



Pedagogická
fakulta
Faculty
of Education

Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
University of South Bohemia
in České Budějovice

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

Pedagogická fakulta

Katedra aplikované fyziky a techniky

Bakalářská práce

Počítačové modelování penetrace částic do struktury textilního materiálu

Vypracovala: Tereza Benešová

Vedoucí práce: doc. RNDr. Petr Bartoš, Ph.D.

České Budějovice 2014

Prohlášení

Prohlašuji, že svoji bakalářskou práci jsem vypracovala samostatně, pouze s použitím pramenů a literatury uvedených v seznamu citované literatury.

Prohlašuji, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb. v platném znění souhlasím se zveřejněním své bakalářské práce, a to v nezkrácené podobě elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích na jejích internetových stránkách, a to se zachováním mého autorského práva k odevzdanému textu této kvalifikační práce. Souhlasím dále s tím, aby toutéž elektronickou cestou byly v souladu s uvedeným ustanovením zákona č. 111/1998 Sb. zveřejněny posudky školitele a oponentů práce i záznam o průběhu a výsledku obhajoby kvalifikační práce. Rovněž souhlasím s porovnáním textu mé kvalifikační práce s databází kvalifikačních prací Theses.cz, provozovanou Národním registrem vysokoškolských kvalifikačních prací a systémem na odhalování plagiátů.

V Českých Budějovicích dne

Tereza Benešová

Abstrakt

Tato bakalářská práce se zabývá problematikou počítačového modelování fyzikálního jevu penetrace částic do struktury textilie v programu MATLAB. Teoretická část se zabývá popsáním a charakteristikou plazmatu a jeho následné využití při modifikaci povrchu materiálů, v našem případě se jedná o textilií. Dále je v teoretické části zmíněna oblast počítačové modelace v různých programech a aplikace modelačních metod v oboru fyziky. Tyto metody jsou ověřeny v praktické části, která je zaměřena na samotné modelování programem MATLAB a zpracování výsledků v jednotlivých grafech a modelech. Zdrojový kód je uveden v příloze.

Klíčová slova

MATLAB, počítačové modelování, plazma, textilie, penetrace částic, modifikace

Abstract

This diploma thesis deals with computer modeling of physical phenomena of particle penetration into the structure of the fabric in MATLAB. The theoretical part results describing a characteristic of plasma and its subsequent use for surface modification of materials, in our case it is the fabric. The theoretical part is about computer modeling in various programs and applications of the modeling methods in the field of physics. These methods are validated in the practical part, which is focused on modeling and MATLAB processing results in various graphs and models. Source code is provided in the Annex.

Key words

MATLAB, computer modeling, plasma, textile, particle penetration, modification

Poděkování

Tímto děkuji panu doc. RNDr. Petru Bartošovi, Ph.D., za odborné vedení při psaní této bakalářské práce a za poskytování cenných rad a důležitých informací, bez kterých by tato práce nevznikla.

Děkuji také panu Mgr. Janu Ptáčnickovi za významnou pomoc v oblasti počítačové modelace a využití programu MATLAB, zpracování dat a poskytnutí výsledků pro mou práci.

1	Obsah	
2	Úvod	6
3	Plazma a jeho využití k úpravě povrchových vlastností materiálů	7
3.1	Plazma jako čtvrté skupenství hmoty	7
3.1.1	Interakce plazmatu s materiálem	11
3.2	Principy úpravy povrchových vlastností materiálů pomocí plazmatu	13
3.3	Vybrané typy povrchových úprav za využití plazmatu	15
4	Penetrace částic do porézních materiálů	18
4.1	Rešerše literatury, vybrané aplikace	18
4.2	Metody počítačového modelování penetrace částic do porézní struktury materiálu	21
4.3	Počítačové modelování procesu penetrace částic do textilie a využití metody Monte Carlo	23
4.4	Programy pro počítačové modelování	27
4.4.1	MATLAB	27
4.4.2	Simulink	30
4.4.3	COMSOL Multiphysics	30
5	Návrh modelu pro studium penetrace reaktivních částic do struktury textilie	33
5.1	Program pro generování struktury vláken	33
5.2	Hlavní program	33
5.3	Funkce pro odraz sledované částice od povrchu vlákna	36
6	Ukázkové výsledky	38
6.1	Výstup z modelu	38
7	Závěr	48
8	Použitá literatura a zdroje	49

2 Úvod

Plazma je čtvrté skupenství hmoty, a přestože jsme o něm do nedávné doby mnoho nevěděli, setkáváme se s ním dnes a denně. Plazma překvapivě tvoří téměř 99 % celého vesmíru. Na Zemi se sice v tak obrovské míře nevyskytuje, přesto ho využíváme stále více a více, například jako zdroj světla, k úpravě materiálů, jako dezinfekci atp. a právě jedním tímto procesem využívajícím plazmatu a jeho následnou modelací se zabývá tato práce.

Proces penetrace částic do textilie za přítomnosti plazmatu je velmi důležitým postupem při modifikaci povrchu materiálů či případné úpravě struktury. Tato technika má v současnosti obrovské využití v mnoha oblastech. Takto plazmaticky ošetřené materiály získávají celou řadu chemických vlastností, a to při využití velmi levné a časově nenáročných metody.

K závěrečné modelaci v této práci byl využit program MATLAB (matrix laboratory), který má celou řadu technických využití nejen na poli fyziky, ale i chemie, matematiky, biologie a dalších odvětví. Pro jednotlivé procesy poskytuje velké množství doplňujících knihoven.

Samotnou modelaci procesu penetrace je možné vytvořit i za pomoci jiných programů, jako je např. COMSOL Multiphysics.

3 Plazma a jeho využití k úpravě povrchových vlastností materiálů

3.1 Plazma jako čtvrté skupenství hmoty

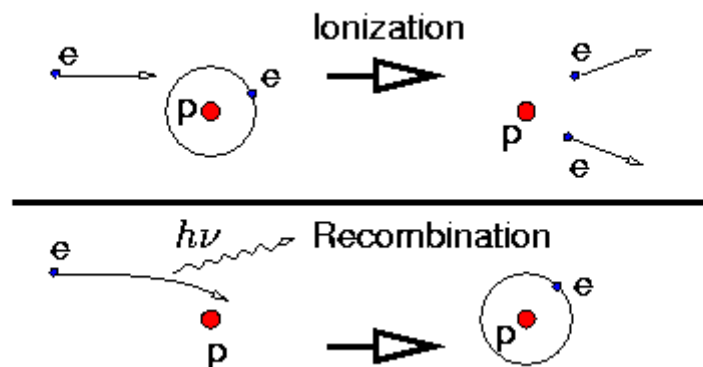
Plazma se řadí mezi čtyři skupenství hmoty a má mezi všemi látkami největší zastoupení, přestože na Zemi se vyskytuje pouze zřídka. Tvoří téměř 99 % hmoty ve vesmíru, jako jsou např. mlhoviny, hvězdy, sluneční vítr, polární záře, blesky a další. Je to v podstatě ionizovaný plyn, ve kterém se částice pohybují tak rychle, že jsou schopny se navzájem rozbíjet.

Ionizace je proces vzniku volných elektronů a iontů v plynu způsobem, při kterém se některé molekuly rozštěpí na kladný iont a elektron působením ionizátoru nebo vzájemnými srážkami. Opačný děj se nazývá rekombinace.

Iont neboli nabitá částice může vzniknout dvěma způsoby:

- odevzdáním elektronu – vznikne kladně nabitý iont, tedy kation
- přijetím elektronu – v tomto případě vznikne záporně nabitý iont, anion

Při rekombinaci iontů, tedy opačném ději k ionizaci, se opačně nabité ionty, popřípadě kladně nabité ionty a elektrony, spojují v neutrální molekulu iontu.[1]



Obrázek 1: Ionizace a rekombinace[2]

S ionizací souvisí pojem excitace. Nabitá částice ztrácí svou energii při průchodu látkou v důsledku Coulombovské interakce s elektrony látky. Je-li energie předaná nabitou částicí látce relativně malá, dojde k přeskokům elektronu z nižší energetické hladiny na vyšší energetickou hladinu, a tím dochází k excitaci atomu.[3]

Plazma je plyn elektricky vodivý, neboť obsahuje elektricky nabitě částice, které mohou přenášet elektrický proud. Pojem plazma zavedl v roce 1927 americký chemik a fyzik Irving Langmuir, který se skutečně nechal inspirovat krevní plazmou přenášející červené a bílé krvinky, proteiny, hormony a mikroby stejně jako plazmatické skupenství přenáší elektrony, ionty, radikály, excitované částice a neutrální částice.

Plazma dělíme podle několika kritérií, čímž snáze odhadujeme jeho konkrétní vlastnosti.

- **Plazma vysokoteplotní – plazma nízkoteplotní**

Velmi důležité je rozdělení plazmatu podle teploty. Jedná se o vysokoteplotní (plně ionizované) plazma, jehož teplota se pohybuje až kolem 10^6 K, a nízkoteplotní plazma, pohybující se v rozmezí 5 000 až 15 000 K. Střední energie nabitých částic se pohybuje od 0,5–10 eV, přičemž vysokoteplotní plazma může dosáhnout hodnot přes 100 eV.

V elektrotechnice se vždy využívaly pevné látky a kovy. Plazma jako vodič má nesporné výhody oproti kovům při využití v průmyslu, jelikož je podstatně lehčí. v plazmě se elektrony odtrhávají od atomů při srážce dostatečně rychlých částic, působením světla nebo elektrickým nábojem.

V plazmatu se elektrony pohybují neuspořádaně (jako v plynech). Důležitou vlastností plazmatu však je, že jeho zmagnetizováním lze přinutit částice, aby se pohybovaly uspořádaně. Ve zmagnetizovaném plazmatu se elektrony pohybují jako uspořádaný kolektiv. Tudíž může být v plazmě pohyb částic omezený magnetickým polem, které na plazma působí díky elektrické vodivosti.

Další důležitou vlastností plazmatu je tzv. kvazineutralita, která znamená, že ve velmi malém objemu (mikroskopickém objemu) je počet kladně nabitých a záporně nabitých částic vyrovnaný.

Důležitou veličinou pro posuzování vlastností plazmat je Debyeova vzdálenost λ_D . Tento jev je pozorován v přítomnosti pevné látky v plazmatu. Pevná látka nese náboj, ale ten je díky kvazineutralitě plazmatu odstíněn. Ve vzdálenosti označované jako Debyeho stínící vzdálenost je již plazma opět kvazineutrální. Důležitým parametrem je množství částic v Debyeho sféře, ve které tento proces probíhá, a tento počet je definován vztahem $N_D = \frac{4}{3} \cdot \pi n \lambda_D^3$.

- **Plazma kvantové – plazma klasické**

U tohoto rozdělení záleží na počtu elektronů na jeden kvantový stav. Pokud je zanedbatelný, vykazuje elektronový plyn klasické chování, popsán Boltzmannovým rozdělením. v opačném případě užíváme Fermiho-Diracovo rozdělení a plyn se chová kvantově.

- **Plazma s difundujícím magnetickým polem – plazma se zamrzlým magnetickým polem**

Plazma je vysoce vodivá látka. Pokud je magnetické pole v plazmatu zamrzlé, sleduje veškerý pohyb částic. Když je pole částečně zamrzlé, jeho vodivost je konečná a magnetické pole částečně difunduje (rozptyluje částice do okolí, dokud se koncentrace nevyrovná).

- **Plazma rovnovážné – plazma nerovnovážné**

Teplota iontů a elektronů se může lišit v důsledku chaotického pohybu částic. Nejprve se díky srážkám zahřejí elektrony, které teplo předají iontům. Pokud je tedy teplota všech částic stejná, jedná se o plazma rovnovážné, v opačném případě o plazma nerovnovážné.

- **Plazma srážkové – plazma bezsrážkové**

V plazmatu probíhají srážky, charakterizované Coulombovou interakcí (přitahování a odpuzování). Chceme-li uvažovat o plazmatu bezsrážkovém, musí být střední volná dráha (průměrná vzdálenost uražená mezi dvěma srážkami) větší než charakteristické rozměry plazmatu.

- **Plazma ideální – plazma neideální**

Je-li $N_D \gg 1$, to znamená, jestliže je počet částic v Debyeho sféře mnohonásobně větší než 1, převládají kolektivní procesy nad srážkami, a jedná se tedy o plazma ideální. Takové plazma je vysoce vodivé a horké.

Při zkoumání plazmatu se setkáváme i s dalším tříděním podle určitých vlastností, jako například plazma relativistické a nerelativistické a podobně, ale pro technické aplikace postačí předchozí dělení.

První zmínky o plazmatu se datují už rokem 1745, kdy německý fyzik E. G. Von Kleist vynalezl tzv. leydenskou láhev, se kterou experimentoval Pieter van

Musschenbroek a později i Benjamin Franklin. Leydenská láhev byla v podstatě skleněná nádoba, potažená zevnitř i zvenčí kovovou folií, aby bylo možno uchovat dostatečné množství elektrického náboje pro dosažení vysokého elektrického potenciálu.



Obrázek 2: Leydenská láhev[4]

Přelom ve zkoumání plazmatu nastal až v první polovině dvacátého století, a to konkrétně v roce 1927, kdy Irving Langmuir se svým spolupracovníkem Lewi Tonksem zkoumal ionizovaný plyn a pozoroval změny elektronové hustoty v trubici s plazmovým výbojem, které jsou označovány za plazmové vlny.

Díky těmto přelomovým objevům vědci zjistili přítomnost zemské ionosféry v horní části atmosféry, kterou tvoří vrstva nabitých částic a která odráží radiové vlny.

Nedlouho na to došlo k zásadnímu objevu, že převážná část vesmíru je tvořena plazmatem, a proto bylo zapotřebí toto skupenství důkladněji prozkoumat. Hannes Alfvén v roce 1940 objasnil teorii magnetohydrodynamiky, která o plazmatu uvažuje jako o vodivé tekutině, a byly objasněny principy slunečního větru, slunečních erupcí a skvrn, původ hvězd, struktura mlhovin a další. [5]

V dnešní době se plazma hojně využívá v průmyslu, v zářivkách, u neonového osvětlení, v elektrotechnice do plazmových obrazovek, také v dermatologii pro regeneraci kůže nebo k dezinfekci vzduchu a v mnoha dalších odvětvích, jako jsou lasery nebo úpravy povrchů. Injektování iontů do daného materiálu se hojně využívá v polovodičovém průmyslu, takto upravené materiály se pak využívají ve zdravotnictví, strojírenství elektronice atd. Dále se plazma využívá v zobrazovacích systémech, jako

jsou televizory, které oproti běžným TV mají nespornou výhodu v tom, že nereagují na vnější magnetická pole.

Využití nalezne plazma i v lékařství, ať už se jedná o dezinfekci lékařských nástrojů, nanášení tenkých vrstev na povrch materiálu se specifickými, např. inhibičními, vlastnostmi. Také se využívá pro životní prostředí k plazmatickému zpracování odpadu.[6]

3.1.1 Interakce plazmatu s materiálem

Z hlediska plazmového inženýrství je velmi důležitá schopnost plazmatu reagovat s materiálem. v plazmatu se často vyskytují částice, které se nedají vytvořit běžnými chemickými reakcemi. Tyto částice reagují jak mezi sebou, tak s materiálem.

Existuje mnoho druhů interakce plazmatu s materiálem. Mezi nejdůležitější patří adsorpce. Ta má dva druhy:

1. Fyzikální adsorpce – adsorbované molekuly drží na povrchu mezimolekulové (van der Waalsovy) síly, adsorpční energie je menší než 0,5 eV, nastává nejčastěji při interakci plynu a materiálu;
2. Chemická adsorpce – adsorbované molekuly drží chemické vazby, je silnější než fyzikální adsorpce, její energie je řádově několik elektronvoltů.

adsorpce	fyzikální	chemická
specifická	ne	ano
adsorpční entalpie	$\sim 20 \text{ kJ mol}^{-1}$	$\sim 200 \text{ kJ mol}^{-1}$
molekuly ztrácí identitu	ne	ano
desorpce je	proveditelná	obtížná neproveditelná
adsorpce nastává	i do více vrstev	do jediné vrstvy

Obrázek 3: Rozdíly mezi adsorpce[7]

Samotný proces interakce probíhá několika způsoby. K nejdůležitějším patří depozice tenkých vrstev nebo také *nanášení* tenkých vrstev materiálu. Je to proces nanesení odolnějšího materiálu ve formě tenké vrstvy na povrch upravovaného materiálu. K tomu dochází plazmatickým napařováním za použití magnetronu nebo plazmových trysek.

Další metodou je plazmové leptání, proces, který probíhá jak ve vakuu, tak v atmosférických podmínkách při velmi nízkých teplotách. Reaktivní atomy nebo ionty

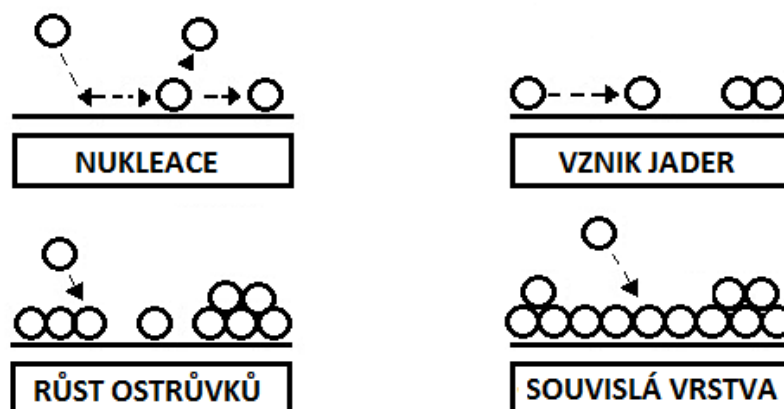
(jako kyslík, chlor, fluor) jsou tvořeny v plynovém výboji. Ionty jsou urychlovány na rozhraní mezi plazmou a podkladem s vysokou směrovostí. Využívá se převážně v mikroelektronice.

Velmi rozšířenou metodou je modifikace povrchových vlastností materiálu, kde se pomocí plazmatu na povrchu materiálu vytváří chemické funkční skupiny, díky nimž se změní vlastnosti povrchu. Můžeme takto upravovat například smáčivost materiálu.

3.2 Principy úpravy povrchových vlastností materiálů pomocí plazmatu

Úprava povrchových vlastností nejrůznějších materiálů, pomocí plazmatu se stala velice populární, neboť je levná a efektivní. Požadavky na vlastnosti jednotlivých materiálů jsou v moderní době čím dál větší, přičemž v mnoha případech postačí upravit pouze vlastnosti povrchu. Příkladem může být například úprava povrchů kovů tak, aby povrch materiálu odpuzoval vodu, a tím účinně zabránil korozi. Další takové úpravy se provádějí za účelem ochrany povrchu, dekorování nebo kvůli změně chemických a fyzikálních vlastností povrchu materiálu atp.

Na povrch se nanese tenká vrstva předem definovaných vlastností. Některé materiály lze modifikovat podle potřeby působením plazmatického paprsku, který i přes šetrnost úpravy docílí výrazné změny povrchu. Využívá se k pokovování, v biomedicině (implantáty, katétry), ke změně adheze, elektronických vlastností a také, potiskovatelnosti, barvitelnosti, omyvatelnosti, přilnavosti, sterility, odolnosti proti korozi, tepelné odolnosti atp. Vrstva se při nanášení vytváří z atomů dopadajících na povrch materiálu, kde se atom zachytí a poté se buď naváže trvalou vazbou. Tím se začne vytvářet vrstva, která se postupně rozšiřuje.



Obrázek 4: Tvorba povlaku [překreslený z 8]

Tyto procesy mohou být jak chemické, tak fyzikální. K modifikaci povrchu dochází obvykle pomocí plazmatu o vysoké hustotě, ionty plazmatu se vpravují do povrchu.

1. Studené plazma

Studené plazma má nízkou elektronovou hustotu, plastické srážky způsobují chemické změny plazmatu, menší množství elastických srážek lehce zahřívá těžké částice.[9]

Za výchozí rovnice budeme volit rovnici kontinuity pro elektrony, pohybovou rovnici pro elektrony, a Maxwellovy rovnice pro časový vývoj elektrického a magnetického pole. Maxwellův posuvný proud nelze vzhledem k frekvenci dějů zanedbat. Všude uvažujeme limitu $m_i \rightarrow \infty$; $p \rightarrow 0$, tj. pro šíření elektromagnetických vln plazmatem zanedbáváme pohyb iontů a tepelné děje v plazmatu.[10]

Studené plazma bylo objeveno poměrně nedávno, a to v devadesátých letech dvacátého století. Vědci zjistili, že studené plazma ničí bakterie, což se stalo přelomovým objevem na poli biomedicíny, kde se do té doby ošetřovaly a sterilizovaly lékařské pomůcky chemickými a mnohdy nebezpečnými látkami.

Tento typ plazmatu lze také využívat k leptání povrchu, nanášení vrstev plazmových polymerů atp. Užívá se při práci s materiály, u kterých hrozí poškození v důsledku působení vysoké teploty, protože při procesu užití studeného plazmatu se materiál výrazně neohřeje.

Při ošetřování studeným plazmatem je nutná vakuová komora, generátor, zdroj plynu, případně přízpůsobovací člen pro indukčně nebo kapacitně vázané plazma. Je nasnadě i výběr vhodného plynu nebo monomeru (výchozí látka při výrobě polymerů, např. ethen, propen atp.), čímž zajistíme širší možnosti při modifikaci povrchu materiálu.

2. Horké plazma

Horké plazma dosahuje velmi vysokých teplot (až kolem 10 000 °C). Jsou to jádra hvězd, sluneční koróna, blesky apod.

Při modifikaci povrchů je v horkém plazmatu roztaven anorganický prášek a poté je rozprašován na povrch materiálu. Je využíván k vytvoření tvrdých vrstev a ošetření především kovových materiálů a keramiky.



Obrázek 5: Příklad pokovování tkaniny[8]

3.3 Vybrané typy povrchových úprav za využití plazmatu

Při modifikaci povrchů probíhá interakce s reaktivními částicemi, jejichž energie nemusí být vysoká. Využívají se dva druhy modifikací. Úprava implementací a bez implementace

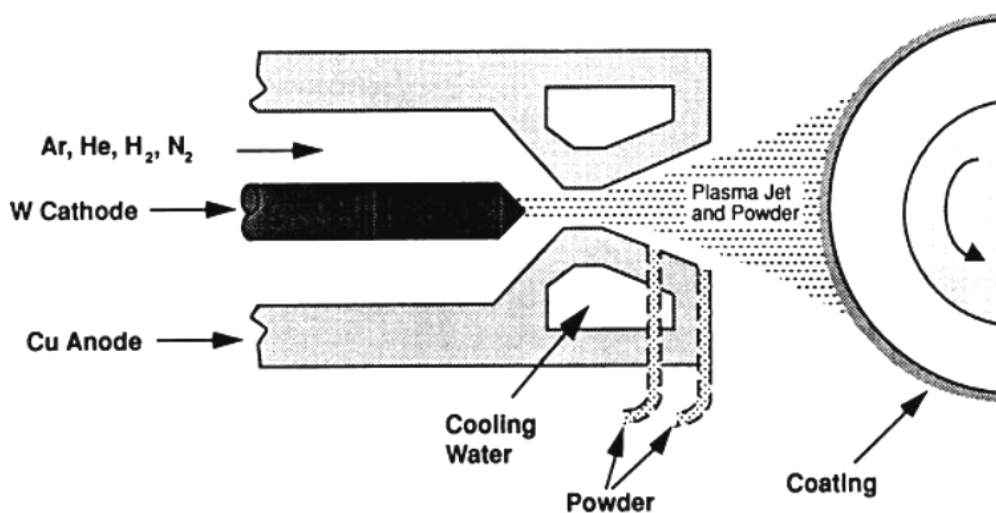
1. Úprava implementací

a) Plazmatický nástřik

Plazmatický nástřik je metoda nástřikování určitého kovu nebo keramického materiálu na povrch, kde vytváří vysoce kvalitní povlak s minimální deformací materiálu spojením vysoké teploty, vysoké rychlosti částic a zdroje vysokoenergetického tepla.

b) Plazmové čištění

Nečistoty jsou bombardováním částic plazmatu za povrchu materiálu odprašovány a následně odstraněny odsávacím zařízením.



Obrázek 6: Plazmatické nástřikování[11]

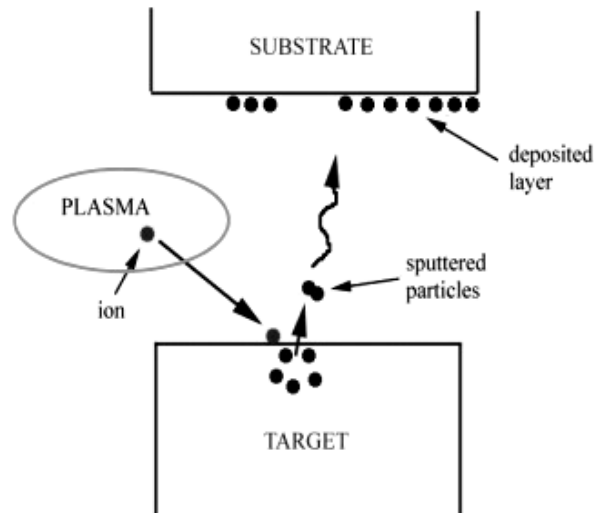
c) Aktivace polymerů

Polymery jsou v moderní době masově používány v celém světě kvůli své poměrně nízké ceně, odolnosti vůči korozi, možnosti barvení a dalším kladným vlastnostem. Přesto je však v některých případech k užití polymerů nutná jejich modifikace, která se provádí právě plazmatem. k požadovaným změnám dochází nejrůznějšími způsoby, jako je působení kyslíkového plazmatu pro zvýšení povrchové energie, plazmatu

s obsahem skupin fluoru pro snížení povrchové energie, zvýšení povrchové vodivosti a kluzkosti, odstranění nečistot, zvýšení hydrofility a hydrofobity a další.

d) PVD (physical vapour deposition)

PVD povlaky jsou nanášeny za poměrně nízkých teplot (400 – 600°C) odpařením kovu při reakci například s dusíkem. Vznikají velmi tvrdé vrstvy s odolností vůči korozi, vysokým teplotám, otěru, kyselinám atp.



Obrázek 7: Nanášení PVD[11]

e) CVD (Chemical vapor deposition),

V důsledku chemických procesů vzniká na povrchu látky tenká vrstva, proces je tvořen v reaktoru za použití plynných složek, které se za vysokých teplot rozkládají a ulpívají na povrchu látky. Používají se především sloučeniny křemíku a titanu.

f) PECVD (plazmochemická metoda)

Hlavní příčinou vzniku této metody byla snaha snížit vysokou teplotu, která byla užívána při aplikaci metody CVD. a snahou tuto teplotu snížit. Jedná se o plazmochemickou depozici z plynné fáze. Při aktivaci par dochází ke srážkám elektron s molekulami plynu a ke vzniku reaktivních částic, které reagují s povrchem materiálu. v tomto případě lze použít substráty s nízkou teplotou tání (např. hliník).

g) Plazmová iontová implementace

Při této metodě reagují zrychlené ionty s materiálem v oblasti středních energií. Ionty tak vnikají hlouběji do povrchu materiálu, kde ztrácejí energii a stávají se součástí struktury materiálu. Jde zde hlavně o zvýšení tvrdosti a odolnosti materiálu.

h) Plazmatické leptání

K plazmatickému leptání dochází pomocí reaktivních složek v plazmatu ve vakuu i v atmosférickém tlaku za nízkých teplot, kdy dochází ke změnám v morfologii povrchu. Tento proces působí na vzrůst drsnosti (a proto zvětšení povrchu materiálu), adheze a dalších vlastností vhodných při lepení materiálu. [12]

4 Penetrace částic do porézních materiálů

4.1 Rešerše literatury, vybrané aplikace

Plazmatické ošetřování zaznamenalo v poslední době obrovský rozmach, ať už se jedná o technický průmysl, zemědělský průmysl, textilní výrobu, medicínu a biomedicínu, dermatologii a další. Vědecká obec se zabývá čím dál podrobněji a ve větší míře problematikou plazmatu a jeho využitím a přichází na stále nové způsoby aplikace, které mohou výrazně ušetřit čas i peníze.

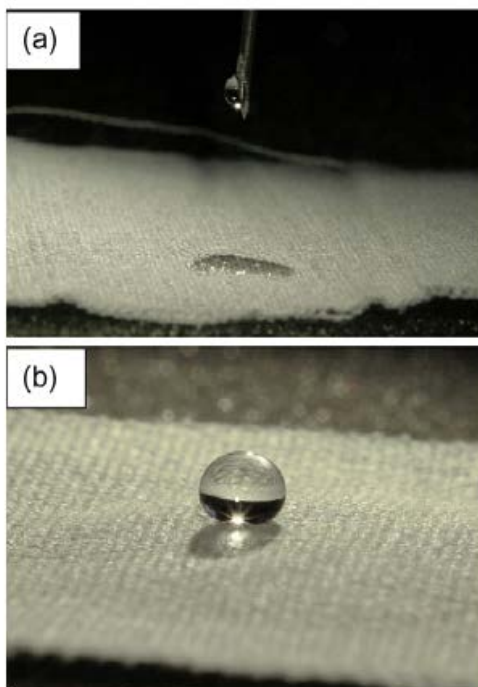
Důležité je však zmínit celosvětový výzkum penetrace částic plazmatu do porézních struktur, jímž se zabývají přední světoví odborníci na fyziku plazmatu. Výzkumy a články jsou pak publikovány na nejznámějších vědeckých serverech a časopisech, kterými jsou především Elsevier.com [13] a ScienceDaily.com [14].

Plazma je využíváno při úpravě textilu. Výsledky výzkumů, které se podílejí na problému úpravy textilií plazmatem, zaznamenávají odborníci například ve finském Aalto University nedaleko Helsinek[14]. Zde se vědci pod vedením profesora Ilkka Kilpeläinena zabývají zpracováním celulózy do textilních vláken, která se upravují na bázi iontových rozpouštědel, proces je mnohem šetrnější k životnímu prostředí než proces zpracování viskózy a bavlny a textilie je odolnější a silnější.

V Yancheng Institute of Technology v Jiangu v Číně zkoumala v roce 2010 vědecká skupina pod vedením CX Wanga[15] vliv velikosti pórů na penetraci při povrchové úpravě textilií ošetřovaných plazmatem a zjistila, že stupeň pronikání APPJ (atmospheric pressure plasma jet) se zvyšuje s rostoucí velikostí pórů a závisí na kontaktním úhlu. Shledali, že působením APPJ plazma může projít celou porézní látkou a účinek na povrchu bude vždy větší než na spodní straně tkaniny.

CX Wang[16] také zkoumal hloubku průniku APPJ do několika vrstev polyesterové tkaniny. Vystavil osmivrstvý polyester působení plazmatu a hodnotil povrchovou hydrofilitu na horní i spodní straně každé vrstvy tkaniny. Nárůst povrchového kapilárního napětí byl použit jako měřítko účinnosti modifikace pro jednotlivé vrstvy látky. Smáčivost byla největší na horní straně první vrstvy látky a byla podstatně větší než u kontrolní látky. Čím se šlo hlouběji do struktury látky, tím se efekt smáčivosti snižoval, protože rozsah plazmové modifikace závisel na stupni průniku plazmatu a ta závisela na velikosti pórů ošetřované tkaniny.

Na belgické univerzitě v Ghentu Rino Morent zkoumal v roce 2007 ošetřování tkanin studeným plazmatem[17]. Vzhledem k množství potenciálního využití ošetření textilií tímto typem plazmatu byl výzkum zaměřen na účinky ošetření a zpracování výsledků.



Obrázek 7: Hydrofobní vlastnosti tkaniny[17]

Na obrázku č. 7 je jasně vidět rozdíl mezi původním stavem a situací kdy byla tkanina plasmaticky ošetřena a vyznačuje se pak hydrofobitou, tedy schopností odpudit vodu.

Je to jedna z mnoha vlastností, které Morentova vědecká skupina testovala. V podstatě zjistili obrovský rozsah možností vytvořených efektů po ošetření textilií studeným plazmatem, dále také zjistili, že velké množství různých podmínek při ošetření může mít za následek stejný efekt. Studené plazma má velký potenciál pro ekologické i ekonomické úspory, plasmatická technologie je schopna dobrých výsledků při použití běžných průmyslových reaktorů. Používání plasmatického ošetření textilu bylo vyvinuto během dlouhého období a vyvíjení, zavádění a následné užívání této technologie v textilním průmyslu bylo pomalé a vleklé. Příčinou tohoto zpomaleného postupu v průmyslu může být nedostatek odborné literatury, která by popisovala zásadní problematiku těchto technik, odlišné techniky používání nebo neuzpůsobenost prostředků k její realizaci.

Techniky ošetřování plazmatem jsou stále ve vývinu, dosud však zaznamenaly značný pokrok a bylo publikováno velké množství odborných článků a publikací, které objasňují některé problematické body.

Modelování penetrace částic plazmatu se mnoho článků ve světových odborných časopisech nevěnuje, spíše výzkumníci a vědci s modelacemi a modelačními programy již automaticky pracují a věnují se hlavně příčinám a důsledkům plazmatického působení.

Pro můj vlastní výzkum mi však tyto články pomohly objasnit některá základní fakta a pochopit problematiku plazmatického ošetřování, abych se dále mohla věnovat samostatně přímo modelování v MATLABu.

4.2 Metody počítačového modelování penetrace částic do porézní struktury materiálu

Počítačové modelování nebo také počítačová simulace je velmi rozšířený samostatný obor fyziky. Počítačové modelování se zpravidla využívá k predikci chování různých systémů při různých vstupních parametrech. v technické praxi tak umožňuje nalézt optimální parametry, při kterých lze sledování systému provozovat.

Pro počítačové modelování používáme následující postup [18]:

1. Formulace problému – nejprve zvolíme jev, který chceme zkoumat, a následně popíšeme potřebnými pojmy.
2. Vytvoření modelu – pokud máme alespoň minimální data, je možné na základě zkoumaného jevu vytvořit základní model, který ovšem nebude přesný, jelikož často neznáme všechna data, a tudíž je nasnadě si jej zjednodušit. Nemáme také jistotu jeho korektnosti, je potřeba model zkontrolovat s výsledky modelování. Přesnost modelu závisí na přesnosti vstupních dat.
3. Řešení modelu – zvolíme postup, kterým budeme model řešit a zvolíme i potřebné numerické hodnoty.
4. Srovnání výsledků modelování s experimentálními údaji – výsledky modelování srovnáme s výsledky přímého měření.

Techniky počítačového modelování [18]:

V této práci se budu zabývat především částicovým modelováním, přesto zde uvedeme krátký přehled dalších technik, které se u počítačového modelování používají. Mimo částicové modelování tedy můžeme využít ještě spojitě a hybridní modelování.

1. Spojité modelování – tato modelační technika pracuje s jevem na makroskopické úrovni. Pracujeme s klasickou fyzikou, tedy s klasickými zákony zachování energie, hybnosti, náboje apod. Na uvažovanou látku, v tomto případě na plazma, se díváme jako na kontinuum (hmotu považujeme za spojitě prostředí o určité hustotě, kdy zanedbáváme jeho částicovou strukturu) o určité teplotě, tlaku, složení, rychlosti proudění apod. z matematického hlediska bychom v tomto případě využili parciálních diferenciálních rovnic, popřípadě klasických diferenciálních rovnic.
2. Částicové modelování – tato technika počítačového modelování je zdaleka nejpřesnější a neúčinnější. Popisuje zkoumaný jev na mikroskopické úrovni, chování

jednotlivých částí, ze kterých se jev skládá. Charakterizujeme ji podle atomů, iontů a elektronů. Testujeme-li chování modelu, musíme provést statistické vyhodnocení dat, abychom byli schopni poskytnout informace o pohybu, poloze či rychlosti částic v modelovaném souboru.

3. Hybridní modelování – u hybridní modelace se užívá kombinace spojitého a částicového modelování.

Při částicovém modelování rozlišujeme několik metod podle toho, jak chování studovaného jevu popisujeme.

a) Metoda Monte Carlo – Tato metoda se nevyužívá pouze v počítačové fyzice. Je to souhrn postupů, které řešení problému získávají pomocí mnohonásobných náhodných pokusů. Popisujeme stochasticky chování částic pomocí zákonů počtu pravděpodobnosti. Tuto metodu si podrobněji vysvětlíme v následující podkapitole 3.3.

b) Metoda molekulární dynamiky – patří mezi modely deterministického částicového modelování a řeší se při ní klasické pohybové rovnice.

c) Hybridní metody – tyto metody kombinují jak stochastický, tak deterministický popis na částicové úrovni pro dosažení nejpřesnějšího modelu.

Částicové modelování také dělíme do dvou základních skupin [19]:

- Selfkonzistentní metoda - hodnoty elektrického potenciálu jsou pravidelně přepočítávány mezi jednotlivými kroky částic. Uvažujeme zde všechny důležité částice (kladně nabitě ionty a elektrony). Časově je tato metoda neefektivní a je vhodná v případech, kdy lze redukovat dimenzionalitu systému.

- Neselfkonzistentní metoda – při této metodě uvažujeme pouze jeden typ částic, jejichž charakteristiku hledáme. Jsou vhodné v případech, kdy potřebujeme ze známého rozložení elektrického potenciálu určit rozdělovací funkce rychlostí a s ní související charakteristiky.

Počítačové modely jsou vytvářeny v různých programech. Pro potřeby této bakalářské práce si představíme dva z nich: program MATLAB a COMSOL Multiphysics.

4.3 Počítačové modelování procesu penetrace částic do textilie a využití metody Monte Carlo

V současné době zaznamenáváme trend k využívání stochastických metod počítačového modelování. Stochastickou metodou rozumíme metodu založenou na počtu pravděpodobnosti a zákonech statistiky, tedy možnost přirozeným způsobem a jednoduše vykreslit grafy funkcí, ověřit si správnosti řešení rovnic apod. Opakem stochastických metod jsou metody deterministické, které jsou sice rozšířenější, ale u mnoha případů méně efektivní.

Pro přiblížení stochastického jevu uvedu příklad: tímto klasickým jevem je např. hod kostkou, kdy se výsledek nedá předpovídat, nicméně dá se spočítat statisticky či za využití pravděpodobnosti.

Klasickým příkladem stochastické metody počítačového modelování je metoda Monte Carlo. Mezi tvůrce této metody patří především J. von Neumann, který zkoumal na americké Národní laboratoři v Los Alamos chování neutronů a potřeboval zjistit, jaké množství neutronů projde různými materiály. Dále se na tvorbě této metody podíleli E. Fermi a N. Metropolis. Byla vytvořena už ve 40. letech 20. století a byla rozšířena za druhé světové války, kde se již pro atomový výzkum využívaly počítače.[20]

Metoda Monte Carlo (MMoCa) je široká třída numerických výpočetních metod, která je založena na využití náhodných veličin a teorii pravděpodobnosti. Jde o simulaci systémů pomocí stochastických metod, které využívají pseudonáhodná čísla. Má širokou škálu využití od simulace experimentů přes počítání určitých integrálů až k řešení diferenciálních rovnic.[21]

Řešení MMoCa můžeme popsat ve třech krocích:[20]

1. Rozbor problému a návrh modelu

Z hlediska řešení problému se jedná o nejdůležitější krok. Přesto že je MMoCa použitelná téměř u všech problémů a její formulace není složitá, nalezení vhodného postupu může nezkušenému uživateli působit potíže.

2. Generování náhodných veličin, transformace na veličiny s daným statistickým rozdělením.

Při tomto kroku se zpravidla opakuje cyklus, dokud se hledaná hodnota příliš neliší od hodnoty dané výpočtem. Rychlost konvergence chyby výsledku

k nulové hodnotě je u MMoCa přibližně rovna převrácené hodnotě odmocniny z počtu realizovaných pokusů N , z čehož plyne, že nepatří mezi nejefektivnější metody.

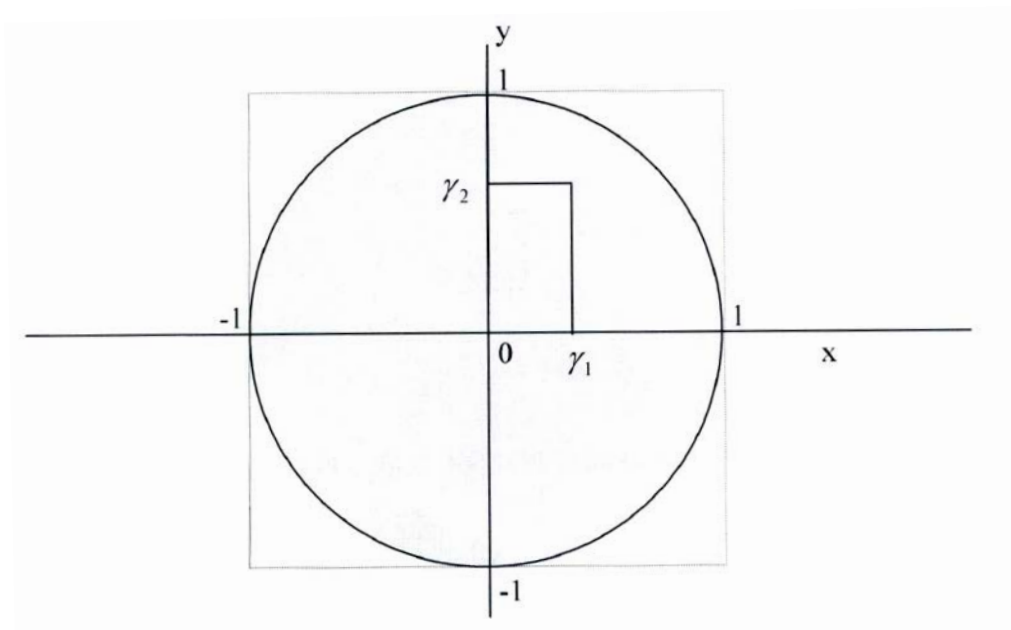
3. Statistické zpracování výsledků.

Hledaná hodnota je zpravidla dána některým z momentů statistických veličin, nejčastěji střední hodnotou.

V následujícím textu si ukážeme tuto metodu na několika příkladech s doplněním zdrojového kódu psaném v MATLABu.

Výpočet čísla π

Nejběžnějším, nejčastějším a nejlépe popisujícím příkladem je výpočet Ludolfova čísla π . Máme čtverec o hraně velikosti 2, do kterého je vepsán kruh o maximálním obsahu (viz obr. 1). Strany čtverce jsou rovnoběžné k osám kartézské souřadné soustavy a počátek souřadné soustavy leží ve středu kružnice.



Obrázek 8: Výpočet Ludolfova čísla[16]

Každý bod v kružnici je definován dvojicí náhodných čísel $[\gamma_1, \gamma_2]$ v intervalu $\{-1, 1\}$. Podíl počtu čísel, která leží uvnitř kruhu N_{kruh} , a všech čísel uvnitř čtverce N_{celkem} je roven podílu obsahu kruhu S_{kruh} a obsahu čtverce $S_{ctverec}$. Tudíž

$$\frac{N_{kruh}}{N_{celkem}} = \frac{S_{kruh}}{S_{ctverec}} = \frac{\pi r^2}{S_{ctverec}} \quad (1)$$

Pokud známe hodnoty, tedy počet generovaných čísel a poloměr kruhu, můžeme pro číslo π psát:

$$\pi = \frac{S_{ctverec} N_{kruh}}{r^2 N_{celkem}}. \quad (2)$$

V MATLABu pak můžeme vytvořit zdrojový kód.[20]

```
polomer=1;
N_celkem=1000000;

gamma1=2*rand(N_celkem, 1)-1;
gamma2=2*rand(N_celkem, 1)-1;

v_kruhu=find((gamma1.^2+gamma2.^2)<polomer.^2);
N_kruhu=size(v_kruhu, 1);

pi=4*N_kruhu/(N_celkem*polomer.^2);
```

Výpočet jednorozměrného určitého integrálu[20]

Počítáme-li jednorozměrný určitý integrál, můžeme vycházet z poznatků získaných v předchozím příkladu.

1. Prvním krokem je určení maxima integrované funkce. Můžeme využít funkci *max* ().
2. Definujeme obdélník o straně AB, BC.
3. Vygenerujeme uspořádané dvojice náhodných čísel $[\gamma_1, \gamma_2]$, kdy $\gamma_1 \in \langle a, b \rangle$, $\gamma_2 \in \langle 0, \max(f(x)) \rangle$, a počítáme poloměr mezi body ležícími uvnitř integrované plochy a všemi generovanými čísly. Hodnotu integrálu pak definujeme vztahem

$$I = \frac{N_{oblast} S_{obdelnik}}{N_{celkem}}. \quad (3)$$

Ukázka je provedením výpočtu hodnoty integrálu funkce sinus na intervalu $(0, \pi)$. K výpočtu bylo použito milion náhodných čísel. Jelikož program MATLAB generuje náhodná čísla rovnoměrně rozložená v intervalu $(0, 1)$, musíme je transformovat na interval (a, b) dle vztahu[16]

$$\gamma' = a + (b - a)\gamma. \quad (4)$$

Takto by pak vypadal zdrojový kód pro tento výpočet:[20]

```
N_celkem=1000000;
a=0;
b=pi;

uzly=a:0.01:b;
maximum=1.1*max(sin(uzly))

gammal=(b-a)*rand(N_celkem, 1)-a;
gamma2=maximum*rand(N_celkem, 1);

v_oblasti=find(gamma2<sin(gammal));
N_oblast=size(v_oblasti, 1);

S_obdelnik=maximum*(b-a);
I=S_obdelnik*N_oblast/N_celkem
```

Jaký je tedy princip MMoCa? Ten spočívá ve dvou bodech:[22]

1. Formulace problému s náhodným charakterem, jejíž řešení se shoduje s řešením předchozí úlohy.
2. Řešení nového problému či úlohy pomocí náhodných experimentů.

Je tedy zřejmé, že při používání MMoCa hledáme přibližné řešení úloh, jejichž exaktní (analytické) řešení by bylo obtížné. Do třídy objektů analyzovatelných pomocí MMoCa lze řadit prakticky libovolné funkce transformující vstupy na výstupy (nikoliv nutně deterministicky). Máme-li například složitou matematickou funkci, jediné, co potřebujeme znát, jsou distribuční funkce vstupů. Díky nim generujeme jednotlivé náhodné vstupy (čísla, vektory...) a zaznamenáváme výstupy. Pokud dosáhneme dostatečného počtu opakování, lze pomocí statistické analýzy výstupů odhadnout parametr, který nás zajímá.

4.4 Programy pro počítačové modelování

V této kapitole bychom si mohli přiblížit některé nejznámější programy využívané pro počítačovou modelaci, programy, které jsem již zmínila v předchozích kapitolách 3.2 a 3.3.

4.4.1 MATLAB

Firma MathWorks vyvinula výpočetní prostředí, které je určeno pro maticové operace, technické výpočty a vizualizaci dat. Je to integrované prostředí s vlastním programovacím jazykem, využívá se pro návrh vlastních algoritmů, simulaci, analýzu a prezenci dat apod.

Tento program zaznamenal v posledních letech značné rozšíření po celém světě a stal se významným programem pro školy, akademickou obec i výzkumné laboratoře a přední světové odborníky.

Byl vytvořen, aby se přizpůsobil rozdílným požadavkům uživatelů, obsahuje rozsáhlé knihovny aplikací a funkcí, schopnost vytvořit 2D a 3D modelace, obsahuje adaptabilní prostředí pro práci s grafy, množinami, matematickými operátory apod.

MATLAB je vynikající nástroj pro snadnou a rychlou práci s maticemi reálných nebo komplexních čísel a následné grafické znázornění výsledků.

Samotný programovací jazyk MATLABu je typ dynamického programovacího jazyka zapisujícího kód do příkazového okna (Command Window) nebo poskytuje možnost vložení textového souboru obsahujícího skript a funkce v jazyku MATLAB.

Praktické ukázky zdrojového kódu budou uvedeny v další kapitole 5.3. spolu s konkrétními výpočty.

Výpočetní jádro

Algoritmy pro operace s maticemi reálných a komplexních čísel jsou nejpodstatnější součástí numerického jádra MATLABu. MATLAB umožňuje provádět všechny běžné operace jako násobení, inverze, determinant atd. a je možno jej použít jako maticový kalkulátor. MATLAB podporuje také typy složitější, jako jsou například vícerozměrná pole reálných nebo komplexních čísel. Dalším datovým typem jsou tzv. pole buněk, tedy struktury podobné maticím, ve kterých ovšem každý prvek může být jiného typu.

Podobně lze tvořit datové struktury, kde jsou prvky rozlišeny jménem, takže připomínají struktury z běžných programovacích jazyků. Skládáním těchto datových typů je pak možné vytvořit libovolně složité datové struktury. MATLAB ukládá všechna čísla v tzv. dvojité přesnosti, nebo si uživatel zvolí úspornější formu. Vektor reálných čísel může v MATLABu představovat i polynom. Operace s polynomy jsou v MATLABu obsaženy. Vektory mohou také reprezentovat časové řady nebo signály a MATLAB obsahuje funkce pro jejich analýzu - výpočet střední hodnoty, hledání extrémů, výpočet směrodatné odchylky, korelačních koeficientů, rychlé Fourierovy transformace, a také podporuje speciální formát uložení tzv. řídkých matic, což jsou rozměrem velké matice, které obsahují většinu nulových prvků. Další významnou vlastností jazyka MATLABu je možnost práce s objekty. Ty uživateli umožňují rozšířit výpočetní prostředí o nové datové typy, na kterých je možno definovat libovolné funkce a operátory.

Výpočetní jádro je implementováno s využitím základních matematických knihoven s podporou více jader. K využití této vlastnosti stačí pouze základní MATLAB, žádný dodatečný toolbox ani psaní paralelních algoritmů není potřeba. Není ani nutné nijak upravovat starší programy, zrychlení se projeví automaticky.[23]

Grafický subsystém

MATLAB poskytuje nenáročné grafické zobrazení a prezentaci výsledků získaných výpočtem. Můžeme pracovat s různými druhy grafů: dvourozměrné pro funkce jedné proměnné, třírozměrné pro funkce dvou proměnných, histogramy, koláčové grafy a další. U všech grafických objektů můžeme téměř libovolně měnit vzhled při jejich vytváření i po jejich nakreslení. Je tedy možné stínovat třírozměrné grafy s určením zdroje dopadajícího světla, animovat grafy včetně třírozměrných, zobrazovat kontury a transparentní objekty, používat pseudobarevné zobrazení, a mnoho dalšího. Většinu těchto efektů je možné docílit jedním nebo několika málo příkazy a pro jejich rychlé vykreslení se používá algoritmus Z-buffer nebo technologie OpenGL, pokud ji použitý počítač podporuje.

Obrázky v grafických oknech MATLABu nejsou statické, neboť každý již nakreslený objekt má přiřazen identifikátor, a lze měnit vlastnosti objektu i jeho vzhled. Grafické objekty můžeme také měnit interaktivně pomocí lišty nástrojů. Grafický

system MATLABu, nazvaný Handle Graphics, dovoluje vkládat do obrazů ovládací prvky (tlačítka, apod.) a vytvořit tak aktivní graficky ovládané uživatelské rozhraní.[23]

Otevřená architektura

U MATLABu je velmi důležitá jeho otevřená architektura, která přispěla k jeho velkému rozšíření. MATLAB je úplný programovací jazyk a uživatelé mohou vytvářet funkce podle svých představ. Dokonce většina funkcí s MATLABem dodávaných je takto vytvořena a opravdu vestavěné jsou jen základní funkce. Má to své výhody: jazyk MATLABu je téměř neomezeně rozšiřitelný a uživatel se může při psaní vlastních funkcí poučit z dodaných algoritmů. Navíc jsou takto koncipované funkce snadno přenosné mezi různými platformami, na kterých je MATLAB implementován. Všechny moduly systému doprovází rozsáhlá pdf i hypertextová on-line dokumentace, která uživatelům usnadňuje orientaci ve funkcích. Otevřená architektura MATLABu inspirovala mnoho nezávislých firem k vývoji a distribuci vlastních produktů, které buď rozšiřují výpočetní prostředí MATLAB o další knihovny nebo zajišťují propojení MATLABu s jinými programy. MATLAB tak obsahuje kromě více než 90 modulů z autorské dílny firmy The MathWorks ještě dalších více než 300 komerčně distribuovaných „third-party“ produktů a dalších volně přístupných akademických aplikací.[23]

Pracovní nástroje

V MATLABu je možné i programování samotných aplikací. Programovací jazyk obsahuje všechny nezbytné příkazy pro psaní programů, jako jsou podmíněné příkazy, větvicí příkazy, cykly a podobně. MATLAB je úplným programovacím jazykem čtvrté generace, ve kterém je možné vyvíjet i velice složité aplikace.

Základním nástrojem je uživatelské rozhraní MATLAB Desktop. Pracovní nástroje jako prohlížeč adresářů a souborů, prohlížeč pracovního prostoru, okno historie příkazů, interaktivní spouštěč aplikací, editor, debugger, profiler, hypertextová nápověda a příkazové okno jsou do prostředí integrovány. Pracovní plocha je přizpůsobena pro potřeby jak začátečníků, tak pokročilých. Uživatelé pomáhá interaktivní nástroj pro vytváření uživatelských rozhraní, ve kterém lze snadno a přehledně vytvořit a uspořádat ovládací prvky aplikace. Důležitým pomocníkem je interaktivní nástroj pro import dat (text, tabulky, databáze, binární data, obrázky, animace atd.).

Velkou předností programovacího jazyka MATLABu je jeho integrace s jazykem Java. Objekty jazyka Java mohou být přímo použity programem v MATLABu, což umožňuje jednak vytvářet složitá grafická rozhraní s použitím grafických objektů Javy, jednak využít velkého množství volně dostupných knihoven, které byly v jazyce Java vytvořeny. Kromě toho je možné k MATLABu připojovat také moduly napsané v jazyce C a ve Fortranu.[23]

Toolboxy

Pro MATLAB bylo vytvořeno velké množství knihoven nazývaných toolboxy, které rozšiřují použití v příslušných oborech. Tyto knihovny, navržené v jazyce MATLABu, nabízejí předzpracované specializované funkce, které je možno rozšiřovat a modifikovat, anebo jen čerpat informace z dokumentovaných algoritmů.[23]

4.4.2 Simulink

Simulink je nadstavba MATLABu umožňující simulaci a modelování dynamických systémů pro numerické řešení nelineárních diferenciálních rovnic. Simulink dovoluje rychle a přesně simulovat rozsáhlé „stiff“ systémy s efektivním využitím paměti počítače. Pomocí Simulinku a jeho grafického editoru lze vytvářet modely lineárních, nelineárních, v čase diskrétních nebo spojitých systémů pouhým přesouváním funkčních bloků myší. Simulink také umožňuje spouštět určité části simulačního schématu na základě výsledku logické podmínky. Tyto subsystemy umožňují použití programu v náročných simulačních experimentech.

Hierarchická struktura modelů umožňuje koncipovat i velmi složité systémy do přehledné soustavy subsystemů prakticky bez omezení počtu bloků. Simulink, stejně jako MATLAB, dovoluje připojovat funkce napsané uživateli v jazyce C. Vynikající grafické možnosti Simulinku je možné přímo využít k tvorbě dokumentace a velkou výhodou je nezávislost uživatelského rozhraní na počítačové platformě.[24]

4.4.3 COMSOL Multiphysics

Jedná se o další z řady inženýrských nástrojů, který je určen pro modelaci a simulaci fyzikálních dějů. Je velmi užitečný v případě interakce několika fyzikálních vlivů současně. Byl vytvořen pro řešení těchto komplexních problémů.

Obsahuje přívětivé uživatelské rozhraní, vhodné i pro začátečníky, zahrnuje nejrůznější řadu aplikací, funkcí a celou škálu nástrojů pro snadnou analýzu dat a práci s nimi.

Je vhodný pro řešení úloh z oblastí pružnosti pevnosti (Mechanical), mechaniky tekutin (Fluids), elektromagnetismu (Electromagnetic), chemie (Chemical) a další.

Jeho velkou výhodou je propojení s programem MATLAB a mnoha CAD nástroji.

Při práci s COMSOLem následujeme pracovní postup, sestávající z pěti hlavních kroků[30]:

1. Nejprve se vytvoří geometrie zkoumaného modelu pomocí CAD nástrojů v grafickém editoru COMSOLu.
2. Zadáme okrajové podmínky a vlastnosti oblastí v modelu (hrany, body, proměnné, výrazy, funkce apod.).
3. Poté se vygeneruje výpočetní síť, v jejíchž uzlových bodech budou vypočtena potřebná data.
4. V předposledním kroku řešíme samotný model pomocí několika typů řešičů.
5. Následuje konečné zpracování výsledků.

Pro COMSOL existuje několik skupin nadstavbových modulů s rozšiřujícími knihovnamí. Pro přiblížení je nutné zmínit tyto čtyři nejdůležitější skupiny[25]:

Elektromagnetismus (Electrical)

Ve skupině Electrical umožňují nadstavbové moduly modelovat úlohy z oblasti elektromagnetismu nízkých a vysokých frekvencí, šíření světla, MEMS systémů, pomáhají analyzovat nízkoteplotní nejaderná plazmata nebo nabízejí detailní analýzu polovodičových prvků. Moduly jsou tedy vhodné pro modelování elektromotorů, antén, vlnovodů, světlovodů, snímačů, různých typů osvětlení, plazmových reaktorů, atd.

Výhodou je možnost integrace modelů do schémat ve SPICE formátu, kdy se analyzovaný model stává součástí definovaného elektrického obvodu.[25]

Strojírenství (Mechanical)

Moduly z oblasti strojírenství umožňují modelovat od klasické pružnosti pevnosti, provádět analýzy nosníků, vzpěru konstrukcí až po skořepiny a membrány. Základní

nabídku lze rozšířit o nelineární materiály, zahrnout creep, plasticitu se životností konstrukcí a také teplotu. Zohledněním těchto aspektů se mnohonásobně rozšíří aplikační oblasti a přiblíží simulaci ještě více realitě. s pružností a pevností souvisí i akustika nebo geomechanika.[25]

Mechanika tekutin (Fluid)

Tyto moduly z oblasti tekutin pracují s mechanikou tekutin od laminárního proudění až po turbulentní, jak jednofázové, tak i vícefázové. Modelování a analýzu rozsáhlých potrubních systémů lze řešit velice efektivně. s příslušným modulem lze simulovat proudění v porézních médiích nebo proudění spojené s geologií, jako je například modelování spodních vod.[25]

Chemie (Chemical)

Chemické moduly obsahují předdefinované fyzikální rozhraní pro modelování chemických reakcí, transportu rozpustných látek nebo transportu látek v porézních médiích. z elektrochemie je možné navrhnout a následně simulovat cykly baterií či palivových článků. Můžeme simulovat i proces galvanizace anebo koroze.[25]

5 Návrh modelu pro studium penetrace reaktivních částic do struktury textilie

Navržený počítačový model je založen na částicové modelovací technice a kombinuje principy deterministického a stochastického modelování. Vlastní zdrojový kód, který je uveden v příloze, je rozdělen do tří částí. v první části je generována struktura jednotlivých vláken na základě vstupních parametrů, kterými je hustota vláken a jejich poloměr. Druhou část tvoří hlavní program, kde jsou nejprve generovány polohy a rychlosti reaktivních částic. Následně je sledována jejich trajektorie v čase a na závěr jsou statisticky zpracovány výsledky a je provedena vizualizace. Třetí část modelu tvoří funkce pro odraz sledované částice od povrchu vlákna.

5.1 Program pro generování struktury vláken

Cílem tohoto jednoduchého programu je nagenarovat strukturu vláken o daném poloměru r , počtu n a velikosti. Pracovní oblastí je obdélník o stranách a a b . Předpokládá se, že vlákna jsou umístěna rovnoběžně, přičemž jejich osa je kolmá na plochu obdélníka. Zdrojový kód, vytvořený v MATLABu pro tuto funkci, je uvedený v příloze 1.

Princip algoritmu je takový, že pomocí cyklu `for` jsou generována jednotlivá vlákna. Poloha středu je určena metodou Monte Carlo, tj. je nagenarována náhodná poloha středu vlákna o souřadnicích s_x a s_y . Následně je proveden test, zda se nově nagenarované vlákno neprotíná s některým z jiných vláken nagenarovanych dříve. Pokud ano, je hodnota s_x a s_y zahozena, pokud ne, je uložena do datové struktury.

Po nagenarování potřebného počtu vláken jsou všechny údaje uloženy do datové struktury `data.mat` a uloženy na disk. Následně je tato datová struktura načtena v druhé části programu. Ukázkové struktury získané z tohoto programu jsou uvedeny v kapitole 5.

5.2 Hlavní program

Cílem hlavní části modelu je sledovat pohyb jednotlivých částic a v každém časovém okamžiku otestovat, zdali došlo k interakci částice s povrchem vlákna. Výstupem modelu jsou souřadnice bodů, v nichž částice svůj pohyb ukončila, tj. byla absorbována

na povrchu textilie. Zdrojový kód programu byl opět vytvořen v MATLABu a je uvedený v příloze 2. Rozdělit ho můžeme do několika částí. Nejprve dochází k načtení struktury `data.mat`, v níž jsou uloženy veškeré informace o středech vláken. Tyto souřadnice byly získány v první části programu, viz kapitola 4.1. Zároveň jsou zadány další vstupní parametry, jako je hodnota sticking koeficientu, střední volné dráhy apod. Na začátku programu je zároveň určeno, pro kolik reaktivních částic bude výpočet proveden. v našem případě jsme testovali 100 000 000 hodnot.

Každá z uvažovaných částic je sledována samostatně. K tomu je využit cyklus `for`. Nejprve je negenerována poloha částice na povrchu struktury, na rozhraní textilie/plazma. Zároveň je negenerována její rychlost.

Trajektorie částice je sledována diskrétně v daných časových okamžicích. Tyto časové okamžiky jsou určeny časovým krokem, který jsme v našem modelu určili 10^{-8} s. v každém tomto okamžiku je určena nová poloha částice a je otestováno, zda došlo k interakci částice s jinými částicemi plynu. Pokud ano, je pomocí MMoCa a vztahu (7) určena náhodná volná dráha ξ . Ve vztahu (7) λ označuje střední volnou dráhu, γ_1 náhodné číslo s normálním rozdělením. Vztah (7) můžeme vysvětlit tak, že urazí-li částice náhodnou volnou dráhu, pak nastane srážka, což v modelu řešíme pouze generováním nového směru částice a novou hodnotou ξ .

Modelem, který je takto vytvořen, můžeme vysvětlit například difuzi nebo pohyb nabitých částic v elektrickém poli.

Tímto způsobem je v programu realizována interakce reaktivní částice s částicemi na pozadí. Zároveň je tak do modelu zakomponován prvek tlakové závislosti.

Následně je testováno, zda došlo k interakci částice s povrchem některého vlákna. Test spočívá v tom, že je zjištěna vzdálenost reaktivní částice od středu všech vláken. v okamžiku, kdy je tato vzdálenost menší než poloměr vlákna, je uvažována srážka částice s povrchem vlákna. Odpadlá částice se může od vlákna buď odrazit, nebo již na něm zůstane uchycena. Dochází k adhezi. Tento test je proveden pomocí samostatné funkce, která bude popsána v kapitole 4.3. Pokud došlo k adhezi částice na povrchu vlákna, je uložena její poloha do matice. Poté, co jsou získány hodnoty všech částic, dochází ke statistickému zpracování výsledků a získaná data jsou prezentována pomocí grafu.

Výpočet hlavní části programu byl z výpočetního hlediska nejnáročnější pro výpočet na počítači s procesorem intel core i5 trval výpočet pro 100 000 000 částic a 500 vláken přibližně 5 hod 30 minut.

Můžeme uvést příklad počítačové modelace pohybu nabitých částic za využití metody Monte Carlo, popis využitých vzorců pro tuto problematiku a ukázky 3D modelů částic v elektrickém poli.

Pohyb nabitých částic v elektrickém poli[20]

Metodou Monte Carlo můžeme modelovat jevy z teorie plynů. Na plyn nahlížíme buď jako na kontinuum nebo na soubor částic, které navzájem interagují. Lze tedy vytvořit jednoduchý částicový model, kde budou zahrnuty veškeré aspekty reálného plynu. Model pak vytvoříme ve dvou krocích.

1. Vyjádření pohybu částic v prostoru a čase

Pohyb jednotlivých částic popisujeme Eulerovým algoritmem

$$\vec{r}_i^{k+1} = \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t \quad (5)$$

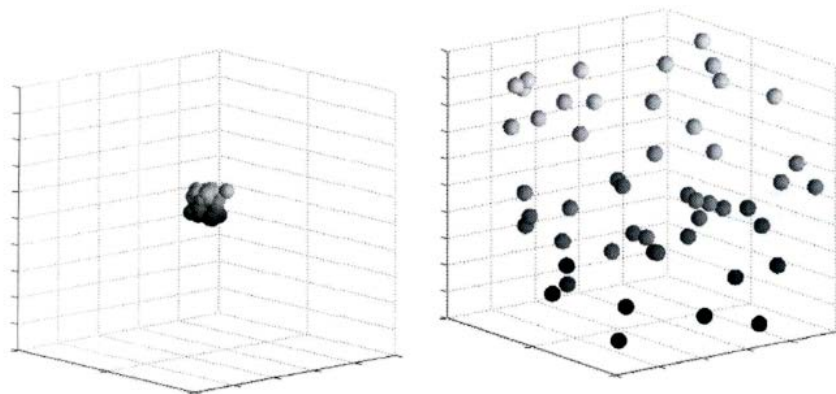
$$\vec{v}_i^{k+1} = \vec{v}_i^k \quad (6)$$

V těchto rovnicích je \vec{r} vektor polohy, \vec{v} vektor rychlosti, Δt časový krok. Horní indexy charakterizují číslo časového kroku, dolní číslo částice. Jako vhodnou délku můžeme zvolit délku časového kroku 1×10^{-8} s, počet částic v pracovní oblasti nemusí být vysoký – v tomto případě bylo použito 50 částic.[20]

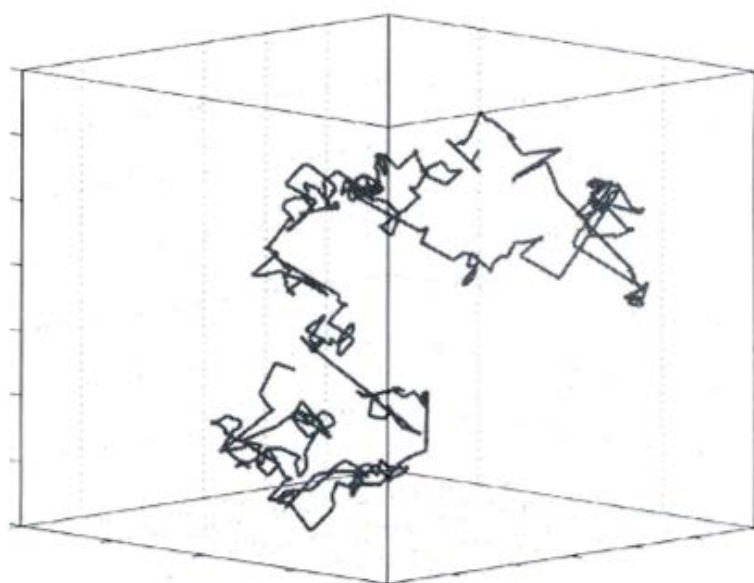
2. Vhodným způsobem realizovat vzájemné srážky částic

Srážky částic můžeme realizovat přidělením náhodné volné dráhy ξ definované vztahem

$$\xi = -\lambda \cdot \ln \gamma_1 \quad (7)$$



Obrázek 9: Rozložení částic na počátku difuze (vlevo) a na konci experimentu v ustáleném stavu (vpravo)[20]



Obrázek 10: Trajektorie jedné částice ideálního plynu[20]

5.3 Funkce pro odraz sledované částice od povrchu vlákna

Teorie předpokládá, že částice se od povrchu odrážejí náhodným směrem. Z tohoto předpokladu také vychází algoritmus pro generování směru částice po odrazu od povrchu vlákna. Vstupními hodnotami této funkce je poloha částice na povrchu vlákna souřadnice středu. v první části programu je určen vektor r , jehož souřadnice jsou určeny jako rozdíl polohového vektoru polohy částice a polohového vektoru středu vlákna. Následně je pomocí metody Monte Carlo negenerován vektor rychlosti v s vektorem r (vektor vypočítám v první části), je menší než 90° . Pokud je tato podmínka splněna, je

nagenerována rychlost výstupem programu. Pokud tato podmínka splněna není, tj. úhel mezi vektorem p a nagenerovaným směrem rychlosti je větší než 90° , je celý výpočet realizován znovu. Algoritmus je ukončen v okamžiku, kdy dojde k úspěšnému nagenerování vektoru rychlosti. Souřadnice tohoto vektoru jsou předány hlavní části programu jako výstupní parametry této funkce. Zdrojový kód funkce pro odraz sledované částice je přílohou 3.

Pro znázornění pohybu částice při průchodu vláken jsou využity již dříve nagenerované hodnoty a tyto hodnoty jsou využity k zakreslení trajektorie. Vstupními hodnotami této funkce je poloha částice na začátku pohybu, tlak p , Boltzmanova konsta B a teplota T . Takto je poté proveden výpočet volné dráhy. Pokud pro částici nastala srážka, je částice odkloněna a funkce generuje jinou dráhu. Součástí zakreslování trajektorie je i funkce pro generování směru opět využívající již zaznamenané hodnoty. Obě tyto funkce jsou uvedeny v příloze 4.

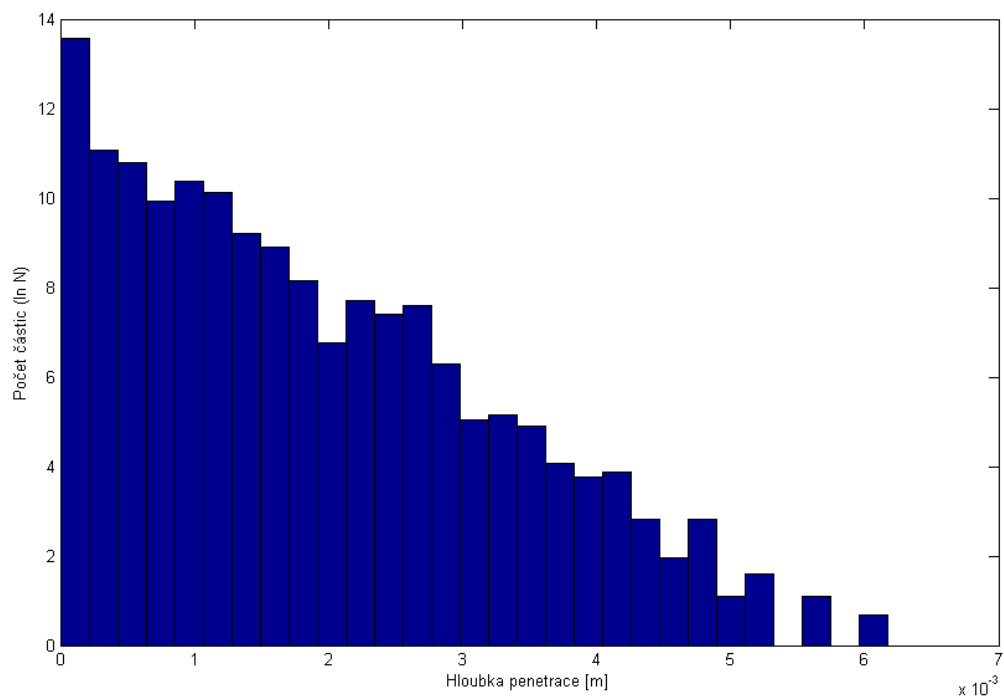
6 Ukázkové výsledky

6.1 Výstup z modelu

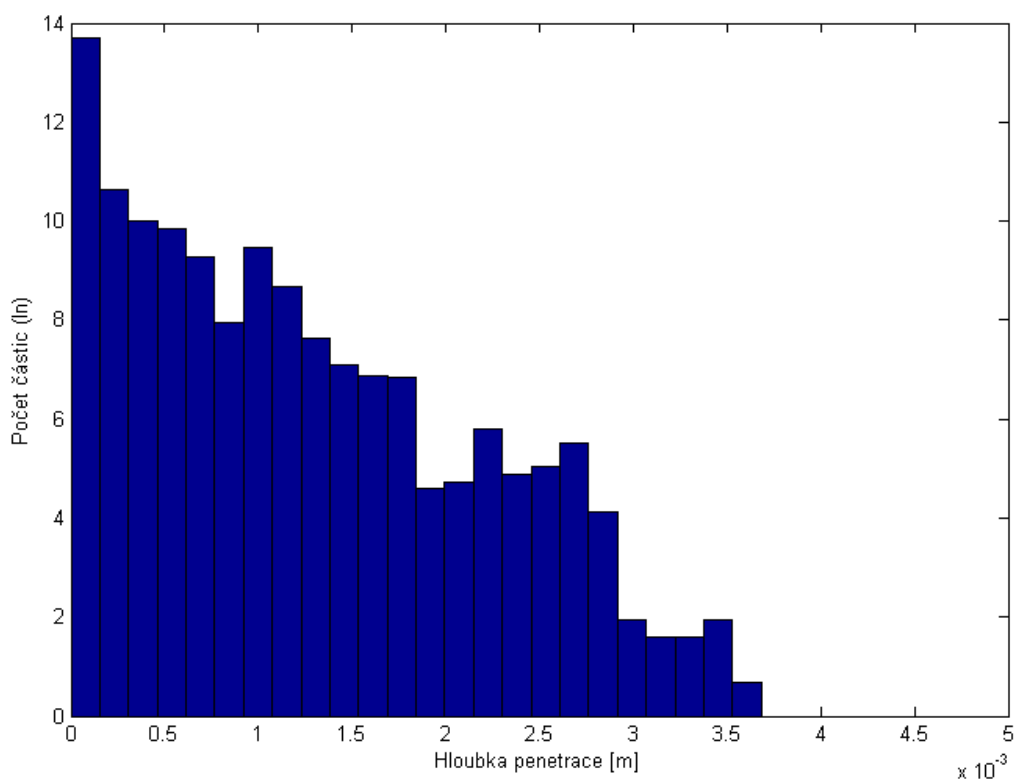
Výsledné histogramy byly provedené v MATLABu pro penetraci 100 000 000 částic do textilie o hustotě 500 vláken na 1 cm x 2 cm a názorně ukazují lineárně klesající funkci, tedy že množství částic lineárně klesá v závislosti na hloubce penetrace.

Množství částic je zaznamenáno v přirozeném logaritmu, protože se jedná o vysoká čísla, a znázornění lineární funkce by tak bylo problematické, v tom případě by se tedy jednalo o funkci exponenciální.

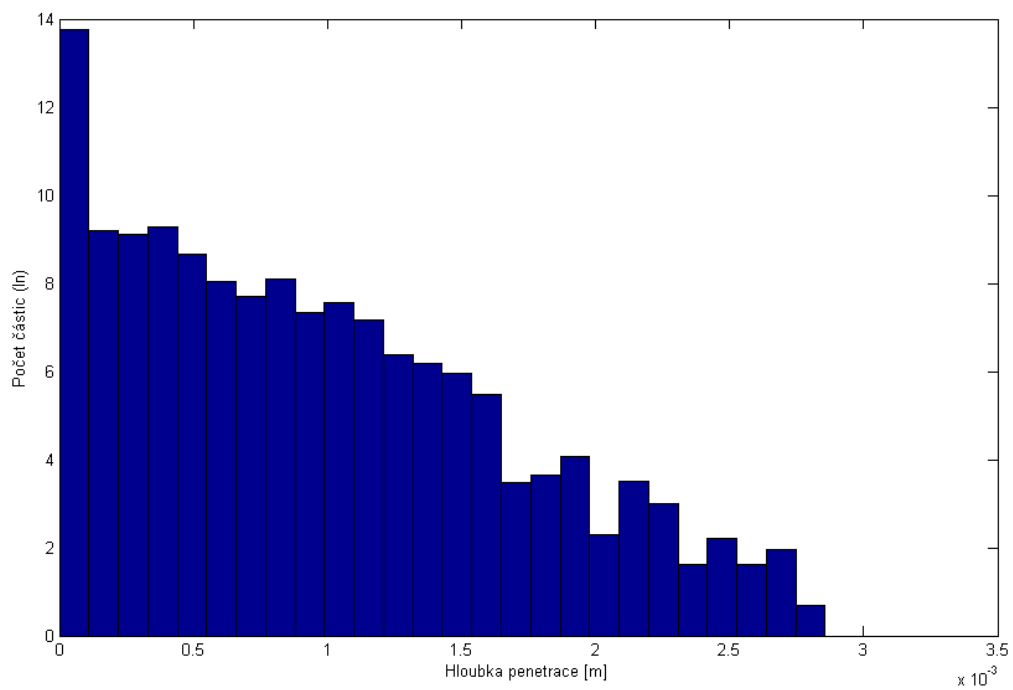
Pro porovnání byla penetrace znázorněna pro tlak při 13 Pa, 133 Pa a 1330 Pa a dále pro sticking koeficient 0,5 a 1, tedy poměr počtu adsorbovaných částic na povrchu vzhledem k celkovému počtu částic, tj. při 0,5 sticking koeficientu těchto částic prošlo pouze 50 %, kdežto při 1 sticking koeficientu jich projde 100 %.



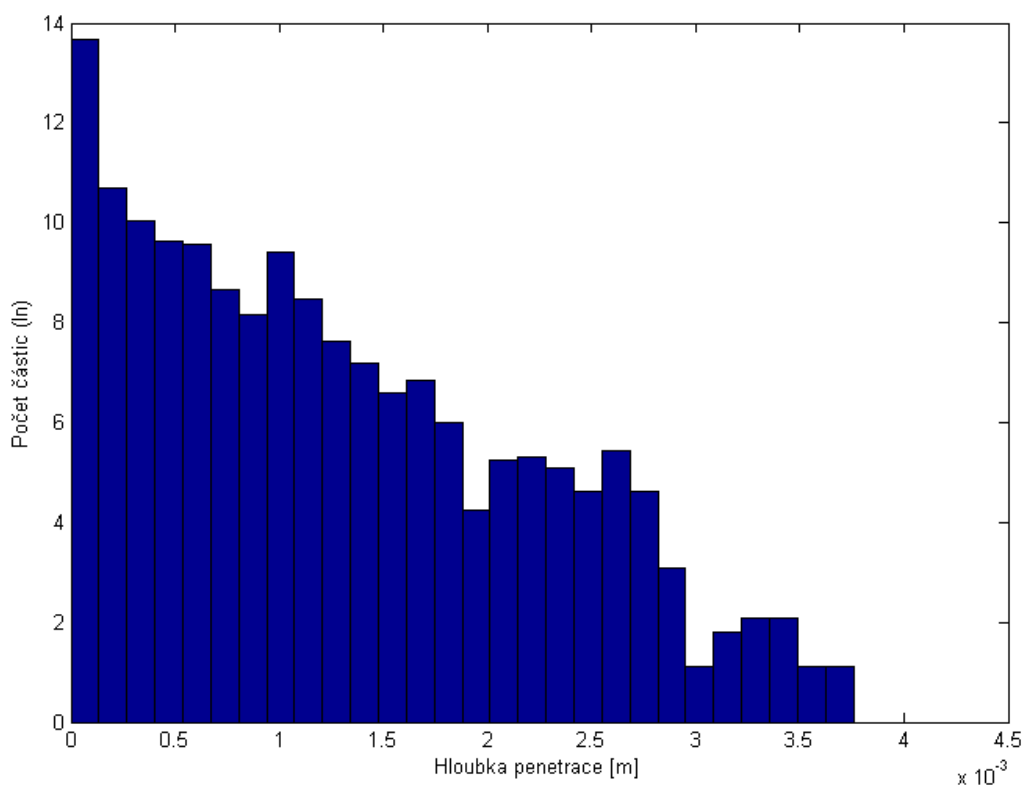
Obrázek 11: Histogram penetrace částic při tlaku 13 Pa a 0,5 sticking koeficientu



Obrázek 12: Histogram penetrace částic při tlaku 133 Pa a 0,5 sticking koeficientu



Obrázek 13: Histogram penetrace částic při tlaku 1330 Pa a 0,5 sticking koeficientu

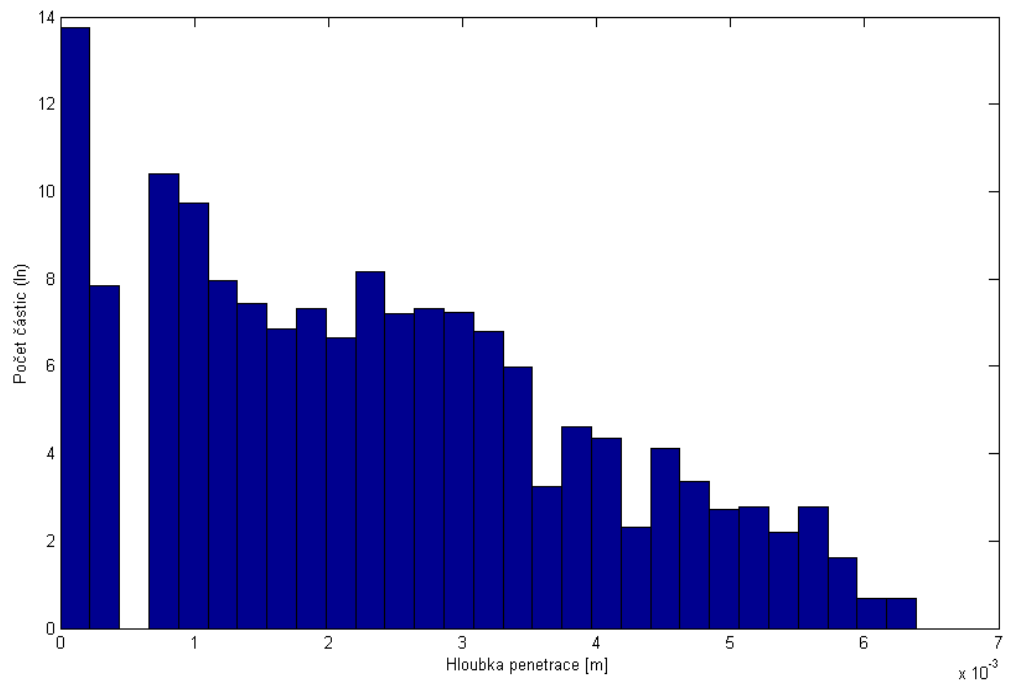


Obrázek 14: Histogram penetrace částic při tlaku 133 Pa a 1 sticking koeficientu

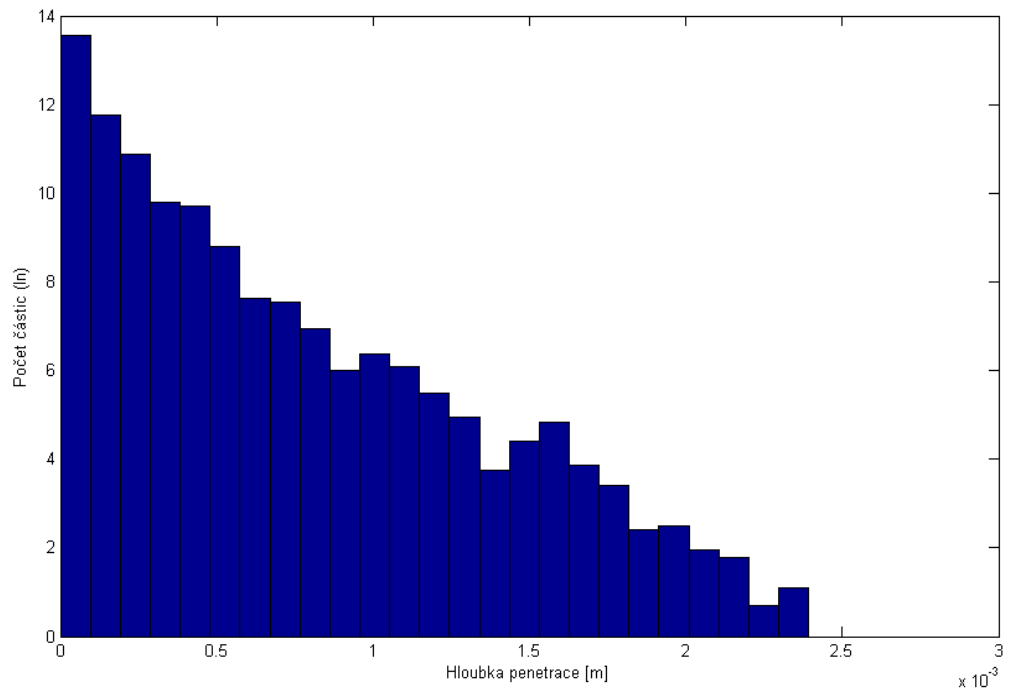
Při porovnání jednotlivých histogramů můžeme dobře pozorovat výrazný vliv tlaku na hloubce penetrace, tedy že se stoupajícím tlakem hloubka penetrace klesá, jedná se tedy o jev nepřímo úměrný.

Dále můžeme také pozorovat na posledním grafu rozdíl při průchodu částic 0,5 a 1 sticking koeficientu při tlaku 133 Pa. Tento rozdíl je takřka neznatelný, tudíž můžeme tvrdit, že sticking koeficient na konečný výsledek nemá téměř žádný vliv.

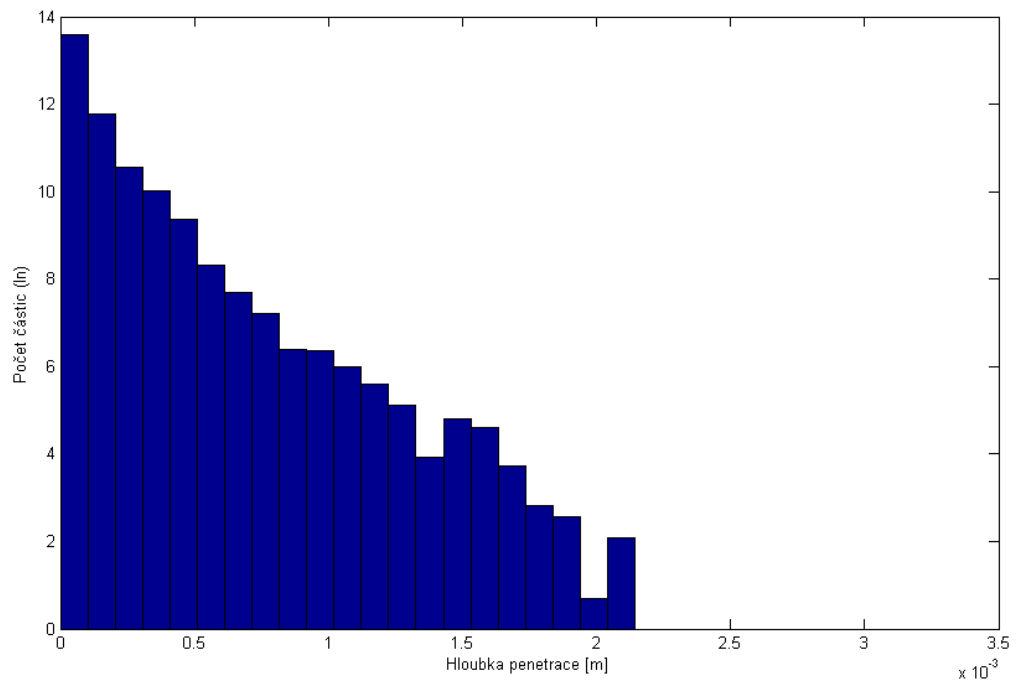
Pro další porovnání jsme zkoumali průchod 10^9 částic pro 200 a 1000 vláken na 1cm x 2 cm o různých tlacích a opět jsme testovali závislost sticking koeficientu.



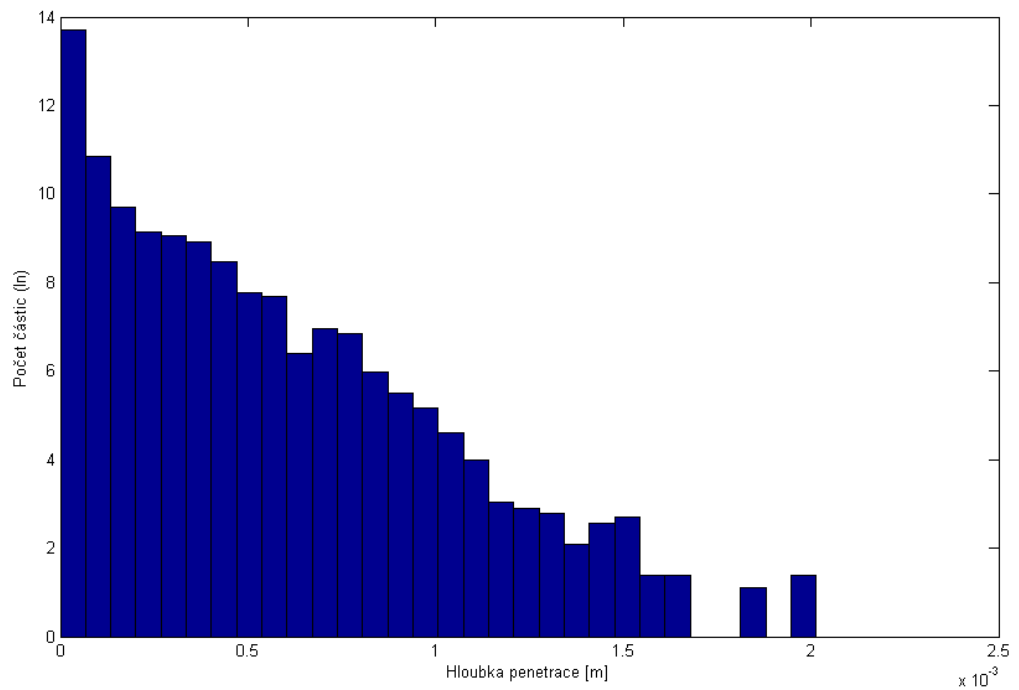
Obrázek 15: Histogram penetrace částic při tlaku 133 Pa a 0,5 sticking koeficientu do struktury 200 vláken



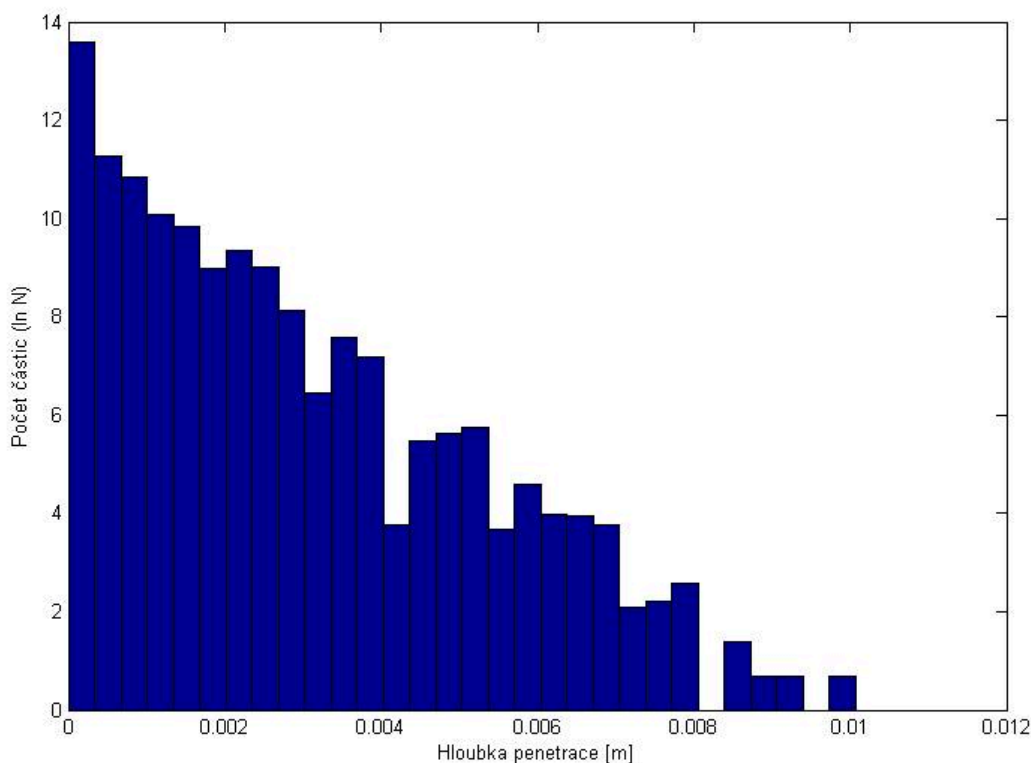
Obrázek 16: Histogram penetrace částic při tlaku 133 Pa a 0,5 sticking koeficientu do struktury 1000 vláken



Obrázek 17: Histogram penetrace částic při tlaku 133 Pa a 1 sticking koeficientu do struktury 1000 vláken



Obrázek 18: Histogram penetrace částic při tlaku 1330 Pa a 1 sticking koeficientu do struktury 1000 vláken

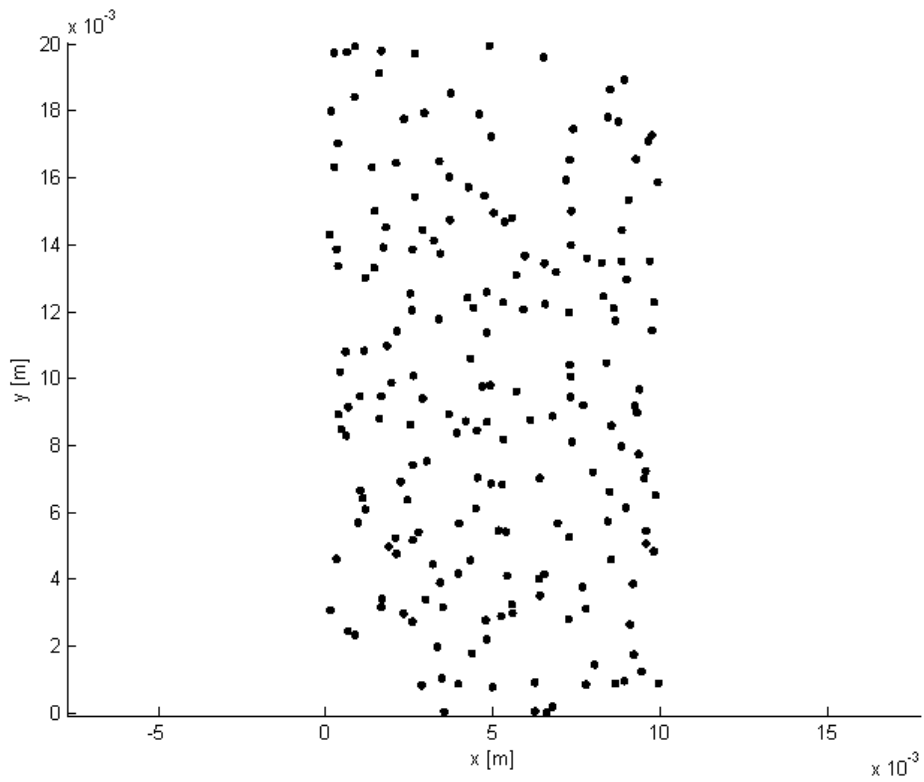


Obrázek 19: Histogram penetrace částic při tlaku 13 Pa a 1 sticking koeficientu do struktury 200 vláken

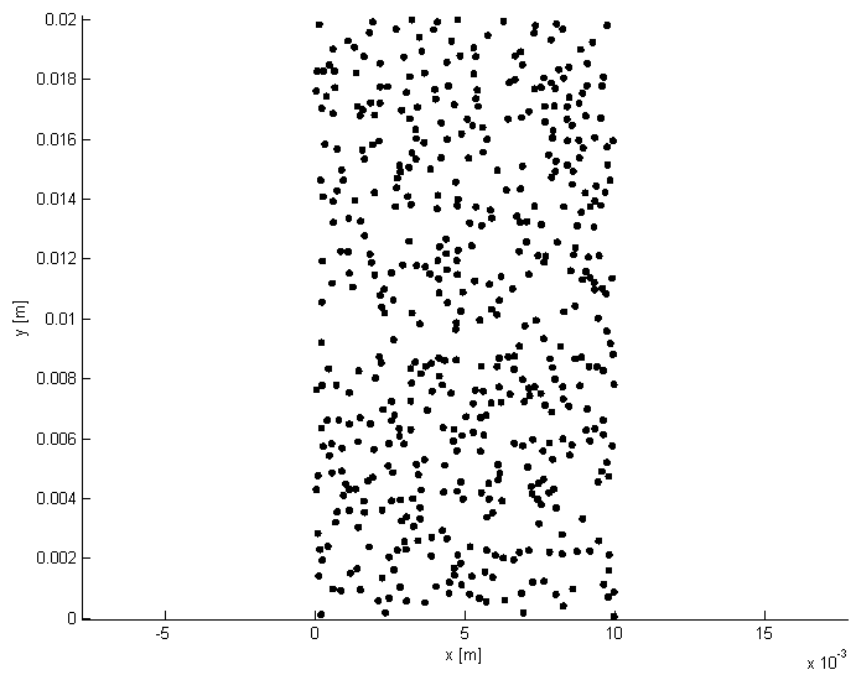
Znovu můžeme pozorovat výraznou změnu hloubky penetrace, a to při průchodu částic do textilie o hustotě 200 a 1000 vláken při tlaku 133, tedy že hloubka penetrace v textili s menším počtem vláken je větší než u hustší textilie (Obrázek 15 a 16).

Dále jsme pro ověření naší teorie vytvořili při testování dva extrémy. Nejprve jsme jako vstupní data použili tlak o 1330 Pa a strukturu 1000 vláken (Obrázek 18). Na histogramu je dobře vidět, že naměřená penetrace je nejnižší. Pro druhý extrém jsme vstupními hodnotami zvolili tlak 13 Pa a strukturu textilie o 200 vláknech. Opět se teorie ověřila, tedy že penetrace při těchto podmínkách je skutečně nejvyšší. To vše při 1 sticking koeficientu.

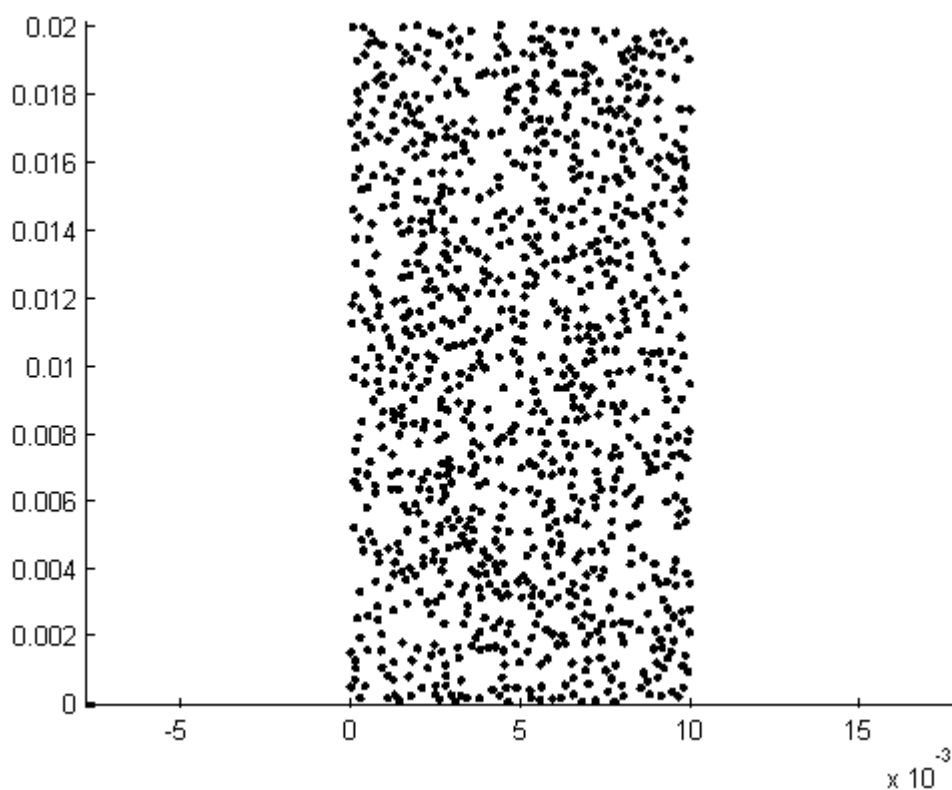
Ukázkové struktury zmíněné v kapitole 4.1 jsou generovány pro hustotu 200, 500 a 1000 vláken (Obrázek 20, 21 a 22).



Obrázek 20: Struktura textilie o 200 vláknech

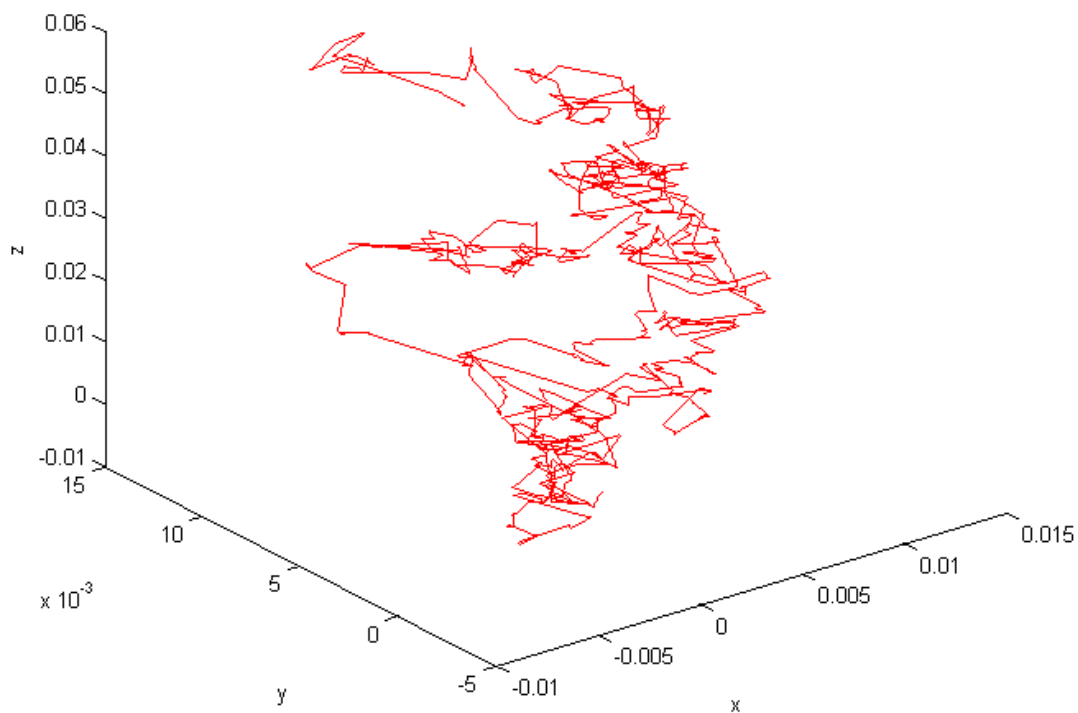


Obrázek 21: Struktura textilie o 500 vláknech

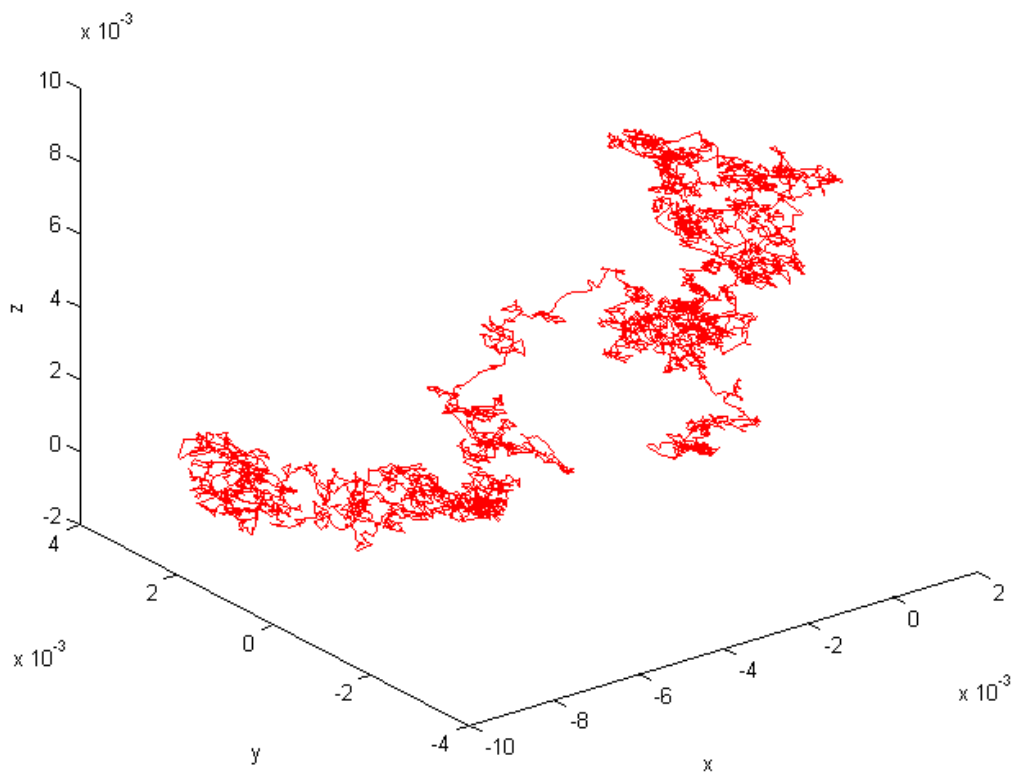


Obrázek 22: Struktura textilie o 1000 vláknech

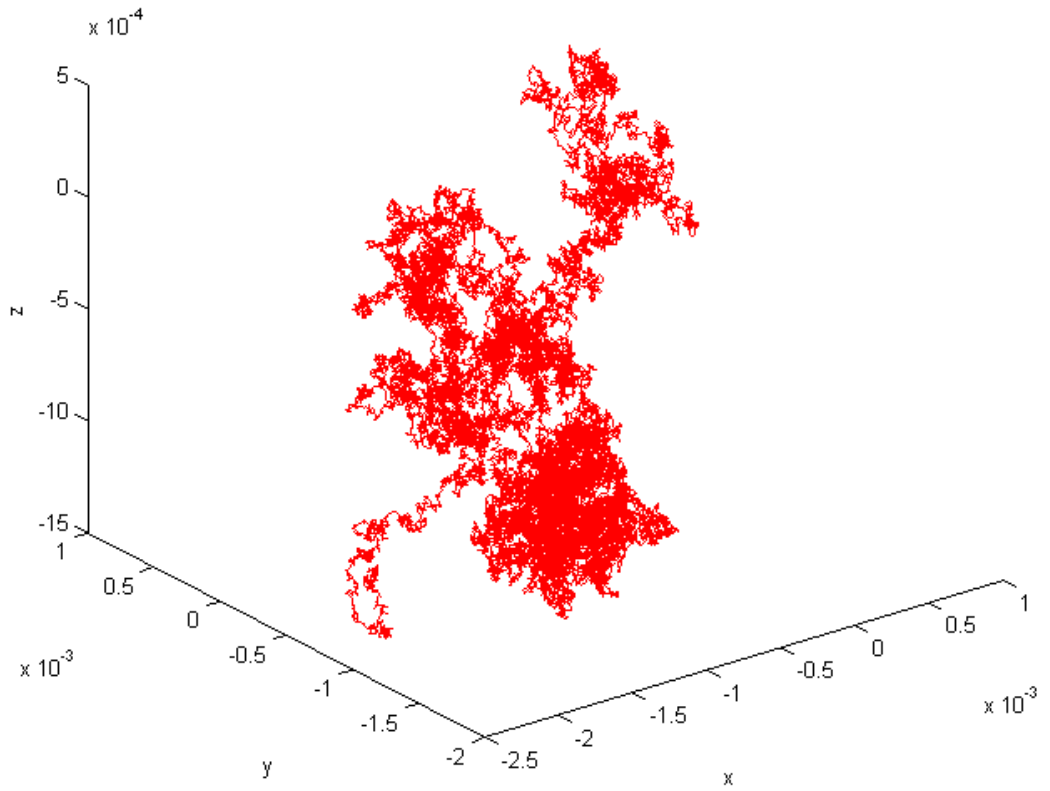
V kapitole 4.3 jsme se zabývali také kreslením trajektorie částice při průchodu vláknem, uvedeným v příloze 4. Tato trajektorie byla generována opět na tlak 13, 133 a 1330 Pa, tentokrát se však pro znázornění využila jedna částice, kterou jsme nastavili jako bod, tedy se zanedbatelnými rozměry. v následujících modelech je tomuto bodu vygenerována trajektorie tentokrát znázorněná ve 3D (Obrázek 23, 24 a 25).



Obrázek 23: Trajektorie jedné částice při průchodu textilií o 500 vlákních za tlaku 13 Pa



Obrázek 24: Trajektorie jedné částice při průchodu textilií o 500 vlákních za tlaku 133 Pa



Obrázek 25: Trajektorie jedné částice při průchodu textilií o 500 vlákních za tlaku 1330 Pa

7 Závěr

Tato bakalářská práce se zabývá obecnou problematikou plazmatu a jeho aplikací. v teoretické části se zabýváme plazmatem a jeho využitím. Dozvěděli jsme se, že jeho využití je celosvětově rozšířené a v současnosti velmi populární, neboť jde o levnou a časově nenáročnou techniku. s využitím plazmatu se setkáváme například v medicíně, kde je užívána k účinnému čištění chirurgických nástrojů, v dermatologii pro ošetřování pleti, v elektronice při zpracování mikrosoučástek, v televizorech, v osvětlení, ošetřování tkanin, dřeva, kovů atp.

Druhá polovina teoretické části je zaměřena na počítačovou modelaci, je zde popsána využitá metoda výpočtu, v našem případě šlo o stochastickou metodu Monte Carlo. v programu je tato metoda kombinována i s deterministickými metodami pro přesnější výpočty. Také jsou zde zmíněny programy využívající se pro počítačovou modelaci, a to konkrétně MALAB a COMSOL Multiphysics.

Jedna z aplikací plazmatu, konkrétně penetrace reaktivních částic do struktury textilie, je zkoumána blíže a tento proces je pak následně modelován v programu MATLAB za využití různých hodnot atmosférického tlaku a koncentrace vláken. Testovány byly i různé sticking koeficienty.

V MATLABu byly generovány vstupní hodnoty a následně proveden výpočet a modelace. Doba této modelace pro 500 vláken se pohybovala zhruba kolem 5 hodin a 30 minut. z výsledných histogramů jsme zjistili, že hloubka penetrace je nepřímo úměrná tlaku využitému při samotném procesu a zároveň je nepřímo úměrná množství vláken, respektive hustotě textilie. Tento projekt je součástí praktické části, kde jsou v kapitole 5 zaznamenány veškeré výsledky a zdrojový kód programu, vytvořeného v MATLABu je uveden v příloze.

Na počátku této práce byl stanoven cíl, který se nakonec podařilo splnit. v teoretické části byly vytvořeny základní mezníky, podle kterých se podařilo realizovat praktickou část, a ověřit tak teorii, která byla stanovena pro tento konkrétní úkol. Vše bylo zdokumentováno, otestováno a realizováno ve finální podobě této práce.

8 Použitá literatura a zdroje

- [1] RNDR. TOMSA, Jan. Základy ionizujícího záření [přednáška k předmětu Biofyzika, obor Všeobecné lékařství, 2. LF UK]. Praha. 27. 11. 2012
- [2] <http://silas.psfc.mit.edu/introplasma/chap1.html>
- [3] <http://www.sukupova.cz/jaky-je-rozdil-mezi-ionizaci-a-excitaci-atomu/>
- [4] http://fyzweb.cz/materialy/bizarni_kramy/ind3.php
- [5] KULHÁNEK, Petr. *Úvod do teorie plazmatu*. Vyd. 1. Praha: AGA, 2011, 375 s. ISBN 9788090458222.
- [6] <http://physics.mff.cuni.cz/kfpp/s4r/plazma/?p=5>
a. [http://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/js11/fyz_chem/web/povrchy/adsorpcce.htm\(7\)](http://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/js11/fyz_chem/web/povrchy/adsorpcce.htm(7))
- [7] VIKOVÁ, Martina, *Fyzikální úpravy povrchu*, LCAM DTM FT TU Liberec
- [8] HUDEČEK, Ondřej, SEDLÁČEK, Tomáš, *Povrchové úpravy plastových výrobků plazmou*, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická.
- [9] KULHÁNEK Petr, *Teorie plazmatu*, Praha, 2009, FJFI ČVUT, pdf
- [10] KOLOUCH, Aleš, *Plazmatické metody pro úpravu povrchů*, Technická univerzita v Liberci
- [11] GAŠIČ, Maja. *Nanášení multifunkčních tenkých vrstev plazmovými tryskami na povrchy různých materiálů*, Přf MU, Brno, 2012
- [12] <http://www.elsevier.com/>
- [13] <http://www.sciencedaily.com/>
- [14] Aalto University. "From cellulose to textile fiber." ScienceDaily. ScienceDaily, 27 November 2013.
www.sciencedaily.com/releases/2013/11/131127110259.htm
- [15] C. X. WANG et al., Influence of pore size on penetration of surface modification into woven fabric treated with atmospheric pressure plasma jet, *Surface & Coatings Technology* 205 (2010) 909–914
- [16] C.X. WANG et al., Penetration depth of atmospheric pressure plasma surface modification into multiple layers of polyester fabrics *Surface & Coatings Technology* 202 (2007) 77–83
- [17] R. MORENT et al., Non-thermal plasma treatment of textiles *Surface & Coatings Technology* 202 (2008) 3427–3449

- [18] HRACH, Rudolf. *Počítačová fyzika I*, UJEP, Ústí nad Labem, 2003.
- [19] BARTOŠ, Petr. *Hybridní modelování ve fyzice plazmatu*, dizertační práce, MFF UK v Praze, Praha, 2003.
- [20] TESAŘ Jiří, BARTOŠ Petr, Metoda Monte Carlo a programovací jazyk MATLAB při přípravě učitelů na pedagogických fakultách, TSP 2005, Pf JCU
- [21] http://sofe2.pepiino.cz/wiki/doku.php?id=principy_metody_monte_carlo
- [22] Ing. DORDA Michal, PhD., Úvod do metody Monte Carlo
- [23] <http://www.humusoft.cz/produkty/matlab/matlab/>
- [24] <http://www.humusoft.cz/produkty/matlab/simulink/>
- [25] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/>
- [26] CHEN, Francis F. *Úvod do fyziky plazmatu*. 1. vyd. Praha: Academia, 1984, 328 s.
- [27] HALLIDAY, David, Robert RESNICK a Jearl WALKER. *Fyzika: vysokoškolská učebnice obecné fyziky*. Brno: VUTIUM, 2000, xvi, 328, [30] s. ISBN 8021418680.
- [28] KAMENECKIJ, Frank. *Plazma-štvrté skupenstvo hmoty*. 1. vyd. Bratislava: SVTL, 1966. 175 s. ISBN 63-014-67
- [29] TVRDÍK, Josef, Viktor PAVLISKA, Petr BUJOK. *Základy modelování v MATLABU*, 1. Vyd, Ostravská univerzita v Ostravě, 2010.
- [30] HERINGOVÁ Blanka, HORA, Petr. *MATLAB*, 1. a 2. díl, H-S, 1995.
- [31] VONDRÁK, Vít. *Úvod do MATLABu*, FEI, VŠB-TU Ostrava, Ostrava, 2012.
- [32] KOLOUCH, Aleš, *Plazmatické metody pro úpravu povrchů*, Technická univerzita v Liberci
- [33] <http://www.mathworks.com/>
- [34] <http://www.sciencedirect.com/>
- [35] <http://www.plasma-polymers.org>
- [36] <http://www.14220.cz/technologie/vyuziti-plazma-v-technologie-1-dil/>
- [37] <http://fyzweb.cz/clanky/index.php?id=73>
- [38] <http://www.mmspektrum.com/clanek/vakuove-a-plazmochemicke-techniky-povrchovych-uprav.html>
- [39] <http://www.truhlarskyportal.cz/clanky/672-zmena-vlastnosti-povrchu-pusobenim-plazmatu>
- [40] <http://www.bodycote.com/cs-CZ/services/surface-technology/plasma-spray.aspx>

- [41] <http://www.pvd.cz/>
- [42] http://www.sandvik.coromant.com/cs-cz/knowledge/materials/cutting_tool_materials/coated_cemented_carbide/pages/coating-%E2%80%93-pvd.aspx
- [43] http://www.vscht.cz/kat/download/lab2_vytvoreni_tenkych_specialnich_vrstev.pdf
- [44] <http://www.orbisnap.com/vrtdesc.html>
- [45] http://ufmi.ft.utb.cz/texty/plazmochemie/PCH_01.pdf
- [46] BARTOŠ Petr, HRACH Rudolf, JELÍNEK Petr, Multidimensional fluid-particle modelling technique in low-temperature argon plasma at low pressure, Department of Surface and Plasma Science, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Praha 2008

Přílohy

Příloha 1

Generátor struktury vláken

```
% Vstupni parametry
polomer = 1e-4;
x_max=100*polomer;
y_max=200*polomer;

pocet_vlaken=500;    % pocet vlaken, ktera budou
nagenerovana

% Definuje matice pro ukladani dat - matice
o lxpocet_vlaken, na zacatku
% same nuly.
S_x=zeros(1, pocet_vlaken);
S_y=zeros(1, pocet_vlaken);

generovat_dalsi_vlakno=0; % bude pracovat tak dlouho,
dokud nebude hodnota rovna jedne.

for i=1:1:pocet_vlaken

    while generovat_dalsi_vlakno==0 % bude pracovat tak
dlouho, dokud nebude hodnota rovna jedne.

        x=x_max*rand(1,1);        % nageneruje nahodnou
polohu
        y=y_max*rand(1,1);

        vzdalenost=sqrt((S_x-x).^2 + (S_y-y).^2); %
vypocita vzdalenosti nagenerovaneho bodu od jiz
nagenerovanych stredu. Na zacatku od nuly.
        index=find(vzdalenost<=2*polomer);        % porovna,
pokud by se vlakna protinala, tak vypocet zopakje (tj.
nezemeni hodnotu generovat_dalsi_vlakno na jedna)

        if isempty(index)
            S_x(i)=x;
            S_y(i)=y;

            generovat_dalsi_vlakno=1;    %nastal uspesny
pokus
        end

    end

end

generovat_dalsi_vlakno=0; % reset
```

```

end

uhel_fi=0:pi/50:2*pi;
x_kruh=polomer*cos(uhel_fi);
y_kruh=polomer*sin(uhel_fi);
x_kruh=[x_kruh x_kruh(1)];
y_kruh=[y_kruh y_kruh(1)];

for i=1:1:pocet_vlaken
    patch(S_x(i)+x_kruh, S_y(i)+y_kruh, [0,0,0]);
    hold on
end

axis equal % rovnost os - nedeformuje zobrazeni.

save data.mat S_x S_y x_max y_max polomer

```

Příloha 2

Penetrace do vláken

```

%
*****
*****
%
*****
*****
% Tady zacina modelovani pronikani castic do struktury.
Tento usek je
% spolecny pro oba dva pripady, tj. pro rovnomerne
nerovnomerne rozlozeni
% castic v pracovni oblasti.
% Castice jsou generovany na urovni y=0, tj. y-ova osa
udava hloubku
% penetrace.

% Nacteni dat ziskanych vypoctem programu
generovani_struktury.m
clear all
clc
load data.mat
global sticking_koeficient

v_0=100; % rychlost castic
lambda_0=8e-5; % 133 Pa 2.5e-4 pro 13 Pa,
2.5e-5 pro 1330 Pa, 8e-5 pro 133 Pa

```

```

delta_t=1e-8;
pocet_kroku=1e6;
sticking_koeficient=0.5;      % veličina rika, kolik
procent castic je zachyceno na povrchu vlakna;   hodnota 1
= vsechny castice jsou zachyceny

x_min=0;
y_min=0;

% y-ova souradnice me vubec nezajima, castice at si lita
jak chce, je to ve smeru vlaken

z_min=0;
zmax=0;

tlouska_vrstvy=2*polomer;
pocet_vrstev=floor(y_max/tlouska_vrstvy);

for vrstva=1:1:pocet_vrstev
    index=find(S_y>(tlouska_vrstvy*(vrstva-1) - polomer) &
S_y<=(tlouska_vrstvy*vrstva + polomer) );
    Stred_x{vrstva}=S_x(index);
    Stred_y{vrstva}=S_y(index);
end

% matice pro ukladani dat - tato cast se da predelat pomoci
zeros!
souradnice_dopad_x=zeros(1, pocet_kroku);
souradnice_dopad_y=zeros(1, pocet_kroku);

for cislo_castice=1:1:pocet_kroku

    cislo_castice

    % rozehraje polohy castice a otestuje, zda se netrefila
tato poloha do vlakna. v tom pripade nageneruje novou
polohu.
    mimo_vlakno=0;
    while mimo_vlakno==0
        x=(x_max-x_min)*rand(1,1);
        y=0;   % pro dalsi vypocet je dulezite jen kvuli
zmensovani stredni volne drahy
        z=0;

```

```

        % otestuje, zda nove nagenеровana castice nelezi
        uvnitr vlakna. Jinak nagenерuje jinou.
        vzdalenost=sqrt((Stred_x{1}-x).^2+(Stred_y{1}-
y).^2);
        index=find(vzdalenost<=polomer);

        if isempty(index)==0
            mimo_vlakno=0;
        else
            mimo_vlakno=1;
        end
    end

    % generuje rychlost vцetne slozek rychlosti
    provedeno=0;
    while provedeno==0
        x_pom=2*rand(1,1)-1;
        y_pom=2*rand(1,1)-1;
        z_pom=2*rand(1,1)-1;
        r=sqrt(x_pom.^2+y_pom.^2+z_pom.^2);

        if r<=1
            v_x=v_0*x_pom/r;
            v_y=abs(v_0*y_pom/r); % rozehraje pouze
v kladnem smeru, kde se nachazi pracovni oblast.
            v_z=v_0*z_pom/r;
            provedeno=1;
        end
    end

    lambda=-lambda_0*log(rand(1,1));

    dopad=0;
    while dopad==0

        x_old=x;
        y_old=y;
        z_old=z;

        x=x+v_x*delta_t;
        y=y+v_y*delta_t;
        z=z+v_z*delta_t;
    end
end

```

```

% srazkove procesy
dist=sqrt((x_old-x).^2+(y_old-y).^2+(z_old-z).^2);
lambda=lambda-dist;
if lambda<0
    lambda=-lambda_0*log(rand(1,1)); %generuje
novou nahodnou volnou drahu

    % nageruje novou rychlost
    provedeno=0;
    while provedeno==0
        x_pom=2*rand(1,1)-1;
        y_pom=2*rand(1,1)-1;
        z_pom=2*rand(1,1)-1;
        r=sqrt(x_pom.^2+y_pom.^2+z_pom.^2);

        if r<=1
            v_x=v_0*x_pom/r;
            v_y=v_0*y_pom/r;
            v_z=v_0*z_pom/r;
            provedeno=1;
        end
    end
end

%setri opusteni pracovni oblasti
if x<x_min+polomer
    v_x=abs(v_x);
end
if x>x_max-polomer
    v_x=-abs(v_x);
end
if y<y_min
    dopad=1;
    break
end
if y>y_max
    dopad=1;
    souradnice_dopad_x(1, cislo_castice)=x;
    souradnice_dopad_y(1, cislo_castice)=y;
    break
end

% test, zda castice dopadla na kouli. Nejprve
se zvolí vrstva, ve které se castice nachází, poté
se rozhodne, zda dopadla na povrch.
if y<0
    vrstva=1;
else

```



```

vrstva=floor(y/tlouska_vrstvy)+1; %prideli
vrstvu
end

vzdalenost=sqrt((Stred_x{vrstva}-
x).^2+(Stred_y{vrstva}-y).^2);
index=find(vzdalenost<=polomer);

if isempty(index) % castice se nenachazi uvnitr
koule, muze se s ni znovu pohnout
dopad=0;
else % castice dopadla na vlakno - bud se pohlti
nebo odrazi

nahodne_cislo=rand(1,1); % rozhoduje o tom,
jeslti se castice odrazi neo zustane na povrchu vlakna
if nahodne_cislo <= sticking_koeficient %
castice je zachycena na povrchu vlakna a nepokracuje
v pohybu
dopad=1;
souradnice_dopad_x(1, cislo_castice)=x;
souradnice_dopad_y(1, cislo_castice)=y;

else % castice se odrazi
[x, y, z, v_x, v_y,
v_z]=odraz_od_castice(x, y, z, Stred_x{vrstva}(index),
Stred_y{vrstva}(index), v_0, polomer);

end
end % end if

end

% hist(souradnice_dopad_y(1:1:cislo_castice), 30)
% drawnow

% if mod(cislo_castice, 10)==0
% disp(cislo_castice)

nejvetsi=max(souradnice_dopad_y);
edges=linspace(0, nejvetsi, 31);
n=histc(souradnice_dopad_y, edges);

```

```

        zl=log(n);

        if cislo_castice>=pocet_kroku
            figure
            bar(edges, zl, 'histc')
%           semilogy(edges(1:1:length(edges)),
n(1:1:length(edges)))
%           axis([0 nejvetsi+0.0001 0 100])
%           drawnow
            end

%       end

%       if mod(cislo_castice, 500)==0
%           save vystup2.mat
%       end

% prubezne ukladani dat pro zpracovani
if mod(cislo_castice, 1e5)==0
    retezec_pom=num2str(cislo_castice);
    nazev_souboru=['vystup_' retezec_pom '_kroku.mat']
    save(nazev_souboru)
end

end % konci for

```

Příloha 3

Odraz od částice

```

function [x, y, z, v_x, v_y, v_z]=odraz_od_castice(x, y, z,
stred_vlakna_x, stred_vlakna_y, v_0, polomer)

r_x=x-stred_vlakna_x;
r_y=y-stred_vlakna_y;
r_z=z-0;

r=[r_x r_y r_z];

provedeno2=0;
while provedeno2==0

```

```

provedeno=0;
while provedeno==0
    x_pom=2*rand(1,1)-1;
    y_pom=2*rand(1,1)-1;
    z_pom=2*rand(1,1)-1;
    r=sqrt(x_pom.^2+y_pom.^2+z_pom.^2);

    if r<=1
        v_x=v_0*x_pom/r;
        v_y=abs(v_0*y_pom/r); % rozehraje pouze
v kladnem smeru, kde se nachazi pracovni oblast.
        v_z=v_0*z_pom/r;
        provedeno=1;
    end
end

v=[v_x v_y v_z];

norma_r=sqrt(r_x^2+r_y^2+r_z^2);
norma_v=sqrt(v_x^2+v_y^2+v_z^2);

uhel=acos((v.*r)/(norma_r.*norma_v));

if uhel<=pi/2
    v_x=v_0*x_pom/r;
    v_y=abs(v_0*y_pom/r); % rozehraje pouze v kladnem
smeru, kde se nachazi pracovni oblast.
    v_z=v_0*z_pom/r;
    provedeno2=1;
end
end

% presun bodu na okraj vlakna
pomer=polomer/norma_r;
x=pomer*(x-stred_vlakna_x)+stred_vlakna_x;
y=pomer*(y-stred_vlakna_y)+stred_vlakna_y;

```

Příloha 4

Kreslení trajektorie

```

clear all
clc

tlak=1330;
casovy_krok=1e-8;

```

```

v=683;

% Hodnoty pro vypocitani volne drahy
lambda_133=8e-5;      % volna draha pri tlaku 133 Pa
p_133=133;           % tlak
k_B=1.38e-23;       % Boltzmannova konstanta
T=300;              % teplota

prumer_molekuly=sqrt(k_B*T/(sqrt(2)*pi*p_133*lambda_133));

% vypocet stredni volne drahy na zaklade pro dany tlak
stredni_lambda=k_B*T/(sqrt(2)*pi*prumer_molekuly*prumer_mol
ekuly*tlak);

x=0;
y=0;
z=0;

[v_x, v_y, v_z] = generator_smeru(v);
lambda = -stredni_lambda*log(rand(1,1));

for pocitadlo=1:1:1e5

    % provede pohyb castice
    x_old(pocitadlo)=x;
    y_old(pocitadlo)=y;
    z_old(pocitadlo)=z;

    x = x + v_x*casovy_krok;
    y = y + v_y*casovy_krok;
    z = z + v_z*casovy_krok;

    posun = sqrt((x-x_old(pocitadlo)).^2+(y-
y_old(pocitadlo)).^2+(z-z_old(pocitadlo)).^2);

    % zmensi nahodnou volanou drahu a pokud nastala
srazka, tak
    % generuje jinou

    lambda=lambda-posun;
    if lambda <0
        lambda = -stredni_lambda*log(rand(1,1));
        [v_x, v_y, v_z] = generator_smeru(v);
    end
end
end

```

```

plot3(x_old,y_old,z_old,'r')
xlabel('x');
ylabel('y');
zlabel('z');
title('13')

view([0, 90])
axis([-2e-2 2e-2 -2e-2 2e-2])
axis equal

```

Generátor směru

```

function [v_x, v_y, v_z]=generator_smeru(v)

ukoncit_generovani=0;
while ukoncit_generovani==0
    smer=2*rand(1,3)-1;

    %     Zde by teoreticky melo byt
    %
    velikost=sqrt(smer(1,1).^2+smer(1,2).^2+smer(1,3).^2);
    %     ale odmocnina z cisla vetsiho nez jedna dava hodnotu
    %     vetsi nez jedna a naopak. Vyrazne tak urychli vypocet
    %     Odmocni se az konecna hodnota

    velikost=(smer(1,1).^2+smer(1,2).^2+smer(1,3).^2);

    if ((velikost<1) & velikost~=0)

        velikost=sqrt(velikost);
        v_x=v*smer(1,1)/velikost;
        v_y=v*smer(1,2)/velikost;
        v_z=v*smer(1,3)/velikost;

        ukoncit_generovani=1;

    end

end
end

```