

Oponentní posudek dizertační práce

Modelování a simulace bičující nestability při elektrostatickém zvlákňování

Autor dizertace: M. Šimko

Školitel: prof. RNDr. David Lukáš, CSc.

Dizertační práce je členěna do 6 částí (na 11 kapitol) a 4 příloh. V Úvodu práce je definován cíl dizertace – vytvořit matematický model bičující nestability při elektrostatickém zvlákňování, realizovat výpočetní program a provést numerické simulace.

Část I pojednává ve dvou krátkých kapitolách o principech elektrostatického zvlákňování a jeho parametrech (materiálových a procesních). První kapitola vysvětluje princip elektrostatického zvlákňování, druhá kapitola je pak rešeršní, shrnuje poznatky známé o tomto problému z dostupné literatury.

Část II se zabývá matematickým modelem přímočaré zelektrizované části kapalinové trysky. Udává základní předpoklady a aproximace pro popis přímočaré části trysky, analyzuje síly působící axiálně a normálově na element trysky („visko-elastická činka“) a sestavuje pohybové rovnice elementu trysky. Další kapitola popisuje zobecněný model trysky realizovaný sériově spojenými visko-elastickými činkami. Ve spojích se mohou činky vzájemně natáčet, jinak zůstávají přímočaré. K silám elektrostatického pole, viskoelastického a elektrostatického napínání trysky jsou v modelu doplněny ještě síly povrchové napětí a síla odporu prostředí při pohybu trysky ke kolektoru. Normálové výchylky trysky jsou realizovány vlivem perturbace ve formě kruhové vlny. Je vypočteno prostorové rozdělení intenzity elektrického pole pro uspořádání hrot-kruhový kolektor a hrot-drátový kolektor, který je experimentálně používán pro směrové ukládání nanovláken.

V Části III je model převeden na bezrozměrné veličiny, matematicky diskretizován a je vybrána numerická metoda jeho řešení.

V Části IV je popsán navržený počítačový model, algoritmus výpočtu a validace výpočetní metody prediktor-korektor na příkladu pohybové rovnice harmonického oscilátoru.

Část V je věnována vlastním výpočtům a simulacím s použitím vytvořeného počítačového programu. První z kapitol se věnuje simulaci časových průběhů sil působících na trysku, průměru a délky přímočaré trysky pro jeden element a dva elementy. Dále pak simuluje trajektorie bičující trysky v závislosti na povrchovém napětí, viskozitě, relaxačním času viskoelastického modelu, průtoku, elektrickém proudu tryskou a použitým napětí mezi tryskou a kolektorem. Je také simulováno ukládání nanovláken na drátový kolektor – pro malé vzdálenosti drátů kolektoru dochází k ukládání rovnoběžně s dráty, pro větší vzdálenosti pak převážně kolmo na ně. Druhá kapitola se týká výsledků simulací pomocí použitého modelu vzhledem k parametrům zvlákňování, jako jsou kritické pole a elektrický náboj přenášený tryskou. Vypočtené hodnoty jsou srovnávány s experimentálními daty reálného experimentu s dobrou shodou.

Poslední Část VI se zabývá diskuzí výsledků a závěrečnými doporučeními pro další práci s modelem.

Dizertační práce obsahuje požadované části – popis stavu problematiky s odkazy na literaturu, návrh vlastního řešení, cíle dizertace, anotace, seznam použité literatury, seznam vlastních prací k tématu dizertace, prohlášení o duševním vlastnictví a autorských právech. Publikace posluchače jsou uváděny ve formě jednoho článku publikovaného v mezinárodním časopise, jednoho článku v recenzním řízení a sedmi konferenčních příspěvků. Původní výsledky dizertace o průběhu elektrostatického pole drátového kolektoru již byly uplatněny v recenzované publikaci, matematická simulace bičující trysky je dosud v recenzním řízení.

Význam dizertační práce pro obor elektrostatického zvlákňování lze spatřovat v simulaci kritického pole a náboje přenášeného tryskou během procesu. Vytvořený model pro popis zvlákňování má ale další potenciál pro studium parametrů procesu zvlákňování.

Vlastní výsledky dizertace se omezily na simulaci trajektorie bíčující trysky při zvlákňování v závislosti na různých parametrech, což nebylo ověřováno experimentem. Porovnání modelu s experimentem bylo provedeno ohledně hodnot kritického elektrického pole a elektrického náboje přenášeného tryskou. Metodika a postup řešení je odpovídající této komplikované tématice. Cíle dizertační práce byly splněny.

Vlastní výsledky dizertační práce lze spatřovat zejména v Části IV, V a VI, část z nich byla publikována, jiná část je v recenzním řízení v mezinárodním recenzovaném časopise. Posluchač uvádí 7 publikací v konferenčních sbornících, jednu publikaci již uplatněnou a jednu v recenzním řízení v mezinárodním časopise. Texty publikací jsou psány pečlivě a na úrovni publikace vyžadované pro absolventa doktorského studia.

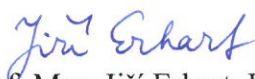
Práce je napsána ve velmi dobrém systematickém uspořádání a vytištěna ve velmi dobré kvalitě.

Otázky které by měl posluchač zodpovědět při obhajobě dizertace:

- Na str. 38 jsou dva stejné obrázky 4.5b a 4.5d?
- Na str. 54 je rovnice (77), která podle textu udává zákon zachování hmoty. Je tomu skutečně tak?

Předložená dizertační práce splňuje požadavky kladené na dizertační práci,
doporučuji ji k obhajobě.

V Liberci 3. 5. 2016


prof. Mgr. Jiří Erhart, Ph.D.
Katedra fyziky FP TUL

Aktuálnost tématu disertační práce a jeho význam pro obor

Předložená disertační práce se zabývá matematickým modelem elektricky nabitě kapalinové trysky a vlivem parametrů ovlivňujících její charakter v oblasti tzv. „bičující“ nestability. Děje odehrávající se v této oblasti jsou považovány za klíčový mechanismus, který působí při zvlákňování polymerů ve statickém elektrickém poli (electrospinning). Proces zvlákňování je v současné době stále více využíván při produkci netkaných materiálů, jež nacházejí uplatnění v řadě průmyslových (filtrace, ochranné prostředky) a lékařských oborů (tkáňové inženýrství, léky). Poznatky o elektrostatickém zvlákňování jsou přitom často omezeny jen na bázi empirických poznatků, které z různých důvodů postrádají zhodnocení z hlediska fyzikálních principů. Bouřlivý rozvoj počítačů, numerických a programovacích technik, umožňující virtuálně napodobovat chování složitých systémů metodou počítačového modelování, tak otevírá prostor pro širší využití poznatků tohoto druhu. Z uvedených důvodů je potěšující, že byla vytvořena velmi zajímavá práce, jejíž výsledek dovoluje efektivně simulovat dílčí procesy při elektrostatickém zvlákňování polymerů.

Metody a postupy řešení, splnění cílů disertační práce

Cílem práce bylo navrhnout matematický model kapalinové trysky, analyzovat a popsat rozhodující parametry ovlivňující chování trysky v elektrostatickém poli se zaměřením na klíčovou oblast „bičující“ nestability. Model pak převést do funkčního, efektivně pracujícího počítačového programu, který umožňuje pohodlnou simulaci veličin/parametrů důležitých pro elektrostatické zvlákňování.

Autor formuloval zobecněný 3D model trysky, založený na představě ideálního elementu tzv. „viskoelastické činky“ D. H. Reneker, A. L. Yarin, Polymer 49(10), 2387–2425 (2008). Tyto elementy jsou v modelu sériově zřetězeny a tvoří soustavu aproximující skutečnou kapalinovou trysku pohybující se v elektrickém poli. Do modelu byly také implementovány nové vlastnosti, např. různé typy kolektorů tvořící elektrostatické pole, síly představující odpor prostředí nebo vliv úbytku hmotnosti vznikajícího vlákna v důsledku odpařování rozpouštědla. Matematický model představuje soustavu ODE, pro jejíž řešení byla použita adaptivní metoda typu predikátor-korektor, která zaručuje dostatečnou stabilitu při numerickém výpočtu. Programová aplikace napsaná v objektově orientovaném jazyce C++ je založená na paralelně běžícím výpočetním jádře, které je doplněno grafickým uživatelským rozhraním. S pomocí této aplikace bylo pak velmi efektivním způsobem simulováno chování kapalinové trysky při změně materiálových, procesních, konstrukčních parametrů.

Výsledky disertační práce, přínos autora

Oblast modelování elektrostatického zvlákňování s využitím počítače je rozvíjeno poměrně krátkou dobu. Většina dosavadních poznatků o zvlákňování ve stacionárním elektrickém poli se zakládá na empirických informacích. Přínosem autora je pokus o využití moderních programovacích technik a výpočetních prostředků a ve spojení s teorií vysvětlit fyzikální jevy při procesu zvlákňování.

K disertační práci mám následující připomínky/náměty do diskuse:

1. Do modelu kapalinové trysky byl nově přidán dílčí efekt úbytku rozpouštědla, který ovlivňuje vlastnosti tvořícího se nanovlákna. Z kapalného polymeru se v okolním prostředí postupně odpařuje rozpouštědlo a v závislosti na délce trysky se mění její viskozita a viskoelastičita. Všechny křivky v simulaci sledující vliv počtu elementů trysky a důsledek působení úbytku hmoty odpařováním na tloušťku vlákna jsou hladké (s výjimkou oblasti hmotných bodů). V obr. 8.6 je vidět na křivce ostrou změnu průměru vlákna. Má tato „ostrá

změna“ fyzikální význam nebo je to jen důsledek integrační metody za takto nastavených podmínek simulace?

2. V odstavci 4.5 je vznik oblasti „bičující“ nestability připisován tepelným fluktuacím na povrchu kapalinové trysky. Nepřispívají ve skutečnosti ke vzniku „bičujícího“ charakteru trysky také nehomogenity elektrostatického pole, které je v podstatě v modelu považováno (a také realizováno) jako přísně homogenní? Lze uvažovat o stochasticky působících poruchách elektrostatického pole v modelu?

3. Zajímavý je také rozbor vlivu rozteče vodičů speciálního kolektoru na distribuci úhlů vláken, ukládaných na kolektoru, a porovnání s experimenty. Může se tento jev uplatnit v technické praxi při výrobě orientovaných nanovláknenných textilií?

Chyby:

Str. 33 Zavádějící popis osy v obr. 4.2 b), d) osa x je osa y. Špatné moduly os y, na osu z mají být vynášeny jednotky v metrech (uvedeny mm), protože vzdálenost $h=90$ mm; potenciál v obr. 4.2 d) není 20 kV, ale 2 kV; poloměr kapiláry r má být 50 mikronů, ne 5 mm. (podobně obr. 4.5 na str. 38, tam jsou špatně jen osy).

Str. 98 Kritické hodnoty v tab. 9.2 a hodnoty uvedené v popisu obrázku 9.2 nesouhlasí.

Formální úprava disertace a její jazyková úroveň, závěrečné zhodnocení

Oceňuji technicky střizlivý styl disertační práce, která je členěna do logicky navazujících úseků tak, že vytváří přehledný a velmi srozumitelný výklad problému a způsob řešení. Zejména je nutno vyzdvihnout přístup k objasnění principů doplněný výstižnými obrázky (schémata), které usnadňují pochopení textu. Obsahuje jen zanedbatelný počet prepisů nebo chyb. Práce je sepsána pečlivě, kultivovaným jazykem a má vysokou typografickou úroveň.

Publikační činnost

Autor zhodnotil potenciál disertační práce ve 2 původních člancích (J. Electrostatics, 72(2), 161–165, (2014), impaktní faktor 0,863; další je v recenzním řízení). Některé další výsledky práce byly zveřejněny jednak formou přednášek na konferencích, jednak jako články ve sbornících. Počet publikačních výstupů považuji za dostačující vzhledem k náročnosti oboru a k nutnosti osvojení mnoha praktických znalostí (odvození a tvorba modelu, algoritmizace úlohy a implementace do použitelného výstupu).

Na závěr konstatuji, že předložená disertace dokládá velmi dobrou znalost studovaného oboru a prokazuje, že její autor ovládá vědecké metody a moderní prostředky pro řešení vědeckovýzkumných úloh. Autor zvolil systematický postup, založený na kombinaci teoretických, numerických a výpočetních a přístupů. Tato disertační práce je tak kvalitním příspěvkem k popisu významných souvislostí vyšetřovaného problému.

Ing. Milan Šimko tímto způsobem jednoznačně prokázal schopnost samostatné vědecké práce, a proto jeho disertační práci doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 20. dubna 2016



Ing. Vladimír Hejtmánek, CSc., Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.
Rozvojová 135, 165 02 Praha 6-Suchbát
hejtmánek@icpf.cas.cz