجامند.

۶.۵.۷. کنترل و اندازه‌گیری pH

pH سنج اغلب در مخازن رنگرزی مدرن برای تعیین تغییرات pH در طول فرآیند رنگرزی گنجانده می‌شوند. زیرا کنترل pH در بسیاری از کاربردها مهم است، این بخش فرآیند را با جزئیات بیشتر بررسی می‌کند. روش‌ها برای کاهش مصرف مواد شیمیائی و انرژی در صنعت رنگرزی براساس زیر هستند:

- تنظیم تعادل‌ها و دوبار تقسیم بندی تعادل سیستم رنگرزی
- بازیابی حمام‌های شستشو

پردازنده‌ها به منظور دستیابی به این صرفه‌جویی‌ها در انرژی با کنترل و کاهش دمای رنگرزی، و کاهش زمان مهاجرت به علاوه استفاده مجدد مایع حمام رنگرزی استفاده می‌شوند. صرفه‌جویی در مواد رنگی با افزایش رمق‌کشی حمام رنگرزی و با کاهش مصرف مواد کمکی مانند عوامل یکنواخت کننده و ریتار جنبه دیگر کنترل افزایش یافته است. همچنین استفاده مجدد حمام‌های رنگرزی با بهینه‌سازی در کنترل منتج به صرفه‌جویی‌ها در آب و کاهش آلودگی محیط زیست می‌شود.

رنگرزی یکنواخت را می‌توان یا با کنترل نرخ رمق‌کشی و یا با توزیع مجدد رنگزایی که در ابتدا به‌طور نایکنواخت جذب شده، به‌وسیله مهاجرت به دست آورد. حالت دوم فرآیندی بسیار قوی است [۱۰].

نرخ رمق‌کشی معمولاً با تنظیم دمای حمام رنگرزی کنترل می‌شود. در برخی موارد نیز ممکن است رمق‌کشی با استفاده از یک دمای ثابت یا تقریباً ثابتی کنترل شود (هم‌زمان با کنترل تاثیر ترکیب حمام رنگرزی طی افزودن نمک، اسید، قلیا یا دیگر مواد شیمیایی). pH، "رمق‌کشی در تعادل" و بالاتر از این مقدار را (منظور از بالاتر نرخ رنگرزی در آن لحظه است) تحت تاثیر قرار می‌دهد. مقدار رمق‌کشی اولیه (جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی) در یک فرآیند کنترل pH باید در شرایطی انتخاب شود که نایکنواختی اولیه بیشتر از آن نباشد و بتوان آن را با مهاجرت رنگزا به سرعت اصلاح کرد.

افزایش نمک، اسید، باز یا سایر مواد شیمیایی مناسب به‌منظور تغییر فعالیت یون و کنترل تعادل (رمق‌کشی) را می‌توان به‌طور مستمر در پاسخ به یک برنامه‌ی از پیش تنظیم شده، یا از طریق اندازه‌گیری‌های رسانایی و pH، توسط کنترل بازخورد حلقه‌ی بسته نخ انجام شود.

روش‌های تحلیلی زیر را می‌توان در رابطه با سیستم‌هایی که pH را در حمام رنگرزی تنظیم می‌کنند، مورد استفاده قرار داد [۱۱]:

- پردازش - تیترو
- آنالیز چند مولفه‌ای اسپکتروفتومتریک
- کروماتوگرافی سه بعدی

تیتراسیون باز قوی با اسید قوی می‌تواند منتج به حمام رنگرزی با قابلیت به‌کارگیری مجدد شود، که این تیتراسیون در انرژی و زمان صرفه‌جویی می‌کند. این به یک سیستم کنترلی حلقه بسته نیاز دارد. با این حال، به کمک اسیدها یا بازهای ضعیف مانند اسید استیک، NH_4OH و غیره بافرها تولید می‌شوند. از این‌رو استفاده مجدد برخی حمام‌های رنگرزی مستلزم برخورداری از دانش دقیق ترکیب شیمیایی حمام رنگرزی است.

در رنگرزی کالاهای سلولزی با رنگزاهای ری‌اکتیو و یا رنگرزی پروتئین‌ها و الیاف پلی آمیدی با رنگزاهای اسیدی، تنها چند مورد به نام، تنظیم pH ضروری است. ارائه ارزیابی کنترل شده‌ی برخی

محصولات مانند اسیدها، مواد کمکی و رنگزها تکرارپذیری و یکنواختی را، همراه با کاهش نیازهای کار اصلاح می‌کند؛ همچنین از کار افتادگی دستگاه‌ها نیز به همین دلیل کاهش می‌یابند.

عبارت pH براساس p، برای توان، و H، نشان دهنده المان هیدروژن، است. بنابراین، pH توان یون هیدروژن را معنا داده و سنجش اسیدیته محلول است. تعریف شناخته شده‌ی pH را می‌توان به صورت زیر نشان داد:

$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+] \quad [12-7]$$

با این حال، رابطه دقیق اندازه‌گیری فعالیت یون هیدروژن است و این در معادله ۷-۱۳ نشان داده می‌شود.

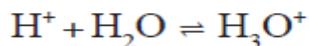
$$\text{pH} = -\log_{10} \alpha_{\text{H}^+} \text{ or } \alpha_{\text{H}^+} = 10^{-\text{pH}} \quad [13-7]$$

فعالیت غلظت موثر یون هیدروژن در محلول است. این فعالیت را می‌توان به غلظت یون هیدروژن برحسب مولالیته آن (C_{H^+}) و ضریب فعالیت (f_{H^+}) نسبت داد. به عبارت دیگر [۱۲]:

$$\alpha_{\text{H}^+} = f_{\text{H}^+} C_{\text{H}^+} \quad [14-7]$$

در مورد محلول‌های رقیق، که در آن قدرت یونی پایین است، ضریب فعالیت تقریباً واحد در نظر گرفته می‌شود، و در نتیجه غلظت یون هیدروژن برابر با فعالیتش می‌شود. به عبارت دیگر، تفاوت بین غلظت‌های واقعی و موثر یون هیدروژن هنگام حرکت به سمت محلول بسیار رقیق که در آن برهم‌کنش یونی کاهش یافته، به طور تصاعدی کم اهمیت می‌شود.

لازم به ذکر است که غلظت یون هیدرونیوم، به جای یون هیدروژن، هنگامی که به اندازه‌گیری‌های pH اشاره شده، در نظر گرفته می‌شود. زیرا یون هیدروژن به‌طور معمول در فرم حلال پوشی خود است، همان‌طور که در زیر نشان داده شده است.



کمپلکس یون هیدروژن با آب فعالیتش را تحت تاثیر قرار می‌دهد؛ با این حال، سایر عوامل دقیق نیز در همبستگی فعالیت و غلظت دخیل هستند. این عوامل عبارت‌اند از دما T ، قدرت یونی u ، ثابت دی‌الکتریک ϵ ، بار یون Z_i ، اندازه یون در واحد انگسترون (A°) و چگالی حلال d . این‌ها ویژگی‌های مشخص محلول اندازه‌گیری شده هستند.

دو عامل اصلی بر ویژگی‌های محلول تاثیر می‌گذارند، که باید هنگامی که فعالیت یون هیدروژن به غلظت آن مرتبط است در نظر گرفته شوند. عامل اول به‌عنوان اثر نمک، بیان شده به‌صورت $f_{H^+}^x$ شناخته می‌شود. این اثر را می‌توان توسط معادله ۷-۱۵ بیان کرد [۱۳].

$$\log f_{H^+}^x = \frac{-0.5u^{1/2}}{1+3u^{1/2}} \quad [15-7]$$

$$u = 1/2 \sum C_m Z_i^2$$

جائی که u قدرت یونی است، توسط معادله ۷-۱۶ تعریف می‌شود.

$$u = 1/2 \sum C_m Z_i^2 \quad [16-7]$$

این نیمی از مجموع مربع بار نمونه‌های یونی ضربدر مولالیته است. ارتباط دقیق بین ضریب فعالیت و قدرت یونی را می‌توان توسط مدل دبای-هوکل^۱، نشان داده شده در معادله ۷-۱۷، بیان کرد [۱۴]:

$$\log f_{H^+}^x = \frac{aZ_i^2 I^{1/2}}{1+bA^\circ I^{1/2}} \quad [17-7]$$

در این رابطه I قدرت یونی است، a و b ثابت‌های وابسته به دما شناخته شده به‌عنوان ثابت‌های دبای-هوکل هستند، Z_i ظرفیت یون (i) و A° پارامتر اندازه یون در انگستروم است.

¹ Debye-Hückel

جدول ۴.۷ اثر تقریبی نمک را بر فعالیت یون هیدروژن نشان می‌دهد، که در آن آنیون تک ظرفیتی و یون هیدروژن برای کاهش Z به ۱ در نظر گرفته می‌شوند [۱۵].

جدول ۴.۷ نشان می‌دهد که فعالیت، با افزایش غلظت نمک، کاهش می‌یابد، و از این رو مقدار pH محلول‌هایی با غلظت یون هیدروژن یکسان متفاوت خواهد شد البته اگر قدرت یونی محلول‌ها تغییر کند.

جدول ۴.۷. اثرات تقریبی نمک.

۰/۱۰۰	۰/۰۵۰	۰/۰۱۰	۰/۰۰۵	۰/۰۰۱	مولالیته نمک
۰/۸۲۹	۰/۸۵۷	۰/۹۱۵	۰/۹۳۵	۰/۹۶۴	ضرایب فعالیت

عامل دوم اثر محیط است. محیط‌هایی که در آن مقادیر pH اندازه‌گیری می‌شوند نیز فعالیت یون‌ها را تحت تاثیر قرار می‌دهند. این عامل به صورت $f_{H^+}^m$ در نظر گرفته می‌شود، که برهم‌کنش الکترواستاتیکی و شیمیایی بین یون و حلال را انعکاس می‌دهد [۱۶]. این فراتر از حوزه فصل حاضر است. بنابراین، هنگام تعریف pH، معمولاً به نمونه‌های آبدار اشاره می‌شود. اندازه‌گیری الکتروود شیشه‌ای فعالیت عمدتاً توسط قدرت یونی، دما و حلال تحت تاثیر قرار می‌گیرد [۱۷]. این در معادله ۷-۱۸ نشان داده شده است.

$$\alpha_{H^+} = f_{H^+}^x f_{H^+}^m C_m \quad [۷-۱۸]$$

به دلیل این متغیرها، شرایطی که در آن مقادیر pH اندازه‌گیری می‌شوند نیز باید بیان شوند. زیرا دما، قدرت یونی و عوامل دیگر فعالیت یون هیدروژن را تحت تاثیر قرار می‌دهند. اگر یک یا تعداد بیشتری از این شرایط تغییر کند، مقدار pH هر نمونه مشخص به‌طور خودکار شناخته نخواهد شد. بنابراین، هنگام تعیین روش کنترل pH برای یک سیستم رنگرزی، تغییر فعالیت یون هیدروژن باید در شرایط مختلف (دما، نمک، مواد افزودنی و غیره) مورد مطالعه قرار گیرد. اگر این‌ها در سرتاسر فرآیند تغییر کنند. یک مثال معمول از این فعالیت یون هیدروژن برای دو محلول بافری در دماهای مختلف است، به‌صورتی که در جدول ۵.۷ نشان داده شده است.

جدول ۵.۷. فعالیت یون هیدروژن در دماهای مختلف [۱۵].

محلول			دما (°C)
خنثی			
۶۰	۰	۲۵	
			بخشی
$3/10 * 10^{-7}$	$3/30 * 10^{-8}$	$10/00^{-7}$	(H ⁺)
$3/10 * 10^{-7}$	$3/30 * 10^{-8}$	$10/00^{-7}$	(OH ⁻)
۶/۵۱	۷/۴۷	۷/۰۰	pH
			بازی
$9/60 * 10^{-14}$	$1/14 * 10^{-15}$	$10/00^{-14}$	(H ⁺)
$10/00^{\cdot}$	$10/00^{\cdot}$	$10/00^{\cdot}$	(OH ⁻)
۱۳/۰۲	۱۴/۹۴	۱۴/۰۰	pH

منبع: وست کات^۱ [۱۵].

به‌منظور ارائه یک روش موثر و مناسب برای نشان دادن pH، یک مقیاس pH ایجاد شده است. محدوده این مقیاس براساس ثابت تفکیک برای آب، K_w، است. Kw فعالیت یون هیدروژن ضربدر یون هیدروکسید است. یعنی:

$$K_w = \alpha_{H^+} \alpha_{OH^-} \quad [19.7]$$

غلظت‌های یون هیدروژن و یون هیدروکسید در آب خالص در ۲۵ °C برابر با 10^{-7} M هستند. با این‌حال، ثابت تفکیک آب با تغییر در دما تغییر می‌کند. این در جدول ۶.۷ نشان داده می‌شود.

¹ Westcott

جدول ۶.۷. اثر دما بر عامل تفکیک آب.

K_w	$-\log K_w$	دما ($^{\circ}\text{C}$)
$1/13 \times 10^{-15}$	۱۴/۹۴۳	۰
$1/85 \times 10^{-15}$	۱۴/۷۳۳	۵
$2/92 \times 10^{-15}$	۱۴/۵۳۵	۱۰
$4/50 \times 10^{-15}$	۱۴/۳۴۷	۱۵
$6/81 \times 10^{-15}$	۱۴/۱۶۷	۲۰
$1/01 \times 10^{-14}$	۱۳/۹۹۶	۲۵
$1/47 \times 10^{-14}$	۱۳/۸۳۳	۳۰
$2/09 \times 10^{-14}$	۱۳/۶۸۰	۳۵
$2/90 \times 10^{-14}$	۱۳/۵۳۵	۴۰
$4/02 \times 10^{-14}$	۱۳/۳۹۶	۴۵
$5/47 \times 10^{-14}$	۱۳/۲۶۲	۵۰
$7/30 \times 10^{-14}$	۱۳/۱۳۷	۵۵
$9/60 \times 10^{-14}$	۱۳/۰۱۷	۶۰

منبع: بریتون^۱ [۱۹].

جداول ۵.۷ و ۶.۷ نشان می‌دهند که محلول‌های مشابه اگر دما تغییر کند مقادیر pH مختلفی خواهند داشت. لازم به ذکر است که دما تاثیر اندکی بر مقادیر pH محلول‌های اسیدی دارد. اندازه‌گیری pH معمولاً به‌طور الکتروشیمیائی با یک الکتروود شیشه‌ای و با استفاده از معادله نرنست (معادله ۷-۲۰) انجام می‌گیرد. می‌توان مشاهده کرد که، این معادله به دما نیز وابسته است.

$$E = E^{\circ} - 0.198 T_k \text{ pH} \quad [۷-۲۰]$$

که در آن E پتانسیل مشاهده شده، E° پتانسیل پایدار ثابت شامل پتانسیل درونی مرجع است و T_k دما بر حسب کلوین است. از این‌رو، اگر دما در طول اندازه‌گیری تغییر کند، الکتروود شیشه‌ای باید در

¹ Britton

تبادل دمای با محلول برای به دست آوردن نتایج پایداری pH باشد. فرم کامل معادله نرنست است [۱۷، ۱۸]:

$$E = E_0 + 2.3 RT/F \log a_{H^+} \quad [۲۱-۷]$$

که در آن E پتانسیل اندازه‌گیری شده، R ثابت جهانی گاز، E_0 پتانسیل استاندارد، F ثابت فارادی^۱، T دما به کلوین و a_{H^+} فعالیت H^+ محلول اندازه‌گیری شده است. با جایگزینی مقدار $2.3 RT/F$ با ثابت S ، می‌توان گفت:

$$E = E_0 - S \text{ pH} \quad [۲۲-۷]$$

و بنابراین تفاوت بین پتانسیل‌های شیشه‌ای و الکترودهای مرجع تابعی از pH محلول اندازه‌گیری شده است.

$$\text{pH} = (E_0 - E)/S \quad \text{در یک دمای ثابت} \quad [۲۳-۷]$$

S به عنوان شیب الکترودها شناخته می‌شود.

همچنین تغییر در دما بر مقاومت غشاء شیشه‌ای در الکترودها تاثیر می‌گذارد. این مقدار برای هر کاهش ۷ درجه‌ای در دما دو برابر می‌شود؛ از این رو، به طور معمول توصیه می‌شود تا از یک الکترودها شیشه‌ای با مقاومت کم برای اندازه‌گیری‌ها در دمای پایین استفاده شود. با این حال، این الکترودها اندازه‌گیری را به یک محدوده کامل pH محدود خواهد کرد؛ این معمولاً به ۱۱-۰ pH محدود می‌شود. با وجود موارد فوق، متأسفانه رابطه تعریف شده‌ای بین تغییرات دمایی و pH وجود ندارد. با این حال، ممکن است از منظر تجربی امکان تقریب یک رابطه کلی درجه دوم وجود داشته باشد، همان‌طور که در معادله ۲۴-۷ نشان داده شده است.

$$\text{pH}_T = \text{pH}_0 + BT + CT^2 \quad [۲۴-۷]$$

¹ Faraday constant

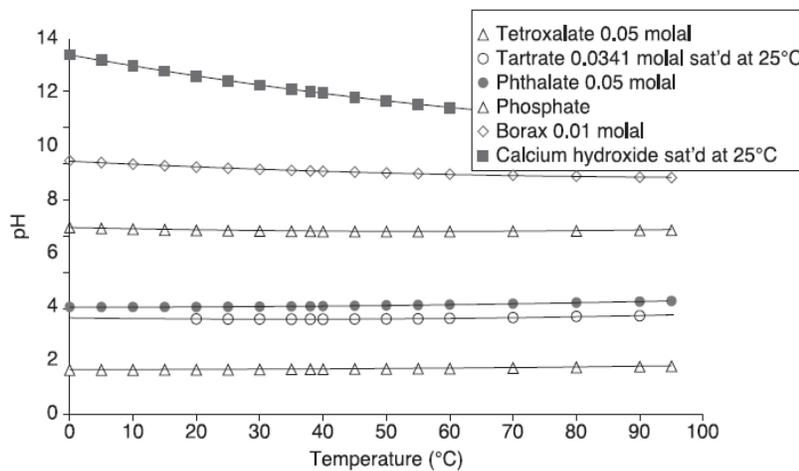
مقادیر B و C به محلول مورد استفاده بستگی دارند. pH_T و pH_0 به ترتیب pH را در هر دمای T و در $0^\circ C$ نشان می‌دهند.

اگر روش جبران دمایی در اندازه‌گیری مقادیر pH محلول در یک دمای متفاوت از دمای استاندارد به کار رود، مقدار صحیح pH در هر دمای داده شده را می‌توان با استفاده از معادله ۷-۲۵ محاسبه کرد [۱۵].

$$pH_s = 7 - (7 - pH_T) T_s / T \quad [۷-۲۵]$$

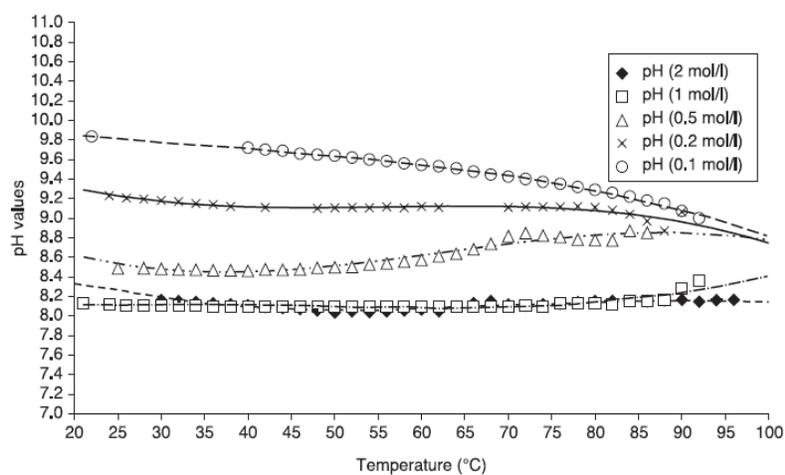
T و T_s به ترتیب دمای استانداردسازی و دمای نمونه برحسب کلون هستند؛ pH_s و pH_T نیز به ترتیب به مقدار صحیح pH و مقدار مشاهده شده‌ی pH در دمای T اشاره دارند. به منظور تاکید بر اثربخشی این رویکرد اصلاحی، یک سری محلول‌های بافری در انواع مختلف باید تهیه شوند و تغییرات pH با دما باید با pH سنج آزمایشگاهی ثبت شود. شکل ۱۴.۷ ارتباط بین محلول‌های بافری را نشان می‌دهد، که در آن خطوط ممتد مطابق با معادله ۷-۲۴ هستند.

این ارتباط تجربی است، و در نتیجه ثابت‌ها برای محلول‌های مختلف باید قبل از هرگونه تلاش انجام شده برای استفاده از آن در سیستم کنترل شناخته شده باشند. با این حال، همان‌طور که دیده شده، تغییر pH، به جزء در دامنه‌های شدید pH، برای مثال کلسیم هیدروکسید، معمولاً اندک است، و در نتیجه ممکن است چشم‌پوشی از این اثر امکان‌پذیر باشد مشروط بر اینکه تاثیر این تغییر pH به اندازه کافی در الگوریتم کنترل جبران شود.



شکل ۱۴.۷. مقادیر pH محلول‌های بافری مختلف در دما ۰-۹۵ °C.

شکل ۱۵.۷ اثر دما را بر تغییرات pH برای غلظت‌های مختلف بی‌کربنات سدیم، مشابه با آنچه که در رنگرزی بسترهای سلولزی استفاده شده، نشان می‌دهد. با این حال، برای اهداف عملی، تغییرات در pH با توجه به دما در طول محدوده رنگرزی، با مقدار حدود ۰/۵ واحد pH، ممکن است ناچیز در نظر گرفته شود.



شکل ۱۵.۷. اثر دما بر مقادیر pH محلول‌های سدیم بی‌کربنات.

مسئله دیگر مورد توجه ارتباط حجمی- گرمایی محلول است. جدول ۷.۷ ارتباط بین دما و حجم محلول سدیم کربنات را در شرایط تجربی کنترل شده نشان می‌دهد. ضریب انبساط حجمی برای مایعات نسبت تغییر در حجم در هر درجه به حجم در صفر درجه سانتی‌گراد است [۲۰]. همچنین مقدار تغییر ضریب انبساط حجمی با دما را نیز می‌توان براساس معادله ۷-۲۶ تعیین کرد.

$$V_T = V_0 (1 + \alpha t + \beta t^2 + \gamma t^3) \quad [۲۶-۷]$$

که در آن α ، β و γ به‌طور تجربی ضرایب را تعیین می‌کنند، و V_T و V_0 به‌ترتیب به حجم در دماهای T و 0°C اشاره دارند.

مهم این است که توجه شود، در کار تجربی مربوط به شیشه‌آلات، عوامل تصحیح برای انبساط لوله خود نیز باید در نظر گرفته شوند [۱۵]. تصحیحات در حجم محلول به‌عنوان نتیجه انبساط را می‌توان در جای دیگر یافت. ضرایب انبساط شیشه‌های مورد استفاده برای ابزارآلات حجمی به‌طور کلی برای تغییر از $0/000023$ به $0/000028$ در نظر گرفته می‌شوند [۲۱].

جدول ۷.۷. نتایج تجربی انبساط حجمی- گرمایی سدیم کربنات ($\pm 0/02 \text{ ml}$ در طول محدوده دمایی 19°C - 97°C).

تغییر در دما ($^\circ\text{C}$)	۰	۲۰	۳۴	۴۰	۵۶	۷۲	۷۵	۷۶	۷۸
تغییر در حجم (ml)	۰/۰۰	۰/۰۲	۰/۰۳	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۰۷	۰/۰۸	۰/۰۸	۰/۰۸

روش مشابه برای تعیین ارتباط حجمی- گرمایی محلول‌ها مستلزم استفاده از پیکنومتر^۱، ظروف شیشه‌ای طراحی شده برای اندازه‌گیری چگالی، است. کلاhek پیکنومتر شامل لوله موئین است که اجازه گسترش مایع را می‌دهد. مایع را می‌توان گرم کرد که در ادامه کلاhek شیشه‌ای شامل محلول اضافه خشک می‌شود. پیکنومتر سپس وزن می‌شود. تفاوت در وزن نمونه‌ها روشی را برای تعیین انبساط حجمی محلول فراهم می‌آورد.

^۱ pyknometer

۷.۵.۷. خطای یون سدیم

یون‌های سدیم می‌توانند به درون شبکه سیلیکون/اکسیژن الکتروود شیشه‌ای نفوذ کنند و یک خطای بالقوه پاسخ را موجب شوند. جدول ۸.۷ تصحیح برای خطای یون سدیم را نشان می‌دهد. K ضریب انتخاب است که تعادل تبادل یونی یون سدیم را در مقایسه با تعادل تبادل یونی یون هیدروژن مربوط می‌سازد، و S فاکتور نرنست است، برابر با $2.3 RT/F$ (R و F ثابت هستند، n بار یون و T دما برحسب کلوین است). K ثابت وابسته به دما برای تعادل تبادل یون بین سدیم و هیدروژن در شیشه و در محلول است. این اثر را می‌توان به پتانسیل پیش‌بینی شده توسط معادله نرنست ربط داد.

$$E = E^0 + S \log (\alpha_{H^+} + K \alpha_{Na^+}) \quad [27-7]$$

جدول ۸.۷. تصحیح یون سدیم برای الکتروودهای شیشه‌ای.

انواع شیشه		
۰-۱۴	۰-۱۱	
۲۵ °C		
۰/۱ M Na ⁺		
-	۰/۰۵	pH ۱۱
۰/۰۱	۰/۱۵	pH ۱۲
۰/۰۳	۰/۴۵	pH ۱۳
۰/۱۰	۱/۰۰	pH ۱۴
۱/۰ M Na ⁺		
۰/۰۱	۰/۱۵	pH ۱۱
۰/۰۳	۰/۴۰	pH ۱۲
۰/۱۰	۱/۰۰	pH ۱۳
۰/۳۰	-	pH ۱۴

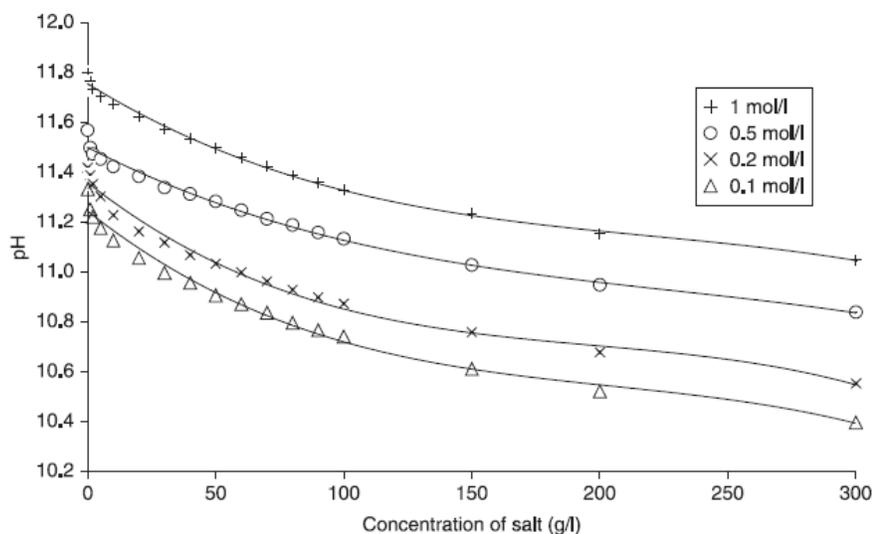
منبع: وست کات [۱۵].

در مطالعه تجربی شامل افزایش سدیم کلراید، در غلظت‌های مختلف، به یک سری مایعات رنگ‌زا حاوی مقادیر مختلف سدیم کربنات در شرایط هم‌دما، درحالی‌که pH محلول اندازه‌گیری شده، رابطه شرح داده شده در شکل ۱۶.۷ مشاهده شد. همان‌طور که می‌توان اشاره کرد، افزایش در غلظت نمک، برای تمامی محلول‌ها بدون در نظرگیری pH اولیه، منتج به کاهش pH تا ۰/۶ واحد می‌شود. شیب کاهشی هنگامی که نمک به سیستم وارد می‌شود، بیشتر است و پس از غلظت‌هایی در حدود ۱۰۰ g/l سدیم کلراید شیب هموارتر می‌شود.

به‌طور کلی، مقدار زیاد نمک برخی نمونه‌ها می‌تواند به‌طور قابل توجهی اندازه‌گیری‌های pH را تحت تاثیر قرار دهد. این نتیجه رقابت یونی بین یون‌ها در محلول داخل الکترود و یون‌های نمونه است. این اثر حتی در بالاترین و پایین‌ترین pH ها نیز بیشتر است، زیرا یون‌های هیدروژن و هیدروکسید چنین مقادیر زیاد رسانی اکسیژان حد دارند. چندین روش برای کاهش این اثر وجود دارد:

- استفاده از بافرهای نمکی قوی، مانند آنهایی که با آب دریا تهیه می‌شوند.
- استفاده از یک اتصال دهنده جریان سریع مقاومت کم، مانند اتصال اسلیو^۱.
- افزایش مقدار کم اسید یا باز به محلول سازگاری آن را با محلول افزایش می‌دهد؛ با این حال، این افزایش زمان ثبیت را کاهش خواهد داد.

¹ The sleeve junction



شکل ۱۶.۷. اثر افزایش نمک بر قرائت‌های pH برای محلول سدیم کربنات.

۸.۵.۷. اثر حضور لیف و pH درونی لیف

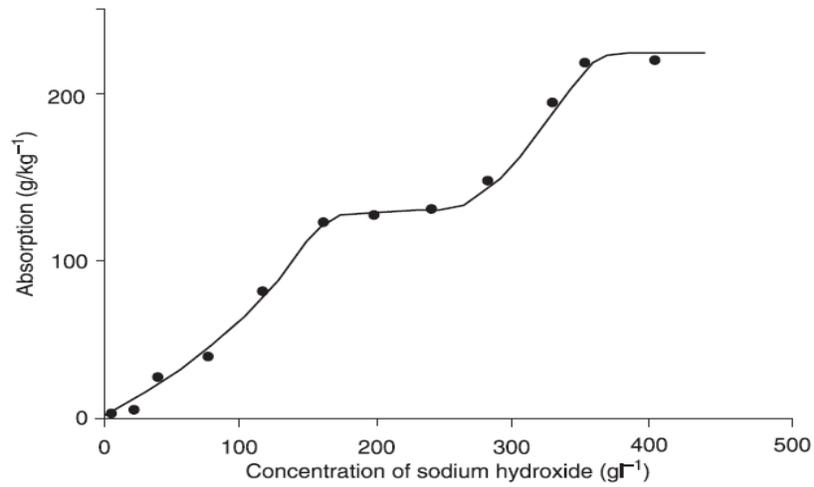
pH موثر در درون لیف می‌تواند متفاوت از pH مایع به گردش در آمده باشد. غلظت هر یون در مایع رنگزا، حتی آنهایی که غیرمستقیم در لیف هستند، می‌تواند هنگامی که لیف حاضر است در مقایسه با زمانی که وجود ندارد کاملاً متفاوت باشد. این غلظت توسط نظریه تعادل دونان^۱ شرح داده می‌شود و نیاز به ایفا کردن الزامات بی طرف الکتریکی دارد. یون‌های هیدروژن، هر چند با اندازه مولکولی کوچک، نیاز به زمان قابل توجهی برای نفوذ به درون یا بیرون، و خروج از، لیف دارند، بنابراین موجب تاخیرات زمانی در دستیابی به pH ثابت پس از تغییر در pH مایع رنگزا می‌شوند. حضور لیف در حمام رنگرزی کنترل pH را در هر سیستم دینامیکی پیچیده‌تر می‌کند. نشان داده شده است که pH درونی سلولز بر مرحله تثبیت رنگزایی ری‌اکتیو تاثیر می‌گذارد [۲۲] و خواص pH درونی الیاف مختلف به‌طور چشمگیری از یک لیف به دیگری متفاوت است [۲۳].

¹ Donnan equilibrium theory

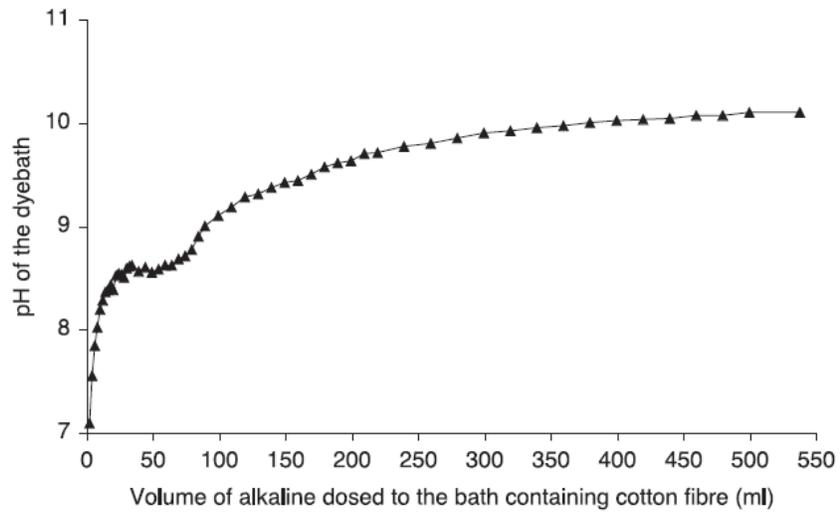
همچنین سامنر^۱ [۲۲] نشان داد که حضور یک الکترولیت می تواند تاثیر قابل توجهی بر تفاوت بین pH درونی و pH در محلول ایجاد کند، و این ارتباط برای الیاف مختلف متفاوت است. به عنوان مثال، در مورد سلولز افزودن سدیم کلراید تفاوت بین مقادیر pH درونی و بیرونی را کاهش می دهد، اما pH درونی هرگز بیشتر از pH حمام رنگرزی نمی شود. تفاوت زمانی که هیچ الکترولیتی حضور نداشته می تواند تا ۳ واحد pH باشد. با این حال، حضور ۱ mol/l نمک سدیم این تفاوت را به حدود ۰/۲ واحد pH کاهش می دهد. در حضور رنگزاهای آنیونی، این تفاوت حتی بزرگ تر می شود. با این حال، مطالعه الیاف نوع نایلونی نشان می دهد که، در غیاب رنگزا، مقادیر pH درونی و بیرونی در نقطه ایزوالکترولیت لیف از هم می گذرند. هنگامی که لیف بار مثبت حمل می کند، pH درونی همیشه بالاتر از آن در حمام رنگرزی می شود، در حالی که پس از نقطه ایزوالکتریک این pH کمتر از pH بیرونی است.

شکل ۱۷.۷ جذب هیدروکسید سدیم را بر روی لیف سلولزی برحسب g/kg لیف نشان می دهد [۲۴]. نتایج تجربی شامل افزودن قلیا به حمام رنگرزی حاوی بستر پنبه در شکل ۱۸.۷ نشان داده می شوند. نتایج، افزایش اولیه pH را در پاسخ به ورود تدریجی قلیا و به دنبال آن یک ناحیه کوچک بدون تغییر در مقدار pH نشان می دهد. تزریقات اضافی قلیا موجب افزایش مقدار pH می شود تا به تعادل خود برای محلول ۱ M سدیم بی کربنات در حدود $pH = 10/3$ دست یابد. این نشان می دهد که تدبیر یک قاعده کلی برای شامل کردن pH درونی لیف در مدل کنترل چالش هایی را به همراه خواهد داشت.

¹ Sumner



شکل ۱۷.۷. جذب ظاهری هیدروکسید سدیم توسط پنبه.



شکل ۱۸.۷. ارتباط مشاهده شده بین pH مایع حمام رنگرزی و غلظت قلیا.

۹.۵.۷. خطای اسید

فعالیت اسید می‌تواند موجب خطا در قرائت‌ها شود. مقدار این خطا به دما (به‌طور ضعیف)، زمان آشکارسازی و اندازه آنیون‌ها در محلول وابسته است.

۱۰.۵.۷. سایر منابع احتمالی خطا

یک تعداد عوامل دیگر نیز وجود دارند که می‌توانند موجب خطاهایی در اندازه‌گیری‌های pH شوند. جدول ۹.۷ علل احتمالی خطا در قرائت pH را نشان می‌دهد.

جدول ۹.۷. منابع خطا در قرائت pH.

منابع خطا				نمونه‌های دشوار
شرایط نمونه	پتانسیل اتصال	مقاومت نمونه	آلودگی	
	×	×	×	روغن‌های نامحلول
	×	×	×	آب مقطر
	×			نمک زیاد
×	×	×		جامدات (صاف، خشک)
	×	×	×	دوغاب گرانبه
×				شدت دما یا فشار
×	×			اسید یا باز قوی

هر یک از این خطاها را می‌توان به حداقل رسانید اگر شیوه‌های خاصی به کار گرفته شود. آلودگی نمونه ممکن است توسط شستشوی مکرر با حلال یا پاک‌سازی نمونه با یک گاز خنثی کاهش یابد. اگر نمک خنثی به نمونه افزوده شود مقاومت بالای نمونه را می‌توان کاهش داد. تغییر در محلول پرکننده مرجع، با استفاده از یک الکترولیت میانی در پل نمکی کمکی یا تغییر در نوع اتصال می‌تواند مشکلات مرتبط با پتانسیل اتصال قوی مایع را کاهش دهد. مشکلات مربوط به شرایط نمونه به‌طور بالقوه متعدد هستند، و بنابراین باید با توجه به نوع نمونه و ویژگی‌های آنها مورد بررسی قرار گیرد.

حضور دی‌اکسید کربن در محیط عامل بسیار مهمی در اندازه‌گیری pH برخی محلول‌های حساس به هوا است، که در آن نباید دست کم گرفته شود. کربنات سدیم، بی‌کربنات و دی‌سدیم فسفات همگی نسبت به حضور CO₂ حساس هستند. حضور دی‌اکسید کربن، که ممکن است با بخش‌های یونی در این محلول‌ها وارد واکنش شود، ممکن است منتج به شکل‌گیری کربونیک اسید شود. علاوه بر این، این محلول‌ها ممکن است به‌عنوان بافر عمل کنند، و در نتیجه در برابر رقیق‌سازی مقاوم باشند. این ممکن است با معرفی یک گاز بی‌اثر مانند N₂ به سیستم ممانعت به عمل آورد، که این مانع ورود CO₂ در هرگونه واکنش در سیستم می‌شود. کیفیت آب مورد استفاده نیز ممکن است یک عامل تاثیرگذار باشد.

۱۱.۵.۷. آب مقطر یا آب با خلوص بالا

آب مقطر یا آب با خلوص بالا رسانایی بسیار کمی دارد، مانند کمتر از ۱۰ میکرو-اهم. به این ترتیب نمونه‌ها احتمالاً پارازیت ناشی از مقاومت بالا را نشان می‌دهند، طبیعت غیربافری آب خالص و همچنین پتانسیل اتصال مایع. نمونه ممکن است به یک زمان قابل توجهی جهت برای پایداری نیاز داشته باشد، که در طی آن ممکن است دی‌اکسید کربن از محیط جذب شود. به‌منظور کاهش این مشکلات روش‌های زیر ممکن است به کار رود:

- سنجشی با جریان پایین بایاس^۱ توانا به اداره مقاومت بالای بین ورودی‌ها ممکن است مورد استفاده قرار گیرد.
- یک الکترولیت خنثی را می‌توان افزود؛ با این حال، این الکترولیت خنثی قدرت یونی را افزایش خواهد داد، که به نوبه خود بر فعالیت یون هیدروژن تاثیر خواهد گذاشت.

¹ Low bias current

- آلودگی با دی‌اکسید کربن را می‌توان توسط پاکسازی نمونه با یک گاز بی‌اثر مانند نیتروژن یا اندازه‌گیری نمونه بلافاصله پس از قرارگیری در معرض هوا کاهش داد.

همچنین مهم است تا الکتروود پس از استانداردسازی در محلول بافری کاملاً شسته شود، زیرا مقدار کم بافر می‌تواند مقدار pH نمونه با خلوص بالا را به شدت تحت تاثیر قرار دهد.

۶.۷. اندازه‌گیری و کنترل pH در سیستم رنجرزی

سیستم کنترل را می‌توان برای اندازه‌گیری و نظارت تغییر pH در یک چرخه رنجرزی معمولی اجرا کرد. سیستم پروب جمع‌شدنی ممکن است برای اندازه‌گیری pH مورد استفاده قرار گیرد. پروب را می‌توان درون محفظه‌ای که به‌طور ویژه طراحی شده نصب کرد. ورود و خروج پروب به‌طور نئوماتیکی (توسط فشار هوا) کنترل می‌شود، که به نوبه خود ممکن است به‌طور الکترونیکی از سیگنال داده شده توسط واحد رابط کنترل شود.

پروب pH ممکن است به یک کابل دو طرفه متصل شود، با صفحه بیرونی متصل به زمین در آمپلی‌فایر (تقویت کننده) و صفحه داخلی متصل به الکتروود مرجع. پروب ممکن است برای وارد شدن و خارج شدن در هر دقیقه برنامه‌ریزی شده باشد تا اجازه دهد قرائت مداوم داده‌های pH انجام گیرد. با این حال، ممکن است لازم باشد پروب در حمام برای هر بار حدود ۱۰ ثانیه جهت ایجاد تعادل قبل از ثبت مقادیر باقی بماند.

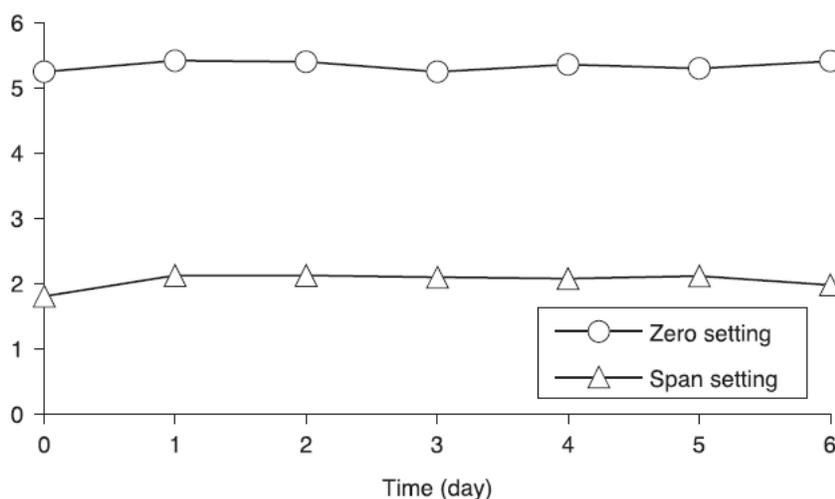
۱.۶.۷. کالیبراسیون

کالیبراسیون تکراری ممکن است با استفاده از محلول‌های بافری زیر انجام پذیرد: pH ۷ و pH ۹/۲۱ برای محدوده قلیایی و pH ۷ و pH ۴/۰۱ برای محدوده اسیدی.

این محلول‌ها باید به‌دقت آماده و با دستگاه‌های کالیبره شده موجود اندازه‌گیری شوند. محلول‌های بافری تهیه شده از جداول بافر همچنین ممکن است برای مقایسه به‌منظور اطمینان از اینکه کالیبراسیون به‌درستی انجام می‌شود، مورد استفاده قرار گیرند. اقدامات احتیاطی زیر باید مورد توجه قرار گیرند:

- اگر الکتروود خشک است، باید آن را در یک محلول الکترولیت برای مدت ۱۸-۲۴ ساعت قرار داد.
- برای دماهای مختلف محلول، زمان باید برای الکتروود pH به‌منظور ایجاد شرایط جدید مجاز باشد.
- در فرآیند کالیبراسیون، حالت pH سنج باید به "کالیب"^۱ تنظیم شود و محلول‌ها در °C ۲۶ نگه داشته شوند.

شکل ۱۹.۷ تغییر در تنظیمات صفر و محدوده مشخص pH سنج معمولی را در کالیبراسیون محلول‌های بافری طی یک دوره ۲۰ روزه پس از روش‌های توصیه شده در بالا نشان می‌دهد. این را می‌توان مشاهده کرد که، با آنکه تغییرات کوچک رخ داده، کالیبراسیون رضایت بخش بود.



شکل ۱۹.۷. تنظیمات در صفر و در محدوده مشخص pH سنج طی یک دوره ۲۰ روزه.

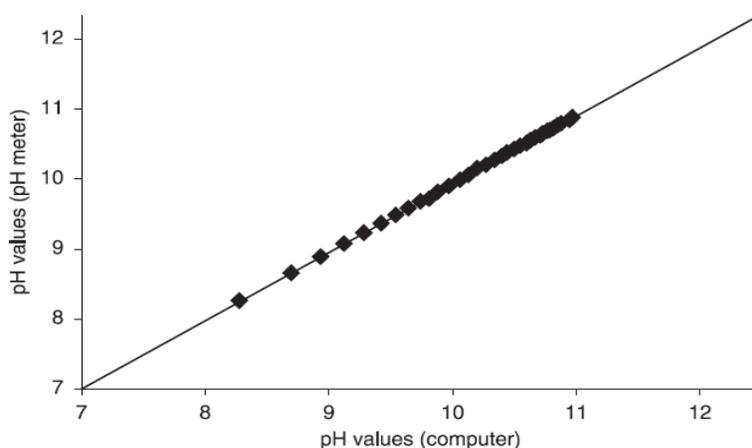
با پروبی که به‌طور رضایت‌بخش کالیبره شده، مقادیر ثبت شده توسط سیستم نیز باید کالیبره شوند. این را می‌توان با رسم مقادیر سیگنال در برابر مقادیر pH محلول‌های مختلف اندازه‌گیری شده به‌دست

¹ Calib

آورد. گام بعدی این است که اطمینان حاصل شود مقادیر بر روی نمایشگر pH سنج در برابر مقادیر ورودی کالیبره می‌شوند.

۲.۶.۷. اندازه‌گیری مقادیر pH توسط کامپیوتر و pH سنج

محلول قلیا یا اسید شناخته شده (به‌عنوان مثال ۱۰ g/l سدیم هیدروکسید) ممکن است به‌طور هم‌دما به درون مایع در گردش ماشین رنگ‌رزی در دمای ۲۵ °C به‌منظور حذف هر گونه اثرات احتمالی تغییر دما بر مقادیر اندازه‌گیری شده تزریق شود. قرائت داده‌ها توسط pH سنج و کنترل کننده درست قبل از شروع تزریق بعدی به‌دست می‌آید. تزریق مقادیر مشخص محلول مرجع (به‌عنوان مثال ۱۰ ml) ممکن است در فواصل زمانی ۵ دقیقه صورت پذیرد. مقادیر توسط سیستم خوانده می‌شوند و pH سنج باید توافق رضایت بخشی برای اطمینان از سطح بالای ثبات و دقت، مانند آنچه که در شکل ۲۰.۷ نشان داده شده) ارائه دهد.



شکل ۲۰.۷. کالیبراسیون مقادیر نشان داده شده‌ی pH سنج در برابر مقادیر ورودی کنترل کننده.

۳.۶.۷. پیشرفت نرم افزار برای کنترل pH

دو رویکرد مختلف ممکن است برای کنترل pH حمام رنگ‌رزی به‌کار رود. رویکرد اول ممکن است براساس نرخ مشخص جریان ورودی اسید یا قلیا به حمام رنگ‌رزی با بررسی‌های نقطه‌ای گرادپان pH باشد. در روش دوم یک سیستم کنترل مدار بسته ممکن است مورد استفاده قرار گیرد، که در آن

افزودن مواد شیمیائی براساس مقدار pH حمام رنگرزی و گرادیان مورد نظر pH است. هر دوی این روش‌ها با جزئیات بیشتری در اینجا توصیف می‌شوند.

۴.۶.۷. کنترل بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده‌ی ورود تدریجی مواد

ورود تدریجی محلول‌های مختلف معمولاً طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده کنترل می‌شود. چندین نمودار مختلف ممکن است مورد توجه قرار گیرد، اما تنها سه مورد در اینجا بیشتر بررسی می‌شوند: خطی، درجه دوم و نمایی.

این نمودارها ممکن است توسط معادلات زیر تعریف شوند؛ که در آن V حجم کل محلول به تدریج افزوده می‌شود و V_{dos} نرخ ورود تدریجی مواد در هر زمان t است. حجم کل محلولی که به تدریج افزوده شده همراه با زمان کل ورود تدریجی مواد ثابت‌های a ، b و c را در نمودارهای از پیش تنظیم شده‌ی ورود تدریجی مواد تعیین می‌کند. با این حال، یکی از کاستی‌های اصلی این سیستم آن است که این ثابت‌ها لازم است برای هر نمودار و هر محلول مختلف که ممکن است مورد استفاده قرار گیرد شناخته شده باشند؛ بنابراین، پایگاه داده‌ای نسبتاً بزرگی نیازمند خواهد بود.

نمودار خطی:

$$V = at$$

[۲۸-۷]

$$V_{dos} = dV/dt = a$$

[۲۹-۷]

نمودار درجه دوم:

$$V = a + bt + ct^2$$

[۳۰-۷]

$$V_{dos} = dV/dt = b + 2ct$$

[۳۱-۷]

نمودار نمایی:

$$V = a(e^{bt} - 1)$$

[۳۲-۷]

$$V_{dos} = dV/dt = abe^{bt}$$

[۳۳-۷]

مقادیر ورود تدریجی مواد ممکن است هر ۲۰ ثانیه برای ورود تدریجی در چرخه زیر محاسبه شوند. با این حال، اندازه‌گیری pH باید به‌طور مداوم صورت پذیرد، به‌عنوان یک بار در هر دقیقه. تقسیم این مقادیر بر نرخ پمپ زمان ورود تدریجی مواد را برای هر چرخه ارائه خواهد داد:

$$t_p = V_{dos} / pmprate \quad [۳۴-۷]$$

که در آن t_p زمان ورود تدریجی مواد است.

با در نظر گرفتن نرخ تغییر pH با افزودن مواد شیمیایی مشخص، لازم به ذکر است که، اگر محلول‌های قوی اعمال شوند، منتج به گرادیان‌های تند pH خواهد شد. از طرفی دیگر، استفاده از محلول‌های رقیق به مقادیر قابل توجه محلول برای ارائه مقدار مشخص pH نیاز خواهد داشت. برای مثال، افزودن حدود ۱ ml به ازای هر لیتر (۱:۱۰۰۰) از HCl رقیق شده به حمام خنثی منتج به مقدار pH=۵ می‌شود. مقدار مورد نیاز محلول مشابه برای تنظیم pH از ۴ به ۳، ۹۰ ml است. تنظیم نرخ جذب بالای رنگزا در مراحل اولیه رنگریزی ممکن است مطلوب نباشد، زیرا تغییر ناگهانی در pH می‌تواند منتج به نایکنواختی یا هیدرولیز رنگزا در حمام رنگریزی شود. یک راه حل بالقوه، اگرچه کامل نیست، به‌کارگیری دو محلول مختلف است: محلول قوی برای تغییر pH در سطوح شدید و محلول رقیق برای تنظیم مقادیر به سمت خنثی. همچنین دشواری که شامل حساسیت اولیه بالای تغییر pH به مقدار محلولی که به تدریج افزوده شده است را نیز می‌توان با کنترل پمپ اندازه‌گیری غلبه کرد، با تغییر در تعداد ثانیه‌ها در هر دوره کنترل که پمپ باقی می‌ماند و نرخ پمپاژ در طول دوره. الگوریتم کنترل را می‌توان هنگامی که مقادیر کم محلول مورد نیاز هستند، تعیین کرد؛ به‌طوری‌که حساسیت سیستم کاهش می‌یابد، مقادیر بیشتری ممکن است تزریق شوند.

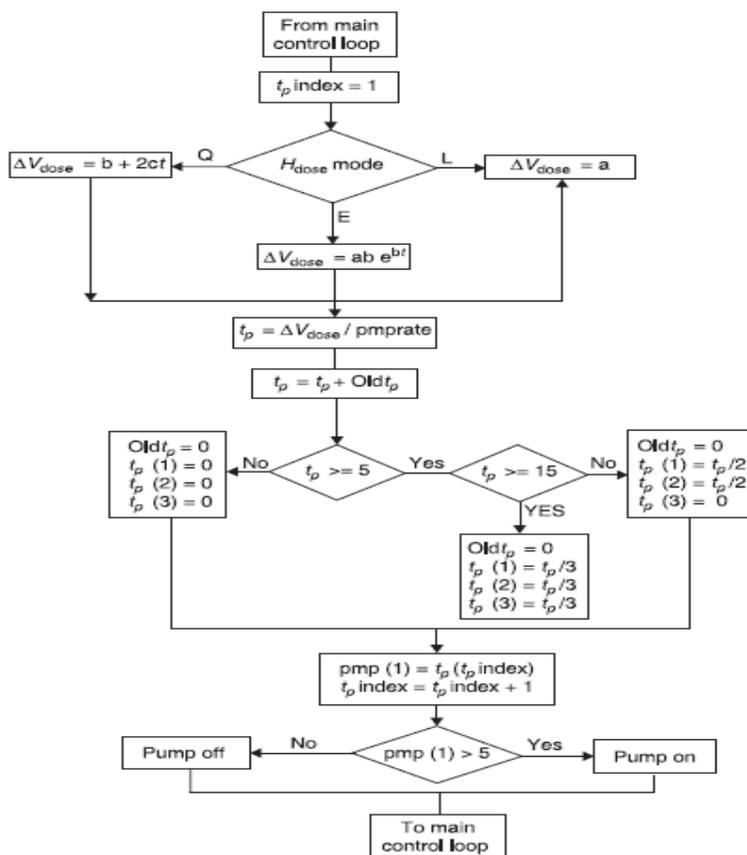
پمپ‌ها را می‌توان توسط سیگنال‌هایی که آنها را روشن و خاموش^۱ می‌کند کنترل کرد. زمان روشن^۲ پمپ‌ها با توجه به نمودار انتخاب شده کنترل می‌شود، که به نوبه خود حجم مورد نظری که به تدریج افزود شده را کنترل می‌کند. به‌منظور حذف خطاهای روشن/خاموش پمپ‌ها، هر حجمی را که به یک

^۱ ON and OFF

^۲ The ON time

زمان پمپاژ کوتاه، به‌عنوان مثال کمتر از ۵ ثانیه، نیاز داشته، را می‌توان به مقدار چرخه بعدی اضافه کرد.

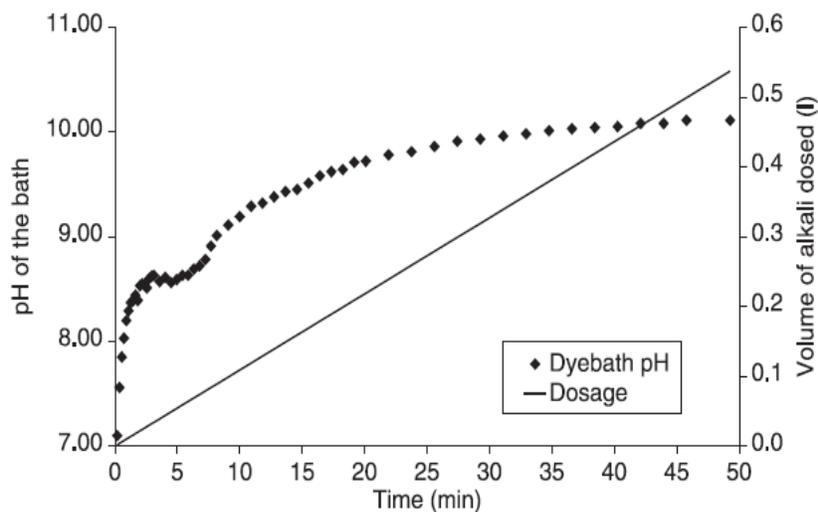
دما حمام رنگرزی ممکن است در برابر دما مورد نظری که در آن ورود تدریجی مواد باید انجام گیرد مقایسه شود. همچنین pH نهایی مورد نظر حمام رنگرزی نیز باید برای پایان دادن به ورود تدریجی مواد، هنگامی که این مقدار به‌دست می‌آید، به‌طور مداوم مورد بررسی قرار گیرد. شکل ۲۱.۷ نمودار گردش کار^۱ ساده‌ای را برای این فرآیند نشان می‌دهد.



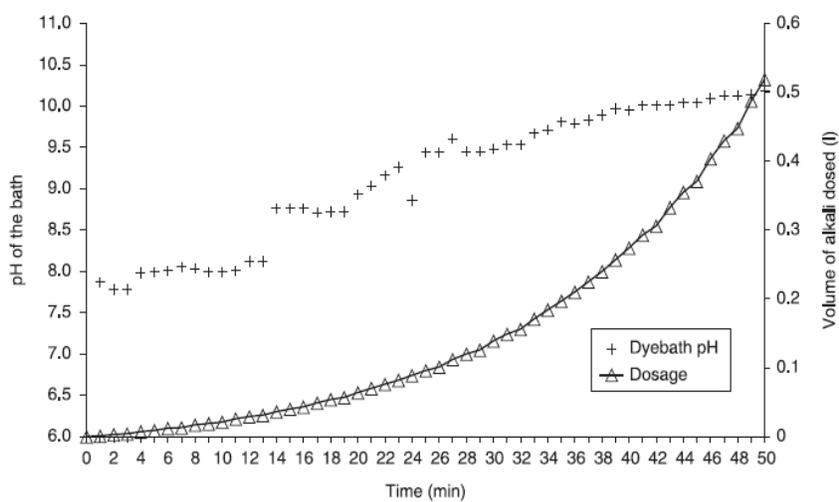
شکل ۲۱.۷. نمودار گردش کار برنامه برای کنترل ورود تدریجی مواد بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده.

¹ Flowchart

شکل‌های ۲۲.۷ و ۲۳.۷ عملکرد نمودارهای خطی و نمایی از ورود تدریجی مواد با بسته نخ سلولزی را درون ماشین رنگرزی نشان می‌دهند. مشخص شده که کنترل امکان‌پذیر است.



شکل ۲۲.۷. نمودار خطی ورود تدریجی مواد.



شکل ۲۳.۷. کنترل نمایی ورود تدریجی مواد.

۵.۶.۷. کنترل بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده‌ی تغییرات pH

تغییر pH درون حمام رنگرزی ممکن است بر طبق یکی از سه نمودارهای: خطی، درجه دوم و نمایی با زمان کنترل شود؛ این را می‌توان به صورت زیر نشان داد:

نمودار خطی:

$$pH_t = pH_0 \left(1 - \frac{A}{T}\right) + pH_f \left(\frac{A}{T}\right) \quad [۳۵-۷]$$

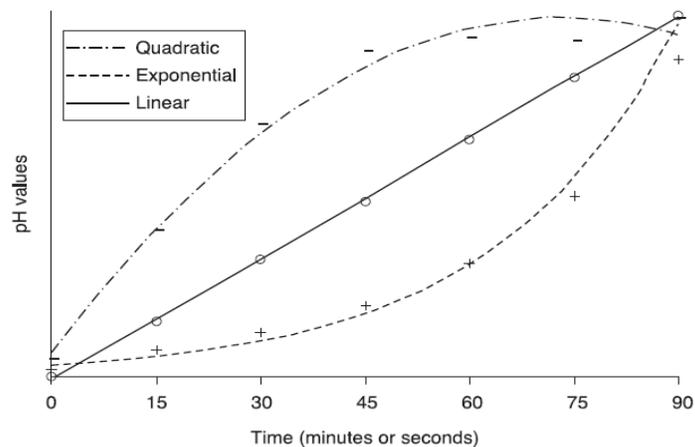
نمودار درجه دوم:

$$pH_t = pH_0 \left\{ 1 - \frac{\left[1 - \left(\frac{pH_f}{pH_0} \right)^{0.5} \right] A}{T} \right\}^2 \quad [۳۶-۷]$$

نمودار نمایی:

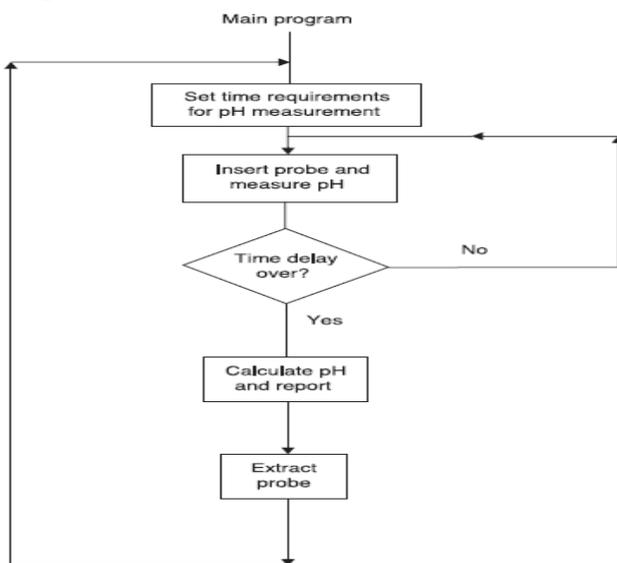
$$pH_t = pH_0 \text{Exp} \left\{ \left[\frac{1}{T} \ln \left(\frac{pH_f}{pH_0} \right) \right] A \right\} \quad [۳۷-۷]$$

مقادیر A ضرایبی هستند که مقادیر آنها برحسب دوره زمانی که تغییر باید انجام شود، تعیین می‌شود. pH_t ، pH_f و pH_0 به ترتیب اشاره به pH در هر زمان t ، pH هدف در پایان فرآیند و pH در شروع فرآیند دارند. T کل دوره زمانی است که طی آن pH هدف باید به دست آید. این نمودارها در شکل ۲۴.۷ نشان داده می‌شوند.



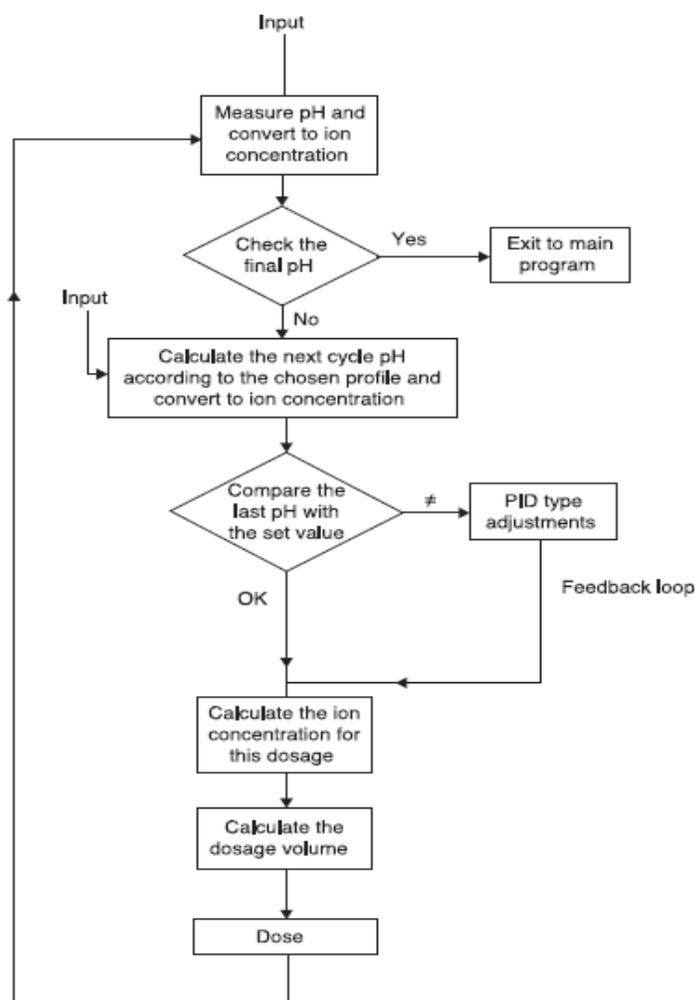
شکل ۲۴.۷. نمودارهای کنترل pH.

کنترل pH به ترتیب شامل دو بخش اصلی است: اندازه‌گیری pH و کنترل پمپ‌ها برای ورود تدریجی مواد. نمودار گردش کار ساده‌ای برای اندازه‌گیری pH در شکل ۲۵.۷ نشان داده می‌شود.



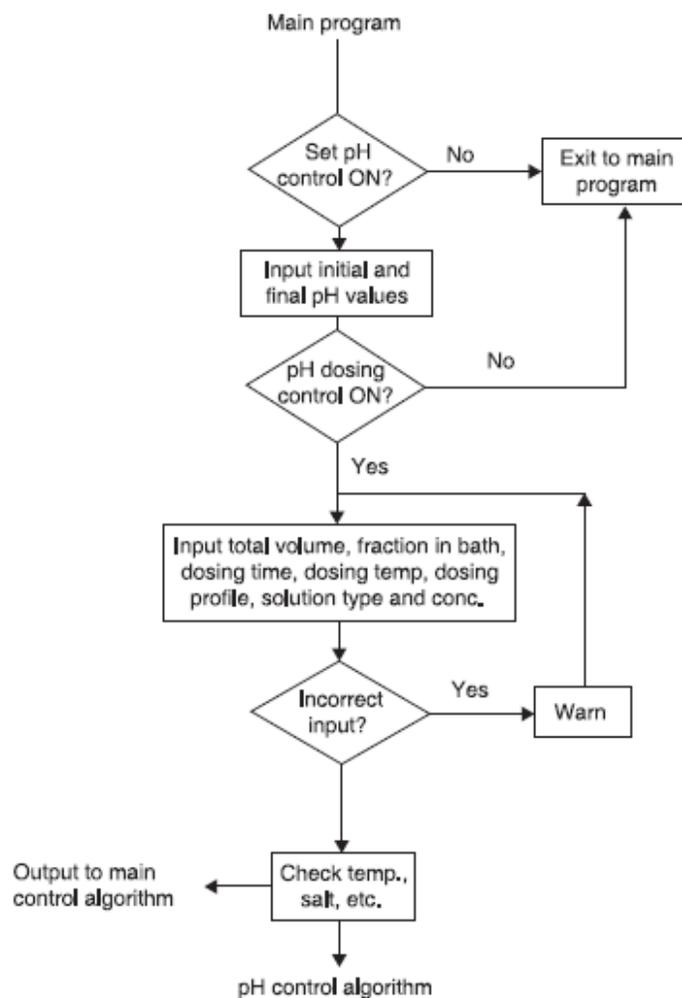
شکل ۲۵.۷. نمودار گردش کار ساده‌ی اندازه‌گیری pH.

اثرات افزودن نمک، غلظت رنگزا و دمای حمام رنگرزی نیز ممکن است در طراحی الگوریتم کنترل pH در نظر گرفته شود. اگر pH مورد نظر در هر چرخه‌ی مشخص به دست نیاید، مقدار pH چرخه بعدی باید این نقص را جبران کند. نمودار گردش کار ساده‌ی این فرآیند در شکل ۲۶.۷ ارائه می‌شود.



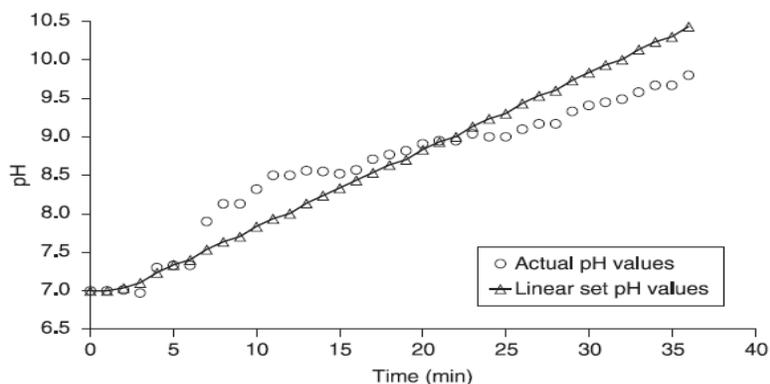
شکل ۲۶.۷. نمودار گردش کار اصلی برنامه کنترل تغییر pH.

شکل ۲۷.۷ نمودار گردش کاری را نشان می‌دهد که هدف آن ایجاد غلظت و نوع محلول مورد استفاده و مقادیر pH اولیه و نهایی است. بخش کنترل pH یک برنامه کلی کنترل می‌تواند وابستگی دمایی ثابت تفکیک اجزا در مایع رنگرزی را به حساب آورد. با این حال، ممکن است اهمیت این بخش کنترل با انتخاب دقیق مواد مورد استفاده کاهش یابد.

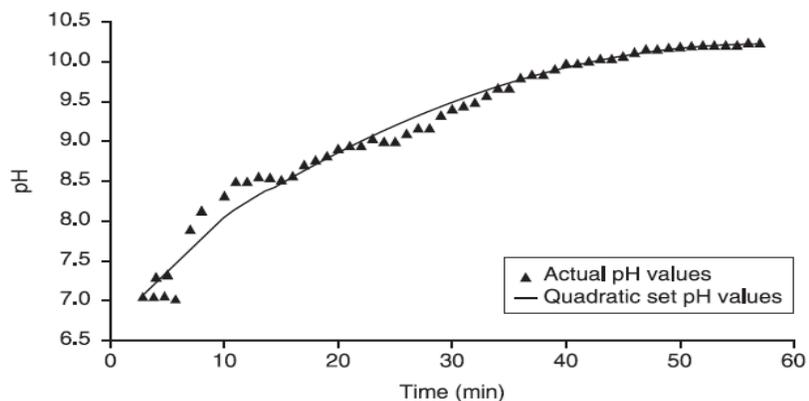


شکل ۲۷.۷. نمودار گردش کار ورودی برنامه کنترل تغییر pH.

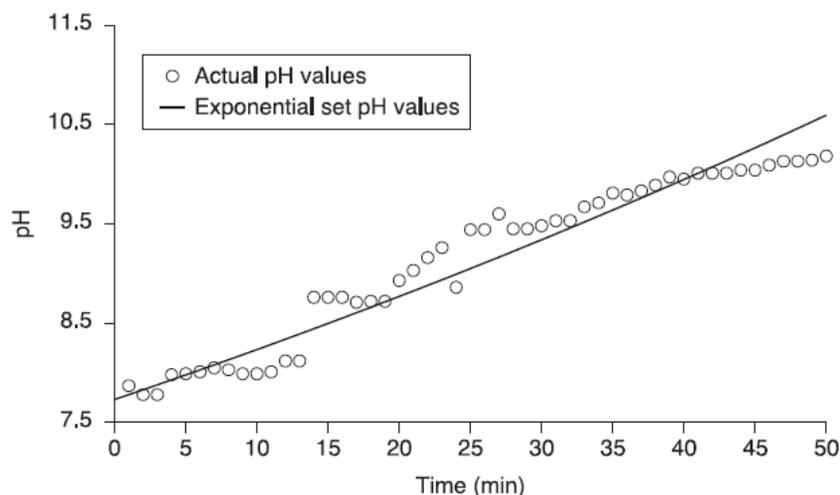
شکل‌های ۲۸.۷-۳۰.۷ عملکرد نمودارهای کنترل خطی، درجه دوم و نمایی را براساس افزودن سدیم کربنات به مایع حمام رنگرزی برای تنظیم مقادیر pH نشان می‌دهند. همان‌طور که می‌توان اشاره کرد، انحرافات از مقادیر تنظیم شده برای تمامی نمودارها براساس استفاده از یک محلول واحد با قدرت مشخص آشکار می‌شود. همان‌طور که قبلاً بیان شد، عملکرد سیستم را می‌توان با به‌کارگیری محلول‌هایی با قدرت یونی مختلف بهبود بخشید، اگرچه این پیچیدگی الگوریتم کنترل را افزایش خواهد داد.



شکل ۲۸.۷. مقادیر pH تنظیم شده در برابر pH واقعی برای نمودار خطی براساس افزودن Na_2CO_3 به درون ماشین رنگرزی.



شکل ۲۹.۷. مقایسه مقادیر pH تنظیم شده و واقعی برای نمودار خطی براساس افزودن Na_2CO_3 برای کنترل درجه دوم.



شکل ۳۰-۷. مقایسه مقادیر pH تنظیم شده و واقعی برای نمودار کنترل نمایی براساس افزودن Na_2CO_3 به مایع حمام رنگرزی.

۶-۶-۷. ارتباط بین غلظت یونی و pH

اگرچه معادله ۷-۱۲، که pH را تعریف می‌کند، غلظت یون هیدروژن را به pH ربط می‌دهد، اما هیچ‌گونه ارتباطی این مقدار با میزان ماده در محلول یا این مقدار با حجم محلول تغذیه حاصل از یک غلظت مشخص فراهم نمی‌کند. تقریب‌هایی برای ارتباط این مقادیر به pH، همان‌طور که در بخش زیر نشان داده شده، مورد نیاز است.

اسیدها و قلیایی‌های قوی

$$[H^+] = M_0, [OH^-] = M_0 \quad [۳۸-۷]$$

که در آن M_0 مولاریته محلول اصلی است و به صورت معادله ۷-۳۹ نشان داده می‌شود.

$$M_0 = \frac{\text{غلظت محلول (g/l)}}{\text{حجم کل (l)} \times \text{وزن مولکولی}} \quad [۳۹-۷]$$

اسیدها و بازهای ضعیف

$$[H^+] = \sqrt{M_0 K_a} \quad [OH^-] = \sqrt{M_0 K_b} \quad [۴۰-۷]$$

K_b و K_a به ثابت‌های تفکیک اسیدها و بازها اشاره دارند.

نمک اسید یا باز بسیار ضعیف

$$[H^+] = \sqrt{\frac{K_w}{K_a} C} \quad [OH^-] = \sqrt{\frac{K_w}{K_b} C} \quad [۴۱-۷]$$

اسیدهای چند پروتونه و قلیایی‌های چند منظوره

مثال خوب این نوع سیستم کربنات سدیم است، که دستخوش واکنش‌های زیر در آب می‌شود.



اگر $K_{b2} \ll K_{b1}$ در آن صورت

$$[OH^-]^2 + K_{b1} [OH^-] - M_0 = 0$$

[۴۶-۷]

$$[H^+] = \frac{-K_{a1} \sqrt{K_{a1}^2 + 4M_0}}{2} \quad [OH^-] = \frac{-K_{b1} \sqrt{K_{b1}^2 + 4M_0}}{2}$$

با استفاده از این روابط، با تقریب‌هایی مناسب، حجم محلولی که مورد نیاز است تا به تدریج افزوده شود برای تهیه یک غلظت یونی مشخص در حمام رنگرزی را می‌توان محاسبه کرد. تفاوت بین مقدار pH محاسبه شده و مقدار اندازه‌گیری شده را می‌توان سپس با محاسبات چرخه‌های بعدی تصحیح کرد. جدول ۱۰.۷ ثابت‌های تفکیک را برای برخی مواد رایج ارائه می‌دهد.

جدول ۱۰.۷. ثابت‌های تفکیک برخی مواد رایج.

نام	فرمول	K_a	K_b	pK
هیدروکلریک اسید	HCl	-	-	-
نیتریک اسید	HNO ₃	-	-	-
فرمیک اسید	HCOOH	1.77×10^{-4}	-	۳/۷۵
استیک اسید	CH ₃ COOH	1.76×10^{-5}	-	۴/۷۵
بوریک اسید	HBO ₂ . H ₂ O	6.00×10^{-6}	-	۹/۲۰
کربونیک اسید	H ₂ CO ₃	$K_{a1} = 3.00 \times 10^{-7}$	-	۶/۵۰
		$K_{a2} = 6.00 \times 10^{-11}$	-	۱۰/۲۰
فسفریک اسید	H ₃ PO ₄	$K_{a1} = 9.40 \times 10^{-3}$	-	-
		$K_{a2} = 1.40 \times 10^{-7}$	-	۶/۹۰
		$K_{a3} = 2.70 \times 10^{-12}$	-	۱۱/۶۰
سدیم هیدروکسید	NaOH	-	-	-

۴/۷۰	$1/80 \cdot 10^{-5}$	-	NH ₃	آمونیاک
۲/۴۳	$K_{b1} = 3/74 \cdot 10^{-2}$	-	Ca(OH) ₂	کلسیم هیدروکسید
۱/۴۰	$K_{b2} = 4/0 \cdot 10^{-2}$			

در نتیجه، کنترل pH در حمام رنگرزی توسط یک تعداد عوامل تحت تاثیر قرار می‌گیرد، برخی از آنها، شامل مقدار نمک، تاثیر نسبتاً بزرگی بر مقدار اندازه‌گیری شده دارند. برخی پارامترها نسبتاً پیچیده هستند، و تغییرات نامحسوس ممکن است به دلیل حضور لیف اعمال شوند. تغییرات نسبتاً کوچک در pH را می‌توان کنترل کرد (تا ۰/۵ واحد pH)، توصیه می‌شود تقریباً در بخش‌های مختلف یک چرخه کنترل مشخص در نظر گرفته شوند، به طوری که این منتج به الگوریتم کنترل بسیار ساده‌ای خواهد شد.

۷.۶.۷. خلاصه استراتژی کنترل

استراتژی کنترل مورد بحث در بالا براساس استفاده از حلقه‌های زمانی برای ورود داده از حسگرها و فعال‌کننده‌های کنترل براساس یک الگوریتم مناسب است. در این روش کل فرآیند رنگرزی به چرخه‌های زمانی کوتاه، به‌عنوان مثال ۲ دقیقه‌ای، تقسیم می‌شود. هر چرخه سپس به حلقه‌های کوچک‌تری، به‌عنوان مثال ۲۰ ثانیه، مجدداً تقسیم می‌شود. در ادامه غلظت رنگزا در مایع اندازه‌گیری و هر ۲۰ ثانیه یک‌بار گزارش می‌شود. در مثال ارائه شده، زمان ۵ ثانیه ممکن است برای اندازه‌گیری و ورود داده و زمان ۱۵ ثانیه برای محاسبه مقادیر مجاز باشند. مقادیر رمق‌کشی سپس براساس غلظت رنگزا در مایع رنگرزی هر ۲ دقیقه به روز می‌شوند. قرائت دما ممکن است در هر ثانیه یک‌بار انجام شود. تغییر در دما ممکن است با رگرسیون غلتان طی ۴۰ ثانیه محاسبه شود. چندین رگرسیون متوالی را می‌توان اجرا کرد، هر کدام در طی ۸ ثانیه، به‌منظور محاسبه فرم مشتقی برای الگوریتم کنترل PID دما. کنترل احتمالی PID دما می‌تواند براساس نسبت ۲:۱:۱ باشد. به این معنی که اهمیت عامل تناسب دو برابر اهمیت عامل‌های انتگرالی یا مشتقی است. محاسبه پارامترهای شبیه‌سازی شده برای کنترل با تغذیه پیش‌رو^۱ ممکن است یک‌بار در هر ثانیه انجام پذیرد. سپس کل چرخه با گام‌های دو دقیقه‌ای پیش‌رو

^۱ Feed- forward control

برنامه‌ریزی می‌شود، هر گام دوباره به حلقه‌های کوچک‌تری تقسیم می‌شود که ۲۰ ثانیه طول می‌کشد. جدول ۱۱.۷ روش‌های کنترل را برای پارامترهای مختلف در سراسر این بخش خلاصه می‌کند.

جدول ۱۱.۷. الگوریتم کنترل پارامترهای مختلف.

پارامتر	الگوریتم کنترل
دما (T)	PID
pH	کنترل بازخوردی ^۱
تزریق مواد شیمیایی	کنترل دو وضعیتی، PID
غلظت رنگزا (ورود تدریجی مواد)	کنترل دو وضعیتی
رمق کشی	کنترل پیشگویانه با تغذیه پیش‌رو ^۲
جهت جریان	کنترل دو وضعیتی
نرخ جریان	PID

۷.۷. استراتژی کنترل تغذیه پیش‌رو

مدل‌های کنترل پیشگویانه با تغذیه پیش‌رو از بین چندین مدلی هستند که ممکن است در کنترل رنگریزی برای به‌دست آوردن مجموعه نمودارهای رmq کشی از پیش تعریف شده به‌کار روند. این مدل با تغییر دما سیستم براساس پیش‌بینی رmq کشی در هر مرحله‌ی مشخص به‌دست می‌آید. مدل، برپایه سینتیک رنگریزی، ارتباط نوع آرنوسی^۳ را بین نرخ رmq کشی و دما فرض می‌کند.

ابتدا، براساس کار تجربی، مشتق غلظت (نرخ تغییر غلظت رنگزا در حمام رنگریزی با زمان) با استفاده از روش‌های رگرسیون خطی غلتان محاسبه می‌شود. این روش مقدار متوسطی را ارائه می‌دهد که خطاهای تصادفی را که ممکن است همراه با یک‌بار قرائت ایجاد شده باشند به حداقل می‌رساند.

¹ Feedback control

² Feed- forward predictive control

³ Arrhenius- type relationship

۱.۷.۷. محاسبه نرخ رمق‌کشی مجموعه با استفاده از یک دمای معین

هدف توسعه سینتیک رنگرزی ایجاد یک رابطه تقریبی بین نرخ رمق‌کشی، غلظت مایع رنگزا و دما در طول فرآیند رنگرزی است. ویژگی اصلی چنین برنامه کنترلی پیش‌بینی دمای رنگرزی برای چرخه کنترل بعدی از متغیرهای حمام رنگرزی اندازه‌گیری شده در طول آخرین چرخه کنترل است. برای رسیدن به این هدف، اطلاعات زیر مورد نیاز است:

- فرمول ریاضی منحنی رمق‌کشی و مقدار پارامتر کنترل Q_i
- انرژی فعال‌سازی رنگرزی E_a (در اکثر رنگرزی‌ها، انرژی فعال‌سازی نفوذ)
- برای برخی ترکیبات رنگزا-لیف، محدوده دمایی انتقال مرتبه دوم (همیشه ضروری نیست).

تغییر در نرخ رمق‌کشی مورد نظر در مدل با تغییر در دما اداره می‌شود. به‌منظور محاسبه دمای معین مورد نیاز برای هر رمق‌کشی مشخص، مدت زمان رنگرزی به یک سری "چرخه‌های کنترل" تقسیم می‌شود. در هر چرخه فرض می‌شود که نرخ رمق‌کشی وابستگی مرتبه اول با غلظت فعلی رنگزا در حمام رنگرزی دارد.

چرخه رنگرزی کامل به چرخه‌های کنترل N در مدت زمان T تقسیم می‌شود. در چرخه کنترل J امین زمانی که چرخه کنترل شروع شده t_j است؛ برای چرخه‌های کنترل قبلی و بعدی این زمان به ترتیب t_{j-1} و t_{j+1} است. در ادامه پارامترهای زیر تعریف می‌شوند:

$C(t_j)$ غلظت رنگزا در حمام رنگرزی در زمان t_j

$T(t_j)$ دما حمام رنگرزی در زمان t_j

E_a انرژی فعال‌سازی رنگرزی

Q مقدار از پیش تعیین شده‌ی پارامتر کنترل.

فرض مرتبه اول ثابت نرخ را با توجه به معادله ۷-۴۷ تعریف می‌کند.

$$K(t) = \frac{1}{c(t)} \cdot \frac{dc(t)}{dt} \quad [۴۷-۷]$$

پارامتر کنترل برای منحنی‌های مختلف رمق‌کشی سپس به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۹]:

خطی:

$$Q_1 = -\frac{1}{C_0} \cdot \frac{dC(t)}{dt} \quad [۴۸-۷]$$

نمایی:

$$Q_2 = -\frac{1}{C(t)} \cdot \frac{dC(t)}{dt} \quad [۴۹-۷]$$

درجه دوم:

$$Q_3 = -\frac{1}{\sqrt{C_0 \cdot C(t)}} \cdot \frac{dC(t)}{dt} \quad [۵۰-۷]$$

بنابراین، یک پارامتر کنترل کلی برای تمامی منحنی‌های رمق‌کشی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$Q = K(t_j) \cdot C(t_j)^{n/2} \quad [۵۱-۷]$$

که در آن $C(t_j)$ نسبت $C(t_j)/C_0$ را نشان می‌دهد، و برای مقادیر n از ۰ تا ۲ این مقدار به ترتیب تابع نمایی، درجه دوم و خطی است.

از منظر واحدهای مورد استفاده برای رنگرزی‌های عملی، ثابت نرخ مرتبه اول توسط معادله ۵۲-۷ ارائه می‌شود.

$$\frac{d(cnow)}{dt} = cdrv = -Kave \cdot cnow \quad [۵۲-۷]$$

که در آن $cdrv$ مشتق غلظت محاسبه شده (ppm/min)

$Kave$ ثابت نرخ مرتبه اول (1/min)

$cnow$ غلظت فعلی رنگزا در حمام رنگرزی (ppm) است.

انتگرال‌گیری معادله ۴۷-۷ برای غلظت رنگزا در زمان‌های t_1 و t_2 منتج به معادله ۴۸-۷ می‌شود.

$$\ln\left(\frac{c(t_2)}{c(t_1)}\right) = -K_{ave} \cdot (t_2 - t_1) = -K_{ave} \cdot \Delta t \quad [53-7]$$

که در آن Δt طول چرخه کنترل است.

برنامه کنترل فرض می‌کند که در طی یک فاصله زمانی کوتاه (Δt) دما ثابت باقی می‌ماند و پس از آن یک پرش دمایی لحظه‌ای به مقدار مورد نیاز برای تولید نرخ رمق‌کشی وجود دارد که مقدار از پیش تعیین شده Q را در مدل ارائه می‌دهد.

غلظت رنگزای اندازه‌گیری شده در زمان t (در مقابل مقادیر پیش‌بینی شده‌ی مایع رنگزا) توسط خط تیره نشان داده می‌شود، یعنی $C'(t)$.

پس از اندازه‌گیری $C'(t_j)$ و $C'(t_{j-1})$ ، کمیت $K'(t_j)$ ، مشخص شده توسط نرخ واقعی رمق‌کشی مایع، را می‌توان به صورت زیر تعیین کرد:

$$K'(t_j) = -\frac{C'(t_j) - C'(t_{j-1})}{C'(t_j)} \times \frac{1}{t_j - t_{j-1}} \quad [54-7]$$

و برای فواصل زمانی کوتاه، به منظور یک تقریب مناسب:

$$K'(t_j) = \left(-\frac{1}{C(t)} \times \frac{dC(t)}{dt} \right)_{t=t_j} \quad [55-7]$$

از معادلات ۵۰-۷ و ۵۴-۷ و با استفاده از تقریب‌ها نتیجه می‌شود:

$$C(t_{j+1}) = C'(t_j) \cdot \exp(-K'(t_j) \cdot \Delta t) \quad [56-7]$$

و در نتیجه:

$$Q = K(t_{j+1}) \cdot C(t_{j+1})^{n/2} \quad [57-7]$$

$$K(t_{j+1}) = \frac{Q}{[C'(t_j) \exp.(-K'(t_j) \cdot \Delta t)]^{\frac{n}{2}}} \quad [58-7]$$

فرض می‌شود که طی محدوده‌های اندک دما و غلظت شامل شده در دوره زمانی t_j تا t_{j+1} معادله آرینوس را می‌توان برای توصیف وابستگی دمایی $K(t_j)$ به کار برد: از این رو

$$\frac{K(t_{j+1})}{K'(t_j)} = \exp\left(-B \cdot \left(\frac{1}{T(t_{j+1})} - \frac{1}{T'(t_j)}\right)\right) \quad [59-7]$$

که در آن B ثابت است، و برای یک سیستم ایده‌آل E_d/R (R ثابت گاز) خواهد بود. برای یافتن دما $T(t_{j+1})$ ، معادلات ۵۸-۷ و ۵۹-۷ را می‌توان برابر فرض کرد و دوباره مرتب کرد:

$$\frac{1}{T(t_{j+1})} = \frac{1}{T'(t_j)} - \frac{1}{B} \left\{ \ln\left(\frac{Q}{Q'}\right) + \frac{n}{2} \cdot K'(t) \cdot \Delta t \right\} \quad [60-7]$$

در این حالت:

$$Q' = K'(t_j) [C'(t_j)]^{\frac{n}{2}} \quad [61-7]$$

سمت راست معادله تنها شامل عباراتی است که یا در شروع رنگری تنظیم شده (B ، Q و t) و یا کمیت‌های اندازه‌گیری شده (Q' ، $K'(t_j)$ و $T'(t_j)$) هستند. معادلات را می‌توان در شکلی با بیان مجدد بدون استفاده از پارامتر کنترل Q تعمیم داد.

پیرو معادله ۵۲-۷، غلظت مورد نظر $cset$ و ثابت نرخ مورد نظر $Kset$ برای چرخه کنترل بعدی تعیین می‌شوند.

$$\ln\left(\frac{cset}{cnow}\right) = -Kset \cdot \Delta t \quad [62-7]$$

و از این معادله ثابت نرخ را می‌توان محاسبه کرد:

$$-\frac{1}{\Delta t} \ln \left(\frac{c_{set}}{c_{now}} \right) = K_{set} \quad [۶۳-۷]$$

قبلاً در این فصل اشاره شد که یک رابطه نوع آرینوسی بین دما و ثابت نرخ فرض می‌شود. این رابطه اکنون برای یافتن دمای T_{set} مورد نیاز به منظور ارائه ثابت نرخ مشخص استفاده می‌شود.

$$K_{ave} = A \cdot \exp \left(\left(\frac{-E_a}{R} \right) \cdot T_{ave} \right) \quad [۶۴-۷]$$

که در آن A عامل پیش‌نمایی^۱ یا ثابت آرینوس (1/min) است، E_a انرژی فعال‌سازی رنگرزی (J/mol) و R ثابت گاز ایده‌آل (J/K.mol) هستند.

اگر T_{ave} دما فعلی باشد، در آن صورت:

$$K_{set} = A \cdot \exp \left(\left(\frac{-E_a}{R} \right) \cdot T_{set} \right) \quad [۶۵-۷]$$

بنابراین می‌توان گفت که:

$$K_{set} = K_{ave} \cdot \exp \left(\left(\frac{-E_a}{R} \right) \cdot \left(\frac{1}{T_{set}} - \frac{1}{T_{ave}} \right) \right) \quad [۶۶-۷]$$

در نتیجه:

$$\frac{1}{T_{set}} = \frac{1}{T_{ave}} - \frac{R}{E_a} \ln \left(\frac{K_{set}}{K_{ave}} \right) \quad [۶۷-۷]$$

K_{ave} و K_{set} برحسب غلظت رنگزا مطابق با معادله ۶۲-۷ محاسبه شدند. جای‌گذاری برای این عبارات در معادله ۶۷-۷ منتج به معادله ۶۸-۷ می‌شود.

¹ Pre- exponential factor

$$\frac{1}{Tset} = \frac{1}{Tave} - \frac{R}{E_a} \ln \left\{ \frac{cnow}{cdrv} \cdot \frac{1}{\Delta t} \cdot \ln \left(\frac{cset}{cnow} \right) \right\} \quad [۶۸-۷]$$

بنابراین می‌توان دید که دمای مشخص برای چرخه بعدی را می‌توان از غلظت‌های فعلی و مورد نظر محاسبه کرد، انرژی فعال‌سازی فرآیند رنگرزی و طول رنگرزی.

نرخ افزایش دما از تقسیم تفاضل دماهای مورد نظر و فعلی بر مدت زمان چرخه کنترل محاسبه می‌شود، یعنی:

$$Trmp = \frac{(Tset - Tave)}{\Delta t} \quad [۶۹-۷]$$

به‌منظور کنترل نرخ رمق‌کشی، معادلات معرفی شده توسط نابس و رن را می‌توان مورد استفاده قرار داد [۲۵]. این معادلات از زمان کل سپری شده از شروع چرخه استفاده می‌کنند. با این حال، برای به حداقل رساندن خطاهای فزاینده مرتبط با انحراف تصادفی مقادیر غلظت از مقادیر مشخص، نرخ رمق‌کشی را می‌توان از غلظت (یا رمق‌کشی) فعلی محاسبه کرد. در این روش، از پیامد نرخ جذب اولیه بالای برخی نمودارها در شروع رنگرزی جلوگیری به‌عمل می‌آید و رنگرزی انحراف کمتری را نشان می‌دهد، زیرا مدل در هر نقطه اندازه‌گیری شده مجدداً شروع می‌شود. تعیین عملی نرخ رمق‌کشی هدف این را توسط جایگزینی C_0 با $Cstart$ در نظر می‌گیرد.

همان‌طور که از قبل نشان داده شد، سه نمودار رمق‌کشی در این مدل به‌کار رفته بودند: خطی، درجه دوم و نمایی. معادله کلی تعریف کننده نرخ رمق‌کشی را می‌توان به‌صورت زیر نشان داد:

$$ExhRate = \frac{-dc}{dt} \cdot \frac{1}{c_0} = - \left(\frac{cdrv}{cstart} \right) \quad [۷۰-۷]$$

که در آن $ExhRate$ نرخ رمق‌کشی مورد نظر (کسر/دقیقه) است و $Cstart$ غلظت واقعی در شروع برحسب ppm است. نرخ رمق‌کشی برای هر نمودار را می‌توان همان‌طور که در زیر نشان داده شده است محاسبه کرد.

نمودار خطی

این نمودار ساده‌ترین حالت کنترل رمق‌کشی است، که در آن نرخ ثابت رمق‌کشی اعمال می‌شود. غلظت در هر زمان t توسط رابطه زیر ارائه می‌شود:

$$c(t) = -c_0 \cdot \left(1 - \frac{t}{td}\right) \quad [۷۱-۷]$$

که در آن td زمان مورد نظر رمق‌کشی برحسب دقیقه است.

بنابراین:

$$\frac{dc(t)}{dt} = -\frac{c_0}{td} \Rightarrow ExhRate = \frac{1}{td} \quad [۷۲-۷]$$

نمودار درجه دوم

$$c(t) = -c_0 \cdot \left(1 - \frac{t}{td}\right)^2 \Rightarrow \frac{dc(t)}{dt} = -c_0 \cdot \frac{2}{td} \cdot \sqrt{\frac{c(t)}{c_0}} \quad [۷۳-۷]$$

و نرخ رمق‌کشی است:

$$ExhRate = \frac{2}{td} \sqrt{\frac{c_{now}}{c_{start}}} \quad [۷۴-۷]$$

به طوری که در این نمودار می‌توان مشاهده کرد، نرخ رمق‌کشی به زمان کل رنگرزی و غلظت فعلی رنگزا در حمام رنگرزی وابسته است.

نمودار نمایی

این نمودار همان طور که در معادله ۷-۷۵ نشان داده شده تعریف می شود.

$$c(t) = -c_0 \cdot \exp \left\{ \frac{t}{td} \cdot \ln \left(\frac{c(td)}{c_0} \right) \right\} \quad [75-7]$$

که در آن $c(td)$ غلظت رنگزا در زمان $t=td$ برحسب ppm است.

این معادله مدل را پیچیده می کند، به طوری که زمان رمق کشی به صورت زمانی که در آن ۹۹٪ رمق کشی به دست می آید، تعریف می شود، از آنجائی که، طبق این مدل، ۱۰۰٪ رمق کشی را نمی توان به دست آورد، از این رو:

$$\frac{c(td)}{c_0} = \frac{1}{100} \quad [76-7]$$

$$c(t) = -c_0 \cdot \exp \left\{ \frac{t}{td} \cdot \ln \left(\frac{1}{100} \right) \right\} \quad [77-7]$$

بنابراین:

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{c(t)}{td} \cdot \ln \left(\frac{1}{100} \right) \quad [78-7]$$

و:

$$ExhRate = \frac{\ln(100)}{td} \cdot \frac{c_{now}}{c_{start}} \quad [79-7]$$

در اینجا، دوباره، نرخ رمق کشی به هر دو حالت پیشرفت رنگریزی و زمان کل رنگریزی وابسته است. نرخ رمق کشی برای محاسبه غلظت مورد نظر در هر زمان t و از این رو ثابت نرخ رنگریزی استفاده می شود. از آنجائی که رمق کشی به صورت کسر غلظت شروع در هر دقیقه تعریف می شود، لذا غلظت هدف توسط رابطه زیر محاسبه می شود:

$$cnxt = cnow - ExhRate \times cstart \times \Delta t \quad [۸۰-۷]$$

که در آن $cnxt$ غلظت هدف است.

۲.۷.۷. اصلاح مدل نظری

مدل توضیح داده شده در بخش قبل افزایشی را در نایکنواختی با کاهش نرخ جریان، همان‌طور که انتظار می‌رود، پیش‌بینی می‌کند، اثر خطی با نرخ جریان متقابل^۱. نشان داده شده است که، به دلیل تاخیرات زمانی ناشی از لوله‌های ایستا و بی‌تغییر، نرخ‌های پایین‌تر جریان سیال منتج به مقادیر نایکنواختی بالاتری نسبت به آنچه انتظار رفته می‌شوند [۲۶]. این بدین معنی است که فرض ایجاد شده در نظریه اساسی در مورد یکنواختی مایع رنگزا برقرار نیست. ثابت نرخ رنگزا-لیف قبلاً فرض شد که تنها به نرخ جذب رنگزا وابسته است و در سراسر بسته ثابت است. به‌منظور اصلاح این نظریه، یک رابطه شعاعی برای ثابت نرخ رنگزا-لیف به شکل زیر را می‌توان مورد استفاده قرار داد.

$$K(r, t) = K(t) \cdot (1 + \gamma r^n) \quad [۸۱-۷]$$

n در ابتدا به صورت ۱- تنظیم می‌شود، به‌طوری‌که:

$$K(r, t) = K(t) \cdot (1 + \gamma/r) \quad [۸۲-۷]$$

مقادیر γ از طریق نتایج تجربی تنظیم می‌شوند.

نظریه کنترل فرض می‌کند که تغییر در دما بلافاصله به‌دست خواهد آمد. با این حال، در عمل این حالت نیست و تغییر در دما طی دوره زمانی به‌دست می‌آید. بنابراین، نظریه اصلاح می‌شود تا این موضوع را در نظر بگیرد. گیل کریست^۲ نشان داد که افزایش ۱/۵ برابر مقدار محاسبه شده برای دمای مشخص منجر به استراتژی کنترل بهتر در رنگرزی بسته‌های نخ اکریلیکی می‌شود [۲۶] به‌عبارت دیگر:

¹ Reciprocal flow rate

² Gilchrist

$$Knxt = Kave + 1.5 (Kset - Kave) \quad [۸۳-۷]$$

که در آن $Knxt$ نرخ هدف تنظیم شده برحسب (1/min) است.

تصحیح دیگر براساس این واقعیت است که با کاهش غلظت فعلی، نرخ رمق‌کشی نیز کاهش خواهد یافت. گیل کریست همچنین نشان داد که زمان‌های پیش‌رو ۱ دقیقه‌ای منجر به کنترل خوبی برای نمودارهای رمق‌کشی نمایی و درجه دوم شد. بنابراین، معادلات برای نرخ رمق‌کشی مورد نظر را می‌توان به مواردی که در زیر نشان داده شده است اصلاح کرد.

خطی:

$$ExhRate = \frac{1}{td} \quad [۸۴-۷]$$

درجه دوم:

$$ExhRate = \frac{2}{td} \sqrt{\frac{cnow}{cstart}} - \frac{2}{td} \sqrt{\frac{cnow}{cstart}} \quad [۸۵-۷]$$

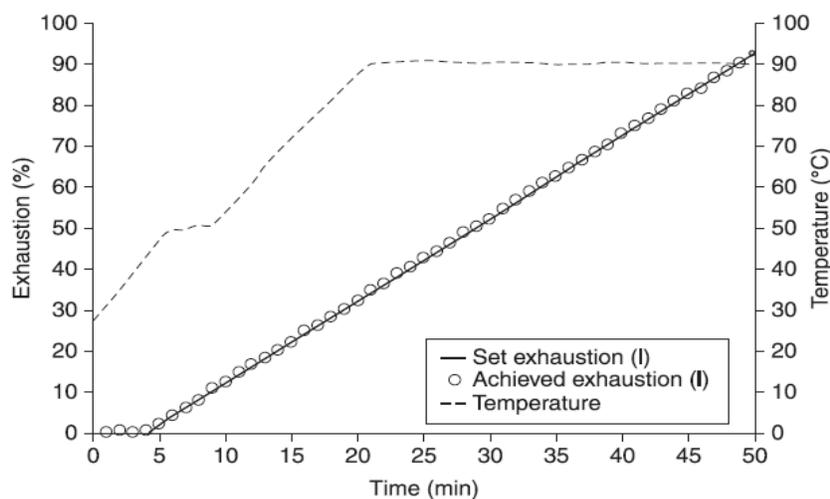
نمایی:

$$ExhRate = \frac{\ln(100)}{td} \cdot \frac{cnow}{cstart} \cdot \left[1 - \frac{\ln(100)}{td} \right] \quad [۸۶-۷]$$

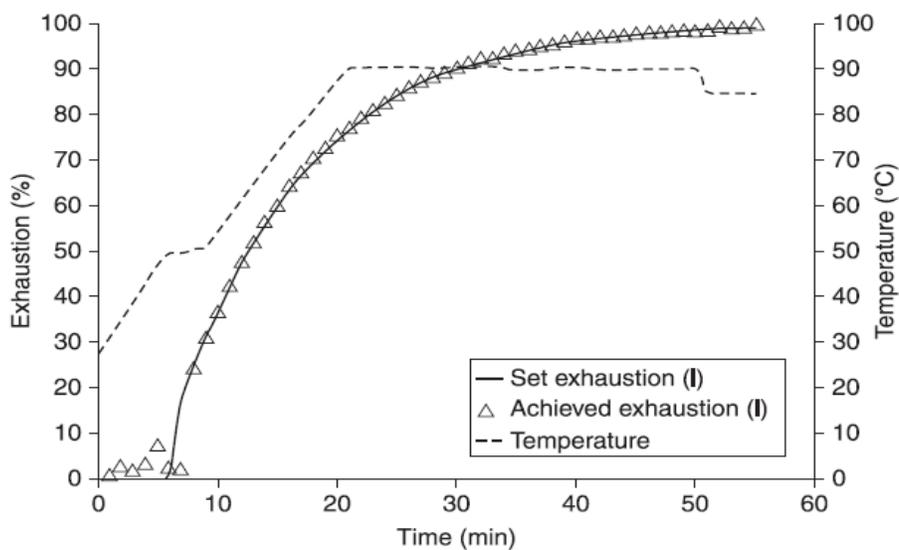
اصلاح نهایی به مدل براساس تنظیم نرخ رمق‌کشی در انتهای نمودارهای رمق‌کشی غیرخطی است، هنگامی که نرخ رمق‌کشی به مقادیر بسیار پایینی افت می‌کند که این منجر به یک برنامه کنترل در تلاش برای خنک‌سازی ماشین‌آلات رنگ‌رزی خواهد شد. هنگامی که نرخ رمق‌کشی به پایین‌تر از ۰.۲٪ افت می‌کند، کنترل‌کننده ممکن است برای تطبیق با نرخ شیب نهایی از پیش تنظیم شده وفق شود.

۳.۷.۷. ارزیابی عملکرد مدل با استفاده از شبیه‌سازی‌ها

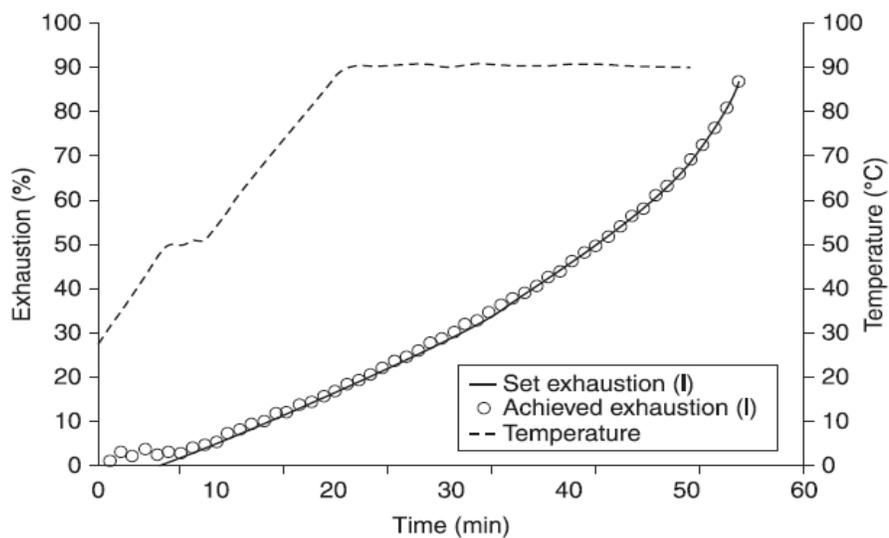
شکل ۳۱.۷ مقایسه رمق‌کشی تنظیم شده و رمق‌کشی به‌دست آمده در نمودار کنترل رمق‌کشی خطی را نشان می‌دهد که در آن سازگاری بسیار خوبی بین مجموعه‌ها وجود دارد. شکل‌های ۳۲.۷ و ۳۳.۷ به ترتیب این مقایسه را برای نمودار کنترل درجه دوم و نمایی نشان می‌دهند. باز هم، توافق خوبی بین مقادیر رمق‌کشی تنظیم شده و به‌دست آمده مشاهده می‌شود. بنابراین، براساس شبیه‌سازی‌های فرآیند رنگرزی، مدل به‌طور رضایت‌بخشی در دستیابی به نمودارهای خطی، درجه دوم و نمایی اجرا می‌شود.



شکل ۳۱.۷. نتایج شبیه‌سازی نشان دهنده مقایسه مقادیر رمق‌کشی تنظیم شده و به‌دست آمده با استفاده از نمودار رمق‌کشی خطی.



شکل ۳۲.۷. نتایج شبیه‌سازی نشان دهنده مقایسه مقادیر رمق‌کشی تنظیم شده و به‌دست آمده با استفاده از نمودار رمق‌کشی درجه دوم.



شکل ۳۳.۷. نتایج شبیه‌سازی نشان دهنده مقایسه مقادیر رمق‌کشی تنظیم شده و به‌دست آمده با استفاده از نمودار رمق‌کشی نمایی.

۴.۷.۷. ارزیابی عملکرد مدل با استفاده از ماشین‌آلات رنگرزی

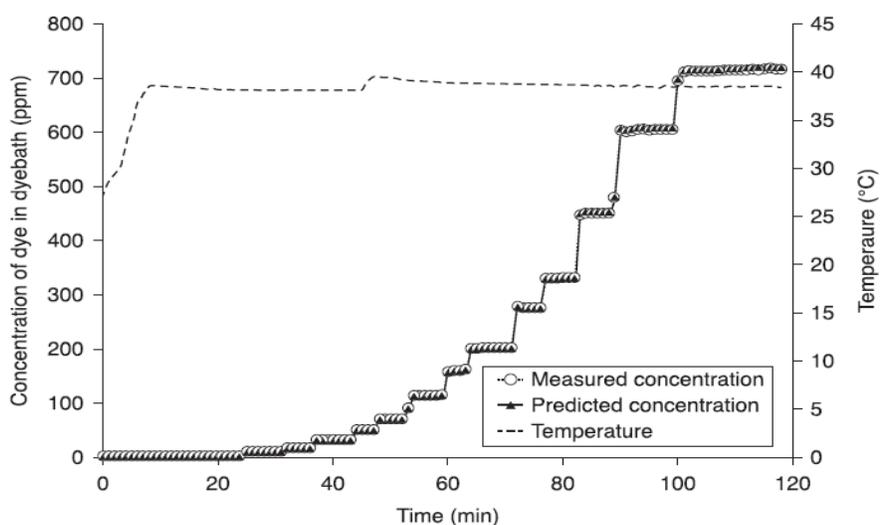
شکل ۳۴.۷ مقایسه مقادیر غلظت رنگزای اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده در حمام رنگرزی براساس کار تجربی نشان می‌دهد. در مثال نشان داده شده، رنگزا به تدریج به درون حمام رنگرزی بر طبق نمودارهای از پیش تنظیم شده از ورود تدریجی مواد تزریق شد، در غیاب بسته الیاف، و در شرایط زیر:

زمان ورود تدریجی مواد ۸۰ دقیقه

pH ۷

نرخ جریان ۵۰ l/min

غلظت رنگزا از ۰ تا ۷۰۰ ppm تغییر کرد درحالی‌که دما در 38°C (دمای تعادل ماشین‌آلات رنگرزی) حفظ شد. چنین مقایسه‌هایی را می‌توان به کار برد تا ثابت شود که عملکرد موجودی رنگزا^۱ در پیش‌بینی مقدار در حمام رنگرزی رضایت‌بخش است. همچنین نمودارهای کنترل را می‌توان در روشی مشابه‌ای ارزیابی کرد.



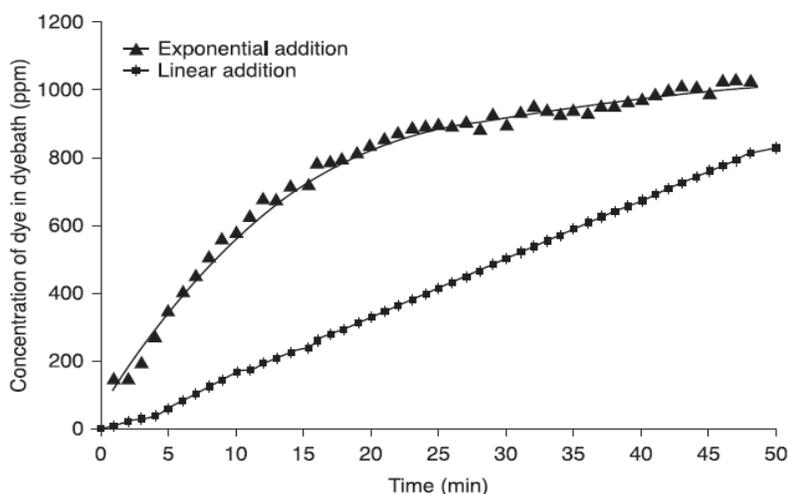
شکل ۳۴.۷. مقایسه مقادیر غلظت اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده در حمام رنگرزی.

¹ Dye inventory

عملکرد پمپ‌های اندازه‌گیری

افزایش رنگزا در رمق‌کشی کنترل شده و همچنین رنگری مداوم استفاده می‌شود. بنابراین، مهم است که عملکرد پمپ‌های اندازه‌گیری برای ورود تدریجی مقادیر محاسبه شده‌ی محلول به حمام رنگری ارزیابی شود.

برای نشان دادن عملکرد سیستم، یک سری آزمایش‌هایی انجام شد که در آن تا ۱۰۰۰ ppm رنگزا به حمام رنگری در 38°C بر طبق نمودارهای خطی و نمایی طی مدت ۵۰ دقیقه اضافه شد. نرخ جریان در ۵۰ l/min تنظیم شد. شکل ۳۵.۷ عملکرد پمپ‌های اندازه‌گیری رضایت‌بخش و خطوط ممتد مقادیر هدف را نشان می‌دهد، و مثلث‌ها و لوزی‌ها مقادیر به‌دست آمده را نشان می‌دهند. پس از انجام این کار، کنترل رنگری بر طبق رمق‌کشی از پیش تنظیم شده و سایر نمودارها بررسی شد. در بخش‌های بعدی نیز یک گروه انتخابی نتایج تجربی به نمایندگی از هر سری توضیح داده می‌شوند.



شکل ۳۵.۷. ارزیابی عملکرد پمپ‌های اضافی بر پایه نمودارهای خطی و نمایی.

۵.۷.۷. مقایسه کلی نمودارهای مختلف کنترل

نگاهی دقیق به مقادیر رمق‌کشی گزارش شده در انتهای هر نمودار رنگری پیشنهاد می‌دهد که رمق‌کشی کامل رنگزا از حمام رنگری در بسیاری از موارد غیرعملی است. با توجه به تعداد عواملی که می‌توانند بر نتیجه فرآیند رنگری تاثیر گذارند، پیشنهاد هر یک از نمودارها به‌عنوان بهترین نمودار از

منظر عملکرد کلی دشوار است. پژوهشگران مختلف، با این‌حال، شکل‌های متفاوت نمودار رمق‌کشی را به‌عنوان ارائه دهنده بهترین نتایج کلی در مقایسه با میانگین نتایج ترویج داده‌اند. با این‌حال، تاکنون هیچ‌گونه شواهد قطعی در حمایت هر مدل برای استفاده در تمامی الیاف گزارش نشده است.

۸.۷. تقدیر و تشکر

برنامه نرم افزاری برای کنترل ماشین‌آلات رنگ‌رزی در Quick Basic 4.5 توسط دکتر جی. اچ. نابس، در گروه شیمی رنگ دانشگاه لیدز، بریتانیا، در اواخر دهه ۱۹۸۰ میلادی نوشته شد. این نرم افزار بسیاری از مدل‌های مورد بحث در اینجا را شامل می‌شود. این کار توسط تعدادی محقق، از جمله یکی از نویسندگان این کتاب، گسترش یافت.

۹.۷. منابع

1. Grady P.L, Mock G.N. (1983), 'Microprocessors and Minicomputers in the Textile Industry', North Carolina State University.
2. Mylroi, M.G. (1972), *Rev. Prog. Col.*, vol. 3, pp. 33 – 8.
3. Bialik Z., Park J., Walker D.C. (1979), *Rev. Prog. Col.*, vol. 10, pp. 55 – 60.
4. Squire D.H. (1974), *American Dyestuff Reporter*, vol. 63, no. 3, pp. 21 – 5.
5. Anon (1975), *Text. World*, vol. 125, no. 4, pp. 48 – 59.
6. Anon (Feb. 1981), *Int. Textile. Bull.*, 'Dyeing, Printing, Finishing', p. 155.
7. Bauer K.H., Boxhammer J., Kockett D., Toldrian P. (1979), *Textilveredelung*, vol. 145, no. 5.
8. Johnson C.D. (1988), 'Process Control Instrumentation Technology', 3rd edn, Prentice-Hall Int. Ed., London.

9. Morris N. M. (1991), 'Control Engineering', 4th edn, McGraw-Hill Book Co., London.
10. Carbonell J. (1987), *Am. Dye. Rep.*, vol. 76, no. 3, p. 34.
11. Bettens L., in 'Computers in the world of Textiles', The Textile Institute, Int. Conf., Hong Kong, (1984).
12. Meites L. (1981), 'An Introduction to Chemical Equilibrium and Kinetics', Hungary, Pergamon Press.
13. Bates R.G. (1973), 'Determination of pH, Theory and Practice', 2nd edn, USA.
14. Mac Innes, D.A. (1939), 'The Principles of Electro-Chemistry', Reinhold Publishing Corp, New York.
15. Westcott C. C. (1978), 'pH measurements'.
16. Ricci J.E. (1952), 'Hydrogen Ion Concentration, new concepts in a systematic treatment'.
17. Wilson A. (1970) (ed.) in 'pH meters', Kogan Page, London.
18. Hartley F. R., Burgess C., Alcock R. M. (1980), 'Solution Equilibria', Ellis Horwood Ltd., Chichester.
19. Britton H.T.S. (1955), 'Hydrogen Ions', 4th edn, Vol. 1, Chapman & Hall.
20. Kell G.S. (1975), *Chem. Eng. Data*, vol. 20, no. 1, p. 97.
21. CRC Handbook of Chemistry and Physics, (1980–81), 61st edn, CRC Press.
22. Sumner H.H., Weston C.D. (1963), *Amer. Dye. Rep.*, vol. 42, p. 442.

23. Sumner H.H., in Johnson A. (ed.) (1989), 'The Theory of Coloration of Textiles', S.D.C.
24. Nevell T.P., in Shore J. (ed.) (1995), 'Cellulosic Dyeing', S.D.C.
25. Nobbs J. H., Ren J., 29th Hungarian Textile Conference, Budapest (1985).
26. Gilchrist A. (1995), PhD Thesis, Dept. of Colour Chemistry, University of Leeds.

۸. اندازه‌گیری و کنترل رنگریزی

چکیده: فرآیند رنگریزی سنتی به‌عنوان یک جعبه سیاه توصیف می‌شود، که در آن مقدار رنگزا بر روی پارچه تا زمانی که رنگریزی کامل نشده قابل شناسایی نیست. پیشرفت‌ها در اسپکتروفوتومتری و محاسبات تعیین غیرمستقیم مقدار رنگزا بر روی پارچه را در طول فرآیند رنگریزی براساس قانون بیر فراهم کرده است. اصول فناوری نظارتِ حمام رنگریزی که امکان تجزیه و تحلیل و کنترل فرآیند رنگریزی را داده معرفی می‌شود. این فناوری اندازه‌گیری می‌تواند در رفع علل ریشه‌ای در بازتولید شید^۱ که از تغییر در قدرت رنگزا، پارچه یا فرآیند رنگریزی رخ می‌دهد، کمک کند.

کلمات کلیدی: اندازه‌گیری غلظت رنگزا، قانون بیر-لامبرت^۲، کنترل و نظارت بی‌وقفه، اصل جمع-پذیری طیفی، شکل‌پذیری طیفی.

۱.۸. مقدمه

با افزایش رقابت، سالن‌های رنگریزی برای رفع نیازهای رنگی بسیار دقیق در عین حال در همان زمان کاهش هزینه تولید نیازمند هستند. به‌منظور حفظ رقابت، رنگرها به به‌کارگیری کنترل کیفیت دقیق‌تر نیازمند هستند و به‌دنبال روش‌هایی برای بهینه‌سازی رنگریزی‌ها هستند. این مستلزم درک رنگزاها و مواد کمکی، بسترها و سازگاری آنها، و پارامترهایی است که بر نرخ و میزان جذب رنگزا توسط بستر تاثیر می‌گذارند (پارک و شور^۳، ۲۰۰۷).

متغیرهایی که در طول رنگریزی برای اهداف کنترل کیفیت عیناً اندازه‌گیری و نظارت می‌شوند به‌طور مرسوم با زمان، دما، pH و رسانایی محدود شده‌اند. اندازه‌گیری انعکاس پارچه تنها در پیشرفت دستورالعمل‌ها/ روش‌های جدید و تایید شید پارچه‌های رنگریزی شده مورد استفاده قرار می‌گیرد. در طول پیشرفت دستورالعمل‌ها/ روش‌ها و اشکال‌زدایی مشکلات رنگریزی، رنگرها همچنان به اطلاعات غیرمستقیم به‌دست آمده از آزمایش‌های ویژه و روش‌های خطا، مشاهدات ذهنی و ارزیابی بصری، تکیه می‌کنند.

¹ Shade reproducibility

² Beer-Lambert law

³ Park and Shore

شناخت محدودیت‌های ذاتی در تلاش برای اندازه‌گیری کیفیت رنگرزی بدون اندازه‌گیری عینی رنگزا صورت می‌گیرد، اولین سیستم‌های پیش‌الگو در دهه ۱۹۹۰ (بک و همکارانش^۱، ۱۹۹۰؛ کیتون و گلوور^۲، ۱۹۸۵) برای نظارتِ حمام رنگرزی در زمان واقعی و در طول رنگرزی توسعه یافت. با این حال، دو عامل اصلی تصویب این سیستم‌های پیش‌الگو را توسط صنعت محدود کرد. اولی بی میلی در تولیدکنندگان ماشین‌آلات برای به هم پیوستن تجهیزات کنترل و نظارتِ حمام رنگرزی در مدل‌های جدید، و همچنین مقاومت در میان رنگرها و تولیدکنندگان مواد رنگی بود که برای تغییر روشی که آنها فرآیندهای رنگرزی را تجزیه و تحلیل کردند. عامل دوم محدودیت‌ها در فناوری مانند هزینه بالای اسپکتروفتومترها، سرعت پردازش پایین کامپیوترها، و حافظه کامپیوتری ناکافی برای محدود کردن مقدار داده‌هایی بود که می‌توانست برای تعیین دقیق غلظت‌های رنگزا اداره شود.

برای مثال، به‌منظور تعیین غلظت‌های رنگزا از یک مخلوط ۳ رنگی دقیقاً در زمان واقعی با دقت دو رقم اعشار، لازم است تا از کامپیوتری با بیش از ۵۰۰۰ مگابایت حافظه استفاده شود. پس از سال ۲۰۰۵، کامپیوترهایی با این مشخصات و با قیمت پایین در دسترس هستند.

با پیشرفت در محاسبات و الکترونیک تا اواسط سال ۲۰۰۰، این محدودیت‌ها برطرف شد. در نتیجه، دو گروه تحقیقاتی، یکی در انگلستان و دیگری در ایالات متحده، شروع به تطبیق سیستم‌های نظارتِ حمام رنگرزی کردند (دیکسون و فارل^۳، ۲۰۰۹؛ فراس-کوملوو^۴، ۲۰۰۵). این سیستم‌ها اساس سیستم‌های رنگرزی صحیح در اولین بار تجاری^۵ (RFT) در کارخانجات مشخص شدند. پیشرفت تاریخی این فناوری‌ها با جزئیات بیشتر توسط اسمیت^۶ در پذیرش جایزه AATCC Olney او در کنفرانس AATCC 2007 مورد بحث و بررسی قرار گرفت.

¹ Beck *et al.*

² Keaton and Glover

³ Dixon and Farrell

⁴ Ferus-Comelo

⁵ Right First Time

⁶ Smith

۱.۱.۸. قانون بیر- لامبرت

اگرچه بدیهی است که هدف اصلی رنگرزی پارچه چسبیدن رنگزا بر روی الیاف در برخی از روش‌های اقتصادی قابل توجه است که با مجموعه از پیش تنظیم شده‌ی الزامات مانند: شید، یکنواختی، ثبات نوری یا ثبات شستشویی مواجه می‌شود، اما پارامتری که اندازه‌گیری و یا کنترل نشده مقدار رنگزا بر روی پارچه در طول فرآیند رنگرزی است. اندازه‌گیری‌های دقیق غلظت‌های رنگزا بر روی پارچه در طول رنگرزی برای اجرا در زمان واقعی بسیار دشوار هستند. این برای انجام اندازه‌گیری‌ها و محاسبات غیرمستقیم کمیت‌های مهم لازم و ضروری است. اگرچه اندازه‌گیری مستقیم غلظت رنگزا بر روی پارچه در حال حاضر غیرعملی است، اما شیوه‌های تحلیلی برای اندازه‌گیری غلظت رنگزا در محلول وجود دارد. دانستن غلظت رنگزا در محلول و مقدار اولیه آن، می‌تواند نسبت مایع، رمق‌کشی حمام رنگرزی، و همچنین غلظت رنگزا بر روی پارچه را تعیین کند.

معادله‌ای که در زیر گرفته شده نقطه شروع مشترک برای بسیاری از سیستم‌های نظارت حمام رنگرزی و قانون بیر- لامبرت است (مک دونالد^۱، ۱۹۹۷) که بیان می‌کند جذب A محلول می‌تواند به صورت زیر تعیین شود:

$$A(\lambda) = l \varepsilon(\lambda, pH, T, s) c \quad [۱-۸]$$

که در آن ε ضریب خاموشی ($l/g \text{ cm}$)، A جذب، l طول مسیر (cm) و c غلظت رنگزا (g/l) هستند. توجه شود که جذب و ضریب خاموشی توابعی از طول موج λ ، دما T ، pH و غلظت نمک s هستند، در حالی که طول مسیر و غلظت توابعی از این موارد نیستند.

اگرچه قانون بیر- لامبرت تا حدودی تجربی است، اما این قانون ریشه در نظریه کیوبلکا-مانک^۲ (کیوبلکا و مانک^۳، ۱۹۳۱) دارد، که در آن فرض بر این است که محیط یا محلول تنها نور را جذب می‌کند، و آن را پراکنده نمی‌سازند. با اندازه‌گیری جذب محلول حمام رنگرزی در زمان واقعی، محاسبه

^۱ McDonald

^۲ Kubelka–Munk theory

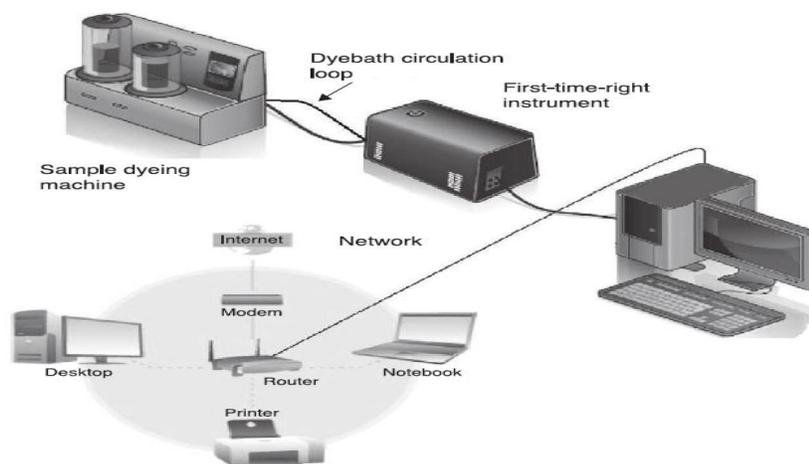
^۳ Kubelka and Munk

غلظت رنگزا یا رنگزاها در محلول امکان‌پذیر می‌شود، و از آن رمق‌کشی رنگزا و غلظت رنگزا بر روی پارچه محاسبه می‌شود.

۲.۸. اندازه‌گیری بی وقفه غلظت رنگزا

۱.۲.۸. ابزارآلات

یک سیستم معمولی نظارت حمام رنگرزی مانند آنچه که در شکل ۱.۸ نشان داده شد رنگرها را برای نظارت غلظت‌های متعدد رنگزا در حمام رنگرزی قادر می‌سازد درحالی‌که به‌طور هم‌زمان دما، pH و رسانایی را اندازه‌گیری می‌کند. اگرچه دستگاه‌های مختلفی وجود دارند که جذب حمام رنگرزی را اندازه‌گیری کرده و این داده‌ها را به غلظت یا رمق‌کشی تبدیل می‌کنند، اما بیشتر این دستگاه‌ها به دو دسته اصلی تقسیم می‌شوند: سیستم‌های نظارت مستقیم بر حمام رنگرزی و سیستم‌های نظارت غیرمستقیم بر آن.



شکل ۱.۸. سیستم نظارت غیرمستقیم بر حمام رنگرزی.

در سیستم‌های نظارت مستقیم بر حمام رنگرزی، مقدار کم حمام رنگرزی از طریق یک یا چند سل جریان به گردش در می‌آید، که در آن طیف جذبی حمام رنگرزی توسط اسپکتروفتومتر اندازه‌گیری می‌شود. دلیل استفاده از بیش از یک سل جریان آن است که تغییرات زیاد در غلظت رنگزا موجب خواهد شد تا جذب‌های اندازه‌گیری شده در خارج از محدوده اسپکتروفتومتر باشند. معمولاً

اسپکتروفوتومتر در محدوده ۰/۰۰۵ تا ۱/۵ از واحدهای جذب عمل می‌کند. یک ضعف سیستم نظارت مستقیم بر حمام رنگری این است که خطاها در قرائت رقم‌کشی می‌تواند برای رنگزاهای نامحلول، تجمع رنگزا و رنگزاهایی که طیف جذبی آنها با دما، نمک و pH تغییر کرده، اتفاق بیفتد.

نوع دیگر سیستم نظارت، نظارت غیرمستقیم بر حمام رنگری است، که در آن نمونه کم حمام رنگری در یک محلول بافری برای حذف هرگونه وابستگی به دما، نمک یا pH اندازه‌گیری و تعیین می‌شود. همچنین، اگر رنگزا نامحلول در آب باشد، در آن صورت می‌توان آن را در یک محلول بافری حل کرد. سپس نمونه حمام رنگری در محدوده بین ۰/۰۰۵ و ۱/۵ از واحدهای جذب قبل از قرائت توسط اسپکتروفوتومتر رقیق می‌شود.

این سیستم‌ها غلظت‌های مشخص رنگزا را با توجه به قانون بیر- لامبرت (مک دونالد، ۱۹۹۷) و جمع‌پذیری طیف‌های رنگزا (جانسون^۱، ۱۹۸۹) تعیین می‌کنند. در حال حاضر برخی سیستم‌های موجود (دیکسون و فارل، ۲۰۰۹) قادر به اندازه‌گیری غلظت‌های رنگزای اکثر طبقات رنگی هستند، از جمله رنگزاهای دیسپرس نامحلول در آب و ایندیگویی^۲ یا رنگزاهایی با فام‌های مشابه.

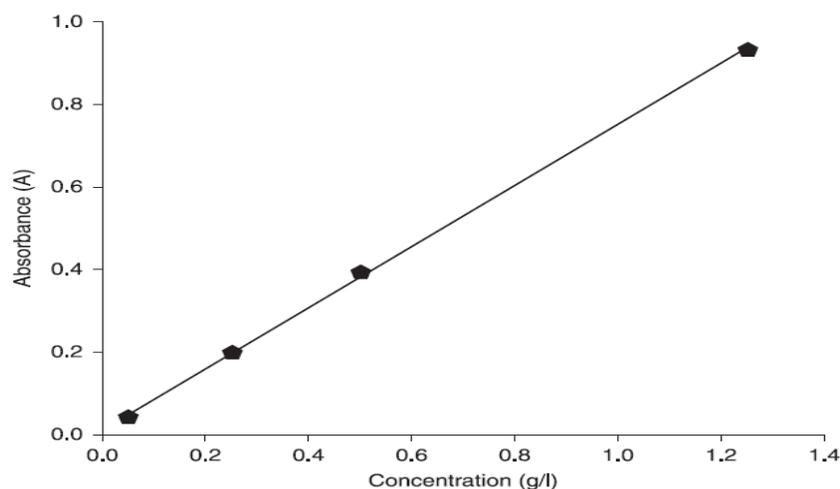
۲.۲.۸. کالیبراسیون رنگزاهای تک و ترکیبی

برای یک رنگزای تک، می‌توان ارتباطی را بین غلظت و جذب در یک طول موج مشخص با اندازه‌گیری مقادیر جذب برای غلظت‌های شناخته شده تعیین کرد (جانسون، ۱۹۸۹). شکل ۲.۸ جذب خوانده شده در طول موج ۶۰۶ نانومتر را برای رنگزای آبی مولتی ری اکتیو FN-R^۳ در یک طول مسیر ثابت نشان می‌دهد. توجه شود که شیب خط برابر با حاصل ضرب ضریب خاموشی مولار در طول مسیر است. ضریب خاموشی مولار ویژگی رنگزا است، که به صورت معادله ۸-۱ ارائه می‌شود.

¹ Johnson

² Indigo dyes

³ Multireactive Blue FN-R



شکل ۲.۸. جذب در برابر غلظت رنگزای آبی مولتی ری اکتیو FN-R.

اگرچه تعیین غلظت برای رنگزای تک نسبتاً آسان است، اما تعیین دقیق غلظت هر رنگزا در مخلوط به شناخت مولفه‌های طیفی منحصر به فرد رنگزا از معادله ۲-۸ و استفاده از روش پیش‌بینی مانند حداقل مربعات نیازمند است (برک استرسر و بک^۱، لیجانگ^۲، ۱۹۹۳؛ ساگوی و همکارانش^۳، ۱۹۷۸؛ زامورا و همکارانش^۴، ۱۹۹۸).

در حمام رنگرزی جایی که رنگزا یا رنگزها بر روی پارچه رمق‌کشی می‌شوند، جذب حمام رنگرزی در طول زمان تغییر خواهد کرد. بنابراین، بیان بسیار کلی معادله ۱-۸ را می‌توان به صورت زیر ارائه داد:

$$A(t) = \sum_{i=1}^{\# \text{ dyes}} f_i c_i(t) \quad [2-8]$$

که در آن $A(t)$ جذب حمام رنگرزی در زمان t ، c_i غلظت رنگزای i ، f_i بردارهای مولفه‌های طیفی رنگزهای منحصر به فرد هستند.

¹ Berkstresser and Beck

² Lijung

³ Saguy *et al.*

⁴ Zamora *et al.*

۳.۲.۸. صحت، دقت و نرخ‌های نمونه

معادله ۸-۲، پنج فرض اساسی به صورت زیر دارد:

- اندازه‌گیری‌ها تکرارپذیر هستند. ورودی یکسان خروجی یکسانی را ارائه خواهد داد.
- رنگ‌ها از قانون بیر-لامبرت در مقیاس خطی پیروی می‌کنند.
- رنگ‌ها از قانون موقعیت عالی (جمع‌پذیری طیفی) پیروی می‌کنند.
- f_i برای رنگ‌های داده شده ثابت هستند (بدون شکل‌گیری طیفی) (گونی و جاسپر^۱، ۲۰۱۰).
- f_i به طور خطی مستقل هستند.

نقص این فرضیات دلایل اصلی برای پیش‌بینی غلظت به منظور عدم موفقیت با استفاده از مدل خطی هستند.

برای یک رنگ‌های تک، معادله ۸-۳ ممکن است برای سنجش خطا در پیش‌بینی مورد استفاده قرار گیرد (برک استرسر و بک، ۱۹۹۳).

$$\%Error = \frac{(c_{\text{actual}} - c_{\text{predicted}})}{c_{\text{actual}}} \times 100 \quad [3-8]$$

روش‌های متعددی برای تعمیم معادله ۸-۳ به حالت رنگ‌های ترکیبی وجود دارد. رویکرد معمول برای توسعه یک نُرم یا متریک^۲ است. نُرم تابعی است که یک طول غیرمنفی را به تمام بردارها در یک فضای برداری اختصاص می‌دهد. دو مثال رایج نُرم ۱ و نُرم ۲ هستند. نُرم ۱ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\%Error_{1 \text{ norm}} = \frac{\sum_i^n |c_{i_{\text{actual}}} - c_{i_{\text{predicted}}}|}{\sum_i^n c_{i_{\text{actual}}}} \times 100 \quad [4-8]$$

در حالی که نُرم ۲ یا RMS به صورت زیر تعریف می‌شود:

¹ Günay and Jasper

² Norm or metric

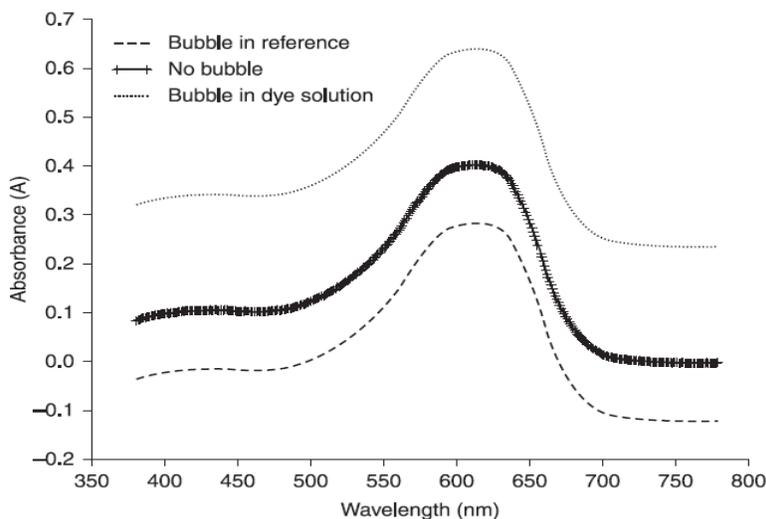
$$\%Error_{2\text{ norm}} = \sqrt{\frac{\sum_i^n (c_{i\text{ actual}} - c_{i\text{ predicted}})^2}{\sum_i^n c_{i\text{ actual}}^2}} \times 100 \quad [5-8]$$

تعیین اینکه کدام متریک بهتر است، یا اینکه چگونه خطاها در غلظت با خطاها در رنگ دریافتی بر روی پارچه مطابقت دارد، مشکل است. یک دلیل برای این امر آن است که رنگ‌رزی فرآیندی دینامیکی است، که در آن شید و یکنواختی نهایی به سرعتی که رنگ‌زا بر روی پارچه اعمال شده وابسته است، نه فقط مقدار نهایی آن.

اندازه‌گیری تکرارپذیری

این مهم است که رنگ‌زا در محلول به‌طور یکنواخت حل شود و محلول بدون حباب‌های هوا و مواد خارجی باشد. اگرچه این ویژگی ممکن نیست در تمامی زمان‌ها حاصل شود، اما خطاهای اندازه‌گیری ممکن است با افزایش غلظت نمونه یا با میانگین داده‌ها در صورت امکان کاهش یابند.

برای مثال، حباب‌های هوا ضریب شکست آب را تغییر می‌دهند، و موجب می‌شوند تا فوتون‌های کمتری به آشکارساز برسد. اگر حباب‌ها در طول اندازه‌گیری نمونه مرجع ظاهر شوند، I_0 جذب برای کل طیف کمتر می‌شود؛ اگر حباب‌ها هنگام اندازه‌گیری محلول رنگ‌زا ظاهر شوند، I جذب در تمامی طول موج‌ها به‌صورتی که در شکل ۳.۸ مشاهده شده، افزایش خواهد یافت. کاهش یا افزایش در جذب برای رنگ‌زای تک ممکن است به‌ترتیب منتج به کاهش یا افزایش در غلظت پیش‌بینی شده شود.



شکل ۳.۸. جابه‌جایی در جذب به دلیل عیوب (حباب‌های هوا) در محلول.

علاوه بر این، باید به تمیز کردن مناسب ابزارآلات بین اندازه‌گیری‌ها هنگامی که طبقات مختلف رنگ‌ها اندازه‌گیری می‌شوند توجه شود. این واقعیت مشخصی است که رنگ‌های اساسی پتانسیل رنگی کردن بالایی دارند. مگر این‌که باقیمانده رنگ‌ها به‌طور کامل از ابزارآلات حذف نشود، در آن صورت اندازه‌گیری‌های بعدی ممکن است به‌علت آلودگی نتایج نادرستی را ارائه دهند.

کاربرد قانون بیر-لامبرت

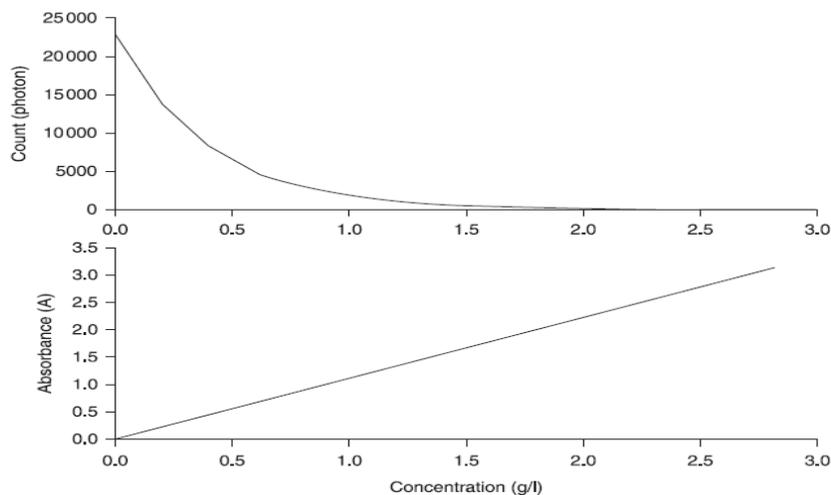
هنگامی که طول مسیر و رنگ‌ساز^۱ ثابت نگه داشته می‌شوند، قانون بیر-لامبرت ارتباط خطی را بین جذب و غلظت رنگ‌ها در طول موج داده شده، با استفاده از معادله ۸-۱، پیشنهاد می‌دهد.

$$A = -\log\left(\frac{I}{I_0}\right) = l\epsilon c \quad [۶-۸]$$

$$I = I_0 10^{-l\epsilon c} \quad [۷-۸]$$

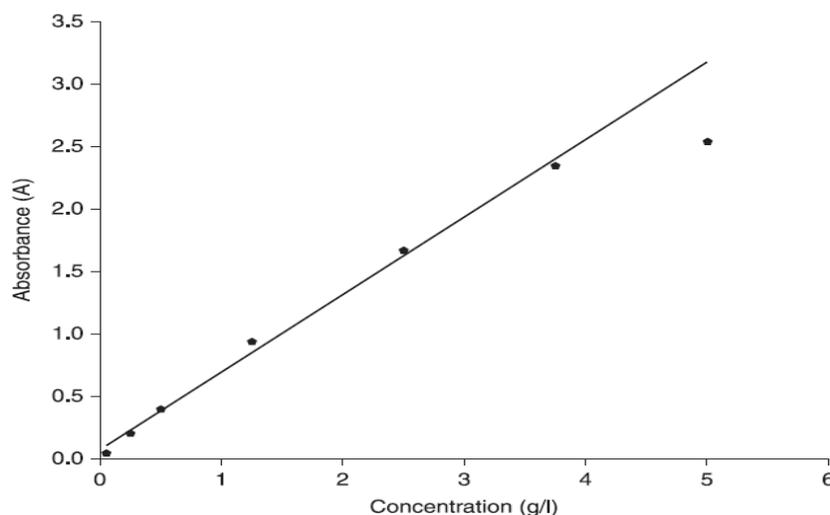
^۱ Colorant

که در آن I_0 شدت نور اولیه یا شار فوتون وارد شده به سل جریان است و I شدت نور خارج شده از سل جریان است. شکل ۴.۸ طرح شمار فوتون شدت نور رسیده به اسپکتروفتومتر را نشان می‌دهد که از طریق محیط محلول‌های رنگی در غلظت‌های مختلف منتقل شده است. در این مثال، $I_0=23000$ شمارش شده و غلظت از ۰ تا $2/75 \text{ g/l}$ تغییر می‌کند.



شکل ۴.۸. ارتباط بین انتقال، جذب و غلظت.

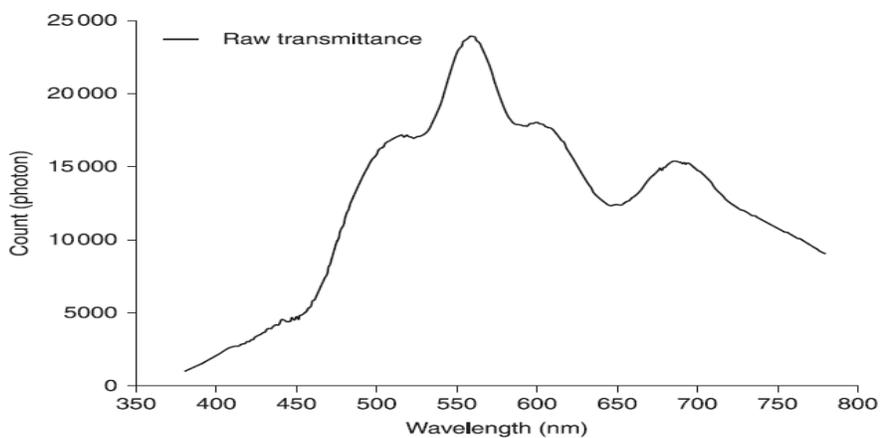
اگرچه ارتباط خطی بین جذب و غلظت وجود دارد، اما پس از مقادیر جذب مشخصی افزایش در غلظت منتج به افزایش نسبی اندازه‌گیری شده در مقدار جذب، به صورتی که در شکل ۵.۸ نشان داده شد، نمی‌شود. نقض قانون بیر ممکن است به حلالیت کاهش یافته‌ی رنگزا در غلظت‌های بالا، تجمع رنگزا موجب پراکندگی نور در سل جریان، یا خطاهای سازنده به‌علت نور منحرف و پراکنده و خطاهای تدریجی نسبت داده شود.



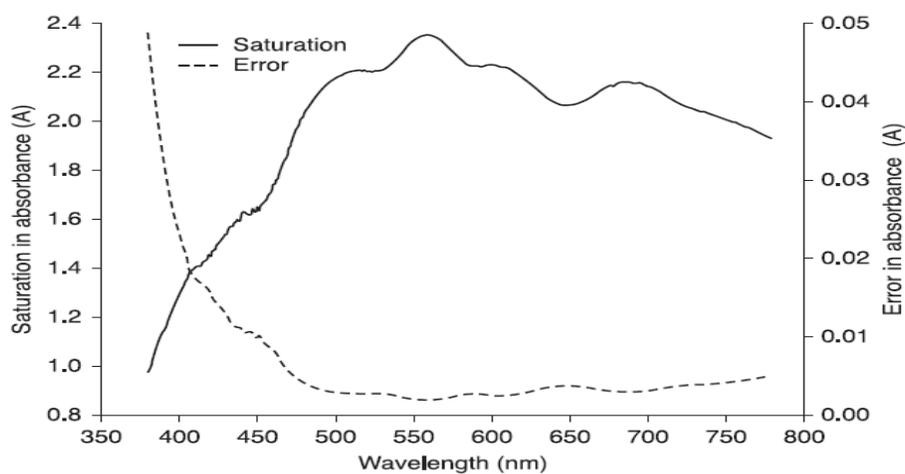
شکل ۵.۸. نقض قانون بیر- لامبرت.

برای مثال، اسپکتروفتومتر Ocean Optics USB4000، (Ocean Optics, 2008) نسبت سیگنال به نویز ۳۰۰:۱ در قدرتی کامل دارد. حساسیت اسپکتروفتومتر ۱۳۰ فوتون در هر شمارش در ۴۰۰ نانومتر و ۶۰ فوتون در هر شمارش در ۶۰۰ نانومتر است. شکل ۶.۸ طیف عبوری معمولی USB4000 را با فیلتر آبی نصب شده بر روی آن نشان می‌دهد. از آنجایی که ابزارآلات در زیر ۴۵۰ نانومتر کمتر حساس هستند (به‌عنوان مثال فوتون‌های بیشتری را برای ایجاد تغییر در شمارش دستگاه بار- جفت شده^۱ دریافت می‌کنند) و فوتون‌های کمتر تولید شده توسط منبع وجود دارد، شمارش کلی برای طول موج‌های زیر ۴۵۰ نانومتر به کمتر از ۵۰۰۰ تا افت پیدا می‌کند. خطای کل به‌علت وجود نویزهای پنهان و تدریجی در حدود ۱۰۶ شمارش است. این مطابق با حد قابل تشخیص ۱/۶ انگستروم در ۴۵۰ نانومتر و ۲/۳ انگستروم در ۵۶۵ نانومتر، به‌صورتی که در شکل ۸.۷ نشان داده شده، است. در زیر ۴۰۰ نانومتر، اسپکتروفتومتر قادر نخواهد بود به‌دقت تغییرات جذب ناشی از افزایش در غلظت محلول را در اندازه‌گیری‌های جذب ۱/۲ از واحدهای جذب تشخیص دهد. برای این ابزارآلات خاص، مهم است که جذب پیک در زیر ۱/۲ باقی بماند، برای اطمینان از رابطه خطی بین جذب و غلظت برای رنگزایی که در محدوده ۳۸۰ تا ۵۰۰ نانومتر جذب می‌شوند.

¹ Charge- coupled device count



شکل ۶.۸. طیف پردازش نشده‌ی اسپکتروفتومتر Ocean Optics USB4000.



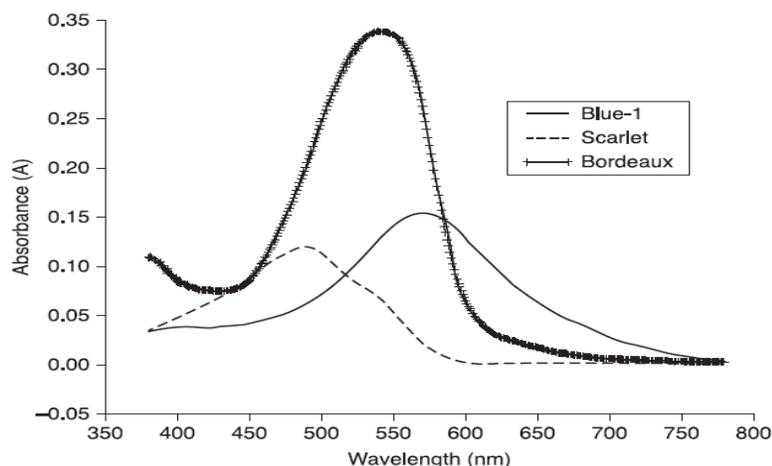
شکل ۷.۸. حساسیت طیف پردازش نشده.

جمع‌پذیری طیفی

هنگامی که دو یا چند رنگ‌زا با هم مخلوط می‌شوند، اگر هیچ گونه برهم‌کنش شیمیایی بین آنها وجود نداشته باشد، مجموع طیف‌های هر رنگ‌زای مجزا باید برابر با طیف مخلوط‌شان باشد. رنگ‌زاهایی که این خاصیت را دارند از اصل جمع‌پذیری طیفی پیروی می‌کنند. یک تعداد تحقیقات با رنگ‌زاهای مستقیم و

خمی در مخلوط‌ها نشان داده است که این عبارت اغلب معتبر نیست. نیل و استرینگ فلوو^۱ (نیل و استرینگ فلوو، ۱۹۴۳) نتیجه گرفتند که برای رنگزاهای مستقیم معین طیف‌های مخلوط در آب جمع‌پذیری نیستند. در محلول آبی، جفت رنگزایی که با یکدیگر برهم‌کنش دارند، احتمالاً از طریق عملکرد پیوندهای رزونانسی یا نیروهای باقیمانده والانس مشابه با آنهایی که برای ثابت کردن رنگزا بر روی گروه‌های هیدروکسل سلولز مسئول هستند عمل می‌کنند.

شکل ۸.۸ طیف‌های جذبی رنگزاهای مستقیم ۸۳.۱^۲، مستقیم آبی ۸۵^۳ و مستقیم قرمز ۸۹^۴ را به ترتیب در غلظت‌های ۲/۶۰ g/l، ۱/۰۰ g/l و ۰/۹۰ g/l نشان می‌دهد. هنگامی که این سه رنگزا با هم مخلوط می‌شوند، برهم‌کنش رنگزا بین مستقیم آبی ۸۵ و دو رنگزای دیگر طیف را در مقایسه با طیفی که شامل مجموع خطی طیف‌های جذبی است، همان‌طور که در شکل ۹.۸ نشان داده شده، تغییر می‌دهد. چنین تغییراتی به علت جمع‌پذیری طیفی می‌تواند خطاهای قابل توجهی را در پیش‌بینی‌های غلظت با استفاده از معادله ۸-۲ موجب شود.



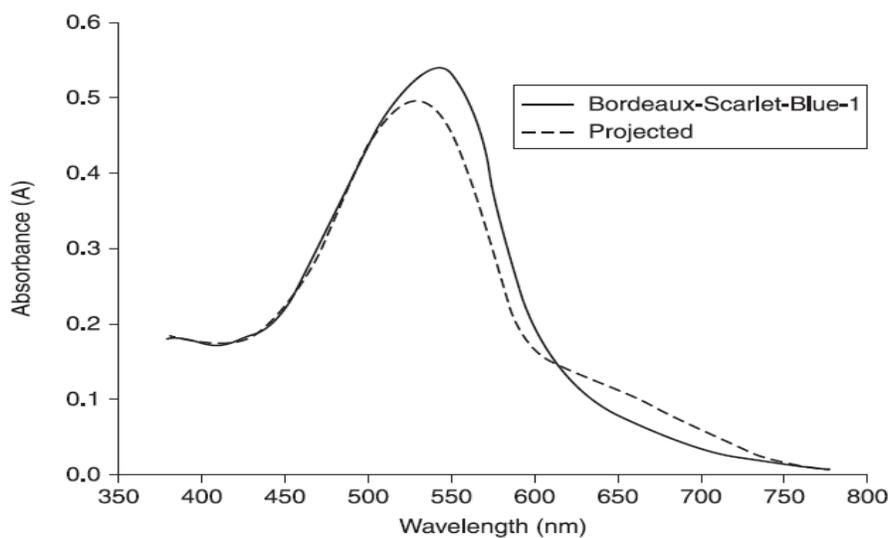
شکل ۸.۸. طیف‌های جذبی سه رنگزای مستقیم مختلف: مستقیم آبی ۸۵ (Blue)، مستقیم قرمز ۸۹ (Scarlet) و مستقیم قرمز ۸۳.۱ (Bordeaux).

¹ Neale and Stringfellow

² Direct 83.1

³ Direct Blue 85

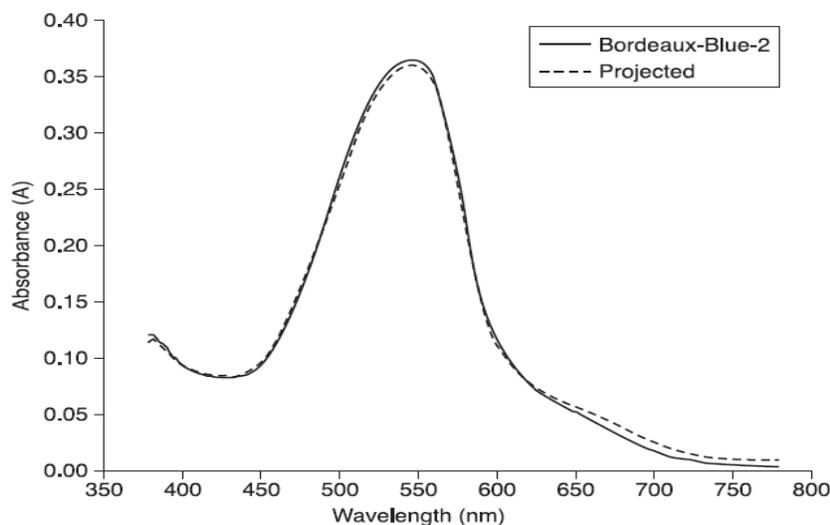
⁴ Direct Red 89



شکل ۹.۸. طیف ترکیبی از رنگ‌های مستقیم قرمز ۸۳.۱، مستقیم آبی ۸۵ و مستقیم قرمز ۸۹.

آزمایش یک جفت مخلوط رنگ‌زا نشان داد که رنگ‌زای مستقیم آبی ۸۵ با هر دوی مستقیم قرمز ۸۳.۱ و مستقیم قرمز ۸۹ برهم‌کنش می‌دهد. با این حال، هنگامی که این رنگ‌زاها با مستقیم آبی ۷۸^۱ در یک مخلوط سه رنگی ترکیب می‌شوند، برهم‌کنش رنگی در نمونه برنامه‌ریزی شده که زودتر ظاهر شد، به‌صورتی که در شکل ۹.۸ نشان داده شده، مشاهده شد که در شکل ۱۰.۸ کمتر مشخص است (شکل ۱۰.۸ را ببینید).

¹ Direct Blue 78



شکل ۱۰۸. طیف ترکیب شده‌ی رنگزای مستقیم قرمز ۸۳.۱، مستقیم آبی ۷۸، و مستقیم قرمز ۸۹.

شکل‌گیری طیفی^۱

با توجه به قانون بیر- لامبرت، هنگامی که رنگزا با آب رقیق می‌شود، طیف جذبی آن به تناسب افت پیدا می‌کند، همان‌طور که در تصویر چاپی V (الف) نشان داده شده است (بخش تصاویر چاپی رنگی را بین صفحات ۱۷۷ و ۱۸۰ ببینید). با تقسیم مقدار جذب هر طول موج به بالاترین مقدار جذب کل طیف، منحنی طیفی مشخصی را می‌توان معیار قرار داد. هنگامی که این طیف‌های معیار قرار داده شده‌ی هر رقیق‌سازی رسم می‌شوند، در آن صورت تقریباً به‌طور کامل رو هم قرار می‌گیرند، به‌صورتی که در تصویر چاپی V (ب) نشان داده شده است.

تصویر چاپی VI طیف معیار قرار داده شده‌ی رنگزای تجاری ری‌اکتیو سیاه ۲۵ را در زمان‌های مختلف در طول رنگرزی نشان می‌دهد. در سرتاسر رنگرزی، شکل طیف در اکثر موارد حفظ می‌شود. این رفتار مورد انتظار در مواردی است که مولفه‌های شید رنگزا پایدار هستند و به‌طور یکنواخت رmq کشی می‌شوند. با این حال، رنگزاهای تجاری به ندرت از یک رنگزای واحد تشکیل می‌شوند، اما،

¹ Spectral morphing

² Reactive Black 5

بیشتر، مخلوط‌هایی هستند که ممکن است در نرخ‌های مختلف در سرتاسر فرآیند رنگرزی رمق‌کشی شوند. طرح معیار قرار داده شده‌ی طیف جذبی در زمان‌های مختلف نشان خواهد داد که شکل طیف جذبی در طول رمق‌کشی تغییر کرده یا شکل جدیدی گرفته است. این پدیده شکل‌گیری طیفی نامیده می‌شود (گونی و جاسپر، ۲۰۱۰)، و برای رنگزای ری‌اکتیو سیاه ۵ در تصویر چاپی VII نشان داده می‌شود. شکل‌گیری طیفی برابر با تغییر بردارهای مولفه‌ای طیف در طول رنگرزی است. در این حالت، ارتباط یک به یکی بین غلظت و جذب وجود ندارد.

به‌منظور دستیابی به یک رنگرزی پایدار، مهم است تا مقدار همگن بودن رنگزا تعیین شود و با استفاده از این داده‌ها عملکرد رنگزا در رنگرزی پیش‌بینی شود. شکل‌گیری طیفی نشان دهنده آن است که مولفه‌های رنگزا در نرخ‌های مختلفی رمق‌کشی می‌شوند، که این می‌تواند منجر به یکنواختی و موضوعات مربوط به شید شود.

استقلال خطی

به‌منظور حل غلظت‌ها در معادله ۸-۲، بردارهای طیفی f_i باید به‌طور خطی مستقل باشند. وابستگی خطی می‌تواند هنگامی که دو رنگزا با طیف‌های جذبی یکسان با هم ترکیب می‌شوند، یا هنگامی که رنگزا شامل مخلوط رنگزاهای موجود در حمام رنگرزی است اتفاق بیفتند. رنگزاهای تجاری به‌ندرت از یک رنگزای واحد تشکیل می‌شوند، بنابراین عدم استقلال خطی بین مولفه‌های رنگزا می‌تواند موجب خطاهایی در پیش‌بینی غلظت نمونه‌های مجزا در مخلوط شود.

به‌عنوان مثال، فرض کنید که رنگزای W مخلوط رنگزاهای X و Y است، و ما علاقه‌مند به اندازه‌گیری غلظت‌های محلول رنگزای متشکل از رنگزاهای W ، Y و Z باشیم. با توجه به وابستگی خطی بین W و Y ، ممکن است پیش‌بینی غلظت‌های این رنگزاهای مجزا به‌طور دقیق امکان‌پذیر نباشد.

از منظور ریاضی، f_i به‌صورت خطی مستقل نیستند. اگر معادله ۸-۲ به شکل ماتریس بیان شود:

$$A = Fc \quad A \in R^n \quad F \in R^{n \times i} \quad c \in R^i \quad [۸-۸]$$

که در آن n تعداد طول‌موج‌های اندازه‌گیری شده و i تعداد رنگزاهای در حمام رنگرزی است، در ادامه خطای نسبی در غلظت ناشی از خطای نسبی در اندازه‌گیری جذب را می‌توان به‌صورت زیر ارائه داد:

$$\frac{\|\Delta c\|}{\|c\|} \leq \frac{\sigma_{\max}(F)}{\sigma_{\min}(F)} \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \quad [9-8]$$

که در آن $\sigma_{\max}(F)$ مقدار بیشینه ویژه‌ی F و $\sigma_{\min}(F)$ مقدار کمینه ویژه‌ی F است. خارج قسمت به‌عنوان تعداد شرط ماتریس شناخته می‌شود و معمولاً توسط $\kappa(F)$ مشخص می‌شود. معادله ۸-۹ حد بالایی برای خطای نسبی در غلظت را با توجه به خطا در جذب ارائه می‌دهد.

هنگامی که بردارهای طیفی f_i ماتریس F به‌طور خطی مستقل هستند، تعداد شرط ۱ است، و چنانچه ماتریس F به‌طور نادرست مشروط شود، در آن صورت تعداد شرط افزایش می‌یابد. بر حسب بیت‌های درست:

#bits of accuracy in concentration \leq #bits of accuracy in absorbance $-\log_2 \kappa(F)$

برای محاسبه غلظت رنگزا تا دقت ۳ رقم اعشار نیاز به ۱۰ بیت درست است. اگر $\log_2 \kappa(F)$ برابر با ۲ باشد، در آن صورت به حداقل ۱۲ بیت درست در اندازه‌گیری جذب لازم خواهد بود. این محدودیتی اساسی در تبدیل داده‌های اسپکتروفتومتر به غلظت است، و دلیلی است برای اینکه چرا برخی ترکیبات رنگزا برای پیش‌بینی مشکل هستند.

۳.۸. پردازش داده‌ها و ابزارهایی برای تجزیه و تحلیل و تفسیر داده‌های بی وقفه نظارت رنگزا
تعیین استاندارد برای ویژگی‌های کیفی که براساس آن ارزیابی‌هایی انجام خواهد شد در کنترل کیفیت رنگرزی حیاتی است.

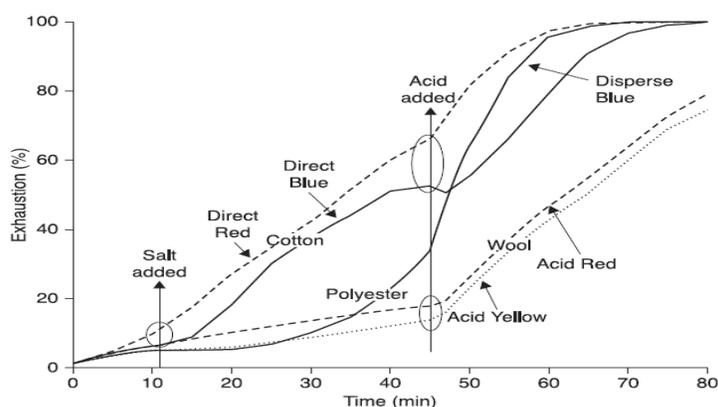
ویژگی‌های کیفی که اهمیت عملی دارند عبارت‌اند از:

- غلظت
- رمق‌کشی
- دما
- pH رسانایی

- سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی (سرعت بیشینه رمق‌کشی)
- دمای جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی (دمایی که در آن رمق‌کشی شتاب می‌گیرد).

از بین این ویژگی‌ها، غلظت، دما، pH و رسانایی به‌طور مستقیم اندازه‌گیری می‌شوند، و رمق‌کشی، سرعت بیشینه رمق‌کشی (سرعت جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی) و دمایی که در آن رمق‌کشی شتاب می‌گیرد (دمای جذب رنگزا در مراحل اولیه رنگرزی) از این اندازه‌گیری‌ها مشتق می‌شوند.

شکل ۱۱.۸ درصد رمق‌کشی رنگزاهای قرمز، زرد و آبی را بر روی پارچه تهیه شده از مخلوط الیاف پلی‌استر، پنبه و پشم در برابر زمان نشان می‌دهد. به‌طور ایده‌آل، رنگزاهای اسیدی بر روی پشم، رنگزاهای مستقیم بر روی پنبه و رنگزاهای دیسپرس بر روی الیاف پلی‌استر جذب می‌شوند. شکل ۱۱.۸ نشان می‌دهد که، در طول رنگرزی، افزودن نمک موجب می‌شود تا الیاف پنبه به رنگزاهای مستقیم جذب شوند، افزودن اسید سبب می‌شود تا الیاف پشم جذب رنگزاهای اسیدی شوند، و در نهایت افزایش دما رنگرزی پلی‌استر با رنگزاهای دیسپرس را با هدایت دما شروع می‌کند.

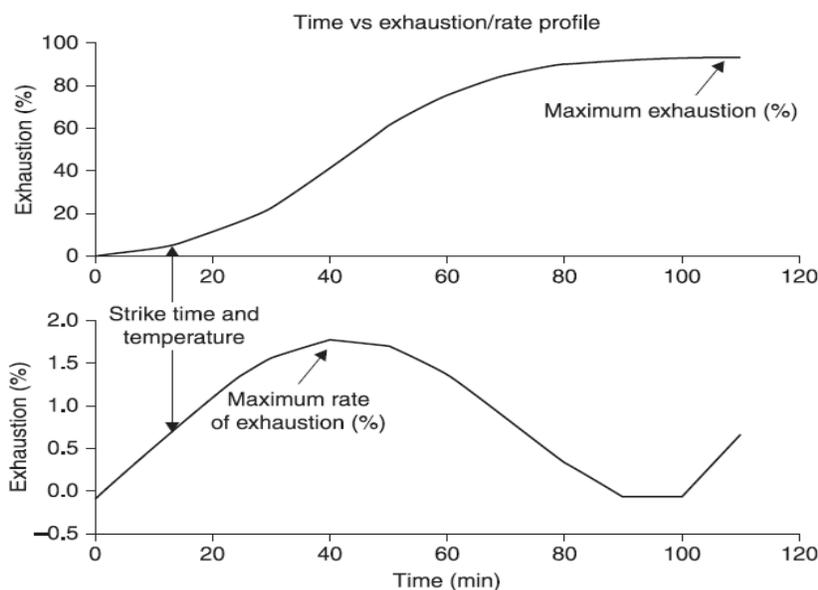


شکل ۱۱.۸. نظارت جذب رنگزا توسط پارچه برای رنگزاهای مجزا در طول چرخه رنگرزی.

علاوه بر این، شکل ۱۱.۸ نشان می‌دهد که سیتریک اسید نیز با رنگزاهای مستقیم برهم‌کنش دارد، و منتج به رمق‌کشی این رنگزاهای توسط الیاف پنبه می‌شود. توانایی به‌دست آوردن چنین اطلاعات دقیقی بر روی رنگزاهای و برهم‌کنش آنها با مواد شیمیایی، پارچه و متغیرهای فرآیند، رنگرزی را قادر می‌سازد تا روش کنترل کیفیت را برای سالن رنگرزی توسعه دهد.

در ارزیابی ویژگی‌های کیفی باید از محدودیت‌های فناوری آگاهی داشت، که توسط گونی و جاسپر بحث و بررسی می‌شوند (گونی و جاسپر، ۲۰۱۰). علاوه بر این، توجه داشته باشید که استفاده از تجهیزات برای آماده‌سازی محلول و پراکندگی آنها به کمک پیپت الکترونیکی توزیع کننده با قیمت پایین برای تهیه حمام رنگریزی اعتماد به نتایج را افزایش می‌دهد و تکرارپذیری آزمایش‌ها را نیز بهبود می‌بخشد.

شکل ۱۲.۸ تعاریف ویژگی‌های بحرانی را بر رمق‌کشی در برابر زمان و نیز نرخ رمق‌کشی در برابر زمان نشان می‌دهد. برای این رنگریزی، رمق‌کشی نهایی حدود ۹۰٪ بود. زمان جذب رنگزا در مراحل اولیه در شانزدهمین دقیقه رنگریزی اتفاق می‌افتد.



شکل ۱۲.۸. نمایش ویژگی‌های بحرانی بر روی نمودار رمق‌کشی برای یک فرآیند رنگریزی معمولی.

۴.۸. نتیجه‌گیری

پیشرفت‌های اخیر در اسپکتروفتومتری و ابزارآلات رنگرها را قادر ساخته است تا غلظت رنگزاها را در حمام رنگریزی و به‌طور غیرمستقیم بر روی پارچه به‌صورت تابعی از زمان اندازه‌گیری کنند. اگر چه

محدودیت‌های نظری و عملی برای این رویکرد وجود دارد، اما یک پیشرفت عمده در نظارت و نهایتاً کنترل فرآیند رنگرزی است. استفاده از روش اسپکتروفتومتری می‌تواند به رنگرز در عیب‌یابی خطاهای موجود در شید و یکنواختی، و همچنین ارائه اساسی برای ارزیابی کنترل کیفیت رنگزها (استحکام رنگزا) و پارچه (جذب رنگزا) کمک کند. علاوه بر این، این رویکرد رنگزها را قادر خواهد ساخت تا پارامترهای رنگرزی ورودی از جمله نمک، مواد شیمیایی، رنگزها، آب و انرژی، که پیش‌نیازهایی برای تمایل به رویکرد شش سیگمائی در رنگرزی هستند، بهینه سازند.

۵.۸. منابع

1. Beck, K., Madderra, T. and Smith, B. (1990), Real- time data acquisition in batch dyeing, AATCC National Technical Conference and Exhibition.
2. Berkstresser, G. and Beck, K. (1993), Novel approaches for the real- time prediction of dye concentrations in three- dye mixtures, Book of Papers, AATCC International Conference, Montreal, Canada, pp. 108 – 13.
3. Dixon, W. and Farrell, M. (2009), HueMetrix Dye-It-Right User Instrument Manual, Huemetrix Inc., 617 Hutton St. Raleigh, NC USA.
4. Ferus-Comelo, M., Clark, M. and Parker, S. (2005), Optimisation of the disperse dyeing process using dyebath analysis, *Coloration Technology* **121** (5): 255 – 7.
5. Günay, M. and Jasper, W. J. (2010), Limitations in predicting dyebath exhaustion using optical spectroscopy, *Coloration Technology* **126** (3): 140 – 6.
6. Johnson, A. (1989), *The Theory of Coloration of Textiles*, 2nd edn, Woodhead Publishing Limited, UK.
7. Keaton, J. and Glover, B. (1985), A philosophy for dyeing in the next decade, *Journal of the Society of Dyers and Colourists* **101**: 86.

8. Kubelka, P. and Munk, F. (1931), Ein beitrag zur optik der farbanstriche, *Z. Tech. Phys.* **12**: 593 – 601.
9. Ljung, L. (1987), *System Identification: Theory for the User*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
10. McDonald, R. (ed.) (1997), *Colour Physics for Industry*, 2nd edn, Society of Dyers and Colourists, West Yorkshire, England, chapter 1, pp. 33 – 6.
11. Neale, S. M. and Stringfellow, W. A. (1943), The absorption by cellulose of mixture of direct cotton dyes, *Journal of the Society of Dyers and Colorists* **59**: 241 – 5.
12. Ocean-Optics (2008), USB4000 Data Sheet, Ocean Optics, 830 Douglas Ave., Dunedin, FL, USA.
13. Park, J. and Shore, J. (2007), Significance of dye research and development for practical dyers, *Coloration Technology* **123**: 209 – 16.
14. Saguy, I., Mazrahi, S. and Kopelman, I. (1978), Mathematical approach for the determination of dyes concentrations in mixtures, *Journal of Food Science* **43**: 121 – 4.
15. Smith, C. B. (2007), Dyebath monitoring and control: Past, present, and future, *AATCC Review* **7** (11): 36 – 41.
16. Zamora, P., Kunz, A., Nagat, N. and Poppi, R. (1998), Spectrophotometric determination of organic dye mixtures by using multivariate calibration, *Talanta* **47**: 77 – 84.

University of Guilan Press

Modelling, Simulation and Control of the Dyeing Process

By:

Renzo Shamey , Xiaming Zhao

Translated by:

Javad Mokhtari, ph. D

Seyedeh Ameneh Siadat