TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta textilní

DISERTAČNÍ PRÁCE

Liberec 2012 **Milan Šimko**

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta textilní

Studijní program: P3106 — Textilní inženýrství
Studijní obor: 3106V007 — Textilní materiálové inženýrství

DISERTAČNÍ PRÁCE

Modelování a simulace bičující nestability při elektrostatickém zvlákňování

Modeling and simulation of whipping instability in the electrospinning process

Milan Šimko

Vedoucí disertační práce: prof. RNDr. David Lukáš, CSc.

Rozsah práce: 93 stran

obrázků	tabulek	literatury	příloh
51	4	44	4

Liberec
2012

Prohlášení

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

Prohlašuji, že má disertační práce je ve smyslu autorského zákona výhradně mým autorským dílem.

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 přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Disertační práci jsem vypracoval samostatně s použitím literatury uvedené na straně 94 a na základě konzultací se školitelem.

Prohlašuji, že jsem do informačního systému STAG vložil elektronickou verzi mé disertační práce, která je identická s tištěnou verzí předkládanou k obhajobě a uvedl jsem všechny systémem požadované informace pravdivě.

V Liberci dne 22. srpna 2012 ....

Milan Šimko

Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval doc. RNDr. Miroslavu Brzezinovi, CSc. za téma předkládané doktorské disertační práce. Velice rád bych chtěl 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 doktorskou disertační práci.

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

Anotace

Disertační práce se zabývá matematickým modelováním bičující nestability elektricky nabité kapalinové trysky, která je vytvářena z polymerního roztoku prostřednictvím elektrostatických sil během elektrostatického zvlákňování. Klíčovým atributem matematického modelu je element ideální přímočaré zelektrizované trysky, tzv.„viskoelastická činka“. Na základě silového rozboru tohoto elementu byly zformulovány rovnice popisující jeho dynamiku. Součástí disertační práce je vyvinutá vícevláknová počítačová aplikace, které umožňuje provádět simulace procesu elektrostatického zvlákňování. Numerický výpočet obstarává paralelní výpočetní (simulační) 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, nanovlákna, počítačová simulace

Annotation

This dissertation thesis deals with the mathematical modeling of whipping instability of the electrically charged liquid jet, which it is created from a polymer solution by electrospinning. The element of ideal rectilinear electrically charged jet, the so-called "viscoelastic dumbbell", is a key attribute of a mathematical model. Governing equations describing dynamics this element were formulated based on its force 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 (simulation) kernel, which it is an algorithmization of a numerical model, handles an approximate numerical computation. Resutls of numerical simulations are visualized through three-dimensional computer graphic.

Keywords

whipping instability, electrospinning, liquid jet, mathematical model, nanofibers, computer simulation

Obsah

Seznam obrázků

Seznam tabulek

Seznam symbolů

Symbol	Jednotka	Význam
$\mathrm{d}\varepsilon/\mathrm{d}t$	s^{-1}	Rychlost přetvoření
γ	$\mathrm{N\,m}^{-1}$	Povrchové napětí
δ	m	Výchylka v příčném směru
ε	—	Deformace
ε_0	$\mathrm{C}^2\,\mathrm{N}^{-1}\,\mathrm{m}^{-2}$	Permitivita vakua
ε_r	—	Relativní permitivita vzduchu
$\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}$	—	Relativní permitivita polymerního roztoku
η	Pa s	Dynamická viskozita
η_a	Pa s	Dynamická viskozita vzduchu
ϑ	rad	Úhel výchylky v příčném směru
κ	$\mathrm{S\,m}^{-1}$	Měrná elektrická vodivost
λ	m	Vlnová délka perturbace (poruchy)
ϱ	$\mathrm{kg\,m}^{-3}$	Měrná hmotnost polymerního roztoku
ϱ_a	$\mathrm{kg\,m}^{-3}$	Měrná hmotnost vzduchu
ϱ_s	$\mathrm{kg\,m}^{-3}$	Měrná hmotnost rozpouštědla
σ	Pa	Normálové napětí
τ	s	Relaxační čas ($\tau = \eta/E$)
φ	V	Elektrostatický potenciál
φ_1	V	Elektrický potenciál aplikovaný na kapiláru
φ_2	V	Elektrický potenciál aplikovaný na uzemněný kolektor
ω	s^{-1}	Úhlová frekvence perturbace (poruchy)
$\varDelta\, t$	s	Časový krok numerické metody
$\varLambda$	—	Koeficient úbytku objemu rozpouštědla
a	m	Rozteč válcových vodičů speciálního kolektoru

d	m	Okamžitý průměr přímočaré zelektrizované trysky
d_0	m	Počáteční průměr přímočaré zelektrizované trysky
e	m	Rozteč os nekonečně tenkých vodičů speciálního kolektoru
g	$\mathrm{m\,s^{-2}}$	Tíhové zrychlení
h	m	Vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem
k	$\mathrm{m^{-1}}$	Úhlový vlnočet perturbace (poruchy)
l	m	Okamžitá délka přímočaré zelektrizované trysky
l_0	m	Počáteční délka přímočaré zelektrizované trysky
m	kg	Okamžitá hmotnost
m_0	kg	Počáteční hmotnost
q	C	Okamžitý náboj
q_0	C	Počáteční náboj
q_ϱ	$\mathrm{C\,m^{-3}}$	Objemová hustota náboje
q_σ	$\mathrm{C\,m^{-2}}$	Plošná hustota náboje
q_τ	$\mathrm{C\,m^{-1}}$	Lineární hustota náboje
r	m	Poloměr kapiláry, resp. hemisférické kapky
t	s	Čas
v	$\mathrm{m\,s^{-1}}$	Velikost okamžité rychlosti
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 perturbace (poruchy)
C_f	—	Koeficient třecího odporu
C_p	—	Koeficient tlakového odporu
D	m	Průměr kolektoru
E	Pa	Youngův modul pružnosti
E	$\mathrm{V\,m^{-1}}$	Velikost intenzity vnějšího elektrostatického pole
E_c	$\mathrm{V\,m^{-1}}$	Velikost kritické intenzity elektrostatického pole
F	V	Komplexní potenciál
I_0	A	Elektrický proud kapalinové trysky
L	m	Délkový měřítkový faktor
Q_V	$\ell\,\mathrm{hod^{-1}}$	Objemový průtok polymerního roztoku kapilárou
U_0	V	Aplikované elektrické napětí

U_c	V	Kritické elektrické napětí
V_0	m^3	Počáteční objem přímočaré zelektrizované trysky
$\boldsymbol{e}$	—	Ortogonální báze lokálního souřadného systému
$\boldsymbol{f}$	—	Ortonormální báze lokálního souřadného systému
$\boldsymbol{i}$	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy x
$\boldsymbol{j}$	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy y
$\boldsymbol{k}$	—	Jednotkový vektor ve směru souřadné osy z
$\boldsymbol{p}$	$\mathrm{kg\ m\ s^{-1}}$	Hybnost
$\boldsymbol{r}$	m	Polohový vektor
$\boldsymbol{v}$	$\mathrm{m\ s^{-1}}$	Okamžitá rychlost
$\boldsymbol{E}$	$\mathrm{V\ m^{-1}}$	Intenzita vnějšího elektrostatického pole
$\boldsymbol{F}_\mathrm{C}$	N	Elektrostatická odpuzující síla
$\boldsymbol{F}_\mathrm{D}$	N	Odporová síla vzduchu
$\boldsymbol{F}_\mathrm{E}$	N	Síla vnějšího elektrostatického pole
$\boldsymbol{F}_\mathrm{M}$	N	Viskoelastická síla
$\boldsymbol{F}_\mathrm{S}$	N	Síla povrchového napětí

Úvod

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

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 [16]. O několik set let později, v roce 1934, patentoval[0.1)] 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 nanovlákna vytvářena prostřednictvím elektricky nabité trysky[0.2)] polymerního roztoku nebo polymerní taveniny [23]. Tento proces si během posledních několika let získal velkou pozornost zejména jako levná a jednoduchá metoda pro laboratorní i průmyslovou výrobu polymerních nanovláken [35]. Polymerní nanovlákna 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 [25]. Z těchto důvodů je pro nás důležité, porozumět fyzikálním principům procesu elektrostatického zvlákňování a snažit se je popsat prostřednictvím matematického aparátu.

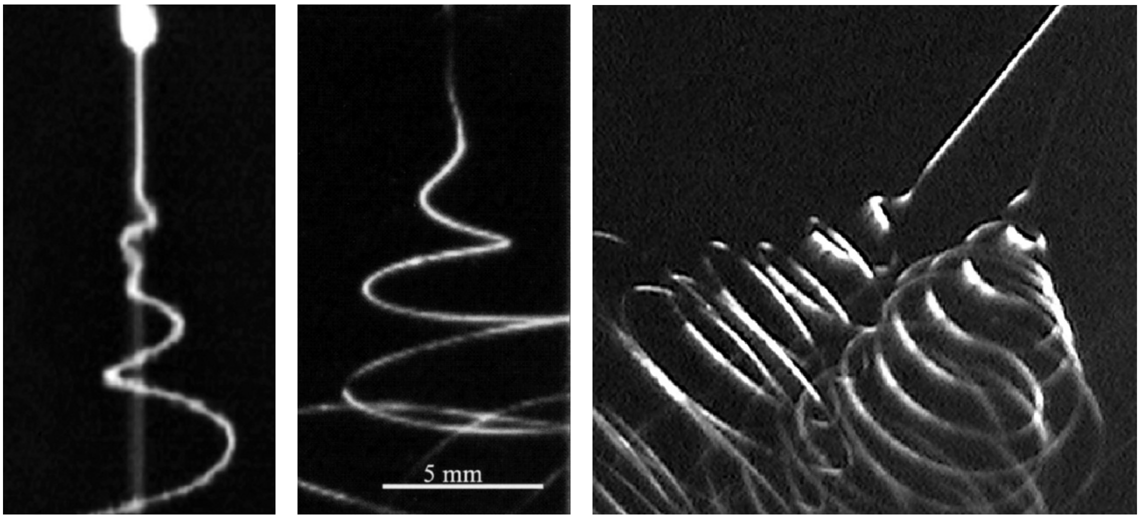
Cílem disertační práce je navrhnout matematický model zelektrizované kapalinové trysky, tento model realizovat ve formě počítačového programu a s jeho pomocí

[0.1)] U. S. Patent 1 975 504.

[0.2)] Tryskou bude v celé práci myšlen tenký proud polymerního roztoku.

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.

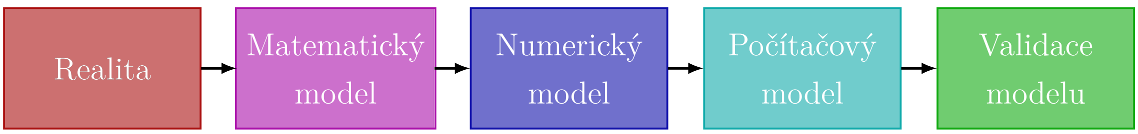
V názvu předkládané práce se vyskytují pojmy *modelování* a *simulace*. Podstatou prvního pojmu je v této práci myšlena náhrada zkoumané kapalinové trysky jejím matematickým modelem. Na obr. 0.1 jsou znázorněny snímky kapalinových trysek, které byly zaznamenány vysokorychlostní kamerou při reálných experimentech.



(a) Převzato z [24] (b) Převzato z [40] (c) Převzato z [24]

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

S rozvojem výpočetní techniky jsou druhým pojmem myšleny numerické simulace na počítači, které mají napodobovat chování zkoumané kapalinové trysky, s cílem získat široké spektrum informací. 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 simulace 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 doktorská 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 čtenáře s úvodem do fyzikálních principů elektrostatického zvlákňování a stručně pojednává o parametrech, které proces elektrostatického zvlákňování ovlivňují.

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

ČÁST II: MATEMATICKÝ MODEL

Kapitola třetí je teoretická. Předkládá element ideální přímočaré zelektrizované trysky, tzv. „viskoelastické činky", který je klíčovým atributem celého modelu.

Kapitola čtvrtá je teoretická. Pojednává o zobecněném (trojrozměrném) modelu elektricky nabité trysky. Stěžejním atributem je tzv. „řetězec viskoelastických činek", prostřednictvím něhož je modelována spojitá elektricky nabitá kapalinová tryska.

ČÁST III: NUMERICKÝ MODEL

Kapitola pátá se zabývá časovou diskretizací obyčejných diferenciálních rovnic a popisuje algoritmus přibližného numerického řešení.

ČÁST IV: POČÍTAČOVÝ MODEL

Kapitola šestá je realizační. Popisuje autorem vyvíjenou počítačovou aplikaci.

Kapitola sedmá pojednává o verifikaci implementovaného numerického modelu v programovacím jazyce.

ČÁST V: EXPERIMENTY A VALIDACE MODELU

Kapitola osmá je experimentální. Zabývá se numerickými experimenty s elementem ideální přímočaré zelektrizované trysky s cílem porozumět jeho chování ve vnějším elektrostatickém poli a výpočtem trajektorie zelektrizované trysky.

Kapitola devátá je experimentální. Pojednává o reálných experimentech, které sloužily k validaci počítačového (matematického) modelu elektricky nabité trysky.

ČÁST VI: DISKUSE VÝSLEDKŮ A ZÁVĚR

Kapitola desátá je věnována souhrnu výsledků získaných na základě numerických experimentů a diskusi možných vlivů na tyto výsledky.

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

Příloha A obsahuje vlastní publikace autora související s tématem doktorské 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.

Část I

SEZNÁMENÍ S ŘEŠENOU PROBLEMATIKOU

Kapitola 1

Elektrostatické zvlákňování

Tato kapitola si klade za cíl, uvést 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.

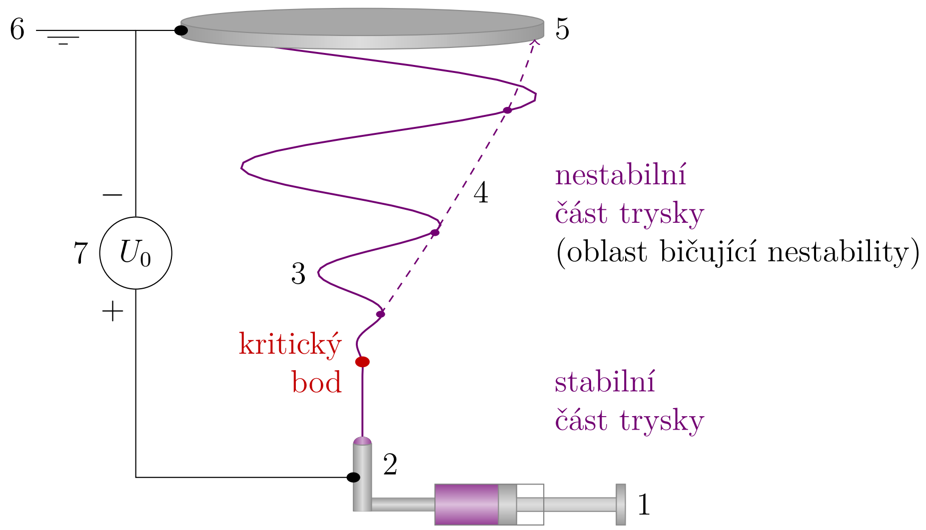
1.1 Princip elektrostatického zvlákňování

Elektrostatické zvlákňování je proces, při kterém jsou polymerní nanovlákna submikronových průměrů formována v případě, že je hemisférická kapka polymerního roztoku [6, 34] nebo polymerní taveniny [23, 26] vystavena silnému vnějšímu elektrostatickému poli. Extrémní dloužení a urychlování elektricky nabité kapalinové trysky [6], ke kterému dochází během letu od zvlákňovací elektrody[1.1] (spinneru) ke sběrnému kolektoru[1.2], je založeno na tzv. bičující (ohybové) nestabilitě, jež vede ke spirálovitému pohybu trysky [10, 14, 24, 25]. Tento mechanismus, přestože byl objeven téměř před sto lety, není dosud zcela objasněn [14]. Pravděpodobná příčina vzniku tohoto jevu bude podrobněji vysvětlena na str. 18, odst. 3.4.

Trajektorie elektricky nabité trysky začíná na povrchu kapaliny, který je často, ale ne nutně omezen kapilárou [24]. V důsledku elektrostatického pole mezi kapilárou a uzemněným kolektorem dochází na povrchu kapaliny k indukování elektric-

[1.1] Zvlákňovací elektroda bude v celé práci tvořena kapilárou.

[1.2] Sběrný kolektor bude v celé práci tvořen diskovým uzemněným kolektorem, příp. speciálním drátovým kolektorem.



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

kého náboje q. Hemisférický povrch kapky v místě ústí kapiláry se postupně prodlužuje [13] až dojde, s určitým časovým zpožděním T [15], k výstavbě kónického útvaru, tzv. Taylorova kužele [31, 41]. 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, jenž je důsledkem působení elektrostatických sil, překoná tlak kapilární p_c [16]. Současně nastane zborcení Taylorova kužele a z jeho vrcholu vytryskne tenký proud kapaliny.

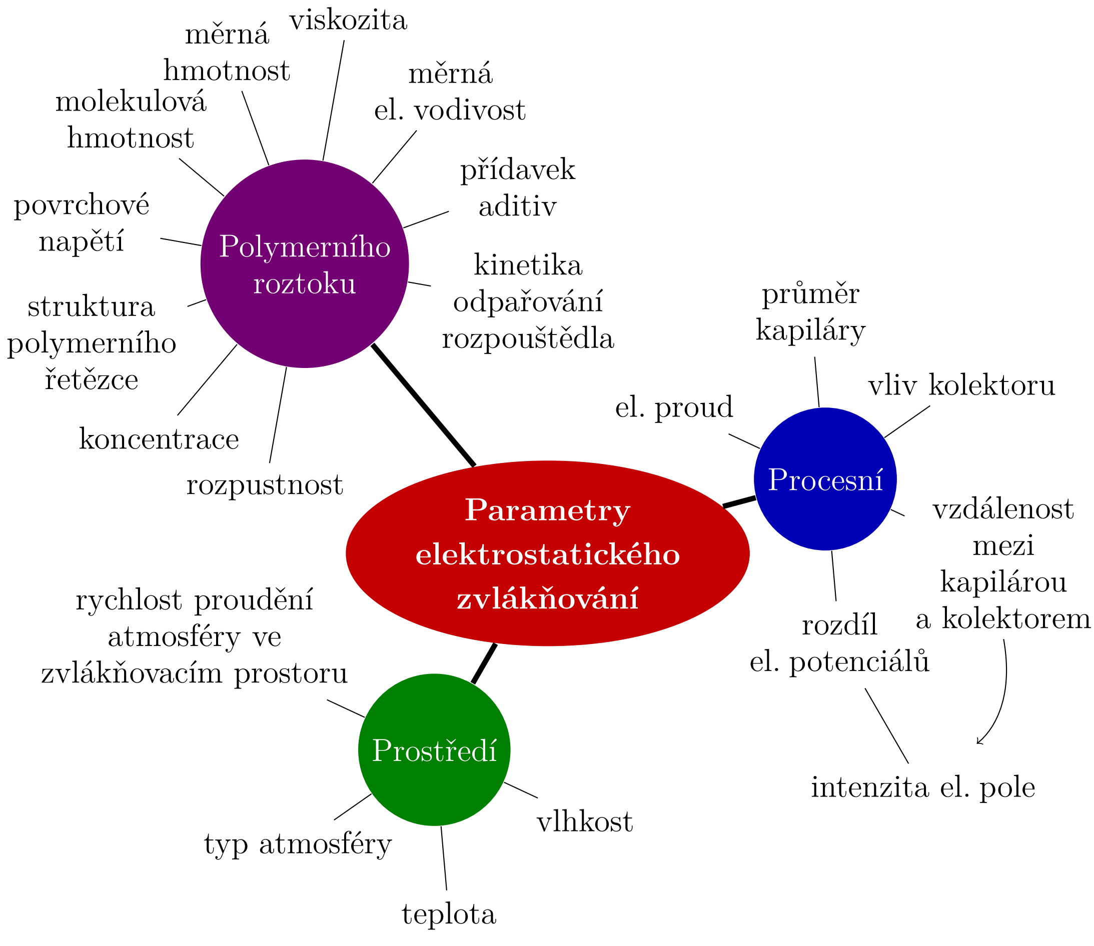
Tento proud kapaliny tvoří postupně se zužující přímý segment, skrze který pokračuje trajektorie zelektrizované kapalinové trysky. Podle autorů článku [25] je prokázáno, že mechanické normálové napětí σ způsobené vnějším elektrostatickým polem, stabilizuje do určité vzdálenosti právě tento přímý segment. Zmíněná zóna se proto označuje jako stabilní část trysky.

Stabilní část kapalinové trysky postupně přechází v část nestabilní [25], pro kterou je charakteristická zmíněná bičující nestabilita. V této zóně, jak bylo již uvedeno, dochází k enormnímu dloužení zelektrizované trysky, což vede ke ztenčování jejího příčného průřezu a zvětšování jejího povrchu. Mezitím dochází k odstranění až 90 % rozpouštědla [36] a téměř suchá polymerní nanovlákna dopadají na uzemněný kolektor [13], kde končí trajektorie elektricky nabité kapalinové trysky.

Na obr. 1.1 je schematicky znázorněna jedna z možných variant uspořádání aparatury pro elektrostatické zvlákňování, kde je jako kolektor použit tenký uzemněný disk. V literatuře (viz např. [33]) jsou popsány další, především speciální, typy kolektorů umožňující cílené ukládání nanovláken. Orientovaná nanovlákna mohou být užitečná například při navrhování scaffoldů pro tkáňové inženýrství [37].

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 [27, 44]. Autor zde uvede tento pojem také v souvislosti, která je blíže



Obr. 1.2: Rozdělení parametrů ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování.

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 napětí σ [44]. Další parametry, které ovlivňují [23, 27, 34] proces elektrostatického zvlákňování, jsou nejčastěji rozdělovány na procesní, systémové (polymerního roztoku) a okolního prostředí. Tyto parametry jsou schematicky znázorněny na obr. 1.2.

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 $\bar{d}_{\mathrm{f}}$ nanovláken a jeho distribuci [2, 5, 7]. Procesní parametry mají vliv zejména na utváření nanovláken [27].

Optimální hodnoty parametrů procesu elektrostatického zvlákňování je potřeba stanovit individuálně pro každý zvlákňovaný polymerní roztok. Na str. 73, tab. 8.1, jsou pro představu uvedeny řádové rozsahy, ve kterých se pohybují hodnoty některých[1.3)] parametrů ovlivňující elektrostatické zvlákňování.

[1.3)] Uvedeny jsou pouze parametry, které jsou vstupem počítačového modelu.

Kapitola 2

Přehled současného stavu řešené problematiky

PROBLEMATIKA bičující nestability, ale 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 [10]. Tato kapitola seznamuje čtenáře s nalezenými informačními zdroji z oblasti tématu doktorské disertační práce.

Feng se ve svém článku [6] odkazuje na práci autorů *Hohmana a kol.* [10], 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 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 „mezní vrstvy“ na kapiláře, citlivá vzhledem k počáteční plošné hustotě náboje. Autor následně zavedl do modelu vztah pro nenewtonovskou[2.1)] (zdánlivou) 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.

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

Han, Yarin a Reneker ve společném článku [8] 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 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 je přičítán podélnému dloužení polymerních kapalin v „přechodové oblasti“ mezi zborceným Taylorovým kuželem a počátkem oblasti tenkého kapalinového proudu, kde se rychlosti přetvoření $\mathrm{d}\varepsilon/\mathrm{d}t$ pohybují v rozmezí 100–1 000 s^{-1}. Rousovy relaxační časy[2.2)] τ_R polymerního roztoku byly naměřeny v rozsahu 3–8 ms a Youngův modul pružnosti E byl řádově 100 Pa. Autoři předkládají nové důvody vysvětlující vytváření přímých úseků elektrostaticky zvlákněných trysek. Přímé úseky jsou stabilizovány velkým počátečním normálovým napětí σ uvnitř elektricky nabité kapalinové trysky, které je vyvoláno v důsledku silného elektricky podmíněného dloužení v přechodové oblasti. Další elektricky podmíněné dloužení kapalinové trysky (po přechodové oblasti) je poměrně slabé a převažuje Rousova viskoelastická relaxace. Mechanické normálové napětí σ uvnitř elektricky nabité kapalinové trysky se vlivem aplikovaného elektrického napětí U_0 zvyšuje (vytváří se větší počáteční tahové napětí σ 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 $\mathrm{d}\varepsilon/\mathrm{d}t$ v rozsahu 100–1 000 s^{-1}. To ukazuje míru normálového napětí σ podél kapalinového proudu a umožňuje vyhodnocení Rousova relaxačního času τ_R, Youngova modulu pružnosti E a dynamické viskozity η.

Hohman a kol. publikovali sérii článků, ve kterých analyzovali mechanismus bičující nestability tím, že studovali nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky s rostoucí intenzitou $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole. Ve svém prvním článku [10] vyvinuli asymptotickou aproximaci rovnic elektrohydrodynamiky, proto aby mohli provést kvalitativní srovnání s experimenty. Rozpoznali tři různé typy nestabilit: (1) klasickou osově souměrnou Rayleigho nestabilitu, (2) osově souměrnou vyvolanou vnějším elektrostatickým polem a (3) ohybovou (bičující) nestabilitu. S rostoucí intenzitou $\boldsymbol{E}$ elektrostatického pole zesilují elektrické nestability, zatímco Rayleigho nestabilita je potlačena. Jaká nestabilita bude dominovat silně závisí na plošné

[2.2)] Rousův relaxační čas je definován vztahem viz [38, rov. (41)].

hustotě náboje q_σ a poloměru křivosti zelektrizované kapalinové trysky. Fyzikální mechanismy nestability jsou autory také diskutovány.

Ve svém druhém článku [11] používají *Hohman a kol.* již odvozenou teorii stability a na jejímž základě vybudovali metodu pro kvantitativní odhad, kdy dojde k elektrostatickému zvlákňování. 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 nabité kapalinové trysky a jsou vytvořeny pracovní diagramy (závislosti intenzity $\boldsymbol{E}$ elektrostatického pole na objemovém průtoku Q_V polymerního roztoku kapilárou), kdy dochází k elektrostatickému zvlákňování. Předpovědi jak se mění režimy elektrostatického zvlákňování, jsou prezentovány jako funkce měrné elektrické vodivosti κ a dynamické viskozity η.

Kowalewski, Blonski a Barral ve své studii [14] shromáždili experimentální data, prostřednictvím kterých si kladli za cíl charakterizovat elektrostatické zvlákňování různých kapalin a navrhnout vhodný teoretický model, který by umožňoval (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 kol. ve svém článku [25] 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 nabité 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 nabité kapalinové trysky určenou pozorováním vysokorychlostní kamerou.

Yarin, Koombhongse a Reneker v článku [40] 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 nabité 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 [43] nevysvětlují bičující nestabilitu elektricky nabité 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 matematický model je používán v textilním průmyslu k simulování pohybu vlákna ve vzduchovém tkacím stroji.

Reneker a Yarin ve svém článku [24] popisují vývoj trajektorie elektricky nabité 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 referují práci [34] o elektrostatickém zvlákňování, ve které byla měřena 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 $\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}$ 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 zvlákněny. Sledovanými řídícími 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 kol. ve svém článku [35] uvádějí, že působící elektrické síly jsou hlavním faktorem odpovědným za charakteristiku trajektorie elektricky nabité kapalinové trysky a její dloužení při elektrostatickém zvlákňování. Tato práce popisuje výsledky 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 nabité kapalinové trysky a její vývoj v průběhu elektrostatického zvlákňování.

Část II

MATEMATICKÝ MODEL

Kapitola 3

Model přímočaré elektricky nabité trysky

MATEMATICKÝ model idealizované elektricky nabité kapalinové trysky předkládaný v této kapitole vychází z myšlenky Renekerova–Yarinova modelu (viz např. [24, 25, 26]) a modelu od Zenga–Yanga–Yua (viz např. [43]). Klíčovým atributem celého modelu je element[3.1)] ideální přímočaré zelektrizované trysky neboli tzv. „viskoelastické činky“.

3.1 Aproximační předpoklady modelu

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

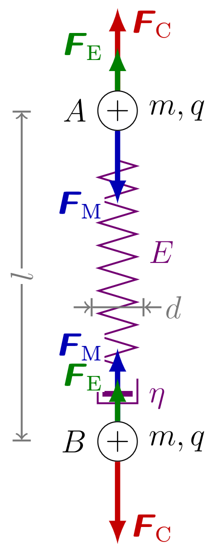
- elektrostatické zvlákňování je realizováno z kapiláry;
- počáteční perturbace trysky je simulována harmonickými kruhovými kmity;
- viskoelastické chování zvlákňovaného polymerního roztoku je popsáno lineárním reologickým modelem;
- polymerní roztok obsahuje pouze vázané náboje a jejich transport je daný pouze tokem kapalinové trysky;
- kapalinová tryska je diskretizována štíhlými segmenty umožňující přenášet pouze osovou sílu, která je konstantní po délce elementu;

[3.1)] Element se předpokládá jednodimenzionální, založený na idealizaci štíhlým tělesem, tj. délka je mnohem větší než příčný průřez. Element je analogií prutu známého z mechaniky tuhých těles.

- není uvažováno s ovlivňováním vypočteného vnějšího elektrostatického pole[3.2)] bičující zelektrizovanou kapalinovou tryskou;
- není uvažováno s bifurkací řešení, tj. rozštěpení primárního proudu kapaliny na sekundární trysky.

3.2 Element přímočaré elektricky nabité trysky

Element ideální přímočaré 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 elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. η — dynamická viskozita, d — okamžitý průměr, l — okamžitá délka, m — hmotnost, q — náboj, E — Youngův modul pružnosti, $\boldsymbol{F}_\mathrm{C}$ — elektrostatická síla, $\boldsymbol{F}_\mathrm{E}$ — síla vnějšího elektrostatického pole, $\boldsymbol{F}_\mathrm{M}$ — viskoelastická síla. Tíhovou sílu je možné v silovém rozboru zanedbat.

3.3 Viskoelastické chování kapalinové trysky

Zvlákňovaný polymerní roztok se chová jako viskoelastická (maxwellovská) kapalina, proto byl pro modelování odezvy materiálu na vnější zatížení použit Maxwellův reologický model (viz např. [17]). Tento reologický model popisuje lineární viskoelasticitu a je reprezentován sériovým spojením lineární pružiny, tzv. Hookeova prvku, a lineárního viskózního tlumiče, tzv. Newtonova prvku. Protože jsou u Maxwellova modelu reologické prvky spojeny v sérii, jsou mechanická normálová napětí σ v obou

[3.2)] Vnější elektrostatické pole je generované pouze kapilárou a uzemněným kolektorem.

prvcích a tedy celém modelu stejná[3.3)]

$$\sigma = \sigma_{\mathrm{H}} = \sigma_{\mathrm{N}},$$

kde σ_{H}, σ_{N} je normálové napětí v Hookeově, resp. Newtonově prvku.

Celková deformace ε je rovna součtu elastické a viskózní složky deformace

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathrm{H}} + \varepsilon_{\mathrm{N}}$$

a taktéž se sčítají jejich rychlosti přetvoření

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\varepsilon_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\varepsilon_{\mathrm{N}}}{\mathrm{d}t}, \tag{3.1}$$

kde ε_{H}, ε_{N} je deformace Hookeova, resp. Newtonova prvku a $\mathrm{d}\varepsilon_{\mathrm{H}}/\mathrm{d}t$, $\mathrm{d}\varepsilon_{\mathrm{N}}/\mathrm{d}t$ je rychlost přetvoření Hookeova, resp. Newtonova prvku.

Deformace Hookeova prvku je dána vztahem

$$\varepsilon_{\mathrm{H}} = \frac{\sigma}{E} \tag{3.2}$$

a rychlost přetvoření Newtonova prvku vztahem

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon_{\mathrm{N}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\sigma}{\eta}, \tag{3.3}$$

kde E je Youngův modul pružnosti a η je dynamická viskozita.

Derivováním vztahu (3.2) podle času a substitucí společně se vztahem (3.3) do rovnice (3.1) se dostane konstitutivní rovnice Maxwellova reologického modelu pro celkovou rychlost přetvoření

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{E}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}t} + \frac{\sigma}{\eta}. \tag{3.4}$$

Přenásobením předchozí rovnice dynamickou viskozitou η a použitím vztahu (B.3) pro výpočet rychlosti přetvoření pro velké deformace elementu trysky, je časová derivace normálového napětí σ z rovnice (3.4) rovna

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}t} = \frac{\eta}{\tau}\frac{\mathrm{d}l}{l\,\mathrm{d}t} - \frac{\sigma}{\tau}, \tag{3.5}$$

kde $\tau = \eta/E$ je relaxační čas polymerního roztoku a l je okamžitá délka elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky.

3.4 Bičující nestabilita kapalinové trysky

Příčina bičující nestability může být vysvětlena následujícím způsobem. V lokálních souřadnicích, které se pohybují společně s elektricky nabitou kapalinovou tryskou,

[3.3)] Dynamické účinky se u reologických modelů neuvažují.

je možné její vázané náboje považovat za statickou soustavu souhlasně nabitých bodových nábojů, která je ovlivňována především elektrostatickými silami $\boldsymbol{F}_\mathrm{C}$, tj. bez vnějšího elektrostatického pole. Podle Earnshawovy věty (viz např. [28, 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 nábojem q a původně umístěné na přímce [viz obr. 3.2(a)]. Jestliže dojde v důsledku příčné perturbace k vychýlení nabitého hmotného bodu B o vzdálenost δ do místa B', výslednice elektrostatických odpuzujících sil $\boldsymbol{F}_\mathrm{VC}$ 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. 3.2(a)], je možné, podle druhého Newtonova zákona, sestavit pohybovou[3.4)] rovnici ve směru příčné perturbace, tj. ve směru kolmém na zvlákňovací linii

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2\delta}{\mathrm{d}t^2} = |\boldsymbol{F}_\mathrm{VC}| = 2\,|\boldsymbol{F}_\mathrm{C}|\cos\vartheta.$$

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

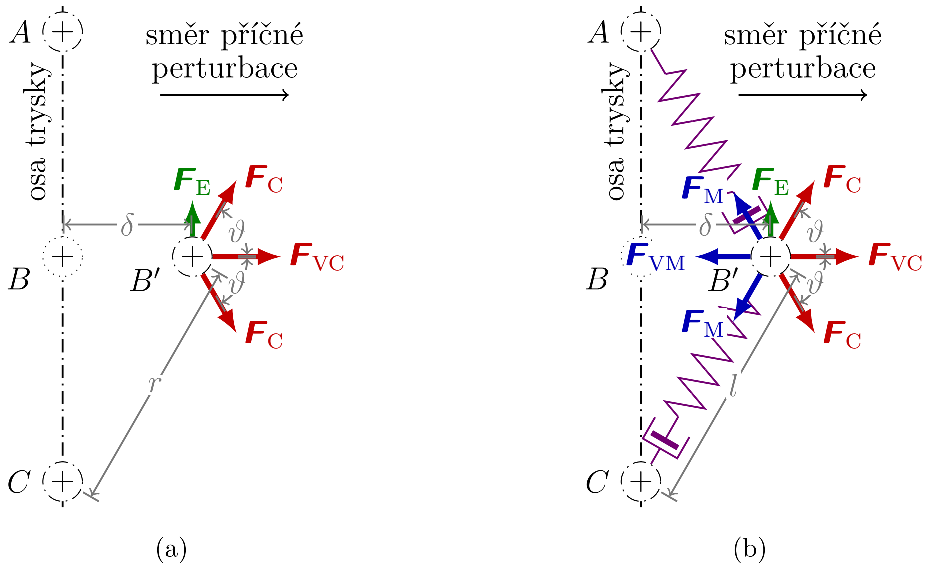
$$\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}t} = v, \tag{3.6}$$

$$m\,\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{q^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{\delta}{r^3}, \tag{3.7}$$

kde m, q, v jsou hmotnost, náboj, 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 (3.6) a (3.7) je hledáno numericky (viz str. 62, odst. 8.1). Podle autorů článků [25, 26] je tento mechanismus zodpovědný za bičující nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky při elektrostatickém zvlákňování.

Pokud jsou nabité hmotné body A, B a C vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 3.2(b)], výslednice viskoelastických sil $\boldsymbol{F}_\mathrm{VM}$ má tendenci vyrovnávat nestabilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami $\boldsymbol{F}_\mathrm{C}$. Pro velmi tenké kapalinové trysky je možné, v porovnání se stabilizujícím efektem viskoelastických sil $\boldsymbol{F}_\mathrm{M}$, zanedbat vliv posouvající síly vztahující se k ohybové tuhosti EJ, kde $J = (\pi d^4)/64$ je moment setrvačnosti kruhového průřezu. Jestliže jsou elektrostatické odpuzující síly větší než viskoelastický odpor, $\boldsymbol{F}_\mathrm{VC} > \boldsymbol{F}_\mathrm{VM}$, růst bičující nestability

[3.4)] Ve smyslu klasické mechaniky.



Obr. 3.2: Silový rozbor vysvětlující pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability elektricky nabité trysky. δ — výchylka perturbace, ϑ — úhel, l — okamžitá délka, $\boldsymbol{F}_\mathrm{C}$ — elektrostatická síla, $\boldsymbol{F}_\mathrm{E}$ — síla vnějšího elektrostatického pole, $\boldsymbol{F}_\mathrm{M}$ — viskoelastická síla, $\boldsymbol{F}_\mathrm{VC}$ — výslednice elektrostatických sil, $\boldsymbol{F}_\mathrm{VM}$ — výslednice viskoelastických sil.

je nyní zbrzďován právě viskoelastickým odporem [26] zvlákňovaného polymerního roztoku. Na základě rozboru sil, jež působí na nabitý hmotný bod B v místě B' [viz obr. 3.2(b)], lze opět podle druhého Newtonova zákona napsat pohybovou rovnici ve směru příčné perturbace

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2\delta}{\mathrm{d}t^2} = |\boldsymbol{F}_\mathrm{VC}| - |\boldsymbol{F}_\mathrm{VM}| = 2\,|\boldsymbol{F}_\mathrm{C}|\cos\vartheta - 2\,|\boldsymbol{F}_\mathrm{M}|\cos\vartheta.$$

Opět přepsáním na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu se dostane

$$\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}t} = v, \tag{3.8}$$

$$m\,\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{q^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{\delta}{l^3} - \frac{1}{2}\,\pi\,d^2\,\sigma\,\frac{\delta}{l}, \tag{3.9}$$

kde d je okamžitý průměr elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. Přibližné řešení soustavy rovnic (3.8) a (3.9) je, tak jako v předchozím případě, hledáno numericky (viz str. 62, odst. 8.1).

Proti bičující nestabilitě působí také povrchové napětí γ, neboť ohýbání kapalinové trysky vede ke zvětšování jejího povrchu [39]. Jinými slovy povrchové napětí omezuje vývoj příliš velkých křivostí způsobených příčnou perturbací. Všechny tyto faktory jsou uvažovány v zobecněném modelu elektricky nabité trysky (viz str. 24, kap. 4).

3.5 Pohybová rovnice

Na základě rozboru sil působících na nabitý hmotný bod A elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky (viz obr. 3.1) je možné, podle druhého Newtonova zákona, sestavit pohybovou rovnici ve tvaru

$$m \frac{\mathrm{d}^2 l}{\mathrm{d}t^2} = |\boldsymbol{F}_\mathrm{E}| + |\boldsymbol{F}_\mathrm{C}| - |\boldsymbol{F}_\mathrm{M}|.$$

Přepsáním na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu se dostane

$$\frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t} = v, \tag{3.10}$$

$$m \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = q\,E + \frac{1}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \frac{q^2}{l^2} - \frac{1}{4}\,\pi\,d^2\,\sigma, \tag{3.11}$$

kde v je velikost okamžité rychlosti nabitého hmotného bodu A ve směru osy trysky, E je (na tomto místě) velikost intenzity vnějšího elektrostatického pole a $(4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r})^{-1}$ je konstanta Coulombova zákona. Pohybová rovnice (3.11) nezahrnuje tíhovou sílu, kterou je možné vzhledem k hmotnostem nabitých bodů zanedbat.

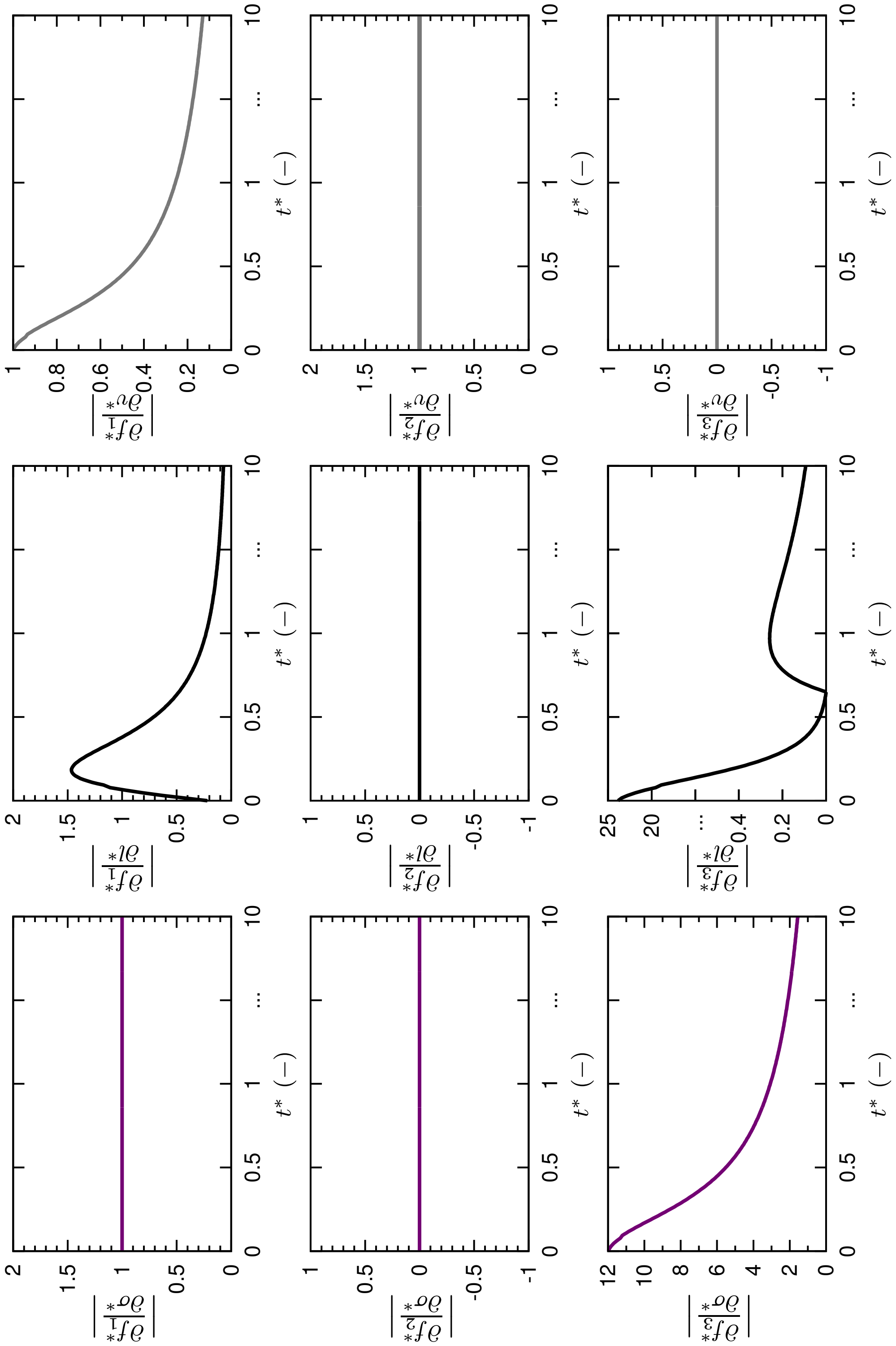
Konstitutivní rovnice (3.5), kinematická rovnice (3.10) a pohybová rovnice (3.11) tvoří soustavu obyčejných diferenciálních rovnic popisující, za předpokladu fixování polohy nabitého hmotného bodu B, dynamiku elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. Přibližné řešení se bude hledat numericky (viz str. 48, čl. 5.4.2).

3.6 Existence a jednoznačnost řešení

V odst. 3.3 a odst. 3.5 byly odvozeny obyčejné diferenciální rovnice, které popisují dynamiku elementu ideální přímočaré 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 f_1, f_2, f_3 a Lipschitzova podmínka (viz [19, str. 22]), která je silnější něž spojitost funkcí [22]. Stačí tedy ověřit, že funkce

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\eta}{\tau}\,\frac{v}{l} - \frac{\sigma}{\tau}, \\ f_2 &= v, \\ f_3 &= \frac{q\,E}{m} + \frac{1}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\,m}\,\frac{q^2}{l^2} - \frac{\pi\,d_0^2\,l_0}{4\,m}\,\frac{\sigma}{l} \end{aligned} \tag{3.12}$$

jsou lipschitzovské vzhledem k stavovým proměnným σ, l a v. Neboli mají omezené všechny své první parciální derivace vzhledem k těmto proměnným, tj. nechť existuje



Obr. 3.3: Průběh prvních parciálních derivací $|\partial f_i/\partial\sigma|$, $|\partial f_i/\partial l|$ a $|\partial f_i/\partial v|$ v bezrozměrných veličinách. σ^* — bezrozměrné normálové napětí, l^* — bezrozměrná okamžitá délka, t^* — bezrozměrný čas, v^* — bezrozměrná velikost okamžité rychlosti.

číslo $M > 0$ (viz [19, str. 23]) takové, že platí

$$\left|\frac{\partial f_i}{\partial \sigma}\right| \leq M \qquad \left|\frac{\partial f_i}{\partial l}\right| \leq M \qquad \left|\frac{\partial f_i}{\partial v}\right| \leq M \qquad \forall i = 1,\ 2,\ 3. \tag{3.13}$$

Pak podle věty o existenci řešení a jednoznačné řešitelnosti počáteční úlohy (viz [19, str. 23]) existuje řešení počáteční úlohy, které je jednoznačně určeno počáteční podmínkou. Parciálním derivováním soustavy (3.12) se dostane

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial f_1}{\partial \sigma} = -\frac{1}{\tau}, && \frac{\partial f_1}{\partial l} = -\frac{\eta}{\tau}\,\frac{v}{l^2}, && \frac{\partial f_1}{\partial v} = \frac{\eta}{\tau}\,\frac{1}{l},\\
&\frac{\partial f_2}{\partial \sigma} = 0, && \frac{\partial f_2}{\partial l} = 0, && \frac{\partial f_2}{\partial v} = 1,\\
&\frac{\partial f_3}{\partial \sigma} = -\frac{\pi\, d_0^2\, l_0}{4\, m}\,\frac{1}{l}, && \frac{\partial f_3}{\partial l} = -\frac{1}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}\,m}\,\frac{q^2}{l^3} + \frac{\pi\, d_0^2\, l_0}{4\, m}\,\frac{\sigma}{l^2}, && \frac{\partial f_3}{\partial v} = 0,
\end{aligned}$$

kde $\sigma \in \langle 0; \sigma_{\max}\rangle$, $l \in \langle l_0; +\infty)$ a $v \in \langle 0; +\infty)$. Obory hodnot stavových proměnných je ale nutné posuzovat také na základě informací o řešené úloze, tzn. že vznikající nanovlákno nemůže proniknout skrz uzemněný diskový kolektor. Proměnné l a v proto ve skutečnosti nade všechny meze nerostou.

V dalším kroku je potřeba vyšetřit průběh všech prvních parciálních derivací, tj. nalézt globální extrémy funkcí $|\partial f_i/\partial \sigma|$, $|\partial f_i/\partial l|$ a $|\partial f_i/\partial v|$ pro $i = 1,\ 2,\ 3$. Zavedením nových funkcí $g_1 = |\partial f_1/\partial \sigma|$, $g_2 = |\partial f_1/\partial l|$, $g_3 = |\partial f_1/\partial v|$, $g_4 = |\partial f_2/\partial \sigma|$, $g_5 = |\partial f_2/\partial l|$, $g_6 = |\partial f_2/\partial v|$, $g_7 = |\partial f_3/\partial \sigma|$, $g_8 = |\partial f_3/\partial l|$ a $g_9 = |\partial f_3/\partial v|$ je pak

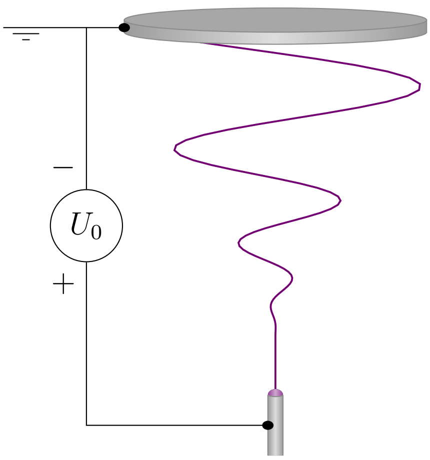
$$\begin{aligned}
&\frac{\partial g_1}{\partial \sigma} = 0, && \frac{\partial g_2}{\partial l} = \left|\frac{2\,\eta}{\tau}\,\frac{v}{l^3}\right|, && \frac{\partial g_3}{\partial v} = 0,\\
&\frac{\partial g_4}{\partial \sigma} = 0, && \frac{\partial g_5}{\partial l} = 0, && \frac{\partial g_6}{\partial v} = 0,\\
&\frac{\partial g_7}{\partial \sigma} = 0, && \frac{\partial g_8}{\partial l} = \left|\frac{3}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}\,m}\,\frac{q^2}{l^4} - \frac{\pi\, d_0^2\, l_0}{2\, m}\,\frac{\sigma}{l^3}\right|, && \frac{\partial g_9}{\partial v} = 0.
\end{aligned}$$

Na základě výpočtu funkčních hodnot vyšetřovaných funkcí v podezřelých bodech a jejich uspořádání dle velikosti existuje, podle (3.13), Lipschitzova konstanta $M = q^2/(2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}\,m\,l_0)$. Výpočet je možné ověřit i graficky z dat získaných při numerickém experimentu (viz str. 71, odst. 8.2). Z grafů vykreslených na obr. 3.3 je také zřejmé, že všechny první parciální derivace funkcí f_1, f_2 a f_3 jsou vzhledem k stavovým proměnným, σ, l 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.

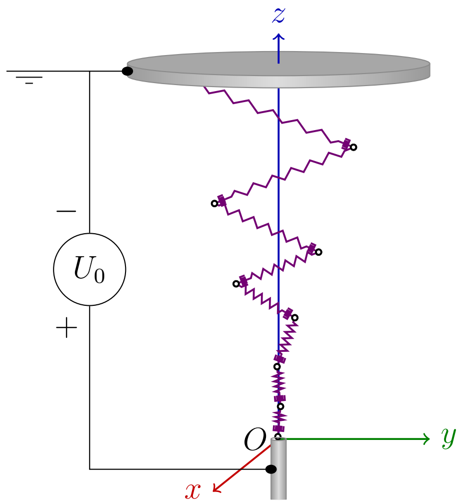
Kapitola 4

Zobecněný model elektricky nabité trysky

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



(a) spojitá kapalinová tryska



(b) diskretizace kapalinové trysky

Obr. 4.1: Náhrada spojité elektricky nabité kapalinové trysky soustavou sériově spojených elementů ideální přímočaré zelektrizované trysky.

4.1 Vnější elektrostatické pole

Vnější elektrostatické pole hraje v procesu elektrostatického zvlákňování důležitou roli. Je příčinou dloužení a urychlování elektricky nabité kapalinové trysky [6, 8, 10], a také do určité vzdálenosti stabilizuje její přímý směr [8, 25]. Předkládaná doktorská 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 zvlákňování, obecně vyžaduje řešit Poissonovu–Laplaceovu rovnici

$$\Delta\varphi = -\frac{q_\varrho}{\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}$$

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

4.1.1 Diskový uzemněný kolektor

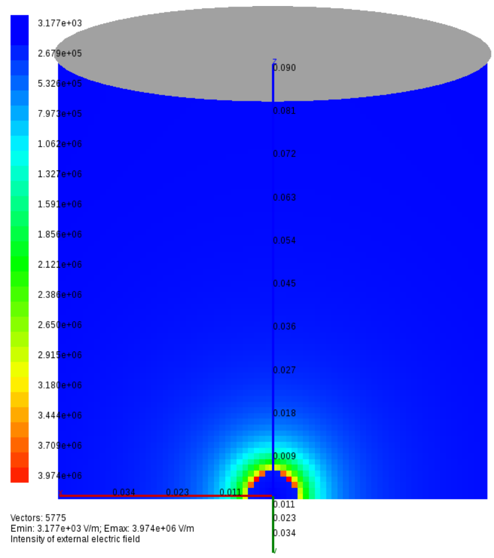
Nechť je uvažována následující soustava sestávající se z vodivé kapky polymerního roztoku a uzemněného diskového kolektoru. Počátek kartézského souřadného systému $O[x;\ y;\ z]$ je umístěn do ústí kapiláry. Pro zjednodušení se vodivá kapka považuje za rovnoměrně nabitou hemisféru (viz [9, obr. 16]) a 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. [28]). Tato metoda umožňuje splnit okrajové podmínky konstantního elektrostatického potenciálu φ tak, že se zrcadlově souměrně k rovině uzemněného kolektoru umístí fiktivní náboj, $Q = 4/3\,\pi\,q_\varrho\,r^3$, opačného znaménka (viz str. 40, obr. 4.8). Úskalím popsané metody je, že neumožňuje splnit okrajovou podmínku ve všech místech povrchu rovnoměrně nabité 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.

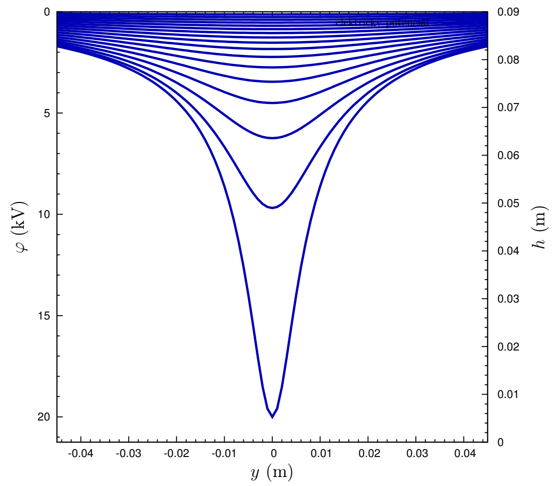
Elektrostatický potenciál φ vně kapky je určen spojitou skalární funkcí

$$\varphi = \frac{q_\varrho\,r^3}{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i|} - \frac{Q}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'|}, \tag{4.1}$$

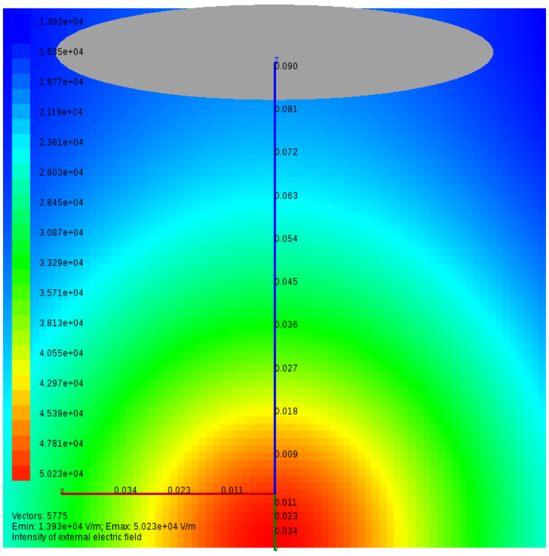
kde q_ϱ je objemová hustota náboje kapky, r je poloměr kapky (pro zjednodušení se



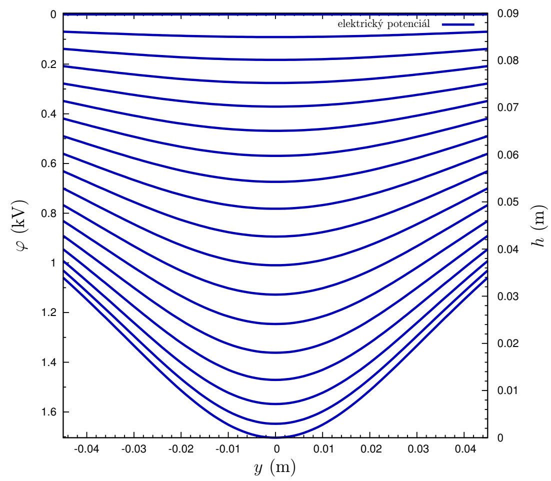
(a) velikost intenzity pole v rovině (0; y; z)



(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 elektrostatického pole a řez ekvipotenciálními plochami uzemněného diskového kolektoru. Parametry výpočtu: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 20\,\mathrm{kV}$, *potenciál uzemněného kolektoru* $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, *vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem* $h = 90\,\mathrm{mm}$, *poloměr kapiláry* $r = 5\,\mathrm{mm}$ *a průměr kolektoru* $D = 90\,\mathrm{mm}$. *Výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého počítačového programu.*

předpokládá shodný s poloměrem kapiláry), $\boldsymbol{r}_i$ je polohový vektor i-tého nabitého hmotného bodu a $\boldsymbol{r}' \equiv \{0;\ 0;\ 2h\}^{\mathrm{T}}$ je polohový vektor středu fiktivního náboje Q (kde horní index $^{\mathrm{T}}$ označuje operaci transpozice). Dosazením okrajové podmínky v bodě $[0;\ 0;\ r]$, tj. vrchol kapky polymerního roztoku, do (4.1), tedy

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

je možné určit objemovou hustotu náboje hemisférické kapky polymerního roztoku

$$q_\varrho = \frac{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\,\varphi_1\,(2h - r)}{2\,r^2\,(h - r)}, \tag{4.2}$$

které odpovídá fiktivní bodový náboj

$$Q = \frac{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\,\varphi_1\,(2\,h\,r - r^2)}{h - r}, \tag{4.3}$$

kde φ_1 je elektrostatický potenciál aplikovaný na kapiláru.

Celková intenzita $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole je dána vektorovým součtem elektrostatického pole rovnoměrně nabité kapky a fiktivního bodového náboje Q

$$\boldsymbol{E} = \begin{cases} |\boldsymbol{r}_i| < r: \dfrac{q_\varrho}{3\,\varepsilon_0\,\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}}\,\boldsymbol{r}_i + \dfrac{-Q}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'|^2}\,\dfrac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'|}, \\ |\boldsymbol{r}_i| \geq r: \dfrac{q_\varrho\, r^3}{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}_i|^2}\,\dfrac{\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_i|} + \dfrac{-Q}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'|^2}\,\dfrac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'|}, \end{cases} \tag{4.4}$$

kde $\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}$ je relativní permitivita polymerního roztoku.

[4.0)] 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 (4.1). Dosazením okrajových podmínek v ose soustavy, tj. v bodech $[0;\ 0;\ r]$ a $[0;\ 0;\ h]$

$$\varphi_1 \equiv \varphi([0;\ 0;\ r]) = \frac{q_\varrho\, r^2}{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} - \frac{Q}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{1}{2h - r},$$
$$\varphi_2 \equiv \varphi([0;\ 0;\ h]) = \frac{q_\varrho\, r^3}{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{1}{h} - \frac{Q}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}\,\frac{1}{h}$$

je možné určit objemovou hustotu náboje polymerní kapky

$$q_\varrho = \frac{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\big[\varphi_1(2h - r) - \varphi_2\,h\big]}{2\,r^2\,(h - r)} \tag{4.5}$$

a velikost fiktivního náboje

$$Q = \frac{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\big[\varphi_1(2\,h\,r - r^2) + \varphi_2(h\,r - 2\,h^2)\big]}{h - r}, \tag{4.6}$$

kde φ_2 je elektrostatický potenciál aplikovaný na diskový kolektor. Celková intenzita $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole je určena vztahem (4.4). Lze snadno ověřit, že pro $\varphi_2 = 0\,V$ jsou vztahy (4.2), (4.3) ekvivalentní se vztahy (4.5), (4.6).

Na obr. 4.2(a), obr. 4.2(c) je znázorněna velikost intenzity $|\boldsymbol{E}|$ 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 Speciální 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 nabity 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. [20]). 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 [20, str. 136])

$$F = \frac{\mathbf{i}\, q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln(w+e) + \frac{\mathbf{i}\, q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln(w-e) + C,$$

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

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

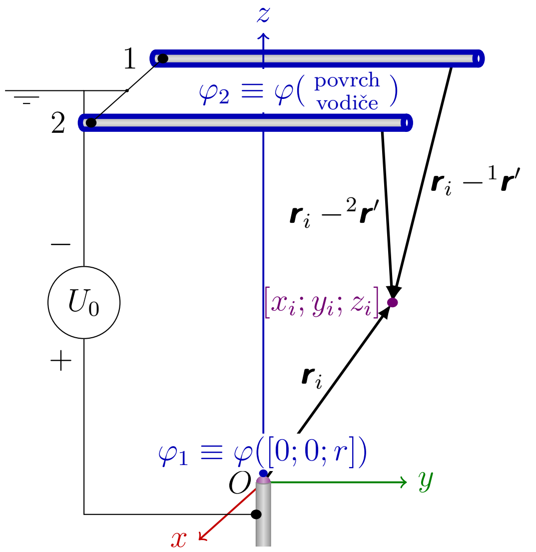
kde $\boldsymbol{r}_i \equiv \{x_i;\ z_i\}^\mathrm{T}$ je polohový vektor libovolného bodu v komplexní rovině a ${}^1\boldsymbol{r}' \equiv \{-e;\ h\}^\mathrm{T}$, ${}^2\boldsymbol{r}' \equiv \{e;\ h\}^\mathrm{T}$ jsou polohové vektory os nekonečně tenkých vodičů, se po úpravě dostane

$$F = -\frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} (\alpha_1+\alpha_2) + \frac{\mathbf{i}\, q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln(|\boldsymbol{r}_i - {}^1\boldsymbol{r}'||\boldsymbol{r}_i - {}^2\boldsymbol{r}'|) + C. \tag{4.7}$$

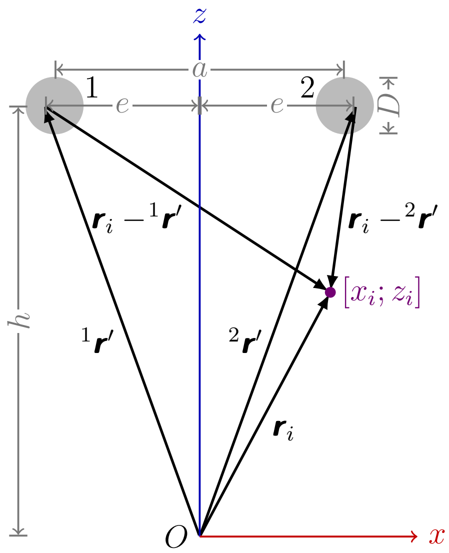
Po rozdělením komplexního potenciálu F na reálnou část Φ a imaginární část φ

$$\begin{aligned} \Phi &= -\frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} (\alpha_1+\alpha_2) + C_1,\\ \varphi &= \frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln(|\boldsymbol{r}_i - {}^1\boldsymbol{r}'||\boldsymbol{r}_i - {}^2\boldsymbol{r}'|) + C_2, \end{aligned} \tag{4.8}$$

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



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, $\boldsymbol{r}_i$ — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, ${}^1\boldsymbol{r}'$, ${}^2\boldsymbol{r}'$ — 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, $\boldsymbol{r}_i$ — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, ${}^1\boldsymbol{r}'$, ${}^2\boldsymbol{r}'$ — polohové vektory os nekonečně tenkých vodičů.

V dalším kroku je potřeba vyšetřit průběh ekvipotenciálních křivek, pro které platí, že $\varphi = \text{konst.}$ Ze vztahu (4.8) jsou ekvipotenciální křivky dány vztahem

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

Jsou to tedy geometrická místa bodů, jejíchž 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 průsečíky 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. Průsečíky Cassiniho oválu s osou $z = h$ jsou

$$ {}^{1}x_1 \equiv -a/2 - R = -\sqrt{e^2 + k^2} \qquad {}^{2}x_1 \equiv a/2 - R = \sqrt{e^2 - k^2} $$
$$ {}^{1}x_2 \equiv -a/2 + R = -\sqrt{e^2 - k^2} \qquad {}^{2}x_2 \equiv a/2 + R = \sqrt{e^2 + k^2} $$

a odtud se vypočítá

$$ e = \sqrt{\frac{a^2}{4} + R^2}, \tag{4.9} $$
$$ k^2 = a\,R. \tag{4.10} $$

Dosazením okrajových podmínek v bodě $[0;\ r]$, tj. vrchol hemisférické kapky polymerního roztoku, a na povrchu kruhových vodičů do (4.8)

$$ \varphi_1 \equiv \varphi([0;\ r]) = \frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln u^2 + C_2, $$
$$ \varphi_2 \equiv \varphi\left(\begin{smallmatrix}\text{povrch}\\ \text{vodičů}\end{smallmatrix}\right) = \frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln k^2 + C_2, $$

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

$$ q_\tau = \frac{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\,(\varphi_1 - \varphi_2)}{\ln u^2/k^2} \tag{4.11} $$

a integrační konstantu

$$ C_2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \ln(u^2 k^2) - \varphi_1 - \varphi_2\right). \tag{4.12} $$

Při vyšetřování intenzity $\boldsymbol{E}$ 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. [28, str. 90]). Intenzita elektrického pole vně vodičů se určí jako

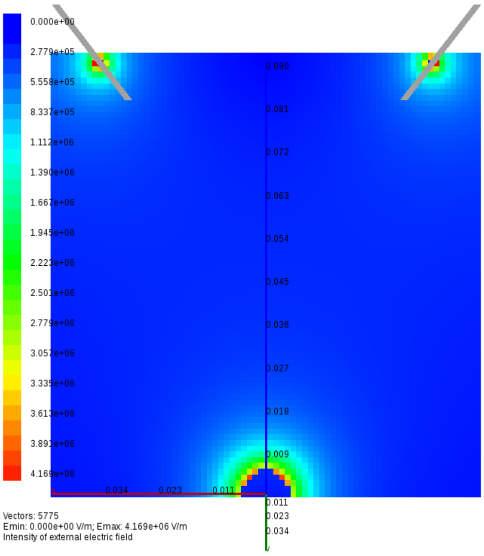
$$ \boldsymbol{E} = -\nabla\varphi. $$

Parciálním derivováním (4.8) se dostane

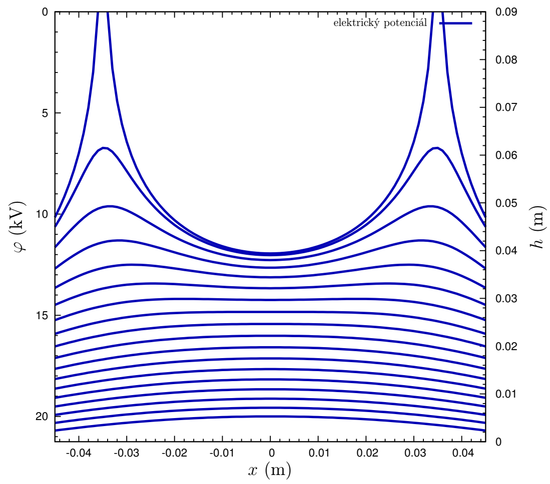
$$ \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \left[\frac{x + e}{(x + e)^2 + (z - h)^2} + \frac{x - e}{(x - e)^2 + (z - h)^2}\right], $$
$$ \frac{\partial\varphi}{\partial z} = \frac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \left[\frac{z - h}{(x + e)^2 + (z - h)^2} + \frac{z - h}{(x - e)^2 + (z - h)^2}\right]. $$

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

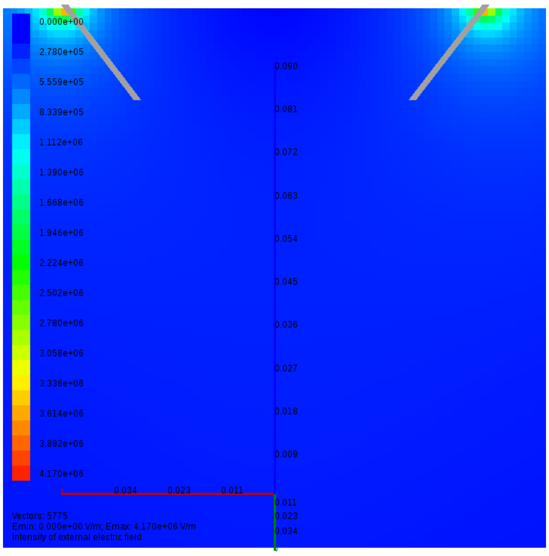
$$ \boldsymbol{E}_1 = \begin{cases} |\boldsymbol{r}_i - {}^{1}\boldsymbol{r}'| < R : \{0;\ 0;\ 0\}^\mathrm{T}, \\ |\boldsymbol{r}_i - {}^{1}\boldsymbol{r}'| \geq R : -\dfrac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \left\{\dfrac{x_i + e}{(x_i + e)^2 + (z_i - h)^2};\ 0;\ \dfrac{z_i - h}{(x_i + e)^2 + (z_i - h)^2}\right\}^\mathrm{T}, \end{cases} $$



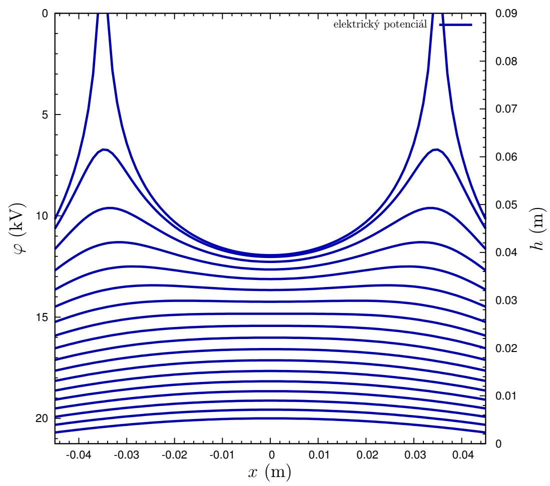
(a) velikost intenzity pole v rovině (0; y; z)



(b) řez (0; y; z) ekvipotenciálními plochami



(c) velikost intenzity pole v rovině (0; 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 $\varphi_1 = 20\,\mathrm{kV}$, potenciál speciálního kolektoru $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 90\,\mathrm{mm}$, poloměr kapiláry $r = 5\,\mathrm{mm}$ a průměr drátu $D = 2\,\mathrm{mm}$. Výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého počítačového programu.

$$\boldsymbol{E}_2 = \begin{cases} |\boldsymbol{r}_i - {}^2\boldsymbol{r}'| < R : \{0;\ 0;\ 0\}^{\mathrm{T}}, \\ |\boldsymbol{r}_i - {}^2\boldsymbol{r}'| \geq R : -\dfrac{q_\tau}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}} \left\{ \dfrac{x_i - e}{(x_i - e)^2 + (z_i - h)^2};\ 0;\ \dfrac{z_i - h}{(x_i - e)^2 + (z_i - h)^2} \right\}^{\mathrm{T}}, \end{cases}$$

Intenzita elektrického pole rovnoměrně nabité hemisférické kapky je definována

$$\boldsymbol{E}_3 = \begin{cases} |\boldsymbol{r}_i| < r : \dfrac{q_\varrho}{3\,\varepsilon_0\,\bar{\varepsilon}_{\mathrm{r}}}\,\boldsymbol{r}_i, \\ |\boldsymbol{r}_i| \geq r : \dfrac{q_\varrho\,r^3}{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}}\,\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}_i|^2}\,\dfrac{\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_i|}. \end{cases}$$

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

$$q_\varrho = \frac{3\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}\,\varphi_1}{r^2}. \tag{4.14}$$

Celková intenzita $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole je dána vektorovým součtem elektrostatických polí vodičů a rovnoměrně nabité hemisférické kapky

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2 + \boldsymbol{E}_3. \tag{4.15}$$

Autor si je vědom skutečnosti, že superpozicí elektrického pole hemisférické kapky s elektrickým polem válcových vodičů dojde k přerozdělení náboje a okrajová podmínka konstantního potenciálu φ na povrchu drátů bude porušena. Tento prohřešek proti fyzikální korektnosti je z hlediska modelu menší, než kdyby se vliv kapky polymerního roztoku vůbec neuvazoval.

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

4.2 Síly působící na elektricky nabitou trysku

V následujících čl. 4.2.1 až čl. 4.2.5 budou detailněji popsány síly, které působící na elektricky nabitou kapalinovou trysku. Jejich výčet jistě není kompletní a je otázkou dalšího zpřesňování matematického modelu.

4.2.1 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 náboji 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 [28]. Elektrostatická odpuzující síla $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}i}$ působící na i-tý nabitý hmotný bod je tedy

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}i} = \frac{q_i}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_{\mathrm{r}}} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{q_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^2}\,\frac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}, \tag{4.16}$$

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

4.2.2 Síla viskoelastická

Normálové napětí $\sigma_{i-1,i}$ působící v ($i-1$)-ním[4.1)] a $\sigma_{i,i+1}$ působící v i-tém[4.2)] elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky je zobecněním konstitutivní rovnice (3.5) a použitím vztahů [viz (B.2), (B.4)] určeno

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i-1,i}}{\mathrm{d}t} = \frac{\eta}{\tau}\,\frac{(\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i)\cdot(\boldsymbol{v}_{i-1} - \boldsymbol{v}_i)}{l^2_{i-1,i}} - \frac{\sigma_{i-1,i}}{\tau}, \tag{4.17a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i,i+1}}{\mathrm{d}t} = \frac{\eta}{\tau}\,\frac{(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{i+1})\cdot(\boldsymbol{v}_{i} - \boldsymbol{v}_{i+1})}{l^2_{i,i+1}} - \frac{\sigma_{i,i+1}}{\tau}, \tag{4.17b}$$

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

Viskoelastická síla, zohledňující tzv. viskózní odpor zvlákňovaného polymerního roztoku, je určena součinem příčného průřezu S ideální přímočaré zelektrizované trysky a normálového napětí σ vypočteného z Maxwellova reologického modelu. Viskoelastická síla $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{M}i-1,i}$ působící na $(i-1)$-ní a $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{M}i,i+1}$ působící na i-tý element ideální přímočaré zelektrizované trysky je určena vztahy

$$\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{M}i-1,i} = S_{i-1,i}\,\sigma_{i-1,i}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i|} = \frac{\pi}{4}\,d^2_{i-1,i}\,\sigma_{i-1,i}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i|}, \tag{4.18a}$$

$$\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{M}i,i+1} = S_{i,i+1}\,\sigma_{i,i+1}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i|} = \frac{\pi}{4}\,d^2_{i,i+1}\,\sigma_{i,i+1}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i|}. \tag{4.18b}$$

4.1) Segment $(i-1, i)$, tzn. mezi i-tým a $(i-1)$-ním nabitým hmotným bodem.

4.2) Segment $(i, i+1)$, tzn. mezi i-tým a $(i+1)$-ním nabitým hmotným bodem.

Výsledná viskoelastická síla $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}i}$ působící na i-tý hmotný bod s nábojem je dána vektorovým součtem

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}i} &= \boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{M}i-1,i} + \boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{M}i,i+1} = \\ &= \frac{\pi}{4}\left(d^2_{i-1,i}\,\sigma_{i-1,i}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i|} + d^2_{i,i+1}\,\sigma_{i,i+1}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|}\right).\end{aligned}\tag{4.19}$$

Okamžité průměry $d_{i-1,i}$ a $d_{i+1,i}$ elementů ideální přímočaré zelektrizované trysky lze vypočítat z rovnosti objemů

$$V_{i-1,i} = V_0\,\Lambda_{i-1,i},\tag{4.20a}$$

$$V_{i,i+1} = V_0\,\Lambda_{i,i+1},\tag{4.20b}$$

kde $V_{i-1,i}$, $V_{i,i+1}$ je okamžitý objem $(i-1)$-ního, resp. i-tého elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky, $\Lambda_{i-1,i} \in \langle 1;\,0)$, $\Lambda_{i,i+1} \in \langle 1;\,0)$ je koeficient úbytku objemu $(i-1)$-ního, resp. i-tého elementu ideální přímočaré elektricky nabité trysky v důsledku odstraňování rozpouštědla a V_0 je počáteční objem diskrétního válcového elementu kapalinové trysky (viz str. 45, odst. 5.2). Tedy

$$d^2_{i-1,i} = d_0^2\,l_0\,\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}},\tag{4.21a}$$

$$d^2_{i,i+1} = d_0^2\,l_0\,\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}},\tag{4.21b}$$

kde d_0, l_0 je počáteční průměr a počáteční délka diskrétního válcového elementu kapalinové trysky (viz str. 45, odst. 5.2). Následnou substitucí vztahů (4.21) do (4.19) se dostane

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}i} &= \boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{M}i-1,i} + \boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{M}i,i+1} = \\ &= \frac{\pi\,d_0^2\,l_0}{4}\left(\frac{\Lambda_{i-1,i}\,\sigma_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i|} + \frac{\Lambda_{i,i+1}\,\sigma_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|}\right).\end{aligned}\tag{4.22}$$

4.2.3 Síla elektrostatického pole

Síla vnějšího elektrostatického pole, která je vyvolaná rozdílem elektrických potenciálů, φ_1 a φ_2, mezi kapilárou a uzemněným kolektorem. Tato elektrická síla $\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}i}$, která působí na libovolný náboj vložený do vnějšího elektrostatického pole, je dána součinem náboje q_i a intenzity $\boldsymbol{E}$ elektrického pole

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}i} = q_i\,\boldsymbol{E},\tag{4.23}$$

kde $\boldsymbol{E}$ je intenzita vnějšího elektrostatického pole.

4.2.4 Síla povrchového napětí

Kapaliny se chovají tak, jako by jejich povrch byl pokryt tenkou pružnou vrstvou, jež se snaží stáhnout povrch kapaliny, aby měl co nejmenší plošný obsah [12]. Dloužení polymerní trysky, ke kterému dochází během elektrostatického zvlákňování vede k nárůstu jejího plošného obsahu a tím ke zvětšení povrchové energie. Na str. 18, odst. 3.4, bylo uvedeno tvrzení ve smyslu: povrchové napětí γ má snahu obnovit přímočarý tvar elektricky nabité kapalinové trysky, který byl porušen v důsledku perturbace a následné bičující nestability, neboť omezuje vývoj příliš velkých křivostí $\mathcal{K}$. Názory jak důležitou roli hraje povrchové napětí γ při procesu elektrostatického zvlákňování, jsou v literatuře odlišné. Podle článku [24] je síla povrchového napětí obvykle zanedbatelná a podle jiného článku [29] je tomu naopak.

Síla způsobovaná povrchovým napětím $\boldsymbol{F}_{\mathrm{S}i}$, někdy také označována jako kapilární síla, působící na i-tý nabitý hmotný bod (viz obr. 4.6) je rovna vektorovému součtu

---

[4.2)] Poznámka pod čarou naznačuje výpočet křivosti $\mathcal{K}_i$ trysky v místě i-tého nabitého 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 $\boldsymbol{u}$ a $\boldsymbol{w}$ ležící v rovině Π, která těmito body prochází

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

Pomocí Gram–Schmidtova ortogonalizačního algoritmu se vytvoří ortogonální báze

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

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

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{\boldsymbol{f}_1}{|\boldsymbol{f}_1|}, \qquad \boldsymbol{e}_2 = \frac{\boldsymbol{f}_2}{|\boldsymbol{f}_2|}.$$

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

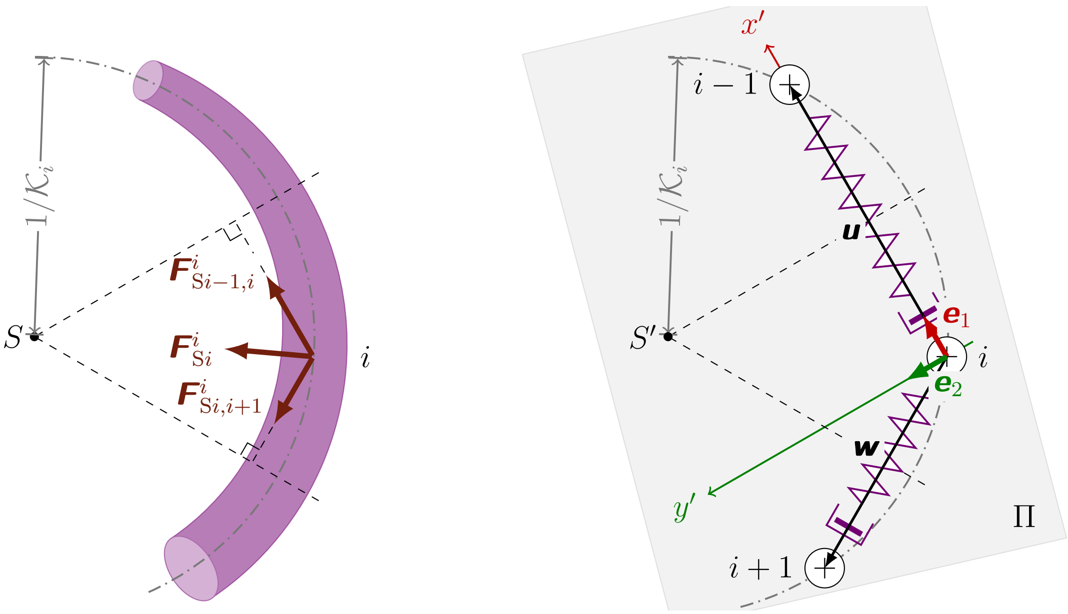
$$\begin{Bmatrix} x'_{i-1} \\ y'_{i-1} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}} \begin{Bmatrix} x_{i-1} \\ y_{i-1} \\ z_{i-1} \end{Bmatrix}, \qquad \begin{Bmatrix} x'_{i} \\ y'_{i} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}} \begin{Bmatrix} x_{i} \\ y_{i} \\ z_{i} \end{Bmatrix}, \qquad \begin{Bmatrix} x'_{i+1} \\ y'_{i+1} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}} \begin{Bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{Bmatrix}.$$

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

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



(a) segment kapalinová tryska

(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, $\boldsymbol{e}_1$ — jednotkový vektory souřadné osy x', $\boldsymbol{e}_2$ — jednotkový vektory souřadné osy y', $\boldsymbol{n}$ — normálový vektor kapalinové trysky, $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{w}$ — vektory určující rovinu Π, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{S}}$ — síla povrchového napětí.

sil $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{S}i-1,i}$ a $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{S}i,i+1}$, jejichž nositelky jsou ve směru $(i-1)$-ního a i-tého elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. Výslednice je tedy určena vztahem

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{S}i} = \boldsymbol{F}^i_{\mathrm{S}i-1,i} + \boldsymbol{F}^i_{\mathrm{S}i,i+1} = \gamma\,\pi\left(d_{i-1,i}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i|} + d_{i,i+1}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|}\right), \tag{4.24}$$

kde γ je povrchové napětí zvlákňovaného polymerního roztoku.

Okamžité průměry $d_{i-1,i}$ a $d_{i+1,i}$ elementů ideální přímočaré zelektrizované trysky jsou definovány vztahy (4.21). Jejich substitucí do (4.24) se dostane

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{S}i} = \gamma\,\pi\,d_0\,\sqrt{l_0}\left(\sqrt{\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1}-\boldsymbol{r}_i|} + \sqrt{\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|}\right). \tag{4.25}$$

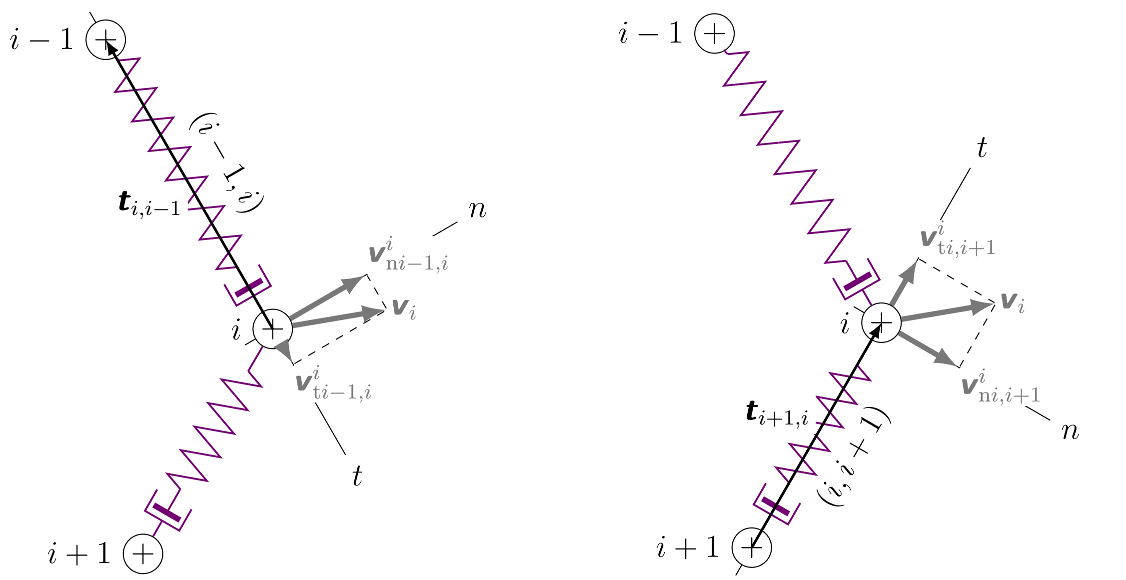
4.2.5 Síla odporu prostředí

Elektrostatickým zvlákňováním se vyrábějí polymerní vlákna submikronových rozměrů. Mezi vlastnosti, jimiž se takto připravená vlákna vyznačují, patří jejich velký měrný povrch. Proto hrají při tomto procesu důležitou roli plošné síly, na rozdíl od sil objemových (tíhová síla). Z tohoto důvodu je nezbytné zahrnout do matematického modelu také vliv aerodynamického odporu prostředí. Síla zahrnující odpor prostředí je obecně vyjádřena vztahem (viz [18, str. 530])

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{D}} = C_{\mathrm{D}}\, S\, \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, \boldsymbol{v}^2}{2},$$

kde C_{D} je koeficient aerodynamického odporu, S je charakteristická plocha a ϱ_{a} je měrná hmotnost vzduchu.

Celková odporová síla, působící proti pohybu elektricky nabité 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 $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{D}i-1,i}$ působící na $(i-1)$-ní a $\boldsymbol{F}^i_{\mathrm{D}i,i+1}$ působící na i-tý element



(a) segment mezi i-tým a $(i-1)$-ním nabitým hmotným bodem

(b) segment mezi i-tým a $(i+1)$-ním nabitým hmotným bodem

Obr. 4.7: Rozklad okamžité rychlosti i-tého nabitého hmotného bodu do osového a normálového směru elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. n — normála segmentu, t — tečna segmentu, $\boldsymbol{v}_i$ — okamžitá rychlost nabitého hmotného bodu trysky, $\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{t}i-1,i}$ — kolmá projekce okamžité rychlosti do tečny segmentu $(i-1, i)$, $\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{n}i-1,i}$ — kolmá projekce okamžité rychlosti do normály segmentu $(i-1, i)$, $\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{t}i,i+1}$ — kolmá projekce okamžité rychlosti do tečny segmentu $(i, i+1)$, $\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{n}i,i+1}$ — kolmá projekce okamžité rychlosti do normály segmentu $(i, i+1)$.

ideální přímočaré zelektrizované trysky je určena vztahy

$$\boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{D}i-1,i} = \boldsymbol{F}_{\mathrm{f}i-1,i} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}i-1,i} = C_{\mathrm{f}}\, S_{\mathrm{f}i-1,i}\, \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, \boldsymbol{v}^{i2}_{\mathrm{t}i-1,i}}{2} + C_{\mathrm{p}}\, S_{\mathrm{p}i-1,i}\, \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, \boldsymbol{v}^{i2}_{\mathrm{n}i-1,i}}{2}, \tag{4.26a}$$

$$\boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{D}i,i+1} = \boldsymbol{F}_{\mathrm{f}i,i+1} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}i,i+1} = C_{\mathrm{f}}\, S_{\mathrm{f}i,i+1}\, \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, \boldsymbol{v}^{i2}_{\mathrm{t}i,i+1}}{2} + C_{\mathrm{p}}\, S_{\mathrm{p}i,i+1}\, \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, \boldsymbol{v}^{i2}_{\mathrm{n}i,i+1}}{2}, \tag{4.26b}$$

kde C_{f} je koeficient třecího odporu, C_{p} je koeficient tlakového odporu, $S_{\mathrm{f}i-1,i}$, $S_{\mathrm{f}i,i+1}$ jsou plochy povrchu válcového elementu trysky, tedy

$$S_{\mathrm{f}i-1,i} = \pi\, d_{i-1,i}\, l_{i-1,i}, \tag{4.27a}$$

$$S_{\mathrm{f}i,i+1} = \pi\, d_{i,i+1}\, l_{i,i+1}, \tag{4.27b}$$

$S_{\mathrm{p}i-1,i}$, $S_{\mathrm{p}i,i+1}$ jsou maximální příčné průřezy elementu trysky, tedy

$$S_{\mathrm{p}i-1,i} = d_{i-1,i}\, l_{i-1,i}, \tag{4.28a}$$

$$S_{\mathrm{p}i,i+1} = d_{i,i+1}\, l_{i,i+1} \tag{4.28b}$$

a $\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i-1,i}$, $\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i,i+1}$, $\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i-1,i}$, $\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i,i+1}$ jsou kolmé projekce okamžité rychlosti i-tého nabitého hmotného bodu do osového, resp. normálového směru příslušného elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky (viz obr. 4.7). Tento rozklad rychlosti $\boldsymbol{v}_i$ je korektní za předpokladu, že jsou si rychlosti hmotných bodů i a $i-1$, resp. i a $i+1$, blízké. Pohyb elementu trysky je totiž určen dvěma nabitými body.

Podle [43] je doporučeno volit koeficient třecího odporu $C_{\mathrm{f}} = f(\mathrm{Re}_l)$ a koeficient tlakového odporu $C_{\mathrm{p}} = f(\mathrm{Re}_d)$, kde Re_l a Re_d jsou Reynoldsova čísla definovaná

$$\mathrm{Re}_l = \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, v^{i}_{\mathrm{t}i-1,i}\, l_{i-1,i}}{\eta_{\mathrm{a}}}, \quad \text{resp.} \quad \mathrm{Re}_l = \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, v^{i}_{\mathrm{t}i,i+1}\, l_{i,i+1}}{\eta_{\mathrm{a}}}, \tag{4.29}$$

$$\mathrm{Re}_d = \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, v^{i}_{\mathrm{n}i-1,i}\, d_{i-1,i}}{\eta_{\mathrm{a}}}, \quad \text{resp.} \quad \mathrm{Re}_d = \frac{\varrho_{\mathrm{a}}\, v^{i}_{\mathrm{n}i,i+1}\, d_{i,i+1}}{\eta_{\mathrm{a}}}, \tag{4.30}$$

kde $v^{i}_{\mathrm{t}i-1,i}$, $v^{i}_{\mathrm{t}i,i+1}$, $v^{i}_{\mathrm{n}i-1,i}$, $v^{i}_{\mathrm{n}i,i+1}$ jsou velikosti kolmých projekcí okamžitých rychlostí i-tého nabitého hmotného bodu v osovém, resp. normálového směru příslušného elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky (viz obr. 4.7) a η_{a} je dynamická viskozita vzduchu. Za předpokladu laminárního proudění ve zvlákňovacím prostoru platí [18, viz str. 538] pro koeficient třecího odporu vztah

$$C_{\mathrm{f}} = \frac{24}{\mathrm{Re}_l} \tag{4.31}$$

a pro koeficient tlakového odporu vztah

$$C_{\mathrm{p}} = \frac{24}{\mathrm{Re}_d}. \tag{4.32}$$

Výsledná síla odporu vzduchu $\boldsymbol{F}_{\mathrm{D}i}$ působící na i-tý nabitý hmotný bod je po substituci vztahů (4.27)–(4.32) a (4.21) do (4.26) určena vektorovým součtem

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_{\mathrm{D}i} &= \frac{1}{2}\,(\boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{D}i-1,i} + \boldsymbol{F}^{i}_{\mathrm{D}i,i+1}) = \\ &= 6\,\eta_{\mathrm{a}}\,\pi\,d_0\,\sqrt{l_0}\left(\sqrt{\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}}\,\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i-1,i} + \sqrt{\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}}\,\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i,i+1}\right) \\ &\quad 6\,\eta_{\mathrm{a}}\,(l_{i-1,i}\,\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i-1,i} + l_{i,i+1}\,\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i,i+1}).\end{aligned} \tag{4.32}$$

Rozklad okamžité rychlosti, $\boldsymbol{v}_i$, i-tého nabitého hmotného bodu do směru tečny a normály k elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky (viz obr. 4.7) je určen vztahy

$$\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i-1,i} = \frac{\boldsymbol{v}_i \cdot \boldsymbol{t}_{i,i-1}}{\boldsymbol{t}_{i,i-1} \cdot \boldsymbol{t}_{i,i-1}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i|} \qquad \boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i-1,i} = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i-1,i} \tag{4.33a}$$

$$\boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i,i+1} = \frac{\boldsymbol{v}_i \cdot \boldsymbol{t}_{i+1,i}}{\boldsymbol{t}_{i+1,i} \cdot \boldsymbol{t}_{i+1,i}}\,\frac{\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{i+1}}{|\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{i+1}|} \qquad \boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{n}i,i+1} = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}^{i}_{\mathrm{t}i,i+1} \tag{4.33b}$$

kde $\boldsymbol{t}_{i,i-1} = \boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i$ a $\boldsymbol{t}_{i+1,i} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{i+1}$ jsou tečné vektory.

4.3 Pohybové 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 $m_i = \frac{1}{2}\,\varrho\,(V_{i-1,i} + V_{i,i+1})$, kde ϱ je měrná hmotnost polymerního roztoku, a okamžitou rychlost $\boldsymbol{v}_i$. Jeho hybnost je v čase t dána vztahem

$$\boldsymbol{p}^{t}_{i} = m_i\,\boldsymbol{v}_i. \tag{4.34}$$

Dále nechť se v průběhu času dt z elektricky nabité kapalinové trysky odstraní rozpouštědlo o hmotnosti $\mathrm{d}m_i = \frac{1}{2}\,\varrho_{\mathrm{s}}\,(\mathrm{d}V_{i-1,i} + \mathrm{d}V_{i,i+1}) < 0$, kde ϱ_{s} je měrná hmotnost rozpouštědla. V důsledku toho dojde ke zmenšení náboje q_i i hmotnosti nabitého hmotného bodu na $m_i - |\mathrm{d}m_i|$ a zvětšení jeho rychlosti na $\boldsymbol{v}_i + \mathrm{d}\boldsymbol{v}_i$. V čase $t + \mathrm{d}t$ bude mít hmotný bod i s nábojem hybnost

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}^{t+\mathrm{d}t}_{i} &= (m_i - |\mathrm{d}m_i|)(\boldsymbol{v}_i + \mathrm{d}\boldsymbol{v}_i), \\ &= m_i\,\boldsymbol{v}_i + m_i\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i.\end{aligned} \tag{4.35}$$

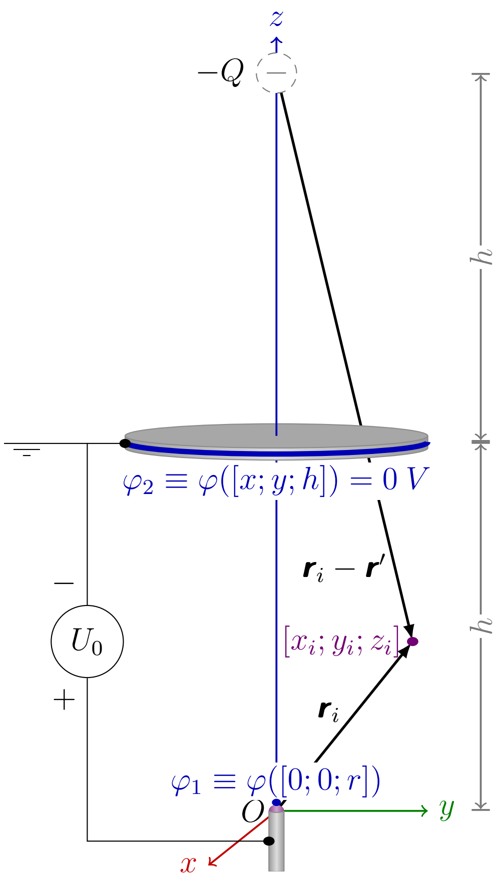
Za dobu dt tedy dojde ke změně hybnosti

$$\mathrm{d}\boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{p}^{t+\mathrm{d}t}_{i} - \boldsymbol{p}^{t}_{i}$$

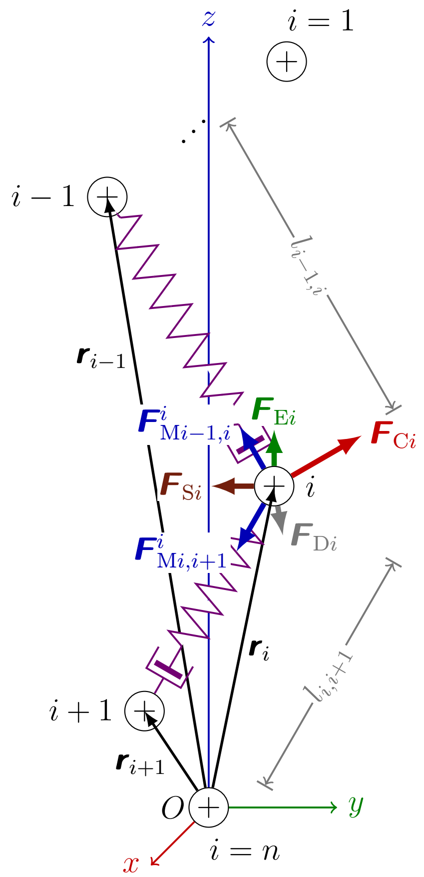
a po substituci vztahů (4.34) a (4.35) se dostane

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\boldsymbol{p}_i &= m_i\,\boldsymbol{v}_i + m_i\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i - m_i\,\boldsymbol{v}_i, \\ &= m_i\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\boldsymbol{v}_i - |\mathrm{d}m_i|\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i. \end{aligned} \tag{4.36}$$

Zanedbáním nekonečně malé veličiny druhého řádu $|\mathrm{d}m_i|\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i$ je podle druhého Newtonova pohybového zákona, časová změna hybnosti nabitého hmotného bodu



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, $\boldsymbol{r}_i$ — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, $\boldsymbol{r}'$ — polohový vektor středu fiktivního náboje.



Obr. 4.9: Silový rozbor na i-tém nabitém hmotném bodě zobecněného modelu elektricky nabité trysky. l — okamžitá délka, $\boldsymbol{r}$ — polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}}$ — elektrostatická síla, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{D}}$ — odporová síla vzduchu, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}}$ — síla vnějšího elektrostatického pole, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}}$ — viskoelastická síla, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{S}}$ — síla povrchového napětí.

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

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_i}{\mathrm{d}t} \equiv m_i \, \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} - \left|\frac{\mathrm{d}m_i}{\mathrm{d}t}\right| \, \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{F}_{\mathrm{E}i} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{C}i} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{M}i} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{S}i} - \boldsymbol{F}_{\mathrm{D}i}.$$

Po úpravě, převedení na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu a substituci vztahů (4.23), (4.16), (4.22), (4.25) a (4.32), se dostane pohybová rovnice i-tého nabitého hmotného bodu ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}_i, \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
m_i \, \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = {} & \boldsymbol{v}_i \, \left|\frac{\mathrm{d}m_i}{\mathrm{d}t}\right| \\
& + q_i \, \boldsymbol{E} \\
& + \frac{q_i}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{q_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^2} \, \frac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \\
& + \frac{\pi\, d_0^2 \, l_0}{4} \left(\frac{\Lambda_{i-1,i}\,\sigma_{i-1,i}}{l_{i-1,i}} \, \frac{\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i|} + \frac{\Lambda_{i,i+1}\,\sigma_{i,i+1}}{l_{i,i+1}} \, \frac{\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i|} \right) \\
& + \gamma\,\pi\,d_0\,\sqrt{l_0} \left(\sqrt{\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}} \, \frac{\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i|} + \sqrt{\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}} \, \frac{\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i|} \right) \\
& - 6\,\eta_\mathrm{a}\,\pi\,d_0\,\sqrt{l_0} \left(\sqrt{\frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}} \, \boldsymbol{v}^i_{\mathrm{t}i-1,i} + \sqrt{\frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}} \, \boldsymbol{v}^i_{\mathrm{t}i,i+1} \right) \\
& - 6\,\eta_\mathrm{a}\,(l_{i-1,i}\,\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{n}i-1,i} + l_{i,i+1}\,\boldsymbol{v}^i_{\mathrm{n}i,i+1}).
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Konstitutivní rovnice (4.17b) Maxwellova reologického modelu, definiční kinematická rovnice (4.37) a pohybová rovnice (4.38) tvoří soustavu obyčejných diferenciálních, která popisuje chování zelektrizované kapalinové trysky v trojrozměrné kartézské souřadné soustavě. Přibližné řešení se bude hledat numerickou metodou (viz str. 48, čl. 5.4.2).

4.4 Počáteční perturbace

Časově proměnlivá porucha v příčném směru, tzv. perturbace, způsobující otáčivý pohyb zelektrizované kapalinové trysky po kuželové spirále [29], vzniká v důsledku nestability povrchu kapaliny, jež je způsobená tepelnými fluktuacemi, [15] a vibrací v laboratoři [25]. 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 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 [12]. Na základě zde uvedeného lze okamžitou výchylku posledního nabitého hmotného bodu vyjádřit vztahy (viz [12, str. 245])

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\delta}_n &= A\ \sin(\omega\, t)\, \boldsymbol{i} + A\ \sin(\omega\, t + \tfrac{3\pi}{2})\, \boldsymbol{j} \\ &= A\ \sin(\omega\, t)\, \boldsymbol{i} + A\ \cos(\omega\, t)\, \boldsymbol{j},\end{aligned} \tag{4.39}$$

kde A je amplituda perturbace, 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 (4.39) a za argument goniometrické funkce dosadit pro levotočivý kruhový kmit $k\, z_i - \omega\, t$, kde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ se nazývá úhlový vlnočet [12] nebo také vlnové číslo. Po substituci se dostane (viz [12, str. 269])

$$\boldsymbol{\delta}_i = A\ \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} z_i - \omega\, t\right) \boldsymbol{i} + A\ \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} z_i - \omega\, t\right) \boldsymbol{j}, \tag{4.40}$$

kde λ je vlnová délka perturbace.

Část III

NUMERICKÝ MODEL

Kapitola 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. Obyčejné diferenciální rovnice popisující element ideální přímočaré zelektrizované trysky nejsou vyjímkou, 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 normálového napětí σ, polohového vektoru $\boldsymbol{r}$ a okamžité rychlosti $\boldsymbol{v}$ lze aproximovat pomocí dopředných diferenčních schémat

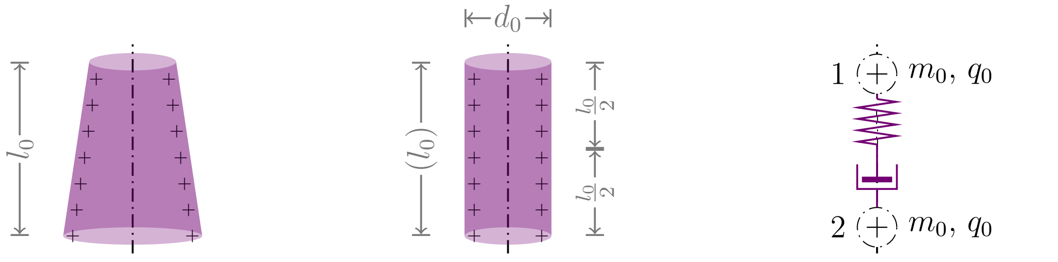
$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma_{i,i+1}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\sigma_i^{t+\Delta t} - \sigma_i^t}{\Delta t}, \tag{5.1a}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\boldsymbol{r}_i^{t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_i^t}{\Delta t}, \qquad \left.\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t+\Delta t} \approx \frac{\boldsymbol{v}_i^{t+\Delta t} - \boldsymbol{v}_i^t}{\Delta t}, \tag{5.1b}$$

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

5.2 Diskretizace kapalinové trysky

Spojitá elektricky nabitá kapalinová tryska [viz obr. 5.1(a)] je diskretizována rozdělením na válcové elementy [viz obr. 5.1(b)] s délkou l_0 a průměrem d_0. Tyto diskrétní válcové elementy 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)]. Hmotné body jsou místa, kde se jednak počítají veškeré působící síly a zároveň plní funkci kloubu ve viskoelastickém řetězci. Takto navržená diskretizace má nevýhodu, že kloub neumožňuje přenášet ohybový moment.



(a) zužující se tryska (b) diskrétní válcový element (c) nabité hmotné body

Obr. 5.1: Diskretizace spojité kapalinové trysky.

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

$$\tfrac{1}{4}\,\pi\,d_0^2\,v_0 = Q_V \tag{5.2}$$

a elektrického náboje

$$\tfrac{1}{4}\,\pi\,d_0^2\,\kappa\,E_z + \pi\,d_0\,v_0\,q_\sigma = I_0, \tag{5.3}$$

kde Q_V je objemový průtok polymerního roztoku kapilárou, κ je měrná elektrická vodivost polymerního roztoku, E_z je z-složka intenzity $\boldsymbol{E}$ elektrického pole, q_σ je plošná hustota náboje kapalinové trysky a I_0 je elektrický proud protékající kapalinovou tryskou (viz např. [6]). Ze zákonů zachování (5.2) a (5.3) lze vyjádřit plošnou hustotu elektrického náboje kapalinové trysky

$$q_\sigma = \frac{4\,d_0\,I_0 - \kappa\,\pi\,d_0^3\,E_z}{16\,Q_V}. \tag{5.4}$$

Počáteční průměr d_0 a délka l_0 diskrétního válcového elementu elektricky nabité kapalinové trysky jsou, stejně jako v literatuře [25], voleny $d_0 = 300\,\mu$m a $l_0 = h/50\,000$, kde h je vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem. Z rozměrů,

d_0 a l_0, diskrétního válcového elementu trysky, měrné hmotnosti ϱ a plošné hustoty náboje q_σ kapalinové trysky jsou vypočítány počáteční hmotnost

$$m_0 = \tfrac{1}{8}\,\pi\,\varrho\,d_0^2\,l_0 \tag{5.5}$$

a náboj

$$q_0 = \tfrac{1}{2}\,\pi\,q_\sigma\,d_0\,l_0, \tag{5.6}$$

které jsou přiřazeny hmotným bodům 1 a 2.

5.3 Bezrozměrný tvar rovnic

Při konkrétním numerickém řešení je často vhodné provést výpočet v bezrozměrném tvaru rovnic [30]. Výhoda tohoto přístupu je především v numerické stabilitě použitých algoritmů, protože nedochází v takové míře ke vzniku a propagaci zaokrouhlovacích chyb nebo podtečení[5.1)] datového typu v důsledku počítání s velmi malými čísly. Nejdříve je potřeba definovat následující bezrozměrné veličiny[5.2)]:

- měřítkový faktor pro normálové napětí v elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky
$$\sigma^*_{i,i+1} = \frac{\sigma_{i,i+1}}{E}, \tag{5.7}$$
- měřítkový faktor pro průměr ideální přímočaré zelektrizované trysky
$$d^*_{i,i+1} = \frac{d_{i,i+1}}{d_0}, \tag{5.8}$$
- měřítkový faktor pro složky polohového vektoru hmotného bodu s nábojem
$$x^*_i = \frac{x_i}{L}, \qquad y^*_i = \frac{y_i}{L}, \qquad z^*_i = \frac{z_i}{L}, \tag{5.9}$$
- měřítkový faktor pro hmotnost
$$m^*_i = \frac{m_i}{m_0}, \tag{5.10}$$
- měřítkový faktor pro náboj
$$q^*_i = \frac{q_i}{q_0}, \tag{5.11}$$
- měřítkový faktor pro čas
$$t^* = \frac{t}{\tau}. \tag{5.12}$$

[5.1)] 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. [1]).
[5.2)] Symbolem * budou v celé práci označeny bezrozměrné veličiny.

Vyjádří-li ze vztahů (5.7)–(5.12) proměnné bez symbolu *, potom se po substituci do původních rovnic (4.17b), (4.37) a (4.38) dostane soustava obyčejných diferenciálních rovnic přeškálovaná do bezrozměrných veličin

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^*_{i,i+1}}{\mathrm{d}t^*} = \frac{(\boldsymbol{r}^*_i - \boldsymbol{r}^*_{i+1}) \cdot (\boldsymbol{v}^*_i - \boldsymbol{v}^*_{i+1})}{l^{*2}_{i,i+1}} - \sigma^*_i, \tag{5.13}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^*_i}{\mathrm{d}t^*} = \boldsymbol{v}^*_i, \tag{5.14}$$

$$\begin{aligned} m^*_i \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}^*_i}{\mathrm{d}t^*} = {} & \frac{m_0\, L}{\tau^2}\, \boldsymbol{v}^*_i \left|\frac{\mathrm{d}m^*_i}{\mathrm{d}t^*}\right| \\ & + C^*_{\mathrm{E}}\, q^*_i\, \boldsymbol{E}^* \\ & + C^*_{\mathrm{C}}\, q^*_i \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{q^*_j}{|\boldsymbol{r}^*_i - \boldsymbol{r}^*_j|^2}\, \frac{\boldsymbol{r}^*_i - \boldsymbol{r}^*_j}{|\boldsymbol{r}^*_i - \boldsymbol{r}^*_j|} \\ & + C^*_{\mathrm{M}} \left(d^{*2}_{i-1,i}\, \sigma^*_{i-1,i}\, \frac{\boldsymbol{r}^*_{i-1} - \boldsymbol{r}^*_i}{|\boldsymbol{r}^*_{i-1} - \boldsymbol{r}^*_i|} + d^{*2}_{i,i+1}\, \sigma^*_{i,i+1}\, \frac{\boldsymbol{r}^*_{i+1} - \boldsymbol{r}^*_i}{|\boldsymbol{r}^*_{i+1} - \boldsymbol{r}^*_i|} \right) \\ & + C^*_{\mathrm{S}} \left(d^*_{i-1,i}\, \frac{\boldsymbol{r}^*_{i-1} - \boldsymbol{r}^*_i}{|\boldsymbol{r}^*_{i-1} - \boldsymbol{r}^*_i|} + d^*_{i,i+1}\, \frac{\boldsymbol{r}^*_{i+1} - \boldsymbol{r}^*_i}{|\boldsymbol{r}^*_{i+1} - \boldsymbol{r}^*_i|} \right) \\ & + C^*_{\mathrm{Df}}\, (d^*_{i-1,i}\, \boldsymbol{v}^{*i}_{\mathrm{t}i-1,i} + d^*_{i,i+1}\, \boldsymbol{v}^{*i}_{\mathrm{t}i,i+1}) + C^*_{\mathrm{Dp}}\, (l^*_{i-1,i}\, \boldsymbol{v}^{*i}_{\mathrm{n}i-1,i} + l^*_{i,i+1}\, \boldsymbol{v}^{*i}_{\mathrm{n}i,i+1}). \end{aligned} \tag{5.15}$$

Bezrozměrné konstanty jsou definovány následujícími vztahy

$$C^*_{\mathrm{E}} = \frac{\tau^2\, q_0}{m_0\, L}, \tag{5.16a}$$

$$C^*_{\mathrm{C}} = \frac{\tau^2\, q_0^2}{4\, \pi\, \varepsilon_0\, \varepsilon_{\mathrm{r}}\, m_0\, L^3}, \tag{5.16b}$$

$$C^*_{\mathrm{M}} = \frac{\tau\, \eta\, \pi\, d_0^2}{4\, m_0\, L}, \tag{5.16c}$$

$$C^*_{\mathrm{S}} = \frac{\tau^2\, \gamma\, \pi\, d_0}{m_0\, L}, \tag{5.16d}$$

$$C^*_{\mathrm{Df}} = -\frac{6\, \tau\, \eta_{\mathrm{a}}\, \pi\, d_0}{m_0}, \tag{5.16e}$$

$$C^*_{\mathrm{Dp}} = -\frac{6\, \tau\, \eta_{\mathrm{a}}\, L}{m_0}, \tag{5.16f}$$

kde $L = \sqrt{(\tau\, q_0^2)/(\varepsilon_0\, \varepsilon_{\mathrm{r}}\, \eta\, \pi^2\, d_0^2)}$ je délkový měřítkový faktor[5.3)]. Na závěr je pro účely ukončovacích podmínek potřeba definovat bezrozměrnou diskretizační délku i vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem

$$l_0^* = \frac{l_0}{L}, \qquad h^* = \frac{h}{L}. \tag{5.16g}$$

[5.3)] Délka vypočtená z rovnosti koeficientů C^*_{C} a C^*_{M} [viz str. 20, obr. 3.2(b)].

5.4 Diskretizovaný tvar rovnic

V odst. 5.3 bylo uvedeno přeškálování obyčejných diferenciálních rovnic do bezrozměrných veličin. Tento odstavec se bude zabývat diskretizací bezrozměrných rovnic (5.13), (5.14) a (5.15). Nejdříve je však potřeba povést diskretizaci úbytku hmotnosti a náboje, ke kterému dochází v důsledku odstraňování rozpouštědla z trysky.

Za předpokladu malého časového kroku $\varDelta\, t$ je přípustné člen $\boldsymbol{v}_i^* \, |\mathrm{d}m_i^*/\mathrm{d}t^*|$, jenž se vyskytuje v rovnici (5.15), nahradit skokovou změnou hmotnosti a tím i náboje přiřazené hmotným bodům. Na začátku časového kroku $\varDelta\, t$ se pomocí vztahů

$$m_i^* = \varLambda_{i-1,i} + \varLambda_{i,i+1}, \tag{5.17}$$

$$q_i^* = \varLambda_{i-1,i} + \varLambda_{i,i+1}, \tag{5.18}$$

vypočítá pro každý hmotný bod i nová hodnota hmotnosti m_i^* a náboje q_i^*. Koeficienty úbytku objemu $\varLambda_{i-1,i}$ a $\varLambda_{i,i+1}$ jsou nastaveny na hodnotu jedna, neboť jejich konkrétní výpočet je otázkou dalšího výzkumu a přesahuje rámec této práce.

5.4.1 Explicitní Eulerova metoda

Eulerova metoda je nejjednodušší jednokroková metoda řešení počátečních úloh pro obyčejné diferenciální rovnice [22]. Její nesporná výhoda spočívá v jednoduché implementaci výpočetního algoritmu. Na druhou stranu je potřeba pro stabilitu a dostatečnou přesnost volit dostatečně malý časový krok $\varDelta\, t$.

5.4.2 Metoda prediktor–korektor

Metoda prediktor–korektor patří do skupiny vícekrokových metod na řešení počátečních úloh pro obyčejné diferenciální rovnice [22]. 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. [22, str. 162]). Touto volbou se dosáhne největší efektivity výpočetního algoritmu, neboť se v každém kroku počítají pouze dvě funkční hodnoty konstitutivní a pohybové rovnice.

Postačující podmínka pro konvergenci během iteračního procesu je s použitím [22, str. 161] $\varDelta\, t < 2/M$, kde M je Lipschitzova konstanta (viz str. 21, odst. 3.6).

Prediktor (P) využitím dopředných diferenčních schémat (5.1a), (5.1b) se dostanou rekurentní vztahy pro explicitní Eulerovu metodu

$$
\begin{aligned}
\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t} &= \sigma_{i,i+1}^{*t} + \Delta\, t^* \left[\frac{(\boldsymbol{r}_i^{*t} - \boldsymbol{r}_{i+1}^{*t}) \cdot (\boldsymbol{v}_i^{*t} - \boldsymbol{v}_{i+1}^{*t})}{l_{i,i+1}^{*2}} - \sigma_{i,i+1}^{*t} \right], \\
\boldsymbol{a}_i^{*t} &= \frac{C_{\mathrm{E}}^*\, q_i^*}{m_i^*}\, \boldsymbol{E}^* \\
&+ \frac{C_{\mathrm{C}}^*\, q_i^*}{m_i^*} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{q_j^* (\boldsymbol{r}_i^{*t} - \boldsymbol{r}_j^{*t})}{|\boldsymbol{r}_i^{*t} - \boldsymbol{r}_j^{*t}|^3} \\
&+ \frac{C_{\mathrm{M}}^*}{m_i^*} \left(\frac{d_{i-1,i}^{*2}\, \sigma_{i-1,i}^{*t} (\boldsymbol{r}_{i-1}^{*t} - \boldsymbol{r}_i^{*t})}{l_{i-1,i}^*} + \frac{d_{i,i+1}^{*2}\, \sigma_{i,i+1}^{*t} (\boldsymbol{r}_{i+1}^{*t} - \boldsymbol{r}_i^{*t})}{l_{i,i+1}^*} \right) \\
&+ \frac{C_{\mathrm{S}}^*}{m_i^*} \left(\frac{d_{i-1,i}^* (\boldsymbol{r}_{i-1}^{*t} - \boldsymbol{r}_i^{*t})}{l_{i-1,i}^*} + \frac{d_{i,i+1}^* (\boldsymbol{r}_{i+1}^{*t} - \boldsymbol{r}_i^{*t})}{l_{i,i+1}^*} \right) \\
&+ \frac{C_{\mathrm{Df}}^*}{m_i^*} \left(d_{i-1,i}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{t}i-1,i}^{*i,t} + d_{i,i+1}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{t}i,i+1}^{*i,t} \right) + \frac{C_{\mathrm{Dp}}^*}{m_i^*} \left(l_{i-1,i}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{n}i-1,i}^{*i,t} + l_{i,i+1}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{n}i,i+1}^{*i,t} \right), \\
\boldsymbol{v}_i^{*t+\Delta t} &= \boldsymbol{v}_i^{*t} + \Delta\, t^*\, \boldsymbol{a}_i^{*t}, \\
\boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t} &= \boldsymbol{r}_i^{*t} + \Delta\, t^*\, \boldsymbol{v}_i^{*t}.
\end{aligned}
\tag{5.19a}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t} &= \sigma_{i,i+1}^{*t} + \frac{\Delta\, t^*}{2} \Bigg[\frac{(\boldsymbol{r}_i^{*t} - \boldsymbol{r}_{i+1}^{*t}) \cdot (\boldsymbol{v}_i^{*t} - \boldsymbol{v}_{i+1}^{*t})}{l_{i,i+1}^{*2}} - \sigma_{i,i+1}^{*t} + \\
&\qquad \frac{(\boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_{i+1}^{*t+\Delta t}) \cdot (\boldsymbol{v}_i^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{v}_{i+1}^{*t+\Delta t})}{l_{i,i+1}^{*2}} - \sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t} \Bigg], \\
\boldsymbol{a}_i^{*t+\Delta t} &= \frac{C_{\mathrm{E}}^*\, q_i^*}{m_i^*}\, \boldsymbol{E}^* \\
&+ \frac{C_{\mathrm{C}}^*\, q_i^*}{m_i^*} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{q_j^* (\boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_j^{*t+\Delta t})}{|\boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_j^{*t+\Delta t}|^3} \\
&+ \frac{C_{\mathrm{M}}^*}{m_i^*} \left(\frac{d_{i-1,i}^{*2}\, \sigma_{i-1,i}^{*t+\Delta t} (\boldsymbol{r}_{i-1}^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i-1,i}^*} + \frac{d_{i,i+1}^{*2}\, \sigma_{i,i+1}^{*t+\Delta t} (\boldsymbol{r}_{i+1}^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i,i+1}^*} \right) \\
&+ \frac{C_{\mathrm{S}}^*}{m_i^*} \left(\frac{d_{i-1,i}^* (\boldsymbol{r}_{i-1}^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i-1,i}^*} + \frac{d_{i,i+1}^* (\boldsymbol{r}_{i+1}^{*t+\Delta t} - \boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t})}{l_{i,i+1}^*} \right) \\
&+ \frac{C_{\mathrm{Df}}^*}{m_i^*} \left(d_{i-1,i}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{t}i-1,i}^{*i,t+\Delta t} + d_{i,i+1}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{t}i,i+1}^{*i,t+\Delta t} \right) + \frac{C_{\mathrm{Dp}}^*}{m_i^*} \left(l_{i-1,i}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{n}i-1,i}^{*i,t+\Delta t} + l_{i,i+1}^*\, \boldsymbol{v}_{\mathrm{n}i,i+1}^{*i,t+\Delta t} \right), \\
\boldsymbol{v}_i^{*t+\Delta t} &= \boldsymbol{v}_i^{*t} + \frac{\Delta\, t^*}{2}\, (\boldsymbol{a}_i^{*t} + \boldsymbol{a}_i^{*t+\Delta t}), \\
\boldsymbol{r}_i^{*t+\Delta t} &= \boldsymbol{r}_i^{*t} + \frac{\Delta\, t^*}{2}\, (\boldsymbol{v}_i^{*t} + \boldsymbol{v}_i^{*t+\Delta t}).
\end{aligned}
\tag{5.19b}
$$

Počáteční podmínky pro Cauchyho úlohu jsou

$$\left.\begin{aligned} \sigma^{*t}_{i,i+1} &= 0, \\ \boldsymbol{r}^{*t}_{i+1} &= \{0;\ 0;\ r/L\}^{\mathrm{T}}, \\ \boldsymbol{v}^{*t}_{i+1} &= \{0;\ 0;\ 0\}^{\mathrm{T}} \end{aligned}\right\}\ \text{pro } i = n. \tag{5.20}$$

5.5 Odhad chyby metodou polovičního kroku

Pro odhad chyby přibližného řešení počáteční úlohy (5.19b), (5.20) byla použita metoda polovičního kroku. Nevýhodou zmíněné metody ovšem je, že hodnotu přibližného řešení v čase t je nutné počítat dvakrát; jednou s krokem $\Delta\, t$ a jednou s polovičním krokem $\Delta\, t/2$ [22]. Chyba jednotlivých stavových proměnných je pro metodu druhého řádu dána (viz [22, str. 140]) vztahy

$$\begin{aligned} \operatorname{err} \sigma^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i,i+1} &= \frac{4\, \sigma^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i,i+1} - 4\, \sigma^{*t+\Delta\, t;\Delta t/2}_{i,i+1}}{3}, \\ \operatorname{err} \boldsymbol{r}^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i} &= \frac{4\, \boldsymbol{r}^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i} - 4\, \boldsymbol{r}^{*t+\Delta\, t;\Delta t/2}_{i}}{3}, \\ \operatorname{err} \boldsymbol{v}^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i} &= \frac{4\, \boldsymbol{v}^{*t+\Delta\, t;\Delta t}_{i} - 4\, \boldsymbol{v}^{*t+\Delta\, t;\Delta t/2}_{i}}{3}, \end{aligned} \tag{5.21}$$

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

5.6 Vstupní parametry numerického modelu

Vstupní parametry, se kterými pracuje numerický, resp. počítačový model, jsou přehledně uspořádány v tab. 5.1. V počítačové aplikaci jsou vstupní parametry zadávány buď prostřednictvím grafického uživatelského rozhraní (GUI) (viz str. 55, odst. 6.2) 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. `6wtPEO.par`, jenž má uložený v adresáři `./pars/`, napíše v konzoli:

```
$ model ./pars/6wtPEO.par
```

Tím dojde k načtení příslušných parametrů simulace a uživatel může spustit výpočet kliknutím na tlačítko Start v GUI aplikace.

Tab. 5.1: Přehled vstupních parametrů numerického modelu.

Materiálové parametry		
Relativní permitivita	$\bar{\varepsilon}_{\mathrm{r}}$	(—)
Dynamická viskozita	η	(Pa s)
Povrchové napětí	γ	(N m^{-1})
Měrná elektrická vodivost	κ	(S m^{-1})
Měrná hmotnost	ϱ	(kg m^{-3})
Relaxační čas	τ	(s)
Procesní parametry		
Elektrický potenciál kolektoru	φ_2	(V)
Elektrické potenciál kapiláry	φ_1	(V)
Elektrický proud protékající tryskou	I_0	(A)
Objemový průtok polymerního roztoku	Q_{V}	(ℓ hod^{-1})
Konstrukční parametry		
Vzdálenost mezi kapilárou a kolektorem	h	(m)
Průměr kapiláry	d $(= 2r)$	(m)
Typ kolektoru[a]		
Parametry okolního prostředí		
Dynamická viskozita	η_{a}	(Pa s)
Měrná hmotnost	ϱ_{a}	(kg m^{-3})
Vlhkost	ψ	(%)
Teplota	T	(°C)
Simulační parametry		
Vlnová délka perturbace	λ	(m)
Úhlová frekvence perturbace	ω	(s^{-1})
Počáteční průměr trysky	d_0	(m)
Počáteční délka trysky	l_0	(m)
Amplituda perturbace	A	(m)
Celkový počet nabitých hmotných bodů	N	(—)

[a]Implementované typy: tenký uzemněný disk, speciální (drátový) kolektor

Část IV

POČÍTAČOVÝ MODEL

Kapitola 6

Počítačová realizace úlohy

Vytvoření nativní počítačové aplikace bylo motivováno třemi hlavními důvody. Prvním důvodem byla potřeba jemnějšího časového kroku použité numerické metody. Stávající algoritmus realizovaný v prostředí programu Matlab byl z hlediska výpočetního času neefektivní. Druhým důvodem byl požadavek na vytvoření GUI, které umožní snadné nastavení všech parametrů modelu. Posledním, 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 na efektivitu, úspornost a přenositelnost. S přihlédnutím ke zmíněným důvodům byl vybrán objektově orientovaný jazyk C++, který těmto požadavkům plně vyhovuje.

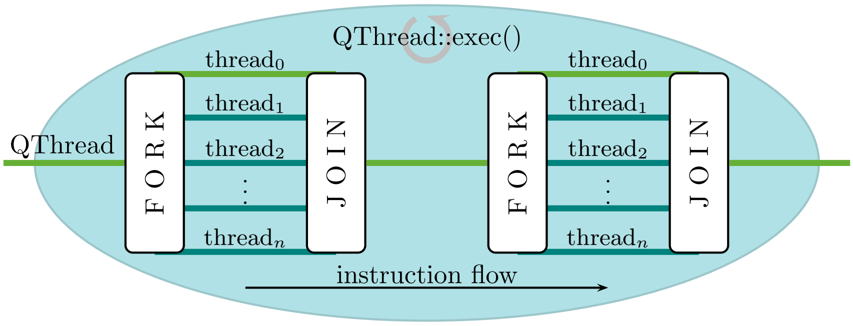
6.1 Paralelní výpočetní jádro

Základem počítačové aplikace je paralelní výpočetní (simulační) jádro, které představuje algoritmizaci numerického modelu (viz str. 44, kap. 5). Paralelizace výpočetního jádra byla realizována s využitím OpenMP[6.1)]. OpenMP je standardizované rozhraní pro paralelní programování aplikací běžících na počítačových systémech se sdílenou pamětí. Sestává se ze sady direktiv pro kompilátor, knihovních funkcí a proměnných prostředí. Standard je k dispozici pro programovací jazyky C/C++ a Fortran. OpenMP používá vícevláknový paralelismus založený na scénáři rozděl/sluč[6.2)]. Po

[6.1)] Domovská stránka projektu http://openmp.org.

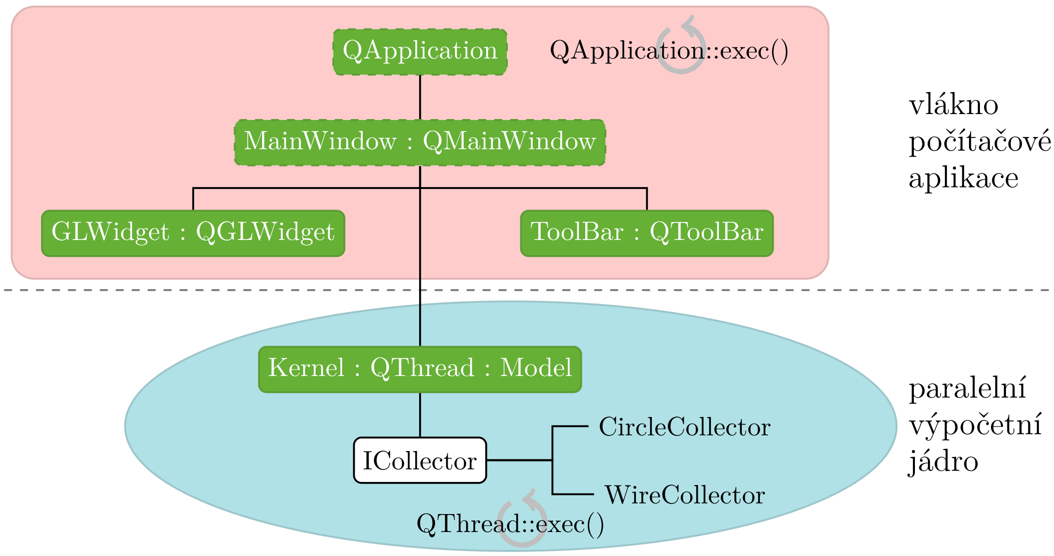
[6.2)] Anglicky fork/join.

spuštění aplikace je výpočetní jádro tvořeno pouze jedním vláknem, tzv. hlavním[6.3], které v modelu představuje třída `QThread`. Hlavní vlákno vykonává sekvenční části výpočetních algoritmů. V místě, kde jsou vyžadovány paralelní operace, se rozdělí, tj. vytvoří se nebo se probudí dodatečná vlákna thread_1, thread_2, $\ldots$, thread_n (viz obr. 6.1). Všechna tato vlákna, společně s hlavním, pracují v paralelní bloku souběžně. Na jeho konci se dodatečná vlákna ukončí nebo uspí a tok instrukcí opět pokračuje sekvenčně v jednom vlákně. Tato operace se nazývá sloučení.



Obr. 6.1: Schema paralelismu uvnitř výpočetního jádra.

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`.

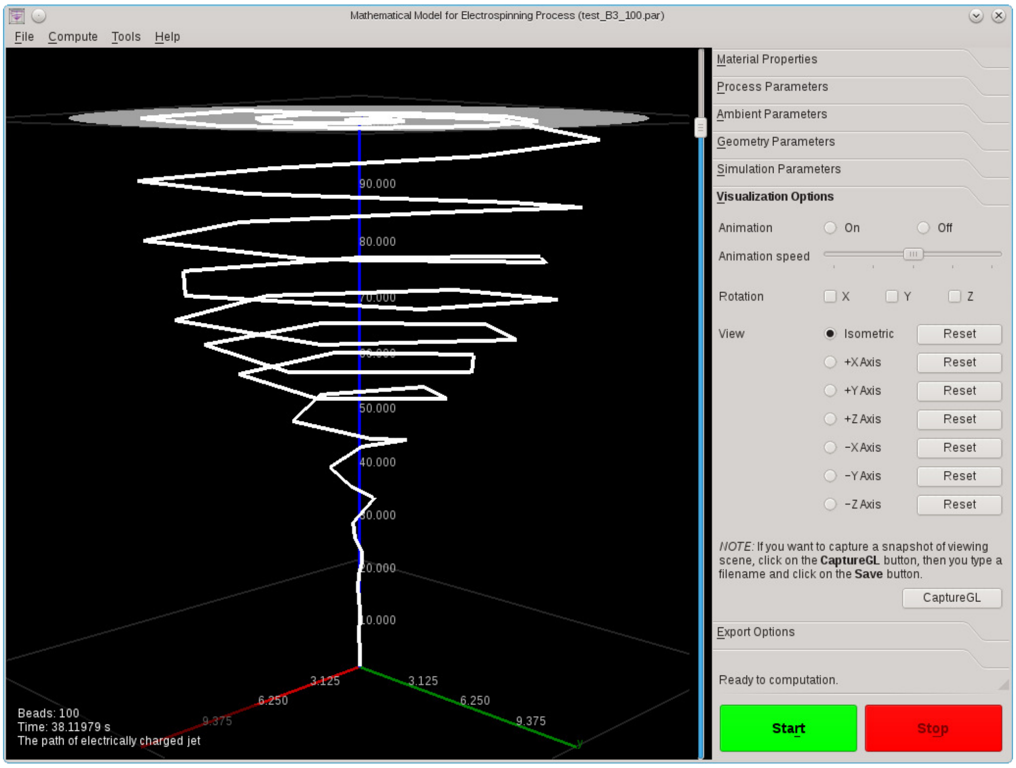


Obr. 6.2: Hierarchický diagram tříd včetně znázornění hlavního vlákna aplikace.

[6.3] Anglicky master thread.

6.2 Grafické uživatelské rozhraní

GUI počítačové aplikace (viz obr. 6.3) bylo vytvořeno s použitím multiplatformní, objektově orientované knihovny Qt[6.4]. GUI je v počítačovém modelu implementováno třídou `MainWindow` v souboru `mainwindow.cpp`.



Obr. 6.3: Grafické uživatelské rozhraní počítačové aplikace.

6.2.1 Panel nástrojů

Ovládací panel na pravé straně je koncipován do šesti záložek, ve kterých jsou roztříděny vstupní parametry numerického modelu (viz str. 51, tab. 5.1), simulace a vizualizace. 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 OpenGL[6.5] dostupný jako modul knihovny Qt. Tento standard specifikuje multiplatformní rozhraní pro grafické

[6.4] Domovská stránka projektu `http://qt.nokia.com`.

[6.5] Domovská stránka projektu `http://opengl.org`.

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`.

6.3 Hlavní výpočetní algoritmus

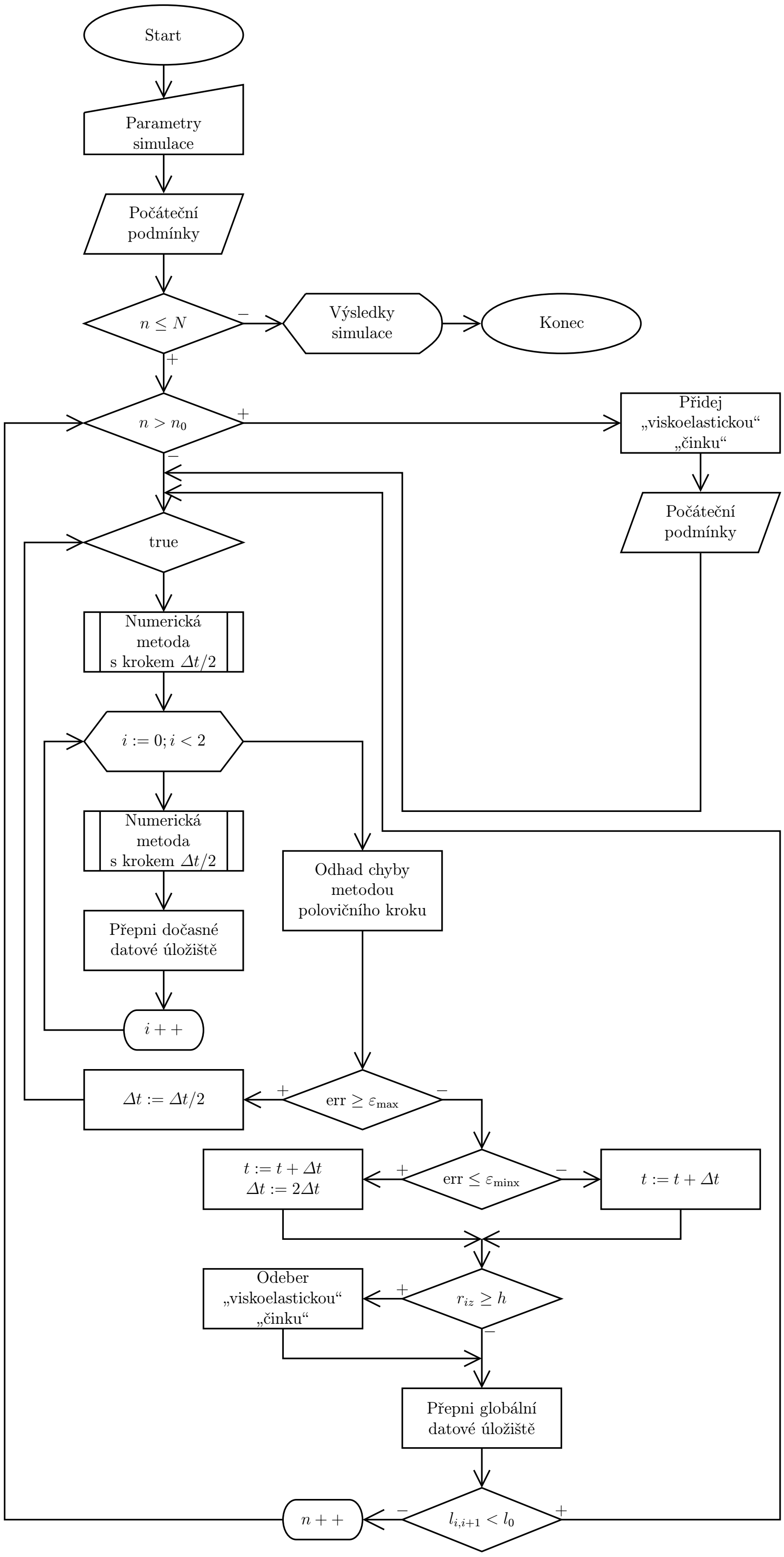
Celý algoritmus výpočtu (simulace) znázorňuje vývojový diagram (viz obr. 6.4). Na začátku jsou prostřednictvím GUI nastaveny vstupní parametry simulace. Následuje inicializace, ve které jsou vypočítány kritické hodnoty vnějšího elektrostatického pole, parametry diskrétního válcového elementu trysky a 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`.

(a) 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 $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole. Výpočet je realizován prostřednictvím metody `computeEE()` ze třídy `Model`, jež volá přes rozhraní `ICollector` virtuální metodu `computeField()` reimplementovanou v souboru `fields/diskcollector.cpp` nebo `fields/wirecollector.cpp`.

(b) 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 deseti kroků a je opakován dokud platí podmínka $n \leq N$, tj. nebyly přidány všechny elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky:

   (1) Prostřednictvím metody `addBead()` jsou přidány nabité hmotné body a metodou `addRod()` je přidán viskoelastický prvek. Obě metody jsou implementovány ve třídě `Kernel`.

   (2) Jsou určeny počáteční podmínky stavových proměnných.



Obr. 6.4: Vývojový diagram výpočetního algoritmu.

(3) Je přidána počáteční perturbace v příčném směru.

(4) Metodou `computeEE()` ze třídy `Model` je, v pozicích nabitých hmotných bodů, vypočítána intenzita $\boldsymbol{E}$ vnějšího elektrostatického pole.

(5) Jsou vypočítány síly působící na hmotné body s nábojem. Implementováno metodami `comupteFFC()`, `comupteFFE()`, `comupteFFM()`, `comupteFFD()` a `comupteFFS()` ze třídy `Model`.

(6) Metodou prediktor–korektor P(EC)^3 je s krokem Δt a $\Delta t/2$ numericky vyřešena soustava obyčejných diferenčních rovnic. Numerický řešič je implementován metodou `numericSolver()` ze třídy `Kernel`.

(7) Metodou polovičního kroku je stanoven odhad chyby a v případě potřeby je upraven časový krok Δt. Implementováno metodou `computeErr()` ze třídy `Kernel`.

(8) Jsou odstraněny rovnice elementů ideální přímočaré zelektrizované trysky, které dosáhly kolektoru.

(9) Je posunut čas simulace $t := t + \Delta t$.

(10) Emitováním signálu `update()` je pomocí virtuální metody `paintGL()` překreslena vizualizovaná OpenGL scéna.

Kapitola 7

Verifikace počítačového modelu

VERIFIKACÍ je myšleno testování, zda implementace metod[7.1)] prostředky programovacího jazyka funguje v počítačovém 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` (ladění paměti) a `gcov` (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

$$\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\, r = 0$$

s počátečními podmínkami

$$\begin{aligned} r(0) &= 1, \\ \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}(0) &= 0. \end{aligned}$$

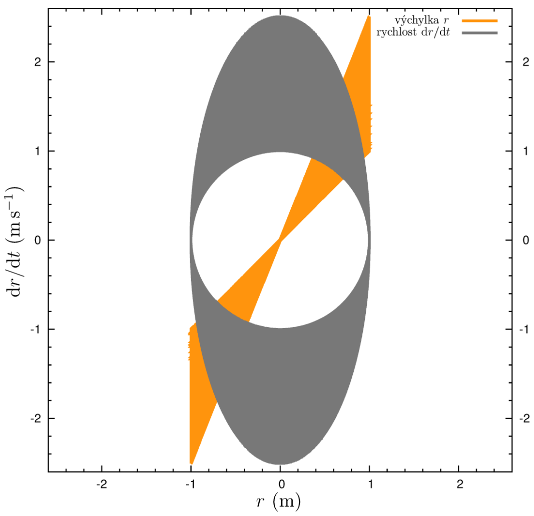
Analytické řešení této homogenní diferenciální rovnice lze najít jako lineární kombinaci dvou lineárně nezávislých fundamentálních řešení. Při volbě $\omega^2 = 1$ a dosazení počátečních podmínek se dostane rovnice okamžité výchylky

$$r = \cos t.$$

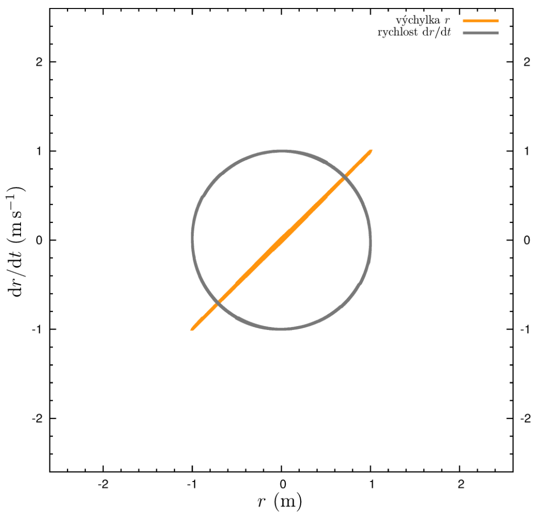
[7.1)] Ve smyslu objektově orientovaného programování.

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 tedy je 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 $\langle 10^{-4}; 10^{-6} \rangle$.

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.



(a) explicitní Eulerova metoda



(b) metoda prediktor–korektor

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.

Část V

EXPERIMENTY A VALIDACE MODELU

Kapitola 8

Numerické experimenty

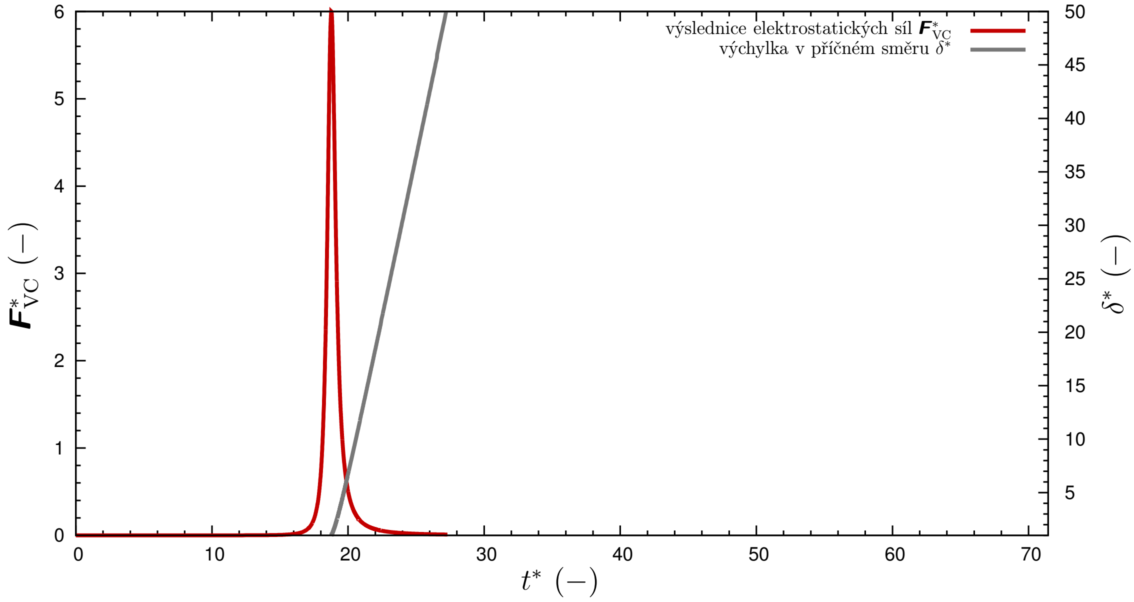
NUMERICKÝ (nebo také počítačový, virtuální) experiment poskytuje možnost generování širokého spektra dat a tím umožňuje lépe porozumět studovanému ději. Předmětem této kapitoly jsou numerické experimenty s „viskoelastickou činkou“, které si kladly za cíl porozumět vývoji malých ohybových perturbací zelektrizované trysky a také jejímu chování ve vnějším elektrostatickém poli. Druhá polovina kapitoly se věnuje simulacím procesu elektrostatického zvlákňování, tj. zkoumání vlivu vstupních parametrů na trajektorii elektricky nabité trysky.

8.1 Růst malých ohybových perturbací

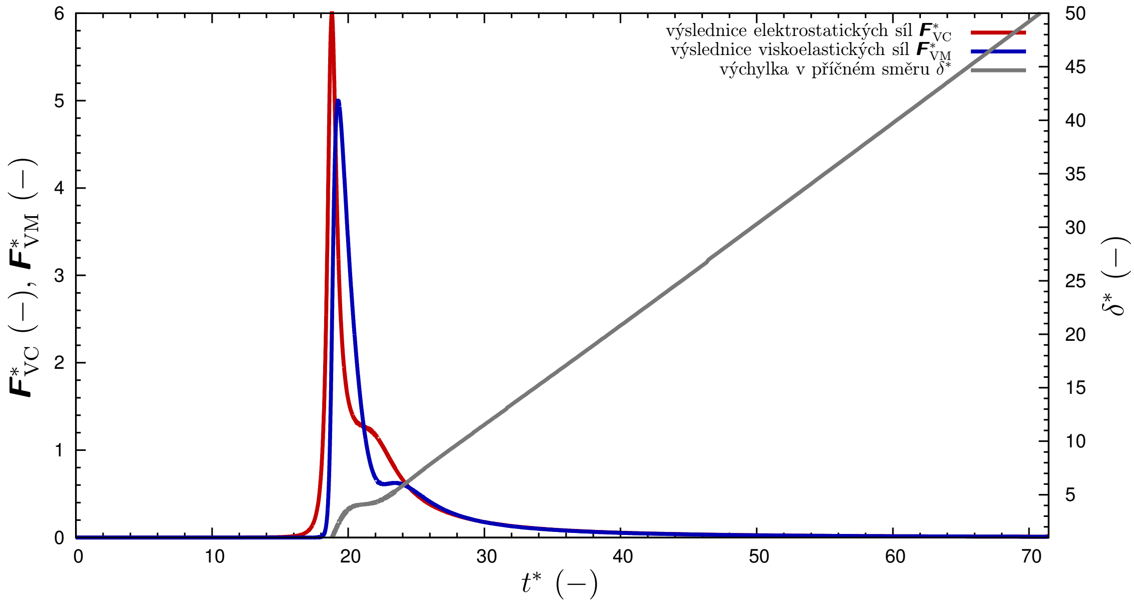
Na str. 18, odst. 3.4, byly sestaveny dvě pohyblivé rovnice, jež popisují vývoj malých ohybových perturbací, které jsou inicializovány poruchou v příčném směru. Tento odstavec se zabývá jejich přibližným numerickým řešením. Při numerickém experimentu byla fixována poloha nabitých bodů A, C a nabitý hmotný bod B byl vychylován tak dlouho, dokud nedorazil na okraj diskového uzemněného kolektoru [viz str. 20, obr. 3.2(a) a obr. 3.2(b)]. Vertikální poloha bodů A, B 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 (3.6) a (3.7) s počátečními podmínkami

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

Na druhém obr. 8.1(b) je pak znázorněno řešení úlohy (3.8) a (3.9) s následujícími

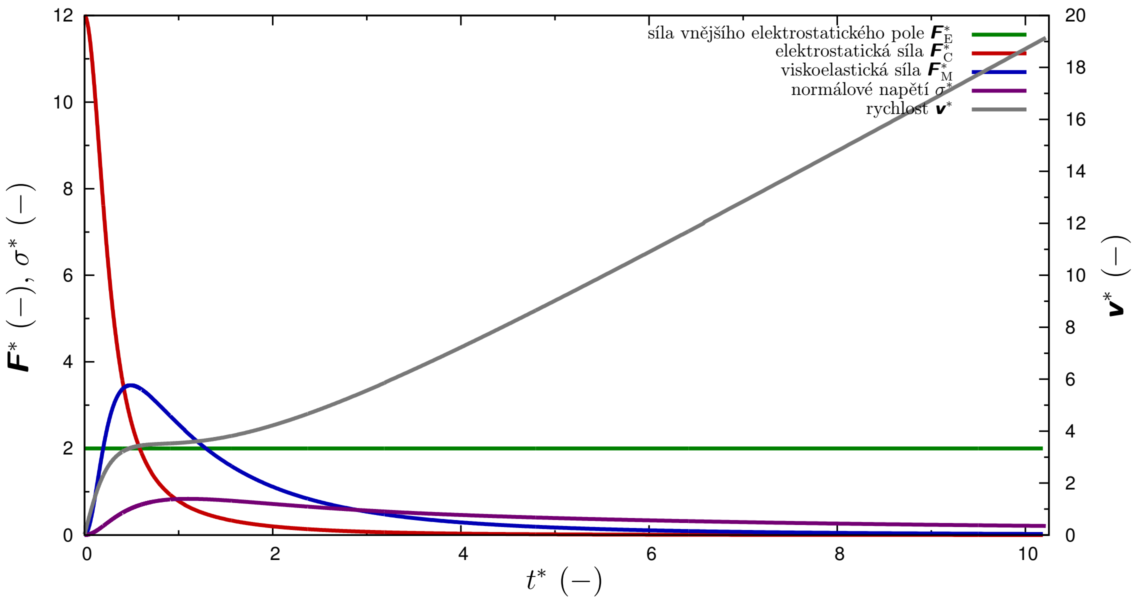


(a)

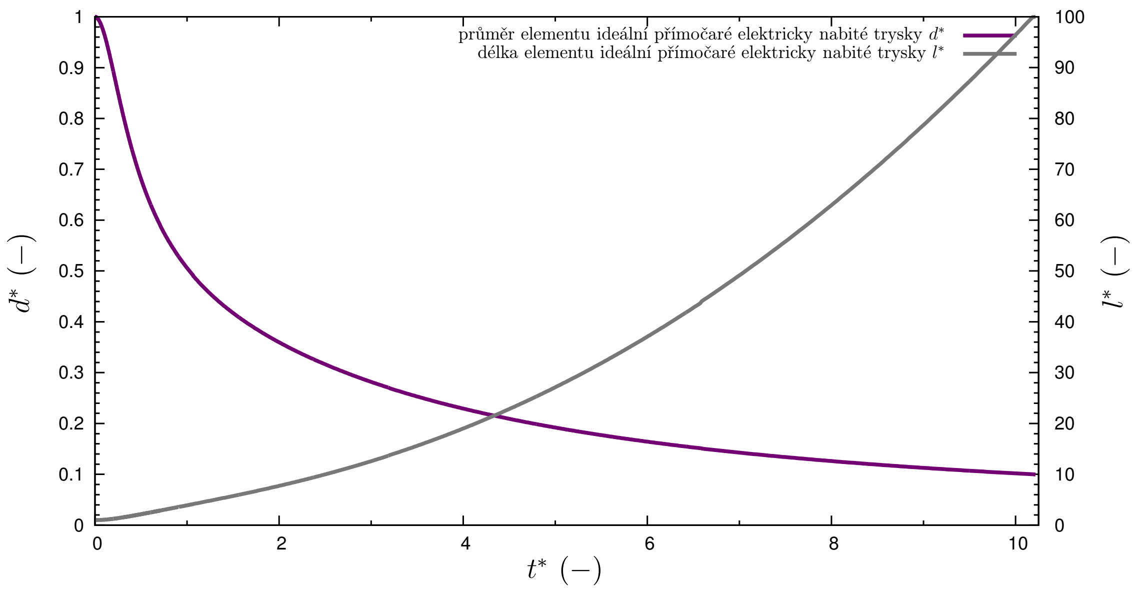


(b)

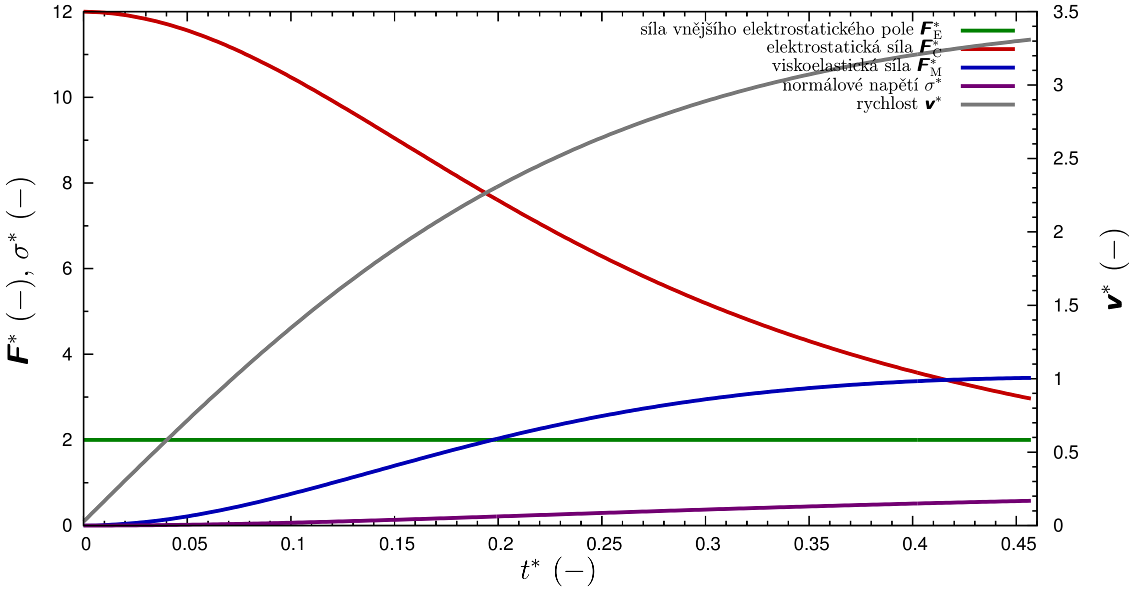
Obr. 8.1: Průběh působících výslednic sil a vývoj malých ohybových perturbací. δ^* — bezrozměrná výchylka perturbace, t^* — bezrozměrný čas. Parametry numerického experimentu: $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$ a $D^* = 100$.



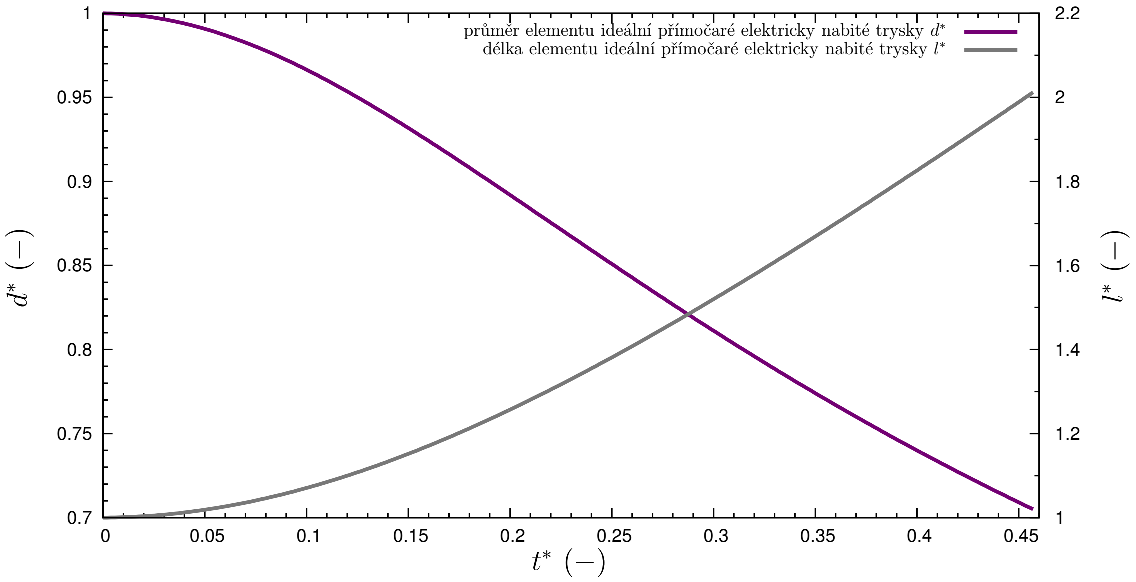
Obr. 8.2: *Element ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu:* $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$ *a* $h^* = 100$.



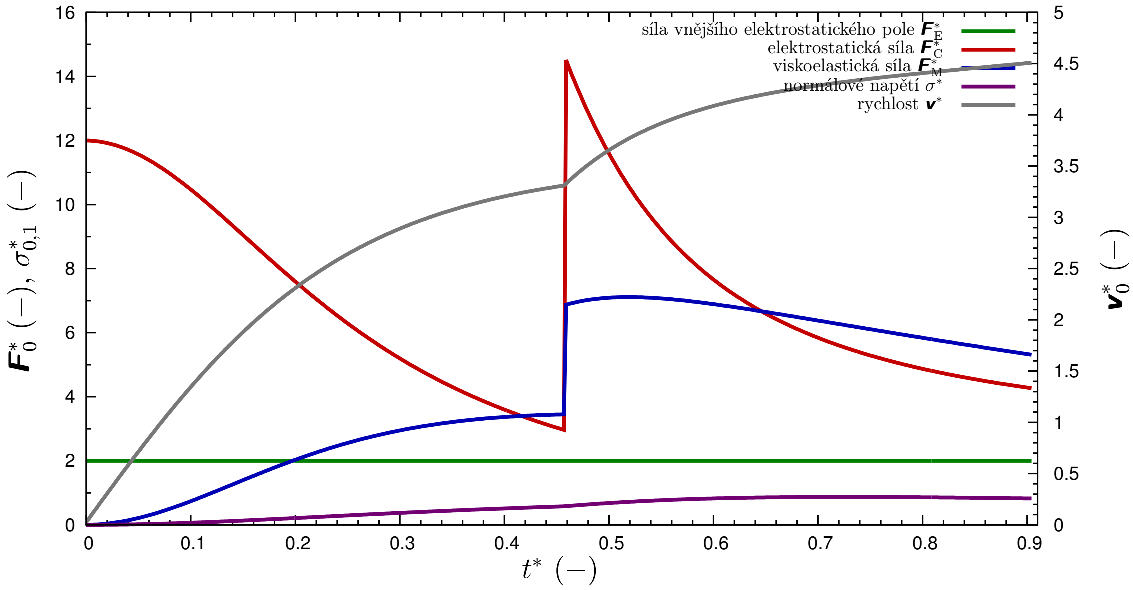
Obr. 8.3: *Element ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli I. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu:* $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$ *a* $h^* = 100$.



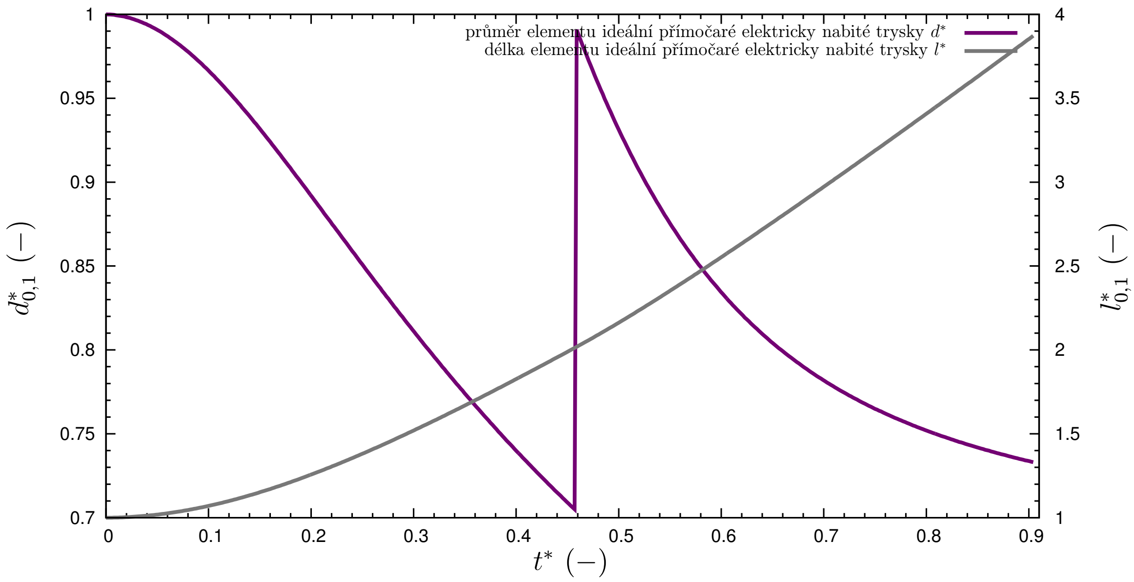
Obr. 8.4: Element ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^* = 2$, $C_{\mathrm{C}}^* = C_{\mathrm{M}}^* = 12$ a $h^* = 100$.



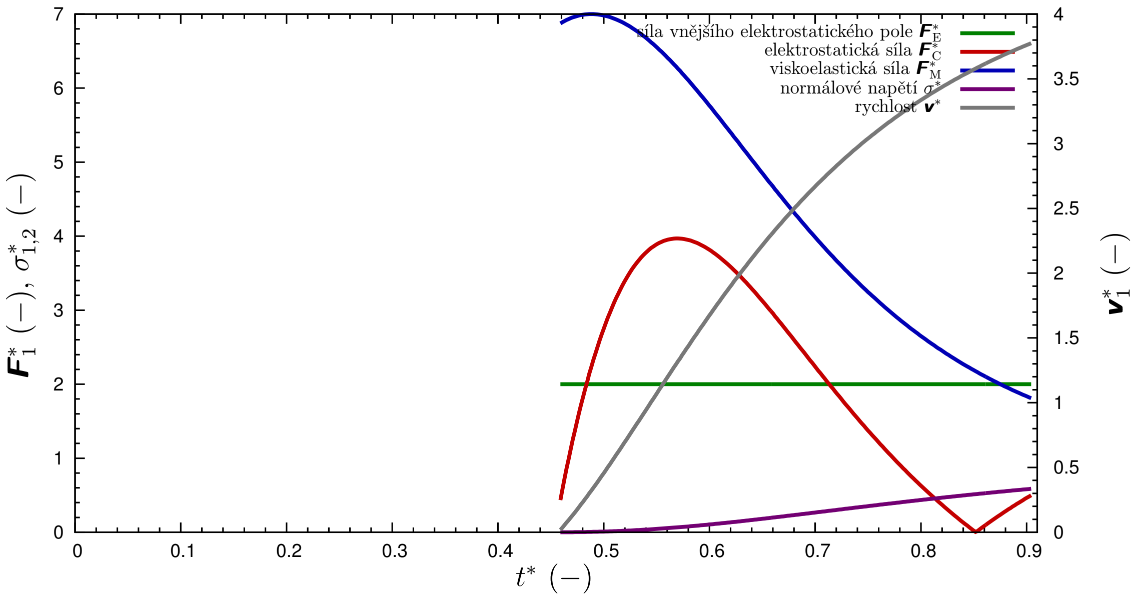
Obr. 8.5: Element ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli II. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^* = 2$, $C_{\mathrm{C}}^* = C_{\mathrm{M}}^* = 12$ a $h^* = 100$.



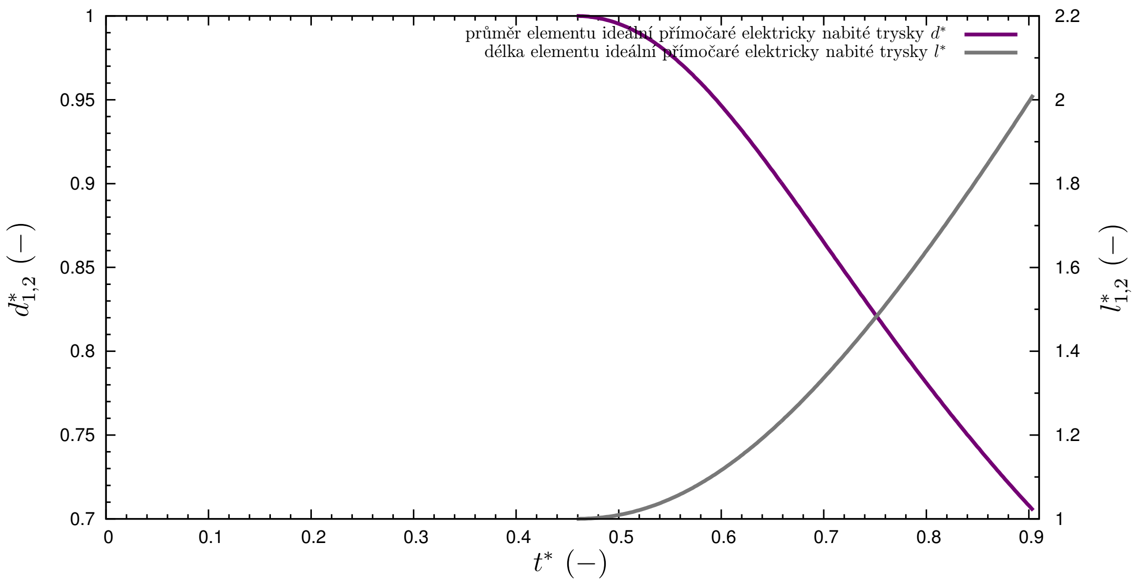
Obr. 8.6: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^{*} = 2$, $C_{\mathrm{C}}^{*} = C_{\mathrm{M}}^{*} = 12$, $K_{\omega}^{*} = 100$, $h^{*} = 100$ *a* $N = 3$.



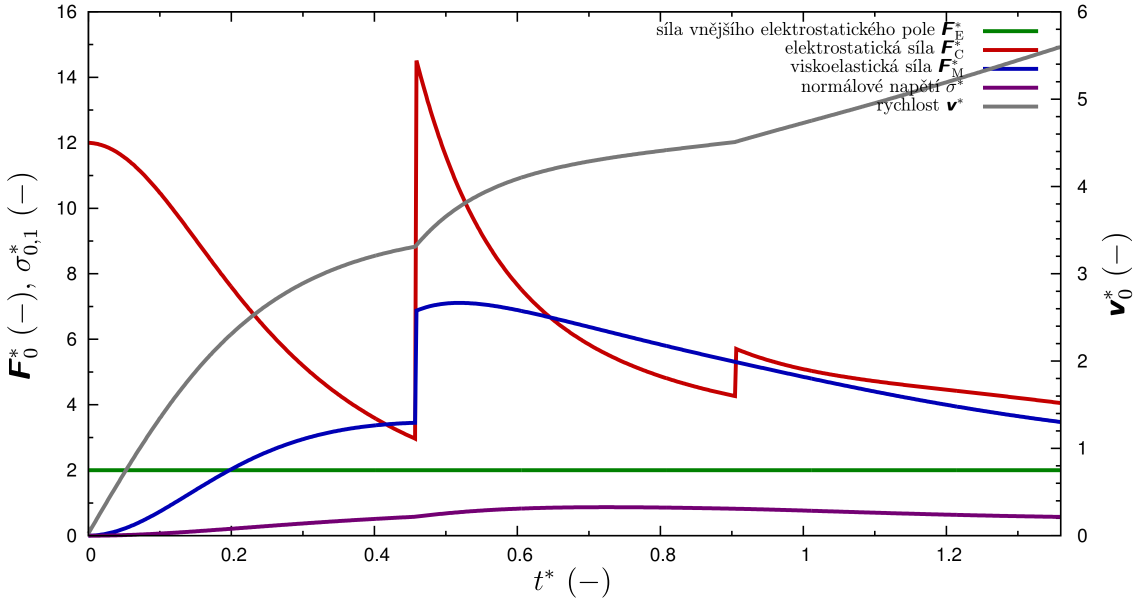
Obr. 8.7: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIa. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^{*} = 2$, $C_{\mathrm{C}}^{*} = C_{\mathrm{M}}^{*} = 12$, $K_{\omega}^{*} = 100$, $h^{*} = 100$ *a* $N = 3$.



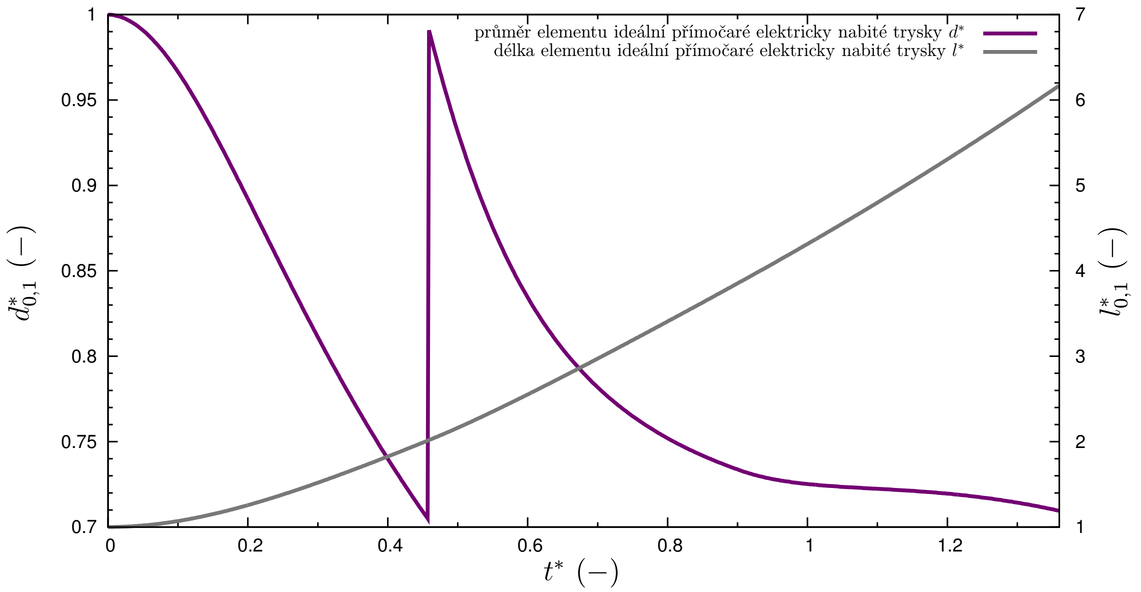
Obr. 8.8: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^* = 2$, $C_{\mathrm{C}}^* = C_{\mathrm{M}}^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ *a* $N = 3$.



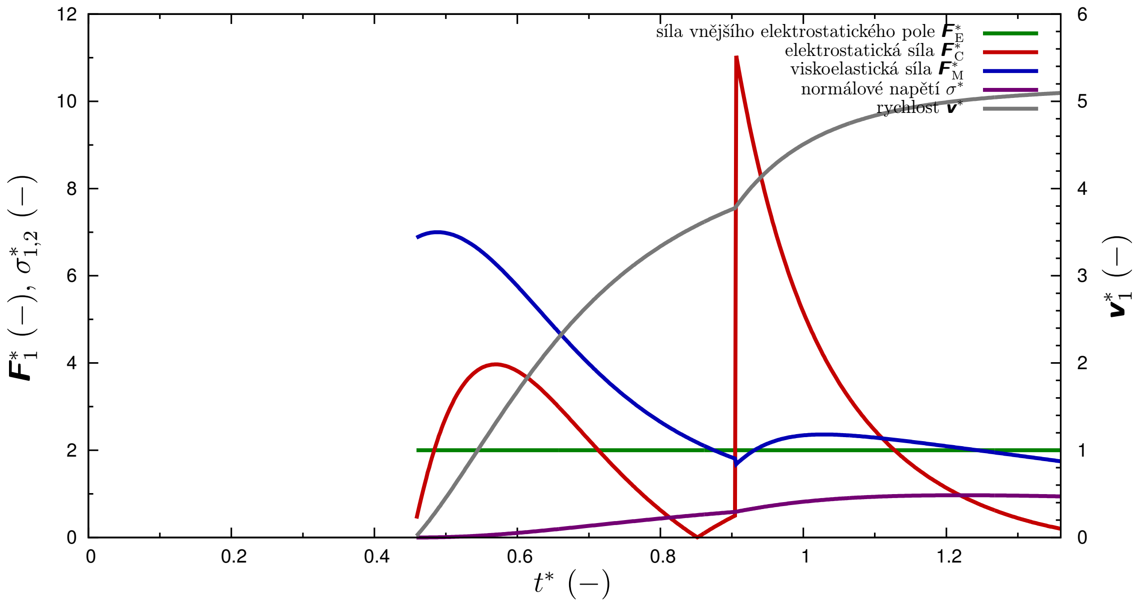
Obr. 8.9: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IIIb. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^* = 2$, $C_{\mathrm{C}}^* = C_{\mathrm{M}}^* = 12$, $K_\omega^* = 100$, $h^* = 100$ *a* $N = 3$.



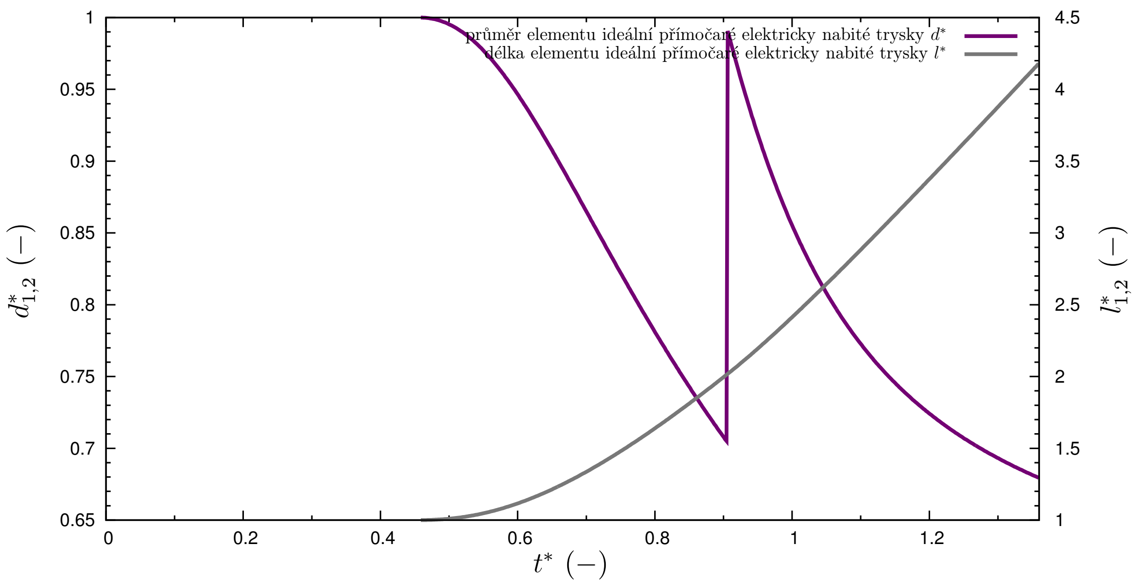
Obr. 8.10: Tři elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^{*} = 2$, $C_{\mathrm{C}}^{*} = C_{\mathrm{M}}^{*} = 12$, $K_{\omega}^{*} = 100$, $h^{*} = 100$ a $N = 4$.



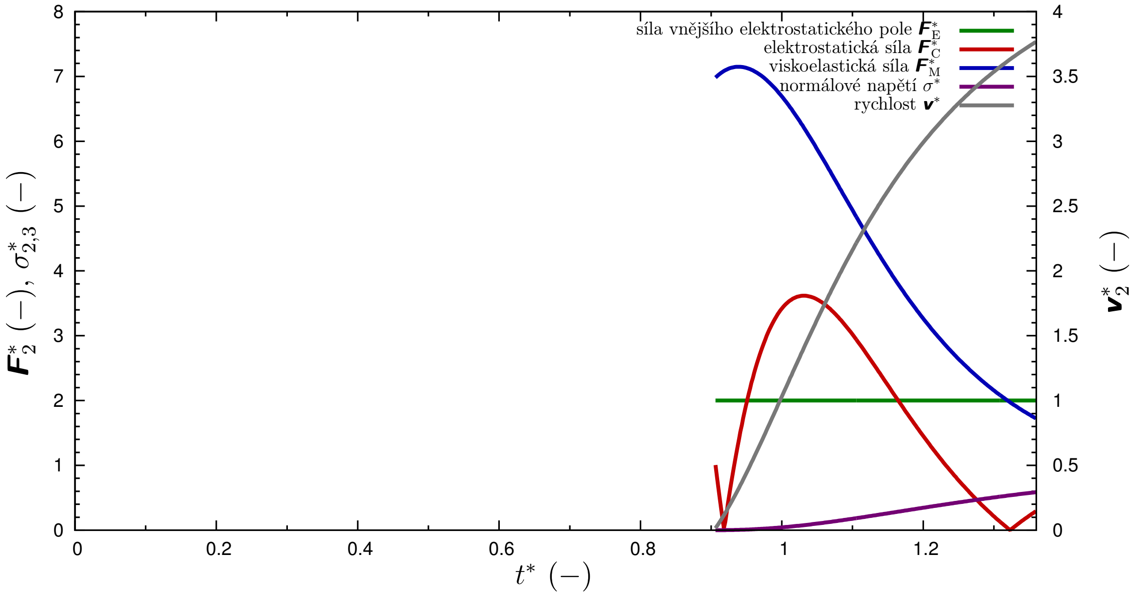
Obr. 8.11: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVa. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C_{\mathrm{E}}^{*} = 2$, $C_{\mathrm{C}}^{*} = C_{\mathrm{M}}^{*} = 12$, $K_{\omega}^{*} = 100$, $h^{*} = 100$ a $N = 4$.



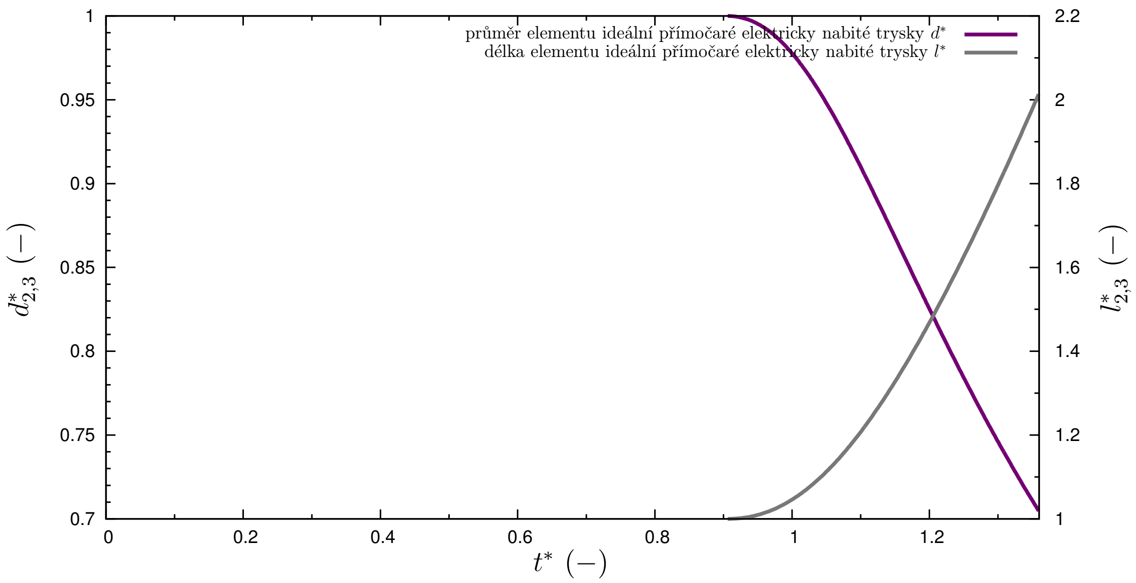
Obr. 8.12: Tři elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$, $K^*_{\omega} = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.13: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVb. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$, $K^*_{\omega} = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.14: Tři elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc. Průběh působících sil, normálového napětí a rychlosti. Parametry numerického experimentu: $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$, $K^*_\omega = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.



Obr. 8.15: Dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky v homogenním elektrostatickém poli IVc. Průběh změny průměru a délky přímočaré elektricky nabité trysky. Parametry numerického experimentu: $C^*_{\mathrm{E}} = 2$, $C^*_{\mathrm{C}} = C^*_{\mathrm{M}} = 12$, $K^*_\omega = 100$, $h^* = 100$ a $N = 4$.

počátečními podmínkami

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

8.2 Přímočará elektricky nabitá tryska v elektrostatickém poli

Odstavec pojednává o numerických experimentech, které si kladli za cíl zjistit chování elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky ve vnějším homogenním elektrostatickém poli. Při prvním numerickém experimentu byl element trysky prodlužován tak dlouho, dokud nabitý hmotný bod A (viz str. 17, obr. 3.1) nedorazil na diskový uzemněný kolektor. Na obr. 8.2 je vykreslen průběh působících sil, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}}$, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}}$ a $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}}$, normálového napětí σ a rychlosti $\boldsymbol{v}$. Na dalším obr. 8.3 je pak vykreslen průběh změny průměru d a délky l elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky.

V případě druhého numerického experimentu byl element ideální přímočaré zelektrizované trysky dloužen pouze do časového okamžiku, který odpovídá přidání nového elementu. Výsledky jsou znázorněny na obr. 8.4 a obr. 8.5.

Třetí numerický experiment je tvořen sérií experimentů. Nejprve jsou zkoumány dva elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky spojené v sérii. Průběhy působících sil, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}i}$, $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}i}$ a $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}i}$, normálových napětí $\sigma_{i,i+1}$ a rychlostí $\boldsymbol{v}_i$ pohyblivých nabitých hmotných bodů jsou vykresleny na obr. 8.6 a obr. 8.8. Změny průměrů $d_{i,i+1}$ a délek $l_{i,i+1}$ elementů jsou zobrazeny na obr. 8.7 a obr. 8.9. Zbývající série numerických experimentů byla provedena se třemi sériově spojenými elementy ideální přímočaré zelektrizované trysky. Výsledky jsou vykresleny na obr. 8.10, obr. 8.12, obr. 8.14, obr. 8.11, obr. 8.13 a obr. 8.15. Při všech experimentech byla fixována poloha nabitého hmotného bodu, jenž se nacházel v počátku kartézského souřadného systému $O(x, y, z)$.

8.3 Výpočet trajektorie elektricky nabité trysky

Numerický výpočet trajektorie elektricky nabité trysky v trojrozměrném prostoru začíná s jedním nabitým hmotným bodem, $i = 1$, který je umístěn na vrchol hemisférického povrchu polymerní kapky. Tento první hmotný bod se, podle zákona zachování hmoty (5.2), pohybuje konstantní výtokovou rychlostí

$$\boldsymbol{v}_1^* = \frac{4\,\tau\,Q_V}{\pi\,d_0^2\,L}\,\boldsymbol{k}, \tag{8.1}$$

dokud je splněna podmínka

$$|\boldsymbol{r}_1^* - \boldsymbol{r}_0^*| \le l_0^*, \tag{8.2a}$$

kde $\boldsymbol{k}$ je jednotkový vektor ve směru souřadné osy z, $\boldsymbol{r}_0^* \equiv \{0;\, 0;\, r/L\}$ je polohový vektor vrcholu hemisférického povrchu kapky v bezrozměrných veličinách a l_0^* je bezrozměrná délka válcového segmentu trysky [viz str. 45, obr. 5.1(b)]. Jakmile přestane platit podmínka (8.2a), je na vrchol hemisférické kapky přidán nový nabitý hmotný bod, $i = 2$, resp. element ideální přímočaré zelektrizované trysky. Současně je přidanému hmotnému bodu udělena malá počáteční perturbace [viz str. 42, (4.39)]. Přidávání dalších nabitých hmotných bodů, $i \ge 3$, resp. elementů ideální přímočaré zelektrizované trysky, je již řízeno vnějším elektrostatickým polem. Jinými slovy vnější elektrostatické pole zajišťuje vytahování nového objemu trysky z polymerní kapky. Tento mechanismus se opakuje, dokud nedojde k vyčerpání předem nastaveného počtu N nabitých hmotných bodů.

Zatím bylo zmíněno přidávání hmotných bodů, které jsou součástí elementů ideálních přímočarých zelektrizovaných trysek. Zbývá tedy vyřešit jejich odebírání. K tomuto účelu se nabízí využít skutečnosti, že vzniklé nanovlákno nemůže proniknout skrze diskový uzemněný kolektor. Na straně kolektoru je proto uplatňována zastavovací podmínka

$$r_{iz}^* \ge h^*, \tag{8.2b}$$

kde r_{iz}^* je z-složka polohového vektoru i-tého nabitého hmotného bodu v bezrozměrných veličinách. Z pohledu numerického řešiče počáteční úlohy znamená zastavovací podmínka (8.2b) vyjmutí rovnic (5.13), (5.14) a (5.15) z globální soustavy[8.1)].

Na obr. 8.17, obr. 8.20 a obr. 8.23 jsou znázorněny vypočtené trajektorie elektricky nabité trysky při různých parametrech simulace. Všechny výsledky byly získány pomocí autorem vyvinutého počítačového programu. Trajektorie zelektrizované kapalinové trysky byly vypočteny pro parametry 6% vodného roztoku PEO: povrchové napětí $\gamma = 70$ mN m^{-1}, dynamická viskozita $\eta = 1\,000$ Pa s, měrná hmotnost

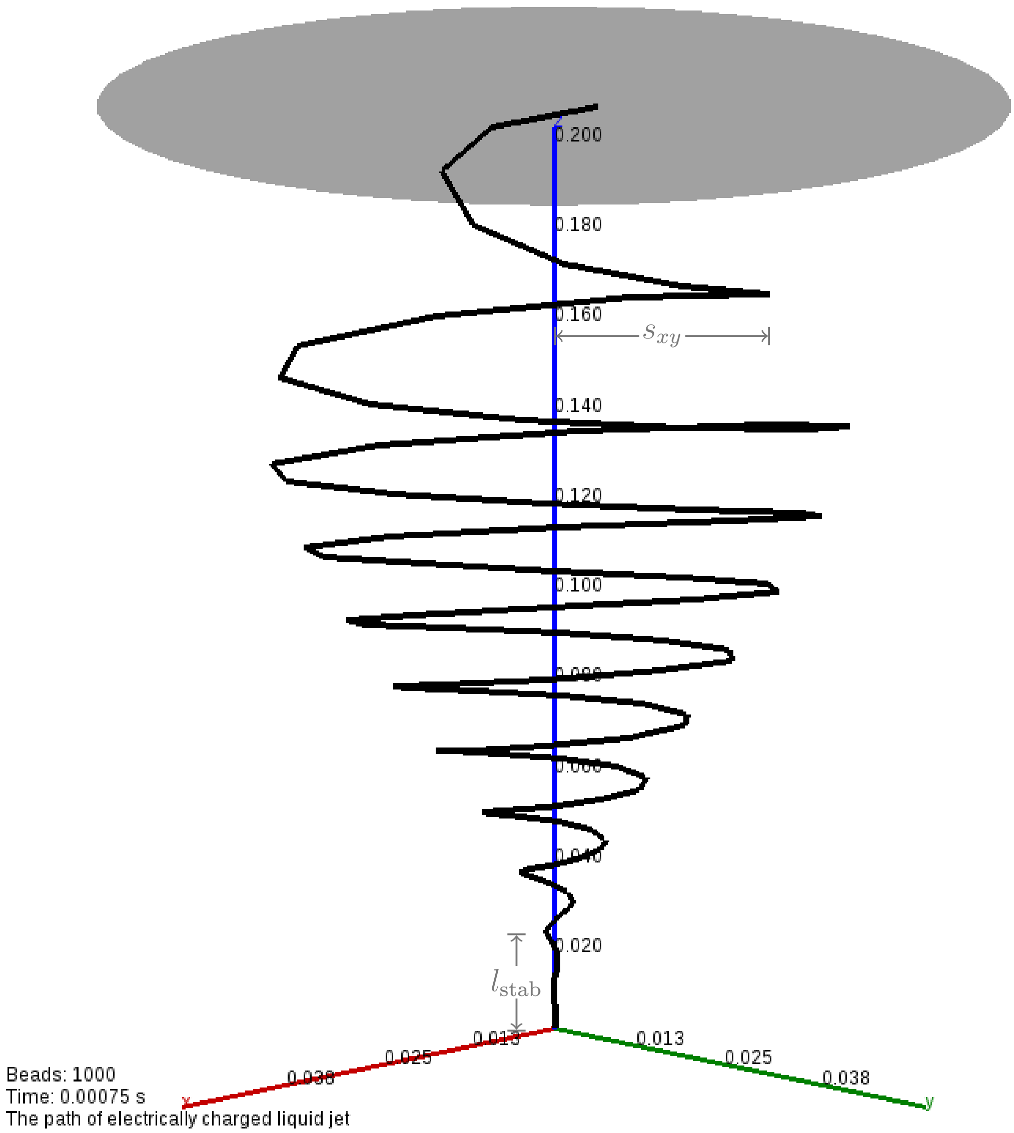
[8.1)] Globální soustavou je myšlena soustava obyčejných diferenciálních rovnic (5.13), (5.14) a (5.15), které jsou přiřazeny každému pohybujícímu se nabitému hmotnému bodu viskoelastického řetězce.

$\varrho = 1\,000$ kg m^{-3}, relaxační čas $\tau = \eta/E = 10$ ms. Procesní parametry byly: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 1$ kV, potenciál uzemněného kolektoru $\varphi_2 = 0$ V, elektrický proud trysky $I_0 = 2.93\ \mu$A, objemový průtok roztoku kapilárou $Q_V = 10.6$ mℓ hod^{-1}, 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 $\eta_\mathrm{a} = 18.6\ \mu$Pa s a měrnou hmotností $\varrho_\mathrm{a} = 1.19$ kg m^{-3}. Počáteční průměr trysky byl $d_0 = 300\ \mu$m a diskretizační délka elementu trysky byla $l_0 = 4\ \mu$m. Na obr. 8.18, obr. 8.19, obr. 8.21, obr. 8.22, obr. 8.24 a obr. 8.22 jsou vykresleny polohy nabitých hmotných bodů od souřadné osy z, $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$. Simulace byly ukončeny při zachycení prvního nabitého hmotného bodu na uzemněném diskovém kolektoru. Výpočetní čas se na standardním PC s procesorem Intel Pentium Dual–Core @2.40 GHz a OS GNU/Linux pohyboval v rozsahu cca 10–15 min. V tab. 8.1

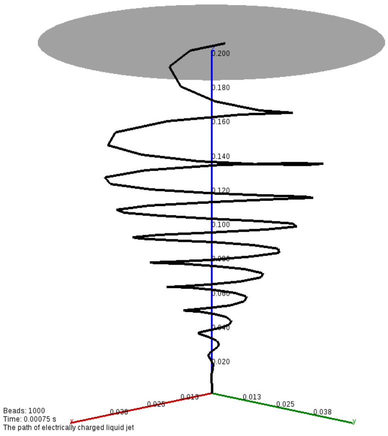
Tab. 8.1: Řádový rozsah vstupních parametrů počítačového modelu.

Materiálové parametry			
Relativní permitivita	$\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}$	desítky	—
Dynamická viskozita	η		Pa s
Povrchové napětí	γ	desítky	mN m^{-1}
Měrná elektrická vodivost	κ	desítky	mS m^{-1}
Měrná hmotnost	ϱ	tisíce	kg m^{-3}
Relaxační čas	τ	desítky	ms
Procesní parametry			
Elektrický potenciál kolektoru	φ_2	0	V
Elektrické potenciál kapiláry	φ_1	desítky	kV
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	$d\ (= 2r)$	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

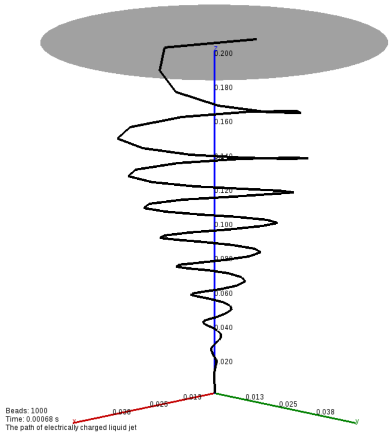
jsou uvedeny řádové rozsahy vstupních parametrů počítačového modelu. Největší variabilita je v případě dynamické viskozity η. Viskozita také patří mezi nejvýznamnějších systémový parametr ovlivňující proces elektrostatického zvlákňování.



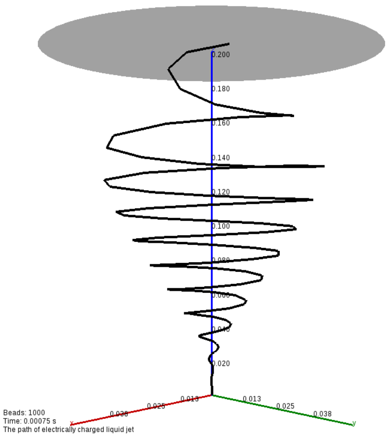
Obr. 8.16: Detail vypočtené trajektorie elektricky nabité trysky pro 6% vodný roztok PEO. Parametry numerické simulace: $\gamma = 70\ \mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\eta = 1\,000\ \mathrm{Pa\,s}$, $\varrho = 1\,000\ \mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\tau = \eta/E = 10\ \mathrm{ms}$, $\varphi_1 = 1\ \mathrm{kV}$, $\varphi_2 = 0\ \mathrm{V}$, $I_0 = 2.93\ \mu\mathrm{A}$, $Q_V = 10.6\ \mathrm{m}\ell\ \mathrm{hod}^{-1}$, $h = 200\ \mathrm{mm}$ $D = 100\ \mathrm{mm}$, $\eta_{\mathrm{a}} = 18.6\ \mu\mathrm{Pa\,s}$, $\varrho_{\mathrm{a}} = 1.19\ \mathrm{kg\,m^{-3}}$. *Počáteční průměr trysky* $d_0 = 300\ \mu\mathrm{m}$ *a diskretizační délka elementu trysky* $l_0 = 4\ \mu\mathrm{m}$. *Délka stabilní části trysky* $l_{\mathrm{stab}} = 23\ \mathrm{mm}$.



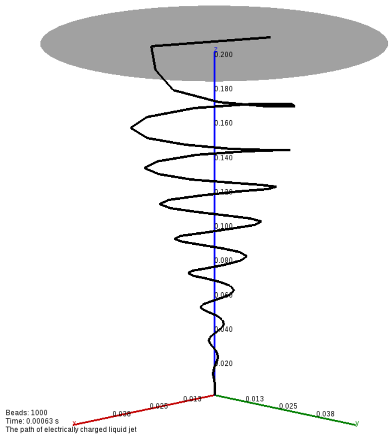
(a) $\gamma = 140\ \mathrm{mN\ m^{-1}}$



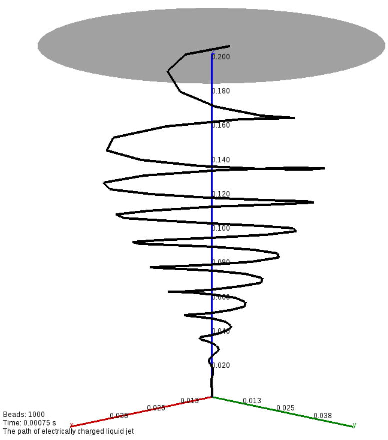
(b) $\eta = 500\ \mathrm{Pa\ s}$



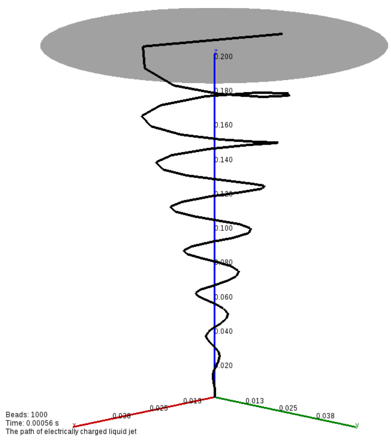
(c) $\gamma = 35\ \mathrm{mN\ m^{-1}}$



(d) $\eta = 250\ \mathrm{Pa\ s}$

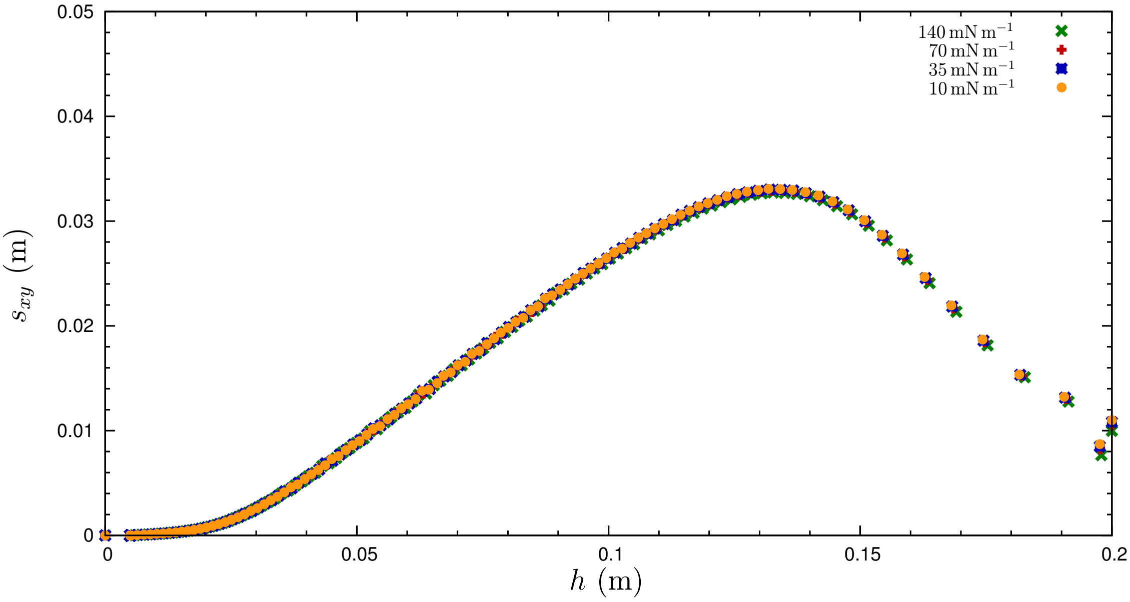


(e) $\gamma = 10\ \mathrm{mN\ m^{-1}}$

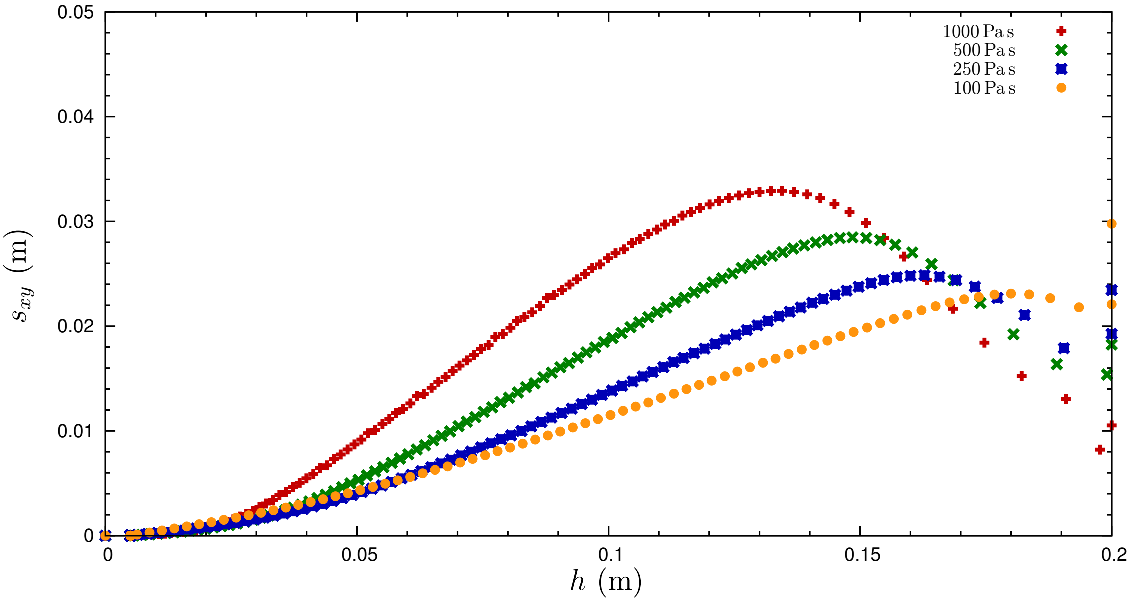


(f) $\eta = 100\ \mathrm{Pa\ s}$

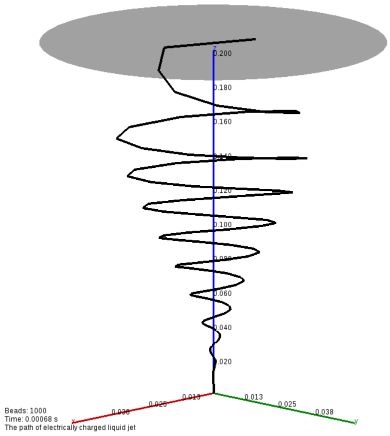
Obr. 8.17: Vliv povrchového napětí γ a dynamické viskozity η na trajektorii elektricky nabité trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.18 a obr. 8.19.



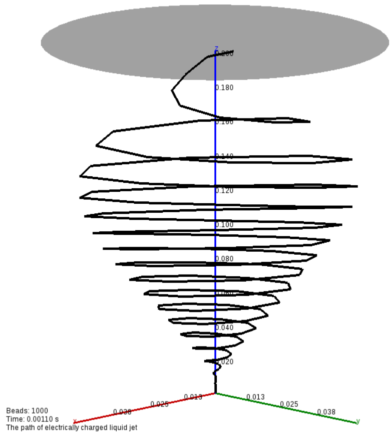
Obr. 8.18: Porovnání vlivu povrchového napětí γ *na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost* s_{xy} *nabitého hmotného bodu* i *v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci:* $\eta = 1\,000$ Pa s, $\varrho = 1\,000$ kg m^{-3}, $\tau = 10$ ms, $\varphi_1 = 1$ kV, $\varphi_2 = 0$ V, $I_0 = 2.93$ μA, $Q_V = 10.6$ mℓ hod^{-1}, $h = 200$ mm.



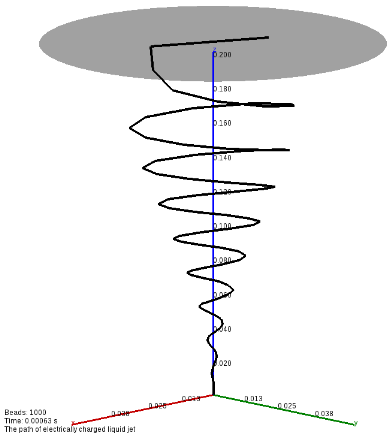
Obr. 8.19: Porovnání vlivu dynamické viskozity η *na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost* s_{xy} *nabitého hmotného bodu* i *v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci:* $\gamma = 70$ mN m^{-1}, $\varrho = 1\,000$ kg m^{-3}, $\tau = 10$ ms, $\varphi_1 = 1$ kV, $\varphi_2 = 0$ V, $I_0 = 2.93$ μA, $Q_V = 10.6$ mℓ hod^{-1}, $h = 200$ mm.



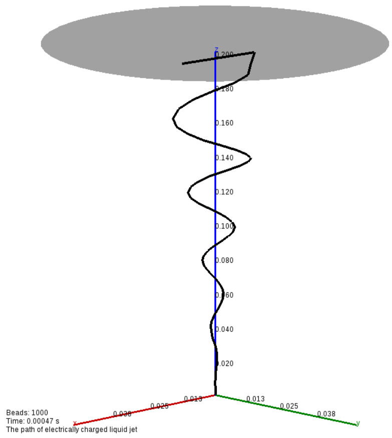
(a) $\tau = 20$ ms



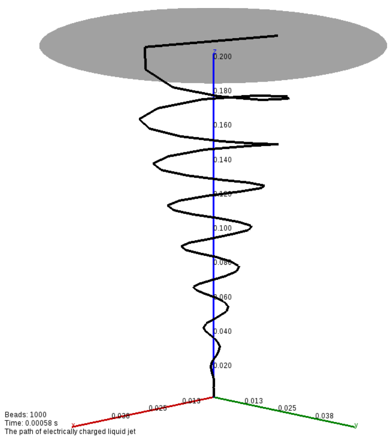
(b) $Q_V = 15.9$ mℓ hod^{-1}



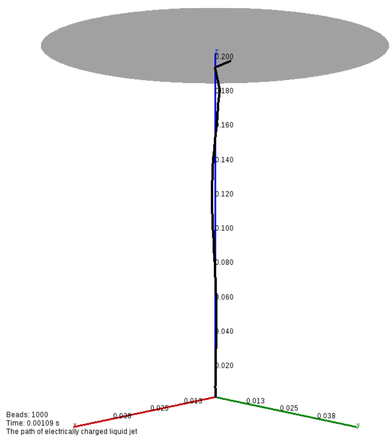
(c) $\tau = 40$ ms



(d) $Q_V = 5.3$ mℓ hod^{-1}

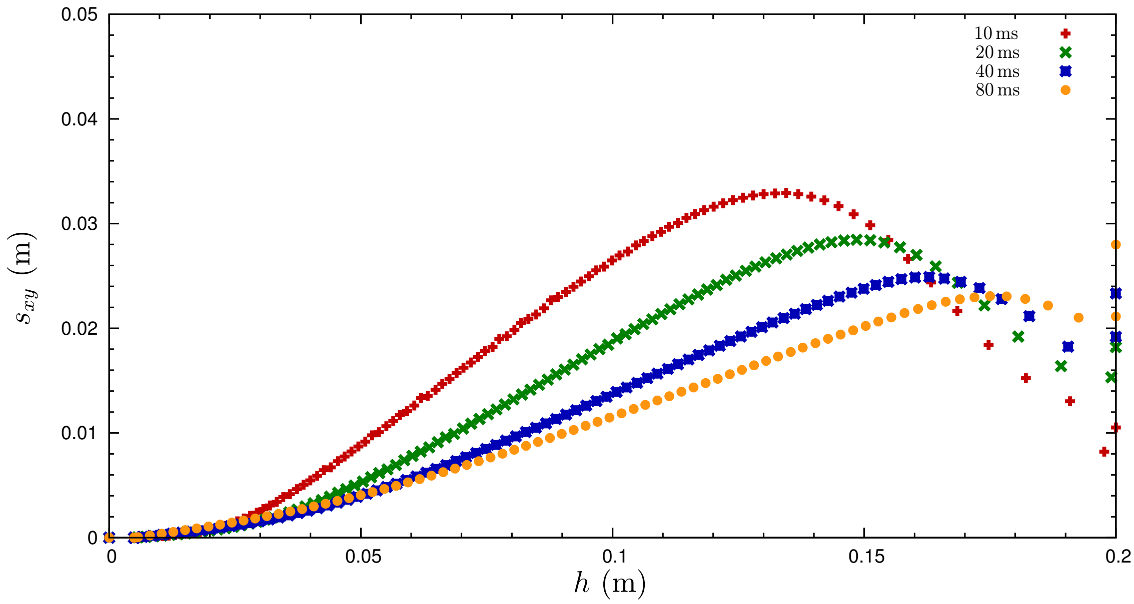


(e) $\tau = 80$ ms

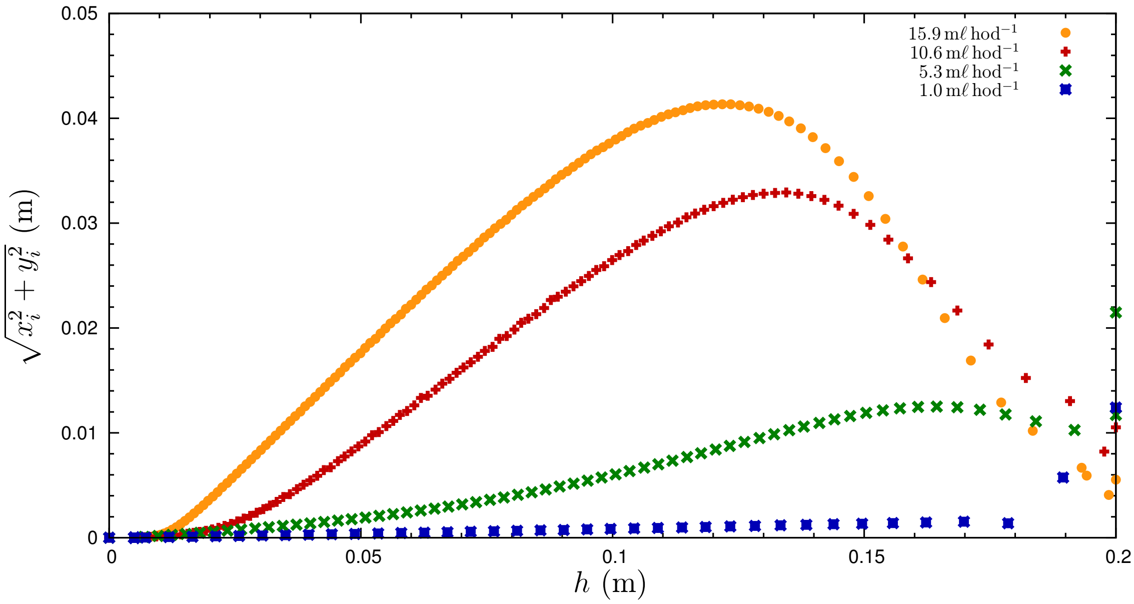


(f) $Q_V = 1$ mℓ hod^{-1}

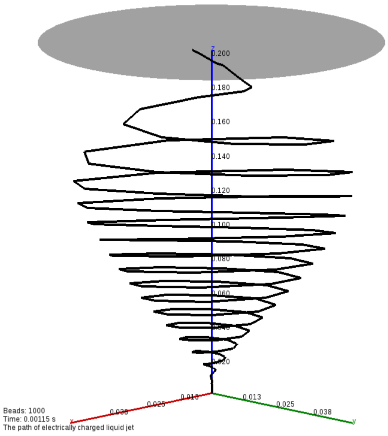
Obr. 8.20: Vliv relaxačního času $\tau = \eta/E$ a objemového průtoku Q_V roztoku na trajektorii elektricky nabité trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.21 a obr. 8.22.



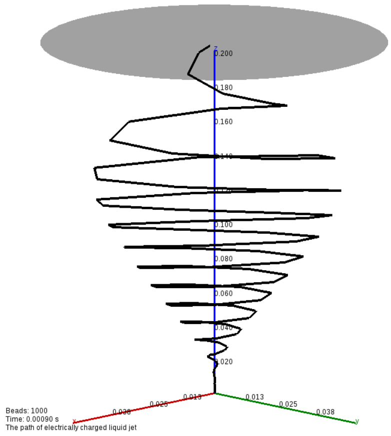
Obr. 8.21: Porovnání vlivu relaxačního času $\tau = \eta/E$ na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost s_{xy} nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\eta = 1\,000\,\mathrm{Pa\,s}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\varphi_1 = 1\,\mathrm{kV}$, $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, $I_0 = 2.93\,\mu\mathrm{A}$, $Q_V = 10.6\,\mathrm{m}\ell\,\mathrm{hod}^{-1}$, $h = 200\,\mathrm{mm}$.



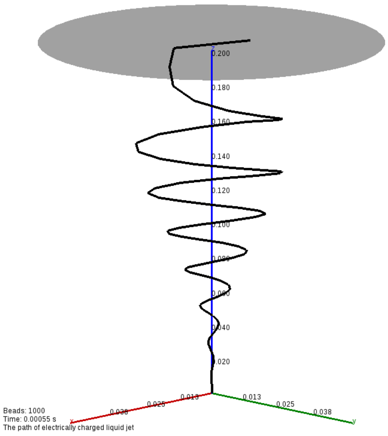
Obr. 8.22: Porovnání vlivu objemového průtoku Q_V na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost s_{xy} nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\eta = 1\,000\,\mathrm{Pa\,s}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\tau = 10\,\mathrm{ms}$, $\varphi_1 = 1\,\mathrm{kV}$, $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, $I_0 = 2.93\,\mu\mathrm{A}$, $h = 200\,\mathrm{mm}$.



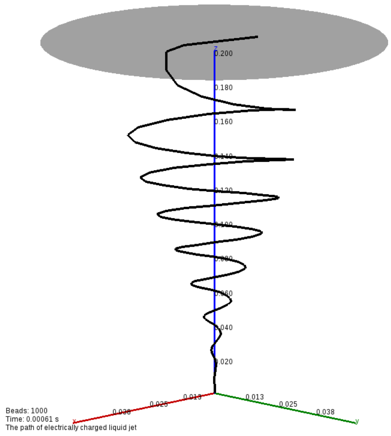
(a) $I_0 = 1.93\ \mu\mathrm{A}$



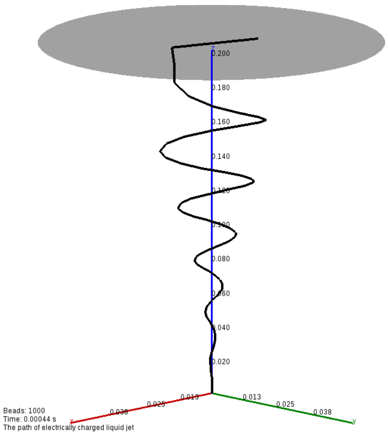
(b) $\varphi_1 - \varphi_2 = 500\ \mathrm{V}$



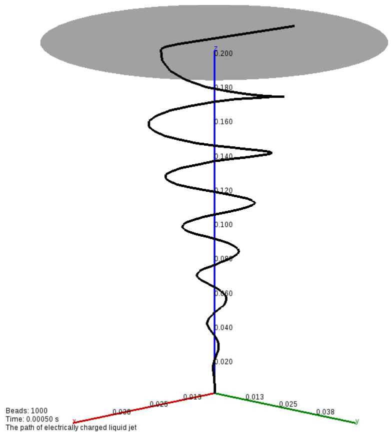
(c) $I_0 = 3.93\ \mu\mathrm{A}$



(d) $\varphi_1 - \varphi_2 = 2\ \mathrm{kV}$

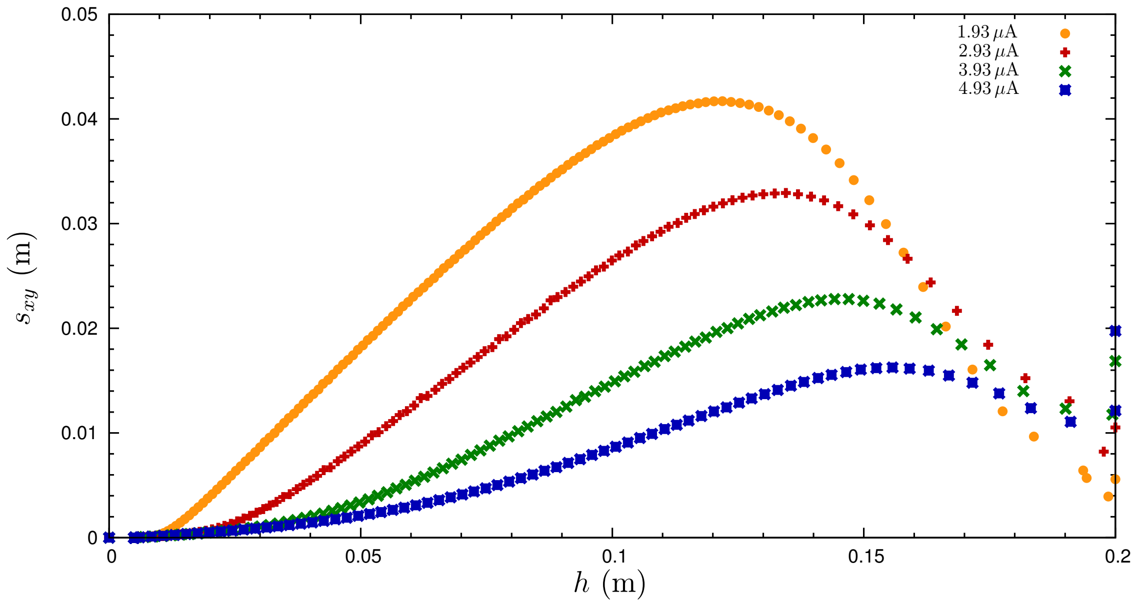


(e) $I_0 = 4.93\ \mu\mathrm{A}$

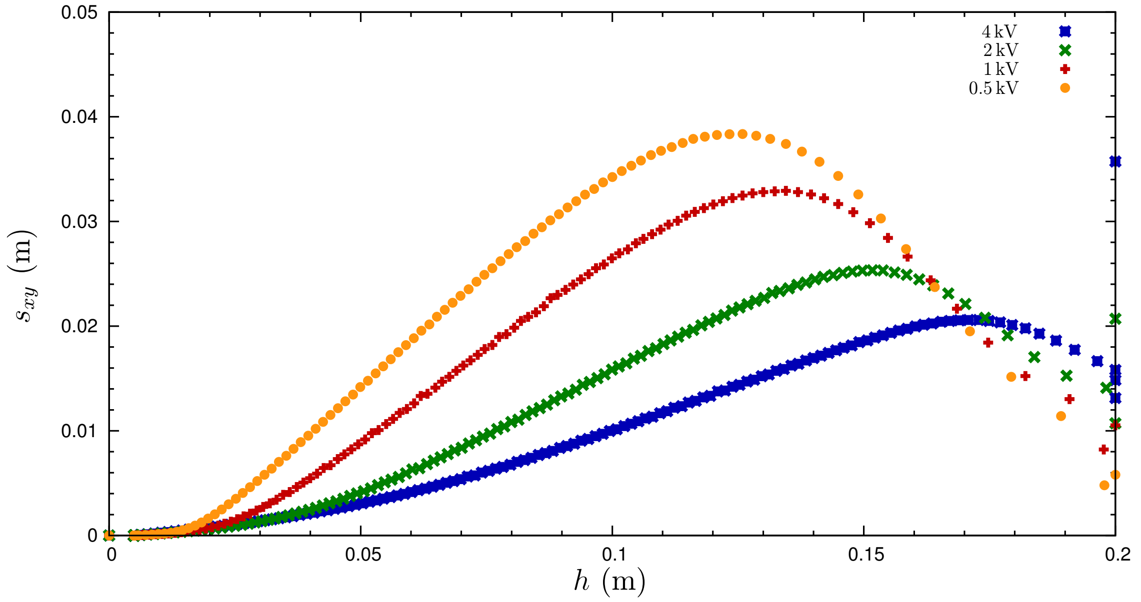


(f) $\varphi_1 - \varphi_2 = 4\ \mathrm{kV}$

Obr. 8.23: Vliv elektrického proudu I_0 a rozdílu elektrických potenciálů $\varphi_1 - \varphi_2$ na trajektorii elektricky nabité trysky. Parametry numerických simulací viz obr. 8.24 a obr. 8.25.



Obr. 8.24: Porovnání vlivu elektrického proudu I_0 v trysce na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost s_{xy} nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\eta = 1\,000\,\mathrm{Pa\,s}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\tau = 10\,\mathrm{ms}$, $\varphi_1 = 1\,\mathrm{kV}$, $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, $Q_V = 10.6\,\mathrm{m\ell\,hod^{-1}}$, $h = 200\,\mathrm{mm}$.



Obr. 8.25: Porovnání vlivu rozdílu elektrických potenciálů $\varphi_1 - \varphi_2$ na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje vzdálenost s_{xy} nabitého hmotného bodu i v závislosti na vzdálenosti od ústí kapiláry. Konstantní parametry při numerické simulaci: $\gamma = 70\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\eta = 1\,000\,\mathrm{Pa\,s}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\tau = 10\,\mathrm{ms}$, $\varphi_2 = 0\,\mathrm{V}$, $I_0 = 2.93\,\mu\mathrm{A}$, $Q_V = 10.6\,\mathrm{m\ell\,hod^{-1}}$, $h = 200\,\mathrm{mm}$.

Kapitola 9

Validace počítačového modelu

Validací je myšleno ověření, zda počítačový, resp. matematický 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

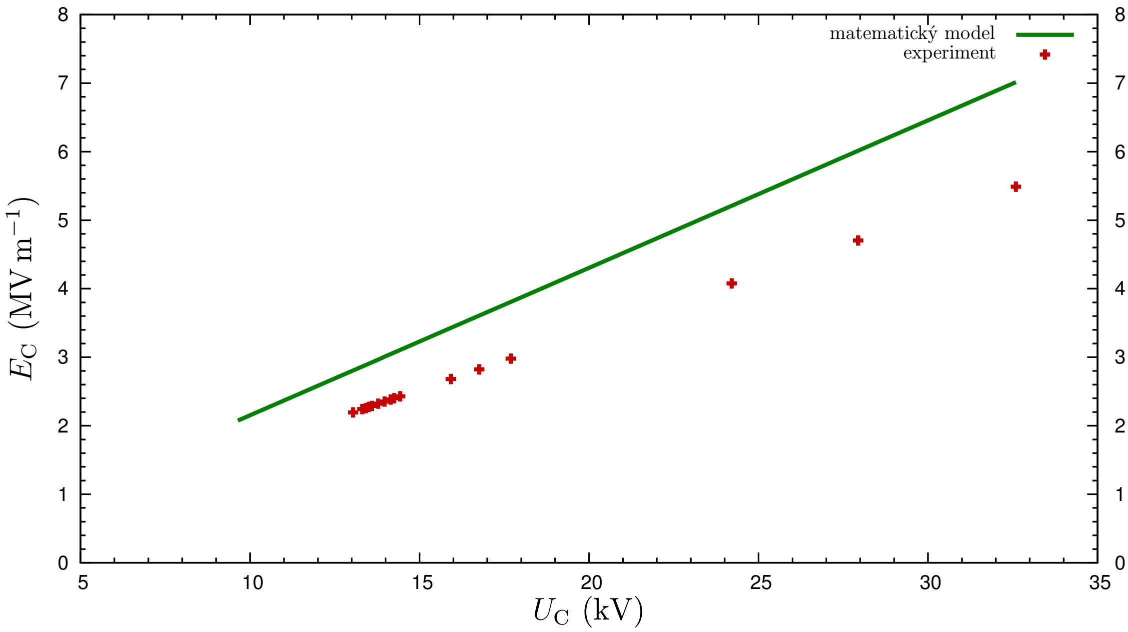
Validace matematického modelu elektrostatického pole uzemněného diskového kolektoru (viz str. 25, čl. 4.1.1) byla provedena prostřednictvím velikosti kritické intenzity E_c vnějšího elektrostatického pole pro vznik polymerní trysky (viz [15])

$$E_\mathrm{c} = \sqrt[4]{\frac{4\,\gamma\,\varrho\,g}{\varepsilon_0^2\,\varepsilon_\mathrm{r}^2}}, \tag{9.1}$$

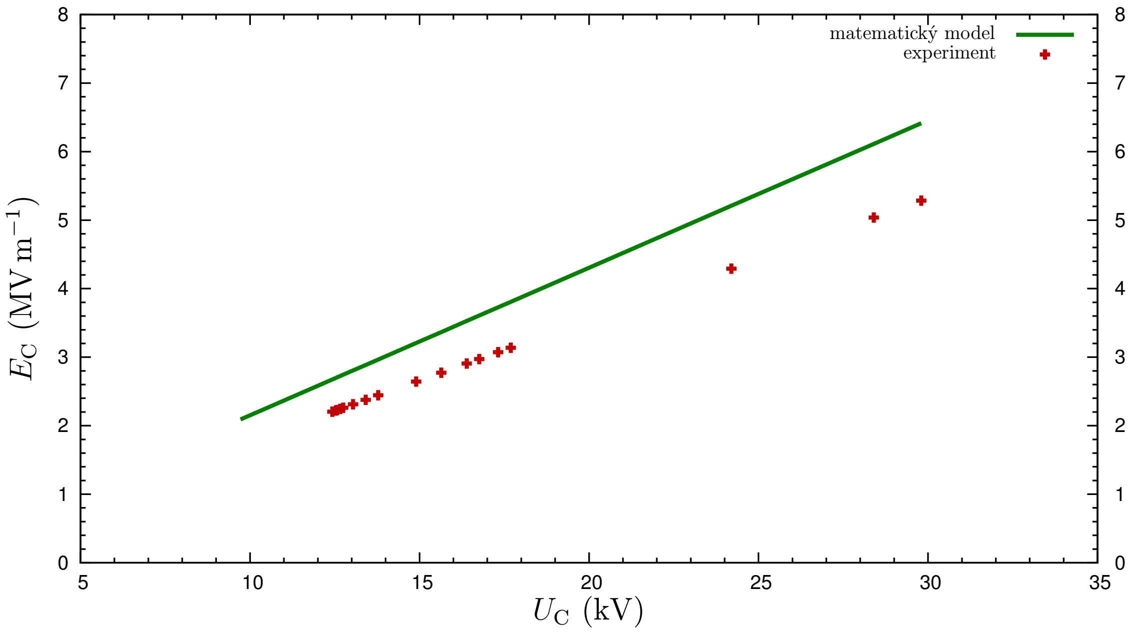
kde g je tíhové zrychlení, a kritického elektrického napětí U_c v kV (viz [16, 32])

$$U_\mathrm{c} = \sqrt{46\,800\,\pi\,\ln\left(\frac{2\,h}{r}\right)\gamma\,r}, \tag{9.2}$$

kde r je poloměr kapiláry. Experimentální data byla převzata z diplomové práce Antonie Hazuchové (viz [9]). Autorka práce [9] pro své experimenty použila 10% vodný roztok PVA ($\gamma = 45.58\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$) a 12% vodný roztok PVA ($\gamma = 46.29\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, $\varrho = 1\,000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$). Elektrostatické zvlákňování realizovala z ocelové tyčky o poloměru $r = 5\,\mathrm{mm}$. Kolektor byl uzemněný ocelový disk o průměru $D = 150\,\mathrm{mm}$. Vzdálenost mezi tyčkou a kolektorem byla $h = 40\,\mathrm{mm}$.



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: $E_c = 2.185\,\mathrm{MV\,m^{-1}}$, $U_c = 9.64\,\mathrm{kV}$.



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: $E_c = 2.193\,\mathrm{MV\,m^{-1}}$, $U_c = 9.72\,\mathrm{kV}$.

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 začne zvlákňování, jsou pro srovnání uvedeny v tab. 9.1 a tab. 9.2. Hodnoty získané pomocí autorem vytvořeného modelu 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, 32]	model	experiment [9]
E_c (MV m^{-1})	2.185	2.185	2.196
$U_c \equiv \varphi_1$ (kV)	9.64[a]	10.15	13.04

[a]Velikost intenzity pole ve vrcholu kapky vypočtená z modelu je $|\boldsymbol{E}| = 2.075$ MV m^{-1}.

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

	teorie [15, 32]	model	experiment [9]
E_c (MV m^{-1})	2.193	2.193	2.205
$U_c \equiv \varphi_1$ (kV)	9.72[a]	10.19	12.43

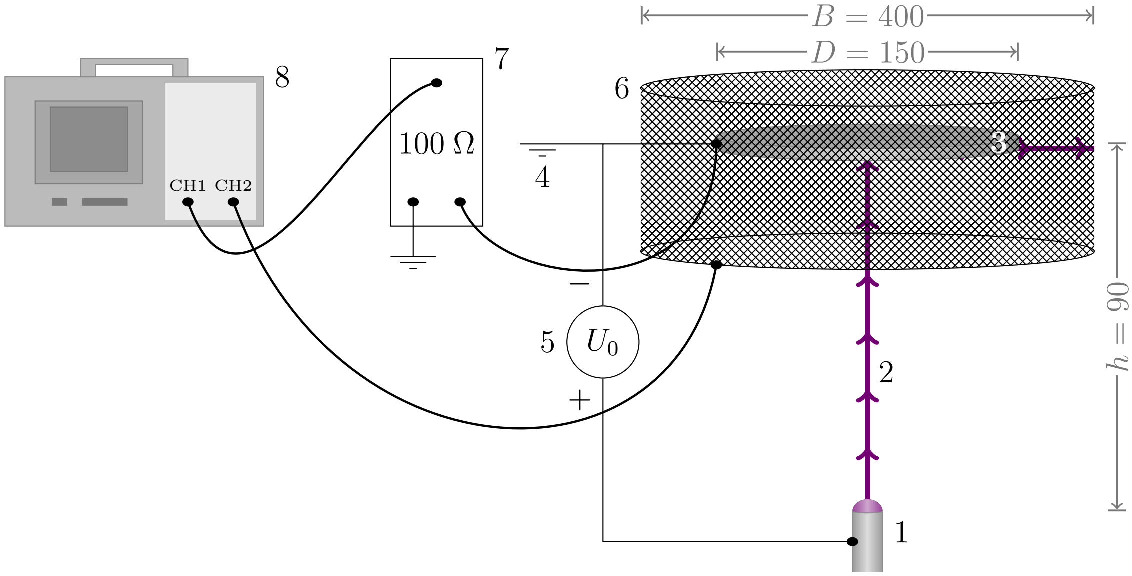
[a]Velikost intenzity pole ve vrcholu kapky vypočtená z modelu je $|\boldsymbol{E}| = 2.092$ MV m^{-1}.

9.2 Validace velikosti elektrického náboje přenášeného tryskou

Na obr. 9.3 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. 9.3), 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 nesoucí náboj trysky je

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



Obr. 9.3: Schema experimentu pro měření elektrického náboje. 1—zvlákňovací elektroda, 2—uvažovaná trajektorie materiálové částice, 3—uzemněný diskový kolektor, 4—uzemnění, 5—vysokonapěťový zdroj, 6—buben, 7—snímací odpor, 8—osciloskop.

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

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

Autoři článku [36] uvádějí, že doba „letu“ materiálového bodu je, na základě numerického výpočtu, menší než 20 ms. Nicméně je potřeba poznamenat, že autoři uvažují ve svém modelu elektrostatického zvlákňování bezodporové prostředí. Rychlost částice je v místě kolektoru

$$v_1 = a\,t_1 = 74.9\ \mathrm{m\,s^{-2}} \times 49 \times 10^{-3}\ \mathrm{s} = 3.7\ \mathrm{m\,s^{-1}}$$

a v místě bubnu

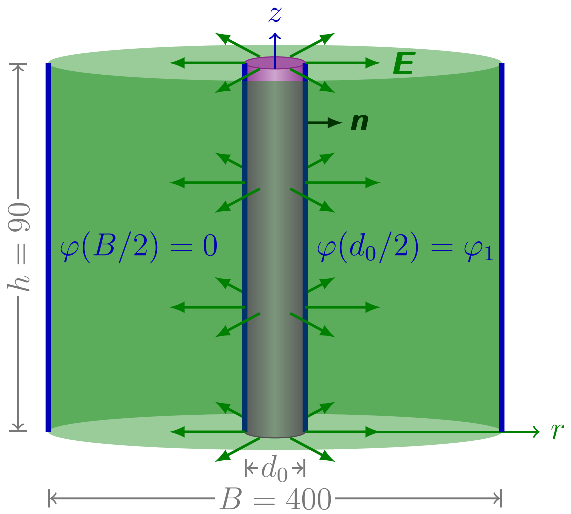
$$v_2 = a\,t_2 = 74.9\ \mathrm{m\,s^{-2}} \times 88 \times 10^{-3}\ \mathrm{s} = 6.6\ \mathrm{m\,s^{-1}}.$$

Reneker a Yarin ve svém souhrnném článku [24] uvádějí, že průměrná rychlost se pohybuje obvykle v rozsahu 1–5 $\mathrm{m\,s^{-1}}$. Celkový náboj za dobu t_1 je potom

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

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

$$d_0 = \sqrt{\frac{4\,I_0\,h}{\pi\,\kappa\,(\varphi_1 - \varphi_2)}} = \sqrt{\frac{4 \times 4.64 \times 10^{-6}\ \mathrm{A} \times 90 \times 10^{-3}\ \mathrm{m}}{\pi \times 57.7 \times 10^{-3}\ \mathrm{S\,m^{-1}} \times 20 \times 10^{3}\ \mathrm{V}}} = 22\ \mu\mathrm{m}. \tag{9.3}$$



Obr. 9.4: Elektrické pole válcové trysky uvnitř bubnu (viz obr. 9.3). 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

$$\oint_S \boldsymbol{E}\,\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \frac{Q}{\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}}.$$

Protože jsou vektory intenzity kolmé na plášť trysky (viz obr. 9.4) a tok intenzity podstavami je nulový, lze přejít od vektorového zápisu ke skalárnímu. Radiální intenzita elektrického pole vně válcové trysky je určena vztahem

$$E(r) = \frac{Q}{2\,\pi\,\varepsilon_0\,\varepsilon_\mathrm{r}\,h}\,\frac{1}{r}. \tag{9.4}$$

Elektrický potenciál je potenciální energie vztažená 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

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

Po dosazení do vztahu (9.4) se dostane

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

Velikost elektrické intenzity na povrchu válcové trysky je tedy

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

Celkový náboj uvnitř válcové trysky je potom

$$\begin{aligned} Q &= 2\,\pi\,\varepsilon_0\,\bar{\varepsilon}_\mathrm{r}\,h\,E(d_0/2)\,d_0/2 \\ &= 2 \times \pi \times 8.85 \times 10^{-12}\ \mathrm{F\ m^{-1}} \times 65.99 \times 90 \times 10^{-3}\ \mathrm{m} \times 185 \times 10^{6}\ \mathrm{V\ m^{-1}} \times \\ &\quad 11 \times 10^{-6}\ \mathrm{m} \\ &= 6.72 \times 10^{-7}\ \mathrm{C}, \end{aligned}$$

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

Část VI

DISKUSE VÝSLEDKŮ A ZÁVĚR

Kapitola 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 odpovídá kapitole věnované numerickým 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 a potom začne narůstat podobným způsobem jako exponenciální funkce. Průběh výslednic sil $\boldsymbol{F}_{\mathrm{VC}}$ a $\boldsymbol{F}_{\mathrm{VM}}$ 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. 7, obr. 1.1). Porovnáním výsledků na obr. 8.1(a) a obr. 8.1(b) je patrné, že pokud jsou nabité hmotné body A, B a C vzájemně propojeny reologickými prvky [viz str. 20, obr. 3.2(b)], výslednice viskoelastických sil $\boldsymbol{F}_{\mathrm{VM}}$ má tendenci vyrovnávat nestabilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}}$. Nabitý hmotný bod B, byl při experimentu (viz odst. 8.1) 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 $v_B^* = 6.07$ a v případě obr. 8.1(b) byl $t^* = 71.441$, $v_B^* = 0.95$. Pro lepší srovnání má časová osa v obou případech stejný rozsah. Pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability (viz str. 18, odst. 3.4), jenž byl navržený Renekerem a Yarinem, lze považovat za relevantní v souvislosti s elektrostatickým zvlákňováním.

Přímočará elektricky nabitá tryska v elektrostatickém poli

Analýzou dat získaných na základě několika numerických experimentů, jež si kladly za cíl zjistit chování elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky ve vnějším homogenním elektrostatickém poli, lze dospět k následujícím závěrům. V případě experimentu s jednou „viskoelastickou činkou“ (viz obr. 8.2) je průběh normálového napětí σ a viskoelastické síly $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}}$ 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 trysky zmenšil 10-krát a její délka se zvětšila 100-krát (viz obr. 8.3). Výsledky odpovídají zákonu zachování objemu, neboť se neuvažovalo s odstraňováním rozpouštědla, $\Lambda = 1$. Štíhlost zelektrizované trysky je tedy $l_{\mathrm{f}}/d_{\mathrm{f}} = 10$.

Detailnější pohled na chování elektricky nabité trysky do okamžiku přidání nového elementu dávají experimenty vykreslené na obr. 8.4 a obr. 8.5. Zde je vidět, že do tohoto okamžiku nedochází k uplatnění Newtonova členu reologického modelu. V tomto případě je možné modelovat viskoelastické chování polymerního roztoku pouze lineární pružinou. Štíhlost trysky je $l_{\mathrm{f}}/d_{\mathrm{f}} = 2.86$.

Poslední série experimentů, obr. 8.6–obr. 8.14 a obr. 8.7–obr. 8.15, studovaly chování postupně se tvořícího „řetězce viskoelastických činek“. Výsledky ukazují výrazné skokové změny v průbězích elektrostatických odpuzujících sil $\boldsymbol{F}_{\mathrm{C}}$ a viskoelastických sil $\boldsymbol{F}_{\mathrm{M}}$ v okamžiku přidání nového elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky. Tento nežádoucí efekt „korálkového–pružinového“ modelu[10.1] by, dle autorova názoru, odstranila náhrada elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky jednorozměrným kontinuem.

Výpočet trajektorie elektricky nabité trysky

Na úvod tohoto odstavce je nutno podotknout, že odhad některých parametrů numerického modelu je velmi obtížný. Jedná se zejména o elektrický náboj q kapalinové trysky, úhlovou frekvenci ω perturbace nebo její amplitudu A.

Z výsledků znázorněných na obr. 8.18 je zřejmé, že povrchové napětí γ, tak jak je definováno v matematickém modelu (viz str. 35, čl. 4.2.4), nemá žádný vliv na změnu trajektorie zelektrizované trysky. Toto konstatování dává za pravdu autorům

[10.1] Anglicky bead–spring model.

článku [24], přestože autorovo očekávání bylo opačné, neboť dloužení vede ke zvětšování povrchu kapalinové trysky. Na tomto místě by chtěl autor také polemizovat s tvrzením autorů článku [39], které zní: ohýbání kapalinové trysky vede ke zvětšování jejího povrchu. Autor výpočtem ověřil, že ohýbáním válce ke zvětšování jeho povrchu nedochází.

Velmi důležitým parametrem, jenž ovlivňuje proces elektrostatického zvlákňování, je dynamická viskozita η polymerního roztoku. Výsledky na obr. 8.19 ukazují, že snižování viskozity roztoku vede k zúžení kuželové spirály. Důsledkem toho je menší stupeň dloužení kapalinové trysky a tedy větší průměr výsledných nanovláken. Zde dochází ke sporu s experimenty, neboť zvlákňováním polymerních roztoků o velké dynamické viskozitě η jsou produkována nanovlákna s větším průměrem (viz např. [2, 4, 5, 7]). Příčinou tohoto sporu může být hodnota relaxačního času τ a Youngova modulu pružnosti E, které zůstaly při numerických experimentech konstantní. Ve skutečnosti jsou všechny fyzikální veličiny provázané.
Stejná situace je i v případě relaxačního času τ a jeho vlivu na trajektorii trysky. Jestliže je dynamická viskozita η konstantní, tak se s prodlužujícím relaxační časem τ musí snižovat Youngův modul pružnosti E. To jinými slovy znamená, že je, při stejné deformaci způsobené vnějším elektrostatickým polem, v kapalinové trysce menší mechanické normálové napětí σ [viz str. 18, rov. 3.2]. Protože normálové napětí σ stabilizuje přímý úsek kapalinové trysky, mělo by potlačovat růst bičující nestability. Výsledky numerických experimentů znázorněných na obr. 8.21 ukazují opačný trend. Autor proto provedl další numerické simulace, kde společně s dynamickou viskozitou η měnil i relaxační čas τ. Výsledky počítačových simulací byly již v souladu s experimenty. Přestože nejsou původní výsledky v souladu s realitou, neměly bychom je zavrhovat, neboť měnit jen určité parametry procesu, je jednou z výhod počítačové simulace. Závěrem tohoto odstavce je nutno poznamenat, že dynamická viskozita η není ve skutečnosti materiálovou konstantou, ale mění se s postupným odstraňováním rozpouštědla a stupněm dloužení kapalinové trysky.

V souladu s očekáváním autora jsou výsledky vlivu objemového průtoku Q_V roztoku kapilárou na trajektorii elektrický nabité trysky. S klesajícím objemovým průtokem Q_V polymerního roztoku, roste, za předpokladu konstantního elektrického proudu I_0, objemová hustota náboje, $q_\varrho = I_0/Q_V$, ze které je vypočítána hodnota náboje q přiřazená nabitým hmotným bodům trysky. Se vzrůstající hodnotou nápoje q, těchto hmotných bodů, dochází k jejich rychlejšímu pohybu směrem ke kolektoru.

Důsledkem toho je zmenšování kuželové spirály bičující nestability, tak jak ukazují výsledky na obr. 8.22.
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. Z výsledků vykreslených na obr. 8.24 je vidět, že vzrůstající elektrický proud I_0 trysky vede ke zmenšování šířky zóny bičující nestability.

Poslední ze série počítačových simulací bičující nestability 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 (viz např. [8, 25]). Na obr. 8.25 jsou znázorněny výsledky experimentů, které jsou opět v souladu s experimenty i očekáváním autora.

Kapitola 11

Závěr a doporučení pro další práci

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

Shrnutím dosažených výsledků, získaných na základě počítačových simulací, lze dospět k závěru, že matematický model, resp. počítačový model je schopen predikovat vliv parametrů na proces elektrostatického zvlákňování. Výstupem práce je především počítačová aplikace pro efektivní simulaci procesu elektrostatického zvlákňování, která vědeckým pracovníkům umožní rychlejší vývoj nanovlákenných 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, resp. počítačového 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 uzemněný kolektor a speciální (drátový) kolektor, které umožňují vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace. Pohybové rovnice byly odvozeny tak, aby umožňovaly zahrnout vliv úbytku hmotnosti a náboje v důsledku postupného odstraňování rozpouštědla. 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.

Na základě poznatků vlastních i uvedených v citované literatuře by autor dále doporučoval postupovat při vývoji počítačového modelu v následujících krocích:

- provést analýzu stability soustavy nelineárních obyčejných diferenciální rovnic;
- nahradit element přímočaré zelektrizované trysky jednorozměrným kontinuem;
- navrhnout výpočet koeficientu úbytku objemu;
- zahrnout změnu dynamické viskozity v závislosti na odstraňování rozpouštědla ze zvlákňovaného polymerního roztoku;
- zahrnout elektrický vítr, který je podle práce [21] dalším důležitým jevem doprovázející elektrostatické zvlákňování;
- implementovat algoritmus pro náhodné generování perturbace;
- implementovat algoritmus rozdělující po určité délce element ideální přímočaré zelektrizované trysky na dvě části;
- zvážit přeformulování počáteční Cauchyho úlohy na optimalizační úlohu.

Literatura

[1] 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.

[2] BAUMGARTEN, P. K. Electrostatic spinning of acrylic microfibers. *Journal of Colloid and Interface Science*. May 1971, vol. 36, iss. 1, s. 71 – 79.

[3] DAVIS, J. R. *Tensile Testing*. 2nd edition. Praha : ASM International, 2004. 283 pp. ISBN 978–0–87170–806–9.

[4] 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.

[5] 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.

[6] 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.

[7] FONG, H. – CHUN, I. – RENEKER, D. H. Beaded nanofibers formed during electrospinning. *Polymer*. July 1999, vol. 40, iss. 16, s. 4 585 – 4 592.

[8] 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.

[9] 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.

[10] 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.

[11] 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.

[12] HORÁK, Z. – KRUPKA, F. *Fyzika*. Praha : SNTL/ALFA, 1996.

[13] 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.

[14] 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.

[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] LUKÁŠ, D. et al. Physical principles of electrospinning (Electrospinning as a nano-scale technology of the twenty-first century). *Progress In Textile Progress*. June 2009, vol. 41, iss. 2, s. 59 – 140.

[17] MEISSNER, B. – ZILVAR, V. *Fyzika polymerů: Struktura a vlastnosti polymerních materálů*. 1. vyd. Praha : SNTL, 1987. 308 s.

[18] MOTT, R. L. *Applied Fluid Mechanics*. 3rd edition. Columbus : Merrill, 1990. 645 pp. ISBN 0–02–946320–3.

[19] NAGY, J. *Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic*. 2. vyd. Praha : SNTL, 1983. 112 s.

[20] PETRŽÍLKA, V. – ŠAFRATA, S. *Elektřina a magnetismus.* 2. vyd. Praha : ČSAV, 1956. 637 s.

[21] 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.

[22] PŘIKRYL, P. *Numerické metody matematické analýzy.* 2. vyd. Praha : SNTL, 1988. 187 s.

[23] 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.

[24] RENEKER, D. H. – YARIN, A. L. Electrospinning jets and polymer nanofibers. *Progress In Polymer Science.* May 2008, vol. 49, iss. 10, s. 2 387 – 2 425.

[25] 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.

[26] RENEKER, D. H. et al. Electrospinning of nanofibers from polymer solutions and melts. *Advances in Applied Mechanics.* July 2007, vol. 41, s. 43 – 195, 345 – 346.

[27] RŮŽIČKOVÁ, J. *Elektrostatické zvlákňování nanovláken.* 2. vyd. Liberec : TUL, 2006. 54 s. ISBN 80–7372–066–3.

[28] SEDLÁK, B. – ŠTOLL, I. *Elektřina a magnetismus.* 2. vyd. Praha : ACADEMIA, 2002. 632 s. ISBN 80–200–1004–1.

[29] 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.

[30] 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.

[31] 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.

[32] 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.

[33] TEO, W. E. – RAMAKRISHNA, S. A review on electrospinning design and nanofibre assemblies. *Nanotechnology*. July 2006, vol. 17, iss. 14, s. 89 – 106.

[34] THERON, S. A. – ZUSSMAN, E. – YARIN, A. L. Experimental investigation of the governing parameters in the electrospinning of polymer solutions. *Progress In Polymer Science*. March 2004, vol. 45, iss. 6, s. 2 017 – 2 030.

[35] THERON, S. A. et al. Multiple jets in electrospinning: experiment and modeling. *Progress In Polymer Science*. April 2005, vol. 46, iss. 9, s. 2 889 – 2 899.

[36] 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.

[37] 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.

[38] WATANABE, H. Viscoelasticity and dynamics of entangled polymers. *Progress in Polymer Science*. November 1999, vol. 24, iss. 9, s. 1 253 – 1 403.

[39] YARIN, A. L. *Free liquid jets and films: hydrodynamics and rheology*. 1st edition. New York : Longman Scientific & Technical, 1993. 446 pp. ISBN 978–0582102958.

[40] 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.

[41] 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.

[42] YATES, R. C. *Curves and their properties.* Reston : National Council of Teachers of Mathematics, 1974. 245 pp.

[43] 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.

[44] 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.

PŘÍLOHY

Příloha A

Publikační činnost autora

Seznam publikací

[1] ŠIMKO, M. Modelování bičující ohybové nestability při elektrostatickém zvlákňování. 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.

[2] 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.

[3] 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.

[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.

[5] 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.

[6] 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.

[7] 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–???–?

[8] ŠIMKO, M. – CHVOJKA, J. – ERHART, J. – LUKAŠ, D. Computer simulation and experiment of electrospinning with a special collector. (in progress).

Příloha B

Pomocné vztahy

Definiční vztahy

$$\boldsymbol{r}_{i-1} = x_{i-1}\,\boldsymbol{i} + y_{i-1}\,\boldsymbol{j} + z_{i-1}\,\boldsymbol{k}, \tag{B.1a}$$

$$\boldsymbol{r}_{i} = x_{i}\,\boldsymbol{i} + y_{i}\,\boldsymbol{j} + z_{i}\,\boldsymbol{k}, \tag{B.1b}$$

$$\boldsymbol{r}_{i+1} = x_{i+1}\,\boldsymbol{i} + y_{i+1}\,\boldsymbol{j} + z_{i+1}\,\boldsymbol{k}, \tag{B.1c}$$

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

$$|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i| \equiv l_{i,i+1} = \sqrt{(x_{i} - x_{i+1})^2 + (y_{i} - y_{i+1})^2 + (z_{i} - z_{i+1})^2}. \tag{B.2b}$$

Celkovou rychlost přetvoření elementu ideální přímočaré elektricky nabité trysky je v případě velkých deformací potřeba vyjádřit pomocí skutečné rychlosti přetvoření, která je dána (viz [3, str. 21]) vztahem

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{l}\,\frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t}. \tag{B.3}$$

Časová derivace délky elementu ideální přímočaré elektricky nabité trysky je dána vztahy

$$\frac{\mathrm{d}l_{i-1,i}}{\mathrm{d}t} = \frac{(\boldsymbol{r}_{i-1} - \boldsymbol{r}_i)\cdot(\boldsymbol{v}_{i-1} - \boldsymbol{v}_i)}{l_{i-1,i}}, \tag{B.4a}$$

$$\frac{\mathrm{d}l_{i,i+1}}{\mathrm{d}t} = \frac{(\boldsymbol{r}_{i} - \boldsymbol{r}_{i+1})\cdot(\boldsymbol{v}_{i} - \boldsymbol{v}_{i+1})}{l_{i,i+1}}. \tag{B.4b}$$

Příloha C

Odvození bezrozměrných rovnic

Kinematická rovnice

Vyjádřením rozměrových souřadnic z definičních rovnic (5.9) se dostane

$$x_i = x_i^* \, L, \qquad y_i = y_i^* \, L, \qquad z_i = z_i^* \, L. \tag{C.1}$$

Složky polohového vektoru $\boldsymbol{r}_i \equiv \{x_i, y_i, z_i\}^{\mathrm{T}}$ jsou s využitím (C.1) a (5.12) funkce

$$x_i = x_i\Big(x_i^*\big(t^*(t)\big)\Big), \quad y_i = y_i\Big(y_i^*\big(t^*(t)\big)\Big), \quad z_i = z_i\Big(z_i^*\big(t^*(t)\big)\Big). \tag{C.2}$$

Derivováním vztahů (C.2) podle času t se dostane

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}x_i^*}\,\frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = L\,\frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau},\\
\frac{\mathrm{d}y_i}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}y_i}{\mathrm{d}y_i^*}\,\frac{\mathrm{d}y_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = L\,\frac{\mathrm{d}y_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}y_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau},\\
\frac{\mathrm{d}z_i}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}z_i}{\mathrm{d}z_i^*}\,\frac{\mathrm{d}z_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = L\,\frac{\mathrm{d}z_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}z_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau}.
\end{aligned} \tag{C.3}$$

Vektor okamžité rychlosti je určen derivací polohového vektoru podle času t

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}y_i}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{j} + \frac{\mathrm{d}z_i}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{k}. \tag{C.4}$$

Dosazením (C.3) do vztahu (C.4) se dostane

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\,\frac{\tau}{L} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i^*}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}y_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{j} + \frac{\mathrm{d}z_i^*}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{k}.$$

Zavedením bezrozměrné veličiny

$$\boldsymbol{v}_i^* = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\,\frac{\tau}{L} \tag{C.5}$$

se dostane kinematická rovnice v bezrozměrném tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i^*}{\mathrm{d}t^*} = \boldsymbol{v}_i^*. \tag{C.6}$$

Složky vektoru okamžité rychlosti $\boldsymbol{v}_i \equiv \{v_{ix}, v_{iy}, v_{iz}\}^{\mathrm{T}}$ jsou s využitím (C.3) a (5.12) funkce

$$v_{ix} = v_{ix}\Big(v^*_{ix}\big(t^*(t)\big)\Big), \quad v_{iy} = v_{iy}\Big(v^*_{iy}\big(t^*(t)\big)\Big), \quad v_{iz} = v_{iz}\Big(v^*_{iz}\big(t^*(t)\big)\Big). \tag{C.7}$$

Derivováním vztahů (C.7) podle času t se dostane

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}v_{ix}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}v_{ix}}{\mathrm{d}v^*_{ix}}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{ix}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = \frac{L}{\tau}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{ix}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}v^*_{ix}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau^2},\\
\frac{\mathrm{d}v_{iy}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}v_{iy}}{\mathrm{d}v^*_{iy}}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{iy}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = \frac{L}{\tau}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{iy}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}v^*_{iy}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau^2},\\
\frac{\mathrm{d}v_{iz}}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}v_{iz}}{\mathrm{d}v^*_{iz}}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{iz}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = \frac{L}{\tau}\,\frac{\mathrm{d}v^*_{iz}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}v^*_{iz}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{L}{\tau^2}.
\end{aligned} \tag{C.8}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}v_{ix}}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}v_{iy}}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{j} + \frac{\mathrm{d}v_{iz}}{\mathrm{d}t}\,\boldsymbol{k}. \tag{C.9}$$

Dosazením (C.8) do vztahu (C.9) se dostane

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t}\,\frac{\tau^2}{L} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}^*_i}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\mathrm{d}v^*_{ix}}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}v^*_{iy}}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{j} + \frac{\mathrm{d}v^*_{iz}}{\mathrm{d}t^*}\,\boldsymbol{k}. \tag{C.10}$$

Pohybová rovnice

Druhý Newtonův zákon je definován vztahem

$$m_i\,\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = \sum \boldsymbol{F}. \tag{C.11}$$

Dosazením (C.10) do (C.11) se dostane pohybová rovnice v bezrozměrném tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}^*_i}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\tau^2}{m_i\,L}\,\sum \boldsymbol{F}. \tag{C.12}$$

Konstitutivní rovnice

Normálové napětí působící v úseku mezi i-tým a $(i+1)$-ním nabitým hmotným bodem, tj. i-tém elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky, je s využitím (5.7) a (5.12) funkce

$$\sigma_{i,i+1} = \sigma_{i,i+1}\Big(\sigma^*_{i,i+1}\big(t^*(t)\big)\Big). \tag{C.13}$$

Derivováním vztahů (C.13) podle času t se dostane

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i,i+1}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\sigma_{i,i+1}}{\mathrm{d}\sigma^*_{i,i+1}}\,\frac{\mathrm{d}\sigma^*_{i,i+1}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{\mathrm{d}t^*}{\mathrm{d}t} = E\,\frac{\mathrm{d}\sigma^*_{i,i+1}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{1}{\tau} = \frac{\mathrm{d}\sigma^*_{i,i+1}}{\mathrm{d}t^*}\,\frac{E}{\tau}. \tag{C.14}$$

Využitím definičních vztahů (5.9) se po dosazeni do (B.2b) 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 i-tého elementu ideální přímočaré elektricky nabité trysky je v bezrozměrném tvaru následující

$$l_{i,i+1}^* = \frac{l_{i,i+1}}{L}. \tag{C.15}$$

Využitím (C.1), (C.3) a dosazením vztahů (C.14), (C.15) do (4.17b) se dostane konstitutivní rovnice Maxwellova modelu pro celkovou rychlost přetvoření v bezrozměrném tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i,i+1}^*}{\mathrm{d}t^*} = \frac{(\boldsymbol{r}_i^* - \boldsymbol{r}_{i+1}^*) \cdot (\boldsymbol{v}_i^* - \boldsymbol{v}_{i+1}^*)}{l_{i,i+1}^{*2}} - \sigma_{i,i+1}^*. \tag{C.16}$$

Příloha 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

Preambule

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 části se zříká) 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 kdokoliv 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 počinem 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) oznam 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 nezdrojová 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, spouštění (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 spouštění 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 vaším jménem, s vaším usměrňováním 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 přidaných 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) poskytli 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 neponechává 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 brané jako „další omezení“. Pokud Program, nebo jeho část, tak jak jste jej obdrželi, obsahuje zmínku o tom, že je licencovaný 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 napravíte 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 držiteli 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 obeznámení 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 Licenci 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 Licenci 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) vycházeje z toho, že tvorbou, používáním, prodejem, nabídnutím k prodeji, nebo dovážením Programu nebo jakékoli jeho části si nečiníte patentového nároku.

11. Patenty

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

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

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

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 uděleny. 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 Licenci 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 nespecifikuje 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 VÝSLOVNÉ 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 užitku, 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, zařiďte, aby se při startu v interaktivním módu vypsalo 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

Ing. Milan Šimko

Sazba systémem LaTeX.

Tisk LIVOX, s. r. o.
Frýdlantská 1359/19, 460 01 Liberec

Vazba Sdružení TULIPAN
Sokolská 113/8, 460 01 Liberec