



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI  
Fakulta textilní



# MODELOVÁNÍ A SIMULACE BIČUJÍCÍ NESTABILITY PŘI ELEKTROSTATICKÉM ZVLÁKŇOVÁNÍ

Ing. Milan Šimko

AUTOREFERÁT DISERTAČNÍ PRÁCE

**Název disertační práce:** MODELOVÁNÍ A SIMULACE BIČUJÍCÍ  
NESTABILITY PŘI ELEKTROSTATICKÉM  
ZVLÁKŇOVÁNÍ

**Autor:** Ing. Milan Šimko

**Obor doktorského studia:** textilní materiálové inženýrství

**Forma studia:** kombinovaná

**Školitel:** prof. RNDr. David Lukáš, CSc.

**Složení komise pro obhajobu disertační práce:**

**Předseda:** prof. Ing. Jiří Militký, CSc.

**Místopředseda:** prof. RNDr. Oldřich Jirsák, CSc.

**Členové:** prof. Mgr. Jiří Erhart, Ph. D. (oponent)  
prof. Ing. Petr Louda, CSc.  
doc. Dr. Ing. Miroslav Černík, CSc.  
doc. RNDr. Miroslav Šulc, Ph. D.  
RNDr. Zdeněk Kalousek, CSc.  
Ing. Vladimír Hejtmánek, CSc. (oponent)  
Ing. Jiří Chaloupek, Ph. D.

S disertační prací je možno se seznámit na děkanátu Fakulty textilní Technické univerzity v Liberci.

## Anotace

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

### **Klíčová slova:**

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

## Annotation

This dissertation thesis deals with the mathematical modeling of a whipping instability of an electrically charged liquid jet, which is created from a polymer solution by electrospinning. The ideal rectilinear segment of the electrically charged liquid jet, the so-called “viscoelastic dumbbell”, is the key attribute of the mathematical model. Governing equations describing dynamics and physical properties of that segment were formulated based on its analysis. Those equations are solved numerically by using the predictor-corrector method with an adaptive step-size. A self-developed multi-threaded computer application written in C++ object-oriented programming language that allows to simulate the electrospinning process is also a part of this dissertation thesis. A parallel computational kernel, which is an algorithmization of the numerical model, handles an approximate numerical computation. Results of numerical simulations are visualized through three-dimensional computer graphic.

### **Keywords:**

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

## Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Předmět a cíle disertační práce</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Přehled současného stavu problematiky</b>	<b>8</b>
<b>4</b>	<b>Použité metody</b>	<b>14</b>
4.1	Ideální přímočarý segment kapalinové trysky	14
4.2	Bičující nestabilita kapalinové trysky	14
4.3	Zobecněný model elektricky nabitě trysky	15
4.4	Zobecněná soustava obyčejných diferenciálních rovnic	16
<b>5</b>	<b>Přehled dosažených výsledků</b>	<b>19</b>
5.1	Vnější elektrostatické pole	20
5.2	Vícevláknová počítačová aplikace	20
5.3	Trajektorie elektricky nabitě trysky	22
5.4	Ukládání nanovláken na drátovém kolektoru	24
<b>6</b>	<b>Zhodnocení výsledků a nových poznatků</b>	<b>24</b>
<b>7</b>	<b>Použitá literatura</b>	<b>37</b>
<b>8</b>	<b>Práce autora se vztahem ke studované problematice</b>	<b>42</b>
8.1	Publikace v odborných časopisech	42
8.2	Příspěvek ve sborníku z mezinárodní konference	42
8.3	Příspěvek ve sborníku z domácí konference	42
8.4	Příspěvek ve sborníku z workshopu	43
8.5	Příspěvek ve sborníku ze SVOČ	43
	<b>Curriculum Vitæ</b>	<b>43</b>
	<b>Stručná charakteristika dosavadní odborné a vědecké činnosti</b>	<b>45</b>
	<b>Zápis o vykonání státní doktorské zkoušky</b>	<b>47</b>
	<b>Vyjádření školitele doktoranda</b>	<b>48</b>
	<b>Oponentské posudky disertační práce</b>	<b>49</b>

## Použité symboly

$\gamma$	$\text{N m}^{-1}$	Povrchové napětí
$\delta$	m	Výchylka v příčném směru
$\varepsilon_0$	$\text{C}^2 \text{N}^{-1} \text{m}^{-2}$	Permitivita vakua
$\varepsilon_r$	—	Relativní permitivita vzduchu
$\varepsilon_{rp}$	—	Relativní permitivita polymerního roztoku
$\eta$	Pa s	Okamžitá dynamická viskozita
$\eta_0$	Pa s	Počáteční dynamická viskozita
$\eta_a$	Pa s	Dynamická viskozita vzduchu

$\nu_a$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Kinematická viskozita vzduchu ( $\nu_a = \eta_a / \rho_a$ )
$\kappa$	$\text{S m}^{-1}$	Měrná elektrická vodivost
$\rho$	$\text{kg m}^{-3}$	Měrná hmotnost polymerního roztoku
$\rho_a$	$\text{kg m}^{-3}$	Měrná hmotnost vzduchu
$\sigma$	Pa	Mechanické normálové napětí
$\tau$	s	Okamžitý relaxační čas ( $\tau = \eta / E$ )
$\tau_0$	s	Počáteční relaxační čas ( $\tau_0 = \eta_0 / E_0$ )
$\varphi_1$	V	Elektrický potenciál aplikovaný na kapiláru
$\varphi_2$	V	Elektrický potenciál aplikovaný na kolektor
$\psi$	—	Relativní vlhkost ve zvlákňovacím prostoru
$\Lambda$	—	Koeficient úbytku objemu rozpouštědla
$\mathcal{D}_{s,a}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Binární koeficient difúze rozpouštědla do vzduchu
$a$	m	Rozteč válcových vodičů drátového kolektoru
$c_p$	—	Okamžitá hmotnostní koncentrace polymeru
$c_{p0}$	—	Počáteční hmotnostní koncentrace polymeru
$c_{s,eq}$	—	Rovnovážná koncentrace nasycených par rozpouštědla
$c_{s,\infty}$	—	Koncentrace nasycených par rozpouštědla ve zvlákňovacím prostoru v blízkosti kapalinové trysky
$d$	m	Okamžitý průměr segmentu zelektrizované trysky
$d_0$	m	Počáteční průměr segmentu zelektrizované trysky
$h$	m	Vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem
$l$	m	Okamžitá délka segmentu zelektrizované trysky
$l_0$	m	Počáteční délka segmentu zelektrizované trysky
$m$	kg	Okamžitá hmotnost
$m$	—	Exponent empirického vztahu
$m_0$	kg	Počáteční hmotnost
$m_p$	kg	Hmotnost polymeru
$m_s$	kg	Okamžitá hmotnost rozpouštědla
$q$	C	Okamžitý náboj
$r$	m	Poloměr kapiláry, resp. hemisférické kapky
$t$	s	Čas
$x$	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
$D$	m	Průměr kolektoru
$E$	Pa	Okamžitý Youngův modul pružnosti
$E_0$	Pa	Počáteční Youngův modul pružnosti
$I_0$	A	Elektrický proud kapalinové trysky
$J$	$\text{m}^4$	Kvadratický moment plochy příčného průřezu
$Q_V$	$\ell \text{ hod}^{-1}$	Objemový průtok polymerního roztoku kapilárou

$R$	m	Poloměr křivosti kapalinové trysky
$T$	$^{\circ}\text{C}$	Teplota ve zvlákňovacím prostoru
$V_0$	$\text{m}^3$	Počáteční objem segmentu zelektrizované trysky
$\mathbf{r}$	m	Okamžitý polohový vektor
$\mathbf{v}$	$\text{m s}^{-1}$	Okamžitá rychlost
$\mathbf{v}_n$	$\text{m s}^{-1}$	Projekce okamžité rychlosti do normálového směru
$\mathbf{v}_t$	$\text{m s}^{-1}$	Projekce okamžité rychlosti do tečného směru
$\mathbf{E}$	$\text{V m}^{-1}$	Intenzita vnějšího elektrostatického pole
$\mathbf{F}_C$	N	Elektrostatická odpuzující síla
$\mathbf{F}_D$	N	Odporová síla vzduchu
$\mathbf{F}_E$	N	Síla vnějšího elektrostatického pole
$\mathbf{F}_M$	N	Viskoelastická síla
$\mathbf{F}_S$	N	Síla povrchového napětí

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

— Leonardo da Vinci

## 1 Úvod

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

V názvu předkládaného autoreferátu disertační práce se vyskytují dva pojmy: *modelování* a *simulace*. Podstatou prvního pojmu je myšlena náhrada zkoumané kapalinové trysky jejím matematickým modelem. S rozvojem výpočetní techniky jsou druhým pojmem myšleny virtuální experimenty na počítači, tj. počítačové simulace propojené s vizualizací scény pomocí trojrozměrné počítačové grafiky, jež mají napodobovat chování zkoumané kapalinové trysky, s cílem získat široké spektrum informací. Ostatně, o rostoucím významu počítačového modelování svědčí i Nobelova cena za chemii, kterou za vývoj počítačových programů sloužících k porozumění složitých chemických procesů získala v roce 2013 trojice vědců Martin Karplus, Michael Levitt a Arieh Warshel [11].

---

<sup>1)</sup> Tryskou je v celém autoreferátu myšlen tenký proud polymerního roztoku.

## 2 Předmět a cíle disertační práce

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

Dílčí cíle disertační práce je možné rozdělit do následujících okruhů:

- zformulovat předpoklady matematického modelu;
- provést analýzu ideálního přímočarého segmentu elektricky nabitě kapalinové trysky, tzv. „viskoelastické činky“;
- zformulovat obyčejné diferenciální rovnice popisující dynamiku i změnu fyzikálních vlastností „viskoelastické činky“;
- ověřit existenci a jednoznačnost řešení Cauchyovy úlohy pro zformulované obyčejné diferenciální rovnice;
- provést zobecnění na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic popisující dynamiku i změnu fyzikálních vlastností „řetězce viskoelastických činek“;
- přeformulovat soustavu zobecněných obyčejných diferenciálních rovnic do bezrozměrného tvaru;
- diskretizovat soustavu bezrozměrných obyčejných diferenciálních rovnic pro aplikaci vhodné numerické metody;
- zformulovat matematické modely vnějších elektrostatických polí (diskový uzemněný kolektor a speciální drátový kolektor);
- nastudovat objektově orientovaný programovací jazyk C++ včetně standardů OpenMP, OpenGL a knihovny Qt;
- naprogramovat paralelní výpočetní jádro;
- naprogramovat modely vnějších elektrických polí;
- naprogramovat scénu trojrozměrné počítačové grafiky;
- naprogramovat grafické uživatelské rozhraní pro snadné nastavení všech parametrů numerického modelu, simulace a vizualizace;
- verifikovat implementované metody (ve smyslu objektově orientovaného programovacího jazyka);
- validovat matematické modely.

## 3 Přehled současného stavu problematiky

Problematika bičující nestability i celého procesu elektrostatického zvlákňování je středem zájmu řady výzkumných pracovišť po celém světě. Nedávně



experimenty ukázaly, že nezbytným mechanismem elektrostatického zvlákňování je rychlé bičování kapalinové trysky [12].

FENG se ve svém článku [3] odkazuje na práci autorů Hohmana a jeho kolektivu [12], kteří navrhli elektrohydrodynamický model elektrostatického zvlákňování newtonovských kapalinových trysek. Nicméně uvádí, že může nastat problém s okrajovou podmínkou předepsanou pro plošnou hustotu náboje na hranici kapiláry. Pokud je počáteční plošná hustota náboje nulová nebo velmi malá, zelektrizovaná kapalinová tryska se ihned za ústím kapiláry vyboulí do bičující nestability, ale k tomu ve skutečnosti nikdy nedochází. Proto ve svém článku nejprve popsal nepatrně odlišný model newtonovských kapalinových trysek, jenž se takové nestabilitě vyvaruje. Řešení se chovají „rozumně“, neboť nejsou, kromě tenké „mezní vrstvy“ na kapiláře, citlivá vzhledem k počáteční plošné hustotě náboje. Autor následně zavedl do modelu vztah pro nenewtonovskou (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.

HAN, YARIN A RENEKER ve společném článku [18] představují novou metodu charakterizace podélně namáhaných viskoelastických trysek při elektrostatickém zvlákňování tavenin a koncentrovaných nebo částečně zředěných polymerních roztoků. V případě 6% vodného roztoku poly(ethylen oxidu) (PEO) naměřili autoři mechanické normálové napětí 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 tzv. „přechodové oblasti“ mezi zborceným Taylorovým kuželem a počátkem oblasti tenkého kapalinového proudu, kde se rychlosti přetvoření pohybují v rozmezí 100 až  $1000 \text{ s}^{-1}$ . Rousovy relaxační časy polymerního roztoku byly naměřeny v rozsahu 3 až 8 ms a Youngův modul pružnosti byl řádově 100 Pa. Autoři předkládají nové důvody vysvětlující vytváření přímých úseků elektrostaticky zvlákněných trysek. Přímé úseky jsou stabilizovány velkým počátečním mechanickým normálovým napětím uvnitř elektricky nabitě 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. Tahové napětí uvnitř elektricky nabitě kapalinové trysky se vlivem aplikovaného elektrického napětí zvyšuje (vytváří se větší počáteční normálové napětí v přechodové oblasti), a proto by se měla délka přímého úseku kapalinové trysky prodlužovat se zvyšujícím se elektrickým napětím. Výsledky autorů také poukazují na příležitost vyvinout

nový reometr pro koncentrované polymerní roztoky s rychlostmi přetvoření v rozsahu 100 až  $1\,000\text{ s}^{-1}$ . To ukazuje míru mechanického normálového napětí podél kapalinového proudu a umožňuje vyhodnocení Rousova relaxačního času, Youngova modulu pružnosti a dynamické viskozity.

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

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

KOWALEWSKI, BLOŃSKI A BARRAL společně ve své studii [13] 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 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, což umožňuje vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace.

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

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

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

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

THERON, ZUSSMAN A YARIN představují svojí práci [4] o elektrostatickém zvlákněování, ve které měřili závislost různých parametrů na elektrickém proudu a objemové i plošné hustotě náboje v kapalinové trysce. Dynamická viskozita, povrchové napětí, relaxační čas, elektrická vodivost a permitivita 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 řídicími parametry byly: aplikované elektrické napětí, objemový průtok roztoku, hmotnostní koncentrace polymeru, molekulová hmotnost polymeru, vzdálenost zvlákněvací elektrody od uzemněného kolektoru a u některých polymerních roztoků také koncentrace ethanolu.

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

FILATOV A KOLEKTIV popisují ve své monografii [30] štěpení primární kapalinové trysky jako druhotný mechanismus elektrostatického zvlákněování. Může být snadno ukázáno, s použitím řešení quasi-jednodimenzionální rovnice elektrohydrodynamiky, že ani kapalina proudící za ustálených podmínek, nemůže být v příčném směru považována za stabilní. Je to proto, že záporný tlak ponderomotorické síly na jejím povrchu je zákonitě vyrovnán a vysoce převyšuje kapilární sílu v její zbývající části. Nicméně, i takové perturbace nepovedou okamžitě ke zlomu kapalinové trysky, za prvé proto, že jediný možný mechanismus potřebný k tomuto účelu je Rayleighova nestabilita, jež je

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

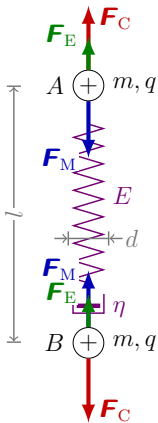
RENEKER A YARIN ve svém článku [9] popisují zkušenosti se štěpením primární kapalinové trysky při elektrostatickém zvláknování 15% roztoku PCL v acetonu. Roztok byl zvlákněn při rozdílu elektrických potenciálů 10 kV. Vzdálenost mezi pipetou a kolektorem byla 70 mm. Štěpení pozorovali častěji u koncentrovanějších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

## 4 Použité metody

Matematický model předkládaný v tomto oddíle vychází z myšlenky modelu od Renekera a Yarina (viz např. [6][8][9]), a také z modelu od Zenga, Yanga a Yua (viz např. [29]). Klíčovým atributem celého modelu je ideální přímočarý segment elektricky nabitě kapalinové trysky, tzv. „viskoelastická činka“.

### 4.1 Ideální přímočarý segment kapalinové trysky

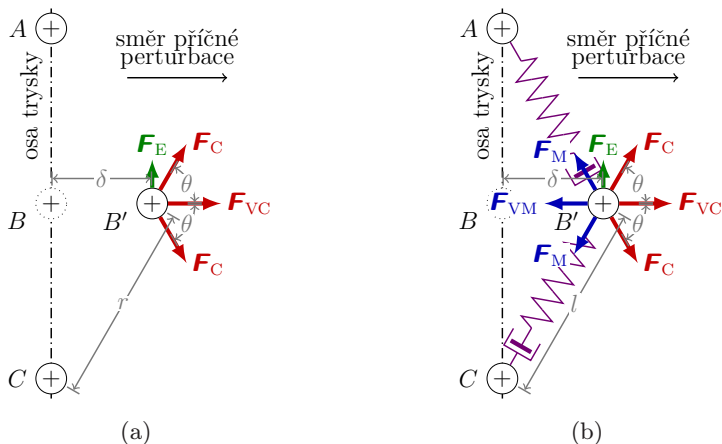
Ideální přímočarý segment zelektrizované trysky se sestává ze dvou nabitých hmotných bodů  $A$  a  $B$ , které jsou vzájemně propojeny reologickými prvky (viz obr. 1). Zvolené reologické prvky a jejich spojení odpovídá Maxwellovu modelu, který byl použit k modelování viskoelastického chování zvlákněvaného polymerního roztoku.



Obr. 1: Silový rozbor ideálního přímočarého segmentu zelektrizované trysky.  $\eta$ —dynamická viskozita,  $d$ —okamžitý průměr,  $l$ —okamžitá délka,  $m$ —okamžitá hmotnost,  $q$ —vázaný náboj,  $E$ —Youngův modul pružnosti,  $F_C$ —elektrostatická síla,  $F_E$ —síla vnějšího elektrostatického pole,  $F_M$ —viskoelastická síla. Tíhovou sílu je možné v silovém rozboru zanedbat.

### 4.2 Bičující nestabilita kapalinové trysky

Pravděpodobná příčina bičující nestability může být vysvětlena následujícím způsobem. V lokálních souřadnicích, které se pohybují společně s elektricky nabitou kapalinovou tryskou, je možné její vázané náboje považovat za statickou soustavu souhlasně nabitých bodových nábojů, která je ovlivňována především elektrostatickými silami  $F_C$ , tj. bez vnějšího elektrostatického pole. Podle Earnshawovy věty (viz např. [35, str. 107]) nemůže být taková soustava ve stabilní rovnováze. Pro ilustraci mechanismu bičující nestability, jenž je relevantní v souvislosti s elektrostatickým zvlákněváním, jsou uvažovány tři hmotné body  $A$ ,  $B$  a  $C$ , každý s vázaným nábojem  $q$  a původně umístěné v ose trysky [viz obr. 2(a)]. Jestliže dojde v důsledku příčné perturbace k vychýlení



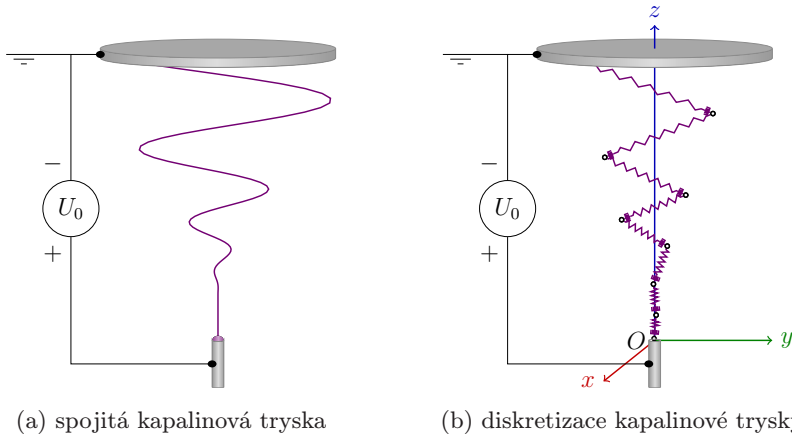
**Obr. 2:** Silový rozbor vysvětlující pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability elektricky nabitě trysky.  $\delta$  — výchylka perturbace,  $\theta$  — úhel,  $l$  — okamžitá délka,  $\mathbf{F}_C$  — elektrostatická síla,  $\mathbf{F}_E$  — síla vnějšího elektrostatického pole,  $\mathbf{F}_M$  — viskoelastická síla,  $\mathbf{F}_{VC}$  — výslednice elektrostatických sil,  $\mathbf{F}_{VM}$  — výslednice viskoelastických sil. Tíhovou sílu je možné v silovém rozboru zanedbat.

nabitého hmotného bodu  $B$  o vzdálenost  $\delta$  do místa  $B'$ , výslednice elektrostatických odpuzujících sil,  $\mathbf{F}_{VC}$ , má tendenci k dalšímu vzdalování tohoto bodu od své původní polohy, tzv. labilní rovnováha. Růst malých ohybových perturbací je charakterizován výchylkou  $\delta$ . Podle autorů článku [6][8] je tento mechanismus zodpovědný za bičující nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky při elektrostatickém zvlákňování.

Pokud jsou nabitě hmotné body  $A$ ,  $B$  a  $C$  vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 2(b)], výslednice viskoelastických sil,  $\mathbf{F}_{VM}$ , má tendenci vyrovnávat nestabilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami  $\mathbf{F}_C$ . Pro velmi tenké kapalinové trysky je možné, v porovnání se stabilizujícím efektem viskoelastických sil  $\mathbf{F}_M$ , zanedbat vliv smykové (posouvající) síly vztahující se k ohybové tuhosti, tj. součinu  $EJ$ , kde  $J = (\pi d^4)/64$  je kvadratický moment plochy kruhového průřezu. Jestliže jsou elektrostatické odpuzující síly větší než viskoelastický odpor,  $\mathbf{F}_{VC} > \mathbf{F}_{VM}$ , růst bičující nestability je nyní zbrzdován právě viskoelastickým odporem [6] zvlákňovaného polymerního roztoku.

### 4.3 Zobecněný model elektricky nabitě trysky

Stěžejní myšlenkou zobecněného modelu je náhrada spojité elektricky nabitě kapalinové trysky [viz obr. 3(a)] za soustavu sériově spojených přímočarých



**Obr. 3:** Náhrada spojitě elektricky nabitě kapalinové trysky soustavou sériově spojených ideálních přímočarých segmentů zelektrizované trysky.

segmentů zelektrizované trysky [viz obr. 3(b)]. Prostřednictvím tohoto „řetězce viskoelastických činek“ je modelováno vznikající polymerního nanovláknko.

#### 4.4 Zobecněná soustava obyčejných diferenciálních rovnic

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

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

Zvlákňovaný polymerní roztok se chová jako viskoelastická (maxwellovská) kapalina, proto byl k modelování odezvy materiálu na vnější zatížení použit Maxwellův reologický model (viz např. [34]) a to v nelineární variantě (s ohledem na změnu materiálových vlastností kapalinové trysky během jejího letu od zvlákňovací elektrody ke sběrnému kolektoru). Předkládaný reologický model popisuje nelineární viskoelasticitu a je reprezentován sériovým zapojením nelineární pružiny, tzv. Hookeova prvku, a nelineárního viskózního tlumiče, tzv. Newtonova prvku. Konstitutivní rovnice má tvar

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



kde jednotlivé členy se vztahem ke zvláknovanému polymernímu roztoku jsou definovány následujícími vztahy:

- okamžitá dynamická viskozita

$$\eta_{i,i+1} = 10^B c_{pi,i+1}^m; \quad (2a)$$

- okamžitý relaxační čas

$$\tau_{i,i+1} = \frac{\tau_0}{c_{p0}} c_{pi,i+1}; \quad (2b)$$

- okamžitá hmotnostní koncentrace polymeru

$$c_{pi,i+1} = \frac{m_p}{m_p + m_{si,i+1}}. \quad (2c)$$

Konstanta  $B$  může být odhadnuta z empirického vztahu [23, str. 32, rov. (18)] s dosazenými počátečními hodnotami dynamické viskozity  $\eta_0$  a hmotnostní koncentrace polymeru  $c_{p0}$

$$B = \frac{\log_{10} \eta_0}{c_{p0}^m}. \quad (2d)$$

(Konstanta  $A$  není důležitá, pokud je známa počáteční hodnota dynamické viskozity, jež je použita pro škálování [10].) Exponent empirického vztahu byl pro některé roztoky nalezen  $m = 0.5$ , zatímco pro jiné bylo  $m = 1$  [23]. Autoři [10] uvádějí rozsah hodnot pro exponent  $m = 0.1$  až  $1$ .

Nechť se v inerciální vztažné soustavě pohybuje hmotný bod  $i$  s nábojem  $q_i$ , který má okamžitou hmotnost  $m_i$  a okamžitou rychlost  $\mathbf{v}_i$ . Podle druhého Newtonova pohybového zákona je časová změna hybnosti nabitého hmotného bodu  $i$  rovna výslednici vnějších sil. Na základě rozboru silových účinků (viz obr. 4), lze sestavit pohybovou rovnici (a rovnou ji přepsat na dvě diferenciální rovnice prvního řádu)

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad (3)$$

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{2} \left( \frac{dm_{si-1,i}}{dt} + \frac{dm_{si,i+1}}{dt} \right) \mathbf{v}_i + \mathbf{F}_{Ei} + \mathbf{F}_{Ci} + \mathbf{F}_{Mi} + \mathbf{F}_{Di} + \mathbf{F}_{Si}, \quad (4)$$

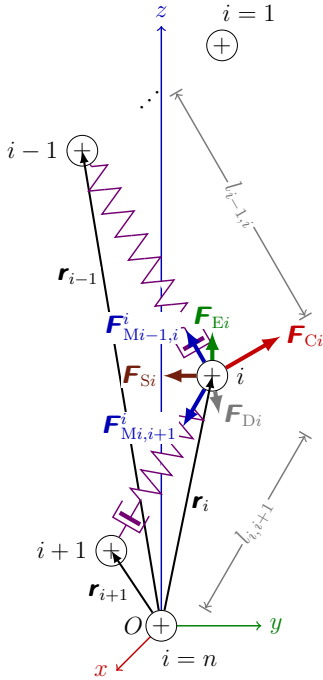
kde jednotlivé působící síly jsou definovány následujícími vztahy:

- síla vnějšího elektrostatické pole

$$\mathbf{F}_{Ei} = q_i \mathbf{E}; \quad (4a)$$

- síla elektrostatická

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



Obr. 4: Silový rozbor na  $i$ -tém nabitém hmotném bodě zobecněného modelu zelektrizované trysky.  $l$  — okamžitá délka,  $\mathbf{r}$  — okamžitý polohový vektor nabitého hmotného bodu trysky,  $\mathbf{F}_C$  — elektrostatická síla,  $\mathbf{F}_D$  — odporová síla vzduchu,  $\mathbf{F}_E$  — síla vnějšího elektrostatického pole,  $\mathbf{F}_M$  — viskoelastická síla,  $\mathbf{F}_S$  — síla povrchového napětí. Tíhovou sílu je možné v silovém rozboru zanedbat.

- síla viskoelastická

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

- síla povrchového napětí

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{Si} = \frac{\gamma \pi}{4} \left( d_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + d_{i-1,i} \arcsin \frac{l_{i-1,i}}{2R_i} \frac{\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_i|} + \right. \\ \left. + d_{i,i+1} \arcsin \frac{l_{i,i+1}}{2R_i} \frac{\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_i|} + d_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right); \quad (4d) \end{aligned}$$

- síla odporová

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{Di} = 6 \eta_a \pi \left( d_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ni-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni-1,i}^i|} + d_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ni,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ni,i+1}^i|} \right) + \\ + 6 \eta_a \left( l_{i-1,i} \frac{(\mathbf{v}_{ti-1,i}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti-1,i}^i|} + l_{i,i+1} \frac{(\mathbf{v}_{ti,i+1}^i)^2}{|\mathbf{v}_{ti,i+1}^i|} \right). \quad (4e) \end{aligned}$$

Okamžité průměry ideálních přímočarých segmentů elektricky nabitě trysky jsou určeny z rovnosti objemů, která je zohledněná tzv. koeficientem úbytku objemu  $\Lambda \in \langle 1; c_{p0} \rangle$ . Tedy

$$\begin{aligned} d_{i-1,i} &= \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}}, & d_{i,i+1} &= \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}}, \\ \Lambda_{i-1,i} &= \frac{V_{i-1,i}}{V_0} = \frac{m_p + m_{si-1,i}}{m_0}, & \Lambda_{i,i+1} &= \frac{V_{i,i+1}}{V_0} = \frac{m_p + m_{si,i+1}}{m_0}. \end{aligned} \quad (4f)$$

Soustava obyčejných diferenciálních rovnic (1), (2), (3) a (4) představuje Cauchyovu úlohu s počátečními podmínkami

$$\left. \begin{aligned} m_{si,i+1} &= 1 - c_{p0} \\ \sigma_{i,i+1} &= 0 \\ \mathbf{r}_{i+1} &= \{0; 0; r\}^T \\ \mathbf{v}_{i+1} &= \{0; 0; 0\}^T \end{aligned} \right\} \text{pro } i = n. \quad (5)$$

Přibližné řešení počáteční úlohy (1), (2), (3), (4) a (5) je hledáno numericky metodou typu prediktor–korektor (P: explicitní Eulerova metoda; K: Adams-Moultonova metoda druhého řádu) s adaptivní volbou časového kroku. Při konkrétním numerickém řešení je však často vhodné provést výpočet v bezrozměrném tvaru rovnic [47]. Výhoda tohoto přístupu je především v numerické stabilitě použitých algoritmů, protože nedochází v takové míře ke vzniku a propagaci zaokrouhlovacích chyb nebo podtečení datového typu v důsledku počítání s velmi malými čísly. Výsledky práce byly shrnuty do článku v odborném časopise [56]. Dílčí výsledky byly publikovány ve sbornících z domácí konference [61][62] a ve sborníku ze SVOČ [64].

## 5 Přehled dosažených výsledků ■

Dosaženými výsledky disertační práce jsou:

- matematické modely vnějších elektrostatických polí (diskový uzemněný kolektor a speciální drátový kolektor);
- matematický model elektricky nabitě kapalinové trysky;
- numerická diskretizace modelu elektricky nabitě kapalinové trysky;
- vícevláknová počítačová aplikace, která umožňuje simulovat proces elektrostatického zvláknování (včetně ukládání nanovláken na kolektoru) a vizualizovat vypočtenou trajektorii zelektrizované trysky nebo rozložení intenzity vnějšího elektrostatického pole;

- virtuální experimenty, tj. počítačové simulace vlivu vstupních parametrů numerického modelu na trajektorii elektricky nabitě trysky nebo vlivu rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken při procesu elektrostatického zvlákňování.

## 5.1 Vnější elektrostatické pole

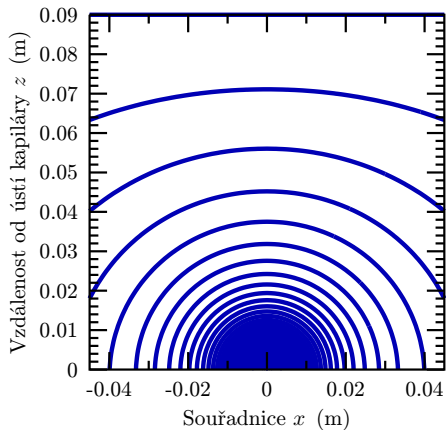
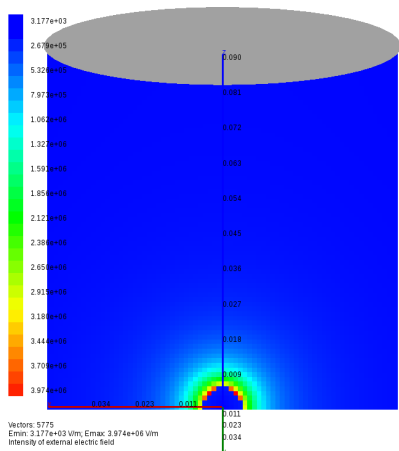
Vnější elektrostatické pole hraje v procesu elektrostatického zvlákňování důležitou roli. Je příčinou dloužení a urychlování elektricky nabitě kapalinové trysky [3][12][18], a také do určité vzdálenosti stabilizuje její přímý směr [8][18]. Disertační práce se zabývá modelováním procesu elektrostatického zvlákňování s použitím diskového uzemněného kolektoru a speciálního kolektoru, který je vyroben ze dvou paralelních válcových vodičů. Dílčí výsledky práce byly publikovány v odborném časopise [57] a ve sborníku z mezinárodní konference [59].

Na obr. 5(a) je znázorněno rozložení velikosti intenzity elektrostatického pole uzemněného diskového kolektoru ve zvlákňovacím prostoru včetně řezů ekvipotenciálními plochami a na obr. 5(b) je znázorněno rozložení velikosti intenzity elektrostatického pole speciálního drátového kolektoru opět včetně řezů ekvipotenciálními plochami.

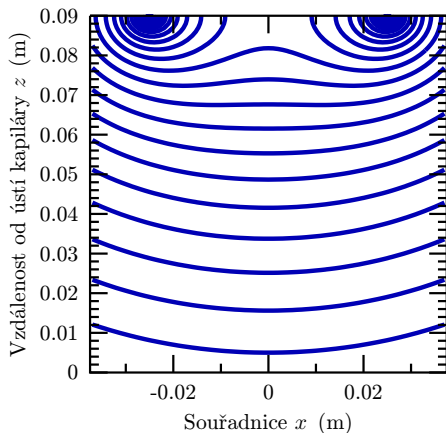
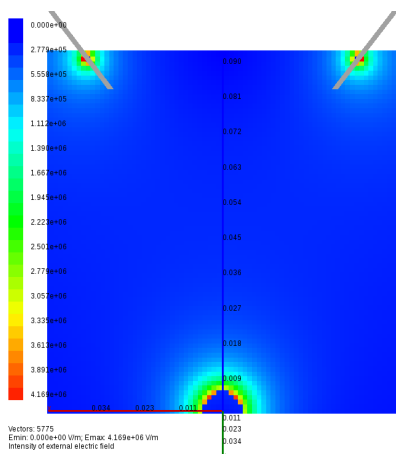
## 5.2 Vícevláknová počítačová aplikace

Vytvoření nativní počítačové aplikace bylo motivováno třemi hlavními důvody. Prvním důvodem byla potřeba jemnějšího časového kroku použité numerické metody. Algoritmus realizovaný v prostředí programu MATLAB byl již z hlediska výpočetního času neefektivní. Druhým důvodem byl požadavek na vytvoření grafického uživatelského rozhraní (viz obr. 6), které umožní snadné nastavení všech parametrů modelu (viz obr. 7). Třetím důvodem byl požadavek na maximální využití výkonu vícejádrového procesoru výpočetní stanice. Při rozhodování, který programovací jazyk pro vývoj počítačového programu použít, byl kladen důraz především na přenositelnost, efektivitu a úspornost. S přihlédnutím ke zmíněným důvodům byl vybrán objektivě orientovaný jazyk C++, který těmto požadavkům plně vyhovuje.

Základem počítačové aplikace je paralelní výpočetní jádro, které představuje algoritmizaci numerického modelu. Paralelizace výpočetního jádra byla realizována s použitím OpenMP, což je standardizované rozhraní pro paralelní programování aplikací běžících na počítačových systémech se sdílenou pamětí. Sestává se ze sady direktiv pro kompilátor, knihovnicích funkcí a proměnných prostředí. OpenMP používá vícevláknový paralelismus založený na scénáři rozděl/sluč. Dílčí výsledky práce byly publikovány ve sborníku

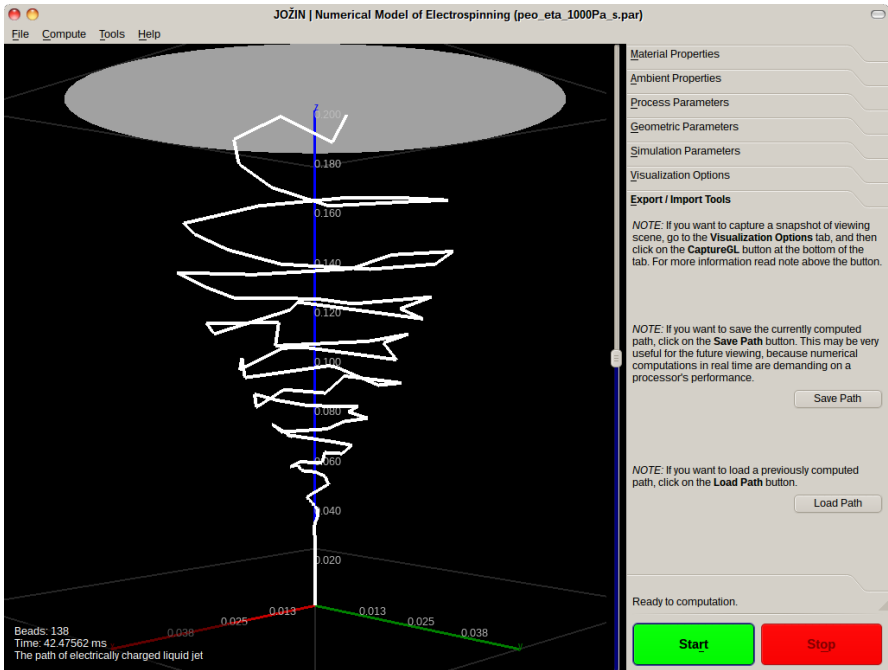


(a) velikost intenzity pole a řez ekvipotenciálními plochami v rovině  $(x; 0; z)$



(b) velikost intenzity pole a řez ekvipotenciálními plochami v rovině  $(x; 0; z)$

**Obr. 5:** Velikost intenzity elektrostatického pole ve zvlákňovacím prostoru a řez ekvipotenciálními plochami (a) uzemněného diskového kolektoru, (b) speciálního drátového kolektoru. Parametry výpočtů: potenciál kapiláry  $\varphi_1 = 20 \text{ kV}$ , potenciál kolektoru  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ , vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem  $h = 90 \text{ mm}$ , poloměr kapiláry  $r = 5 \text{ mm}$ , průměr diskového kolektoru  $D = 90 \text{ mm}$  a průměr drátového kolektoru  $D = 2 \text{ mm}$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



Obr. 6: Grafické uživatelské rozhraní počítačové aplikace.

z mezinárodní konference [58], ve sborníku z domácí konference [60] a ve sborníku z workshopu [63].

### 5.3 Trajektorie elektricky nabitě trysky

Na obr. 8, obr. 9, obr. 12, obr. 13, obr. 16 a obr. 17 jsou znázorněny vypočtené trajektorie elektricky nabitě trysky při různých parametrech počítačové simulace. Všechny výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN. Trajektorie zelektrizované kapalinové trysky byly vypočteny pro parametry 6% vodného roztoku PEO: povrchové napětí  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ , relativní permitivita  $\epsilon_{\text{rp}} = 57.63$ , měrná elektrická vodivost  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ , měrná hmotnost  $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$ , počáteční dynamická viskozita  $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$ , počáteční relaxační čas  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ , počáteční hmotnostní koncentrace polymeru  $c_{\text{p}0} = 0.06$ . Binární koeficient difúze rozpouštědla do vzduchu  $D_{\text{s,a}} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  a exponent empirického vztahu  $m = 0.1$ . Procesní parametry byly: potenciál kapiláry  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ , potenciál uzemněného kolektoru  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ , elektrický proud trysky  $I_0 =$

**Material Properties**

Surface tension  N·m<sup>-1</sup>

Conductivity  S·m<sup>-1</sup>

Permittivity  —

Density  kg·m<sup>-3</sup>

Initial viscosity  Pa·s

Initial relaxation time  s

Initial polymer mass fraction  %

Binary diffusion coefficient  m<sup>2</sup>·s<sup>-1</sup>

Empirc formula exponent  —

Ambient Properties

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(a) materiálové parametry

**Material Properties**

**Ambient Properties**

Air density  kg·m<sup>-3</sup>

Air viscosity  Pa·s

Humidity  %

Temperature  °C

Process Parameters

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(b) parametry okoli

**Material Properties**

**Ambient Properties**

**Process Parameters**

Electric current  A

Electric potential of the collector  V

Electric potential of the needle  V

Volumetric flow rate  l·h<sup>-1</sup>

Geometric Parameters

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(c) procesní parametry

**Material Properties**

**Ambient Properties**

**Process Parameters**

**Geometric Parameters**

Distance between the needle and the collector  m

Diameter of the needle  m

Select collector

- Disk
- Wire

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

Simulation Parameters

Visualization Options

Export / Import Tools

(d) geometrické parametry

**Material Properties**

**Ambient Properties**

**Process Parameters**

**Geometric Parameters**

**Simulation Parameters**

Total number of beads

Initial diameter of the jet  m

Initial length of the jet  m

Perturbation amplitude  m

Perturbation frequency  s<sup>-1</sup>

Visualization Options

Export / Import Tools

(e) simulační parametry

**Material Properties**

**Ambient Properties**

**Process Parameters**

**Geometric Parameters**

**Simulation Parameters**

**Visualization Options**

Animation  On  Off

Animation speed

Rotation  X  Y  Z

View

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

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

Export / Import Tools

(f) parametry vizualizace

**Obr. 7:** Záložky ovládacího panelu nástrojů počítačové aplikace.

$= 2.93 \mu\text{A}$ , objemový průtok roztoku kapilárou  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ . Geometrické parametry byly: vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem  $h = 200 \text{ mm}$  a průměr diskového kolektoru  $D = 100 \text{ mm}$ . Prostředí ve zvláknovacím prostoru byl vzduch s dynamickou viskozitou  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$  a měrnou hmotností  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ . Zvláknování probíhalo při teplotě  $T = 21 \text{ }^\circ\text{C}$  a relativní vlhkosti  $\psi = 16.5 \%$ . (Koncentrace nasycených par rozpouštědla v blízkosti kapalinové trysky  $c_{s,\infty} = 0.165$ .) Počáteční průměr trysky byl  $d_0 = 300 \mu\text{m}$  a diskretizační délka segmentu trysky byla  $l_0 = 4 \mu\text{m}$ . Na obr. 10, obr. 11, obr. 14, obr. 15, obr. 18 a obr. 19 jsou vykresleny radiální vzdálenosti,  $s_{xy} = \sqrt{x^2 + y^2}$ , nabitých hmotných bodů od souřadné osy  $z$ . Body byly proloženy kubickým polynomem, jehož koeficienty byly získány nelineární metodou nejmenších čtverců implementovanou v programu GNU PLOT. Simulace byly ukončeny při zachycení prvního nabitého hmotného bodu na uzemněném diskovém kolektoru. Výpočetní čas každé simulace se na PC s procesorem Intel Pentium M @1.6 GHz a OS GNU/Linux pohyboval kolem půl druhé hodiny.

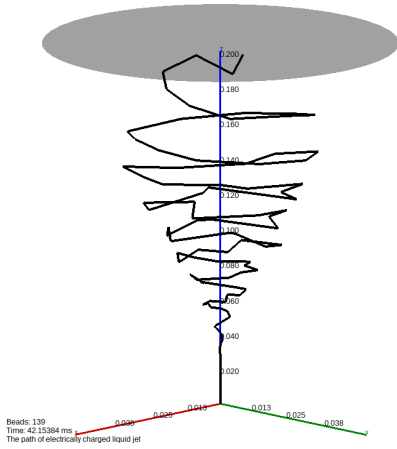
## 5.4 Ukládání nanovláken na drátovém kolektoru ■

Speciální kolektory různých tvarů hrají klíčovou roli pokud je požadováno cílené ukládání zvlákněných nanovláken. Orientovaná nanovláknina mohou být užitečná například při navrhování scaffoldů pro tkáňové inženýrství [21] nebo žádoucí v případě následného zpracování do nanopříze. Na obr. 20(a) až obr. 20(i) jsou zobrazeny pohledy na elektrostaticky zvlákněná nanovláknina při různých roztečích válcových vodičů speciálního drátového kolektoru. Součástí každého pohledu je i úhlový histogram pro průkazné vyhodnocení směrové orientace deponovaných nanovláken. Všechny výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN. Parametry modelu byly stejné jako v odd. 5.3 s výjimkou průměru kolektoru, který byl  $D = 2.45 \text{ mm}$ . Výpočetní čas každé simulace se na PC s procesorem Intel Pentium M @1.6 GHz a OS GNU/Linux pohyboval kolem šesti hodin.

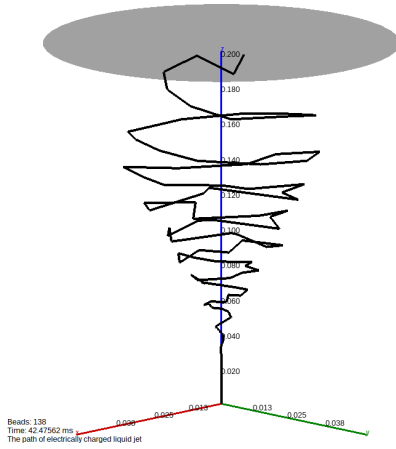
## 6 Zhodnocení výsledků a nových poznatků ■

Zhodnocením výsledků dosažených na základě počítačových simulací lze dospět k závěru, že cíle disertační práce byly splněny, a že matematický model, resp. numerický model, je schopen predikovat vliv parametrů na proces elektrostatického zvláknování, ukládání elektrostaticky zvlákněných nanovláken na sběrném kolektoru a rovněž přispět k hlubšímu porozumění tohoto procesu. Praktickým výstupem práce je především počítačová aplikace pro efektivní simulaci procesu elektrostatického zvláknování, která vědeckým

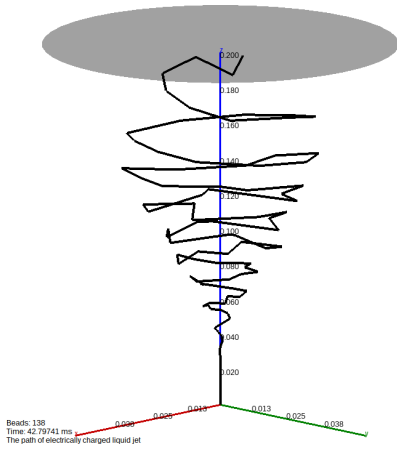




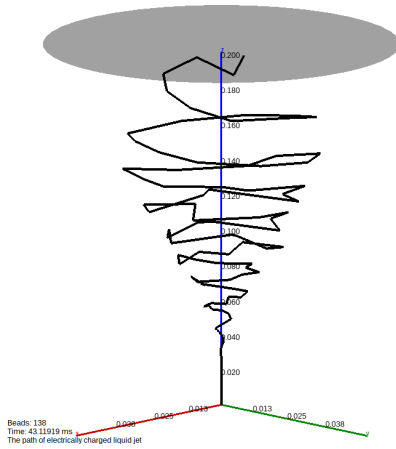
(a)  $\gamma = 140 \text{ mN m}^{-1}$



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

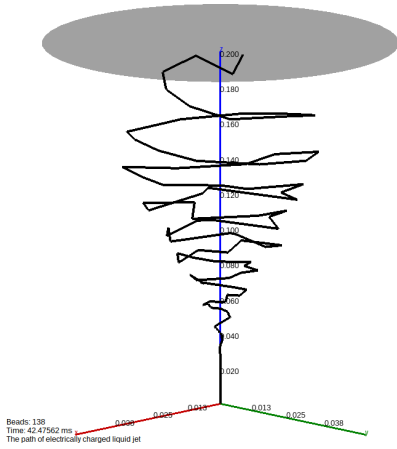


(b)  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$

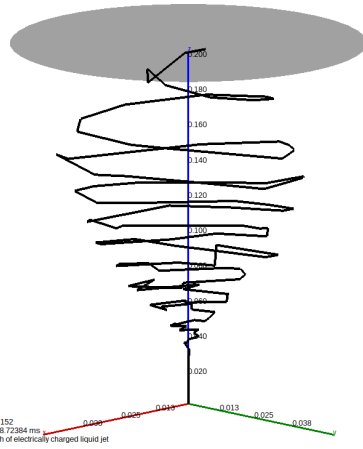


(d)  $\gamma = 10 \text{ mN m}^{-1}$

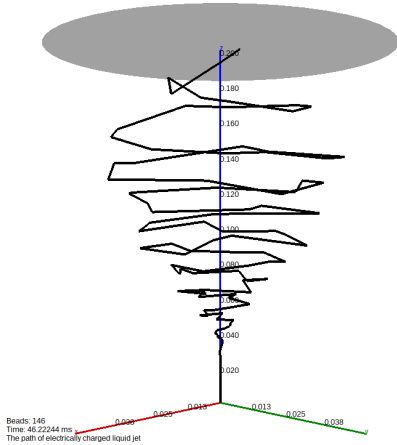
**Obr. 8:** Vliv povrchového napětí na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\epsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



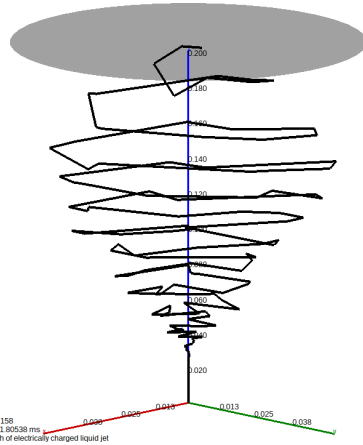
(a)  $\eta_0 = 1000 \text{ Pa s}$



(c)  $\eta_0 = 250 \text{ Pa s}$

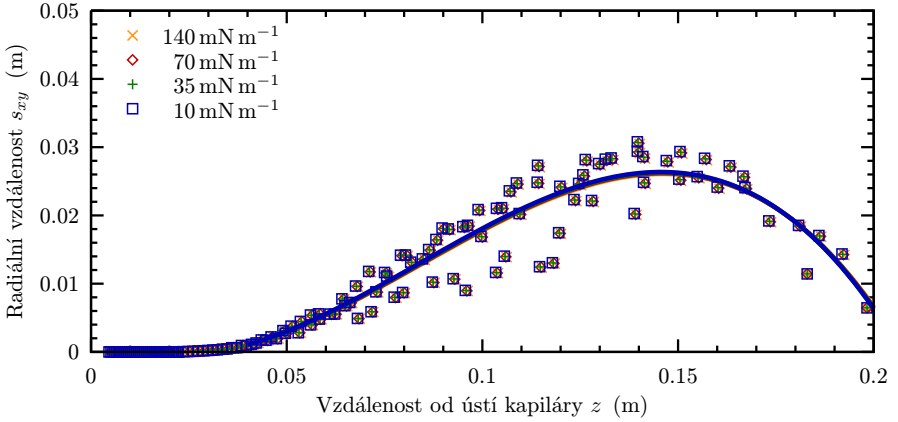


(b)  $\eta_0 = 500 \text{ Pa s}$

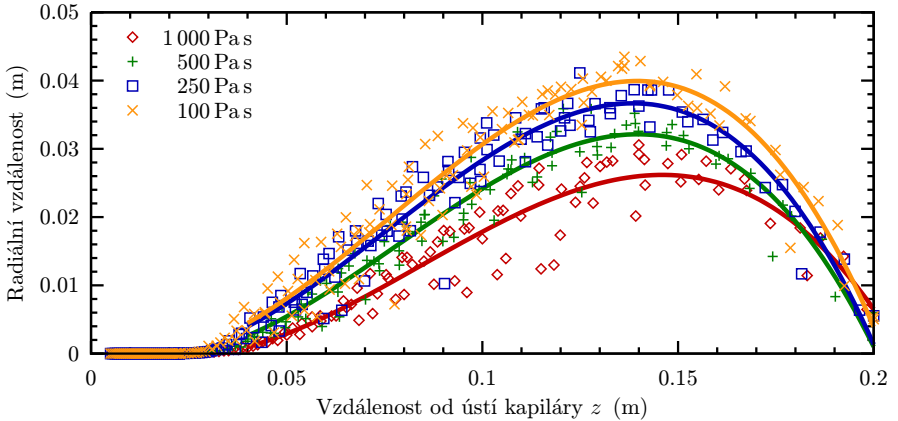


(d)  $\eta_0 = 100 \text{ Pa s}$

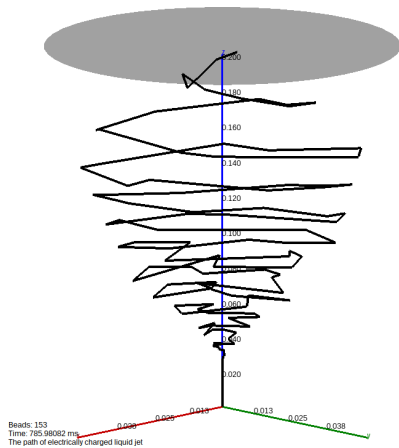
**Obr. 9:** Vliv počáteční dynamické viskozity na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{TP}} = 57.63$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



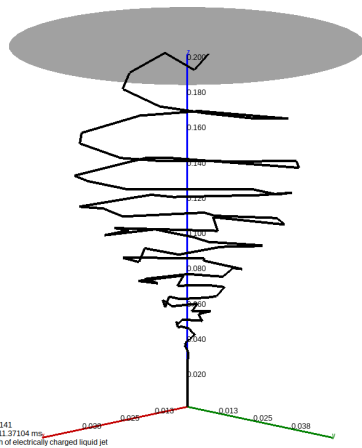
**Obr. 10:** Porovnání vlivu povrchového napětí na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\varepsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



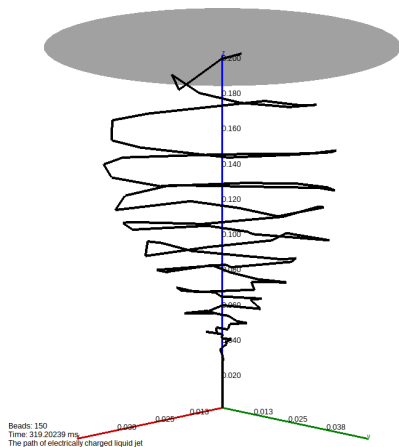
**Obr. 11:** Porovnání vlivu počáteční dynamické viskozity na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



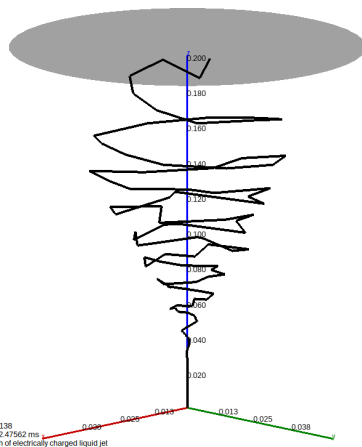
(a)  $\tau_0 = 80$  ms



(c)  $\tau_0 = 20$  ms

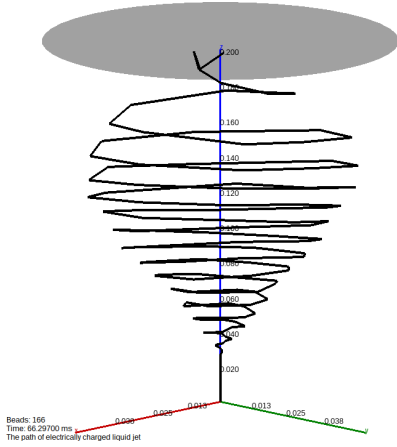


(b)  $\tau_0 = 40$  ms

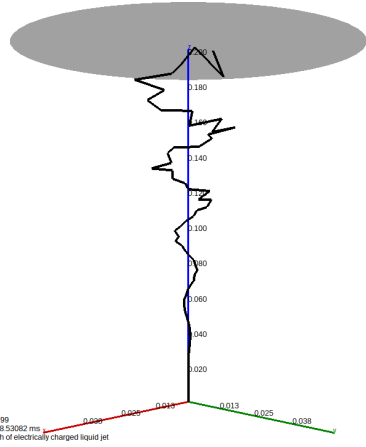


(d)  $\tau_0 = 10$  ms

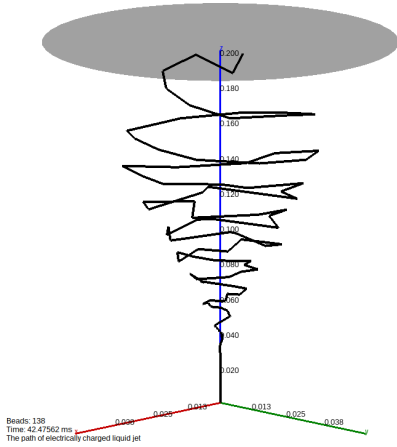
**Obr. 12:** Vliv počátečního relaxačního času na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rP}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{\text{s,a}} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{\text{p0}} = 0.06$ ,  $c_{\text{s},\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



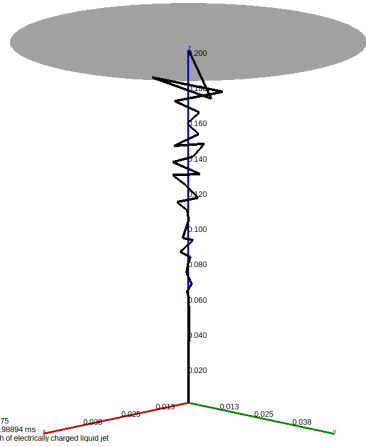
(a)  $Q_V = 15.9 \text{ ml hod}^{-1}$



(c)  $Q_V = 5.3 \text{ ml hod}^{-1}$

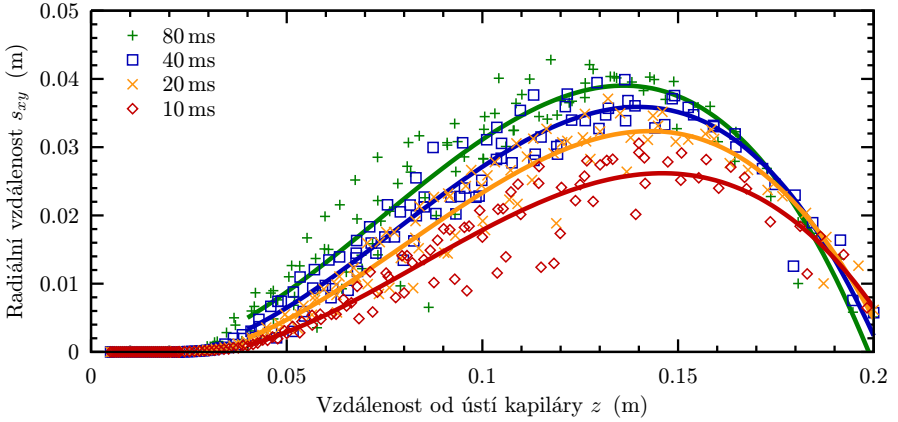


(b)  $Q_V = 10.9 \text{ ml hod}^{-1}$

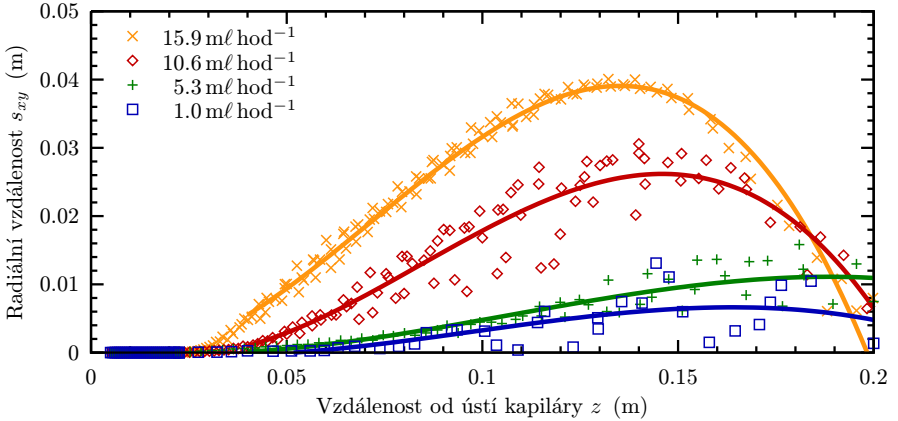


(d)  $Q_V = 1.0 \text{ ml hod}^{-1}$

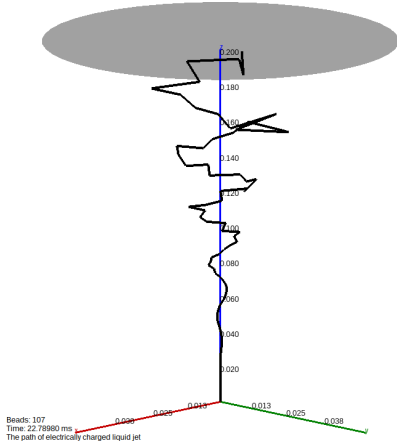
**Obr. 13:** Vliv objemového průtoku na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\epsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



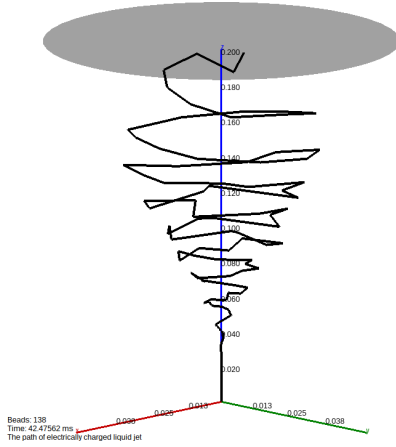
**Obr. 14:** Porovnání vlivu počátečního relaxačního času na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



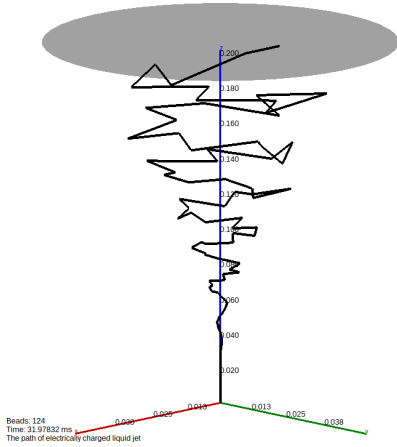
**Obr. 15:** Porovnání vlivu objemového průtoku na šířku zóny bičující nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



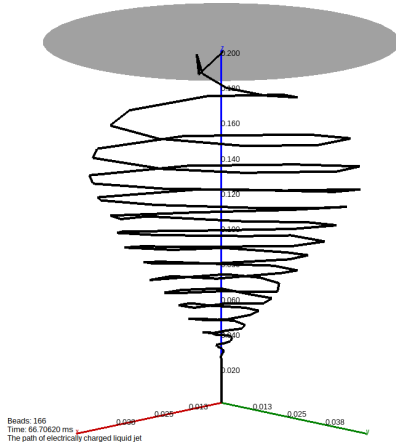
(a)  $I_0 = 4.93 \mu\text{A}$



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

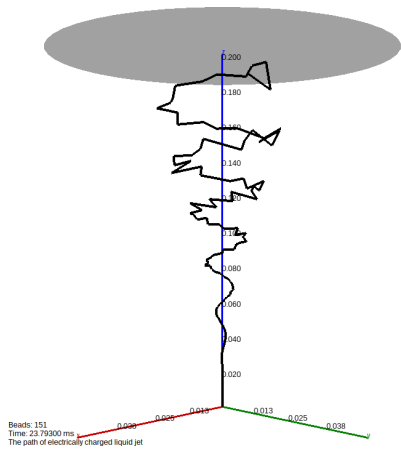


(b)  $I_0 = 3.93 \mu\text{A}$

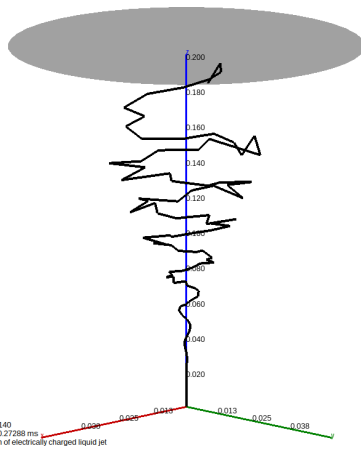


(d)  $I_0 = 1.93 \mu\text{A}$

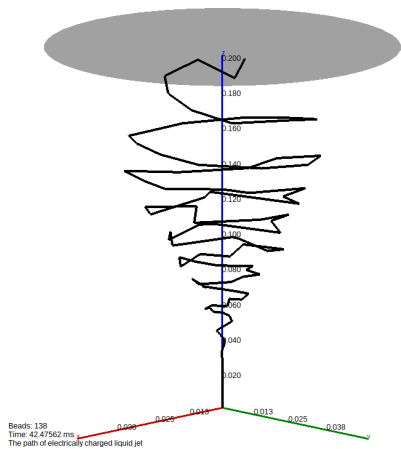
**Obr. 16:** Vliv elektrického proudu na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{rp} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



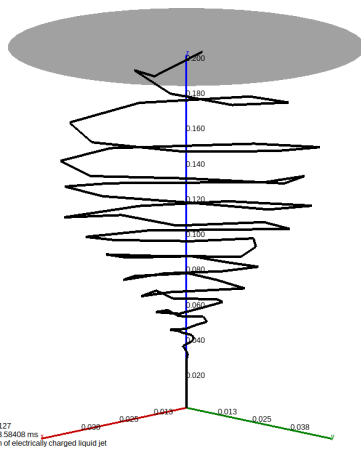
(a)  $\varphi_1 - \varphi_2 = 20 \text{ kV}$



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



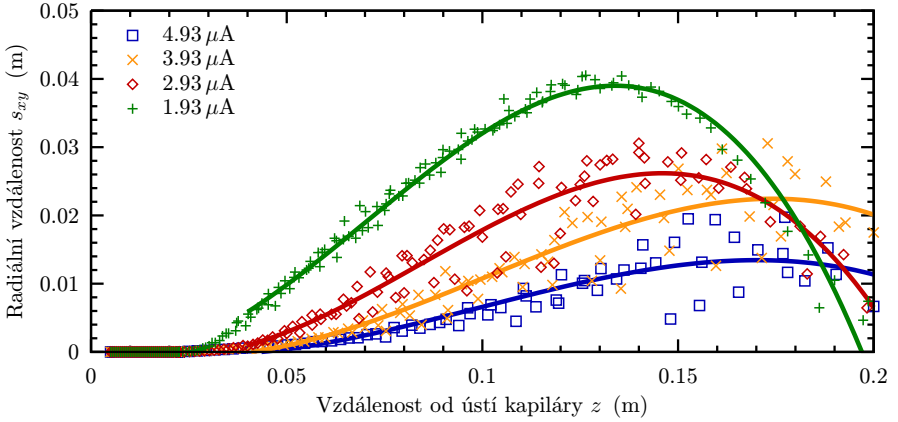
(b)  $\varphi_1 - \varphi_2 = 15 \text{ kV}$



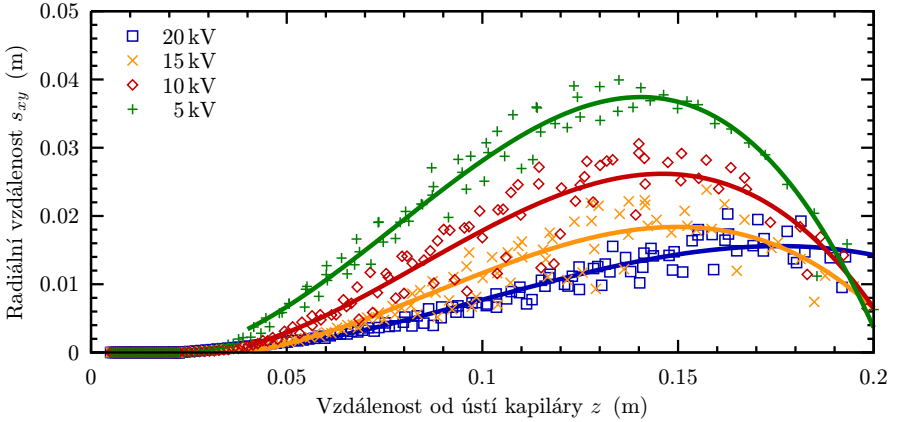
(d)  $\varphi_1 - \varphi_2 = 5 \text{ kV}$

**Obr. 17:** Vliv rozdílu elektrických potenciálů na trajektorii elektricky nabitě trysky. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rP}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_{\text{a}} = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_{\text{a}} = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{\text{s,a}} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{\text{p0}} = 0.06$ ,  $c_{\text{s},\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.

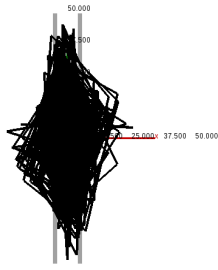




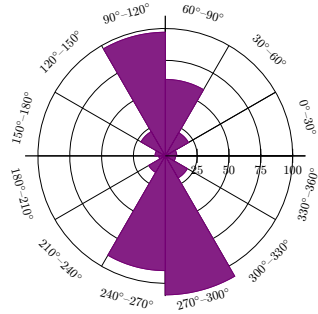
**Obr. 18:** Porovnání vlivu elektrického proudu na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



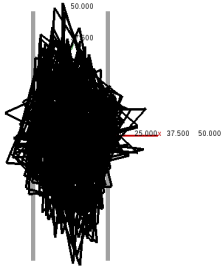
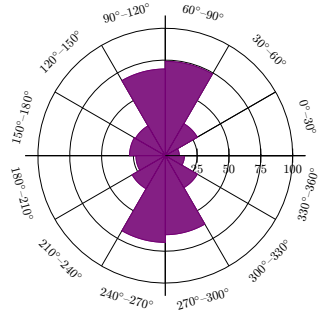
**Obr. 19:** Porovnání vlivu rozdílu elektrických potenciálů na šířku zóny bíhající nestability. Graf znázorňuje radiální vzdálenost,  $s_{xy} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ , nabitého hmotného bodu  $i$  v závislosti na vzdálenosti,  $z_i$ , od ústí kapiláry. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ .



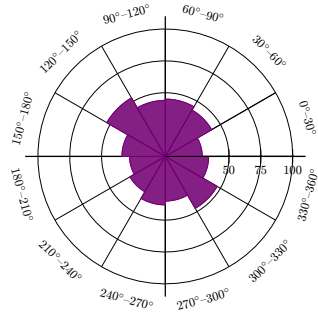
(a)  $a = 5.5$  mm



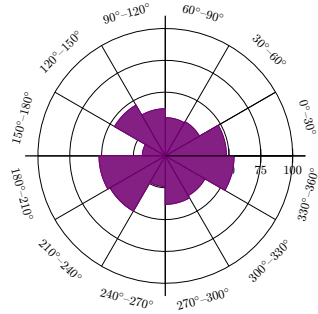
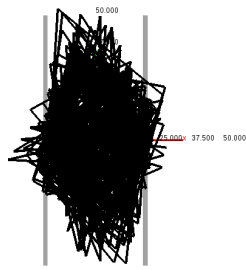
(b)  $a = 11.0$  mm



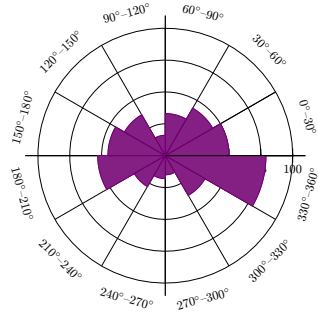
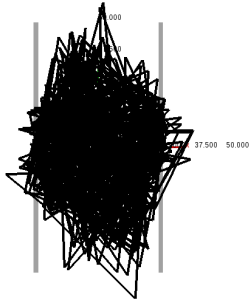
(c)  $a = 16.5$  mm



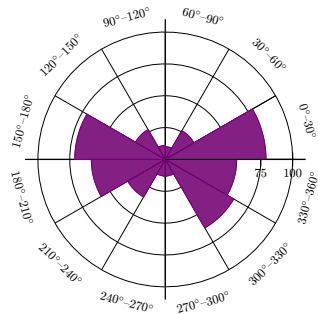
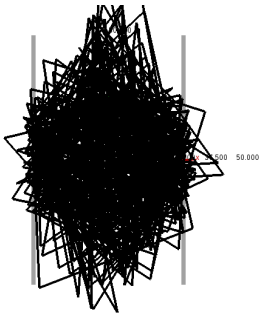
**Obr. 20:** Vliv rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $D_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu žožin.



(d)  $a = 22.0$  mm

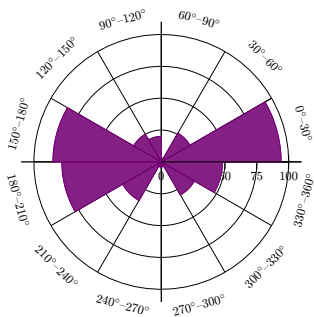
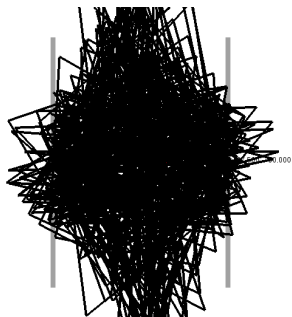


(e)  $a = 27.5$  mm

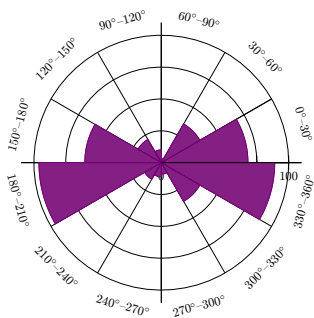
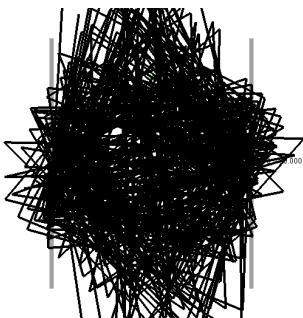


(f)  $a = 33.0$  mm

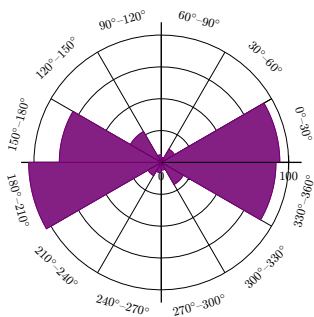
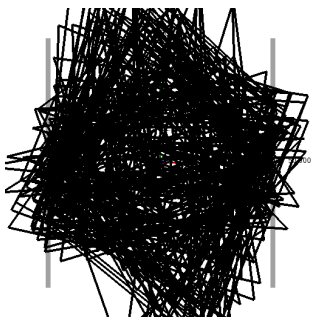
**Obr. 20 (pokrač.):** Vliv rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.



(g)  $a = 38.5$  mm



(h)  $a = 44.0$  mm



(i)  $a = 49.5$  mm

**Obr. 20 (pokrač.):** Vliv rozteče válcových vodičů speciálního kolektoru na ukládání nanovláken. Parametry numerické simulace:  $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$ ,  $\varepsilon_{\text{rp}} = 57.63$ ,  $\eta_0 = 10^3 \text{ Pa s}$ ,  $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ ,  $\kappa = 14.8 \text{ mS m}^{-1}$ ,  $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\tau_0 = \eta_0/E_0 = 10 \text{ ms}$ ,  $\varphi_1 = 10 \text{ kV}$ ,  $\varphi_2 = 0 \text{ V}$ ,  $\mathcal{D}_{s,a} = 2.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$ ,  $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$ ,  $c_{p0} = 0.06$ ,  $c_{s,\infty} = 0.165$ ,  $h = 200 \text{ mm}$  a  $m = 0.1$ . Výsledky byly získány prostřednictvím autorem vyvinutého numerického modelu JOŽIN.

pracovníkům nabízí nástroj pro rychlejší vývoj nanovláknenných materiálů. Velkou výhodou tohoto přístupu je, že samotnému procesu elektrostatického zvlákňování předchází počítačová simulace, což vede k úspoře nejen materiálu, energetických zdrojů, ale i času. Přínosem disertační práce jsou také nové vlastnosti matematického modelu, resp. numerického modelu, které nejsou obsaženy v modelu od Renekera a Yarina. Mezi tyto nové vlastnosti patří nahrazení homogenního elektrostatické pole za modely elektrických polí pro diskový kolektor a speciální drátový kolektor, které umožňují vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace. Vzhledem k velkému měrnému povrchu polymerních nanovláken byla přidána síla zahrnující vliv třecí a tlakové složky odporového prostředí vzduchu. Počítačová aplikace také obsahuje výpočet kritické intenzity elektrostatického pole pro ověření, zda při zadaných parametrech nastane elektrostatické zvlákňování nebo kontrolu minimálního požadovaného počátečního průměru kapalinové trysky.

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

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

## 7 Použitá literatura

- [1] LUKÁŠ, D. et al. Physical principles of electrospinning (Electrospinning as a nano-scale technology of the twenty-first century). *Textile Progress*. June 2009, vol. 41, iss. 2, s. 59–140.
- [2] TUCKER, N. et al. The history of the science and technology of electrospinning from 1600 to 1995. *Journal of Engineered Fibers and Fabrics*. July 2012, vol. 7, s. 63–73.
- [3] FENG, J. J. The stretching of an electrified non-Newtonian jet: A model for electrospinning. *Physics of fluids*. November 2002, vol. 14, num. 11, s. 3912–3926.

- [4] THERON, S. A. – ZUSSMAN, E. – YARIN, A. L. Experimental investigation of the governing parameters in the electrospinning of polymer solutions. *Polymer*. March 2004, vol. 45, iss. 6, s. 2017–2030.
- [5] RAMAKRISHNA, S. et al. *An Introduction to Electrospinning and Nanofibers*. 1st edition. Singapore : World Scientific Publishing, 2005. 396 pp. ISBN 978-981-256-415-3.
- [6] RENEKER, D. H. et al. Electrospinning of nanofibers from polymer solutions and melts. *Advances in Applied Mechanics*. July 2007, vol. 41, s. 43–195.
- [7] THERON, S. A. et al. Multiple jets in electrospinning: experiment and modeling. *Polymer*. April 2005, vol. 46, iss. 9, s. 2889–2899.
- [8] RENEKER, D. H. et al. Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning. *Journal of Applied Physics*. May 2000, vol. 87, num. 9, s. 4531–4547.
- [9] RENEKER, D. H. – YARIN, A. L. Electrospinning jets and polymer nanofibers. *Polymer*. May 2008, vol. 49, iss. 10, s. 2387–2425.
- [10] YARIN, A. L. – KOOMBHONGSE, S. – RENEKER, D. H. Bending instability in electrospinning of nanofibers. *Journal of Applied Physics*. March 2001, vol. 89, num. 5, s. 3018–3026.
- [11] Nobel Media AB. *The Nobel Prize in Chemistry 2013* [online]. [cit. 2014-06-21]. c2013. Dostupné z: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2013/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/).
- [12] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. I. Stability theory. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2201–2220.
- [13] KOWALEWSKI, T. A. – BŁOŃSKI, S. – BARRAL, S. Experiments and modelling of electrospinning process. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences*. August 2005, vol. 53, num. 4, s. 385–394.
- [14] HUANG, Z. M. et al. A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites. *Composites science and technology*. November 2003, vol. 63, iss. 15, s. 2223–2253.
- [15] LUKÁŠ, D. – SARKAR, A. – POKORNÝ, P. Self-organization of jets in electrospinning from free liquid surface: A generalized approach. *Journal of Applied Physics*. April 2008, vol. 103, iss. 8, s. 309–316.
- [16] TAYLOR, G. Disintegration of water drops in an electric field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. July 1964, vol. 280, iss. 1382, s. 383–397.

- [17] YARIN, A. L. – KOOMBHONGSE, S. – RENEKER, D. H. Taylor cone and jetting from liquid droplets in electrospinning of nanofibers. *Journal of Applied Physics*. November 2001, vol. 90, num. 9, s. 4836–4846.
- [18] HAN, T. – YARIN, A. L. – RENEKER, D. H. Viscoelastic electrospun jets: Initial stresses and elongational rheometry. *Polymer*. March 2008, vol. 49, iss. 8, s. 1651–1658.
- [19] THOMPSON, C. J. et al. Effects of parameters on nanofiber diameter determined from electrospinning model. *Polymer*. November 2007, vol. 48, iss. 23, s. 6913–6922.
- [20] TEO, W. E. – RAMAKRISHNA, S. A review on electrospinning design and nanofibre assemblies. *Nanotechnology*. July 2006, vol. 17, iss. 14, s. 89–106.
- [21] VASITA, R. – KATTI, D. S. Nanofibers and their applications in tissue engineering. *International Journal of Nanomedicine*. March 2006, vol. 1, iss. 1, s. 15–30.
- [22] RŮŽIČKOVÁ, J. *Elektrostatické zvlákňování nanovláken*. 2. vyd. Liberec : TUL, 2006. 54 s. ISBN 80-7372-066-3.
- [23] ZIABICKI, A. *Fundamentals of Fibre Formation: The Science of Fibre Spinning and Drawing*. 1st edition. London : John Wiley & Sons, 1976. 488 pp. ISBN 978-0471982203.
- [24] BAUMGARTEN, P. K. Electrostatic spinning of acrylic microfibers. *Journal of Colloid and Interface Science*. May 1971, vol. 36, iss. 1, s. 71–79.
- [25] DOSHI, J. – RENEKER, D. H. Electrospinning process and applications of electrospun fibers. *Journal of Electrostatics*. August 1995, vol. 35, iss. 2–3, s. 151–160.
- [26] FONG, H. – CHUN, I. – RENEKER, D. H. Beaded nanofibers formed during electrospinning. *Polymer*. July 1999, vol. 40, iss. 16, s. 4585–4592.
- [27] WATANABE, H. Viscoelasticity and dynamics of entangled polymers. *Progress in Polymer Science*. November 1999, vol. 24, iss. 9, s. 1253–1403.
- [28] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. II. Applications. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2221–2236.
- [29] ZENG, Y. C. – YANG, J. P. – YU, C. W. Mixed Euler-Lagrange approach to modeling fiber motion in high speed air flow. *Applied Mathematical Modelling*. March 2005, vol. 29, iss. 3, s. 253–262.

- [30] FILATOV, Y. – BUDYKA, A. – KIRICHENKO, V. *Electrospinning of Micro- and Nanofibers: Fundamentals in Separation and Filtration Processes*. 1st edition. New York : Begell House, 2007. 488 s. ISBN 978-1-56700-241-6.
- [31] LIENHARD IV, J. H. – LIENHARD V, J. H. *A Heat Transfer Textbook*. 4th edition. Cambridge : Phlogiston Press, 2012. Dostupné z: <http://web.mit.edu/lienhard/www/ahtt.html>. 755 s.
- [32] SEAVER, M. – GALLOWAY, A. – MANUCCIA, T. J. Acoustic Levitation in a free-jet wind tunnel. *Review of Scientific Instruments*. November 1989, vol. 60, iss. 11, s. 3452–3459.
- [33] VIKTORIN, Z. Analytické řešení sušícího procesu s uvažováním vlivu rozměru materiálu ve směru proudění sušícího prostředí. *Zdravotní technika a vzduchotechnika*. 1985, ročník 8, číslo 4, s. 145–152.
- [34] MEISSNER, B. – ZILVAR, V. *Fyzika polymerů: Struktura a vlastnosti polymerních materiálů*. 1. vyd. Praha : SNTL, 1987. 308 s.
- [35] SEDLÁK, B. – ŠTOLL, I. *Elektrina a magnetismus*. 2. vyd. Praha : ACADEMIA, 2002. 632 s. ISBN 80-200-1004-1.
- [36] YARIN, A. L. *Free liquid jets and films: hydrodynamics and rheology*. 1st edition. New York : Longman Scientific & Technical, 1993. 446 pp. ISBN 978-0582102958.
- [37] NAGY, J. *Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic*. 2. vyd. Praha : SNTL, 1983. 112 s.
- [38] PŘÍKRYL, P. *Numerické metody matematické analýzy*. 2. vyd. Praha : SNTL, 1988. 187 s.
- [39] KREML, P. et al. *Matematika II*. Ostrava : VŠB-TU, 2007. Dostupné z: <http://homen.vsb.cz/~kre40/esfmat2/kapitoly/>. Studijní materiál. ISBN 978-80-248-1316-5.
- [40] HAZUCHOVÁ, A. *Měření dynamických parametrů při elektrostatickém zvlákňování*. Liberec, 2010. 54 s. Diplomová práce na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci na Ústavu mechatroniky a technické informatiky. Vedoucí diplomové práce prof. Ing. Pavel Rydlo, Ph.D.
- [41] PETRŽÍLKA, V. – ŠAFRATA, S. *Elektrina a magnetismus*. 2. vyd. Praha : ČSAV, 1956. 637 s.
- [42] YATES, R. C. *Curves and their properties*. Reston : National Council of Teachers of Mathematics, 1974. 245 pp.
- [43] HORÁK, Z. – KRUPKA, F. *Fyzika*. Praha : SNTL/ALFA, 1996.



- [44] SODOMKA, L. Jednoduché teoretické předpoklady elektrostatického zvlákňování nanovláken. In *NANOCON 2009. Sborník referátů z mezinárodní konference pořádané 20. – 22. října 2009 v Rožnově pod Radhoštěm*, 1. vyd., Ostrava, 2009. TANGER. ISBN 978–80–87294–12–3.
- [45] MOTT, R. L. *Applied Fluid Mechanics*. 3rd edition. Columbus : Merrill, 1990. 645 pp. ISBN 0–02–946320–3.
- [46] JANALÍK, J. *Obtékání a odpor těles*. Ostrava : VŠB–TU, 2008. Dostupné z: <http://www.338.vsb.cz/PDF/Janalik-Obtekani.pdf>. Studijní materiál.
- [47] TANNEHILL, J. C. – ANDERSON, D. A. – PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2nd edition. Washington : Taylor & Francis, 1997. 792 pp. ISBN 1–56032–046–X.
- [48] BANAHAN, M. – BRADY, D. – DORAN, M. *The C Book: Featuring the ANSI C Standard*. 2nd edition. Wokingham : Addison-Wesley, 1991. 336 pp. ISBN 978–0201544336.
- [49] QUINN, M. J. *Parallel Programming in C with MPI and OpenMP*. 1st edition. New York : McGraw-Hill, 2003. 529 pp. ISBN 007–282256–2.
- [50] TAYLOR, G. Electrically driven jets. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. December 1969, vol. 313, iss. 1515, s. 453–475.
- [51] ŠIMKO, M. – ERHART, J. – LUKÁŠ, D. A mathematical model of external electrostatic field of a special collector for electrospinning of nanofibers. *Journal of Electrostatics*. April 2014, vol. 72, iss. 2, s. 161–165.
- [52] DEITZEL, J. M. et al. The effect of processing variables on the morphology of electrospun nanofibers and textiles. *Polymer*. January 2001, vol. 42, iss. 1, s. 261–272.
- [53] LI, D. – WANG, Y. – XIA, Y. Electrospinning nanofibers as uniaxially aligned arrays and layer-by-layer stacked films. *Advanced Materials*. February 2004, vol. 16, iss. 4, s. 361–366.
- [54] POKORNÝ, P. *Analýza procesu elektrostatického zvlákňování a možnosti jeho řízení*. Liberec, 2011. 121 s. Doktorská práce na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci na Ústavu mechatroniky a technické informatiky. Vedoucí doktorské práce prof. RNDr. David Lukáš, CSc.
- [55] DAVIS, J. R. *Tensile Testing*. 2nd edition. Praha : ASM International, 2004. 283 pp. ISBN 978–0–87170–806–9.

## 8 Práce autora se vztahem ke studované problematice ■

### 8.1 Publikace v odborných časopisech ■

- [56] ŠIMKO, M. – LUKÁŠ, D. Mathematical modeling of a whipping instability of an electrically charged liquid jet. (revision under review)
- [57] ŠIMKO, M. – ERHART, J. – LUKÁŠ, D. A mathematical model of external electrostatic field of a special collector for electrospinning of nanofibers. *Journal of Electrostatics*. April 2014, vol. 72, iss. 2, p. 161–165.

### 8.2 Příspěvek ve sborníku z mezinárodní konference ■

- [58] 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–???–?.
- [59] 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.

### 8.3 Příspěvek ve sborníku z domácí konference ■

- [60] 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.
- [61] 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.
- [62] 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.

## 8.4 Příspěvek ve sborníku z workshopu

- [63] 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.

## 8.5 Příspěvek ve sborníku ze SVOČ

- [64] 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.

## Curriculum Vitae

### Osobní informace

Jméno	ŠIMKO Milan
E-mail	milan.simko@tul.cz
Státní příslušnost	Česká republika
Pohlaví	Muž

### Pracovní zkušenosti

Období (od–do)	prosinec 2012 — do současnosti
Povolání nebo vykonávaná funkce	Pevnostní výpočtář
Hlavní pracovní náplň a oblasti odpovědnosti	Pevnostní výpočty tlakových nádob a ocelových konstrukcí, analýzy potrubních systémů a konstrukčních prvků metodou konečných prvků, podpora při řešení projektů a R&D úkolů
Název/jméno a adresa zaměstnavatele	Chart Ferox a. s., Ústecká 30, 405 30 Děčín
Obor činnosti či odvětví	Výroba zařízení na skladování a transport zkapalněných technických plynů
Období (od–do)	březen 2011 — srpen 2012
Povolání nebo vykonávaná funkce	Mladý perspektivní řešitel projektu ESF CZ.1.07/2.3.00/09.0155
Hlavní pracovní náplň a oblasti odpovědnosti	Programování a paralelní programování, prezentace výsledků na seminářích a konferencích
Název/jméno a adresa zaměstnavatele	TU v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec

Období (od–do) říjen 2006 — leden 2007  
 Povolání nebo vykonávaná funkce Odborná praxe zaměřená na kontrolu a řízení jakosti  
 Název/jméno a adresa zaměstnavatele L. A. F. Liberec a. s., Bánskobystřická 114/26, 460 08 Liberec  
 Obor činnosti či odvětví Výroba náprav pro automobilový průmysl

## Vzdělání, odborná příprava a školení

Období (od–do) září 2007 — do současnosti  
 Název a typ organizace, která poskytla vzdělání, odbornou přípravu či kurz TU v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec

Období (od–do) září 2001 — červen 2007  
 Dosažená kvalifikace Inženýr v oboru Strojírenská technologie / Ing.  
 Název a typ organizace, která poskytla vzdělání, odbornou přípravu či kurz TU v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec  
 Úroveň vzdělání v národní nebo mezinárodní klasifikaci Vysokoškolské

Období (od–do) září 1997 — květen 2001  
 Dosažená kvalifikace Maturita v oboru Automatizovaná konstrukce ve strojírenství  
 Název a typ organizace, která poskytla vzdělání, odbornou přípravu či kurz SPŠ a VOŠ Chomutov, Školní 50, 430 01 Chomutov  
 Úroveň vzdělání v národní nebo mezinárodní klasifikaci Středoškolské s maturitou

## Osobní dovednosti

Mateřský jazyk

**Čeština**

Další jazyky  
 Sebehodnocení\*

Porozumění		Mluvení		Psaní	
Poslech	Čtení	Ústní interakce	Samostatný ústní projev		
A1 uživatel základů jazyka	B2 samostatný uživatel	A2 uživatel základů jazyka	B2 samostatný uživatel	B2 samostatný uživatel	B2 samostatný uživatel

\* Společný evropský referenční rámec pro jazyky

Sociální schopnosti a dovednosti

Prezentační dovednosti získané během doktorského studia  
 Týmové role podle Belbina: *Kompletovač/Finišer* a *Inovátor*

Organizační schopnosti a dovednosti

Plánování, metoda osobní produktivity GTD

Technické znalosti a dovednosti

Analytický přístup k řešení problémů  
 Čtení výkresové dokumentace

*Uživatel*

CAD systémy: AutoCAD, Pro/Engineer  
 FEM systémy: ANSYS Workbench, TRIFLEX Windows  
 Grafické systémy: GIMP, GNUPLOT, METAPOST  
 Operační systémy: UNIX/Linux, Microsoft Windows 7  
 Typografický systém: T<sub>E</sub>X (formáty PlainT<sub>E</sub>X a L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X)  
 Verzovací systém: Git  
 WWW: Mutt, Mozilla Firefox/Thunderbird, Microsoft Outlook

*Programátor*

Bash, C/C++, Mathcad, Matlab, Pascal, Perl, T<sub>E</sub>X, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X  
 AJAX, CSS, JS, HTML, XHTML, XML

**Pracovní portfolio**

Řešené projekty

ITER  
 PETRONAS Floating LNG 2  
 SHELL LNG Refuelling Stations

**Doplňující informace**

Certifikáty

Osvědčení o absolvování odborného konzultačního semináře  
*Výpočty pevnosti, stability, životnosti a tlakových zkoušek tlakových zařízení* (2013)  
 Certifikát o absolvování kurzu *Soft skills* (2012)  
 Certifikát o absolvování kurzu *Řízení času* (2011)  
 Certifikát o absolvování kurzu *Týmová spolupráce* (2011)  
 Certifikát o absolvování kurzu *Základy projektového řízení* (2011)

**Stručná charakteristika dosavadní odborné a vědecké činnosti****Doktorské studium**

Studium

Studium v prezenční formě doktorského studijního programu  
 Textilní inženýrství, v oboru Textilní materiálové inženýrství na  
 Fakultě textilní Technické univerzity v Liberci.

Studium v kombinované formě doktorského studijního programu  
 Textilní inženýrství, v oboru Textilní materiálové inženýrství na  
 Fakultě textilní Technické univerzity v Liberci.

Seznam zkoušek

Fyzikální principy elektrostatického zvlákňování (16/6/2011)  
 Mechanika vlákněných útvarů (3/3/2010)  
 Vybrané numerické metody (5/6/2008)  
 Matematické základy metody konečných prvků (7/4/2008)

SDZ Státní doktorská zkouška vykonána dne 21. listopadu 2011 s celkovým hodnocením **prospěl**.

## Pedagogická činnost

Výuka (přednášející)

Základy informačních a telekomunikačních technologií (2010)

Výuka (cvičící)

Matematika pro přírodní vědy (2010–2011)

Seminář z matematiky (2009–2011)

Matematika III (numerická matematika) (2010)

Metody stochastického a simulačního modelování (2009)

Programování v MATLABu (2007–2009)

Úvod do numerické matematiky (2007–2008)

## Ostatní projekty

Projekt ESF č. CZ.1.07/2.3.00/09.0155 „Vytvoření a rozvoj týmu pro náročné technické výpočty na paralelních počítačích na TU v Liberci“, člen řešitelského týmu (2011–2012)

Grant FRVŠ č. 2235/2008 „Multimediální podpora pro předmět Metody stochastického a simulačního modelování“, člen řešitelského týmu (2008–2009)

Grant FRVŠ č. 2663/2007 „Inovace předmětů numerické matematiky“, člen řešitelského týmu (2007–2008)

# Zápis o vykonání státní doktorské zkoušky

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI  
FAKULTA TEXTILNÍ


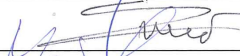



## ZÁPIS O VYKONÁNÍ STÁTNÍ DOKTORSKÉ ZKOUŠKY (SDZ)

*Jméno a příjmení doktoranda:* Ing. Milan Šimko  
*Datum narození:* 24. 1. 1982  
*Doktorský studijní program:* Textilní inženýrství  
*Studijní obor:* Textilní materiálové inženýrství  
*Termín konání SDZ:* 21. 11. 2011

prospěl ~~neprospěl~~

### *Komise pro SDZ:*

### *Podpis*

Předseda:	prof. Ing. Jiří Militký, CSc.	
Místopředseda:	prof. RNDr. David Lukáš, CSc.	
Členové:	prof. Ing. Jaroslav Šesták, DrSc.	
	doc. RNDr. Miroslav Šulc, Ph.D.	
	doc. Ing. Jakub Wiener, Ph.D.	

V Liberci 21. 11. 2011

*O průběhu SDZ je veden protokol*



## Vyjádření školitele doktoranda

Disertační práce Ing. Milana Šimka „Modelování a simulace bičující nestability při elektrostatickém zvlákňování“ se zabývá matematickým modelováním hlavních rysů pohybu polymerní trysky během elektrostatického zvlákňování. Model a simulace, kterou disertant vytvořil, byly inspirovány pracemi Renekera a Yarina. Polymerní tryska je v tomto přístupu diskretizována do lineárních elementů spojených pohyblivými klouby. Klouby jsou zároveň nositeli náboje, zatímco lineární elementy poskytují modelu reologické vlastnosti včetně důsledků kapilárních sil. Model trysky je vystaven vnějšímu poli vytvářenému mezi zvlákňovací elektrodou a kolektorem.

Od samého zadání disertační práce, jehož jsem se zúčastnil jako konzultant, projevoval Ing. M. Šimko hluboký zájem o zvolenou problematiku. Brzy vytvořil první verzi modelu a získal první výsledky počítačové simulace. Nespokojil se s bezrozměrnými vstupními daty převzatými z Renekerovy a Yarinovy práce, ale snažil se soubor vstupních údajů co nejvíce přizpůsobit experimentálně naměřeným hodnotám. Při simulaci se potýkal s problémy konvergence výpočtu při nevhodně vybraném kroku simulace při daných vstupních datech. Tento problém nakonec úspěšně vyřešil a provedl sérii simulačních výpočtů. Výsledkem práce je kvalitativní i kvantitativní popis základních rysů dynamiky polymerní trysky při elektrostatickém zvlákňování. Výstupy z počítačové simulace disertanta ukazují například přechod od stabilní části trysky v nestabilní bičující část, která má podobu rozevírající se spirály odpovídající reálnému chování. V práci diskutuje například vliv viskozity, modulu pružnosti, relaxačního času a povrchového napětí na zužování, nebo naopak rozšiřování bičující části trysky.

M. Šimko přispěl k pochopení vzájemné souvislosti materiálových a procesních parametrů elektrostatického na dynamické chování polymerní trysky při elektrostatickém zvlákňování.

Jako dostatečnou hodnotím publikační činnost Ing. Milana Šimka, která čítá sedm konferenčních příspěvků. Práce s názvem „A mathematical model of external electrostatic field of a special collector for electrospinning of nanofibers“ byla publikována v Journal of Electrostatics. K časopisecké publikaci je připravena další práce.

Navrhuji, aby práce Ing. Milana Šimka byla přijata k obhajobě.

Prof. RNDr. David Lukáš, CSc.





# Oponentské posudky disertační práce

## Posudek oponenta Prof. Mgr. Jiřího Erharta, Ph. D.

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

Část I pojednává ve dvou krátkých kapitolách o principech elektrostatického zvláknování a jeho parametrech (materiálových a procesních). První kapitola vysvětluje princip elektrostatického zvláknování, 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 použitím 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 zvláknování, 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 bičující 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 oblastí „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 nanovlákných 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 přepisů nebo chyb. Práce je sepsána pečlivě, kultivovaným jazykem a má vysokou typografickou úroveň.

### **Publikační činnost**

Autor zhodnotil potenciál disertační práce ve 2 původních článcích (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, algoritimizace 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-Suchbátov  
hejtmank@icpf.cas.cz

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

Modeling and simulation of whipping instability  
in the electrospinning process

Ing. Milan Šimko

Grafika systémem METAPOST.

Sazba systémem T<sub>E</sub>X (formát C<sub>S</sub>plain).

Typografie a počítačová sazba z písma Computer Modern provedena autorem.

Tisk a vazba Vysokoškolský podnik Liberec, spol. s r. o.

Studentská 1402/2, 461 17 Liberec

Všechna práva autora vyhrazena.