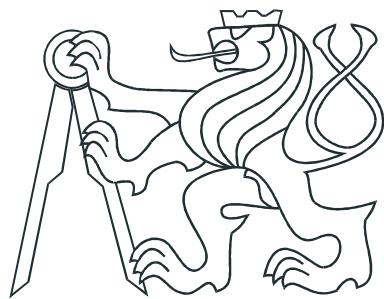


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ



BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Modelování a simulace pohybu soustav  
objektů v silových polích

Praha, 2011

Autor: Jan Kohout

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

V Praze dne 27.5.2011

Kohout

## **Poděkování**

Rád bych tímto poděkoval vedoucímu bakalářské práce doktoru Zdeňku Hurákovi za jeho věcné připomínky a podnětné nápady. Dále Jiřímu Zemánkovi za jeho cenné rady a postřehy. Vojtěchu Delongovi za jeho pomoc při hledání hardwarové platformy k základnímu testování simulací. Děkuji též rodině a přátelům za jejich podporu.

# Abstrakt

Tato práce se zabývá simulací pohybu objektů v řízených silových polích, a to s omezením na pohyb v rovině. Hlavním výstupem práce je sada funkcí v programovacím jazyce Matlab. Tyto funkce umožňují zadávat popis silových polí jak analyticky (coby funkční předpisy) tak i numericky (coby sadu numerických vzorků planárního silového pole) a generují trajektorie objektů v silovém poli. Funkčnost simulátoru je demonstrována na aplikačním případě dielektroforetické manipulace, kdy jsou elektricky neutrální ale polarizovatelné mikroskopické objekty vystaveny silovému působení nehomogenního elektrického pole. Práce obsahuje i funkce pro numerickou approximaci takového silového pole, která se vyhýbá nutnosti výpočetně náročného řešení Laplaceovy rovnice (pro stanovení intenzity elektrického pole).

# Abstract

This thesis deals with simulation of motion of objects in controlled force fields. The main outcome is a set of Matlab functions which allow describing the fields both analytically (giving a mathematical expression for the field) and numerically (giving a set of spatially sampled values of the field). The functions generate trajectories of the particles. Functionality of the simulator is demonstrated for the application domain of dielectrophoretic micromanipulation wherein uncharged yet polarizable microparticles feel some force when exposed to a nonhomogeneous electric field. The work also includes a routine for numerical approximation of the dielectrophoretic force field obviating the need to solve Laplace equation (in order to find the electric field intensity).

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta elektrotechnická

Katedra řídicí techniky

## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: Jan Kohout

Studijní program: Elektrotechnika a informatika (bakalářský), strukturovaný  
Obor: Kybernetika a měření

Název tématu: **Modelování a simulace pohybu soustav objektů v silových polích**

### Pokyny pro vypracování:

1. Vytvořte praktický softwarový nástroj pro matematické modelování a numerickou simulaci pohybu soustavy objektů v silovém poli. Pole i pohyb uvažujte pouze planární.
2. Kromě silové interakce pole a objektu uvažujte i interakci objektu a okolního média (například viskózní tření v kapalině) a interakci mezi blízkými objekty.
3. Pole uvažujte jak naprosto abstraktní (zadané numerickými hodnotami či matematickým výrazem), tak i několik konkrétních instancí, a to z aplikační oblasti dielektroforetické či magnetické manipulace manipulace. Počet objektů nechť je alespoň několik desítek.
4. SW platformu si můžete zvolit, ale doporučen je Matlab/Simulink. Výstupem práce tedy bude SW generující trajektorie sady objektů v reakci na zadané rovinné silové polem, případně časově proměnné.

### Seznam odborné literatury:

Y. Lin, G. Amberg, F. Aldaeus, a J. Roeraade, "Simulation of dielectrophoretic motion of microparticles using a molecular dynamics approach", in Proceedings of ICNMM2006, 2006.

Vedoucí: Ing. Zdeněk Hurák, Ph.D.

Platnost zadání: do konce zimního semestru 2011/2012

prof. Ing. Michael Šebek, DrSc.  
vedoucí katedry



prof. Ing. Boris Šimák, CSc.  
děkan



V Praze dne 11. 10. 2010

# Obsah

<b>1 Úvod</b>	<b>1</b>
1.1 Motivace a cíle . . . . .	1
1.2 Dosažené výsledky . . . . .	2
1.3 Struktura práce . . . . .	2
<b>2 Silová pole</b>	<b>3</b>
2.1 Druhy silových polí . . . . .	3
2.1.1 Skalární (potenciálové) pole . . . . .	3
2.1.2 Vektorové pole . . . . .	4
2.2 Příklad abstraktních potenciálových polí . . . . .	4
2.3 Příklad reálného pole . . . . .	5
2.4 Silové působení pole na objekt . . . . .	6
2.4.1 Translační pohyb . . . . .	6
2.4.2 Rotační pohyb . . . . .	7
2.4.3 Odpor prostředí . . . . .	7
2.4.4 Síly vzájemného působení . . . . .	7
<b>3 Dielektroforéza</b>	<b>8</b>
3.1 Typy dielektroforézy . . . . .	9
3.2 Uspořádání experimentů pro separaci objektů . . . . .	9
3.3 Matematický popis . . . . .	10
3.4 Výpočet pole vyvolávajícího dielektroforézu . . . . .	11
<b>4 Implementace v Matlabu</b>	<b>15</b>
4.1 Parametry simulace . . . . .	16
4.1.1 Typy objektů . . . . .	16

4.1.2	Počáteční podmínky . . . . .	16
4.1.3	Definice pole . . . . .	17
4.1.4	Definice a význam koeficientů . . . . .	17
4.1.5	Konstanty simulace . . . . .	18
4.1.6	Realizace objektu . . . . .	20
4.2	Spuštění simulace . . . . .	20
4.2.1	Průběh simulace . . . . .	20
4.2.2	Výstup simulace . . . . .	20
4.2.3	Zobrazení nasimulovaných dat . . . . .	21
4.3	Funkce pro výpočet pole pro dielektroforézu . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Simulace pohybu v planárních silových polích</b>	<b>23</b>
5.1	Simulace bez vzájemné interakce . . . . .	24
5.2	Simulace pohybu dipólu . . . . .	24
5.3	Simulace mezi-objektové interakce . . . . .	25
<b>6</b>	<b>Závěr</b>	<b>27</b>
<b>Literatura</b>		<b>28</b>
<b>A</b>	<b>Výstupní struktura simulace</b>	<b>I</b>
<b>B</b>	<b>Obsah přiloženého CD</b>	<b>II</b>

# Kapitola 1

## Úvod

### 1.1 Motivace a cíle

Cílem práce je vytvořit softwarový prostředek pro simulaci pohybu soustav objektů v silových polích jako základ pro další studium bezkontaktní manipulace pomocí dielektrického pole, které se v této práci také částečně věnujeme.

Pomocí mikrofluidické komůrky s mikroelektrodovým polem, sestavené na Katedře řídící techniky FEL ČVUT v rámci diplomové práce Jiřího Zemánka vedené doktorem Zdeňkem Hurákem, byly pořízeny videozáznamy pohybu polystyrenových kuliček o velikosti  $50\ \mu m$ . Kuličky byly umístěny v deionizované vodě a jejich pohyb byl způsoben právě dielektrickou silou. Jejich chování bychom rádi studiovali i teoreticky pomocí matematického modelu. Bez matematického modelu totiž není možné navrhnut automatické zpětnovazební řízení.

Tato práce by tedy měla dát základ softwarovému nástroji, pomocí něhož bude možné silové působení na zkoumaných objektech porovnat se skutečně pozorovaným chováním.

Simulace proto obsahuje nejen interakci objektů a vnějšího pole, ale též meziobjektovou interakci a interakci mezi objekty a médiem.

Modelování dielektrické síly je ale poměrně náročný problém. Analytický popis pole totiž existuje jen pro několik málo známých jednoduchých geometrických uspořádání elektrod. Rádi bychom ověřili, jak přesné jsou aproximace dielektrické síly, uvedené například v (Lin et al., 2006).

Proto se v této práci soustředíme hlavně na softwarovou platformu, která bude schopna nasimulovat pohyb objektů v obecných potenciálových polích s možností vstupu numericky zadaných hodnot silového pole. Numericky předpočítaný popis silového pole, například pomocí FEM (Finite Element Method), tak bude jedním z možných vstupů.

Software má tak dvě hlavní části - simulační, kdy je známa působící síla (zadána např. analytickým výrazem či numerickými hodnotami). Výstupem je potom soubor trajektorií objektů. Trajektorie objektů jsou pak ukládány ve formě souboru \*.mat, jehož

struktura je popsána v příloze A. Uživatel má ale možnost zobrazit si výstup také graficky, buď jako video (ve formátu avi) nebo jako statický obrázek Matlabu (\*.fig).

Druhou částí práce je výpočet intenzity elektrického pole a z něj odvozeného dielekstroforetického silového pole.

## 1.2 Dosažené výsledky

Vytvořili jsme simulační nástroj pro pozorování chování objektů v silových polích, včetně jejich vzájemné interakce. Studovat je možné objekty kruhové, čtvercové a chovající se jako dipoly. Simulovat je možno pohyb jednotlivých objektů, ale i několika desítek (délka simulace se ale samozřejmě roste s počtem simulovaných objektů). Nastavením konstant je uživateli ponechána naprostá volnost nad rozměrovou interpretací.

Implementovány jsou funkce pro vzájemné působení - ať už síla odpovídající gravitačnímu působení, nebo síla elektrostatická. Z reálné aplikace se podařilo implementovat funkce k výpočtu parametrů reálného silového pole dielekstroforetické síly a odpovídající intenzity elektrického pole.

## 1.3 Struktura práce

Ve druhé kapitole podáme stručnou klasifikaci silových polí vhodných pro naši práci. Dále se budeme věnovat možnostem jejich popisu. Protože vyvinutý softwarový nástroj směřujeme hlavně k dalšímu studiu dielekstroforezy, je třetí kapitola věnována stručnému popisu tohoto jevu. Jsou v ní shrnutý rovnice pro popis approximace reálného pole, schopného dielekstroforetickou sílu vyvolat. Na konci třetí kapitoly je k nahlédnutí grafický výsledek výpočtů. V další, čtvrté kapitole, se potom podíváme na samotnou implementaci simulace v Matlabu. Popíšeme vstupy a výstupy a nastíníme klíčové body simulace. Pátá kapitola je věnována ukázkám grafického výstupu simulace na některých zajímavých příkladech nastavení. Poslední kapitola je věnována závěru a shrnutí práce.

# Kapitola 2

## Silová pole

V této kapitole se budeme věnovat silovým polím. Cílem je představit možnosti popisu potenciálových silových polí.

### 2.1 Druhy silových polí

Matematicky je pole zobrazení, které každému bodu prostoru přiřadí dané hodnoty. Ve fyzice rozlišujeme dva hlavní typy silových polí - skalární a vektorové, které můžeme souhrnně označit jako pole tenzorová.

#### 2.1.1 Skalární (potenciálové) pole

”Je-li fyzikální vlastnost materiálních objektů (těles, soustavy, látky libovolného skupenství) nebo jiné fyzikální reality (gravitačního, elektrického, magnetického pole apod.) popsána v každém místě skalární veličinou, říkáme, že v prostoru je skalární pole příslušné veličiny.” (KRUPKA, F. a KALIVODA, L., 1989)

Skalární pole se tedy dá popsat jako funkce prostorových souřadnic:

$$f = f(x, y, z) \tag{2.1}$$

kde  $f$  je skalární veličina.

Příkladem skalárního pole může být třeba rozložení teploty nerovnoměrně zahřátého tělesa, potenciál elektrického či gravitačního pole atd.

Skalární pole je též někdy označováno jako potenciálové, protože k jeho popisu stačí právě funkce více proměnných, jakou potenciál je.

## 2.1.2 Vektorové pole

”Analogicky se skalárním polem je v prostoru vektorové tehdy, jestliže každému místu v prostoru je (místo skalární veličiny) přiřazen vektor jisté orientace a velikosti.” (KRUPKA, F. a KALIVODA, L., 1989)

Formální zápis takového pole má tedy tvar

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}(x, y, z), \quad (2.2)$$

kde  $\mathbf{f}$  je vektor.

Příkladem vektorového pole je třeba znázornění síly působící v silovém poli či například rozložení síly a směru větru na meteorologických mapách.

## 2.2 Příklad abstraktních potenciálových polí

V naší práci se omezujeme na silová pole, která jsou odvozena z potenciálových polí. Z potenciálových polí se omezujeme na ty, která lze popsat pomocí kvadratické formy

$$\mathbf{V} = [x \ y] \mathbf{A} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \mathbf{B}^T \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

kde  $x, y$  jsou souřadnice,  $\mathbf{A}$  je čtvercová matice  $2 \times 2$  (pro náš planární případ) a ovlivňuje kvadratický člen rovnice.  $\mathbf{B}$  je matice  $2 \times 1$  a jak zřejmo, ovlivňuje lineární člen výrazu.

Změnou definujících matic dle (2.3) můžeme samozřejmě snadno docílit změny potenciálu. Jedním z volitelných parametrů programu jsou právě i tyto dvě matice.

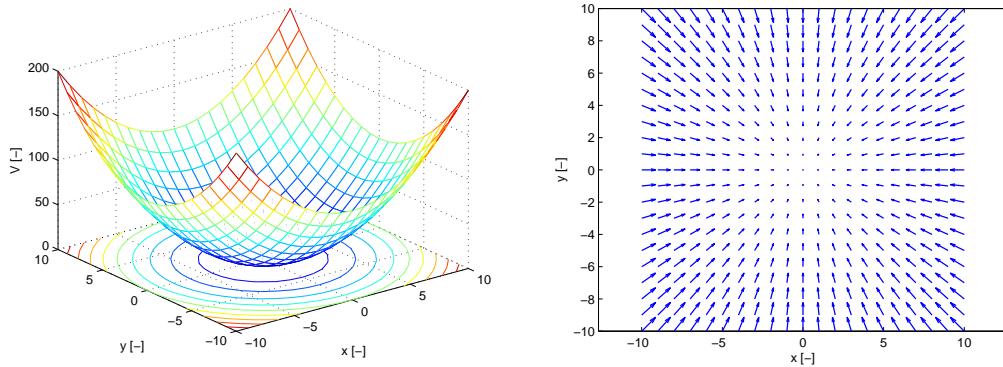
Výsledný tvar potenciálu závisí na vlastních číslech  $\lambda_i$  matice  $\mathbf{A}$ . Nás ale zajímají pouze skalární funkce, k jejichž vyjádření stačí symetrická matice  $\mathbf{A}$ . Symetrické matice mají pouze reálná vlastní čísla, proto v našem případě není třeba uvažovat případy  $\mathbf{A}$  s  $\lambda_i$  imaginární. Podívejme se tedy na jednotlivé zajímavé tvary takto zadaného potenciálu.

**Paraboloid** - je-li  $\lambda_1 > 0$  nebo  $\lambda_2 < 0$ , matice  $\mathbf{A}$  je pozitivně definitní. V naší simulaci je implementován jako

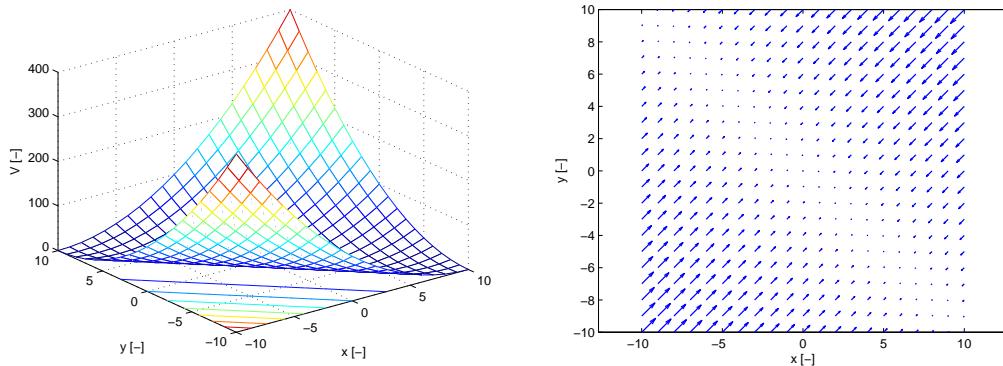
$$V(x, y) = x^2 + y^2, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

**Údolí** - je-li  $\lambda_1 > 0$  a  $\lambda_2 = 0$ , matice  $\mathbf{A}$  je semidefinitní. Potenciál tvaru údolí je v naší simulaci přímo implementován v základním tvaru

$$V(x, y) = x^2 + 2xy + y^2, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$



Obrázek 2.1: Pole typu paraboloid - popis potenciálem (vlevo) a intenzitou (vpravo).



Obrázek 2.2: Pole typu údolí - popis potenciálem (vlevo) a intenzitou (vpravo).

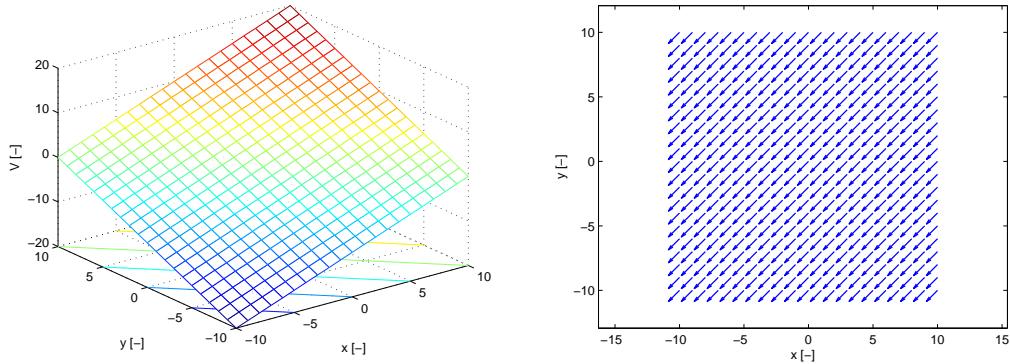
**Sedlo** je-li  $\lambda_1 > 0$  a  $\lambda_2 < 0$ , matice  $\mathbf{A}$  je indefinitní. Tento typ není v simulaci přímo implementován, je možné jej ale zadat pomocí vstupních matic  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$ .

**Nakloněná rovina** - je poslední pole přímo implementované v simulaci. K jeho popisu je matice  $\mathbf{A}$  nulová. Potenciál pole má následující matematický popis

$$V(x, y) = x + y, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

## 2.3 Příklad reálného pole

Protože naše práce je směřována k využití vyvinutého softwaru při dalším studiu dielektroforézy, budeme se věnovat popisu reálného pole, které vyvolává právě dielektroforézu. Dielektroforéza je ale oblast poměrně rozsáhlá, proto je jí věnována samostatná další kapitola.



Obrázek 2.3: Pole typu nakloněná rovina - popis potenciálem (vlevo) a intenzitou (vpravo).

## 2.4 Silové působení pole na objekt

Obecná síla se spočítá jako

$$\mathbf{F} = -\nabla V, \quad (2.7)$$

kde  $\mathbf{F}$  je vektor síly,  $\nabla$  označuje gradient,  $V$  je zmiňovaný potenciál. Derivací potenciálového pole  $V$  tedy dostáváme pole vektorové  $\mathbf{F}$ .

V případě, že pole uvažujeme jako diskrétní, je třeba připomenout, že  $\mathbf{F}$  ve výrazu (2.7) má význam silové hustoty. Tento přístup ale není tak abstraktní, jak se může zdát. Diskrétní silová pole existují - mechanickým příkladem může být třeba soustava trysek pro levitaci předmětů.

Pokud je pole spojité, síla se musí počítat integrací a v tom případě už bychom mohli hovořit o tom, že  $\mathbf{F}$  ve výrazu (2.7) má skutečně význam síly.

### 2.4.1 Translační pohyb

Translační pohyb popisuje pohybová rovnice

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F_x}{m} \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{F_y}{m} \quad (2.8)$$

kde  $\frac{d^2x}{dt^2}$ ,  $\frac{d^2y}{dt^2}$  je zrychlení ve směru osy x, resp. y,  $F_x$ ,  $F_y$  síla ve směru os působící na objekt a  $m$  je hmotnost, respektive náboj pro případ simulace ve významu elektrického pole.

Problém jsme řešili planárně, proto je síla rozdělena pouze na dvě složky (podle os). Výslednou sílu jsme určili jako součet sil (resp. silových hustot) působících na všechny elementy objektu.

### 2.4.2 Rotační pohyb

Rotační pohyb popisuje pohybová rovnice

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} = \frac{M}{J} \quad (2.9)$$

kde  $M$  je výsledný moment sil působících na objekt,  $J$  moment setrvačnosti,  $\frac{d^2\varphi}{dt^2}$  úhlové zrychlení.

Pro moment potom platí

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}, \quad (2.10)$$

kde velikost polohového vektoru  $\mathbf{r}$  je rameno působící síly a  $\mathbf{F}$  působící síla.

### 2.4.3 Odpornost prostředí

Pro pomalý pohyb kulového objektu v kapalině, kdy dochází k laminárnímu proudění, platí pro velikost odporové síly vztah

$$F_o = k v, \quad (2.11)$$

kde koeficient  $k$  závisí na dynamické viskozitě kapaliny a poloměru objektu a  $v$  je rychlosť objektu.

Pro rychlejší pohyb objektu přechází v kvadratickou závislost na rychlosti

$$F_o = k v^2, \quad (2.12)$$

kde koeficient  $k$  závisí na tvaru objektu, jeho průřezu a hustotě kapaliny a  $v$  je rychlosť objektu.

### 2.4.4 Síly vzájemného působení

Mezi síly vzájemného působení mezi dvěma objekty patří gravitační síla, jejíž velikost se dá vyjádřit jako

$$F_g = \frac{k}{r^2}, \quad (2.13)$$

kde  $k = \kappa m_1 m_2$ . Pak  $\kappa$  je gravitační konstanta,  $m_1, m_2$  jsou hmotnosti objektů a konečně  $r$  jejich vzdálenost.

Velikost elektrostatické síly je

$$F = \frac{k}{r^2}, \quad (2.14)$$

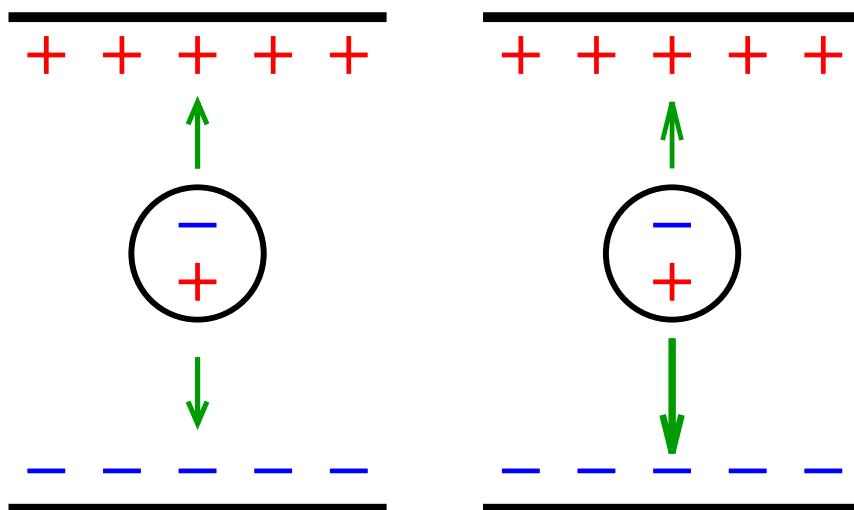
kde  $k = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$ . Pak  $\epsilon_0$  je permitivita vakua,  $q_1, q_2$  velikost náboje objektů a  $r$  jejich vzdálenost.

# Kapitola 3

## Dielekstroforéza

Zatímco elektroforéza je síla působící pouze na nabité objekty, dielekstroforéza působí i na objekty celkově elektricky neutrální, stačí jen, aby byly polarizovatelné. Principem je působení časově proměnného elektrického pole, jehož vlivem dochází k polarizaci objektů, které vyvolává dielekstroforetickou sílu.

Jestliže je intenzita elektrického pole homogenní, vyrovnejí se působící síly (na obrázku 3.1 vlevo). Pokud je intenzita elektrického pole ale nehomogenní, začne síla v jednom směru převládat (na obrázku 3.1 vpravo). Podle toho, kam směřuje výslednice sil, se také nazývá dielekstroforéza buď pozitivní nebo negativní.



Obrázek 3.1: Vlevo: polarizovatelná částice v poli s homogenní elektrickou intenzitou. Zeleně jsou naznačeny velikosti působící síly, výslednice je nulová.

Vpravo: polarizovatelná částice v poli s nehomogenní elektrickou intenzitou. Zeleně jsou naznačeny velikosti působící síly, výslednice je nenulová.

### 3.1 Typy dielektroforézy

Rozlišujeme tři typy dielektroforézy: pozitivní, negativní a s postupnou vlnou.

**Pozitivní dielektroforéza** - děj, kdy je objekt přitahován do prostoru s vysokým gradientem elektrické intenzity. Charakteristické je, že pro tento typ je reálná část (3.2) kladná.

**Negativní dielektroforéza** - objekt je z prostoru s vysokým gradientem elektrické intenzity naopak vypuzován. Pro tento typ je reálná část (3.2) záporná.

Oba uvedené typy se označují jako konvenční část (působící ve vertikálním směru vzhledem k elektrodám) a jsou závislé na gradientu *amplitudy* intenzity elektrického pole.

**Dielektroforéza s postupnou vlnou** - (angl. travelling wave dielectrophoresis) označovaná  $F_{TW}$ , závisí na gradientu *fáze* intenzity elektrického pole. Technické řešení je tak náročnější - je třeba více kanálů zdroje, který pole vytváří.

Pomocí změny fáze se ale dá docílit velice zajímavého chování - separace objektů, ale i třeba naopak jejich shlukování či paralelních přesunů celých soustav objektů. Z hlediska pohybu se tedy jedná o pohyb napříč elektrodami.

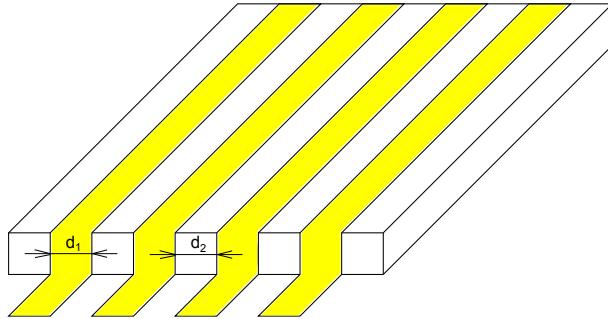
### 3.2 Uspořádání experimentů pro separaci objektů

Pro názornost porovnáme uspořádání s elektroforézou. Uspořádání experimentu pro separaci objektů pomocí elektroforézy je relativně jednoduché: dvě elektrody na koncích nádoby s médiem, ve kterém plavou pozorované objekty. Na elektrody je přiváděn stejnosměrný proud, vlivem něhož dochází k oddělení kladně a záporně nabitéch objektů.

Uspořádání experimentu pro pozorování dielektroforézy je odlišné. V dielektroforéze jsou elektrody většinou umístěny pod médiem, ve kterém opět plavou pozorované objekty. Ovšem geometrické uspořádání elektrod zásadním způsobem ovlivňuje další působení.

To je také jedním z problémů, které je třeba při simulaci skutečné dielektrické síly řešit. Analytické popisy pole jsou většinou pouhou approximací a platí jen pro konkrétní geometrická uspořádání elektrod. Řešením může být numerický výpočet pomocí FEM, ten je ale výpočetně náročný. V této práci jsme se jím nezabývali.

Z popisu výše vyplývá, že pro manipulaci, tedy chceme-li, aby objekty levitovaly a zároveň konaly posuvný pohyb, je nutné vyvolat jak dielektroforézu konvenční, tak dielektroforézu s postupnou vlnou. Na elektrody je přiváděn střídavý proud, který při patřičné fázové modulaci může způsobit potřebné unášení objektů či jejich třídění na základě různých elektrických vlastností.



Obrázek 3.2: Geometrické usporádání elektrod. Žlutou barvou jsou označeny elektrody.

### 3.3 Matematický popis

Obecně dielektroforéza závisí na frekvenci změny elektrického pole vytváří a také na vlastnostech objektů a média (Lin et al., 2006).

Působení dielektroforetické síly je popsáno rovnicí

$$F_{DEP} = 4\pi r^3 \epsilon_m \beta \mathbf{E} \cdot \nabla \mathbf{E}, \quad (3.1)$$

kde  $r$  je poloměr objektů,  $\epsilon_m$  je permitivita média a  $\mathbf{E}$  je intenzita vnějšího elektrického pole (Lin et al., 2006).  $\beta$  je Clausius-Mossottiho funkce

$$\beta(\omega) = \frac{\left(\epsilon_p + \frac{\sigma_p}{\omega}\right) - \left(\epsilon_m + \frac{\sigma_m}{\omega}\right)}{\left(\epsilon_p + \frac{\sigma_p}{\omega}\right) + 2\left(\epsilon_m + \frac{\sigma_m}{\omega}\right)}, \quad (3.2)$$

kde  $\epsilon_p$  je permitivita objektů,  $\epsilon_m$  permitivita média,  $\sigma_p$  vodivost objektů a  $\sigma_m$  vodivost média (Chang et al., 2003).

Vztahy níže platí pro soustavu podélně uložených elektrod s konstantní šírkou a konstantními mezerami mezi sebou - viz obrázek 3.2. Šířka elektrod (na obrázku i dále označena jako  $d_1$ ) by měla být zanedbatelná vůči jejich délce. Šířku mezery mezi elektrodami budeme označovat jako  $d_2$ .

Pro takovéto geometrické usporádání, které je schopné vyvolat dielektroforézu s postupnou vlnou, byly v (Chang et al., 2003) odvozeny následující vztahy:

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \mathbf{E}^C(x, y) \cos(\omega t) + \mathbf{E}^S(x, y) \sin(\omega t), \quad (3.3)$$

kde

$$\mathbf{E}^C = \left[ \begin{array}{c} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+1)\pi}{4d} A_{2m+1} \sin\left(\frac{(2m+1)\pi x}{4d}\right) \exp\left(-\frac{(2m+1)\pi y}{4d}\right) \\ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+1)\pi}{4d} A_{2m+1} \cos\left(\frac{(2m+1)\pi x}{4d}\right) \exp\left(-\frac{(2m+1)\pi y}{4d}\right) \end{array} \right], \quad (3.4)$$

$$\mathbf{E}^S = \left[ \begin{array}{c} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+1)\pi}{4d} A_{2m+1} (-1)^{2m+1} \cos\left(\frac{(2m+1)\pi x}{4d}\right) \exp\left(-\frac{(2m+1)\pi y}{4d}\right) \\ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m+1)\pi}{4d} A_{2m+1} (-1)^m \sin\left(\frac{(2m+1)\pi x}{4d}\right) \exp\left(-\frac{(2m+1)\pi y}{4d}\right) \end{array} \right], \quad (3.5)$$

$$A_{2m+1} = \frac{16 V_0 d}{(2m+1)^2 \pi^2 d_2} \times \left( \cos\left(\frac{(2m+1)\pi d_1}{8d}\right) - \cos\left(\frac{(2m+1)\pi(d_1+2d_2)}{8d}\right) \right). \quad (3.6)$$

Pro TW dielektroforézu byl ve stejném článku odvozen vztah

$$\langle \mathbf{F}_{DEP} \rangle = \frac{2 V_0^2}{\pi d (d_2)^2} \operatorname{Re}[G(\omega)] \times \operatorname{Re} \begin{bmatrix} i z f(\bar{z}) f'(z) + z f(i \bar{z}) f'(i z) \\ -z f(\bar{z}) f'(z) + i z f(i \bar{z}) f'(i z) \end{bmatrix} + \frac{2 V_0^2}{\pi d (d_2)^2} \operatorname{Im}[G(\omega)] \operatorname{Re} \begin{bmatrix} i z f(i \bar{z}) f'(z) + z f(\bar{z}) f'(i z) \\ -z f(i \bar{z}) f'(z) + i z f(\bar{z}) f'(i z) \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

(ostré závorky znázorňují bezčasovou verzi, jedná se tedy o průměrnou hodnotu za dobu jedné periody změny pole - viz (Chang a Lorie, 2003)). Dále

$$z = \exp\left(\frac{\pi(i x - y)}{4d}\right) \quad \bar{z} = \exp\left(\frac{-\pi(i x + y)}{4d}\right), \quad (3.8)$$

kde  $x$  a  $y$  jsou souřadnice,

$$d = \frac{d_1 + d_2}{2} \quad q = \frac{d_1}{2d} \quad (3.9)$$

kde  $d_1$  je šířka elektrody,  $d_2$  je mezera mezi dvěma sousedními elektrodami.

Dále

$$f(z) = h\left(z, \frac{d_1}{8d}\right) - h\left(z, \frac{d_1 + 2d_2}{8d}\right), \quad (3.10)$$

$$f' = -\frac{\left(z^2-1\right) \left(\cos\left(\frac{\pi d_1}{8d}\right)-\cos\left(\frac{\pi (d_1+2d_2)}{8d}\right)\right) \left(2 z^2+z^4+4 z^2 \cos\left(\frac{\pi d_1}{8d}\right) \cos\left(\frac{\pi (d_1+2d_2)}{8d}\right)+1\right)}{\left(z^4-4 z^2 \cos\left(\frac{\pi d_1}{8d}\right)^2+2 z^2+1\right) \left(z^4-4 z^2 \cos\left(\frac{\pi (d_1+2d_2)}{8d}\right)^2+2 z^2+1\right)}, \quad (3.11)$$

$$h(z, q) = \frac{1}{4} \log \left( \frac{1 + 2z \cos(q\pi) + z^2}{1 - 2z \cos(q\pi) + z^2} \right). \quad (3.12)$$

Pro zájemce o bližší seznámení s dielektroforézou odkážeme na literaturu (POHL, H., 1978).

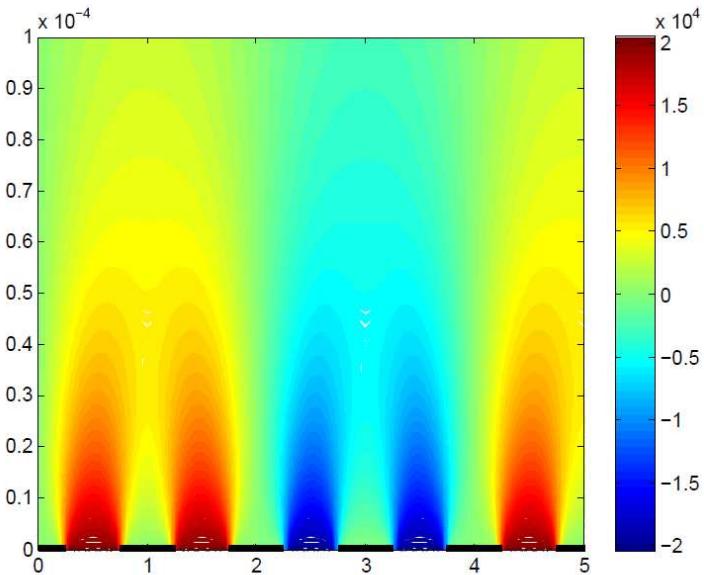
## 3.4 Výpočet pole vyvolávajícího dielektroforézu

V této části uvádíme ukázky výpočtu dielektroforetické síly - jedná se o příklad dielektroforézy s postupnou vlnou s následujícími parametry: poloměr kuličky  $r = 25 \cdot 10^{-6} m$ , potenciál  $V_0 = 1 V$ , šířka elektrody (na obrázcích označeny černými ploškami)

$d_1 = 50 \mu m$ , vzdálenost mezi sousedními elektrodami  $d_2 = 50 \mu m$ , relativní permitivita kuliček  $\epsilon_{r_p} = 2.5$ , vodivost kuliček  $\sigma_p = 0.8 mSm^{-1}$ , relativní permitivita média  $\epsilon_m = 80$ , vodivost média  $\sigma_m = 5.5 \mu Sm^{-1}$ ,  $\omega = 10^6$ .

Síla je vykreslována od výšky  $20 \mu m$ , protože níže dosahuje příliš vysokých hodnot a vykreslením od  $y = 0$  by nebyl patrný její další průběh ve větší výšce.

Pro porovnání srovnáme vypočítanou sílu s daty z programu Comsol, který dielektroforetickou sílu počítá numericky. Data poskytl Jiří Zemánek.



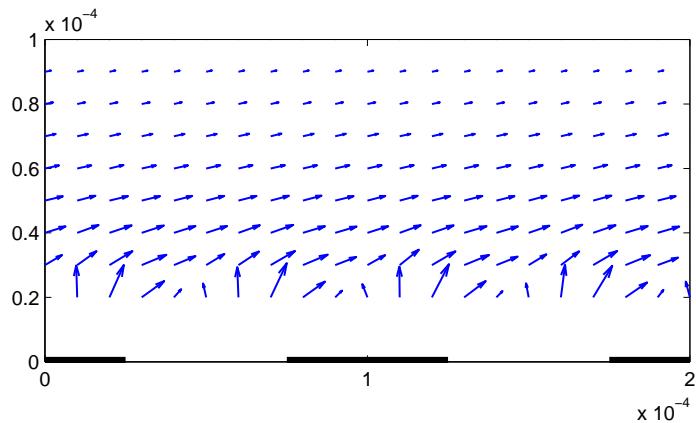
Obrázek 3.3: Intenzita elektrického pole. Parametry nastaveny pro dielektroforézu s postupnou vlnou.

Na obrázku 3.3 je vidět velikost intenzity elektrického pole v čase  $t = 0 s$  vyvolávajícího dielektroforetickou sílu.

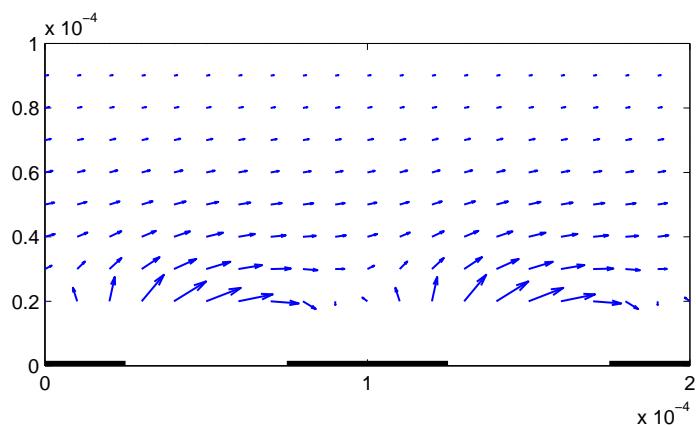
Na obrázku 3.4 je vidět výpočet velikosti dielektroforetické síly, získané numerickými metodami v programu Comsol. Na obrázku 3.5 je potom tatáž síla, vypočítaná ale v Matlabu za pomocí naší funkce pro výpočet dielektroforetické síly dle (3.7). Vidíme, že co se týče směru, oba výpočty si přibližně odpovídají. Různá velikost vykreslených šipek může být způsobena změnami měřítka při vykreslování.

Na obrázcích 3.6 a 3.7 je detailně vykreslena velikost dielektroforetické síly ve výšce  $10^{-5} m$  nad elektrodami pro podrobnější porovnání výpočtu pomocí aproximace (3.7) a v programu Comsol. Vidíme, že řádově velikost síly souhlasí, průběh se ale v některých částech dost liší. To je způsobeno jednak approximací a jednak patrně i zkreslením měřítka a numerickými chybami při výpočtu (nacházíme se ve velmi malém řádu). Možné ale je, že nastala chyba v implementaci výpočetních funkcí.

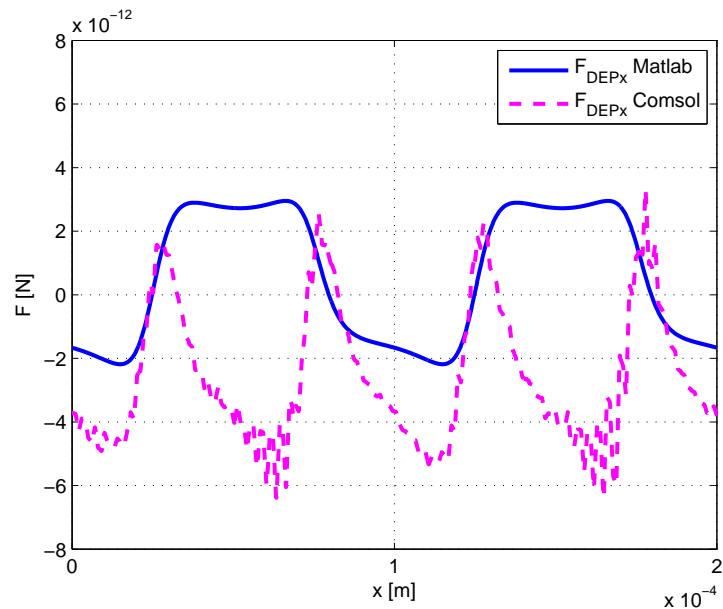
K výpočtu intenzity elektrického pole a dielektroforetické síly byly použity funkce, jejichž implementace je popsána v kapitole 4.3.



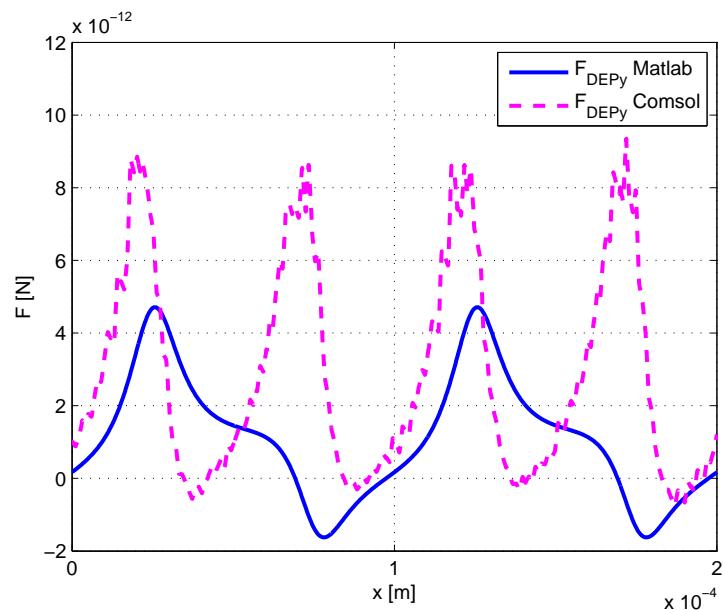
Obrázek 3.4: Velikost dielektrické síly vypočítaná v programu Comsol metodou FEM (data poskytl Jiří Zemánek). Vykreslováno od výšky  $20 \mu m$ .



Obrázek 3.5: Vypočítaná velikost dielektrické síly pomocí naší funkce napsané v Matlabu - dle vztahu (3.7). Vykreslováno od výšky  $20 \mu m$ .



Obrázek 3.6: Porovnání x-ové složky velikosti dielektrické sily ve výšce  $10^{-5} m$  nad elektrodamami.



Obrázek 3.7: Porovnání y-ové složky velikosti dielektrické sily ve výšce  $10^{-5} m$  nad elektrodamami.

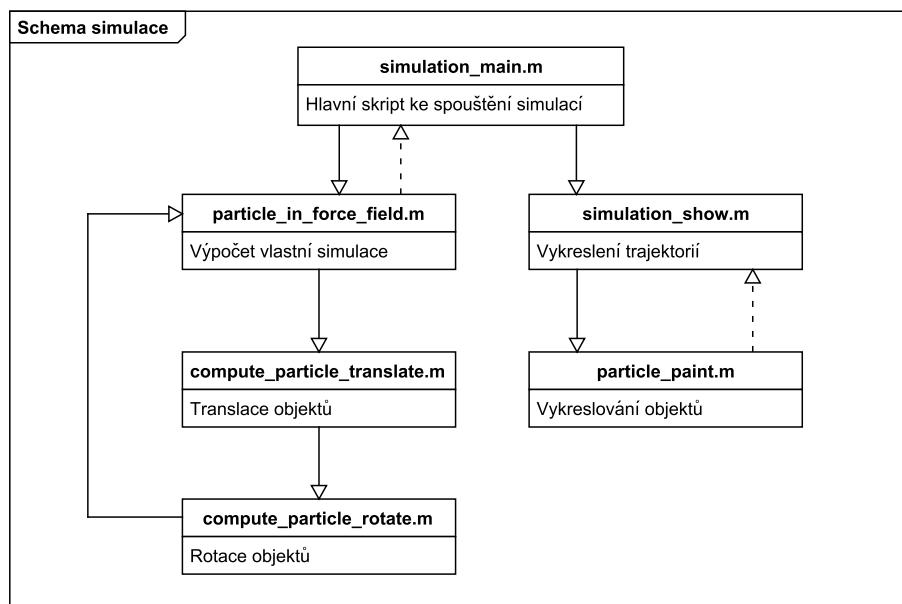
# Kapitola 4

## Implementace v Matlabu

Realizace se skládá ze souboru funkcí, které zajišťují dílčí výpočty a jsou tak použitelné i samostatně. Hlavní m-file *simulation\_start.m* pak slouží k nastavení a spuštění simulace.

Vstupem může být zadání abstraktního pole nebo pole, zadaného numerickými hodnotami a další parametry (viz 4.1) a výstupem je struktura obsahující soubor trajektorií objektů. Trajektorie je možné také zobrazit jako obrázek či videosekvenci.

Funkce, které se při simulaci používají cyklicky, mají zjednodušenou kontrolu vstupních parametrů. Jsou tedy použitelné i samostatně, je ale nutno dbát zvýšené opatrnosti. Zdrojový kód je psán a komentován v angličtině.



Obrázek 4.1: Schema hlavních souborů simulace. Plné šipky značí směr vykonávání programu, čárkované zpětné volání hlavních funkcí.

Hlavním výkonným souborem je *particle\_in\_force\_field.m*, který zajišťuje kompletní výpočet simulace. Používá se jako funkce s volitelnými parametry. Jeho jádrem je solver obyčejných diferenciálních rovnic, ODE45, který je založena na Runge-Knuttově metodě s proměnným krokem.

## 4.1 Parametry simulace

Povolené i výchozí hodnoty parametrů, naleznete přímo v komentářích souboru *simulation\_start.m*, případně příslušných funkcí.

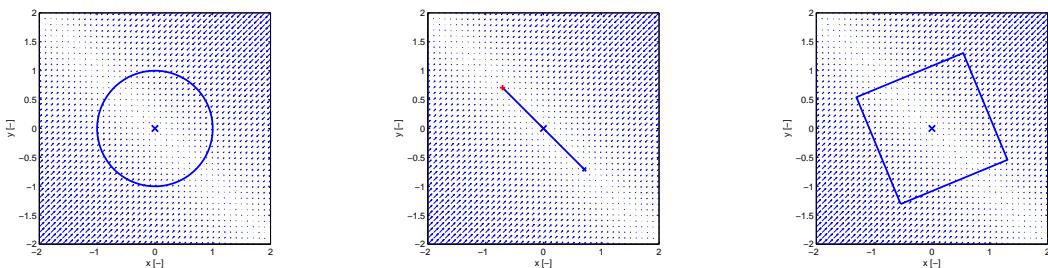
### 4.1.1 Typy objektů

V simulaci je možné nastavit tři typy objektů: kruhovitý, čtvercový a dipól.

**Kruhovitý** slouží k simulaci se zanedbáním rotačního pohybu, čtvercový naopak. Ve svém principu se pro zanedbatelné rozdíly při malých velikostech oba počítají jako stejně velká plocha.

**Čtvercový** slouží k simulaci s vlivem rotačního pohybu.

**Dipól** má jen dvě elementární plošky, jedna reprezentuje kladný náboj, druhá náboj záporný. Parametr *ParticleSize* v případě typu objektu dipól znamená vzdálenost mezi oběma náboji.



Obrázek 4.2: Ukázka typů objektů (postupně zleva: kruhovitý, dipól po-otočený o  $\frac{\pi}{4}$ , čtvercový pootočený o  $\frac{\pi}{8}$  ).

### 4.1.2 Počáteční podmínky

Počáteční podmínky se udávají jako matice  $n \times m$ , kde každý řádek představuje vektor počátečních podmínek pro jednotlivé objekty.

Vektor počátečních podmínek pro každý objekt je

$$[x_0 \ y_0 \ v_{x0} \ v_{y0} \ \phi_0 \ \omega_0],$$

kde  $x_0, y_0$  je počáteční poloha na ose  $x$ , respektive  $y$ ,  $v_{x0}, v_{y0}$  počáteční rychlosť ve smereu příslušné osy,  $\phi$  počáteční úhel natočení objektu a  $\omega_0$  počáteční úhlová rychlosť objektu.

Výchozí nastavení vektoru počátečních podmínek je:

```
InitialCondition = [2 2 0 0 0 0; -2 -2 0 0 0 0];
```

tedy dva objekty v poloze  $[2 \ 2]$ ,  $[-2 \ -2]$ .

### 4.1.3 Definice pole

Definovat vnější silové pole je možné několika způsoby:

**slovně** - nastavením parametru *FieldShape*. Možné tvary potenciálu pole jsou:

```
FieldShape = 'plane'; % naklonena rovina
FieldShape = 'paraboloid'; % paraboloid
FieldShape = 'valley'; % udoli
FieldShape = 'none'; % zadny
```

**maticemi** - potenciál pole je také možné zadat s pomocí matic dle 2.3, nastavením parametrů *FieldShapeMatrixLinear* a *FieldShapeMatrixQuadratic*.

**numericky** - nastavením parametru

```
ExternalForce = true;
```

a vyplněním požadovaných dat v souboru *data\_force\_external.m* (syntaxe popsána přímo v tomto souboru).

### 4.1.4 Definice a význam koeficientů

**Koeficient odpuzování** *RepulsiveCoef* má zabránit srážce objektů, působí do vzdálenosti  $4r$ , kde  $r$  je velikost objektu (*ParticleSize*).

$$F_{repuls} = K e^{-R}; \quad (4.1)$$

kde  $K$  je hodnota parametru *RepulsiveCoef* a  $R$  je vzájemná vzdálenost středů objektů.

**Koeficient mezi-objektového působení** vyjadřuje působení jednoho objektu na druhý, může mít význam gravitační síly dle (2.13) nebo elektrostatické (2.14). Nastavuje se parametrem

Tabulka 4.1: Přehled obecných nastavení simulace

Parametr	Popis
SimulationName	název simulace (bude použit jako začátek názvu výstupních souborů)
ProjectFolder	název výstupního adresáře simulace (relativně vůči umístění skriptu)
DatetimeStamp	nastavení časového razítka (umožňuje vícenásobné spouštění simulace bez nutnosti přejmenování výstupních souborů)
PrintToConsole	povolí/zakáže textový výstup do konzole (neplatí pro error a warning hlášení)
PrintToLog	povolí/zakáže zápis průběhu simulace do souboru *.log (jméno jako výstupní soubor *.mat)

```
InterParticleCoef .
```

Je-li nastaveno

```
ParticleType = 'd' ;
```

rozlišuje se, zda dochází k odpuzování nebo přitahování (viz definice dipolu).

**Odpor prostředí** byl přidán kvůli simulaci pohybu objektů kapalinou dle (2.11) nebo (2.12). Nastavuje se dvěma parametry:

```
ResistanceRelation = 0;
ResistanceCoef = 0;
```

Prvním lze nastavit závislost odporu prostředí na rychlosti objektu (0 - žádná, vypnuto, 1 - lineární, 2 - kvadratická), druhý určuje velikost koeficientu odporové síly.

#### 4.1.5 Konstanty simulace

Veškeré používané konstanty pro výpočet simulace, stejně jako pro výpočet pole pro dielektroforézu, se nachází v souboru *simulation\_constants.m*. Jeho změnou tak můžeme snadno pozměnit fyzikální význam výstupní simulace.

Tabulka 4.2: Přehled nastavení parametrů vlastní simulace

Parametr	Popis
SimulationTime	čas trvání simulace v sekundách
InitialCondition	počáteční podmínky (viz 4.1.2)
ParticleSize	velikost objektů
SimulateRotation	povolí/zakáže simulaci otáčení objektů
ParticleType	typ simulovaných objektů ('d' - dipól; 'c' - kulička; 's' - čtvercový objekt)
FieldShape	tvar vnějšího silového pole ('paraboloid' - paraboloid; 'valley' - údolí; 'plane' - nakloněná rovina; 'none' - bez vnějšího pole)
ExternalForce	povolí/zakáže použití numerického zadání vnější funkce
FieldShapeMatrixLinear	matice ovlivňující lineární člen potenciálu pole
FieldShapeMatrixQuadratic	matice ovlivňující lineární člen potenciálu pole
RepulsiveCoef	koeficient odpuzování objektů (proti kolizím)
InterParticleCoef	koeficient meziobjektového působení
ResistanceRelation	závislost odporu prostředí na rychlosti pohybu objektů
ResistanceCoef	koeficient odporu prostředí

### 4.1.6 Realizace objektu

Objekt jsme realizovali jako strukturu *PO* (particle object). Ve struktuře objektu je zachovávána informace o současné poloze všech elementárních ploch objektu na ose (*PO.x* a *PO.y*), úhlu natočení v radiánech (*PO.angle*), typu objektu (*PO.shape*), poloze středu objektu (*PO.S*) a velikosti objektu (*PO.r*), která odpovídá inicializačnímu parametru simulace *ParticleSize*.

Samotný objekt je tedy reprezentován maticí, kdy každý prvek představuje elementární plochu  $1 \times 1$  (skutečný rozměr záleží na volbě celkového měřítka a dalších konstant). Nastavením parametru *ParticleSize* se nastavuje velikost poloměru objektu (resp. pro čtvercový objekt polovina délky strany).

```
ParticleSystem = 1;
```

se tedy jedná o 9 elementárních plošek (jedna ploška ve středu a poloměr 1), pro

```
ParticleSystem = 2;
```

potom 25 a tak dále.

## 4.2 Spuštění simulace

Vlastní simulace se spouští pomocí hlavního souborem *simulation\_main.m*.

### 4.2.1 Průběh simulace

O průběhu simulace je uživatel informován po celou dobu běhu simulace formou procentuálního zobrazení v konzoli a času uplynulého od počátku simulace. Protože použitý solver používá variabilní krok, může se stát, že chvílemi zobrazovaný průběh simulace "zpomaluje" či "zrychluje".

### 4.2.2 Výstup simulace

Výstupem simulace je struktura s uloženými trajektoriemi objektů. Připojeny jsou další důležité informace o parametrech simulace a jejím průběhu. Viz příloha.

Je-li povoleno (viz 4.1), ukládá se do příslušné složky soubor s daty simulace (\*.mat, \*.dat). Struktura souboru \*.mat je popsána v příloze A. Celkem tři datové soubory \*\_x.dat, \*\_y.dat a \*\_t.dat obsahují postupně souřadnice trajektorií objektů v ose x, y a časový vektor. Každý sloupec odpovídá jednomu objektu.

```

MATLAB 7.9.0 (R2009b)
File Edit Debug Parallel Desktop Window Help
Done.
Initialization...
Simulation name: simulace
Project dir: desitky
Export to mat file: desitky/simulace_11-05-24_09-51-20.mat

SIMULATION:
Simulate_rotation: 0
Type of particles: s
Size of particles: 1

Init condition:
x0      y0      vx0      vy0      phi0      w0
-2.000  -2.000  0.000   0.000   0.000   0.000
-2.000   2.000  0.000   0.000   0.000   0.000
 2.000  -2.000  0.000   0.000   0.000   0.000
 2.000   2.000  0.000   0.000   0.000   0.000

Force - potencial of external field
V = x^2 + (2*y)*x + y^2

COEFFICIENTS:
InterParticleCoef: 1.00
RepulsiveCoef: 0.00
ResistanceRelation: 0.00
ResistanceCoef: 0.10

Time of simulation: 1.00 s
Count of particles: 4

Start of simulation...
100%    36s
fx Time of simulation:
Start

```

Obrázek 4.3: Průběh simulace v konzoli.

Dále je po skončení simulace ukládán textový log o jejím průběhu (\*.log). Po zobrazení simulace potom naposledy vytvořený snímek (\*.fig) a případně video (\*.avi).

Hvězdičky v názvech souborů jsou automaticky generované názvy složené z názvu simulace, časové značky (je-li nastaveno) a popřípadě číselné přípony.

### 4.2.3 Zobrazení nasimulovaných dat

O zobrazení nasimulovaných dat se stará funkce *simulation\_show.m*. Zobrazení je možné ovlivnit nepovinnými vstupními parametry - viz tabulka 4.3. Též je možné kdykoli výsledek simulace zobrazit z uložených dat (soubor \*.mat).

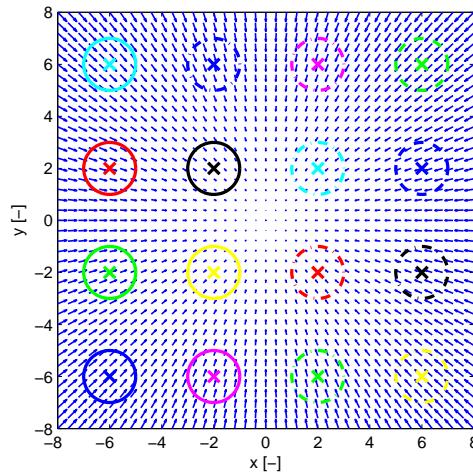
## 4.3 Funkce pro výpočet pole pro dielektrického řady

Pro výpočet intenzity elektrického pole dle (3.3) slouží funkce

```
function [Ex ,Ey] = compute_E(x ,y ,t ,m_param) .
```

Vstupem jsou souřadnice  $x$ ,  $y$  a čas  $t$ . Poslední parametr slouží k určení počtu nekonečné řady dle (3.3), se kterými se bude počítat.

Pro výpočet dielektrické sily je dle (3.7) implementována funkce



Obrázek 4.4: Příklad grafického výstupu simulace.

Tabulka 4.3: Přehled nastavení zobrazení simulace

Parametr	Popis
SimulationData	relativní cesta k souboru s daty simulace
StartTime	čas, od kterého se simulace zobrazuje (spolu s nastavením <i>Frames</i> =1 lze využít při zobrazení statického obrázku v daném čase)
Frames	počet snímků zachycených ve videu
HoldOn	určuje, zda jsou objekty vykreslovány v každém snímku, nebo až v posledním
ShowTrajectory	povolí/zakáže zobrazení trajektorie objektů.
PlotStyle	nastavení stylu vykreslování (analogicky jako funkce <i>plot</i> v Matlabu) - plot style
LineWidth	tloušťka čáry vykreslovaných objektů
ForceMeshSteps	krok mřížky silového pole (pro vykreslování)

```
function [Fx,Fy] = compute_F_DEP(x,y).
```

Vstupem funkce jsou souřadnice  $x$  a  $y$ , možný je i vstup více souřadnic najedou. Výstupem je velikost síly v daných osách.

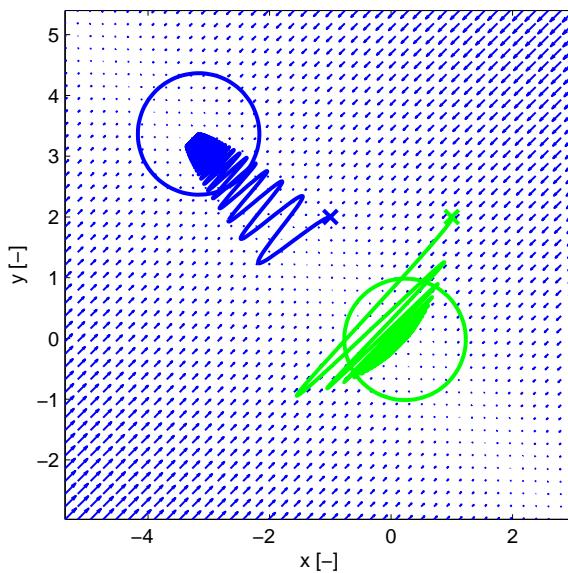
Nastavení konstant obou výše zmíněných funkcí se provádí v souboru *simulation\_constants.m*.

Pro zobrazení příkladu elektrického pole lze využít pomocného skriptu *show\_E.m*, respektive *show\_F\_DEP.m*. Výsledky výpočtů jsme již uvedli v 3.4.

# Kapitola 5

## Simulace pohybu v planárních silových polích

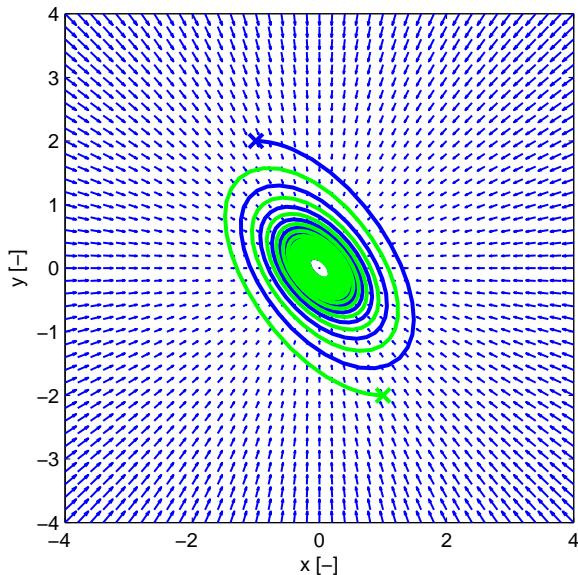
Vyvinutý softwarový nástroj slouží k simulaci jak obecných polí, tak polí s konkrétním fyzikálním významem. Jednotky a velikosti ovlivňuje uživatel jednak nastavením konstant, jednak nastavením působícího vnějšího pole. Proto nejsou na grafech níže jednotky zobrazovány, pokud se nejedná o příklad reálného fyzikálního jevu. Podobně u jednotek parametrů a výstupních hodnot.



Obrázek 5.1: Simulace odporu prostředí. Objekty s nenulovou počáteční rychlostí.

Pokud není uvedeno jinak, na všech zobrazených simulacích byla pro lepší pozorování chování daného jevu vypnuta síla působící při přílišném přiblížení objektů.

Počáteční polohy objektů jsou označeny křížky s příslušnou barvou. Modré šipky



Obrázek 5.2: Simulace odporu prostředí a počáteční rychlosti.

naznačují směr a velikost působící síly v daném bodě.

## 5.1 Simulace bez vzájemné interakce

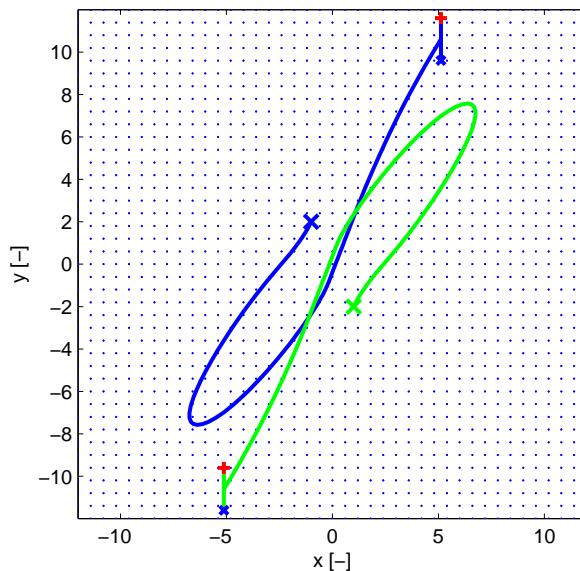
Cílem bylo nasimulovat chování objektu v silovém poli. Translační pohyb včetně interakce objektů a média (odpor prostředí).

Na obrázku 5.1 je vidět simulace pohybu 2 kruhových objektů v poli typu údolí, s nenulovým koeficientem odporu. Vzájemná interakce objektů je vypnuta, ale tlumení je nastaveno na hodnotu 0.10 s kvadratickou závislostí na rychlosti. Objekty mají nenulovou počáteční rychlosť (se vzájemně opačným směrem). Čas simulace 1 s.

Na obrázku 5.2 je vidět simulace pohybu 2 kruhových objektů s nenulovou počáteční rychlostí, objekty samotné nejsou ale vykreslovány. Vnější pole je tvaru paraboloidu. Vzájemná interakce objektů je vypnuta, ale tlumení je nastaveno na hodnotu 0.10 s kvadratickou závislostí na rychlosti. Čas simulace 1 s.

## 5.2 Simulace pohybu dipólu

Na obrázku 5.3 je vidět simulace pohybu 2 objektů typu dipól. Vnější pole je vypnuté pro lepší pozorování vzájemné interakce. Vzájemná interakce objektů je nastá-



Obrázek 5.3: Simulace pohybu dvou dipólů.

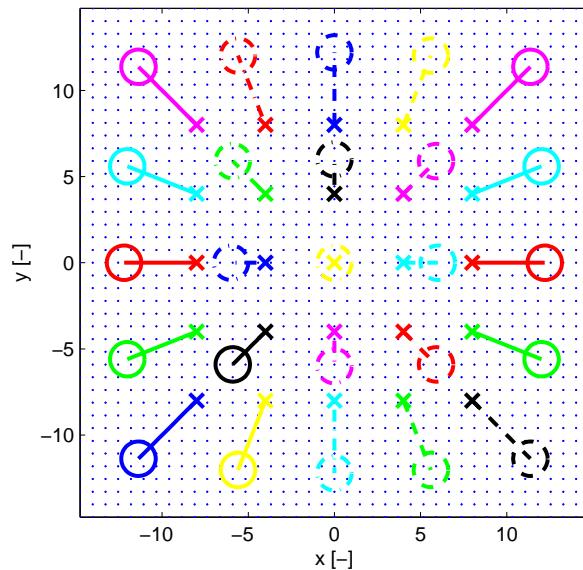
vena je na hodnotu 0.1. Čas simulace 10 s. Všimněte si, jak se vlivem rozdílných nábojů na koncích dipolu nejdříve objekty odpuzují a při překročení určité hranice se začnou přitahovat.

### 5.3 Simulace mezi-objektové interakce

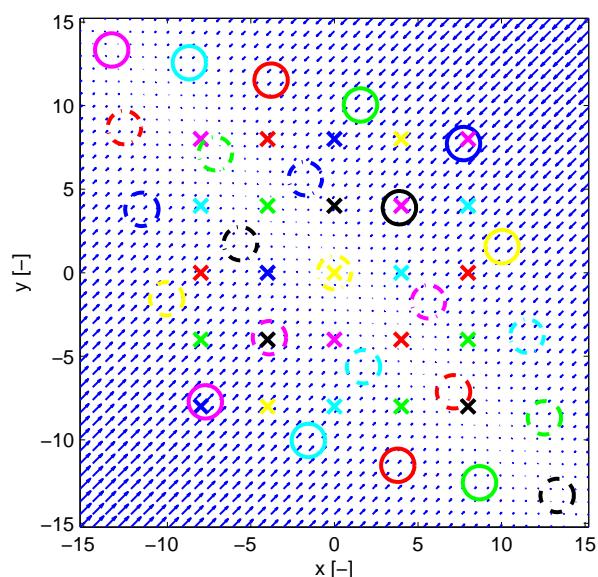
V této části jsme se již soustředili nejen na samotnou interakci pole-objekt, ale také na vzájemnou interakci objektů mezi sebou.

Na obrázku 5.4 je vidět simulace pohybu 25 kruhových objektů. Vnější pole je vypnuté pro pozorování vzájemné interakce objektů, která je nastavena na hodnotu 0.01. Čas simulace 2 s. Všimněte si hlavně různých koncových poloh krajních objektů na diagonále a na kříži vedeném ve směru os. Na objekty na diagonále totiž vlivem větší vzdálenosti od sousedů působí menší síla.

Na obrázku 5.5 je vidět simulace pohybu 25 kruhových objektů. Vnější pole je nastaveno na tvar údolí, vzájemná interakce objektů je úmyslně přehnaná. Nastavena je na hodnotu 0.1. Čas simulace 1 s. Všimněte si zejména, jak vlivem odpudivé síly jsou objekty na hlavní diagonále vytlačovány z jejich původních poloh.



Obrázek 5.4: Simulace vzájemné interakce soustavy objektů, bez vnějšího pole.



Obrázek 5.5: Simulace vzájemné interakce soustavy objektů, ve vnějším poli tvaru údolí.

# Kapitola 6

## Závěr

Nasimulovali jsme pohyb objektů v potenciálovém poli. Tvar pole lze nastavit buď z přednastavených tvarů, pomocí kvadratické formy potenciálu nebo numericky. Je možné počítat s interakcí pole-objekt, objekt-objekt i objekt-médium. Počet objektů se dá nastavit na několik desítek.

Výpočty elektrického pole, vyvolávajícího dielektroforézu, byly úkolem dost náročným. Podařilo se ale implementovat funkce k jejich výpočtu. S použitím rovnic, popsaných v (Chang et al., 2003) se nám podařilo ověřit výpočet velikosti dielektrické síly v konkrétním planárním geometrickém uspořádání elektrod.

Simulace pohybu byla poměrně náročná na ladění, některé chyby se začaly projevovat až při velkém množství objektů. Během posledních revizí jsme narazili na několik problémů souvisejících s pořadím výpočtů. Při závěrečných testech se potom ukázalo, že simulace rotačního pohybu čtvercového objektu neodpovídá teoretickým předpokladům, proto ji ve zde neukazujeme.

Velkým problémem simulace pohybu objektů v silových polích je doba simulace, která logicky narůstá s počtem simulovaných objektů. Zajímavostí také je, že starší verze Matlabu jsou mnohem rychlejší. V Matlabu 2005 jedna z prvních pokusných simulací běžela cca 2.5 s, zatímco v Matlabu 2010b cca 12 s.

Matlab je optimalizován pro práci s maticemi. Při použití cyklu for k výpočtu celkové síly a celkového momentu síly byla simulace až  $10\times$  pomalejší, než při přepsání algoritmu pro lepší využití maticových operací. Otevřeným problémem je ale celková optimalizace simulace, na kterou jsme se v této části nezaměřovali.

Pro přesnější simulace rozměrnějších objektů by bylo vhodné upravit strukturu kruhových objektů. V současné implementaci se s nimi počítá, jak už bylo zmíněno, jako se čtvercovými, protože na simulovaných velikostech objektů je rozdíl mezi kruhovým a čtvercovým objektem zanedbatelný.

Dále by bylo vhodné nějakým způsobem upravit odpuzování při přílišném přiblížení objektů. V nynější implementaci závisí na uživatelově volbě příslušného koeficientu, což se ukázalo, že není příliš vhodné (je nutné jej měnit například podle zadané síly vnějšího pole apod.).

# Literatura

- Chang, D. E., Loire, S. a Mezi, I. (2003), ‘Closed-form solutions in the electrical field analysis for dielectrophoretic and travelling wave inter-digitated electrode arrays’, *Journal of Physics D: Applied Physics* **36**(23), 3073–3078.
- Chang, D. E. a Lorie, S. (2003), Separation of bioparticles using the travelling wave dielectrophoresis with multiple frequencies, in ‘Decision and Control, 2003. Proceedings. 42nd IEEE Conference on’, Vol. 6, p. 6448–6453.
- Lin, Y., Amberg, G., Aldaeus, F. a Roeraade, J. (2006), Simulation of dielectrophoretic motion of microparticles using a molecular dynamics approach, in ‘4th International Conference on Nanochannels, Microchannels and Minichannels, ICNMM2006: Limerick; 19 June 2006 through 21 June 2006’.
- Matlab help* [online] ([cit. 2010-01-28], ⟨<http://www.mathworks.com/help/techdoc/>⟩).
- Stackoverflow.com* [online] ([cit. 2010-01-28], ⟨<http://stackoverflow.com/questions/tagged/matlab/>⟩).
- ŠÍBA, J. (2010), ‘Planární nekontaktní manipulátor na principu magnetické levitace’.
- FEYNMAN, R.P., LEIGHTON, R.B. a SANDS, M. (2000), *Feynmanovy přednášky z fyziky*, Nakladatelství FRAGMENT.
- KARBAN, P. (2006), *Výpočty a simulace v programech Matlab a Simulink*, Nakladatelství Computer Press, Brno.
- KRUPKA, F. a KALIVODA, L. (1989), *Fyzika*, Praha: SNTL - Nakladatelství technické literatury.
- NOVÁK, J., PULTAROVÁ, I. a NOVÁK, P. (2005), *Základy informatiky - počítačové modelování v Matlabu*, Praha: Vydavatelství ČVUT.
- POHL, H. (1978), *Dielectrophoresis*, Cambridge University Press.
- SEDLÁČEK, M. a ŠMÍD, R. (2004), *Matlab v měření*, Praha: Vydavatelství ČVUT.
- ZEMÁNEK, J. (2009), ‘Noncontact parallel manipulation with micro- and mesoscale objects using dielectrophoresis’.

# Příloha A

## Výstupní struktura simulace

Tabulka A.1: Výstupní struktura simulace

Parametr	Popis
simulation.trajectory.steps	počet kroků simulace
simulation.trajectory.t	časový vektor
simulation.trajectory.x	matice poloh objektu na ose $x^1$
simulation.trajectory.y	matice poloh objektu na ose $y^1$
simulation.trajectory.vx	matice rychlostí ve směru osy $x^1$
simulation.trajectory.vy	matice rychlostí ve směru osy $y^1$
simulation.trajectory.phi	matice úhlů natočení <sup>1</sup>
simulation.trajectory.omega	matice úhlových rychlostí <sup>1</sup>
simulation.timeComputing	doba trvání výpočtu simulace
simulation.timeSimulation	doba simulace
simulation.initCond	matice počátečních podmínek
simulation.particleCount	počet objektů
simulation.particleSize	velikost objektů
simulation.particleType	typ objektů (možné hodnoty: 'd', 'c', 's')
simulation.force	definice vnější síly
simulation.forceExternal	použití externího zadání síly
simulation.coef.InterParticleCoef	koeficient vzájemné interakce
simulation.coef.RepulsiveCoef	koeficient odpuzování
simulation.coef.ResistanceRelation	závislost odporu prostřední na rychlosti
simulation.coef.ResistanceCoef	velikost odporu prostředí
simulation.projectFolder	výstupní adresář simulace
simulation.projectName	Název projektu.
simulation.projectNameSuffix	přípona k názvu souborů simulace
simulation.version	verze simulačního skriptu
simulation.SimulationData	relativní cesta k uloženým datům simulace

<sup>1</sup>ve sloupcích jednotlivé objekty

## Příloha B

### Obsah přiloženého CD

K této práci je přiloženo CD, na kterém je uložena elektronická verze práce, zdrojové kódy a videa ze čtyř zmiňovaných simulací.

Struktura CD je následující:

\BP\_kohout\_2011.pdf

```
\funkce\compute_E.m
\funkce\compute_F_DEP.m
\funkce\compute_particle_moment.m
\funkce\compute_particle_rotate.m
\funkce\compute_particle_translate.m
\funkce\data_force_external.m
\funkce\field_force_external.m
\funkce\findfreepath.m
\funkce\mprint.m
\funkce\particle_in_force_field.m
\funkce\particle_initial_condition.m
\funkce\particle_object.m
\funkce\particle_paint.m
\funkce\show_E.m
\funkce\show_F_DEP.m
\funkce\show_field.m
\funkce\simulation_constants.m
\funkce\simulation_main.m
\funkce\simulation_show.m

\video\simulace_dipoly.avi
\video\simulace_interakce_udoli.avi
\video\simulace_interakce_udoli_trajektorie.avi
\video\simulace_odporu_prostredi.avi
```