

Název:	Biotermodynamika
Zkratka:	NMMO531 (MOD17)
Typ:	
Rozsah:	týdně 2 hodiny přednášek + 2 hodiny seminárních cvičení , zimní semest přednášeno každý druhý rok
Kredity:	
Způsob ukončení:	zkouška
Katedra:	Matematické modelování, MFF UK
Přednášející:	Prof. Ing. František Maršík, DrSc

Stručná anotace předmětu:

Předmět pojednává o modelování biologických systémů a jejich částí. Otevřený biologický systém, vyměňuje se svým okolím hmotu, hybnost a energii, které vnitřními mechanizmy využívá pro zachování své existence. Obecný biologický systém je složen z pevných komponent (kosti, chrupavky), měkkých tkání (svaly, tuky) a tekutin (krev, sinovialní tekutiny) a proto je třeba při popisu vycházet z obecných zákonitostí mechaniky a termodynamiky těles a tekutin. Výchozími jsou zákony bilance hmoty (chemické reakce), bilance hybnosti (silové působení svalů), bilance energie (transformace různých forem energií mezi sebou) a bilance entropie (směry přeměny energií a látek).

Získané kompetence:

Student vybavený základními pojmy a metodami biotermodynamiky je schopen analyzovat i složité mechanické a biochemické procesy probíhající v živé hmotě, např. při diagnostice a léčení chorob kardiovaskulárního systému a poruchách skeletu, při návrhu mechanických náhrad tepen, kloubů a v neposlední řadě i při vývoji a aplikaci metod tkáňového inženýrství.

Témata přednášek:

Základní termodynamické pojmy, fenomenologická a mikroskopická interpretace vnitřní energie a entropie. Zákony bilance vícekomponentních chemicky reagujících systémů, tj. bilance hmotnosti - popis chemicky reagujících směsí, bilance hybnosti, vnitřní energie (I. zákon termodynamiky), bilance elektrického a magnetického indukčního toku a bilance entropie (II. zákon termodynamiky).

Souvislost vnitřní struktury systému a jeho fenomenologických vlastností, tj. elasticita, viskoelasticita, difuzivita, tepelná a elektrická vodivost apod.

Důsledky principu minimální produkce entropie na materiálové vlastnosti biologických systémů. Lineární nevratná termodynamika a základy chemické kinetiky a chemické termodynamiky.

Náplň cvičení:

Konkrétní aplikace obecných principů a metod budou probírány formou cvičení: Enzymová kinetika Michaelise-Mentenove, termodynamika membránového transportu, generace mechanické síly ve svalu-výkon srdečního svalu, pulzační proudění krve v elastických trubicích (tepnách a žilách), model srdečně cévního systému člověka, modely přestavby (remodelace) kostí vlivem výživy a mechanické zátěže.

Literatura:

- [1] Alberts B., Bray D. a kol.: Základy buněčné biologie, Espero Publishing, Ústí nad Labem 2001
- [2] Humprey Jay D., Delange Sherry L: Introduction to Biomechanics, Solids and Fluids, Analysis and Design, Springer, N.Y., 2004
- [3] Humprey Jay D.: Cardiovascular Solid mechanics, Cells, Tissues, and Organs, Springer N.Y., 2002
- [4] Valenta J. a kol. Biomechanika, Academia 1985
- [5] Maršík F, Dvořák I. : Biodynamika, Academia 1998
- [6] Kodíček M. Karpenko V.: Biofyzikální chemie Academia 2000

3. Najděte vztah pro odpor proudící krve v tepně o poloměru a za předpokladu laminárního proudění. Krev považujte za nestlačitelnou tekutinu s hustotou ρ , s konstantní viskozitou^{3.1} $\mu = konst.$

Řešení: **3.** Proudění nestlačitelné Newtonské tekutiny je popsáno zákony bilance hmotnosti

$$\frac{\partial v^i}{\partial x^i} = \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (3.1)$$

a bilance hybnosti

$$\rho \dot{v}^i + \frac{\partial p}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^l} t_{dis}^{il}, \quad (3.2)$$

pro konstitutivní vztah

$$t_{dis}^{il} = 2\mu d^{(o)il}, \quad d^{(o)il} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v^i}{\partial x^l} + \frac{\partial v^l}{\partial x^i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v^k}{\partial x^l} \delta^{il} \right). \quad (3.3)$$

Po dosazení konstitutivního vztahu (3.3) do bilance hybnosti (3.2) za podmínky (3.1) dostáváme

$$\rho \dot{v}^i + \frac{\partial p}{\partial x^i} = \mu \frac{\partial^2 v^i}{(\partial x^l)^2} = \mu \Delta v^i. \quad (3.4)$$

Za předpokladu stacionárního proudění ve válcových souřadnicích r, φ, z mají rovnice (3.1) a (3.4) tvar

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (3.5)$$

$$v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_\varphi \frac{\partial v_\varphi}{r \partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{v_\varphi^2}{r} + \frac{\partial p}{\rho \partial r} = \nu \left(\Delta v_r - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} \right), \quad (3.6)$$

$$v_r \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + v_\varphi \frac{\partial v_\varphi}{r \partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} + \frac{v_r v_\varphi}{r} + \frac{\partial p}{\rho r \partial \varphi} = \nu \left(\Delta v_\varphi - \frac{v_\varphi}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} \right), \quad (3.7)$$

$$v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_\varphi \frac{\partial v_z}{r \partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial p}{\rho \partial z} = \nu \Delta v_z, \quad (3.8)$$

pro

$$\Delta v = \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}, \quad (3.9)$$

přičemž $\nu = \mu/\rho$ je kinematická viskozita krve.

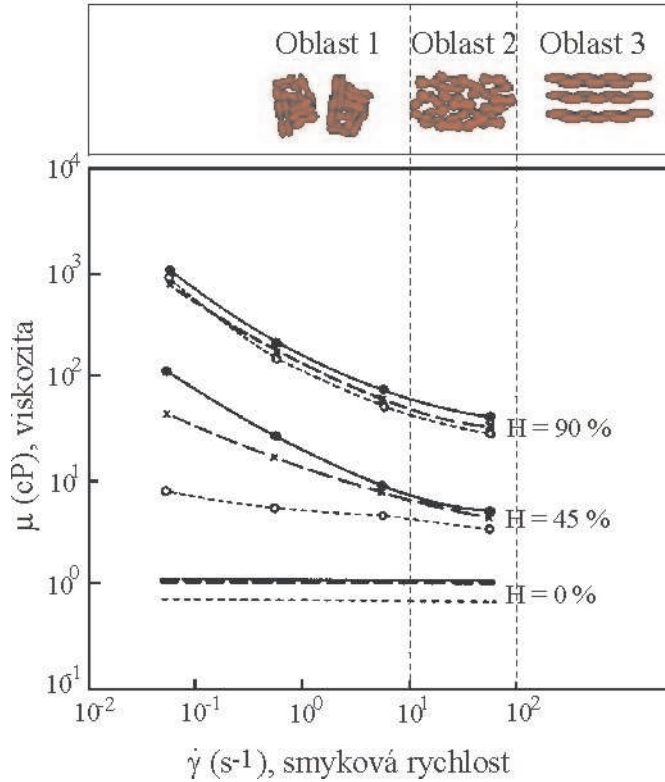
^{3.1}Ve skutečnosti je krev tixotropní tekutina, tzn., že její viskozita roste (více jak 10x) s klesající rychlostí deformace $\dot{\gamma} = \frac{\partial v_x}{\partial y}$, viz obr. 3.1. Viskozita krve roste i s nárůstem hematokritu H , $H\% = \frac{V - V_{cell}}{V} \cdot 100$ je objemové zastoupení buněk V_{cell} (hlavně červených krvinek) v krvi.

Předpokládejme pro jednoduchost osově symetrické proudové pole $\mathbf{v} = (0, 0, v_z)$ závislé jen na r, z , značíme $v_z = v(r, z)$. Rovnice bilance hmotnosti (3.5) a hybnosti (3.8) mají tvar

$$\frac{\partial v}{\partial z} = 0, \quad \text{tj.} \quad v = v(r), \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\mu}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dv}{dr} \right) = A = \text{konst}, \quad (3.11)$$

$$\text{resp.} \quad p = Az + B.$$



Obrázek 3.1: Závislost viskozity lidské krve na smykové rychlosti $\dot{\gamma}$ a hematokritu H . Viskozita krevní plazmy ($H = 0\%$) je $1,2 \text{ cP}$. (Viskozita čisté vody je $0,8 \text{ cP}$, 1 cP (centipoise) = $10^{-3} \frac{\text{N}\cdot\text{s}}{\text{m}^2}$).

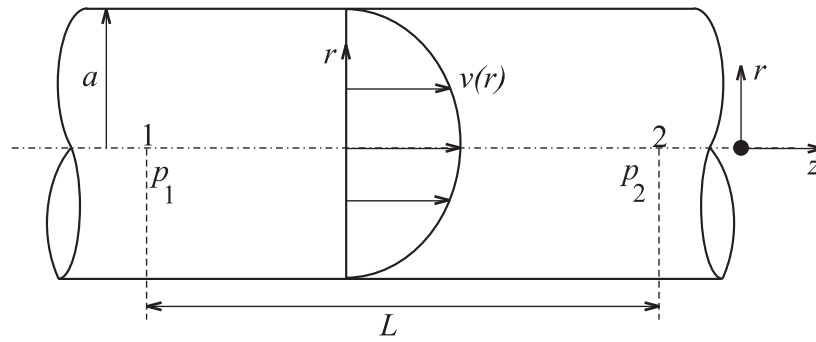
• ———• viskozita celé krve, \times — — — \times krev zbavená fibrinu (bílkoviny vznikající při srážení krve), $\circ \cdots \cdots \circ$ propláchnuté krevní buňky v Ringerově roztoku.

Označíme-li p_1 a p_2 ($p_1 > p_2$) tlaky ve dvou místech na ose z (viz obr. 3.2), jejichž vzdálenost je L , je tím již určena konstanta A a tím i tlakový spád $\frac{\partial p}{\partial z}$. Platí

$$A = -\frac{p_1 - p_2}{L}, \quad (3.12)$$

takže rovnice (3.11) má nyní tvar

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dv}{dr} \right) = -\frac{p_1 - p_2}{\mu L}. \quad (3.13)$$



Obrázek 3.2: Laminární proudění válcovou trubicí

Dvojitou integrací této rovnice dostáváme po rychlost vyjádření

$$v = -\frac{p_1 - p_2}{4\mu L} r^2 + C_1 \ln r + C_2. \quad (3.14)$$

Zde vystupují dvě integrační konstanty, ale k jejich určení máme jedinou okrajovou podmínku

$$v = 0 \quad \text{pro} \quad r = a, \quad (3.15)$$

kde a je poloměr trubice. Abychom určili obě integrační konstanty v rovnici (3.14), připojíme k tomuto řešení "přirozený" požadavek, aby totiž rychlost v byla v celém průřezu konečná. Pro střed průřezu $r = 0$ logaritmický člen diverguje a proto musíme položit $C_1 = 0$, abychom splnili právě uvedený požadavek. Použitím podmínky (3.15) pak snadno určíme zbývající konstantu C_2 . Konečný tvar řešení je tedy

$$v = \frac{p_1 - p_2}{4\mu L} (a^2 - r^2). \quad (3.16)$$

Dostali jsme "parabolický zákon" rozdělení rychlostí.

Známe-li rychlost v v každém bodě průřezu, není již obtížné určit střední rychlost \bar{v} nebo objem F tekutiny, která projde průřezem za jednotku času, popř. i veličiny charakterizující disipaci energie resp. tok tepla. Zde si jen vypočítáme \bar{v} a F .

Hodnotu střední rychlosti dostaneme, když sečteme rychlosti po celém průřezu a výsledek vydělíme plochou průřezu; tak dostáváme

$$\bar{v} = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a v \cdot 2\pi r dr = \frac{p_1 - p_2}{8\mu L} a^2. \quad (3.17)$$

Z rovnice (3.16) je vidět, že největší rychlost proudění je v ose válce, tj. pro $r = 0$, a že \bar{v} je právě polovinou největší rychlosti.

Pro hodnotu objemového toku F plyne

$$F = \int_0^a v \cdot 2\pi r dr = \pi a^2 \bar{v} = \pi \frac{p_1 - p_2}{8\mu L} a^4 \quad \left[\frac{m^3}{s} \right]. \quad (3.18)$$

To je *Hagenův-Poiseuilleův zákon*, který slovy lze vyjádřit takto: Množství tekutiny, které projde plochou kruhového průřezu za jednotku času, je přímo úměrné tlakovému spádu a čtvrté mocnině poloměru trubice a je nepřímo úměrné dynamickému koeficientu vazkosti. Zákon (3.18) můžeme přepsat do tvaru

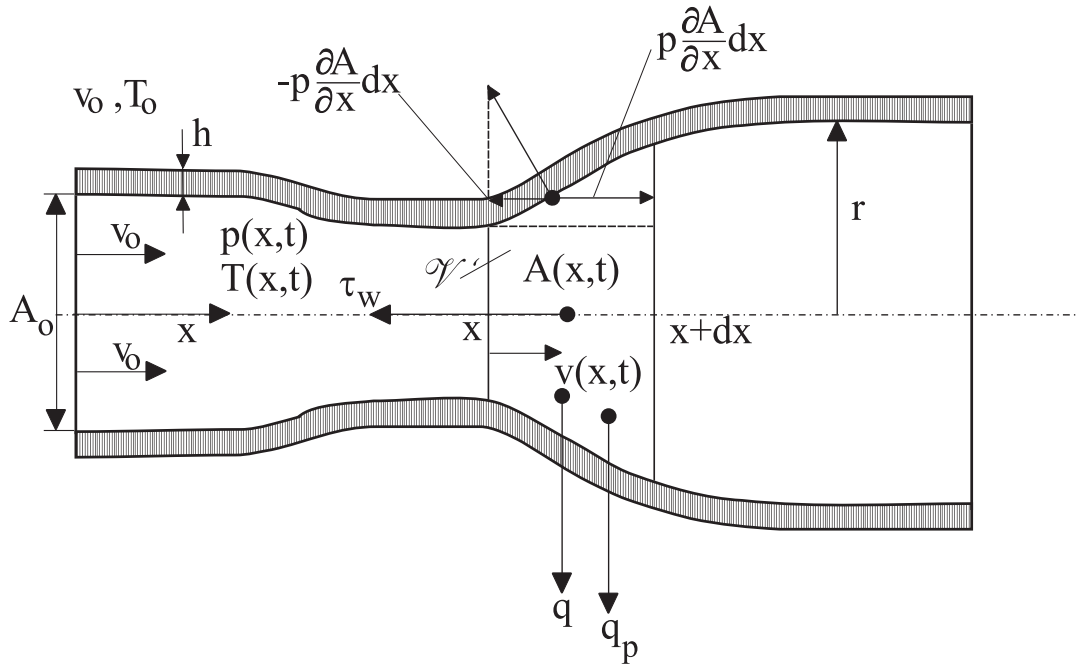
$$R = \frac{8\mu L}{\pi a^4}, \quad \text{resp.} \quad (p_1 - p_2) = RF, \quad (3.19)$$

kde R je odpor trubice (tepny, žíly) o délce L a poloměru a . Je pak analogický Ohmovu zákonu elektrických obvodů.

Při použití tohoto zákona je nutno si uvědomit, že byl odvozen za předpokladu, že se částice tekutiny pohybují přímočaře a rovnoběžně s osou trubice, čili že jde o pohyb laminární. Je-li proudění turbulentní, které se vyznačuje neuspořádaností pohybu částic, nemůžeme tyto vzorce použít, viz dále. Použitelnost vzorce (3.18) je tedy vázána na podmínku, že Reynoldsovo číslo $Re = \frac{2av\rho}{\mu}$ charakterizující proudění uvažované tekutiny je menší než kritické Reynoldsovo číslo Re_{krit} . Přejmeme-li, že $Re_{krit} = 2300$ (ve velmi hladkých trubkách dokonce 1000), snadno se přesvědčíme, že ve většině technicky důležitých případů je proudění kapalin potrubím turbulentní. Na druhé straně je podmínka $Re < Re_{krit}$ splněna při proudění tekutin kapilárními trubicemi (zřejmě vzhledem k tomu, že a , v jsou velmi malé). V tomto případě lze určit dynamický koeficient vazkosti μ podle (3.18).

Poznámka (historická). K zákonu (3.18) dospěli na základě experimentálních měření téměř současně a přitom nezávisle německý inženýr HAGEN (r. 1839) a francouzský lékař a fyzik POISEUILLE (r. 1840), který studoval pohyb krve v žilách.

4. Odvoďte rovnice kvazijednorozměrného proudění tekutiny elastickou trubicí o průřezu $A(x)$, viz obr. 4.1. Vně trubice je konstantní tlak p_o a teplota T_o a



Obr. 4.1: Kvazijednorozměrné proudění elastickou trubicí

uvnitř tlak $p(x, t)$ a teplota $T(x, t)$. Předpokládáme-li, že

- i) proudící tekutina, která má hustotu ρ , je nestlačitelná, takže $\frac{\partial p}{\partial \rho} = 0$.
- ii) Stěna trubice o tloušťce h je elastická, takže

$$p - p_o = \frac{4hE}{3a} \left[\left(\frac{A}{A_o} \right)^\alpha - 1 \right] \quad (4.1)$$

kde $A = \pi a^2$ je počáteční průřez trubice s poloměrem $r = a$ a E je elastický modul. Exponent α je podle lineární teorie elasticity roven $1/2$, v biologických materiálech (tepnách) je často $\alpha > 1/2$.

- iii) $q \left[\frac{W}{m^2} \right]$, $q_s \left[\frac{kg}{m^2s} \right]$, $\tau_w \left[\frac{N}{m^2} \right]$ vyjadřují postupně odvod tepla, hmoty a hybnosti (tření o stěnu) z proudící tekutiny.

Řešení: 4. Napíšeme rovnice bilance hmotnosti, hybnosti a celkové energie $e = u + \frac{v^2}{2}$, ($u = c_v T$ je vnitřní energie tekutiny) pro elementární objem trubice \mathcal{V}' , viz obr. 4.1

$$\overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho dv} = 2\pi r q_\rho dx, \quad (4.2)$$

$$\overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho v dv} + p|_A^{A+\frac{\partial A}{\partial x} dx} - p \frac{\partial A}{\partial x} dx = -2\pi r \tau_w dx, \quad (4.3)$$

$$\overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho e dv} + (pv)|_A^{A+\frac{\partial A}{\partial x} dx} = 2\pi r q dx. \quad (4.4)$$

Zdrojové členy jsou na pravé straně a tlak p jako povrhová síla působící ve směru normály. Uvážíme-li problém jako jednorozměrný je element objemu trubice $dv = A(x, t)$ a materiálová derivace objemu \mathcal{V}' je např. v rovnici bilance hybnosti (4.3) rovna dx

$$\overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho v dv} = \overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho v A dx} = \overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho v A dx} + \overline{\int_{\mathcal{V}'} \rho v A dx} = \overline{\int_{\mathcal{V}'} \left[\frac{\partial}{\partial t} (A\rho v) + \frac{\partial}{\partial t} (A\rho v^2) \right] dx}. \quad (4.5)$$

Zde jsme využili definice materiálové derivace $(\dot{}) = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}$ a $\overline{dx} = \frac{\partial x(X, t)}{\partial X} dX = \frac{\partial v}{\partial X} dX = \frac{\partial v}{\partial x} dx$, $x = x(X, t)$ je trajektorie materiálového bodu, který byl v čase $t = 0$ v poloze $x = X$.

Užitím identity (4.5) můžeme zákony bilance (4.2) až (4.4) psát v kompaktním tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} A\rho \\ A\rho v \\ A\rho e \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} A\rho v \\ A(\rho v^2 + p) \\ A(\rho e + p)v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \frac{\partial A}{\partial x} + 2\pi r q_\rho \\ 2\pi r \tau_w \\ 2\pi r q \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Uvedené tři rovnice spolu s materiálovým vztahem (4.1) jsou hledané rovnice kvazijednorozměrného proudění stlačitelné tekutiny elastickou trubicí.

Zdrojové členy na pravé straně rovnic (4.6) vyjadřujeme obvykle ve tvaru

$$q_\rho = -K_\rho (p - p_o) \dots \text{průtok tekutiny stěnou trubice } (K_\rho \left[\frac{s}{m} \right] \text{ je konstanta přestupu}). \quad (4.7)$$

Velikost třecího napětí ve stěně τ_w určíme podle Hagenova-Poiseuilleova zákona (3.18), viz příklad 3 vztah (3.12). V případě vyrovnaného proudění je tlakový spád roven třecí síle

$$-\frac{\partial p}{\partial x} \doteq \frac{p_1 - p_2}{L} = \frac{8\mu F}{a^2 A} = \frac{8\mu v}{a^2} = -\frac{2\tau_w}{a}. \quad (4.8)$$

Odtud

$$\tau_w = -\frac{4\mu v}{a} \dots \text{pro laminární proudění} \quad (4.9)$$

a nebo obecně

$$\tau_w = -\rho \frac{\lambda_f}{2} |v| v \dots \text{pro laminární i turbulentní proudění na tvaru třecího koeficientu } \lambda_f. \quad (4.10)$$

$$q = -K_q (T - T_o) \dots \text{odvod tepla s konstantou přestupu } K_q \left[\frac{W}{m^2 K} \right]. \quad (4.11)$$

Charakteristikou odporu proudění tekutiny v trubici je třecí koeficient

$$\lambda_f = -\frac{D}{\frac{1}{2}\rho v^2} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{2D\Delta p}{L\rho v^2} = \frac{64}{Re}, \quad (4.12)$$

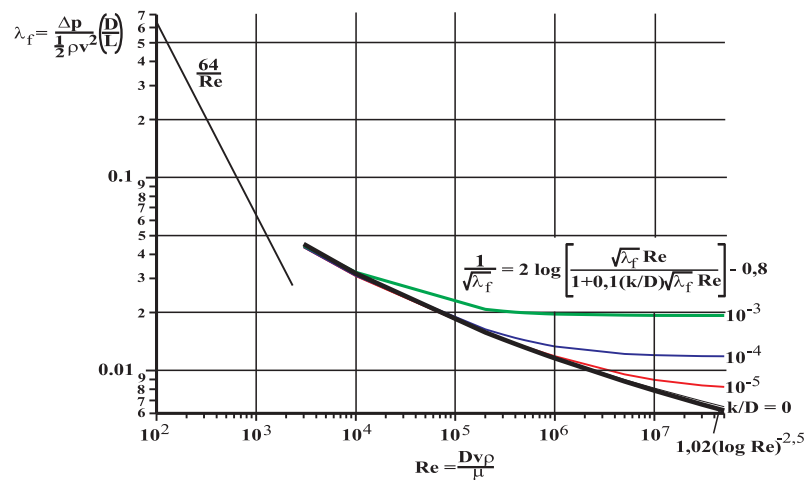
kde $D = 2a$, Δp je tlaková ztráta na délce L a $Re = \frac{D\rho v}{\mu}$ je Reynoldsovo číslo. Pro turbulentní proudění je určován experimentálně

$$\lambda_f = 1,02(\log Re)^{-2,5}. \quad (4.13)$$

Obecnější je vztah Colebrookův, který zahrnuje i vliv drsnosti k

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda_f}} = 2 \log \left[\frac{Re \sqrt{\lambda_f}}{1 + 0,1 \frac{k}{D} Re \sqrt{\lambda_f}} \right] - 0,8, \quad (4.14)$$

k je charakteristický rozměr (výška) drsností, viz obr. 4.2.



Obr. 4.2: Závislost třecího koeficientu λ_f na Reynoldsově čísle Re a bezrozměrné drsnosti $\frac{k}{D}$

5. Rovnice kvazijednorozměrného proudění tekutiny elastickou trubicí odvozené v příkladu 4 zjednodušte pro případ nestlačitelné vazké tekutiny a určete jejich charakteristiky.

Řešení: 5.

Rovnice bilance hmotnosti a hybnosti se nechají za předpokladu $\rho = konst$ upravit na rovnice pro proměnné $A(x, t)$, $v(x, t)$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + v \frac{\partial A}{\partial x} + A \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{8\tau\mu}{\rho} \frac{v}{A}. \quad (5.2)$$

Použitím konstitutivního vztahu (4.1) popisujícího elasticitu stěny trubice můžeme vyloučit tlak

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = c_o^2 \left(\frac{A}{A_{res}} \right)^{\alpha-1} \frac{1}{A_{res}} \frac{\partial A}{\partial x}, \quad \text{pro } c_o^2 = \frac{4\alpha h E}{3a\rho}, \quad (5.3)$$

kde A_{res} je nějaký počáteční (residuální) průřez trubice a c_o se jen málo liší od rychlosti postupné elastické vlny podél trubice.

Pro zjednodušení zavedeme proměnné

$$u(x, t) = \ln \frac{A(x, t)}{A_{res}}, \quad v = v(x, t) \quad (5.4)$$

a charakteristický čas $\tau = \frac{\rho A_{res}}{8\pi\mu}$.

Rovnice proudění tekutiny elastickou trubicí s uvažováním tření mají tvar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + c_o^2 e^{\alpha u} \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{v}{\tau} e^{-u}. \quad (5.6)$$

Rovnice (5.5) a (5.6) linearizujeme v okolí nějakého referenčního bodu $w_0 = (u_0, v_0)$. Řešení těchto rovnic si představíme ve tvaru $w = w_0 + \delta w$ a omezíme se pouze na lineární členy. Po linearizaci označíme opět pro jednoduchost zápisu $w = \delta w$. Výsledné dvě rovnice přepíšeme do maticového tvaru a nalezneme jejich charakteristiky

$$I \frac{\partial w}{\partial t} + B \frac{\partial w}{\partial x} = f, \quad \text{zde } w = (u, v) \text{ a značí } \delta w = (\delta u, \delta v) = (u - u_0, v - v_0), \quad (5.7)$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} v_o & 1 \\ c_o^2 e^{\alpha u_o} & v_o \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{v}{\tau} e^{-u} \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Charakteristiky soustavy parciálních diferenciálních rovnic (5.7) jsou křivky $\chi_i = \chi_i(x, t) = konst$, $i = 1, 2$ v řešené oblasti (x, t) podél nichž se řešení nemění, tj.

$$dw = \frac{\partial w}{\partial t} dt + \frac{\partial w}{\partial x} dx = 0, \quad (5.9)$$

zapsáno maticově

$$dtI \frac{\partial w}{\partial t} + dxI \frac{\partial w}{\partial x} = 0. \quad (5.10)$$

Podél charakteristiky $\chi_i(x, t) = konst$ platí současně rovnice

$$\begin{aligned} I \frac{\partial w}{\partial t} + B \frac{\partial w}{\partial x} &= 0, \\ dtI \frac{\partial w}{\partial t} + dxI \frac{\partial w}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Pravá strana f rovnice (5.7) pokud nezávisí na $\frac{\partial w}{\partial t}$, $\frac{\partial w}{\partial x}$ a konkrétní tvar charakteristiky neovlivňuje (můžeme ji položit např. rovnou nule). Hledáme nenulové řešení pro neznámé $\frac{\partial w}{\partial t}$, $\frac{\partial w}{\partial x}$ (tj. čtyři neznámé). Podmínkou nenulového řešení je

$$\begin{aligned} \det \begin{vmatrix} I & B \\ dtI & dxI \end{vmatrix} &= dt^2 \det \begin{vmatrix} I & B \\ I & \frac{dx}{dt} I \end{vmatrix} = dt^2 \det \begin{vmatrix} 0 & B - \frac{dx}{dt} I \\ I & \frac{dx}{dt} I \end{vmatrix} \\ &= (-1)^2 dt^2 \det \left| B - \frac{dx}{dt} I \right| = 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Při úpravě jsme odečetli spodní řádky od horních a rozvinuli podle sloupce. Označíme $\lambda = \frac{dx}{dt}$ a s ohledem na matici B , vztah (5.8), platí

$$\det \begin{vmatrix} v_o - \lambda & 1 \\ c_o^2 e^{\alpha u_o} & v_o - \lambda \end{vmatrix} = (v_o - \lambda)^2 - c_o^2 e^{\alpha u_o} = 0, \quad (5.13)$$

resp.

$$\lambda_{1,2} = \frac{dx}{dt} = v_o \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2} u_o}. \quad (5.14)$$

Tato rovnice je diferenciální rovnicí charakteristik

$$dx - \left(v_o \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2} u_o} \right) dt = 0, \quad (5.15)$$

resp.

$$x - \left(v_o \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2} u_o} \right) t = \chi_i = konst, \quad i = 1, 2. \quad (5.16)$$

Podmínku řešitelnosti (5.12) resp. (5.13) soustavy (5.11) můžeme na charakteristikách (5.14) psát bez indexu "o", protože podle podmínky (5.9) jsou funkce $w_1(\chi_1)$, $w_2(\chi_2)$ řešením rovnice (5.7) a jsou podél charakteristik konstantní. Pro řešení u, v podél charakteristiky, např. vzhledem k (5.15), platí

$$\left[v(x, t) \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2} u(x, t)} \right] t - x = 0. \quad (5.17)$$

Splňuje-li řešení vztah

$$v = c_o e^{\frac{\alpha}{2} u} = c_o \left(\frac{A}{A_{res}} \right)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad x = konst \quad (5.18)$$

je charakteristika nezávislá na čase. Řešení rovnic (5.1) a (5.2) v bodě $x = konst$ nezávisí na čase, tzn., že např. průřez $A(x)$ je v tomto bodě konstantní. Tato situace může odpovídat i kolapsu trubice, viz př. 6.

Uvážíme-li, že rychlost krve se pohybuje mezi 0 až $6 m/s$ (v aortě asi $1 m/s$), rychlost malé elastické poruchy po tepně je $c_o = \left(\frac{4\alpha h E}{3a\rho}\right)^{1/2} = 7,4 m/s$, může být při zúžení tepny podmínka (5.18) splněna. Pro lidskou femoral artery je $E = 3 \cdot 10^5 Pa$, $a = 5,5 mm$, $h = 1,5 mm$, $\rho = 10^3 kgm^{-3}$, $\alpha = 1/2$.

6. Nalezněte podmínky samobuzených oscilací proudění vazké nestlačitelné tekutiny v elastické trubici popsaného rovnicemi v příkladu 5.

Řešení: **6.** Předpokládáme, že řešení $w = (u, v)$ rovnic (5.5) a (5.6) závisí na charakteristikách $\chi_{1,2} = \chi_{1,2}(x, t)$, tj. $w(x, t) = w(\chi_1(x, t), \chi_2(x, t))$. Rovnice (5.5) a (5.6) převedeme do charakteristických proměnných

$$\chi_1 = x - \left(v_o + c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}\right) t, \quad \chi_2 = x - \left(v_o - c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}\right) t. \quad (6.1)$$

Index "o" označuje, že jde o nějaké konstantní, ale dosud neurčené hodnoty řešení. χ_1 popisuje případ, kde elastická porucha na trubici se přičítá k rychlosti proudu a χ_2 případ, kdy se naopak odčítá (postupuje proti proudu). Zvlášť budeme vyšetřovat vlastnost rovnic (5.5), (5.6) na charakteristice χ_1 a zvlášť na charakteristice χ_2 . Lišit se budou jen znaménkem. S ohledem na (6.1) platí

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= \frac{dw}{d\chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{dw}{d\chi} \left(v_o \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}\right), \\ \frac{\partial w}{\partial x} &= \frac{dw}{d\chi} \frac{\partial \chi}{\partial x} = \frac{dw}{d\chi}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Dosazením do rovnic (5.5), (5.6) dostáváme

$$\psi \frac{du}{d\chi} + \frac{dv}{d\chi} = 0, \quad (6.3)$$

$$\psi \frac{dv}{d\chi} + c_o^2 e^{\alpha u} \frac{du}{d\chi} = -\frac{v}{\tau} e^{-u}, \quad (6.4)$$

kde $\psi = \psi(v, v_o, u_o) = v - v_o \mp c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}$. Horní znaménko platí pro elastickou vlnu postupující rychlostí $v_o + c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}$ a dolní znaménko pro vlnu postupující rychlostí $v_o - c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}$. Tato druhá vlna může za podmínky (5.18) i stát na místě a nebo se pohybovat nějakou jinou rychlostí, viz vztah (6.21).

Tyto rovnice rozřešíme vůči derivacím

$$\frac{du}{d\chi} = \frac{v e^{-u}}{\tau (\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})} = f_1(u, v), \quad (6.5)$$

$$\frac{dv}{d\chi} = -\frac{\psi v e^{-u}}{\tau (\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})} = f_2(u, v). \quad (6.6)$$

Pro případ, že hodnoty v_o, u_o v charakteristikách (6.1) popisují klidový stav $v_o = u_o = 0$, potom funkce $\psi = v \mp c_o$ ¹ V tomto speciálním případě mají rovnice

¹Index "o" obecně neznamená počáteční hodnotu, ale nějakou hodnotu referenční, takže v případě $\chi_2 = x$ (vlna s touto v místě $x = const$), platí $v_o = c_o \left(\frac{A_o}{A_{res}}\right)^{\alpha/2}$, kde A_{res} označuje velikost počátečního průřezu trubice.

(6.5) a (6.6) tvar

$$\frac{du}{d\chi} = \frac{ve^{-u}}{\tau[v(v \mp 2c_o) + c_o^2(1 - e^{\alpha u})]}, \quad (6.7)$$

$$\frac{dv}{d\chi} = -\frac{v(v \mp c_o)e^{-u}}{\tau[v(v \mp 2c_o) + c_o^2(1 - e^{\alpha u})]} \quad (6.8)$$

a jejich řešení nevykazuje v okolí klidového stavu žádné zajímavé vlastnosti.

Derivace podle charakteristik (6.2) můžeme interpretovat i jako derivace podle času

$$\frac{dw}{d\chi} = \left(v_o \pm c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o} \right)^{-1} \frac{dw}{dt} \Bigg|_{\substack{v_o = 0 \\ u_o = 0}} = \pm \frac{dw}{c_o dt}, \quad (6.9)$$

resp. podle prostorové souřadnice

$$\frac{dw}{d\chi} = \frac{dw}{dx} \Bigg|_{\substack{v_o \neq 0 \\ u_o \neq 0}} = \frac{dw}{dx}, \quad (6.10)$$

za podmínky (5.18) i pro libovolné t .

Nehledě na geometrickou interpretaci derivace (6.9), (6.10) budeme nazývat stacionárním řešením rovnic (6.5), (6.6) řešení algebraických rovnic

$$f_1(\bar{u}, \bar{v}) = \frac{\bar{v}e^{-\bar{u}}}{\tau[(\bar{v} - v_o)(\bar{v} - v_o \mp 2c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}) + c_o^2(e^{\alpha u_o - \alpha \bar{u}})]} = 0, \quad (6.11)$$

$$f_2(\bar{u}, \bar{v}) = \frac{(\bar{v} - v_o \mp c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o})\bar{v}e^{-\bar{u}}}{\tau[(\bar{v} - v_o)(\bar{v} - v_o \mp 2c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}) + c_o^2(e^{\alpha u_o} - e^{\alpha \bar{u}})]} = 0. \quad (6.12)$$

Stacionárním řešením je

$$\bar{v} = 0, \quad \bar{u} \in (-\infty, \infty). \quad (6.13)$$

Naším cílem je nalézt kvalitativní vlastnosti nenulových řešení rovnic (6.5), (6.6). Tato řešení lze určit z derivací v tomto stacionárním stavu, popřípadě ve stavech pro $\bar{v} > 0$, budou-li splňovat potřebné podmínky (6.18). Tudiž

$$\frac{\partial f_1}{\partial u} = -\frac{ve^{-u}[\psi^2 - (1 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha u}]}{\tau(\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2} \Bigg|_{\bar{v}, \bar{u}}, \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial v} = \frac{[\psi^2(v - \psi) + (v + \psi)c_o^2 e^{\alpha u}]e^{-u}}{\tau(\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2}, \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial v} = \frac{(\psi^2 - 2\psi v - c_o^2 e^{\alpha u})e^{-u}}{\tau(\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2} \Bigg|_{\bar{u}, \bar{v}}, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial u} = \frac{\psi ve^{-u}[\psi^2 - (1 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha u}]}{\tau(\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2}. \quad (6.17)$$

Říkáme, že rovnice (6.5), (6.6) splňují v bodě (6.12) podmínku Hopfovy bifurkace, jestliže pro nějaké další body $\bar{v} > 0$, $\bar{u} \in (-\infty, \infty)$ platí

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial u} + \frac{\partial f_2}{\partial v} \right) \Bigg|_{\bar{v}, \bar{u}} = 0, \quad \frac{\partial(f_1, f_2)}{\partial(u, v)} > 0. \quad (6.18)$$

Řešení má pak charakter samobuzených oscilací (limitního cyklu).

Tudíž

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial u} + \frac{\partial f_2}{\partial v}\right) = \frac{e^{-u} \{[(2+\alpha)v+\psi]c_o^2 e^{\alpha u} - \psi^3\}}{\tau(\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2} \Big|_{\bar{v}} = \frac{e^{-u\bar{\psi}}(c_o^2 e^{\alpha u} - \bar{\psi}^2)}{\tau(\bar{\psi}^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^2} \Big|_{\bar{\psi}} = 0, \quad (6.19)$$

pro $\bar{\psi} = \bar{v} \mp c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o} - v_o = 0.$

Splnění této rovnosti budeme hledat za podmínky (5.18), tj.

$$v_o = c_o e^{\frac{\alpha}{2}u_o}, \quad \text{popř.} \quad v_o = c_o \left(\frac{A_0}{A_{res}}\right)^{\frac{\alpha}{2}}. \quad (6.20)$$

Podmínka (6.18) je splněna i při $\bar{v} \neq 0$ pro $\bar{\psi} = \bar{v}$

$$\bar{v}^3 - (3 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha\bar{v}} = 0, \quad (6.21)$$

tj.

$$\bar{v} = 0, \quad \bar{v}_{1,2} = \pm\sqrt{3 + \alpha}c_o e^{\frac{\alpha}{2}\bar{u}} = \pm\sqrt{3 + \alpha}c_o \left(\frac{\bar{A}}{A_o}\right)^{\frac{\alpha}{2}}. \quad (6.22)$$

Další podmínkou netlumených oscilací (6.17) je splnění nerovnosti

$$\frac{\partial f_1}{\partial u} \frac{\partial f_2}{\partial v} - \frac{\partial f_2}{\partial u} \frac{\partial f_1}{\partial v} = -\frac{v^2 e^{-2u} [\psi^2 - (1 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha u}] (c_o^2 e^{\alpha u} - \psi^2)}{\tau^2 (\psi^2 - c_o^2 e^{\alpha u})^4} \Big|_{\bar{v}, \bar{\psi}} > 0. \quad (6.23)$$

V případě, že $\bar{\psi} = \bar{v}$, dostáváme

$$\frac{\bar{v}^2 e^{-2\bar{u}} [\bar{v}^2 - (1 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha\bar{u}}] (\bar{v}^2 - c_o^2 e^{\alpha\bar{u}})}{\tau^2 (\bar{v}^2 - c_o^2 e^{\alpha\bar{u}})^4} > 0. \quad (6.24)$$

Tento výraz je kladný pro rychlost proudu \bar{v} splňující buď nerovnost

$$\left(\frac{\bar{v}}{c_o}\right)^2 < e^{\alpha\bar{u}}, \quad \text{nebo} \quad \left(\frac{\bar{v}}{c_o}\right)^2 > (1 + \alpha)e^{\alpha\bar{u}}. \quad (6.25)$$

Toto jsou současně i podmínky netlumených oscilací. První nerovnost má však smysl jen pro $\bar{v} = 0$. Díky podmínce (6.22) má fyzikální význam jen druhá nerovnost. Uvážíme-li, že hledáme řešení na charakteristice (6.20) tak má podmínka netlumených oscilací (6.25) tvar

$$\left(\frac{v}{c_o}\right)^2 \geq (1 + \alpha) \left(\frac{A}{A_{res}}\right)^\alpha \quad (6.26)$$

Rychlost proudící tekutiny při které nastává Hopfova bifurkace, je podle (6.22) rovna

$$\left(\frac{\bar{v}}{v_o}\right)^2 = (3 + \alpha) \left(\frac{\bar{A}}{A_o}\right)^\alpha. \quad (6.27)$$

Při této rychlosti nastávají netlumené oscilace stěny trubice a tlaku.

Pro parametry aorty z příkladu 5 ($\alpha = 1/2$, $c_o = 7,5 \text{ m/s}$), pak podle podmínky (6.25) nastávají netlumené oscilace pro $v = \sqrt{3 + \alpha}v_o \left(\frac{A}{A_o}\right)^{\alpha/2} = 1.87v_o \left(\frac{A}{A_o}\right)^{1/4}$. Pro $A_0 = A_{res}$ je $v_o = c_o$, pro $A_0 \neq A_{res}$ má v_o hodnotu vypočtenou podle podmínky (6.20), což odpovídá charakteristice $\chi_2 = x = \text{const}$, tedy oscilacím v pevném místě (srovnej s 6.1).

Poznámka. Porovnáním podmínky (6.22) a (6.25) vidíme, že v oblasti

$$(1 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha\bar{u}} < \bar{v}^2 < (3 + \alpha)c_o^2 e^{\alpha\bar{u}} \quad (6.28)$$

existují i tlumené oscilace.

7. Přechod z oblasti laminárního proudění do oblasti turbulentního proudění je identifikován kritickou hodnotou Reynoldsova čísla Re [1], které udává vztah mezi rychlostí toku krve v [m/s], průměrem cévní trubice d [m], hustotou krve ρ [kg/m^3] a viskozitou krve μ [Ns/m^2], $Re = vd\rho/\mu$. Reynoldsovo číslo je vlastně poměr setrvačných a vazkých sil. Při laminárním proudění jsou dominantní vazké síly, při turbulentním proudění převažují síly setrvačné. Typická hodnota kritického Reynoldsova čísla pro přechod režimů proudění v cévách je asi 2320, viz obr. 4.2, ale v místě bifurkací může mít hodnotu jen 600 a nebo i nižší než 400. Uvažujeme-li proudění v hrudní aortě, jejíž průměr $d = 2a$ se při kontrakci a relaxaci mění od $2,5 \cdot 10^{-2}$ do $4 \cdot 10^{-2} m$, rychlost se mění v rozmezí 0,5 až $3 m/s$, hustota krve při teplotě $37^\circ C$ je $1,058 \cdot 10^3 kg/m^3$, viskozita μ je $4 \cdot 10^{-3} Ns/m^2$, pak v případě kontrakce aorty je hodnota Reynoldsova čísla $Re = \frac{0,5 \times 2,5 \cdot 10^{-2} \times 1,058 \cdot 10^3}{4 \cdot 10^{-3}} = 3306$ a v případě relaxace nabývá hodnotu $Re = \frac{3 \times 4 \cdot 10^{-2} \times 1,058 \cdot 10^3}{4 \cdot 10^{-3}} = 31740$. Tyto hodnoty jsou ve skutečnosti zavádějící, protože není jasné, jak dlouho turbulence trvá.

Odhadněte čas potřebný ke vzniku turbulence a charakteristickou velikost turbulentních vírů při přechodu krve z levé komory do aorty. Průchod aortální chlopní chápeme jako turbulizační faktor.

Řešení: **7.** Odhadnout čas potřebný k přechodu z laminárního do turbulentního proudění je možno jedině ze znalosti mechanismu ztráty stability laminárního proudění. Proudění ve smykové vrstvě trubky (tepny) je popsáno Navier-Stokesovou rovnicí (3.4)

$$\dot{v}_x = \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \quad \text{pro} \quad \dot{v}_x = \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y}, \quad (7.1)$$

($\dot{}$) značí konvektivní (materiálovou) derivaci. Protože nás zajímá jen rovnováha mezi setrvačnými (levá strana rovnice) a vazkými silami (pravá strana rovnice), neuvažujeme tlakový gradient $\frac{\partial p}{\partial x}$.

Proudové pole si představíme jako superpozici střední rychlosti v_x a fluktuálních složek δv_x , δv_y , δv_z . Potom lze podmínku stability proudového pole v uvažované smykové vrstvě psát ve tvaru¹

$$-\dot{k} = \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 k}{\partial y^2} + \varepsilon + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{v_x^2}{2} \right), \quad (7.2)$$

kde kinetická energie fluktuálního (turbulentního) pohybu v 1 kg krve je

$$k = \frac{1}{2} \int \mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \left[(\delta v_x)^2 + (\delta v_y)^2 + (\delta v_z)^2 \right] dv_x dv_y dv_z. \quad (7.3)$$

¹Maršík F., Termodynamika kontinua, Academia Praha, 1999.

K disipaci energie turbulentního pohybu ε dochází v důsledku molekulární viskozity μ a její velikost (v 1 kg krve) je definována vztahem

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \int \mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \frac{\partial \delta v_i}{\partial x^j} \frac{\partial \delta v_j}{\partial x^i} dv_x dv_y dv_z. \quad (7.4)$$

Rozdělovací funkci $\mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ velikosti fluktuací rychlosti δv_i ($i = 1, 2, 3$) není nutno znát explicitně, protože se zajímáme jen o střední velikosti k a ε .

Velikost turbulentních pulzací δv charakteristického rozměru $l < r$ je určena rovnováhou mezi setrvačnými a vazkými silami (ve smykové vrstvě tepny o poloměru r) podle rovnice (7.1), tudíž

$$\frac{(\delta v)^2}{l} \sim \frac{\mu \delta v}{\rho l^2}, \quad \text{resp.} \quad \delta v \sim \frac{\mu}{\rho l}. \quad (7.5)$$

Rovnováha (jakýsi ustálený stav) mezi velikostí (intenzitou) turbulence $k = \frac{(\delta v)^2}{2}$, resp. její kinetickou energií k a přeměnou turbulentního pohybu na teplo, tj. disipací ε , je vyjádřena vztahem (7.2)

$$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 k}{\partial y^2} + \varepsilon = 0, \quad \text{resp.} \quad \frac{\mu}{\rho} \frac{(\delta v)^2}{l^2} \sim \varepsilon. \quad (7.6)$$

Vyloučením velikosti turbulentních pulzací δv (resp. velikosti kinetické energie $k = (\delta v)^2/2$) dostáváme důležitý vztah pro geometrickou velikost pulzací²

$$l^4 = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^3. \quad (7.7)$$

Čas τ potřebný k vyvinutí turbulentního pohybu stanovíme z rovnice (7.2)

$$\dot{k} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 k}{\partial y^2} = 0, \quad \text{resp.} \quad \frac{(\delta v)^2}{\tau} \sim \frac{\mu}{\rho} \frac{(\delta v)^2}{l^2}, \quad \text{resp.} \quad \tau = \frac{\rho l^2}{\mu}. \quad (7.8)$$

Jde o čas, za který se velké víry o velikosti $r = d/2$ rozpadnou na víry o velikosti l . Tento čas stanovíme tak, že vyloučíme charakteristický rozměr l z rovnice (7.7)

$$\tau = \frac{\rho l^2}{\mu} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho \varepsilon}} \quad (7.9)$$

a vyjádříme ho pomocí velikosti disipace ε , popřípadě velikostí kinetické energie turbulentního pohybu k .

Zbývá nalézt vztah mezi velikostí disipované energie $\rho \varepsilon SV$ během jednoho srdečního tepu a kinetickou energií turbulentního pohybu $\rho k SV$, $SV [m^3]$ je tepový objem. Vzhledem k pulzačnímu pohybu krve můžeme předpokládat, že se veškerá kinetická energie krve v aortě převede na kinetickou energii turbulentního pohybu, tj.

$$E_k = \rho \frac{v^2}{2} SV = \rho k SV \quad (7.10)$$

a to za dobu trvání srdečního tepu Δt . Má-li být na konci srdečního tepu opět laminární proudění, musí se ale současně tato energie disipovat na teplo, tj.

$$\rho \varepsilon SV = E_k / \Delta t = \rho k SV / \Delta t. \quad (7.11)$$

²Chorin J. A., Vorticity and turbulence, Springer Verlag 1994.

Z této bilance odvodíme vztah $\varepsilon = k/\Delta t$ (srovnej s podmínkou stability (7.2)), který dosadíme do vztahu pro charakteristický čas rozpadu víru (7.9)

$$\tau = \sqrt{\frac{\mu}{\rho\varepsilon}} = \sqrt{\frac{\mu\Delta t}{\rho k}} = \sqrt{\frac{\mu\Delta t SV}{E_k}}, [s]. \quad (7.12)$$

Charakteristický rozměr l turbulentního víru je podle (7.7) roven

$$l = \left[\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^3 \right]^{1/4} = \left[\frac{\mu^3 \Delta t SV}{\rho^2 E_k} \right]^{1/4}, [m]. \quad (7.13)$$

Tepový objem SV , tj. množství krve vypuzené do aorty během kontrakce levé komory, je asi $7 \cdot 10^{-5} m^3$ (70 ml). Kinetická energie potřebná pro pohyb krve v aortě je dodávána prací srdce

$$W = SV \times \Delta p = E_k + E_p + E_{el} + E_{dis}, [J], \quad (7.14)$$

kteřá je vykonána během komorové kontrakce, kde $\Delta p [Pa = N/m^2]$ je rozdíl tlaků v komoře (rozdíl mezi maximálním systolickým a minimálním diastolickým tlakem). $E_k [J]$ je kinetická energie krve, $E_p [J]$ je tlaková energie krve uvolněná při zvýšení tlaku z diastolických hodnot na systolické, $E_{el} [J]$ je elastická energie uložená ve stěně aorty a $E_{dis} [J]$ je ztrátová energie v důsledku disipace.

Naším cílem je zjistit velikost kinetické energie krve v aortě E_k a podle vztahu (7.10) stanovit alespoň přibližně charakteristickou rychlost krve v pro výpočet Reynoldsova čísla.

Za předpokladu normálního systolického (maximálního) tlaku v levé srdeční komoře $120 mmHg$ a diastolického tlaku v levé síni $9 mmHg$, je tlakový rozdíl $\Delta p = 111 mmHg = (111 \times 133,3) = 1,48 \cdot 10^4 Pa$. Práce, kterou vykoná srdce $W = 1,48 \cdot 10^4 \times 7 \cdot 10^{-5} = 1,04 J$. Jen asi 70% této práce je předáno krvi v aortě (30% energie se ztratí při výtoku krve ze srdce a průtokem aortální chlopní), takže celková energie předaná do aorty (7.14) je $W = 0,7 \times 1,04 = 0,73 J$.

Tlaková energie krve v aortě se zvyšuje při vzrůstu tlaku z diastolické hodnoty, normální diastolický tlak v aortě je $80 mmHg$, na systolickou hodnotu $120 mmHg$. Tlakový rozdíl je v tomto případě $40 mmHg (= 40 \times 133,3 = 5,33 \cdot 10^3 Pa)$. Předpokládáme-li 70% tepového objemu, pak tlaková energie

$$E_p = 0,7 \times SV \times \Delta p = 0,7 \times 7 \cdot 10^{-5} \times 5,33 \cdot 10^3 = 0,26 J. \quad (7.15)$$

Elastická energie

$$E_{el} = SV \times \Delta p = \frac{SV}{C_{Ao}} (V_{Ao} - V_{res,Ao}), \quad (7.16)$$

kde C_{Ao} je elastická poddajnost aorty a V_{Ao} , $V_{res,Ao}$ jsou maximální a zbytkový objem aorty. Uvažujeme-li $C_{Ao} = 1,2 \cdot 10^{-8} m^3/Pa$, $SV = 7 \cdot 10^{-5} m^3$, $V_{Ao} = 1,4 \cdot 10^{-4}$, $V_{res,Ao} = 1,3 \cdot 10^{-5} m^3$, pak $E_{el} = 0,28 J$. Tato energie je uložena do stěny aorty a je uvolněna při kontrakci aorty a umožňuje tok krve do celého systému. Tato energie je srovnatelná s prací vykonanou srdcem a tlakovou energií při vzrůstu tlaku.

Ztrátová energie $E_{dis} = \Delta p_{dis} \times SV$, Δp_{dis} je tlaková ztráta podél aorty, kterou lze stanovit pomocí Poiseuillova zákona. Za předpokladu, že poloměr aorty je $1,25 \cdot 10^{-2} m$, délka aorty je $0,3 m$, tok krve v aortě $9,6 \cdot 10^{-5} m^3/s$,

$$\Delta p_{dis} = \frac{8\mu l_{Ao} F}{\pi r^4} = \frac{8 \times 4 \cdot 10^{-3} \times 0,3 \times 9,6 \cdot 10^{-5}}{3,14 \times (1,25 \cdot 10^{-2})^4} = 12 N/m^2 \quad (7.17)$$

a $E_{dis} = 12 \times 0,7 \times 7 \cdot 10^{-5} = 5,9 \cdot 10^{-4} J$. Tato energie je malá vzhledem k tlakové energii a k práci vykonané srdcem.

Ze zjednodušeného zákona zachování energie (7.14) (zanedbání členu E_{dis}) lze určit kinetickou energii $E_k = W - E_p - E_{el} = 0,73 - 0,26 - 0,28 = 0,19 J$. Ze známé hodnoty kinetické energie lze vypočítat rychlost proudění krve v aortě $v [m/s]$

$$v = \sqrt{\frac{2 \times E_k}{\rho \times 0,7 \times SV}} = \sqrt{\frac{2 \times 0,19}{1,058 \cdot 10^3 \times 0,7 \times 7 \cdot 10^{-5}}} = 2,71 m/s. \quad (7.18)$$

Výpočtem Reynoldsova čísla $Re = \frac{vd\rho}{\mu} = \frac{2,71 \times 4 \cdot 10^{-2} \times 1,058 \cdot 10^3}{4 \cdot 10^{-3}} = 2867$, zjistíme, že je v aortě v okamžiku ejekce levé komory vyvinuté turbulentní proudění, viz obr. 4.2.

Na základě těchto údajů lze podle vztahu (7.12) zjistit čas τ , který je zapotřebí ke vzniku turbulentních vírů

$$\tau = \sqrt{\frac{\mu \times \Delta t \times 0,7 \times SV}{E_k}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 10^{-3} \times 0,8 \times 0,7 \times 7 \cdot 10^{-5}}{0,19}} = 9,1 \cdot 10^{-4} s, \quad (7.19)$$

a velikost charakteristického rozměru (7.13) turbulentního víru

$$l = \left[\frac{\mu^3 \times \Delta T \times SV}{\rho^2 E_k} \right]^{1/4} = 1,1 \cdot 10^{-5} \quad (7.20)$$

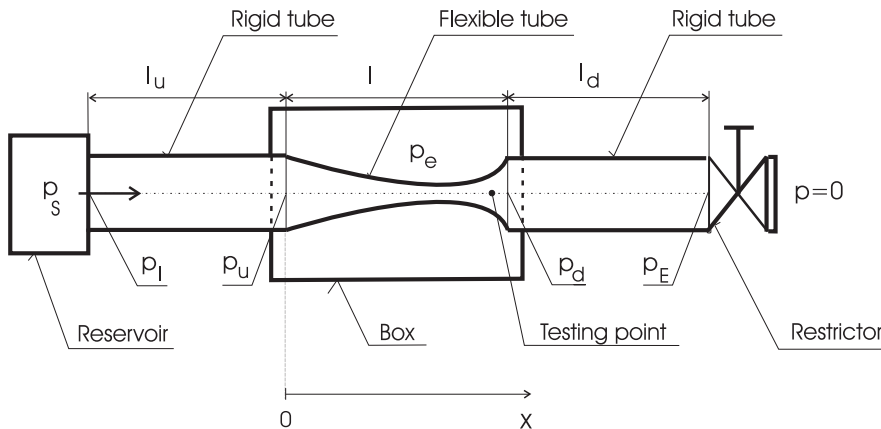
Δt je doba trvání jednoho tepu, při srdeční frekvenci 75 tepů/min $\Delta t = 60/75 = 0,8 s$. Velikost času τ a rozměru l indikuje, že v aortě je většinu času při normálních podmínkách proudění na hranici turbulence. Do režimu turbulentního může přejít při zvýšené srdeční zátěži (např. při cvičení) nebo při stenóze srdečních chlopní (zúžení). Rozměr turbulentního víru je srovnatelný s velikostí lymfocytů a monocytů $5 - 17 \mu m$. Časté turbulentní proudění by je mohlo poškodit.

Příklad 8.

Popište nestacionární 1D proudění elastickou trubicí.

PULZAČNÍ PROUDĚNÍ V TEPNÁCH A ŽILÁCH – 1D APROXIMACE

Pro účely studia samobuzených pulsací a kolapsu tenkostěnných elastických trubic (tepen a cév) byl sestaven hydraulický systém, viz Obr. 8.1. Hlavní částí je tenkostěnná studovaná elastická trubice o délce l a tloušťce h , přičemž je předpokládáno, že $h \ll l$. Elastická trubice je obklopena dvěma tuhými kanály s patřičným hydraulickým odporem, jejichž cílem je tlumit tlakové poruchy generované při vzniku pulsací. Vstupní tuhý kanál má délku l_u a výstupní kanál má délku l_d . Plocha průřezu je označena $A(x, t)$, plocha průřezu tuhé části je označena A_0 .



Obr. 8.1. Model experimentálního zařízení v ÚT AVČR využívaného ke studiu samobuzených pulsací. Zařízení slouží jako fyzikální realizace Starlingova resistoru

Tekutina proudí z rezervoáru při konstantním tlaku p_s . Výstupní pevná část je zakončena restriktorem, který spojuje systém s jeho okolním prostředím kde je nulový tlak. Pružná část trubice je umístěna v kazetě, kde je konstantní tlak p_e .

8.1. MATEMATICKÁ FORMULACE 1D PROUDĚNÍ ELASTICKOU TRUBICÍ

Model zahrnuje tři rovnice – zákon zachování hmoty, hybnosti a odpovídající konstitutivní materiálový vztah. Zákon zachování hmoty pro nestlačitelnou tekutinu o hustotě ρ v elastické trubicí, která má plochu průřezu $A = A(x, t)$, je

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial(Av)}{\partial x} = 0, \quad (8.1)$$

kde $v = v(x, t)$ je rychlost tekutiny. Zákon zachování hybnosti je vyjádřen ve tvaru

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{S_0}{A_0} \frac{\lambda_f}{8} v |v|, \quad (8.2)$$

kde $p = p(x, t)$ je tlak tekutiny, $S_0 = \pi D_0$ je periferní délka vnitřního povrchu. Efekt předpokládaného odtržení proudu je nahrazen vazkým třením podél trubice. Koeficient tření λ_f je vyjádřen jinak pro laminární proudění ($Re < Re_{crit}$) (odvozen za předpokladu platnosti Poiseuilleova zákona) a jinak pro turbulentní proudění ($Re \geq Re_{crit}$) (užitím empirického vztahu, viz [2]) následujícím způsobem

$$\lambda_f = \begin{cases} \frac{64}{Re} & \text{for } Re < Re_{crit} \\ 1.02 [\log(Re)]^{-2.5} & \text{for } Re \geq Re_{crit} \end{cases}, \quad (8.3)$$

Lokální Reynoldsovo číslo je uvažováno ve tvaru

$$Re = \frac{vA}{2\nu R_0}, \quad (8.4)$$

kde ν je kinematická viskozita tekutiny.

Proudění v přední a zadní tuhé části trubice je modelováno následujícími dvěma obyčejnými diferenciálními rovnicemi

$$\begin{aligned} \frac{dv_u}{dt} &= \frac{p_I - p_u}{\rho l_u} - \frac{\lambda_f}{8} \frac{S_0}{A_0} v_u |v_u|, \\ \frac{dv_d}{dt} &= \frac{p_d - p_E}{\rho l_d} - \frac{\lambda_f}{8} \frac{S_0}{A_0} v_d |v_d|, \end{aligned} \quad (8.5)$$

$$p_S = p_I + \frac{1}{2} \rho v_u^2, \quad p_E = R A_0^2 v_d |v_d|. \quad (8.6)$$

kde R je odpor restriktoru. Tlak vně trubice je nulový.

Viskoelastické vlastnosti stěny elastické trubice v 1D aproximaci jsou popsány rovnicí

$$\frac{T}{D_0} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + p - p_e = \Phi \left(\frac{A}{A_0} \right) + \gamma \frac{\partial A}{\partial t}, \quad (8.7)$$

kteřá je zobecněním rovnice bilance hybnosti trubky, viz Příklad 39. Zde γ je tlumení trubice a T je tenze trubice a $p - p_e$ je tzv. transmurní tlak. Konstitutivní materiálový vztah (8.7) je použit podle Hayashi S. a kol., 1998 a byl získán více empirickou cestou než přímým analytickým odvozením [1]. Druhý člen v rovnici (8.7) vyjadřuje tahovou sílu, která zahrnuje zakřivení stěny trubice.

Elastická část konstitutivního vztahu (8.7) je popsána funkcí $\Phi(z)$

$$\Phi(z) = \begin{cases} K_p \left[1 - \left(\frac{A}{A_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] & \text{pro kolabující stav } 0 < \frac{A}{A_0} \leq 1, \\ K_E \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right) & \text{pro expandující stav } 1 < \frac{A}{A_0}, \end{cases} \quad (8.8)$$

kde K_p a K_E jsou tuhosti pružné trubice v kolabujícím, popř. expandujícím stavu. Relace těchto parametrů k parametrům používaných v obecných materiálových modelech, plyne z rovnic (8.7), viz Příklad 39.

$$\Phi\left(\frac{A}{A_0}\right) = K_p \left[1 - \left(\frac{A}{A_0}\right)^{-1} \right], \text{ t.j.,} \quad (8.9)$$

$$K_p = \frac{h_0(\lambda + 2\mu)}{2R_0} = \frac{h_0 E}{4R_0(1-2\sigma)(1+\sigma)} = \frac{h_0\mu}{2R_0(1-2\sigma)} = \frac{h_0(3K + 4\mu)}{6R_0}$$

zde je pro úplnost uveden i modul stlačitelnosti K . Koefficient K_E pro popis expandujícího stavu (aneurysma) vychází podle navržené teorie roven K_p . Na rozdíl od vztahu (8.8) je vztah (8.9) možno použít jak pro kolaps tak i pro expanzi.

Podobně získáme vztah pro tenzi ve stěně trubky v podélném směru

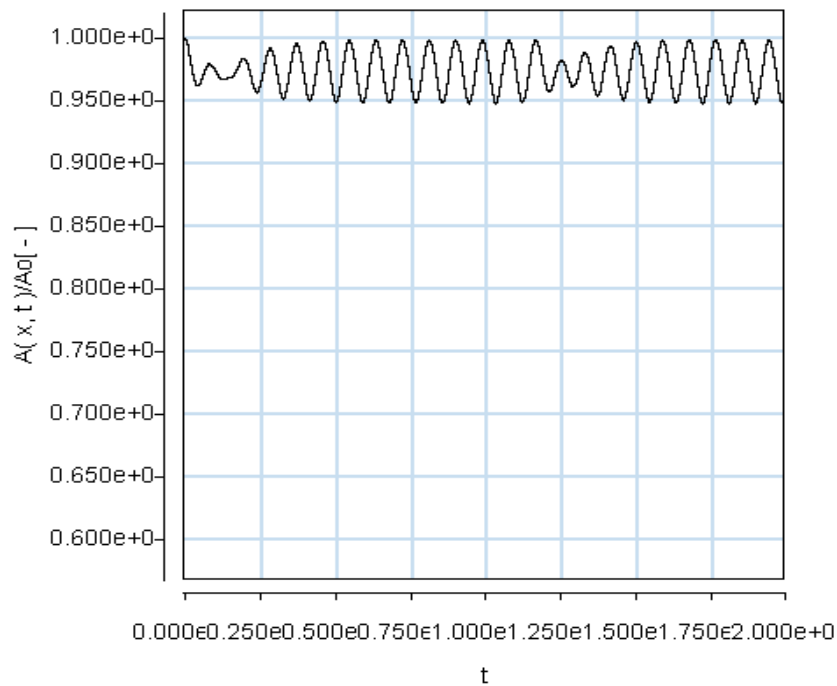
$$T = \frac{h_0\mu}{\pi} \left[\frac{N}{m} = \frac{J}{m^2} \right] \quad (8.10)$$

vyjadřující hustotu mechanické energie v příčném řezu stěny. Hodnota (8.10) platí pro nepředpjatou trubku. V fyziologických podmínkách je tepna či žíla vždy předpjata, takže reálná hodnota T je vždy větší.

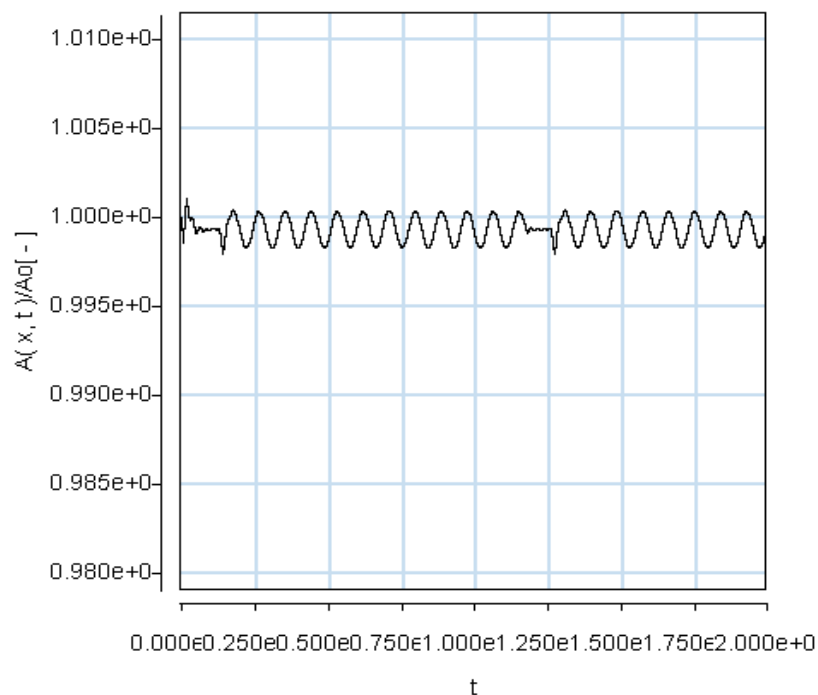
8.2 NUMERICKÁ SIMULACE PULZAČNÍHO PROUDĚNÍ CÉVAMI

V práci [3] bylo provedeno numerické řešení soustavy rovnic (8.2) - (8.8). Pro kontrolu řešení byly použity čtyři odlišné metody časové integrace; Eulerovo schema, schema Crankové-Nicholsona a metoda dělení časového kroku (Fractional Step Method). Všechny použité metody dávají přijatelně shodné výsledky. V závislosti na volbě materiálových konstant K_p určující elasticitu trubice a T definující podélnou tenzi ve stěně.

System vykazuje numericky tři odlišně kvalitativní chování: kolaps elastické trubice, tlumení a samobuzené oscilace. Frekvence samobuzených oscilací se snižuje se zvýšením materiálových konstant K_p, T , t.j. s Youngovým modulem E v jisté oblasti parametrů, viz Obr. 8.2 a 8.3.



Obr. 8.2. Pulzace velikosti průřezu tepny při periodickém buzení pro parametry naměřené v práci [5], tj. $K_p = 13 \text{ kPa Pa}$ v poloze $x = 0.955 \text{ m}$ při rychlosti proudění krve 1 m/s .



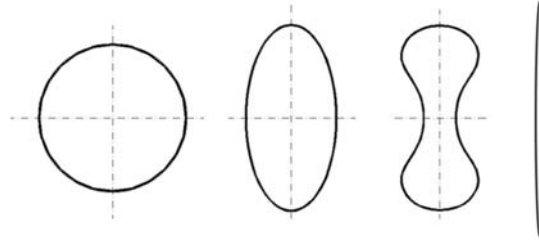
Obr. 8.3 Pulsace velikosti průřezu přemostující cévy při periodickém buzení při rychlosti proudění krve 5 mm/s . Parametry získané z měření tahem za předpokladu Hookova materiálového modelu byly $\lambda = 1.92 \cdot 10^4 \text{ Pa}$ a $\mu = 1.92 \cdot 10^4 \text{ Pa}$, poloměr je $R_0 = 1 \text{ mm}$ a tloušťka stěny $h_0 = 0.15 \text{ mm}$. Podle vztahu (8.9) je $K_p = 4,32 \text{ kPa}$. Odtud je zřejmé, že samobuzené pulsace mají frekvenci přibližně 5 Hz .

8.3 ANALÝZA KOLAPSU PŘEMOŠŤUJÍCÍCH CÉV

Rovnice (8.1), která je rovnicí bilance hmoty a rovnice (8.2), která je rovnicí bilance hybnosti, reprezentují nestacionární průtok krve tepnou. Při jistých hodnotách průtoku (rychlosti krve) dojde k náhlému poklesu tlaku uvnitř tepny a následkem toho se její stěna zborťí a tepna kolabuje. Podmínku kolapsu tepny můžeme alespoň přibližně stanovit z kvalitativní analýzy řešení těchto rovnic. Průřez kolabující tepny může být různý, viz Obr. 8.4. Zásadní význam pro stanovení podmínky kolapsu má konkrétní tvar konstitutivního vztahu (8.7), resp. (8.9). Tento vztah dává do relace transmuraní tlak, tj. rozdíl tlaku p uvnitř tepny a tlaku vně tepny p_e

$$p - p_e = \Phi\left(\frac{A}{A_o}\right) \quad (8.11)$$

a efektivním průřezem tepny $A(x)$. A_o je nějaký referenční klidový průřez, kdy krev neproudí.



Obr. 8.4 Průběh kolapsu cévy, v konečné fázi se může průřez zcela uzavřít, tj. $A = 0$.

V rovnici (8.2) nahradíme tlakový gradient z konstitutivního vztahu (8.11)

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Phi}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial x}, \text{ popř. } \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = c_o^2 \frac{\partial A}{A_o \partial x}, \text{ pro } c_o^2 = \frac{A}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial A} \quad (8.12)$$

Rovnice (8.1) a (8.2) přejdou s ohledem na (8.12) na rovnice pro $A(x, t)$, $v(x, t)$, tj.

$$\frac{\partial A}{\partial t} + v \frac{\partial A}{\partial x} + A \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (8.13)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{c_o^2}{A_o} \frac{\partial A}{\partial x} = -S \frac{\lambda_f}{8A_o} v |v| \quad (8.14)$$

Pravá strana rovnice (8.14) vyjadřuje tření, které může působit jen jako tlumení proudu. Kvalitu proudění popisují levé strany rovnic (8.13), (8.14)

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} + v \frac{\partial A}{\partial x} + A \frac{\partial v}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{c_o^2}{A_o} \frac{\partial A}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (8.15)$$

Soustavu těchto rovnic budeme linearizovat, tj. předpokládáme, že

$$\begin{aligned} v(x, t) &= v_o + v'(x, t) \\ A(x, t) &= A_o + A'(x, t) \end{aligned} \quad (8.16)$$

kde v_o, A_o jsou nějaké konstantní hodnoty rychlosti a průřezu. Soustava nelineárních rovnic (8.15) přechází na soustavu lineárních parciálních diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}\frac{\partial A'}{\partial t} + v_o \frac{\partial A'}{\partial x} + A_o \frac{\partial v'}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial v'}{\partial t} + v_o \frac{\partial v'}{\partial x} + \frac{c_o^2}{A_o} \frac{\partial A'}{\partial x} &= 0\end{aligned}\quad (8.17)$$

řešení budeme předpokládat ve tvaru postupných harmonických poruch

$$\begin{pmatrix} A' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{A} \\ \bar{v} \end{pmatrix} e^{i(\omega - kx)}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (8.18)$$

o amplitudě \bar{A}, \bar{v} , s periodou T a vlnovou délkou λ . Hledáme podmínku, při které budou poruchy A', v' určeny soustavou lineárních algebraických rovnic

$$\begin{aligned}(\omega - v_o k) A' - A_o k v' &= 0 \\ -\frac{c_o^2}{A_o} k A' + (\omega - v_o k) v' &= 0\end{aligned}\quad (8.19)$$

nenulové. Podmínka existence nenulového řešení je

$$\det \begin{vmatrix} \omega - kv_o & -kA_o \\ -k\frac{c_o^2}{A_o} & \omega - kv_o \end{vmatrix} = (\omega - kv_o)^2 - k^2 c_o^2 = 0 \quad (8.20)$$

Tedy pro fázovou rychlost poruchy musí platit

$$\frac{\omega}{k} = v_o \pm c_o = \frac{\lambda}{T} \quad (8.21)$$

Pro zkolabovanou trubku je $T \rightarrow \infty$ a to platí v případě, že střední rychlost proudění splňuje podmínku

$$v_o = c_o = \left(\frac{A_o}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial A} \right)^{1/2} \quad (8.22)$$

Pro Hookův materiálový model tepny popsáný vztahem (8.9), pro který je $\frac{\partial \Phi}{\partial A} = \frac{K_p}{A_o}$ je

rychlost krve nutná ke kolapsu

$$c_o = \sqrt{\frac{K_p}{\rho}} = \sqrt{\frac{0,15 \cdot 10^{-3} (1,92 + 2 \cdot 1,92) \cdot 10^4}{2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^3}} = 2,07 \text{ m/s} \quad (8.23)$$

Za předpokladu, materiál stěny cévy je popsán vztahem (8.9)- Hookův model, nemůže za normálních podmínek u zdravé přemostující cévy ke kolapsu dojít. Důvodem je nižší rychlost krve v těchto žilách. Podle měření pomocí MRI je rychlost v rozmezí 25 – 50 cm/s. V případě, kdy je poloměr cévy $R_o \sim 0,5 \text{ cm}$ a tloušťka stěny klesne na 0,08 mm a materiálové parametry λ, μ (viz vztah (8.9)) na hodnotu 10^4 Pa , může parametr K_p klesnout a tím klesne i rychlost kolapsu c_o

$$K_p = \frac{h_o (\lambda + 2\mu)}{2R_o} = \frac{8 \cdot 10^{-5} \cdot 3 \cdot 10^4}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-3}} = 240, \quad c_o = \sqrt{\frac{h_o (\lambda + 2\mu)}{2\rho R_o}} = \sqrt{\frac{240}{10^3}} = 490 \text{ cm/s}$$

Tedy, ani při náhlém zvýšení intrakraniálního tlaku p_e nemůže přemostující céva zkolabovat.

Pro vysvětlení kolapsu cévy je třeba použít jiného materiálového vztahu než vztah (8.9). Do úvahy je třeba vzít i případné protažení či smrštění cévy, které je vyjádřeno poměrem $\lambda = L/L_o$.

Použijeme materiálové modely viz Příklad 39. Pro vztah, který vyjadřuje jen silové poměry na stěnách cévy platí

$$c_{eq} = \left[\frac{2h_o\mu}{\rho R_o} \left(1 + \frac{1}{\lambda^2} \right) \right]^{1/2}. \quad (8.24)$$

Velikost rychlosti při které by mělo dojít ke kolapsu je srovnatelná s rychlostí (8.23) a je tudíž nereálná. Naproti tomu pro neo-Hookův model při nepatrném zkrácení cévy, např. jen o 5%, tj. pro $\lambda = 0.95$ dostáváme rychlost

$$c_{NH} = \left[\frac{h_o\mu}{\rho R_o} \left(\frac{1}{\lambda^2} - 1 \right) \right]^{1/2} = \sqrt{\frac{1 \cdot 10^{-4} \cdot 4 \cdot 10^4}{10^3 \cdot 5 \cdot 10^{-3}} \left(\frac{1}{0.95^2} - 1 \right)} = 29 \text{ cm/s}. \quad (8.25)$$

která zcela odpovídá podmínkám, existujícím v cévě. Je tudíž reálné, že při nějakém prudším pohybu hlavy může i tento jev nastat.

REFERENCES

- [1] Hayashi S., Hayase T., Kawamura H.: Numerical Analysis for Stability and Self-Exited Oscillation in Collapsible Tube Flow, J. of Biomech. Eng. **Vol. 120**, (1998) 468-475.
- [2] Colebrook C.F.: Turbulent Flow in Pipes with Particular Reference to the Transition Region Between the Smooth and Rough Pipe Law, J. Institute Civil Eng., (1939).
- [3] Štembera V., Maršík F., Chlup H.: One-dimensional mathematical model of the flow through a collapsible tube with applications to blood flow through human vessels, Proceedings of the conference *Topical Problems of Fluid Mechanics 2005*, Eds: J. Příhoda, K. Kozel, February 16-17, 2005, IT ASCR, ISBN 80-859018-92-7, pp. 115-118
- [4] Maršík F., Převorovská S., Brož Z., Štembera V.: Numerical Model of the Human Cardiovascular System-Korotkoff Sound Simulation, Cardiovascular Engineering: An International Journal, Vol. 4, No 2, June 2004, pp 193-199
- [5] Holzapfel GA, Gasser TC, Ogden RW (2000) A new constitutive framework for arterial wall mechanics and comparative study of material models. J. Elast. 61:1 – 48.
- [6] Horný L., Žitný R., Chlup, H.: Strain energy function for arterial walls based on limiting fiber extensibility. In IFMBE Proceedings [CD-ROM]. Berlin: Springer, 2008, p. 1910-
- [7] Holzapfel AG : Nonlinear solid mechanics. John Wiley & Sons, New York, 2000
- [8] Humphrey JD: Cardiovascular Solid Mechanics: Cells, Tissues, and Organs. Springer-Verlag, NY, 2002



EXERCISES

1. How much heat will be produced by the formation of 1 g pure liquid water from pure hydrogen and pure oxygen at room conditions

a) in a gas burner after condensation of the water vapour:

$$Q_1 = \dots\dots\dots \text{ kJ};$$

b) in a standard fuel cell (efficiency $\approx 70\%$)

$$Q_2 = \dots\dots\dots \text{ kJ}.$$

2. What is the numerical value of the (differential molar) heat of reaction at constant pressure $Q_{m,p}$ and that at constant volume $Q_{m,v}$ for the formation of graphite from diamond starting at room conditions?

$$Q_{m,p} = \dots\dots\dots \text{ kJ/mol};$$

$$Q_{m,v} = \dots\dots\dots \text{ kJ/mol}.$$

3. What is the numerical value of the molar free enthalpy of formation of pure dichlorine $^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}$ at room conditions?

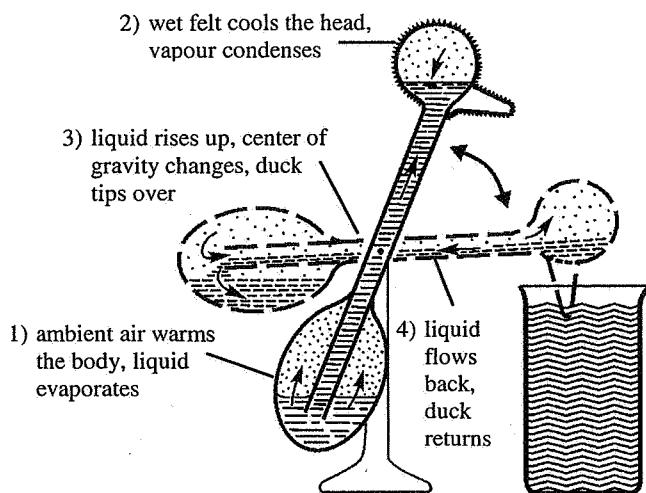
$$\Delta_f G_m = \dots\dots\dots \text{ kJ/mol}.$$

4. A hot solution with a temperature of $\approx 100^\circ\text{C}$ is obtained if the same amounts (in weight) of NaOH and H_2O are mixed (strong exothermic reaction). On the other hand the ratio $n(\text{NaOH})/n(\text{H}_2\text{O})$ in a saturated solution at 100°C is approximately 3 times higher than at 25°C (strong increase of solubility at heating). How is this compatible with Le Chatelier's principle? (answer in catchwords)

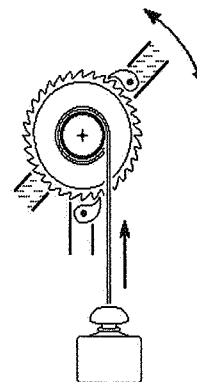
.....

5. The "drinking duck", a well-known toy, tips over, the beak dips into the water, the duck returns in the upright position, and the game can start again.

What is the approximate value of the efficiency, if the duck (by evaporating 1 g of water at a humidity of 70%) lifts a weight of 50 g for 1 m?



The movement of the duck can be used for lifting a weight



Some useful numerical values (at 298 K)

	State	M g/mol	ρ^0 kg/m ³	H_m^0 J/mol	S_m^0 J/K·mol	$C_{p,m}^0$ J/K·mol	χ^0 10 ⁻⁹ /Pa	γ^0 10 ⁻⁶ /K	$\Delta_f H_m$ kJ/mol	$\Delta_D H_m$ kJ/mol
C	diamond	12.01	3510	522	2.38	6.12	0.0023	3.0	1.893	716
C	graphite	12.01	2200	1051	5.74	8.53	0.031	7.4	0	714
Cl ₂	gas	70.91	2.898	9177	223.0	33.9	9869	3354	0	242.2
H ₂	gas	2.016	0.0824	7415	130.6	28.83	9869	3354	0	435.8
H ₂ O	gas	18.015	0.736	9899	188.6	33.55	9869	3354	-241.7	924.9
H ₂ O	liquid	18.015	997.0	1326	69.7	75.15	0.474	256	-285.9	969.1
O ₂	gas	32.00	1.308	8,646	205.0	29.36	9869	3354	0	494.8

Index ⁰ identifies standard conditions

M molecular mass

ρ mass density

H_m molar enthalpy $H_m(298\text{ K}) - H_m(0\text{ K})$

S_m (conventional) molar entropy

$C_{p,m}$ molar heat capacity at constant pressure

χ isotherm compressibility

γ (cubic) thermal expansion coefficient

$\Delta_f H_m$ molar enthalpy of formation

$\Delta_D H_m$ molar dissociation enthalpy (for the dissociation in atoms)

Natural isotopic composition of chlorine:

³⁵Cl 75,4 %, ³⁷Cl 24,6 %

Ground state vibration frequency of ³⁵Cl₂ molecules:

$\nu_e = 16.9 \cdot 10^{12}$ Hz

Molar evaporation enthalpy of water at 373 K:

$\Delta_v H_m = 40.66$ kJ/mol

References:

D'Ans Lax: "Taschenbuch für Chemiker und Physiker", 3th ed., Springer, Vol. 1 (1967) and Vol. 3 (1970)

E. Wiberg: „Die chemische Affinität“, 2nd ed., de Gruyter 1972

Gmelin handbook, Vol. C [B]

Rovnováha mezi čistou látkou a směsí- Posuv rovnováhy následkem změny tlaku a teploty

Obsah

1. Rovnováha rozpouštědla a rozpouštěné látky: Colligativní vlastnosti roztoků	1
1.1. Důsledky termodynamické rovnováhy rozpouštědla a rozpouštěné látky: Raoultův a Henryho zákony.	3
1.2. Fázové rovnováhy rozpouštědla a rozpouštěné látky.....	4
1.3. Vztahy mezi aktivními koeficienty rozpouštědla a rozpouštěné látky.....	6
1.4. Závislost Henryho konstanty na teplotě a tlaku	7
2. Osmotický tlak	10
2.1 Hemolýza červených krvinek vlivem snížené koncentrace soli a cukru.....	12
3. Posun fázové rovnováhy rozpouštědla	13
3.1 Posun fázové rovnováhy rozpouštěné látky	13
4. Vznik glukózy a její fermentace.....	15
5. Tepelná zabarvení fázových změn: rozpouštěcí a směšovací tepla.....	16
5.1. Rozpouštěcí teplo	18
5.1. Směšovací teplo.....	19

1. Rovnováha rozpouštědla a rozpouštěné látky: Colligativní vlastnosti roztoků

Ukážeme, že různé vlastnosti roztoků mají obecné souvislosti, tzv., colligativní vlastnosti, mezi které patří:

- i) snížení tlaku par rozpouštědla nad roztokem, popř. koncentrace rozpuštěného plynu v rozpouštědle
- ii) zvýšení bodu varu rozpouštědla
- iii) snížení bodu tuhnutí rozpouštědla
- iv) osmotický tlak

Výchozí veličinou, která kvalitativně i kvantitativně popisuje energetickou interakci mezi rozpouštědlem A a rozpouštěnou látkou B je chemický potenciál.

Nejdůležitější veličiny pro popis směsí kapalin (obecně i pevných látek) a par (obecně plynů) jsou chemické potenciály chemických komponent $i = 1, 2, \dots, m$, označíme $\mu_{i,l}, \mu_{i,v}$ [J/kmol]

("l" je pro kapaliny, "v" je pro páry - plyny). Značíme n_i [kmol] molární koncentraci složky i

a $n_T = n_A + n_B$ je celkový počet molů, popř. kmolů v jednotce objemu směsi. Indexem "l" značíme kapalnou fázi a indexem "v" fázi plynou (páru).

Gibbsova volná entalpie (někdy nazývaná jen Gibbsův potenciál) celého systému složeného z různých chemických komponent s molárním zastoupením n_i [kmol] je definována jako vážený součet jejich chemických potenciálů $G = \sum_{i=1}^m n_i \mu_i$. Její totální diferenciál je roven

$$dG = \sum_{i=1}^m n_i d\mu_i + \sum_{i=1}^m \mu_i dn_i = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^m \mu_i dn_i \quad [\text{J}] \quad (1.1)$$

Jak entropie S [JK⁻¹], objem V [m³] tak i hmotnost systému n_T [kmol] jsou extenzivní veličiny, t.j.:

$$S = \sum_{i=1}^m n_i s_i, \quad V = \sum_{i=1}^m n_i v_i, \quad n_T = \sum_{i=1}^m n_i \quad (1.2)$$

kde s_i [JK⁻¹kmol⁻¹], v_i [m³kmol⁻¹] jsou specifické veličiny vztažené na jednotku hmotnosti.

Dosažením do vztahu (1.1) dostáváme tzv., Gibbsovu-Duhemovu rovnici

$$\sum_{i=1}^m n_i (d\mu_i + s_i dT - v_i dp) = 0, \quad \text{popř.} \quad d\mu_i(T, p) = -s_i dT + v_i dp \quad (1.3)$$

Jestliže připustíme, že každý člen součtu je roven nule, tak dostáváme diferenciální rovnici pro chemický potenciál μ_i . Integrací od nějakého referenčního stavu p^0, T^0 do nějakého aktuálního stavu p, T^0 (po izotermě) můžeme psát

$$\mu_i(p, T^0) = \mu_i^0(p^0, T^0) + \int_{p^0}^p v_i dp = \mu_i^0(p^0, T^0) + RT^0 \ln\left(\frac{f_i}{p^0}\right) \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}}\right] \quad (1.4)$$

kde $f_i = \varphi_i p$ je tzv. fugacita a φ_i [1] je tzv. fugacitní koeficient popisující odlišnost reálného plynu od plynu ideálního. Definovali jsme referenční stav reálného plynu/kapaliny, jako nějaký hypotetický stav p^0, T^0 při kterém se chovají jako ideální plyn/kapalina, tj.,

$$p_i = \frac{n_i RT}{V}, \quad p = \sum_{i=1}^m p_i, \quad y_i = \frac{p_i}{p} \quad \dots \quad \text{Daltonov koncept} \quad (1.5)$$

$$v_i = \frac{RT}{p}, \quad V = \sum_{i=1}^m n_i v_i = \frac{n_T RT}{p}, \quad x_i = \frac{n_i}{n_T} \quad \dots \quad \text{Amagatov koncept} \quad (1.6)$$

Kvůli tomu, že dokážeme tvar chemického potenciálu (1.4) teoreticky dobře formulovat jen pro ideální systémy plyn / kapalina pomocí molární frakce y_i [1] (obvykle používané pro plynnou část) a molárního zlomku x_i [1] (používané pro kapalnou část) je třeba pro reálné složky určit korekce. Tudíž, pro všechny reálné plyny je zaveden efektivní (mající účinek odpovídající realitě) tlak, tzv. fugacita $f_i = \varphi_i p$ a pro reálné kapaliny efektivní koncentraci, takzvanou aktivitu $a_i = \gamma_i x_i$. Skutečný rozdíl od ideálnosti plynu / kapaliny je pak vyjádřen pomocí koeficientu figacity φ_i [1] a aktivity γ_i [1], viz dále.

Čistá látka je definována přesně stanovenou fázovou rovnováhou, většinou relací

$p_{sat} = p_{sat}(T_{sat})$ popisující tzv. mezní křivku, specifickými tepley a objemy, stlačitelností a dalšími specifickými vlastnostmi. Často velmi malá koncentrace příměsi v čisté látce způsobí významné změny v teplotě, popř. tlaku, fázového přechodu a nebo ve změně objemové stlačitelnosti $K = \rho c_T^2$, která přímo souvisí s izotermickou rychlostí zvuku c_T^2 . Izotermická rychlost zvuku se tak stává významnou veličinou popisující pohyb směsi, např. při fázových přechodech, kavitaci, při náhlé expanzi (uvolňování plynů z kapalin-krve, mozko-míšního

moku apod.) Dalším důležitým důsledkem rovnováhy roztoku a čisté látky je vznik osmotického tlaku, který má v biologických systémech zásadní důležitost, např. při transportu látek membránou buňky, stěnami střev a pod. Rozhodující pro stanovení změny termodynamických vlastností čisté látky je hmotnostní množství cizí látky, která je v čisté látce přítomna. Jejich vzájemnou energetickou rovnováhu vyjadřuje chemický potenciál $\mu_i(p, T, x_i)$ [J/kmol], který musí být stanoven pro každou složku i při známé koncentraci x_i [1]; nejčastěji molární či hmotnostní koncentraci, tlaku p [Pa=N/m²=J/m³] a teplotě T [K]. Každou reálnou směs si představíme jako soustavu dvou složek, $i = A$ ---rozpouštědla a $i = B$ ---rozpouštěné látky.

Rozpouštědlo budeme značit indexem A a rozpouštěnou látku indexem B . Rozpouštědlo je v převládající molární koncentraci. Pro kapaliny (popř. pevné látky-sole) značíme $x_A = n_A / n_{\text{tl}}$ a pro plyny (páry) značíme $y_A = n_A / n_{\text{tv}} = p_A / p$. x_A, y_A [1] nazýváme molární zlomky rozpouštědla a analogicky pro rozpouštěnou látku. Vzhledem k tomu, že popisované látky nejsou z termodynamického hlediska ideální, jsou v případě plynů parciální tlaky p_A nahrazeny fugacitami f_A a koncentrace x_A, x_B v případě kapalin nahrazeny aktivitami a_A, a_B . Standardní chemické potenciály čistých látek značíme $\mu_A^*(p^0, T^0)$ a $\mu_B^*(p^0, T^0)$.

1.1. Důsledky termodynamické rovnováhy rozpouštědla a rozpouštěné látky: Raoultův a Henryho zákony.

Stanovíme nejdříve rovnováhu rozpouštěné látky B s rozpouštědlem A . Čistá látka A s chemickým potenciálem $\mu_A^*(p^0, T^0)$ do které je přidáno malé množství nějaké další látky B změní svůj chemický potenciál a stává se rozpouštědlem s chemickým potenciálem $\mu_A(p^0, T^0, a_A)$. Protože *chemický potenciál vyjadřuje energii, kterou na sebe jednotlivé molekuly působí*, pro čistou látku je tato energie (vztahena na 1kmol) rovna $\mu_A^*(p^0, T^0)$ [J/kmol], přidáním -rozpuštěním- množství a_B [1] $\ll 1$ cizí látky, klesne její energie o energii nutnou k rozpuštění této cizí látky. Díky tomuto procesu poklesne velikost chemického potenciálu čisté látky. S ohledem na tvar chemického potenciálu (1.4) je **chemický potenciál jednoho kilomolu rozpouštědla A (obecně tekutiny, /pevné látky, v našem případě, vody, tělních tekutin jako jsou liquor, krev apod.) s malou koncentrací rozpouštěné látky B (obecně tekutiny, popř. solí či plynů) určen vztahem**

$$\mu_A(p^0, T^0, a_A) = \mu_A^*(p^0, T^0) - RTa_B = \mu_A^*(p^0, T^0) + RT^0(a_A - 1) \quad \text{-- Raoultův zákon (1.7)}$$

Tento vztah je důsledkem rovnováhy mezi dvěma chemickými komponentami kde koncentrace jedné převládá, tj. $a_A \gg a_B$, přičemž pro aktivity platí $a_A + a_B = 1$. Vztah (1.7) je důsledek **obecné podmínky termodynamické rovnováhy** směsi definované jako minimum Gibbsova potenciálu

$$\begin{aligned} G &= n_A \mu_A(p^0, T^0, a_A) + n_B \mu_B(p^0, T^0, a_B) = n_A (\mu_A(p^0, T^0, 1) + RT^0 \ln a_A) \\ &+ n_B \mu_B(p^0, T^0, a_B) = n_A (\mu_A(p^0, T^0, 1) - RT^0 a_B) + n_B \mu_B(p^0, T^0, a_B). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Chemický potenciál čisté látky $\mu_A(p^0, T^0, 1) = \mu_A^*(p^0, T^0)$. Při úpravě jsme použili aproximace $\ln a_A = \ln(1 - a_B) \doteq -a_B$. Pro rozpouštěnou látku, tj. za předpokladů $a_A \ll a_B$ a $a_A + a_B = 1$ má podmínka (1.8) tvar

$$G = n_A \mu_A(p^0, T^0, a_A) + n_B \mu_B(p^0, T^0, a_B) = n_A \mu_A(p^0, T^0, a_A) + n_B (\mu_B(p^0, T^0, 1) + RT \ln a_B) = n_A \mu_A(p^0, T^0, a_A) + n_B (\mu_B^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln a_B). \quad (1.9)$$

chemický potenciál rozpouštěné látky (v našem případě, sole, plyny jako kyslík CO_2 apod.) je s ohledem na (1.4) popsán vztahem.

$$\mu_B(p^0, T^0, a_B) = \mu_B^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln a_B - \text{Henryho zákon} \quad (1.10)$$

Stejně vztahy dostáváme i pro plynnou část směsi; složka A je plynné rozpouštědlo a složka B je rozpouštěná plynná látka. Vzhledem k neideálnosti plynů definujeme koncentrace y_A, y_B pomocí fugacit. Potom $n_{Av} \gg n_{Bv}$, $f_A \gg f_B$ a pro velmi malé koncentrace $y_{Bv} \approx 1$, je přípustné $f_A + f_B \rightarrow p^0$, neboli $f_B = p^0 - f_A$. Chemický potenciál plynného rozpouštědla je pak roven

$$\mu_A(p^0, T^0, f_A) = \mu_A^*(p^0, T^0) - RT \left(\frac{f_B}{p^0} \right) = \mu_A^*(p^0, T^0) + RT^0 \left(\frac{f_A}{p^0} - 1 \right) - \text{Raoultův zákon} \quad (1.11)$$

a pro rozpouštěnou plynnou látku má tvar

$$\mu_B(p^0, T^0, f_B) = \mu_B^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln \left(\frac{f_B}{p^0} \right) - \text{Henryho zákon} \quad (1.12)$$

Pro rozpouštědla jsou výchozími vztahy (1.7) (pro kapaliny) a (1.11) (pro plyny) a pro rozpouštěné látky vztahy (1.10) (pro kapaliny/pevné látky) a (1.12) (pro plyny).

1.2. Fázové rovnováhy rozpouštědla a rozpouštěné látky

Termodynamická (chemická) rovnováha kapalného rozpouštědla s plynnou fází rozpouštědla, např. vody s vodní parou je dána rovností chemických potenciálů

$$\begin{aligned} \mu_{A1}(p^0, T^0, a_A) &= \mu_{A1}^*(p^0, T^0) - (1 - a_A) RT^0 = \\ &= \mu_{Av}(p^0, T^0, f_A) = \mu_{Av}^*(p^0, T^0) - \left(1 - \frac{f_A}{p^0} \right) RT^0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

Rozpouštědlo A v kapalném stavu (index "l") je v rovnováze s rozpouštědlem v plynném stavu (index "v").

Stejně tak dostáváme pro termodynamickou rovnováhu kapalně fázové rozpouštěné látky B s její parou vztah

$$\begin{aligned} \mu_{B1}(p^0, T^0, a_B) &= \mu_{B1}^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln a_B = \\ &= \mu_{Bv}(p^0, T^0, f_B) = \mu_{Bv}^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln \frac{f_B}{p^0} \end{aligned} \quad (1.14)$$

Příkladem může být mořská voda, která je rozpouštědlo pro mořskou sůl a vodní pára nad mořem je opět rozpouštědlem pro sůl v plynném (aerosolovém) stavu. Rozpuštěná sůl ve

vodě je v rovnováze se solí ve vzduchu nad mořskou hladinou. Např. v mořské vodě je průměrně 35g/L $\rightarrow x_{\text{NaCl}} = 0,6/(55,5 + 0,6) = 0,0107$ a v 6 metrech nad hladinou je koncentrace soli 10–30 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ v závislosti na rychlosti větru od 5–20 km/hod. Použitím podmínky rovnováhy (1.14) dostaneme

$$\frac{f_{\text{NaCl}}}{p^0} = a_{\text{NaCl}} \exp\left[\frac{\mu_{\text{l,NaCl}}^* - \mu_{\text{v,NaCl}}^*}{RT}\right] = a_{\text{NaCl}} K_{\text{H}_2\text{O,NaCl}} \quad (1.15)$$

a za předpokladu, že koncentrace soli jsou tak malé, že koeficienty aktivity a fugacity jsou blízko jedné, můžeme psát

$$y_{\text{NaCl}} = \frac{f_{\text{NaCl}}}{p^0} = x_{\text{NaCl}} K_{\text{H}_2\text{O,NaCl}}, \quad \text{pro } K_{\text{H}_2\text{O,NaCl}} = \left(\frac{10}{35} \div \frac{30}{35}\right) \cdot 10^{-6} \quad (1.16)$$

Tudíž, u moře je koncentrace soli ve vzduchu přibližně milionkrát menší než ve vodě, srovnaj s Henryho zákonem (1.22).

Ukážeme nyní postup, kterým lze stanovit velikost aktivitních a fugacitních koeficientů a souvislosti mezi nimi. Při standardních podmínkách platí $\mu_{A\text{l}}^* = \mu_{A\text{v}}^*$, $\mu_{B\text{l}}^* = \mu_{B\text{v}}^*$, takže konečný tvar rovnováhy kapaliny a páry nad kapalinou lze podle vztahů (1.13) a (1.14) vyjádřit ve tvaru

$$f_A = \varphi_A p_A = \varphi_A y_A p = p_{A\text{sat}} a_A = p_{A\text{sat}} \gamma_A x_A, \quad \text{pro } p_A = y_A p \quad (1.17)$$

kde $y_A = n_{A\text{v}}/n_{\text{Tv}}$ a $x_A = n_A/n_{\text{Tl}}$ jsou molární zlomky postupně pro plynnou a kapalnou fázi. V případech, že teplota T^0 odpovídající saturačnímu tlaku $p_{A\text{sat}}$ a je dostatečně nízká (menší než několik bar), pak je i fugacitní koeficient φ_A definovaný v rovnici (1.17) velice blízký jedné (toto je tzv. Poyntingova korekce, která neplatí pro látky mající tendenci polymerovat). Referenční tlak při vypařování, kondenzaci či kavitaci, je obvykle pokládán roven saturačnímu tlaku odpovídající čisté látce $p^0 = p_{A\text{sat}}$. Aktivitní koeficient rozpouštědla γ_A určíme experimentálně pomocí **Raoultova zákona**

$$\gamma_A = \frac{p_A}{x_A p_{A\text{sat}}}, \quad \text{přičemž } p_A = p_{A\text{sat}} x_A, \quad \text{pro } \gamma_A \rightarrow 1 \text{ když } x_A \rightarrow 1 \quad (1.18)$$

vztah (1.7) je roven vztahu (1.11). Aktivita a_A čistých látek se blíží k molárnímu zlomku $x_A = n_A/n_{\text{Tl}}$. V aproximaci ideálních plynů je molární zlomek roven **supersaturaci**

$y_A = x_A = p_A/p_{A\text{sat}} = S$. V případě reálných plynů může být aktivitní koeficient značně různý od jedné, viz Obr.1 a 2. Reálné plyny navíc kondenzují a vypařují se. Pro případ kdy je supersaturace menší než 1 dochází k vypařování kapaliny a pro $S > 1$ dochází ke kondenzaci. V zemské atmosféře se vodní pára sráží v kapky a prší.

Ze vztahu (1.18) plyne **cogliativní vlastnost i**), tj., snížení tlaku par rozpouštědla A nad roztokem ve kterém rozpouštěná látka B není těkavá (volatile). Pokles tlaku par rozpouštědla je

$$\Delta p_A = p_{A,\text{sat}} - p_{A\text{v}} = (1 - x_A) p_{A,\text{sat}} = x_B p_{A,\text{sat}} \quad (1.19)$$

Pro směs ideálních tekutin-pro ideální roztok platí, že celkový tlak par nad rozpouštědlem je součet parciálních tlaků

$$p = \sum_i p_{i\text{v}} = \sum_i x_i p_{i,\text{sat}}, \quad \text{pro } i = A, B, \dots \quad (1.20)$$

což je analogií Pascalova zákona pro směs ideálních plynů

$$p = \sum_i p_i = \sum_i x_i p, \quad \text{pro } i = A, B, \dots \quad \sum_i x_i = 1 \quad (1.21)$$

Z podmínky rovnováhy (1.14) plyne užitečný vztah mezi koncentrací rozpouštěné látky a_B (v našem případě plynu-kyslíku, dusíku, CO₂ a pod.) v kapalném složce rozpouštědla A (v našem případě v krvi, liquoru, vody a pod.), tzv. Henryho zákon. Tento zákon je analogem Raoultova zákona (1.18) kde ze známého tlaku nad rozpouštědlem stanovíme koncentraci rozpouštěné (pohlčené) látky B . Zásadní veličinou pro stanovení koncentrace rozpouštěného plynu v kapalině je tlak tohoto plynu nad kapalinou (rozpouštědlem). Chemické potenciály pro rozpouštěnou látku (např. vzduch) ve tvaru (1.14) použijeme jak pro plyn tak i pro kapalinu a položíme sobě rovny. Tímto způsobem vyjádříme chemickou rovnováhu plynu nad rozpouštědlem s plynem již v kapalině rozpouštěným. Po úpravě dostaneme konkrétní tvar **Henryho zákona**

$$\mu_{Bv}(p^0, T^0, f_B) = \mu_{Bl}(p^0, T^0, a_B), \quad \text{nebo } f_B = \varphi_B p_B = p^0 a_B \exp\left[\frac{\mu_{Bv}^* - \mu_{Bl}^*}{RT}\right] = k_{H,B,A} a_B \quad (1.22)$$

Fugacitní koeficient φ_B je díky Poyntingově korekci blízký jedné a normalizace aktivitního koeficientu γ_B pro rozpouštěnou látku je svázána s **Henryho konstantou rozpouštěné látky B v rozpouštědle A**

$$k_{H,B,A} = \lim_{x_B \rightarrow 0} \frac{f_B}{a_B} = \lim_{x_B \rightarrow 0} p^0 \exp\left[\frac{\mu_{Bv}^* - \mu_{Bl}^*}{RT}\right], \quad \left(\doteq \frac{\Delta p_B}{\Delta x_B}\right), \quad (1.23)$$

Tato konstanta má fyzikální rozměr tlaku a fyzikálně reprezentuje hustotu mechanické energie vázanou na v rozpouštědle rozpouštěnou látku (ovšem jen pro velmi malé koncentrace). Srovnáním s Raoultovým zákonem (1.18) vidíme, že je Henryho konstanta při vysokých koncentracích rozpouštěné látky ($x_B \rightarrow 1$) rovna saturačnímu tlaku $p_{B,\text{sat}}$. Zákon (1.22) je **colligativní vlastnost i**).

1.3. Vztahy mezi aktivitními koeficienty rozpouštědla a rozpouštěné látky

Čistě formálním porovnáním vztahů (1.17) a (1.22) vidíme, že Henryho konstanta nahrazuje dobře měřitelnou veličinu $p_{A,\text{sat}}$ používanou v Raoultově zákonu (1.18). Jestliže molární zlomek rozpouštěné látky jde k nule, pak i její aktivitní koeficient $\gamma_B \rightarrow 1$. Takže velikost aktivitního koeficientu rozpouštěné látky můžeme stanovit z Henryho zákona

$$\gamma_B = \frac{p_B}{k_{H,B,A} x_B}, \quad \text{a } p_B = k_{H,B,A} x_B, \quad \text{při } \gamma_B \rightarrow 1, x_B \rightarrow 0 \quad (1.24)$$

Předpokládali jsme že $\varphi_B \approx 1$. Velice slabé roztoky ($x_B \rightarrow 0$) mají zcela rozdílné vlastnosti, pokud jejich molekuly nejsou podobné. V případě jisté podobnosti molekul vyhovují jak rozpouštědlo, tak i rozpouštěná látka Raoultovu (1.11) i Henryho zákonu (1.12) a lze mezi aktivitními koeficienty rozpouštědla a rozpouštěné látky nalézt určité relace.

Označíme indexem "1" např. methanol, popř. amonium a indexem "2" vodu. Indexem "A" vystupuje příslušná chemická komponenta jako rozpouštědlo a s indexem "B" jako rozpouštěná látka. Aktivitní koeficienty rozpouštědla (1.18) a rozpouštěné látky (1.24) jsou

$$\gamma_{1,A} = \frac{p_1}{x_1 p_{1,\text{sat}}}, \quad \gamma_{2,A} = \frac{p_2}{x_2 p_{2,\text{sat}}} \quad \text{jako rozpouštědlo podle Raulta} \quad (1.25)$$

$$\gamma_{1,B} = \frac{P_1}{x_1 k_{H 1,2}}, \quad \gamma_{2,B} = \frac{P_2}{x_2 k_{H 2,1}} \quad \text{jako rozpouštěná látka podle Henryho} \quad (1.26)$$

a nejsou normalizovány stejným způsobem. Existuje však mezi nimi relace

$$\frac{\gamma_{1,A}}{\gamma_{1,B}} = \frac{k_{H 1,2}}{P_{1sat}}, \quad \frac{\gamma_{2,A}}{\gamma_{2,B}} = \frac{k_{H 2,1}}{P_{2sat}} \quad (1.27)$$

kteřou lze díky normalizaci (1.24), $\lim_{x_2 \rightarrow 0} \gamma_{2,B} = 1$ and $\lim_{x_1 \rightarrow 0} \gamma_{1,B} = 1$ přepsat do tvaru

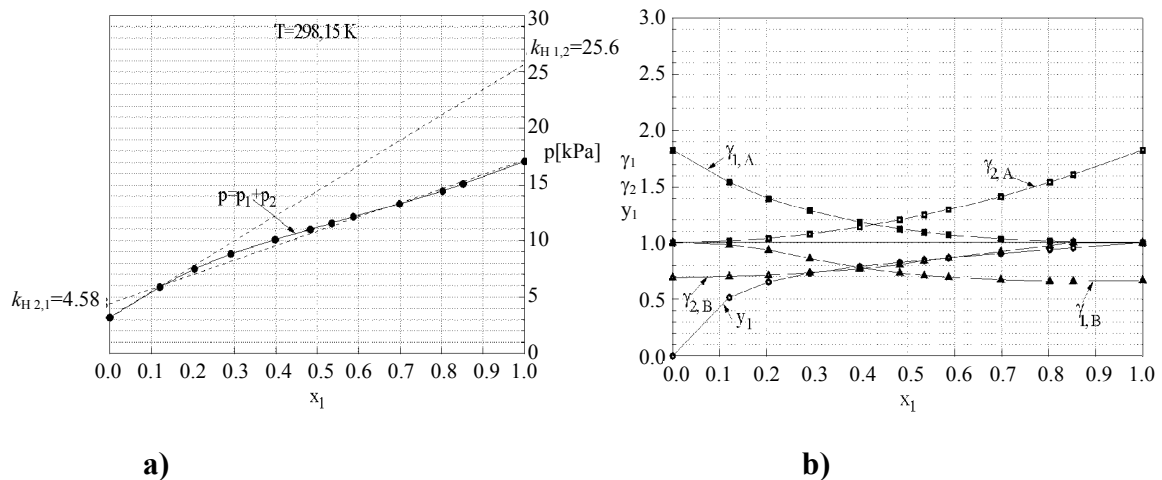
$$\lim_{x_1 \rightarrow 0} \gamma_{1,A} = \frac{k_{H 1,2}}{P_{1sat}}, \quad \lim_{x_2 \rightarrow 0} \gamma_{2,A} = \frac{k_{H 2,1}}{P_{2sat}} \quad (1.28)$$

Dosažením do vztahů (1.27) dostáváme konečnou relaci mezi aktivními koeficienty rozpouštědla a rozpouštěné látky

$$\gamma_{1,A} = \gamma_{1,B} \lim_{x_1 \rightarrow 0} \gamma_{1,A}, \quad \gamma_{2,A} = \gamma_{2,B} \lim_{x_2 \rightarrow 0} \gamma_{2,A} \quad (1.29)$$

Z tohoto vztahu plyne, že např. aktivní koeficient methanolu, popř. amoniaku $\gamma_{1,B}$ jako rozpouštěných látek se při jejich nulové koncentraci blíží 1. Stejná situace nastane i pro vodu jako rozpouštěnou látku kde $\gamma_{2,B} \rightarrow 1$, viz Obr. 1 a Obr. 2.

Typické příklady výpočtu aktivních koeficientů $\gamma_{i,A}$ (rozpouštědlo) a $\gamma_{i,B}$ (rozpouštěné látky) z údajů o rovnováze pára-kapalina jsou uvedeny na obr. 1 a 2. Pro roztok metanol-voda vztah (1.29) není platný v celé oblasti. Měření aktivního koeficientu metanolu bylo provedeno do maximálního rozředění až do limitu detekce chromatografie, tj., $\lim_{x_1 \rightarrow 0} \gamma_{1,A} = 1.7$, viz. [2].



Obr. 1. Methanol (1) – voda (2) a) Rovnovážný tlak systému kapalina-pára. Henryho konstanta je stanovena podle (1.23) b) Molární zlomek y_1 metanolové páry a aktivita rozpouštěné látky jsou určeny rovnicemi (1.25) a (1.26).

1.4. Závislost Henryho konstanty na teplotě a tlaku

Podobně jako saturační tlak p_{Asat} v Raoultově zákonu závisí i Henryho konstanta na tlaku a teplotě. Z Gibbsovy-Duhemovy rovnice $\sum_{i=1}^m n_i (d\mu_i + s_i dT - v_i dp) = 0$, tj., z podmínky, že

$d\mu_B(T, p)$ je totální diferenciál, máme identitu

$$\frac{1}{RT} \left(\frac{\partial \mu_B}{\partial p} \right)_T = \frac{\partial}{\partial p} \ln \left(\frac{f_B}{p^0} \right)_T = \frac{v_B}{RT}, \quad (1.30)$$

nebo

$$\left(\frac{\partial \ln k_{H,B,A}}{\partial p} \right)_T = \frac{v_B^\infty}{RT},$$

kde v_B^∞ je molární objem zředěné rozpouštěné látky (kyslíku, vzduchu apod.) buď v plynné a nebo kapalně fázi.

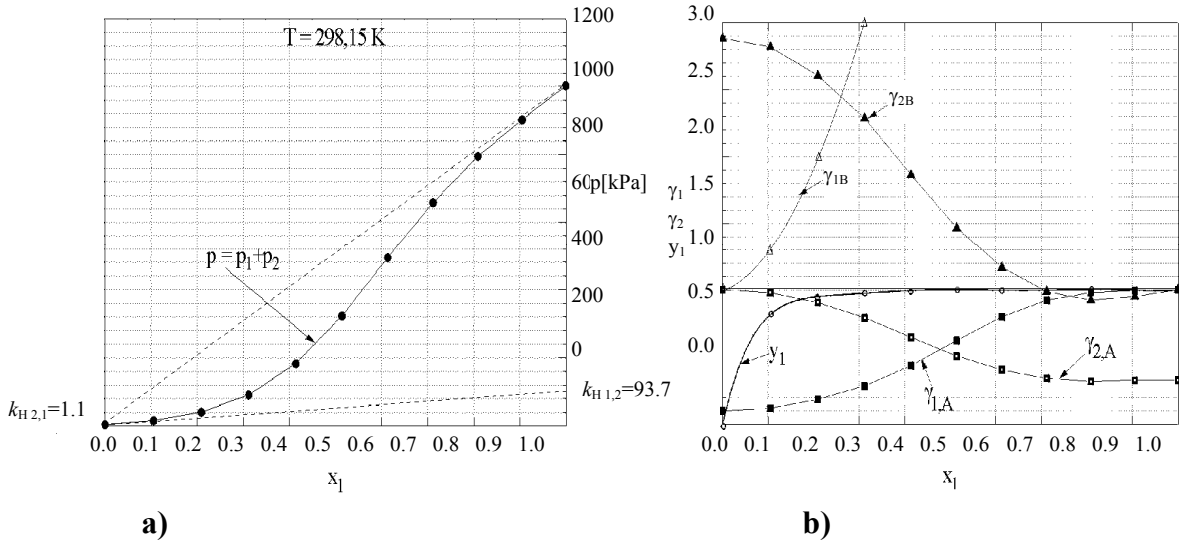


Fig. 2 Ammonia (1) – voda (2) a) Rovnovážný tlak systému kapalina-pára. Henryho konstanta je stanovena podle (1.23). b) Molární zlomek y_1 čpavkové páry a aktivita rozpouštěné látky jsou určeny rovnicemi (1.25) a (1.26).

Termodynamické identity (1.30) můžeme využít ke stanovení závislosti Henryho konstanty na tlaku. Předpokládejme, že koncentrace látky B (plynů) rozpouštěné ve vodě (popř. krvi) je nízká, takže je její aktivní koeficient $\gamma_B \rightarrow 1$. Potom můžeme v rovnici (1.22) nahradit aktivitu koncentrací. Integrací identity (1.30) od $p^0 = p_{B\text{sat}}$ do p a použitím vztahu (1.23) dostáváme obecnou definici Henryho konstanty

$$\ln \frac{f_B}{x_B} = \ln k_{H,B,A}(p_{B\text{sat}}) + \frac{v_B^\infty (p - p_{B\text{sat}})}{RT}. \quad (1.31)$$

Tato rovnice je velice užitečná a pozoruhodně přesná i pro rozpustnost hůře rozpustných plynů, a to až do velmi vysokých tlaků.

Teplotní závislost Henryho konstanty odvodíme opět použitím podmínky totálního diferenciálu $d\mu_b(T, p)$

$$\frac{1}{R} \left(\frac{\partial \mu_B}{\partial T} \right)_p = -\frac{s_B}{R} = \frac{\partial}{\partial T} \left(T \ln \frac{f_B}{p_{B\text{sat}}} \right)_p = \frac{\partial}{\partial T} (T k_{H,B,A}). \quad (1.32)$$

Rozpouštění látky B (vzduchu, aditiv) v rozpouštědle A (oleji) zvyšuje entropii rozpouštěné látky s_B a rozpouštěcí teplo $\Delta h_{B,A} = T(s_B - s_B^0)$ se dodává a $\Delta h_{B,A} > 0$. Jinými slovy rozpouštěním se roztok ochlazuje. Pokud se rozpouštěním roztok zahřívá, pak se teplo odvádí a hodnota $\Delta h_{B,A}$ je záporná. Typický tvar tohoto obecného vztahu (1.32) je

$$k_{HB,A}(T) = k_{HB,A}^0 \exp \left[-\frac{\Delta h_{B,A}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^0} \right) \right], \quad (1.33)$$

kde $k_{HB,A}^0$ je Henryho konstanta B v rozpouštědle A při teplotě T^0 ($= 298.15$ K).

Hlavním cílem experimentu je stanovit velikost rozpouštěcího tepla $\Delta h_{B,A}$ a velikost referenční konstanty $k_{HB,A}^0$.

Jako příklad uvedeme hodnotu Henryho konstanty (1.33), která je definována jako poměr

$$k_{HB,A} = \lim_{x_B \rightarrow 0} \frac{f_B}{a_B} = \frac{p_B}{x_B} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right] \quad (1.34)$$

Rozpouštěná látka	B	k_{HB,H_2O}^0 [bar]	$\frac{\Delta h_{B,H_2O}^0}{R}$ [K]
dušík	N ₂	$8,65 \times 10^4$	1300
vodík	H ₂	$7,21 \times 10^4$	500
kyslík	O ₂	$4,3 \times 10^4$	1700
metan	CH ₄	$4,3 \times 10^4$	1700
oxid uhličitý	CO ₂	$1,6 \times 10^3$	2400
oxid siřičitý	SO ₂	44,86	3100
čpavek	NH ₃	0,937	4100
2-propanol	C ₃ H ₇ OH	0,47	7200
1-propanol	C ₃ H ₇ OH	0,37	7200
ethanol	C ₂ H ₅ OH	0,28	6300
methanol	CH ₃ OH	0,256	4900
kyslík v krvi*)	O ₂	322,6 mmHg	0

Tab 1. Henryho konstanty k_{HB,H_2O}^0 (při $T^0 = 298.15$ K) a entalpie rozpouštění

$\Delta h_{B,H_2O}$ [J mol⁻¹] vybraných plynů ve vodě.

$$*) x_{O_2} = n_{O_2} [\text{mL/dL}_{\text{krve}}] = p_{O_2} [\text{mmHg}] / k_{HO_2,\text{krv}}^0 [\text{mmHg dL/mL}]$$

Z tabulky Tab. 1 a ze vztahu (1.34) je patrné, že koncentrace látky B rozpouštěné v rozpouštědle (vodě) je úměrná tlaku nad rozpouštědlem

$$x_B = \frac{n_B}{n_T} = \frac{n_B}{n_A + n_B} = k_{HB,A}^{-1} p_B = \frac{\exp \left[\frac{\Delta h_{B,A}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^0} \right) \right]}{k_{HB,A}^0} p_B(T) [1] \quad (1.35)$$

a závisí na rozpouštěcím teple $\Delta h_{B,A} = T(s_B - s_B^0)$. Závislost (1.35) ukazuje, že pro teploty vyšší než T^0 koncentrace rozpouštěné látky exponenciálně klesá, tudíž uvolňuje se do plynné fáze. Např. při nárůstu teploty vody z 25 °C na 30 °C klesne koncentrace kyslíku ve vodě o 10 %. Podobná situace nastane i v případě plynů rozpouštěných v krvi, popř. v mozko-míšním moku.

Množství kyslíku rozpouštěného v krvi je rovněž úměrné parciálnímu tlaku kyslíku ve vzduchu, který je 158 mmHg = 0,02118 MPa. Potom koncentrace kyslíku v krvi je

$n_{O_2} \left[\frac{\text{mL}_{O_2}}{\text{dL}_{\text{krve}}} \right] = 158 / 322.6 = 0.49 \text{ mL/dL} = 4.9 \text{ mL/L}$. Za předpokladu, že má člověk 5 L (litrů) pak by jeho krev obsahovala 24.5 mL kyslíku. Průměrně 5L krve se v lidském organismu obmění za jednu minutu a člověk v klidu spotřebuje za tuto minutu 250 mL kyslíku. Tedy 10krát více. Z těchto důvodů je nutný ještě dodatečný mechanismus absorpce kyslíku pomocí hemoglobinu.

2. Osmotický tlak

Osmotický tlak pozorujeme ve slabém roztoku do kterého byla vložena polopropustná membrána, která zajišťuje separaci rozpouštěné látky B , viz Obr. 1. Rozpouštědlo (např. voda) může touto membránou volně procházet a má vlastnosti čisté látky, tj., jeho chemický potenciál je $\mu_A^*(p^0, T^0) = \mu_A(p^0, T^0, a_A = 1)$. Přidáním nějakého množství rozpouštěné látky B je chemický potenciál roztoku $\mu_A(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T, a_B)$ popsán Raultovým zákonem (1.7). Díky membráně může na jedné její straně membrány dojít ke změně množství rozpouštědla A . **Chemická rovnováha mezi rozpouštědlem a roztokem zůstane zachována**, tj.,

$$\begin{aligned} \mu_A^*(p^0, T^0) &= \mu_A(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T, a_A) = \mu_A^*(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T) - RT \frac{n_B}{n_T} = \\ &= \mu_A^*(p^0, T^0) + d\mu_A^*(p^0, T^0) - RT \frac{n_B}{n_T} = \mu_A^*(p^0, T^0) - s_A \Delta T + v_A \Delta p - \frac{RT n_B}{n_T} \end{aligned} \quad (1.36)$$

Předpokládáme-li, že se teplota nemění pak odpovídající změna tlaku na membráně je

$$\Delta p = p - p_0 = \frac{RT n_B}{v_A n_T} = \frac{a_B RT}{v_A} \quad (1.37)$$

Nárůst tlaku v té části objemu do kterého mohlo membránou proniknout jen čisté rozpouštědlo A je důsledkem podmínky chemické rovnováhy (1.36) za předpokladu, že celkové množství rozpouštěné látky B je v této části objemu konstantní. Pro celý objem platí $n_A + n_B = n_T = \text{const}$. V reálných případech je třeba místo koncentrace $x_B = n_B / n_T$ použít afinitu a_B . Rovnice (1.37) se někdy nazývá van't Hoffova formule a je analogická stavové rovnici dokonalého plynu ve tvaru $\Delta p = \Delta n RT$, tj. při konstantní teplotě je změna tlaku úměrná molární koncentraci (počtu molekul).

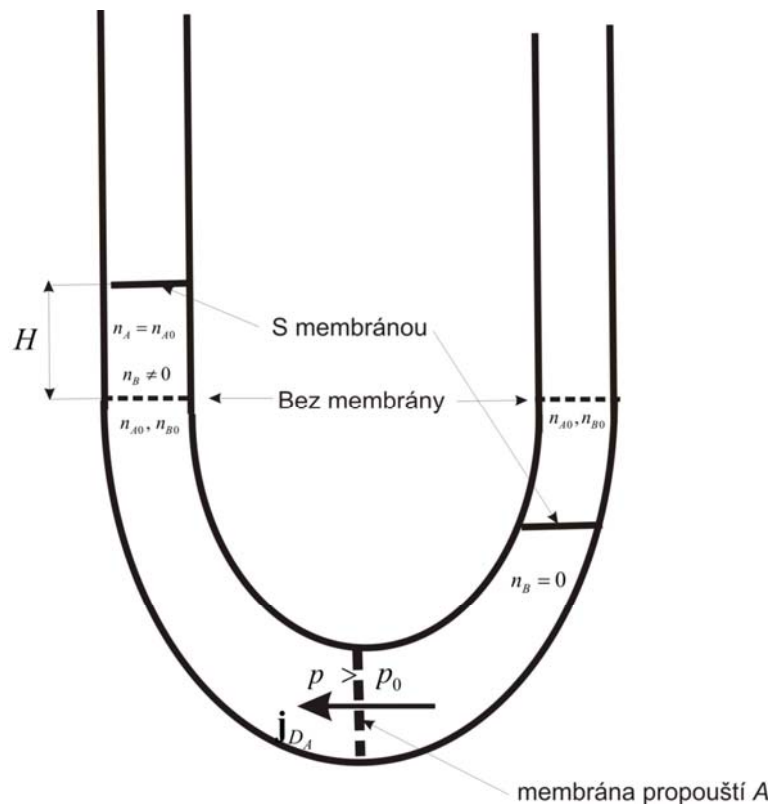
Poznámka: Nárůst tlaku je způsoben pouze existencí polopropustné membrány která musí tento rozdíl tlaků svoji tuhostí vyrovnat. Jestliže polopropustnou membránu odstraníme pak z podmínky rovnováhy (1.8) plyne

$$\begin{aligned} dG_0(p^0, T^0, n_{A0}) &= n_A d\mu_A^*(p^0, T^0, n_A) + \mu_A^*(p^0, T^0, n_A) dn_A + n_B d\mu_B^*(p^0, T^0, n_B) + \mu_B^*(p^0, T^0, n_B) dn_B = \\ &= \left[\mu_A^*(p^0, T^0, n_A) - \mu_B^*(p^0, T^0, n_B) \right] dn_A + n_A d\mu_A^*(p^0, T^0, n_A) + n_B d\mu_B^*(p^0, T^0, n_B) = 0 \end{aligned} \quad (1.38)$$

Důsledek této podmínky je rovnost chemických potenciálů roztoku, rozpouštědla i rozpouštěné látky

$$\mu_A^*(p^0, T^0, n_A) = \mu_B^*(p^0, T^0, n_B) = \text{const. tj., } d\mu_i = -s_i dT + v_i dp = 0, i = A, B \quad (1.39)$$

tudíž i vyrovnání tlaku a teploty, tj., $dp = dT = 0$. Nejsou-li chemické potenciály rovny dochází k chemickým procesům jako je rozpouštění, chemická reakce apod. Konec poznámky.



Obr. 1. Pro případ bez membrány je rozpouštěná látka přítomna v obou částech U trubice ve stejné koncentraci, tj., $n_{B0} \neq 0$ a tok $\mathbf{j}_{D_A} = 0$. V případě, že vložíme polopropustnou membránu a přidáme rozpouštěnou látku B jen do levé části U trubice nemůže rozpouštěná látka membránou pronikat a v pravé části trubice je $n_B = 0$. V té části objemu do které může pronikat rozpouštědlo A, tj., tok $\mathbf{j}_{D_A} \neq 0$ naroste tlak $p > p_0$, viz (1.37).

Osmotický tlak dosahuje již při malých koncentracích rozpouštěné látky, např. soli, značných hodnot a lze využít i v energetice. Oddělením mořské vody při koncentraci soli přibližně 35 g soli/1 L od vody sladké, dosahuje osmotický tlak až hodnoty 14.2 baru. Na tomto případu ukážeme využití vztahu (1.37).

Molekulová hmotnost NaCl je $M_{\text{NaCl}} = 58.5 \text{ kg/kmol}$, takže molární koncentrace soli v mořské vodě je $n_{\text{NaCl}} = (35/58.5) = 0.598 \text{ kmol/m}^3$. Uvážíme-li, že 1 m^3 vody má hmotnost

1000 kg a molekulová hmotnost vody je $M_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$, je molární koncentrace vody

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1000}{18} = 55.6 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}. \text{ Molární objem vody je } v_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1}{n_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{1}{55.6} = 0.018 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}$$

zlomek soli v mořské vodě je $x_{\text{NaCl}} = n_{\text{NaCl}} / (n_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{NaCl}}) = 0,6 / (55,5 + 0,6) = 0,0107 \approx a_{\text{NaCl}}$.

Aktivita je $a_{\text{NaCl}} = \gamma_{\text{NaCl}} x_{\text{NaCl}}$, aktivitní koeficient γ_{NaCl} takto slabého roztoku soli je blízko 1,

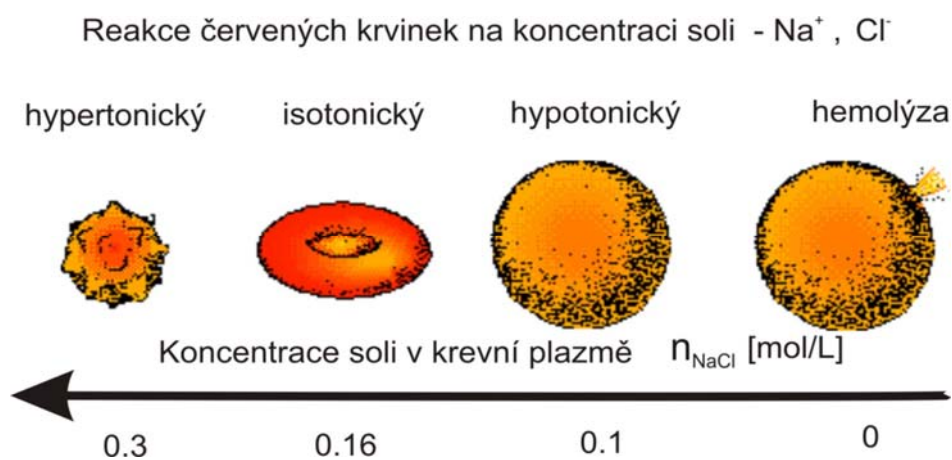
konkrétně při koncentracích $n_{\text{NaCl}} \in (0.01, 1)$ mol/L platí $\gamma_{\text{NaCl}} \in (0.968, 0.905)$. Osmotický tlak (1.37) je roven

$$\Delta p = \frac{a_B RT}{v_A} = \frac{0.0107 \cdot 8315 \cdot (273 + 15)}{0.018} = 1.42 \text{ MPa} = 14.2 \text{ bar} \sim 142 \text{ m vodního sloupce} \quad (1.40)$$

V Norsku využívají spádu sladké (odsolené) vody k pohonu vodních turbin. Sladká voda se spádem o velikosti 120 m pohání vodní turbínu a po smíšení se slanou vodou přes polymerní polopropustné membrány (propouští jen sladkou vodu) vznikne tzv., brakická voda (směs sladké a slané vody) o značné koncentraci soli, která je zpět vytlačena osmotickým tlakem do výše 120m. V současné době Norská společnost Statkraft generuje tímto způsobem 2-4 kW elektrické energie. Ve fázi příprav jsou jednotky o výkonu MW.

2. 1 Hemolýza červených krvinek vlivem snížené koncentrace soli a cukru.

Fyziologická koncentrace soli v krevní plazmě je 0.9g/L, tj., 0.16 mol/L a cukru 5mmol/L. Sůl (NaCl) se za fyziologických podmínek nejen rozpustí ale také disociuje na dvě složky Na^+ a Cl^- . Předpokládejme, že molární koncentrace krevní plazmy je blízká destilované vodě, tj, $n_{\text{krev.plazma}} = n_{\text{H}_2\text{O}} = 55.6$ mol/L a koncentrace iontů je $n_{\text{Na}^+} = n_{\text{Cl}^-} = 0.16$ mol/L. Celkový počet molů v červené krvince je $n_T = n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-} + n_{\text{H}_2\text{O}} = 55.92$ mol/L, takže molární zlomek iontů je $x_{\text{Na}^+} = x_{\text{Cl}^-} = n_{\text{Na}^+} / n_T = n_{\text{Cl}^-} / n_T = 0.16 / 55.92 = 0.0029$. Za předpokladu, že aktivitní koeficienty



Obr. 2. Vliv osmotického tlaku iontů soli na tvar červených krvinek

γ_{Na^+} a γ_{Cl^-} jsou blízko 1 je jejich aktivita $a_{\text{Na}^+} = a_{\text{Cl}^-} = 0.0029$. Každý z těchto iontů vyvolá v červené krvince osmotický přetlak (1.37). Celkový osmotický tlak v červené krvince za předpokladu, že je v ní fyziologická koncentrace iontů $n_{\text{Na}^+} = n_{\text{Cl}^-} = 0.16$ mol/L a v okolí krvinky (v krevní plazmě) je destilovaná voda má hodnotu

$$\Delta p = \frac{a_{\text{Na}^+} RT}{v_{\text{krev. plazma}}} + \frac{a_{\text{Cl}^-} RT}{v_{\text{krev. plazma}}} = 2 \frac{0.0029 \cdot 8315 \cdot (273 + 37)}{0.018} = 8.3 \text{ bar} \quad (1.41)$$

Tento tlak v krvince vede k jejímu porušení-hemolýze. Z těchto důvodů musí být fyziologický roztok isotonický, tj., obsahovat 0.9g/L soli, viz Obr. 2

3. Posun fázové rovnováhy rozpouštědla

Čisté rozpouštědlo v kapalném stavu má za teploty T^0 a tlaku p^0 chemický potenciál $\mu_{A1}^*(p^0, T^0)$ a je v rovnováze se svojí parou $\mu_{Av}(p^0, T^0, a_A = 1)$. Jestliže se v kapalném rozpouštědle rozpustilo určité množství n_B látky B tak se jeho chemický potenciál změnil na $\mu_{A1}(p, T, a_B)$ (Rauoltův zákon (1.7)). V důsledku rozpuštění látky se změnila jak teplota tak i tlak rozpouštědla. Předpokládáme, že látka B není těkavá a nevypařuje se, takže chemické složení parní fáze rozpouštědla není rozpuštěnou látkou ovlivněno, tj.,

$$\mu_{Av}(p = p^0 + \Delta p, T = T^0 + \Delta T, a_A = 1) = \mu_{Av}^*(p = p^0 + \Delta p, T = T^0 + \Delta T).$$

Chemická rovnováha parní fáze čistého rozpouštědla s roztokem je za těchto podmínek dána vztahem

$$\mu_{Av}(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T, a_A = 1) = \mu_{Av}^*(p = p^0 + \Delta p, T = T^0 + \Delta T) = \mu_{A1}^*(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T) - RT \frac{n_B}{n_T} \quad (1.42)$$

Rozvojem kolem stavu T^0, p^0 nalezneme důsledky koncentrace rozpuštěné látky na termodynamické vlastnosti rozpouštědla. Tudiž

$$\begin{aligned} & \mu_{Av}^*(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T) - \mu_{A1}^*(p^0 + \Delta p, T^0 + \Delta T) + RT^0 \frac{n_B}{n_T} = \\ & \mu_{Av}^*(p^0, T^0) + d\mu_{Av}^*(p^0, T^0) = \mu_{A1}^*(p^0, T^0) + d\mu_{A1}^*(p^0, T^0) + RT^0 \frac{n_B}{n_T} \\ & \frac{\partial \mu_{Av}^*}{\partial T} dT + \frac{\partial \mu_{Av}^*}{\partial p} dp - \frac{\partial \mu_{A1}^*}{\partial T} dT - \frac{\partial \mu_{A1}^*}{\partial p} dp + RT^0 \frac{n_B}{n_T} = \\ & - \frac{T^0 (s_{Av}^* - s_{A1}^*)}{T^0} dT + (v_{Av}^* - v_{A1}^*) dp + RT^0 \frac{n_B}{n_T} = 0 \end{aligned} \quad (1.43)$$

Zde jsme využily podmínky rovnováhy čistého rozpouštědla se svojí parou, tj.,

$\mu_{A1}^*(p^0, T^0) = \mu_{Av}(p^0, T^0, a_A = 1)$ a definice chemického potenciálu (1.3). Podle definice je

$$\begin{aligned} T^0 (s_{Av}^* - s_{A1}^*) &= h_{vl} \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right] \text{ teplo fázového přechodu,} \\ v_{Av}^* - v_{A1}^* & \left[\frac{\text{m}^3}{\text{kmol}} \right] \text{ změna molárního objemu} \end{aligned} \quad (1.44)$$

3.1 Posun fázové rovnováhy rozpouštěné látky

Ze vztahu (1.43) plyne posun teploty a tlaku fázového přechodu rozpouštědla ve kterém je rozpuštění určité množství n_B [kmol/m³] rozpouštědla. Při konstantním tlaku je posun teploty fázového přechodu roven

$$\Delta T = T - T^0 = \frac{R(T^0)^2 n_B}{h_v n_T} \quad (1.45)$$

Zvýšení, popř. snížení teploty přechodu závisí na tom jestli je při přechodu teplo dodávané, tj., $h_v > 0$, pak dochází k nárůstu teploty, např. při vypařování a nebo odebírané $h_v < 0$, např. při tuhnutí.

Pro vodu při 100°C a tlaku $p^0 = 1\text{bar}$ je výparné teplo $h_v = 40608\text{ kJ/kmol} = 2256\text{ kJ/kg}$ a teplo tuhnutí při 0°C je $h_{is} = -6012\text{ kJ/kmol} = -334\text{ kJ/kg}$. Pro solný roztok vody platí

$n_T = 55.6 + n_{\text{NaCl}}$. Pro mořskou vodu s molární koncentrací $n_{\text{NaCl}} = (35/58.5) = 0.598\text{ kmol/m}^3$ dostáváme zvýšení bodu varu

$$T = 373.15 + \frac{8314.5 \cdot 373.15^2 \cdot n_{\text{NaCl}}}{40.6 \cdot 10^6 (55.6 + n_{\text{NaCl}})} = 373.15 + 0.303\text{K} = 100.3^\circ\text{C} \quad (1.46)$$

tedy jen o 0.3°C . Experimentálně bylo naměřeno zvýšení o 0.56°C . Důvodem je disociace soli na ionty. Nejvíce jsou zastoupeny ionty chloru $n_{\text{Cl}^-} = 0.546\text{ kmol/m}^3$ a ionty sodíku

$n_{\text{Na}^+} = 0.469\text{ kmol/m}^3$ a koncentrace čisté vody je $n_{\text{H}_2\text{O}} = 53.6\text{ kmol/m}^3$. Takto vypočtené zvýšení bodu varu je

$$T = 373.15 + \frac{8314.5 \cdot 373.15^2 \cdot (n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})}{40.6 \cdot 10^6 (53.6 + n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})} = 373.15 + \frac{8314.5 \cdot 373.15^2 \cdot (0.469 + 0.546)}{40.6 \cdot 10^6 (53.6 + 0.469 + 0.546)} = 100.53^\circ\text{C} \quad (1.47)$$

Tato hodnota 0.53°C se už velmi blíží experimentálně naměřené hodnotě 0.56°C . Rozdíl je způsoben ještě dalšími ionty rozpuštěnými v mořské vodě, např. $n_{\text{Mg}^{2+}} = 0.053\text{ kmol/m}^3$,

$n_{\text{SO}_4^{2-}} = 0.028\text{ kmol/m}^3$, $n_{\text{Ca}^{2+}} = 0.0103\text{ kmol/m}^3$, $n_{\text{K}^+} = 0.0102\text{ kmol/m}^3$, a j.

Podobně pro pokles bodu tuhnutí dostáváme

$$T = 273.15 - \frac{8314.5 \cdot 273.15^2 \cdot (n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})}{6.012 \cdot 10^6 (53.6 + n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})} = 273.15 - \frac{8314.5 \cdot 273.15^2 \cdot (0.469 + 0.546)}{6.012 \cdot 10^6 (53.6 + 0.469 + 0.546)} = 100^\circ\text{C} - 1.92^\circ\text{C} \quad (1.48)$$

Experimentálně byl naměřen pokles o 1.91°C . Rozdíly lze opět vysvětlit tím, že reálná mořská voda je směs ještě většího počtu komponent.

Zajímavou aplikací je snížení bodu tuhnutí vody v zimě, použitím posypové soli. Uvážíme-li, že při 0°C a tlaku $1\text{ atm} = 1.013\text{ bar}$ je nasycený vodný roztok soli 356 g/L , tj. hmotnostní koncentrace $w_{\text{NaCl}} = 356/1356 = 0.263$. Tomu odpovídá molární koncentrace

$$n_{\text{NaCl}} = \frac{w_{\text{NaCl}} n_{\text{H}_2\text{O}} M_{\text{H}_2\text{O}}}{(1 - w_{\text{NaCl}}) M_{\text{NaCl}}} = \frac{0.263 \cdot 55.6 \cdot 18}{(1 - 0.263) \cdot 58.5} = 6.104\text{ kmol/m}^3 \quad (1.49)$$

Při rozpuštění soli dojde k disociaci, takže $n_T = n_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-} = 55.6 + 2 \cdot 6.104 = 67.81\text{ kmol/m}^3$ a pokles bodu tuhnutí solného roztoku je

$$T = 273.15 - \frac{8314.5 \cdot 273.15^2 \cdot (n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})}{6.012 \cdot 10^6 (55.6 + n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})} = 273.15 - \frac{8314.5 \cdot 273.15^2 \cdot (6.104 + 6.104)}{6.012 \cdot 10^6 \cdot 67.81} = -18.5^\circ\text{C} \quad (1.50)$$

Experimentálně stanovený bod tuhnutí nasyceného roztoku je -21.12°C . Důvodem je velikost aktivního koeficientu, která se mění s koncentrací.

Při praktickém použití na silnicích je díky nehomogenitě dosaženo snížení maximálně do teploty -5 až -7°C . Při teplotě -11°C je kuchyňská sůl neúčinná a je třeba použít chlorid vápenatý (CaCl_2), který je účinný až do teplot -35°C .

Podmínku rovnováhy páry rozpouštědla s kapalným roztokem (1.43) můžeme využít ke stanovení změny tlaku par rozpouštědla

$$p = p^0 - \frac{RT^0 n_B}{(v_{Av}^* - v_{Al}^*) n_T} \quad (1.51)$$

Jako příklad můžeme stanovit pokles vodní páry nad nasyceným roztokem soli (1.49).

Molární objemy nasycené páry a kapaliny jsou $v_{\text{H}_2\text{O},v}^* = 10.764$, $v_{\text{H}_2\text{O},l}^* = 0.0187$ m³/kmol

Dosazením do (1.51)

$$p = p^0 - \frac{RT^0 (n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})}{(v_{\text{H}_2\text{O},v}^* - v_{\text{H}_2\text{O},l}^*) (55.6 + n_{\text{Na}^+} + n_{\text{Cl}^-})} =$$

$$1.014 \cdot 10^5 - \frac{8314.5 \cdot 373.15 \cdot (6.104 + 6.104)}{(10.764 - 0.0187) \cdot 67.81} = 1.014 \cdot 10^5 - 51945 = 49455 \text{ Pa} \quad (1.52)$$

Pokles tlaku je značný, avšak při experimentu dochází ke krystalizaci soli v roztoku a přesné hodnoty tlaku nejde dobře stanovit.

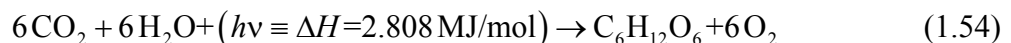
Poznámka.

Pro čisté roztoky, tj. $n_B = 0$, přechází podmínka rovnováhy (1.43) na rovnici Clausiovu-Clapeyronovu

$$\frac{T^0 (s_{Av}^* - s_{Al}^*)}{T^0} dT = (v_{Av}^* - v_{Al}^*) dp \quad (1.53)$$

4. Vznik glukózy a její fermentace

Význam Gibbsovy volné entalpie pro průběh reakcí ukážeme na příkladu syntézy a rozkladu glucozy. Glukoza $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ vzniká fotosyntézou v rostlinách, především v hroznech, popř. bramborách a pod., podle následující reakce



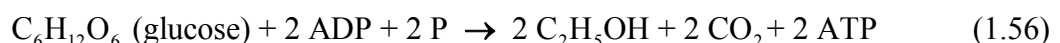
a k její syntéze je nutná energie dodaná sluncem ve formě záření hv , které dodá energii odpovídající entalpii spálení $\Delta H = -\Delta H_c$ (rozklad zpět na $6\text{CO}_2 + 6\text{H}_2\text{O}$). Její molekulová hmotnost je $M_G = 180.16$ g/mol. Standardní spalné teplo při $p = 1$ bar a teplotě $T = 298$ K rovno $\Delta H_c = -2.808$ MJ/mol. Gibbsova volná entalpie $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ jednotlivých složek v reakci (1.54) je

$$6\mu_{\text{CO}_2} + 6\mu_{\text{H}_2\text{O}} + \Delta H_c \rightarrow \mu_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6} + 6\mu_{\text{O}_2} \quad (1.55)$$

$$\Delta G_p = -[6(-394) + 6(-120) + 2808] + 1(-910) + 6 \cdot (0) = -634 \text{ kJ/mol}$$

Celková změna Gibbsovy volné entalpie je díky dodané sluneční energii záporná, takže tato reakce probíhá samovolně.

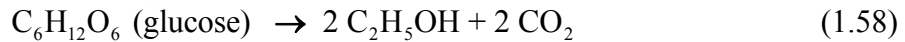
Fermentace je typickým případem anaerobního štěpení cukru (někdy nazýváme kvašení) a probíhá bez přístupu kyslíku. Jeho hlavními produkty jsou etanol, ATP a CO_2



Tento proces používají především kvasinky, rostliny (houby) a pod. V jednotce objemu směsi ve kterém jsou stechiometrické koncentrace substrátů proběhne reakce (1.56) spontánně

$$\Delta G_p = \sum_i v_{pi} \mu_i = -\mu_G - 2\mu_{ADP} - 2\mu_P + 2\mu_E + 2\mu_{CO_2} + 2\mu_{ATP} \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right] \quad (1.57)$$

protože uvolněná Gibbsova entalpie $\Delta G = -180 \text{ kJ}$ na 1 mol glukosy je záporná. Uvážíme-li, že se na syntézu 1 mol ATP z ADP spotřebuje 30.5 kJ uvolní se v celkové reakci



$\Delta G = -235 \text{ kJ}$. Malý rozdíl v ΔG v reakci (1.58) a (1.56), tj., $-235 + 2 \cdot 30.5 = -174 \text{ kJ/mol}$ proti hodnotě $\Delta G = -180 \text{ kJ}$ může být způsoben variabilitou reakce $\text{ADP} + \text{P} \rightarrow \text{ATP} + \text{H}_2\text{O}$ v různých podmínkách.

5. Tepelná zabarvení fázových změn: rozpouštěcí a směšovací tepla

Uvažujeme molární koncentrace $n_i \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$ i když je často výhodnější pracovat s koncentracemi hmotnostními $w_i = m_i / m = m_i / \sum_j m_j = V \rho_i / (V \rho) [1]$ kde $m_i \text{ [kg]}$ je hmotnost

i -té složky a celková hmotnost je konstantní, tj. $m = \sum_i m_i = \text{konst.}$ Ostatní extenzivní veličiny (1.2) mají stejný tvar

$$s = \sum_i s_i w_i \left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}} \right], \quad v = \frac{1}{\rho} = \sum_i v_i w_i \left[\frac{\text{m}^3}{\text{kg}} \right], \quad g = \sum_i \frac{\mu_i}{M_i} w_i \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right] \quad (1.59)$$

a Gibbsova volná entalpie vztažená na 1 kg je rovna

$$dg = \sum_{i=1}^m w_i \frac{d\mu_i}{M_i} + \sum_{i=1}^m \frac{\mu_i}{M_i} dw_i = -s dT + \frac{dp}{\rho} + \sum_{i=1}^m v_{pi} \mu_i \frac{dw_i}{v_{pi} M_i} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right] \quad (1.60)$$

a platí spolu s Gibbsovou-Duhemovou podmínkou

$$\sum_{i=1}^m w_i \left(\frac{d\mu_i}{M_i} + s_i dT - v_i dp \right) = 0, \quad \text{popř. } d\mu_i(T, p) = (-s_i dT + v_i dp) M_i \quad (1.61)$$

která je definicí chemického potenciálu.

Zde $d\xi_p = \frac{dw_i}{v_{pi} M_i} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{kg}} \right]$ je extense chemické reakce $\xi \in (0, 1)$, která vyjadřuje jak velká

část reakce již proběhla. Tato veličina má pro každou komponentu účastnící se reakce, stejnou hodnotu. Její výhodou je, že se může počítat jen s jedním molem každé zúčastněné látky a pro celou reakci máme jen jednu veličinu. Stechiometrický koeficient komponenty do reakce vstupující (substrátu) značíme $v_{pi} < 0$ a je záporný (látko se spotřebovává) a stechiometrický koeficient produktu $v'_{pi} > 0$ je kladný. Díky tomuto označení můžeme Gibbsovu volnou entalpii p -té reakce psát ve tvaru

$$\mathcal{A}_p = - \sum_{i=1}^m v_{pi} \mu_i = -\Delta G_p = \sum_i (v'_{pi} \mu_i - v_{pi} \mu_i) \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right] \quad (1.62)$$

a nazýváme ji **afinitou**. Vyjadřuje rozdíl mezi chemickými potenciály látek do reakce vstupujících a látek z reakce vystupujících. Tudíž pro samovolně probíhající reakce je tato veličina kladná. Totální diferenciál Gibbsovy volné entalpie (1.60) můžeme psát ve tvaru

$$\begin{aligned}
dg &= -sdT + \frac{dp}{\rho} + \sum_{i=1}^m v_{\rho i} \mu_i \frac{dw_i}{v_{\rho i} M_i} \\
&= -sdT + \frac{dp}{\rho} - \mathcal{A}_p \frac{dw_i}{v_{\rho i} M_i} \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right]
\end{aligned} \tag{1.63}$$

$$\text{přičemž platí } s = - \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}} \right], \quad \mathcal{A}_p = - \left(\frac{\partial g}{\partial \xi_p} \right)_{T, p, \xi_p} \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right]$$

Množství tepla, které se do systému přivede ($dq > 0$) vyjádříme formou I. Zákona termodynamiky kde nezávisle proměnnými jsou T, p, ξ_p , tudíž

$$\begin{aligned}
dq = Tds(T, p, \xi_p) &= T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} dT + T \left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_{T, \xi_p} dp + T \left(\frac{\partial s}{\partial \xi_p} \right)_{T, p} d\xi_p \\
&= dh(T, p, \xi_p) - \frac{dp}{\rho(T, p, \xi_p)} - \sum_i v_{\rho i} \mu_i \frac{dw_i}{M_i v_{\rho i}} \\
&= dh(T, p, \xi_p) - \frac{dp}{\rho(T, p, \xi_p)} + \sum_p \mathcal{A}_p(T, p, \xi_p) d\xi_p \\
&= \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} dT + \left[\left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{T, \xi_p} - \frac{1}{\rho} \right] dp + \left[\left(\frac{\partial h}{\partial \xi_p} \right)_{p, T} + \mathcal{A}_p \right] d\xi_p \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right]
\end{aligned} \tag{1.64}$$

$$\text{kde } \mathcal{A}_p(T, p, \xi_p) = - \sum_i v_{\rho i} \mu_i \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right], \quad d\xi_p = \frac{dw_i}{M_i v_{\rho i}} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{kg}} \right]$$

Porovnáním odpovídajících členů zjistíme jak souvisí množství přivedeného (odvedeného) tepla s procesy uvnitř systému. Tudíž při konstantním tlaku a chemickém složení odpovídá změna entalpie systému množství přivedeného tepla a je kvantitativně vyjádřeno **specifickým teplem**

$$c_{p, \xi_p} = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}} \right] \tag{1.65}$$

Množství tepla, které se uvolňuje či pohlcuje při změně tlaku za konstantní teploty a neměnném chemickém složení je charakterizováno tzv. **latentním teplem**

$$h_{T, \xi_p} = \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{T, \xi_p} = \frac{1}{\rho} + T \left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_{T, \xi_p} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{kg}} \right] \tag{1.66}$$

Použitím Kelvinova vztahu

$$\left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{T, \xi_p} = \frac{1}{\rho} - T \left(\frac{\partial(1/\rho)}{\partial T} \right)_{p, \xi_p} \tag{1.67}$$

dostáváme pro směs dokonalých plynů $p = \rho \sum_{i=1}^m \frac{w_i}{M_i} RT$, kde $w_i = \rho_i / \rho$ je hmotnostní zlomek, nulové latentní teplo (1.66).

Vyjádříme teplo uvolněné při chemických reakcích fázových přechodech a při rozpouštění pomocí změny entalpie. Porovnání odpovídajících členů ve vztahu (1.64) a vztahů pro derivace v (1.63) platí

$$\begin{aligned} h_{T,p,p} &= \left(\frac{\partial h}{\partial \xi_p} \right)_{p,T} = T \left(\frac{\partial s}{\partial \xi_p} \right)_{T,p,\xi_p} - \mathcal{A}_p = - \frac{\partial}{\partial \xi_p} \left[T \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{p,\xi_p} - g \right] \\ &= -T^2 \frac{\partial}{\partial \xi_p} \left[\left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{p,\xi_p} \right]_{p,T} \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right] \end{aligned} \quad (1.68)$$

Za předpokladu, že proběhl celý proces, tj. integrací přes $\xi_p \in (0,1)$ můžeme psát

$$h_{T,p,p} = -T^2 \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{p,\xi_p} \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right] \quad (1.69)$$

5. 1. Rozpouštěcí teplo

K objasnění vzniku rozpouštěcího tepla použijeme příklad rozpouštění glukózy ve vodě při přípravě její fermentace s použitím vztahu (1.68). Víme, že rozpouštění cukru ve vodě probíhá samovolně, tzn. že změna Gibbsovy volné entalpie musí být záporná. Nechť je $m = m_G + m_{H_2O}$ celková hmotnost roztoku a m_G je množství glukózy ve vodě o hmotnosti m_{H_2O} . Při rozpouštění dochází k poklesu chemického potenciálu čisté glukózy $\mu_G^*(T, P)$ na potenciál roztoku $\mu_G(T, P, x_G)$. Pro chemický potenciál roztoku blízko meze sytosti platí Henryho zákon (1.10)

$$\begin{aligned} \mu_G^*(T, P) &\rightarrow \mu_G(T, P, x_G), \\ \Delta g(T, P, w_G) &= \frac{m_G}{M_G} \left[-\mu_G^*(T, P) + \left(\mu_G^*(T, P) + RT \ln \frac{x_G}{x_{Gs}} \right) \right] \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right] \end{aligned} \quad (1.70)$$

kde $x_G = \frac{n_G}{n} = \frac{w_G M_{H_2O}}{M_G w_{H_2O} + M_{H_2O} w_G}$ je aktuální molální koncentrace glukózy a x_{Gs} je

koncentrace nasyceného roztoku. Pro lepší měření je někdy výhodné používat hmotnostní koncentrace $w_G = \frac{m_G}{m}$. Pokles chemického potenciálu 1 kg nasyceného roztoku je

$$\Delta g = \frac{RT}{M_G} \ln \frac{w_G}{w_{Gs}} = - \frac{RT}{M_G} \ln \frac{x_{Gs}}{x_G} \quad (1.71)$$

Dosazením do vztahu (1.68) dostáváme konečný tvar pro rozpouštěcí teplo cukru

$$h_{T,p,p} = -T^2 \left(\frac{\partial \Delta g}{\partial T} \right)_{p,\xi_p} = T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{R}{M_G} \ln \frac{x_{Gs}}{x_G} \right)_{p,\xi_p} = \frac{RT^2}{M_G x_{Gs}} \frac{\partial x_{Gs}}{\partial T} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right] \quad (1.72)$$

Jestliže obsah cukru v nasyceném roztoku roste s teplotou, tj. $\frac{\partial x_{Gs}}{\partial T} > 0$, tak je rozpouštěcí teplo $h_{T,p,p}$ kladné (pro rozpuštění dalšího cukru je třeba teplo) a roztok se ochlazuje. Při 18°C je nasycený roztok cukru při dodání 201 g cukru do 100 g vody. Při dalším zvyšování cukru nastává sirup. Rozpouštěcí teplo je $\Delta H_G = -13.4 \text{ kJ/kg}$, tudíž teplo se odvádí a tím se roztok ochlazuje. Vzhledem k tomu, že specifické teplo vody je $c_{p,H_2O} = 4.18 \text{ kJ/kg K}$ a specifické teplo glukózy je $c_{p,H_2O} = 4.18 \text{ kJ/kg K} = 1.244 \text{ kJ/kg K}$ ochladí se nasycený roztok glukózy o

$$\Delta T = \frac{m_G \Delta H_G}{m_G c_{p,G} + m_{H_2O} c_{p,H_2O}} = \frac{0.201(-13.4 \cdot 10^3)}{0.201 \cdot 1.244 \cdot 10^3 + 0.1 \cdot 4.18 \cdot 10^3} = -4^\circ \text{C} \quad (1.73)$$

Tento jev je další ukázka platnosti Braunova-Chatelierova principu: Systém, který se nachází v termodynamické rovnováze (dynamické rovnováze) tlumí změny tohoto stavu využitím všech ostatních vnitřních procesů, v tomto případě eliminuje změnu složení roztoku změnou teploty.

5. 1. Směšovací teplo

Vyjdeme z entropie směšování dvou složek. Předpokládejme, že jde o dva polymery kde polymer A je rozpouštědlo a polymer B je rozpouštěná látka s molárními koncentracemi n_A, n_B . Jejich hmotnosti jsou m_A [kg] a m_B [kg]. Délka těchto polymerů je rozdílná, takže při rozpuštění nedojde ke kontaktu celého řetězce A s celým řetězcem polymeru B , tudíž celková hmotnost roztoku, popř. jeho molární koncentrace jsou

$$m = m_A + \gamma m_B \quad [\text{kg}], \quad \text{popř. } n = n_A + \gamma n_B \quad [\text{mol/m}^3] \quad (1.74)$$

kde γ vyjadřuje jakou částí je polymer B navázán na polymer A . V případě ideálního roztoku je $\gamma = 1$. Tento postup použili Flory a Huggins ve své teorii rozpouštění polymerů. Uvedeme výpočet entalpie směšování jak pro případ celého roztoku, tak i více obvyklý postup pro jednotkový objem. Důvod proč je postup výpočtu užívající molární koncentrace častější, plyne z definice chemického potenciálu (1.10), kde je standardně užívána aktivita

$a_i = \gamma_i x_i$ s aktivitní koeficientem γ_i . Jsou-li $x_A = \frac{n_A}{n}$, $x_B = \frac{n_B}{n}$ molární koncentrace tak jejich

vztah ke koncentracím hmotnostním $w_A = \frac{m_A}{m}$, $w_B = \frac{m_B}{m}$ je následující

$$x_A = \frac{n_A}{n} = \frac{w_A M_B}{M_A w_B + M_B w_A}, \quad x_B = \frac{n_B}{n} = \frac{w_B M_A}{M_A w_B + M_B w_A} \quad (1.75)$$

Celková entropie směšování je podle definice rovna

$$\Delta S_{mix} = m_A s_A + m_B s_B = -\frac{m_A}{M_A} \left(\frac{\partial \mu_A}{\partial T} \right)_p - \frac{m_B}{M_B} \left(\frac{\partial \mu_B}{\partial T} \right)_p = -\frac{R m_A}{M_A} \ln x_A - \frac{R m_B}{M_B} \ln x_B \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{K}} \right]$$

popř. $\Delta S_{mix} = n_A s_A + n_B s_B = -n_A \left(\frac{\partial \mu_A}{\partial T} \right)_p - n_B \left(\frac{\partial \mu_B}{\partial T} \right)_p = -R n_A \ln x_A - R n_B \ln x_B \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right] \quad (1.76)$

S ohledem na chemický potenciál (1.10) jsme entropii stanovily podle Gibbsova-Duhemova vztahu (1.61).

Chemické vazby mezi polymery charakterizujeme vazební energiemi $\Phi_{AA}, \Phi_{BB}, \Phi_{AB}$, v

ideálním roztoku je $\Phi_{AB} = \frac{1}{2}(\Phi_{AA} + \Phi_{BB})$ a v reálném roztoku je dodatečná vazebná energie

$$\Delta\Phi = \Phi_{AB} - \frac{1}{2}(\Phi_{AA} + \Phi_{BB}) \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right] \quad (1.77)$$

Odhadneme celkový počet kontaktů polymerních molekul

$$\underbrace{\gamma n_B}_{\substack{\text{počet polymerů } B \\ \text{s navázanými segmenty}}} \underbrace{z}_{\substack{\text{počet nejbližších} \\ \text{sousedů}}} \underbrace{x_A}_{\substack{\text{pravděpodobnost} \\ \text{kontaktu s polymerem } A}} = n_A z x_B \quad (1.78)$$

Místo neměřitelného parametru γ zavedeme entalpii směšování, která je již měřitelnou veličinou

$$\Delta H_{mix} = n_A z x_B \Delta\Phi \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right], \text{ popř. } \chi_{AB} = \frac{z\Delta\Phi}{RT} [1] \quad (1.79)$$

Entalpie směšování vztaženou na jednotku hmotnosti získáme zavedením hustoty

$\rho_A = \frac{n_A M_A}{V} = \frac{m_A}{V}$, kde V je objem roztoku. Specifická entalpie směšování je

$$\Delta h_{mix} = \frac{\Delta H_{mix} V}{m} = \frac{w_A z x_B \Delta\Phi}{M_A} = \frac{w_A x_B RT \chi_{AB}}{M_A} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}} \right] \quad (1.80)$$

Uvážíme, že Gibbsova volná entalpie směsi je definována vztahem (1.59), pak pro směšování platí

$$\begin{aligned} \Delta g_{mix} &= m_A \frac{\mu_A}{M_A} + m_B \frac{\mu_B}{M_B} = -T \Delta s_{mix} + \Delta h_{mix} = -m_A T s_A - m_B T s_B + \Delta h_{mix} \\ &= RT \left(\frac{m_A}{M_A} \ln w_A + \frac{m_B}{M_B} \ln w_B + \frac{m_A x_B \chi_{AB}}{M_A} \right) \left[\frac{\text{J}}{\text{K}} \right] \\ \text{popř. } \Delta G_{mix} &= RT (n_A \ln x_A + n_B \ln x_B + n_A x_B \chi_{AB}) \left[\frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right] \end{aligned} \quad (1.81)$$

V případě ideálních roztoků je parametr $\gamma = 1$ a entalpie směšování je podle definice entalpie

$H = \sum_i x_i H_i$ [J/mol] rovna nule. Pro reálné roztoky je různá od nuly a závisí na síle interakce

mezi mísícími se molekulami.

Jako příklad vypočteme směšovací entropii při míšení čisté a mořské vody. Entropii stanovíme ze vztahu

$$T \Delta S_{mix} = \Delta H_{mix} - \Delta G_{mix} \quad (1.82)$$

Roztok budeme považovat za ideální, proto $\Delta H_{mix} \doteq 0$ ale vzhledem k nenulové hodnotě

ΔG_{mix} , viz vztah (1.81), bude i entropie míšení nenulová. Předpokládejme koncentraci soli v mořské vodě, přibližně 35 g soli/1 L, viz kap. 2. Tudíž 1 m³ mořské vody má hmotnost 1035 kg. Molekulová hmotnost NaCl je $M_{NaCl} = 58.5 \text{ kg/kmol}$, takže molární koncentrace soli

v mořské vodě je $n_{NaCl} = (35/58.5) = 0.598 \text{ kmol/m}^3$. Uvážíme-li, že 1 m³ vody má hmotnost

1000 kg a molekulová hmotnost vody je $M_{H_2O} = 18 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$, je molární koncentrace vody

$n_{H_2O} = \frac{1000}{18} = 55.6 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$. Molární zlomek soli v mořské vodě je $x_{NaCl} = n_{NaCl} / (n_{H_2O} + n_{NaCl})$

$= 0,6/(55,5 + 0,6) = 0,0107 \approx a_{NaCl}$. Čistá voda v mořské vodě má molární zlomek

$x_{H_2O,see} = 1 - x_{NaCl} = 1 - 0,0107 = 0,9893 \approx a_{H_2O,see}$. Pro srovnání uvedeme hmotnostní zlomky

$w_{NaCl} = \frac{35}{1035} = 0,034$, $w_{H_2O} = 1 - 0,034 = 0,966$, které lze dobře stanovit vážením Podle vztahu

$$(1.75) \text{ můžeme vypočítat molální koncentrace } x_{H_2O,see} = \frac{0,966 \cdot 58,5}{0,966 \cdot 58,5 + 0,034 \cdot 18} = 0,987.$$

Označíme pitnou vodu jako složku *A* a sůl v moři jako složku *B*. Chemický potenciál slabého roztoku soli ve vodě je (1.10)

$$\mu_{H_2O,see}(p^0, T^0, a_{H_2O,see}) = \mu_{H_2O}^*(p^0, T^0) + RT^0 \ln x_{H_2O,see} \quad (1.83)$$

takže směšovací entropie je rovna entropii rozpouštění soli v čisté vodě a podle vztahu (1.76)

$$\Delta s_{mix} = s_{H_2O}^* - \frac{R}{M_{H_2O}} \ln x_{H_2O,see} - s_{H_2O}^* = \frac{8314}{18} \ln 0,989 = 5,11 \left[\frac{J}{kg K} \right] \quad (1.84)$$

zde $s_{H_2O}^*$ jsme označili entropii čisté vody.

Směšovací Gibbsova volná entalpie při 10°C je

$$g_{mix} = -Ts_{mix} = -293 \cdot 5,11 = -1,5 \left[\frac{kJ}{kg} \right] \quad (1.85)$$

a je záporná, tudíž proces probíhá spontánně. Vzhledem k tomu, že proces probíhá izotermicky (nedochází ke změně entalpie jako při rozpouštění (1.72)) je možno přeměnit tuto Gibbsovu volnou entalpii na mechanickou či elektrickou (obecně neobjemovou) energii. Z definice Gibbsovy volné entalpie (1.63) pro isotermický proces při kterém nedochází k chemickým přeměnám plyne, že musí dojít ke změně tlaku, ovšem jen za přítomnosti polopropustné membrány. Tedy

$$dg = \frac{dp}{\rho}, \text{ popř. } \Delta p = \rho g_{mix} = 10^3 \cdot (-1,5 \cdot 10^3) = -15 \text{ bar} \quad (1.86)$$

Při uspořádání na Obr. 1 způsobí míšení pokles tlaku čisté vody a skrz membránu je nasáto tolik čisté vody, že směs vystoupá do výšky 150 m, srovnej s osmotickým tlakem (1.40).

Reference:

- [1] F. Maršík, T. Němec, J. Hrubý, P. Demo, Z. Kožíšek, V. Petr, M. Kolovratník: Binary Homogeneous Nucleation in Selected Aqueous Vapor Mixtures, J. Solution Chem. 37, 2008, 1671-1708
- [2] Bader, M. S. H., Gasem, K. A. M. (1996). Determination of infinite dilution activity coefficients for organic aqueous systems using a dilute vapour-liquid equilibrium method, Chem. Eng. Comm. 140, 41-72

17. Živiny jako zdroj energie

Popište základní biochemické procesy doprovázející transformaci látek (živin) v živé tkáni.

Řešení:

Každý lidský organismus potřebuje k životu zdroj energie. Živiny, které přijímáme z potravy, se liší množstvím energie. Sacharidy a bílkoviny mají prakticky shodnou energetickou hodnotu, lipidy však představují pro organismus nejkoncentrovanější zdroj energie Tab. 1. Z lipidů hrají v metabolismu nejdůležitější roli triacylglyceroly /85%/, uložené v tukové tkáni [2], [3], [6]. Tento text je doplnění textu Mgr. Dominiky Pyšné

Nejrozšířenějším a fyziologicky nejlépe rozpustným sacharidem v lidském těle je glukóza, která poskytuje výhradní zdroj energie pro mozek a v klidovém stavu poskytuje palivo pro všechny ostatní tkáně. Glukóza však může být přeměněna i na jiné formy energie, např. lipidy (cholesterol, steroid, mastné kyseliny aj.) a aminokyseliny. Kromě vitamínů, esenciálních aminokyselin a esenciálních mastných kyselin mohou být všechny metabolity syntetizovány z glukózy [3].

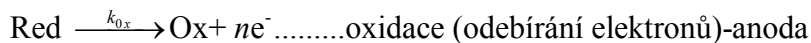
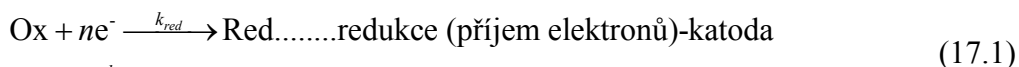
Na proteiny je vázána veškerá forma života, tvoří základ všech enzymů, některých hormonů, hemoglobinu, myoglobinu a mnoha dalších látek. Nadbytečné aminokyseliny nejsou oproti sacharidům a lipidům skladovány formou zásob. Slouží v intermediárním metabolismu a přebytečný dusík tělo vylučuje ureou [2].

živina	spalné teplo kJ/g
sacharidy	17
bílkoviny	17
lipidy	39

Tab.1. Množství energie jednotlivých živin [2]

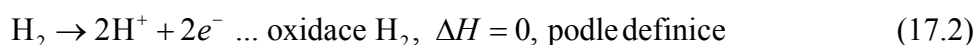
17.1. Přeměna živin na využitelnou formu energie

Základem jsou oxidačně redukční reakce, tzv RedOx nebo Ox/Red

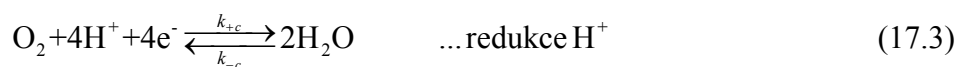


Substance, která uvolňuje elektrony (např. hydride H^- , hydroxide OH^-) je **reduktant** (nazývá se také *redukční agent*, protože snadno oxiduje, tj. odevzdává elektron a tím způsobuje redukci reagující látky) a substance, která přijímá elektron (např. proton H^+ , hydronium H_3O^+) je **oxidant** (nazývá se také *oxidující agent*, protože snadno redukuje, tj., přijímá elektron a tím způsobuje oxidaci reagující látky).

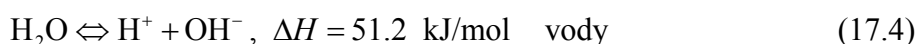
Příkladem může být rozklad molekuly vodíku, její *oxidace na anodě*



Při tomto procesu dochází k disociaci vodíku (H_2) a jsou uvolněny 2 elektrony. H^+ se stává oxidantem, protože přijmem elektronu se redukuje. Ke zpětnému získání elektronů- **redukci- dochází na katodě**



Volné elektrony nejsou nikdy ve tkáni běžně indikovatelné, elektrický náboje se většinou vyskytuje formou protonu H^+ a nebo hydroxyly OH^- . Tato reakce úzce souvisí s přirozenou disociací vody



a definicí kyselosti roztoků, značené

$$pH = -\log_{10} [H^+], \quad (17.5)$$

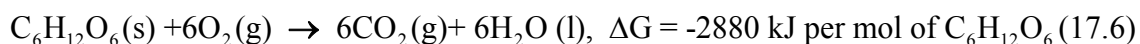
viz Příklad 19.

Tepelné zabarvení chemických reakcí je dáno změnou Gibbsovy volné entalpie $G=H-TS$, kde H je entalpie a S je entropie a T je teplota ve stupních Kelvina [K]. Chemická reakce probíhá spontánně jestliže je změna $\Delta G < 0$. Při isotermických podmínkách je $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$, kde ΔH je entalpie, která se může využít v dalších chemických reakcích (případně převést přímo na elektrickou energii, jako je tomu v palivových článcích) a $T\Delta S$ je množství uvolněného tepla, které musí být z organismu odvedeno.

Poznámka:

Jestliže nějaká chemikálie je donor elektronu (reduktant-redukční agent) tak v důsledku elektroneutrality musí být druhá chemikálie příjemce elektronu (oxidační agent- oxidant). Tedy **reduktanti** jsou oxidovány **oxidanty** a **oxidační činidla (oxidanti)** jsou redukovány **reduktanty**. Reduktant, který má více elektronů (je to většinou záporně nabitý iont- aniont) je odevzdává v důsledku vyrovnávání náboje (podmínka elektroneutrality) oxidantu, který má méně elektronů. Redukční agent je v nižším oxidačním stavu (má nižší oxidační číslo tj., chybí mu méně elektronů než oxidačnímu agentovi) a je tudíž dárce elektronů. Příkladem redukčních agentů jsou vedle kovů, kyselina mravenčí ($HCOOH$ - formic acid) a sulfit (SO_3^{2-} - Sulphur trioxide).

Důležitým případem redukce kyslíku (O_2) při současné oxidaci glukózy ($C_6H_{12}O_6$) je aerobní buněčné dýchání.



(podrobněji viz dále (17.11)) Kyslík se redukuje (přijímá elektrony), takže je oxidační činidlo. Glukóza se oxiduje (vydává elektrony), takže je to redukční činidlo. Gibbsova volná entalpie je záporná, což znamená, že reakce probíhá spontánně. V organické chemii se za redukci nějaké molekuly považuje přidání vodíku k této molekule; nicméně výše uvedené definice stále platí, že při redukci byly elektrony přijaty

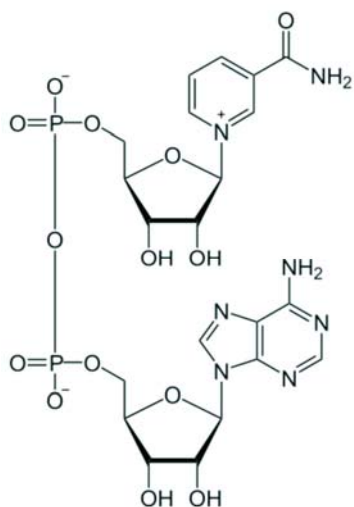
Poněkud komplikovaná interpretace Red/Ox procesů (17.1) vychází z historicky zavedeného pojmu **redukce** jako odstraňování (snižování množství) kyslíku ze sloučeniny, proto slovo

redukce- snížení. Moderní koncepce, která je založena na kvantové struktuře molekul, zavádí pojem „darovat elektrony“ (být oxidován). Tedy pojem „redukce“- snížení, vztáhneme k počtu elektronů dostáváme vlastně oxidaci, tedy význam z hlediska chemie opačný. Původně zavedený pojem redukce reflektuje skutečnost, že i další chemická činidla mohou hrát podobnou roli jako kyslík. **Konec poznámky**

Typickým příkladem látky schopné disociovat i složité molekuly je **Nicotinamide adenine dinucleotide**, zkráceně **NAD⁺**, který je koenzymem vyskytujícím se v živých buňkách, viz Obr. 17.1.

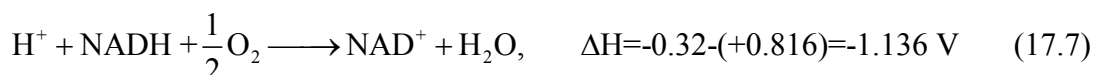
Tento koenzym je dinucleotide, protože se skládá ze dvou nukleotidů spojených fosfátovou skupinou. Jeden nukleotid obsahuje bázi adenin a druhý je nikotinamid. V metabolismu, je NAD⁺ zapojen v redoxních reakcích, nesoucí elektrony z jedné molekuly na jinou. Koenzym se proto nalézá v buňkách ve dvou podobách: **NAD⁺ je oxidační činidlo** – přijímá elektrony z jiných molekul a **tím se redukuje**.

Přechází **do formy NADH**, která pak může být použita jako **redukční činidlo**, tudíž elektrony daruje.



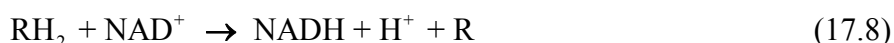
Obr. 17.1 Strukturální vzorec Nicotine amide adenine dinucleotide (NAD⁺, C₂₁H₂₇N₇O₁₄P₂), Mol. hmotnost 663.43 g/mol (bílý prášek)

Typickým příkladem tohoto procesu je redukce kyslíku za vzniku vody



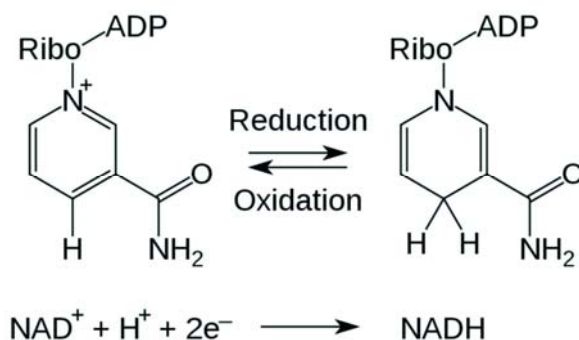
$\Delta H = (96.48 \cdot 2) \cdot (-1.136) = -219.2 \text{ kJ}$ je množství tepla, které se reakcí uvolní na 1 mol H₂O. $F = 96.487 \text{ C/mol} = 96.487 \text{ C/mol J/(Vmol)}$ je Faradayova konstanta udává relaci mezi jednotkami energie vyjádřené v Joulech a energie vyjádřené ve Voltech, protože $V = J/C$.

V metabolismu živé tkáně probíhá cyklický proces ve kterém NAD⁺ přijímá elektrony a NADH je daruje



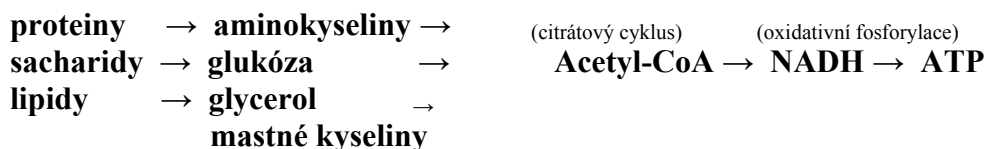
Tato reakce zahrnuje odtržení dvou atomů vodíku z reaktantu (R), což vede k ionizaci vodíku na vodíkový iont (H⁻) a protonu (H⁺). Proton se uvolní do roztoku, zatímco reductant RH₂ který uvolňuje elektrony (oxiduje se) a NAD⁺ elektrony přijímá a je redukován na NADH; přechází na nikotinamid. Jeden ze dvou elektronů 2H⁻ je převeden na kladně nabitý dusík v nikotinamidovém cyklu NAD a druhý atom vodíku je převeden na atom uhlíku C, který se nachází naproti dusíku N. Střední redox potenciál páru NAD⁺/NADH je -0.32 voltů, což činí z NADH silné redukční činidlo. Reakce (17.8) je snadno reverzibilní, tj., NADH redukuje

další molekuly a sám se re-oxiduje na NAD^+ . To znamená, že koenzym trvale osciluje mezi NAD^+ a NADH bez jeho konzumace, viz Obr 17.2.

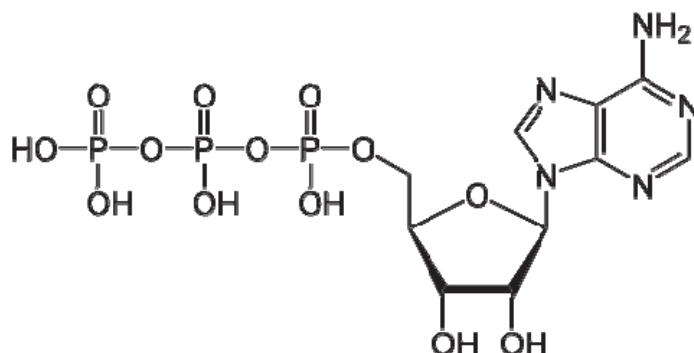
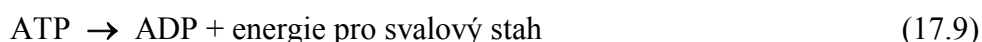


Obr. 17.2 Cyklický proces redukce NAD^+ a oxidace NADH . Komplex Ribo se váže k cukru (pentoze), srovnej vztahy na Obr. 17. 1 a Obr. 17.4

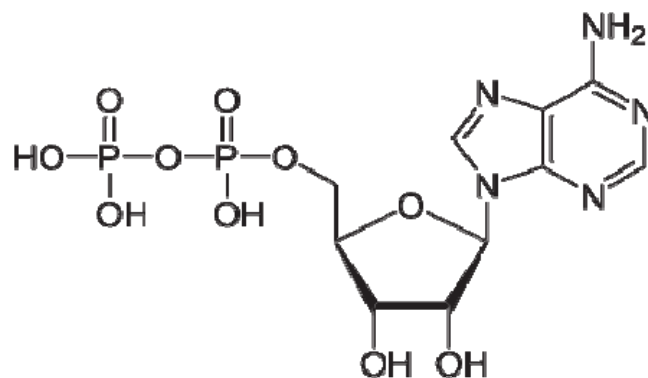
Přímým zdrojem energie organismu jsou *makroergní vazby* kyseliny fosforečné s dalšími organickými látkami. **Makroergní vazba** je taková vazba, při jejímž hydrolytickém štěpení se uvolní velké množství energie. Mezi makroergní sloučeniny patří zejména ATP (adenosintrifosfát), ADP (adenosindifosfát), GTP (guanosintrifosfát) a další. Jednou z forem primární energie lidského organismu je tedy právě adenosintrifosfát (ATP) [1]. Transformace jednotlivých živin na makroergní vazby lze rozdělit na 4 možné stupně, viditelné z následujícího schématu [2]:



V menším poměru se vyskytují např. kreatinfosfát (CP), fosfoenolpyruvát atd. Energie se z vazby ATP uvolňuje štěpením ve formě energie $\Delta H + T\Delta S$ kde ΔH je chemická (elektrická) energie a $T\Delta S$ je uvolněné teplo. Při této transformaci se odštěpuje anorganický fosfát

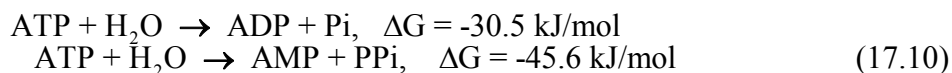


Obr. 17.3 Adenosin trifosfát $\text{ATP-C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_5\text{O}_{13}\text{P}_3$, Molekulová hmotnost je 507.18 g/mol



Obr. 17.4 Adenosin difosfát ADP- $C_{21}H_{27}N_7O_{14}P_2$, Molekulová hmotnost je 427.201 g/mol

Obecná rovnice štěpení ATP je

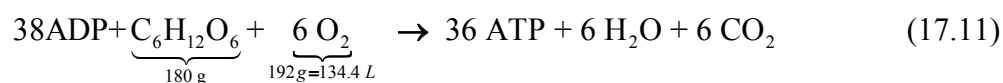


kde produktem je Adenosin difosfát ADP a fosfát (P_i), popř. Adenosin monofosfát AMP a pyrofosfát (PP_i).

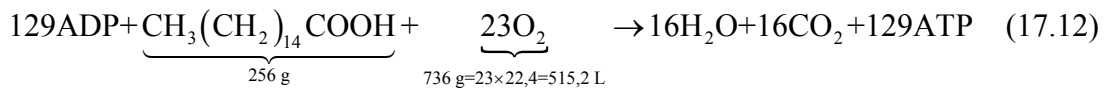
Standardní množství energie uvolněné z hydrolýzy ATP lze vypočítat ze změny Gibbsovy volné entalpie za standardních podmínek a s následnou opravou na biologické podmínky. Čistá změna entalpie (Gibsovy entalpie) při standardní teplotě a tlaku při rozkladu ATP do hydratované ADP a hydratovaného anorganického fosfátu je -30.5 kJ/mol. Tyto hodnoty lze použít pro výpočet změny energie za fyziologických podmínek při znalosti poměru ATP/ADP. Nicméně, více reprezentativní hodnota je ta, která bere v úvahu i AMP a reprezentuje tak konkrétní energetický náboj reakce. Hodnoty Gibbsovy volné energie pro tuto reakci jsou pak závislé na řadě faktorů, včetně celkového iontového náboje způsobeného přítomností alkalických zemin, kovových iontů, jako jsou např. Mg^{2+} , Na^+ , Ca^{2+} , K^+ . Pro typické buněčné podmínky je přibližně $\Delta G = -57 \text{ kJ/mol}$.

17.2 Aerobní a anaerobní způsob získávání energie

Aerobní způsob získávání energie je charakterizován možností svalových buněk vykonávat mechanickou práci za účasti kyslíku. Podílí se např. na energetickém krytí pohybové aktivity vytrvalostního charakteru trvající déle než 2-3 min. Aerobní schopnosti jsou podmíněny z 80% genetickou predispozicí a jsou významným faktorem pro pohybovou aktivitu vytrvalostního charakteru [5]. Zdrojem energie pro svalovou práci je převážně glukóza a ATP, které můžeme vyložit následujícím vztahem [1]



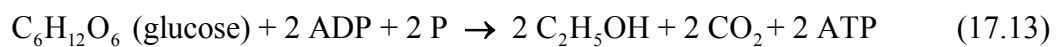
Tudíž 1 g glukózy uvolní v živé tkáni přibližně 16 kJ. Při spalování tuků se uvolní ještě více ATP, a tím i více energie, např. pro tukovou kyselinu (palmitic acid)



takže 1 g palmitové kyseliny uvolní energii přibližně 37 kJ.

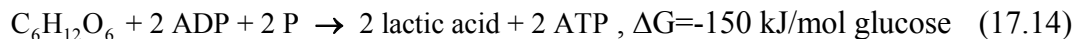
Anaerobní zdroje energie využívá organismus v situacích, kdy není schopen zabezpečit dostatek energie efektivnějším, aerobním způsobem. Bez účasti anaerobní glykolýzy a bez tvorby laktátu ($\text{CP} + \text{ADP} \rightarrow \text{ATP} + \text{C}^-$ systém), je energie uvolňována z ATP a CP (kreatinfosfát), které byly vytvořeny dříve (do zásoby). Anaerobní systém získávání energie dělíme na *fermentaci* a *anaerobní dýchání*.

Fermentace – je typickým případem anaerobního štěpení cukru (někdy nazýváme kvašení). Příkladem je kvasný proces



Tento proces používají především kvasinky, rostliny (houby) a pod. Uvolněná Gibbsova entalpie je 180 kJ/mol glukosy, tj. $\Delta G = -180 \text{ kJ/mol}$. Výsledkem je etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) a CO_2 .

Druhý postup je anaerobně laktátový, kdy se energie získává z anaerobní glykolýzy s tvorbou laktátu LA [1], [7].



Kyselina mléčná (lactic acid- $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CO}_2\text{H}$) je bílá ve vodě rozpustná látka, vznikající rozkladem cukrů který zajišťuje buňka (svalová) a nebo bakterie. Např. *lactic acid bacteria* existují v ústech jimi produkovaná kyselina mléčná je původce zubních kazů. (Sůl kyseliny mléčné vznikající pomocí pyruvátu přes enzym laktate dehydrogenázy se nazývá laktát -LA, který je odpadní produkt získávání převážně mechanické energie a je následně odbouráván v játrech.)

Anaerobní dýchání – je forma dýchání kde akceptor elektronů není kyslík. I když kyslík neslouží jako konečný akceptor elektronů, je dýchací řetězec transportem elektronů tvořen. Aby mohl elektronový transport fungovat a elektrony mohly systémem procházet, musí být přítomen vnější (exogenní) konečný akceptor elektronů. U aerobních organismů je tento poslední akceptor elektronů kyslík. Molekulární kyslík je vysoce oxidační činidlo, a proto je vynikající akceptor. U anaerobních bakterií jsou používány jiné méně-oxidační látky, jako jsou síran (SO_4^{2-}), nitrát (NO_3^-), síra (S), nebo fumarát (fumaric acid). Kde fumarát je meziproduktem v cyklu kyseliny citrónové, který používají buňky k produkci energie z potravy ve formě adenosintrifosfátu (ATP). Tyto látky mají menší redukční potenciál než O_2 , což znamená, že se uvolní méně energie. Anaerobní dýchání je proto obecně energeticky méně efektivní, než aerobní dýchání. Uvádí se, že tímto způsobem lze vyprodukovat ze stejného množství potravy (glukozy) jen 5 - 10% energie získatelné aerobním způsobem. Anaerobní respiraci používají hlavně prokaryoti, kteří žijí v prostředí postrádající kyslík. Mnoho anaerobních organismů může dýchat pouze pomocí anaerobních sloučenin a zemřou v přítomnosti kyslíku.

17.3 Energetické krytí organismu při pohybové zátěži

Existuje celá řada energetických zdrojů pro různé fáze pohybové aktivity. Celkový přehled zdrojů z hlediska jejich lokalizace je přiložen v Tab.č.2.

Pohybová zátěž rychlostního charakteru s dobou trvání výkonu přibližně 15 s využívá jako hlavní energetický zdroj systém makroergních fosfátů ATP a CP s nepatrnou tvorbou kyseliny mléčné. Rychlostně vytrvalostní zatížení v rozmezí 15 – 50 s využívá ATP a CP, anaerobní glykolýzu s tvorbou laktátu. Zdroj energie při krátkodobém vytrvalostním zatížení do 2 minut zajišťuje proces- anaerobní glykolýza s velmi vysokou tvorbou laktátu (glykolytická fosforylace). Vysoký obsah laktátu ve svalech způsobuje výrazný pokles pH (nárůst kyselosti, tj. nárůst koncentrace H^+ , a tím i nárůst oxidantů způsobující degradaci některých proteinů) [1]. U trénovaného jedince by měla být schopnost odbourávat kyselinu mléčnou snadnější.



Vytrvalostní zatížení středního trvání 2 – 11 min využívá především glycidy se středním množstvím vytváření laktátu, dlouhé vytrvalostní zatížení 11 – 60 min využívá glycidy a lipidy, vytváření kyseliny mléčné je minimální. Velmi dlouhá doba zatížení (delší než 60 min) využívá jako energetický zdroj převážně lipidy a glycidy, laktát se tvoří v malé míře [1].

Tkáň	zdroj	zásoba v kJ
příčně pruhovaná svalovina	ATP	10
	CP	30
	glykogen	6 700
	- anaerobně	600
	- aerobně	6 000
	triglyceridy	11 000
	proteiny	160 000
Krev	glukóza	300
	neesenciální mastné kyseliny	15
	triglyceridy	150
Játra	glykogen	1 500
tuková tkáň	lipidy	560 000

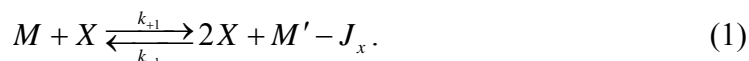
Tab. 2 Energetické zdroje v lidském organismu. ATP - adenzinotrifosfát, CP – kreatinofosfát, vztaženo na 20 kg zatěžované svalové hmoty podle [4].

Reference

- [1] Havlíčková, L. a kol. Fyziologie tělesné zátěže I. Obecná část. Praha : Nakladatelství Karolinum, 2004. 203 s. ISBN 80-7184-875-1
- [2] Holeček, M. Regulace metabolismu cukrů, tuků, bílkovin a aminokyselin. Praha : Grada, 2006. 286 s. ISBN 80-247-1562-7
- [3] Marieb, E.N., Hoehn, K. Human physiology & anatomy. San Francisco : Pearson international edition, 2007. 1159 p. ISBN 0-321-37294-8
- [4] Melichna, J.: Pohyb a morfologická adaptabilita kosterního svalu. Praha : Karolinum, 1990.
- [5] Meško, D. a kol. Telovýchovnělékárské vademekum. Bratislava : Slovenská spoločnosť telovýchovného lekárstva, 2005. 221 s. ISBN 80-969446-4-9
- [6] Greenway S.C. Human energy metabolism in health and disease. New Jersey : John Wiley & Sons, 2004, Chap. 9, Funkcional metabolism: regulation and adaptation. Dostupná také z WWW:
- [7] https://en.wikipedia.org/wiki/Nicotinamide_adenine_dinucleotide
- [8] http://books.google.cz/books?id=yum9_yrFYC&pg=PA243&lpg=PA243&dq=human+energy+lipids&source=bl&ots=16opUHE3Ty&sig=jFlzFzAShS9iN00833eKoKQqRsE&hl=cs&ei=LIGuSpGaDcKksAaenZzrBw&sa=X&oi=book_result&ct=result&resnum=3#v=onepage&q=human%20energy%20lipids&f=false. ISBN 0-471-41090-X

Příklad:

Analyzujte proces (chemickou reakci) nazývaný *Autokatalýza – rozmnožování*, který je popsán rovnicí



Proces probíhá v prostředí M měnicím se na prostředí M' s možností odtoku množící se komponenty X . Účastníky procesu jsou následující složky:

M ... je původní prostředí

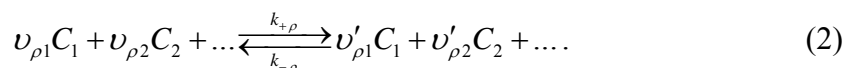
M' ... je prostředí po katalýze

X ... je množící se složka např. molekula, buňka, jedinec apod.

J_x ... označuje tok složky X , pro $J_x > 0$ dochází k odstranění z místa reakce.

Řešení:

Formulujeme diferenciální rovnici pro časovou změnu komponenty X v rovnici (1). Vyjdeme z nějaké obecné rovnice



Nechť jde např. o ρ -tou rovnici pro chemické komponenty $C_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots$. Tato rovnice popisuje chemickou kinetiku s dopřednou rychlostí chemické reakce $k_{+\rho}$ a zpětnou rychlostí $k_{-\rho}$. Zde $\nu_{\rho\alpha}$ označuje stechiometrický koeficient substrátů reakce (na levé straně rovnice (2)) a analogicky $\nu'_{\rho\alpha}$ je stechiometrický koeficient produktů reakce (komponent na pravé straně rovnice (2)). Rychlost chemické reakce (2) vyhovuje zákonu aktivních hmot $w_\rho = k_{+\rho} n_1^{\nu_{\rho 1}} n_2^{\nu_{\rho 2}} \dots - k_{-\rho} n_1^{\nu'_{\rho 1}} n_2^{\nu'_{\rho 2}} \dots$ kde $n_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots$ jsou látková množství (popř. molární koncentrace) odpovídajících složek. Rychlost vzniku, např. komponenty C_1 je pak dána vztahem

$$\dot{n}_1 = \frac{dn_1}{dt} = (\nu'_{\rho 1} - \nu_{\rho 1}) w_\rho, \quad (3)$$

který reprezentuje bilanci hmotnosti v chemických reakcích, viz např. vztah (5.73) v knize [1].

Zákon aktivních hmot aplikujeme nyní na naši chemickou rovnici (1) a pro rychlost této chemické reakce dostáváme vztah $w_\rho = k_{+1} n_M n_X - k_{-1} n_M^2 n_X^2$. Podle rovnice (3) je změna složky X dána diferenciální rovnicí

$$\dot{n}_X = \frac{dn_X}{dt} = (\nu'_{\rho X} - \nu_{\rho X}) w_\rho = k_{+1} n_X n_M - k_{-1} n_X^2 n_M^2 - J_x. \quad (4)$$

Rozdíl stechiometrických koeficientů je $\nu'_{\rho X} - \nu_{\rho X} = 2 - 1 = 1$.

Budeme nejdříve hledat možné stacionární stavy. Pro zjednodušení zavedeme rovnovážnou konstantu chemické reakce (1) určenou poměrem rychlostí dopředné reakce k_{+1} a zpětné reakce k_{-1} , tudíž

$$K_1 = \frac{k_{+1}}{k_{-1}} = A e^{-\frac{h_I}{RT}}. \quad (5)$$

Zde A je konstantní faktor, a h_I je energie reakce, pro $h_I > 0$ jde o energii spotřebovanou k rozmnožení složky X , viz rovnici (5.60) v knize [1].

Za předpokladu nulového odtoku $J_x = 0$ má rovnice (4) dva stacionární stavy

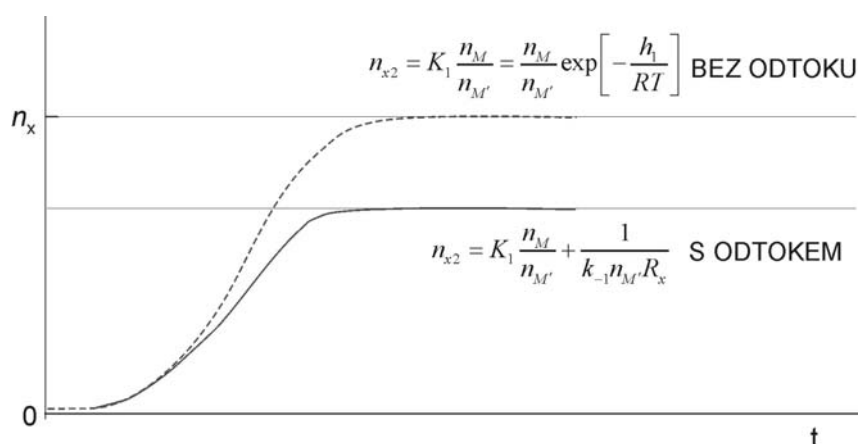
$$n_{x1} = 0, \quad n_{x2} = K_1 \frac{n_M}{n_{M'}} = A \frac{n_M}{n_{M'}} e^{-\frac{h_1}{RT}}. \quad (6)$$

Velikost stacionárního stavu se změní při nenulovém odtoku složky X. Předpokládejme závislost odtoku na koncentraci, např. $J_X = \frac{n_X}{R_X}$, kde R_X je odpor kladený prostředím. V tomto případě je stacionární stav procesu (4) vyjádřen podmínkou

$$\left[k_{-1} n_{M'} \left(n_X - K_1 \frac{n_M}{n_{M'}} \right) + \frac{1}{R_X} \right] n_X = 0, \quad (7)$$

$$n_{x1} = 0, \quad n_{x2} = K_1 \frac{n_M}{n_{M'}} - \frac{1}{k_{-1} n_{M'} R_X}. \quad (8)$$

Stacionární koncentrace jsou uvedeny na obrázku ze kterého je vidět, že při rostoucí energii $h_1 = h_1(n_X, n_M, n_{M'})$ klesá i konečná stacionární hodnota n_{x2} . Ukazuje se rovněž jak důležitý je vliv prostředí $n_M = n_M(n_X), n_{M'} = n_{M'}(n_X)$.



Obr. Vliv energie rozmnožování h_1 a odtoku $J_X = \frac{n_X}{R_X}$, kde R_X je odpor prostředí na velikost stacionární koncentrace komponenty X.

Přesné řešení rovnice (4) dostaneme její přímou integrací v časovém intervalu $\langle t_0, t \rangle$ a jim odpovídajícím koncentracím $n_{x,0} = n_X(t_0), n_X(t) = n_X$

$$\int_{n_{x,0}}^{n_X} \frac{dn_X}{n_X(a + bn_X)} = -\frac{1}{a} \ln \left| \frac{(a + bn_X)n_{x,0}}{n_X(a + bn_{x,0})} \right| = t - t_0, \quad \text{pro } a = k_{+1}n_M - \frac{1}{R_X}, \quad b = -k_{-1}n_{M'} \quad (9)$$

Uvážíme-li, že

$$-\frac{a}{b} = \frac{k_{+1}n_M}{k_{-1}n_{M'}} - \frac{1}{k_{-1}n_{M'}R_X} = n_X(t \rightarrow \infty) = n_{x2} \quad (10)$$

dostáváme po úpravě časovou závislost množící se složky na její hodnotě počáteční $n_{x,0} = n_X(t_0)$ a na její hodnotě konečné n_{x2} ve tvaru

$$n_x(t) = \frac{n_{x0}n_{x2}}{n_{x2} \exp[-a(t-t_0)] + n_{x0} [1 - \exp[-a(t-t_0)]]} \quad (11)$$

Z tohoto obecného tvaru je zřejmé, že počáteční hodnota množící se komponenty n_{x0} nemůže být nulová; nebo-li proces autokatalýzy musí začít od nějakého jedince.

Vidíme, že rozhodující význam má koeficient

$$a = k_{+1}n_M - \frac{1}{R_x}. \quad (12)$$

Je-li tento koeficient kladný má průběh $n_x(t)$ monotónní průběh, v případě, že odpor prostředí R_x klesá může klesat i koncentrace množící se komponenty X .

Doporučená literatura:

[1] F. Maršík, I. Dvořák: Biotermodynamika, Academia , Praha 1998.

Příklad: Uved'te definici pH roztoku, jeho vlastnosti a popište jeho měření.

Řešení

Měření pH je všeobecně známý analytický proces. Navzdory tomu je tento proces velmi často chybně interpretován. Tento příklad podává vysvětlení měření pH, odhalení skrytých záludností a vlivů dalších proměnných na tuto analytickou metodu.

Veličina pH je odvozena z potenciálu vodíku a je vyjádřena logaritmickým vzorcem:

$$\text{pH} = -\log_{10} a_{\text{H}^+}, \quad (1)$$

a_{H^+} vyjadřuje aktivitu vodíkového iontu, H^+ . Aktivita je závislá na koncentraci měřeného roztoku vyjádřené počtem molů. Rovnice (1) je obvykle užívána v následujícím tvaru

$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+], \quad (2)$$

kde $[\text{H}^+]$ je koncentrace vodíkových iontů, tj. počet molů H^+ v 1 litru vody¹.

Obvyklý rozsah pH je odvozen z disociace vody



Disociační konstanta, K_w je definována obvyklým způsobem:

$$K_w = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]} = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-], \quad (4)$$

kde $[\text{H}^+]$ je koncentrace (látkové množství) vodíkového iontu, $[\text{OH}^-]$ je koncentrace (látkové množství) hydroxylového iontu. Pro lepší manipulaci předpokládáme látkové množství $[\text{H}_2\text{O}] = 1 \text{ M}$, tj. 18 g vody. Molární koncentrace

čisté vody je $[\text{H}_2\text{O}] = \frac{1000}{18} = 55,55 \text{ M}$.

Za předpokladu, že roztok je i elektricky neutrální, tj. počet kladných i záporných iontů je stejný, lze z rovnice (4) odvodit rozhodující vztah:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_w}. \quad (5)$$

K_w má při teplotě 25 °C a tlaku 1 baru hodnotu $1,001 \times 10^{-14}$. Z rovnice (5) vypočteme koncentrace iontů ve vodě

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_w} = \sqrt{1,011 \times 10^{-14}} \approx 10^{-7} \quad (6)$$

při uvedených podmínkách. Substitucí do rovnice (2) dostáváme

$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+] = -\log_{10} 10^{-7} = 7. \quad (7)$$

Podobně můžeme definovat další veličinu nazývanou pOH

$$\text{pOH} = -\log_{10} [\text{OH}^-] = -\log_{10} 10^{-7} = 7. \quad (8)$$

Tudíž celý rozsah hodnot pH je od 0 do 14 a *neutrální roztok* je definován jako roztok jehož koncentrace iontů je rovna $\text{pH} = \text{pOH} = 7$.

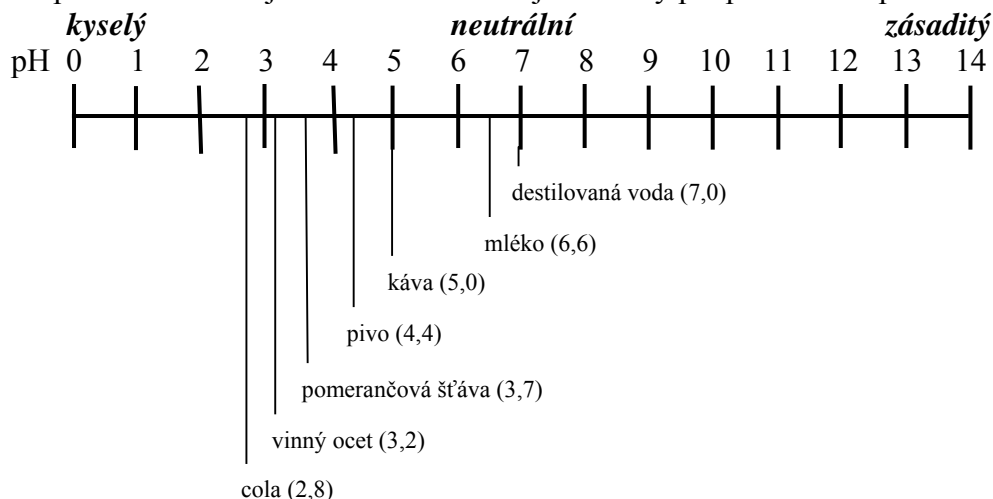
¹ Koncentrace je uváděna v Molech, tj. $[\text{H}^+] = \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right] = \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right] = \text{M}$

Disociační konstanta K_w je závislá na teplotě a může se měnit od $1,156 \times 10^{-15}$ při 0°C do $5,189 \times 10^{-13}$ při 100°C , viz Tabulku 1.

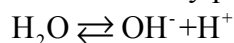
Teplota $^\circ\text{C}$	Teplota $^\circ\text{K}$	K_w	pH pOH
0	273,15	$1,156 \times 10^{-15}$	7,47
5	278,15	$1,872 \times 10^{-15}$	7,36
10	283,15	$2,964 \times 10^{-15}$	7,26
15	288,15	$4,573 \times 10^{-15}$	7,17
20	293,15	$6,878 \times 10^{-15}$	7,08
25	298,15	$1,011 \times 10^{-14}$	7,00
30	303,15	$1,455 \times 10^{-14}$	6,92
35	308,15	$2,055 \times 10^{-14}$	6,84
40	313,15	$2,854 \times 10^{-14}$	6,77
45	318,15	$3,898 \times 10^{-14}$	6,70
50	323,15	$5,245 \times 10^{-14}$	6,64
55	328,15	$6,957 \times 10^{-14}$	6,58
60	333,15	$9,104 \times 10^{-14}$	6,52
65	338,15	$1,176 \times 10^{-13}$	6,46
70	343,15	$1,501 \times 10^{-13}$	6,41
75	348,15	$1,893 \times 10^{-13}$	6,36
80	353,15	$2,362 \times 10^{-13}$	6,31
85	358,15	$2,917 \times 10^{-13}$	6,27
90	363,15	$3,567 \times 10^{-13}$	6,22
95	368,15	$4,321 \times 10^{-13}$	6,18
100	373,15	$5,189 \times 10^{-13}$	6,14

Tabulka 1: Teplotní závislost K_w , pH a pOH při tlaku 1 baru.

Stupnice na následujícím obrázku ilustruje hodnoty pH pro některé používané nápoje



Gibbsovu volnou entalpii (někdy se užívá kratší název Gibbsova energie) vodíkových iontů ve vodě vypočteme z rovnovážné konstanty přirozené disociace vody



Standardní Gibbsovy energie (v našem případě referenční chemické potenciály) jsou pro většinu látek tabelovány, např [1]. Zde nalezneme hodnoty chemických potenciálů vniku příslušných komponent, $\bar{\mu}_{\text{H}_2\text{O}} = -237 \text{ kJ/mol}$, $\bar{\mu}_{\text{OH}^-} = -157 \text{ kJ/mol}$,

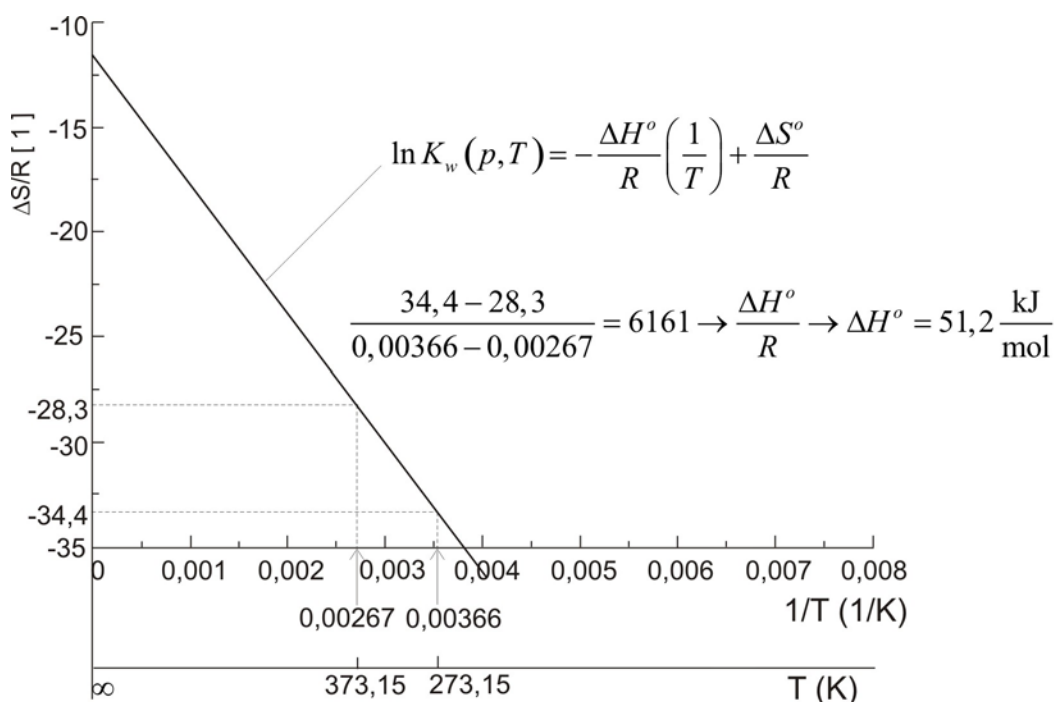
$\bar{\mu}_{\text{H}^+} = 0 \text{ kJ/mol}$. Logaritmus rovnovážné konstanty je roven záporně vzaté Gibbsově volné entalpii

$$\begin{aligned} RT \ln K_w &= RT \ln \left[\frac{[\text{OH}^-][\text{H}^+]}{[\text{H}_2\text{O}]} \right] = -\Delta G = -(-\bar{\mu}_{\text{H}_2\text{O}} + \bar{\mu}_{\text{OH}^-} + \bar{\mu}_{\text{H}^+}), \\ &= -237 + 157 + 0 = -80 \text{ [kJ/mol]} \end{aligned} \quad (9)$$

viz např. [2]. Z tohoto vztahu nalezneme konkrétní velikost rovnovážné konstanty

$$K_w = \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right) = \exp\left(\frac{-80 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 298,15}\right) = \exp(-32,2331) = (9,969 \cdot 10^{13})^{-1} \doteq 10^{-14} \quad (10)$$

Ke stejným závěrům dospějeme z teplotní závislosti rovnovážné konstanty z Tabulky 1.



Obr. 1: Stanovení velikosti Gibbsovy volné entalpie ΔG z teplotní závislosti $K_w(p, T)$ pro $p = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $T \in (0^\circ - 100^\circ \text{C})$, viz Tab. 1

Z obr. 1 nalezneme změnu entropie $\frac{\Delta S^\circ}{R} = -12$ pro $T \rightarrow \infty$, pro $R = 8314 \text{ J/mol}$

plyne $\Delta S^\circ = -99,8 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$ a tudíž $-\Delta G^\circ = -\Delta H + T^\circ \Delta S^\circ = -51200 - 298,15 \cdot 99,8 =$
 $-80900 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = -80,9 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$.

Měření pH definované na základě elektrochemických veličin

Mělo by být zřejmé, že měření $[H^+]$ nebo $[OH^-]$ metodami analytické chemie není proveditelné. Tudíž rovnici (1) musíme vyjádřit v jiné formě – nazývané Nernstova rovnice, která popisuje pH pomocí elektrických veličin:

$$E = E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln a_{H^+}, \quad (11)$$

kde E značí potenciál v milivoltech (mV) a E° je standardní potenciál vodíkové elektrody (0 mV), R je univerzální plynová konstanta, T je teplota ve stupních Kelvina n počet elektronů vstupujících do reakce, tzn. $n=1$, F je Faradayova konstanta a a_{H^+} je aktivita vodíkového iontu.

Dosazením numerických hodnot pro různé konstanty a převedením přirozeného logaritmu na dekadický se rovnice (11) redukuje na tvar:

$$E = E^\circ + 0,1984 \cdot (t + 273,15) \cdot pH. \quad (12)$$

Člen $0,1984 \cdot (t + 273,15)$ je znám jako Nernstův faktor a popisuje rychlost změny v mV vzhledem k teplotě, viz Tabulka 2.

Teplota (°C)	Nernstův faktor (mV/pH)
0	54,19
5	55,18
10	56,18
15	57,17
20	58,16
25	59,15
30	60,14
35	61,14
40	62,13
45	63,12
50	64,11
55	65,10
60	66,10
65	67,09
70	68,08
75	69,07
80	70,06
85	71,06
90	72,05
95	73,04
100	74,03

Tabulka 2: Teplota vs. změna v mV

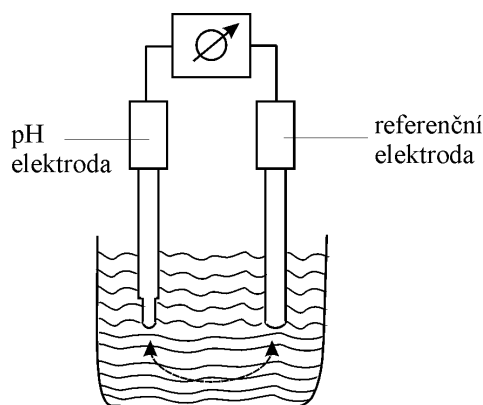
Následující Tabulka 3 popisuje celý rozsah pH od 0 do 14 při 25 °C.

pH	mV
0	414,05
1	354,90
2	295,75
3	236,60
4	177,45
5	118,30
6	59,15
7	0,00
8	-59,15
9	-118,30
10	-177,45
11	-236,60
12	-295,75
13	-354,90
14	-414,05

Tabulka 3: pH vs. mV

Jak je pH ve skutečnosti měřeno?

Z předchozí diskuze by mělo být zřejmé, že pro měření pH musí existovat elektrický obvod. Tento obvod zahrnuje měřicí (nebo skleněnou) elektrodu (pro určení E), referenční elektrodu (ke stanovení E^0) a nějaké zařízení pro měření elektrického potenciálu (mV) mezi dvěma elementy, viz Obr. 2.



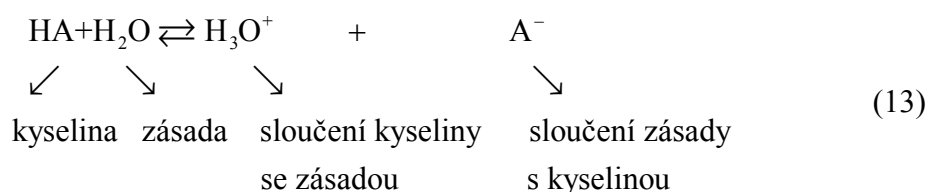
Obr. 2 měřící obvod pH

Poznámky:

Kyseliny-acids \rightarrow H^+ donates (dává)

Zásady- bases \rightarrow H^+ accepts (pohlcuje)

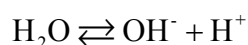
reakce kyselina-zásada (acid-base reaction)



Rovnovážná nebo disociační konstanta

$$K_w = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA][H_2O]} \quad (14)$$

Pro čistou vodu



$$[H_2O] = \text{koncentrace} \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} = \frac{\text{mol}}{\text{L}} = M$$

$$\left. \begin{array}{l} 1 \text{ L} \dots 1 \text{ kg} \\ 1 \text{ kmol} \dots 18 \text{ kg} \dots 18 \text{ L} \end{array} \right\} \text{ v } 1 \text{ L je } \frac{1000}{18} = 55,5 \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 55,5 M$$

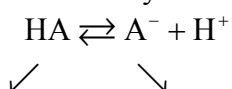
Z rovnice (13) a (3) vyplývá

$$K_w = \frac{[OH^-][H^+]}{[H_2O]} \rightarrow K_w = [OH^-][H^+] \Big|_{\substack{25^\circ C = 298,15 \text{ K} \\ p = 101325 \text{ Pa}}} = 10^{-14} M^2 \quad (15)$$

Množství obsahující stejný počet molů $[OH^-] = [H^+] = K_w^{1/2} = 10^{-7} M$

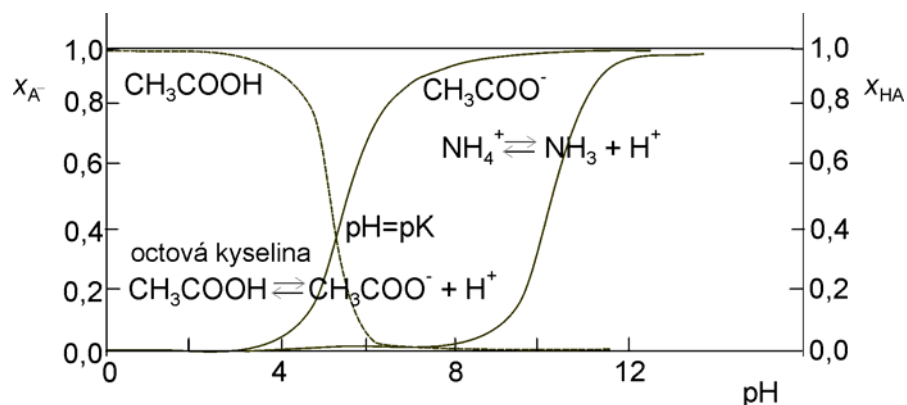
$$\text{pH} = -\log[H^+] \begin{cases} 0 \dots \text{silná kyselina} \\ 7 \dots \text{neutrální roztok (krev } [H^+] = 4 \cdot 10^{-8} M; \text{ pH}=6) \\ 14 \dots \text{silná zásada} \end{cases}$$

Biologické látky se mění podstatně s malými změnami pH. Vyžadují prostředí, ve kterém je pH nesenzitivní na slučování kyselin nebo zásad, tzn.

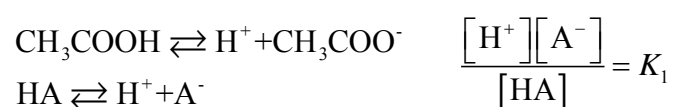


kyselina konjugovaná zásada

Takové prostředí nazýváme pufr (angl. buffer), viz Obr.3



Obr. 3 Dva typické pufrы pro různé hodnoty pH.



pH roztoku je určeno relativními koncentracemi $[\text{HA}]$ a konjugovanými zásadami $[\text{A}^-]$

$$[\text{H}^+] = K \frac{[\text{HA}]}{[\text{A}^-]}, \quad \text{pH} = -\log[\text{H}^+] = -\log K + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Titrační křivka- postupné přidávání OH^- (resp. zvýšení $[\text{A}^-]$).

Henderson-Haselbachova rovnice $\text{pH} = \text{pK} + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$, pK je numericky rovno pH

(rovnost kyselosti), je-li koncentrace kyseliny $[\text{HA}]$ rovna koncentraci její konjugované zásady.

Doporučená literatura:

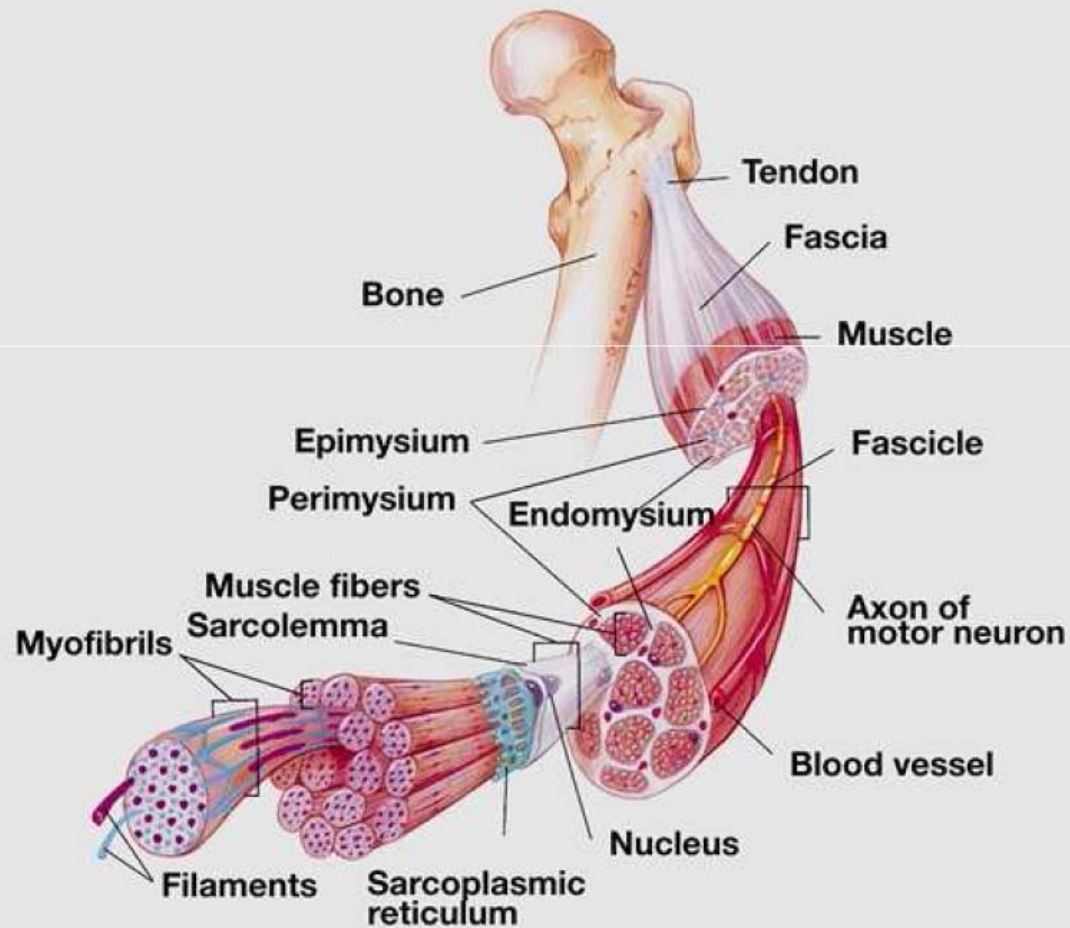
[1] P. W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford Press, 1999.

[2] F. Maršík, I. Dvořák, *Biodynamika*, Academia Praha, 1988

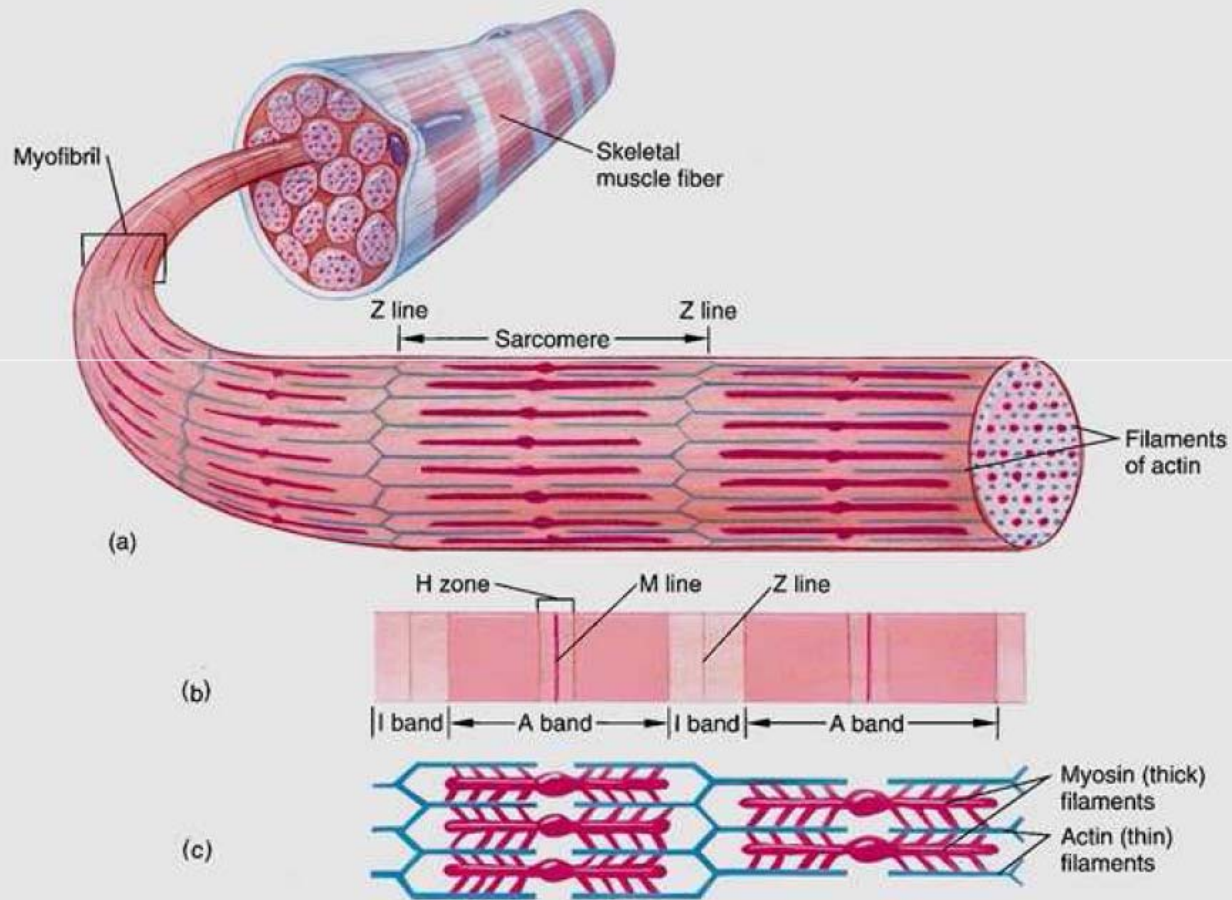
MODELY SVALU A SVALOVÁ PRÁCE

- hierarchická struktura svalu
- modely -biomechanické
-termodynamický

Hierarchická struktura svalu

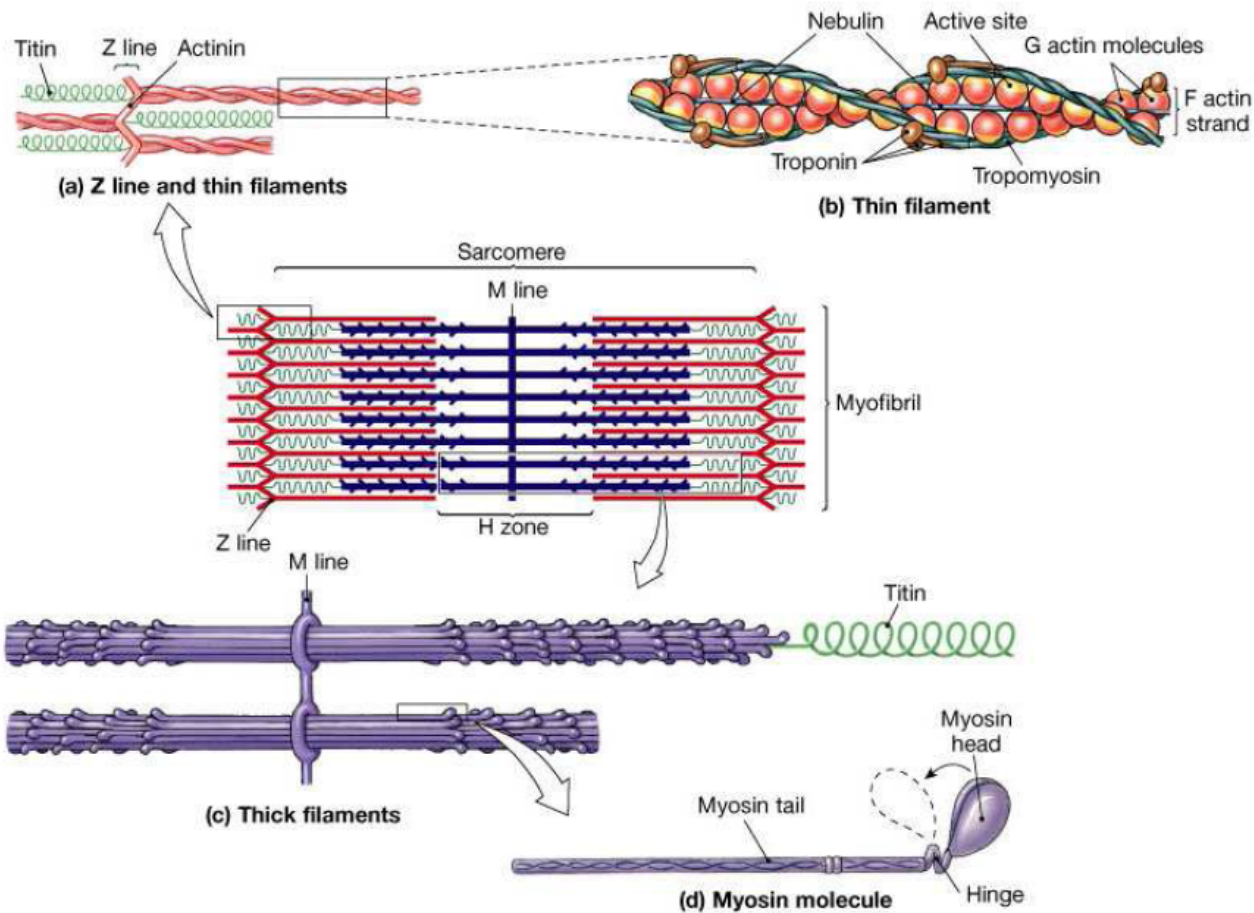


Hierarchická struktura svalu



Sarkomera

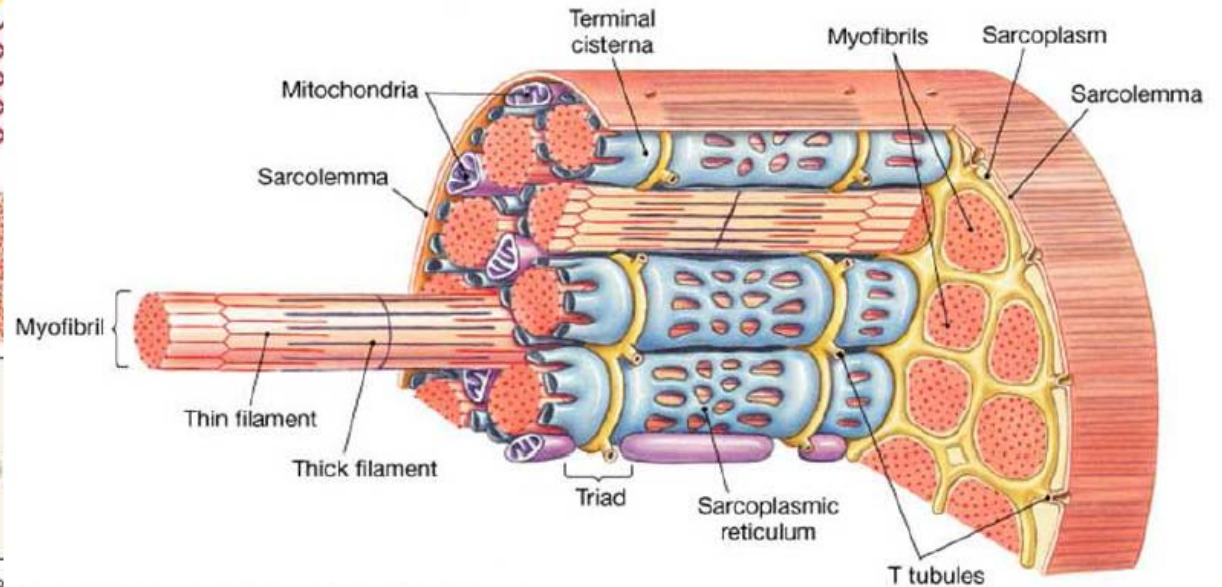
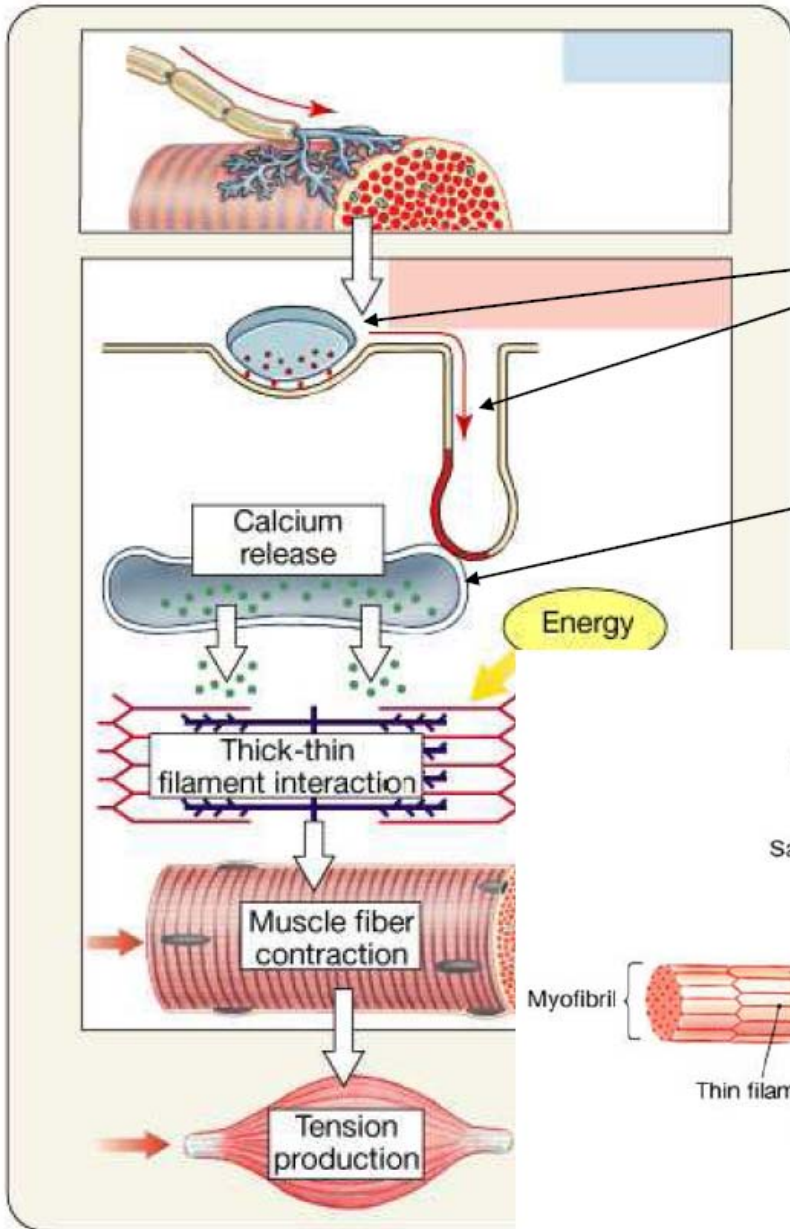
základní kontraktilní jednotka



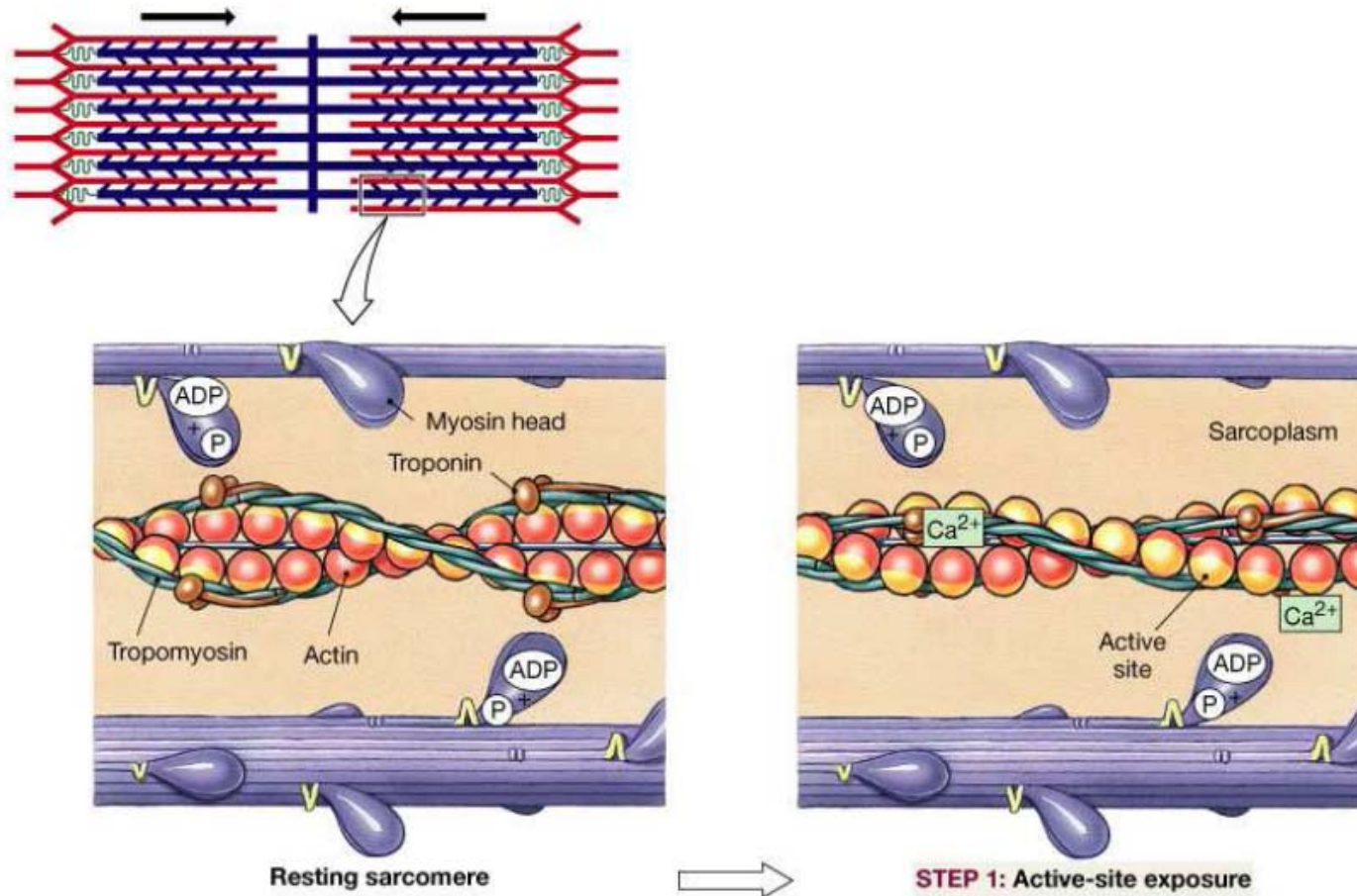
Excitace a kontrakce

Stimulace svalového vlákna

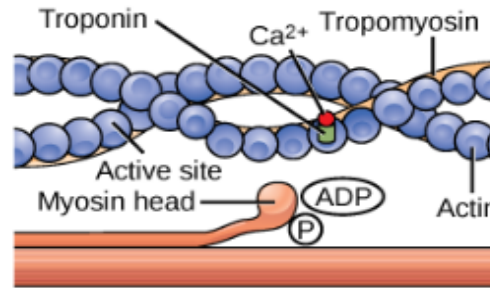
Uvolnění Ca^{2+}



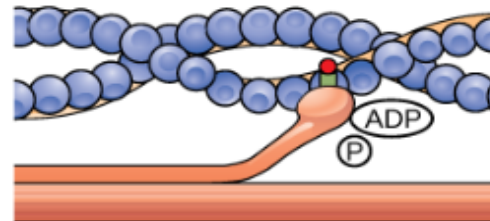
Vápník se váže na troponino-tropomyosinový komplex.
Ten se následně otáčí a uvolní aktinové vazebné místo.



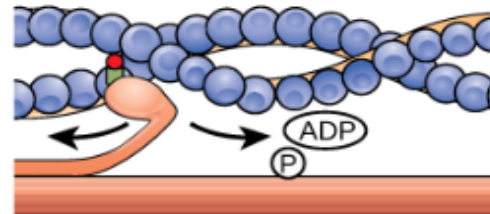
- ① The active site on actin is exposed as Ca^{2+} binds troponin.



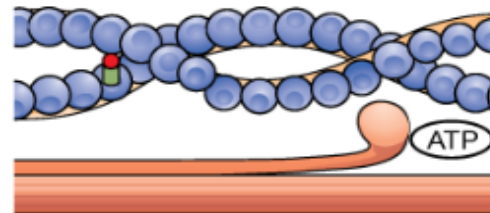
- ② The myosin head forms a cross-bridge with actin.



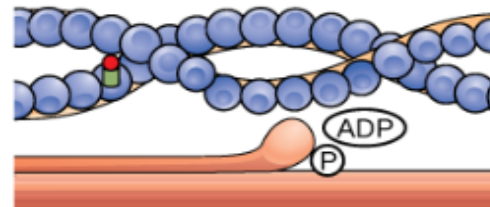
- ③ During the power stroke, the myosin head bends, and ADP and phosphate are released.



- ④ A new molecule of ATP attaches to the myosin head, causing the cross-bridge to detach.

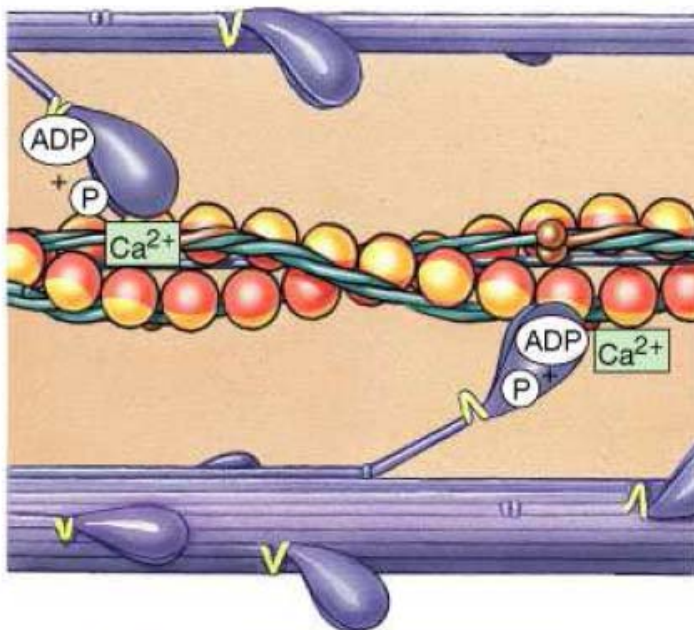


- ⑤ ATP hydrolyzes to ADP and phosphate, which returns the myosin to the "cocked" position.

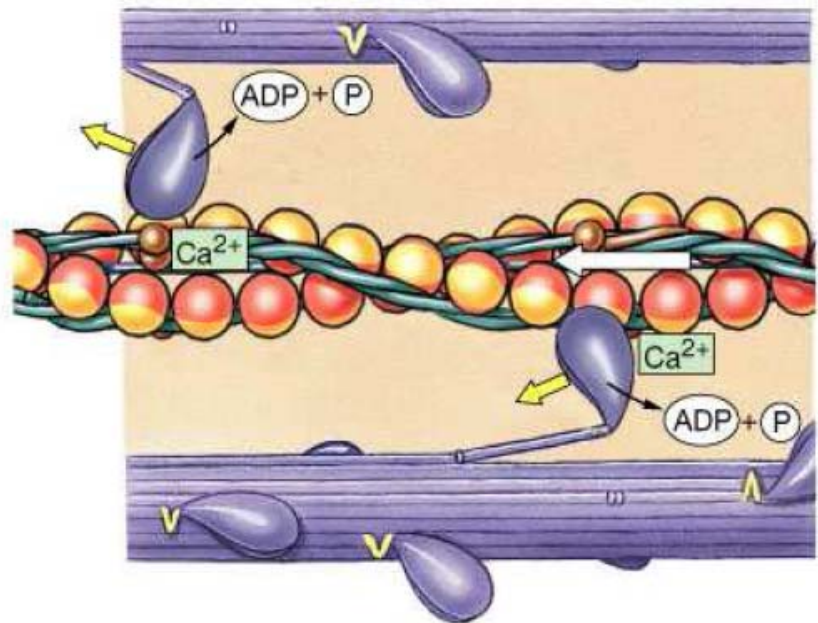


Hlava myosinové molekuly se naváže na aktinové vazebné místo.

Po navázání dochází ke konformační změně v krčku myosinu (uvolní se ADP) a vlákna se posouvají relativně vůči sobě (vlastní kontrakce).



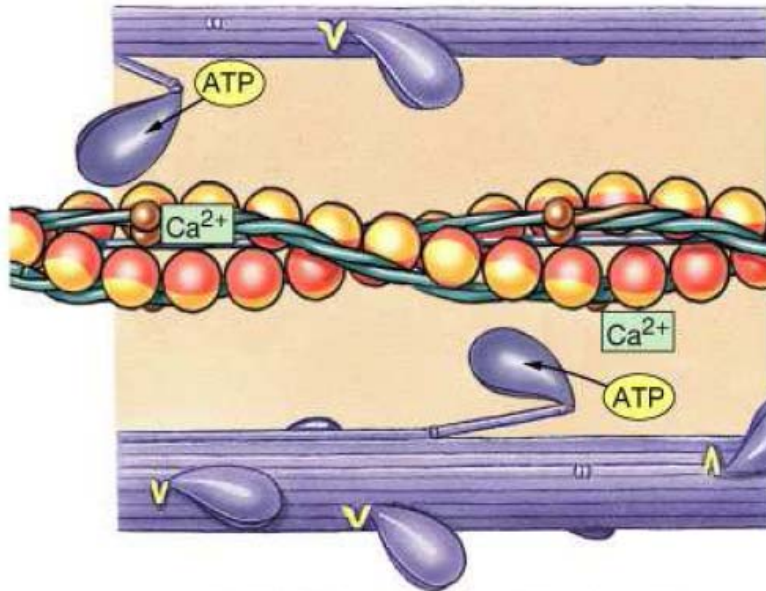
STEP 2: Cross-bridge attachment



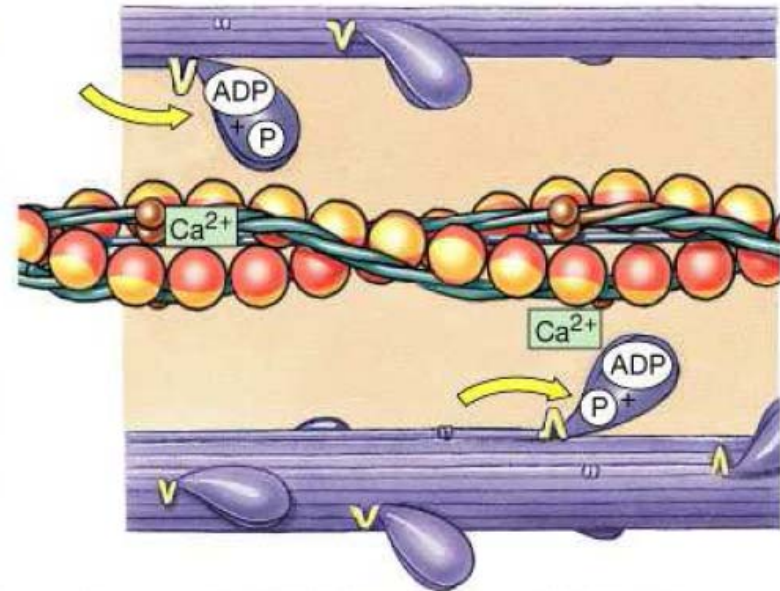
STEP 3: Pivoting of myosin head

ATP nahradí ADP+Pi,
nastáva odpojení vláken ...

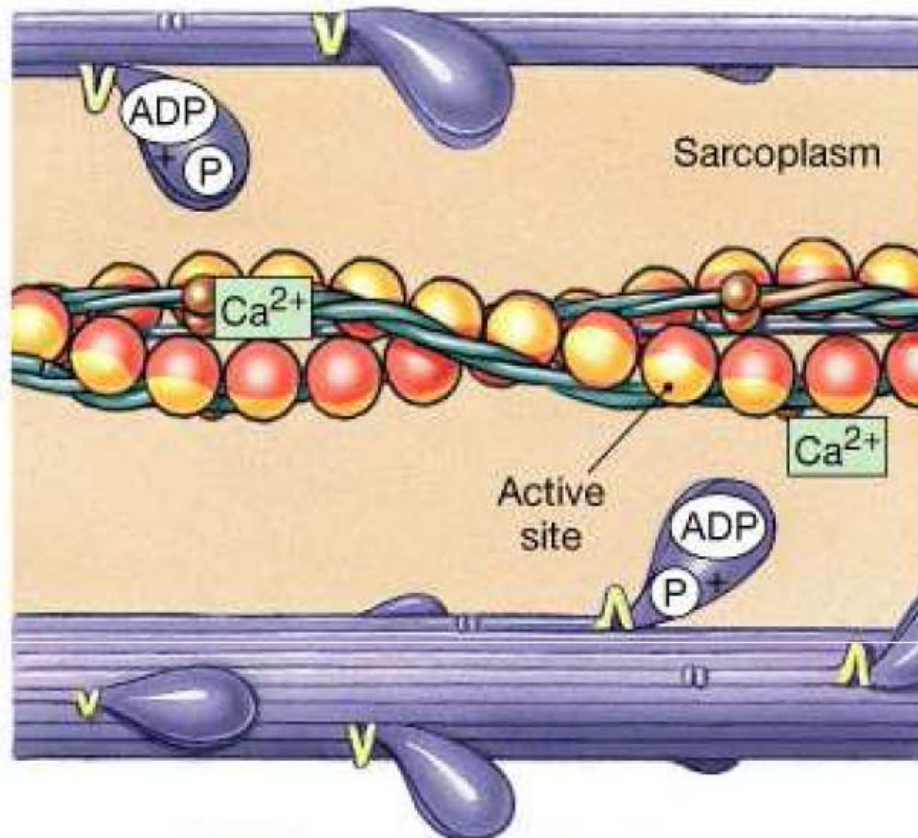
... a obě vlákna se
vrátí do výchozí
pozice.



STEP 4: Cross-bridge detachment



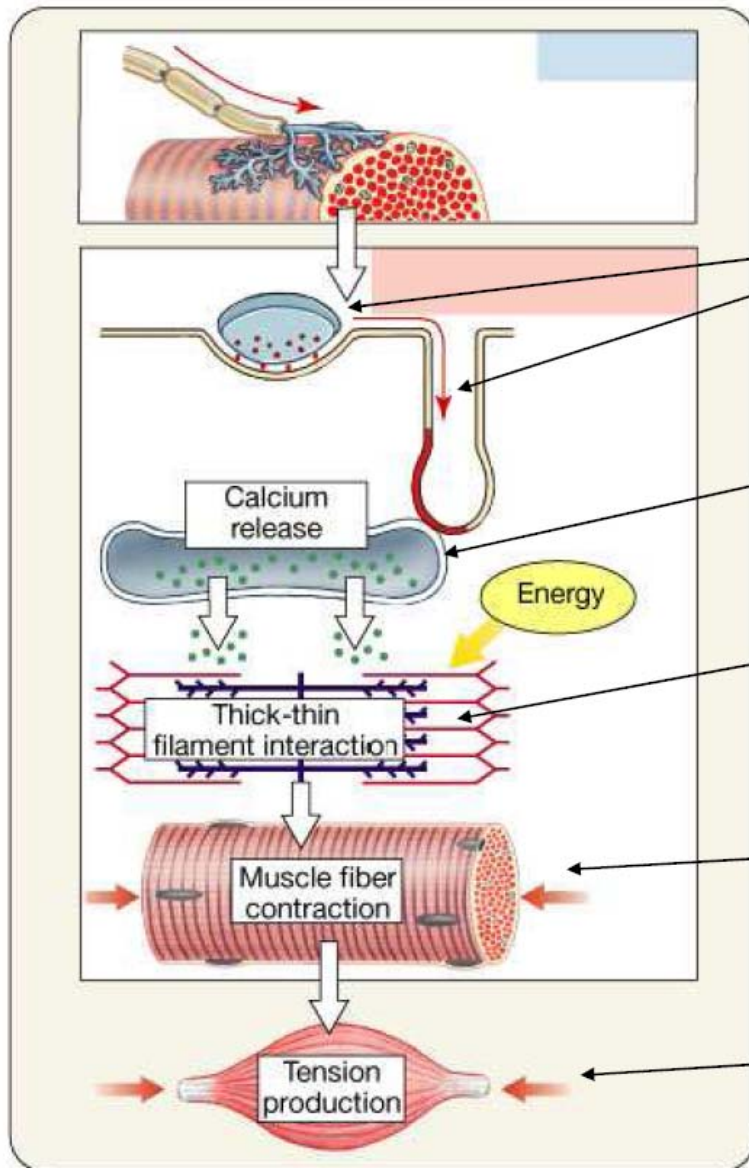
STEP 5: Myosin reactivation



STEP 1: Active-site exposure

Copyright © 2004 Pearson Education, Inc., publishing as Benjamin Cummings.

Cyklický proces pokračuje tak dlouho, dokud jdou k dispozici vápenaté ionty a ATP. Myosinové hlavy se „aktivují“ asynchronně.



Excitace a kontrakce

Stimulace svalového vlákna

Uvolnění Ca²⁺

Kontrakce sarkomery

Svalová kontrakce

Růst svalového napětí



Huxleyho model

- 1959 - Model klouzajících filament (interakce aktinu a myosinu)

- Jakým fyzikálním způsobem se sval smršťuje?
- Co způsobuje toto zkracování?

$$\frac{dn(x,t)}{dt} = \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} - v(t) \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} = (1-n(x,t))f(x) - n(x,t)g(x)$$

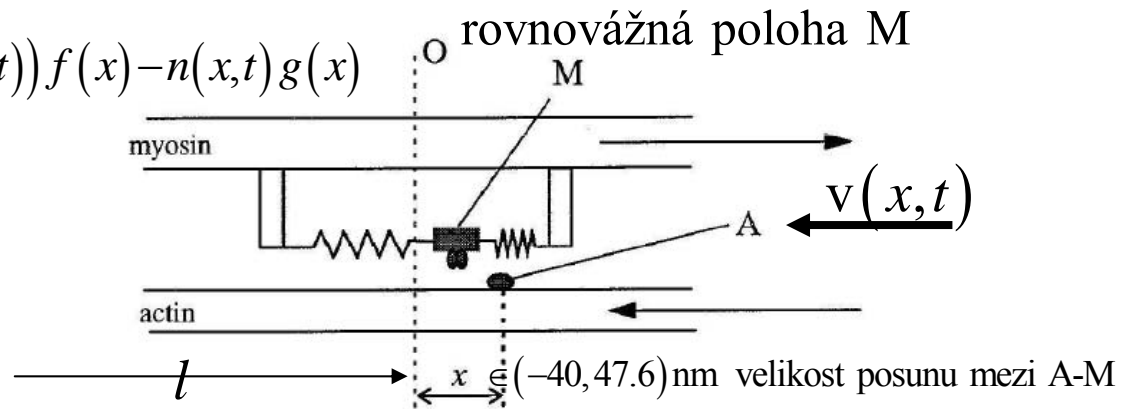
$$v(t) = -\frac{dx}{dt} = \frac{dl}{dt}$$

l délka poloviny sarkomery

$$n(x,t) = \frac{N_a}{N}, \quad N_a + N_u = N$$

N_u -- počet nepřipojených (pasivních) můstků

N_a -- počet připojených (aktivních) můstků



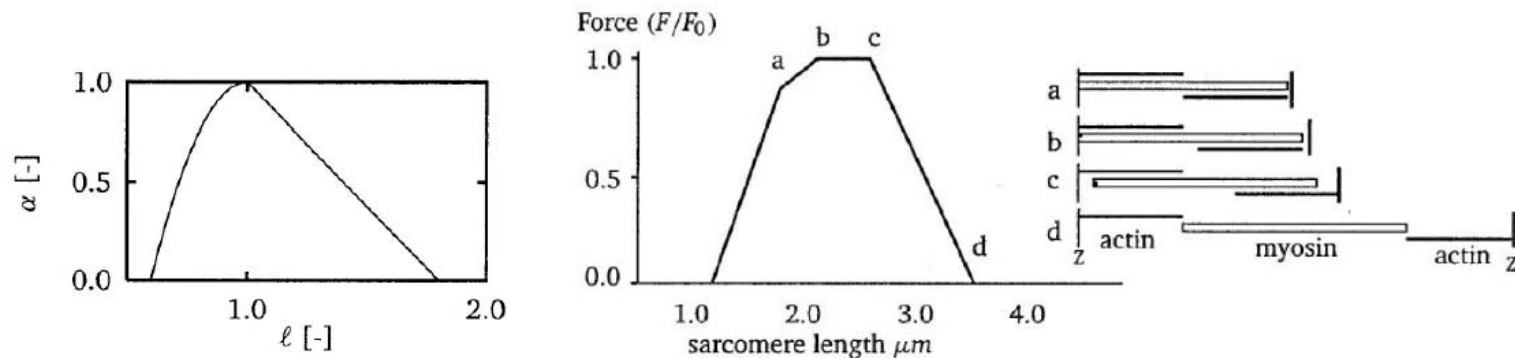
Huxleyho model

$$\frac{\partial n(\xi, t)}{\partial t} - v(t) \frac{\partial n(\xi, t)}{\partial \xi} = r(t) f(\xi) [\alpha(l_s) - n(\xi, t)] - g(\xi) n(\xi, t)$$

- Vápenatá aktivace

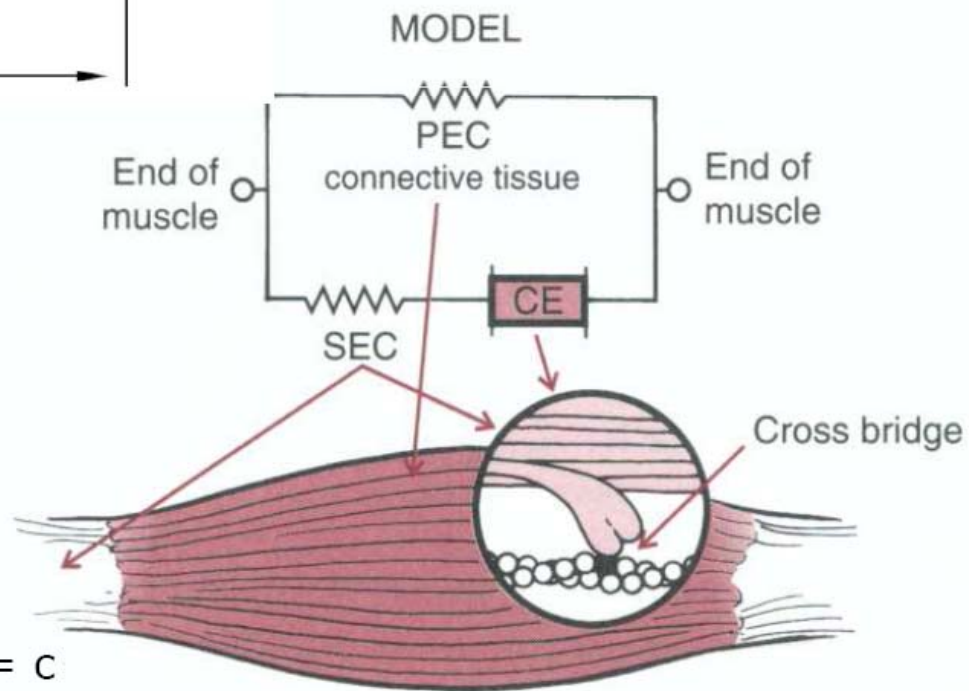
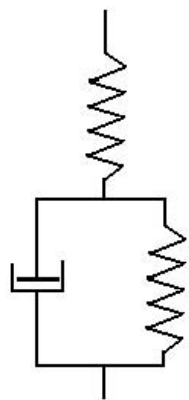
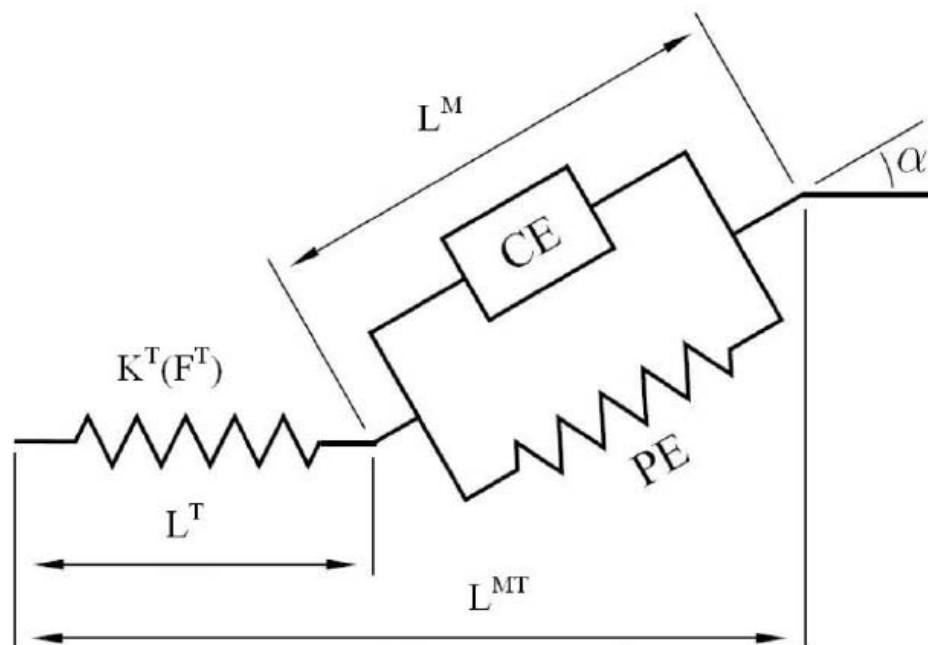
$$\dot{C} = \rho \left(1 - \frac{e}{e^*}\right) \chi(t) - \tau_0^{-1} \frac{e}{e + k_m}$$

$$C = e + 2bQ_0 + r \left(2 + \frac{\mu}{e}\right) (1 - bQ_0)$$



Příliš mnoho neznámých a obtížně se verifikuje

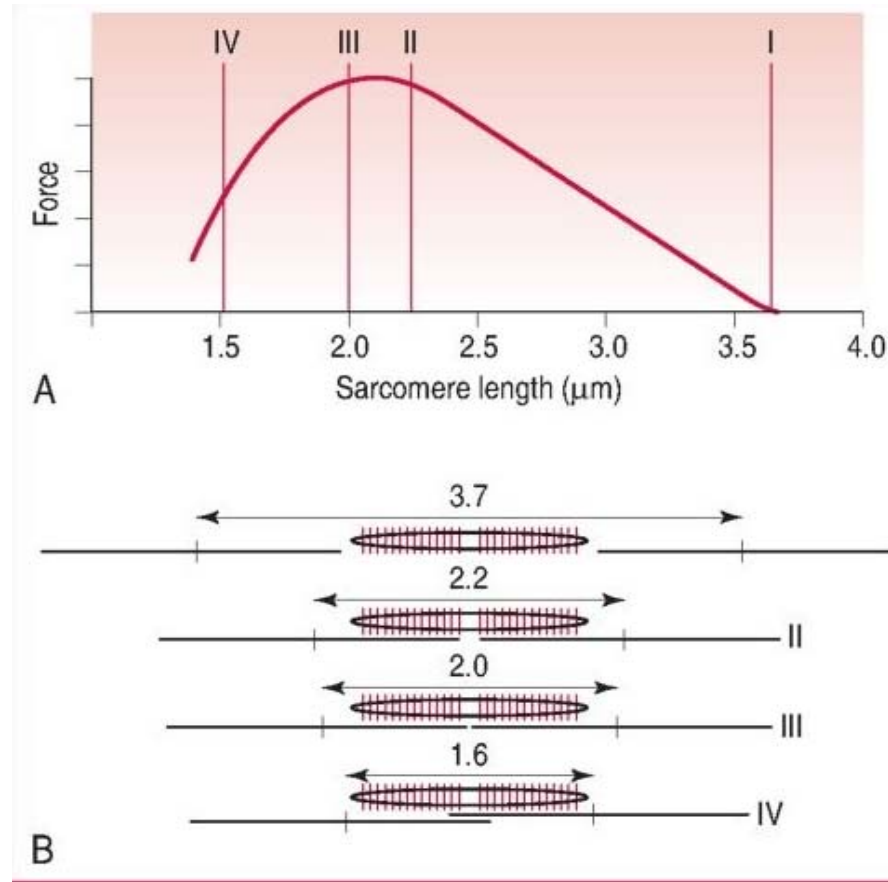
1934 - Hillův model svalů



Hillova rovnice: $(P + a)(V + b) = c$

Gordon graph

The variation of *isometric* tetanus tension with sarcomere length in single fibres from frog striated muscle.



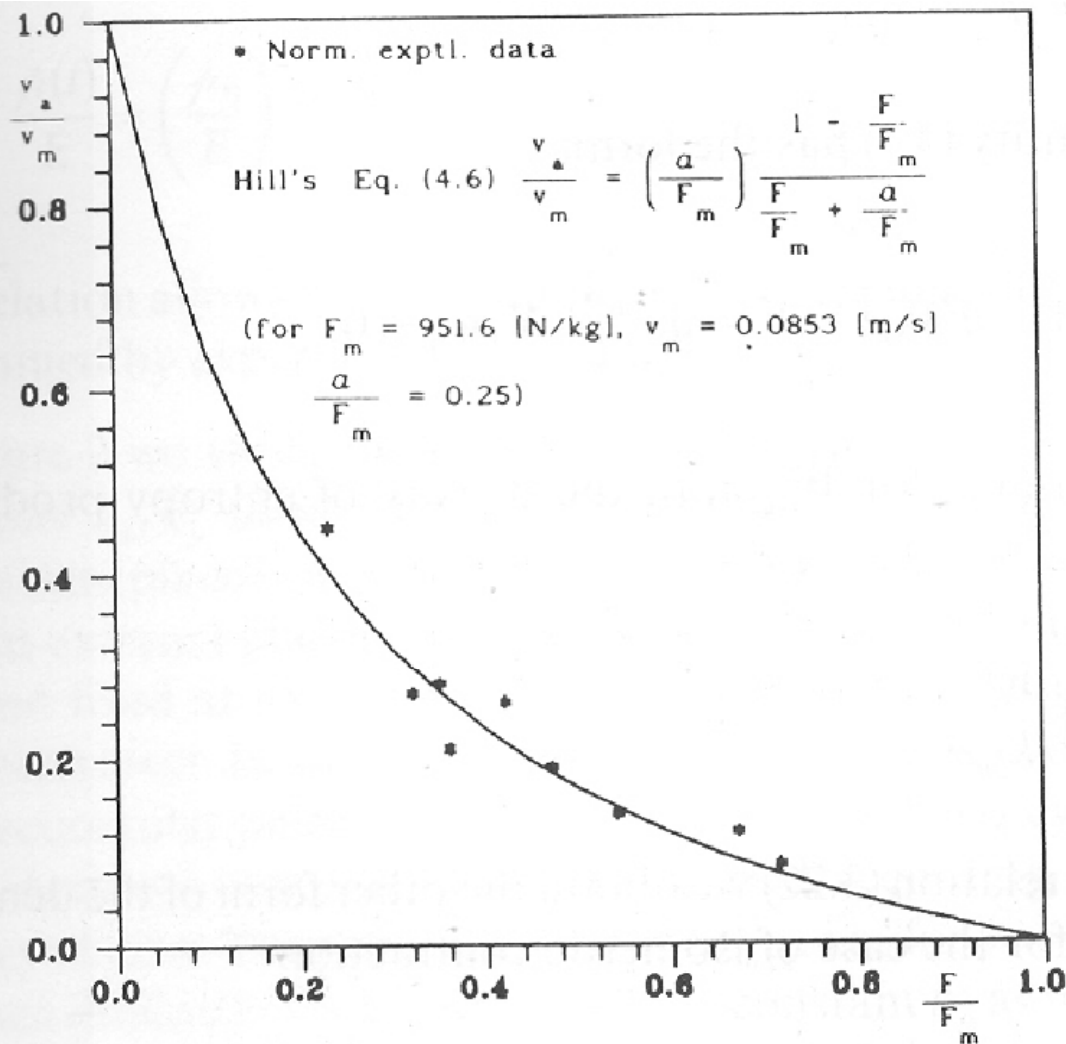
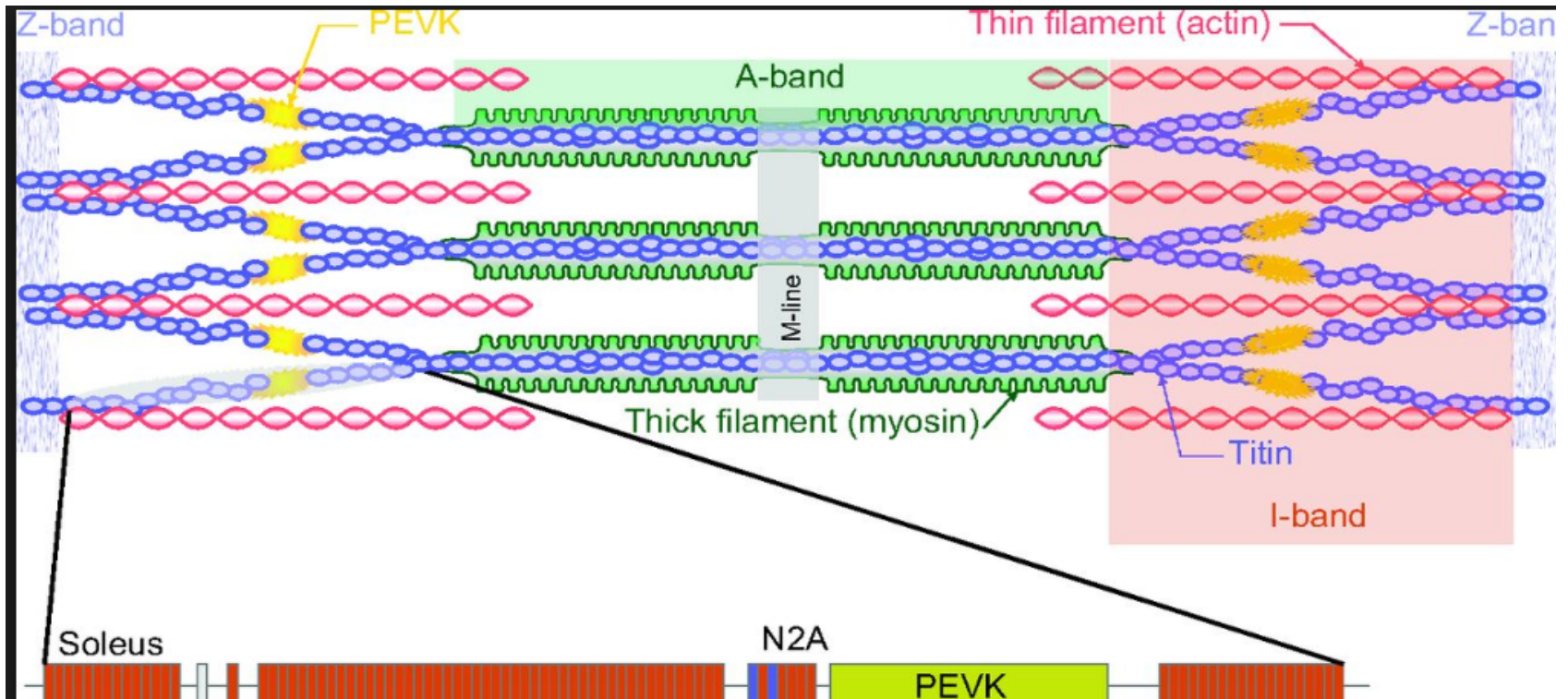


Fig. 1: Hill equation (4.6) is derived from the general entropy balance equation (4.1) by the heat flow (4.5). Comparison with the experimental data for a frog muscle [2].

Rozhodující roli hraje při tzv. excentrické kontrakci, tím, že zvyšuje, popř. snižuje elasticitu sarkomery

Titin is the largest known protein; its human variant consists of 34 350 amino acids, with the molecular weight of the mature "canonical" isoform of the protein being approximately 3 816 188.13 Da. Its mouse homologue is even larger, comprising 35.213 amino acids with a MW of 3 906 487.6 Da. It has a theoretical isoelectric point (is the pH at which a particular molecule carries no net electrical charge in the statistical mean) of 6.01. The protein's empirical chemical formula is $C_{169,723}H_{270,464}N_{45,688}O_{52,243}S_{912}$.



Trasformace chemické energie na mechanickou energii ve svalu

Termodynamická koncepce

Produkcí entropie můžeme vyjádřit jako bilineární formu

$$\sigma(s) = \sum_{\gamma} J_{\gamma} X_{\gamma} \geq 0$$

J_{γ} kde jsou termodynamické toky a X_{γ} jsou termodynamické síly. Přehled všech významných sil a toků je uveden v Tab. 20.1.

Tab. 20.1. Termodynamické toky a termodynamické síly

Tok J_γ	Síla X_γ
teplo \mathbf{j}_q	$\nabla \left(\frac{1}{T} \right)$
<u>viskoplastický</u> - pro pevné látky $\mathbf{t}_{\text{dis}}(T, \mathbf{d}, \dot{\mathbf{t}}_{\text{dis}})$ - pro tekutiny p_{dis} - viskozita $\mathbf{t}_{\text{dis}} - \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{D\alpha} \otimes \mathbf{v}_{D\alpha}$	$\frac{\mathbf{d}}{T}$ $\frac{\text{div } \mathbf{v}}{T}$ $\frac{\mathbf{d}}{T}$
- namáhání $\mathbf{t}_{\text{el}\alpha} + \mathbf{t}_{\text{dis}\alpha}$	$-\mathbf{v}_{D\alpha} \otimes \nabla \left(\frac{1}{T} \right)$
koncentrace difúze $\mathbf{j}_{D\alpha}$	$\left(\frac{\nabla \mu_{\alpha}}{T} \right)$
<u>termodifúze</u> $\mathbf{j}_{D\alpha}$	$(u_{\alpha} - \mu_{\alpha}) \nabla \left(\frac{1}{T} \right)$
elektrický tok \mathbf{j}_{ez}	$\frac{\mathbf{F}_{\alpha}}{T} = -\frac{z_{\alpha} F}{M_{\alpha} T} \nabla \phi$
kapilární tok \mathbf{j}_{Dc}	$\frac{\Gamma_c}{T} = +\frac{1}{T} \nabla (\sigma \cdot a)$
chemická reakce a fázový přechod $\dot{\zeta}_p$	$\frac{\mathcal{A}_p}{T}$

Electro-chemical potential

$$\mu_{\alpha} \left(T, t_{\text{el}}^{ij}, c_{\alpha}, \phi, \sigma \right) = \bar{\mu}_{\alpha} \left(T, t_{\text{el}}^{ij} \right) + RT \ln \left(\frac{c_{\alpha}}{c_{0\alpha}} \right) + Z_{\alpha} F \phi + \frac{A_{\alpha}}{c_{\alpha}} \sigma \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right]$$

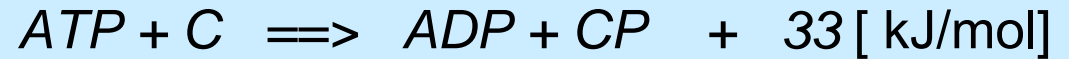
Reference pot. of pure substance
Influence of el. field
Influence of concentration
Influence of capillarity, for water only

Influence of capillarity, for water only
 $\alpha = \text{H}_2\text{O}$

$\sigma(c_{\alpha})$ water surface tension depends on a solute concentration c_{α} on the surface A_{α} in 1 m^3 of the porous membrane

Application of linear non-equilibrium thermodynamics to muscle performance and tissue remodeling.

Chemical reaction, e.g.: for muscle contraction -- muscle relaxation



Mechanical loading for tissue remodelling.

Cross effect between chemical reaction $w_\rho \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{s}} \right]$ and mechanical energy concentration $p \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} = \text{Pa} \right]$

Energy dissipation (entropy production) is

$$T\sigma(S) = pd_{(1)} + w_\rho A_\rho \geq 0 \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{s}} \right]$$

Linear relation between mechanical energy and energy of chemical reactions

$$p = l_{vv} d_{(1)} + l_{v\rho} A_\rho \quad \dots \text{mech. energy generation}$$

$$w_\rho = l_{\rho v} d_{(1)} + l_{\rho\rho} A_\rho \quad \dots \text{chem. reaction rate}$$

$$d_{(1)} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{\dot{\rho}}{\rho} \left[\frac{1}{\text{s}} \right] \dots \text{volume deformation rate}$$

$$A_\rho = \sum_\alpha \nu_{\rho\alpha} \mu_\alpha \quad \dots \text{chemical affinity } (A_\rho < 0 \text{ for spontaneous reactions})$$

$$q = \frac{l_{v\rho}}{\sqrt{l_{\rho\rho} l_{vv}}}; \quad -1 \leq q \leq 1, \quad \dots \quad (\sigma(S) \geq 0)$$

$$l_{vv} \left[\frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \right], \quad l_{\rho v} = l_{v\rho} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right], \quad l_{\rho\rho} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{J m}^3 \text{s}} \right]$$

viscosity, coupling-Onsager relation, constant of chem. reaction rate

Linear relation between mass diffusion and electric current

$$j_{D_w} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^2 \text{s}} \right] = L_{D_w} \left. \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial c_w} \right|_\phi \frac{\partial c_w}{\partial y} + L_{we} \left. \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial \phi} \right|_w \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad \text{water diffusion flux}$$

$$\frac{i}{F} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^2 \text{s}} \right] = L_{ew} \left. \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial c_w} \right|_\phi \frac{\partial c_w}{\partial y} + L_{ee} \left. \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial \phi} \right|_w \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad \text{electric current}$$

$L_{ew} = L_{we}$... electrophoresis coefficients - Onsager relation

Diff. coef.... $-L_{D_w} > 0$, conductivity $-L_{ee} > 0$,

physical dimension of all coef. are $\left[\frac{\text{kmol}^2}{\text{ms}} \right]$

Coupling coef. $q = \frac{L_{ew}}{\sqrt{L_{D_w} L_{ee}}}$, ... close relation to electrophoresis

Extreme magnitude of electric flux through nerve fibre depends on electrophoresis coef. q^2 only

$$\frac{\text{electric power}}{\text{total dissipation}} = \frac{\delta q + \delta^2}{1 + 2\delta q + \delta^2} \Bigg|_{\substack{\text{max} \\ q \in (-1,1)}} = 1 \pm \frac{q^2}{2\sqrt{1-q^2} \left(1 \pm \sqrt{1-q^2}\right)},$$

in all operating modes $\delta q < 0$,

$$\text{for } \delta = \sqrt{\frac{L_{ee}}{L_{D_w}}} \times \left\{ \frac{\text{electric intensity}}{\text{concentration gradient}} \right\} = -\frac{1 \pm \sqrt{1-q^2}}{q}.$$

Conclusion

I.) for $q > 0$, $\delta \mu \left\{ \frac{\text{electric intensity}}{\text{concentration gradient}} \right\} < 0$, i.e., $\frac{\partial \phi}{\partial y} > 0$, $\frac{\partial c_w}{\partial y} < 0$

Chem. reac. generate el.flux

II.) for $q < 0$, $\delta \mu \left\{ \frac{\text{electric intensity}}{\text{concentration gradient}} \right\} > 0$, i.e., $\frac{\partial \phi}{\partial y} > 0$, $\frac{\partial c_w}{\partial y} > 0$,

El. flux generate chem. reac.

Empirical relation of mechanical tension in the heart muscular fibre - Hill's formula

$$\frac{\hat{p}}{\hat{p}_{\max}} = \frac{c_{Ca}^l}{c_{Ca}^l + K_m^l}$$

c_{Ca} - intracellular calcium concentration

l - exponent characterising sarcomere length ($l \doteq 2$ for myocardium)

K_m - Menten-Michaelis constant ($K_m = c_{Ca}$ for $\hat{p}_{\max} / 2$)

\hat{p}_{\max} - maximal tension

Relationship for the hydrodynamic blood pressure

$$p(t) = \underbrace{\frac{4hE}{r} \left(\frac{V(t)}{V_o} - 1 \right)}_{\text{elasticity of heart}} + \underbrace{\frac{2hk_{chem}}{r} c_{Ca}(t)}_{\text{transformation of chemical energy into mechanical energy}}$$

r - cardiac cavity internal radius

h - cardiac muscle wall thickness

V - cardiac cavity volume

V_o - cardiac cavity residual volume

k_{chem} - material constant

HEART MUSCLE CELL ENERGETICS

Thermodynamic relation between density of mechanical energy (pressure) and chemo-mechanical properties of heart muscle

$$\tau_p \dot{\hat{p}} + \hat{p} - E \tau_l \dot{e} - E e = W_{chem} \quad \left[\text{J/m}^3 \right]$$

- τ_p (s) - relaxation time characterizing muscle plasticity
- τ_l (s) - relaxation time characterizing muscular viscosity
- \hat{p} (J/m³) - heart muscle tension
- E (J/m³) - Young's module of elasticity of collagen contained in the heart fibres
- e (1) - relative contraction of a heart muscle cell
- \dot{e} (1/s) - contraction rate
- W_{chem} (J/m³) - mechanical energy

SHRNUTÍ

Huxleyho model:

- příliš mnoho proměnných, ale po nabitování popisuje věrohodně dynamiku kontrakce

Hillův model:

- jednoduchý na použití ale nevyjadřuje pravou podstatu kontrakce,

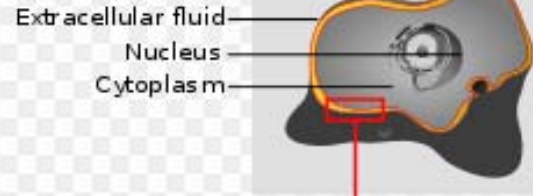
Termodynamický model

- formálně jednoduchý dobře verifikovatelný a zahrnuje vliv chemických procesů, nevyjadřuje ale, skutečný mechanismus kontrakce

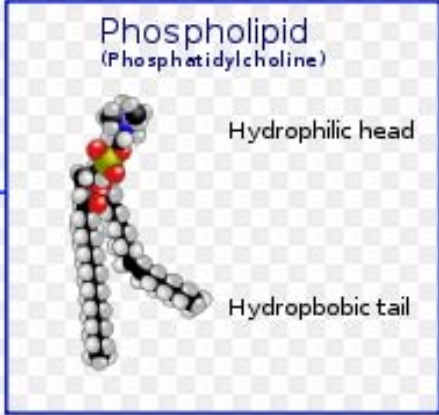
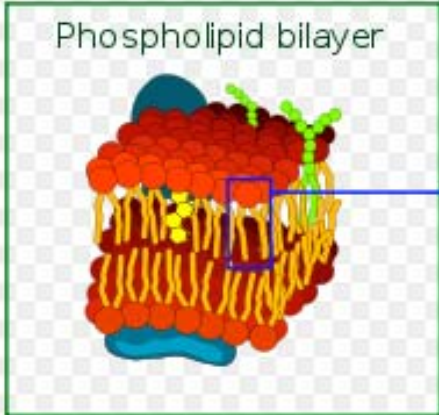
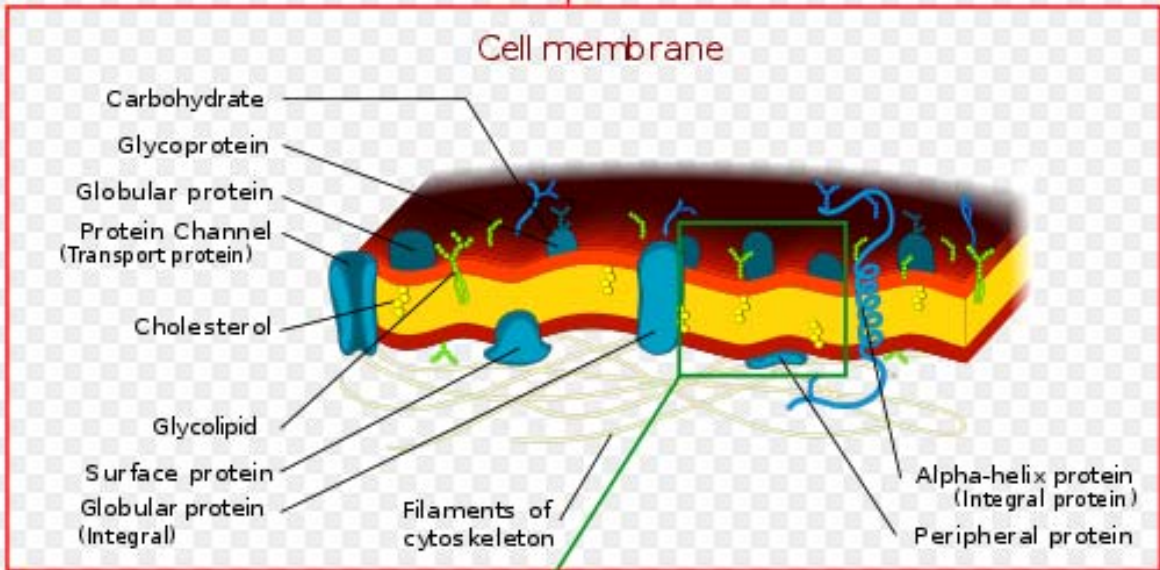
Buněčná membrána

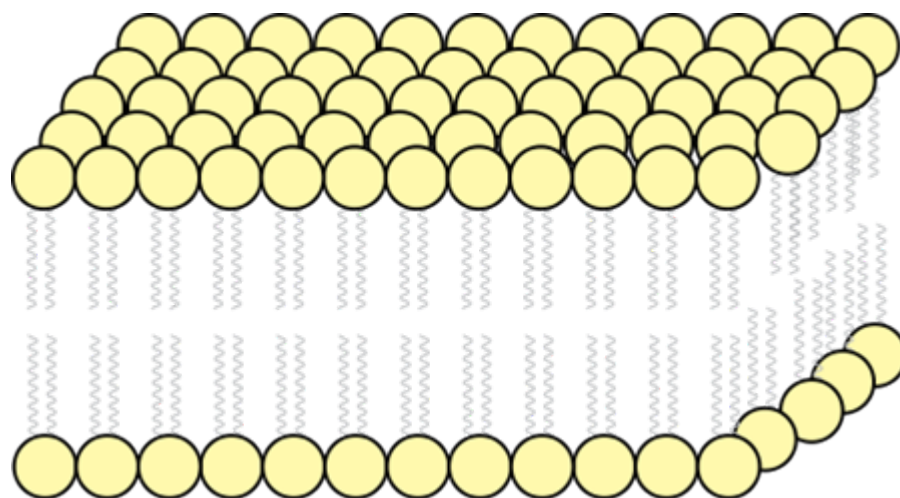
- Odděluje vnitřek buňky od vnějšího prostředí
- Selektivně propouští ionty a organické molekuly
- Řídí i látek pohyb uvnitř i vně
- Je tvořena dvojvrstvou a zpevněna proteiny
- Účastní se adheze, vodivosti, přenosu signálů
- Slouží k zajištění mechanické pevnosti celé buňky (součástí cytoskeletonu)

Cell



Cell membrane





Lipidové molekuly tvoří dvojvrstvu.
Polární hlavice (žlutá) oddělují hydrofobní konce (šedé)
od vnějšího i vnitřního vodného prostředí.

Příklad: *Difúzní vlny.* Ukažte na příkladu dvou konkurujících si autokatalytických reakcí s difúzí možnost oscilací konkurujících si komponent a existenci difúzních vln. Předpokládejte, že konkurující si komponenty C_2, C_3 vystupují v kinetických rovnicích



Uvedený systém rovnic je rozšířením ekologického modelu Lotky-Voltera [2], nazývaný též model dravci (C_3)-kořisti (C_2), o přítoky ($J_\alpha > 0$) popřípadě odtoky ($J_\alpha < 0$) odpovídajících komponent.

Řešení

Rychlosti chemických reakcí (1) stanovíme podle zákona aktivních hmot, tj.

$$\begin{aligned} w_1 &= k_{+1}n_1n_2 - k_{-1}n_2^2 \\ w_2 &= k_{+2}n_2n_3 - k_{-2}n_3^2 \\ w_3 &= k_{+3}n_3 - k_{-3}n_4 \end{aligned} \quad (2)$$

kde n_α , $\alpha = 1, 2, \dots$ jsou látková množství (popř. molární koncentrace, počet jedinců v populaci apod.) odpovídajících složek. Předpokládejme, že rychlosti zpětných reakcí jsou nulové, pak rychlost vzniku sledovaných komponent C_2, C_3 je popsána diferenciálními rovnicemi

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = w_1 - w_2 + J_2 = k_{+1}n_1n_2 - k_{+2}n_2n_3 + J_2, \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_3}{\partial t} = w_2 - w_3 + J_3 = k_{+2}n_2n_3 - k_{+3}n_3 + J_3. \quad (4)$$

Tyto rovnice reprezentují bilanci hmotnosti v chemických reakcích, viz např. vztah (5.73) v knize [1]. Toky J_2, J_3 můžeme nahradit difúzními toky

$$J_2 = D_2 \frac{\partial^2 n_2}{\partial r^2}, \quad J_3 = D_3 \frac{\partial^2 n_3}{\partial r^2}. \quad (5)$$

Budeme vyšetřovat následující případy

$$\begin{aligned} 1) \quad & J_2 = J_3 = 0, \\ 2) \quad & J_2 = J_3 < 0, \\ 3) \quad & J_2 = -J_3. \end{aligned} \quad (6).$$

Koeficienty difúze D_2, D_3 mohou mít jak kladné tak i záporné hodnoty v závislosti na předpokládaném směru gradientu koncentrace. Znaménkem koeficientů D_2, D_3 stanovíme, zda komponenta přitéká ($J_\alpha > 0$) a nebo odtéká ($J_\alpha < 0$). Prostorovou

souřadnici jsme označili r a předpokládáme pro jednoduchost popis difúze v kartézských souřadnicích.

V reálném případě, kdy je současně řešena rovnice difúze a možné průběhy koncentrací jsou, např. $n_2 \sim \arctg[(r-r_0)/\delta_2]$, a $n_3 \sim \arctg[(r-r_0)/\delta_3]$ pak platí

$$\frac{\partial^2 n_2}{\partial r^2} = -\frac{2(r-r_0)}{\delta_2^3 \left(1 + \left(\frac{r-r_0}{\delta_2}\right)^2\right)^2}, \quad \frac{\partial^2 n_3}{\partial r^2} = -\frac{2(r-r_0)}{\delta_3^3 \left(1 + \left(\frac{r-r_0}{\delta_3}\right)^2\right)^2} \quad (7)$$

a odtok komponenty n_2 , tj. $J_2 < 0$ je zajištěn pro oblast $r > r_0$, koeficientem difúze $D_2 > 0$, viz Obr. 1b). Příklad složky n_3 v této oblasti je při kladném koeficientu $D_3 > 0$, vyvolán jen průběhem koncentrace ve tvaru $n_3 \sim \arctg(r/\delta_3)$, viz Obr. 1b). V této více kvalitativní analýze neřešíme konkrétní průběhy koncentrací složky n_3 a proto vyjádříme její přítok, tj. $J_3 > 0$, pro $r > r_0$ zavedením záporného koeficientu difúze $D_3 < 0$.

Pro popis prostorové difúze sférickými souřadnicemi by vyžadovalo zavedení Kelvinových sférických funkcí na místo funkcí harmonických. Kvalitativní vlastnosti řešení jsou však stejné.

Nalezneme stacionární hodnoty koncentrací n_2, n_3 tím, že položíme levé strany rovnic (3), (4) a toky J_2, J_3 rovny nule, tudíž

$$k_{+1}n_1n_{20} - k_{+2}n_{20}n_{30} = 0, \quad (8)$$

$$k_{+2}n_{20}n_{30} - k_{+3}n_{30} = 0. \quad (9)$$

Z rovnice (9) plyne

$$n_{20} = \frac{k_{+3}}{k_{+2}}, \quad n_{30} = \frac{k_{+1}n_1}{k_{+2}} \quad (10)$$

kde $n_1, k_{+1}, k_{+2}, k_{+3}$ jsou nějaké zadané parametry úlohy. Jejich hodnoty jsou vesměs kladná čísla.

Budeme hledat kvalitativní vlastnosti řešení rovnic (3), (4) kolem stacionárního stavu (10). Předpokládejme řešení ve tvaru malých harmonických poruch velikosti $\delta n_2, \delta n_3$

$$n_2(t) = n_{20} + \delta n_2 \exp(\omega t - kr), \quad \text{pro } \omega = \omega_r + i\omega_{im}, \quad k = k_r + ik_{im} \quad (11)$$

$$n_3(t) = n_{30} + \delta n_3 \exp(\omega t - kr).$$

Frekvence ω a vlnové číslo k jsou komplexní čísla. Dosadíme vztahy (11) do výchozích rovnic (3), (4) a budeme uvažovat difúzní toky (5). Zanedbáním členů malých druhého řádu a výše, dostáváme homogenní soustavu lineárních rovnic pro poruchy $\delta n_2, \delta n_3$

$$\begin{aligned} -(\omega - k_{+1}n_1 + k_{+2}n_{30} - k^2D_2)\delta n_2 - k_{+2}n_{20}\delta n_3 &= 0, \\ k_{+2}n_{30}\delta n_2 - (\omega + k_{+3} - k_{+2}n_{20} - k^2D_3)\delta n_3 &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Použijeme-li vlastnosti stacionárního stavu (10) redukuje se soustava (12) na rovnice

$$\begin{aligned} -(\omega - k^2D_2)\delta n_2 - k_{+2}n_{20}\delta n_3 &= 0, \\ k_{+2}n_{30}\delta n_2 - (\omega - k^2D_3)\delta n_3 &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Tato soustava rovnic má nenulové řešení (existují nějaké fluktuace koncentrací) jen v tom případě je-li její determinant roven nule, tj.

$$\omega^2 + \omega k^2 (D_2 + D_3) + k^4 D_2 D_3 + k_{+1} k_{+3} n_1 = 0 \quad (14)$$

což je splněno v případě, že platí následující vztah mezi frekvencí ω a vlnovým číslem k

$$\omega = -\frac{k^2 (D_2 + D_3)}{2} \pm \sqrt{\frac{k^4 (D_2 + D_3)^2}{4} - k^4 D_2 D_3 - k_{+1} k_{+3} n_1} = \omega_{re} + i \omega_{im}. \quad (15)$$

Vzhledem k tomu, že parametry n_1, k_{+1}, k_{+3} jsou kladná čísla a difúzní koeficienty D_2, D_3 mohou být kladná i záporná podle směru toku (6). Znaménkem koeficientů D_2, D_3 nahrazujeme vliv koncentračního gradientu, viz Obr. 1b).

Pro případ 1) ve vztahu (6) platí, že $D_2 = D_3 = 0$ a dochází pouze k netlumeným oscilacím

$$i \omega_{im} = i \sqrt{k_{+1} k_{+3} n_1} \quad (16)$$

kolem stacionárního stavu (10), viz Obr. 1a).

V případě, že jsou oba koeficienty difúze kladné a sobě rovny, tj. $D_2 = D_3 = D$ má frekvence (15) reálnou a imaginární část

$$\omega = \omega_{re} + i \omega_{im} = -k^2 D \pm i \sqrt{k_{+1} k_{+3} n_1} \quad (17)$$

a vedle oscilace koncentrací n_2, n_3 kolem stacionární hodnoty (10) dochází k jejich útlumu s rostoucí vzdáleností r .

Jiná situace nastane v případě, že koncentrační gradienty $\frac{\partial n_2}{\partial r}$ a $\frac{\partial n_3}{\partial r}$ mají opačný směr, např. tak jak je uvedeno na Obr. 1b). Tuto skutečnost vyjádříme opačnými znaménky koeficientů difúze, tj. $D_2 = D, D_3 = -D$. Frekvence (15) má jen imaginární část ω_{im} , která odpovídá opět netlumeným oscilacím jako v případě 1) ve vztahu (6) ale tentokrát s frekvencí

$$\omega_{im} = 2\pi f = \frac{2\pi}{T} = \pm \sqrt{k_{+1} k_{+3} n_1 - k^4 D^2}. \quad (18)$$

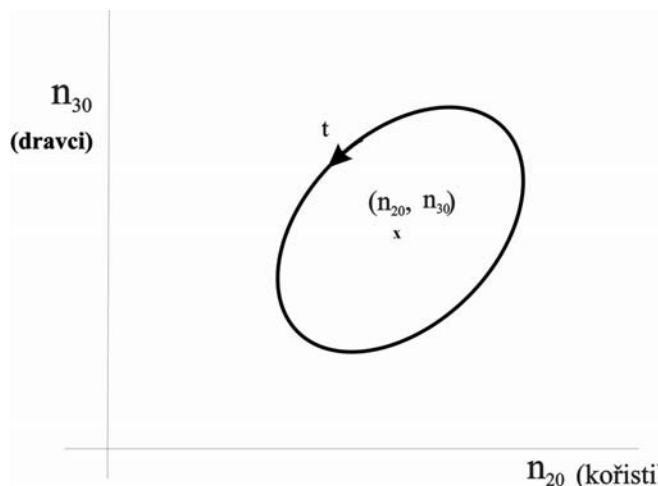
kteřá je vázána s vlnovým číslem $k = 2\pi / \lambda$ a tedy i s vlnovou délkou λ postupné vlny

$$\begin{aligned} n_2(t) &= n_{20} + \delta n_2 \exp(\omega_{im} t - kr), \\ n_3(t) &= n_{30} + \delta n_3 \exp(\omega_{im} t - kr). \end{aligned} \quad (19)$$

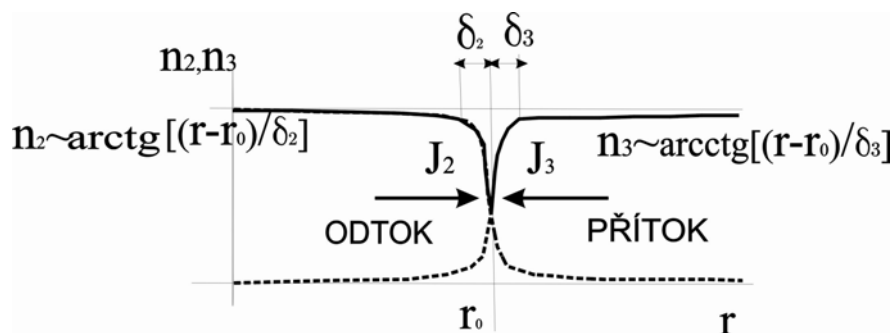
viz obr. 1a). Tyto postupné vlny reprezentují koncentrační vlny, které jsou pozorovány při tzv. Belousově-Žabotinského reakci, viz [2]. Ve speciálním případě kdy je frekvence (18) nulová je koncentrační hranice stacionární a vlnová délka λ má následující vztah k rychlostem chemických reakcí

$$\lambda = \frac{2\pi D}{\sqrt{k_{+1} k_{+3} n_1}}. \quad (20)$$

Tvar takové stacionární vlny je schematicky zobrazen na Obr.1b). Vzdálenost λ na které dojde k prudkému nárůstu koncentrace je určena rychlostmi 1. a 3. chemické reakce a velikostí difúzní konstanty.



Obr. 1a) Stabilní oscilující řešení kolem stacionárního stavu (10).



Ob r.1b). Schematický tvar koncentračního gradientu při vzájemné kompenzaci chemické reakce a difúze.

Doporučená literatura:

[1] F. Maršík, I. Dvořák, *Biotermodynamika*, Academia Praha, 1988

[2] P. Glansdorff, I. Prigogine, *Thermodynamic theory of Structure, Stability and Fluctuations*, John Wiley & Sons Ltd., London, 1971

Příklad 23

Formulujte rovnice jednorozměrného isotermického nestlačitelného proudění elastickou trubicí průřezu $A(x,t)$ jejíž stěna je charakterizována konstitutivním vztahem tvaru

$$p - p_o = \frac{8hE}{3D} \left[\left(\frac{A}{A_o} \right)^\alpha - 1 \right]. \quad (23.1)$$

kde h je tloušťka stěny, E je Youngův modul pružnosti.

Řešení:

Vyjdeme z bilančních rovnic odvozených v příkladu 4 a upravíme je pro zjednodušený případ nestacionárního, nestlačitelného, izotermického proudění. Definujeme veličinu

$$m = A\rho v, \quad (23.2)$$

průtočné množství pomocí které budeme formulovat rovnici bilanci hmotnosti

$$\rho \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} = 0. \quad (23.3)$$

Bilance hybnosti má tvar

$$\frac{\partial m}{\partial t} - \left[\left(\tau_w + \frac{m^2}{\rho A^2} \right) \frac{\partial A}{\partial p} - A \right] \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{2m}{A\rho} \frac{\partial m}{\partial x} = O\tau_w, \quad (23.4)$$

kde na obvodu trubice O ($= \pi D \dots$ pro válcovou trubku) je tečné napětí

$$\tau_w = \mu \left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_w = -\frac{\rho v^2}{2} c_f, \quad (23.5)$$

vyjadřující vazké tření o stěnu trubice. Toto tření vyjádříme pomocí třecího koeficientu c_f , který má pro laminární Poiseuillovo proudění tvar

$$c_f = \frac{64}{\text{Re}}, \quad \text{Re} = \frac{D\rho v}{\mu}. \quad (23.6)$$

Analogicky příkladu 5 označíme

$$c^2 = \frac{A}{\rho} \left(\frac{\partial A}{\partial p} \right)^{-1} = \frac{A}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial A} \right). \quad (23.7)$$

jako rychlost pohybu pulzní vlny vzniklé v důsledku elastické deformace trubky.

Z formálních důvodů lepšího zápisu výchozích bilančních rovnic (23.3),(23.4) zavedeme označení

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial A}{\partial p} &= A \left(\frac{\rho}{A} \frac{\partial A}{\partial p} \right) = \frac{A}{c^2}, \\ v &= \frac{m}{\rho A}, \\ A &= A \left[1 - \left(\tau_w + \frac{m^2}{\rho^2 A^2} \right) \frac{1}{\rho c^2} \right] = A \left[1 - (\tau_w + \rho v^2) \frac{1}{\rho c^2} \right]. \end{aligned} \quad (23.8)$$

Zákony bilance (23.3), (23.4) převedeme na konzervativní tvar

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c^2 m}{A} \right) = m \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c^2}{A} \right), \quad (23.9)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (Ap + 2vm) = \left(O\tau_w + p \frac{\partial A}{\partial x} + 2m \frac{\partial v}{\partial x} \right).$$

Vektor proměnných označíme $Y = (p, m) = (Y_1, Y_2)$ a dodatečné parametry jsou A, c^2, v , které jsou rovněž funkcemi (x, t) .

Vektor toků označíme

$$F_1 = \frac{c^2}{A} Y_2, \quad , \quad (23.10)$$

$$F_2 = AY_1 + 2vY_2$$

a vektor zdrojů

$$H_1 = Y_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c^2}{A} \right), \quad (23.11)$$

$$H_2 = O\tau_x + Y_1 \frac{\partial A}{\partial x} + Y_2 \frac{\partial v}{\partial x}.$$

Konečný tvar výchozích rovnic (23.9) je

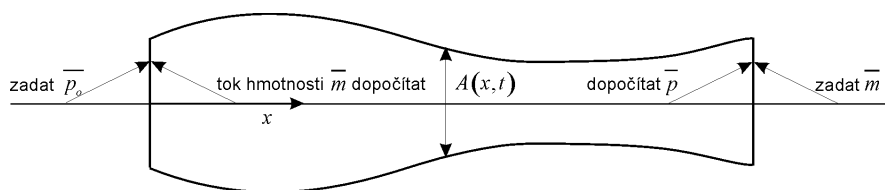
$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial F(Y)}{\partial x} = H(Y). \quad (23.12)$$

Jde o soustavu dvou hyperbolických rovnic které mají dvě reálné charakteristiky

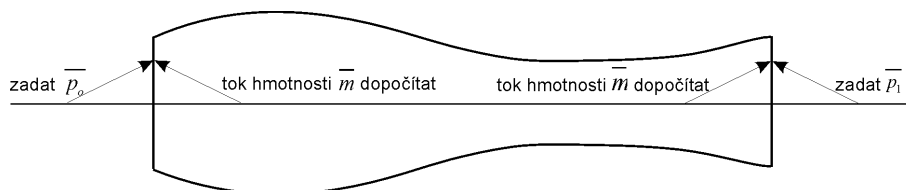
$$\frac{dx}{dt} = v \pm c \quad (23.13)$$

můžeme na okajích zadávat vždy jen jednu z okrajových podmínek, viz obr.1 a obr.2.

1. varianta



obr.23. 1 Okrajové podmínky při zadaném vstupním tlaku požadovaném výstupním množství



2. varianta

obr. 23. 2 Okrajové podmínky při zadaném vstupním a výstupním tlaku.

Způsob numerického řešení

K řešení můžeme použít MacCormackovou metodou prediktor-korektor, jejíž schema je

$$\begin{aligned}\bar{Y}_j^n &= Y_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1}^n - F_j^n) + \Delta t H_j^n, \\ \bar{Y}_j^{n+1} &= \frac{1}{2} \left[Y_j^n + \bar{Y}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\bar{F}_j^n - \bar{F}_{j-1}^n) + \Delta t \bar{H}_j^n \right], \\ Y_j^{n+1} &= \bar{Y}_j^{n+1} + \varepsilon D_2 F_j^n.\end{aligned}\tag{23.14}$$

Poslední vztah vyjadřuje tzv. umělý disipační člen, který se zavádí k potlačení numerických oscilací. Jeho nejčastější tvar je

$$D_2 Y_j^n \approx \left. \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \right|_j^n \doteq \frac{Y_{j+1}^n - 2Y_j^n + Y_{j-1}^n}{\Delta x^2}\tag{23.15}$$

a koeficient numerické disipace (tlumení) má velikost $\varepsilon \in (10^{-4}, 10^{-2})$, podle povahy úlohy.

$$\left| (c + v) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1,\tag{23.16}$$

kde c je rychlost malých (zvukových) poruch ve vyšetřovaném mediu.

Příklad 24:

Dokažte v termodynamice často užívané matematické identity (3), (4), (5). Předpokládejte, že veličiny x, y, z jsou vázány funkční závislostí

$$f(x, y, z) = 0, \text{ resp.} \quad (1)$$

$$x = x(y, z), \quad y = y(x, z), \quad z = z(x, y).$$

Jestliže ještě navíc je funkce w funkcí libovolné dvojice těchto tří proměnných, tj.

$$w = w(x, y), \text{ popř. } w = w(y, z) \text{ či } w = w(x, z), \quad (2)$$

platí následující identity:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w = \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_w, \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \frac{1}{\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z}, \quad (4)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1. \quad (5)$$

Řešení:

Závislost (2) si můžeme přepsat do tvaru

$$x = x(w, y), \quad y = y(w, z), \quad z = z(w, x). \quad (6)$$

Totální diferenciály těchto funkcí jsou

$$dx - \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w dy + 0dz - \left(\frac{\partial x}{\partial w}\right)_y dw = 0,$$

$$0dx + dy - \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w dz - \left(\frac{\partial y}{\partial w}\right)_z dw = 0, \quad (7)$$

$$-\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w dx + 0dy + dz - \left(\frac{\partial z}{\partial w}\right)_x dw = 0.$$

Předpokládejme, že $w = \text{konst}$, pak $dw = 0$ a soustava (7) má tvar

$$dx - \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w dy + 0dz = 0,$$

$$0dx + dy - \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w dz = 0, \quad (8)$$

$$-\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w dx + 0dy + dz = 0.$$

Její nenulové řešení dx, dy, dz může nastat jen v případě, že determinant této soustavy je nulový, tj.

$$\det \begin{bmatrix} 1, & -\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w, & 0 \\ 0, & 1, & -\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w \\ -\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w, & 0, & 1 \end{bmatrix} = 1 - \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_w = 0, \quad (9)$$

$$\text{resp. } \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_w = \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_w.$$

Tímto je dokázána identita (3).

Identita (4) plyne přímo z definice inverzní funkce, např.

$$x = x(y, z), \text{ resp. } x = x(y(x, z), z). \quad (10)$$

Totální diferenciál této funkce vyhovuje podmínce

$$dx - \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z dx = 0,$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \frac{1}{\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z}. \quad (11)$$

Využitím vlastností totálního diferenciálu funkcí (1). Odvodíme identitu (5), tj.

$$dx - \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z dy - \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y dz = 0,$$

$$-\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z dx + dy - \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x dz = 0, \quad (12)$$

$$-\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y dx - \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x dy + dz = 0.$$

Diferenciály dx , dz , dy jsou řešením soustavy lineárních algebraických rovnic (12) a podmínka nenulového řešení této soustavy je nulová hodnota determinantu matice této soustavy

$$\det \begin{bmatrix} 1, & -\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z, & -\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \\ -\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z, & 1, & -\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \\ -\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y, & -\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x, & 1 \end{bmatrix} =$$

$$-\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y - \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x -$$

$$-\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z + 1 = 0. \quad (13)$$

Využitím identity (11) můžeme podmínku (13) přepsat do tvaru

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y + \left[\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \right]^{-1} + 2 = 0. \quad (14)$$

Označíme na okamžik výraz

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = X. \quad (15)$$

Pak podmínka existence nenulových diferenciálů (13) má tvar

$$X^2 + 2X + 1 = (X + 1)^2 = 0. \quad (16)$$

Řešením této rovnice je hledaný vztah (5), tj.

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1. \quad (17)$$

Příklad 30

Z formulace zákona bilance hybnosti v integrálním tvaru

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \dot{v}^i dv = \int_{\partial \mathcal{V}} t^i da + \int_{\mathcal{V}} \rho f^i dv \quad (30.1)$$

setrvačná síla povrchová síla objemová síla

nalezněte bilanci mechanické energie po proudnici.

Řešení: Přejdeme k lokálnímu tvaru zákona bilance pro tenzor tlaku P^{ij} definovaný z povrchových sil t^i vztahem

$$t^i = P^{ij} n_j, \quad da_j = n_j da, \quad \text{kde } P^{ij} = p(\rho, T) \delta^{ij} - P_{dis}^{ij}, \quad (30.2)$$

kde $da = (da_1, da_2, da_3) = \mathbf{n} da$ je orientovaný element povrchu, $p(\rho, T)$ je hydrostatický tlak a P_{dis}^{ij} je tenzor vazkých (disipativních) napětí. Výchozí lokální tvar zákona bilance hybnosti je

$$\frac{\partial \rho v^i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^l} (\rho v^l v^i + P^{li}) = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} f_{\alpha}^i. \quad (30.3)$$

Po dosazení z (30.2) dostáváme a vynásobením skalárně vektorem rychlosti \mathbf{v}

$$\frac{\partial (\rho v^i)}{\partial t} v^i + v^i \frac{\partial}{\partial x^l} (\rho v^l v^i) + v^i \frac{\partial p}{\partial x^i} = v^i \frac{\partial}{\partial x^l} P_{dis}^{li} + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} v^i f_{\alpha}^i. \quad (30.4)$$

Tímto formálním postupem jsme dostali bilanci mechanické energie, tj. [W].

Upravíme a přeskupíme jednotlivé členy

$$\begin{aligned} (v^i)^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^l)}{\partial x^l} \right) + \rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) + v^l \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + v^l \frac{\partial p}{\partial x^l} = \\ \frac{\partial (p + \varphi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^l} (v^i P_{dis}^{li}) - P_{dis}^{li} \frac{\partial v^i}{\partial x^l}, \quad \text{pro } \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} f_{\alpha}^l = - \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial x^l} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x^l} \end{aligned} \quad (30.5)$$

Využijeme rovnice bilance hybnosti a definice materiálové derivace

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^l)}{\partial x^l} = 0, \quad \dot{p} = \frac{\partial p}{\partial t} + v^l \frac{\partial p}{\partial x^l} \quad (30.6)$$

rovnici bilance mechanické energie pak můžeme psát ve tvaru

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) + v^l \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + v^l \frac{\partial p}{\partial x^l} = \\ \rho \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) + \dot{p} = \frac{\partial (p + \varphi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^l} (v^i P_{dis}^{li}) - P_{dis}^{li} \frac{\partial v^i}{\partial x^l}. \end{aligned} \quad (30.7)$$

Jestliže zanedbáme tření, tj. $P_{dis}^{il} = 0$ a procesy jsou stacionární dostáváme nejjednodušší variantu zákona bilance mechanické energie, tzv. Bernoulliovu rovnici

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) + \frac{\dot{p}}{\rho} \right] dt = \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) \Big|_1^2 + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\dot{p}}{\rho} dt = \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) \Big|_2 - \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + \varphi \right) \Big|_1 + \int_{p_1}^{p_2} \frac{dp}{\rho} = 0 \quad (30.8)$$

kde integrace probíhá po proudnici (čára tečná ke směru rychlosti) s délkovým parametrem s

$$dt = v^l dx^l = |v| ds. \quad (30.9)$$

Bilanci mechanické energie můžeme formulovat i obecněji. Využijeme bilance hmotnosti a následujících identit

$$\dot{\rho} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + v^l \frac{\partial \rho}{\partial x^l} = -\rho \frac{\partial v^l}{\partial x^l}, \quad \dot{p} = \overline{\left(\rho \frac{p}{\rho} \right)} = \frac{p}{\rho} \dot{\rho} + \rho \overline{\left(\frac{p}{\rho} \right)} = \rho \overline{\left(\frac{p}{\rho} \right)} - p \frac{\partial v^l}{\partial x^l}, \quad (30.10)$$

$$\text{t.j. } \frac{\rho \partial p}{\rho \partial t} = \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p}{\rho} \right) - p \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right], \quad \frac{\rho v^l \partial p}{\rho \partial x^l} = \rho v^l \left[\frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{p}{\rho} \right) - p v^l \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right]$$

a dostáváme bilanci mechanické energie v obecném tvaru

$$\rho \overline{\left(\frac{v^2}{2} + \frac{p}{\rho} + \varphi \right)} = \frac{\partial (p + \varphi)}{\partial t} + p \frac{\partial v^l}{\partial x^l} - P_{dis}^{li} \frac{\partial v^l}{\partial x^l} + \frac{\partial}{\partial x^l} (v^l P_{dis}^{li}). \quad (30.11)$$

Odtud je zřejmé, že pro nevazkou a nestlačitelnou tekutinu ($\frac{\partial v^l}{\partial x^l} = 0$) platí, že součet kinetické, potenciální a tlakové energie jsou v každém místě tekutiny konstantní, tj.

$$\frac{v^2}{2} + \frac{p}{\rho} + \varphi = konst. \quad (30.12)$$

Jde o jakýsi „Zákon zachování mechanické energie“.

Příklad 31.

Zákon bilance momentu hybnosti (zákon rovnováhy momentů) tělesa o objemu \mathcal{V} v bodu \mathbf{y} má tvar [1]

$$\overline{\int_{\mathcal{V}} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \times \rho \mathbf{v} dv} = \overline{\int_{\partial\mathcal{V}} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \times \mathbf{t} da} + \overline{\int_{\mathcal{V}} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \times \rho \mathbf{f} dv}, \quad (31.1)$$

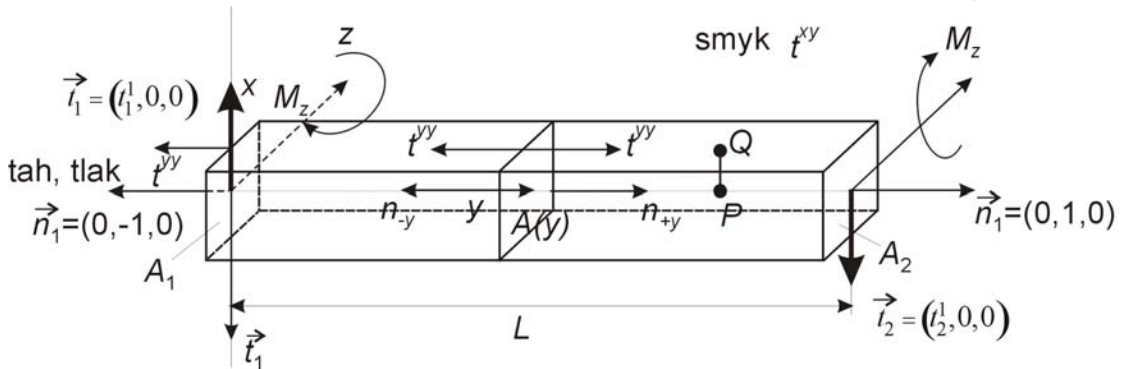
ve složkovém zápisu

$$\overline{\int_{\mathcal{V}} \rho \varepsilon_{ijk} (x^j - y^j) v^k dv} = \overline{\int_{\partial\mathcal{V}} \varepsilon_{ijk} (x^j - y^j) t^k da} + \overline{\int_{\mathcal{V}} \rho \varepsilon_{ijk} (x^j - y^j) f^k dv}. \quad (31.2)$$

Vektor povrchových (plošných) sil působících na element plochy má komponenty $\mathbf{t} = (t^1, t^2, t^3)$. Je-li da velikost elementu plochy $\mathbf{da} = (dydz, dzdx, dxdy)$ s definovanou normálou $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ pak z rovnováhy sil $\mathbf{t} da = t^k da_k = t^{kl} da_l$ na tomto elementu odvodíme vztah $t^i = t^{ij} n_j$ kde t^{ij} je tenzor napětí. V obvyklém případě kdy neexistují vnitřní objemové momenty (látka není polární) je tenzor napětí symetrický

$$t^{ij} = t^{ji}. \quad (31.3)$$

Vyšetřete rovnováhu sil a momentů pro případ vetknuté tyče zatížené na volném konci silou $\vec{t}_2 = (t_2^1, 0, 0)$, viz obr. 31.1. Vektorový součin je definován pomocí permutačního symbolu ε^{ijk} vztahem $M_i = (\mathbf{y} \times \mathbf{t}_2)_i = \varepsilon_{ijk} y^j t_2^k$.



Obr. 31.1 Rovnováha sil a momentů sil na vetknuté tyči před deformací. P, Q jsou dva materiálové body, bod P je na ose a bod Q je mimo osu.

Vztažný bod $\mathbf{y} = (0, 0, 0)$ je počátek soustavy souřadnic. Pro z -tovou složku momentu, tj. $i=3$ platí $M_3 = \varepsilon_{321} y^2 t_2^1$, viz obr. 31.1. Moment ve směru osy z označme M_z a jeho velikost je $M_z = (-1)L(-t_2^1) = Lt_2^1$. Orientované elementy plochy v odpovídajících průřezích A_1, A_2 jsou $da_1 = (0, -dxdz, 0), da_2 = (0, dxdz, 0)$.

Řešení:

Předpokládejme, že je materiál zatěžované tyče homogenní a isotropní, takže jeho konstitutivní vťah má tvar

$$t^{ij} = \eta e_{(1)} \delta^{ij} + 2\hat{\mu} e^{(o)ij} = K e_{(1)} \delta^{ij} + 2\hat{\mu} e^{(o)ij}. \quad (31.4)$$

Eulerův deformační tenzor

$$2e^{kl} = \frac{\partial u^k}{\partial x^l} + \frac{\partial u^l}{\partial x^k} - \frac{\partial u^m}{\partial x^l} \frac{\partial u^m}{\partial x^k}, \quad e_{(1)} = \sum_{m=1}^3 \left\{ \frac{\partial u^m}{\partial x^m} - \sum_{l=1}^3 \left(\frac{\partial u^l}{\partial x^m} \right) \left(\frac{\partial u^l}{\partial x^m} \right) \right\}, \quad (31.5)$$

vyjadřuje relativní změny vzdáleností dvou materiálových bodů P , Q působením deformace, porovnej Obr. 31.1 a Obr. 31.2. Stopa tenzoru deformace $e_{(1)}$ vyjadřuje objemové změny a deviator tenzoru deformace

$$2e^{(o)kl} = \frac{\partial u^k}{\partial x^l} + \frac{\partial u^l}{\partial x^k} - \frac{\partial u^m}{\partial x^l} \frac{\partial u^m}{\partial x^k} - \frac{2}{3} e_{(1)} \delta^{kl} \quad (31.6)$$

popisuje změny v důsledku přetvoření (beze změny objemu), např. jednoduchý smyk.

V případě malých deformací zanedbáme v tenzoru (31.6) nelineární člen, takže tenzor malých deformací je definován vztahem

$$e^{(o)kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^k}{\partial x^l} + \frac{\partial u^l}{\partial x^k} - \frac{2}{3} e_{(1)} \delta^{kl} \right), \quad e_{(1)} = \sum_{m=1}^3 \frac{\partial u^m}{\partial x^m},$$
$$e^{11} = e^{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad e^{12} = e^{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right), \dots, \quad (31.7)$$

$$e^{(o)11} = e^{(o)xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{3} e_{(1)}, \quad e^{(o)12} = e^{(o)xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right), \dots$$

V důsledku rozdílného fyzikálního významu deformačních tenzorů (31.5) a (31.6), mají různý význam i materiálové parametry $\eta, K, \hat{\mu}$. Platí mezi nimi následující vztahy [2]

$$\eta = \frac{\sigma E}{(1+\sigma)(1-2\sigma)}, \quad K = \frac{E}{3(1-2\sigma)}, \quad \hat{\mu} = \frac{E}{2(1+\sigma)}. \quad (31.8)$$

Youngův modul pružnosti E a Poissonovo číslo

$$\sigma = -\frac{e^{22}}{e^{11}} = -\frac{\frac{\partial u_y}{\partial y}}{\frac{\partial u_x}{\partial x}} = -\frac{e^{33}}{e^{11}} = -\frac{\frac{\partial u_z}{\partial z}}{\frac{\partial u_x}{\partial x}} \quad (31.9)$$

jsou většinou získávány z tahové zkoušky ve směru osy x .

Rovnováha sil. Předpokládáme statické zatížení a uvažujeme jen rovnováhu povrchových sil

$$t_1^i + t_2^i = 0, \quad \text{pro } i = 1, 2, 3, \quad (31.10)$$

které působí v průřezech A_1, A_2 , viz obr. 31.1. V našem případě platí

$$t_1^1 = -t_2^1, \quad (31.11)$$

síly působí ve směru souřadnice x a jsou stejně velké opačného smyslu. Označíme-li smykové napětí t^{xy} [Pa] pak z konstitutivního vztahu (31.4) plyne

$$t_1^1 = t^{xy} A(y) = \hat{\mu} e^{xy} A(y) = \frac{E}{1+\sigma} e^{xy} A(y) \quad (31.12)$$

Smykový modul $\hat{\mu}$ jsme nahradily Youngovým modulem pružnosti E a Poissonovým číslem σ , viz. vztah (31.8).

Rovnováha momentů. V průřezu A_1 je moment způsobený silou $t_2 = (-t_2^1, 0, 0)$. Podle vztahu (31.2) je rovnováha momentů pro případ znázorněný na obr. 31.1 popsána rovnicí

$$\underbrace{-\int_{A_1} \varepsilon_{zxy} x t^{yy} dx dz}_{-1} + \underbrace{\int_{A_2} \varepsilon_{zyx} L (-t_2^x) dx dz}_{+1} = 0. \quad (31.13)$$

Moment vnější síly, který má velikost $M_z = Lt_2^1$ směřuje v průřezu A_2 v kladném směru osy z a v průřezu A_1 v záporném směru.

Zavedeme označení

$$M_z = -\int_{A_1} x t^{yy} dx dz = Lt_2^1. \quad (31.14)$$

Rovnováhu momentů můžeme formulovat k libovolnému bodu y průřezu $A(y)$, viz obr. 31.1,

$$\begin{aligned} -M_z + \int_{A(y)} \varepsilon_{321} (0-y) t_1^1 dx dz + \int_{A(y)} \varepsilon_{321} x t^{yy} dx dz - \\ \int_{A(y)} \varepsilon_{321} x t^{yy} dx dz + \int_{A(y)} \varepsilon_{321} (L-y) (-t_2^1) dx dz = -M_z + M_z(y) - M_z(y) + M_z = 0 \end{aligned} \quad (31.15)$$

Integrály

$$\int_{A(y)} x t^{yy} dx dz - \int_{A(y)} x t^{yy} dx dz = 0 \quad (31.16)$$

přes tahová a tlaková napětí t^{yy} na orientované ploše průřezu $A(y)$ se vzájemně vyruší v důsledku orientace plochy, viz obr.31.1. Moment vnějších povrchových sil v bodě y je roven

$$M_z(y) = \int_{A(y)} \varepsilon_{321} (0-y) (t_1^1) dx dz \quad \text{pro } y \in (0, y), \quad (31.17)$$

a

$$M_z(y) = \int_{A(y)} \varepsilon_{321} (L-y) (-t_2^1) dx dz \quad \text{pro } y \in (y, L). \quad (31.18)$$

$$M_z = -\int_{A_1} x t^{yy} dx dz = Lt_2^1 \quad (31.19)$$

Vidíme, že ohybový moment je lineární funkcí souřadnice y a pro jeho derivaci platí

$$\frac{M_z(y + \Delta y) - M_z(y)}{\Delta y} = \frac{dM_z}{dy} \Big|_{y \in (0, y)} = t_1^1 \quad \text{a analogicky} \quad \frac{dM_z}{dy} \Big|_{y \in (y, L)} = -t_2^1. \quad (31.20)$$

Derivace ohybového momentu je rovna **smykové (posouvající) síle**. V tomto případě je velikost této smykové síly rovna síle zatěžující t_2^1 .

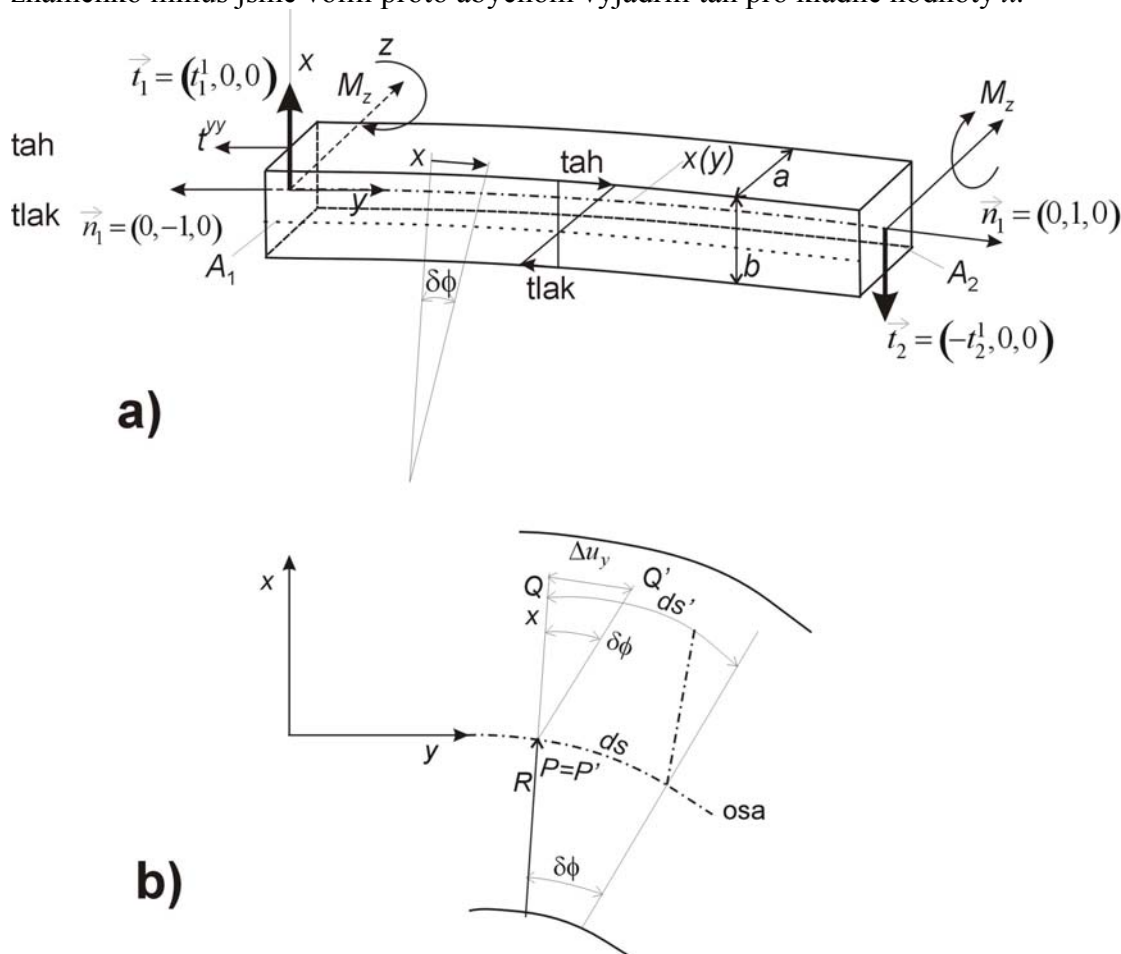
Namáhání v ohybu. Pro jednoosé zatížení můžeme určit tenzor napětí $t^{yy} = Ee^{yy}$, kde e^{yy} je relativní prodloužení ve směru osy y . Deformaci ve směru osy y stanovíme podle přibližného vzorce

$$e^{yy} = \frac{[(R+x) - R] \delta\phi}{R\delta\phi} = \frac{x}{R}, \quad (31.21)$$

viz obr.31.2. Podle konstitutivního vztahu (31.4) je tento typ namáhání napětí v průřezu $A(y)$ určen vztahem

$$t^{yy} = Ee^{yy} = -E \frac{x}{R} = -Ex \frac{d^2x}{dy^2}, \quad (31.22)$$

znaménko minus jsme volili proto abychom vyjádřili tah pro kladné hodnoty x .



Obr. 31.2 a) Ohyb tyče obdélíkového průřezu. b) Materiálový bod Q , který je mimo osu se posunul do polohy Q' a pod P svou polohu nezměnil.

Ohybový moment v průřezu A_1 je podle vztahu (31.14) roven

$$M_z = - \int_{A_1} x t^{yy} dx dz = \int_{A_1} \frac{E}{R} x^2 dx dz = \frac{EI_z}{R} = EI_z \frac{d^2x}{dy^2}. \quad (31.23)$$

Zavedli jsme veličinu I_z zvanou moment setrvačnosti průřezu vztahem

$$I_z = \int_{A(y)} x^2 dx dz = \int_{-b/2}^{b/2} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 dx dy = \frac{ab^3}{12}. \quad (31.24)$$

Ze vztahu (31.23) snadno vypočteme poloměr zakřivení tyče

$$\frac{1}{R} = \frac{M_z}{EI_z} \quad (31.25)$$

pomocí známých veličin.

Literatura:

- [1] Maršík F. Termodynamika kontinua, Academia Praha, 1999
- [2] Brdička M. Mechanika kontinua, Nakladatelství Československé akademie věd, Praha, 1959

Příklad 32

Formulujte zadání úlohy pro nalezení podélných, příčných a torzních kmitů tyče vetknuté na jedné straně a zatěžované na volném konci silou, popř. silovým momentem, viz. obr. 32.1.

Řešení:

Předpokládejme, že půjde o homogenní, izotropní, termo-viskoelastický materiál, jehož obecný konstitutivní vztah je

$$t^{ij} = -3K\alpha(T - T_o)\delta^{ij} + Ke_{(1)}\delta^{ij} + 2\hat{\mu}e^{(o)ij} + 2\mu d^{(o)ij} \quad (32.1)$$

Materiálové parametry mohou obecně záviset i na velikosti deformace a mají následující fyzikální význam:

$K \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right]$	je modul stlačitelnosti
$\hat{\mu} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right]$	je modul pružnosti ve smyku
$\mu \left[\text{Pa} \cdot \text{s} \right]$	je koeficient smykové viskozity
$\alpha \left[\text{K}^{-1} \right]$	je koeficient teplotní roztažnosti

Eulerův tenzor konečných deformací $e^{ij}(x^l, t)$ je vyjádřen pomocí vektoru posunutí

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u^1(x^i, t), u^2(x^i, t), u^3(x^i, t)) = (u_x, u_y, u_z) \quad (32.2)$$

Jeho obecný tvar je

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} - 2 \frac{\partial u^l}{\partial x^i} \frac{\partial u_l}{\partial x^j} \right) \quad (32.3)$$

Stopa tenzoru deformace $e_{(1)}$ vyjadřuje změnu velikosti objemu při deformaci a

deviátor $e^{(o)ij}$ tohoto tenzoru vyjadřuje přetvoření.

Tedy

$$e_{(1)} = \delta_{ij}e^{ij} = e^{11} + e^{22} + e^{33} = \sum_{m=1}^3 \left[\frac{\partial u^m}{\partial x^m} - \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u^l}{\partial x^m} \frac{\partial u_l}{\partial x^m} \right] \quad (32.4)$$

$$e^{(o)ij} = e^{ij} - \frac{1}{3}e_{(1)}\delta^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u^l}{\partial x^l} \delta^{ij} \right) + \frac{1}{3} \sum_{l,m=1}^3 \left(\frac{\partial u^l}{\partial x^m} \frac{\partial u_l}{\partial x^m} \delta^{ij} - 3 \frac{\partial u^l}{\partial x^i} \frac{\partial u^l}{\partial x^j} \right) \quad (32.5)$$

Zanedbáním kvadratických členů v tenzorech deformace (32.4) a (32.5) dostáváme obvyklý tenzor malých deformací. Vzhledem k tomu, že budeme nadále užívat jen tenzor malých deformací, ponecháme stejné označení jako v případě tenzoru konečných deformací, tudíž

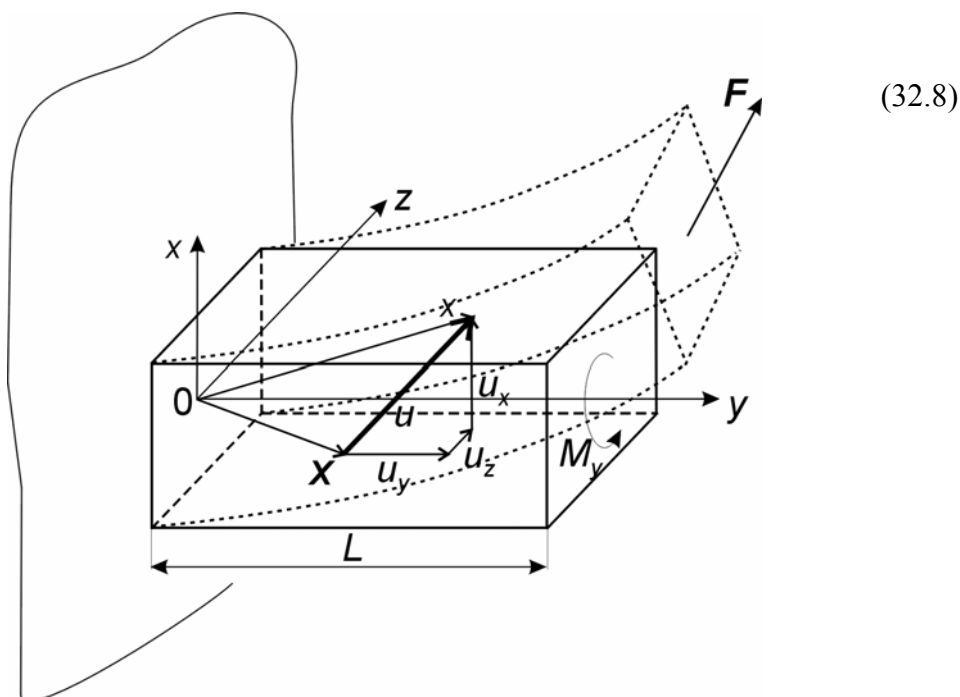
$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} \right) \quad (32.6)$$

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} - \frac{2}{3} e_{(1)} \delta^{ij} \right), \quad e_{(1)} = \frac{\partial u^l}{\partial x^l} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

Tenzor rychlosti deformace je definován vztahem

$$d^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \frac{\partial v^j}{\partial x^i} \right), \quad d^{ij} = d^{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial v^l}{\partial x^l} \delta^{ij}. \quad (32.7)$$

Rychlost materiálového bodu $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$ vyjádříme v prostorových (Eulerových) souřadnicích $(\mathbf{x}, t) = (x^1, x^2, x^3) \equiv (x, y, z, t)$ jako materiálovou derivaci vektoru posunutí



obr. 32.1

Znázornění deformace vetknuté tyče silou $F = (F_x, F_y, F_z)$. Touto silou můžeme vybudit podélné kmity (laterální flexe), příčné kmity (čistá flexe). Momentem M_y vybudíme torzní kmity.

Konvektivní člen $v^l \frac{\partial u^i}{\partial x^l}$ zanedbáme proti rychlosti $\frac{\partial u^i}{\partial t}$, protože v tuhých tělesech je rychlost unášení (konvekce) materiálových bodů velmi malá. Např. pro případ podélných vln, viz dále, je konvektivní člen úměrný $v_y e_{yy}$, kde $v_y \doteq \frac{\partial u}{\partial t}$ a $e_{yy} \ll 1$. V případě malých deformací navíc platí

$$d^{ij} = \dot{e}^{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j \partial t} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i \partial t} \right) \quad (32.9)$$

Zákon bilance hybnosti je vyjádření rovnováhy setrvačných a povrchových sil (objemové síly zanedbáváme). Pro každý materiálový bod tyče (obecné těleso o objemu \mathcal{V}) platí

$$\rho \dot{v}^i - \frac{\partial t^{ik}}{\partial x^k} = 0, \quad i, k = 1, 2, 3 \text{ pro } \mathbf{x} \in V \quad (32.10)$$

Zanedbáme-li konvektivní členy, dostáváme bilanci hybnosti ve tvaru

$$\rho \frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} - \frac{\partial t^{ik}}{\partial x^k} = 0 \quad (32.11)$$

kde $\rho \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$ je hustota tělesa.

Okrajové podmínky:

Předpokládejme výchylku jen ve směru osy x , tj. $\mathbf{u} = (u_x(y, t), 0, 0)$ na vetknuté straně musí být splněny podmínky

$$u_x(y, t) = 0, \quad \frac{\partial u_x}{\partial y}(y, t) = 0 \quad \text{pro } y = 0, t \geq 0 \quad (32.12)$$

a na volném konci předpokládáme kmitnu, tj.

$$\frac{\partial u_x}{\partial y}(y, t) = 0, \quad \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}(y, t) = 0, \quad \text{pro } y = L, t \geq 0 \quad (32.13)$$

Počáteční podmínky musí být kompatibilní s okrajovými podmínkami, tj.

$$u_x(y, 0) = u_x(y, t = 0) \quad \text{pro } y \in \langle 0, L \rangle \quad (32.14)$$

Příklad 33:

Nalezněte frekvenci ohybových kmitů vetknuté tyče s volným koncem

- bez přidané hmoty na konci tyče,
- s přidanou bodovou hmotou na konci M_G tyče.

Pro stanovení deformace v ohybu využijte vztahu (31.22) z příkladu 31.

Řešení:**Ohybové (příčné) kmity vetknuté tyče.**

K řešení využijte variačního principu mechaniky pevných elastických těles [1], [2]. Budeme předpokládat, že v tyči dochází jen k elastickým deformacím a tento proces je izentropický. Za těchto podmínek je zákon bilance hybnosti (rovnováha sil na elastickém tělese) důsledkem extrému (minima) funkcionálu

$$S(u^i(x^j, t)) = \int_{t_0}^{t_1} \int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial t} \right)^2 - \frac{t_{el}^{ij} e_{ij}}{2} - \rho \phi \right] dv dt \quad (33.1)$$

vzhledem k posunutí $u^i(x^j, t)$ materiálového bodu P . Fyzikální význam integrandu

(tzv. Lagrangiánu) ve funkcionálu (33.1) je rozdíl kinetické energie $\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial t} \right)^2$ a energie

deformační $\frac{1}{2} t_{el}^{ij} e_{ij}$ a potenciální $\rho \phi$ v jednotce objemu tuhého tělesa o hustotě ρ a

celkovém objemu \mathcal{V} . Část deformační energie se nevratně přeměňuje na teplo disipací. Tuto disipovanou energii zahrneme do potenciální energie

$$\rho \phi = f_{dis} u_x = \mu \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} u_x \quad \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right], \quad (33.2)$$

kde $\mu \left[\frac{\text{Ns}}{\text{m}^2} \right]$ je viskozita materiálu tyče. Jestliže zanedbáme vliv gravitace, pak zůstává v lagrangiánu vedle kinetické energie jen deformační energie tyče ohýbající se v rovině (x, y) a disipovaná energie (33.2). S ohledem na vztahy (31.21) a (31.22) je deformační energie rovna¹⁾

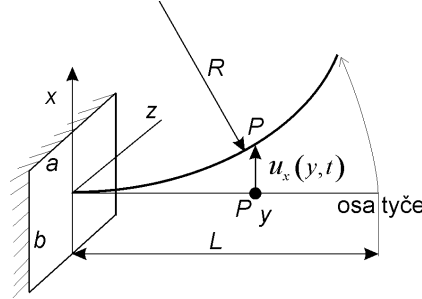
$$\frac{1}{2} t_{el}^{ij} e_{ij} = \frac{1}{2} t^{yy} \cdot e^{yy} = \frac{Ex^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right)^2. \quad (33.3)$$

Výchylku osy tyče ve směru x jsme označili $u_x(y, t)$, viz obr. 33.1 Potom je funkcionál (33.1) pro tyč příčně kmitající v rovině (x, y) dán integrálním výrazem

1) Poloměr oskulační kružnice v bodě y je $\frac{1}{R_x} = \frac{\left| \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right|}{\left[1 + \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)^2 \right]^{3/2}} \doteq \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \Big|_y$

Pro malé ohyby je $\left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)^2 \ll 1$. Pro rovinu (y, z) platí $\frac{1}{R_z} = \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}$.

$$S(u_x(y), t) = \int_{t_0}^{t_1} \int_{-\frac{b}{2}}^{+\frac{b}{2}} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \int_0^L \left[\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right)^2 - \mu \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} u_x - \frac{Ex^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right)^2 \right] dy dz dx dt. \quad (33.4)$$



Obr. 33.1 Ohyb osy tyče obdélníkového průřezu. Materiálový bod osy P se posunul o $u_x(y, t)$. Posuv ve směru podélném zanedbáme $|u_x| \gg |u_y|$.

Nutná podmínka extrému tohoto funkcionálu vzhledem k výchylce $u_x(y, t)$ je určena nulovou variací tj.,

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_0}^{t_1} \frac{\rho ab}{2} \int_0^L \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right)^2 - \mu \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} u_x - \frac{Eab^3}{24} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right)^2 \right] dy dt = \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho ab \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right) \frac{\partial \delta u_x}{\partial t} - \mu \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} \delta u_x - \frac{Eab^3}{12} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \frac{\partial^2 \delta u_x}{\partial y^2} \right] dy dt = 0, \end{aligned} \quad (33.5)$$

za dodatečných podmínek na počátku a konci pohybu

$$\delta u(y, t = t_0) = \delta u(y, t = t_1) = 0. \quad (33.6)$$

Okrajové podmínky na koncích tyče určíme později.

Integrál

$$I_z = \int_A x^2 dx dz \quad \text{pro } A(x, z) = a \times b, \text{ nebo } A(x, z) = \pi R^2, \quad (33.7)$$

je obecně moment setrvačnosti I_z průřezu $A(x, z)$ při ohybu kolem osy z . Pro případ kruhového průřezu $A(x, z) \equiv R^2 - x^2 - z^2 = 0$ pak integrujeme

$$\begin{aligned} I_z &= \int_{A(x,z)} x^2 dx dz = \int_{-R}^R dz \int_{-R\sqrt{1-\frac{z^2}{R^2}}}^{R\sqrt{1-\frac{z^2}{R^2}}} x^2 dx = \frac{2R^3}{3} \int_{-R}^R \left(1 - \frac{z^2}{R^2} \right)^{3/2} dz = \\ &= \frac{2R^4}{3} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^4 \varphi d\varphi = \frac{\pi R^4}{4}. \end{aligned} \quad (33.8)$$

Integrál jsme upravili pomocí substituce $z = R \sin \varphi$. Výsledkem je moment setrvačnosti kruhového průřezu vzhledem k ohybu kolem osy z .

Poznámka 1: Všechny následující vztahy, které platí pro obdélníkový průřez na obr.

33.1 platí i pro kruhový průřez jestliže nahradíme vztah $\frac{ab^3}{12}$ vtahem $\frac{\pi R^4}{4}$. Konec poznámky.

Veličiny označené indexem „0“ budeme považovat při variaci za konstantní. Jde o tzv. rozšířený variační počet, podrobněji viz příklad 37.

Využitím časové integrace per partes dostáváme

$$\rho ab \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \frac{\partial u_x}{\partial t} \frac{\partial \delta u_x}{\partial t} dy dt = \rho ab \int_0^L \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \delta u_x \right) \Big|_{t_0}^{t_1} dy - \rho ab \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} \delta u_x dy dt. \quad (33.9)$$

Stejnou úpravu použijeme i na integraci v intervalu $(0,L)$ v integrálu

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \frac{Eab^3}{12} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \frac{\partial^2 \delta u_x}{\partial y^2} dy dt &= - \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \frac{\partial \delta u_x}{\partial y} \right) \Big|_0^L dy dt + \\ &+ \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^3} \frac{\partial \delta u_x}{\partial y} dy dt = - \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \frac{\partial \delta u_x}{\partial y} \right) \Big|_0^L dy dt + \\ &+ \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial^3 u_x}{\partial y^3} \delta u_x \right) \Big|_0^L dy dt - \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \frac{\partial^4 u_x}{\partial y^4} \delta u_x dy dt. \end{aligned} \quad (33.10)$$

Shrneme okrajové podmínky pro výchylku na koncích tyče:

i) pro $y=0$ je konec tyče vetknutý:

$$\delta u_x \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{\partial u_x}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0 \quad (33.11)$$

ii) pro $y=L$ je konec tyče volný:

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \Big|_{y=L} = 0, \quad \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^3} \Big|_{y=L} = 0 \quad (33.12)$$

iii) pro $y=L$ je konec tyče podepřen:

$$\delta u_x \Big|_{y=L} = 0, \quad \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \Big|_{y=L} = 0 \quad (33.13)$$

Dosazením do hraničních členů ve výrazu (33.10) zjistíme, že jediný nenulový člen je roven

$$- \frac{Eab^3}{12} \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial^4 u_x}{\partial y^4} \delta u_x dy dt \quad (33.14)$$

S ohledem na podmínky (33.6) a (33.11) až (33.13) přechází nutná podmínka extrému (33.5) funkcionálu (33.4) na tvar

$$\delta S = - \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L ab \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} \Big|_0 + \frac{Eb^2}{12\rho} \frac{\partial^4 u_x}{\partial y^4} \right) \delta u_x dy dt = 0 \quad (33.15)$$

která je identicky splněna parciální diferenciální rovnicí

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^3 u_x}{\partial y^2 \partial t} \Big|_0 + \frac{Eb^2}{12\rho} \frac{\partial^4 u_x}{\partial y^4} = 0, \quad \text{při } u_x = u_{x0}, \text{ pro } t > 0, y \in (0, L). \quad (33.16)$$

Dostali jsme tak rovnici příčných kmitů tyče v rovině (x,y) . Pro kmity v rovině (y,z) platí analogicky

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^3 u_z}{\partial y^2 \partial t} \Big|_0 + \frac{Ea^2}{12\rho} \frac{\partial^4 u_z}{\partial y^4} = 0, \quad \text{pro } t > 0, y \in (0, L) \quad (33.17)$$

Řešení těchto lineárních rovnic budeme hledat ve tvaru harmonické vlny, např. pro rovnici (33.16) předpokládáme

$$u_x(y, t) = \bar{u}_x e^{i(k_y y - \omega t)} \quad (33.18)$$

Po dosazení (33.18) do diferenciální rovnice (33.16) dostáváme pro $\omega = \omega_r + \omega_{im}$, tzv. disperzní rovnici

$$-\omega^2 = i\omega \frac{\mu}{\rho} k_y^2 + \frac{Eb^2}{12\rho} k_y^4 = 0. \quad (33.19)$$

Tato algebraická rovnice má jak reálný tak i imaginární kořen

$$\omega_r = \pm k_y^2 \sqrt{\frac{Eb^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}}, \quad \omega_{im} = -\frac{\mu}{2\rho} k_y^2, \quad (33.20)$$

takže kmity jsou tlumené. Toto se dalo očekávat, neboť jsme uvažovali disipativní člen (33.2), viz funkcionál (33.4).

Předpokládejme, že konec tyče $y=L$ je **volný**, tzn., že vlnová délka základního modu je $l_y = 4L$. Odpovídající vlnový vektor je $k_y = \frac{2\pi}{4L}$ a základní frekvence je podle (33.20) rovna

$$\omega_x = \left(\frac{2\pi}{4L}\right)^2 \sqrt{\frac{Eb^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}}, \quad \omega_z = \left(\frac{2\pi}{4L}\right)^2 \sqrt{\frac{Ea^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}} \quad (33.21)$$

kde ω_x je frekvence kmitů v rovině (x,y) a ω_z frekvence v rovině (z,y) . Výhyška na konci tyče je pak dána harmonickou (periodickou) funkcí

$$u_x(L, t) = \bar{u}_x \exp\left[-\frac{\mu}{8\rho} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 t\right] \sin\left[\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{Eb^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}}\right) t\right]. \quad (33.22)$$

Předpokládejme, že konec tyče $y=L$ je **vetknutý**, tzn., že vlnové délky kmitajících módů jsou $l_y = \frac{2L}{n}$, pro $n=1,2,3,\dots$ kde základní mód má vlnovou délku $2L$.

Odpovídající vlnový vektor je podle (33.20) rovna

$$\omega_x = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sqrt{\frac{Eb^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}}, \quad \omega_z = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sqrt{\frac{Ea^2}{12\rho} - \frac{\mu^2}{4\rho^2}} \quad (33.23)$$

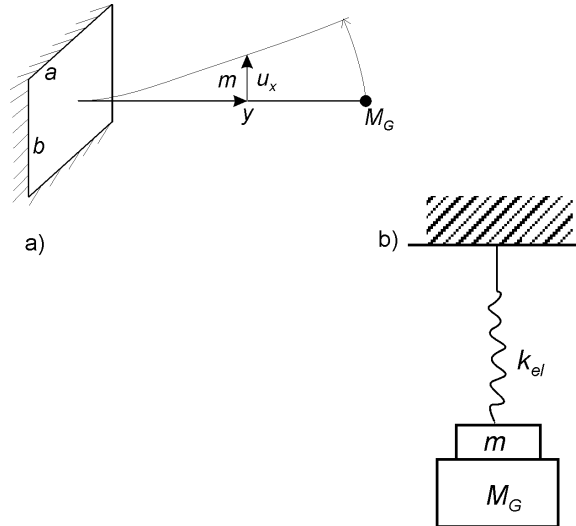
Ohybové kmity vetknuté tyče s přidanou hmotou.

Kmity tyče s přidanou hmotou budou opět harmonické, ale budou jiné frekvence. Dříve než přistoupíme k přidání dodatečné hmotnosti M_G nahradíme původní tyč, viz obr. 33.1, tlumeným harmonickým oscilátorem

$$m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} + k_{el} u = 0 \quad (33.24)$$

s hmotností

$$m = \int_{-\frac{b}{2}}^{\frac{b}{2}} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \int_0^L \rho dy dx dz = \rho abL. \quad (33.25)$$



obr. 33.2

- a) Ohybové kmity tyče s přidanou bodovou hmotou M_G
 b) Náhradní schéma tyče o hmotnosti m s přidanou hmotou

Řešení rovnice (33.24) hledáme ve tvaru $u(t) = \bar{u} \exp(-i\omega t)$. Elasticitou konstantu k_{el} této soustavy určíme z podmínky stejných frekvencí (33.21) a stejného tlumení ω_{im} , tedy

$$\omega_{r,ef}^2 = \omega_r^2, \omega_{im,ef} = \omega_{im}. \quad (33.26)$$

Po dosazení vztahů (33.20) dostáváme

$$\omega_{r,ef}^2 = \frac{k_{el}}{m} - \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2, \text{ pro } \frac{k_{el}}{m} = \left(\frac{2\pi}{4L}\right)^4 \frac{Eb^2}{12\rho} \text{ a } \omega_{im,ef} = -\frac{\gamma}{2m}, \text{ pro } \frac{\gamma}{m} = \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 \quad (33.27)$$

Takto vytvořená náhradní soustava kmitá na stejné frekvenci jako konec tyče (33.22).

Soustava s přidanou hmotou má stejnou elasticitou konstantu k_{el} jako původní soustava (33.24)

$$(m + M_G) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} + k_{el} u = 0. \quad (33.28)$$

Tuto rovnici normalizujeme

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k_{el}}{m + M_G} u = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\gamma}{m + M_G} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k_{el}}{m + M_G} u = 0, \quad (33.29)$$

a naměřená frekvence kmitů ω_{exp} tyče s přidanou hmotou a útlum těchto kmitů β má následující vztah k materiálovým vlastnostem původní tyče

$$\omega_{\text{exp}}^2 = \frac{k_{el}}{m + M_G} - \frac{\beta^2}{4} = \left(\frac{2\pi}{4L}\right)^4 \frac{Eb^2}{12\rho\left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} - \frac{\gamma^2}{4(m + M_G)^2},$$

$$\beta = \frac{\gamma}{m + M_G} = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 \frac{\mu}{\rho\left(1 + \frac{M_G}{m}\right)}$$

Poznámka 2: Vzhledem k Poznámce 1 platí pro kruhový průřez poloměru R vztah

$$\omega_{\text{exp}}^2 = \frac{k_{el}}{m + M_G} - \frac{\beta^2}{4} = \left(\frac{2\pi}{4L}\right)^4 \frac{ER^2}{4\rho\left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} - \frac{\gamma^2}{4(m + M_G)^2},$$

$$\beta = \frac{\gamma}{m + M_G} = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 \frac{\mu}{\rho\left(1 + \frac{M_G}{m}\right)}$$

Ze znalosti frekvence ω_{exp} , hmotnosti m, M_G a geometrických rozměrů tyče obdélníkového průřezu a, b , a délky L můžeme stanovit Youngův modul

$$E = 3\rho\left(\frac{2}{\pi}\right)^4 \left(\frac{L^2}{b}\right)^2 (4\omega_{\text{exp}}^2 + \beta^2) \left(1 + \frac{M_G}{m}\right)$$

a pro kruhovou tyč poloměru R platí

$$E = \rho\left(\frac{2L}{\pi}\right)^4 \left(\frac{2}{R}\right)^2 (4\omega_{\text{exp}}^2 + \beta^2) \left(1 + \frac{M_G}{m}\right).$$

Koeficient viskozity je roven

$$\frac{\mu}{\rho} = \left(\frac{2L}{\pi}\right)^2 \beta \left(1 + \frac{M_G}{m}\right).$$

Poznámka 3

Vzhledem k nezanedbatelné hmotnosti měřené tyče a konečnému geometrickému rozměru přidané hmotnosti je výsledný moment $L \times M_G$ působící na tyč, neznámý. Je proto nutné stanovit efektivní velikost bodové hmotnosti M_G na konci tyče testovacím experimentem.

Jako příklad použijeme testovací materiál „high density homopolymer“, který má známé materiálové vlastnosti; Youngův modul $E = 1070 - 1091 \pm 1080$ [MPa], hustotu $\rho = 960$ [kg m⁻³] a je prakticky nestlačitelný, tj. $\sigma = 0.5$. Modul pružnosti ve smyku je pro Hookův materiál roven $\hat{\mu} = \frac{E}{2(1 + \sigma)}$ [Pa], viz např.

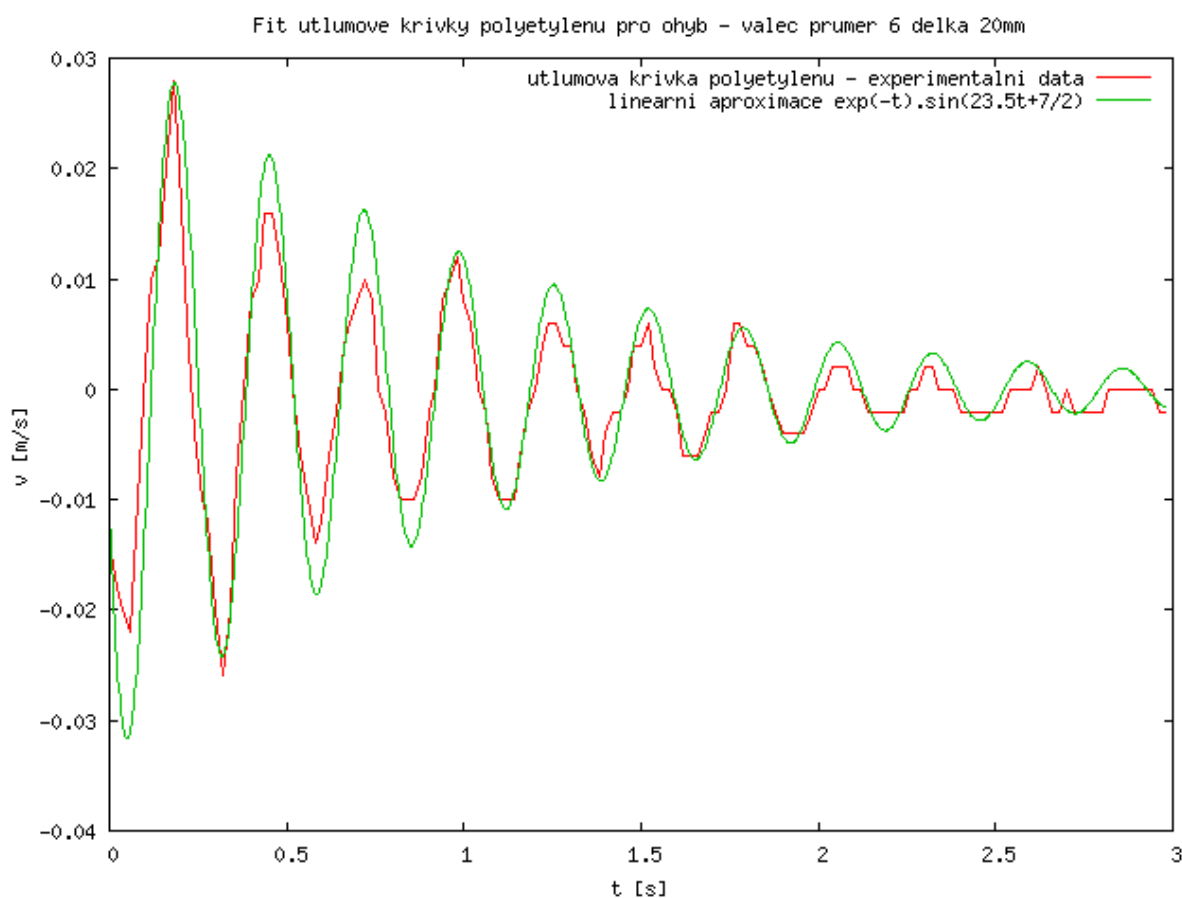
http://www.efunda.com/materials/polymers/properties/polymer_datasheet.cfm?MajorID=PE&MinorID=6. Ohýbaná délka tyče je $L = 16.8$ mm a její poloměr a hmotnost jsou postupně $R = 3$ mm a $m = \pi R^2 \rho L = \pi(3 \cdot 10^{-3})^2 960 \cdot 20 \cdot 10^{-3} = 0,000543$ kg.

Využijeme-li toho, že při měření je $\frac{M_G}{m} \gg 1$ a $\omega_{\text{exp}}^2 \gg \beta_{\text{exp}}^2$, lze pro tyčku kruhového průřezu psát

$$E = \left(\frac{4L}{\pi R} \right)^4 \frac{M_G \omega_{\text{exp}}^2}{\pi L} \text{ [Pa]}, \quad \mu = \left(\frac{2L}{\pi R} \right)^2 \frac{M_G \beta_{\text{exp}}}{\pi L} \text{ [Pa s]}. \quad (33.35)$$

Výhodou tohoto vztahu je, že již na hmotnosti měřené tyčky nezávisí. Materiálové konstanty závisí jen na geometrických rozměrech tyčky a přidané hmotnosti M_G .

Nalezneme přidanou hmotnost měřícího zařízení pomocí testovacího experimentu s polyetylénovou tyčkou, viz obr. 33.3



Obr. 33.3. Záznam rychlosti výchylky polyetylénové tyče kruhového průřezu poloměru $R = 3$ mm a ohýbané délky $L = 16.8$ mm.

Z naměřené frekvence $\omega_{\text{exp}} = 23.5[\text{s}^{-1}]$ a ze vztahu (33.35) stanovíme

$$M_G = \frac{\pi E L}{\omega_{\text{exp}}^2} \left(\frac{\pi R}{4L} \right)^4 = \frac{3.14 \cdot 1.08 \cdot 10^9 \cdot 1.68 \cdot 10^{-2}}{(23.5)^2} \left(\frac{3.14 \cdot 3 \cdot 10^{-3}}{4 \cdot 1.68 \cdot 10^{-2}} \right)^4 = 39.8 \text{ kg}$$

Tato hodnota neodpovídá skutečné přidané hmotnosti upnuté na konci testované tyče. Je to fiktivní bodová hmotnost na konci tyče vyvolávající stejný ohybový moment $L \times M_G$ jako skutečná hmotnost na konec tyče upnutá, viz obr. 33.2. Velikost přidané

fiktivní hmotnosti M_G je ovlivněna především geometrickým tvarem a způsobem uchycení upnuté hmotnosti. M_G je často až o dva řády větší než skutečně upnutá hmotnost.

Analogicky pro obdélníkový průřez $a \times b$ kde kmitání probíhá ve směru strany b platí

$$E = \frac{3bM_G}{4aL} \left(\frac{2L}{\pi b} \right)^4 \omega_{\text{exp}}^2 [\text{Pa}], \quad \mu = \frac{4LM_G \beta_{\text{exp}}}{\pi^2 ab} [\text{Pa s}]. \quad (33.36)$$

Poznámka 4

Formule (33.30) je jen přibližná a bez vlivu viskozity dává

$$\omega_{\text{exp}}^2 = \left(\frac{2\pi}{4} \right)^4 \frac{EI}{L^3(M_G + m)} \approx \frac{6EI}{L^3(M_G + m)}, \quad \text{pro } I = \frac{b^4}{12}, \quad E = \frac{2\omega^2 L^3 (M_G + m)}{b^4}, \quad (33.37)$$

V literatuře

http://perso.univ-rennes1.fr/lalaonirina.rakotomanana-ravelonarivo/Stokey_chapter7.pdf

je uvedena přibližná formule, ve tvaru

$$\omega_{\text{Stok}}^2 = \frac{3E_{\text{Stok}} I}{L^3(M_G + 0.23m)}, \quad \text{pro } I = \frac{b^4}{12}, \quad E_{\text{Stok}} = \frac{\omega_{\text{Stok}}^2 L^3 (M_G + 0.23m)}{b^4}, \quad (33.38)$$

Poměr mezi formullemi (33.38) a (33.37) je

$$\frac{E_{\text{Stok}}}{E} = 2 \frac{1 + 0.23 \frac{m}{M}}{1 + \frac{m}{M}} \Bigg|_{\frac{m}{M} \ll 1} \approx 2 \quad (33.39)$$

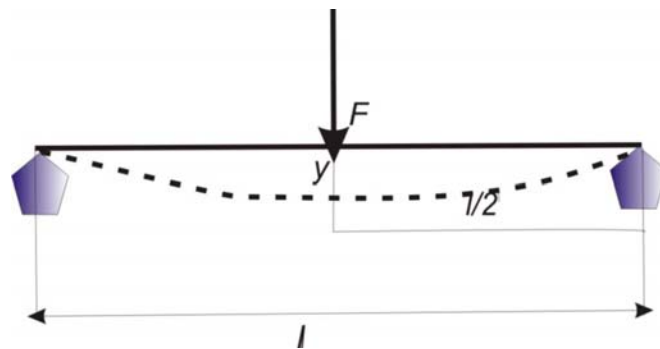
Poměr mezi měřením podle odvozené formule (33.37) a tabulkovými hodnotami je

$$\frac{E_{\text{tab}}}{E} = \frac{12800}{4814} = 2.65, \quad \text{podle uvedené literatury je } \frac{E_{\text{tab}}}{E_{\text{Stok}}} = 1.33 \quad (33.40)$$

Z toho plyne, že přibližné řešení (33.37) je dále od experimentu (od reality). Důvodem je předpoklad hmota m soustředěna na konci tyče a navíc není řešena přesně okrajová úloha. Tvar kmitu je jen odhadnut.

Literatura:

- [1] Maršík F. Termodynamika kontinua, Academia Praha, 1999
- [2] Brdička M. Mechanika kontinua, Nakladatelství Československé akademie věd, Praha, 1959
- [3] Landau L.D., Lišic E.M.: Teorija uprugosti, Izdatelstvo Nauka, Moskva 1963



Obr. 33.4 Průhyb kruhového nosníku o poloměru R zatíženého silou uprostřed. Předpoklad malých deformací, viz [3] §20.

$$y(l/2) = \frac{Fl^3}{48EI}, \text{ pro } I = \frac{\pi R^4}{4} \quad (33.41)$$

Příklad 34.

Využijte formulace z příkladu 33 a nalezněte podélné kmity tyče z viskoelastického materiálu délky L , obecného průřezu $A(y)$, hustoty ρ , která je na konci zatížena dodatečnou hmotou M_G , viz obr. 34.2.

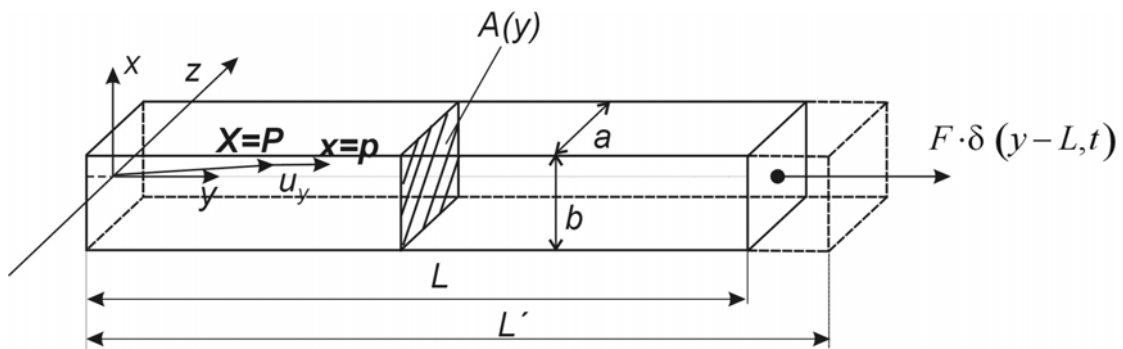
Řešení 34:

Podélné kmity homogenní tyče

Vyřešíme nejprve podélné kmitání bez dodatečné hmoty. Tento problém je formálně nejjednodušším problémem šíření vln tyčí, viz obr. 34.1. V tomto případě má tenzor napětí tvar

$$t^{ij} = -3K\alpha(T - T_o)\delta^{ij} + Ke_{(1)}\delta^{ij} + 2\hat{\mu}e^{(o)ij} + 2\mu d^{(o)ij} \quad (34.1)$$

viz. příklad 33.



Obr. 34.1

Generace podélné vlny v tyči okamžitou silou $F \cdot \delta(y-L, t)$. Materiálový bod P se z polohy X posouvá do polohy x . Kolem polohy X osciluje.

Výchylka všech materiálových bodů tyče $u_y(y, t)$ je pouze ve směru osy y . Relativní prodloužení je popsáno diagonální složkou tenzoru deformace

$$e_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{L' - L}{L} \quad (34.2)$$

a stejně tak i tenzor napětí má pouze složku v tomto směru

$$\begin{aligned} t_{yy} &= Ke_{(1)}\delta^{yy} + 2\hat{\mu}\left(e_{yy} - \frac{2}{3}e_{(1)}\delta^{yy}\right) + 2\hat{\mu}\dot{e}_{yy} = \\ &= \left(K - \frac{2}{3}\hat{\mu}\right)e_{(1)}\delta^{yy} + 2\hat{\mu}e_{yy} + 2\mu\dot{e}_{yy}. \end{aligned} \quad (34.3)$$

Vzhledem k definici tenzoru malých deformací (33.6) platí

$$e_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad e_{(1)} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}. \quad (34.4)$$

Zavedením Poissonova čísla

$$\sigma = -\frac{e_{xx}}{e_{yy}} = -\frac{e_{zz}}{e_{yy}} \quad (34.5)$$

můžeme tenzor napětí (34.3) a (33.7) psát ve tvaru

$$\begin{aligned}
t_{yy} &= \left(K - \frac{2}{3} \hat{\mu} \right) (1 - 2\sigma) e_{yy} + 2\hat{\mu} e_{yy} + 2\mu \frac{\partial}{\partial t} e_{yy} = \\
&= \left[K(1 - 2\sigma) + \frac{4}{3} \hat{\mu}(1 + \sigma) \right] e_{yy} = E e_{yy} + \frac{4}{3} \hat{\mu}(1 + 4\sigma) \frac{\partial e_{yy}}{\partial t}
\end{aligned} \tag{34.6}$$

Porovnáním koeficientů u odpovídajících složek tenzoru deformace, dostáváme relaci mezi Youngovým modulem E a modulem ve smyku $\hat{\mu}$ a Poissonovým číslem σ

$$E = \frac{4}{3} \hat{\mu}(1 + \sigma) + K(1 - 2\sigma), \quad \sigma = \frac{(3K - 2\hat{\mu})E}{18\hat{\mu}K}, \quad \hat{\mu} = \frac{E}{2(1 + \sigma)} \tag{34.7}$$

Pohybová rovnice (33.11) určující šíření podélných vln má s ohledem na tenzor napětí (34.6) tvar

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} - \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} - \frac{\mu}{3\rho} (1 + 4\sigma) \frac{\partial^3 u_y}{\partial t \partial y^2} = 0. \tag{34.8}$$

Řešení této lineární rovnice budeme hledat ve tvaru harmonické vlny

$$u_y = \overline{u}_y e^{i(k_y y - \omega t)} \tag{34.9}$$

s amplitudou \overline{u}_y , vlnovým vektorem $k_y = \frac{2\pi}{l_y}$ a úhlovou frekvencí ω . Dosazením

(34.9) do rovnice (34.8), dostáváme disperzní rovnici pro podélné vlny (tzv. lateral flexi)

$$-\omega^2 + \frac{E}{\rho} k_y^2 - i \frac{\mu}{3\rho} (1 + 4\sigma) \omega k_y^2 = 0 \tag{34.10}$$

O vlnovém čísle k_y a frekvenci ω musíme předpokládat, že jsou obecně komplexní čísla. Rovnici (34.10) budeme řešit za předpokladu, že frekvence

$$\omega = \omega_r + i\omega_{im} \tag{34.11}$$

je komplexní číslo a ukážeme, že disperzní rovnice (34.10) má nenulové řešení i v případě, že vlnový vektor má pouze reálnou hodnotu. Disperzní rovnice (34.10) potom přechází na dvě algebraické rovnice

$$-\omega_r^2 + \omega_{im}^2 + \left(\frac{E}{\rho} + \tilde{\nu} \omega_{im} \right) k_y^2 = 0, \quad \text{pro } \tilde{\nu} = \frac{\mu}{3\rho} (1 + 4\sigma) \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right] \tag{34.12}$$

$$\omega_{im} = -\frac{\tilde{\nu} k_y^2}{2}$$

pro neznámé ω_r, ω_{im} . Po úpravě dostáváme závislost frekvence

$$\omega_r = k_y \sqrt{\frac{E}{\rho} \left(1 - \frac{\tilde{\nu}^2 \rho}{4E} k_y^2 \right)^{1/2}}, \quad \omega_{im} = -\frac{\tilde{\nu} k_y^2}{2} \tag{34.13}$$

jen na vlnovém vektoru k_y . Budeme vyšetřovat kmitání tyče na volném konci, tj. ve vzdálenosti L . Tyto kmity odpovídají módům o vlnové délce

$$l_y = \frac{4L}{2n - 1}, \quad \text{kde } n = 1, 2, \dots \tag{34.14}$$

Základní mód podélné vlny má vlnovou délku $l_y = 4L$, viz obr. 34.1. Průběh kmitání v čase získáme dosazením do vztahu (34.9), tedy

$$u_y(y, t) = \overline{u}_y e^{-\frac{\tilde{\nu} k_y^2}{2} t} \exp \left\{ i k_y \left[y - \sqrt{\frac{E}{\rho} \left(1 - \frac{\tilde{\nu}^2 \rho}{4E} k_y^2 \right)} t \right] \right\}. \tag{34.15}$$

Hledáme řešení s kmitnou na konci tyče, tj. pro $k_y = \frac{\pi}{2L}$. (Okrajová podmínka (33.12) z příkladu 33.) Konečný tvar základního módu podélné vlny je

$$u_y(y, t) = \overline{u}_y e^{-\left[\frac{\mu(1+4\sigma)\pi^2}{12\rho L^2} t\right]} \sin \left\{ \frac{\pi}{2L} \left\{ y - \sqrt{\frac{E}{\rho}} \left[1 - \frac{1}{E} \left(\frac{\pi\mu(1+4\sigma)}{6L} \right)^2 \right]^{1/2} t \right\} \right\}. \quad (34.16)$$

Odtud je patrné, že dekrement útlumu oscilací je

$$\frac{\mu(1+4\sigma)\pi^2}{12\rho L^2} \quad (34.17)$$

a fázová rychlost postupné vlny je

$$c = \frac{\omega_r}{k_y} = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \left[1 - \frac{1}{E} \left(\frac{\pi\mu(1+4\sigma)}{6L} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (34.18)$$

Vzhledem k tomu, člen pod odmocninou je zanedbatelný vůči jedné, je rychlost podélné vlny prakticky rovna $c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$.

Podélné kmity tyče s přidanou hmotou na konci

Budeme hledat změnu frekvence podélných kmitů tyče, která má na konci přidanou bodovou hmotu M_G , viz obr. 34.2. Původní elastickou tyč nahradíme bodovou hmotou m na pružině s elasticitou k_{el} a tlumením γ , viz obr. 34.b. Předpokládejme, že náhradní soustava samotné elastické tyče je

$$m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} + k_{el} u = 0. \quad (34.19)$$

Hmotnost tyče známe a je dána vztahem

$$m = \int_0^L \rho A(y) dy, \quad (34.20)$$

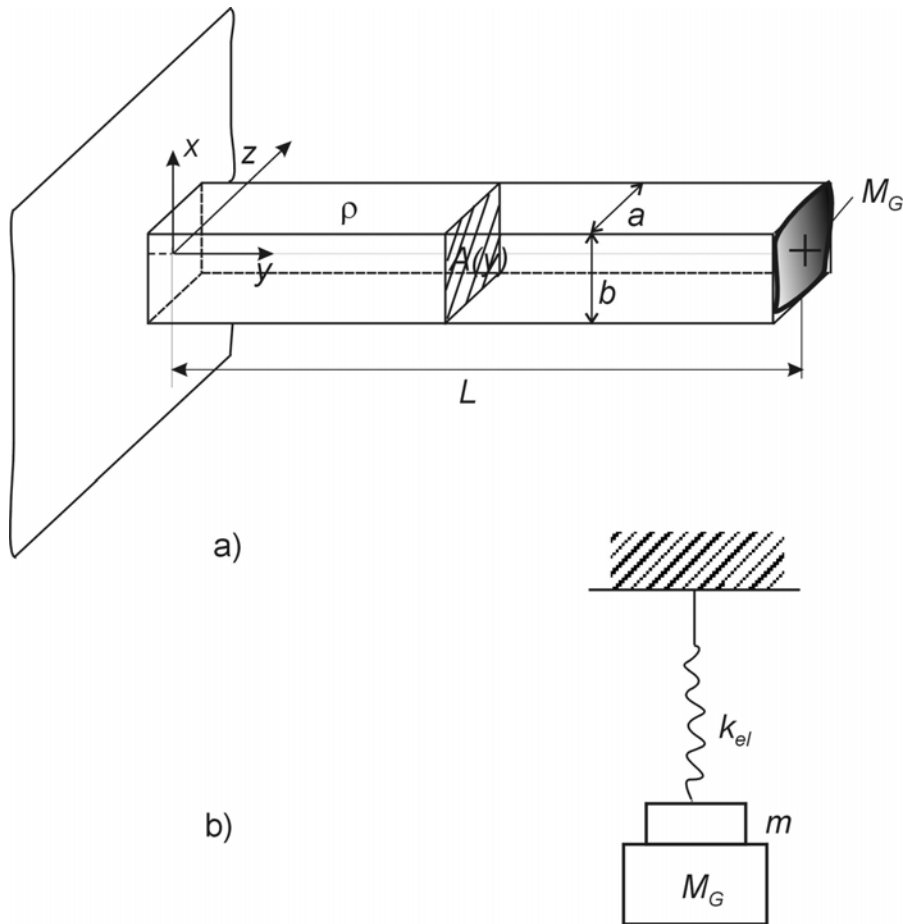
kde $A(y)$ je průřez tyče (např. kruhový s poloměrem R , tj. $A = \pi R^2$) a L je její délka. Neznámé hodnoty γ a k_{el} náhradní soustavy (34.19) stanovíme tak, aby tato soustava měla stejnou frekvenci a útlum kmitů jako konec tyče (34.16).

Soustava s přidanou hmotou je popsána stejnou pohybovou rovnicí

$$(m + M_G) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} + k_{el} u = 0 \quad (34.21)$$

jako samotná elastická tyč (34.19), jen kmitající hmotnost je zvětšena o přidanou hmotnost M_G . Předpokládáme, že elasticita tyče k_{el} a útlumu γ jsou stejné jako v případě samotné elastické tyče (34.19). Její kmity budeme opět hledat ve tvaru $e^{-i\omega t}$, tj.

$$-\omega^2 (m + M_G) - i\omega\gamma + k_{el} = 0. \quad (34.22)$$



Obr. 34.2

a) Elastická tyč o průřezu $A(y) = l(y)w(y)$ zatížená dodatečnou hmotou M_G .

Celková hmotnost tyče je $m = \int_0^L \rho A(y) dy$.

b) Náhradní schéma tyče s dodatečnou hmotou M_G . Elasticita je nahrazena parametrem k_{el} .

Za předpokladu, že $\omega = \omega_r + i\omega_{im}$, dostáváme dvě algebraické rovnice

$$\begin{aligned} (-\omega_r^2 + \omega_{im}^2)(m + M_G) - \omega_{im}\gamma + k_{el} &= 0 \\ i\omega_r[\gamma + 2\omega_{im}(m + M_G)] &= 0 \end{aligned} \quad (34.23)$$

pro reálnou a imaginární část frekvence platí

$$\omega_r^2 = \frac{k_{el}}{m\left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} - \frac{\gamma^2}{4(M_G + m)^2}, \quad \omega_{im} = -\frac{\gamma}{2(m + M_G)}. \quad (34.24)$$

Zde jsou γ a k_{el} parametry náhradní soustavy(34.19), které jsme určily z podmínky, že náhradní soustava kmitá stejně jako výchylka konce elastické tyče (34.16).

Předpokládejme že frekvence je komplexní $\omega = \omega_r + \omega_{im}$ a pro konec tyče $y = L$ je výchylka dána vztahem

$$u(L, t) = \overline{u}_y \exp(-i\omega t) = \overline{u}_y e^{\omega_{im} t} e^{-i\omega_r t} = \overline{u}_y e^{-\frac{\tilde{v}}{8} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 t} e^{\frac{i\pi}{2} t} \exp\left[-\frac{i\pi}{2L} \sqrt{\frac{E}{\rho} \left(1 - \frac{\rho}{E} \left(\frac{\pi \tilde{v}}{4L}\right)^2\right)}\right] t, \text{ pro } \tilde{v} = \frac{\mu}{3\rho} (1 + 4\sigma) \quad (34.25)$$

Fázový posuv výchylky $e^{\frac{i\pi}{2} t}$ zahrneme do amplitudy poruchy \overline{u}_y a pro útlum výchylky a pro frekvenci konce tyče dostáváme

$$\omega_{im} = -\frac{\tilde{v}}{8} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2, \quad \omega_r = \frac{\pi}{2L} \sqrt{\frac{E}{\rho} \left(1 - \frac{\rho}{E} \left(\frac{\pi \tilde{v}}{4L}\right)^2\right)}. \quad (34.26)$$

Vlastní kmity a tlumení náhradní soustavy (34.19) je

$$\omega_{r,ef}^2 = \frac{k_{el}}{m} - \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2, \quad \text{pro } \frac{k_{el}}{m} = \omega_{r,ef}^2 + \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2 \text{ a } \omega_{im,ef} = -\frac{\gamma}{2m}. \quad (34.27)$$

Z podmínky stejné frekvence a útlumu náhradní soustavy (34.19) a tyče (34.26) dostáváme hledanou relaci mezi měřenou frekvencí a útlumem a materiálovými parametry zkoumané tyče E, μ . Tudíž

$$\frac{\gamma}{2m} = \frac{\tilde{v}}{8} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2, \quad \frac{k_{el}}{m} = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 \frac{E}{\rho}. \quad (34.28)$$

Tyto vztahy budou pro stanovení materiálových parametrů tyče rozhodující.

Soustava s přidanou hmotou (34.21) musí mít stejné tlumení γ a stejnou elastickou konstantu k_{el} jako náhradní soustava (34.19). Frekvence a útlum naměřených podélných vln soustavy s přidanou hmotou (34.24), označíme $\omega_{r,exp}$ a $\omega_{im,exp} = -\beta/2$, souvisí s materiálovými parametry E, μ samotné tyče (34.8) vztahem

$$\omega_{r,exp}^2 = \frac{k_{el}}{m + M_G} - \frac{\beta^2}{4} = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 \frac{E}{\rho \left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} - \frac{\beta^2}{4}, \quad \omega_{im,exp} = -\frac{\gamma}{2(m + M_G)} \quad (34.29)$$

$$\frac{\beta}{2} = \frac{\gamma}{2m \left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{\tilde{v}}{8 \left(1 + \frac{M_G}{m}\right)} = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{\mu(1 + 4\sigma)}{24\rho \left(1 + \frac{M_G}{m}\right)}$$

Nyní již snadno nalezneme explicitní závislost mezi naměřenými hodnotami $\omega_{r,exp}$ a β a parametry E, μ

$$E = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \rho \left(4\omega_{r,exp}^2 + \beta^2\right) \left(1 + \frac{M_G}{m}\right) \text{ [Pa]}, \quad \mu = \frac{12\rho L^2 \beta}{\pi^2 (1 + 4\sigma)} \left(1 + \frac{M_G}{m}\right) \text{ [Pa s]} \quad (34.30)$$

Využití vztahů (34.30) ukážeme na příkladu meziobratlové ploténky o průřezu $A = 3 \cdot 10^{-2} \times 4 \cdot 10^{-2} = 12 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$ a délky $L = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. S ohledem na její hustotu $\rho = 1,2 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ je hmotnost ploténky $m = \rho AL = 0,0086 \text{ kg}$. Mezi dodatečné hmotnosti M_G zahrneme hmotnosti dvou obratlů stejného průřezu a délky 30 mm,

jejichž hmotnost odhadneme na 2×30 g. Hmotnost testovacího závaží je 0,839 kg, takže celková dodatečná hmotnost je $M_G = 0,90$ kg. Naměřená frekvence podélných kmitů (laterální flexe) byla $\omega_{r,\text{exp}} = 200 \left[\frac{1}{\text{s}} \right]$ a velikost koeficientů tlumení $\beta = 0,8 \text{ s}^{-1}$

Ke stanovení Youngova modulu a viskozity meziobratlové ploténky použijeme vztah (34.30). Dostáváme tak pro Youngův modul hodnotu

$$E = \left(\frac{6 \cdot 10^{-3}}{3,14} \right)^2 1,2 \cdot 10^3 (4\omega_{r,\text{exp}}^2 + \beta^2) \left(1 + \frac{0,9}{0,00866} \right) = \quad (34.31)$$

$$0,460 (4\omega_{r,\text{exp}}^2 + \beta^2) \Big|_{\omega_{r,\text{exp}}=200}^{\beta=0,8} = 73,6 \cdot 10^3 \text{ Pa}$$

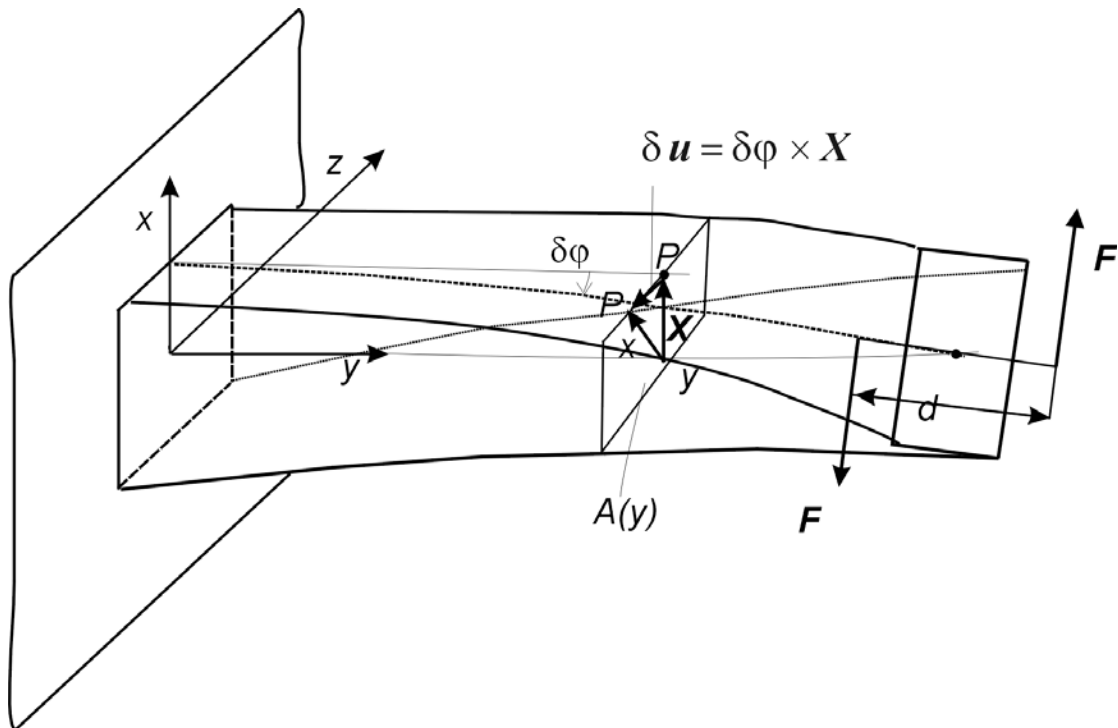
a pro viskozitu hodnotu

$$\mu = \frac{12 \cdot 1,2 \cdot 10^3 \cdot 6^2 \cdot 10^{-6} \cdot \beta}{(3,14)^2 (1 + 4 \cdot 0,5)} (1 + 104) = 1,84 \beta \Big|_{\beta=0,8} = 1,47 \text{ Pa s} \quad (34.32)$$

Předpokládali jsme, že materiál chrupavky je nestlačitelný, tj. $\sigma = 0,5$.

Příklad 35:

Tyč o průřezu $A(y)$ je na svém konci namáhána momentem dvojice sil $\mathbf{M} = \mathbf{d} \times \mathbf{F}$, viz obr. 35.1. Odvoďte vztahy pro výpočet deformace tyče za předpokladu, že je namáhána momentem sil $\mathbf{M} = (0, M_y, 0)$ a zkrucovaná pouze ve směru osy y s konstantním úhlem natočení $\tau = \frac{d\varphi}{dy}$. Objem tyče $V = A \times L$ a její povrch ∂V se deformuje.



Obr. 35.1

Deformace vetknuté tyče průřezu A silovou dvojicí $\mathbf{M} = \mathbf{d} \times \mathbf{F}$.

Řešení: Je-li průřez tyče A po délce konstantní, pak můžeme předpokládat, že i úhel krutu $\tau = \frac{d\varphi}{dy}$ je konstantní. Posunutí libovolného materiálového bodu P z počáteční polohy \mathbf{X} do konečné polohy \mathbf{x} bude lineární funkcí τ . S ohledem na to, že natočení kolem osy y je vektor $\delta\varphi = (0, \delta\varphi, 0)$, který směřuje v kladném směru této osy, lze posunutí materiálového bodu P vyjádřit vektorovým součinem, viz obr. 35.1

$$\delta\mathbf{u} = \delta\varphi \times \mathbf{X}; \quad \delta u^i = \varepsilon^{iyk} \tau \delta y X^k. \quad (35.1)$$

Z formálních důvodů označíme počáteční polohu materiálového bodu P $\mathbf{X} = \mathbf{x}$. Posunutí tohoto bodu při krutu, rozepsáno ve složkách, je rovno

$$u_x(y, z) = \tau yz, \quad u_z(x, y) = -\tau yx, \quad u_y(x, z) = \tau \psi(x, z) \quad (35.2)$$

Výchylka ve směru y je vyjádřena pomocí zatím neznámé funkce $\psi(x, z)$, která popisuje zborcení průřezu v průběhu krutu. Tuto funkci nazýváme torzní funkcí a nalezneme ji řešením rovnice rovnováhy [1,2,3], viz dále. Tensor deformace (33.6) je s ohledem na posunutí (35.2) popsán vztahy

$$\begin{aligned} e_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad e_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{\tau}{2} \left(z + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\ e_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0, \quad e_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) = \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} - x \right) \\ e_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \quad e_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) = 0 \end{aligned} \quad (35.3)$$

Všechny tři diagonální složky tenzoru deformace jsou nulové, takže při krutu

nedochází ke změně objemu a deviator deformace e^{ij} je roven tenzoru deformace e^{ij} . Předpokládejme, že tyč je z termoviskoelastického materiálu (viz vztah (33.1) v příkladu 33)), jehož tenzor napětí je

$$t^{ij} = -3K\alpha(T - T_0)\delta^{ij} + 2\hat{\mu}e^{ij} + 2\mu d^{ij}. \quad (35.4)$$

Jde nám o případ statické rovnováhy, takže můžeme zanedbat teplotní roztažnost ($\alpha = 0$) a viskozitu ($\mu = 0$). Jediné nenulové složky tenzoru napětí jsou

$$t_{yx} = t_{xy} = \hat{\mu}\tau \left(z + \frac{\partial \psi(x, z)}{\partial x} \right), \quad t_{yz} = t_{zy} = \hat{\mu}\tau \left(\frac{\partial \psi(x, z)}{\partial z} - x \right). \quad (35.5)$$

Ostatní složky tenzoru jsou nulové

$$t_{xx} = t_{yy} = t_{zz} = t_{xz} = 0. \quad (35.6)$$

Poznamenáváme, že v důsledku symetrie tenzoru deformace je i tenzor napětí symetrický. Rovnice bilance hybnosti (33.11) má pro případ statické rovnováhy jednoduchý tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial t^{ij}}{\partial x^j} &= 0, \quad \text{pro } i, j = 1, 2, 3, \\ \frac{\partial t_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial t_{yz}}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial t_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial t_{yz}}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial t_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial t_{zz}}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (35.7)$$

Vzhledem k tomu, že na pravé straně těchto rovnic nevystupují žádné vnější objemové síly (setrvačnost jsme zanedbali), redukuje se rovnováha povrchových sil na jedinou rovnici

$$\frac{\partial t_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{yz}}{\partial z} = 0. \quad (35.8)$$

Tyč je namáhána na krut silovou dvojicí, viz obr. 35.1. Dosazením z (35.5) přechází rovnice rovnováhy sil na Laplaceovu rovnici pro torzní funkci

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0. \quad (35.9)$$

Pro funkci $\psi(x, z)$ je obtížné formulovat okrajové podmínky, proto na povrchu tyče zavedeme pomocnou funkci $\chi = \chi(x, z)$ tak, abychom mohli převést integraci přes plochu A na integraci po obvodu této plochy ∂A , viz obr. 35.2. Složky tenzoru napětí (35.5) vyjádříme formou gradientu funkce $\chi(x, z)$, tj.

$$\begin{aligned} t_{yx} &= -2\hat{\mu}\tau \frac{\partial \chi}{\partial z}, \text{ tj. } 2 \frac{\partial \chi}{\partial z} = -\frac{\partial \psi}{\partial x} - z \\ t_{yz} &= +2\hat{\mu}\tau \frac{\partial \chi}{\partial x}, \text{ tj. } 2 \frac{\partial \chi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial z} - x. \end{aligned} \quad (35.10)$$

Rovnice rovnováhy sil (35.8) je zavedením této funkce splněna identicky¹⁾

$$-2\hat{\mu}\tau \frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial z} + 2\hat{\mu}\tau \frac{\partial^2 \chi}{\partial z \partial x} = 0, \quad x, z \in A \quad (35.11)$$

Derivaci první rovnice v (35.10) podle z a druhé podle x a jejich následným součtem dostáváme Poissonovu rovnici

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = -1, \quad x, z \in A \quad (35.12)$$

Pro funkci $\chi(x, z)$ máme díky rovnici rovnováhy (35.8) popř. (35.11) okrajovou podmínku. Integrací přes objem tyče $V = A \times L$ a použitím Gaussovy věty dojdeme k podmínce

$$\int_{\mathcal{V}=A \times L} \left(\frac{\partial t_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{yz}}{\partial z} \right) dx dy dz = \int_{\partial \mathcal{V}} (t_{yx} da_x + t_{yz} da_z) = 0. \quad (35.13)$$

Orientované elementy plochy $\mathbf{da} = (da_x, da_y, da_z)$ jsou definovány vnější normálou $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ a platí

$$da_x = n_x dy dz, \quad da_y = n_y dz dx, \quad da_z = n_z dx dy. \quad (35.14)$$

Dosazením (35.10) do povrchového integrálu (35.13) dostáváme

$$\begin{aligned} 2\hat{\mu}\tau \int_{\partial V} \left(-\frac{\partial \chi}{\partial z} n_x dy dz + \frac{\partial \chi}{\partial x} n_z dx dy \right) &= \\ = 2\hat{\mu}\tau \int_{\Delta y_x \times \partial A} \left(-\frac{\partial \chi}{\partial z} n_x dz + \frac{\partial \chi}{\partial x} n_z dx \right) dy &= 0 \end{aligned} \quad (35.15)$$

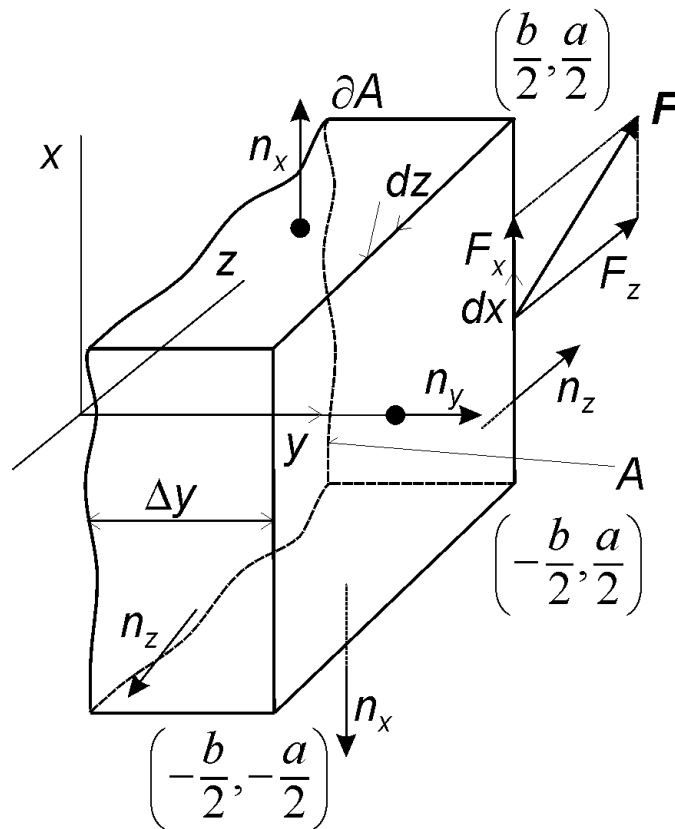
Vzhledem k tomu, že úsek tyče Δy může být libovolný, přechází původní lokální podmínka rovnováhy (35.8) na integrální podmínku

1) Tento postup je identický při zavádění proudové funkce $\chi(x, z)$ v mechanice nestlačitelných tekutin, kde je pak bilance hmotnosti splněna identicky

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \text{ pro } v_x = -\frac{\partial \chi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{\partial \chi}{\partial x}.$$

$$\int_{\partial A} -\frac{\partial \chi}{\partial z} n_x dz + \frac{\partial \chi}{\partial x} n_z dx = \int_{\partial A} \frac{\partial \chi}{\partial z} dz + \frac{\partial \chi}{\partial x} dx = \oint_{\partial A} d\chi = 0, \text{ pak } d\chi = 0, \chi = \text{konst pro } x, z \in \partial V \quad (35.16)$$

V druhém integrálu jsme orientaci plochy definovaly vnější normálou, tak jak je to obvyklé při těchto integrálních identitách. Tudíž, v našem případě $n_x = (1, 0, 0)$ odpovídá integraci v záporném (tj. opačném) směru osy z a $n_z = (1, 0, 0)$ odpovídá integraci v kladném směru osy x . Integrace podle křivky ∂A probíhá v kladném smyslu (viz obr. 35.2, plocha je na levé straně křivky).



Obr. 35.2

K přechodu od integrace po ploše A na integraci po jejím obvodu ∂A . Normála plochy A směřuje ve směru osy y a element této plochy je $da_y = dz dx$. Velikost plochy $A = ab$. Obvod plochy $\partial A = \{x = -b/2, -a/2 \leq z \leq a/2\} \cup \{z = a/2, -b/2 \leq x \leq b/2\} \cup \{x = b/2, a/2 \geq z \geq -a/2\} \cup \{z = -a/2, -b/2 \geq x \geq -b/2\}$.

Z druhé integrální podmínky (35.16) vyplynulo, že pomocná funkce $\chi = \chi(x, z)$ je podél hranice průřezu tyče konstantní. Tuto konstantu můžeme volit rovnou nule, tj.

$$\chi(x, z) = 0 \text{ pro } (x, z) \in \partial V \quad (35.17)$$

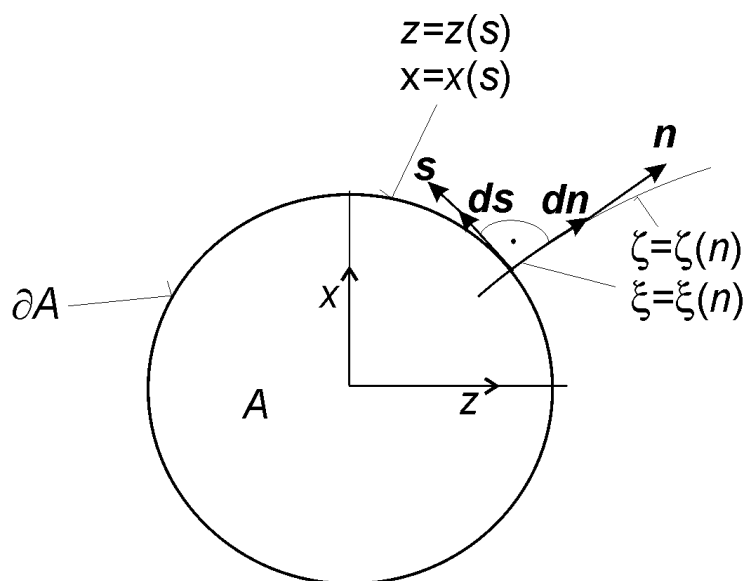
Derivace této funkce však mohou být nenulové. Podmínku kompatibility deformace (nedojde ke vzniku trhlinky) pro posunutí $u_y = \tau \psi(x, z)$, formulujeme integrálním vztahem

$$\oint_{\partial A} du_y = \tau \oint_{\partial A} d\psi = \oint_{\partial A} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\partial \psi}{\partial z} dz = -2\tau \oint_{\partial A} \frac{\partial \chi}{\partial z} dx - \frac{\partial \chi}{\partial x} dz - \tau \oint_{\partial A} dx - x dz = 0. \quad (35.18)$$

Odtud dostáváme podmínku pro derivaci funkce $\chi = \chi(x, z)$ podél křivky ∂A ohraničující průřez tyče

$$2 \oint_{\partial A} \frac{\partial \chi}{\partial z} dx - \frac{\partial \chi}{\partial x} dz = - \oint_{\partial A} z dx - x dz. \quad (35.19)$$

Oba tyto křivkové integrály můžeme upravit, viz dále.



Obr. 35.3

K integraci po křivce ∂A ohraničující plochu A . $\mathbf{s} = \left(\frac{dz}{ds}, \frac{dx}{ds} \right)$ je tečný vektor k hranici

∂A průřezu A a $\mathbf{n} = \left(\frac{d\zeta}{dn}, \frac{d\xi}{dn} \right)$ je vektor kolmý.

Předpokládejme, že v rovině (z, x) je rovnice obvodové křivky ∂A dána funkcemi $z = z(s), x = x(s)$, kde s je délkový parametr. Tečný vektor a vektor normály jsou postupně

$$\mathbf{s} = \left(\frac{dz}{ds}, \frac{dx}{ds} \right), \quad \mathbf{n} = \left(\frac{d\zeta}{dn}, \frac{d\xi}{dn} \right). \quad (35.20)$$

Normála je popsána funkcemi $\zeta = \zeta(n), \xi = \xi(n)$, kde n je její délkový parametr.

Tečný vektor \mathbf{s} je kolmý k vektoru \mathbf{n} , čili je otočen o úhel $\frac{\pi}{2}$ ve smyslu $(z \rightarrow x)$, viz lit. [1], viz obr. 35.3. Tuto transformaci můžeme zapsat maticově

$$\begin{pmatrix} \frac{dz}{ds} \\ \frac{dx}{ds} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{2}, & \sin \frac{\pi}{2} \\ -\sin \frac{\pi}{2}, & \cos \frac{\pi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{d\zeta}{dn} \\ \frac{d\xi}{dn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, & 1 \\ -1, & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{d\zeta}{dn} \\ \frac{d\xi}{dn} \end{pmatrix}, \quad (35.21)$$

což dává konečný vztah

$$dz = \frac{d\xi}{dn} ds, \quad dx = -\frac{d\zeta}{dn} ds. \quad (35.22)$$

Použitím této transformace lze první integrál (35.19) upravit následovně

$$2\oint \frac{\partial \chi}{\partial z} dx - \frac{\partial \chi}{\partial x} dz = -2\oint \left(\frac{\partial \chi}{\partial z} \frac{\partial \zeta}{\partial n} \Big|_{z=\zeta} + \frac{\partial \chi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial n} \Big|_{x=\xi} \right) ds = -2\oint \frac{\partial \chi}{\partial n} ds. \quad (35.23)$$

Druhý křivkový integrál převedeme pomocí Stokesovy věty, viz [1] vztah (A.54), na integraci po ploše²⁾ A

$$-\oint_{\partial A} z dx - x dz = -\oint_A \left(\frac{\partial z}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial x} \right) dz dx = -2\oint_A dz dx = -2A. \quad (35.24)$$

Konečný tvar podmínky kompatibility krutu (35.19) je pak identita

$$\oint_{\partial A} \frac{\partial \chi}{\partial n} ds = A \quad (35.25)$$

Porovnáme-li podmínku rovnováhy sil kroutícího momentu (35.17) s podmínkou kompatibility (35.25), dospějeme k hledaným okrajovým podmínkám pomocné funkce $\chi = \chi(x, z)$

$$\chi(x, z) = 0, \quad \frac{\partial \chi}{\partial n} \neq 0 \text{ pro } x, z \in \partial A \quad (35.26)$$

Variační formulace statické rovnováhy krutu tyče.

Podmínku statické rovnováhy při krutu tyče, viz obr. 35.1, lze formulovat pomocí variačního principu, viz [1] kap. 9.4. Vzhledem k tomu, že při krutu tyče neuvažujeme disipativní procesy, lze jako funkcionál použít jak vnitřní energii, tak i volnou energii. Obě tyto energie jsou pro toto zjednodušení rovny deformační energii [1], viz. vztah (8.58), popř. (9.92). Volná energie celé tyče je

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \frac{1}{2} \int_V t_{el}^{ij} e_{ij} dv = \frac{1}{2} \int_{A \times L} (t_{xy} e_{xy} + t_{yz} e_{yz}) da_y dy = \\ &= \frac{1}{2\hat{\mu}} \int_{A \times L} \left[(t_{xy})^2 + (t_{yz})^2 \right] dz dx dy = 2\hat{\mu} \int_{A \times L} \tau^2 \left[\left(\frac{\partial \chi}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)^2 \right] dz dx dy \end{aligned} \quad (35.27)$$

K úpravě posledního integrálu jsme využili pomocnou funkci $\chi(x, z)$ ze vztahu (35.10). Celková deformační energie je rovna volné energii (35.27).

2) Obecná Stokesova věta dává do relace integraci po hranici ∂A s integrací po ploše A

$$\oint_{\partial A} F_x dx + F_y dy + F_z dz = \int_A \left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \right) dy dz + \left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \right) dz dx + \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) dx dy$$

Integrace po křivce ∂A probíhá v tom smyslu, při kterém je integrovaná plocha po levé straně (tzv. indukovaná orientace).

Definujeme, tzv. tuhost tyče v krutu

$$C = 4\hat{\mu} \int_A \left[\left(\frac{\partial \chi}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)^2 \right] da_y, \quad da_y = dzdx. \quad (35.28)$$

Zavedením úhlu krutu $\tau = \frac{d\varphi}{dy}$ lze celkovou volnou energii (35.27) psát ve tvaru

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int_L C \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 dy \quad (35.29)$$

Plošný integrál pro výpočet tuhosti tyče (35.28) lze s ohledem na okrajové podmínky (35.26) upravit pomocí následující matematické identity. Označme na okamžik

$\nabla \chi \equiv \left(\frac{\partial \chi}{\partial z}, \frac{\partial \chi}{\partial x} \right)$, pak

$$\left(\frac{\partial \chi}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)^2 = (\nabla \chi)^2 = \nabla(\chi \nabla \chi) - \chi \nabla^2(\chi) = \nabla(\chi \nabla \chi) + \chi \quad (35.30)$$

kde $\nabla^2 = \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = -1$, viz (35.12). Užitím této úpravy přejde vztah pro výpočet tuhosti tyče v krutu (35.28) na tvar

$$C = 4\hat{\mu} \int_A \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial \chi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) \right] da_y + 4\hat{\mu} \int_A \chi da_y. \quad (35.31)$$

První plošný integrál lze upravit použitím Stokesovy věty²⁾; pro

$F_z = -\chi \frac{\partial \chi}{\partial x}$, $F_x = \chi \frac{\partial \chi}{\partial z}$ pak dostaneme křivkový integrál

$$4\hat{\mu} \int_{\partial A} \chi \frac{\partial \chi}{\partial z} dx - \chi \frac{\partial \chi}{\partial x} dz = 4\hat{\mu} \int_{\partial A} \chi \frac{\partial \chi}{\partial n} ds. \quad (35.32)$$

Při úpravě tohoto integrálu jsme použili stejný postup jako při úpravě (35.23). Vzhledem k okrajové podmínce (35.26) na hranici průřezu A je $\chi = 0$, je integrál (35.32) roven nule. Tuhost tyče je pak určena plošným integrálem z pomocné funkce $\chi(x, z)$, která splňuje na hranici ∂A podmínku $\chi(x, z) = 0$

$$C = 4\hat{\mu} \int_A \chi dzdx. \quad (35.33)$$

Výpočtu tuhosti tyče pro kruhový a obdélníkový průřez je věnován příklad 36.

Rovnováha momentů na vetknuté tyči.

Zbývá nalézt souvislost mezi úhlem krutu $\tau = \frac{d\varphi}{dy}$ a velikostí momentu sil

$M = d \times F$, viz obr. 35.1. Deformační energie (35.27), popř. (35.29) je vyvolána energií dodanou momentem sil. Předpokládejme, že moment sil generuje nějakou potenciální energii ϕ tak, že její změna je

$$\delta\phi = -M \delta\varphi(y = L), \quad (35.34)$$

tj. je úměrná úhlu natočení $\delta\varphi(y = L)$ na konci tyče. Rovnováha tyče pak nastane při minimu celkové energie

$$\delta(\mathcal{F} + \phi) = 0. \quad (35.35)$$

V tomto případě je energie momentu sil kompenzována energií deformace

$$\begin{aligned}
& \delta \int_L \frac{C}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 dy + \delta \phi = \int_L C \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \frac{d \delta \varphi}{dy} dy - M \delta \varphi (y = L) \\
& - \int_L C \frac{d \tau}{dy} \delta \varphi dy + C \tau \delta \varphi \Big|_0^L - M \delta \varphi (y = L) = \quad (35.36) \\
& - \int_L C \frac{d \tau}{dy} \delta \varphi dy + (C \tau - M) \delta \varphi (y = L) = 0
\end{aligned}$$

Minimum tohoto funkcionálu nastane za podmínek

$$\int_L C \frac{d \tau}{dy} \delta \varphi dy = 0, \text{ tj. } \frac{d \tau}{dy} = 0, \tau = \frac{d \varphi}{dy} = \text{konst}, \quad (35.37)$$

čili moment vnějších sil je dán vztahem

$$M = \tau C. \quad (35.38)$$

Úhel krutu tyče o konstantním průřezu A je konstantní a nezávisí na y . Jeho velikost je úměrná velikosti momentu vnějších sil M a nepřímo úměrná tuhosti tyče C .

Příklad 36

Nalezněte tuhost v krutu C a funkci krutu (někdy nazývaná funkce zborcení při krutu) $\psi(x, z)$ při torzi tyče kruhového, elipsoidního, obdélníkového a trojúhelníkového průřezu. Tuhost v krutu je definována integrálem (35.33) v příkladu 35 pomocí pomocné funkce $\chi(x, z)$

$$C = 4\hat{\mu} \int_A \chi dz dx, \text{ přičemž } \chi(x, z) = 0 \text{ na hranici pro } x, z \in \partial A \quad (36.1)$$

$$\text{a } \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = -1 \text{ uvnitř průřezu pro } x, z \in A \quad (36.2)$$

Funkce zborcení $\psi(x, z)$ je definována vztahy (35.10) v příkladu 35

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -2 \frac{\partial \chi}{\partial z} - z, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 2 \frac{\partial \chi}{\partial x} + x, \text{ pro } x, z \in A \quad (36.3)$$

a musí vyhovovat Laplaceově rovnici

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0 \text{ pro } x, z \in A \quad (36.4)$$

Řešení:

Východiskem je pomocná funkce $\chi(x, z)$, která je nulová na hranici průřezu a uvnitř průřezu splňuje Poissonovu rovnici (35.12). Tuto funkci budeme hledat tak, aby definovala hranici průřezu a konstantu K určíme tak, aby splňovala rovnici (36.2):

a) **kruhový průřez**, viz obr. 36a

$$K\chi(x, z) = R^2 - x^2 - z^2, \quad (36.5)$$

$$K \frac{\partial \chi}{\partial x} = -2x, \quad K \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = -2, \quad K \frac{\partial \chi}{\partial z} = -2z, \quad K \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = -2.$$

Pro $K=4$ splňuje funkce χ rovnici (36.2), takže

$$2\chi(x, z) = \frac{1}{2}(R^2 - x^2 - z^2). \quad (36.6)$$

Stanovíme funkci zborcení podle vztahů (36.3)

$$-\frac{\partial \psi}{\partial x} = 2 \frac{\partial \chi}{\partial z} + z = -z + z = 0,$$

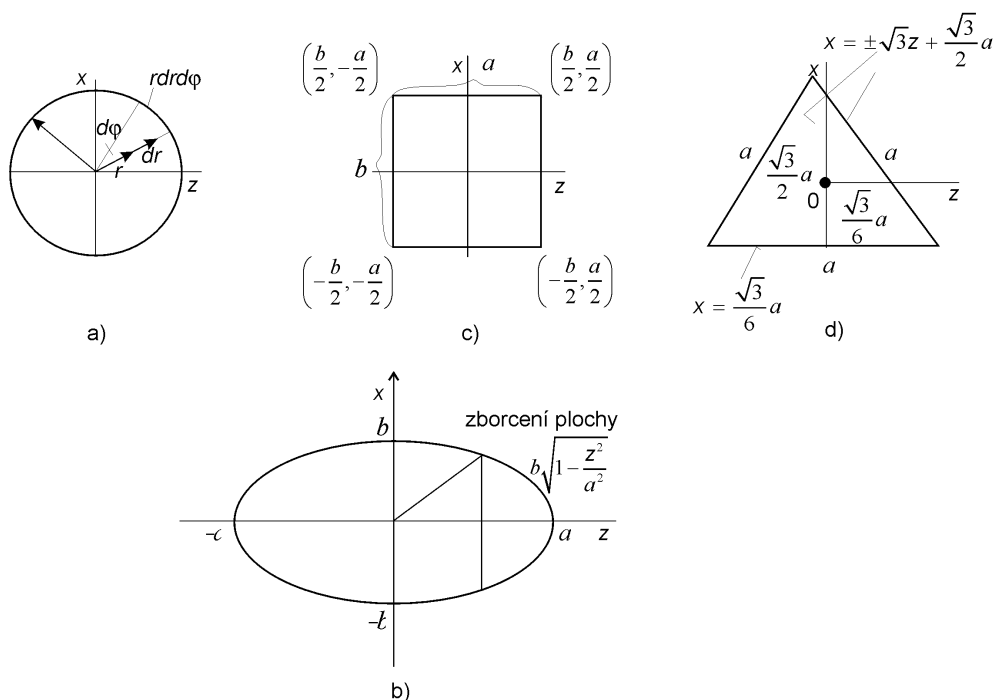
$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = 2 \frac{\partial \chi}{\partial x} + x = -x + x = 0.$$

Funkce zborcení je identicky rovna nule, tj. $\psi(x, z) = 0$ a tudíž při krutu kruhové tyče nedochází k výchylce ve směru u_y , viz vztah (35.2).

Tuhost kruhové tyče nalezneme dosazením (36.6) do integrálu (36.1)

$$C = \hat{\mu} \int_A (R^2 - x^2 - z^2) dx dz = \hat{\mu} \int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\varphi - \hat{\mu} \int_0^{2\pi} \int_0^R r^3 dr d\varphi = \hat{\mu} \frac{\pi R^4}{2}. \quad (36.7)$$

Integrál jsme řešili přechodem k polárním souřadnicím r, φ , $x = r \sin \varphi$, $z = r \cos \varphi$.



obr. 36

Průřezy A tyče namáhané v krutu

a) kruhový, b) elipsoidový, c) obdélníkový, d) rovnostranný trojúhelník

b) *Pro eliptický průřez*, viz obr. 36b

$$K \chi(x, z) = a^2 b^2 - b^2 x^2 - a^2 z^2 \quad (36.8)$$

Konstantu K nalezneme dosazením do rovnice (36.2)

$$K \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} \right) = -2(a^2 + b^2), \quad K = 2(a^2 + b^2)$$

a hledaná pomocná funkce je

$$2\chi(x, z) = \frac{a^2 b^2 - b^2 x^2 - a^2 z^2}{a^2 + b^2}. \quad (36.9)$$

Funkce zborcení je podle (36.3) dána řešením parciálních diferenciálních rovnic

$$-\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{2a^2 z}{a^2 + b^2} + z, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = -\frac{2b^2 x}{a^2 + b^2} + x. \quad (36.10)$$

Integrací, např. první rovnice dostáváme hledanou funkci

$$\psi(x, z) = \frac{b^2 - a^2}{a^2 + b^2} xz, \quad (36.11)$$

kteřá splňuje podmínku (36.4). Odtud je zřejmé, že při krutu tyče eliptického průřezu dochází ke zborcení plochy krutu

$$u_y(x, z) = \frac{M}{C} \left(\frac{b^2 - a^2}{a^2 + b^2} \right) xz. \quad (36.12)$$

K největšímu zborcení dochází na úhlopříčce os a je tím větší čím je rozdíl os větší.

Tuhost tyče eliptického průřezu je s ohledem na tvar pomocné funkce (36.9) rovna

$$C = 4\hat{\mu} \int_A \frac{(a^2b^2 - b^2x^2 - a^2z^2)}{2(a^2 + b^2)} dx dz = \frac{2\hat{\mu}a^2b^2}{a^2 + b^2} \int_A dx dz - \frac{2\hat{\mu}b^2}{a^2 + b^2} \int_A x^2 dx dz - \frac{2\hat{\mu}a^2}{a^2 + b^2} \int_A z^2 dx dz. \quad (36.13)$$

Integrál vede na plochu elipsy

$$\int_A dx dz \int_{-a}^a \left[\int_{-b\sqrt{1-\frac{z^2}{a^2}}}^{+b\sqrt{1-\frac{z^2}{a^2}}} dx \right] dz = 2b \int_{-a}^a \sqrt{1-\frac{z^2}{a^2}} dz = 2b \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1-\sin^2 \varphi} d\varphi = 2ab \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \varphi d\varphi = \pi ab. \quad (36.14)$$

Při úpravě jsme použili substituce $z = a \sin \varphi$.

Druhý integrál v (36.13) je moment setrvačnosti k ose z

$$I_z = \int_A x^2 dx dz = \int_{-a}^a dz \int_{-b\sqrt{1-\frac{z^2}{a^2}}}^{+b\sqrt{1-\frac{z^2}{a^2}}} x^2 dx = \frac{2b^3}{3} \int_{-a}^a \left(1-\frac{z^2}{a^2}\right)^{3/2} dz = \frac{2ab^3}{3} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^4 \varphi d\varphi = \frac{\pi b^3 a}{4}. \quad (36.15)$$

Tento integrál jsme opět upravili pomocí substituce $z = a \sin \varphi$. Podobně nalezneme i moment setrvačnosti k ose x

$$I_x = \int_A z^2 dx dz = \int_{-b}^b dx \int_{-a\sqrt{1-\frac{x^2}{b^2}}}^{+a\sqrt{1-\frac{x^2}{b^2}}} z^2 dz = \frac{\pi ab^3}{4}. \quad (36.16)$$

Dosazením integrálu, (36.14), (36.15) a (36.16) do výrazu pro tuhost tyče (36.13) dostáváme konečný tvar

$$C = \frac{2\hat{\mu}}{a^2 + b^2} \left[\pi a^3 b^3 - \frac{\pi a^3 b^3}{4} - \frac{\pi a^3 b^3}{4} \right] = \frac{\hat{\mu} \pi a^3 b^3}{a^2 + b^2}. \quad (36.17)$$

c) **Pro obdélníkový průřez** obr. 36c budeme hledat pomocnou funkci ve tvaru

$$\chi = \left(\frac{b^2}{2} - x^2\right) \left(\frac{a^2}{2} - z^2\right) = \frac{a^2 b^2}{4} - \frac{a^2 x^2}{2} - \frac{b^2 z^2}{2} + x^2 z^2 \quad (36.18)$$

Tato funkce však nesplňuje podmínku (36.2), neboť

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = -(a^2 + b^2) + 2(x^2 + z^2) \neq -1 \quad (36.19)$$

Proto je třeba hledat funkci $f(x, z)$

$$\frac{\partial^2(f\chi)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(f\chi)}{\partial z^2} = \Delta(f\chi) = \chi\Delta f + 2(\nabla f \nabla \chi) + f\Delta\chi = -1 \quad (36.20)$$

Nalezení vhodného tvaru funkce $f(x, z)$ je dosud otevřeným problémem.

d) **Pro trojúhelníkový průřez**, obr. 36d

Pomocnou funkci $\chi(x, z)$ hledáme ve tvaru

$$\begin{aligned} K(\chi, x, z) &= \left(\frac{\sqrt{3}}{6} + x\right) \left(\frac{\sqrt{3}}{3}a - \sqrt{3}z - x\right) \left(\frac{\sqrt{3}}{3}a + \sqrt{3}z - x\right) = \\ &= \frac{a^3}{6\sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{2}ax^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}az^2 - 3xz^2 + x^3. \end{aligned} \quad (36.21)$$

Podmínka (36.2) má tvar

$$K\left(\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial z^2}\right) = -K\sqrt{3}a = -1, \quad K = \frac{1}{\sqrt{3}a}. \quad (36.22)$$

a konečný tvar pomocné funkce je

$$2\chi = \frac{1}{\sqrt{3}a} \left(\frac{a^3}{6\sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{2}ax^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}az^2 - 3xz^2 + x^3 \right). \quad (36.23)$$

Funkce zborcení, která je definovaná rovnicemi (36.3) má po integraci konečný tvar

$$\psi(x, z) = \frac{z}{\sqrt{3}a} (3x^2 - z^2). \quad (36.24)$$

a vyhovuje podmínce (36.4).

Zborcení plochy při krutu je podle vztahů (35.2) a (35.38) rovno

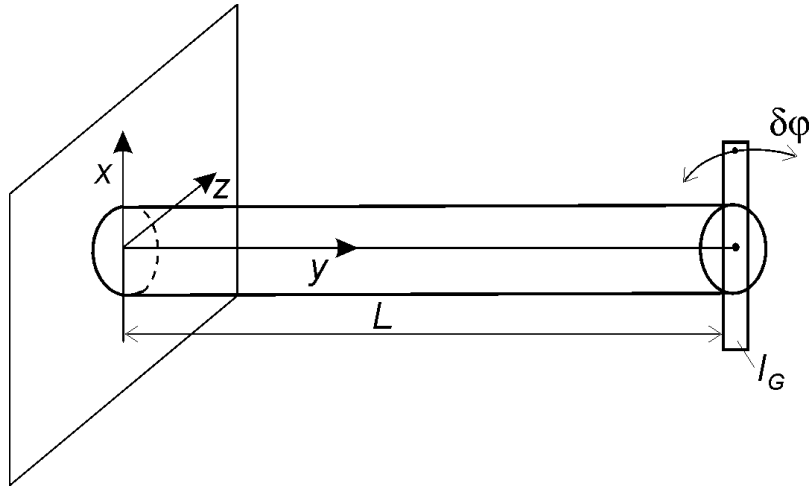
$$u_y(x, z) = \tau\psi(x, z) = \frac{Mz}{\sqrt{3}Ca} (3x^2 - z^2). \quad (36.25)$$

Je nulové v rozích trojúhelníka a maximální ve středu stran. Tuhost trojúhelníkové tyče je dána integrálem

$$C = \frac{2\hat{u}}{\sqrt{3}a} \int \left(\frac{a^3}{6\sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{2}ax^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}az^2 - 3xz^2 + x^3 \right) dx dz = \frac{\sqrt{3}}{80} \hat{u}a^4.$$

Příklad 37

Nalezněte frekvenci a útlum torzních kmitů vetknuté tyče kruhového, eliptického a trojúhelníkového průřezu z viskoelastického materiálu, např. meziobratlové polénky [3]. Určete jak se změní vlastní frekvence torzních kmitů přidáním tělesa s momentem



setrvačnosti I_G na konec tyče, viz obr. 37.1.

Obr. 37.1

Kmitání torzní tyče s dodatečnou hmotou na jejím konci.

Řešení:

Vyjdeme z obecného namáhání tyče jak na ohyb, tak na krut podél osy y , viz obr. 37.2. Ohyb tyče podél její podélné osy y vyjádříme vektorem ohybu

$$\Omega \left(= \frac{\Delta \mathbf{u}' - \Delta \mathbf{u}}{\Delta s} \right) = \frac{d\mathbf{u}}{ds} = \left(\frac{du_x}{ds}, \frac{du_y}{ds}, \frac{du_z}{ds} \right) \quad (37.1)$$

Zavedeme tečný vektor $\mathbf{s} = \left(\frac{d\eta_x}{ds}, \frac{d\eta_y}{ds}, \frac{d\eta_z}{ds} \right)$ k ose tyče $\boldsymbol{\eta} = (\eta_x(s), \eta_y(s), \eta_z(s))$.

Při malých ohybech je složka $\eta_y(s)$ zanedbatelná vůči složkám $\eta_x(s)$ a $\eta_z(s)$.

Snadno nahlédneme, že derivace¹⁾ $\frac{ds}{ds}$ tečného vektoru \mathbf{s} je vektor k němu kolmý a navíc platí geometrický vztah

$$\frac{ds}{ds} = \frac{\mathbf{n}}{R}, \quad \frac{d\eta_x}{ds^2} = \frac{1}{R_z}, \quad \frac{d^2\eta_y}{ds^2} = \frac{1}{R_x} \quad (37.2)$$

kde R_z, R_x jsou křivosti v odpovídajících rovinách (x, y) a (z, y) . Použitím vektoru normály \mathbf{n} a vektoru tečného \mathbf{s} (oba vektory jsou jednotkové) lze deformaci tyče

Předpokládejme, že tečný vektor normovaný k jedné, tj. $(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}) = 1$. Potom jeho derivace je kolmý vektor \mathbf{n}

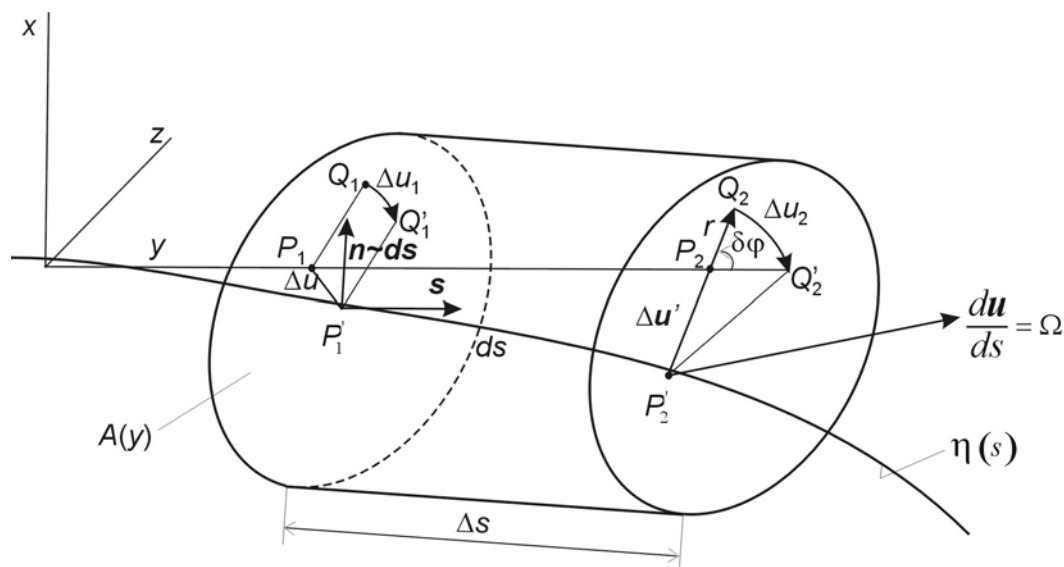
$$\frac{d(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s})}{ds} = 2\mathbf{s} \frac{ds}{ds} = 0, \quad \text{tj.} \quad \frac{ds}{ds} \sim \mathbf{n}$$

rozdělit na čistý ohyb Ω_x v rovině (y, z) , Ω_z v rovině (x, y) a čistý krut Ω_y v rovině (z, x) . Platí, viz obr. 37.2, že vektorový součin posunutí du a tečného vektoru s k ohybové křivce je vektor

$$ds = du \times s, \quad \frac{ds}{ds} = \frac{du}{ds} \times s \quad (37.3)$$

který je kolmý k ohybové křivce. Ohybová křivka splývá pro malé deformace s osou y . Vzhledem k definicím vektoru ohybu (37.1) a vektoru normály (37.2) dostáváme

$$\frac{n}{R} = \Omega \times s, \quad \text{resp. } s \times \frac{n}{R} = s \times (\Omega \times s) = (s \cdot s)\Omega - (\Omega \cdot s)s \quad (37.4)$$



obr. 37.2

Obecná deformace tyče vyjádřená vektorem vychýlení $\Omega = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$, Ω_x - ohyb v rovině (y, z) , Ω_y - krut podél osy y , Ω_z - ohyb v rovině (x, y) . Původní poloha materiálových bodů P_1, Q_1 a P_2, Q_2 ve dvou různých místech tyče se deformací změnila na polohu P'_1, Q'_1 a P'_2, Q'_2 .

Poslední vztah upravíme, protože $(s \cdot s) = 1$ a $(\Omega \cdot s)$ je průmět vektoru ohybu do podélné osy tyče, takže lze vektor ohybu tyče rozložit

$$\Omega = \frac{s \times n}{R} + \Omega_y s = (\Omega_x, 0, \Omega_z) + (0, \Omega_y, 0) \quad (37.5)$$

na část čistě ohybovou o složkách Ω_x, Ω_z a část čistě torzní Ω_y . Uvážíme-li, že s, n jsou kolmé jednotkové vektory, je velikost jejich součinu rovna jedné. Potom komponenty vektoru ohybu jsou

$$\Omega = \left(\frac{1}{R_z}, \tau, \frac{1}{R_x} \right) \quad (37.6)$$

kde R_z je poloměr křivosti v rovině (z,y) , viz příklad 31, vztah (31.21), a R_x v rovině (x,y) . $\tau = \frac{d\varphi}{ds}$ je úhel krutu v rovině (x,z) , viz příklad 35.

Z rovnováhy momentů sil působící na tyč, viz příklad 31 a příklad 35, jsme našli relaci mezi velikostí deformace (37.6) (poměry křivosti a úhlu krutu) a zatěžujícím momentem vnějších sil

$$M_x = \frac{EI_x}{R_z}, \quad M_z = \frac{EI_z}{R_x}, \quad M_y = C\tau \quad (37.7)$$

kde

$$I_x = \int_{A(y)} z^2 dx dz, \quad I_z = \int_{A(y)} x^2 dx dz, \quad C = 4\hat{\mu} \int_{A(y)} \chi dx dz$$

jsou I_x, I_z postupně momenty setrvačnosti plochy $A(y)$ vůči ose x, y a C je tuhost plochy $A(y)$ v krutu ve směru osy y . Statická rovnováha vetknuté tyče je řešena vztahy (37.7).

Naším cílem je nalézt vztahy pro dynamickou rovnováhu tyčí zatížených přídatnou hmotou. Stejně jako v případě příčných kmitů vetknuté tyče, viz příklad 32, vyjdeme z hustoty deformační energie tyče namáhané ohybem a tahem

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} t_{el}^{ij} e_{ij} &= \frac{1}{2} t^{yy} e^{yy} + t^{xy} e^{xy} + t^{yz} e^{yz} = \\ &= \frac{Ex^2}{2} \left(\frac{d^2 \eta_x}{ds^2} \right)^2 + \frac{Ez^2}{2} \left(\frac{d^2 \eta_z}{ds^2} \right)^2 + \frac{C}{2} \left(\frac{d\varphi}{ds} \right)^2 \end{aligned} \quad (37.8)$$

Druhá derivace osy tyče $\boldsymbol{\eta} = (\eta_x(s), \eta_z(s))$ odpovídá druhým derivacím výchylky osy

$\boldsymbol{u} = (u_x(y), u_z(y))$ a úhel krutu ve vzdálenosti y od vetknutí je $\frac{d\varphi}{dy}$, tudíž

$$\frac{d^2 \eta_x}{ds^2} \approx \frac{d^2 u_x}{dy^2} = \frac{1}{R_z}, \quad \frac{d\varphi}{ds} \approx \frac{d\varphi}{dy} = \tau, \quad \frac{d^2 \eta_z}{ds^2} \approx \frac{d^2 u_z}{dy^2} = \frac{1}{R_x} \quad (37.9)$$

Celková deformační energie tyče o průřezu A a délky L je dána integrálem

$$W = \int_{A \times L} \frac{1}{2} t_{el}^{ij} e_{ij} dy = \frac{1}{2} \int_{A \times L} \left\{ \left[Ex^2 \left(\frac{d^2 u_x}{dy^2} \right)^2 + Ez^2 \left(\frac{d^2 u_z}{dy^2} \right)^2 \right] dx dz + C\tau^2 \right\} dy \quad (37.10)$$

K popisu dynamiky kmitající tyče využijeme variační princip mechaniky elastických těles [1], viz příklad 32, vztah 32.1

$$S(u^i(x^j, t)) = \int_{t_0}^{t_1} \int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial t} \right)^2 - \frac{t_{el}^{ij} e_{ij}}{2} - \rho\phi \right] dx dy dz dt \quad (37.11)$$

Tlumené kmity torzní tyče.

Budeme studovat torzní kmitání z viskoelastického materiálu. Tensor napětí takového materiálu je uveden v příkladu 33, viz vztah (33.1). Při deformaci takového materiálu se část mechanické energie přeměňuje na teplo, dochází k disipaci mechanické energie. Tuto ztrátu zahrneme do funkcionálu (37.11) do členu

$$\rho\dot{\phi} = f_{dis}u_{\varphi} = \mu \frac{\partial^2 v_{\varphi}}{\partial y^2} u_{\varphi} \quad \left[\frac{J}{m^3} \right]. \quad (37.12)$$

Omezíme se jen na vyšetřování torzních kmitů. Funkcionál (37.11) lze s ohledem na (37.10), (37.11) a (35.27) až (35.29) psát ve tvaru

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \int_{A(y)}^L \left[\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial r\dot{\varphi}}{\partial t} \right)^2 - \mu \frac{\partial^2 (r\dot{\varphi})}{\partial y^2} r\dot{\varphi} \right] dx dz dy - \int_0^L \frac{C}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right\} dt \quad (37.13)$$

kde výchylka $u_{\varphi} = r\dot{\varphi}$ je výchylky v řezu $A(y)$ v rovině (x,z) , tj. pootočení o úhel φ kolem osy y a $r = \sqrt{x^2 + z^2}$ je vzdálenost od osy otáčení, viz obr. 37.2. Hledáme extrém (minimum) funkcionálu (37.13) vzhledem k úhlu natočení $\varphi(y,t)$. Nutnou podmínku extrému nalezneme pomocí jeho variace

$$\begin{aligned} \delta S(\varphi(y,t)) &= \frac{\delta}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - C \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 - \mu \int_0^{2\pi R} \frac{\partial^2 (r\dot{\varphi}_0)}{\partial y^2} r\dot{\varphi} r dr d\vartheta \right] dy dt = \\ &= \frac{\delta}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \mu I \frac{\partial^2 \dot{\varphi}_0}{\partial y^2} \varphi - C \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] dy dt = 0 \end{aligned} \quad (37.14)$$

kde $I = I_x + I_z$ je celkový moment setrvačnosti plochy. Indexem „0“ jsme označili veličinu kterou ponecháme při variaci konstantní. Vzhledem k tomuto předpokladu je variace funkcionálu rovna

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{\partial (\delta\varphi)}{\partial t} - \mu I \frac{\partial^2 \dot{\varphi}_0}{\partial y^2} \delta\varphi - C \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial (\delta\varphi)}{\partial y} \right] dy dt = \\ &\int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \delta\varphi \right) - \left(\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \mu I \frac{\partial^2 \dot{\varphi}_0}{\partial y^2} \right) \delta\varphi - C \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \delta\varphi \right) + C \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \delta\varphi \right] dy dt = \\ &= \int_0^L \rho I \frac{\partial \varphi}{\partial t} \delta\varphi \Big|_{t_0}^{t_1} dy - C \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \delta\varphi \Big|_{y=0}^{y=L} dt - \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \mu I \frac{\partial^2 \dot{\varphi}_0}{\partial y^2} - C \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right] \delta\varphi dy dt = 0 \end{aligned} \quad (37.15)$$

Variace výchylky v čase t_0 a t_1 je nulová- vypadne 1. člen v poslední rovnosti. V místě vetknutí tyče je

$$\delta\varphi \Big|_{y=0} = 0, \quad (37.16)$$

a na volném konci můžeme předpokládat

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{y=L} = 0. \quad (37.17)$$

Podmínka dynamické rovnováhy (37.15) je zajištěna diferenciální rovnicí

$$\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \mu I \frac{\partial^3 \varphi}{\partial t \partial y^2} + C \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}, \quad \text{pro } \varphi = \varphi_0 \quad y \in (0, L) \quad (37.18)$$

Tato rovnice popisuje tlumené torzní kmity tyče.

Předpoklad $\varphi = \varphi_0$ representuje tzv. rozšířený variační počet [4], [5] a matematicky znamená, že variace (fluktuaace kolem hledaného řešení) jsou velmi malé a hodnota φ_0 je již přesným řešením. V obecném případě velkých odchylek od

rovnovážné polohy (vizkózní tlumení je velké) je nutno řešit tento typ úloh iteračním postupem.

Řešení této rovnice hledáme ve tvaru harmonické vlny

$$\varphi(y, t) = \bar{\varphi} e^{i(k_y y - \omega t)} \quad (37.19)$$

pro komplexní $\omega = \omega_r + i\omega_{im}$. Po dosazení do podmínky dynamické rovnováhy (37.18) dostáváme disperzní rovnici torzních kmitů

$$\begin{aligned} (-\omega_r^2 + \omega_{im}^2) \rho I + i\omega_{im} \mu I k_y^2 + C k_y^2 &= 0, \\ -2i\omega_r (\omega_{im} \rho I + \mu I k_y^2) &= 0 \end{aligned} \quad (37.20)$$

Reálná část ω_r popisuje vlastní frekvenci kmitů a imaginární část frekvence ω_{im} popisuje tlumení. Řešením algebraických rovnic (37.20) dostáváme

$$\omega_r = k_y \sqrt{\frac{C}{\rho I} - \frac{\mu^2 k_y^2}{4\rho^2}} \quad (37.21)$$

a

$$\omega_{im} = -\frac{\mu}{2\rho} k_y^2. \quad (37.22)$$

Jako v příkladu 32 bude vlnový vektor kmitů s jedním volným koncem $k_y = \frac{2\pi}{4L}$ a frekvence základního torzního kmitu bude

$$\omega_r = \frac{\pi}{2L} \sqrt{\frac{C}{\rho I} - \left(\frac{\pi\mu}{4\rho L}\right)^2}, \quad \omega_{im} = -\frac{\pi^2 \mu}{8L^2 \rho} \quad (37.23)$$

Tlumená oscilace natočení na konci tyče v základní frekvenci (37.23) je popsána funkcí

$$\varphi(L, t) = \bar{\varphi} \exp(\omega_{im} t) \sin(\omega_r t). \quad (37.24)$$

Oscilaci plné tyče o průměru $2R$ a délky L můžeme nahradit oscilací hmotného kotouče (popř. bodové hmoty) na pružném vlákně o pružnosti k_t o stejné vlastní frekvenci, viz obr. 37.3.

Podmínka extrémů (37.18) platí v každém bodě tyče. Jestliže v experimentu sledujeme kmitání celé tyče délky L má podmínka extrémů tvar

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^L \left[\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \mu I \frac{\partial^2 \dot{\varphi}_0}{\partial y^2} - C \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right] \delta \varphi dy dt = \\ \int_{t_0}^{t_1} \exp(-i2\omega t) \left(-\rho I \omega^2 + i\mu I \omega k_y^2 - C k_y^2 \right) \int_0^L \exp(i2k_y y) \Big|_{k_y = \frac{\pi}{2L}} dy \delta \bar{\varphi} dt = 0 \end{aligned} \quad (37.25)$$

Předpokládali jsme řešení ve tvaru (37.19) takže jeho variace je

$$\delta \varphi(y, t) = e^{i(k_y y - \omega t)} \delta \bar{\varphi}. \quad (37.26)$$

Po provedení integrace

$$\int_0^L \exp(2i \frac{\pi y}{2L}) dy = -\frac{iL}{\pi} \int_0^{i\pi} e^z dz = -\frac{iL}{\pi} (e^{i\pi} - e^0) = \frac{2iL}{\pi} \quad (37.27)$$

má podmínka extrémů torzních kmitů celé tyče tvar

$$\begin{aligned} (-\omega_r^2 + \omega_{im}^2) \frac{2L\rho I}{\pi} + \omega_{im} \frac{2L\mu I}{\pi} k_y^2 + \frac{2L}{\pi} Ck_y^2 &= 0, \\ -2i\omega_r \left(\omega_{im} \frac{2L\rho I}{\pi} - \frac{2L\mu I}{\pi} k_y^2 \right) &= 0. \end{aligned} \quad (37.28)$$

Resonanční frekvence i tlumení jsou stejné jako v případě elementu tyče, tj. (37.23), různý je však moment setrvačnosti a koeficient tlumení, které mají nyní postupně hodnoty

$$\frac{2L\rho I}{\pi}, \quad \frac{2L\mu I}{\pi} k_y^2 = \frac{\pi\mu I}{2L}. \quad (37.29)$$

Tyto hodnoty využijeme pro stanovení materiálových parametrů $\hat{\mu}$, μ kmitající tyče zatížené dodatečným momentem setrvačnosti.

Torzni kmitý s přidaným momentem setrvačnosti

Kmitání torní tyče, viz obr. 37.1, jako tělesa je obecně popsáno parciální diferenciální rovnicí (37.18). Těleso nahradíme hmotným bodem na pružině, viz obr. 37.3, který kmitá stejnou vlastní frekvencí a se stejným útlumem jako konec tyče (37.24). Abychom našli tuto náhradní soustav vyjdeme z Lagrangiánu takové soustavy, viz. obr.37.3

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\varphi, \dot{\varphi}, \dot{\varphi}_0, t) dt, \quad \text{pro } \mathcal{L} = m \frac{v^2}{2} - \phi = \frac{m(R_{ef}\dot{\varphi})^2}{2} - b_t R_{ef} \dot{\varphi}_0 \varphi - k_t \frac{\varphi^2}{2}, \quad (37.30)$$

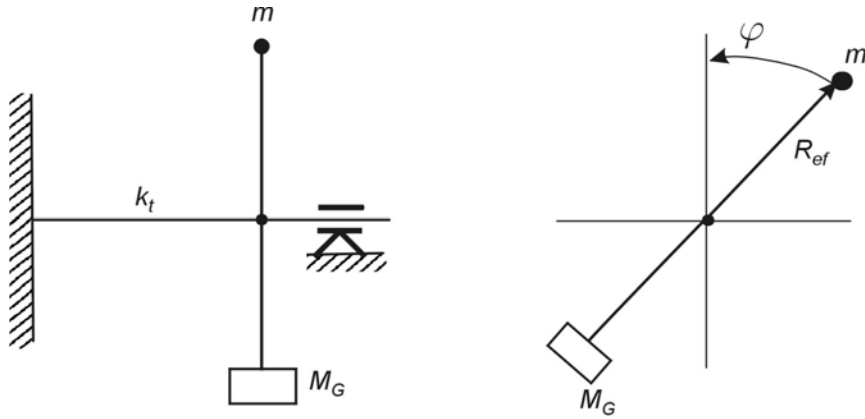
Potenciální energii ϕ jsme nahradily energií pružiny s konstantou k_t a disipativním členem $b_t R_{ef} \dot{\varphi}_0 \varphi$ vyjadřujícím tlumení. Rychlost rotačního pohybu $v = \dot{\varphi} R_{ef}$ jsme nahradily úhlovou rychlostí $\dot{\varphi} = \frac{d\varphi}{dt}$ na nějakém efektivním poloměru R_{ef} a pro tlumení jsme zavedli tlumící parametr b_t . Díky nekonzervativnosti soustavy jsme museli úhlovou rychlost $R_{ef} \dot{\varphi}_0$ v tlumícím členu považovat při variaci za konstantní, viz. (37.14).

Parametry k_t, b_t budou určeny tak aby náhradní soustava kmitala stejně jako konec tyče (37.24). Pohybový zákon (rovnováha sil) této hmoty je určen jako extrém funkcionálu (37.30), tj.,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = m R_{ef}^2 \ddot{\varphi} + b_t R_{ef} \dot{\varphi}_0 \Big|_{\varphi=\varphi_0} + k_t \varphi = 0. \quad (37.31)$$

Řešení budeme opět hledat ve tvaru (37.19), tj. $\varphi(y, t) = \bar{\varphi} \exp(-i\omega t)$, takže vlastní frekvence a tlumení jsou rovny

$$\omega_{r,ef}^2 = \frac{k_t}{m R_{ef}^2} - \left(\frac{b_t}{2m R_{ef}} \right)^2, \quad \omega_{im,ef} = -\frac{b_t}{2m R_{ef}}. \quad (37.32)$$



Obr. 37.3

Schéma náhrady torzní tyče. Hmotnost m reprezentuje vlastní hmotu tyče a její odpovídající moment setrvačnosti $I = mR_{ef}^2$ a přidaná hmotnost M_G má přidaný moment setrvačnosti $I_G = M_G R_{ef}^2$.

m je známá hmotnost torzní tyče a M_G je známá přídavná hmotnost. Ve vztazích (37.32) vystupují neznámé hodnoty k_t a b_t , které musíme dát do relace s materiálovými parametry tyče $\hat{\mu}, \mu$ reprezentující postupně smykový modul a viskozitu. Položíme

$$mR_{ef}^2 = \frac{2L\rho I}{\pi}, \quad mR_{ef} = \sqrt{\frac{2Lm\rho I}{\pi}}, \quad (37.33)$$

kde ρ a L jsou postupně hustota a délka tyče a I je moment setrvačnosti jejího průřezu. Tyto veličiny jsou známy (37.7). Potom z podmínky stejných vlastních frekvencí a stejného tlumení náhradní tyče (37.32) a studované tyče (37.23)

$$\omega_r^2 = \omega_{r,ef}^2 \quad \text{a} \quad \omega_{im} = \omega_{im,ef} \quad (37.34)$$

získáme dosazením vztahů (37.33) do vzorců (37.32) hledané hodnoty náhradní (efektivní) tyče

$$k_t = mR_{ef}^2 (\omega_{r,ef}^2 + \omega_{im,ef}^2) = \frac{\pi C}{2L} = \frac{\pi \hat{\mu} I}{2L}, \quad (37.35)$$

$$b_t = -2\omega_{im,ef} mR_{ef} = \frac{\pi^2 \mu}{4L^2} \sqrt{\frac{mLI}{\pi\rho}}.$$

Smykový modul $\hat{\mu}$ vystupuje v tuhosti tyče C , viz. vztah (37.7) a μ je viskozita materiálu tyče.

Kmitání torzní tyče s přidaným momentem setrvačnosti.

Přidáním dodatečného známého momentu setrvačnosti $I_G = M_G R_{ef}^2$ se změní první člen pohybové rovnice (37.31)

$$(mR_{ef}^2 + I_G) \ddot{\varphi} + b_t R_{ef} \dot{\varphi} \Big|_{\varphi=\varphi_0} + k_t \varphi = 0. \quad (37.36)$$

Vzhledem k tomu, že se tento typ torzního kyvadla používá ke stanovení materiálových vlastností označíme změřenou vlastní frekvenci a tlumení jako $\omega_{exp}, \beta_{exp}$. Jejich relace k vlastním kmitům soustavy (37.36) je

$$\omega_r^2 = \omega_{\text{exp}}^2 = \frac{k_t}{(mR_{\text{ef}}^2 + I_G)} - \left(\frac{b_t R_{\text{ef}}}{2(mR_{\text{ef}}^2 + I_G)} \right)^2, \quad \omega_{\text{im}} = -\frac{\beta_{\text{exp}}}{2} = -\frac{b_t R_{\text{ef}}}{2(mR_{\text{ef}}^2 + I_G)} \quad (37.37)$$

Konečné vztahy pro stanovení materiálových parametrů tyče $\hat{\mu}, \mu$ nalezneme dosazením za k_t a b_t z náhrady torzní tyče (37.35). Tudíž pro elastické konstanty platí

$$C = \rho I \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 (4\omega_{r,\text{exp}}^2 + \beta_{\text{exp}}^2) \left(1 + \frac{\pi I_G}{2\rho LI} \right), \quad \hat{\mu} = \frac{C}{I}, \quad (37.38)$$

a pro viskozitu

$$\frac{\mu}{\rho} = 4\sqrt{2} \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \beta_{\text{exp}} \left(1 + \frac{\pi I_G}{2\rho LI} \right). \quad (37.39)$$

Tento vztah budeme aplikovat na kruhovou tyč (36.7) poloměru R , pro $I = \frac{\pi R^4}{2}$ nalezneme vztah pro smykový modul $\hat{\mu}$ materiálu tyče pomocí naměřené rezonanční frekvence ω_{exp} a útlumu β_{exp}

$$\hat{\mu}_{\text{cylinder}} = \rho \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 (4\omega_{r,\text{exp}}^2 + \beta_{\text{exp}}^2) \left(1 + \frac{I_G}{\rho LR^4} \right), \quad (37.40)$$

Pro eliptickou tyč, viz obr. 36b s tuhostí tyče $C = \hat{\mu}I$ a momentem setrvačnosti I

$$C = \frac{\hat{\mu}\pi a^3 b^3}{a^2 + b^2}, \quad I = I_z + I_x = \frac{\pi ab^3}{4} + \frac{\pi a^3 b}{4} = \frac{\pi}{4} ab(a^2 + b^2) \quad (37.41)$$

dostáváme

$$\hat{\mu}_{\text{ellipse}} = \rho \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 (4\omega_{r,\text{exp}}^2 + \beta_{\text{exp}}^2) \left(1 + \frac{2I_G}{\rho Lab(a^2 + b^2)} \right), \quad (37.42)$$

Jak již bylo patrné ze vztahu (37.37) je rozhodující poměr přidaného momentu setrvačnosti I_G a vlastního momentu setrvačnosti tyče $2\rho LI/\pi$. Srovnej se vztahy pro stanovení Youngova modulu E z ohybových, viz. příklad 32, či podélných vln, viz. příklad 34.

Při kmitání kruhové tyče o poloměru $R = 17,5 \text{ mm}$ délce $L = 6 \text{ mm}$ (délka jen chrupavky) o hustotě $\rho = 1,2 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ byly naměřeny hodnoty $\omega_{\text{exp}} = 9 \text{ s}^{-1}$ a

$\beta_{\text{exp}} = 0,8 \text{ s}^{-1}$. Moment setrvačnosti je $I = \frac{\pi R^4}{2} = \frac{3,14 \cdot (1,75 \cdot 10^{-2})^4}{2} = 14,72 \cdot 10^{-8}$.

Hodnota modulu pružnosti ve smyku je

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_{cylinder} &= \rho \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \left(4\omega_{r,exp}^2 + \beta_{exp}^2 \right) \left(1 + \frac{I_G}{\rho LR^4} \right) = \\ &1.2 \cdot 10^3 \left(\frac{6 \cdot 10^{-3}}{3.14} \right)^2 \left(4\omega_{r,exp}^2 + \beta_{exp}^2 \right) \left(1 + 1.48 \cdot 10^6 I_G \right) = \\ &6.485 \cdot 10^3 \left(4\omega_{r,exp}^2 + \beta_{exp}^2 \right) \Big|_{\omega_{r,exp}=9}^{\beta=0.8} I_G \Big|_{I_G=2.65 \cdot 10^{-3}} = 5.568 \cdot 10^3 \text{ [Pa]}\end{aligned}\quad (37.43)$$

Poměr $I_G / (\rho LR^4) = 1.48 \cdot 10^6 \cdot I_G$. Pro velikost $I_G = 2.65 \cdot 10^{-3} \text{ [kg m}^2\text{]}$ dostáváme hodnotu $\hat{\mu} = 5.568 \cdot 10^3 \text{ [Pa]}$. Youngův modul pružnosti je pak

$$E = 2\hat{\mu}(1 + \sigma) \Big|_{\sigma=0.5} = 3\hat{\mu} = 16.70 \cdot 10^3 \text{ Pa} \quad (37.44)$$

Viskozita je podle vztahu (37.39) rovna

$$\mu = 4\sqrt{2} \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \rho \beta_{exp} \left(1 + \frac{\pi I_G}{2\rho LI} \right) = 5.657 \cdot \left(\frac{6 \cdot 10^{-3}}{3.14} \right)^2 1.2 \cdot 10^3 \beta_{exp} \left(1 + 1.48 \cdot 10^6 I_G \right) = \quad (37.45)$$

$$36.68 \cdot 10^3 \beta_{exp} \Big|_{\beta_{exp}=0.8} I_G \Big|_{I_G=2.65 \cdot 10^{-3}} = 77.76 \text{ Pa s}$$

Vzhledem k často složité geometrii měřícího zařízení je výhodné zařízení otestovat na známém materiálu. Moment setrvačnosti tohoto měřícího zařízení byl stanoven měřením polyetylénové tyčky zkrucované délky $L = 16.8 \text{ mm}$, poloměru $R = 3 \text{ mm}$. Předpokládáme, že polyetylén je nestlačitelný Hookovský materiál, tj. $\sigma = 0.5$, takže jeho modul ve smyku je $\hat{\mu} = \frac{E}{2(1 + \sigma)} = \frac{1.08 \cdot 10^9}{2(1 + 0.5)} = 0.36 \cdot 10^9 \text{ [Pa]}$, který souvisí s vlastními kmity torzní tyče podle zjednodušeného vztahu (37.43)

$$\hat{\mu}_{cylinder} = \frac{4LI_G}{\pi^2 R^4} \omega_{r,exp}^2 \text{ [Pa]} \quad (37.46)$$

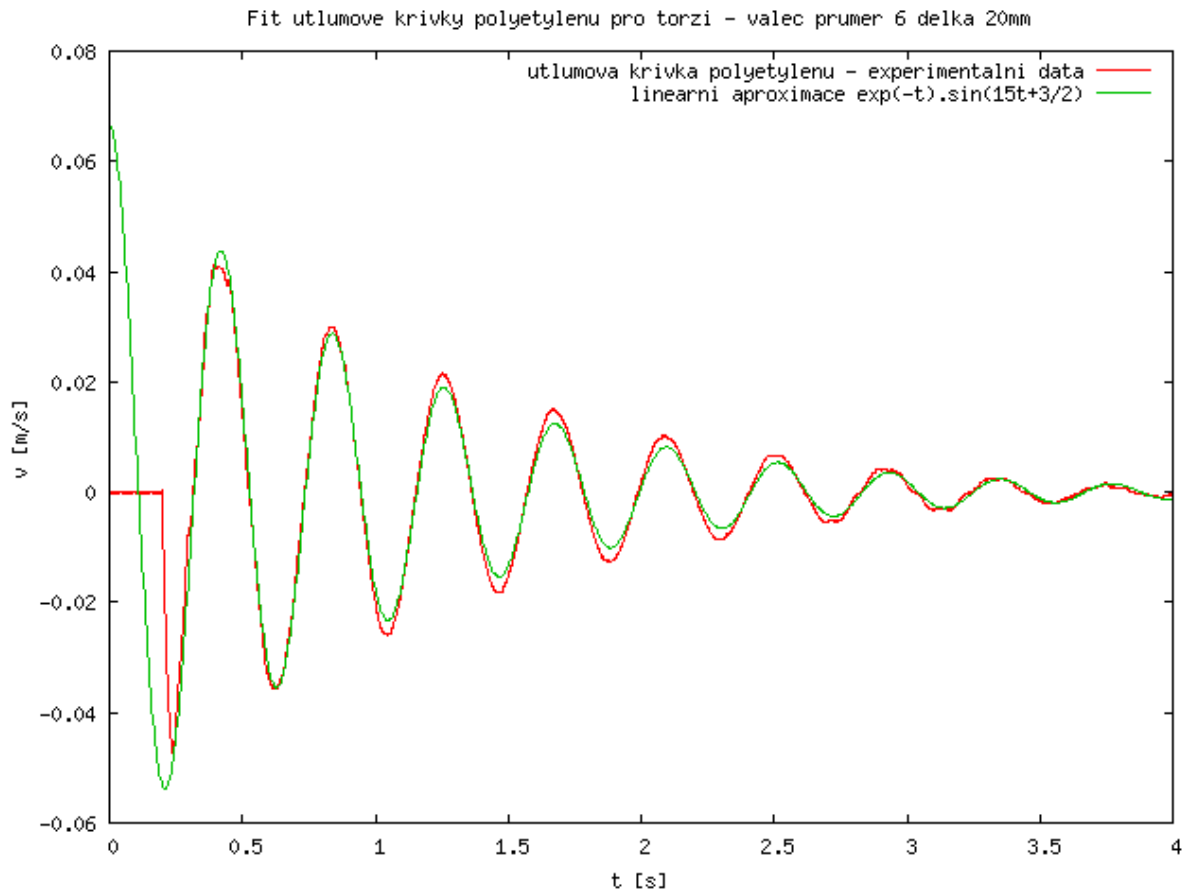
Neznámý moment setrvačnosti I_G měřícího zařízení je roven

$$I_G = \frac{\pi^2 R^4}{4L\omega_{exp}^2} \hat{\mu}_{cylinder} = \frac{(3.14)^2 (3 \cdot 10^{-3})^4}{4 \cdot (1.68 \cdot 10^{-2}) \cdot 15^2} 0.36 \cdot 10^9 = 1.9 \cdot 10^{-2} \text{ kg m}^2, \quad (37.47)$$

viz. obr. 37.4 kde je uveden záznam měření

Modul pružnosti ve smyku $\hat{\mu}$ a viskozitu μ je možno stanovit otestovaným experimentálním zařízením podle vztahů

$$\hat{\mu}_{cylinder} = \frac{4LI_G}{\pi^2 R^4} \omega_{r,exp}^2 \text{ [Pa]}, \quad \mu = \frac{4\sqrt{2}LI_G}{\pi^2 R^4} \beta_{exp} \text{ [Pa s]}. \quad (37.48)$$



Obr. 37.4. Záznam rychlosti torzních kmitů při testování torzního zařízení polyetylenovou trubkou.

Literatura:

- [1] Maršík F. Termodynamika kontinua, Academia Praha, 1999
- [2] Brdička M. Mechanika kontinua, Nakladatelství Československé akademie věd, Praha, 1959
- [3] Landau L.D., Lifšic E. M. Theory of elasticity (rusky Teorija uprugosti), Izdatelstvo Nauka, Moskva 1965
- [4] Finlayson B. M. The Methods of Weighted Residuals and Variational Principles, Academic Press, 1972.
- [5] Glansdorff P., Prigogine I., Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations, Wiley-Interscience, 1971.

Příklad 39

ELASTICKÉ VLASTNOSTI TEPEN A ŽIL

Materiálové vlastnosti živých tkání určujeme většinou empiricky, přičemž všechna provedená měření splňují zákony bilance hmotnosti, hybnosti, momentu hybnosti, energie a jsou podřízena II. Zákonu termodynamiky. Vzhledem k tomu, že nás zajímají vlastnosti materiálu v jeho původním (referenčním) stavu je výhodné formulovat zákony bilance v materiálovém popisu.

Bilance hmotnosti má tvar

$$\rho_o = j\rho, \quad j = \det|F^i{}_I|, \quad F^i{}_I = \frac{\partial x^i}{\partial X^I} \quad (39.1)$$

kde ρ_o, ρ jsou postupně hustoty v počátečním-referenčním stavu a ve stavu aktuálním, tj. po

deformaci charakterizované deformačním gradientem $F^i{}_I = \frac{\partial x^i}{\partial X^I}$. Biologické tkáně mohou

být i stlačené materiály, takže při deformaci dochází ke změně objemu. Změna objemu je charakterizovaná rozdílem $(1-j)$, pro $j=1$ jde o materiály nestlačitelné a velikost změny objemu je úměrná velikosti tlaku p [N/m² = J/m³], kde koeficient úměrnosti K je modul stlačitelnosti

$$p = K(1-j) = K\left(1 - \frac{\rho_o}{\rho}\right). \quad (39.2)$$

Bilance hybnosti-rovnováha objemových a povrchových sil je vyjádřena rovnicí

$$\rho_o \ddot{u}^i = \frac{\partial T^{Ki}}{\partial X^K}, \quad u^i = x^i - X^i \dots \text{ je posunutí proti počátečnímu stavu} \quad (39.3)$$

vyjadřující rovnováhu setrvačné (objemové) síly $\rho_o \ddot{u}^i$ a síly povrchové. Setrvačná síla se při biomechanických procesech a v testovacích experimentech zanedbává, takže ve většině případů jde při experimentu jen o rovnováhu povrchových sil. Povrchové síly generují v tělese (ve tkáni) napětí, které má tenzorový charakter (síla ve směru x způsobí napětí jak ve směru x , ale i ve směrech kolmých y, z). Rovnováhu povrchových sil na těleso objemu \mathcal{V}_o zapíšeme v integrálním tvaru

$$\int_{\mathcal{V}_o} \frac{\partial T^{Ki}}{\partial X^K} d\mathcal{V} = \int_{\partial\mathcal{V}_o} T^{Ki} dA_K = \int_{\partial\mathcal{V}} j^{-1} T^{Ki} \frac{\partial x^k}{\partial X^K} da_k = \int_{\partial\mathcal{V}} t^{ik} da_k = 0. \quad (39.4)$$

Integrací přes objem \mathcal{V}_o jsme získali rovnováhu povrchových sil ve všech směrech $i=1,2,3$

v aktuálním (zatíženém) stavu. Rovnováha povrchových sil je pak vyjádřena 1. Piola-

Kirchhoffovým tenzorem $T^{Ki}(X, x, t)$, který závisí jak na počátečním stavu X , tak i na stavu

aktuálním x . Tenzor napětí v aktuálním stavu značíme t^{ik} a nazýváme ho Cauchyho tenzorem napětí. Jeho relace k původnímu 1. Piola-Kirchhoffovu tenzoru napětí je

$$t^{ik}_{(x,t)} = j^{-1} \frac{\partial x^k}{\partial X^K} T^{Ki}(X, x, t) = j^{-1} \frac{\partial x^i}{\partial X^I} \frac{\partial x^k}{\partial X^K} S^{IK}(x, t) \quad (39.5)$$

Poslední rovnice definuje tzv. 2. Piola-Kirchhoffův tenzor napětí $S^{IK}(x, t)$, který vyjadřuje vlastnosti materiálu v referenčním stavu a neměl by tedy záviset explicitně na časovém

průběhu konkrétního pohybu $x^i = x^i(X^I, t)$, pro $i, I = 1, 2, 3$. Jak bude uvedeno dále, bude tento tenzor záviset jen na Greenovu tenzoru deformace

$$C_{KL}(X^I, t) = \sum_{l=1}^3 \frac{\partial x^l}{\partial X^K} \frac{\partial x^l}{\partial X^L} = \frac{\partial x^l}{\partial X^K} \frac{\partial x^l}{\partial X^L} = F^l_{\ K} F^l_{\ L} = (F^T F)_{KL}, \quad (39.6)$$

popř. jeho invariantech. Používáme Einsteinova značení, tj. přes dva stejné indexy objevující se v součinu budeme sčítat.

Vedle Greenova tenzoru deformace je pro referenční stav používán Lagrangeův tenzor deformace

$$2E_{KL}(X^I, t) = C_{KL}(X^I, t) - \delta_{KL} \quad (39.7)$$

a v pro deformaci v aktuálním stavu Eulerův tenzor relativních deformací

$$e_{kl}(x^i, t) = E_{KL} \frac{\partial X^K}{\partial x^k} \frac{\partial X^L}{\partial x^l}. \quad (39.8).$$

K popisu materiálových vlastností tkání můžeme použít kterýkoliv z tenzorů (39.6), (39.7), (39.8). Mezi všemi tenzory existují vzájemně jednoznační zobrazení.

Bilance vnitřní energie- I. zákon termodynamiky má tvar

$$\rho_o \dot{u} + \frac{\partial Q^K}{\partial X^K} - T^{Ki} \frac{\partial v_i}{\partial X^K} = 0 \quad (39.9)$$

a dává do relace změnu vnitřní energie (teploty tkáně) jednak následkem přivedeného tepla $Q^K \left[\frac{J}{m^2} \right]$ a jednak v důsledku mechanické energie dodané při deformaci tkáně. Mechanická

energie je vyjádřena členem $T^{Ki} \frac{\partial v_i}{\partial X^K} \left[\frac{W}{m^3} \right]$.

II. zákon termodynamiky vyjadřuje reálnost všech procesů transformace energie a látek (chemických reakcí). Nedílnou součástí těchto přeměn je nevratnost procesů popsaná nerovnostmi, tzv. *produkcí entropie* $\sum(S)$, popř. disipací mechanické a chemické energie na teplo. V materiálovém popisu má tvar

$$T \sum(S) = \rho (T\dot{s} - \dot{u}) - \frac{Q^K}{T} \frac{\partial T}{\partial X^K} + T^{Ki} \frac{\partial v_i}{\partial X^K} \geq 0 \left[\frac{W}{m^3} \right]. \quad (39.10)$$

Abychom mohli materiálové vztahy tkání formulovat nezávisle na pozorovateli (v libovolné souřadné soustavě) pomocí vhodných a měřitelných nezávislých proměnných veličin T, C_{KL} , tj. teploty a deformace, zavedeme skalární funkci, tzv. volnou energii

$f(T, C_{KL})$

$$f(T, C_{KL}) = u(T, C_{KL}) - Ts(T, C_{KL}). \quad (39.11)$$

Tato funkce nám umožní vyjádřit materiálové vlastnosti nezávisle na tom, zda je měříme v referenčním stavu, či po deformaci ve stavu aktuálním.

Deformaci tkáně v nějakém referenčním stavu vyjádříme pomocí Greenova tenzoru deformace (39.6), který je symetrický v indexech KL . Jeho materiálová derivace charakterizuje rychlost deformace

$$\dot{C}_{KL} = 2 \frac{\partial x^m}{\partial X^L} \frac{\partial v_m}{\partial X^K} = 2d_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial X^K} \frac{\partial x^l}{\partial X^L}, \text{ kde } d_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v^k}{\partial x^l} + \frac{\partial v^l}{\partial x^k} \right). \quad (39.12)$$

Pomocí volné energie lze nerovnost (39.10) přepsat do explicitního tvaru

$$T \sum (S) = -\rho_o (\dot{f} + s\dot{T}) - \frac{Q^K}{T} \frac{\partial T}{\partial X^K} + T^{Ki} \frac{\partial v_i}{\partial X^K} =$$

$$-\rho_o \left[s + \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{C_{KL}} \right] \dot{T} + \left[T^{KL} - 2\rho_o \frac{\partial f}{\partial C_{KL}} \frac{\partial x^l}{\partial X^L} \right] \frac{\partial v_l}{\partial X^K} - \frac{Q^K}{T} \frac{\partial T}{\partial X^K} \geq 0 \quad (39.13)$$

Splnění této nerovnosti je ekvivalentní II. zákonu termodynamiky. Můžeme ji splnit zavedením následujících definic:

- **entropii definujeme vztahem**

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{C_{KL}} \dots \text{popisuje vliv teploty a změny struktury (degradaci)} \quad (39.14)$$

- **tenzor napětí rozdělíme na dvě části**

$$T^{KL} = T_{el}^{KL} + T_{dis}^{KL}$$

$$T_{el}^{KL} = 2\rho_o \left(\frac{\partial f}{\partial C_{KL}} \right)_T \frac{\partial x^l}{\partial X^L} \dots \text{popisuje jen elastické změny včetně velkých deformací a anisotropie.} \quad (39.15)$$

Z této definice plyne, že elastická část tenzoru napětí nezávisí na rychlosti deformace (39.12). Tím je explicitně vyjádřeno, že všechny nevratné procesy (viskozita, plasticita, degradace apod.) budou zahrnuty do disipativní části tenzoru napětí T_{dis}^{KL} . Tato skutečnost je formulována pomocí tzv. **disipativní nerovnosti**

$$T_{dis}^{KL} \frac{\partial v_l}{\partial X^K} - \frac{Q}{T} \frac{\partial T}{\partial X^K} \geq 0 \quad (39.16)$$

tj. trvalá deformace, chemické přeměny apod. musí splňovat tuto nerovnost.

39.1 NEJČASTĚJI POUŽÍVANÉ MODELY ELASTICKÝCH MATERIÁLŮ

Pro popis elastických vlastností homogenních isotropních materiálů je nejpopulárnější tzv.

- *St. Venant-Kirchhoffův* model, popisující stlačitelný materiál. Jeho volná energie je součet elastické energie uložené ve formě stlačení či expanze a elastické energie ve formě krutu (smyku), takže její tvar je

$$f(E_{KL}, t) = \frac{\lambda}{2\rho_o} E_{(1)}^2 + \frac{\mu}{\rho_o} (E_{KL} E_{KL}), \text{ kde je } E_{(1)} = E_{II} = E_{11} + E_{22} + E_{33}. \quad (39.17)$$

Veličina $E_{(1)}$ vyjadřuje změnu objemu; v případě malých deformací platí

$$\frac{\rho_o}{\rho} - 1 \doteq E_{(1)}. \quad (39.18)$$

Podle vztahu (39.15) má odpovídající 2. Piolův-Kirchhoffův tenzor tvar

$$S_{KL} = 2\rho_o \left(\frac{\partial f}{\partial C_{KL}} \right)_T = 2\rho_o \left(\frac{\partial f}{\partial E_{KL}} \right)_T = \lambda E_{II} \delta_{KL} + 2\mu E_{KL}, \text{ pro } 2E_{KL} = C_{KL} - \delta_{KL} \quad (39.19)$$

kde λ, μ jsou, tzv. Laméovy koeficienty. Tento materiálový model přechází v aktuální konfiguraci na Hookův materiálový model

$$t_{kl} = \lambda e_{ii} \delta_{kl} + 2\mu e_{kl}, \quad e_{kl} = E_{KL} \frac{\partial X^K}{\partial x^k} \frac{\partial X^L}{\partial x^l}, \quad (39.20)$$

kde e_{kl} je Eulerův tenzor relativních deformací.

V obvyklé formulaci Hookova modelu jsou od sebe odděleny čistě objemové změny a distorze (změny tvaru beze změny objemu). V takovéto formulaci má Hookův zákon tvar

$$t_{kl} = Ke_{(1)}\delta_{kl} + 2\mu e_{kl}^{(o)} \quad (39.21)$$

Zde jsme označili objemovou deformaci $e_{(1)} = e_{ii} = \sum_{i=1}^3 e_{ii}$ a čistě tvarovou deformaci bez

objemových změn jako $e_{kl}^{(o)} = e_{kl} - \frac{e_{(1)}}{3}\delta_{kl}$. Při deformačních testech se obvykle měří Youngův

modul pružnosti E a Poissonovo číslo $\sigma = \frac{e_{22}}{e_{11}} = \frac{e_{33}}{e_{11}}$ (kontrakce při tahu). Tyto veličiny jsou

v následujících relacích k Lamého koeficientům

$$\lambda = \frac{E\sigma}{(1+\sigma)(1-2\sigma)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\sigma)} \quad (39.22).$$

V Hookově zákonu (39.21) vystupuje objemový modul K a smykový modul μ a ty lze vyjádřit pomocí měřitelných veličin E, σ následujícím způsobem

$$K = \frac{E}{3(1-2\sigma)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\sigma)}. \quad (39.23)$$

Druhým velmi často používaným modelem, především pak pro nestlačitelné elastické materiály typu pryže je, tzv. *neo-Hookův* model, jehož volná energie je rovna energii distorze (čistě tvarové deformace)

$$f(C_{KL}(X^I, t)) = \frac{\mu}{2}(j^{-2/3}C_{(1)} - 3), \quad \text{pro } j^2 = \det C_{KL}. \quad (39.24)$$

Odtud je patrné, že v případě konstantní hustoty tkáně ($j=1$) je stopa Greenova tenzoru velkých deformací $C_{(1)} = C_{11} + C_{22} + C_{33} = \lambda_{(1)}^2 + \lambda_{(2)}^2 + \lambda_{(3)}^2$ měřítkem změny tvaru. Zde jsou $\lambda_{(1)}, \lambda_{(2)}, \lambda_{(3)}$ protažení v hlavních směrech deformace. μ je smykový modul podobně jako v Hookově zákonu.

S ohledem na definici 2. Piolova-Kichhoffova tenzoru napětí (39.19) dostáváme

$$S_{KL} = \mu j^{-2/3} \left(\delta_{KL} - \frac{C_{(1)}}{3} C_{KL}^{-1} \right), \quad \text{platí } \frac{\partial j}{\partial C_{KL}} = \frac{j}{2} C_{KL}^{-1}, \quad (39.25)$$

kde $C_{KL}^{-1} = \frac{\partial X^K}{\partial x^k} \frac{\partial X^L}{\partial x^l}$ je tenzor deformace inverzní ke Greenovu tenzoru deformace (někdy se nazývá Piolův tenzor). Transformací do aktuálního stavu dostáváme vztah pro Cauchyho tenzor napětí

$$t^{ik} = j^{-1} \frac{\partial x^i}{\partial X^I} \frac{\partial x^k}{\partial X^L} S^{KL} = \mu j^{-5/3} \left(c^{-1ik} - \frac{C_{(1)}}{3} \delta^{ik} \right), \quad \text{kde } c^{-1ik} = \frac{\partial x^i}{\partial X^L} \frac{\partial x^k}{\partial X^L} \quad (39.26)$$

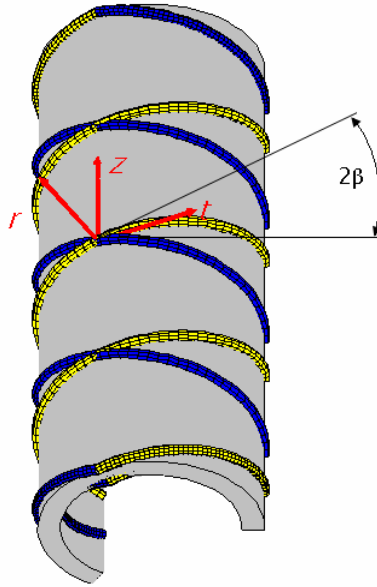
Označili jsme c^{-1ik} inverzní tenzor k Cauchyho deformačnímu tenzoru

$$c_{kl}(x^i, t) = \frac{\partial X^L}{\partial x^k} \frac{\partial X^L}{\partial x^l} = \delta_{kl} - 2e_{kl}. \quad (39.27)$$

Velikost vlastních čísel Cauchyho tenzoru (39.27) (velikost deformace v hlavních směrech) je rovna převrácené hodnotě vlastních čísel k tenzoru c^{-1ik} . Odtud již můžeme vyvodit souvislost s velikostí relativních deformací, kterou popisuje Eulerův tenzor e_{kl} .

$C_{(1)} = \lambda_{(1)}^2 + \lambda_{(2)}^2 + \lambda_{(3)}^2$ je invariant vyjádřen pomocí protažení v hlavních směrech deformace.

Volná energie Neo-Hookova materiálu (39.24) je často využívána k popisu tepen a žil, což jsou anisotropní materiály se dvěma významnými a specificky orientovanými směry [5]. Volná energie se rozdělí na část homogenní isotropní, která je popsána tvarem (39.24) a na část anisotropní, která zahrnuje odlišné elastické vlastnosti v předem definovaném směru, viz Obr. 39.1. Vedle invariantů $j, C_{(1)}$ bude volná energie ještě záviset na invariantech $C_{(4)}, C_{(6)}$



Obr. 39.1. Zobrazení dvou směrů kolagenních vláken ve stěně tepny, popř. žíly. Šedá oblast je homogenní matrice [6].

vyjadřující elastickou energii ve směrech jednotkových vektorů N_4, N_6

$$\begin{aligned} C_{(4)} &= j^{-2/3} C_{KL} N_4^K N_4^L = \lambda_{(4,f)}^2 = \lambda_{(4,x)}^2 \cos^2 \beta_4 + \lambda_{(4,y)}^2 \sin^2 \beta_4, \\ C_{(6)} &= j^{-2/3} C_{KL} N_6^K N_6^L = \lambda_{(6,f)}^2 = \lambda_{(6,x)}^2 \cos^2 \beta_6 + \lambda_{(6,y)}^2 \sin^2 \beta_6. \end{aligned} \quad (39.28)$$

Směry kolagenových vláken jsme vymezily úhly β_4, β_6 a deformace vzhledem pevným souřadnicím (x, y) protažením λ_x, λ_y . Konečný tvar volné energie pro anisotropní materiál je

$$f(C_{KL}(X^I, t)) = \frac{\mu}{2} (j^{-2/3} C_{(1)} - 3) - \frac{\mu_{4,f}}{2} J_{m4} \ln \left[1 - \frac{(C_{(4)} - 1)^2}{J_{m4}^2} \right] - \frac{\mu_{6,f}}{2} J_{m6} \ln \left[1 - \frac{(C_{(6)} - 1)^2}{J_{m6}^2} \right] \quad (39.29)$$

kde $\mu_{4,f}, J_{m4}, \mu_{6,f}, J_{m6}$ jsou postupně smykové moduly a limitní roztažnosti (extensibility) postupně vláken ve směru 4 a 6. Platí-li že vlákna obou směrů mají stejné mechanické vlastnosti, tj. $\mu_{4,f} = \mu_{6,f} = \mu_f, J_{m4} = J_{m6} = J_m, \beta_4 = -\beta_6 = \beta$ pak má volná energie tvar

$$f(C_{KL}(X^I, t)) = \frac{\mu}{2} (j^{-2/3} C_{(1)} - 3) - \mu_f J_m \ln \left[1 - \frac{(C_{(4)} - 1)^2}{J_m^2} \right] \quad (39.30)$$

Tento model byl s úspěchem použit ke stanovení materiálového modelu tepenných stěn v práci [6]. Naměřená hodnota smykového modulu za předpokladu Neo-Hookova materiálového modelu byla $\mu = 26 \text{ kPa}$, limitní roztažnost $J_m = 1.464$ [1] úhel vláken $\beta = 37.2^\circ \text{C}$.

39.2 DEFORMACE TEPEN A ŽIL

Pro kvalitativní analýzu pulzačního proudění v elastických trubicích obecně, kterou lze provádět jen v 1D aproximaci (závislost jen na čase t a podélné souřadnici z), je třeba nalézt vhodný vztah mezi deformovatelným průřezem $A(z, t)$ trubice, tloušťkou její stěny h_0 a elastickými parametry materiálu trubice. Předpokládejme, materiál stěny tepny je popsán Hookovým zákonem (39.20). Bilance hybnosti (39.3) zahrnuje jen setrvačnou sílu a sílu povrchovou (tj. vnitřní a vnější tlaky na tepnu, popř. její podélné předpětí), takže ji lze psát ve tvaru

$$\frac{\partial t_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (39.31)$$

kde jsme jak tenzor napětí t_{kl} tak i vektor posunutí \mathbf{u} , převedli do válcových souřadnic. Předpokládáme posunutí jen ve směru radiálním $\mathbf{u} = (u_r, u_\varphi, u_z) = (u_r(z), 0, 0)$, dosazením do rovnice (39.31) odvodíme rovnici

$$\mu h \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} + p - p_0 = h(\lambda + 2\mu) \frac{u_r}{r^2} + \rho h \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}, \quad (39.32)$$

kteřá nám bude sloužit ke stanovení, alespoň přibližného konstitutivní vztahu pro 1D aproximaci [3].

Za předpokladu malých deformací malých deformací můžeme posunutí stěny trubice nahradit změnou jejího průřezu, tj., $A = \pi r^2 = \pi(R_0 + u_r)^2 \doteq A_0 + S_0 u_r$, S_0 bude obecně označovat vnitřní obvod tepny o poloměru R_0 .

Za těchto předpokladů přechází vztah (39.32) pro bilanci sil v radiálním směru na hledaný konstitutivní vztah

$$\frac{\mu h}{S_0} \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + p - p_0 = \frac{h(\lambda + 2\mu)}{2R_0} \left(1 - \frac{A_0}{A} \right) + \frac{\rho h}{S_0} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2}, \quad (39.33)$$

kteřý můžeme již porovnat s běžně užívaným vztahem **Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.** [1]. Tlumící člen ve vztahu **Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.** je nahrazen setrvačným členem na pravé straně rovnice (39.32). Porovnáním jednotlivých členů v rovnicích (39.33) a **Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.** můžeme nalézt alespoň přibližný materiálový vztah

$$\Phi\left(\frac{A}{A_0}\right) = \frac{h(\lambda + 2\mu)}{2R_0} \left[1 - \left(\frac{A}{A_0}\right)^{-1} \right], \text{ t.j., } K_p = \frac{hE}{4R_0(1-2\sigma)(1+\sigma)} = \frac{h\mu}{2R_0(1-2\sigma)} \quad (39.34)$$

mezi elastickou konstantou K_p a Youngovým modulem E a Poisseuillovou konstantou σ , popř. smykovým modulem, viz. relace (39.22).

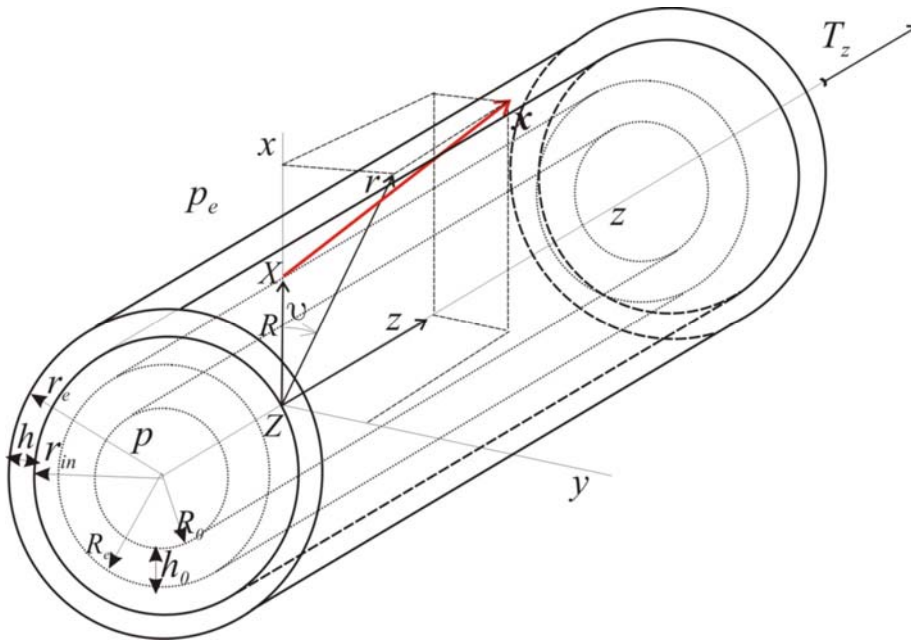
Pro naměřenou hodnotu smykového modulu $\mu = 26 \text{ kPa}$ u tepny poloměru $R_0 = 1 \text{ cm}$ a tloušťky $h_0 = 1 \text{ cm}$ pro $\sigma = 0.45$ vychází $K_p = 13 \text{ kPa}$. Roztažený stav pružné trubice s koeficientem elasticity K_E nebyl studován.

39.3 VLASTNOSTI TENKOSTĚNNÝCH TEPEN A ŽIL PŘI KONEČNÝCH DEFORMACÍCH

Vlivem rozdílných tlaků $p - p_e$ dochází u tepny jednak k inflaci a jednak ke kolapsu.

Vlivem tenze T_z v podélném směru dochází k prodloužení $\lambda = \frac{\partial z}{\partial Z}$ a obecně i k torzi γ ,

která je obvykle definována jako poměrné zkroucení $\gamma = \frac{\partial \vartheta}{\partial Z} \left[\frac{\text{rad}}{\text{m}} \right]$. Výhodnější se jeví zavést torzi pomocí torzního úhlu $\tau = \gamma R$ [rad] (protože $\text{arctg } \tau = \gamma R z / z = \gamma R$).



Obr. 4.3. Inflace, torze a extenze cévy. Materiálový bod se z polohy $X = (R, \theta, Z)$ posune vlivem deformace do polohy $x = (r, \vartheta, z)$, např. [8].

Deformace je popsána vztahy

$$r = r(R), \vartheta = \theta + \gamma Z, z = \lambda Z \quad (39.35)$$

Mírou této deformace je deformační gradient (39.1)

$$\frac{\partial x^i}{\partial X^I} = F^i_I \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial R}, & \frac{\partial r}{R\partial\theta}, & \frac{\partial r}{\partial Z} \\ r\frac{\partial\vartheta}{\partial R}, & r\frac{\partial\vartheta}{R\partial\theta}, & r\frac{\partial\vartheta}{\partial Z} \\ \frac{\partial z}{\partial R}, & \frac{\partial z}{R\partial\theta}, & \frac{\partial z}{\partial Z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial R}, & 0, & 0 \\ 0, & \frac{r}{R}, & r\gamma \\ 0, & 0, & \lambda \end{pmatrix} \quad (39.36)$$

Budeme předpokládat, že materiál cévy je nestlačitelný, tj. $\det|F^i_I| = 1$, pak platí navíc relace

$$\frac{\partial r}{\partial R} \cdot \frac{\lambda r}{R} = 1, \text{ tj. } \frac{\partial r}{\partial R} = \frac{R}{\lambda r} \quad (39.37)$$

Dosazením do (39.36) dostáváme Greenův tenzor deformace (39.6) pro nestlačitelný materiál a jeho konečný tvar je

$$C_{IJ} = F^i_I \cdot F^i_J = (F^T F)_{IJ} = \begin{pmatrix} \left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2, & 0, & 0 \\ 0, & \left(\frac{r}{R}\right)^2, & \frac{\gamma r^2}{R} \\ 0, & \frac{\gamma r^2}{R}, & \gamma^2 r^2 + \lambda^2 \end{pmatrix} \quad (39.38)$$

Lagrangeův tenzor deformace (39.7) je

$$2E_{IJ} = \begin{pmatrix} \left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2 - 1, & 0, & 0 \\ 0, & \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1, & \frac{\gamma r^2}{R} \\ 0, & \frac{\gamma r^2}{R}, & \gamma^2 r^2 + \lambda^2 - 1 \end{pmatrix} \quad (39.39)$$

K výpočtu Eulerova tenzoru deformace potřebujeme inverzní gradient deformace

$$F^i_I = \frac{\partial X^I}{\partial x^i} = \begin{pmatrix} \left(\frac{r\lambda}{R}\right), & 0, & 0 \\ 0, & \left(\frac{R}{r}\right), & -\frac{R\gamma}{\lambda} \\ 0, & 0, & \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix} \quad (39.40)$$

Potom podle transformačního vztahu (39.8) dostáváme

$$2e_{ij} = \begin{pmatrix} 1 - \left(\frac{\lambda r}{R}\right)^2, & 0, & 0, \\ 0, & 1 - \left(\frac{R}{r}\right)^2, & \frac{\gamma R^2}{\lambda r} \\ 0, & \frac{\gamma R^2}{\lambda r}, & 1 - \frac{1}{\lambda^2} [1 + (\gamma R)^2] \end{pmatrix} \quad (39.41)$$

Odtud můžeme podle vztahu (39.27) nalézt Cauchyho deformační tenzor

$$c_{ij} = \delta_{ij} - 2e_{ij} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\lambda r}{R}\right)^2, & 0, & 0, \\ 0, & \left(\frac{R}{r}\right)^2, & -\frac{\gamma R^2}{\lambda r} \\ 0, & -\frac{\gamma R^2}{\lambda r}, & \frac{1}{\lambda^2} [1 + (\gamma R)^2] \end{pmatrix} \quad (39.42)$$

a k němu inverzní tenzor (tzv. Fingerův tenzor) c_{ij}^{-1} vystupuje v neo-Hookově modelu nestlačitelného dobře deformovatelného materiálu. Tento model je často používán pro popis dobře ohebných materiálů (guma, pryž, biologické tkáně). Tudíž konečný tvar Fingerova tenzoru deformace cévy je

$$c_{ij}^{-1} = \frac{\partial x^i}{\partial X^L} \frac{\partial x^j}{\partial X^L} = \begin{pmatrix} \left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2, & 0, & 0, \\ 0, & (\gamma r)^2 + \left(\frac{r}{R}\right)^2, & \gamma \lambda r \\ 0, & \gamma \lambda r, & \lambda^2 \end{pmatrix} \quad (39.43)$$

Uvážíme-li, že I. invariant Greenova tenzoru deformace (39.38) je

$$C_{(1)} = C_{11} + C_{22} + C_{33} = \lambda^2 + (\gamma r)^2 + \left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2 + \left(\frac{r}{R}\right)^2 \quad (39.44)$$

je Cauchyho tenzor napětí pro neo-Hookův model (39.26) definován vztahem

$$t^{ij} = \mu \left(c^{-1 ij} - \frac{C_{(1)}}{3} \delta^{ij} \right) \quad (39.45)$$

Nenulové složky tenzoru napětí jsou

$$\begin{aligned} t_{rr} &= \mu \left[\frac{2}{3} \left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2 - \frac{r^2 + R^2 (\lambda^2 + \gamma^2 r^2)}{3R^2} \right], \quad t_{rv} = t_{rz} = 0 \\ t_{\theta\theta} &= \frac{2}{3} \mu \left(\gamma^2 r^2 + \frac{r^2}{R^2} \right) - \frac{\mu (\lambda^4 r^2 + R^2)}{3\lambda^2 r^2}, \quad t_{\theta z} = \mu \gamma \lambda r, \quad t_{\theta r} = 0 \\ t_{z\theta} &= \mu \gamma \lambda r, \quad t_{zz} = \mu \left\{ \frac{2}{3} \lambda^2 - \frac{\gamma^2 r^2}{3} - \frac{1}{3} \left[\left(\frac{R}{\lambda r}\right)^2 + \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \right\}, \quad t_{zr} = 0 \end{aligned} \quad (39.46)$$

Konkrétní relace mezi deformací cévy a okrajovými podmínkami, tj. tlakem $p_{in} - p_e$ a tenzí T_z stanovíme z rovnic rovnováhy sil (39.3). V případě Cauchyho tenzoru napětí dostáváme

$$\begin{aligned}\frac{\partial t^{ik}}{\partial x^k} &= 0 \text{ pro } x \in \mathcal{V} \quad \dots \text{ céva, } i, k = r, \vartheta, z \\ p &= p_{in} \text{ pro } x \in \partial \mathcal{V}'_{in} \quad \dots \text{ vnitřní stěna cévy} \\ p &= p_e \text{ pro } x \in \partial \mathcal{V}'_e \quad \dots \text{ vnější stěna cévy}\end{aligned}\tag{39.47}$$

Za předpokladu, že $t^{ik}(r)$ je funkcí jen souřadnice r (závisí na poloměru), je rovnováha v radiálním směru

$$\frac{\partial t_{rr}}{\partial r} + \frac{t_{rr} - t_{\vartheta\vartheta}}{r} = 0\tag{39.48}$$

rovnováha v azimutálním směru

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 t_{r\theta}) = 0\tag{39.49}$$

a rovnováha v podélném směru

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r t_{rz}) = 0\tag{39.50}$$

Ze vztahů (39.49) a (39.50) pro složky tenzoru napětí plyne

$$t_{\vartheta r} = t_{r\vartheta} = \frac{d_\theta}{r^2}, \quad t_{zr} = t_{rz} = \frac{d_z}{r}\tag{39.51}$$

S ohledem na definici napětí (39.46) jsou konstanty $d_\theta = d_z = 0$

Integrací rovnice (39.48) přes tloušťku stěny cévy

$$\int_{r_{in}}^{r_e} \frac{\partial t_{rr}}{\partial r} dr = t_{rr,e} - t_{rr,in} = \int_{r_{in}}^{r_e} \frac{t_{\vartheta\vartheta} - t_{rr}}{r} dr\tag{39.52}$$

Označíme

$$t_{rr,e} = -p_e, \quad t_{rr,in} = -p\tag{39.53}$$

vnější a vnitřní tlak¹⁾.

Rovnováha sil v radiálním směru za předpokladu, že nedochází ke zkroucení, tj. $\gamma = 0$, je

$$p - p_e = \int_{r_{in}}^{r_e} \frac{t_{\vartheta\vartheta} - t_{rr}}{r} dr = \mu \int_{r_{in}}^{r_e} \left[\frac{2}{3} \frac{r^2}{R^2} - \frac{\lambda^4 r^2 + R^2}{3\lambda^2 r^2} - \frac{2}{3} \left(\frac{R}{\lambda r} \right)^2 + \frac{r^2 + \lambda^2 R^2}{3R^2} \right] \frac{dr}{r}\tag{39.54}$$

Zavedeme substituci $\tilde{r} = \frac{r}{R}$ a integrací dostáváme vztah

$$p - p_e = \frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{r_e}{R_e} \right)^2 - \left(\frac{r_{in}}{R_o} \right)^2 + \frac{1}{\lambda^2} \frac{R_e^2}{r_e^2} - \frac{1}{\lambda^2} \frac{R_o^2}{r_{in}^2} \right]\tag{39.55}$$

ve kterém musíme ještě uplatnit zákon zachování hmoty, který má pro válcovou tepnu tvar

$$R_e = R_o + h_o, \quad r_e = r_{in} + h \quad \text{platí } 2\pi R_o h_o = 2\pi r_{in} h\tag{39.56}$$

Dosazením do rovnováhy sil (39.55) a užitím přibližných vztahů

¹⁾ Vzhledem k orientaci stěn ve směru vnější normály působí tlak opačným směrem, proto jsou znaménka minus.

$$\frac{1}{R_e^2} = \frac{1}{(R_o + h)^2} = \frac{1}{R_o^2 \left(1 + \frac{h_o}{R_o}\right)^2} \doteq \frac{1}{R_o^2} \left(1 - 2\frac{h_o}{R_o}\right), \quad \frac{1}{r_{in}^2} \left(1 - 2\frac{R_o h_o}{r_{in}^2}\right) \quad (39.57)$$

a zanedbáním členů 2. řádu $\left(\frac{h_o}{R_o}\right)^2, \left(\frac{h_o}{r_{in}}\right)^2$ odvodíme

$$p - p_e = \frac{\mu h_o}{R_o} \left[1 + \left(\frac{R_o}{\lambda r_{in}}\right)^2 - \frac{r_{in}^2}{R_o^2} - \frac{R_o^4}{\lambda^2 r_{in}^4} \right]. \quad (39.58)$$

Vnitřní průřez tepny před deformací označíme A_o a po deformaci A , tedy

$$A_o = \pi R_o^2, \quad A = \pi r_{in}^2. \quad (39.59)$$

Konečný tvar rovnováhy vnějších sil (tlaků) na vnitřní a vnější stěně tepny (39.54) s elastickými silami tepenné stěny je

$$\begin{aligned} p - p_e &= \frac{\mu h_o}{R_o} \left(1 + \frac{A_o}{\lambda^2 A} - \frac{A}{A_o} - \frac{A_o^2}{\lambda^2 A^2} \right) = \frac{\mu h_o}{R_o} \left[1 - \alpha + \frac{1}{\alpha \lambda^2} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) \right] = \\ &= \Phi_{NH} \left(\frac{A}{A_o} \right), \quad \text{pro } \alpha = \frac{A}{A_o} \end{aligned} \quad (39.60)$$

Průběh veličiny $\frac{(p - p_e) R_o}{\mu h_o}$ charakterizující inflaci či kolaps je pro neo-Hookův materiál

(39.45) patrný z Obr. 4.4. Odtud je i zřejmé, že pro tento typ materiálů může tepna (obecně trubka) expandovat či kolabovat i při poklesu vnitřního tlaku. Tento model je vhodný k popisu aneurysma, které může jak růst tak se i zmenšovat aniž dochází k nárůstu vnitřního tlaku. Důvodem je skutečnost, že při nárůstu průřezu se zmenšuje stěna tepny a pro zachování rovnováhy sil se musí snižovat vnitřní tlak (vnitřní tlak p může být vzhledem k předpětí ve stěně tepny i nižší než tlak vnější p_e).

Poněkud jiný vztah dostaneme z prostého rozdílu tlaků (39.53) na vnější a vnitřní straně tepny. Tento rozdíl je roven hustotě mechanické energie bez uvažování jeho elastických deformací. Použitím stejného postupu jako při odvozování vztahu (39.58), tj. zachování hmoty (39.56) a zjednodušení (39.57) dostáváme

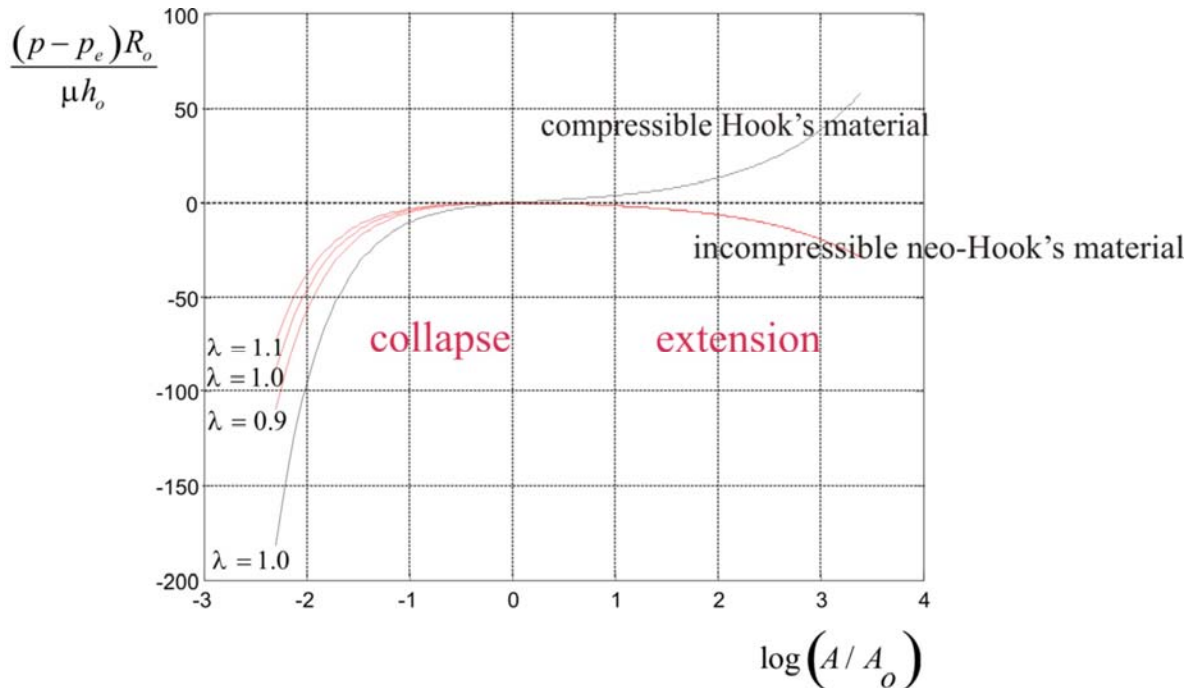
$$\begin{aligned} p - p_e &= -\frac{2h_o \mu}{R_o} \left[1 - \frac{A}{A_o} - \frac{A_o}{\lambda^2 A} \left(1 - \frac{A_o}{A} \right) \right] = \\ &= -\frac{2h_o \mu}{R_o} \left[1 - \alpha - \frac{1}{\lambda^2 \alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) \right] = \Phi_{eq} \left(\frac{A}{A_o} \right) \end{aligned} \quad (39.61)$$

Průběh normalizovaného tvaru $\frac{(p - p_e) R_o}{\mu h_o}$ této veličiny je uveden na Obr. 4.4. Odtud je

zřejmé, že proces inflace odpovídá nárůstu vnitřního tlaku a kolaps jeho poklesu.

Pro stanovení rychlosti vedoucí ke kolapsu tepny je třeba spočítat derivaci závislosti (39.61), která charakterizuje rychlost deformační vlny šířící se podél trubice, více viz. příklad 23. Tato rychlost je rovna

$$c_{eq} = \left(\frac{A_o}{\rho} \frac{\partial \Phi_{eq}}{\partial A} \right)^{1/2} = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi_{eq}}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=1} \right)^{1/2} = \left[\frac{2h_o \mu}{\rho R_o} \left(1 + \frac{1}{\lambda^2} \right) \right]^{1/2} \quad (39.62)$$



Obr. 4.4. Závislost velikosti rozdílu vnitřního a vnějšího tlaku $p - p_e$ v cévě na poměru průřezů cévy A/A_0 pro stlačitelný Hookův materiál (černá čára) a nestlačitelný neo-Hookův materiál (červená čára).

a pro závislost (39.60)

$$c_{NH} = \left(\frac{A_o}{\rho} \frac{\partial \Phi_{NH}}{\partial A} \right)^{1/2} = \left[\frac{h_o \mu}{\rho R_o} \left(\frac{1}{\lambda^2} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad (39.63)$$

Využití posledních dvou vztahů je možno využít k výpočtu podmínek kolapsu cévy v příkladech 8 a 23.

REFERENCES

- [1] Hayashi S., Hayase T., Kawamura H.: Numerical Analysis for Stability and Self-Excited Oscillation in Collapsible Tube Flow, J. of Biomech. Eng. **Vol. 120**, (1998) 468-475.
- [2] Colebrook C.F.: Turbulent Flow in Pipes with Particular Reference to the Transition Region Between the Smooth and Rough Pipe Law, J. Institute Civil Eng., (1939).
- [3] Štembera V., Maršík F., Chlup H.: One-dimensional mathematical model of the flow through a collapsible tube with applications to blood flow through human vessels, Proceedings of the conference *Topical Problems of Fluid Mechanics 2005*, Eds: J. Příhoda, K. Kozel, February 16-17, 2005, IT ASCR, ISBN 80-859018-92-7, pp. 115-118
- [4] Maršík F., Převorovská S., Brož Z., Štembera V.: Numerical Model of the Human Cardiovascular System-Korotkoff Sound Simulation, Cardiovascular Engineering: An International Journal, Vol. 4, No 2, June 2004, pp 193-199
- [5] Holzapfel GA, Gasser TC, Ogden RW (2000) A new constitutive framework for arterial wall mechanics and comparative study of material models. J. Elast. 61:1 – 48.

- [6] Horný L., Žitný R., Chlup, H.: Strain energy function for arterial walls based on limiting fiber extensibility. In IFMBE Proceedings [CD-ROM]. Berlin: Springer, 2008, p. 1910-
- [7] Holzapfel AG : Nonlinear solid mechanics. John Wiley & Sons, New York, 2000
- [8] Humphrey JD: Cardiovascular Solid Mechanics: Cells, Tissues, and Organs. Springer-Verlag, NY, 2002