

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI



DISERTAČNÍ PRÁCE

2015

Milan Šimko



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta textilní



Modelování a simulace bičující nestability při elektrostatickém zvlákňování

Disertační práce

Studijní program: P3106 — Textilní inženýrství
Studijní obor: 3106V007 — Textilní materiálové inženýrství
Autor práce: **Ing. Milan Šimko**
Vedoucí práce: prof. RNDr. David Lukáš, CSc.





TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC
Faculty of Textile Engineering ■

Modeling and simulation of whipping instability in the electrospinning process

Dissertation

Study programme: P3106 — Textile Engineering

Study branch: 3106V007 — Textile and material engineering

Author: **Ing. Milan Šimko**

Supervisor: prof. RNDr. David Lukáš, CSc.



Poznámka k elektronické verzi



Toto je text disertační práce v „klikací“ verzi ve formátu PDF.

Verze tohoto textu přesně odpovídá textu opraveného tištěného vydání, přestože číslování stran není z důvodu knižních vakátů shodné.

PDF formát práce byl připraven pomocí volně dostupné modifikace \TeX u `pdftex`. Viz například <http://www.cstug.cz/pdftex/>.

Prohlášení



Byl jsem seznámen s tím, že na mou doktorskou disertační práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), zejména § 60 — školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé disertační práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li disertační práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Disertační práci jsem vypracoval samostatně s použitím literatury uvedené na straně 98 a na základě konzultací se školitelem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

V Chomutově dne 17. listopadu 2015

.....

Milan Šimko

Poděkování



Velice rád bych chtěl na tomto místě poděkovat svému školiteli prof. RNDr. Davidu Lukášovi, CSc. za jeho vstřícný přístup, odborné vedení mé práce a cenné rady, které mi dával během konzultací. Dále bych také velice rád poděkoval prof. Mgr. Jiřímu Erhartovi, Ph. D. za jeho podnětné připomínky a rady, které mi velice ochotně poskytoval. Poděkování patří také Ing. Pavlovi Pokornému, Ph. D. za jeho pomoc při validaci modelu.

Je mou milou povinností poděkovat také prof. Ing. Karlu Vokurkovi, DrSc. a všem členům Katedry fyziky Fakulty přírodovědně–humatitní a pedagogické TUL za příjemné pracovní prostředí, ve kterém jsem mohl v klidu splnit své studijní povinnosti a dopsat disertační práci.

Mé poděkování patří také vyjímečné osobnosti Ing. Josefu Pavlákovi, kterého si velice vážím, a proto jsem numerický model pojmenoval JOŽIN.

Děkuji samozřejmě všem, kteří mi byli oporou po celou dobu doktorského studia, a kteří se přímo či nepřímo zasloužili o to, že tato disertační práce mohla vzniknout.

Závěrečné poděkování patří RNDr. Petru Olšákovi z ČVUT za jeho doplňující makra k plain \TeX u nazvaná OPmac a CTUstyle, jež mi byly inspirací k napsání vlastních maker pro sazbu této práce.



Tato doktorská disertační práce vznikla v období 2011–2012 za podpory projektu ESF č. CZ.1.07/2.3.00/09.0155 „Vytvoření a rozvoj týmu pro náročné technické výpočty na paralelních počítačích na TU v Liberci“, kterému touto cestou děkuji za poskytnutou finanční podporu.

Abstrakt



Disertační práce se zabývá matematickým modelováním bičující nestability elektricky nabitě kapalinové trysky, která je vytvářena z polymerního roztoku prostřednictvím elektrostatických sil během elektrostatického zvlákňování. Klíčovým atributem matematického modelu je ideální přímočarý segment zelektrizované trysky, tzv. „viskoelastická činka“. Na základě analýzy tohoto segmentu byly zformulovány obyčejné diferenciální rovnice popisující jeho dynamiku i fyzikální vlastnosti. Součástí disertační práce je vyvinutá vícevláknová počítačová aplikace, která umožňuje provádět simulace procesu elektrostatického zvlákňování. Numerický výpočet obstarává paralelní výpočetní jádro, které představuje algoritmizaci numerického modelu. Výsledky numerických simulací jsou vizualizovány prostřednictvím trojrozměrné počítačové grafiky.

Klíčová slova: bičující nestabilita; elektrostatické zvlákňování; kapalinová tryska; matematický model; nanovlákná; numerický model; počítačová simulace.

Abstract



This dissertation thesis deals with the mathematical modeling of a whipping instability of an electrically charged liquid jet, which it is created from a polymer solution by electrospinning. The ideal rectilinear element of the electrically charged liquid jet, the so-called “viscoelastic dumbbell”, is the key attribute of the mathematical model. Governing equations describing dynamics and physical properties of this element were formulated based on its analysis. A developed multi-threaded computer application that allows to simulate the electrospinning process is also a part of this dissertation thesis. A parallel computational kernel, which it is an algorithmization of the numerical model, handles an approximate numerical computation. Results of numerical simulations are visualized through three-dimensional computer graphic.

Keywords: whipping instability; electrospinning; liquid jet; mathematical model; nanofibers; numerical model; computer simulation.

Obsah



Úvod	1
I SEZNÁMENÍ S ŘEŠENOU PROBLEMATIKOU	4
1 Elektrostatické zvlákňování	5
1.1 Princip elektrostatického zvlákňování	5
1.2 Parametry ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování	6
2 Přehled současného stavu řešené problematiky	8
II MATEMATICKÝ MODEL	13
3 Model přímočarého segmentu elektricky nabitě trysky	14
3.1 Aproximační předpoklady modelu	14
3.2 Ideální přímočarý segment kapalinové trysky	15
3.3 Úbytek rozpouštědla z kapalinové trysky	15
3.4 Viskoelastické chování kapalinové trysky	18
3.5 Bičující nestabilita kapalinové trysky	19
3.6 Pohybová rovnice	20
3.7 Existence a jednoznačnost řešení	21
4 Zobecněný model elektricky nabitě trysky	25
4.1 Vnější elektrostatické pole	25
4.1.1 Diskový kolektor	26
4.1.2 Drátový kolektor	28
4.2 Úbytek rozpouštědla a efekt tuhnutí trysky	33
4.3 Síly působící na elektricky nabitou trysku	34
4.3.1 Síla elektrostatická	34
4.3.2 Síla viskoelastická	34
4.3.3 Síla elektrostatického pole	35
4.3.4 Síla povrchového napětí	35
4.3.5 Síla odporu prostředí	37
4.4 Pohybová rovnice	40
4.5 Počáteční perturbace	42

III	NUMERICKÝ MODEL	44
5	Numerická realizace úlohy	45
5.1	Diskretizace časové proměnné	45
5.2	Diskretizace kapalinové trysky	45
5.3	Bezrozměrný tvar rovnic	47
5.4	Diskretizovaný tvar rovnic	49
5.4.1	Explicitní Eulerova metoda	49
5.4.2	Metoda prediktor–korektor	49
5.5	Odhad chyby metodou polovičního kroku	52
5.6	Vstupní parametry numerického modelu	52
IV	POČÍTAČOVÝ MODEL	54
6	Počítačová realizace úlohy	55
6.1	Paralelní výpočetní jádro	55
6.2	Grafické uživatelské rozhraní	56
6.2.1	Panel nástrojů	57
6.2.2	Vizualizace výsledků	57
6.3	Hlavní výpočetní algoritmus	60
7	Verifikace numerického modelu	61
7.1	Verifikace numerického řešiče	61
V	EXPERIMENTY A VALIDACE MODELU	63
8	Numerické a virtuální experimenty	64
8.1	Růst malých ohybových perturbací	64
8.2	Segment elektricky nabitě trysky ve vnějším elektrostatickém poli	66
8.3	Trajektorie elektricky nabitě trysky	76
8.4	Ukládání nanovláken na drátovém kolektoru	83
9	Validace numerického modelu	85
9.1	Validace vnějšího elektrostatického pole	85
9.1.1	Diskový kolektor	85
9.1.2	Drátový kolektor	86
9.2	Validace hodnoty elektrického náboje přenášeného kapalinovou tryskou	86
VI	DISKUSE VÝSLEDKŮ A ZÁVĚR	92
10	Diskuse výsledků	93
11	Závěr a doporučení pro další práci	97
	Literatura	98
VII	PŘÍLOHY	102
A	Publikační činnost autora	103
B	Pomocné vztahy	105
C	Odvození bezrozměrných rovnic	106
D	Obecná veřejná licence GNU	109

Seznam obrázků



0.1	Snímky zelektrizované kapalinové trysky pořízené vysokorychlostní kamerou	2
0.2	Obecný postup při matematickém modelování	2
1.1	Schema aparatury pro elektrostatické zvlákňování	6
1.2	Rozdělení parametrů ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování	7
3.1	Silový rozbor přímočarého segmentu zelektrizované trysky	15
3.2	Koncentrace nasycených par při rovnovážném stavu v závislosti na teplotě ve zvlákňovacím prostoru	16
3.3	Silový rozbor vysvětlující pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability elektricky nabitě trysky	20
3.4	Průběh prvních parciálních derivací	22
4.1	Náhrada spojitě elektricky nabitě kapalinové trysky soustavou sériově spojených ideálních přímočarých segmentů zelektrizované trysky	25
4.2	Velikost intenzity elektrostatického pole a řez ekvipotenciálními plochami uzemněného diskového kolektoru	27
4.3	Schema speciálního kolektoru sestávajícího se ze dvou paralelních vodičů s kruhovým průřezem	29
4.4	Elektrické pole dvou paralelních, nekonečně dlouhých vodičů s kruhovým průřezem	29
4.5	Velikost intenzity elektrostatického pole a řez ekvipotenciálními plochami speciálního kolektoru	32
4.6	Efekt povrchového napětí na zakřivený segment kapalinové trysky	37
4.7	Rozklad okamžité rychlosti do normálového a tečného směru ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky	39
4.8	Metoda elektrického zobrazení splňující okrajové podmínky konstantního elektrického potenciálu	41
4.9	Silový rozbor na i -tém nabitém hmotném bodě zobecněného modelu elektricky nabitě trysky	41
5.1	Schema diskretizace spojitě kapalinové trysky	46
6.1	Schema paralelismu uvnitř výpočetního jádra	56
6.2	Hierarchický diagram tříd včetně znázornění hlavního vlákna aplikace	56
6.3	Grafické uživatelské rozhraní počítačové aplikace	57
6.4	Záložky ovládacího panelu nástrojů počítačové aplikace	58

6.5	Vývojový diagram výpočetního algoritmu	59
7.1	Porovnání implementovaných numerických metod pro řešení počáteční úlohy .	62
8.1	Průběh působících výslednic sil a vývoj malých ohybových perturbací . . .	65
8.2	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I; průběh dynamické viskozity	66
8.3	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	67
8.4	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	67
8.5	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	68
8.6	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	68
8.7	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	69
8.8	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	69
8.9	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	70
8.10	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	70
8.11	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	71
8.12	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	71
8.13	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	72
8.14	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	72
8.15	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	73
8.16	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	73
8.17	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	74
8.18	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	74
8.19	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc; průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti	75
8.20	Segment přímočaré elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc; průběh změny průměru a délky segmentu trysky	75
8.21	Vliv povrchového napětí a počáteční dynamické viskozity na trajektorii elektricky nabitě trysky	77
8.22	Vliv povrchového napětí na šířku zóny bičující nestability	78

8.23	Vliv počáteční dynamické viskozity na šířku zóny bičující nestability	78
8.24	Vliv počátečního relaxačního času a objemového průtoku na trajektorii elektricky nabitě trysky	79
8.25	Vliv počátečního relaxačního času na šířku zóny bičující nestability	80
8.26	Vliv objemového průtoku na šířku zóny bičující nestability	80
8.27	Vliv elektrického proudu v trysce a rozdílu elektrických potenciálů na trajektorii elektricky nabitě trysky	81
8.28	Vliv elektrického proudu v trysce na šířku zóny bičující nestability	82
8.29	Vliv rozdílu elektrických potenciálů na šířku zóny bičující nestability	82
8.30	Vliv rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken	84
9.1	Závislost velikosti kritické intenzity elektrického pole na kritickém elektrickém napětí pro 10% vodný roztok PVA	87
9.2	Závislost velikosti kritické intenzity elektrického pole na kritickém elektrickém napětí pro 12% vodný roztok PVA	87
9.3	Závislost kritického napětí na rozteči válcových vodičů speciálního drátového kolektoru pro 10% vodný roztok PVA	88
9.4	Schema experimentu pro měření elektrického náboje	89
9.5	Elektrické pole válcové trysky uvnitř bubny	90

Seznam tabulek



5.1	Řádový rozsah běžných vstupních parametrů numerického modelu	53
9.1	Kritické hodnoty elektrického potenciálu a velikosti intenzity elektrického pole pro 10% vodný roztok PVA	86
9.2	Kritické hodnoty elektrického potenciálu a velikosti intenzity elektrického pole pro 12% vodný roztok PVA	86

Seznam symbolů



Symbol	Jednotka	Význam
$d\varepsilon/dt$	s^{-1}	Rychlost přetvoření
dm_s/dt	$kg\ s^{-1}$	Hmotnostní tok rozpouštědla
Re	—	Reynoldsovo kritériální číslo
Sc	—	Schmidtovo kritériální číslo
Sh	—	Sherwoodovo kritériální číslo
γ	$N\ m^{-1}$	Povrchové napětí
δ	m	Výchylka v příčném směru
ε	—	Deformace
ε_0	$C^2\ N^{-1}\ m^{-2}$	Permitivita vakua
ε_r	—	Relativní permitivita vzduchu
ε_{rp}	—	Relativní permitivita polymerního roztoku
η	Pa s	Okamžitá dynamická viskozita
η_0	Pa s	Počáteční dynamická viskozita
η_a	Pa s	Dynamická viskozita vzduchu
ν_a	$m^2\ s^{-1}$	Kinematická viskozita vzduchu ($\nu_a = \eta_a/\rho_a$)
θ	rad	Úhel výchylky v příčném směru
κ	$S\ m^{-1}$	Měrná elektrická vodivost
λ	m	Vlnová délka příčné perturbace
ρ	$kg\ m^{-3}$	Měrná hmotnost polymerního roztoku
ρ_a	$kg\ m^{-3}$	Měrná hmotnost vzduchu
σ	Pa	Mechanické normálové napětí
τ	s	Okamžitý relaxační čas ($\tau = \eta/E$)
τ_0	s	Počáteční relaxační čas ($\tau_0 = \eta_0/E_0$)
φ	V	Elektrostatický potenciál
φ_1	V	Elektrický potenciál aplikovaný na kapiláru
φ_2	V	Elektrický potenciál aplikovaný na uzemněný kolektor
ψ	—	Relativní vlhkost ve zvlákňovacím prostoru
ω	s^{-1}	Úhlová frekvence příčné perturbace
Δt	s	Časový krok numerické metody
Λ	—	Koeficient úbytku objemu rozpouštědla
$\mathcal{D}_{s,a}$	$m^2\ s^{-1}$	Binární koeficient difúze rozpouštědla do vzduchu

a	m	Rozteč válcových vodičů drátového kolektoru
c_p	—	Okamžitá hmotnostní koncentrace polymeru
c_{p0}	—	Počáteční hmotnostní koncentrace polymeru
$c_{s,eq}$	—	Rovnovážná koncentrace nasycených par rozpouštědla
$c_{s,\infty}$	—	Koncentrace nasycených par rozpouštědla ve zvlákňovacím prostoru
d	m	Okamžitý průměr segmentu zelektrizované trysky
d_0	m	Počáteční průměr segmentu zelektrizované trysky
e	m	Rozteč os nekonečně tenkých vodičů drátového kolektoru
g	$m s^{-2}$	Gravitační zrychlení
h	m	Vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem
h_m	$m s^{-1}$	Součinitel přestupu hmoty při vypařování rozpouštědla
k	m^{-1}	Úhlový vlnčet příčné perturbace
l	m	Okamžitá délka segmentu zelektrizované trysky
l_0	m	Počáteční délka segmentu zelektrizované trysky
m	kg	Okamžitá hmotnost
m_0	kg	Počáteční hmotnost
m_p	kg	Hmotnost polymeru
m_s	kg	Okamžitá hmotnost rozpouštědla
m_{s0}	kg	Počáteční hmotnost rozpouštědla
p_c	Pa	Kapilární tlak
p_e	Pa	Elektrický tlak
q	C	Okamžitý náboj
q_0	C	Počáteční náboj
q_ρ	$C m^{-3}$	Objemová hustota náboje
q_σ	$C m^{-2}$	Plošná hustota náboje
q_τ	$C m^{-1}$	Lineární hustota náboje
r	m	Poloměr kapiláry, resp. hemisférické, kapky
t	s	Čas
v	$m s^{-1}$	Velikost okamžité rychlosti
v_0	$m s^{-1}$	Velikost výtokové rychlosti z kapiláry
x	m	Okamžitá x -ová souřadnice nabitého hmotného bodu
y	m	Okamžitá y -ová souřadnice nabitého hmotného bodu
z	m	Okamžitá z -ová souřadnice nabitého hmotného bodu
A	m	Amplituda příčné perturbace
A	m^2	Charakteristická plocha
A	m^2	Plocha příčného průřezu
C_f	—	Koeficient třecího odporu
C_p	—	Koeficient tlakového odporu
C_D	—	Koeficient aerodynamického odporu
D	m	Průměr kolektoru
E	Pa	Okamžitý Youngův modul pružnosti
E_0	Pa	Počáteční Youngův modul pružnosti
E	$V m^{-1}$	Velikost intenzity vnějšího elektrostatického pole

E_c	$V m^{-1}$	Velikost kritické intenzity elektrostatického pole
F	V	Komplexní potenciál
I_0	A	Elektrický proud kapalinové trysky
J	m^4	Kvadratický moment plochy příčného průřezu
L	m	Charakteristický délkový měřítkový faktor
Q_V	$l \text{ hod}^{-1}$	Objemový průtok polymerního roztoku kapilárou
S	m^2	Plocha povrchu
T	$^{\circ}C$	Teplota ve zvlákňovacím prostoru
U_0	V	Aplikované elektrické napětí ($U_0 = \varphi_1 - \varphi_2$)
U_c	V	Kritické elektrické napětí
V	m^3	Okamžitý objem segmentu zelektrizované trysky
V_0	m^3	Počáteční objem segmentu zelektrizované trysky
\mathbf{e}	—	Ortogonální báze lokálního souřadného systému
\mathbf{f}	—	Ortonormální báze lokálního souřadného systému
\mathbf{i}	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy x
\mathbf{j}	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy y
\mathbf{k}	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy z
\mathbf{n}	—	Normálový vektor
\mathbf{p}	$kg m s^{-1}$	Hybnost
\mathbf{r}	m	Okamžitý polohový vektor
\mathbf{v}	$m s^{-1}$	Okamžitá rychlost
\mathbf{v}_n	$m s^{-1}$	Projekce okamžité rychlosti do normálového směru
\mathbf{v}_t	$m s^{-1}$	Projekce okamžité rychlosti do tečného směru
\mathbf{E}	$V m^{-1}$	Intenzita vnějšího elektrostatického pole
\mathbf{F}_f	N	Síla třecího odporu
\mathbf{F}_p	N	Síla tlakového odporu
\mathbf{F}_C	N	Elektrostatická odpuzující síla
\mathbf{F}_D	N	Odporová síla vzduchu
\mathbf{F}_E	N	Síla vnějšího elektrostatického pole
\mathbf{F}_M	N	Viskoelastická síla
\mathbf{F}_S	N	Síla povrchového napětí

Ačkoliv člověk tvoří mnoho objevů pomocí různých prostředků,
nikdo nezvládne nic krásnějšího, jednoduššího a přesnějšího než příroda,
protože v jejích výtvorech nic nechybí a nic nepřebývá.

— Leonardo da Vinci

Úvod

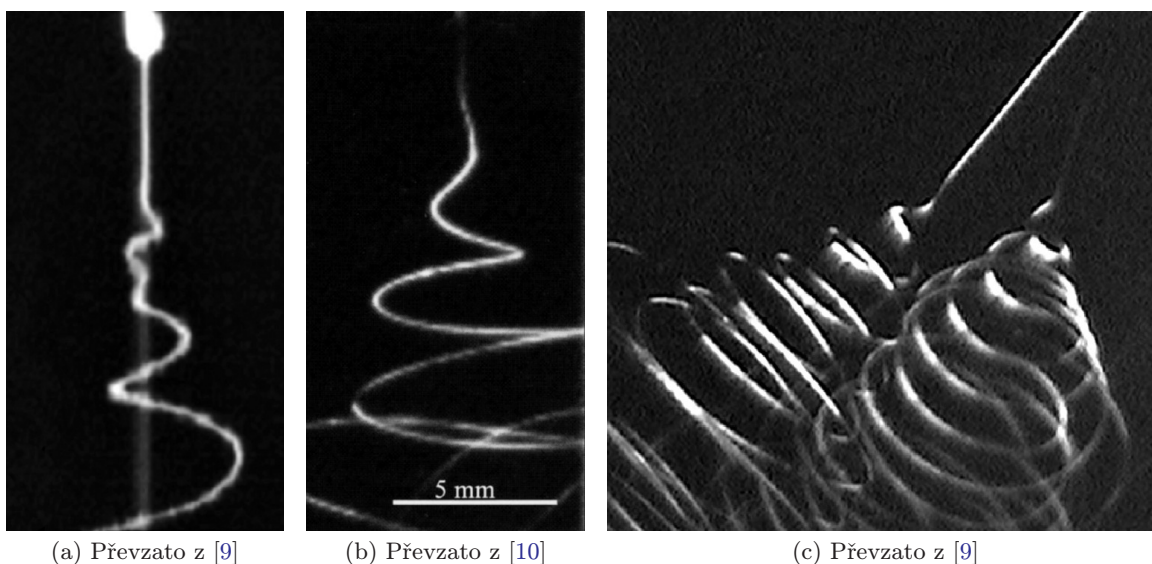


POČÁTKY elektrostatického zvlákňování sahají až do roku 1600, kdy anglický lékař a fyzik William Gilbert publikoval své stěžejní dílo *De Magnete, Magneticisque Corporibus, et de Magno Magnete Tellure*. Gilbert byl první, kdo pozoroval, jak se na suché podložce kapka vody formuje v kónický útvar, přiblíží-li se k ní třením nabitou jantarovou tyčí [1]. Snahu pokusit se matematicky modelovat chování kapalin ve vnějším elektrostatickém poli započal John Zeleny, který v roce 1914 publikoval práci zabývající se chováním kapek tekutiny na konci kovových kapilár [2]. V roce 1934 patentoval Anton Formhals experimentální aparaturu sloužící k výrobě polymerních vláken použitím elektrostatických sil. Příprava vláken tímto způsobem se nazývá elektrostatické zvlákňování. Jinými slovy je elektrostatické zvlákňování proces, kterým jsou výsledná nanovlákná vytvářena prostřednictvím elektricky nabitých trysky¹⁾ polymerního roztoku [3][4] nebo polymerní taveniny [5][6]. Tento proces si během posledních několika let získal velkou pozornost zejména jako levná a jednoduchá metoda pro laboratorní i průmyslovou výrobu polymerních nanovláken [7]. Polymerní nanovlákná jsou používána nebo nacházejí uplatnění při filtraci, výrobě ochranných oděvů, biomedicínských aplikacích, systémech na podávání léčiv, tkáňovém inženýrství a v neposlední řadě jako výztuž kompozitních materiálů [8]. Z těchto důvodů je pro nás důležité, porozumět fyzikálním principům procesu elektrostatického zvlákňování a snažit se je popsat prostřednictvím matematického aparátu.

Cílem disertační práce je navrhnout matematický model zelektrizované kapalinové trysky, tento model realizovat ve formě počítačového programu a s jeho pomocí simulovat bičující (ohybovou) nestabilitu, která hraje při elektrostatickém zvlákňování klíčovou roli. Matematický model by také mohl sloužit k vysvětlení některých nejasností při kooperativním ukládání nanovláken na speciálních kolektorech nebo při zvlákňování pomocí střídavého elektrického proudu.

V názvu předkládané disertační práce se vyskytují dva pojmy: *modelování* a *simulace*. Podstatou prvního pojmu je v této práci myšlena náhrada zkoumané kapalinové trysky jejím matematickým modelem. Na obr. 0.1 jsou znázorněny snímky kapalinových trysek, které byly zaznamenány vysokorychlostní kamerou při laboratorních experimentech. S rozvojem výpočetní techniky jsou druhým pojmem myšleny virtuální

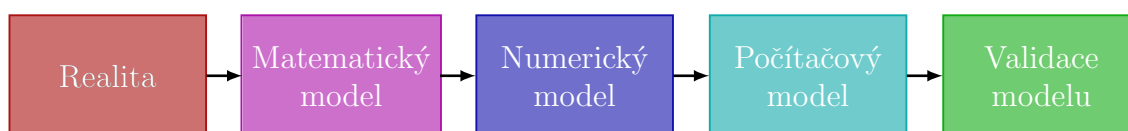
¹⁾ Tryskou je v celé práci myšlen tenký proud polymerního roztoku.



Obr. 0.1: Snímky elektricky nabitě kapalinové trysky pořízené vysokorychlostní kamerou.

experimenty¹⁾ na počítači, jež mají napodobovat chování zkoumané kapalinové trysky, s cílem získat široké spektrum informací. Ostatně, o rostoucím významu počítačového modelování svědčí i Nobelova cena za chemii, kterou za vývoj počítačových programů sloužících k porozumění složitých chemických procesů získala v roce 2013 trojice vědců Martin Karplus, Michael Levitt a Arieh Warshel [11].

Matematický model popsaný spojitými obyčejnými diferenciálními rovnicemi je potřeba — před vlastní implementací v programovacím jazyce — diskretizovat. Diskretizací vznikne numerický model popsaný diferenčními rovnicemi, které se následně řeší numericky. Proto v případě počítačových simulací hrají důležitou roli také numerické metody a jejich stabilita. Obecný postup při matematickém modelování se sestává z kroků schematicky znázorněných na obr. 0.2.



Obr. 0.2: Obecný postup při matematickém modelování.

Předkládaná disertační práce je systematicky rozčleněna do šesti hlavních částí (kde prvních pět sleduje postup znázorněný na obr. 0.2) a jedenácti kapitol. Následující výčet stručně pojednává o jejich obsahu.

ČÁST I: SEZNÁMENÍ S ŘEŠENOU PROBLEMATIKOU

Kapitola první je teoretická. Seznamuje váženého čtenáře s úvodem do fyzikálních principů elektrostatického zvlákňování a stručně pojednává o parametrech, které proces elektrostatického zvlákňování ovlivňují.

¹⁾ Virtuálním experimentem je v celé práci myšlena počítačová simulace propojená s vizualizací scény pomocí trojrozměrné počítačové grafiky.

Kapitola druhá je rešeršní. Pojednává o nalezených informačních zdrojích z oblasti tématu disertační práce.

ČÁST II: MATEMATICKÝ MODEL

Kapitola třetí je teoretická. Předkládá ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky, tzv. „viskoelastickou činku“, který je klíčovým atributem celého modelu.

Kapitola čtvrtá je teoretická. Pojednává o zobecněném (trojrozměrném) modelu elektricky nabitě trysky. Stěžejním atributem je tzv. „řetězec viskoelastických činek“, prostřednictvím něhož je modelována spojitá elektricky nabitá kapalinová tryska během jejího letu od zvlákňovací elektrody ke sběrnému kolektoru.

ČÁST III: NUMERICKÝ MODEL

Kapitola pátá je teoretická. Zabývá se časovou diskretizací obyčejných diferenciálních rovnic a popisuje algoritmus přibližného numerického řešení.

ČÁST IV: POČÍTAČOVÝ MODEL

Kapitola šestá je realizační. Popisuje autorem vyvinutou počítačovou aplikaci.

Kapitola sedmá je realizační. Pojednává o verifikaci implementovaného numerického modelu v programovacím jazyce C++.

ČÁST V: EXPERIMENTY A VALIDACE MODELU

Kapitola osmá je experimentální. Zabývá se numerickými experimenty s ideálním přímočarým segmentem zelektrizované trysky, jejichž cílem je porozumět jeho chování ve vnějším elektrostatickém poli a rovněž virtuálními experimenty, jejichž cílem je porozumění vlivu vstupních parametrů modelu na trajektorii elektricky nabitě kapalinové trysky.

Kapitola deváta je experimentální. Pojednává o laboratorních experimentech, které sloužily k validaci matematického, resp. numerického, modelu zelektrizované trysky.

ČÁST VI: DISKUSE VÝSLEDKŮ A ZÁVĚR

Kapitola desátá je věnována souhrnu výsledků získaných na základě numerických a virtuálních experimentů, včetně diskuse možných vlivů na tyto výsledky.

Kapitola jedenáctá shrnuje získané poznatky celé disertační práce a možnosti jejich uplatnění v praxi nebo dalším výzkumu.

Příloha A obsahuje publikace autora související s tématem disertační práce.

Příloha B obsahuje pomocné definiční vztahy.

Příloha C obsahuje odvození soustavy obyčejných diferenciálních rovnic v bezrozměrném tvaru.

Příloha D obsahuje softwarovou licenci, pod kterou je uvolněn autorem vyvinutý počítačový program.



Seznámení s řešenou problematikou

1

Elektrostatické zvlákňování

TATO kapitola předkládané disertační práce si klade za cíl, uvést váženého čtenáře do problematiky výroby polymerních nanovláken metodou elektrostatického zvlákňování. První část kapitoly je věnována definici procesu elektrostatického zvlákňování a úvodu do jeho fyzikálních principů. Ve druhé části kapitoly je schematicky znázorněn přehled parametrů, které tento proces ovlivňují.

1.1 Princip elektrostatického zvlákňování

Elektrostatické zvlákňování je proces, při kterém jsou polymerní nanovláčka sub-mikronových průměrů formována v případě, že je hemisférická kapka polymerního roztoku [3][4] nebo polymerní taveniny [5][6] vystavena účinkům silného vnějšího elektrostatického pole. Extrémní dloužení a urychlování elektricky nabitě kapalinové trysky [3], ke kterému dochází během letu od zvlákňovací elektrody¹⁾ ke sběrnému kolektoru,³⁾ je založeno na tzv. bičující (ohybové) nestabilitě, jež vede ke spirálovitému pohybu trysky [8][9][12][13]. Tento mechanismus — přestože byl objeven téměř před sto lety — není dosud zcela objasněn [13]. Pravděpodobná příčina vzniku tohoto jevu bude podrobněji vysvětlena na str. 19, odd. 3.5.

Trajektorie elektricky nabitě trysky začíná na povrchu kapaliny, který je často, ale ne nutně omezen kapilárou [9]. V důsledku elektrostatického pole mezi kapilárou a uzemněným kolektorem dochází na povrchu kapaliny k indukovaní elektrického náboje q . Původně hemisférický povrch kapky se v místě ústí kapiláry postupně prodlužuje [14] až dojde — s určitým časovým zpožděním [15] — k výstavbě kónického útvaru, tzv. Taylorova kuželu [16][17]. Dalším zvyšováním elektrického napětí, U_0 , na vysokonapěťovém zdroji dojde k překročení jeho kritické hodnoty U_c a tím i kritické hodnoty elektrické intenzity E_c [15], při které elektrický tlak $p_e = (\epsilon_0 \epsilon_r E^2)/2$, jenž je důsledkem působení elektrostatických sil, překoná tlak kapilární $p_c = \gamma (\mathcal{K}_1 + \mathcal{K}_2)$, kde $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ jsou křivosti [1]. Současně nastane zborcení Taylorova kužele a z jeho vrcholu vytryskne tenký proud kapaliny.

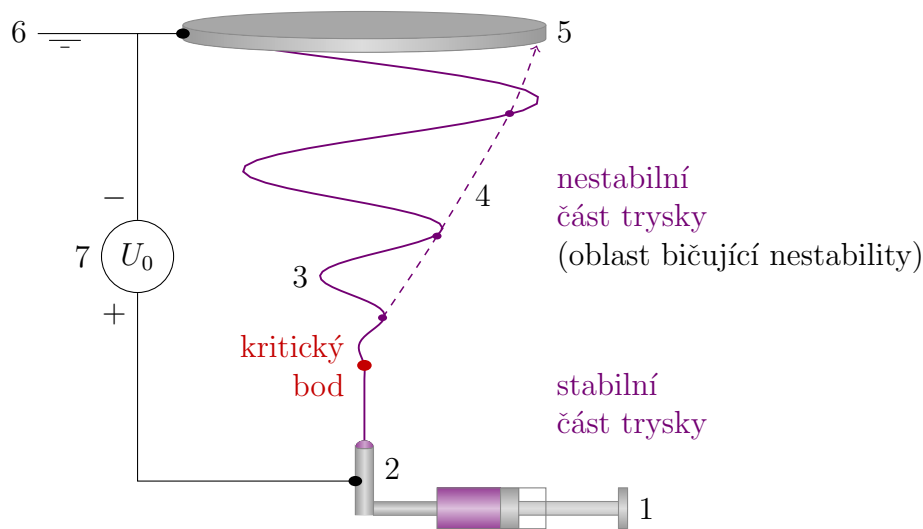
¹⁾ Zvlákňovací elektroda se také často nazývá spinner.

²⁾ Zvlákňovací elektroda je v celé práci tvořena kapilárou.

³⁾ Sběrný kolektor je v celé práci tvořen diskovým uzemněným kolektorem, příp. speciálním drátovým kolektorem.

Tento proud kapaliny tvoří postupně se zužující přímý segment, skrze který pokračuje trajektorie zelektrizované kapalinové trysky. Podle autorů článku [8] je prokázáno, že mechanické normálové napětí σ , jenž je způsobené vnějším elektrostatickým polem, stabilizuje do určité vzdálenosti právě tento přímý úsek trysky. Zmíněná zóna se proto označuje jako stabilní část trysky. (Poznámka: podle autorů článku [18] existuje mezi zborceným Taylorovým kuželem a stabilní částí trysky tzv. „přechodová oblast“, kde se rychlosti přetvoření, $d\varepsilon/dt$, pohybují v rozmezí 100 až 1000 s⁻¹.)

Stabilní část kapalinové trysky postupně přechází v část nestabilní [8], pro kterou je charakteristická zmíněná bičující (ohybová) nestabilita. V této zóně dochází k enormnímu prodloužení zelektrizované kapalinové trysky, což vede ke ztenčování jejího příčného průřezu a zvětšování jejího povrchu. Mezitím dochází k odstranění až 90 % rozpouštědla [19] a téměř suchá polymerní nanovláknna dopadají na sběrný kolektor [14], kde končí trajektorie elektricky nabitě kapalinové trysky.



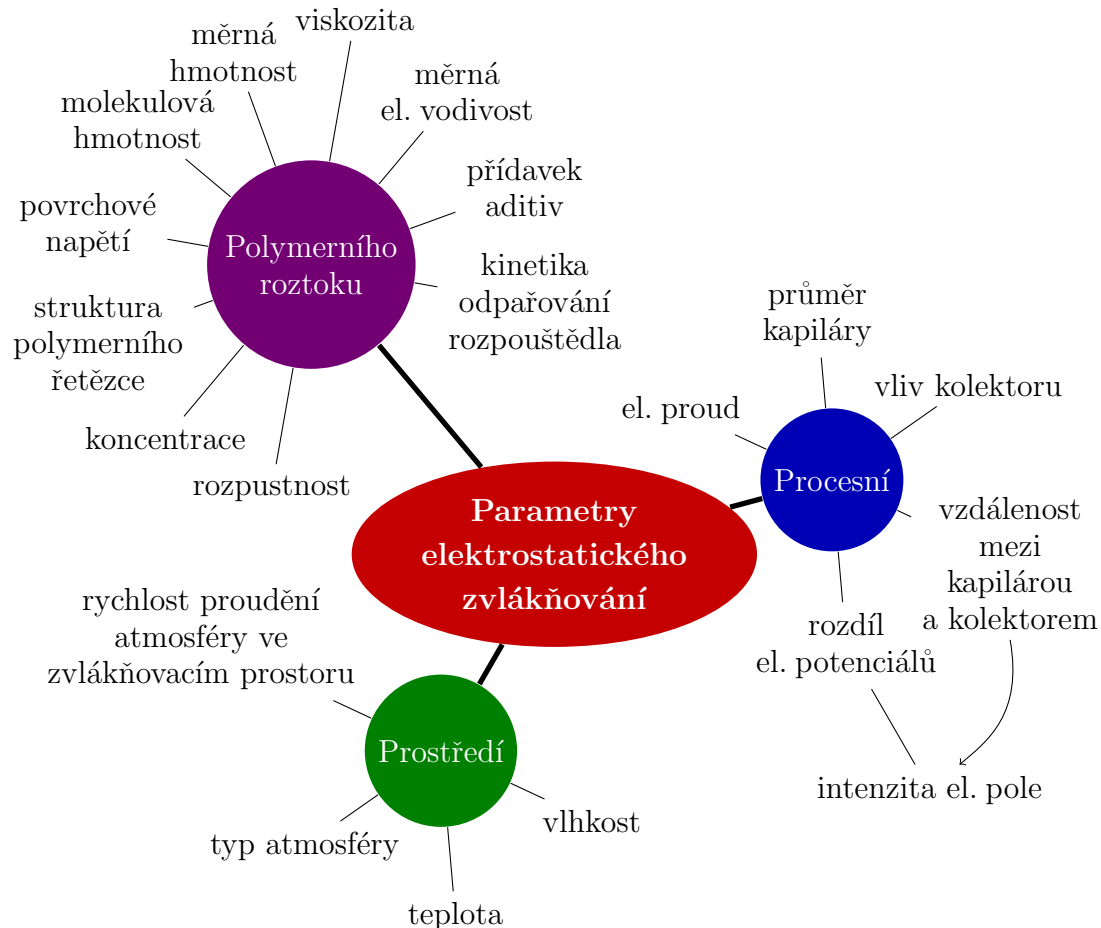
Obr. 1.1: Schema aparatury pro elektrostatické zvlákňování. 1—pumpa pro dávkování polymerního roztoku, 2—kapilára, 3—trajektorie letící elektricky nabitě kapalinové trysky, 4—trajektorie materiálové částice trysky, 5—uzemněný diskový kolektor, 6—uzemnění, 7—vysokonapěťový zdroj.

Na obr. 1.1 je schematicky znázorněna jedna z možných variant uspořádání aparatury pro elektrostatické zvlákňování, kde jako kolektor je použit tenký uzemněný disk. V literatuře (viz např. [20]) jsou popsány další — především speciální — typy kolektorů umožňující cílené ukládání nanovláken. Orientovaná nanovláknna mohou být užitečná například při navrhování scaffoldů pro tkáňové inženýrství [21].

1.2 Parametry ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování

Klíčovým parametrem ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování je zvláknitelnost. Tímto pojmem je často myšlena schopnost polymerního roztoku formovat se do vláken nebo soubor několika fyzikálních a chemických vlastností, které tuto schopnost

ovlivňují [22][23]. Autor zde uvede tento pojem také v souvislosti, která je blíže původnímu významu obvykle používanému ve fyzice a koloidní chemii. Zvláknitelností je označována míra maximálního prodloužení, kterého je kapalina schopna dosáhnout, pokud je podrobena jednoosému tahovému namáhání [23]. Další parametry, které ovlivňují [4][5][22] proces elektrostatického zvlákňování, jsou nejčastěji rozdělovány na procesní, systémové (polymerního roztoku) a okolního prostředí. Tyto parametry jsou schematicky znázorněny na obr. 1.2.



Obr. 1.2: Rozdělení parametrů ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování.

Systémové parametry jsou především charakteristiky zvlákňovaného materiálu. Pokud nedochází ke štěpení primárního kapalinového proudu na sekundární trysky, jedním z nejvýznamnějších systémových parametrů je dynamická viskozita, η , polymerního roztoku, protože ovlivňuje výsledný průměr nanovláken a jeho distribuci [24][25][26]. Procesní parametry mají vliv zejména na utváření nanovláken [22].

Optimální hodnoty parametrů procesu elektrostatického zvlákňování je potřeba stanovit individuálně pro každý zvlákňovaný polymerní roztok. Na str. 53, tab. 5.1, jsou pro představu uvedeny řádové rozsahy, ve kterých se pohybují hodnoty některých¹⁾ parametrů ovlivňující elektrostatické zvlákňování.

¹⁾ Uvedeny jsou pouze parametry, které jsou vstupem do matematického, resp. numerického, modelu.

2

Přehled současného stavu řešené problematiky

PROBLEMATIKA bičující nestability i celého procesu elektrostatického zvlákňování je středem zájmu řady výzkumných pracovišť po celém světě. Nedávné experimenty ukázaly, že nezbytným mechanismem elektrostatického zvlákňování je rychlé bičování kapalinové trysky [12]. Tato kapitola seznamuje čtenáře s nalezenými informačními zdroji z oblasti tématu předkládané disertační práce.

Zdroje vysvětlující bičující (ohybovou) nestabilitu prostřednictvím matematického modelu

FENG se ve svém článku [3] odkazuje na práci autorů Hohmana a jeho kolektivu [12], kteří navrhli elektrohydrodynamický model elektrostatického zvlákňování newtonovských kapalinových trysek. Nicméně uvádí, že může nastat problém s okrajovou podmínkou předepsanou pro plošnou hustotu náboje, q_σ , na hranici kapiláry. Pokud je počáteční plošná hustota náboje nulová nebo velmi malá, zelektrizovaná kapalinová tryska se ihned za ústím kapiláry vyboulí do bičující nestability, ale k tomu ve skutečnosti nikdy nedochází. Proto ve svém článku nejprve popsal nepatrně odlišný model newtonovských kapalinových trysek, jenž se takové nestabilitě vyvaruje. Řešení se chovají „rozumně“, neboť nejsou — kromě tenké „mezni vrstvy“ na kapiláře — citlivá vzhledem k počáteční plošné hustotě náboje. Autor následně zavedl do modelu vztah pro neneutronovskou (zdánlivou)¹⁾ viskozitu a zkoumal její efekty. Výsledky ukazují na dva odlišné režimy dloužení: (1) „mírné dloužení“ a (2) „silné dloužení“. Feng na závěr použil empirický vztah pro simulování deformačního zpevnění typických polymerních kapalin, které má za následek výrobu silnějších vláken.

HAN, YARIN A RENEKER ve společném článku [18] představují novou metodu charakterizace podélně namáhaných viskoelastických trysek při elektrostatickém zvlákňování tavenin a koncentrovaných nebo částečně zředěných polymerních roztoků. V případě 6% vodného roztoku poly(ethylen oxidu) (PEO) naměřili autoři mechanické normálové napětí σ na počátku tenkého proudu v řádu stovek kPa, což je o dva řády více než u jiných viskoelastických trysek vytékajících z ústí kapiláry. Tento nesoulad

¹⁾ Neneutronovská viskozita není materiálovou konstantou, ale závisí na rychlosti přetvoření $d\varepsilon/dt$ nebo tečném napětí.

je přičítán podélnému dlužení polymerních kapalin v tzv. „přechodové oblasti“ mezi zborceným Taylorovým kuželem a počátkem oblasti tenkého kapalinového proudu, kde se rychlosti přetvoření, $d\varepsilon/dt$, pohybují v rozmezí 100 až 1 000 s⁻¹. Rousovy¹⁾ relaxační časy polymerního roztoku byly naměřeny v rozsahu 3 až 8 ms a Youngův modul pružnosti, E , byl řádově 100 Pa. Autoři předkládají nové důvody vysvětlující vytváření přímých úseků elektrostatičticky zvlákněných trysek. Přímé úseky jsou stabilizovány velkým počátečním mechanickým normálovým napětím, σ_0 , uvnitř elektricky nabitě kapalinové trysky, které je vyvoláno v důsledku silného elektricky podmíněného dlužení v přechodové oblasti. Další elektricky podmíněné dlužení kapalinové trysky (po přechodové oblasti) je poměrně slabé a převažuje Rousova viskoelastická relaxace. Tahové napětí, σ , uvnitř elektricky nabitě kapalinové trysky se vlivem aplikovaného elektrického napětí, U_0 , zvyšuje (vytváří se větší počáteční normálové napětí σ_0 v přechodové oblasti), a proto by se měla délka přímého úseku kapalinové trysky prodlužovat se zvyšujícím se elektrickým napětím U_0 . Výsledky autorů také poukazují na příležitost vyvinout nový reometr pro koncentrované polymerní roztoky s rychlostmi přetvoření $d\varepsilon/dt$ v rozsahu 100 až 1 000 s⁻¹. To ukazuje míru mechanické normálového napětí σ podél kapalinového proudu a umožňuje vyhodnocení Rousova relaxačního času, Youngova modulu pružnosti E a dynamické viskozity η .

HOHMAN A KOLEKTIV publikovali sérii článků, ve kterých analyzovali mechanismus bičující nestability tím, že studovali nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky s rostoucí intenzitou, \mathbf{E} , vnějšího elektrostatičtického pole. Ve svém prvním článku [12] vyvinuli asymptotickou aproximaci rovnic elektrohydrodynamiky, proto aby mohli provést kvalitativní srovnání s experimenty. Rozpoznali tři různé typy nestabilit: (1) klasickou osově souměrnou Rayleighovu nestabilitu, (2) osově souměrnou vyvolanou vnějším elektrostatičtickým polem a (3) ohybovou (bičující) nestabilitu. S rostoucí intenzitou, \mathbf{E} , elektrostatičtického pole zesilují elektrické nestability, zatímco Rayleighova nestabilita je potlačena. Jaká nestabilita bude dominovat silně závisí na plošné hustotě náboje q_σ a poloměru křivosti zelektrizované kapalinové trysky. Fyzikální mechanismy nestability jsou autory také diskutovány.

Ve svém druhém článku [28] používají HOHMAN A KOLEKTIV již odvozenou teorii stability a na jejím základě vybudovali metodu pro kvantitativní odhad, kdy dojde k elektrostatičtickému zvláknování. Nejprve je vypočítána plošná hustota náboje q_σ a tvar stabilní části trysky, který se ztenčuje s rostoucí vzdáleností od kapiláry. Následně je tato informace kombinována s analýzou stability. V závislosti na experimentálních parametrech je předpovídáno chování elektricky nabitě kapalinové trysky a jsou vytvořeny pracovní diagramy (závislosti intenzity, \mathbf{E} , elektrostatičtického pole na objemovém průtoku, Q_V , polymerního roztoku kapilárou), kdy dochází k elektrostatičtickému zvláknování. Předpovědi jak se mění režimy elektrostatičtického zvláknování, jsou prezentovány jako funkce měrné elektrické vodivosti κ a dynamické viskozity η .

KOWALEWSKI, BLONSKI A BARRAL společně ve své studii [13] shromáždili experimentální data, prostřednictvím kterých si kladli za cíl charakterizovat elektrostatičtické zvláknování různých kapalin a navrhnout vhodný teoretický model, který by umož-

¹⁾ Rousův relaxační čas je definován vztahem viz např. [27, rov. (41)].

ňoval — aniž by došlo ke ztrátě přesnosti a stability — používat libovolně hrubou i jemnou výpočetní síť. Většina modelů elektrostatického zvlákňování je formulována tak, že se předpokládá $l \gg d$, tedy podélný rozměr mnohem větší než příčný. Tyto modely jsou z důvodu elektrostatických interakcí nevhodné, pokud je diskretizace buď příliš hrubá nebo naopak příliš jemná. Autoři představují robustní numerické metody, jejichž podstata je založena na hierarchickém shlukování náboje, které výrazně snižují výpočetní časy. Nakonec implementovali metodu hraničních prvků, kterou používají k výpočtu elektrostatických interakcí kapalinové trysky se sebe samou a s elektrodami. Tím je zaručeno splnění pevné okrajové podmínky pro konstantní elektrostatický potenciál φ , což umožňuje vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace.

RENEKER A KOLEKTIV ve svém článku [8] analyzují příčiny ohybové nestability, které jsou vysvětlovány pomocí matematického modelu. Součástí článku je také reologický model polymerního roztoku, který umožňuje brát v úvahu i viskoelastické chování kapalinové trysky. Autoři prokázali, že mechanické normálové napětí σ způsobené vnějším elektrostatickým polem působícím na přenášený náboj q , stabilizuje do určité vzdálenosti přímý směr elektricky nabitě kapalinové trysky. Potom příčné perturbace rostou v reakci na odpuzující síly mezi sousedními elementy nesoucími náboj, q , kapalinové trysky. Pohyb segmentů trysky v důsledku elektricky podmíněné ohybové nestability rychle roste. Autoři vypočítali trajektorii kapalinové trysky a to jak v oblasti, kde je tryska téměř přímá a kde nestabilita není pozorovatelná, tak i v oblasti, kde dominuje bičující nestabilita. Matematický model poskytl přiměřenou shodu s experimentálními daty, zejména trajektorií elektricky nabitě kapalinové trysky určenou pozorováním vysokorychlostní kamerou.

YARIN, KOOMBHONGSE A RENEKER v článku [10] vyvinuli lokální aproximaci pro výpočet ohybové elektrické síly působící na zelektrizovanou kapalinovou trysku, která je klíčovým prvkem při vytváření nanovláken elektrostatickým zvlákňováním. Pomocí této síly byla vypracována dalekosáhlá analogie mezi elektricky podmíněnou ohybovou nestabilitou a aerodynamicky podmíněnou nestabilitou. Odvodili quasi-jednodimenzionální parciální diferenciální rovnice pro předpověď velikosti růstu malých, elektricky podmíněných ohybových perturbací z kapalných sloupců. Diskretizovaný tvar těchto rovnic, který bere v úvahu odstraňování rozpouštědla a tuhnutí polymerního roztoku, použili na výpočet trajektorie elektricky nabitě kapalinové trysky v průběhu bičující nestability vedoucí k tvorbě velké smyčky a výsledných nanovláken. Výsledky výpočtů jsou autory porovnány s experimentálními daty získanými v jejich práci.

ZENG, YANG A YU ve své práci [29] nevysvětlují bičující nestabilitu elektricky nabitě kapalinové trysky ani proces elektrostatického zvlákňování, ale zabývají se modelováním pohybu vlákna, které je unášeno proudem vzduchu o vysoké rychlosti. Pro simulování pohybu vlákna navrhli matematický model založený na hmotných bodech a pružných tyčinkách. Tento model zahrnuje vliv Youngova modulu pružnosti E a ohybové tuhosti EJ , a tak umožňuje popsat pružnost a ohyb vlákna. Kombinací Eulerova a Lagrangeova přístupu odvodili rovnice, kterými modelovali pohyb vlákna v odporovém prostředí vzduchu. Oboustranná vazba je zavedena tak, aby dávala jasnější pochopení interakce mezi vláknem a vzduchem. Navržený model je používán v textilním průmyslu k simulování pohybu vlákna ve vzduchovém tkacím stroji.

Zdroje zabývající se parametry ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování

RENEKER A YARIN ve svém článku [9] popisují vývoj trajektorie elektricky nabitě kapalinové trysky. Řízením procesu připravili vlákna s průměry několika nanometrů a s různými tvary příčných průřezů. Přísady do zvlákňovaného polymerního roztoku jako jsou chemická činidla, další polymery, dispergované částice, bílkoviny nebo životaschopné buňky, měly za následek vmísení přidaného materiálu do nanovláken. Následné úpravy nanovláken jako slepování, chemické zpracování povrchů a tepelné zpracování rozšiřují využitelnost těchto nanomateriálů.

THERON, ZUSSMAN A YARIN představují svojí práci [4] o elektrostatickém zvlákňování, ve které měřili závislost různých parametrů na elektrickém proudu I a objemové, q_ρ , i plošné, q_σ , hustotě náboje v kapalinové trysce. Dynamická viskozita η , povrchové napětí γ , relaxační čas $\tau = \eta/E$, elektrická vodivost κ a permitivita ε_{TP} polymerního roztoku byly měřeny stejným způsobem. Za tímto účelem připravili různé polymerní roztoky, např. poly(ethylen oxidu) (PEO), polyakrylové kyseliny (PAA), polyvinylalkoholu (PVA), polyuretanu (PU) a polykaprolaktonu (PCL), které byly elektrostaticky zvlákňeny. Sledovanými řídicími parametry byly: aplikované elektrické napětí U_0 , objemový průtok, Q_V , roztoku, hmotnostní koncentrace polymeru, molekulová hmotnost polymeru, vzdálenost, h , zvlákňovací elektrody od uzemněného kolektoru a u některých polymerních roztoků také koncentrace ethanolu.

THERON A KOLEKTIV ve svém článku [7] uvádějí, že působící elektrické síly jsou hlavním faktorem odpovědným za charakteristiku trajektorie elektricky nabitě kapalinové trysky a její dloužení při elektrostatickém zvlákňování. Jejich práce referuje o výsledcích experimentů a modelování vícenásobných kapalinových trysek vznikajících během elektrostatického zvlákňování polymerních roztoků. Konfigurace vnějšího elektrostatického pole mezi elektrodami byla stejná jak u lineárního, tak u nelineárního Maxwellova reologického modelu, který autoři použili k popisu viskoelastického chování kapalinové trysky. Výsledky ukazují, jak vnější elektrostatické pole a vzájemné elektrické interakce ovlivňují trajektorii elektricky nabitě kapalinové trysky a její vývoj v průběhu elektrostatického zvlákňování.

Zdroje zabývající se štěpením primární kapalinové trysky

FILATOV A KOLEKTIV popisují ve své monografii [30, odd. 1.2.3] štěpení primární kapalinové trysky jako druhotný mechanismus elektrostatického zvlákňování. Může být snadno ukázáno — s použitím řešení quasi-jednodimenzionální rovnice elektrohydrodynamiky — že ani kapalina proudící za ustálených podmínek, nemůže být v příčném směru považována za stabilní. Je to proto, že záporný tlak ponderomotorické síly na jejím povrchu je zákonitě vyrovnán a vysoce převyšuje kapilární sílu v její zbývající části. Nicméně, i takové perturbace nepovedou okamžitě ke zlomu kapalinové trysky, za prvé proto, že jediný možný mechanismus potřebný k tomuto účelu je Rayleighova nestabilita, jež je výrazně oslabena elektrickým tlakem p_e , který je mnohem vyšší než kapilární p_c a za druhé proto, že příchod tohoto mechanismu „do hry“ prostřednictvím stále rostoucích samooscilací kapaliny vyžaduje mnohem více času než podélné

zrychlení trysky. Tato situace se však podstatně změní poté, jakmile se kapalinová tryska následně stočí ve směru siločár aplikovaného vnějšího elektrického pole. V tomto případě se významný spirálovitý pohyb trysky stane dostatečným důvodem pro rozštěpení primární trysky podél její osy a následné formování větvící struktury s čím dál štíhlejšími a přibližně shodnými páry sekundárních trysek. Štěpení primární kapalinové trysky může v principu pokračovat dokud rostoucí kapilární tlak, p_c , na povrchu sekundárních trysek bude v rovnováze s elektrickým tlakem p_e , nebo dokud kapalinová tryska neztuhne do vlákna po odstranění rozpouštědla. Autoři uvádějí, že štěpení primární trysky zvlákněvaného polymerního roztoku zlepšuje průběh elektrostatického zvláknění a má významný vliv na výsledné vlastnosti vzniklých nanovláken. Na základě experimentálně získaných minimálních a maximálních průměrů vláken tvrdí, že poměr maximálního a minimálního průměru je roven $2^{n/2}$, kde n odpovídá postupnému rozštěpení kapalinové trysky do dvou sekundárních trysek stejného objemu. Ukazují, že se hodnota n zvyšuje s objemovým průtokem, Q_V , od 2 do 5. Za zmínku stojí také poznamenat, že štěpení je náhodný proces a je doprovázený redistribucí elektrického náboje podél vznikajících sekundárních trysek. V závěru oddílu je uveden důkaz založený na porovnání kinetické energie primární kapalinové trysky s elektrickou energií dodanou do systému, o který autoři opírají své tvrzení. Poukazují na přebytek energie i při 100% účinnosti procesu, zatímco ve skutečnosti je účinnost mnohem nižší, protože část energie musí být vynaložena na překonání vnitřního tření v kapalinové trysce a pro její nabíjení. Výsledkem důkazu je, že tento paradox lze snadno odstranit pomocí mechanismu postupného štěpení primární kapalinové trysky na n -párů sekundárních trysek, jejichž rychlost se postupně snižuje o faktor 2^n . (Pro účinnost procesu více než 3 % uvádějí hodnotu $n = 4.28$.)

RENEKER A YARIN ve svém článku [9] popisují zkušenosti se štěpením primární kapalinové trysky při elektrostatickém zvláknění 15% roztoku PCL v acetonu. Roztok byl zvlákněn při rozdílu elektrických potenciálů 10 kV. Vzdálenost mezi pipetou a kolektorem byla 70 mm. Štěpení pozorovali častěji u koncentrovanějších a viskóznějších roztoků, a při hodnotách intenzity, E , elektrostatického pole, jež byly vyšší než hodnota kritické intenzity E_c , která je požadována k vytvoření jedné trysky. Ohýbání a štěpení začalo již při krátké vzdálenosti od ústí pipety. Zajímavé štěpení pozorovali na tryskách z roztoků polyetherimidu (PEI) v těkavém rozpouštědle, které měly tendenci tvorbě krusty v místě rozštěpení primární kapalinové trysky.



Matematický model

3

Model přímočarého segmentu elektricky nabitě trysky

MATEMATICKÝ model předkládaný v této kapitole vychází z myšlenky modelu od Renekera a Yarina (viz např. [6][8][9]), a také z modelu od Zenga, Yanga a Yua (viz např. [29]). Klíčovým atributem celého modelu je ideální přímočarý segment elektricky nabitě kapalinové trysky, tzv. „viskoelastická činka“. Obsahem kapitoly je proto analýza tohoto segmentu, odvození obyčejných diferenciálních rovnic popisujících jeho dynamiku i fyzikální vlastnosti včetně existence a jednoznačnosti řešení.

3.1 Aproximační předpoklady modelu

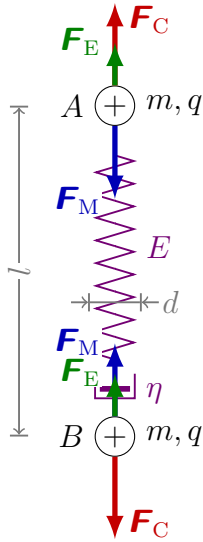
Matematický model elektricky nabitě kapalinové trysky byl odvozen za následujících aproximačních předpokladů:

- elektrostatické zvlákňování je realizováno z kapiláry;
- kapalinová tryska je diskretizována jednodimenzionálními přímočarými segmenty založenými na idealizaci štíhlým tělesem, tj. podélný rozměr mnohem větší než příčný průřez, umožňující přenášet pouze osovou sílu;¹⁾
- hmotnostní tok rozpouštědla mezi kapalinovou tryskou a okolním prostředím je popsán prvním Fickovým zákonem;
- viskoelastické chování zvlákňovaného polymerního roztoku je popsáno nelineárním Maxwellovým reologickým modelem;
- zvlákňovaný polymerní roztok obsahuje pouze vázané náboje a jejich transport je daný pouze tokem kapalinové trysky;
- počáteční perturbace kapalinové trysky je simulována harmonickými kruhovými kmity s náhodně generovaným šumem, jenž jsou aplikovány na nově přidaný nabitý hmotný bod trysky;
- vnější elektrostatické pole generované kapilárou a sběrným kolektorem bylo vypočteno nezávisle na bičující elektricky nabitě kapalinové trysce, tj. tvar pole není ovlivněn náboji na kapalinové trysce;
- není uvažováno s bifurkačními řešeními, tj. rozštěpení primárního proudu kapaliny na sekundární trysky.

¹⁾ Ideální přímočarý segment trysky je analogií prutu známého z mechaniky tuhých těles.

3.2 Ideální přímočarý segment kapalinové trysky

Ideální přímočarý segment zelektrizované trysky se sestává ze dvou nabitých hmotných bodů A a B , které jsou vzájemně propojeny reologickými prvky (viz obr. 3.1). Zvolené reologické prvky a jejich spojení odpovídá Maxwellovu modelu, který byl použit k modelování viskoelastického chování zvlákňovaného polymerního roztoku.



Obr. 3.1: Silový rozbor ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. η —dynamická viskozita, d —okamžitý průměr, l —okamžitá délka, m —okamžitá hmotnost, q —vázaný náboj, E —Youngův modul pružnosti, F_C —elektrostatická síla, F_E —síla vnějšího elektrostatického pole, F_M —viskoelastická síla. Tíhovou sílu je možné v silovém rozboru zanedbat.

3.3 Úbytek rozpouštědla z kapalinové trysky

Úbytek hmotnosti rozpouštědla v důsledku jeho vypařování — a s tím spojené tuhnutí elektricky nabitě kapalinové trysky — je důležitým efektem během procesu elektrostatického zvlákňování. Tento děj, při němž dochází k transportu rozpouštědla mezi kapalinovou tryskou a prostředím zvlákňovacího prostoru, lze matematicky vyjádřit prvním Fickovým zákonem (viz např. [31]), který má pro hmotnostní tok tvar

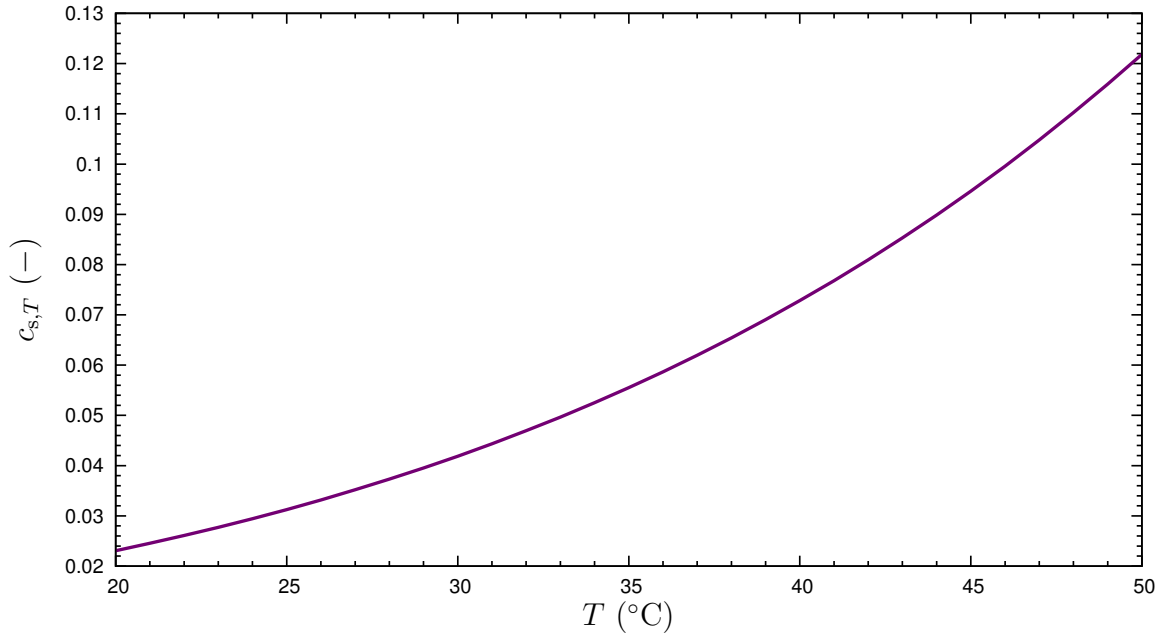
$$\frac{dm_s}{dt} = h_m S \rho (c_{s,eq} - c_{s,\infty}) = h_m \pi d l \rho (c_{s,eq} - c_{s,\infty}), \quad (1)$$

kde dm_s/dt je hmotnostní tok rozpouštědla, h_m je součinitel přestupu hmoty při vypařování rozpouštědla, ρ je měrná hmotnost zvlákňovaného polymerního roztoku, $c_{s,eq}$ je rovnovážná koncentrace¹⁾ nasycených par rozpouštědla při teplotě, T , ve zvlákňovacím prostoru a $c_{s,\infty}$ je koncentrace nasycených par rozpouštědla v blízkosti kapalinové trysky, která je rovna relativní vlhkosti, ψ , ve zvlákňovacím prostoru.

¹⁾ Pro vodu jako rozpouštědlo lze v literatuře [32] najít doporučený vztah pro výpočet koncentrace nasycených par v závislosti na teplotě

$$c_{s,eq} = \frac{p_{sat}}{p_{STD}} = \frac{1}{1013.25} \left[a_0 + T \left(a_1 + T \left(a_2 + T \left(a_3 + T \left(a_4 + T \left(a_5 + a_6 T \right) \right) \right) \right) \right) \right],$$

kde $p_{STD} = 101.325$ kPa je standardní tlak, p_{sat} je saturační tlak (mbar), T je okolní teplota ($^{\circ}\text{C}$), $a_0 = 6.107799961$, $a_1 = 4.436518521 \times 10^{-1}$, $a_2 = 1.428945805 \times 10^{-2}$, $a_3 = 2.650648731 \times 10^{-4}$, $a_4 = 3.031240396 \times 10^{-6}$, $a_5 = 2.034080948 \times 10^{-8}$ a $a_6 = 6.136820929 \times 10^{-11}$. Koncentrace nasycených par při rovnovážném stavu je v závislosti na teplotě ve zvlákňovacím prostoru vykreslena na obr. 3.2.



Obr. 3.2: Koncentrace nasycených par při rovnovážném stavu v závislosti na teplotě ve zvlákňovacím prostoru.

Sherwoodovo číslo (viz např. [31]) pro přestup rozpouštědla kapalinovou tryskou je definováno vztahem

$$\text{Sh} = \frac{h_m d}{\mathcal{D}_{s,a}}, \quad (2)$$

a také vztahem [33, rov. (12)]

$$\text{Sh} = \text{konst. Re}^a \text{Sc}^b, \quad (3)$$

kde $\mathcal{D}_{s,a}$ je binární koeficient difúze rozpouštědla do vzduchu, Re, Sc jsou Reynoldsovo, resp. Schmidtovo, číslo a a , b jsou exponenty. V článku [10] jsou uvedeny následující hodnoty: konst. = 0.495, $a = 1/3$ a $b = 1/2$. Jejich dosazením do (3) a následnou substitucí do (2) je součinitel přestupu hmoty při vypařování rozpouštědla roven

$$h_m = \frac{0.495 \text{Re}^{\frac{1}{3}} \text{Sc}^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{s,a}}{d}. \quad (4)$$

Dosazením (4) do (1) se dostane přepsaný první Fickův zákon pro hmotnostní tok rozpouštědla mezi kapalinovou tryskou a prostředím zvlákňovacího prostoru

$$\frac{dm_s}{dt} = 0.495 \text{Re}^{\frac{1}{3}} \text{Sc}^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{s,a} \pi l \rho (c_{s,\text{eq}} - c_{s,\infty}),$$

kde definice kritériálních čísel jsou: $\text{Re} = (\rho_a l v)/\eta_a$ a $\text{Sc} = \eta_a/(\rho_a \mathcal{D}_{s,a})$. Po úpravě

$$\frac{dm_s}{dt} = 0.495 \nu_a^{\frac{1}{6}} l^{\frac{4}{3}} v^{\frac{1}{3}} \mathcal{D}_{s,a}^{\frac{1}{2}} \pi \rho (c_{s,\text{eq}} - c_{s,\infty}), \quad (5)$$

kde $\nu_a = \eta_a/\rho_a$ je kinematická viskozita vzduchu.

Pro počáteční hmotnost kapalinové trysky platí jednoduchá rovnice

$$m_0 = m_p + m_{s0},$$

kde hmotnost polymeru je

$$m_p = c_{p0} \rho V_0 = c_{p0} \rho \frac{\pi}{4} d_0^2 l_0$$

a počáteční hmotnost rozpouštědla je

$$m_{s0} = (1 - c_{p0}) \rho V_0 = (1 - c_{p0}) \rho \frac{\pi}{4} d_0^2 l_0,$$

kde c_{p0} je počáteční hmotnostní koncentrace polymeru ve zvlákňovaném roztoku, d_0 je počáteční průměr segmentu kapalinové trysky a l_0 je jeho počáteční délka.

Okamžitá hmotnostní koncentrace polymeru v kapalinové trysce je

$$c_p = \frac{m_p}{m} = \frac{m_p}{m_p + m_s}, \quad (6)$$

kde m_s je okamžitá hmotnost rozpouštědla v kapalinové trysce vypočtená ze vztahu (5). Okamžitý relaxační čas, τ , polymerního roztoku je úměrný jeho okamžité hmotnostní koncentraci c_p [10, rov. (38)]. Tedy

$$\frac{\tau}{\tau_0} = \frac{c_p}{c_{p0}},$$

kde τ_0 je počáteční relaxační čas zvlákňovaného polymerního roztoku.

Okamžitý relaxační čas polymerní kapalinové trysky je z předchozí rovnice

$$\tau = \frac{\tau_0}{c_{p0}} c_p. \quad (7)$$

Okamžitá dynamická viskozita η je funkcí koncentrace zvlákňovaného polymerního roztoku. V monografii [23, str. 32] je uveden empirický vztah, který platí pro mnoho roztoků

$$\log_{10} \eta = A + B c_p^m, \quad (8)$$

kde A , B jsou konstanty a m je (na tomto místě) exponent. Pro některé roztoky bylo nalezeno $m = 0.5$, zatímco pro jiné bylo $m = 1$ [23]. Autoři [10] uvádějí rozsah hodnot pro exponent $m = 0.1$ až 1. Konstanta A není důležitá, pokud je známa počáteční hodnota dynamické viskozity, η_0 , jenž je použita pro škálování [10]. Odlogaritmováním (8) se dostane vztah pro okamžitou dynamickou viskozitu polymerní kapalinové trysky

$$\eta = 10^{B c_p^m}, \quad (9)$$

kde konstanta B může být odhadnuta ze vztahu (8) s dosazenými počátečními hodnotami dynamické viskozity η_0 a hmotnostní koncentrace polymeru c_{p0}

$$B = \frac{\log_{10} \eta_0}{c_{p0}^m}. \quad (10)$$

Vztahy (7) a (9) popisují změnu materiálových vlastností elektricky nabitě kapalinové trysky během jejího letu od zvlákňovací elektrody ke sběrnému kolektoru, kdy dochází vlivem úbytku rozpouštědla k procesu tuhnutí. V návaznosti na výše uvedené byl odvozen nelineární Maxwellův reologický model, o kterém bude pojednávat následující oddíl 3.4.

3.4 Viskoelastické chování kapalinové trysky

Zvláknovaný polymerní roztok se chová jako viskoelastická (maxwellovská) kapalina, proto byl pro modelování odezvy materiálu na vnější zatížení použit Maxwellův reologický model (viz např. [34]). Předkládaný reologický model popisuje nelineární viskoelasticitu a je reprezentován sériovým zapojením nelineární pružiny, tzv. Hookeova prvku, a nelineárního viskózního tlumiče, tzv. Newtonova prvku. Protože jsou u tohoto modelu reologické prvky spojeny v sérii, jsou mechanická normálová napětí, σ , v obou prvcích a tedy celém modelu stejná¹⁾

$$\sigma = \sigma_H = \sigma_N,$$

kde σ_H , σ_N jsou normálové napětí v Hookeově, resp. Newtonově, prvku.

Celková deformace ε je rovna součtu elastické a viskózní složky deformace

$$\varepsilon = \varepsilon_H + \varepsilon_N$$

a taktéž se sčítají jejich rychlosti přetvoření

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\varepsilon_H}{dt} + \frac{d\varepsilon_N}{dt}, \quad (11)$$

kde ε_H , ε_N jsou deformace Hookeova, resp. Newtonova, prvku a $d\varepsilon_H/dt$, $d\varepsilon_N/dt$ jsou rychlost přetvoření Hookeova, resp. Newtonova, prvku.

Elastická deformace Hookeova prvku je dána vztahem

$$\varepsilon_H = \frac{\sigma}{E} \quad (12)$$

a rychlost přetvoření Newtonova prvku vztahem

$$\frac{d\varepsilon_N}{dt} = \frac{\sigma}{\eta}, \quad (13)$$

kde E je okamžitý Youngův modul pružnosti a η je okamžitá dynamická viskozita polymerního roztoku vypočtená ze vztahu (9).

Derivováním vztahu (12) podle času a substitucí společně se vztahem (13) do rovnice (11) se dostane konstitutivní rovnice Maxwellova reologického modelu pro celkovou rychlost přetvoření

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{E} \frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\eta}. \quad (14)$$

Přenásobením předchozí rovnice okamžitou dynamickou viskozitou η a použitím vztahu (104) pro výpočet rychlosti přetvoření pro velké deformace segmentu trysky, je časová derivace mechanického normálového napětí, σ , z rovnice (14) rovna

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\eta}{\tau} \frac{dl}{dt} - \frac{\sigma}{\tau}, \quad (15)$$

kde $\tau = \eta/E$ je okamžitý relaxační čas polymerního roztoku vypočtený ze vztahu (7) a l je okamžitá délka ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky.

¹⁾ Dynamické účinky se u reologických modelů neuvažují.

3.5 Bičující nestabilita kapalinové trysky

Příčina bičující nestability může být vysvětlena následujícím způsobem. V lokálních souřadnicích, které se pohybují společně s elektricky nabitou kapalinovou tryskou, je možné její vázané náboje považovat za statickou soustavu souhlasně nabitých bodových nábojů, která je ovlivňována především elektrostatickými silami, \mathbf{F}_C , tj. bez vnějšího elektrostatického pole. Podle Earnshawovy věty (viz např. [35, str. 107]) nemůže být taková soustava ve stabilní rovnováze. Pro ilustraci mechanismu bičující nestability, jenž je relevantní v souvislosti s elektrostatickým zvlákňováním, jsou uvažovány tři hmotné body A , B a C , každý s vázaným nábojem q a původně umístěné v ose trysky [viz obr. 3.3(a)]. Jestliže dojde v důsledku příčné perturbace k vychýlení nabitěho hmotného bodu B o vzdálenost δ do místa B' , výslednice elektrostatických odpuzujících sil, \mathbf{F}_{VC} , má tendenci k dalšímu vzdalování tohoto bodu od své původní polohy, tzv. labilní rovnováha. Růst malých ohybových perturbací je charakterizován výchylkou δ . Na základě rozboru sil působících na nabitý hmotný bod B v místě B' [viz obr. 3.3(a)], je možné — podle druhého Newtonova zákona — sestavit pohybovou¹⁾ rovnici ve směru příčné perturbace, tj. ve směru kolmém na zvlákňovací linii

$$m \frac{d^2\delta}{dt^2} = |\mathbf{F}_{VC}| = 2 |\mathbf{F}_C| \cos \theta.$$

Předchozí obyčejná diferenciální rovnice je druhého řádu, lze ji však přepsat na dvě diferenciální rovnice prvního řádu. Tedy

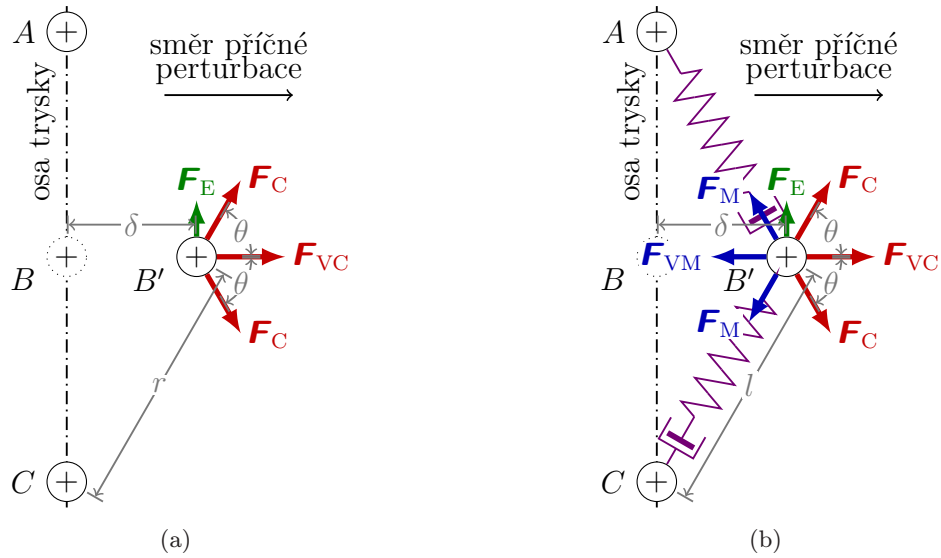
$$\frac{d\delta}{dt} = v, \quad (16)$$

$$m \frac{dv}{dt} = \frac{q^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{\delta}{r^3}, \quad (17)$$

kde m , q , v jsou hmotnost, resp. náboj, resp. velikost okamžité rychlosti hmotného bodu B , ϵ_0 je permitivita vakua, ϵ_r je relativní permitivita prostředí, δ je výchylka ve směru příčné perturbace a r je (na tomto místě) okamžitá vzdálenost mezi náboji BA , resp. BC , v místě B' . Přibližné řešení rovnic (16) a (17) je hledáno numericky (viz str. 64, odd. 8.1). Podle autorů článků [6][8] je tento mechanismus zodpovědný za bičující nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky při elektrostatickém zvlákňování.

Pokud jsou nabitě hmotné body A , B a C vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 3.3(b)], výslednice viskoelastických sil, \mathbf{F}_{VM} , má tendenci vyrovnávat nestabilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami \mathbf{F}_C . Pro velmi tenké kapalinové trysky je možné — v porovnání se stabilizujícím efektem viskoelastických sil \mathbf{F}_M — zanedbat vliv smykové (posouvající) síly vztahující se k ohybové tuhosti, tj. součinu EJ , kde $J = (\pi d^4)/64$ je kvadratický moment plochy kruhového průřezu. Jestliže jsou elektrostatické odpuzující síly větší než viskoelastický odpor, $\mathbf{F}_{VC} > \mathbf{F}_{VM}$, růst bičující nestability je nyní zbrzděn právě viskoelastickým odporem [6] zvlákňovaného polymerního roztoku. Na základě rozboru sil, jež působí na nabitý hmotný bod B v místě B' [viz obr. 3.3(b)], lze podle druhého Newtonova zákona napsat

¹⁾ Ve smyslu klasické mechaniky.



Obr. 3.3: Silový rozbor vysvětlující pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability elektricky nabité trysky. δ —výchylka perturbace, θ —úhel, l —okamžitá délka, \mathbf{F}_C —elektrostatická síla, \mathbf{F}_E —síla vnějšího elektrostatického pole, \mathbf{F}_M —viskoelastická síla, \mathbf{F}_{VC} —výslednice elektrostatických sil, \mathbf{F}_{VM} —výslednice viskoelastických sil.

pohybovou rovnicí ve směru příčné perturbace

$$m \frac{d^2 \delta}{dt^2} = |\mathbf{F}_{VC}| - |\mathbf{F}_{VM}| = 2 |\mathbf{F}_C| \cos \theta - 2 |\mathbf{F}_M| \cos \theta.$$

Přepsáním na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu se dostane

$$\frac{d\delta}{dt} = v, \quad (18)$$

$$m \frac{dv}{dt} = \frac{q^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{\delta}{l^3} - \frac{1}{2} \pi d^2 \sigma \frac{\delta}{l}, \quad (19)$$

kde d je okamžitý průměr ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. Přibližné řešení soustavy rovnic (18) a (19) je — tak jako v předchozím případě — hledáno numericky (viz str. 64, odd. 8.1).

Proti bičující nestabilitě působí také povrchové napětí γ , neboť ohýbání kapalinové trysky vede ke zvětšování jejího povrchu [36]. Jinými slovy, povrchové napětí omezuje vývoj příliš velkých křivostí způsobených příčnou perturbací. Všechny tyto faktory jsou uvažovány v zobecněném matematickém modelu elektricky nabité trysky (viz str. 25, kap. 4).

3.6 Pohybová rovnice

Na základě rozboru sil působících na nabitý hmotný bod A ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky (viz obr. 3.1) je možné — opět podle druhého Newtonova zákona — sestavit pohybovou rovnici ve tvaru

$$m \frac{d^2 l}{dt^2} = |\mathbf{F}_E| + |\mathbf{F}_C| - |\mathbf{F}_M|.$$

Přepsáním na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu se dostane

$$\frac{dl}{dt} = v, \quad (20)$$

$$m \frac{dv}{dt} = qE + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q^2}{l^2} - \frac{1}{4} \pi d^2 \sigma, \quad (21)$$

kde v je velikost okamžité rychlosti nabitěho hmotného bodu A ve směru osy trysky, E je (na tomto místě) velikost intenzity vnějšího elektrostatického pole a $1/(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)$ je konstanta Coulombova zákona. Pohybová rovnice (21) nezahrnuje tíhovou sílu, kterou je možné vzhledem k hmotnostem nabitých bodů zanedbat.

Rovnice (5) pro hmotnostní tok rozpouštědla, konstitutivní rovnice (15) reologického modelu, definiční kinematická rovnice (20) a pohybová rovnice (21) tvoří soustavu obyčejných diferenciálních rovnic popisující — za předpokladu fixování polohy nabitěho hmotného bodu B — dynamiku ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. Přibližné řešení se bude hledáno numericky (viz str. 49, odd. 5.4.2).

3.7 Existence a jednoznačnost řešení

V odd. 3.4 a odd. 3.6 byly odvozeny obyčejné diferenciální rovnice, které popisují hmotnostní tok rozpouštědla a dynamiku ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. Přirozeně se nabízí otázka, zda má tato soustava obyčejných diferenciálních rovnic řešení a zda existuje právě jedno. Existenci a jednoznačnost řešení počáteční (Cauchyho) úlohy zaručuje spojitost funkcí a Lipschitzova podmínka (viz [37, str. 22]), která je silnější než zmíněná spojitost funkcí [38]. Stačí tedy ověřit, že funkce

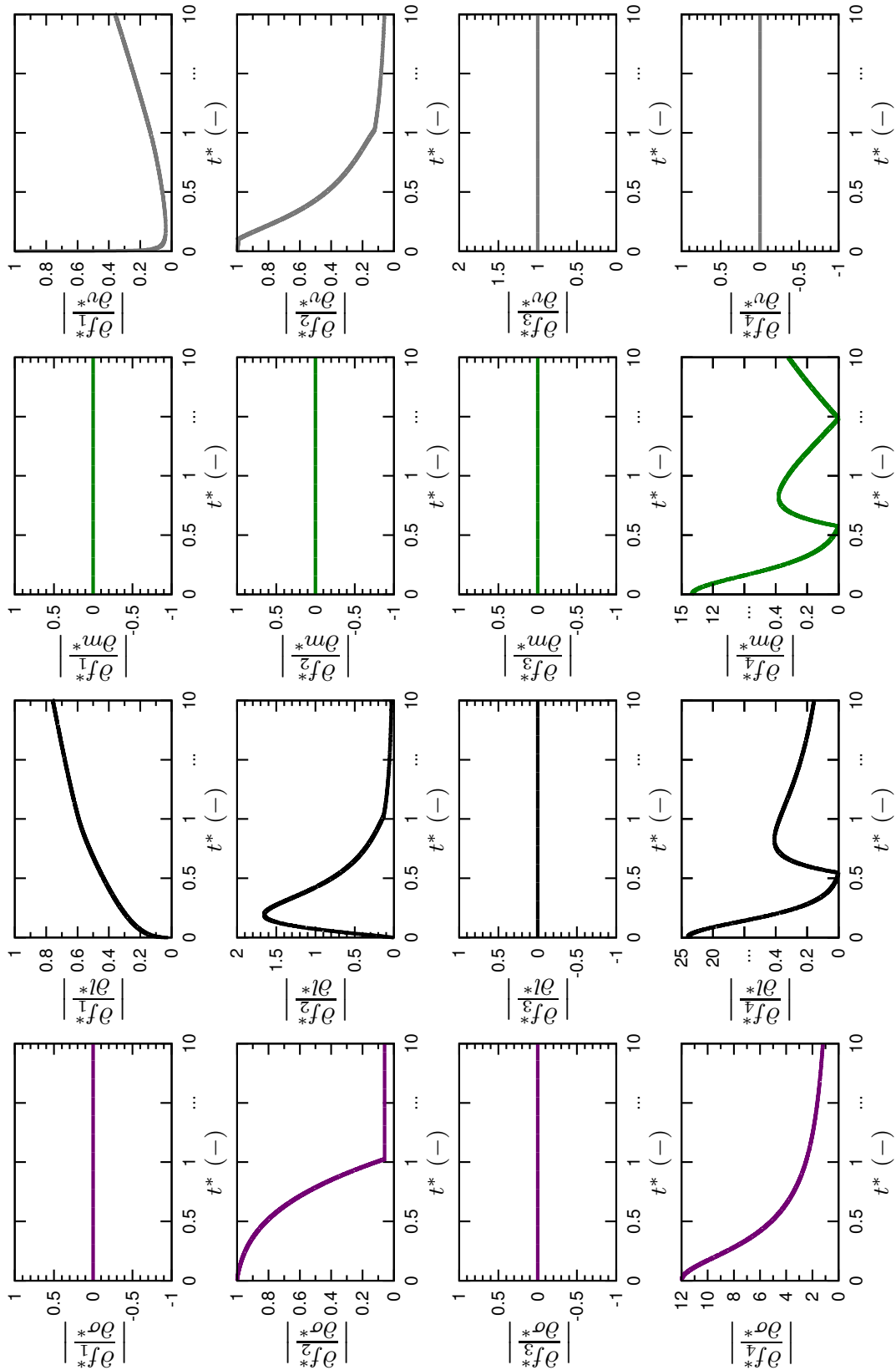
$$\begin{aligned} f_1 &= 0.495 \nu_a^{\frac{1}{6}} l^{\frac{4}{3}} v^{\frac{1}{3}} \mathcal{D}_{s,a}^{\frac{1}{2}} \pi \rho (c_{s,\text{eq}} - c_{s,\infty}), \\ f_2 &= \frac{\eta}{\tau} \frac{v}{l} - \frac{\sigma}{\tau}, \\ f_3 &= v, \\ f_4 &= \frac{qE}{m} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q^2}{m l^2} - \frac{\pi d_0^2 l_0}{4m} \frac{\sigma}{l} \end{aligned} \quad (22)$$

jsou lipschitzovské vzhledem k stavovým proměnným σ , l , m a v . Neboli mají omezené všechny své první parciální derivace vzhledem k těmto proměnným, tj. nechť existuje číslo $M > 0$ (viz [37, str. 23]) takové, že platí

$$\left| \frac{\partial f_i}{\partial \sigma} \right| \leq M \quad \left| \frac{\partial f_i}{\partial l} \right| \leq M \quad \left| \frac{\partial f_i}{\partial m} \right| \leq M \quad \left| \frac{\partial f_i}{\partial v} \right| \leq M \quad \forall i = 1, 2, 3, 4. \quad (23)$$

Potom na základě věty o existenci řešení a jednoznačné řešitelnosti počáteční úlohy (viz [37, str. 23]) existuje řešení počáteční úlohy, které je jednoznačně určeno počáteční podmínkou. Parciálním derivováním soustavy (23) se dostane

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial \sigma} &= 0, & \frac{\partial f_1}{\partial l} &= \frac{4}{3} \text{konst.} \cdot l^{\frac{1}{3}} v^{\frac{1}{3}}, & \frac{\partial f_1}{\partial m} &= 0, & \frac{\partial f_1}{\partial v} &= \frac{1}{3} \text{konst.} \cdot l^{\frac{4}{3}} v^{-\frac{2}{3}}, \\ \frac{\partial f_2}{\partial \sigma} &= -\frac{1}{\tau}, & \frac{\partial f_2}{\partial l} &= -\frac{\eta}{\tau} \frac{v}{l^2}, & \frac{\partial f_2}{\partial m} &= 0, & \frac{\partial f_2}{\partial v} &= \frac{\eta}{\tau} \frac{1}{l}, \end{aligned}$$



Obr. 3.4: Průběh prvních parciálních derivací $|\partial f_i/\partial \sigma|$, $|\partial f_i/\partial l|$, $|\partial f_i/\partial m|$ a $|\partial f_i/\partial v|$ v bezrozměrných veličinách. σ^* —mechanické normálové napětí, l^* —okamžitá délka, m^* —okamžitá hmotnost, t^* —simulační čas, v^* —velikost okamžité rychlosti.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_3}{\partial \sigma} &= 0, & \frac{\partial f_3}{\partial l} &= 0, & \frac{\partial f_3}{\partial m} &= 0, & \frac{\partial f_3}{\partial v} &= 1, \\ \frac{\partial f_4}{\partial \sigma} &= -\frac{\pi d_0^2 l_0}{4 m} \frac{1}{l}, & \frac{\partial f_4}{\partial l} &= -\frac{1}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r m} \frac{q^2}{l^3} + \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 m} \frac{\sigma}{l^2}, \\ \frac{\partial f_4}{\partial m} &= -\frac{q E}{m^2} - \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r m^2} \frac{q^2}{l^2} + \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 m^2} \frac{\sigma}{l}, & \frac{\partial f_4}{\partial v} &= 0, \end{aligned}$$

kde konst. = $0.495 \nu_a^{\frac{1}{6}} D_{s,a}^{\frac{1}{2}} \pi \rho (c_{s,eq} - c_{s,\infty})$, $\sigma \in \langle 0; \sigma_{\max} \rangle$, $m \in \langle m_0; m_p \rangle$, $l \in \langle l_0; +\infty \rangle$ a $v \in \langle 0; +\infty \rangle$. Obory hodnot posledních dvou stavových proměnných, l a v , je ale nutné posuzovat také na základě informací o řešené úloze. Tedy, že vznikající nanovláknko nemůže proniknout skrz uzemněný diskový kolektor a také, že jeho rychlost je vždy konečná. Proměnné l a v proto ve skutečnosti nade všechny meze nerostou.

Matice druhých partiálních derivací (viz např. [39, kap. 6]) je

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_i}{\partial \sigma^2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial \sigma \partial l} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial \sigma \partial m} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial \sigma \partial v} \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial l \partial \sigma} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial l^2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial l \partial m} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial l \partial v} \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial m \partial \sigma} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial m \partial l} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial m^2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial m \partial v} \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial v \partial \sigma} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial v \partial l} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial v \partial m} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial v^2} \end{pmatrix}.$$

Matice druhých partiálních derivací funkce f_1 podle stavových proměnných σ , m , l a v

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} \text{konst.} l^{-\frac{2}{3}} v^{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{4}{9} \text{konst.} l^{\frac{1}{3}} v^{-\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} \text{konst.} l^{\frac{1}{3}} v^{-\frac{2}{3}} & 0 & -\frac{2}{9} \text{konst.} l^{\frac{4}{3}} v^{-\frac{5}{3}} \end{pmatrix}.$$

Matice druhých partiálních derivací funkce f_2 podle stavových proměnných σ , m , l a v

$$\mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\eta v}{\tau l^3} & 0 & -\frac{\eta}{\tau l^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\eta}{\tau l^2} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Matice druhých partiálních derivací funkce f_3 podle stavových proměnných σ , m , l a v

$$\mathbf{D}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Matice druhých partiálních derivací funkce f_4 podle stavových proměnných σ , m , l a v

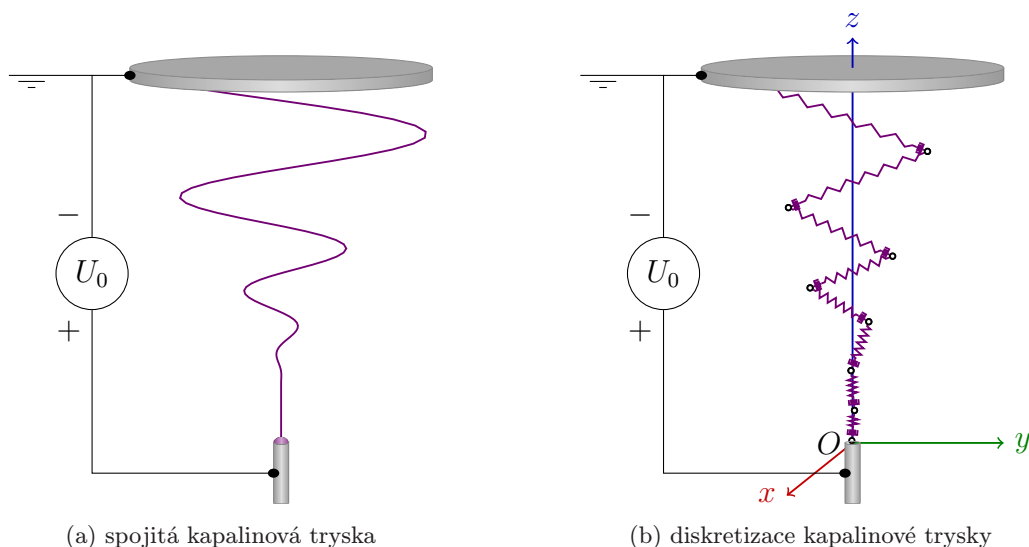
$$\mathbf{D}_4 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 l^2 m} & \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 l m^2} & 0 \\ \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 l^2 m} & \frac{3 q^2}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r l^4 m} - \frac{\pi \sigma d_0^2 l_0}{2 l^3 m} & \frac{q^2}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r l^3 m^2} - \frac{\pi \sigma d_0^2 l_0}{4 l^2 m^2} & 0 \\ \frac{\pi d_0^2 l_0}{4 l m^2} & \frac{q^2}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r l^3 m^2} - \frac{\pi \sigma d_0^2 l_0}{4 l^2 m^2} & \frac{2 q E}{m^3} + \frac{q^2}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r l^2 m^3} - \frac{\pi \sigma d_0^2 l_0}{2 l m^3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Na základě výpočtu funkčních hodnot vyšetřovaných funkcí f_1 , f_2 , f_3 a f_4 v podezřelých bodech a jejich uspořádání dle velikosti existuje, podle (23), Lipschitzova konstanta $M = q^2 / (2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r m l_0)$. Výpočet je možné ověřit i graficky z dat získaných při numerickém experimentu (viz str. 66, odd. 8.2). Z grafů vykreslených na obr. 3.4 je také zřejmé, že všechny první partiální derivace funkcí f_1 , f_2 , f_3 a f_4 jsou vzhledem k stavovým proměnným, σ , l , m a v , omezené. Jsou tedy splněny předpoklady věty o existenci řešení a jednoznačné řešitelnosti počáteční úlohy, tj. existuje právě jedno řešení určené počáteční podmínkou. Tento závěr je velmi důležitý pro pozdější numerické řešení, neboť numerické metody existenci a jednoznačnost řešení počáteční úlohy mlčky předpokládají.

4

Zobecněný model elektricky nabitě trysky

STĚŽEJNÍ myšlenkou zobecněného modelu je náhrada spojitě elektricky nabitě kapalinové trysky za soustavu sériově spojených přímočarých segmentů zelektrizované trysky (viz obr. 4.1). Prostřednictvím tohoto „řetězce viskoelastických činek“ je modelován vznik polymerního nanovlákna. Jak dochází elektrickými silami k transportu materiálu, vstupují do systému v místě ústí kapiláry nové přímočaré segmenty trysky. Na opačné straně — v místě kolektoru — jsou tyto segmenty postupně fixovány, což odpovídá zachytávání nanovláken na sběrné elektrodě.



Obr. 4.1: Náhrada spojitě elektricky nabitě kapalinové trysky soustavou sériově spojených ideálních přímočarých segmentů zelektrizované trysky.

4.1 Vnější elektrostatické pole

Vnější elektrostatické pole hraje v procesu elektrostatického zvlákňování důležitou roli. Je příčinou dlužení a urychlování elektricky nabitě kapalinové trysky [3][12][18], a také do určité vzdálenosti stabilizuje její přímý směr [8][18]. Předkládaná disertační práce se zabývá modelováním procesu elektrostatického zvlákňování s použitím

diskového uzemněného kolektoru a speciálního kolektoru, který je vyroben ze dvou paralelních válcových vodičů. Určit elektrostatické pole v prostoru, ve kterém dochází ke zvláknování, obecně vyžaduje řešit Poissonovu–Laplaceovu rovnici

$$\Delta\varphi = -\frac{q_\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}$$

s příslušnými okrajovými podmínkami, kde φ je elektrostatický potenciál a q_ρ je objemová hustota náboje.

4.1.1 Diskový kolektor ■

Nechť je uvažována následující soustava sestávající se z vodivé kapky polymerního roztoku a uzemněného diskového kolektoru. Počátek kartézského souřadného systému $O[x; y; z]$ je umístěn do ústí kapiláry. Pro zjednodušení se vodivá kapka považuje za rovnoměrně nabitou hemisféru (viz [40, obr. 16]) a kolektor za nekonečnou vodivou rovinu. Deformace kapky vlivem elektrostatického pole se neuvažuje.

Ve speciálních případech — jakým je za uvedených předpokladů také uzemněný diskový kolektor — lze využít metody elektrostatického zobrazení (viz např. [35]). Tato metoda umožňuje splnit okrajové podmínky konstantního elektrostatického potenciálu φ tak, že se zrcadlově souměrně k rovině uzemněného kolektoru umístí fiktivní náboj, $Q = 4/3 \pi q_\rho r^3$, opačného znaménka (viz str. 41, obr. 4.8). Úskalím popsané metody je, že neumožňuje splnit okrajovou podmínku ve všech místech povrchu rovnoměrně nabitě kapky. Soustavu je však možné nastavit tak, že bude okrajová podmínka splněna alespoň v jednom bodě jejího povrchu. Tímto bodem byl zvolen vrchol hemisférického povrchu, neboť se v matematickém modelu předpokládá, že z tohoto místa dojde k vytrysknutí tenkého proudu kapaliny.

Elektrostatický potenciál, φ , vně kapky je určen spojitou skalární funkcí

$$\varphi = \frac{q_\rho r^3}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i|} - \frac{Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|}, \quad (24)$$

kde q_ρ je objemová hustota náboje kapky, r je poloměr kapky (pro zjednodušení se předpokládá shodný s poloměrem kapiláry), \mathbf{r}_i je polohový vektor i -tého nabitého hmotného bodu a $\mathbf{r}' \equiv \{0; 0; 2h\}^T$ je polohový vektor středu fiktivního náboje Q . (Poznámka: horní index T označuje maticovou operaci transpozice.) Dosazením okrajové podmínky v bodě $[0; 0; r]$, tj. vrchol kapky polymerního roztoku, do (24), tedy

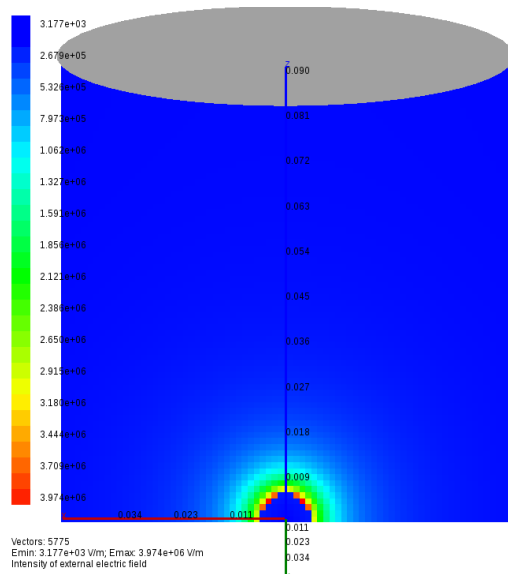
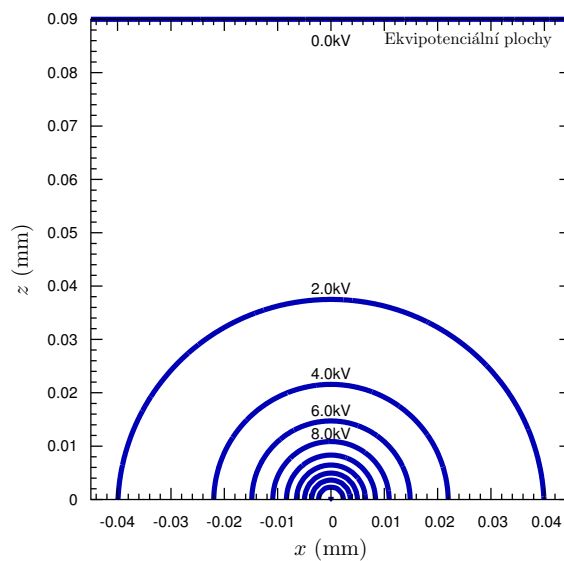
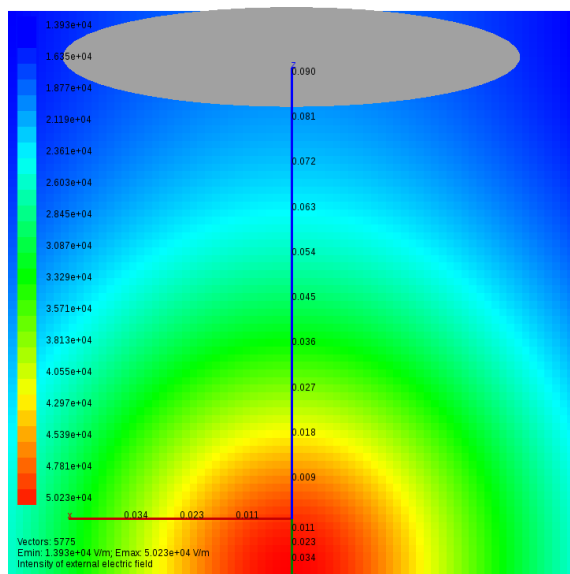
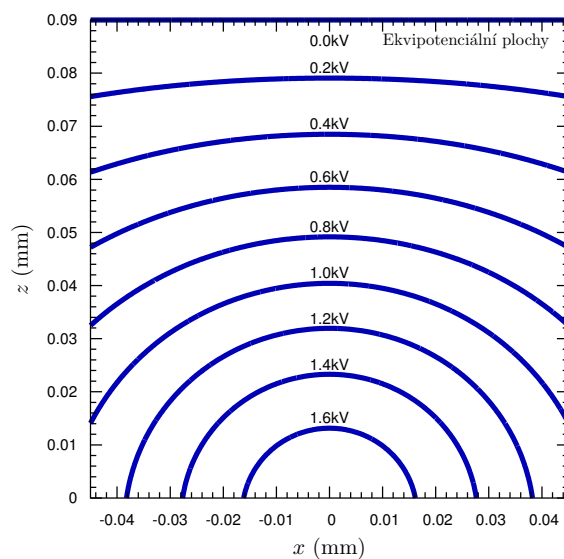
$$\varphi_1 \equiv \varphi([0; 0; r]) = \frac{q_\rho r^2}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} - \frac{Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{2h - r}$$

je možné určit objemovou hustotu náboje hemisférické kapky polymerního roztoku

$$q_\rho = \frac{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r \varphi_1 (2h - r)}{2 r^2 (h - r)}, \quad (25)$$

které odpovídá fiktivní bodový náboj

$$Q = \frac{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r \varphi_1 (2hr - r^2)}{h - r}, \quad (26)$$

(a) velikost intenzity pole v rovině $(0; y; z)$ (b) řez $(0; y; z)$ ekvipotenciálními plochami(c) velikost intenzity pole v rovině $(D/2; y; z)$ (d) řez $(D/2; y; z)$ ekvipotenciálními plochami

Obr. 4.2: Velikost intenzity elektrostatičkého pole a řez ekvipotenciálními plochami uzemněného diskového kolektoru. Parametry výpočtu: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 20$ kV, potenciál uzemněného kolektoru $\varphi_2 = 0$ V, vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 90$ mm, poloměr kapiláry $r = 5$ mm a průměr kolektoru $D = 90$ mm. Výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.

kde φ_1 je elektrostatický potenciál aplikovaný na kapiláru.¹⁾

Celková intenzita, \mathbf{E} , vnějšího elektrostatického pole je rovna vektorovému součtu elektrostatického pole rovnoměrně nabitě kapky a fiktivního bodového náboje Q

$$\mathbf{E} = \begin{cases} \frac{q_\rho}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} \mathbf{r}_i + \frac{-Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|} & \text{pro } |\mathbf{r}_i| < r, \\ \frac{q_\rho r^3}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i|^2} \frac{\mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_i|} + \frac{-Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|} & \text{pro } |\mathbf{r}_i| \geq r, \end{cases} \quad (29)$$

kde ε_{rp} je relativní permitivita polymerního roztoku.

Na obr. 4.2(a), obr. 4.2(c) je znázorněna velikost intenzity, $|\mathbf{E}|$, elektrostatického pole uzemněného diskového kolektoru ve zvlákňovacím prostoru a na obr. 4.2(b), obr. 4.2(d) odpovídající průběh elektrostatického potenciálu φ .

4.1.2 Drátový kolektor

Nechť je uvažována následující soustava sestávající se z vodivé kapky polymerního roztoku a speciálního kolektoru (viz obr. 4.3). Počátek kartézského souřadného systému $O[x; y; z]$ je opět umístěn do ústí kapiláry. Pro zjednodušení se bude speciální kolektor považovat za soustavu dvou paralelních, nekonečně dlouhých, válcových vodičů, které jsou rovnoměrně nabitý po své délce nábojem q_τ .

Pokud se pro tuto chvíli nebude uvažovat s hemisférickou kapkou, pak lze za uvedených předpokladů pro speciální kolektor převést úlohu na rovinnou a pro hledání řešení využít metody konformního zobrazení (viz např. [41]). Tato metoda umožňuje najít analytickou funkci, která bude vyhovovat předepsaným okrajovým podmínkám. Komplexní potenciál, F , je v případě dvou souhlasně nabitých vodičů umístěných symetricky kolem osy z (viz obr. 4.4), definován (viz [41, str. 136])

$$F = j \frac{q_\tau}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \ln(w + e) + j \frac{q_\tau}{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \ln(w - e) + C,$$

¹⁾ Výpočet elektrostatického pole uzemněného kolektoru lze zobecnit na kolektor s nenulovým elektrostatickým potenciálem, tj. $\varphi_2 \neq 0 V$. Zobecnění je však pouze hrubou aproximací, proto je uvedeno jen jako poznámka pod čarou. Metodou elektrického zrcadlení není možné splnit okrajovou podmínku, $\varphi_2 = \text{konst.}$, na celém povrchu kolektoru, ale, stejně jako u kapky, pouze v jednom bodě.

Elektrostatický potenciál φ vně kapky je opět určen skalární funkcí (24). Dosazením okrajových podmínek v ose soustavy, tj. v bodech $[0; 0; r]$ a $[0; 0; h]$

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\equiv \varphi([0; 0; r]) = \frac{q_\rho r^2}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} - \frac{Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{2h - r}, \\ \varphi_2 &\equiv \varphi([0; 0; h]) = \frac{q_\rho r^3}{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{h} - \frac{Q}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{h} \end{aligned}$$

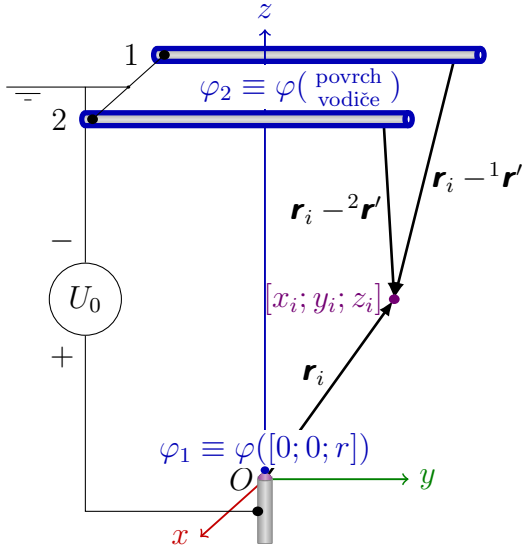
je možné určit objemovou hustotu náboje polymerní kapky

$$q_\rho = \frac{3 \varepsilon_0 \varepsilon_r [\varphi_1(2h - r) - \varphi_2 h]}{2r^2(h - r)} \quad (27)$$

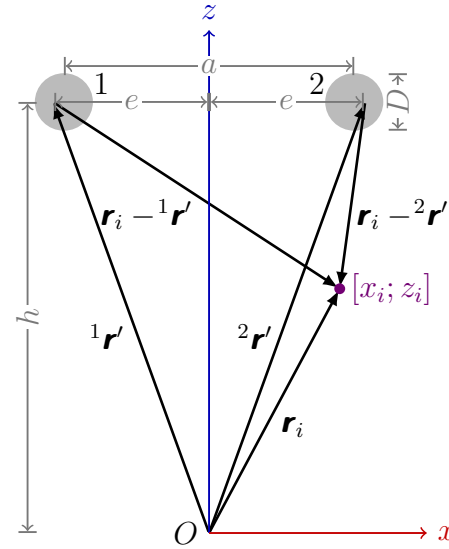
a velikost fiktivního náboje

$$Q = \frac{2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r [\varphi_1(2hr - r^2) + \varphi_2(hr - 2h^2)]}{h - r}, \quad (28)$$

kde φ_2 je elektrostatický potenciál aplikovaný na diskový kolektor. Celková intenzita, \mathbf{E} , vnějšího elektrostatického pole je určena vztahem (29). Lze snadno ověřit, že pro $\varphi_2 = 0 V$ jsou vztahy (25), (26) ekvivalentní se vztahy (27), (28).



Obr. 4.3: Schema speciálního kolektoru sestávajícího se ze dvou paralelních vodičů s kruhovým průřezem. φ_1 —elektrický potenciál kapiláry, φ_2 —elektrický potenciál speciálního kolektoru, U_0 —aplikované elektrické napětí, \mathbf{r}_i —polohový vektor nabitěho hmotného bodu trysky, ${}^1\mathbf{r}'$, ${}^2\mathbf{r}'$ —polohové vektory os nekonečně tenkých vodičů.



Obr. 4.4: Elektrostatické pole dvou paralelních, nekonečně dlouhých vodičů s kruhovým průřezem. a —rozteč válcových vodičů speciálního kolektoru, e —rozteč osy nekonečně tenkého vodiče, h —vzdálenost mezi kapilárou a speciálním kolektorem, D —průměr válcových vodičů speciálního kolektoru, \mathbf{r}_i —polohový vektor nabitěho hmotného bodu trysky, ${}^1\mathbf{r}'$, ${}^2\mathbf{r}'$ —polohové vektory os nekonečně tenkých vodičů.

kde j je komplexní jednotka, q_τ je lineární hustota náboje, $w = x + jz$ je komplexní číslo, e je rozteč os nekonečně tenkých vodičů a C je integrační konstanta. Při zavedení exponenciálního vyjádření komplexních čísel

$$\begin{aligned} w + e &= |\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'| e^{j\alpha_1}, \\ w - e &= |\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'| e^{j\alpha_2}, \end{aligned}$$

kde $\mathbf{r}_i \equiv \{x_i; z_i\}^T$ je polohový vektor libovolného bodu v komplexní rovině a ${}^1\mathbf{r}' \equiv \{-e; h\}^T$, ${}^2\mathbf{r}' \equiv \{e; h\}^T$ jsou polohové vektory os nekonečně tenkých vodičů, se po úpravě dostane

$$F = -\frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}(\alpha_1 + \alpha_2) + j\frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}\ln(|\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'||\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'|) + C.$$

Po rozdělení komplexního potenciálu F na reálnou část Φ a imaginární část φ

$$\begin{aligned} \Phi &= -\frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}(\alpha_1 + \alpha_2) + C_1, \\ \varphi &= \frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}\ln(|\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'||\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'|) + C_2, \end{aligned} \quad (30)$$

kde Φ je tok vektoru intenzity \mathbf{E} elektrického pole a $C_1 + C_2 = C$.

V dalším kroku je potřeba vyšetřit průběh ekvipotenciálních křivek, pro které platí, že $\varphi = \text{konst.}$ Ze vztahu (30) jsou ekvipotenciální křivky dány vztahem

$$|\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'| |\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'| = \text{konst.}$$

Jsou to geometrická místa bodů, jejichž součin vzdáleností ke dvěma pevným ohniskům je konstantní. Křivka, která uvedenou vlastnost splňuje, se nazývá Cassiniho ovál (viz např. [42, str. 8]), jehož rovnice je

$$\sqrt{(x+e)^2 + (z-h)^2} \sqrt{(x-e)^2 + (z-h)^2} = k^2.$$

Konstanty e a k^2 se vypočtou tak, aby Cassiniho ovál co nejlépe aproximoval tvar kruhového vodiče speciálního kolektoru. K tomu poslouží průřechy kruhových vodičů s Cassiniho oválem o souřadnicích $[-a/2 - R; h]$, $[-a/2 + R; h]$, $[a/2 - R; h]$, $[a/2 + R; h]$, kde a je rozteč dvou paralelních válcových vodičů speciálního kolektoru a $R = D/2$ je jejich poloměr. Průřechy Cassiniho oválu s osou $z = h$ jsou

$$\begin{aligned} {}^1x_1 &\equiv -a/2 - R = -\sqrt{e^2 + k^2}, & {}^2x_1 &\equiv a/2 - R = \sqrt{e^2 - k^2}, \\ {}^1x_2 &\equiv -a/2 + R = -\sqrt{e^2 - k^2}, & {}^2x_2 &\equiv a/2 + R = \sqrt{e^2 + k^2} \end{aligned}$$

a odtud se vypočítá

$$\begin{aligned} e &= \sqrt{\frac{a^2}{4} + R^2}, \\ k^2 &= aR. \end{aligned}$$

Dosazením okrajových podmínek v bodě $[0; r]$, tj. vrchol hemisférické kapky polymerního roztoku, a na povrchu kruhových vodičů do (30)

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\equiv \varphi([0; r]) = \frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \ln u^2 + C_2, \\ \varphi_2 &\equiv \varphi(\text{povrch vodiče}) = \frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \ln k^2 + C_2, \end{aligned}$$

kde $u^2 = e^2 + (h-r)^2$ je vzdálenost od osy nekonečně tenkého vodiče k vrcholu kapky, je možné určit lineární hustotu náboje kolektoru

$$q_\tau = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r(\varphi_1 - \varphi_2)}{\ln u^2/k^2}$$

a integrační konstantu

$$C_2 = -\frac{1}{2} \left(\frac{q_\tau}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \ln(u^2 k^2) - \varphi_1 - \varphi_2 \right).$$

Při vyšetřování intenzity, \mathbf{E} , elektrického pole každého z vodičů je potřeba zkoumat zvlášť pole uvnitř a vně těchto vodičů. Je známo, že intenzita pole uvnitř vodiče je nulová (viz např. [35, str. 90]). Intenzita elektrického pole vně vodičů se určí jako záporně vzatý gradient elektrostatického potenciálu

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi.$$

Parciálním derivováním (30) se dostane

$$\begin{aligned}\frac{\partial\varphi}{\partial x} &= \frac{q_\tau}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \left[\frac{x+e}{(x+e)^2+(z-h)^2} + \frac{x-e}{(x-e)^2+(z-h)^2} \right], \\ \frac{\partial\varphi}{\partial z} &= \frac{q_\tau}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \left[\frac{z-h}{(x+e)^2+(z-h)^2} + \frac{z-h}{(x-e)^2+(z-h)^2} \right].\end{aligned}$$

Za předpokladu $a/2 \doteq e$ jsou vektory intenzity, \mathbf{E}_1 a \mathbf{E}_2 , pole od jednotlivých vodičů ve zvlákňovacím prostoru definovány

$$\mathbf{E}_1 = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{pro } |\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'| < R, \\ -\frac{q_\tau}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \left[\frac{x_i+e}{(x_i+e)^2+(z_i-h)^2} \mathbf{i} + y\mathbf{j} + \right. \\ \quad \left. + \frac{z_i-h}{(x_i+e)^2+(z_i-h)^2} \mathbf{k} \right] & \text{pro } |\mathbf{r}_i - {}^1\mathbf{r}'| \geq R, \end{cases}$$

$$\mathbf{E}_2 = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{pro } |\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'| < R, \\ -\frac{q_\tau}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \left[\frac{x_i-e}{(x_i-e)^2+(z_i-h)^2} \mathbf{i} + y\mathbf{j} + \right. \\ \quad \left. + \frac{z_i-h}{(x_i-e)^2+(z_i-h)^2} \mathbf{k} \right] & \text{pro } |\mathbf{r}_i - {}^2\mathbf{r}'| \geq R, \end{cases}$$

kde $\mathbf{0} \equiv \{0; 0; 0\}^T$ je nulový vektor a $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ jsou jednotkové vektory ve směru souřadné osy x , resp. y , resp. z .

Intenzita elektrického pole rovnoměrně nabitě hemisférické kapky je definována

$$\mathbf{E}_3 = \begin{cases} \frac{q_\rho}{3\varepsilon_0\varepsilon_{rp}} \mathbf{r}_i & \text{pro } |\mathbf{r}_i| < r, \\ \frac{q_\rho r^3}{3\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{|\mathbf{r}_i|^2} \frac{\mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_i|} & \text{pro } |\mathbf{r}_i| \geq r, \end{cases}$$

kde q_ρ je objemová hustota náboje určená z okrajové podmínky pro konstantní elektrický potenciál φ v bodě $[0; 0; r]$, tj. vrchol kapky polymerního roztoku. Tedy

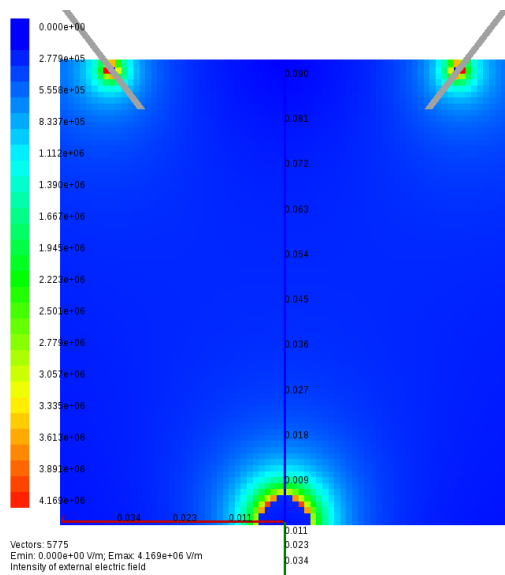
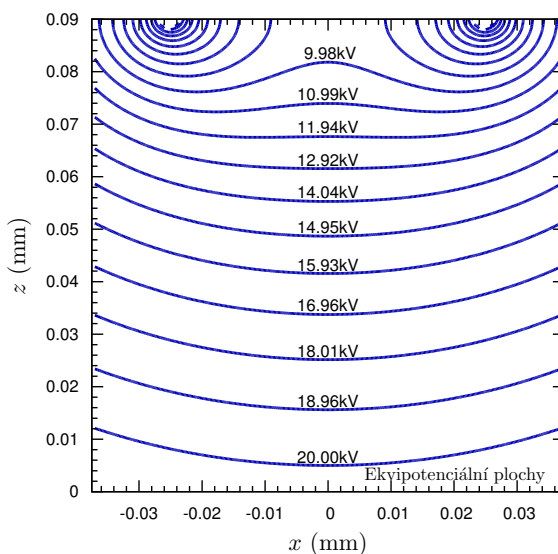
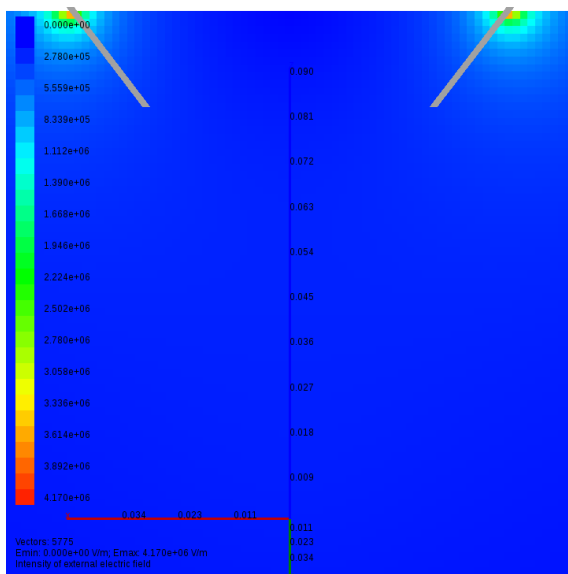
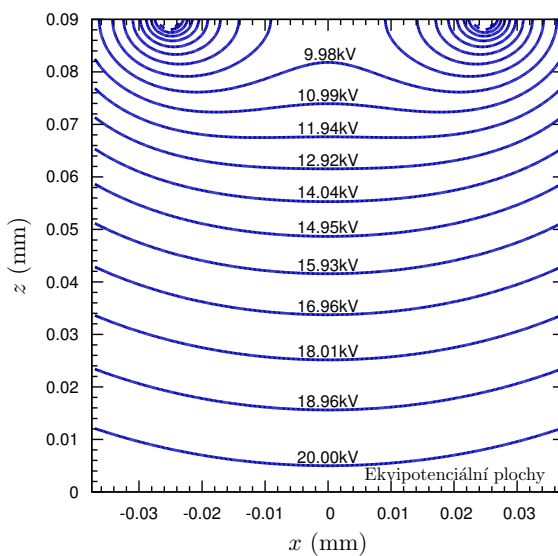
$$q_\rho = \frac{3\varepsilon_0\varepsilon_r\varphi_1}{r^2}.$$

Celková intenzita \mathbf{E} vnějšího elektrostatického pole je rovna vektorovému součtu elektrostatických polí vodičů a rovnoměrně nabitě hemisférické kapky

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3. \quad (31)$$

Autor si je vědom skutečnosti, že superpozicí elektrického pole hemisférické kapky a elektrického pole válcových vodičů [viz vztah (31)] dojde k přerozdělení náboje na povrchu válcových vodičů a okrajová podmínka konstantního elektrostatického potenciálu φ bude porušena na jejich povrchu. Nicméně, tento prohrěšek proti fyzikální korektnosti je — z hlediska matematického modelu drátového kolektoru — menší, než kdyby se vliv kapky polymerního roztoku vůbec neuvazoval.

Na obr. 4.5(a), obr. 4.5(c) je znázorněna velikost intenzity, $|\mathbf{E}|$, elektrostatického pole speciálního drátového kolektoru ve zvlákňovacím prostoru a na obr. 4.5(b), obr. 4.5(d) odpovídající průběh elektrostatického potenciálu φ .

(a) velikost intenzity pole v rovině $(0; y; z)$ (b) řez $(0; y; z)$ ekvipotenciálními plochami(c) velikost intenzity pole v rovině $(D/2; y; z)$ (d) řez $(0; y; z)$ ekvipotenciálními plochami

Obr. 4.5: Velikost intenzity elektrostatického pole a řez ekvipotenciálními plochami speciálního kolektoru. Parametry výpočtu: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 20$ kV, potenciál speciálního kolektoru $\varphi_2 = 0$ V, vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 90$ mm, poloměr kapiláry $r = 5$ mm a průměr drátu $D = 2$ mm. Výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.

4.2 Úbytek rozpouštědla a efekt tuhnutí trysky

Úbytek rozpouštědla mezi kapalinovou tryskou a okolním prostředím zvlákňovacího prostoru — a s tím související efekt tuhnutí trysky — byl podrobně diskutován na str. 15, odd. 3.3. V tomto odstavci bude provedeno zobecnění prvního Fickova zákona (5), jenž popisuje hmotnostní tok rozpouštědla mezi tryskou a prostředím zvlákňovacího prostoru. Zobecněný první Fickův zákon pro diskretizaci spojitě kapalinové trysky na segmenty „viskoelastických činek“ má tvar

$$\frac{dm_{si-1,i}}{dt} = 0.495 \nu_a^{\frac{1}{6}} \mathcal{D}_{s,a}^{\frac{1}{2}} \pi \rho (c_{s,eq} - c_{s,\infty}) (l_{i-1,i})^{\frac{4}{3}} |\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|^{\frac{1}{3}}, \quad (32)$$

$$\frac{dm_{si,i+1}}{dt} = 0.495 \nu_a^{\frac{1}{6}} \mathcal{D}_{s,a}^{\frac{1}{2}} \pi \rho (c_{s,eq} - c_{s,\infty}) (l_{i,i+1})^{\frac{4}{3}} |\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|^{\frac{1}{3}}, \quad (33)$$

kde $\mathbf{v}_{ni-1,i}^i$, $\mathbf{v}_{ni,i+1}^i$ jsou kolmé projekce okamžité rychlosti i -tého nabitěho hmotného bodu do normálového (osového) směru ideálního přímočarého segmentu $(i-1, i)$,¹⁾ resp. $(i, i+1)$, zelektrizované trysky (viz str. 39, obr. 4.7).

Změna materiálových vlastností elektricky nabitě kapalinové trysky během jejího letu od zvlákňovací elektrody ke sběrnému kolektoru je popsána zobecněnými vztahy pro okamžitou dynamickou viskozitu

$$\eta_{i-1,i} = 10^{B c_{pi-1,i}^m}, \quad (34)$$

$$\eta_{i,i+1} = 10^{B c_{pi,i+1}^m} \quad (35)$$

a okamžitý relaxační čas polymerního roztoku

$$\tau_{i-1,i} = \frac{\tau_0}{c_{p0}} c_{pi-1,i}, \quad (36)$$

$$\tau_{i,i+1} = \frac{\tau_0}{c_{p0}} c_{pi,i+1}, \quad (37)$$

kde okamžitá hmotnostní koncentrace polymeru v segmentech trysky je

$$c_{pi-1,i} = \frac{m_p}{m_p + m_{si-1,i}}, \quad (38)$$

$$c_{pi,i+1} = \frac{m_p}{m_p + m_{si,i+1}}. \quad (39)$$

Poměr okamžitého objemu a počátečního objemu je vyjádřen koeficientem úbytku objemu $\Lambda \in \langle 1; c_{p0} \rangle$, který je pro ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky $(i-1, i)$, resp. $(i, i+1)$, definován vztahy

$$\Lambda_{i-1,i} = \frac{V_{i-1,i}}{V_0} = \frac{m_p + m_{si-1,i}}{m_0}, \quad (40)$$

$$\Lambda_{i,i+1} = \frac{V_{i,i+1}}{V_0} = \frac{m_p + m_{si,i+1}}{m_0}, \quad (41)$$

kde V_0 je počáteční objem diskrétního válcového segmentu kapalinové trysky.

¹⁾ Pro snadnou orientaci v rámci „řetězce viskoelastických činek“ nechť označuje $(i-1, i)$ segment řetězce mezi $(i-1)$ -ním a i -tým nabitým hmotným bodem, resp. $(i, i+1)$ segment mezi i -tým a $(i+1)$ -ním hmotným bodem s nábojem.

4.3 Síly působící na elektricky nabitou trysku

V následujících oddílech 4.3.1 až 4.3.5 budou detailněji popsány síly, které působí na elektricky nabitou kapalinovou trysku. Jejich výčet jistě není kompletní a je otázkou dalšího zpřesňování matematického modelu.

4.3.1 Síla elektrostatická

Podle Coulombova zákona působí mezi dvěma náboji elektrostatická síla, která je přímo úměrná součinu nábojů a nepřímo úměrná druhé mocnině jejich vzdálenosti. Silové působení mezi dvěma vázanými náboji kapalinové trysky je možné zobecnit využitím principu superpozice. Podle tohoto principu není vzájemné elektrické působení dvojice nábojů ovlivněno přítomností dalších nábojů. Elektrostatické síly se tedy superponují a lze je vektorově sčítat [35]. Elektrostatická odpuzující síla \mathbf{F}_{Ci} působící na i -tý nabitý hmotný bod je tedy

$$\mathbf{F}_{Ci} = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (42)$$

kde q_i , q_j jsou náboj i -tého, resp. j -tého, hmotného bodu, \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_j jsou polohový vektor i -tého, resp. j -tého, nabitého hmotného bodu a n je index posledního nabitého hmotného bodu v soustavě sériově spojených ideálních přímočarých segmentů zelektrizované trysky (viz obr. 4.1(b), obr. 4.9).

4.3.2 Síla viskoelastická

Dloužením zelektrizované kapalinové trysky, ke kterému dochází během jejího letu od zvlákňovací elektrody ke sběrnému kolektoru, vzniká uvnitř trysky mechanické normálové napětí σ . Časová derivace normálového napětí $\sigma_{i-1,i}$ vztahující se k ideálnímu přímočarému segmentu $(i-1, i)$, resp. časová derivace normálového napětí $\sigma_{i,i+1}$ vztahující se k segmentu $(i, i+1)$, elektricky nabitě trysky je — po zobecnění konstitutivní rovnice (15) a použití vztahů (102), (103), (105), (106) — rovna

$$\frac{d\sigma_{i-1,i}}{dt} = \frac{\eta_{i-1,i}}{\tau_{i-1,i}} \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i) \cdot (\mathbf{v}_{i-1} - \mathbf{v}_i)}{l_{i-1,i}^2} - \frac{\sigma_{i-1,i}}{\tau_{i-1,i}}, \quad (43)$$

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}}{dt} = \frac{\eta_{i,i+1}}{\tau_{i,i+1}} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{i+1})}{l_{i,i+1}^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}}{\tau_{i,i+1}}, \quad (44)$$

kde \mathbf{r}_{i-1} , \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_{i+1} jsou polohový vektor $(i-1)$ -ního, resp. i -tého, resp. $(i+1)$ -ního, hmotného bodu s nábojem a \mathbf{v}_{i-1} , \mathbf{v}_i , \mathbf{v}_{i+1} jsou jejich okamžité rychlosti.

Viskoelastická síla zohledňující tzv. viskózní odpor zvlákňovaného polymerního roztoku je rovna součinu plochy příčného průřezu ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky a mechanického normálového napětí vypočteného z nelineárního Maxwellova reologického modelu. Viskoelastická síla $\mathbf{F}_{Mi-1,i}^i$, resp. $\mathbf{F}_{Mi,i+1}^i$, jejíž nositelka je totožná s normálou segmentu $(i-1, i)$, resp. $(i, i+1)$, ideální přímočaré zelektrizované trysky je určena vztahy

$$\mathbf{F}_{Mi-1,i}^i = A_{i-1,i} \sigma_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} = \frac{\pi}{4} d_{i-1,i}^2 \sigma_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|}, \quad (45)$$

$$\mathbf{F}_{Mi,i+1}^i = A_{i,i+1} \sigma_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} = \frac{\pi}{4} d_{i,i+1}^2 \sigma_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|}. \quad (46)$$

Okamžité průměry, $d_{i-1,i}$ a $d_{i,i+1}$, ideálních přímočarých segmentů elektricky nabitě trysky lze vypočítat z rovnosti objemů

$$\begin{aligned} V_{i-1,i} &= V_0 \Lambda_{i-1,i}, \\ V_{i,i+1} &= V_0 \Lambda_{i,i+1}. \end{aligned}$$

Tedy

$$\begin{aligned} d_{i-1,i}^2 &= d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}, \\ d_{i,i+1}^2 &= d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}, \end{aligned} \quad (47)$$

kde d_0 , l_0 jsou počáteční průměr, resp. počáteční délka, diskrétního válcového segmentu kapalinové trysky (viz str. 45, odd. 5.2).

Výsledná viskoelastická síla \mathbf{F}_{Mi} působící na i -tý hmotný bod s nábojem je rovna vektorovému součtu sil definovaných vztahy (45) a (46). Tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{Mi} &= \mathbf{F}_{Mi-1,i}^i + \mathbf{F}_{Mi,i+1}^i \\ &= \frac{\pi}{4} \left(d_{i-1,i}^2 \sigma_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + d_{i,i+1}^2 \sigma_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right) \end{aligned}$$

a následnou substitucí vztahů (47) do předchozího řádku

$$= \frac{\pi d_0^2 l_0}{4} \left(\frac{\Lambda_{i-1,i} \sigma_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + \frac{\Lambda_{i,i+1} \sigma_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right). \quad (48)$$

4.3.3 Síla elektrostatického pole ■

Síla vnějšího elektrostatického pole je způsobená rozdílem elektrických potenciálů, $\varphi_1 - \varphi_2$, mezi kapilárou a uzemněným kolektorem. Tato elektrická síla \mathbf{F}_{Ei} , která působí na libovolný náboj vložený do vnějšího elektrostatického pole, je rovna součinu náboje a intenzity elektrického pole

$$\mathbf{F}_{Ei} = q_i \mathbf{E}, \quad (49)$$

kde \mathbf{E} je intenzita vnějšího elektrostatického pole.

4.3.4 Síla povrchového napětí ■

Kapaliny se chovají tak, jako by byl jejich povrch pokryt tenkou pružnou vrstvou, jež se snaží stáhnout povrch kapaliny, aby měl co nejmenší plošný obsah [43]. Dloužení polymerní trysky — ke kterému dochází během elektrostatického zvláknování — vede k nárůstu jejího plošného obsahu a tím ke zvětšení povrchové energie. Na str. 19, odd. 3.5, bylo uvedeno tvrzení ve smyslu: povrchové napětí, γ , má snahu obnovit přímočarý tvar elektricky nabitě kapalinové trysky, který byl porušen v důsledku příčné perturbace a následné bičující nestability, neboť omezuje vývoj příliš velkých

křivosti \mathcal{K} .¹⁾ Názory jak důležitou roli hraje povrchové napětí, γ , při procesu elektrostatického zvlákňování, jsou v literatuře odlišné. Podle článku [9] je síla povrchového napětí obvykle zanedbatelná a podle jiného článku [44] je tomu naopak.

Energie povrchového napětí $E_{i-1,i}$, jež se vztahuje k polovině ideálního přímočarého segmentu $(i-1, i)$, resp. energie povrchového napětí $E_{i,i+1}$ vztahující se k polovině segmentu $(i, i+1)$, zelektrizované trysky je rovna

$$E_{i-1,i} = \frac{1}{2} \gamma S_{i-1,i} = \frac{1}{2} \gamma \pi d_{i-1,i} l_{i-1,i}, \quad (50)$$

$$E_{i,i+1} = \frac{1}{2} \gamma S_{i,i+1} = \frac{1}{2} \gamma \pi d_{i,i+1} l_{i,i+1}, \quad (51)$$

kde γ je povrchové napětí zvlákňovaného polymerního roztoku.

Substitucí odmocněných vztahů (47) do (50) a (51) se dostane

$$E_{i-1,i} = \frac{1}{2} \gamma \pi \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}} l_{i-1,i} = \frac{1}{2} \gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}} (\Lambda_{i-1,i} l_{i-1,i})^{\frac{1}{2}}, \quad (52)$$

$$E_{i,i+1} = \frac{1}{2} \gamma \pi \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}} l_{i,i+1} = \frac{1}{2} \gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}} (\Lambda_{i,i+1} l_{i,i+1})^{\frac{1}{2}}. \quad (53)$$

Síla povrchového napětí $\mathbf{F}_{S_{i-1,i}}^i$, resp. $\mathbf{F}_{S_{i,i+1}}^i$, jejíž nositelka je totožná s normálou ideálního přímočarého segmentu $(i-1, i)$, resp. $(i, i+1)$, elektricky nabitě trysky

¹⁾ Poznámka pod čarou naznačuje výpočet křivosti \mathcal{K}_i trysky v místě i -tého nabitě hmotného bodu. Hlavní myšlenka je znázorněna na obr. 4.6(b). Nejprve se ze souřadnic nabitých hmotných bodů $(i-1)$, i a $(i+1)$ určí dva vektory \mathbf{u} a \mathbf{w} ležící v rovině Π , která těmito body prochází

$$\mathbf{u} = \{x_{i-1} - x_i; y_{i-1} - y_i; z_{i-1} - z_i\}^T, \quad \mathbf{w} = \{x_{i+1} - x_i; y_{i+1} - y_i; z_{i+1} - z_i\}^T.$$

Pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního algoritmu se vytvoří ortogonální báze [tj. požaduje se skalární součin $(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2) = 0$]

$$\mathbf{f}_1 = \mathbf{u}, \quad \mathbf{f}_2 = \mathbf{w} - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}} \mathbf{f}_1.$$

Jednotkové vektory lokálního kartézského souřadného systému $i[x'; y']$ určuje ortonormální báze

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{f}_1}{|\mathbf{f}_1|}, \quad \mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{f}_2}{|\mathbf{f}_2|}.$$

Transformace souřadnic z globálního kartézského souřadného systému $O[x; y; z]$ do lokálního $i[x'; y']$ se provede pomocí matice přechodu $\mathbf{G} = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{21} \\ e_{12} & e_{22} \\ e_{13} & e_{23} \end{pmatrix}$, kde jsou ve sloupcích vektory ortonormální báze.

Tedy

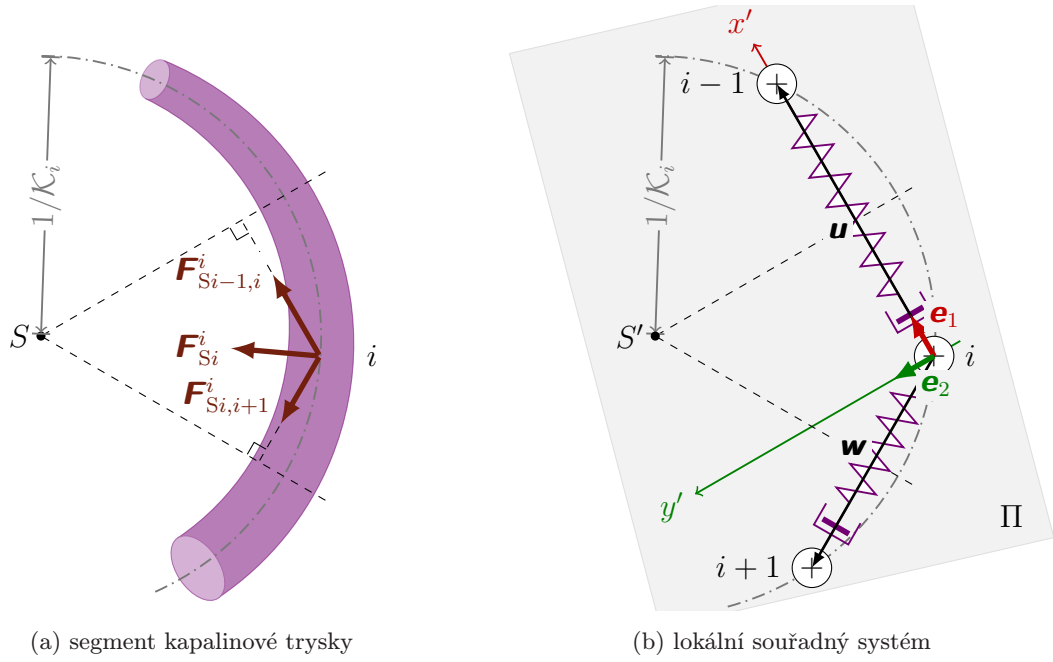
$$\begin{Bmatrix} x'_{i-1} \\ y'_{i-1} \end{Bmatrix} = \mathbf{G}^T \begin{Bmatrix} x_{i-1} \\ y_{i-1} \\ z_{i-1} \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} x'_i \\ y'_i \end{Bmatrix} = \mathbf{G}^T \begin{Bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} x'_{i+1} \\ y'_{i+1} \end{Bmatrix} = \mathbf{G}^T \begin{Bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{Bmatrix}.$$

Poloměr křivosti $1/\mathcal{K}_i$ se určí, v lokální kartézské souřadné soustavě $i[x'; y']$, z rovnice kružnice ve středovém tvaru. Soustava algebraických rovnic pro hledané neznámé S'_x , S'_y a $1/\mathcal{K}_i$ je

$$\begin{aligned} (x'_{i-1} - S'_x)^2 + (y'_{i-1} - S'_y)^2 &= (1/\mathcal{K}_i)^2, \\ (x'_i - S'_x)^2 + (y'_i - S'_y)^2 &= (1/\mathcal{K}_i)^2, \\ (x'_{i+1} - S'_x)^2 + (y'_{i+1} - S'_y)^2 &= (1/\mathcal{K}_i)^2. \end{aligned}$$

Zpětná transformace středu S' oskulační kružnice do globálního souřadného systému $O[x; y; z]$ je určena vztahem

$$\{S_x; S_y; S_z\}^T = \{x_i; y_i; z_i\}^T + (S'_x - x'_i) \mathbf{e}_1 + (S'_y - y'_i) \mathbf{e}_2.$$



(a) segment kapalinové trysky

(b) lokální souřadný systém

Obr. 4.6: Efekt povrchového napětí na zakřivený segment kapalinové trysky. \mathcal{K}_i — křivost kapalinové trysky, S — střed oskulační kružnice, \mathbf{e}_1 — jednotkový vektor souřadné osy x' , \mathbf{e}_2 — jednotkový vektor souřadné osy y' , \mathbf{u} , \mathbf{w} — vektory určující rovinu Π , \mathbf{F}_{Si}^i — výslednice sil povrchového napětí.

je rovna derivaci povrchové energie $E_{i-1,i}$, resp. $E_{i,i+1}$, podle délky $l_{i-1,i}$, resp. $l_{i,i+1}$, přímočarého segmentu trysky. Derivováním vztahů (52) a (53) se dostane

$$\mathbf{F}_{Si-1,i}^i = \frac{dE_{i-1,i}}{dl_{i-1,i}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} = \frac{\gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}}}{4} \left(\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|}, \quad (54)$$

$$\mathbf{F}_{Si,i+1}^i = \frac{dE_{i,i+1}}{dl_{i,i+1}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} = \frac{\gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}}}{4} \left(\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|}. \quad (55)$$

Výsledná síla povrchového napětí \mathbf{F}_{Si}^i působící na i -tý hmotný bod s nábojem (viz obr. 4.6) je rovna vektorovému součtu sil definovaných vztahy (54) a (55). Tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{Si}^i &= \mathbf{F}_{Si-1,i}^i + \mathbf{F}_{Si,i+1}^i \\ &= \frac{\gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}}}{4} \left[\left(\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + \left(\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right]. \end{aligned} \quad (56)$$

4.3.5 Síla odporu prostředí

Elektrostatické zvlákňování je metoda pro laboratorní i průmyslovou výrobu polymerních nanovláken submikronových rozměrů. Mezi vlastnosti, jimiž se takto připravená vlákna vyznačují, patří zejména jejich velký měrný povrch. Proto hrají při tomto procesu důležitou roli plošné síly, na rozdíl od sil objemových (např. tíhová síla). Z tohoto důvodu je nezbytné zahrnout do matematického modelu také vliv aerodynamického

odporu prostředí. Síla zahrnující odpor prostředí, resp. vzduchu, je obecně definována vztahem (viz [45, str. 530])

$$\mathbf{F}_D = C_D A \frac{\rho_a \mathbf{v}^2}{2}, \quad (57)$$

kde C_D je koeficient aerodynamického odporu, A je charakteristická plocha a ρ_a je měrná hmotnost vzduchu.

Celková odporová síla — působící proti pohybu elektricky nabitě kapalinové trysky — je rovna součtu třecí a tlakové složky odporu. Třecí odpor je způsoben tečným napětím v mezní vrstvě tekutiny. Tlakový odpor je důsledkem oddělení proudnic od povrchu obtékaného tělesa a vytvoření úplavu. Toto narušení proudnic je závislé na tvaru tělesa a také na Reynoldsově čísle proudění. Vliv drsnosti povrchu se neuvažuje. Odporová síla $\mathbf{F}_{D_{i-1,i}}^i$, resp. $\mathbf{F}_{D_{i,i+1}}^i$, jejíž nositelka je totožná s normálou ideálního přímočarého segmentu $(i-1, i)$, resp. $(i, i+1)$, elektricky nabitě trysky je rovna

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{D_{i-1,i}}^i &= \mathbf{F}_{f_{i-1,i}} + \mathbf{F}_{p_{i-1,i}} \\ &= C_f S_{f_{i-1,i}} \frac{\rho_a (\mathbf{v}_{n_{i-1,i}}^i)^2}{2} + C_p A_{p_{i-1,i}} \frac{\rho_a (\mathbf{v}_{t_{i-1,i}}^i)^2}{2}, \end{aligned} \quad (58)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{D_{i,i+1}}^i &= \mathbf{F}_{f_{i,i+1}} + \mathbf{F}_{p_{i,i+1}} \\ &= C_f S_{f_{i,i+1}} \frac{\rho_a (\mathbf{v}_{n_{i,i+1}}^i)^2}{2} + C_p A_{p_{i,i+1}} \frac{\rho_a (\mathbf{v}_{t_{i,i+1}}^i)^2}{2}, \end{aligned} \quad (59)$$

kde C_f je koeficient třecího odporu, C_p je koeficient tlakového odporu, $S_{f_{i-1,i}}$, $S_{f_{i,i+1}}$ jsou povrchy poloviny délky válcového segmentu trysky, tedy

$$\begin{aligned} S_{f_{i-1,i}} &= \frac{1}{2} \pi d_{i-1,i} l_{i-1,i}, \\ S_{f_{i,i+1}} &= \frac{1}{2} \pi d_{i,i+1} l_{i,i+1}, \end{aligned} \quad (60)$$

$A_{p_{i-1,i}}$, $A_{p_{i,i+1}}$ jsou maximální příčné průřezy poloviny délky segmentu trysky, tedy

$$\begin{aligned} A_{p_{i-1,i}} &= \frac{1}{2} d_{i-1,i} l_{i-1,i}, \\ A_{p_{i,i+1}} &= \frac{1}{2} d_{i,i+1} l_{i,i+1} \end{aligned} \quad (61)$$

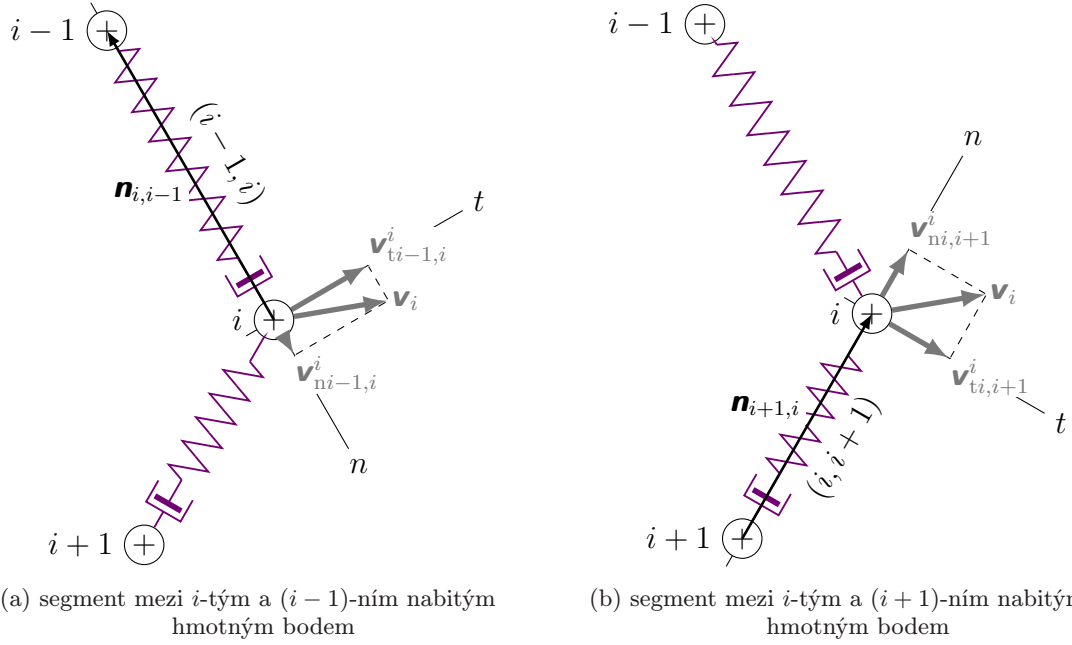
a kde $\mathbf{v}_{n_{i-1,i}}^i$, $\mathbf{v}_{n_{i,i+1}}^i$, $\mathbf{v}_{t_{i-1,i}}^i$, $\mathbf{v}_{t_{i,i+1}}^i$ jsou kolmé projekce okamžité rychlosti i -tého nabitě hmotného bodu do normálového (osového), resp. tečného, směru ideálního přímočarého segmentu $(i-1, i)$, resp. $(i, i+1)$, zelektrizované trysky (viz obr. 4.7). Tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n_{i-1,i}}^i &= \frac{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_{i,i-1}}{\mathbf{n}_{i,i-1} \cdot \mathbf{n}_{i,i-1}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|}, \\ \mathbf{v}_{n_{i,i+1}}^i &= \frac{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_{i+1,i}}{\mathbf{n}_{i+1,i} \cdot \mathbf{n}_{i+1,i}} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}|} \end{aligned}$$

a potom

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{t_{i-1,i}}^i &= \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{n_{i-1,i}}^i, \\ \mathbf{v}_{t_{i,i+1}}^i &= \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{n_{i,i+1}}^i, \end{aligned}$$

kde $\mathbf{n}_{i,i-1} = \mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i$ a $\mathbf{n}_{i+1,i} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}$ jsou normálové vektory odpovídajících segmentů trysky. (Poznámka: rozklad rychlosti, \mathbf{v}_i , znázorněný na obr. 4.7 je korektní



Obr. 4.7: Rozklad okamžité rychlosti i -tého nabitého hmotného bodu do normálového a tečného směru ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. n —normála segmentu, t —tečna segmentu, \mathbf{v}_i —okamžitá rychlost nabitého hmotného bodu trysky, $\mathbf{v}_{ti-1,i}^i$ —projekce okamžité rychlosti do tečny segmentu $(i-1, i)$, $\mathbf{v}_{ni-1,i}^i$ —projekce okamžité rychlosti do normály segmentu $(i-1, i)$, $\mathbf{v}_{ti,i+1}^i$ —projekce okamžité rychlosti do tečny segmentu $(i, i+1)$, $\mathbf{v}_{ni,i+1}^i$ —projekce okamžité rychlosti do normály segmentu $(i, i+1)$.

za předpokladu, že jsou si rychlosti hmotných bodů i a $i-1$, resp. i a $i+1$, blízké. Pohyb segmentu trysky je totiž určen dvěma nabitými hmotnými body.)

Podle monografie [29] je doporučeno volit koeficient třecího odporu $C_f = f(\text{Re}_l)$ a koeficient tlakového odporu $C_p = f(\text{Re}_d)$, kde Re_l a Re_d jsou Reynoldsova čísla definovaná

$$\text{Re}_l = \frac{\rho_a l_{i-1,i} |\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|}{\eta_a}, \quad \text{resp.} \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_a l_{i,i+1} |\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|}{\eta_a}, \quad (62)$$

$$\text{Re}_d = \frac{\rho_a d_{i-1,i} |\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|}{\eta_a}, \quad \text{resp.} \quad \text{Re}_d = \frac{\rho_a d_{i,i+1} |\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|}{\eta_a}, \quad (63)$$

kde η_a je dynamická viskozita vzduchu.

Za předpokladu laminárního proudění ve zvlákňovacím prostoru platí (viz např. [45, str. 538] pro koeficient třecího odporu vztah

$$C_f = \frac{24}{\text{Re}_l} \quad (64)$$

a pro koeficient tlakového odporu vztah

$$C_p = \frac{24}{\text{Re}_d}. \quad (65)$$

Výsledná síla odporu vzduchu \mathbf{F}_{Di} působící na i -tý hmotný bod s nábojem je rovna vektorovému součtu sil definovaných vztahy (58) a (59). Po substituci (60)

až (65) do (58), (59) se dostane

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{Di} &= \mathbf{F}_{Di-1,i}^i + \mathbf{F}_{Di,i+1}^i \\ &= 6 \eta_a \pi \left[d_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|} + d_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|} \right] + \\ &\quad + 6 \eta_a \left[l_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|} + l_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|} \right] \end{aligned}$$

a následným dosazením (47) do předchozího řádku

$$\begin{aligned} &= 6 \eta_a \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|} + \left(\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|} \right] + \\ &\quad + 6 \eta_a \left[l_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|} + l_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|} \right]. \quad (66) \end{aligned}$$

Zanedbá-li se třetí složka odporu vzduchu, je možné použít zjednodušující přístup výpočtu založený na plouživém (při malých Reynoldsových číslech) obtékání nekonečně dlouhého válce v nekonečně velkém prostoru. Pro koeficient aerodynamického odporu odvodil Lamb rovnici [46, viz str. 45]

$$C_D = \frac{8 \pi}{\text{Re}_d (2.002 - \ln \text{Re}_d)}. \quad (67)$$

Výsledná síla odporu vzduchu \mathbf{F}_{Di} působící na i -tý hmotný bod s nábojem je opět rovna vektorovému součtu sil, $\mathbf{F}_{Di-1,i}^i$ a $\mathbf{F}_{Di,i+1}^i$, které se pro tento zjednodušující přístup vypočítají dosazením vztahů (67), (63) a (61) do (57)

$$\mathbf{F}_{Di} = 2 \eta_a \pi \left[\frac{l_{i-1,i} \mathbf{v}_{ti-1,i}^i}{2.002 - \ln \frac{\rho_a d_{i-1,i} |\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|}{\eta_a}} + \frac{l_{i,i+1} \mathbf{v}_{ti,i+1}^i}{2.002 - \ln \frac{\rho_a d_{i,i+1} |\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|}{\eta_a}} \right].$$

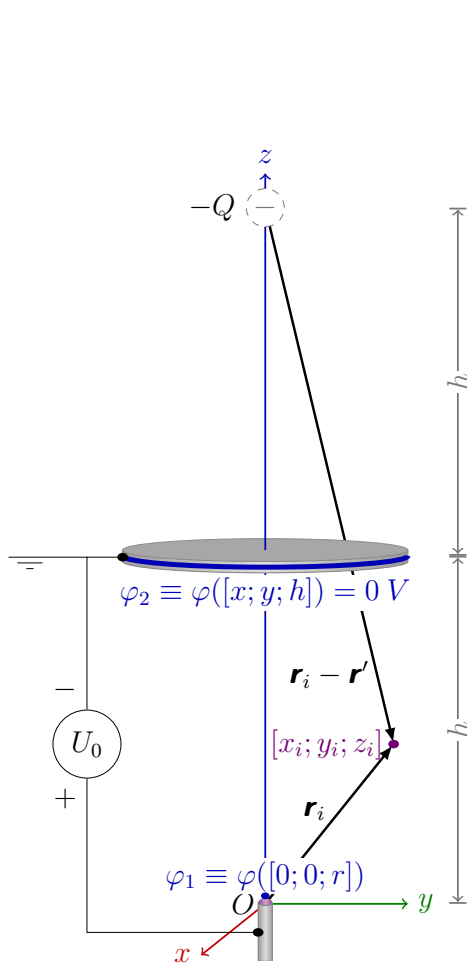
4.4 Pohybová rovnice

Pohybová rovnice bude sestavena za následujících předpokladů. Nechť se v inerciální vztažné soustavě pohybuje hmotný bod i s nábojem q_i , který má okamžitou hmotnost $m_i = \frac{1}{2} (m_{i-1,i} + m_{i,i+1})$ a okamžitou rychlost \mathbf{v}_i . Jeho hybnost je v čase t dána vztahem

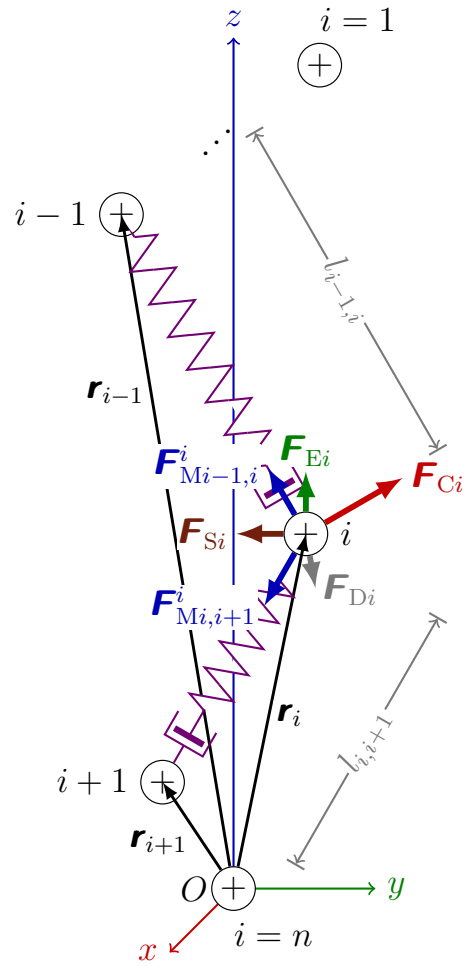
$$\mathbf{p}_i^t = m_i \mathbf{v}_i. \quad (68)$$

Dále nechť za čas dt dojde k úbytku rozpouštědla z elektricky nabitě kapalinové trysky o hmotnosti $dm_i = \frac{1}{2} (dm_{si-1,i} + dm_{si,i+1})$. V důsledku toho dojde ke zmenšení náboje q_i i hmotnosti nabitého hmotného bodu na $m_i - dm_i$ a zvětšení jeho rychlosti na $\mathbf{v}_i + d\mathbf{v}_i$. V čase $t + dt$ bude mít hmotný bod i s nábojem hybnost

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_i^{t+dt} &= (m_i - dm_i)(\mathbf{v}_i + d\mathbf{v}_i), \\ &= m_i \mathbf{v}_i + m_i d\mathbf{v}_i - dm_i \mathbf{v}_i - dm_i d\mathbf{v}_i. \quad (69) \end{aligned}$$



Obr. 4.8: Metoda elektrického zobrazení pro splnění okrajových podmínek konstantního elektrického potenciálu. φ_1 — elektrický potenciál kapiláry, φ_2 — elektrický potenciál uzemněného kolektoru, h — vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem, Q — fiktivní náboj, U_0 — aplikované elektrické napětí, \mathbf{r}_i — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, \mathbf{r}' — polohový vektor středu fiktivního náboje.



Obr. 4.9: Silový rozbor na i -tém nabitém hmotném bodě zobecněného modelu elektricky nabité trysky. l — okamžitá délka, \mathbf{r} — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, \mathbf{F}_C — elektrostatická síla, \mathbf{F}_D — odporová síla vzduchu, \mathbf{F}_E — síla vnějšího elektrostatického pole, \mathbf{F}_M — viskoelastická síla, \mathbf{F}_S — síla povrchového napětí.

Za dobu dt tedy dojde ke změně hybnosti

$$d\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i^{t+dt} - \mathbf{p}_i^t$$

a po substituci vztahů (68) a (69) se dostane

$$\begin{aligned} d\mathbf{p}_i &= m_i \mathbf{v}_i + m_i d\mathbf{v}_i - dm_i \mathbf{v}_i - dm_i d\mathbf{v}_i - m_i \mathbf{v}_i, \\ &= m_i d\mathbf{v}_i - dm_i \mathbf{v}_i - dm_i d\mathbf{v}_i. \end{aligned}$$

Zanedbáním nekonečně malé veličiny druhého řádu $dm_i d\mathbf{v}_i$ je podle druhého Newtonova pohybového zákona, časová změna hybnosti nabitého hmotného bodu i

rovna výslednici vnějších sil. Na základě rozboru sil působících na i -tý hmotný bod s nábojem (viz obr. 4.9) lze sestavit pohybovou rovnici ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} \equiv m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} - \frac{1}{2} \left(\frac{dm_{si-1,i}}{dt} + \frac{dm_{si,i+1}}{dt} \right) \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_{Ei} + \mathbf{F}_{Ci} + \mathbf{F}_{Mi} + \mathbf{F}_{Si} - \mathbf{F}_{Di}.$$

Po úpravě, převedení na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu a substituci vztahů, (42), (48), (49), (56) a (66), se dostane pohybová rovnice i -tého nabitěho hmotného bodu ve tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \frac{1}{2} \left(\frac{dm_{si-1,i}}{dt} + \frac{dm_{si,i+1}}{dt} \right) \mathbf{v}_i + q_i \mathbf{E} \\ &+ \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ &+ \frac{\pi d_0^2 l_0}{4} \left[\frac{\Lambda_{i-1,i} \sigma_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + \frac{\Lambda_{i,i+1} \sigma_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right] \\ &+ \frac{\gamma \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}}}{2} \left[\left(\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + \left(\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right] \\ &- 6\eta_a \pi d_0 l_0^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|} + \left(\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|} \right] \\ &- 6\eta_a \left[l_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|} + l_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|} \right]. \end{aligned} \quad (70)$$

Rovnice (33) pro hmotnostní tok rozpouštědla, konstitutivní rovnice (44) reologického modelu, definiční kinematická rovnice (70) a pohybová rovnice (71) tvoří soustavu obyčejných diferenciálních rovnic, která popisuje chování segmentu zelektrizované kapalinové trysky v trojrozměrné kartézské souřadné soustavě. Přibližné řešení se bude hledat numerickou metodou (viz str. 49, odd. 5.4.2).

4.5 Počáteční perturbace

Časově proměnlivá porucha v příčném směru, tzv. perturbace, způsobující otáčivý pohyb zelektrizované kapalinové trysky po kuželové spirále [44], vzniká v důsledku nestability povrchu kapaliny, jež je způsobená tepelnými fluktuacemi [15], dále fluktuacemi rozdílů elektrostatických potenciálů [30], vibracemi zařízení a vnějšími akustickými vlivy v laboratoři [8][30]. V matematickém modelu je perturbace realizována složením dvou harmonických kmitů stejných amplitud a stejných úhlových frekvencí v navzájem kolmých souřadných osách x a y . Bez takto vnesené perturbace by se elektricky nabitá tryska pohybovala pouze přímočaře ve směru souřadné osy z , ale tomu ve skutečnosti nikdy nedochází. Důvodem je matematická abstrakce, jež je přítomna v modelu, a také

dokonalá symetrie diskového uzemněného kolektoru. Malá perturbace je tedy nezbytná pro rozběhnutí mechanismu bičující nestability zelektrizované trysky.

Při fázovém rozdílu $\varphi_0 = \frac{\pi}{2}$, resp. $\frac{3\pi}{2}$, skládaných kmitů vznikají pravotočivé, resp. levotočivé, kruhové kmity, při kterých se nabitý hmotný bod pohybuje rovnoměrně po kružnici [43]. Na základě zde uvedeného lze okamžitou výchylku posledního nabitého hmotného bodu vyjádřit vztahy (viz [43, str. 245])

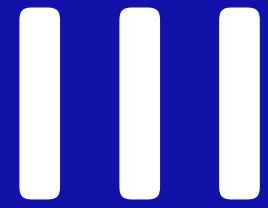
$$\begin{aligned}\delta_n &= (A + \text{rand } \delta) \sin(\omega t) \mathbf{i} + (A + \text{rand } \delta) \sin(\omega t + \frac{3\pi}{2}) \mathbf{j} \\ &= (A + \text{rand } \delta) \sin(\omega t) \mathbf{i} + (A + \text{rand } \delta) \cos(\omega t) \mathbf{j},\end{aligned}\quad (72)$$

kde A je (na tomto místě) amplituda perturbace, $\text{rand } \delta$ je náhodně generovaným šum, ω je úhlová frekvence perturbace a t je čas.

Kmitání posledního hmotného bodu s nábojem způsobí preturbační vlny, které se šíří řadou nabitých hmotných bodů. Složením dvou navzájem kolmých harmonických vln, které se šíří ve směru souřadné osy z , lze vyjádřit výchylky i -tého nabitého hmotného bodu. Pro harmonické vlny je možné vyjít z rovnice harmonického kmitání (72) a za argument goniometrické funkce dosadit pro levotočivý kruhový kmit $k z_i - \omega t$, kde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ se nazývá úhlový vlnčet [43] nebo také vlnové číslo. Po substituci se dostane (viz [43, str. 269])

$$\delta_i = (A + \text{rand } \delta) \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} z_i - \omega t\right) \mathbf{i} + (A + \text{rand } \delta) \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} z_i - \omega t\right) \mathbf{j}, \quad (73)$$

kde λ je vlnová délka perturbace.



Numerický model

5

Numerická realizace úlohy

Při řešení praktických úloh nastane ve většině případů situace, kdy jsou rovnice zformulované v matematickém modelu, řešitelné analytickými metodami jen obtížně, nebo by řešení těmito metodami zabralo příliš mnoho času, a nebo dokonce analytické řešení není možné nalézt. V takových případech je nutné použít výpočetní techniku a řešení hledat alespoň přibližně pomocí vhodné numerické metody. Obvyčejné diferenciální rovnice popisující ideální přímočarý segment zelektrizované trysky nejsou výjimkou, proto je cílem této kapitoly seznámit čtenáře s diskretizací úlohy a s numerickou metodou, která byla použita k nalezení přibližného řešení.

5.1 Diskretizace časové proměnné

Při numerickém řešení je potřeba provést časovou diskretizaci spojitých funkčních závislostí, tj. zvolit vhodný časový interval Δt a přejít tak od spojitého času k diskrétnímu. Místo spojitých hodnot stavových proměnných v matematickém modelu se v numerickém modelu pracuje pouze s jejich konečnou posloupností. Časovou změnu mechanického normálového napětí σ , hmotnosti rozpouštědla m_s , okamžitého polohového vektoru \mathbf{r} a okamžité rychlosti \mathbf{v} lze aproximovat pomocí dopředných diferenčních schémat

$$\left. \frac{d\sigma_{i,i+1}}{dt} \right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\sigma_{i,i+1}^{t+\Delta t} - \sigma_{i,i+1}^t}{\Delta t}, \quad (74)$$

$$\left. \frac{dm_{si,i+1}}{dt} \right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{m_{si,i+1}^{t+\Delta t} - m_{si,i+1}^t}{\Delta t}, \quad (75)$$

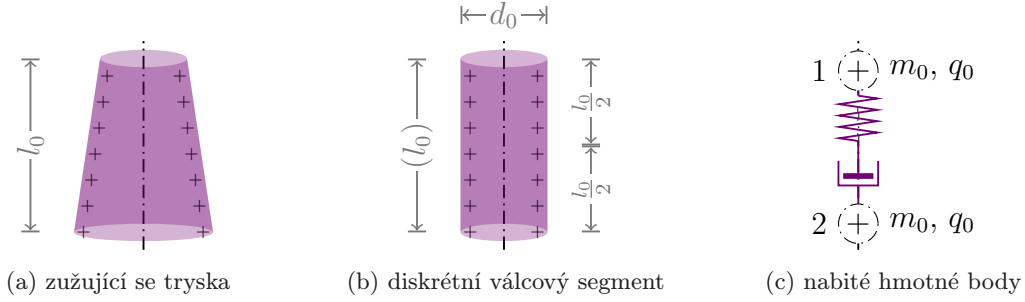
$$\left. \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\mathbf{r}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{r}_i^t}{\Delta t}, \quad \left. \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^t}{\Delta t}, \quad (76)$$

kde horní index znamená uzel časové osy, Δt je časový krok numerické metody a t je simulační čas.

5.2 Diskretizace kapalinové trysky

Spojité elektricky nabitá kapalinová tryska [viz obr. 5.1(a)] je diskretizována rozdělením na válcové segmenty [viz obr. 5.1(b)] s délkou l_0 a průměrem d_0 . Tyto diskrétní

válcové segmenty jsou dále nahrazeny hmotnými body, jimž je přiřazena hmotnost m_0 a elektrický náboj q_0 , které jsou vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 5.1(c) nebo také str. 25, obr. 4.1(b)]. Hmotné body jsou místa, kde se jednak počítají veškeré silové účinky a zároveň plní funkci kloubu ve „viskoelastickém řetězci“. (Poznámka: diskretizace navržená na str. 14, kap. 3, má nevýhodu, že kloub neumožňuje přenášet ohybový moment.)



Obr. 5.1: Schema diskretizace spojitě kapalinové trysky.

Elektricky nabitá kapalinová tryska musí v ustáleném stavu splňovat podmínky platnosti zákona zachování hmoty

$$\frac{1}{4} \pi d_0^2 v_0 = Q_V \quad (77)$$

a elektrického náboje

$$\frac{1}{4} \pi d_0^2 \kappa E_z + \pi d_0 v_0 q_\sigma = I_0, \quad (78)$$

kde Q_V je objemový průtok polymerního roztoku kapilárou, κ je měrná elektrická vodivost polymerního roztoku, E_z je z -složka intenzity \mathbf{E} elektrického pole, q_σ je plošná hustota náboje kapalinové trysky a I_0 je elektrický proud protékající kapalinovou tryskou (viz např. [3]). Ze zákonů zachování (77) a (78) lze vyjádřit plošnou hustotu elektrického náboje kapalinové trysky

$$q_\sigma = \frac{4 d_0 I_0 - \kappa \pi d_0^3 E_z}{16 Q_V}.$$

Počáteční průměr d_0 a délka l_0 diskrétního válcového segmentu elektricky nabitě kapalinové trysky jsou zvoleny stejně jako v literatuře [8], tedy: $d_0 = 300 \mu\text{m}$ a $l_0 = h/50\,000$, kde h je vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem. Z hmotnosti polymeru m_p a počáteční hmotnosti rozpouštědla m_{s0} je vypočítána hodnota počáteční hmotnosti

$$m_0 = \frac{1}{2} (m_p + m_{s0}) \quad (79)$$

a z plošné hustoty náboje, q_σ , kapalinové trysky a rozměrů, d_0 , l_0 , diskrétního válcového segmentu trysky je vypočítána hodnota počátečního elektrického náboje

$$q_0 = \frac{1}{2} \pi q_\sigma d_0 l_0, \quad (80)$$

kteří jsou přiřazeny hmotným bodům 1 a 2 „viskoelastické činky“ [viz obr. 5.1(c)].

5.3 Bezrozměrný tvar rovnic

Při konkrétním numerickém řešení je často vhodné provést výpočet v bezrozměrném tvaru rovnic (viz např. [47]). Výhoda tohoto přístupu je především v numerické stabilitě použitých algoritmů, protože nedochází v takové míře ke vzniku a propagaci zaokrouhlovacích chyb nebo podtečení¹⁾ datového typu v důsledku počítání s velmi malými čísly. Nejdříve je potřeba definovat následující skupinu bezrozměrných veličin²⁾:

- měřítkový faktor pro mechanické normálové napětí v ideálním přímočarém segmentu elektricky nabitě trysky

$$\sigma_{i,i+1}^* = \frac{\sigma_{i,i+1}}{E_0}; \quad (81)$$

- měřítkový faktor pro dynamickou viskozitu polymerního roztoku

$$\eta_{i,i+1}^* = \frac{\eta_{i,i+1}}{\eta_0}; \quad (82)$$

- měřítkový faktor pro relaxační čas polymerního roztoku

$$\tau_{i,i+1}^* = \frac{\tau_{i,i+1}}{\tau_0}; \quad (83)$$

- měřítkový faktor pro průměr ideálního přímočarého segmentu elektricky nabitě trysky

$$d_{i,i+1}^* = \frac{d_{i,i+1}}{d_0}; \quad (84)$$

- měřítkový faktor pro složky polohového vektoru hmotného bodu s nábojem

$$x_i^* = \frac{x_i}{L}, \quad y_i^* = \frac{y_i}{L}, \quad z_i^* = \frac{z_i}{L}; \quad (85)$$

- měřítkový faktor pro hmotnost

$$m_i^* = \frac{m_i}{m_0}; \quad (86)$$

- měřítkový faktor pro náboj

$$q_i^* = \frac{q_i}{q_0}; \quad (87)$$

- měřítkový faktor pro čas

$$t^* = \frac{t}{\tau_0}, \quad (88)$$

kde $L = \sqrt{(\tau_0 q_0^2)/(\varepsilon_0 \varepsilon_r \pi^2 \eta_0 d_0^2)}$ je charakteristický délkový měřítkový faktor³⁾.

Vyjádří-li se ze vztahů (81) až (88) proměnné bez symbolu *, potom se po substituci do původních rovnic (33), (44), (70) a (71) dostane soustava obyčejných diferenciálních rovnic přeškálovaná do bezrozměrného tvaru

¹⁾ Způsobeno omezenou možností reprezentace čísel v počítačích. Přesnost reálného čísla se udává tzv. strojovým epsilon. To je definované jako nejmenší číslo, které pokud se přičte k jedničce, dá výsledek různý od jedné (viz např. [48]).

²⁾ Symbolem * budou v celé práci označeny bezrozměrné veličiny.

³⁾ Délka vypočtená z rovnosti koeficientů C_C^* a C_M^* [viz str. 20, obr. 3.3(b)].

$$\frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} = C_m^* (v_{ni,i+1}^i)^{\frac{1}{3}} (l_{i,i+1})^{\frac{4}{3}}, \quad (89)$$

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}^*}{dt^*} = \frac{\eta_{i,i+1}^* (\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_{i+1}^*) \cdot (\mathbf{v}_i^* - \mathbf{v}_{i+1}^*)}{\tau_{i,i+1}^* (l_{i,i+1}^*)^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}^*}{\tau_{i,i+1}^*}, \quad (90)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i^*}{dt^*} = \mathbf{v}_i^*, \quad (91)$$

$$\begin{aligned} m_i^* \frac{d\mathbf{v}_i^*}{dt^*} &= \frac{1}{2} \left(\frac{dm_{si-1,i}^*}{dt^*} + \frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} \right) \mathbf{v}_i^* + C_E^* q_i^* \mathbf{E}^* \\ &+ C_C^* q_i^* \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_i^*}{|\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_j^*|^2} \frac{\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_j^*}{|\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_j^*|} \\ &+ C_M^* \left(\sigma_{i-1,i}^* d_{i-1,i}^{*2} \frac{\mathbf{r}_{i-1}^* - \mathbf{r}_i^*}{|\mathbf{r}_{i-1}^* - \mathbf{r}_i^*|} + \sigma_{i,i+1}^* d_{i,i+1}^{*2} \frac{\mathbf{r}_{i+1}^* - \mathbf{r}_i^*}{|\mathbf{r}_{i+1}^* - \mathbf{r}_i^*|} \right) \\ &+ C_S^* \left(d_{i-1,i}^* \frac{\mathbf{r}_{i-1}^* - \mathbf{r}_i^*}{|\mathbf{r}_{i-1}^* - \mathbf{r}_i^*|} + d_{i,i+1}^* \frac{\mathbf{r}_{i+1}^* - \mathbf{r}_i^*}{|\mathbf{r}_{i+1}^* - \mathbf{r}_i^*|} \right) \\ &+ C_{Df}^* \left(d_{i-1,i}^* \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|} + d_{i,i+1}^* \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|} \right) \\ &+ C_{Dp}^* \left(l_{i-1,i}^* \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|} + l_{i,i+1}^* \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|} \right). \end{aligned} \quad (92)$$

Další skupina bezrozměrných konstant, jež se vyskytuje v rovnicích (89) a (92), je definována následujícími vztahy

$$C_m^* = \frac{0.495 \pi \rho \nu_a^{\frac{1}{6}} \tau_0^{\frac{2}{3}} \mathcal{D}_{s,a}^{\frac{1}{2}} L^{\frac{5}{3}} (c_{s,eq} - c_{s,\infty})}{m_0},$$

$$C_E^* = \frac{\tau_0^2 q_0^2}{\varepsilon_0 m_0 L^3},$$

$$C_C^* = \frac{\tau_0^2 q_0^2}{4 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r m_0 L^3},$$

$$C_M^* = \frac{\pi \eta_0 \tau_0 d_0^2}{4 m_0 L},$$

$$C_S^* = \frac{\pi \gamma \tau_0^2 d_0}{m_0 L},$$

$$C_{Df}^* = -\frac{6 \pi \eta_a \tau_0 d_0}{m_0},$$

$$C_{Dp}^* = -\frac{6 \eta_a \tau_0 L}{m_0}.$$

Na závěr je potřeba pro účely ukončovacích podmínek [viz str. 76, nerov. (96) a (97)] definovat bezrozměrnou diskretizační délku i vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem

$$l_0^* = \frac{l_0}{L}, \quad h^* = \frac{h}{L}.$$

5.4 Diskretizovaný tvar rovnic

V odd. 5.3 bylo uvedeno přeškálování obyčejných diferenciálních rovnic do bezrozměrného tvaru. Tento odstavec bude pojednávat o diskretizaci bezrozměrných rovnic (89) až (92). Nejdříve je však potřeba provést diskretizaci materiálových vlastností zvláknovaného polymerního roztoku a úbytku hmotnosti i náboje, ke kterému dochází v důsledku odstraňování rozpouštědla z kapalinové trysky. Na začátku časového kroku Δt se pomocí vztahů

$$\begin{aligned} c_{pi,i+1} &= \frac{c_{p0}}{c_{p0} + m_{si,i+1}^{*t}}, \\ \eta_{i,i+1}^{*t} &= \frac{10^B c_{pi,i+1}^m}{\eta_0}, \\ \tau_{i,i+1}^{*t} &= \frac{c_{pi,i+1}}{c_{p0}}, \end{aligned}$$

vypočítá pro každý ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky „viskoelastického řetězce“ nová hodnota dynamické viskozity $\eta_{i,i+1}$, relaxačního času $\tau_{i,i+1}$ a také pro každý hmotný bod, i , nová hodnota

$$\begin{aligned} m_i^{*t} &= c_{p0} + \frac{m_{si-1,i}^{*t} + m_{si,i+1}^{*t}}{2}, \\ q_i^{*t} &= \frac{\Lambda_{i-1,i} + \Lambda_{i,i+1}}{2}, \end{aligned}$$

hmotnosti m_i a náboje q_i v bezrozměrných veličinách.

5.4.1 Explicitní Eulerova metoda

Eulerova metoda je nejjednodušší jednokroková metoda řešení počátečních úloh pro obyčejné diferenciální rovnice (viz např. [38]). Její nesporná výhoda spočívá v jednoduché implementaci výpočetního algoritmu. Na druhou stranu je potřeba pro stabilitu a dostatečnou přesnost volit dostatečně malý časový krok Δt .

5.4.2 Metoda prediktor–korektor

Metoda prediktor–korektor patří do skupiny vícekových metod na řešení počátečních úloh pro obyčejné diferenciální rovnice (viz např. [38]). Tato metoda je založena na následující myšlence: nejprve je v každém kroku vypočtena počáteční aproximace, tzv. predikce, která je v dalším kroku zpřesněna, tzv. korekce.

V této práci je pro predikci použita explicitní Eulerova metoda a pro korekci implicitní Adams–Moultonova metoda druhého řádu (viz např. [38, str. 162]). Touto volbou se dosáhne největší efektivity výpočetního algoritmu, neboť se v každém kroku počítají pouze dvě funkční hodnoty Fickova zákona, konstitutivní a pohybové rovnice.

Postačující podmínka pro konvergenci během iteračního procesu (viz např. [38, str. 161]) je $\Delta t < 2/M$, kde M je Lipschitzova konstanta (viz str. 21, odd. 3.7).

Prediktor (P) využitím dopředných diferenčních schémat (74) a (76) se dostanou rekurentní vztahy pro explicitní Eulerovu metodu

$$\begin{aligned}
m_{si,i+1}^{*t+\Delta t} &= m_{si,i+1}^{*t} + \Delta t^* \left(C_m^* (l_{i,i+1}^{*t})^{\frac{4}{3}} |\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t}|^{\frac{1}{3}} \right), \\
m_{si,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \begin{cases} m_{si,i+1}^{*t+\Delta t} & \text{pro } m_{si,i+1}^{*t+\Delta t} > 0, \\ m_{si,i+1}^{*t} & \text{pro } m_{si,i+1}^{*t+\Delta t} < 0, \end{cases} \\
\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \sigma_{i,i+1}^{*t} + \Delta t^* \left(\frac{\eta_{i,i+1}^{*t} (\mathbf{r}_i^{*t} - \mathbf{r}_{i+1}^{*t}) \cdot (\mathbf{v}_i^{*t} - \mathbf{v}_{i+1}^{*t})}{\tau_{i,i+1}^{*t} (l_{i,i+1}^{*t})^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}^{*t}}{\tau_{i,i+1}^{*t}} \right), \\
\mathbf{a}_i^{*t;\Delta t} &= \frac{1}{2} (m_{si-1,i}^{*t} + m_{si,i+1}^{*t}) \mathbf{v}_i^{*t} \\
&\quad + \frac{C_E^* q_i^{*t}}{m_i^{*t}} \mathbf{E}^* \\
&\quad + \frac{C_C^* q_i^{*t}}{m_i^{*t}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_j^{*t} (\mathbf{r}_i^{*t} - \mathbf{r}_j^{*t})}{|\mathbf{r}_i^{*t} - \mathbf{r}_j^{*t}|^3} \\
&\quad + \frac{C_M^*}{m_i^{*t}} \frac{\sigma_{i-1,i}^{*t} (d_{i-1,i}^{*t})^2 (\mathbf{v}_{i-1}^{*t} - \mathbf{r}_i^{*t})}{l_{i-1,i}^{*t}} \\
&\quad + \frac{C_M^*}{m_i^{*t}} \frac{\sigma_{i,i+1}^{*t} (d_{i,i+1}^{*t})^2 (\mathbf{r}_{i+1}^{*t} - \mathbf{r}_i^{*t})}{l_{i,i+1}^{*t}} \\
&\quad + \frac{C_S^*}{m_i^{*t}} \frac{d_{i-1,i}^{*t} (\mathbf{v}_{i-1}^{*t} - \mathbf{r}_i^{*t})}{l_{i-1,i}^{*t}} \\
&\quad + \frac{C_S^*}{m_i^{*t}} \frac{d_{i,i+1}^{*t} (\mathbf{r}_{i+1}^{*t} - \mathbf{r}_i^{*t})}{l_{i,i+1}^{*t}} \\
&\quad + \frac{C_{Df}^*}{m_i^{*t}} \left(d_{i-1,i}^{*t} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^{*i,t})^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^{*i,t}|} + d_{i,i+1}^{*t} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t})^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t}|} \right) \\
&\quad + \frac{C_{Dp}^*}{m_i^{*t}} \left(l_{i-1,i}^{*t} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^{*i,t})^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^{*i,t}|} + l_{i,i+1}^{*t} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^{*i,t})^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^{*i,t}|} \right), \\
\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \mathbf{v}_i^{*t} + \Delta t^* \mathbf{a}_i^{*t;\Delta t}, \\
\mathbf{r}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \mathbf{r}_i^{*t} + \Delta t^* \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t}.
\end{aligned} \tag{93}$$

Korektor (C) používá vztahy založené na numerické kvadratuře, konkrétně lichoběžníkové pravidlo

$$\begin{aligned}
m_{si,i+1}^{*t+\Delta t/2} &= m_{si,i+1}^{*t} + \frac{\Delta t^*}{2} \left(C_m^* (l_{i,i+1}^{*t})^{\frac{4}{3}} |\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t}|^{\frac{1}{3}} + C_m^* (l_{i,i+1}^{*t})^{\frac{4}{3}} |\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t+\Delta t}|^{\frac{1}{3}} \right), \\
m_{si,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t/2} &= \begin{cases} m_{si,i+1}^{*t+\Delta t/2} & \text{pro } m_{si,i+1}^{*t+\Delta t/2} > 0, \\ m_{si,i+1}^{*t} & \text{pro } m_{si,i+1}^{*t+\Delta t/2} < 0, \end{cases} \\
\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t/2} &= \sigma_{i,i+1}^{*t} + \frac{\Delta t^*}{2} \left(\frac{\eta_{i,i+1}^{*t}}{\tau_{i,i+1}^{*t}} \frac{(\mathbf{r}_{i+1}^{*t} - \mathbf{r}_{i+1}^{*t}) \cdot (\mathbf{v}_i^{*t} - \mathbf{v}_{i+1}^{*t})}{(l_{i,i+1}^{*t})^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}^{*t}}{\tau_{i,i+1}^{*t}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\eta_{i,i+1}^{*t+\Delta t}}{\tau_{i,i+1}^{*t+\Delta t}} \frac{(\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t} - \mathbf{r}_{i+1}^{*t+\Delta t}) \cdot (\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t} - \mathbf{v}_{i+1}^{*t+\Delta t})}{(l_{i,i+1}^{*t+\Delta t})^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t}}{\tau_{i,i+1}^{*t+\Delta t}} \right), \\
\mathbf{a}_i^{*t;\Delta t/2} &= \frac{1}{2} (m_{si-1,i}^{*t+\Delta t} + m_{si,i+1}^{*t+\Delta t}) \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t} \\
&\quad + \frac{C_E^* q_i^{*t+\Delta t}}{m_i^{*t+\Delta t}} \mathbf{E}^* \\
&\quad + \frac{C_C^* q_i^{*t+\Delta t}}{m_i^{*t+\Delta t}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_j^{*t+\Delta t} (\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t} - \mathbf{r}_j^{*t+\Delta t})}{|\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t} - \mathbf{r}_j^{*t+\Delta t}|^3} \\
&\quad + \frac{C_M^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \frac{\sigma_{i-1,i}^{*t+\Delta t} (d_{i-1,i}^{*t+\Delta t})^2 (\mathbf{r}_{i-1}^{*t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i-1,i}^{*t+\Delta t}} \\
&\quad + \frac{C_M^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \frac{\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t} (d_{i,i+1}^{*t+\Delta t})^2 (\mathbf{r}_{i+1}^{*t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i,i+1}^{*t+\Delta t}} \\
&\quad + \frac{C_S^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \frac{d_{i-1,i}^{*t+\Delta t} (\mathbf{r}_{i-1}^{*t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i-1,i}^{*t+\Delta t}} \\
&\quad + \frac{C_S^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \frac{d_{i,i+1}^{*t+\Delta t} (\mathbf{r}_{i+1}^{*t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i,i+1}^{*t+\Delta t}} \\
&\quad + \frac{C_{Df}^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \left(d_{i-1,i}^{*t+\Delta t} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^{*i,t+\Delta t})^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^{*i,t+\Delta t}|} + d_{i,i+1}^{*t+\Delta t} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t+\Delta t})^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^{*i,t+\Delta t}|} \right) \\
&\quad + \frac{C_{Dp}^*}{m_i^{*t+\Delta t}} \left(l_{i-1,i}^{*t+\Delta t} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^{*i,t+\Delta t})^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^{*i,t+\Delta t}|} + l_{i,i+1}^{*t+\Delta t} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^{*i,t+\Delta t})^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^{*i,t+\Delta t}|} \right), \\
\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2} &= \mathbf{v}_i^{*t} + \frac{\Delta t^*}{2} (\mathbf{a}_i^{*t;\Delta t} + \mathbf{a}_i^{*t;\Delta t/2}), \\
\mathbf{r}_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2} &= \mathbf{r}_i^{*t} + \frac{\Delta t^*}{2} (\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} + \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2}).
\end{aligned} \tag{94}$$

Počáteční podmínky pro Cauchyho úlohu jsou

$$\left. \begin{aligned} m_{si,i+1}^{*t} &= 1 - c_{p0} \\ \sigma_{i,i+1}^{*t} &= 0 \\ \mathbf{r}_{i+1}^{*t} &= \{0; 0; r/L\}^T \\ \mathbf{v}_{i+1}^{*t} &= \{0; 0; 0\}^T \end{aligned} \right\} \text{pro } i = n. \quad (95)$$

5.5 Odhad chyby metodou polovičního kroku

Pro odhad chyby přibližného řešení počáteční úlohy (93), (94) a (95) byla použita metoda polovičního kroku. Nevýhodou zmíněné metody ovšem je, že hodnotu přibližného řešení v čase t je nutné počítat dvakrát; jednou s krokem Δt a jednou s polovičním krokem $\Delta t/2$ [38]. Chyba jednotlivých stavových proměnných je pro metodu druhého řádu dána (viz [38, str. 140]) vztahy

$$\begin{aligned} \text{err } \sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \frac{4\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t} - 4\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t;\Delta t/2}}{3}, \\ \text{err } m_i^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \frac{4m_i^{*t+\Delta t;\Delta t} - 4m_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2}}{3}, \\ \text{err } \mathbf{r}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \frac{4\mathbf{r}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} - 4\mathbf{r}_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2}}{3}, \\ \text{err } \mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} &= \frac{4\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t} - 4\mathbf{v}_i^{*t+\Delta t;\Delta t/2}}{3}, \end{aligned}$$

kde horní index za ; znamená krok. Odhad chyby je použit pro adaptivní volbu časového kroku Δt tak, aby lokální diskretizační chyba nepřesáhla zadanou toleranci.

5.6 Vstupní parametry numerického modelu

Vstupní parametry, se kterými pracuje matematický model, resp. numerický model, jsou přehledně uspořádány v tab. 5.1. V počítačové aplikaci jsou vstupní parametry zadávány buď prostřednictvím grafického uživatelského rozhraní (viz str. 57, obr. 6.3) nebo konfiguračním souborem. Konfigurační soubor lze pak načíst jako argument programu při spouštění z konzole. Pokud chce uživatel spustit simulaci s parametry uloženými v souboru např. `6wtPE0.par`, jenž má uložený v adresáři `./pars/`, napíše v konzoli:

```
$ jozin ./pars/6wtPE0.par
```

Tím dojde k načtení příslušných parametrů simulace a uživatel může spustit výpočet kliknutím na tlačítko `Start` v grafickém uživatelském rozhraní aplikace.

Tab. 5.1: Přehled vstupních parametrů numerického modelu a jejich řádový rozsah.

Materiálové parametry			
Povrchové napětí	γ	desítky	mN m^{-1}
Měrná elektrická vodivost	κ	desítky	mS m^{-1}
Relativní permitivita	ε_{rp}	desítky	—
Měrná hmotnost	ρ	tisíce	kg m^{-3}
Počáteční dynamická viskozita	η_0	stovky	Pa s
Počáteční relaxační čas	τ_0	desítky	s
Počáteční hmotnostní koncentrace polymeru	$c_{\text{p}0}$	jednotky–desítky	%
Exponent ve vztahu $\eta = 10^B c_{\text{p}}^m$	m	0.1 až 1	—
Binární difúzní koeficient	$\mathcal{D}_{\text{s,air}}$		$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
Parametry okolního prostředí			
Dynamická viskozita	η_{a}	desítky	$\mu\text{Pa s}$
Měrná hmotnost	ρ_{a}	jednotky	kg m^{-3}
Relativní vlhkost	ψ	desítky	%
Teplota	T	desítky	$^{\circ}\text{C}$
Procesní parametry			
Elektrický potenciál kapiláry	φ_1	desítky	kV
Elektrický potenciál kolektoru	φ_2	0	V
Elektrický proud protékající tryskou	I_0	jednotky	μA
Objemový průtok polymerního roztoku	Q_{V}	jednotky–desítky	ml hod^{-1}
Konstrukční parametry			
Vzdálenost mezi kapilárou a kolektorem	h	jednotky–desítky	cm
Průměr kapiláry (Typ kolektoru*)	$d (= 2r)$	jednotky	mm
Simulační parametry			
Úhlová frekvence perturbace	ω	desetitisíce	s^{-1}
Počáteční průměr trysky	d_0	stovky	μm
Počáteční délka trysky	l_0	jednotky–desítky	μm
Amplituda perturbace	A	desetiny–jednotky	mm
Celkový počet nabitých hmotných bodů	N		—

*) Implementované typy: tenký disk, speciální (drátový) kolektor.

IV

Počítačový
model

6

Počítačová realizace úlohy

VYTVORENÍ nativní počítačové aplikace bylo motivováno třemi hlavními důvody. Prvním důvodem byla potřeba jemnějšího časového kroku použité numerické metody. Algoritmus realizovaný v prostředí programu MATLAB byl již z hlediska výpočetního času neefektivní. Druhým důvodem byl požadavek na vytvoření grafického uživatelského rozhraní (GUI), které umožní snadné nastavení všech parametrů modelu. Třetím důvodem byl požadavek na maximální využití výkonu vícejádrového procesoru výpočetní stanice. Při rozhodování, který programovací jazyk pro vývoj počítačového programu použít, byl kladen důraz především na přenositelnost, efektivitu a úspornost. S přihlédnutím ke zmíněným důvodům byl vybrán objektově orientovaný jazyk C++, který těmto požadavkům plně vyhovuje.

6.1 Paralelní výpočetní jádro

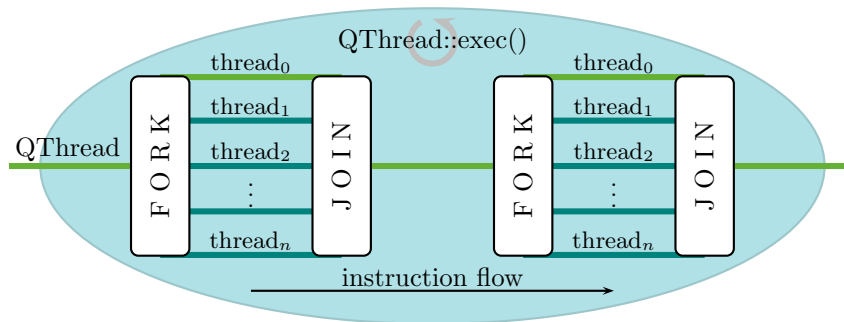
Základem počítačové aplikace je paralelní výpočetní jádro, které představuje algoritmi-
zaci numerického modelu (viz str. 45, kap. 5). Paralelizace výpočetního jádra byla
realizována s použitím OpenMP.¹⁾ OpenMP je standardizované rozhraní pro para-
lelní programování aplikací běžících na počítačových systémech se sdílenou pamětí.²⁾
Sestává se ze sady direktiv pro kompilátor, knihovních funkcí a proměnných prostředí.
Standard je dostupný pro programovací jazyky C/C++ a Fortran. OpenMP používá
vícevláknový paralelismus založený na scénáři rozděl/sluč.³⁾ Po spuštění aplikace je
výpočetní jádro tvořeno pouze jedním vláknem, tzv. hlavním,⁴⁾ které v modelu před-
stavuje třída `QThread`. Hlavní vlákno vykonává sekvenční části výpočetních algoritmů.
V místě, kde jsou vyžadovány paralelní operace, se hlavní vlákno rozdělí, tj. vytvoří
se nebo se probudí dodatečná vlákna `thread1`, `thread2`, ..., `threadn` (viz obr. 6.1).
Všechna tato vlákna pracují společně s hlavním v paralelním bloku souběžně. Na jeho

¹⁾ Domovská stránka projektu <http://openmp.org>.

²⁾ Hardwarová vrstva se sestává ze sady procesorových jednotek (CPU), každá s přístupem ke sdí-
lenému paměťovému prostoru. Jednotlivé CPU mohou prostřednictvím sdílených proměnných provádět
vzájemnou komunikaci a synchronizaci [49].

³⁾ Anglicky `fork/join`.

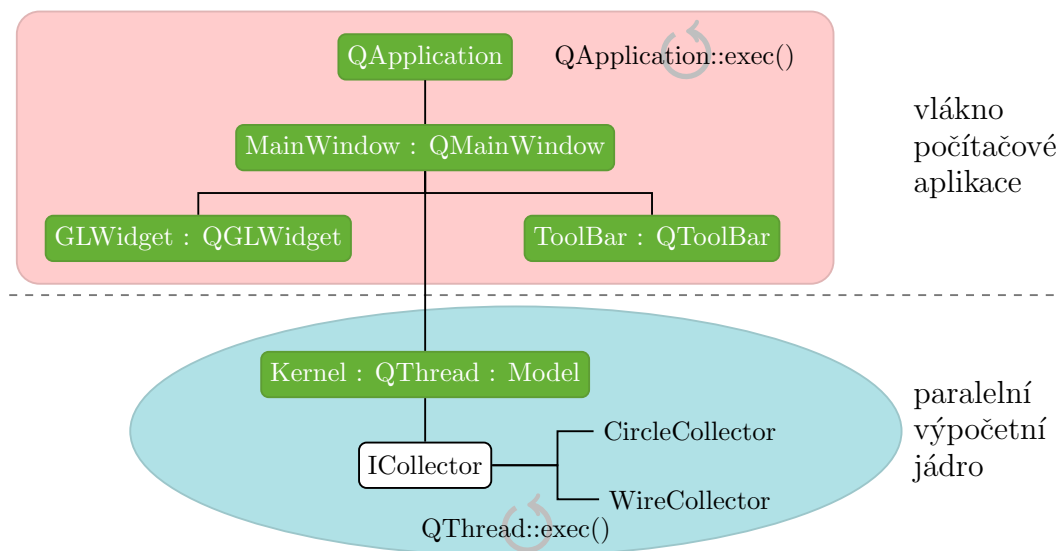
⁴⁾ Anglicky `master thread`.



Obr. 6.1: Schema paralelismu uvnitř výpočetního jádra.

konci se dodatečná vlákna ukončí nebo uspí a tok instrukcí opět pokračuje sekvenčně v jednom vlákně. Tato operace se nazývá sloučení.

Z důvodu náročnosti numerického výpočtu na systémové prostředky běží výpočetní jádro ve vlákně odděleném od vlákna počítačové aplikace (viz obr. 6.2). Výhoda tohoto přístupu spočívá v dostupnosti GUI po celou dobu numerického výpočtu. Paralelní výpočetní jádro je v počítačovém modelu implementováno třídou `Kernel` v souboru `core/kernel.cpp`.

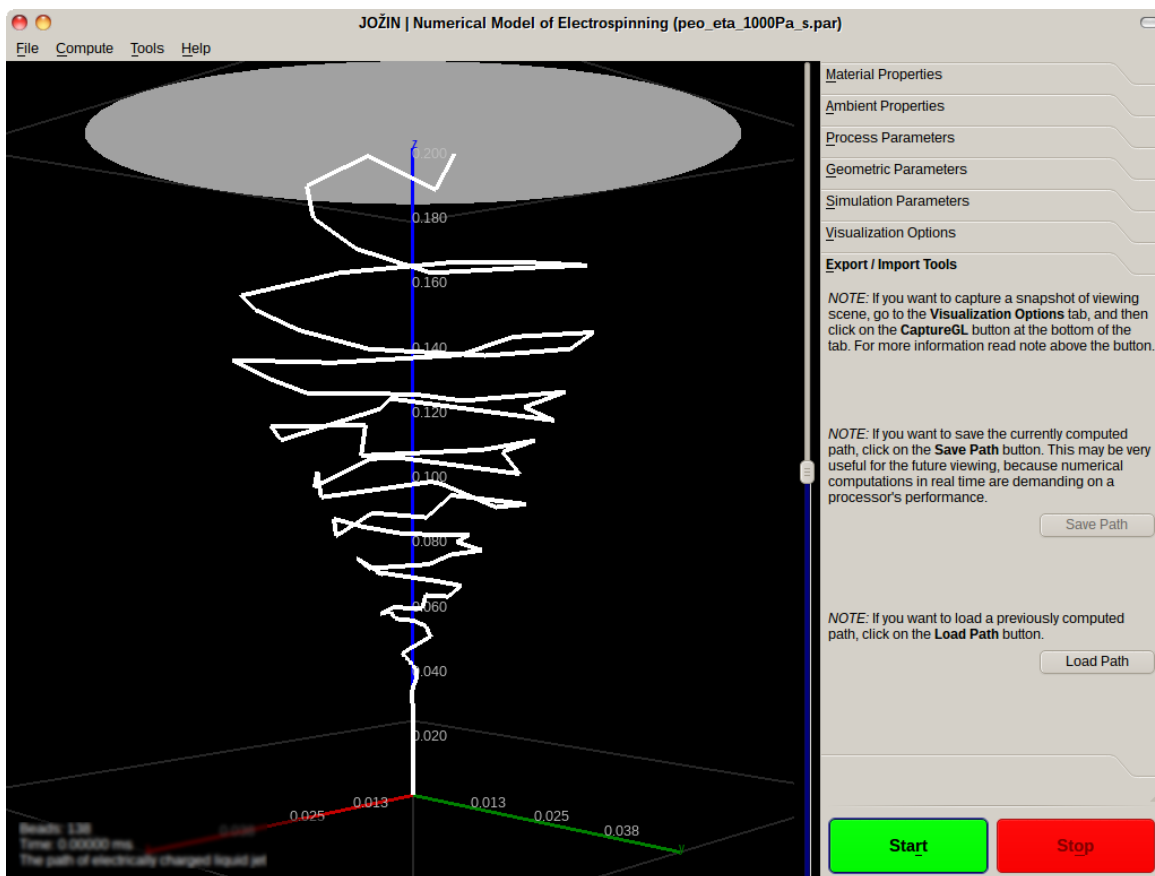


Obr. 6.2: Hierarchický diagram tříd včetně znázornění hlavního vlákna aplikace.

6.2 Grafické uživatelské rozhraní

GUI (viz obr. 6.3) počítačové aplikace bylo vytvořeno s použitím multiplatformní, objektově orientované knihovny Qt.¹⁾ GUI je v počítačovém modelu implementováno třídou `MainWindow` v souboru `mainwindow.cpp`.

¹⁾ Domovská stránka projektu <http://qt.nokia.com>.



Obr. 6.3: Grafické uživatelské rozhraní počítačové aplikace.

6.2.1 Panel nástrojů

Ovládací panel (viz obr. 6.4) na pravé straně je koncipován do sedmi záložek, ve kterých jsou rozříděny vstupní parametry matematického modelu, resp. numerického modelu (viz str. 53, tab. 5.1), simulace, vizualizace a nástroje pro export/import dat. Widget ovládacího panelu je v počítačovém modelu implementován třídou `ToolBar` v souboru `widgets/toolbar.cpp`.

6.2.2 Vizualizace výsledků

Pro vizualizaci výsledků simulací byl použit standard OpenGL¹⁾ dostupný jako modul knihovny Qt. Tento standard specifikuje multiplatformní rozhraní pro grafické karty, které je využíváno k vývoji interaktivních počítačových aplikací obsahujících 2D a 3D grafiku. Vizualizační widget má implementovány metody, které umožňují otáčet scénou nebo ji zobrazit ve směrech souřadných os a tím dávají možnost pozorovat bičující nestabilitu z různých úhlů pohledu, což poskytuje lepší prostorovou představivost. Vizualizační widget je v počítačovém modelu implementován třídou `GLWidget` v souboru `widgets/glwidget.cpp`.

¹⁾ Domovská stránka projektu <http://opengl.org>

Material Properties

Surface tension N·m⁻¹

Conductivity S·m⁻¹

Permittivity —

Density kg·m⁻³

Initial viscosity Pa·s

Initial relaxation time s

Initial polymer mass fraction %

Binary diffusion coefficient m²·s⁻¹

Empiric formula exponent —

Ambient Properties

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(a) materiálové parametry

Material Properties

Ambient Properties

Air density kg·m⁻³

Air viscosity Pa·s

Humidity %

Temperature °C

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(b) parametry okolního prostředí

Material Properties

Ambient Properties

Process Parameters

Electric current A

Electric potential of the collector V

Electric potential of the needle V

Volumetric flow rate l·h⁻¹

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(c) procesní parametry

Material Properties

Ambient Properties

Process Parameters

Geometric Parameters

Distance between the needle and the collector m

Diameter of the needle m

Select collector

Disk

Wire

NOTE: After settings the geometric parameters, click on the **UpdateGL** button, thereby set the camera and viewing scene. This is also done automatically by clicking on the **Start** button.

UpdateGL

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(d) konstrukční parametry

Material Properties

Ambient Properties

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Total number of beads 2

Initial diameter of the jet m

Initial length of the jet m

Perturbation amplitude m

Perturbation frequency s⁻¹

Visualization Options

Export / Import Tools

(e) simulační parametry

Material Properties

Ambient Properties

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Animation On Off

Animation speed

Rotation X Y Z

View Isometric +X Axis +Y Axis +Z Axis -X Axis -Y Axis -Z Axis

Reset

Reset

Reset

Reset

Reset

Reset

Reset

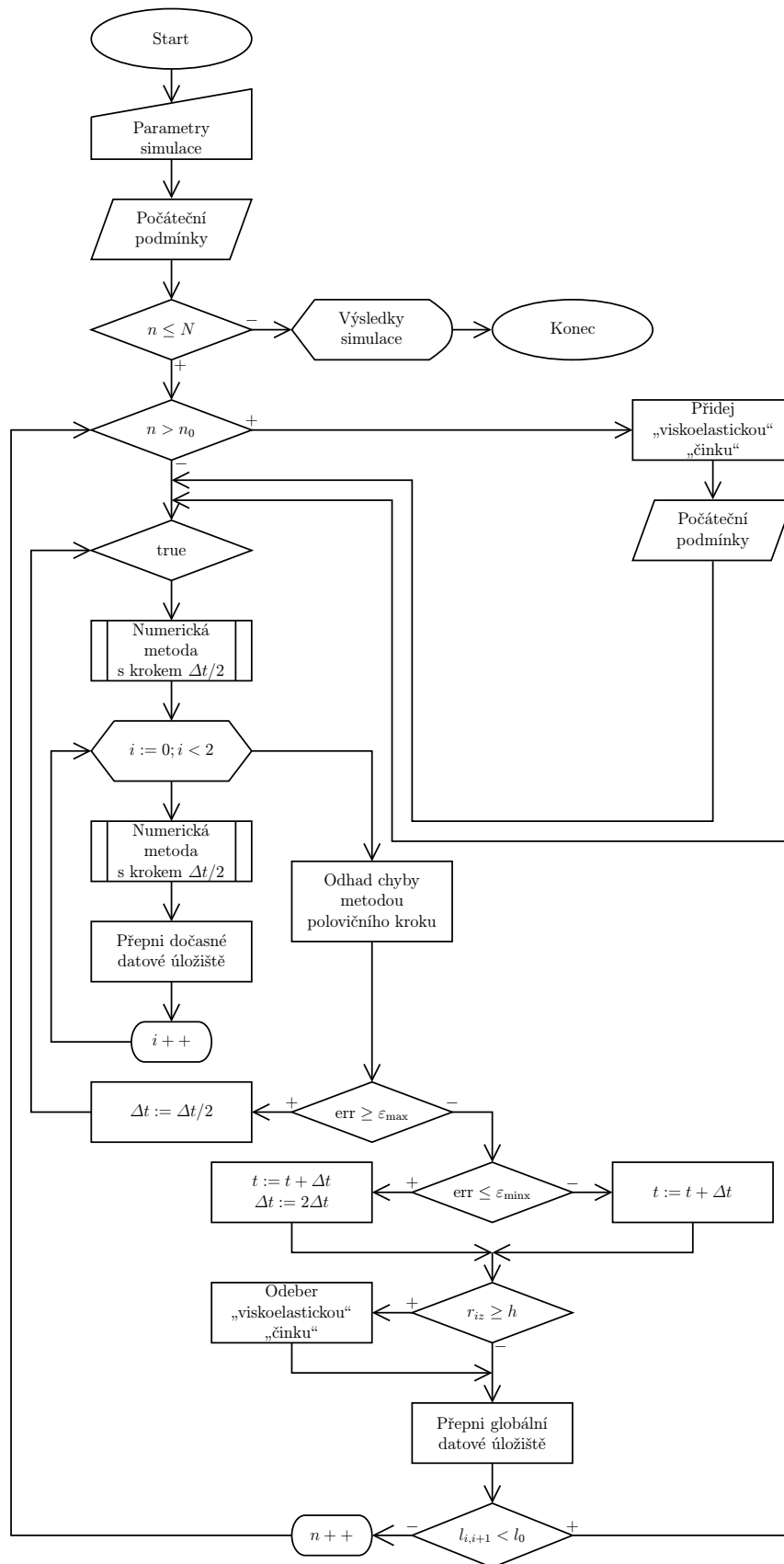
NOTE: If you want to capture a snapshot of viewing scene, click on the **CaptureGL** button, then you type a filename and click on the **Save** button.

CaptureGL

Export / Import Tools

(f) parametry vizualizace

Obr. 6.4: Záložky ovládacího panelu nástrojů počítačové aplikace.



Obr. 6.5: Vývojový diagram výpočetního algoritmu.

6.3 Hlavní výpočetní algoritmus ■

Celý algoritmus numerického výpočtu znázorňuje vývojový diagram (viz obr. 6.5). Na začátku jsou prostřednictvím GUI nebo konfiguračního souboru nastaveny vstupní parametry numerického modelu. Následuje inicializace, ve které jsou vypočítány kritické hodnoty vnějšího elektrostatického pole, parametry diskrétního válcového segmentu trysky a bezrozměrné koeficienty. Inicializace je implementována metodou `InitializeModel()` ze třídy `Model` v souboru `core/model.cpp`. Výpočet je obsluhován virtuální metodou `run()` reimplementovanou ve třídě `Kernel`.

- (i) Pokud je v nabídce `Compute` zaškrtnuta volba `Electric field`, je zavolána metoda `computeField()` implementovaná ve třídě `Kernel`. Tato metoda vygeneruje uzly matematické sítě, ve kterých je vypočítána intenzita, \mathbf{E} , vnějšího elektrostatického pole. Výpočet je realizován prostřednictvím metody `computeEE()` ze třídy `Model`, jež volá přes rozhraní `ICollector` virtuální metodu `computeField()`, která je reimplementovaná v souboru `fields/diskcollector.cpp` nebo `fields/wirecollector.cpp`.
- (ii) Pokud je v nabídce `Compute` zaškrtnuta volba `Jet path`, je zavolána metoda `computePath()` implementovaná ve třídě `Kernel`. Metoda řídí výpočet trajektorie zelektrizované trysky. Výpočetní cyklus se sestává z následujících jedenácti kroků a je opakován dokud platí podmínka $n \leq N$, tj. nebyly přidány všechny nabitě hmotné body, resp. ideální přímočaré segmenty zelektrizované trysky:
 - (1) Prostřednictvím metody `addBead()` jsou přidány nové nabitě hmotné body a metodou `addRod()` je vložen propojující viskoelastický segment. Obě metody jsou implementovány ve třídě `Kernel`.
 - (2) Jsou určeny počáteční podmínky, (95), stavových proměnných.
 - (3) Náhodně je přidána počáteční perturbace v příčném směru.
 - (4) Metodou `computeEE()` ze třídy `Model` je — v pozicích nabitých hmotných bodů — vypočítána intenzita, \mathbf{E} , vnějšího elektrostatického pole.
 - (5) Jsou vypočítány hodnoty sdílených proměnných. Implementováno metodou `computeShared()` ze třídy `Model`.
 - (6) Jsou vypočítány silové účinky na hmotné body s nábojem. Implementováno metodami `computeFFC()`, `computeFFE()`, `computeFFM()`, `computeFFD()` a `computeFFS()` ze třídy `Model`.
 - (7) Metodou prediktor–korektor $P(EC)^3$ je s krokem Δt a $\Delta t/2$ numericky vyřešena soustava obyčejných diferencních rovnic (93) a (94). Numerický řešič je implementován metodou `ODESolver()` ze třídy `Kernel`.
 - (8) Metodou polovičního kroku je stanoven odhad chyby a v případě potřeby je upraven časový krok Δt . Implementováno metodou `computeErr()` ze třídy `Kernel`.
 - (9) Jsou odstraněny rovnice vztahující se k ideálním přímočarým segmentům zelektrizované trysky, které dosáhly kolektoru.
 - (10) Je posunut čas simulace $t \leftarrow t + \Delta t$.
 - (11) Emitováním signálu `update()` je prostřednictvím virtuální metody `paintGL()` překreslena vizualizovaná OpenGL scéna.

7

Verifikace numerického modelu

VERIFIKACÍ je myšleno testování, zda implementace metod — ve smyslu objektivě orientovaného programování — prostředky programovacího jazyka funguje v numerickém modelu správně. Tato kapitola se zabývá ověřením numerického řešiče počáteční úlohy pro obyčejné diferenciální rovnice. Analýza a optimalizace dalších algoritmů byla provedena s využitím programů `valgrind`¹⁾ (ladění paměti) a `gcov`²⁾ (pokrytí kódu). Protože se jedná o rutiny v procesu vývoje softwaru, kapitola o těchto činnostech z úsporných důvodů nepojednává.

7.1 Verifikace numerického řešiče

Pro verifikaci implementovaných numerických metod byla vybrána pohybová rovnice lineárního harmonického oscilátoru

$$\frac{d^2r}{dt^2} + \omega^2 r = 0$$

s počátečními podmínkami

$$\begin{aligned} r(0) &= 1, \\ \frac{dr}{dt}(0) &= 0. \end{aligned}$$

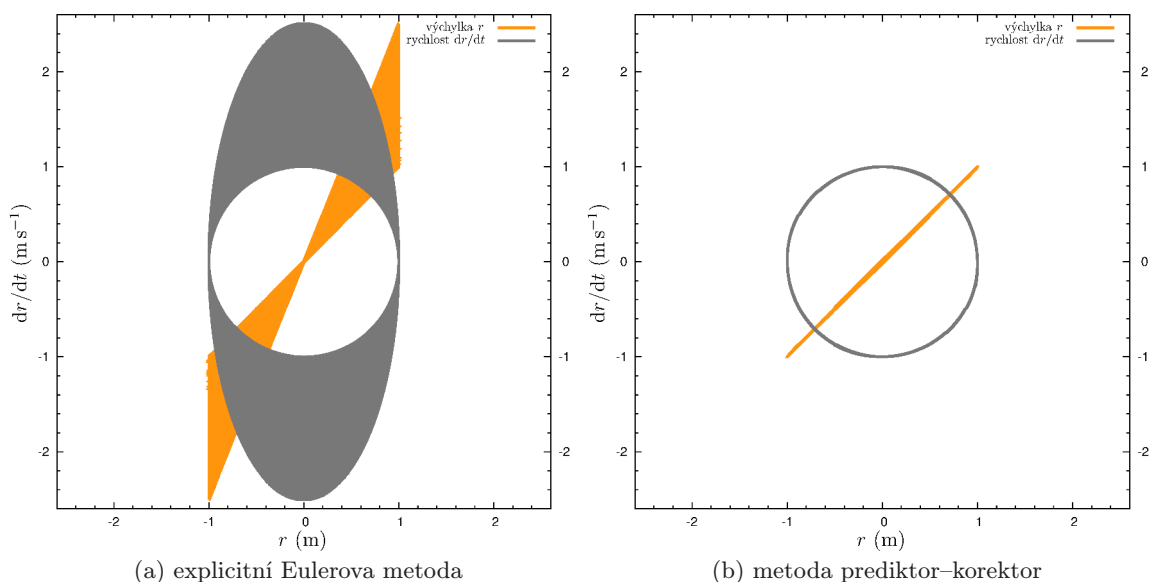
Analytické řešení této homogenní diferenciální rovnice lze najít jako lineární kombinaci dvou lineárně nezávislých fundamentálních řešení. Při volbě $\omega^2 = 1$ a dosazení počátečních podmínek se dostane rovnice okamžité výchylky

$$r = \cos t.$$

Důvod, proč byla pro verifikaci použita právě pohybová rovnice lineárního harmonického oscilátoru, je ten, že fázový diagram netlumených kmitů je kružnice. Ověření správnosti numerického řešení je tedy možné vizuálně. Časový interval testu byl $t \in \langle 0; 1\,000\pi \rangle$, což je dostatečně dlouhá doba, aby se projevila nepřesnost numerické metody a zaokrouhlovací chyba. Požadovaná přesnost přibližného numerického řešení byla v rozsahu $\langle 10^{-4}; 10^{-6} \rangle$.

¹⁾ Domovská stránka projektu <http://valgrind.org/>.

²⁾ Domovská stránka projektu <https://gcc.gnu.org/>.



Obr. 7.1: Porovnání implementovaných numerických metod pro řešení počáteční úlohy. Počet provedených časových kroků při řešení pohybové rovnice lineárního harmonického oscilátoru na intervalu $t \in \langle 0; 1\,000\pi \rangle$ je: (a) 13 094 998, (b) 8 762 377.

Na obr. 7.1(a) je vykresleno přibližné řešení získané explicitní Eulerovou metodou. Z fázového diagramu je — v podobě vzniklé elipsy — zřetelně patrná nepřesnost této metody a to i přesto, že byla automaticky upravována délka časového kroku Δt tak, aby lokální diskretizační chyba nepřesáhla zadanou toleranci. Na obr. 7.1(b) je znázorněno přibližné řešení testovací rovnice získané metodou prediktor–korektor. V tomto případě je vidět, že posloupnost numericky vypočtených hodnot konverguje k přesnému analytickému řešení.

V

Experimenty
a validace
modelu

*Za svůj dlouhý život jsem pochopil jedno.
Ve srovnání s objektivní realitou je naše věda dětinská a prostá,
ale přece je tím nejlepším, co vůbec máme.*

— Albert Einstein

8

Numerické a virtuální experimenty ■

NUMERICKÉ A VIRTUÁLNÍ experimenty poskytují možnost generování širokého spektra cenných dat a tím umožňují lépe porozumět studovanému ději. Předmětem první části této kapitoly jsou nejprve numerické experimenty s „viskoelastickou činkou“, které si klady za cíl porozumět vývoji malých ohybových perturbací zelektrizované trysky a také jejímu chování ve vnějším elektrostatickém poli. Druhá část kapitoly se věnuje virtuálním experimentům, tj. počítačovým simulacím vlivu vstupních parametrů na proces elektrostatického zvlákňování, které jsou propojené s vizualizací trajektorie elektricky nabitých trysky pomocí trojrozměrné počítačové grafiky.

8.1 Růst malých ohybových perturbací ■

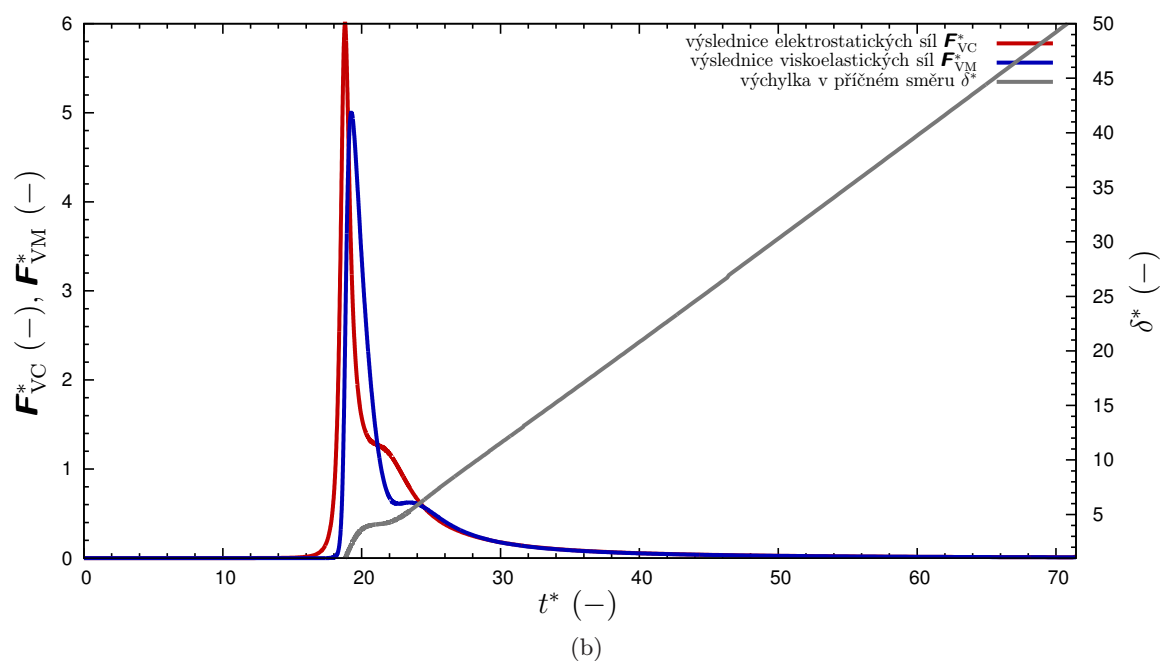
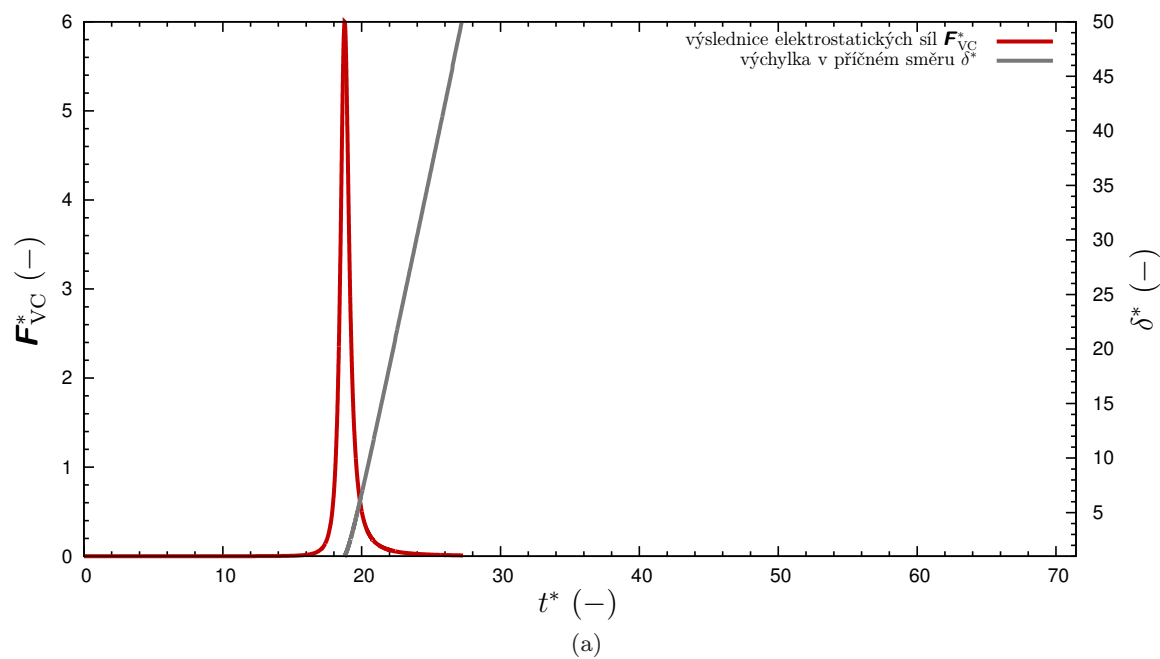
Na str. 19, odd. 3.5, byly představeny dvě pohybové rovnice, jež popisují vývoj malých ohybových perturbací, které jsou inicializovány poruchou v příčném směru. Tento odstavec se zabývá jejich přibližným numerickým řešením. Při numerickém experimentu byla fixována poloha nabitých bodů A , C a nabitý hmotný bod B byl vychylován tak dlouho [viz str. 20, obr. 3.3 a obr. 3.3(b)], dokud neurazil vzdálenost rovnající se poloměru diskového uzemněného kolektoru. Vertikální poloha bodů A , B a C byla zvolena tak, aby vzdálenost $r(0)$, resp. $l(0)$, byla v bezrozměrných veličinách rovna jedné. Na obr. 8.1(a) je znázorněno řešení úlohy (16) a (17) s počátečními podmínkami

$$\begin{aligned}\delta(0) &= 10^{-3} r(0), \\ v(0) &= 0.\end{aligned}$$

Na obr. 8.1(b) je dále znázorněno řešení úlohy (18) a (19) s následujícími počátečními podmínkami

$$\begin{aligned}\delta(0) &= 10^{-3} l(0), \\ \sigma(0) &= 0, \\ v(0) &= 0.\end{aligned}$$

Z obou grafů je patrné, jak je výchylka z počátku téměř nepozorovatelná, ale potom dramaticky roste obdobně jako exponenciální funkce.



Obr. 8.1: Průběh působících výslednic sil včetně vývoje malých ohybových perturbací. δ^* —bezrozměrná výchylka perturbace, t^* —bezrozměrný čas. Parametry numerického experimentu: $C_C^* = C_M^* = 12$ a $D^* = 100$.

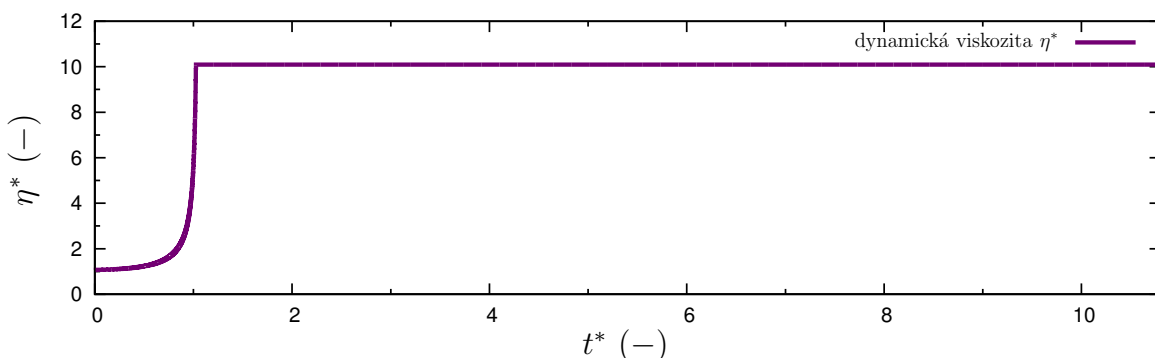
8.2 Segment elektricky nabitě trysky ve vnějším elektrostatickém poli

Tento oddíl pojednává o třech skupinách numerických experimentů, které si kladly za cíl zjistit chování ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky ve vnějším homogenním elektrostatickém poli.

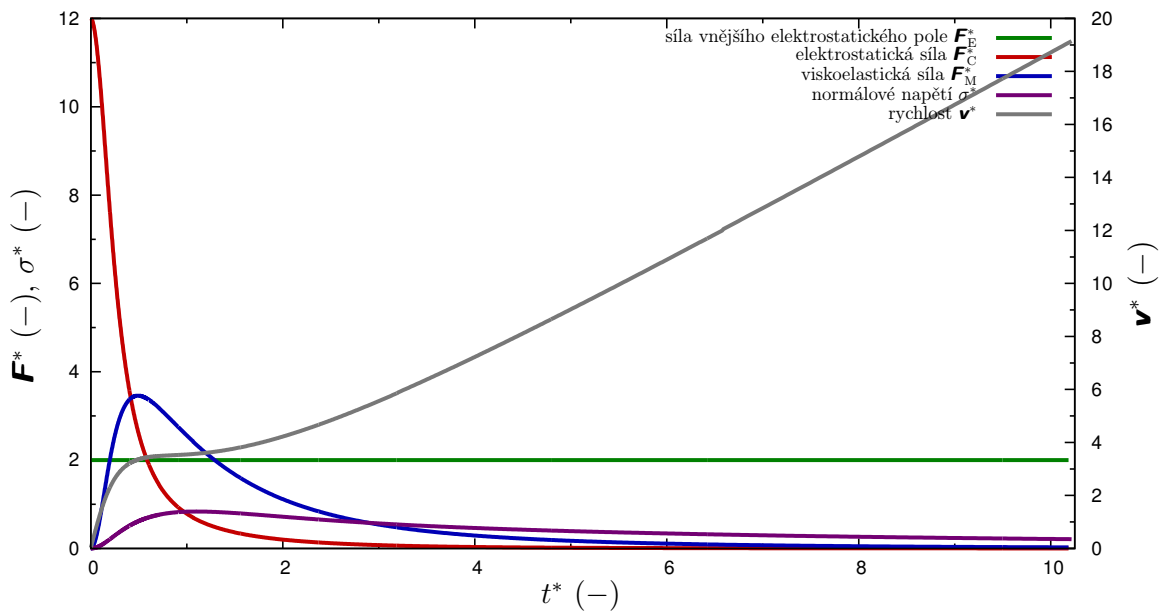
V případě první skupiny numerických experimentů byl ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky prodlužován tak dlouho, dokud nabitý hmotný bod A (viz str. 15, obr. 3.1) nedorazil na diskový uzemněný kolektor. Na obr. 8.2 je zobrazen průběh dynamické viskozity η , který je ve shodě s článkem [10, obr. 9]. Na obr. 8.3 je vykreslen průběh působících sil, \mathbf{F}_E , \mathbf{F}_C a \mathbf{F}_M , normálového napětí, σ , rychlosti, \mathbf{v} , bez úbytku rozpouštědla a na obr. 8.4 s úbytkem rozpouštědla. Na obr. 8.5 je pak vykreslen průběh změny průměru d a délky, l , ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky nejprve bez úbytku rozpouštědla a na obr. 8.6 s úbytkem rozpouštědla.

U druhé skupiny numerických experimentů byl ideální přímočarý segment zelektrizované trysky dlužen pouze do časového okamžiku, který odpovídá přidání nového segmentu trysky. Průběhy působících sil, \mathbf{F}_E , \mathbf{F}_C a \mathbf{F}_M , mechanického normálového napětí, σ , rychlosti, \mathbf{v} , bez úbytku rozpouštědla jsou znázorněny na obr. 8.7 a průběhy s úbytkem rozpouštědla na obr. 8.8. Na obr. 8.9 je dále vykreslen průběh změny průměru d a délky, l , ideálního přímočarého segmentu trysky opět nejprve bez úbytku rozpouštědla a na obr. 8.10 s úbytkem rozpouštědla. Jelikož se závislosti příliš neliší, budou z úsporných důvodů uvedeny ve třetí skupině pouze výsledky základních numerických experimentů, tedy bez úbytku rozpouštědla.

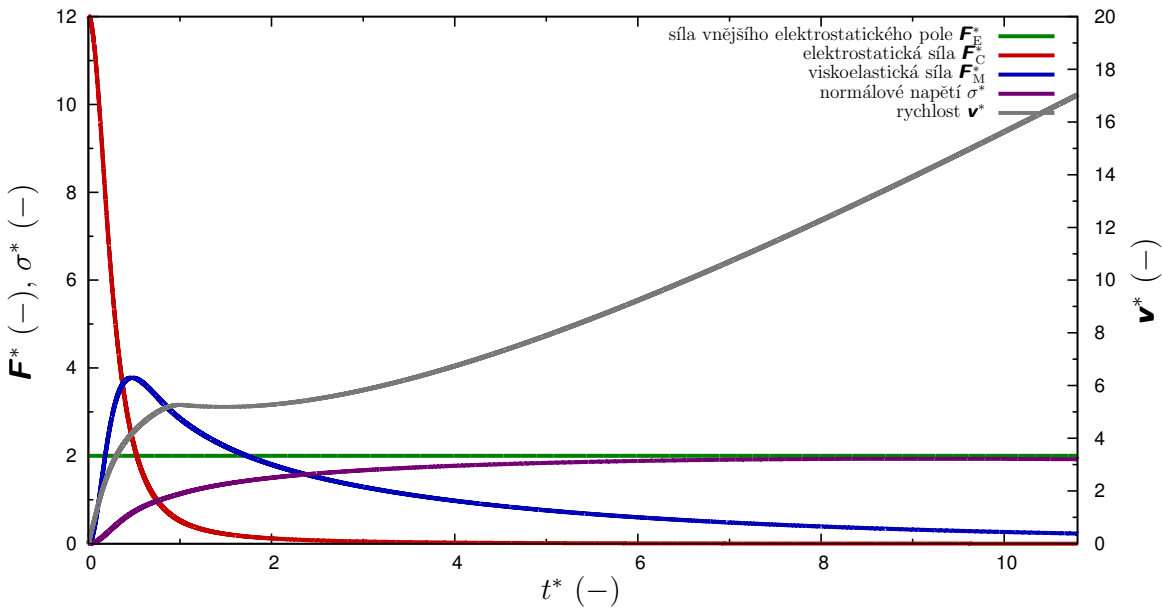
Třetí skupina numerických experimentů je tvořena sérií experimentů. Nejprve jsou zkoumány dva ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky spojené v sérii. Průběhy působících sil, \mathbf{F}_{Ei} , \mathbf{F}_{Ci} a \mathbf{F}_{Mi} , normálových napětí $\sigma_{i,i+1}$ a rychlostí, \mathbf{v}_i , pohyblivých nabitých hmotných bodů jsou vykresleny na obr. 8.11 a obr. 8.13. Změny průměrů $d_{i,i+1}$ a délek, $l_{i,i+1}$, segmentů jsou znázorněny na obr. 8.12 a obr. 8.14. Zbývající série numerických experimentů byla provedena se třemi sériově spojenými ideálními přímočarými segmenty zelektrizované trysky. Výsledky jsou vykresleny na obr. 8.15 až obr. 8.20. Při všech experimentech byla fixována poloha nabitého hmotného bodu, který se nacházel v počátku kartézského souřadného systému $O[x; y; z]$.



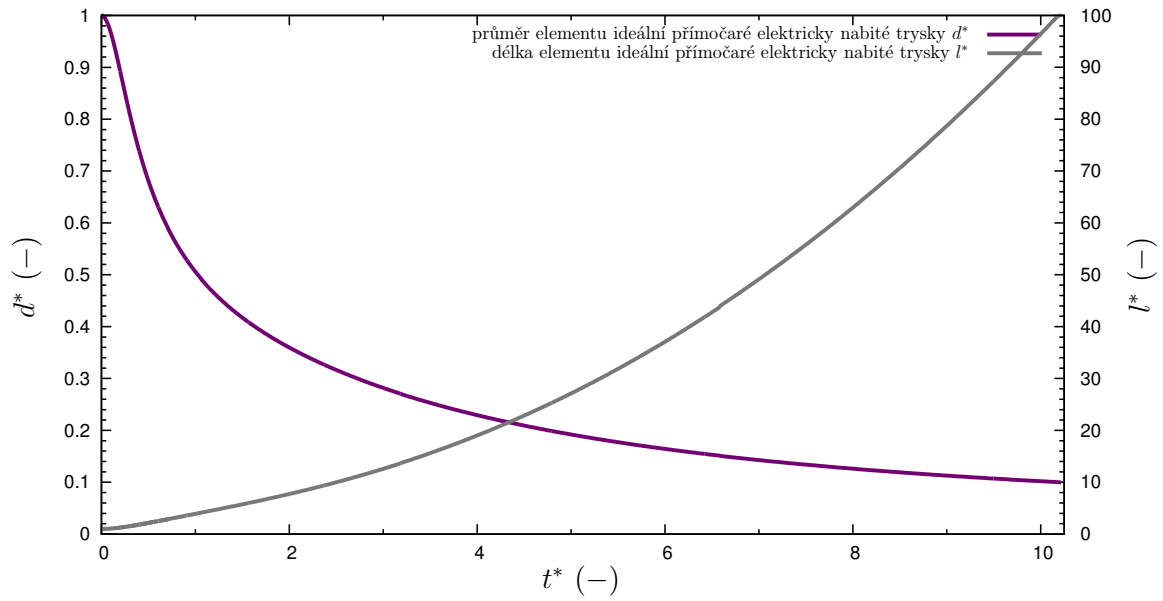
Obr. 8.2: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh dynamické viskozity. Parametry numerického experimentu (s úbytkem rozpouštědla): $B = 3$, $C_m^* = -45$, $h^* = 100$ a $m = 0.1$.



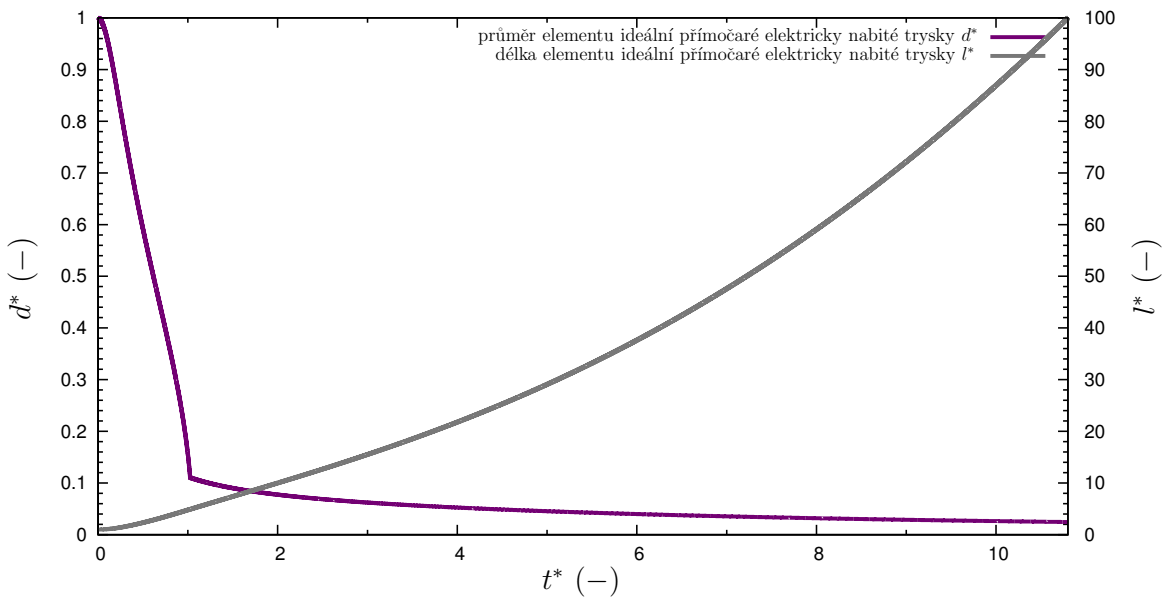
Obr. 8.3: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$ a $h^* = 100$.



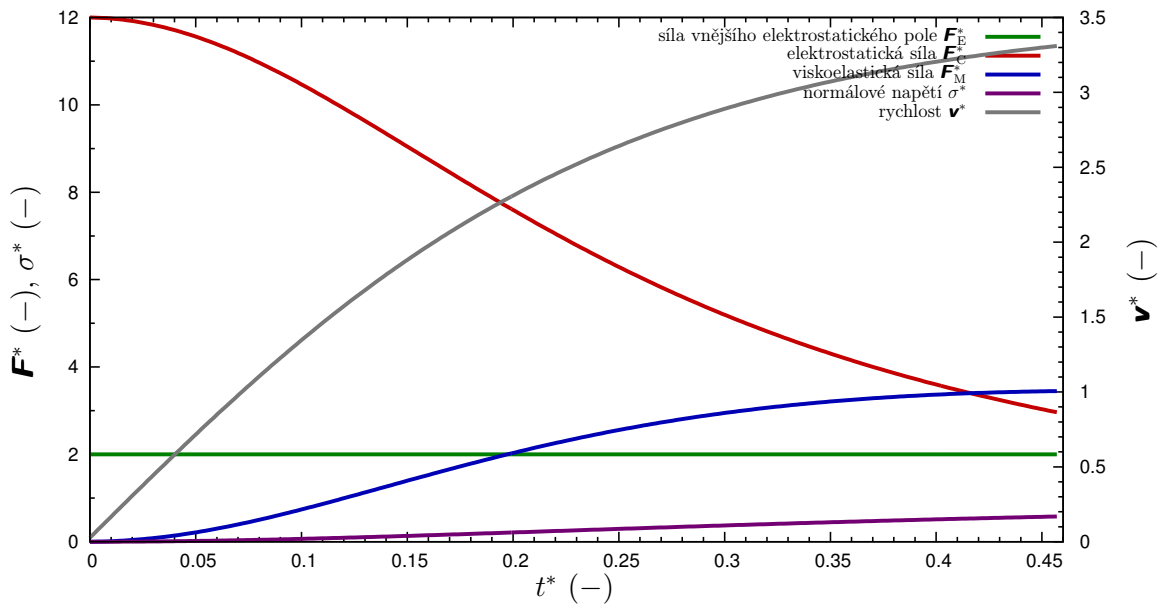
Obr. 8.4: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (s úbytkem rozpouštědla): $B = 3$, $C_m^* = -45$, $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $h^* = 100$ a $m = 0.1$.



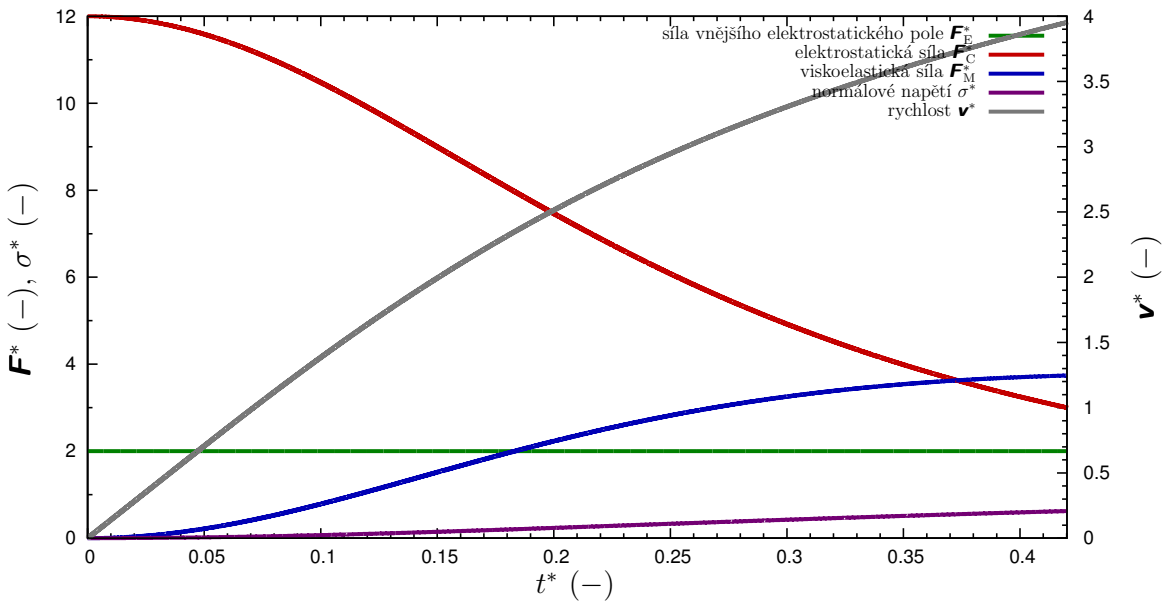
Obr. 8.5: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$ a $h^* = 100$.



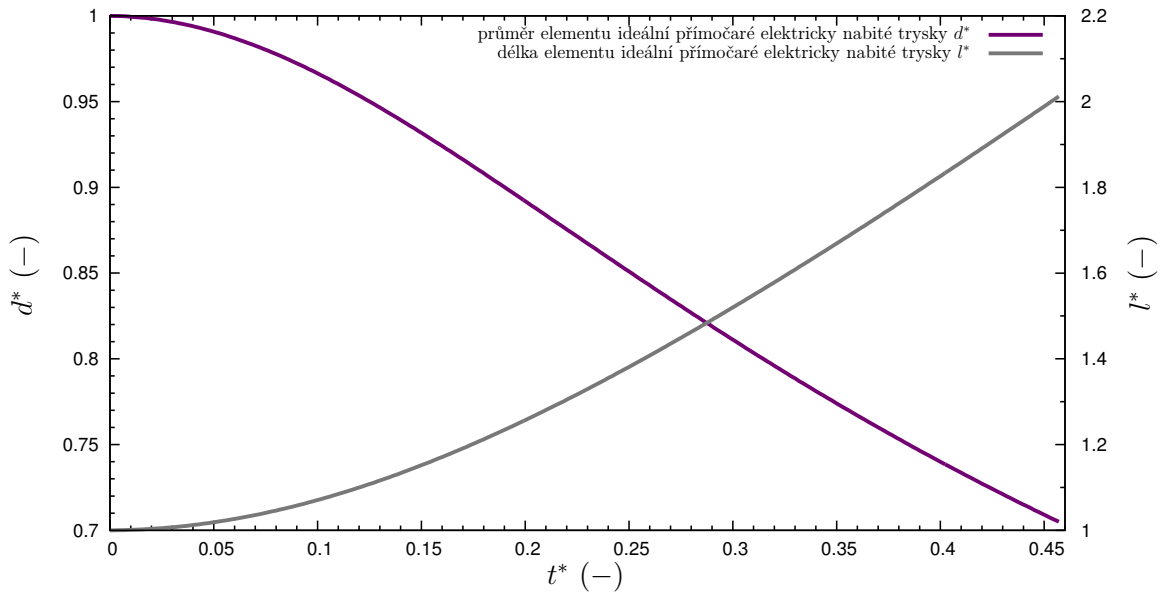
Obr. 8.6: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (s úbytkem rozpouštědla): $B = 3$, $C_m^* = -45$, $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $h^* = 100$ a $m = 0.1$.



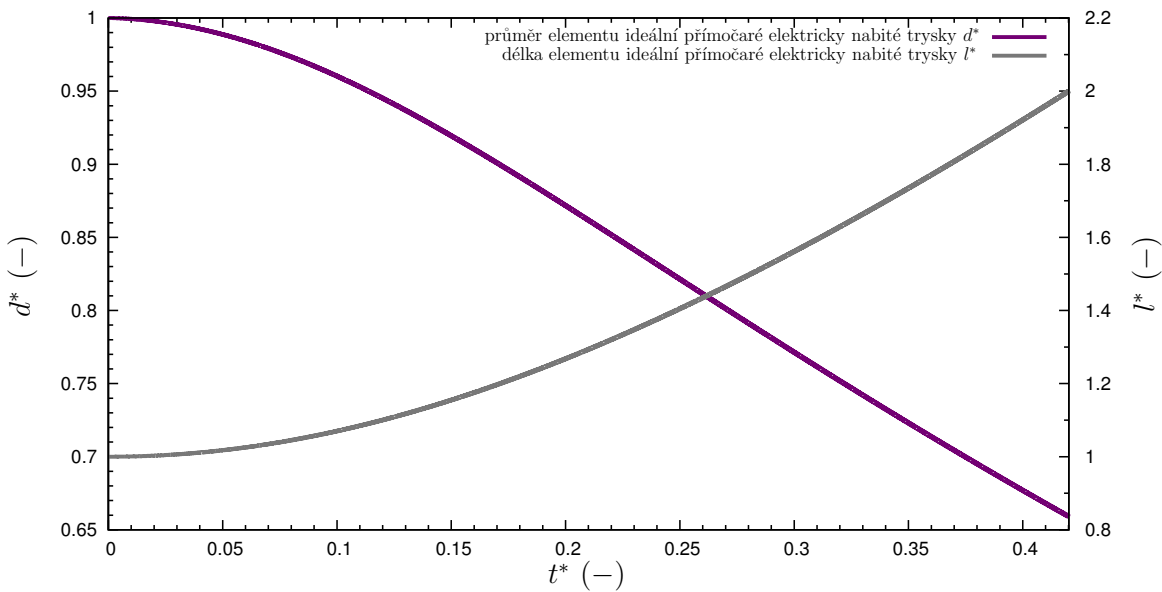
Obr. 8.7: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$ a $h^* = 100$.



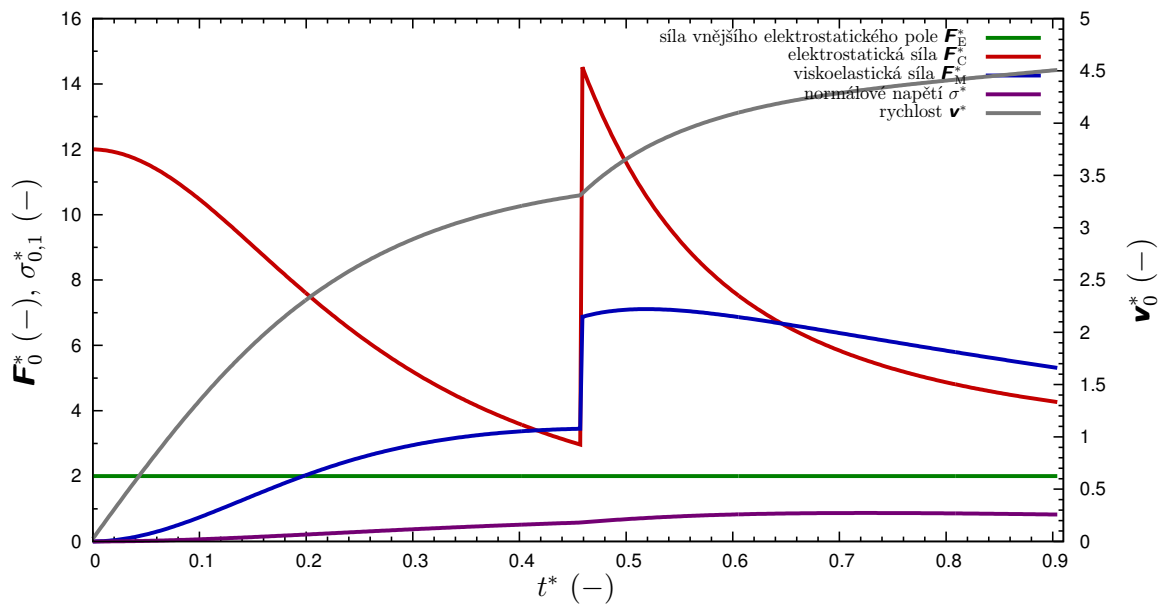
Obr. 8.8: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (s úbytkem rozpouštědla): $B = 3$, $C_m^* = -45$, $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $h^* = 100$ a $m = 0.1$.



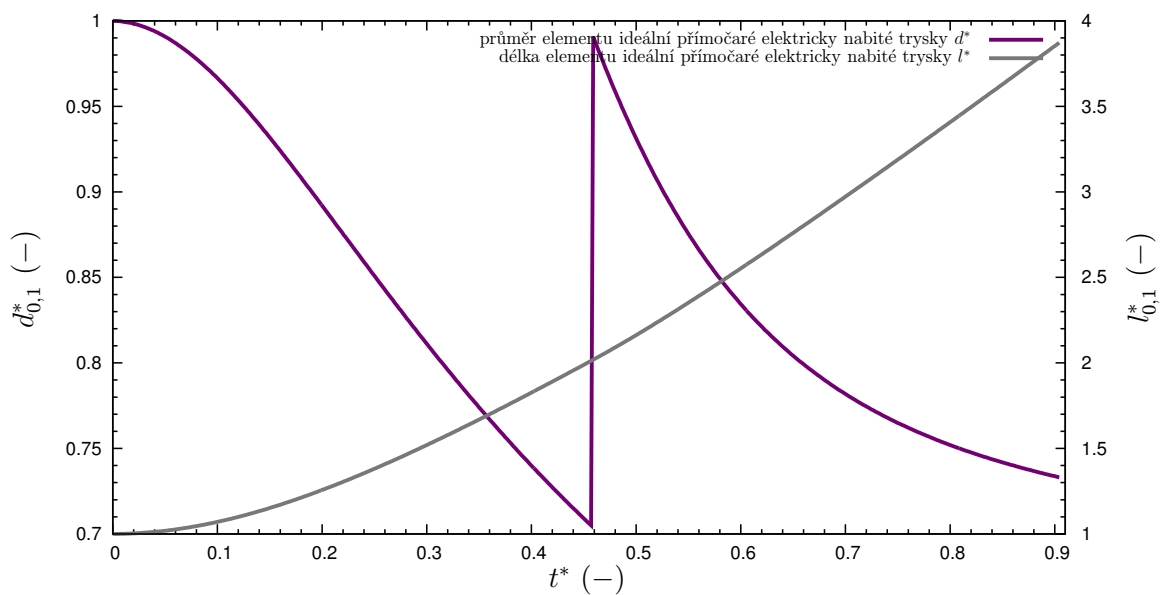
Obr. 8.9: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$ a $h^* = 100$.



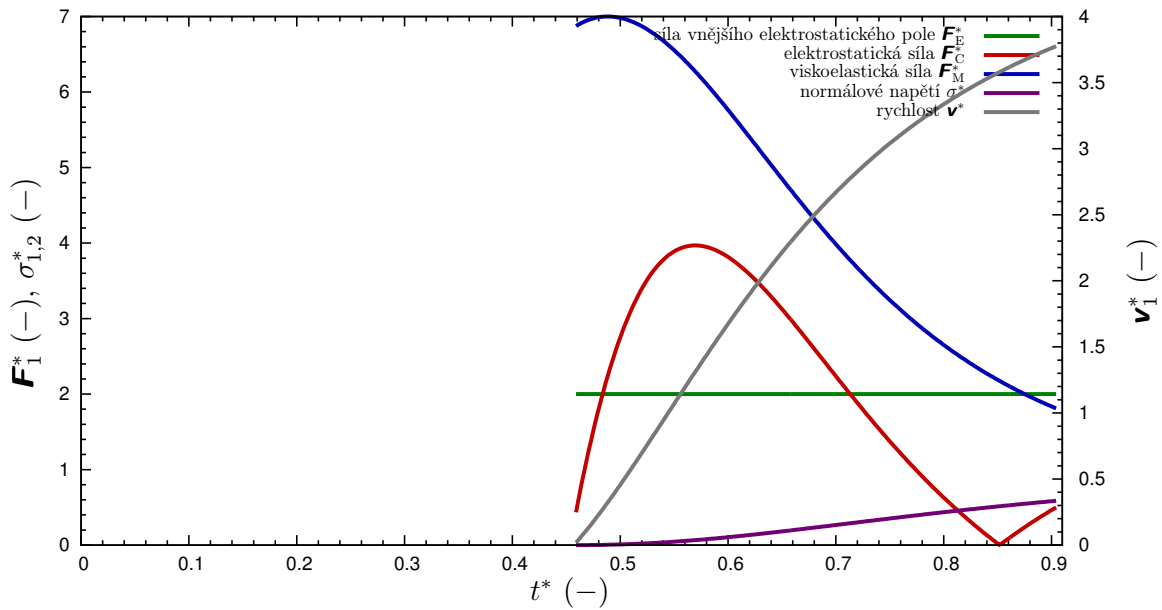
Obr. 8.10: Ideální přímočarý segment elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (s úbytkem rozpouštědla): $B = 3$, $C_m^* = -45$, $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $h^* = 100$ a $m = 0.1$.



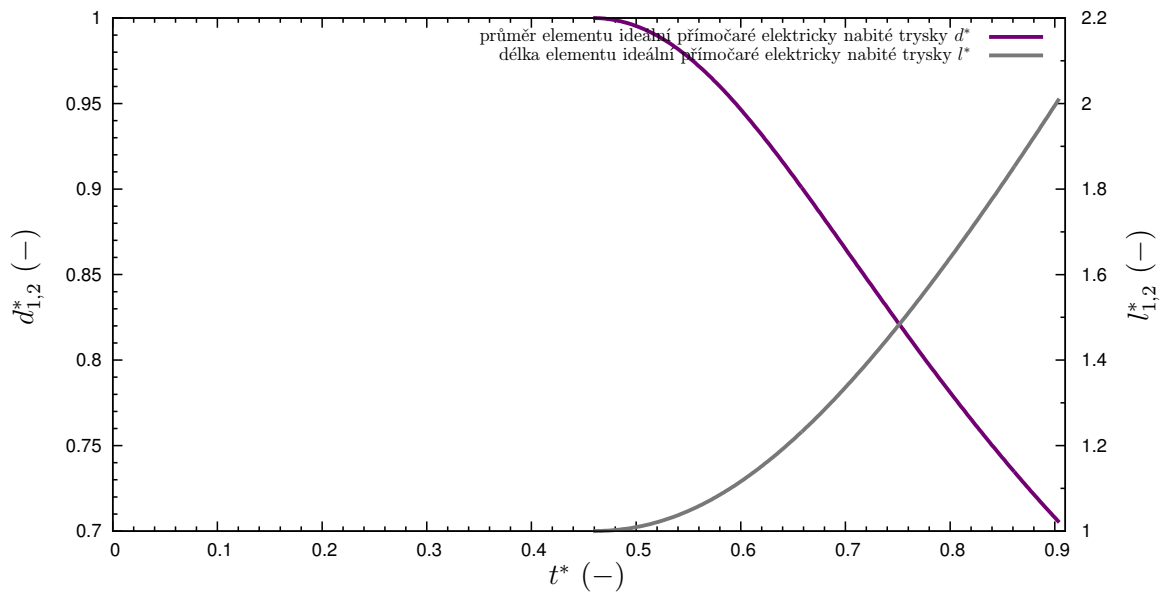
Obr. 8.11: Dva ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 3$.



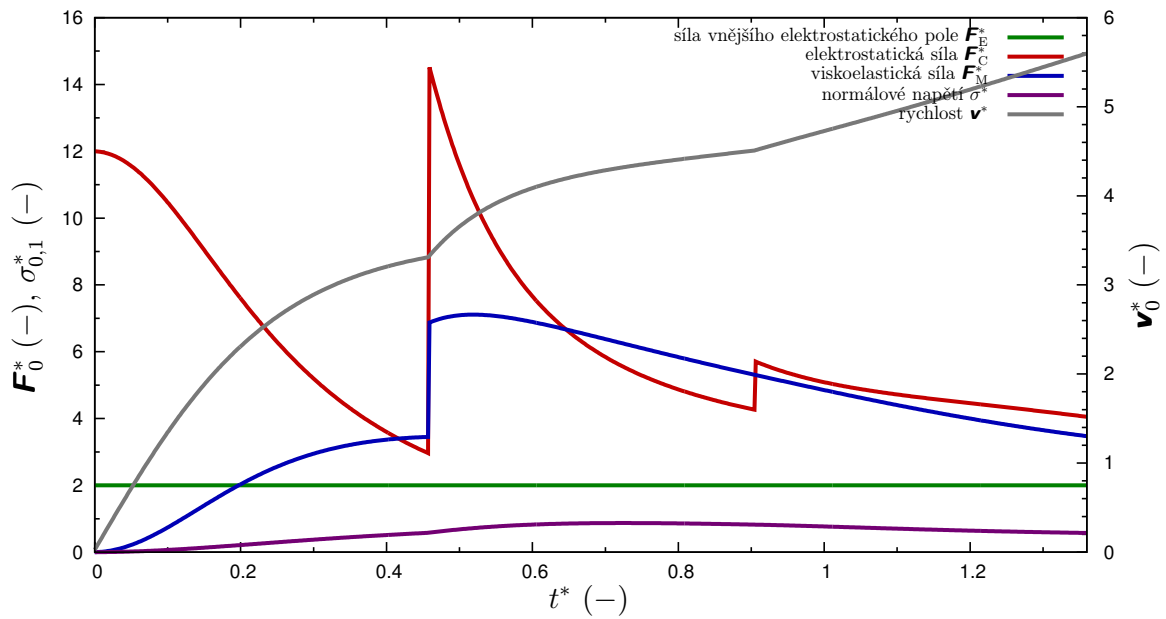
Obr. 8.12: Dva ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 3$.



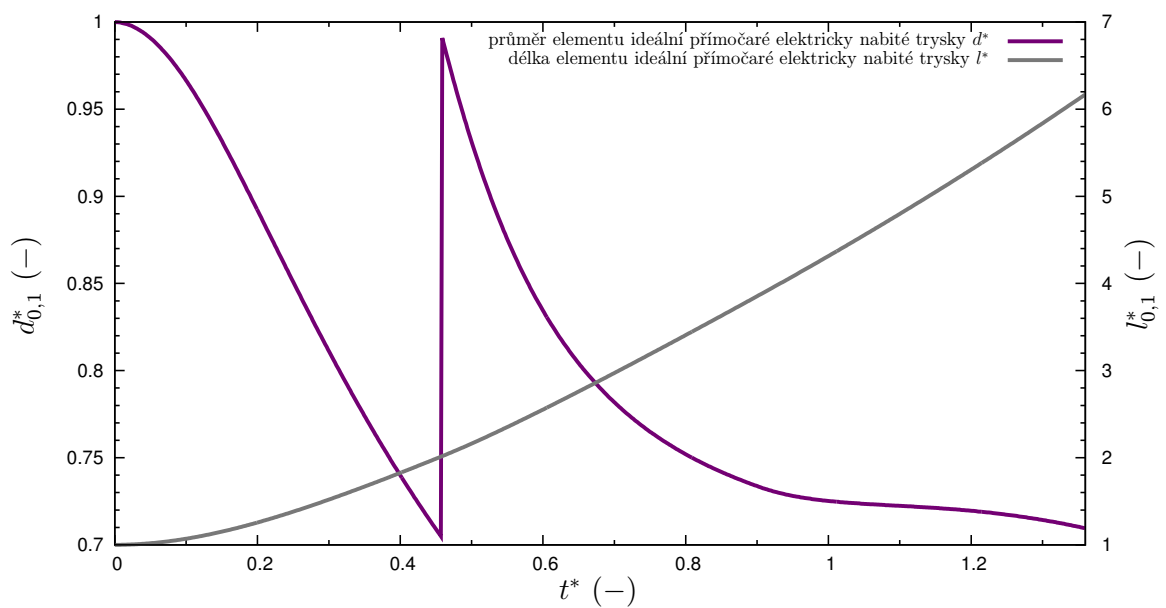
Obr. 8.13: Dva ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 3$.



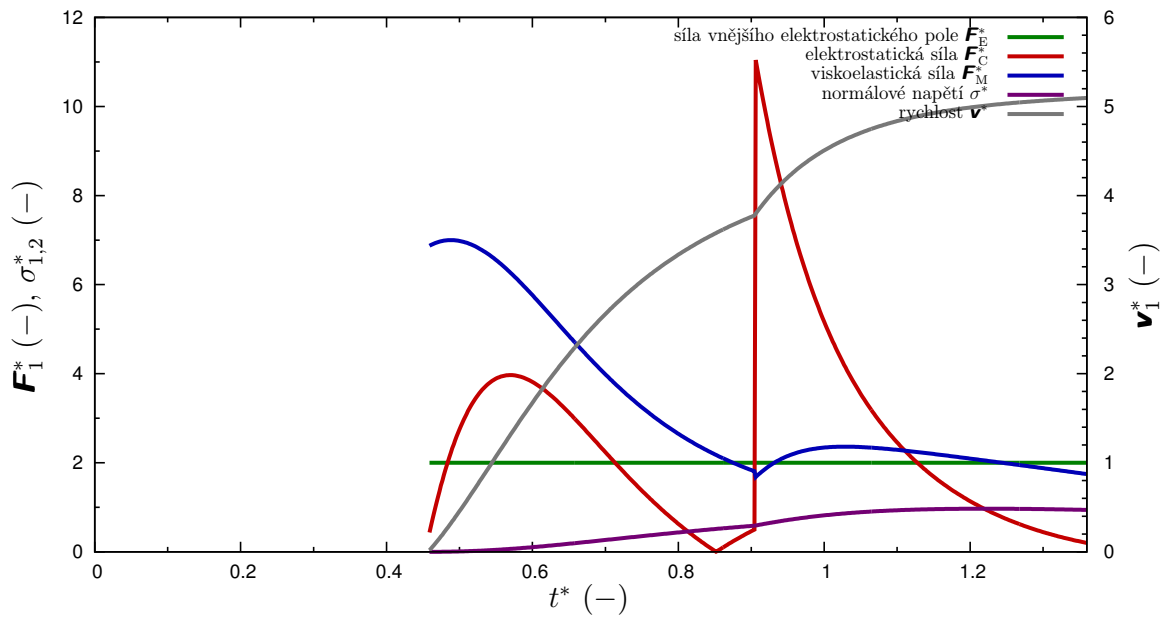
Obr. 8.14: Dva ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 3$.



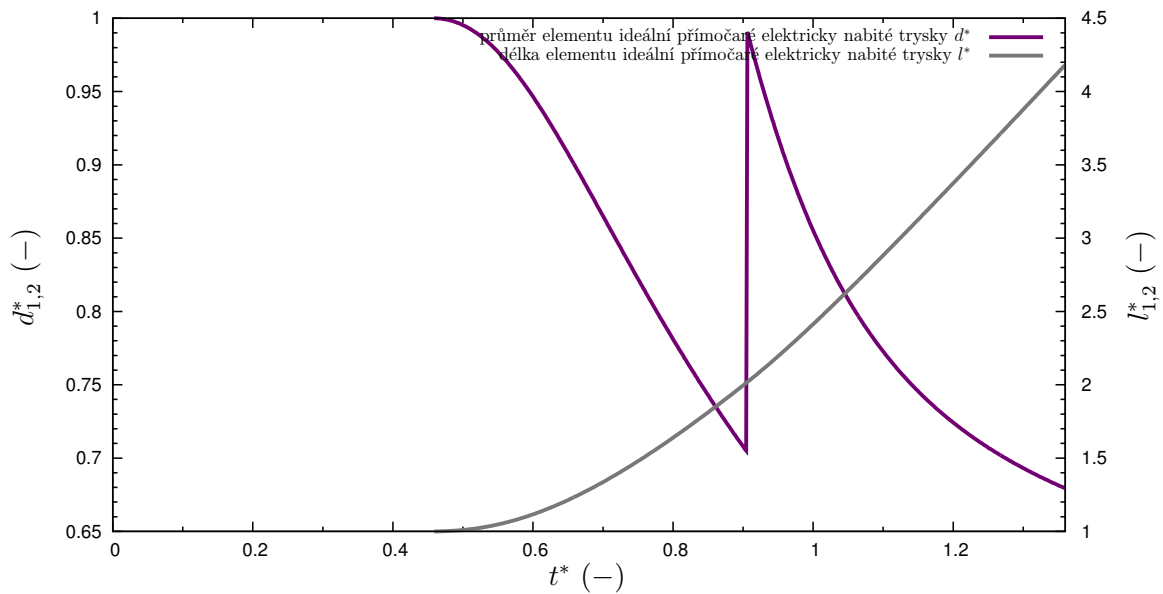
Obr. 8.15: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



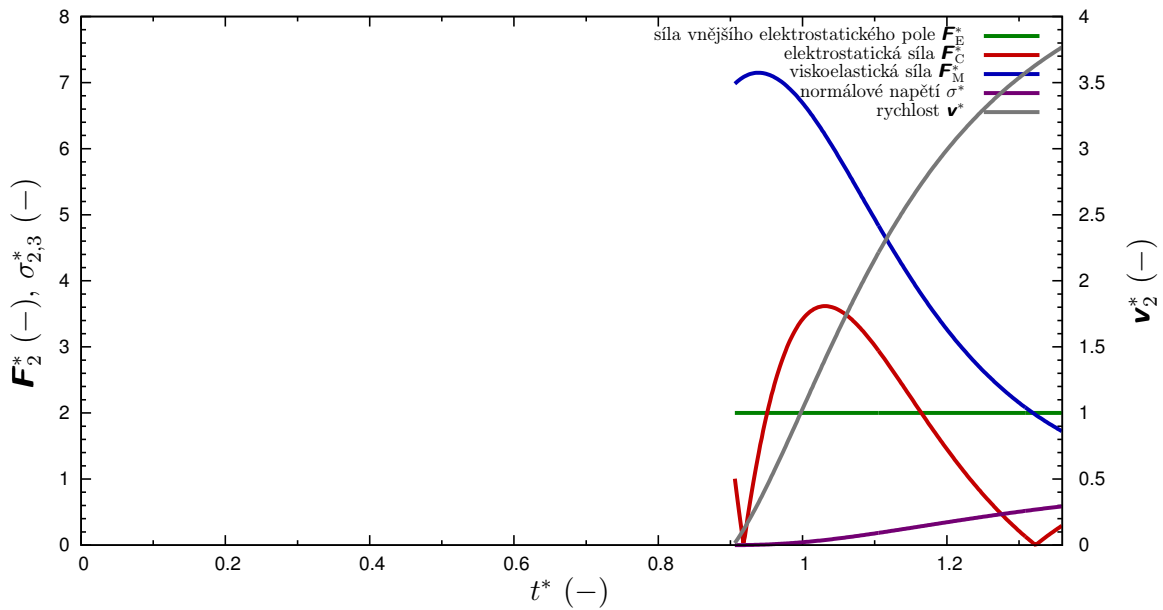
Obr. 8.16: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



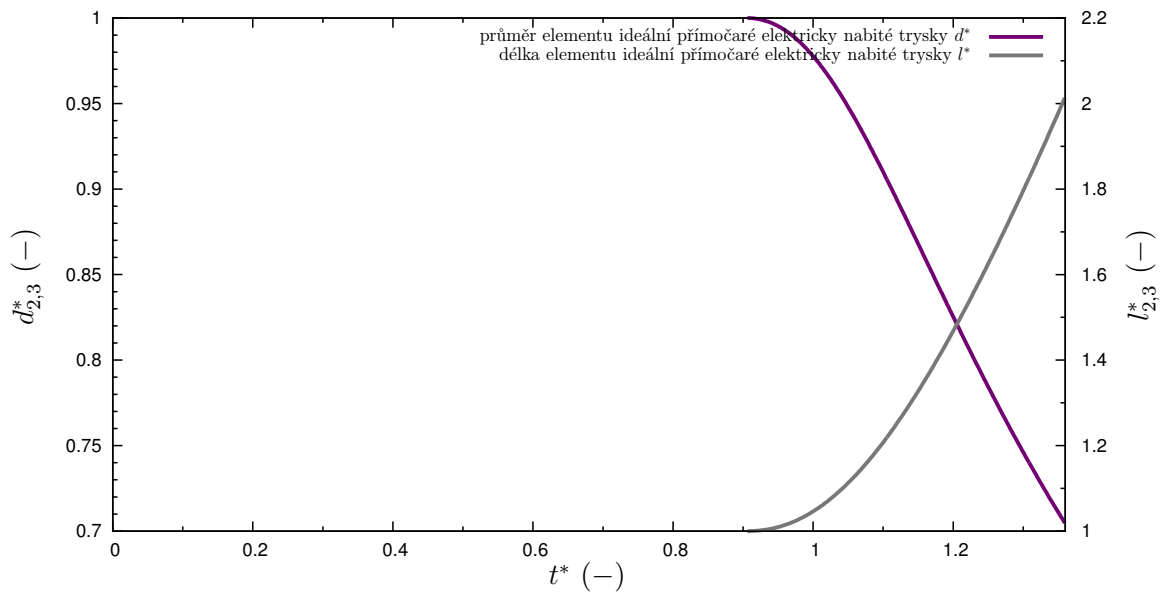
Obr. 8.17: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.18: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.19: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.20: Tři ideální přímočaré segmenty elektricky nabitě trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc. Průběh změny průměru a délky segmentu trysky. Parametry numerického experimentu (bez úbytku rozpouštědla): $C_E^* = 2$, $C_C^* = C_M^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.

8.3 Trajektorie elektricky nabitě trysky

Numerický výpočet trajektorie elektricky nabitě trysky v trojrozměrném prostoru začíná s jedním nabitým hmotným bodem, $i = 1$, který je — podle zákona zachování hmoty [viz str. 46, rov. (77)] — přidán do ústí kapiláry konstantní výtokovou rychlostí

$$\mathbf{v}_i^* = \frac{4\tau_0 Q_V}{\pi d_0^2 L} \mathbf{k},$$

kde \mathbf{k} je jednotkový vektor ve směru souřadné osy z . Tento hmotný bod je uveden do pohybu silou vnějšího elektrostatického pole, \mathbf{F}_{Ei} , neboť vnější elektrostatické pole je „odběratelem“ materiálových částic z kapky polymerního roztoku. Jinými slovy, vnější elektrostatické pole zajišťuje vytahování nového objemu trysky z kapky polymerního roztoku. Nabitý hmotný bod, $i = 1$, se takto pohybuje dokud je splněna podmínka

$$|\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_{i+1}^*| \leq l_0^*, \quad (96)$$

kde $\mathbf{r}_{i+1}^* \equiv \{0; 0; r/L\}$ je polohový vektor vrcholu hemisférického povrchu kapky v bezrozměrných veličinách a l_0^* je bezrozměrná délka válcového segmentu trysky [viz str. 46, obr. 5.1(b)]. Na základě nastaveného objemového průtoku polymerního roztoku jsou do ústí kapiláry postupně přidávány nové nabitě hmotné body $i = 2, 3, \dots, N$. Jakmile přestane platit podmínka (96), je na vrchol hemisférického povrchu umístěn nabitý hmotný bod, $i = 2$, včetně spojujícího ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. Současně je přidánému hmotnému bodu, $i = 2$, udělena malá náhodná počáteční perturbace [viz str. 43, rov. (72)]. Tento mechanismus se opakuje tak dlouho, dokud nedojde k vyčerpání předem nastaveného počtu, N , nabitých hmotných bodů.

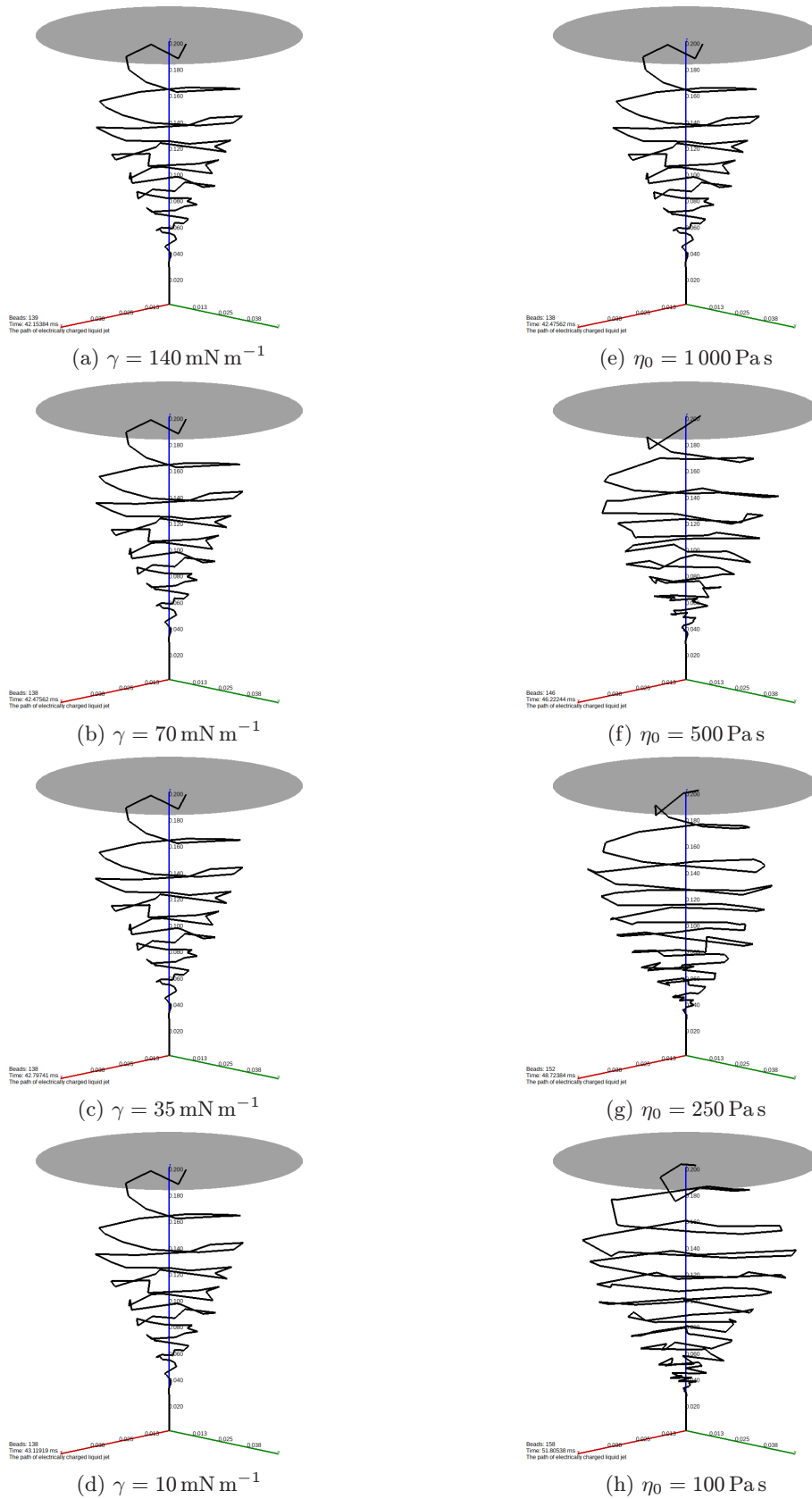
Zatím bylo zmíněno přidávání hmotných bodů, které jsou součástí ideálních přímočarých segmentů elektricky nabitě trysky. Zbývá tedy vyřešit jejich odebrání. K tomuto účelu se nabízí využít skutečnosti, že vzniklé nanovlákně nemůže proniknout skrz diskový uzemněný kolektor. Na straně kolektoru je proto uplatňována ukončovací podmínka

$$r_{iz}^* \geq h^*, \quad (97)$$

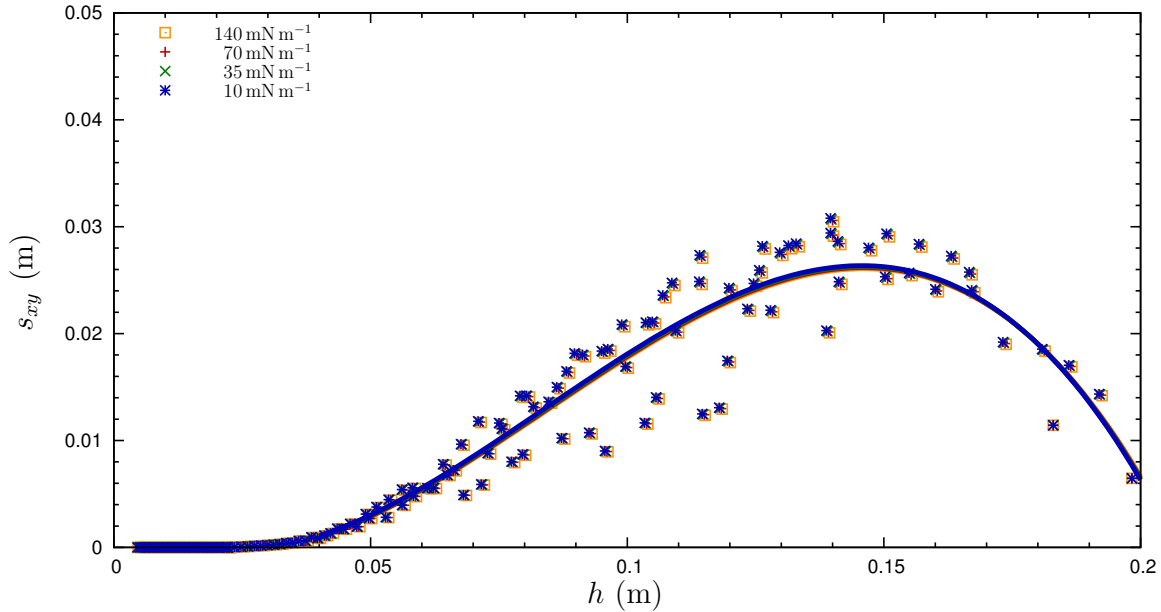
kde r_{iz}^* je z -složka polohového vektoru i -tého nabitého hmotného bodu v bezrozměrných veličinách. Z pohledu numerického řešiče počáteční úlohy znamená ukončovací podmínka (97) vyjmutí rovnic (89), (90), (91) a (92) z globální soustavy.¹⁾ Ideální přímočaré segmenty zelektrizované trysky však zůstávají při vizualizaci přichyceny na diskovém kolektoru, resp. drátovém kolektoru.

Na obr. 8.21, obr. 8.24 a obr. 8.27 jsou znázorněny vypočtené trajektorie elektricky nabitě trysky při různých parametrech počítačové simulace. Všechny výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN. Trajektorie zelektrizované kapalinové trysky byly vypočteny pro parametry 6% vodného roztoku PEO: povrchové napětí $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, relativní permitivita $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$, měrná elektrická vodivost $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, měrná hmotnost $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, počáteční

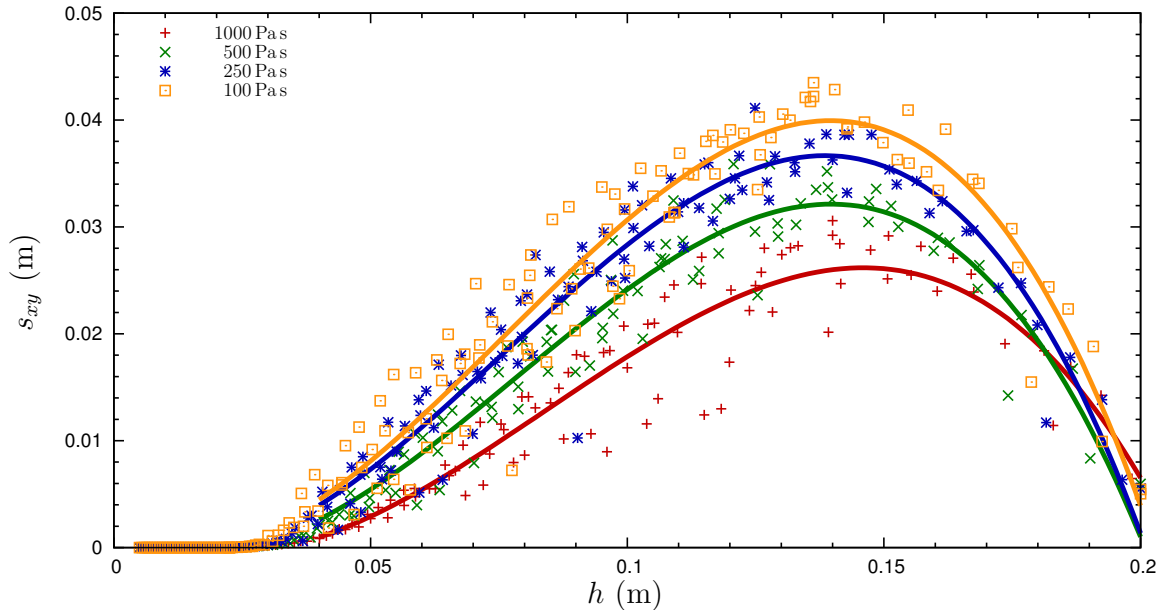
¹⁾ Globální soustavou je myšlena soustava obyčejných diferenciálních rovnic, které jsou přiřazeny každému pohybujícímu se nabitému hmotnému bodu „viskoelastického řetězce“.



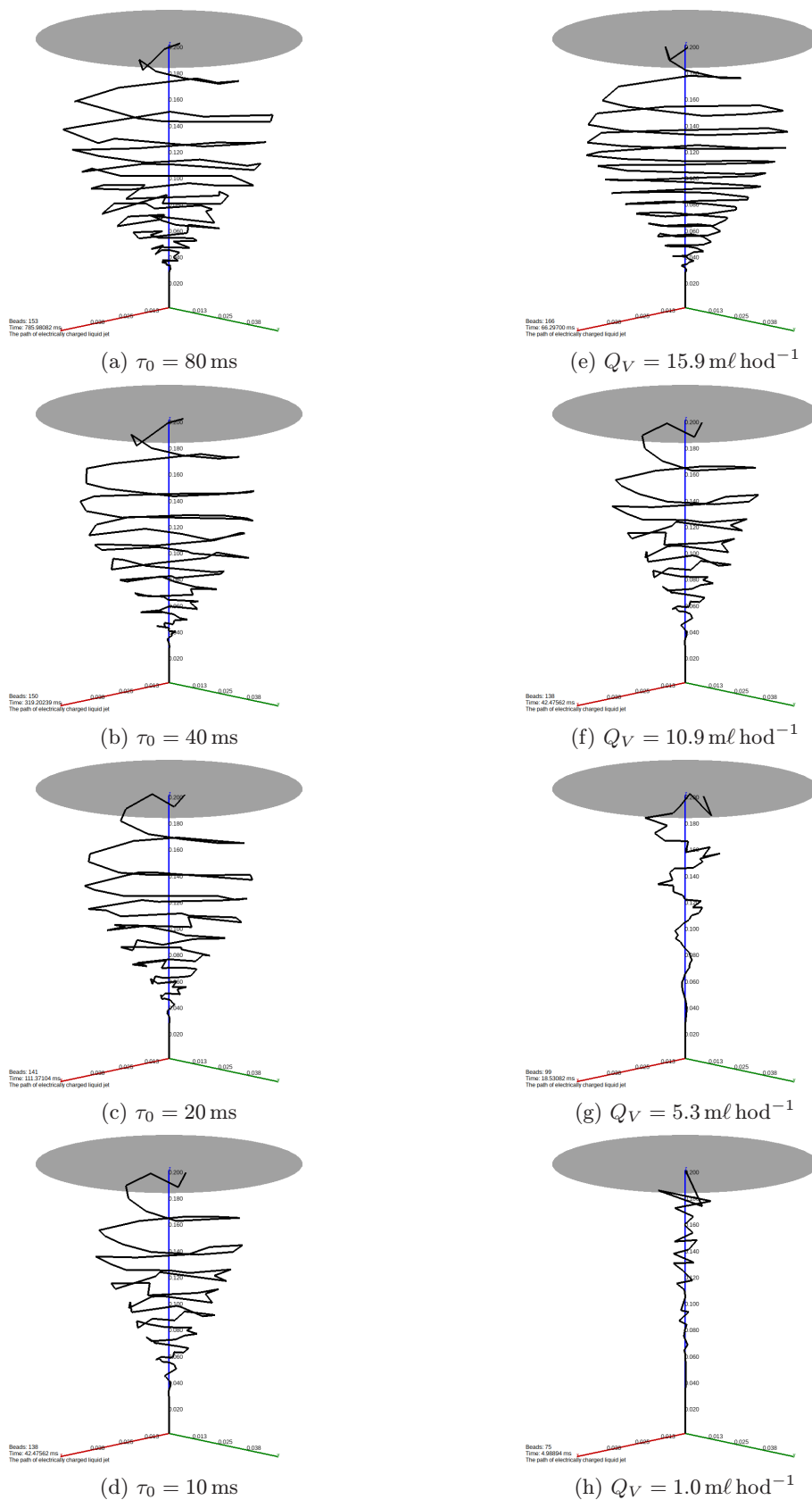
Obr. 8.21: Vliv povrchového napětí γ a počáteční dynamické viskozity η_0 na trajektorii elektricky nabité trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.22 a obr. 8.23.



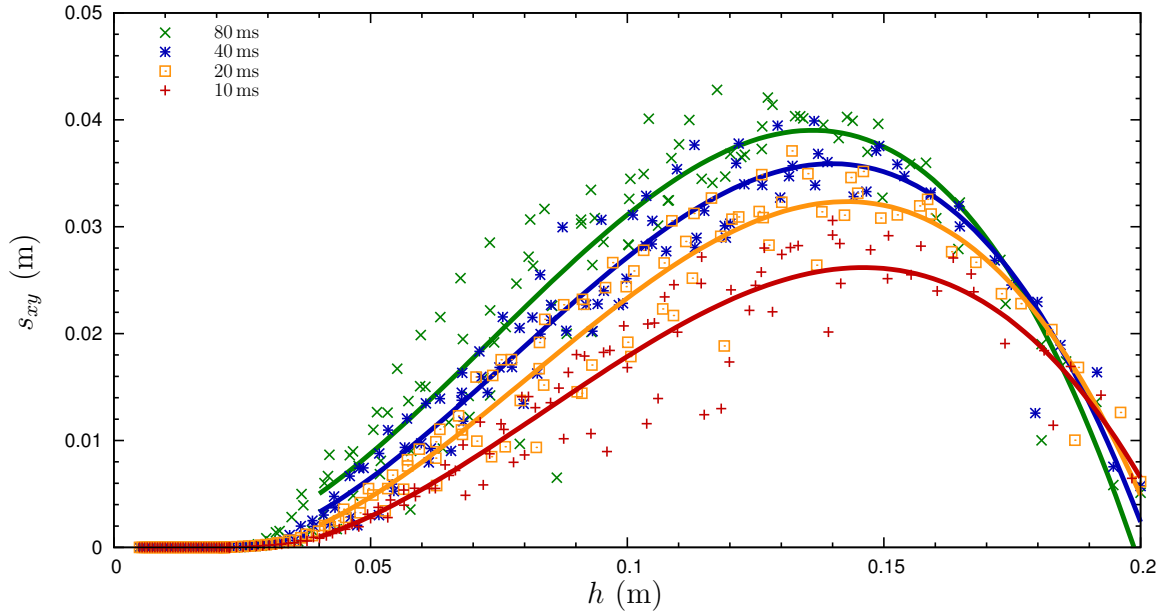
Obr. 8.22: Porovnání vlivu povrchového napětí γ na šířku zóny bičující instability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\varepsilon_{rp} = 57.63$, $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$, $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$, $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5\%$, $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{p0} = 0.06$, $c_{s,\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.



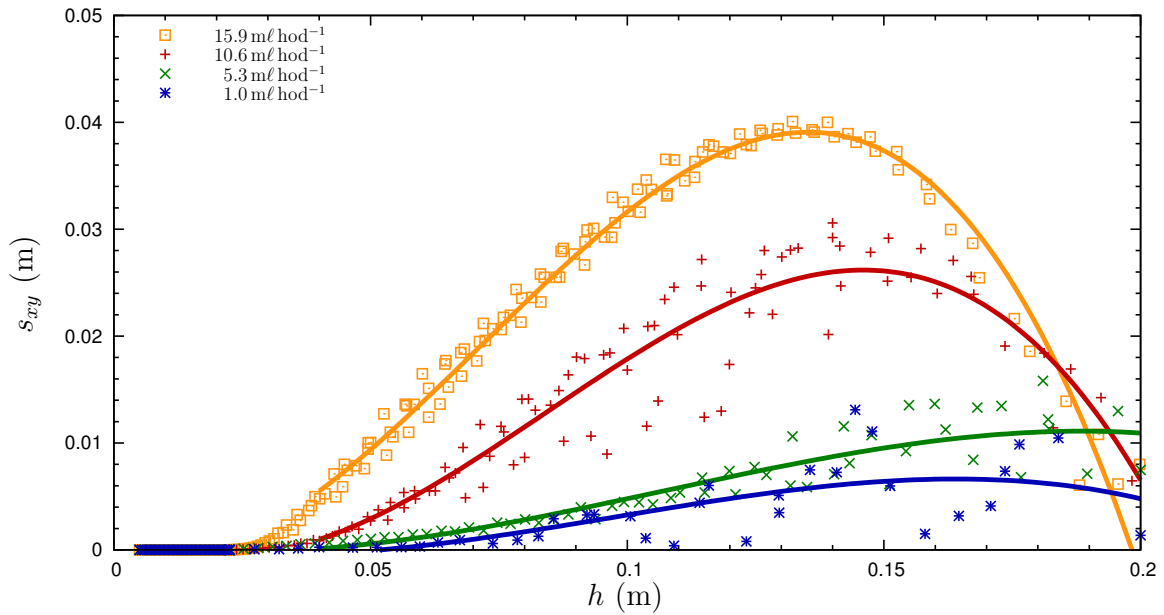
Obr. 8.23: Porovnání vlivu počáteční dynamické viskozity η_0 na šířku zóny bičující instability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\varepsilon_{rp} = 57.63$, $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$, $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5\%$, $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{p0} = 0.06$, $c_{s,\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.



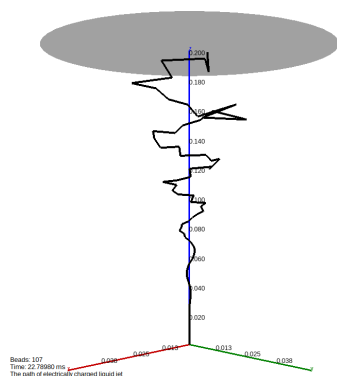
Obr. 8.24: Vliv počátečního relaxačního času τ_0 a objemového průtoku Q_V na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.25 a obr. 8.26.



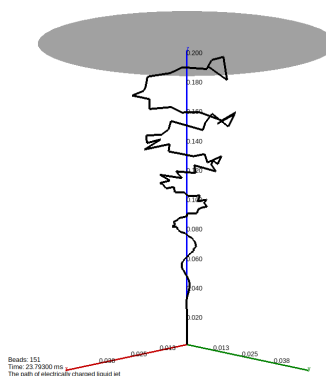
Obr. 8.25: Porovnání vlivu počátečního relaxačního času $\tau_0 = \eta_0/E_0$ na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$, $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$, $\eta_a = 18.6 \text{ } \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5 \%$, $D_{\text{s,a}} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \text{ } \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $I_0 = 2.93 \text{ } \mu\text{A}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{\text{p0}} = 0.06$, $c_{\text{s,}\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \text{ } \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \text{ } \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.



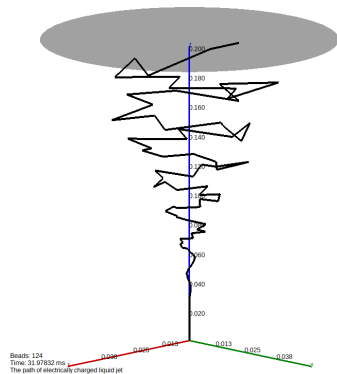
Obr. 8.26: Porovnání vlivu objemového průtoku Q_V na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$, $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$, $\eta_a = 18.6 \text{ } \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$, $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5 \%$, $D_{\text{s,a}} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \text{ } \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $I_0 = 2.93 \text{ } \mu\text{A}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{\text{p0}} = 0.06$, $c_{\text{s,}\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \text{ } \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \text{ } \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.



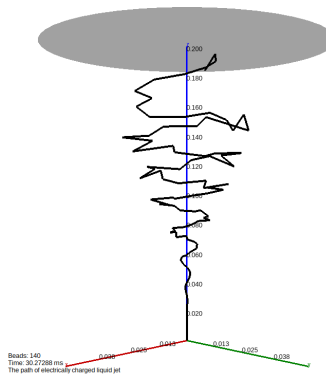
(a) $I_0 = 4.93 \mu\text{A}$



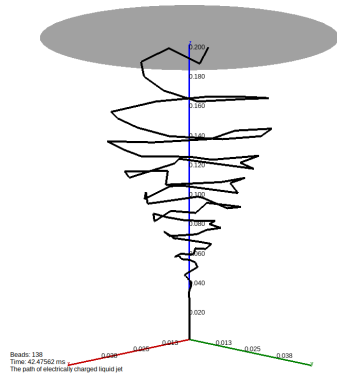
(e) $\varphi_1 - \varphi_2 = 20 \text{ kV}$



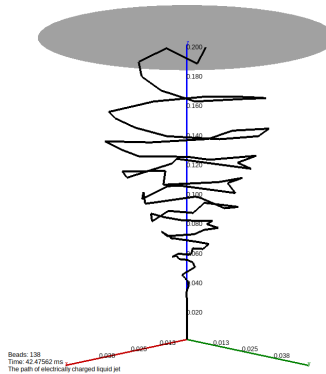
(b) $I_0 = 3.93 \mu\text{A}$



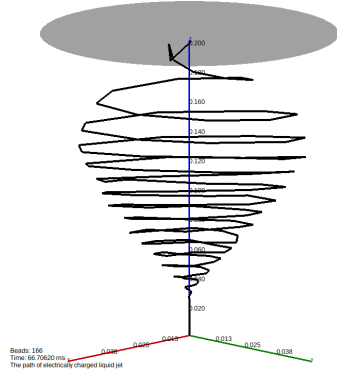
(f) $\varphi_1 - \varphi_2 = 15 \text{ kV}$



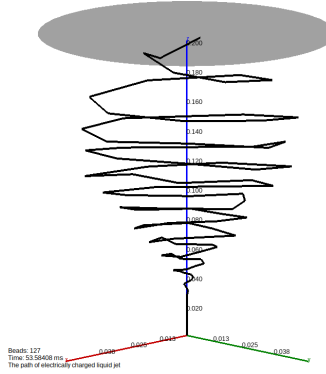
(c) $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$



(g) $\varphi_1 - \varphi_2 = 10 \text{ kV}$

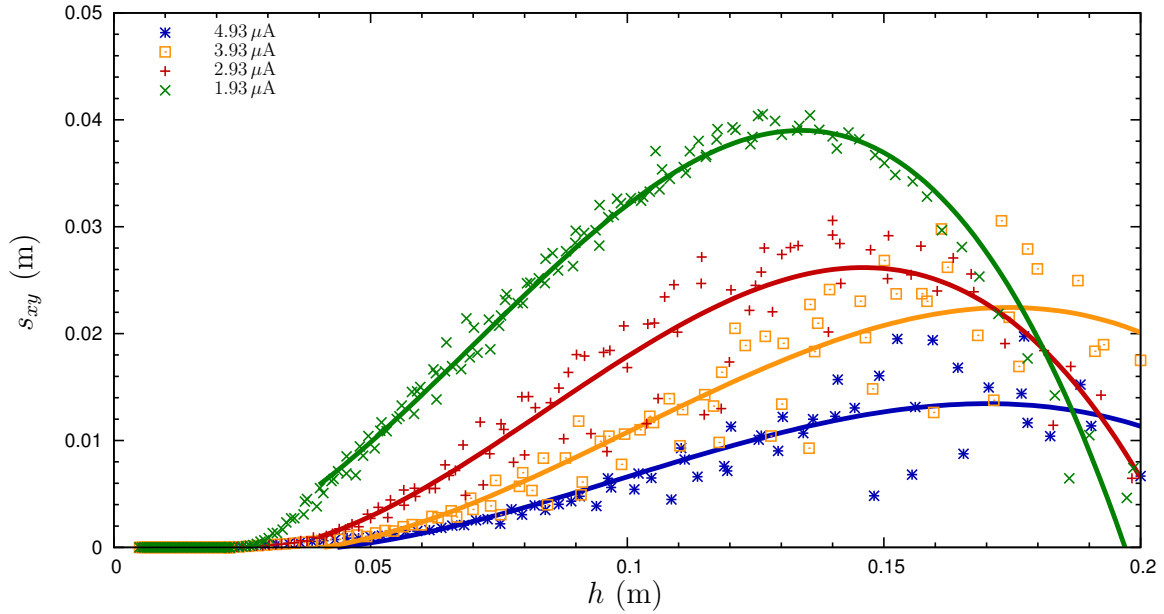


(d) $I_0 = 1.93 \mu\text{A}$

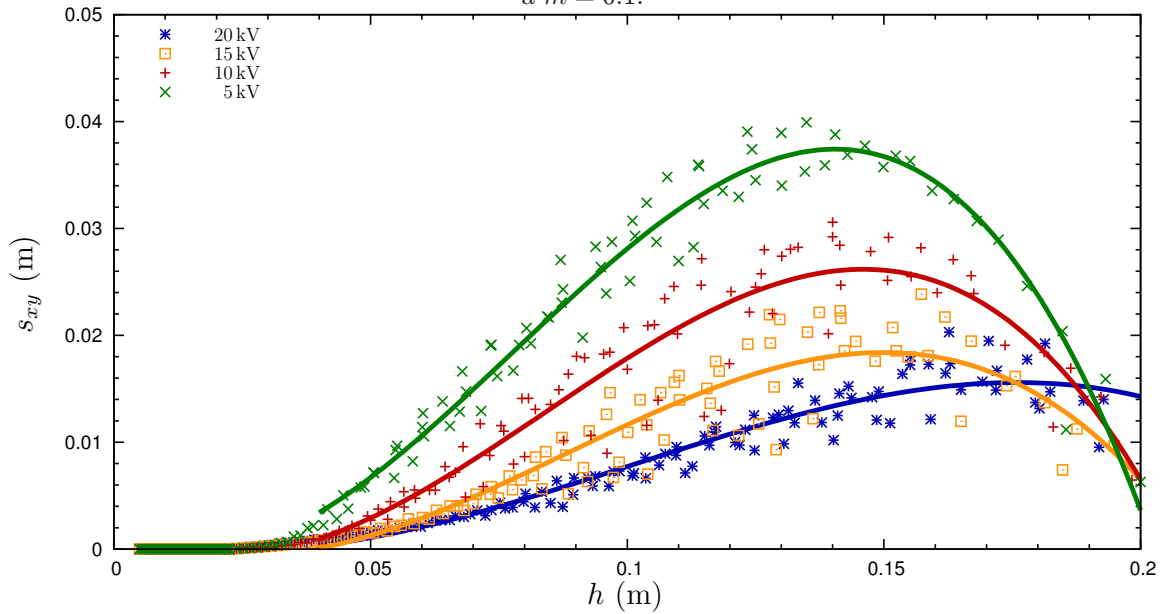


(h) $\varphi_1 - \varphi_2 = 5 \text{ kV}$

Obr. 8.27: Vliv elektrického proudu I_0 a rozdílu elektrických potenciálů $\varphi_1 - \varphi_2$ na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.28 a obr. 8.29.



Obr. 8.28: Porovnání vlivu elektrického proudu I_0 v trysce na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$, $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$, $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$, $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5\%$, $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{p0} = 0.06$, $c_{s,\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.



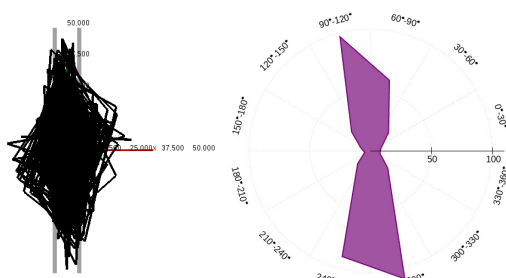
Obr. 8.29: Porovnání vlivu rozdílu elektrických potenciálů $\varphi_1 - \varphi_2$ na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti, h , od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$, $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$, $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$, $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $\psi = 16.5\%$, $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = 50 \mu\text{m}$, $D = 100 \text{ mm}$, $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$, $c_{p0} = 0.06$, $c_{s,\infty} = 0.165$, $d = 10 \text{ mm}$, $d_0 = 300 \mu\text{m}$, $h = 200 \text{ mm}$, $l_0 = 4 \mu\text{m}$ a $m = 0.1$.

dynamická viskozita $\eta_0 = 1\,000$ Pa·s, počáteční relaxační čas $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10$ ms, počáteční hmotnostní koncentrace polymeru $c_{p0} = 0.06$. Binární koeficient difúze rozpouštědla do vzduchu $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a exponent empirického vztahu (8) $m = 0.1$. Procesní parametry byly: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 10$ kV, potenciál uzemněného kolektoru $\varphi_2 = 0$ V, elektrický proud trysky $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$, objemový průtok roztoku kapilárou $Q_V = 10.6 \text{ ml} \text{ hod}^{-1}$. Geometrické parametry byly: vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 200$ mm a průměr diskového kolektoru $D = 100$ mm. Prostředí ve zvlákňovacím prostoru byl vzduch s dynamickou viskozitou $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ a měrnou hmotností $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$. Zvlákňování probíhalo při teplotě $T = 21$ °C a relativní vlhkosti $\psi = 16.5$ %. (Koncentrace nasycených par rozpouštědla v blízkosti kapalinové trysky $c_{s,\infty} = 0.165$.) Počáteční průměr trysky byl $d_0 = 300 \mu\text{m}$ a diskretizační délka segmentu trysky byla $l_0 = 4 \mu\text{m}$. Na obr. 8.22, obr. 8.23, obr. 8.25, obr. 8.26, obr. 8.28 a obr. 8.26 jsou vykresleny radiální vzdálenosti, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$, nabitých hmotných bodů od souřadné osy z . Body byly proloženy kubickým polynomem, jehož koeficienty byly získány nelineární metodou nejmenších čtverců implementovanou v programu GNU PLOT. Simulace byly ukončeny při zachycení prvního nabitého hmotného bodu na uzemněném diskovém kolektoru. Výpočetní čas každé simulace se na PC s procesorem Intel Pentium M @1.6 GHz a OS GNU/Linux pohyboval kolem půl druhé hodiny.

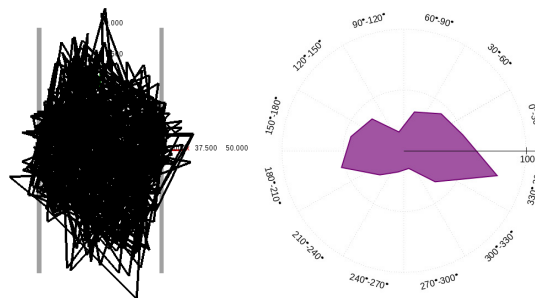
Na str. 53, tab. 5.1, jsou uvedeny řádové rozsahy vstupních parametrů matematického, resp. numerického, modelu. Největší variabilita je v případě dynamické viskozity η . Viskozita také patří mezi nejvýznamnějších systémový parametr ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování.

8.4 Ukládání nanovláken na drátovém kolektoru ■

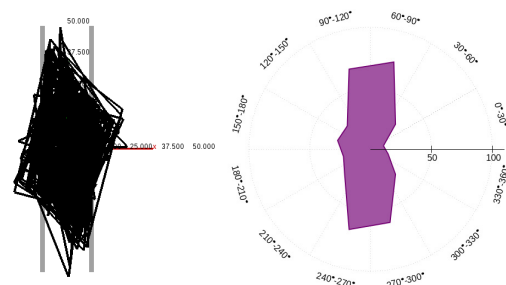
Speciální kolektory různých tvarů hrají klíčovou roli pokud je požadováno cílené ukládání zvlákněných nanovláken. Orientovaná nanovláknina mohou být užitečná například při navrhování scaffoldů pro tkáňové inženýrství [21] nebo žádoucí v případě následného zpracování do nanopříze. Na obr. 8.30(a) až obr. 8.30(h) jsou zobrazeny pohledy na elektrostaticky zvlákněná nanovláknina při různých roztečích válcových vodičů speciálního drátového kolektoru. Součástí každého pohledu je i úhlový histogram pro průkazné vyhodnocení směrové orientace deponovaných nanovláken. Výpočetní čas každé simulace se na PC s procesorem Intel Pentium M @1.6 GHz a OS GNU/Linux pohyboval kolem šesti hodin.



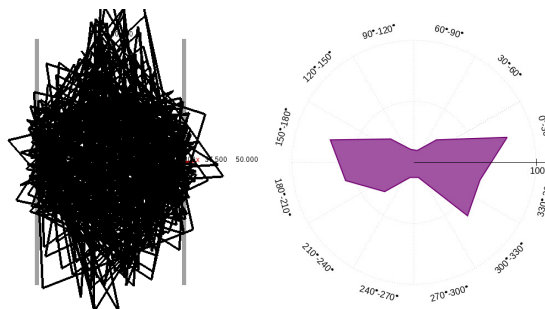
(a) $a = 5.5$ mm



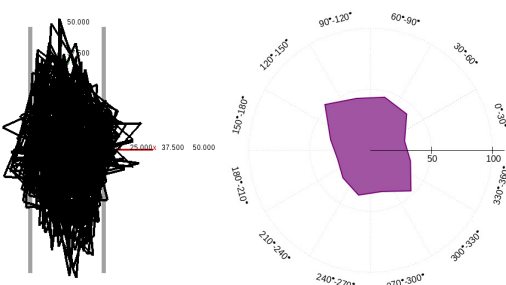
(e) $a = 27.5$ mm



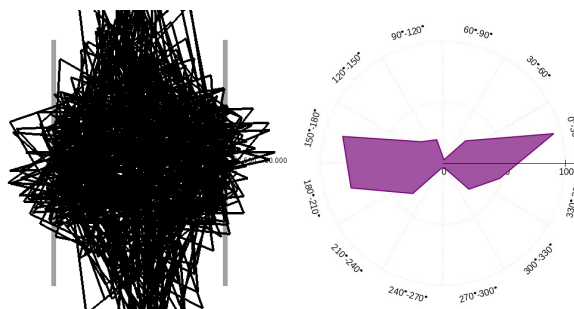
(b) $a = 11.0$ mm



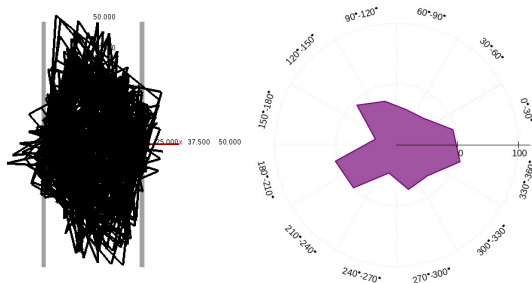
(f) $a = 33.0$ mm



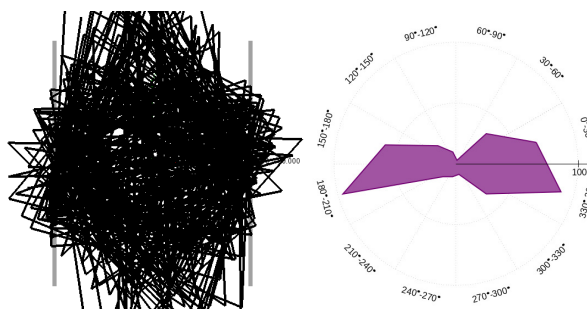
(c) $a = 16.5$ mm



(g) $a = 38.5$ mm



(d) $a = 22.0$ mm



(h) $a = 44.0$ mm

Obr. 8.30: Vliv rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken. Parametry numerických simulací viz str. 76 a 83.

9

Validace numerického modelu

VALIDACÍ je myšleno ověření, zda matematický, resp. numerický, model poskytuje požadovanou shodu s realitou. Jinými slovy jakou má model — i přes přijaté aproximační předpoklady — vypovídací schopnost a do jaké míry umožňuje predikovat proces elektrostatického zvlákňování. Předkládaná kapitola pojednává o reálných experimentech, které byly použity k ověření vztahu model versus realita.

9.1 Validace vnějšího elektrostatického pole

Validace matematického modelu elektrostatického pole uzemněného diskového kolektoru (viz str. 26, odd. 4.1.1) a uzemněného drátového kolektoru (viz str. 28, odd. 4.1.2) byla provedena prostřednictvím velikosti kritické intenzity E_c vnějšího elektrostatického pole pro vznik polymerní trysky (viz [15])

$$E_c = \sqrt[4]{\frac{4\gamma\rho g}{\varepsilon_0^2 \varepsilon_r^2}},$$

kde g je gravitační zrychlení, a kritického elektrického napětí U_c v kV (viz [1][50])

$$U_c = \sqrt{46\,800\pi \ln\left(\frac{2h}{r}\right)\gamma r},$$

kde r je poloměr kapiláry. V souvislosti s kritickými hodnotami je na tomto místě důležité poznamenat, že velikost kritické intenzity E_c je pro konkrétní polymerní roztok materiálovou konstantou, zatímco kritické elektrické napětí U_c je závislé na geometrii zvlákňovací elektrody.

9.1.1 Diskový kolektor

Experimentální data byla převzata z diplomové práce Antonie Hazuchové (viz [40]). Autorka práce [40] pro své experimentální měření použila 10% vodný roztok PVA ($\gamma = 45.58 \text{ mN m}^{-1}$, $\rho = 1\,000 \text{ kg m}^{-3}$) a 12% vodný roztok PVA ($\gamma = 46.29 \text{ mN m}^{-1}$, $\rho = 1\,000 \text{ kg m}^{-3}$). Elektrostatické zvlákňování realizovala z ocelové tyčky o poloměru $r = 5 \text{ mm}$. Kolektor byl uzemněný ocelový disk o průměru $D = 150 \text{ mm}$. Vzdálenost mezi tyčkou a kolektorem byla $h = 40 \text{ mm}$. Závislost velikosti kritické intenzity, E_c ,

vnějšího elektrostatického pole na kritickém elektrickém napětí U_c je pro 10% vodný roztok PVA znázorněna na obr. 9.1 a pro 12% vodný roztok PVA na obr. 9.2. Číselné hodnoty, při kterých začalo zvlákňování, jsou pro srovnání uvedeny v tab. 9.1 a tab. 9.2. Hodnoty získané pomocí autorem vytvořeného modelu JOŽIN byly odečteny na špičce hemisférické polymerní kapky.

Tab. 9.1: Kritické hodnoty elektrického potenciálu a velikosti intenzity elektrického pole pro 10% vodný roztok PVA

	teorie [15, 50]	model	experiment [40]
E_c (MV m ⁻¹)	2.185	2.185	2.196
$U_c \equiv \varphi_1$ (kV)	9.64*)	10.15	13.04

*) Velikost intenzity pole ve vrcholu kapky vypočtená z modelu je $|\mathbf{E}| = 2.075$ MV m⁻¹.

Tab. 9.2: Kritické hodnoty elektrického potenciálu a velikosti intenzity elektrického pole pro 12% vodný roztok PVA

	teorie [15, 50]	model	experiment [40]
E_c (MV m ⁻¹)	2.185	2.185	2.196
$U_c \equiv \varphi_1$ (kV)	9.64**)	10.15	13.04

***) Velikost intenzity pole ve vrcholu kapky vypočtená z modelu je $|\mathbf{E}| = 2.092$ MV m⁻¹.

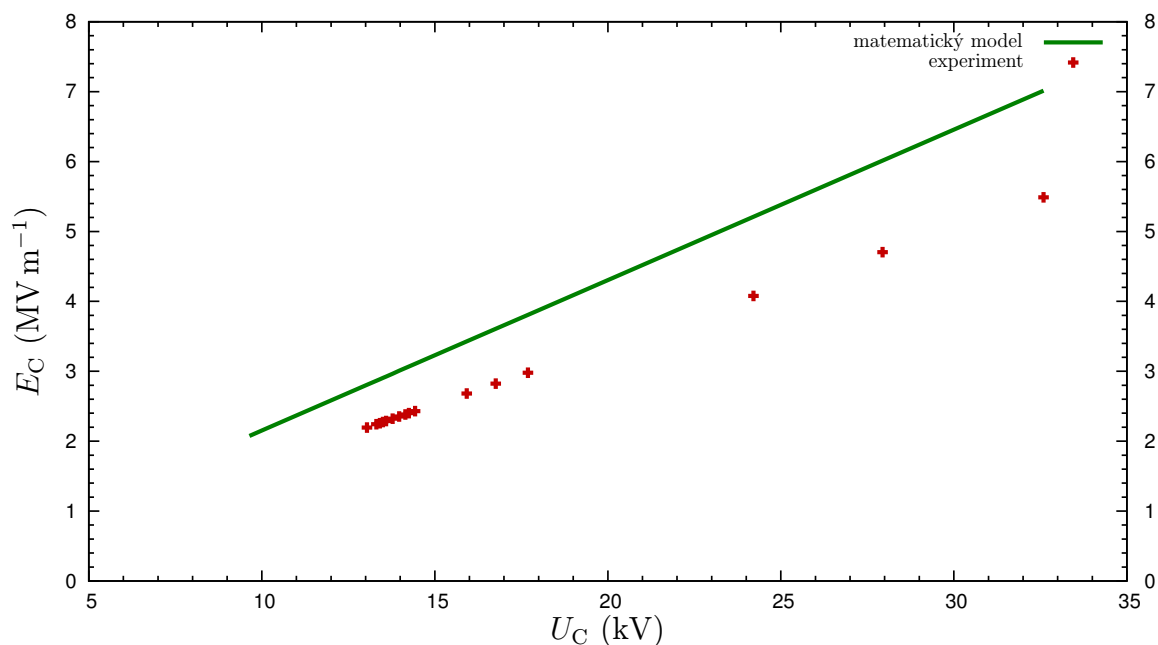
9.1.2 Drátový kolektor

Pro experimentální měření byl použit 10% vodný roztok PVA ($\gamma = 46.29$ mN m⁻¹, $\rho = 1006.9$ kg m⁻³). Elektrostatické zvlákňování bylo realizováno z ocelové tyčky o poloměru $r = 5$ mm. Kolektor byl uzemněný speciální kolektor s dvěma paralelními válcovými vodiči o průměru $D = 2.45$ mm. Rozteče os válcových vodičů byly $a = 4.90, 26.95, 51.45, 63.70$ a 100.45 mm. Vzdálenosti mezi tyčkou a kolektorem byly $h = 49, 98$ a 147 mm. Závislosti kritického napětí, U_c , na rozteči, a , válcových vodičů speciálního kolektoru jsou znázorněny na obr. 9.3(a), obr. 9.3(b) a obr. 9.3(c). (Poznámka: více podrobností může vážený čtenář nalézt v článku [51].)

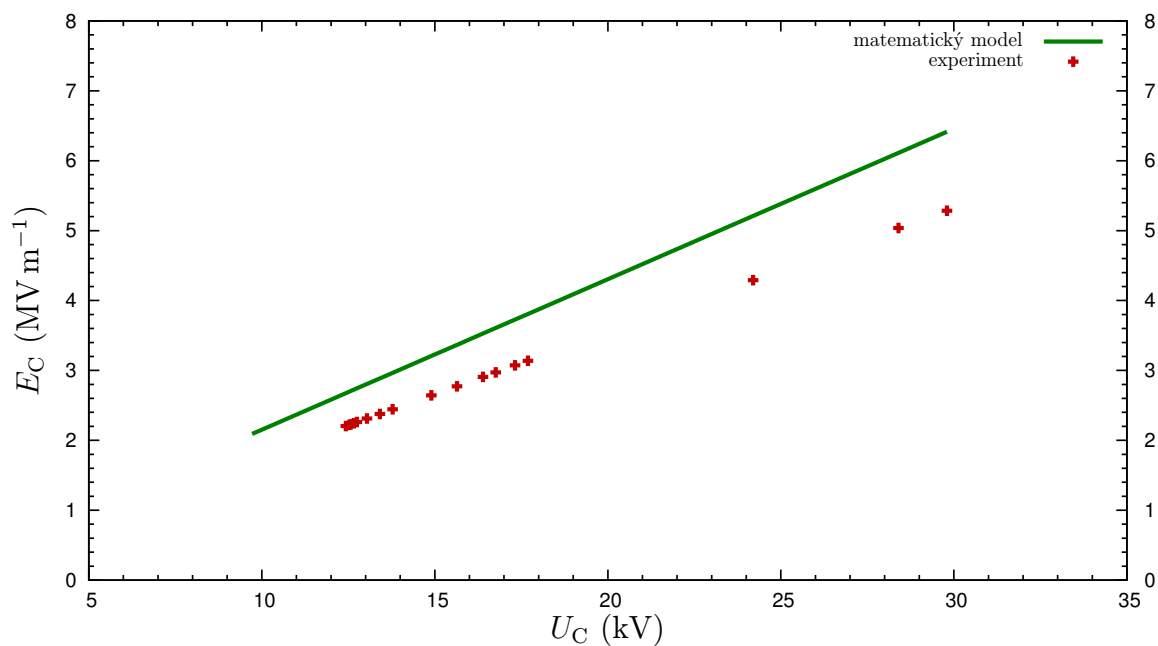
9.2 Validace hodnoty elektrického náboje přenášeného kapalinovou tryskou

Na obr. 9.4 je schematicky znázorněno uspořádání experimentu, pomocí kterého byl měřen elektrický náboj q přenášený kapalinovou tryskou. Uzemněný kolektor je zapojen do obvodu se snímacím odporem, který je připojen na první kanál CH1 osciloskopu. Na druhý kanál CH2 osciloskopu je pak připojen kovový buben, který zachycuje většinu náboje transportovaného ionizovaným plynným prostředím.

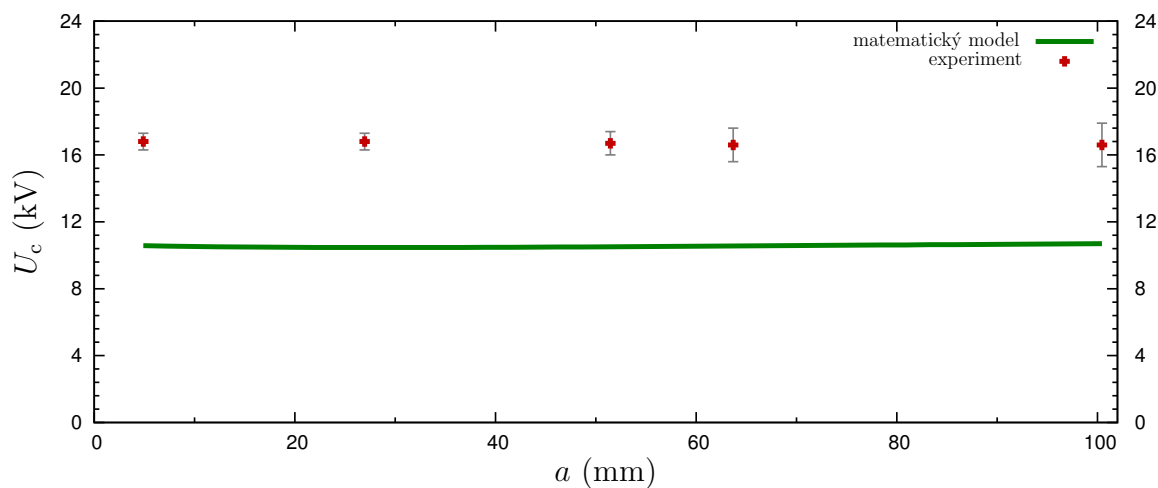
Za předpokladu, že se materiálová částice nesoucí náboj q pohybuje rovnoměrně zrychleným přímočarým pohybem (viz obr. 9.4), lze v nultém přiblížení odhadnout náboj kapalinové trysky následujícím výpočtem. Ze záznamu signálu, který je snímám osciloskopem na kanálu CH2, byl odečten čas $t_2 = 88$ ms. Zrychlení materiálové částice



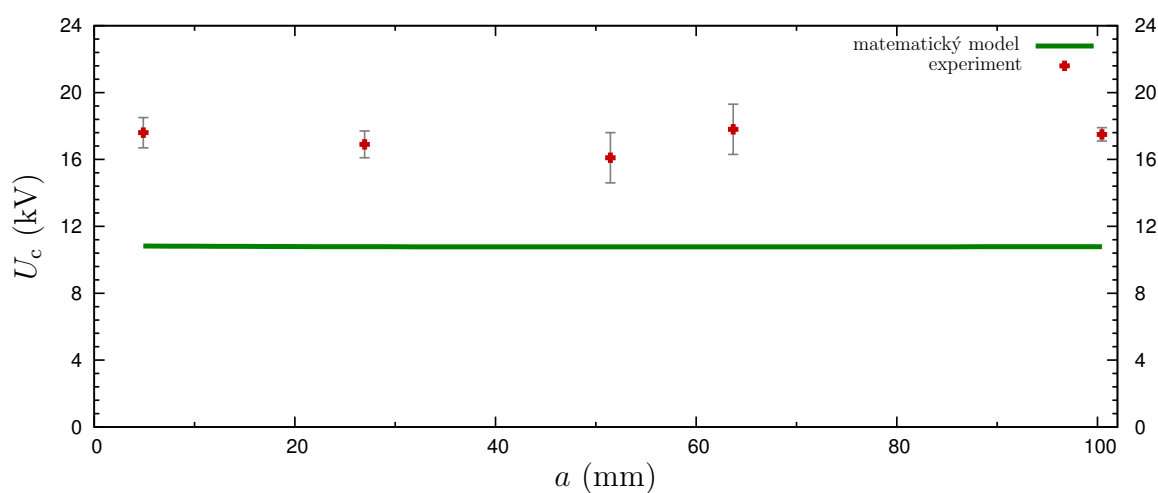
Obr. 9.1: Závislost velikosti kritické intenzity E_c elektrického pole na kritickém elektrickém napětí U_c pro 10% vodný roztok PVA. Zobrazené experimentální hodnoty jsou průměr z deseti měření. Chybové úsečky nejsou znázorněny z důvodu dostupnosti pouze průměrné hodnoty. Kritické hodnoty: $E_c = 2.185 \text{ MV m}^{-1}$, $U_c = 9.64 \text{ kV}$.



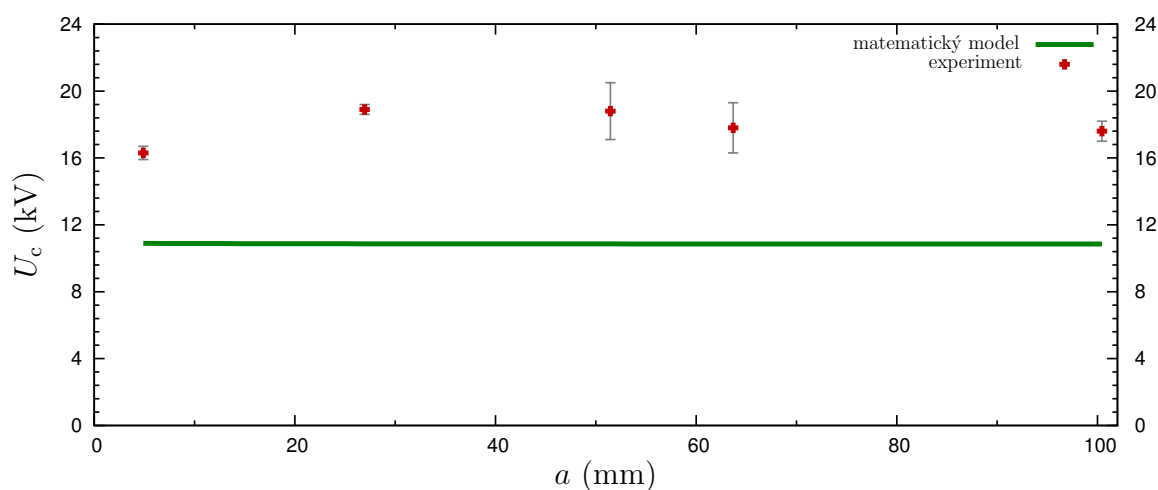
Obr. 9.2: Závislost velikosti kritické intenzity E_c elektrického pole na kritickém elektrickém napětí U_c pro 12% vodný roztok PVA. Zobrazené experimentální hodnoty jsou průměr z deseti měření. Chybové úsečky nejsou znázorněny z důvodu dostupnosti pouze průměrné hodnoty. Kritické hodnoty: $E_c = 2.193 \text{ MV m}^{-1}$, $U_c = 9.72 \text{ kV}$.



(a) vzdálenost mezi tyčkou a kolektorem $h = 49$ mm

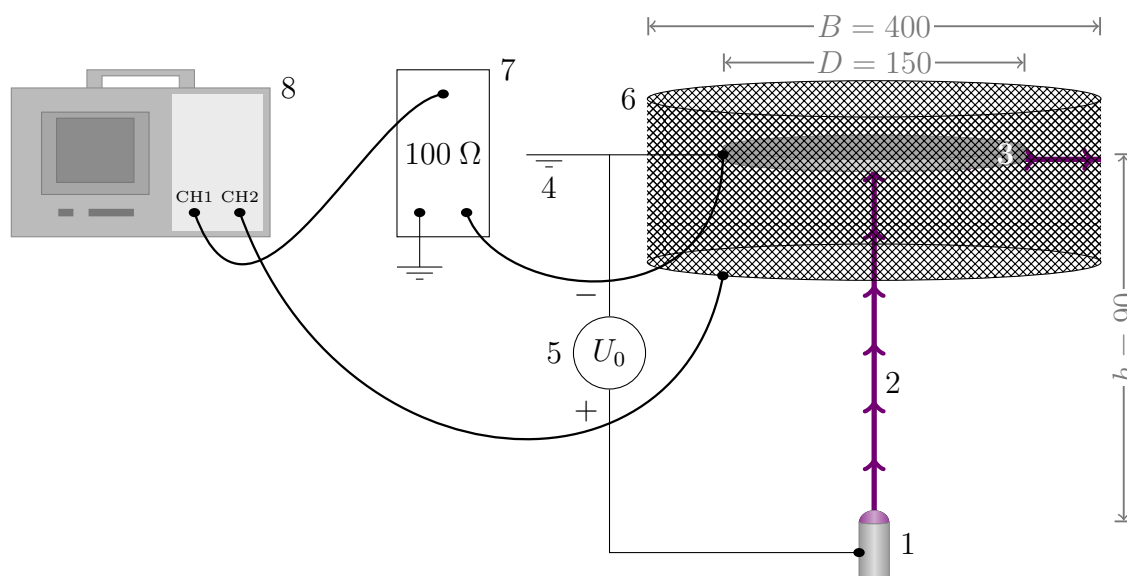


(b) vzdálenost mezi tyčkou a kolektorem $h = 98$ mm



(c) vzdálenost mezi tyčkou a kolektorem $h = 147$ mm

Obr. 9.3: Závislost kritického napětí U_c na rozteči, a , válcových vodičů speciálního drátového kolektoru pro 10% vodný roztok PVA. Zobrazené experimentální hodnoty jsou průměr z deseti měření. Velikosti chybových úseček byly vypočteny programem GNUMERIC.



Obr. 9.4: Schema experimentu pro měření elektrického náboje. 1 — zvlákňovací elektroda, 2 — uvažovaná trajektorie materiálové částice, 3 — uzemněný diskový kolektor, 4 — uzemnění, 5 — vysokonapěťový zdroj, 6 — bubna, 7 — snímací odpor, 8 — osciloskop.

nesoucí elektrický náboj trysky je

$$a = \frac{2(h + B/2)}{t_2^2} = \frac{2 \cdot (90 \cdot 10^{-3} \text{ m} + 200 \cdot 10^{-3} \text{ m})}{(88 \cdot 10^{-3} \text{ s})^2} = 74.9 \text{ m s}^{-2}.$$

Doba „letu“ materiálové částice od kapiláry k uzemněnému kolektoru je potom

$$t_1 = \sqrt{\frac{2h}{a}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 90 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{74.9 \text{ m s}^{-2}}} = 49 \text{ ms}.$$

Autoři článku [19] uvádějí, že doba „letu“ materiálového bodu je — na základě numerického výpočtu — menší než 20 ms. Nicméně je důležité poznamenat, že autoři uvažují ve svém matematickém modelu elektrostatického zvlákňování s bezodporovým prostředím. Rychlost částice je v místě kolektoru

$$v_1 = a t_1 = 74.9 \text{ m s}^{-2} \cdot 49 \cdot 10^{-3} \text{ s} = 3.7 \text{ m s}^{-1}$$

a v místě bubny

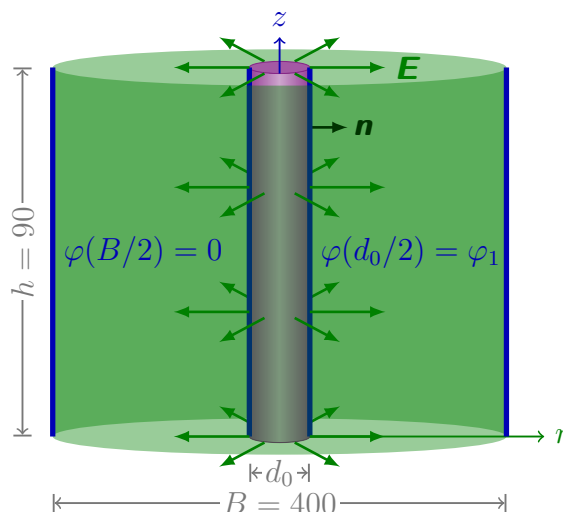
$$v_2 = a t_2 = 74.9 \text{ m s}^{-2} \cdot 88 \cdot 10^{-3} \text{ s} = 6.6 \text{ m s}^{-1}.$$

Reneker a Yarin ve svém souhrnném článku [9] uvádějí, že průměrná rychlost se pohybuje obvykle v rozsahu $1\text{--}5 \text{ m s}^{-1}$. Celkový náboj za dobu t_1 je potom

$$Q = I_0 t_1 = 4.64 \cdot 10^{-6} \text{ A} \cdot 49 \cdot 10^{-3} \text{ s} = 2.27 \cdot 10^{-7} \text{ C}.$$

Za předpokladu válcové trysky mezi kapilárou a uzemněným kolektorem je možné její průměr vypočítat z Ohmova zákona. Tedy

$$d_0 = \sqrt{\frac{4 I_0 h}{\pi \kappa (\varphi_1 - \varphi_2)}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 4.64 \cdot 10^{-6} \text{ A} \cdot 90 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{\pi \cdot 57.7 \cdot 10^{-3} \text{ S m}^{-1} \cdot 20 \cdot 10^3 \text{ V}}} = 22 \mu\text{m}.$$



Obr. 9.5: Elektrické pole válcové trysky uvnitř bubnu (viz obr. 9.4). φ —elektrický potenciál, B —průměr bubnu, d_0 —průměr válcové trysky, h —vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem.

Intenzita elektrického pole v blízkosti válcové trysky se potom určí z Gaussovy věty

$$\oint_S \mathbf{E} \mathbf{n} dS = \frac{Q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}.$$

Protože jsou vektory intenzity kolmé na plášť trysky (viz obr. 9.5) a tok intenzity podstavami je nulový, lze přejít od vektorového zápisu ke skalárnímu. Radiální intenzita elektrického pole vně válcové trysky je určena vztahem

$$E(r) = \frac{Q}{2\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r h} \frac{1}{r}. \quad (98)$$

Elektrický potenciál vyjadřuje potenciální energii vztahenu na jednotkový náboj, tj. záporně vzatá práce, kterou musí elektrické síly vykonat při přemístění náboje z místa s nulovou potenciální energií do daného místa. Integrační cesta je určena okrajovými podmínkami konstantního potenciálu $\varphi(B/2) = 0$ a $\varphi(d_0/2) = \varphi_1$. Elektrický potenciál na povrchu válce je

$$\varphi_1 \equiv \varphi(d_0/2) = - \int_{B/2}^{d_0/2} E(r) dr = - \frac{Q}{2\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r h} \int_{B/2}^{d_0/2} \frac{dr}{r} = \frac{Q}{2\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r h} \ln \frac{B/2}{d_0/2}.$$

Po dosazení do vztahu (98) se dostane

$$E(r) = \frac{\varphi_1}{r \ln \frac{B/2}{d_0/2}}.$$

Velikost elektrické intenzity na povrchu válcové trysky je tedy

$$E(d_0/2) = \frac{\varphi_1}{d_0/2 \ln \frac{B/2}{d_0/2}} = \frac{20 \cdot 10^3 \text{ V}}{11 \cdot 10^{-6} \text{ m} \cdot \ln \frac{200 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{11 \cdot 10^{-6} \text{ m}}} = 185 \text{ MV m}^{-1}.$$

Celkový náboj uvnitř válcové trysky je potom

$$\begin{aligned} Q &= 2 \pi \varepsilon_0 \varepsilon_{rp} h E(d_0/2) d_0/2 \\ &= 2 \cdot \pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1} \cdot 65.99 \cdot 90 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot 185 \cdot 10^6 \text{ V m}^{-1} \cdot 11 \cdot 10^{-6} \text{ m} \\ &= 6.72 \cdot 10^{-7} \text{ C}, \end{aligned}$$

přičemž experimentálně stanovená hodnota je $2.27 \cdot 10^{-7} \text{ C}$. Výpočet náboje uvnitř válcové trysky poskytuje řádovou shodu s experimentem.

VI

Diskuse výsledků a závěr

10

Diskuse výsledků

KAPITOLA desátá se zabývá shrnutím výsledků, které autor získal na základě počítačových simulací a diskusí možných vlivů na tyto výsledky. Její členění sleduje strukturu kapitoly věnované numerickým a virtuálním experimentům.

Růst malých ohybových perturbací

Z výsledků numerických experimentů, jež studovaly růst malých ohybových perturbací, je vidět, že do bezrozměrného času simulace $t^* \doteq 19$ nestabilita není pozorovatelná, ale potom začne narůstat podobným způsobem jako exponenciální funkce. Průběh výslednic sil \mathbf{F}_{VC} a \mathbf{F}_{VM} v tomto čase, de facto, skokově vzroste na maximální hodnotu. S velkou pravděpodobností se jedná o kritický bod, kde tryska přechází ze stabilní části do nestabilní (viz str. 6, obr. 1.1). Porovnáním výsledků na str. 65, obr. 8.1(a) a obr. 8.1(b), je patrné, že pokud jsou nabitě hmotné body A , B a C vzájemně propojeny reologickými prvky [viz str. 20, obr. 3.3(b)], výslednice viskoelastických sil, \mathbf{F}_{VM} , má tendenci vyrovnávat nestabilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami \mathbf{F}_C . Nabitý hmotný bod B byl při numerickém experimentu vychylován až do vzdálenosti, která odpovídala bezrozměrnému poloměru uzemněného diskového kolektoru, tedy $D^*/2 = 50$. V případě obr. 8.1(a) byl konečný čas simulace $t^* = 27.367$, bezrozměrná velikost rychlosti bodu B byla $v_B^* = 6.07$ a v případě obr. 8.1(b) byl $t^* = 71.441$, $v_B^* = 0.95$. Pro názornější srovnání má časová osa v obou numerických experimentech stejný rozsah. Pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability (viz str. 19, odd. 3.5), jenž byl navržený Renekerem a Yarinem, lze považovat za relevantní v souvislosti s elektrostatickým zvlákňováním.

Segment elektricky nabitě trysky ve vnějším elektrostatickém poli

Analýzou dat získaných na základě několika numerických experimentů, jež si kladly za cíl zjistit chování ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky ve vnějším homogenním elektrostatickém poli, lze dospět k následujícím závěrům. V případě experimentu s jednou „viskoelastickou činkou“ (viz str. 67, obr. 8.3) je průběh mechanického normálového napětí σ a viskoelastické síly \mathbf{F}_M z počátku rostoucí (efekt Hookeova prvku reologického modelu) a potom — v důsledku relaxace zvlákňovaného polymerního roztoku — klesající (efekt Newtonova prvku reologického modelu). Během dloužení

v homogenním elektrostatickém poli se průměr segmentu trysky zmenšil 10-krát a jeho délka se zvětšila 100-krát (viz str. 68, obr. 8.5). Výsledky odpovídají zákonu zachování objemu, neboť se neuvažovalo s úbytkem rozpouštědla, $\Lambda = 1$. Štíhlost ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky je tedy $l_f/d_f = 1\,000$. V případě uvažování vlivu úbytku rozpouštědla, $\Lambda \in \langle 1; c_{p0} \rangle$, se průměr segmentu trysky zmenšil 50-krát a jeho délka se zvětšila 100-krát (viz str. 68, obr. 8.6). Štíhlost přímočarého segmentu elektricky nabité trysky je tedy $l_f/d_f = 5\,000$.

Detailnější pohled na chování ideálního přímočarého segmentu elektricky nabité trysky ve vnějším homogenním elektrostatickém poli do okamžiku přidání nového segmentu dávají experimenty vykreslené na str. 69–70, obr. 8.7 až obr. 8.10. Zde je patrné, že do tohoto okamžiku nedochází k uplatnění Newtonova prvku reologického modelu. Modelovat viskoelastické chování polymerního roztoku je možné v tomto případě pouze lineární pružinou. Štíhlost segmentu trysky je $l_f/d_f = 2.86$, když se neuvažovalo s úbytkem rozpouštědla a $l_f/d_f = 3.03$, pokud se vliv úbytku rozpouštědla uvažoval.

Poslední série experimentů (viz str. 71–75, obr. 8.11 až obr. 8.20) studovaly chování postupně se tvořícího „řetězce viskoelastických činek“. Výsledky ukazují výrazné skokové změny v průbězích elektrostatických odpuzujících sil \mathbf{F}_C a viskoelastických sil \mathbf{F}_M v okamžiku přidání nového ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky. Tento nežádoucí efekt „korálového–pružinového“ modelu¹⁾ by — dle autorova názoru — odstranila náhrada ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky jednorozměrným kontinuem.

Trajektorie elektricky nabité trysky

Na úvod tohoto oddílu je důležité poznamenat, že odhad některých parametrů matematického, resp. numerického, modelu je velmi obtížný. Jedná se zejména o počáteční průměr, d_0 , kapalinové trysky, elektrický náboj, q , přenášený tryskou, úhlovou frekvenci, ω , perturbace nebo její amplitudu A .

Z výsledků znázorněných na str. 78, obr. 8.22, je zřejmé, že povrchové napětí γ , nemá žádný signifikantní vliv na změnu trajektorie elektricky nabité trysky. Toto konstatování dává za pravdu autorům článku [9], přestože autorovo očekávání bylo opačné, neboť dloužení vede ke zvětšování povrchu kapalinové trysky. Povrchové napětí hraje důležitou roli v případě „korálových“ defektů na elektrostaticky zvlákněných vláknech (viz např. [26]). Na tomto místě by chtěl autor také polemizovat s tvrzením autorů článku [36], které zní: ohýbání kapalinové trysky vede ke zvětšování jejího povrchu. Autor výpočtem ověřil, že ohýbáním válcového segmentu trysky nedochází ke zvětšování jeho povrchu.

Velmi důležitým parametrem, jenž ovlivňuje proces elektrostatického zvláknování, je počáteční dynamická viskozita, η_0 , polymerního roztoku. Výsledky počítačových simulací na str. 77, obr. 8.21(e), obr. 8.21(f), obr. 8.21(g) a obr. 8.21(h), ukazují, že snižování počáteční dynamické viskozity zvlákněvaného roztoku vede k rozšiřování kuželové spirály (viz str. 78, obr. 8.23). Důsledkem je větší stupeň dloužení kapalinové

¹⁾ Anglicky bead–spring model.

trysky, a proto menší průměr výsledných nanovláken. Vysvětlení je následující: je známo (viz např. [8][18]), že mechanické normálové napětí, σ , stabilizuje přímočarý úsek kapalinové trysky, potlačuje rozšiřování zóny bičující nestability. Současně se ($E \propto \eta$) zvyšuje také ohybová tuhost $E J$, tj. součin Youngova modulu pružnosti a kvadratického momentu plochy příčného průřezu. Počítačové simulace jsou v souladu s experimenty, neboť zvláknováním polymerních roztoků o velké počáteční dynamické viskozitě, η_0 , jsou produkována nanovlákná s větším průměrem (viz např. [24][25][26][52]).

Dalším materiálovým parametrem matematického, resp. numerického, modelu je počáteční relaxační čas, τ_0 , zvláknovaného polymerního roztoku. Z výsledků počítačových simulací na str. 79, obr. 8.24(a), obr. 8.24(b), obr. 8.24(c) a obr. 8.24(d), je vidět, že elektrostatickým zvláknováním polymerních roztoků s delším relaxačním časem budou produkována nanovlákná s menším průměrem, neboť opět dochází k rozšiřování kuželové spirály (viz str. 80, obr. 8.25). To jinými slovy znamená, že s prodlužujícím počátečním relaxačním časem, τ_0 , dochází ke snižování Youngova modulu pružnosti, E_0 , kapalinové trysky ($E \propto 1/\eta$) a při stejném poměrném prodloužení způsobeném vnějším elektrostatickým polem bude v kapalinové trysce menší mechanické normálové napětí σ . Protože normálové napětí, σ , stabilizuje přímý úsek kapalinové trysky (viz např. [8][18]), a proto potlačuje rozšiřování zóny bičující nestability. Výsledky počítačových simulací predikují stejný trend.

V souladu s očekáváním autora jsou výsledky vlivu objemového průtoku, Q_V , roztoku kapilárou na trajektorii elektricky nabitě trysky. S rostoucím objemovým průtokem, Q_V , polymerního roztoku, klesá — za předpokladu konstantního elektrického proudu I_0 — objemová hustota náboje ($q_\rho \propto 1/Q_V$), z níž je vypočítána hodnota počátečního náboje q_0 , která je přiřazena nabitým hmotným bodům trysky. S klesající hodnotou náboje těchto hmotných bodů, dochází k jejich pomalejšímu pohybu směrem ke sběrnému kolektoru. Důsledkem je rozšiřování kuželové spirály bičující nestability (viz str. 80, obr. 8.26), jak také ukazují výsledky počítačových simulací na str. 79, obr. 8.24(e), obr. 8.24(f), obr. 8.24(g) a obr. 8.24(h), a proto dochází k produkovaní nanovláken s menším průměrem.

Je zřejmé, že ke stejným závěrům se dojde také při srovnáním vlivu elektrického proudu, I_0 , protékajícího kapalinovou tryskou, neboť obě fyzikální veličiny jsou opět provázané. S klesající hodnotou elektrického proudu, I_0 , klesá hodnota počátečního náboje, q_0 , hmotných bodů ($q \propto I$) a dochází tedy k jejich pomalejšímu pohybu směrem ke sběrnému kolektoru. Z výsledků počítačových simulací zobrazených na str. 81, obr. 8.27(a), obr. 8.27(b), obr. 8.27(c) a obr. 8.27(d), je vidět, že klesající elektrický proud I_0 , jenž protéká kapalinovou tryskou, vede ke zvětšování šířky zóny bičující nestability (viz str. 82, obr. 8.28). Důsledkem je větší stupeň dlužení kapalinové trysky a tedy menší průměr výsledných nanovláken.

Poslední ze série počítačových simulací trajektorie elektricky nabitě trysky je vliv rozdílu elektrostatických potenciálů $\varphi_1 - \varphi_2$. Tento potenciálový rozdíl generuje vnější elektrostatické pole, které do určité vzdálenosti stabilizuje přímý směr zelektrizované trysky. Výsledky počítačových simulací prezentované na str. 81, obr. 8.27(e), obr. 8.27(f), obr. 8.27(g) a obr. 8.27(h), ukazují, že elektrostatické zvláknování při nižších hodnotách aplikovaného elektrického napětí, U_0 , povede k produkovaní nanovláken o menším

průměru. Důsledek je za prvé oslabení stabilizačního efektu mechanického normálového napětí σ a za druhé pomalejší pohyb elektrického náboje přenášeného kapalinovou tryskou směrem ke sběrnému kolektoru, což se projeví rozšiřováním oblasti (viz str. 82, obr. 8.29), ve které dochází k bičující nestabilitě. Počítačové simulace jsou opět v dobré shodě s experimenty (viz např. [8][18]).

Ukládání nanovláken na speciálním drátovém kolektoru ■

Z výsledků počítačových simulací na str. 84 je patrné, že pro velmi malé rozteče válcových vodičů speciálního drátového kolektoru, $a = 11$ mm (cca 0.2 délky drátu), dochází primárně k ukládání nanovláken podél vodičů [viz str. 84, obr. 8.30(a), obr. 8.30(b)]. Pokud je rozteč vodičů kolem $a = 19$ mm (cca 0.35 délky drátu), nanovlákná se mezi vodiči ukládají přednostně chaoticky, jak je vidět z úhlových histogramů [viz obr. 8.30(c), obr. 8.30(d)]. Takové ukládání je typické pro diskový uzemněný kolektor. Podle úhlových histogramů [viz obr. 8.30(e), obr. 8.30(f), obr. 8.30(g), obr. 8.30(h)] je dále zřejmé, že pokud je rozteč válcových vodičů speciálního drátového kolektoru kolem poloviny jejich délky, dochází již k dominantnímu ukládání nanovláken kolmo na tyto vodiče. Tento výsledek je v souladu s [53] a také experimentem provedeným Ing. Jiřím Chvojkou, Ph. D. z katedry netkaných textilií a nanovláknenných materiálů TUL.

11

Závěr a doporučení pro další práci ■

Předložená disertační práce se zabývala modelováním a simulacemi bičující nestability, která je nezbytným mechanismem při elektrostatickém zvlákňování. Jejím cílem bylo navrhnout matematický model elektricky nabitě kapalinové trysky a tento model realizovat ve formě počítačového programu.

Shrnutím výsledků dosažených na základě počítačových simulací lze dospět k závěru, cíle disertační práce byly splněny, a že matematický model, resp. numerický model, je schopen predikovat vliv parametrů na proces elektrostatického zvlákňování, ukládání elektrostaticky zvlákněných nanovláken na sběrném kolektoru, a také přispět k hlubšímu porozumění tohoto procesu. Praktickým výstupem práce je především počítačová aplikace pro efektivní simulaci procesu elektrostatického zvlákňování, která vědeckým pracovníkům nabízí nástroj pro rychlejší vývoj nanovlákněných materiálů. Velkou výhodou tohoto přístupu je, že samotnému procesu elektrostatického zvlákňování předchází počítačová simulace, což vede k úspoře nejen materiálu, energetických zdrojů, ale i času. Přínosem disertační práce jsou také nové vlastnosti matematického modelu, resp. numerického modelu, které nejsou obsaženy v modelu od Renekera a Yarina. Mezi tyto nové vlastnosti patří nahrazení homogenního elektrostatické pole za modely elektrických polí pro diskový kolektor a speciální drátový kolektor, které umožňují vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace. Vzhledem k velkému měrnému povrchu polymerních nanovláken byla přidána síla zahrnující vliv třecí a tlakové složky odporového prostředí vzduchu. Počítačová aplikace také obsahuje výpočet kritické intenzity elektrostatického pole pro ověření, zda při zadaných parametrech nastane elektrostatické zvlákňování nebo kontrolu minimálního požadovaného počátečního průměru kapalinové trysky.

Na základě poznatků vlastních i uvedených v citované literatuře autor dále doporučuje postupovat při vývoji numerického modelu v následujících krocích:

- nahradit přímočarý segment zelektrizované trysky jednorozměrným kontinuem;
- zahrnout elektrický vítr, který je podle práce [54] dalším důležitým jevem doprovázející elektrostatické zvlákňování;
- implementovat algoritmus rozdělující po určité délce segment ideální přímočaré zelektrizované trysky na dvě části;
- provést analýzu stability soustavy nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic;
- zvážit přeformulování počáteční Cauchyho úlohy na optimalizační úlohu.

Literatura



- [1] LUKÁŠ, D. et al. Physical principles of electrospinning (Electrospinning as a nano-scale technology of the twenty-first century). *Textile Progress*. June 2009, vol. 41, iss. 2, s. 59 – 140.
- [2] TUCKER, N. et al. The history of the science and technology of electrospinning from 1600 to 1995. *Journal of Engineered Fibers and Fabrics*. July 2012, vol. 7, s. 63 – 73.
- [3] FENG, J. J. The stretching of an electrified non-Newtonian jet: A model for electrospinning. *Physics of fluids*. November 2002, vol. 14, num. 11, s. 3 912 – 3 926.
- [4] THERON, S. A. – ZUSSMAN, E. – YARIN, A. L. Experimental investigation of the governing parameters in the electrospinning of polymer solutions. *Polymer*. March 2004, vol. 45, iss. 6, s. 2 017 – 2 030.
- [5] RAMAKRISHNA, S. et al. *An Introduction to Electrospinning and Nanofibers*. 1st edition. Singapore : World Scientific Publishing, 2005. 396 pp. ISBN 978-981-256-415-3.
- [6] RENEKER, D. H. et al. Electrospinning of nanofibers from polymer solutions and melts. *Advances in Applied Mechanics*. July 2007, vol. 41, s. 43 – 195.
- [7] THERON, S. A. et al. Multiple jets in electrospinning: experiment and modeling. *Polymer*. April 2005, vol. 46, iss. 9, s. 2 889 – 2 899.
- [8] RENEKER, D. H. et al. Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning. *Journal of Applied Physics*. May 2000, vol. 87, num. 9, s. 4 531 – 4 547.
- [9] RENEKER, D. H. – YARIN, A. L. Electrospinning jets and polymer nanofibers. *Polymer*. May 2008, vol. 49, iss. 10, s. 2 387 – 2 425.
- [10] YARIN, A. L. – KOOMBHONGSE, S. – RENEKER, D. H. Bending instability in electrospinning of nanofibers. *Journal of Applied Physics*. March 2001, vol. 89, num. 5, s. 3 018 – 3 026.
- [11] Nobel Media AB. *The Nobel Prize in Chemistry 2013* [online]. [cit. 2014-06-21]. c2013. Dostupné z: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/.
- [12] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. I. Stability theory. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2 201 – 2 220.

- [13] KOWALEWSKI, T. A. – BLONSKI, S. – BARRAL, S. Experiments and modelling of electrospinning process. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences*. August 2005, vol. 53, num. 4, s. 385 – 394.
- [14] HUANG, Z. M. et al. A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites. *Composites science and technology*. November 2003, vol. 63, iss. 15, s. 2 223 – 2 253.
- [15] LUKÁŠ, D. – SARKAR, A. – POKORNÝ, P. Self-organization of jets in electrospinning from free liquid surface: A generalized approach. *Journal of Applied Physics*. April 2008, vol. 103, iss. 8, s. 309 – 316.
- [16] TAYLOR, G. Disintegration of water drops in an electric field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. July 1964, vol. 280, iss. 1382, s. 383 – 397.
- [17] YARIN, A. L. – KOOMBHONGSE, S. – RENEKER, D. H. Taylor cone and jetting from liquid droplets in electrospinning of nanofibers. *Journal of Applied Physics*. November 2001, vol. 90, num. 9, s. 4 836 – 4 846.
- [18] HAN, T. – YARIN, A. L. – RENEKER, D. H. Viscoelastic electrospun jets: Initial stresses and elongational rheometry. *Polymer*. March 2008, vol. 49, iss. 8, s. 1 651 – 1 658.
- [19] THOMPSON, C. J. et al. Effects of parameters on nanofiber diameter determined from electrospinning model. *Polymer*. November 2007, vol. 48, iss. 23, s. 6 913 – 6 922.
- [20] TEO, W. E. – RAMAKRISHNA, S. A review on electrospinning design and nanofibre assemblies. *Nanotechnology*. July 2006, vol. 17, iss. 14, s. 89 – 106.
- [21] VASITA, R. – KATTI, D. S. Nanofibers and their applications in tissue engineering. *International Journal of Nanomedicine*. March 2006, vol. 1, iss. 1, s. 15 – 30.
- [22] RŮŽIČKOVÁ, J. *Elektrostatické zvlákňování nanovláken*. 2. vyd. Liberec : TUL, 2006. 54 s. ISBN 80-7372-066-3.
- [23] ZIABICKI, A. *Fundamentals of Fibre Formation: The Science of Fibre Spinning and Drawing*. 1st edition. London : John Wiley & Sons, 1976. 488 pp. ISBN 978-0471982203.
- [24] BAUMGARTEN, P. K. Electrostatic spinning of acrylic microfibers. *Journal of Colloid and Interface Science*. May 1971, vol. 36, iss. 1, s. 71 – 79.
- [25] DOSHI, J. – RENEKER, D. H. Electrospinning process and applications of electrospun fibers. *Journal of Electrostatics*. August 1995, vol. 35, iss. 2 – 3, s. 151 – 160.
- [26] FONG, H. – CHUN, I. – RENEKER, D. H. Beaded nanofibers formed during electrospinning. *Polymer*. July 1999, vol. 40, iss. 16, s. 4 585 – 4 592.
- [27] WATANABE, H. Viscoelasticity and dynamics of entangled polymers. *Progress in Polymer Science*. November 1999, vol. 24, iss. 9, s. 1 253 – 1 403.
- [28] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. II. Applications. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2 221 – 2 236.

- [29] ZENG, Y. C. – YANG, J. P. – YU, C. W. Mixed Euler-Lagrange approach to modeling fiber motion in high speed air flow. *Applied Mathematical Modelling*. March 2005, vol. 29, iss. 3, s. 253 – 262.
- [30] FILATOV, Y. – BUDYKA, A. – KIRICHENKO, V. *Electrospinning of Micro- and Nanofibers: Fundamentals in Separation and Filtration Processes*. 1st edition. New York : Begell House, 2007. 488 s. ISBN 978–1–56700–241–6.
- [31] LIENHARD IV, J. H. – LIENHARD V, J. H. *A Heat Transfer Textbook*. 4th edition. Cambridge : Phlogiston Press, 2012. Dostupné z: <http://web.mit.edu/lienhard/www/ahtt.html>. 755 s.
- [32] SEAVER, M. – GALLOWAY, A. – MANUCCIA, T. J. Acoustic Levitation in a free-jet wind tunnel. *Review of Scientific Instruments*. November 1989, vol. 60, iss. 11, s. 3 452 – 3 459.
- [33] VIKTORIN, Z. Analytické řešení sušícího procesu s uvažováním vlivu rozměru materiálu ve směru proudění sušícího prostředí. *Zdravotní technika a vzduchotechnika*. 1985, ročník 8, číslo 4, s. 145 – 152.
- [34] MEISSNER, B. – ZILVAR, V. *Fyzika polymerů: Struktura a vlastnosti polymerních materiálů*. 1. vyd. Praha : SNTL, 1987. 308 s.
- [35] SEDLÁK, B. – ŠTOLL, I. *Elektřina a magnetismus*. 2. vyd. Praha : ACADEMIA, 2002. 632 s. ISBN 80–200–1004–1.
- [36] YARIN, A. L. *Free liquid jets and films: hydrodynamics and rheology*. 1st edition. New York : Longman Scientific & Technical, 1993. 446 pp. ISBN 978–0582102958.
- [37] NAGY, J. *Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic*. 2. vyd. Praha : SNTL, 1983. 112 s.
- [38] PŘIKRYL, P. *Numerické metody matematické analýzy*. 2. vyd. Praha : SNTL, 1988. 187 s.
- [39] KREML, P. et al. *Matematika II*. Ostrava : VŠB–TU, 2007. Dostupné z: <http://homen.vsb.cz/~kre40/esfmat2/kapitoly/>. Studijní materiál. ISBN 978–80–248–1316–5.
- [40] HAZUCHOVÁ, A. *Měření dynamických parametrů při elektrostatickém zvlákňování*. Liberec, 2010. 54 s. Diplomová práce na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci na Ústavu mechatroniky a technické informatiky. Vedoucí diplomové práce prof. Ing. Pavel Rydlo, Ph. D.
- [41] PETRŽÍLKA, V. – ŠAFRATA, S. *Elektřina a magnetismus*. 2. vyd. Praha : ČSAV, 1956. 637 s.
- [42] YATES, R. C. *Curves and their properties*. Reston : National Council of Teachers of Mathematics, 1974. 245 pp.
- [43] HORÁK, Z. – KRUPKA, F. *Fyzika*. Praha : SNTL/ALFA, 1996.
- [44] SODOMKA, L. Jednoduché teoretické předpoklady elektrostatického zvlákňování nanovláken. In *NANOCON 2009. Sborník referátů z mezinárodní konference pořádané 20. – 22. října 2009 v Rožnově pod Radhoštěm*, 1. vyd., Ostrava, 2009. TANGER. ISBN 978–80–87294–12–3.

- [45] MOTT, R. L. *Applied Fluid Mechanics*. 3rd edition. Columbus : Merrill, 1990. 645 pp. ISBN 0-02-946320-3.
- [46] JANALÍK, J. *Obtékání a odpor těles*. Ostrava : VŠB-TU, 2008. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/Janalik-Obtekani.pdf>. Studijní materiál.
- [47] TANNEHILL, J. C. – ANDERSON, D. A. – PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2nd edition. Washington : Taylor & Francis, 1997. 792 pp. ISBN 1-56032-046-X.
- [48] BANAHAN, M. – BRADY, D. – DORAN, M. *The C Book: Featuring the ANSI C Standard*. 2nd edition. Wokingham : Addison-Wesley, 1991. 336 pp. ISBN 978-0201544336.
- [49] QUINN, M. J. *Parallel Programming in C with MPI and OpenMP*. 1st edition. New York : McGraw-Hill, 2003. 529 pp. ISBN 007-282256-2.
- [50] TAYLOR, G. Electrically driven jets. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. December 1969, vol. 313, iss. 1515, s. 453 – 475.
- [51] ŠIMKO, M. – ERHART, J. – LUKÁŠ, D. A mathematical model of external electrostatic field of a special collector for electrospinning of nanofibers. *Journal of Electrostatics*. April 2014, vol. 72, iss. 2, s. 161 – 165.
- [52] DEITZEL, J. M. et al. The effect of processing variables on the morphology of electrospun nanofibers and textiles. *Polymer*. January 2001, vol. 42, iss. 1, s. 261 – 272.
- [53] LI, D. – WANG, Y. – XIA, Y. Electrospinning nanofibers as uniaxially aligned arrays and layer-by-layer stacked films. *Advanced Materials*. February 2004, vol. 16, iss. 4, s. 361 – 366.
- [54] POKORNÝ, P. *Analýza procesu elektrostatického zvlákňování a možnosti jeho řízení*. Liberec, 2011. 121 s. Doktorská práce na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci na Ústavu mechatroniky a technické informatiky. Vedoucí doktorské práce prof. RNDr. David Lukáš, CSc.
- [55] DAVIS, J. R. *Tensile Testing*. 2nd edition. Praha : ASM International, 2004. 283 pp. ISBN 978-0-87170-806-9.

VII

Přílohy

A

Publikační činnost autora



- ŠIMKO, M. Mathematical modeling of a whipping instability of an electrically charged liquid jet. (under review)
- ŠIMKO, M., ERHART, J., LUKÁŠ, D. A mathematical model of external electrostatic field of a special collector for electrospinning of nanofibers. *Journal of Electrostatics*. April 2014, vol. 72, iss. 2, p. 161–165.
- ŠIMKO, M. Verification and validation of computer model of electrospinning. In *Proceedings of International Conference Presentation of Mathematics'12. Sborník příspěvků z konference pořádané 21.–22. června 2012 v Liberci*, 1. vyd., s. 123–126, Liberec, 2012. TUL. ISBN 978–80–7372–???–?.
- ŠIMKO, M. A parallel computation kernel for a mathematical model of electrospinning. In *Seminar on numerical analysis'12—Winter school. Sborník rozšířených abstraktů ze zimní školy pořádané 23.–27. ledna 2012 v Liberci*, 1. vyd., s. 165–166, Liberec, 2012. TUL. ISBN 978–80–7372–821–2.
- ŠIMKO, M. An influence of two parallel wires on the path of the electrically charged liquid jet. In *Proceedings of International Conference Presentation of Mathematics'11. Sborník příspěvků z konference pořádané 20.–21. října 2011 v Liberci*, 1. vyd., s. 139–145, Liberec, 2011. TUL. ISBN 978–80–7372–773–4.
- ŠIMKO, M. Implementation of a mathematical model of the electrospinning process. In *Moderní matematické metody v inženýrství. Sborník příspěvků ze semináře pořádaného 30. května–1. června 2011 v Dolní Lomné u Jablunkova*, 1. vyd., s. 106–110, Ostrava, 2011. VŠB. ISBN 978–80–248–2517–5.
- ŠIMKO, M. Modeling of bending instability in the electrospinning process. In *Moderní matematické metody v inženýrství. Sborník příspěvků ze semináře pořádaného 31. května–2. června 2010 v Dolní Lomné u Jablunkova*, 1. vyd., s. 83–89, Ostrava, 2010. VŠB. ISBN 978–80–248–2118–4.
- ŠIMKO, M. GUI aplikace na simulace bičující ohybové nestability při elektrostatickém zvlákňování. In *Workshop pro doktorandy Fakulty textilní a Fakulty strojní Technické univerzity v Liberci. Sborník příspěvků ze semináře pořádaného 20.–23. září 2010 v Rokytnici nad Jizerou*, 1. vyd., s. 95–98, Liberec, 2010. TUL. ISBN 978–80–7372–642–3.

- ŠIMKO, M. Modelování bičující ohybové nestability při elektrostatickém zvláknování. In *Studentská vědecká a odborná činnost 2010. Sborník příspěvků ze studentské vědecké a odborné činnosti pořádané 20. května 2010 v Liberci*, 1. vyd., s. 83–89, Liberec, 2010. TUL. ISBN 978–80–7372–601–0.

B

Pomocné vztahy



Definiční vztahy

$$\mathbf{r}_{i-1} = x_{i-1} \mathbf{i} + y_{i-1} \mathbf{j} + z_{i-1} \mathbf{k}, \quad (99)$$

$$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{i} + y_i \mathbf{j} + z_i \mathbf{k}, \quad (100)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = x_{i+1} \mathbf{i} + y_{i+1} \mathbf{j} + z_{i+1} \mathbf{k}, \quad (101)$$

$$|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i| \equiv l_{i-1,i} = \sqrt{(x_{i-1} - x_i)^2 + (y_{i-1} - y_i)^2 + (z_{i-1} - z_i)^2}, \quad (102)$$

$$|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i| \equiv l_{i,i+1} = \sqrt{(x_i - x_{i+1})^2 + (y_i - y_{i+1})^2 + (z_i - z_{i+1})^2}. \quad (103)$$

Celkovou rychlost přetvoření ideálního přímočarého segmentu elektricky nabitě trysky je v případě velkých deformací potřeba vyjádřit pomocí skutečné rychlosti přetvoření, která je dána vztahem (viz např. [55, str. 21])

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{l} \frac{dl}{dt}. \quad (104)$$

Časová derivace délky ideálního přímočarého segmentu elektricky nabitě trysky je dána vztahy

$$\frac{dl_{i-1,i}}{dt} = \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i) \cdot (\mathbf{v}_{i-1} - \mathbf{v}_i)}{l_{i-1,i}}, \quad (105)$$

$$\frac{dl_{i,i+1}}{dt} = \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{i+1})}{l_{i,i+1}}. \quad (106)$$

C

Odvození bezrozměrných rovnic

Hmotnostní tok rozpouštědla

Hmotnostní tok rozpouštědla mezi kapalinovou tryskou a prostředím zvlákňovacího prostoru je s použitím vztahů (86), (88) funkce

$$m_{si,i+1} = m_{si,i+1} \left(m_{si,i+1}^* (t^*(t)) \right). \quad (107)$$

Derivováním vztahů (107) podle času t se dostane

$$\frac{dm_{si,i+1}}{dt} = \frac{dm_{si,i+1}}{dm_{si,i+1}^*} \frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = m_0 \frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} \frac{m_0}{\tau_0}. \quad (108)$$

Přepsáním (108) se dostane hmotnostní tok rozpouštědla v bezrozměrném tvaru

$$\frac{dm_{si,i+1}^*}{dt^*} = \frac{dm_{si,i+1}}{dt} \frac{\tau_0}{m_0}.$$

Kinematická rovnice

Vyjádřením rozměrových souřadnic z definičních rovnic (85) se dostane

$$x_i = x_i^* L, \quad y_i = y_i^* L, \quad z_i = z_i^* L. \quad (109)$$

Složky polohového vektoru $\mathbf{r}_i \equiv \{x_i; y_i; z_i\}^T$ jsou s použitím (109) a (88) funkce

$$x_i = x_i \left(x_i^* (t^*(t)) \right), \quad y_i = y_i \left(y_i^* (t^*(t)) \right), \quad z_i = z_i \left(z_i^* (t^*(t)) \right). \quad (110)$$

Derivováním vztahů (110) podle času t se dostane

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{dx_i}{dx_i^*} \frac{dx_i^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = L \frac{dx_i^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dx_i^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0}, \\ \frac{dy_i}{dt} &= \frac{dy_i}{dy_i^*} \frac{dy_i^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = L \frac{dy_i^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dy_i^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0}, \\ \frac{dz_i}{dt} &= \frac{dz_i}{dz_i^*} \frac{dz_i^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = L \frac{dz_i^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dz_i^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0}. \end{aligned} \quad (111)$$

Vektor okamžité rychlosti je určen derivací polohového vektoru podle času t

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{dx_i}{dt} \mathbf{i} + \frac{dy_i}{dt} \mathbf{j} + \frac{dz_i}{dt} \mathbf{k}. \quad (112)$$

Dosazením (111) do vztahu (112) se dostane

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \frac{\tau_0}{L} = \frac{d\mathbf{r}_i^*}{dt^*} = \frac{dx_i^*}{dt^*} \mathbf{i} + \frac{dy_i^*}{dt^*} \mathbf{j} + \frac{dz_i^*}{dt^*} \mathbf{k}.$$

Zavedením bezrozměrné veličiny

$$\mathbf{v}_i^* = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \frac{\tau_0}{L} \quad (113)$$

se dostane kinematická rovnice v bezrozměrném tvaru

$$\frac{d\mathbf{r}_i^*}{dt^*} = \mathbf{v}_i^*.$$

Složky vektoru okamžité rychlosti $\mathbf{v}_i \equiv \{v_{ix}; v_{iy}; v_{iz}\}^T$ jsou s využitím (111) a (88) funkce

$$v_{ix} = v_{ix}(v_{ix}^*(t^*(t))), \quad v_{iy} = v_{iy}(v_{iy}^*(t^*(t))), \quad v_{iz} = v_{iz}(v_{iz}^*(t^*(t))). \quad (114)$$

Derivováním vztahů (114) podle času t se dostane

$$\begin{aligned} \frac{dv_{ix}}{dt} &= \frac{dv_{ix}}{dv_{ix}^*} \frac{dv_{ix}^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = \frac{L}{\tau_0} \frac{dv_{ix}^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dv_{ix}^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0^2}, \\ \frac{dv_{iy}}{dt} &= \frac{dv_{iy}}{dv_{iy}^*} \frac{dv_{iy}^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = \frac{L}{\tau_0} \frac{dv_{iy}^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dv_{iy}^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0^2}, \\ \frac{dv_{iz}}{dt} &= \frac{dv_{iz}}{dv_{iz}^*} \frac{dv_{iz}^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = \frac{L}{\tau_0} \frac{dv_{iz}^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{dv_{iz}^*}{dt^*} \frac{L}{\tau_0^2}. \end{aligned} \quad (115)$$

Vektor okamžitého zrychlení je určen derivací vektoru okamžité rychlosti podle času t

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{dv_{ix}}{dt} \mathbf{i} + \frac{dv_{iy}}{dt} \mathbf{j} + \frac{dv_{iz}}{dt} \mathbf{k}. \quad (116)$$

Dosazením (115) do vztahu (116) se dostane

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \frac{\tau_0^2}{L} = \frac{d\mathbf{v}_i^*}{dt^*} = \frac{dv_{ix}^*}{dt^*} \mathbf{i} + \frac{dv_{iy}^*}{dt^*} \mathbf{j} + \frac{dv_{iz}^*}{dt^*} \mathbf{k}. \quad (117)$$

Pohybová rovnice ■

Druhý Newtonův pohybový zákon je definován vztahem

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum \mathbf{F}. \quad (118)$$

Dosazením (117) do (118) se dostane pohybová rovnice v bezrozměrném tvaru

$$\frac{d\mathbf{v}_i^*}{dt^*} = \frac{\tau_0^2}{m_i L} \sum \mathbf{F}.$$

Konstitutivní rovnice ■

Normálové napětí působící v ideálním přímočarém segmentu, $(i, i + 1)$, elektricky nabitě trysky, je s využitím (81) a (88) funkce

$$\sigma_{i,i+1} = \sigma_{i,i+1} \left(\sigma_{i,i+1}^* (t^*(t)) \right). \quad (119)$$

Derivováním vztahů (119) podle času t se dostane

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}}{dt} = \frac{d\sigma_{i,i+1}}{d\sigma_{i,i+1}^*} \frac{d\sigma_{i,i+1}^*}{dt^*} \frac{dt^*}{dt} = E_0 \frac{d\sigma_{i,i+1}^*}{dt^*} \frac{1}{\tau_0} = \frac{d\sigma_{i,i+1}^*}{dt^*} \frac{E_0}{\tau_0}. \quad (120)$$

Využitím definičních vztahů (85) se po dosazení do (103) dostane

$$\frac{l_{i,i+1}}{L} = \sqrt{(x_i^* - x_{i+1}^*)^2 + (y_i^* - y_{i+1}^*)^2 + (z_i^* - z_{i+1}^*)^2}.$$

Definiční vztah pro délku ideálního přímočarého segmentu, $(i, i + 1)$, zelektrizované trysky je v bezrozměrném tvaru následující

$$l_{i,i+1}^* = \frac{l_{i,i+1}}{L}. \quad (121)$$

Použitím (82), (83), (109), (111) a dosazením vztahů (120), (121) do (44) se dostane konstitutivní rovnice Maxwellova modelu pro časovou derivaci mechanického normálového napětí v bezrozměrném tvaru

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}^*}{dt^*} = \frac{\eta_{i,i+1}^*}{\tau_{i,i+1}^*} \frac{(\mathbf{r}_i^* - \mathbf{r}_{i+1}^*) \cdot (\mathbf{v}_i^* - \mathbf{v}_{i+1}^*)}{l_{i,i+1}^{*2}} - \frac{\sigma_{i,i+1}^*}{\tau_{i,i+1}^*}.$$

D

Obecná veřejná licence GNU



This is an unofficial translation of the GNU General Public License into Czech. It was not published by the Free Software Foundation, and does not legally state the distribution terms for software that uses the GNU GPL — only the [original English text of the GNU GPL](#) does that. However, we hope that this translation will help Czech speakers understand the GNU GPL better.

Tento text je neoficiálním českým překladem GNU General Public License (Obecné veřejné licence GNU). Nebyl vydán nadací Free Software Foundation a tak právně neupravuje distribuční podmínky softwaru, který je licencován pod GNU GPL. Právně závazný je pouze [anglický originál GNU GPL](#). Doufáme ale, že překlad pomůže českým čtenářům lépe porozumět GNU GPL.

3. verze, 29. červen 2007

Copyright © 2007 Free Software Foundation, Inc.

Kopírování a distribuce doslovných kopií tohoto licenčního dokumentu jsou povoleny, ale jeho úpravy jsou zakázány.

Preamble

Obecná veřejná licence GNU (v angličtině GNU General Public License, dále jen jako „GNU GPL“ nebo „GPL“) je svobodná, „copyleft“ (část autorských práv ponechává a částí se ztrácí) licence pro software a jiná díla.

Většina licencí pro software a jiná díla jsou navrženy tak, aby omezovaly svobodu jeho sdílení a úprav. Naproti tomu, Obecná veřejná licence GNU zaručuje svobodu sdílení a úprav všech verzí programu — aby byl software svobodný pro všechny jeho uživatele. My, ze Free Software Foundation, používáme Obecnou veřejnou licenci GNU pro většinu našich programů, ale licence se vztahuje i na díla jiných autorů, kteří se je rozhodli zveřejnit právě tímto způsobem. Můžete ji rovněž použít pro své programy.

Pokud mluvíme o svobodném softwaru, myslíme tím svobodu používání, nikoliv cenu. Naše Obecné veřejné licence jsou navrženy tak, abyste mohli volně šířit kopie svobodného softwaru (a pokud chcete, nechat si za to i zaplatit), abyste obdrželi zdrojový kód, nebo ho měli možnost získat, abyste mohli tento software měnit nebo jeho části použít v nových programech a abyste věděli, že tyto věci smíte dělat.

Abychom mohli chránit vaše práva, musíme zabránit tomu, aby vám kdokoli tato práva odepíral, nebo vás žádal, abyste se těchto práv vzdali. Proto i vy máte určité povinnosti, které musíte dodržet, pokud šíříte nebo upravujete takový software, a to povinnost respektovat svobodu ostatních.

Například, šíříte-li kopie programu, ať již zdarma nebo za poplatek, příjemci musíte poskytnout stejná práva, jaké jste sami obdrželi. Musíte zaručit, že příjemci rovněž dostanou, anebo mohou získat zdrojový kód. A aby i oni znali svá práva, musíte je upozornit na tyto podmínky.

Vývojáři, kteří používají GNU GPL, chrání vaše práva ve dvou krocích: (1) zabezpečením autorských práv k softwaru, a (2) nabídkou této Licence, která vám dává právoplatné svolení k jeho kopírování, šíření a/nebo jeho úpravě.

Kvůli ochraně každého vývojáře a autora, GPL dává jasně najevo, že pro svobodný software neexistuje žádná záruka. V zájmu obou stran, uživatelů i autorů, GPL požaduje, aby upravené

verze programu byly příslušně označeny, a to kvůli tomu, aby za původce případných chyb programu nebyli nesprávně označeni autoři původních verzí.

Některá zařízení uživatelům zakazují instalaci nebo spuštění upravených verzí softwaru, i když výrobce si takovou možnost ponechal. Toto je z principu neslučitelné s cílem ochrany uživatelské svobody — svobody jakkoli software měnit. Takové porušování se systematicky vyskytuje tam, kde je program určen pro jednotlivce, tedy tam, kde je to nejméně přijatelné. Abychom takovým počínem předešli, vytvořili jsme tuto verzi GPL. Jestliže problémy tohoto druhu budou nadále vznikat, jsme připraveni je podle potřeby ošetřit v následujících verzích GPL.

Závěrem, každý program je neustále ohrožen softwarovými patenty. Státy by neměly povolovat patenty pro zamezení vývoje a použití softwaru, který je určen pro všeobecné použití. Ale u těch, které tak činí, bychom rádi zamezili nebezpečí, že by distributoři svobodného programu obdrželi samostatná patentová osvědčení a tím by učinili takový program vázaným. Abychom tomu zamezili, GPL zaručuje, že patenty nemohou činit program nesvobodným.

Přesná ustanovení a podmínky pro kopírování, šíření a upravování naleznete níže.

USTANOVENÍ A PODMÍNKY

0. Definice

Označením „tato Licence“ se myslí 3. verze Obecné veřejné licence GNU.

„Autorskými právy“ se myslí i zákony příbuzné autorským právům, vztahující se na jiné druhy díl, jako např. polovodičové masky.

„Programem“ se označuje jakékoli dílo, které může být chráněno autorskými právy a je licencováno touto Licencí. Uživatel licence se označuje jako „vy“. „Uživatelé licence“ a „příjemci licence“ mohou být jednotlivci nebo organizace.

„Upravováním“ díla se rozumí zkopírování nebo přizpůsobení celého nebo jen části díla způsobem, který vyžaduje autorská práva. Nemyslí se tím vytvoření přesné kopie. Výsledné dílo se nazývá „upravenou verzí“ původního díla nebo dílo „založené na“ původním díle.

„Chráněným dílem“ se myslí neupravená verze Programu nebo dílo založené na Programu.

„Šířením“ díla se označuje jakákoli činnost, která by vás činila přímo či nepřímo odpovědnými za porušení Zákona o ochraně autorských práv, kromě spouštění díla na osobním počítači nebo vytváření vlastní kopie. Šíření zahrnuje kopírování, distribuci (s nebo bez úpravy), zpřístupnění veřejnosti a v některých zemích i další aktivity.

„Zveřejnit“ dílo značí jakýkoliv druh šíření, které dalším stranám umožňuje výrobu nebo pořízení kopií. Běžné používání díla přes počítačovou síť, bez přenosu kopie k uživateli, se nepovažuje za zveřejnění díla.

Interaktivní uživatelské prostředí zobrazuje „Příslušné právní podmínky“ v takovém rozsahu, že jsou uživateli pohodlně vnímatelné a umístěny na dobře viditelném místě a (1) oznamuje zobrazuje Příslušné právní podmínky a (2) oznamuje uživateli, že na dílo se nevztahuje záruka (kromě případů, kdy se záruka uděluje), že uživatelé licence mohou dílo na základě této Licence dále zveřejňovat a oznamuje, kde si mohou tuto Licenci přečíst. Pokud uživatelské prostředí obsahuje seznam uživatelských příkazů, dobře viditelné umístění v takovém menu splňuje toto kritérium.

1. Zdrojový kód

„Zdrojový kód“ označuje preferovanou formu díla určenou na jeho úpravy. „Strojovým kódem“ se označuje jakákoli nezdvojová forma díla.

„Standardním rozhraním“ se myslí rozhraní, které je buď uznáno jako oficiální standard definován uznávanou standardizující autoritou, nebo, v případě rozhraní určených pro určitý programovací jazyk, je to rozhraní, které je uznané širokou vývojářskou veřejností daného jazyka.

„Systémové knihovny“ spustitelného díla zahrnují vše (kromě díla jako celku), co (a) je zahrnuto v běžné formě balení hlavního komponentu, ale není součástí hlavního komponentu a (b) slouží pouze pro usnadnění práce s hlavní komponentou, nebo k implementaci standardního rozhraní tam, kde je implementace formou zdrojového kódu veřejnosti povolena. V tomto kontextu se „hlavní

komponentou“ myslí hlavní nezbytná součást (jádro, správce oken, atp.) daného operačního systému (pokud nějaký je), na kterém spustitelné dílo běží, nebo kompilátor používaný ke spuštění díla, nebo spouštěč strojového kódu používaný k běhu díla.

„Úplný zdroj“ díla značí veškerý zdrojový kód potřebný pro generování, instalaci, spuštění (pro spustitelná díla) strojového kódu a úpravu díla, včetně skriptů pro kontrolu těchto úkonů. Nezahrnuje systémové knihovny díla, nebo obecné nástroje nebo obecně přístupné svobodné programy, které jsou používány (v neupravené podobě) k provedení těchto úkonů a nejsou součástí díla. Například, Úplný zdroj zahrnuje soubory pro definici rozhraní přidružené ke zdrojovým souborům díla, zdrojový kód sdílených knihoven a dynamicky navázané podprogramy, které dílo ke správnému fungování potřebuje — a to buď formou datové komunikace, nebo formou kontroly přenosu mezi podprogramy a jinými částmi díla.

Úplný zdroj nemusí obsahovat nic, co si mohou uživatelé automaticky vygenerovat z jiných částí Úplného zdroje.

Úplný zdroj pro dílo v podobě zdrojového kódu je dané dílo samo.

2. Základní privilegia

Všechna práva zaručená touto Licencí trvají po dobu platnosti autorského práva na Program a jsou neodvolatelné, pokud jsou dodrženy podmínky uvedené níže. Tato Licence explicitně potvrzuje vaše neomezené právo na spuštění neupraveného Programu. Výstup ze spuštění chráněného díla tato Licence upravuje pouze v případě, že výstup, vzhledem ke svému obsahu, představuje chráněné dílo samo. Tato Licence zároveň uznává vaše právo na „fair use“ (správné používání) nebo jiný ekvivalent daný zákonem o autorském právu.

Dokud je vaše licence platná, můžete tvořit, spouštět a šířit chráněná díla bez jakýchkoli omezení, i když díla sami nezveřejňujete. Pro účely exkluzivních úprav děl výhradně ve váš prospěch nebo vytvoření prostředků ke spuštění těchto děl, můžete chráněná díla zveřejnit pouze v případě, že v souladu s podmínkami této Licence zveřejníte všechny materiály, ke kterým nevlastníte autorská práva. A ti, kteří tvoří a spouštějí chráněná díla za vás, musí tak činit výhradně vašim jménem, s vaším usměřňováním a pod vaší kontrolou, v podmínkách, které jim mimo vztahu s vámi zakazují tvořit jakékoli kopie vašeho materiálu, ke kterému jste držitelem autorských práv.

Za jiných okolností zveřejnění díla podléhá podmínkám uvedeným níže. Sublicencování není povoleno, odstavec 10 ho činí zbytečným.

3. Ochrana zákonných práv uživatelů před Zákonem proti obcházení

Žádné chráněné dílo by nemělo být považováno za součást efektivních technologických prostředků na základě platných právních předpisů podle článku 11, Smlouvy WIPO o autorských právech, přijaté dne 20. prosince 1996, nebo obdobných zákonů zakazujících nebo omezujících obcházení takových prostředků.

Pokud zveřejníte chráněné dílo, zříkáte se jakékoliv právní moci zakázat obcházení technologických prostředků kromě případu, kdy by takové obcházení bylo provedeno na základě práva vyplývajícího z této Licence. Zároveň se zříkáte jakéhokoliv záměru omezit provoz nebo úpravu díla kvůli prosazení zákonných práv (v rozporu s uživateli díla) vašich nebo třetí strany na zákaz obcházení technologických prostředků.

4. Zveřejňování doslovných kopií

Doslovné kopie zdrojového kódu Programu můžete zveřejňovat tak, jak jste jej obdržel, za pomoci libovolného média, ale pouze za předpokladu, že na každé kopii uvedete zmínku o autorovi a absenci záruky na vhodném a viditelném místě, že všechny zmínky odkazující na tuto Licenci a na jakoukoli přidanou podmínku podle odstavce 7 ponecháte beze změn a že zároveň ponecháte nedotčené všechny zmínky o absenci záruky a všem příjemcům zprostředkujete kopii této Licence spolu s Programem.

Za každou zveřejněnou kopii si můžete účtovat peníze (ale nemusíte) a také můžete nabízet služby zákaznické podpory nebo záruku za poplatek.

5. Zveřejňování upravených verzí zdroje

Dílo založené na Programu, nebo úpravy na vytvoření díla založené na Programu, můžete zveřejňovat ve formě zdrojového kódu dle platných podmínek odstavce 4, za předpokladu, že zároveň splníte všechny následující podmínky:

- (1) Dílo musí obsahovat zřetelnou zmínku o tom, že bylo upraveno, spolu s datem jeho úpravy.
- (2) Dílo musí obsahovat zřetelnou zmínku o tom, že bylo vydáno pod touto Licencí a zmínku o jakýchkoliv přidávaných podmínkách v souladu s odstavcem 7. Tento požadavek upravuje požadavek na „ponechání všech zmínek beze změn“ z odstavce 4.
- (3) Celé dílo musíte licencovat touto Licencí pro každého, kdo si kopii opatří, anebo s ní jinak přijde do styku. Licence se, spolu s jakýmikoli dalšími podmínkami podle odstavce 7, proto vztahuje na dílo jako celek a na všechny jeho části, bez ohledu na to, jak je dílo a jeho části balené. Tato Licence nedává povolení k licencování děl jiným způsobem, ale pokud jste toto povolení získali jinak, tato Licence takové povolení neruší.
- (4) Pokud dílo obsahuje interaktivní uživatelská rozhraní, každé z nich musí zobrazovat Příslušné právní podmínky. Pokud ale Program obsahuje interaktivní uživatelská rozhraní, která nezobrazují Příslušné právní podmínky, vaše dílo nemusí přinutit Program, aby je zobrazoval.

Kompilace chráněného díla s jinými vzájemně nezávislými díly, které ze své podstaty nejsou rozšířeními chráněného díla a které s ním nejsou kombinovány tak, aby tvořily jeden větší program na paměťovém médiu, či jiném distribučním médiu, se nazývá „agregát“, pokud kompilace a její výsledné autorská práva nejsou používány k omezování přístupu nebo zákonných práv uživatelů kompilace nad míru, kterou samostatná díla povolují. Zahrnutím chráněného díla do agregátu tato Licence nenabývá platnosti na jiné části agregátu.

6. Zveřejňování nezdrojových verzí

Dílo můžete zveřejňovat prostřednictvím strojového kódu podle odstavců 4 a 5, uvedených výše, pokud zveřejníte i strojem-čitelný Úplný zdroj dle ustanovení této Licence, jedním z následujících způsobů:

- (1) Zveřejníte strojový kód ve fyzickém produktu (včetně fyzického distribučního média), doplněný Úplným zdrojem uloženým na trvalém fyzickém médiu běžně používaném pro výměnu softwaru.
- (2) Zveřejníte strojový kód ve fyzickém produktu (včetně fyzického distribučního média), doplněný písemnou nabídkou platnou nejméně tři roky a tak dlouho, dokud pro ten daný model produktu nabízíte náhradní díly nebo zákaznickou podporu, abyste komukoliv, kdo si strojový kód opatří, poskytly buď (1) kopii Úplného zdroje pro veškerý software obsažený v produktu a chráněný touto Licencí na trvalém fyzickém médiu běžně používaném pro výměnu softwaru, za cenu nepřesahující náklady vzniklé na fyzické vyhotovení takové kopie, nebo (2) poskytlí bezplatný přístup k Úplnému zdroji na síťovém serveru.
- (3) Zveřejníte jednotlivé kopie strojového kódu s kopií písemné nabídky zpřístupnit Úplný zdroj. Tato alternativa je povolena jen výjimečně, pro nekomerční účely a jen v případě, že jste i vy přijali strojový kód s takovou nabídkou, v souladu s odstavcem 6(b).
- (4) Zveřejníte strojový kód nabídkou přístupu z určeného místa (zdarma nebo za poplatek) a nabídnete rovnocenný přístup k Úplnému zdroji stejným způsobem, ze stejného místa a bez dodatečných poplatků. Od příjemců musíte vyžadovat, aby Úplný zdroj zkopírovali spolu se strojovým kódem. Pokud je tím místem na zkopírování strojového kódu síťový server, Úplný zdroj může být na jiném serveru (provozovaný vámi nebo třetí stranou), který podporuje ekvivalentní prostředky pro kopírování a za podmínky, že vedle strojového kódu zajistíte jasné instrukce o tom, jak Úplný zdroj najít. Nezávisle na tom, jaký server hostuje Úplný zdroj, jste povinen zajistit, že bude přístupný tak dlouho, dokud bude třeba tyto požadavky naplňovat.
- (5) Zveřejníte strojový kód pomocí peer-to-peer přenosu, za podmínky, že jiné počítače (peers) informujete, kde je ten strojový kód a Úplný zdroj díla zveřejněn zdarma, v souladu s odstavcem 6(d).

Oddělitelná část strojového kódu, jehož zdrojový kód nespadá do Úplného zdroje jako systémová knihovna, nemusí být součástí zveřejnění strojového kódu díla.

„Uživatelský produkt“ je buď (1) „zákaznický produkt“, což znamená jakékoliv soukromé vlastnictví, které je běžně používané pro soukromé, rodinné účely a účely pro domácnost, nebo (2) cokoliv vytvořené a prodávané pro zabudování do obytných prostor. Pro určení toho, zda je produkt zákaznickým, sporné případy mají být rozhodnuty ve prospěch toho, že jimi jsou. Pro daný produkt přijat daným uživatelem, „běžné používání“ znamená typické použití daného druhu produktu, nezávisle na daném uživateli nebo na konkrétním uživatelově způsobu použití, jeho očekávání, nebo očekávání, které se na uživatele kladou. Produkt je zákaznickým produktem nezávisle na tom, zda má produkt podstatné komerční, průmyslové, nebo ne-zákaznické využití, pokud taková využití představují jediný signifikantní způsob použití produktu.

„Instalační informace“ pro uživatelský produkt jsou jakékoliv metody, procedury, autorizační klíče, nebo jiné informace potřebné k instalaci a spuštění upravených verzí chráněného díla v daném uživatelském produktu z upravené verze Úplného zdroje. Informace musí zajistit, že se v žádném případě nebude bránit nebo zasahovat nepřerušené funkcionalitě upraveného strojového kódu jen proto, že byly úpravy provedeny.

Pokud budete strojový kód zveřejňovat podle tohoto odstavce v, nebo se, nebo výhradně pro použití v zákaznickém produktu a zveřejnění bude součástí transakce, v níž se právo na držení a používání uživatelského produktu převádí na příjemce na neomezenou dobu nebo na dobu určitou (bez ohledu na to, jak je transakce charakterizována), Úplný zdroj zveřejněn na základě tohoto odstavce musí být doplněn o instalační informace. Tento požadavek však neplatí, pokud ani vy, ani žádná třetí strana si nepochybně nechává možnost instalovat upravený strojový kód pro uživatelský produkt (např. dílo bylo instalováno na ROM).

Požadavek poskytnutí instalačních informací nezahrnuje požadavek na pokračování v poskytování zákaznické podpory, záruky, nebo aktualizací pro dílo, které bylo upraveno nebo instalováno příjemcům, nebo pro uživatelský produkt, ve kterém byl upraven nebo instalován. Přístup k síti může být odmítnut, pokud by měla samotná úprava věcně a nepříznivě ovlivňovat chod sítě, nebo porušuje pravidla a protokoly pro komunikaci na síti.

Zveřejněný Úplný zdroj a uvedené instalační informace musí, v souladu s tímto odstavcem, být ve formátu, který je veřejně dokumentovaný (a s veřejně dostupnou implementací ve formě zdrojového kódu) a nemůže vyžadovat žádné speciální hesla nebo klíče pro rozbalení, čtení a kopírování.

7. Dodatečné podmínky

„Dodatečná práva“ jsou podmínky, které doplňují podmínky této Licence výjimkami na jednu nebo více podmínek. Dodatečná práva, která se mohou vztahovat na celý Program, se považují za součást této Licence, ale jen dokud dodržují platné právní předpisy. Pokud se uplatní dodatečná práva pouze na část Programu, daná část se má používat zvlášť na základě těchto práv, ale na celý Program se vztahují podmínky této Licence bez dodatečných práv.

Pokud zveřejníte kopii chráněného díla, můžete z ní podle vlastní libosti odstranit kterékoli další práva, nebo jejich kteroukoliv část. (Dodatečné práva mohou být sestaveny tak, aby v některých případech úpravy díla požadovali samotné jejich odstranění.) Dodatečné práva můžete přidat na materiál, který byl ke chráněnému dílu přidán vámi, nebo pro které vlastníte, nebo můžete vydat, příslušná autorská práva.

Bez ohledu na jakákoli jiná ustanovení této Licence můžete pro materiál, který byl přidán ke chráněnému dílu (pokud vlastníte autorská práva k materiálu), rozšířit podmínky této Licence o podmínky:

- (1) Popřít záruku či omezit odpovědnost jiným způsobem, než je uvedeno v odstavci 15 a 16 této Licence, nebo
- (2) Požadovat uchování specifických odůvodněných zákonných vyhlášek nebo autorských příspěvků do materiálu, nebo do Příslušných právních podmínek zobrazovaných díly, které je obsahují, nebo
- (3) Zakázat zavádění o původu materiálu, nebo požadovat, aby byly upravené verze tohoto materiálu označeny přiměřeným způsobem, tedy jako odlišné od originálu, nebo
- (4) Omezit veřejné užívání jmen poskytovatelů licence nebo autorů materiálu, nebo
- (5) Popřít přenos práv podle Zákona o ochranných známkách pro některé ochranné známky, značky a servisní známky, nebo

- (6) Požadovat odškodnění poskytovatele licence a autorů materiálu od kohokoli, kdo zveřejní materiál (nebo jeho upravenou verzi) se smluvními závazky k příjemci, a za jakýkoli závazek, který smlouva přímo ukládá na poskytovatele licence a autorů.

Jiné zakazující dodatečné podmínky jsou ve smyslu odstavce 10 bráné jako „další omezení“. Pokud Program, nebo jeho část, tak jak jste jej obdrželi, obsahuje zmínku o tom, že je licencován touto Licencí spolu s podmínkou, která je dalším omezením, můžete tuto podmínku odebrat. Pokud licenční dokument obsahuje další omezení, ale povoluje znovu–licencování a zveřejnění pod touto Licencí, můžete ke chráněnému dílu přidat materiál podléhající podmínkám toho licenčního dokumentu, ale pouze za podmínky, že další omezení se takovýmto znovu–licencováním nebo zveřejněním zruší.

Pokud ke chráněnému dílu přidáte podmínky v souladu s tímto odstavcem, do příslušných zdrojových souborů musíte umístit prohlášení o dodatečných podmínkách vztahující se na dané soubory, nebo zmínku o tom, kde tyto platné podmínky najít.

Dodatečné podmínky, povolující nebo zakazující, mohou být podány formou zvláštní napsané licence, nebo podány jako výjimky (ale nezávisle na způsobu, platí vše, co je výše uvedeno).

8. Ukončení

Šířit nebo upravovat chráněné dílo můžete výslovně jen pod touto Licencí. Jakákoli snaha šířit nebo upravovat dílo jiným způsobem, je porušením těchto podmínek a znamená automatické ukončení vašich práv plynoucích z této Licence [včetně jakýchkoliv patentových licencí udělených podle odstavce 11(3)].

Pokud napравíte všechny porušení této Licence, pak je vaše licence z daného autorského práva obnovena (a) dočasně, pokud a dokud držitel autorských práv výslovně a s konečnou platností neukončí vaši licenci a (b) trvale, pokud se držitel autorských práv nepodaří vhodnými prostředky vás o porušení seznámit do 60 dnů po ukončení.

Navíc, vaše licence od daného držitele autorských práv se natrvalo obnovuje i v případě, že vás držitel autorských práv vhodnými prostředky informuje o porušení a toto je poprvé, co jste obeznámeni o porušení této Licence (pro jakékoli dílo) od toho držitele autorských práv obdrželi a vy napravíte porušení do 30 dnů po doručení oznámení.

Ukončení vašich práv podle tohoto odstavce neukončuje licenci stran, které na základě této Licence obdržely kopie nebo práva od vás. Pokud byly vaše práva ukončeny a nebyly natrvalo obnoveny, nemáte právo přijmout nové licence pro daný materiál vyplývající z odstavce 10.

9. Přijetí Licence není povinné pro držení kopií

Pro přijímání nebo spouštění kopie Programu nejste povinen tuto Licencí přijmout. Pokud je to pouze výsledkem použití přenosu peer–to–peer, ani pomocné šíření chráněného díla nevyžaduje přijetí. Nic jiného než tato Licence vám ale nedává možnost kopírovat nebo šířit chráněné dílo. V případě, že tuto Licencí nepřijmete, tyto činnosti porušují autorská práva. Úpravou nebo šířením chráněného díla tedy vyjadřujete souhlas s Licencí a všem jejím ustanovením a podmínkám.

10. Automatické licencování následných příjemců

Po každé, když zveřejňujete chráněné dílo, získává příjemce od původního poskytovatele licence licenci pro spouštění, úpravu nebo šíření daného díla v souladu s ustanoveními této Licence. Nejste odpovědný za dodržování této Licence třetími stranami.

„Přenos entity“ je přenos kontroly nad organizací, nebo v podstatě přenos všech jejích aktiv, nebo rozdělení organizace, nebo spojení organizací. Pokud šíření chráněného díla vyplývá z přenosu entity, každá strana transakce, která obdrží kopii díla, také obdrží všechny licence k dílu, které jeho předchůdce měl, nebo mohl dávat podle předchozího odstavce, plus obdrží právo na vlastnění Úplného zdroje díla od předchůdce, pokud ho předchůdce vlastní nebo jej může pořídit opodstatněným úsilím.

Nesmíte klást žádné překážky výkonu zaručených práv příjemce vyplývajících z této Licence. Například, nesmíte požadovat žádné licenční poplatky nebo jiné poplatky za výkon práv udělených touto Licencí a nesmíte zahájit soudní spor (včetně příčných– a proti–pohledávek v soudním sporu) vycházející z toho, že tvorbou, používáním, prodejem, nabídnutím k prodeji, nebo dovážením Programu nebo jakékoli jeho části si nečiníte patentového nároku.

11. Patenty

„Příspěvatel“ je držitel autorských práv, který touto Licencí autorizuje použití Programu nebo díla na Programu založeném. Takto licencované dílo se nazývá „verze příspěvatele“.

Příspěvatelovými „základními patentovými nároky“ jsou všechny vlastněné patentové nároky nebo patentové nároky kontrolované příspěvatelem (již nabyté nebo později získané), které by tvorbou, používáním nebo prodáváním verze příspěvatele byly nějakým způsobem (povoleným touto Licencí) porušovány, ale nezahrnuje nároky, které by byly porušeny jen následkem dalších úprav verze příspěvatele. Pro potřeby této definice, „kontrolovat“ znamená i právo udělit patentové sublicence způsobem konzistentním s požadavky této Licence.

Každý příspěvatel vám uděluje neexkluzivní, celosvětovou, bezplatnou patentovou licenci podle příspěvatelových základních patentových nároků k tvorbě, používání, předávání, poskytnutí k prodeji, dovážení a jinak, spouštění, úpravě a šíření obsahu verze příspěvatele.

V dalších třech odstavcích se „patentovou licencí“ myslí jakýkoli výslovný souhlas nebo závazek nepožadovat patent (výslovné povolení užívání patentu nebo smlouva o nežalování za porušení patentu). „Udělit“ takovou patentovou licenci nějaké straně znamená, buď takový výslovný souhlas dát, nebo závazek nevymáhat patent vůči dotyčné straně.

Pokud vědomě zveřejníte chráněné dílo, které podléhá patentové licenci a Úplný zdroj není zadarmo a podle podmínek této Licence není nikomu přístupný na kopírování přes veřejně přístupný síťový server, nebo jinak jednoduše zpřístupněný, pak musíte (1) takovým způsobem Úplný zdroj zpřístupnit, nebo (2) se sami o výhodu patentové licence pro toto konkrétní dílo připravit, nebo (3) zajistit, způsobem konzistentním s požadavky této Licence, aby se patentová licence přenášela na následné příjemce. „Vědomě“ znamená, že máte skutečnou znalost o tom, že vaše zveřejnění chráněného díla v zemi nebo, že použití vašeho chráněného díla příjemcem, by porušilo jedno nebo více identifikovatelných patentů země, o kterých máte důvod se domnívat, že jsou platné.

Pokud budete zveřejňovat, nebo šířit chráněné dílo prostřednictvím pořízení jeho zveřejnění na základě jedné transakce nebo dohody a udělíte patentovou licenci jedné ze stran, které chráněné dílo přijímá a udělujete tak povolení k používání, šíření, uchování nebo zveřejnění konkrétního exempláře chráněného díla, pak patentová licence se automaticky rozšiřuje na všechny příjemce chráněného díla a na díla na něm založené.

Patentová licence je „diskriminační“, pokud do oblasti své působnosti zahrnuje zákazy výkonu, nebo je podmíněna zákazem výkonu jedné nebo více práv, která jsou touto Licencí udělena. Chráněné dílo nemůžete zveřejňovat, pokud jste uzavřeli s třetí stranou, která se zabývá obchodní distribucí softwaru, dohodu, podle níž platíte třetí straně na základě rozsahu vašeho úsilí ve zveřejňování díla a podle níž třetí strana uděluje jakékoli straně, která by přijala chráněné dílo od vás, diskriminační patentovou licenci (a) v souvislosti s kopiemi chráněného díla zveřejněného vámi (nebo kopiemi vyrobenými z těchto kopií), nebo (b) především v souvislosti s konkrétním produktem nebo kompilací, která obsahuje chráněné dílo. To vše, pokud jste tuto dohodu uzavřely, nebo byla patentová licence udělena před 28. březnem 2007.

Nic z této Licence by nemělo být vykládáno jako navádění k porušování nebo omezování patentů či jiných vlastnických práv, které by se na vás jinak vztahovali podle platného patentového práva.

12. Neexistuje výjimka na úkor svobody ostatních

Pokud jsou vám uloženy takové podmínky (ať již rozhodnutím soudu, smlouvou nebo jinak), které se vylučují s podmínkami této Licence, nejste tím osvobozeni od podmínek této Licence. Pokud nemůžete šířit chráněné dílo tak, abyste vyhověl zároveň svým závazkům vyplývajícím z této Licence a jiným platným závazkům, nesmíte jej v důsledku toho šířit vůbec. Pokud byste například souhlasili s podmínkami, které by vám neumožňovaly další bezplatné zveřejňování všem, komu Program zveřejňujete, pak by jediný možný způsob, jak vyhovět daným podmínkám a zároveň i této Licencí spočíval v ukončení distribuce Programu.

13. Použití s Obecnou veřejnou licencí GNU Affero

Bez ohledu na jakákoli jiná ustanovení této Licence, máte povolení k propojení či kombinování jakéhokoliv chráněného díla s dílem licencovaným podle 3. verze Obecné veřejné licence GNU Affero

do jediného kombinovaného díla a výsledné dílo zveřejnit. Podmínky této Licence se budou nadále vztahovat na část, která je chráněným dílem, ale, pokud jde o interakci prostřednictvím sítě, na kombinované dílo jako takové budou platit zvláštní požadavky odstavce 13 Obecné veřejné licence GNU Affero.

14. Revidovaná verze této Licence

Free Software Foundation může čas od času vydávat upravené a/nebo nové verze Obecné veřejné licence GNU. Nové verze se budou svým duchem podobat současné verzi, ale v některých detailech se kvůli řešení nových problémů či zájmů mohou lišit.

Každé verzi je přiděleno jednoznačné číslo verze. Pokud Program určí číslo verze, vztahuje se na něj daná verze Obecné veřejné licence GNU nebo kterákoli „později vydaná verze“, a můžete se podle uvážení řídit ustanoveními a podmínkami této konkrétní verze, nebo kterékoli pozdější verze vydanou Free Software Foundation. Jestliže program nespécifikuje číslo verze, můžete si vybrat libovolnou verzi, kterou Free Software Foundation vydala.

Pokud Program určí, že proxy-server může rozhodnout, která z budoucích verzí Obecné veřejné licence GNU může být použita, veřejné oznámení přijetí některé verze proxy-serverem vás trvale autorizuje vybrat si pro Program tu danou verzi.

Později vydané verze licence vám mohou zaručit dodatečné nebo pozměněné oprávnění. Avšak v důsledku vašeho výběru řídit se novější verzí se na žádného autora nebo držitele autorských práv neukládají žádné další závazky.

15. Zřeknutí se záruky

NA PROGRAM SE NEVZTAHUJE ŽÁDNÁ ZÁRUKA, V MÍŘE POVOLENÉ ZÁKONEM. POKUD NENÍ PÍSEMNĚ UVEDENO JINAK, DRŽITELÉ AUTORSKÝCH PRÁV POPŘÍPADĚ JINÉ STRANY POSKYTUJÍ PROGRAM „TAK JAK JE“, BEZ ZÁRUKY JAKÉHOKOLI DRUHU, AŤ VÝSLOVNĚ NEBO VYPLÝVAJÍCÍ, VČETNĚ, ALE NIKOLI JEN, ZÁRUK OBCHODOVATELNOSTI A VHODNOSTI PRO URČITÝ ÚČEL. POKUD JDE O KVALITU A VÝKONNOST PROGRAMU, JE VEŠKERÉ RIZIKO NA VÁS. POKUD BY SE U PROGRAMU PROJEVILY ZÁVADY, NÁKLADY NA POTŘEBNOU ÚDRŽBU, OPRAVU ČI NÁPRAVU PADAJÍ NA VÁŠ VRUB.

16. Omezení odpovědnosti

V ŽÁDNÉM PŘÍPADĚ, S VÝJIMKOU TOHO, KDYŽ TO VYŽADUJE PLATNÝ ZÁKON, ANEBO KDYŽ TO BYLO PÍSEMNĚ ODSOUHLASENO, VÁM NEBUDE ŽÁDNÝ Z DRŽITELŮ AUTORSKÝCH PRÁV ANI ŽÁDNÁ JINÁ STRANA, KTERÁ SMÍ UPRAVOVAT NEBO ŠÍŘIT PROGRAM V SOULADU S PŘEDCHOZÍMI USTANOVENÍMI, ODPOVĚDNA ZA ŠKODY, VČETNĚ VŠECH OBECNÝCH, SPECIÁLNÍCH, NAHODILÝCH NEBO NÁSLEDNÝCH ŠKOD VYPLÝVAJÍCÍCH Z UŽÍVÁNÍ ANEBO NESCHOPNOSTI UŽÍVAT PROGRAMU (VČETNĚ, ALE NIKOLI JEN, ZTRÁTY NEBO ZKRESLENÍ DAT, NEBO TRVALÝCH ŠKOD ZPŮSOBENÝCH VÁM NEBO TŘETÍM STRANÁM, NEBO SELHÁNÍ FUNKCE PROGRAMU V SOUČINNOSTI S JINÝMI PROGRAMY), A TO I V PŘÍPADĚ, ŽE TAKOVÝ DRŽITEL AUTORSKÝCH PRÁV NEBO JINÁ STRANA BYLI UPOZORNĚNI NA MOŽNOST TAKOVÝCH ŠKOD.

17. Výklad odstavců 15 a 16

Pokud výše uvedené zřeknutí se záruk a omezení odpovědnosti nemohou být s ohledem na své podmínky místo-právně vykonatelné, příslušný soud by měl vycházet z místních zákonů, které se nejvíce přibližují zbavení veškeré občanskoprávní odpovědnosti v souvislosti s Programem, pokud není záruka nebo převzetí odpovědnosti doprovázena zpoplatněním kopií Programu.

KONEC USTANOVENÍ A PODMÍNEK

JAK UPLATNIT TATO USTANOVENÍ NA VAŠE NOVÉ PROGRAMY

Pokud vyvinete nový program a chcete, aby byl veřejnosti co nejvíce k užítku, nejlépe to dosáhnete tím, že jej prohlásíte za svobodný software, který může kdokoliv šířit a měnit za podmínek zde uvedených.

Pokud se tak rozhodnete, připojte k programu následující údaje. Nejbezpečnějším způsobem je připojit údaje na začátek každého souboru se zdrojovým kódem, čímž se nejúčinněji poukáže na vyloučení záruky. V každém souboru by pak měla být přinejmenším řádka s podpisem autora a odkazem na místo, kde lze získat ostatní úplné údaje.

```
<jeden řádek se jménem programu a krátkým popisem toho, co dělá>  
Copyright (C) <rok> <jméno autora>
```

```
Tento program je svobodný software: můžete jej šířit a upravovat podle  
ustanovení Obecné veřejné licence GNU (GNU General Public Licence),  
vydávané Free Software Foundation a to buď podle 3. verze této Licence,  
nebo (podle vašeho uvážení) kterékoli pozdější verze.
```

```
Tento program je rozšiřován v naději, že bude užitečný, avšak  
BEZ JAKÉKOLIV ZÁRUKY. Neposkytují se ani odvozené záruky PRODEJNOSTI  
anebo VHODNOSTI PRO URČITÝ ÚČEL. Další podrobnosti hledejte v Obecné  
veřejné licenci GNU.
```

```
Kopii Obecné veřejné licence GNU jste měli obdržet spolu s tímto  
programem. Pokud se tak nestalo, najdete ji zde: <http://www.gnu.org/licenses/>.
```

Připojte rovněž informaci o tom, jakým způsobem je možné se s vámi spojit — elektronickou poštou nebo dopisem.

Pokud je program interaktivní, zařídte, aby se při startu v interaktivním módu vypsal hlášení podobné tomuto:

```
<program> Copyright (C) <rok> <jméno autora>  
Tento program je ABSOLUTNĚ BEZ ZÁRUKY; podrobnosti se dozvíte zadáním 'show w'.  
Jde o svobodný software a jeho šíření je za určitých podmínek  
vítáno; podrobnosti získáte zadáním 'show c'.
```

Hypotetické povely 'show w' a 'show c' by měly zobrazit příslušné pasáže Obecné veřejné licence. Samozřejmě, odpovídající příkazy nemusí být právě tyto, v grafickém uživatelském prostředí (GUI) to může být např. část „O nás“ nebo „O programu“.

Pokud je to nutné, měli byste u svého zaměstnavatele (jestliže pracujete jako programátor) nebo představitele vaší školy (pokud nějakou navštěvujete) zařídit, aby podepsal „zřeknutí se autorských práv“ k Programu. Více informací o tom, jak to udělat a zároveň neporušit GNU GPL, najdete na <http://www.gnu.org/licenses/>.

Obecná veřejná licence GNU neumožňuje zahrnutí vašeho programu do programů, které nepodléhají Licenci. Pokud je váš program knihovnou podprogramů, můžete považovat za užitečnější povolit pouze navázání jiných aplikací (nepodléhajících této Licenci) na tuto knihovnu. Pokud tak chcete udělat, místo této Licence použijte Obecnou veřejnou licenci GNU Lesser. Ale ještě před tím si, prosím, přečtěte: <http://www.gnu.org/philosophy/why-not-lgpl.html>.

**Modelování a simulace bičující nestability
při elektrostatickém zvlákňování**

Modeling and simulation of whipping instability
in the electrospinning process

Ing. Milan Šimko

Grafika systémem METAPOST.

Sazba systémem T_EX (formát C_Splain).

Typografie a počítačová sazba z písma Computer Modern provedena autorem.

Desky, tisk a vazba Tiskárna AKORD Chomutov, s. r. o.

Na Příkopech 901/3, 430 01 Chomutov

Všechna práva autora vyhrazena.

