

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
FAKULTA TEXTILNÍ



Milan Šimko

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

AUTOREFERÁT DISERTAČNÍ PRÁCE

Název disertační práce: **Modelování a simulace bičující nestability
při elektrostatickém zvlákňování**

Autor: **Milan Šimko**

Obor doktorského studia: textilní materiálové inženýrství

Forma studia: kombinovaná

Školící pracoviště:

Školitel: prof. RNDr. David Lukáš, CSc.

Školitel specialista:

Liberec 2012

1 Předmět a cíl práce

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 nanovláknna vytvářena prostřednictvím elektricky nabitých trysky polymerního roztoku nebo polymerní taveniny [8]. Tento proces si během posledních několika let získal velkou pozornost zejména jako levná a jednoduchá metoda pro laboratorní i průmyslovou výrobu polymerních nanovláken [14]. Polymerní nanovláknna 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 [10]. Z těchto důvodů je pro nás důležité, porozumět fyzikálním principům procesu elektrostatického zvlákňování a snažit se je popsat prostřednictvím matematického aparátu.

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

2 Přehled současného stavu problematiky

Problematika bičující nestability, ale i celého procesu elektrostatického zvlákňování, je středem zájmu řady výzkumných pracovišť po celém světě. Nedávné experimenty ukázaly, že nezbytným mechanismem elektrostatického zvlákňování je rychlé bičování kapalinové trysky [3].

Feng se ve svém článku [1] odkazuje na práci autorů *Hohmana a kol.* [3], 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 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 newtonovskou (zdánlivou) viskozitu a zkoumal její efekty. Výsledky ukazují na dva odlišné režimy dlužení: (1) „mírné dlužení“ a (2) „silné dlužení“. Feng na závěr použil empirický vztah pro simulování deformačního zpevnění typických polymerních kapalin, které má za následek výrobu silnějších vláken.

Hohman a kol. 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 [3] vyvinuli asymptotickou aproximaci rovnic elektrohydrodynamiky, proto aby mohli provést kvalitativní srovnání s experimenty. Rozpoznali tři různé typy nestabilit: (1) klasickou osově souměrnou Rayleighovu nestabilitu, (2) osově souměrnou vyvolanou vnějším elektrostatickým polem a (3) ohybovou (bičující) nestabilitu. S rostoucí intenzitou elektrostatického pole zesilují elektrické nestability, zatímco Rayleighova nestabilita je potlačena. Jaká nestabilita bude dominovat silně závisí na plošné hustotě náboje a poloměru křivosti zelektrizované kapalinové trysky. Ve svém druhém článku [4] používají *Hohman a kol.* již odvozenou teorii stability a na jejím základě vypracovali 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 nabitých kapalinových 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, Blonski a Barral ve své studii [5] 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 trysky 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 sebou samou a s elektrodami. Tím je

zaručeno splnění pevné okrajové podmínky pro konstantní elektrostatický potenciál, což umožňuje vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace.

Reneker a kol. ve svém článku [10] 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 [16] 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 [17] 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 matematický mo-

del je používán v textilním průmyslu k simulování pohybu vlákna ve vzduchovém tkacím stroji.

3 Použité metody

Matematický model elektricky nabitě kapalinové trysky předkládaný v této kapitole vychází z myšlenky Renekerova–Yarinova modelu (viz např. [9, 10, 11]) a modelu od Zenga–Yanga–Yua (viz např. [17]). Klíčovým atributem celého modelu je element ideální přímočaré zelektrizované trysky.

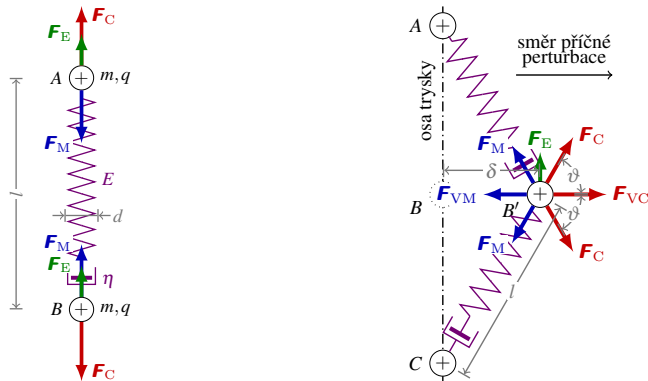
3.1 Model přímočaré elektricky nabitě trysky

Element ideální přímočaré zelektrizované trysky, tzv. „viskoelastická činka“, se sestává ze dvou nabitých hmotných bodů A a B , které jsou vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 3.1(a)]. Zvolené reologické prvky a jejich spojení odpovídá Maxwellovu modelu, který byl použit k modelování viskoelastického chování zvláknovaného polymerního roztoku.

3.2 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 odpuzujícími silami, tj. bez vnějšího elektrostatického pole. Podle Earnshawovy věty (viz např. [12, str. 107]) nemůže být taková soustava ve stabilní rovnováze. Pro ilustraci mechanismu bičující nestability, který je relevantní v souvislosti s elektrostatickým zvláknováním, jsou uvažovány tři hmotné body A , B a C , každý s nábojem q a původně umístěné na přímce. Jestliže dojde v důsledku příčné perturbace k vychýlení nabitěho hmotného bodu B o vzdálenost δ do místa B' , výslednice elektrostatických odpuzujících sil \mathbf{F}_{VC} má tendenci k dalšímu vzdalování tohoto bodu od své původní polohy. Růst malých ohybových perturbací je charakterizován výchylkou δ . Podle autorů článků [10, 11] je tento mechanismus zodpovědný za bičující nestabilitu zelektrizované kapalinové trysky při elektrostatickém zvláknování.

Pokud jsou nabitě hmotné body A , B a C vzájemně propojeny reologickými prvky [viz obr. 3.1(b)], výslednice viskoelastických sil \mathbf{F}_{VM} má tendenci vyrovnávat nestabi-



(a) silový rozbor elementu ideální přímočaré zelektrizované trysky

(b) silový rozbor vysvětlující pravděpodobný mechanismus vzniku bičující nestability elektricky nabitě trysky

Obr. 3.1: Silové rozboru elektricky nabitě trysky. δ —výchylka perturbace, η —dynamická viskozita, ϑ —úhel, d —okamžitý průměr; l —okamžitá délka, m —hmotnost, q —náboj, E —Youngův modul pružnosti, F_C —elektrostatická odpuzující síla, F_E —síla vnějšího elektrostatického pole, F_M —viskoelastická síla, F_{VC} —výslednice elektrostatických sil, F_{VM} —výslednice viskoelastických sil. Tíhovou sílu je možné v silových rozborech zanedbat.

bilitu způsobenou elektrostatickými odpuzujícími silami. Pro velmi tenké kapalinové trysky je možné, v porovnání se stabilizujícím efektem viskoelastických sil, zanedbat vliv posouvající síly vztahující se k ohybové tuhosti EJ , kde $J = (\pi d^4)/64$ je moment setrvačnosti kruhového průřezu. Jestliže jsou elektrostatické odpuzující síly větší než viskoelastický odpor, $F_{VC} > F_{VM}$, růst bičující nestability je nyní zbrzděn právě viskoelastickým odporem [11] zvlákněvaného polymerního roztoku.

Proti bičující nestabilitě působí také povrchové napětí, neboť ohýbání kapalinové trysky vede ke zvětšování jejího povrchu [15]. Jinými slovy povrchové napětí omezuje vývoj příliš velkých křivostí způsobených perturbací. Všechny tyto faktory jsou uvažovány v zobecněném modelu elektricky nabitě trysky.

3.3 Zobecněný model elektricky nabitě trysky

Stěžejní myšlenkou zobecněného modelu je náhrada spojité elektricky nabitě kapalinové trysky za soustavu sériově spojených elementů přímočaré zelektrizované trysky (viz obr. 3.2). Prostřednictvím tohoto „řetězce viskoelastických čínek“ je modelováno vznikající polymerní nanovláknko.

3.4 Pohybové rovnice

Podle druhého Newtonova pohybového zákona je časová změna hybnosti $d\mathbf{p}_i/dt$ nabitého hmotného bodu rovna výslednici vnějších sil. Na základě rozboru sil, které působí na i -tý hmotný bod s nábojem (viz obr. 3.2) lze sestavit pohybovou rovnici ve tvaru

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} - \left| \frac{dm_i}{dt} \right| \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_{Ei} + \mathbf{F}_{Ci} + \mathbf{F}_{Mi} + \mathbf{F}_{Di} + \mathbf{F}_{Si}, \quad (3.1)$$

kde m je okamžitá hmotnost, t je čas, \mathbf{v} je okamžitá rychlost, \mathbf{F}_E je síla vnějšího elektrostatického pole, \mathbf{F}_C je elektrostatická odpuzující síla, \mathbf{F}_M je viskoelastická síla, \mathbf{F}_D je odporová síla vzduchu a \mathbf{F}_S je síla povrchového napětí. Jednotlivé působící síly jsou definovány následujícími vztahy:

- síla vnějšího elektrostatického pole

$$\mathbf{F}_{Ei} = q_i \mathbf{E}; \quad (3.2a)$$

- elektrostatická odpuzující síla

$$\mathbf{F}_{Ci} = \frac{q_i}{4 \pi \epsilon_0 \epsilon_r} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}; \quad (3.2b)$$

- viskoelastická síla

$$\mathbf{F}_{Mi} = \frac{\pi}{4} \left(d_{i-1,i}^2 \sigma_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + d_{i,i+1}^2 \sigma_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right); \quad (3.2c)$$

- odporová síla

$$\mathbf{F}_{Di} = -6 \eta_a \pi (d_{i-1,i} \mathbf{v}_{ti-1,i}^i + d_{i,i+1} \mathbf{v}_{ti,i+1}^i) - 6 \eta_a (l_{i-1,i} \mathbf{v}_{ni-1,i}^i + l_{i,i+1} \mathbf{v}_{ni,i+1}^i); \quad (3.2d)$$

- síla povrchového napětí

$$\mathbf{F}_{Si} = \gamma \pi \left(d_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} + d_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right). \quad (3.2e)$$

Okamžité průměry přímočaré zelektrizované trysky jsou určeny z rovnosti objemů:

$$d_{i-1,i} = \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i-1,i}}{l_{i-1,i}}}, \quad \text{resp.} \quad d_{i,i+1} = \sqrt{d_0^2 l_0 \frac{\Lambda_{i,i+1}}{l_{i,i+1}}}, \quad (3.3)$$

kde q je okamžitý náboj, \mathbf{E} je intenzita vnějšího elektrostatického pole, ϵ_0 je permittivita vakua, ϵ_r je relativní permittivita prostředí, \mathbf{r} je polohový vektor, d je okamžitý průměr, σ je normálové napětí, η_a je dynamická viskozita vzduchu, \mathbf{v}_t , \mathbf{v}_n je okamžitá

rychlost v osovém, resp. normálovém směru, l je okamžitá délka, γ je povrchové napětí, d_0, l_0 jsou počáteční rozměry trysky a Λ je koeficient úbytku objemu.

Pohybová rovnice (3.1) je obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu, lze ji však přepsat na dvě diferenciální rovnice prvního řádu. Po úpravě se dostane pohybová rovnice i -tého nabitého hmotného bodu ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad (3.4)$$

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \left| \frac{dm_i}{dt} \right| + \mathbf{F}_{Ei} + \mathbf{F}_{Ci} + \mathbf{F}_{Mi} + \mathbf{F}_{Di} + \mathbf{F}_{Si}. \quad (3.5)$$

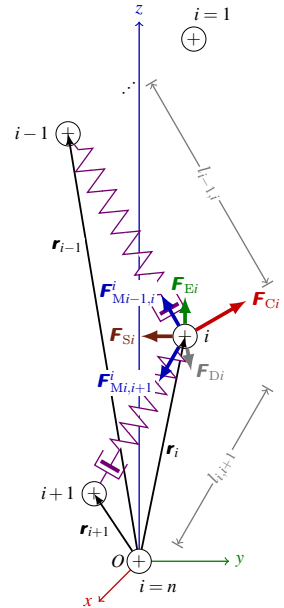
Zvlákněvaný polymerní roztok se chová jako viskoelastická (maxwellovská) kapalina, proto byl pro modelování odezvy materiálu na vnější zatížení použit Maxwellův reologický model (viz např. [6]). Tento reologický model popisuje lineární viskoelasticitu a je reprezentován sériovým spojením lineární pružiny, tzv. Hookeova prvku, a lineárního viskózního tlumiče, tzv. Newtonova prvku. Konstitutivní rovnice reologického modelu je

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}}{dt} = \frac{\eta}{\tau} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{i+1})}{l_{i,i+1}^2} - \frac{\sigma_{i,i+1}}{\tau}. \quad (3.6)$$

Soustava obyčejných diferenciálních rovnic (3.6), (3.4) a (3.5) představuje Cauchyho úlohu s počátečními podmínkami

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{i,i+1} &= 0, \\ \mathbf{r}_{i+1} &= \{0; 0; r\}, \\ \mathbf{v}_{i+1} &= \{0; 0; 0\} \end{aligned} \right\} \text{pro } i = n - 1. \quad (3.7)$$

Přibližné řešení počáteční úlohy (3.6), (3.4), (3.5) a (3.7) je hledáno numericky metodou prediktor-korektor s adaptivní volbou časového kroku. Při konkrétním numerickém řešení je však často vhodné provést výpočet v bezrozměrném tvaru rovnic [13]. 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.



Obr. 3.2: Silový rozbor na i -tém nabitém hmotném bodě zobecněného modelu elektricky nabitě trysky. l —okamžitá délka, \mathbf{r} —polohový vektor, \mathbf{F}_C —elektrostatická odpuzující 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.

4 Přehled dosažených výsledků

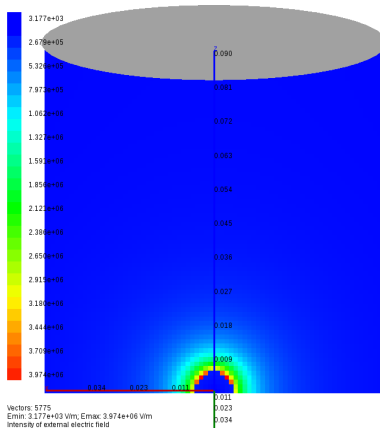
Dosaženými výsledky disertační práce jsou:

- matematický model elektricky nabitě kapalinové trysky;
- modely vnějších elektrostatických polí (diskový uzemněný kolektor a speciální drátový kolektor);
- vícevláknová počítačová aplikace umožňující simulovat proces elektrostatického zvláknování a vizualizovat vypočtenou trajektorii zelektrizované trysky nebo rozložení intenzity vnějšího elektrostatického pole.

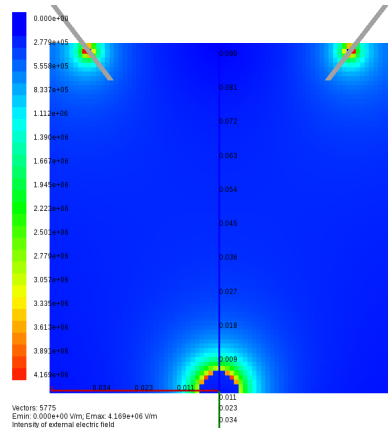
4.1 Vnější elektrostatické pole

Vnější elektrostatické pole hraje v procesu elektrostatického zvláknování důležitou roli. Je příčinou dloužení a urychlování elektricky nabitě kapalinové trysky [1, 2, 3], a také do určité vzdálenosti stabilizuje její přímý směr [2, 10].

Na obr. 4.1(a) a obr. 4.1(b) je znázorněno rozložení velikosti intenzity elektrostatického pole uzemněného diskového kolektoru a speciálního drátového kolektoru ve zvláknovacím prostoru.

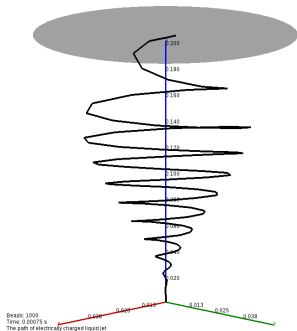


(a) diskový kolektor

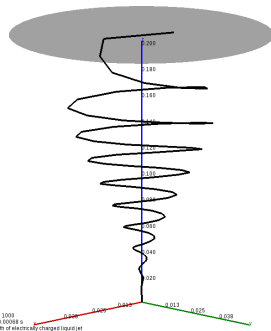


(b) drátový kolektor

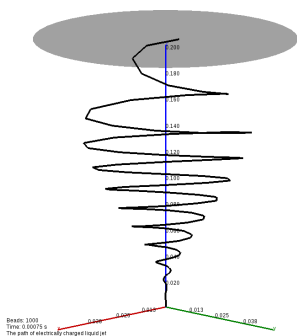
Obr. 4.1: Rozložení velikosti intenzity elektrostatického pole. Parametry simulace: potenciál kapiláry $\phi_1 = 20$ kV, potenciál uzemněného kolektoru $\phi_2 = 0$ V, vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 90$ mm, poloměr kapiláry $r = 5$ mm a průměr diskového kolektoru $D = 90$ mm, resp. drátového kolektoru $D = 2$ mm. Výsledky byly získány pomocí vyvinutého počítačového programu.



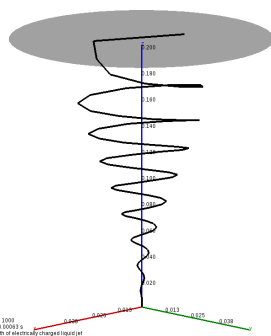
(a) $\gamma = 140 \text{ mN m}^{-1}$



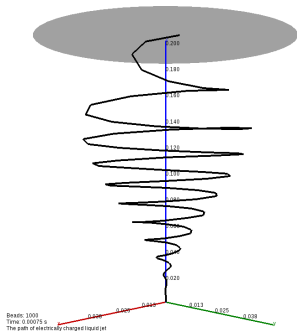
(b) $\eta = 500 \text{ Pa s}$



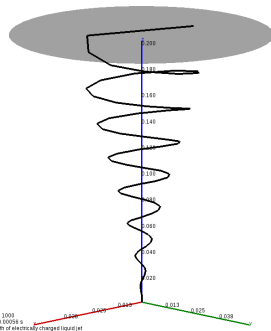
(c) $\gamma = 35 \text{ mN m}^{-1}$



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

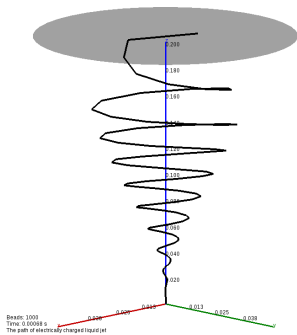


(e) $\gamma = 10 \text{ mN m}^{-1}$

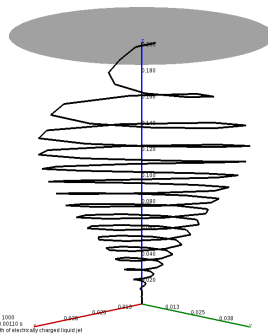


(f) $\eta = 100 \text{ Pa s}$

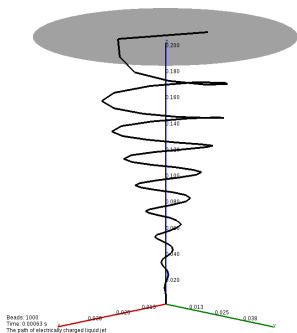
Obr. 4.2: Vliv povrchového napětí γ a dynamické viskozity η na trajektorii elektricky nabitě trysky. Konstantní parametry simulace pro 6% vodný roztok PEO: $\rho = 1\,000 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau = 10 \text{ ms}$, $\varphi_1 = 1 \text{ kV}$, $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, $I_0 = 2.93 \text{ }\mu\text{A}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $h = 200 \text{ mm}$, $D = 100 \text{ mm}$.



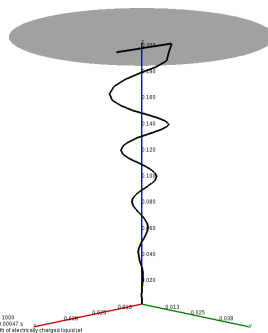
(a) $\tau = 20$ ms



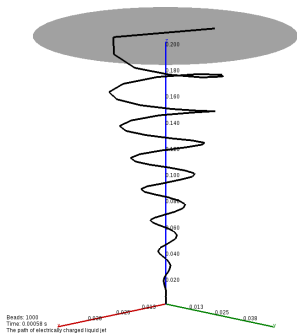
(b) $Q_V = 15.9$ ml hod⁻¹



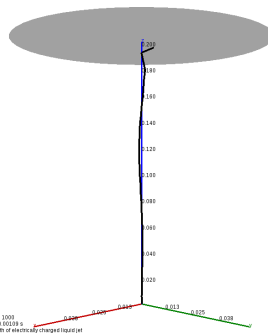
(c) $\tau = 40$ ms



(d) $Q_V = 5.3$ ml hod⁻¹

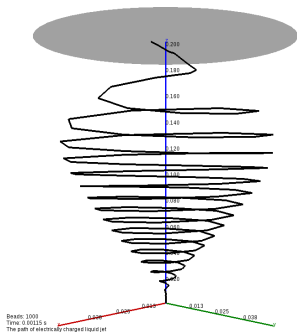


(e) $\tau = 80$ ms

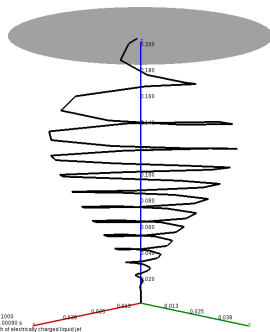


(f) $Q_V = 1$ ml hod⁻¹

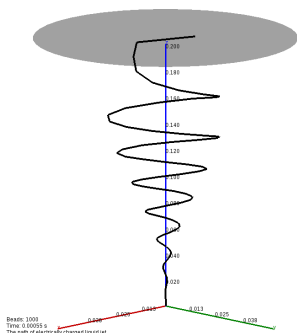
Obr. 4.3: Vliv relaxačního času $\tau = \eta/E$ a objemového průtoku Q_V roztoku na trajektorii elektricky nabitě trysky. Konstantní parametry simulace pro 6% vodný roztok PEO: $\gamma = 70$ mN m⁻¹, $\eta = 1\,000$ Pa s, $\rho = 1\,000$ kg m⁻³, $\phi_1 = 1$ kV, $\phi_2 = 0$ V, $I_0 = 2.93$ μ A, $h = 200$ mm, $D = 100$ mm.



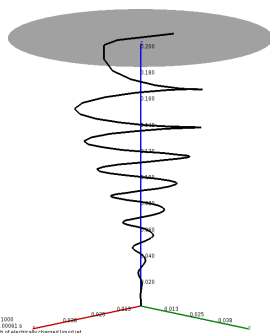
(a) $I_0 = 1.93 \mu\text{A}$



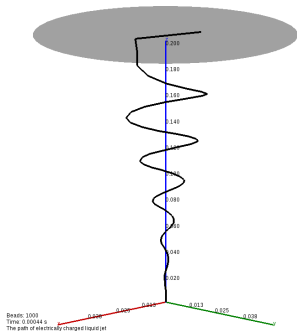
(b) $\phi_1 - \phi_2 = 500 \text{ V}$



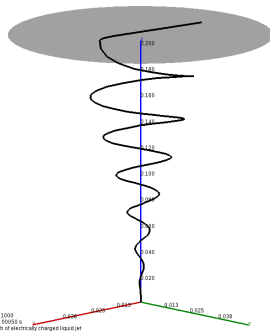
(c) $I_0 = 3.93 \mu\text{A}$



(d) $\phi_1 - \phi_2 = 2 \text{ kV}$



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



(f) $\phi_1 - \phi_2 = 4 \text{ kV}$

Obr. 4.4: Vliv elektrického proudu I_0 a rozdílu elektrických potenciálů $\phi_1 - \phi_2$ na trajektorii elektricky nabitě trysky. Konstantní parametry simulace pro 6% vodný roztok PEO: $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, $\eta = 1\,000 \text{ Pa s}$, $\rho = 1\,000 \text{ kg m}^{-3}$, $\tau = 10 \text{ ms}$, $\phi_2 = 0 \text{ V}$, $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, $h = 200 \text{ mm}$, $D = 100 \text{ mm}$.

4.2 Trajektorie elektricky nabité trysky

Trajektorie zelektrizované kapalinové trysky byla vypočtena pro parametry 6% vodného roztoku poly(ethylen oxidu): povrchové napětí $\gamma = 70 \text{ mN m}^{-1}$, dynamická viskozita $\eta = 1\,000 \text{ Pa s}$, měrná hmotnost $\rho = 1\,000 \text{ kg m}^{-3}$, relaxační čas $\tau = \eta/E = 10 \text{ ms}$. Procesní parametry byly: potenciál kapiláry $\varphi_1 = 1 \text{ kV}$, potenciál uzemněného kolektoru $\varphi_2 = 0 \text{ V}$, elektrický proud trysky $I_0 = 2.93 \mu\text{A}$, objemový průtok roztoku kapilárou $Q_V = 10.6 \text{ ml hod}^{-1}$, vzdálenost mezi kapilárou a uzemněným kolektorem $h = 200 \text{ mm}$ a průměr diskového kolektoru $D = 100 \text{ mm}$. Prostředí ve zvlákňovacím prostoru byl vzduch s dynamickou viskozitou $\eta_a = 18.6 \mu\text{Pa s}$ a měrnou hmotností $\rho_a = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$. Počáteční průměr trysky byl $d_0 = 300 \mu\text{m}$ a diskretizační délka elementu trysky byla $l_0 = 4 \mu\text{m}$.

Na obr. 4.2, obr. 4.3 a obr. 4.4 jsou znázorněny výsledky numerických simulací při různě modifikovaných hodnotách parametrů. Všechny simulace byly ukončeny v okamžiku zachycení prvního nabitého hmotného bodu na uzemněném kolektoru. Výsledky byly získány pomocí vyvinutého počítačového programu. Výpočetní čas se na standardním PC s procesorem Intel Pentium Dual-Core @2.40 GHz a OS GNU/Linux pohyboval v rozsahu cca 10–15 min.

5 Zhodnocení výsledků a nových poznatků

Shrnutím dosažených výsledků, získaných na základě numerických experimentů, lze dospět k závěru, že matematický model, resp. počítačový model je schopen predikovat vliv parametrů na proces elektrostatického zvlákňování. Výstupem práce je především počítačová aplikace pro efektivní simulaci procesu elektrostatického zvlákňování, která vědeckým pracovníkům umožní rychlejší vývoj 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, resp. počítačového modelu, které nejsou obsaženy v modelu od Renekera a Yarina. Mezi tyto nové vlastnosti patří nahrazení homogenního elektrostatického pole za modely elektrických polí pro diskový uzemněný kolektor a speciální drátový kolektor, které umožňují vyšetřovat skutečné elektrodové konfigurace. Pohybové rovnice byly odvozeny tak, aby umožňovaly zahrnout vliv úbytku hmotnosti a náboje v důsledku postupného odstraňování rozpouštědla. Vzhledem k velkému měrnému povrchu polymerních nanovláken byla přidána síla zahrnující vliv třecí

a tlakové složky odporového prostředí vzduchu. Počítačová aplikace také obsahuje výpočet kritické intenzity elektrostatického pole pro ověření, zda při zadaných parametrech nastane elektrostatické zvlákňování.

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

- provést analýzu stability soustavy nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic;
- nahradit element přímočaré zelektrizované trysky jednorozměrným kontinuem;
- navrhnout výpočet koeficientu úbytku objemu;
- zahrnout změnu dynamické viskozity v závislosti na odstraňování rozpouštědla ze zvlákňovaného polymerního roztoku;
- zahrnout elektrický vítr, který je podle práce [7] dalším důležitým jevem doprovázející elektrostatické zvlákňování;
- implementovat algoritmus pro náhodné generování perturbace;
- implementovat algoritmus rozdělující po určité délce element ideální přímočaré zelektrizované trysky na dvě části;
- zvážit přeformulování počáteční Cauchyho úlohy na optimalizační úlohu.

6 Práce autora se vztahem ke studované problematice

- [1] ŠIMKO, M. – CHVOJKA, J. – ERHART, J. – LUKAŠ, D. Computer simulation and experiment of electrospinning a special collector. (in progress).
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.

- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 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 978–80–7372–821–2.

7 Literatura

- [1] FENG, J. J. The stretching of an electrified non-Newtonian jet: A model for electrospinning. *Physics of fluids*. November 2002, vol. 14, num. 11, s. 3 912 – 3 926.
- [2] HAN, T. – YARIN, A. L. – RENEKER, D. H. Viscoelastic electrospun jets: Initial stresses and elongational rheometry. *Polymer*. March 2008, vol. 49, iss. 8, s. 1 651 – 1 658.
- [3] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. I. Stability theory. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2 201 – 2 220.
- [4] HOHMAN, M. M. et al. Electrospinning and electrically forced jets. II. Applications. *Physics of fluids*. August 2001, vol. 13, iss. 8, s. 2 221 – 2 236.

- [5] KOWALEWSKI, T. A. – BLONSKI, S. – BARRAL, S. Experiments and modelling of electrospinning process. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences*. August 2005, vol. 53, num. 4, s. 385 – 394.
- [6] MEISSNER, B. – ZILVAR, V. *Fyzika polymerů: Struktura a vlastnosti polymerních materiálů*. 1. vyd. Praha : SNTL, 1987. 308 s.
- [7] POKORNÝ, P. *Analýza procesu elektrostatického zvláknování 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.
- [8] 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.
- [9] RENEKER, D. H. – YARIN, A. L. Electrospinning jets and polymer nanofibers. *Progress In Polymer Science*. May 2008, vol. 49, iss. 10, s. 2 387 – 2 425.
- [10] RENEKER, D. H. et al. Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning. *Journal of Applied Physics*. May 2000, vol. 87, num. 9, s. 4 531 – 4 547.
- [11] RENEKER, D. H. et al. Electrospinning of nanofibers from polymer solutions and melts. *Advances in Applied Mechanics*. July 2007, vol. 41, s. 43 – 195, 345 – 346.
- [12] SEDLÁK, B. – ŠTOLL, I. *Elektřina a magnetismus*. 2. vyd. Praha : ACADEMIA, 2002. 632 s. ISBN 80-200-1004-1.
- [13] 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.
- [14] THERON, S. A. et al. Multiple jets in electrospinning: experiment and modeling. *Progress In Polymer Science*. April 2005, vol. 46, iss. 9, s. 2 889 – 2 899.
- [15] YARIN, A. L. *Free liquid jets and films: hydrodynamics and rheology*. 1st edition. New York : Longman Scientific & Technical, 1993. 446 pp. ISBN 978-0582102958.

- [16] YARIN, A. L. – KOOMBHONGSE, S. – RENEKER, D. H. Bending instability in electrospinning of nanofibers. *Journal of Applied Physics*. March 2001, vol. 89, num. 5, s. 3 018 – 3 026.
- [17] 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.

8 Summary

A mathematical model of the electrospinning process was introduced in this summary booklet of the dissertation thesis. This model describes a whipping instability of the electrically charged liquid jet, which is an important mechanism of the creation and the elongation of nanofibers during electrospinning. An element of the ideal rectilinear electrically charged jet, the so-called “viscoelastic dumbbell”, is a key attribute of the mathematical model. Governing equations describing dynamics this element were formulated based on its force analysis and they are solved numerically by using the predictor–corrector method (P: the forward Euler method; C: the Adams-Moulton second order method) with an adaptive step-size. A self-developed multi-threaded computer program is a part of the dissertation thesis. This program is written in C++ language and it is an algorithmization of a numerical model of the electrospinning process. The application allows to simulate the electrospinning process and to visualize a distribution of the intensity of an external electrostatic field or a path of the jet. Results of the path of the jet obtained by numerical simulations showed, that the mathematical model or the numerical model is able to predict an influence of parameters on the electrospinning process.

Poznámky:

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

Ing. Milan Šimko

Sazba systémem L^AT_EX.

Všechna práva autora vyhrazena.

Vydala Textilní fakulta Technické univerzity v Liberci
jako interní publikaci pod pořadovým číslem DFT/5/2012
v počtu 20 výtisků.