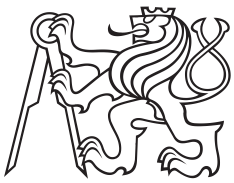
Bakalářská práce



České
vysoké
učení technické
v Praze

F3

Fakulta elektrotechnická
Katedra řídicí techniky

Maticové elektrodové pole pro dielektroforézu – základní řízení polohy

Tomáš Michálek
Kybernetika a robotika – Systémy a řízení
michato4@fel.cvut.cz

Květen 2013
Vedoucí práce: Ing. Jiří Zemánek

Poděkování / Prohlášení

Chtěl bych poděkovat své rodině za podporu během celého studia. Děkuji též vedoucímu práce, Ing. Jiřímu Zemánkovi, za jeho cenné rady a připomínky.

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

V Praze dne 20. 5. 2013

.....

Abstrakt / Abstract

V této práci popisuji návrh řízení pro nekontaktní planární manipulaci mikro- a mezoskopických objektů pomocí dielektroforézy. Konkrétně dokumentuji využití komerčně dostupného maticového mikroelektrodového pole. Pro něj jsem vytvořil matematické simulační modely s využitím metody momentů, a tyto jsem použil pro odladění jednoduchých regulátorů polohy. Funkčnost jsem ověřil v laboratorních experimentech při manipulaci polystyrenových mikrokuliček. Předpokladem pro realizaci experimentů bylo i moje úspěšné vyřešení technického problému kontaktování elektrodového pole a generátoru napětí.

Klíčová slova: maticové elektrodové pole; dielektroforéza; simulace; řízení polohy mikročástice.

This work describes the design procedure for a non-contact planar manipulation of micro- and mesoscopic objects using dielectrophoresis. Specifically, it documents the use of commercially available matrix microelectrode array. For it, I created mathematical simulation models using the method of moments, and I used these for debugging of simple position controllers. I verified the functionality in laboratory experiments handling polystyrene microspheres. A prerequisite for these experiments was also my successful resolution of contacting electrode array and a voltage generator.

Keywords: matrix electrode array; dielectrophoresis; simulation; microparticle position control.

Title translation: Matrix electrode array for dielectrophoresis – basic position control

Obsah /

1 Úvod 1
2 Dielektroforéza 2
2.1 Dielektroforetická síla 2
2.2 Možnosti budoucích aplikací 4
3 Kompletace hardware v laboratorní sestavě 5
3.1 Maticové elektrodové pole 5
3.2 Konektor k 64kanálovému generátoru 6
4 Simulační schéma pro návrh řízení 8
4.1 Implementace výpočtu dielektroforetických sil 8
4.2 Simulace pohybu částice 9
4.3 Metoda momentů 9
4.4 Popis klasického simulačního schématu 12
4.5 Hybridní přístup k simulaci 14
4.6 Popis hybridního simulačního schématu 15
4.7 Porovnání jednotlivých simulačních přístupů 16
5 Návrh regulátoru polohy 20
5.1 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů 20
5.2 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů s pamětí 21
5.3 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů s lokálním působením 22
5.4 Regulátor využívající posuvu silové pasti 23
5.5 Regulátor využívající „look-up“ tabulku předem vypočítanou genetickým algoritmem . 23
5.5.1 Princip genetického algoritmu 24
5.5.2 Implementace regulátoru 24
5.6 Regulátor využívající odpuzování od elektrod 25
5.7 Heuristické vylepšení regulátoru využívajícího soustavy předdefinovaných směrů 26
6 Experimentální ověření regulátorů 30
6.1 Příprava podpůrného programového vybavení 30
6.1.1 Zkoumání frekvenční závislosti chování 32
6.2 Výsledky vlastních experimentů 32
7 Závěr 35
Literatura 36
A Zadání práce 37
B Kompletní odvození dielektroforetické síly 39
B.1 Komplexní permitivita 39
B.2 Dielektroforetická síla 40
C Zkratky a symboly 43
C.1 Zkratky 43
C.2 Symboly 43

Obrázky

2.1. Částice v homogenním elektrickém poli. 2
2.2. Částice v nehomogenním elektrickém poli. 3
2.3. Clausius-Mosotti faktor pro polystyren v deionizované vodě. 4
3.1. Maticové pole používané pro vyvolání dielektroforézy 5
3.2. Pružinový konektor GSCC1060-Up. 6
3.3. Fotografie kompletní laboratorní sestavy 7
3.4. Vnitřní části konektoru před jeho sestavením 7
3.5. Schematický řez konektorem 7
4.1. Disktretizace elektrod v MOM 11
4.2. Diskretizace prostoru pro hybridní metodou dvourozměrného síťování elektrod 14
4.3. Diagram procesu dvourozměrného síťování 15
4.4. Rozložení fází při porovnávání simulací 16
4.5. Dielektroforetické silové pole – Comsol 18
4.6. Dielektroforetické silové pole – Comsol hybrid 18
4.7. Dielektroforetické silové pole – MOM. 19
4.8. Dielektroforetické silové pole – MOM hybrid 19
5.1. Blokové schéma celého systému 20
5.2. Předdefinované fáze základního regulátoru 21
5.3. Princip vylepšení základního regulátoru 22
5.4. Předdefinované fáze lokalizované varianty základního regulátoru 23

5.5. Předdefinované fáze regulátoru využívajícího silové pasti 23
5.6. Příklad fází vypočtených genetickým algoritmem 25
5.7. Příklad sledu fází při pohybu po diagonále využívajícího odpuzování od elektrod 26
5.8. Příklad experimentálně nalezených směrů postupné vlny vylepšujících chování základního regulátoru 26
5.9. Porovnání regulátorů používajících základních předdefinovaných směrů – idealizované pole 27
5.10. Porovnání regulátorů používajících základních předdefinovaných směrů – neidealizované pole 27
5.11. Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru s posuvnou silovou pastí 28
5.12. Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru s fázemi optimalizovanými genetickým algoritmem – idealizované pole 28
5.13. Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru s fázemi optimalizovanými genetickým algoritmem – neidealizované pole 29
5.14. Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru využívajícího odpuzování od hran elektrod 29

6.1. Ukázka předzpracování obrazu pro detekční algoritmus 31
6.2. Screenshot z GUI pro ovládání experimentu 31
6.3. Výsledek experimentu s regulátorem využívajícím základních předdefinovaných směrů 33
6.4. Výsledek experimentu s regulátorem využívajícím heuristického vylepšení základního řízení 33
6.5. Výsledek experimentu s regulátorem využívajícím odpuzování od hran elektrod 34
6.6. Výsledek experimentu s regulátorem využívajícím dat získaných genetickým algoritmem 34

Kapitola 1
Úvod

Obsahem této bakalářské práce je modelování, návrh regulátorů a experimentální ověření zpětnovazebního řízení polohy mikročástice pomocí dielektroforézy. Práce je zaměřena na využití konkrétního typu maticového elektrodového pole, které je komerčně dostupné pro jiné účely. Zde ho využívám k vytváření a tvarování elektrického pole, v němž dochází k pohybu mikročástic. Výhodou dielektroforézy je, že ačkoliv probíhá v elektrickém poli, nevyžaduje, aby byly objekty nabité (stačí, aby byly polarizovatelné). Proto je vhodá pro manipulaci s různými mikroobjekty.

Stěžejním prvkem této práce je tedy využívání dielektroforézy. Bohužel povědomí o ní není mezi elektroinženýry doposud významněji rozšířeno. Proto jsem se pokusil v kapitole 2 o její stručné vysvětlení.

Cílem mé práce bylo v prvé řadě dokončit hardwarovou část experimentální platformy, na níž by se daly se zmíněným polem provést experimenty. Jednalo se zejména o návrh a realizaci vhodné metody propojení tohoto pole s generátorem napětí, jenž byl již dříve zkonstruován na pracovišti zadavatele. Generátor disponuje 64 kanály a umožňuje přivádět na jednotlivé elektrody obdélníkové signály o různých fázových posunech. Slouží tedy k vyvolání a řízení dielektroforézy. Konkrétní použitý způsob propojení jsem podrobně popsal v kapitole 3.

Dále jsem za účelem návrhu řízení dielektroforézy sestavil simulační schéma. Pro zjednodušení jsem nejprve uvažoval pole idealizované, lišící se od toho reálného absencí přívodních cest ke svým elektrodám. Následně jsem schéma rozšířil tak, aby zahrnovalo i vliv těchto přívodních cest. Implementoval jsem několik různých přístupů k simulaci (metoda momentů a hybridní přístup v několika jeho variantách) podrobně popsaných a porovnaných v kapitole 4.

Na vytvořených simulačních schématech jsem pak mohl testovat a vzájemně porovnávat různé způsoby řízení dielektroforézy. Řízení jsem nejprve navrhoval pro jednodušší případ idealizovaného pole, kde se neprojevuje nežádoucí vliv přívodů elektrod. Následně jsem takto navržené regulátory specifikoval k použití na poli dostupném v laboratoři. Jednotlivých strategií řízení jsem implementoval a vzájemně porovnal několik (např. střídání několika předdefinovaných směrů, odpuzování od hran elektrod atd.) a jejich popisu jsem věnoval kapitolu 5.

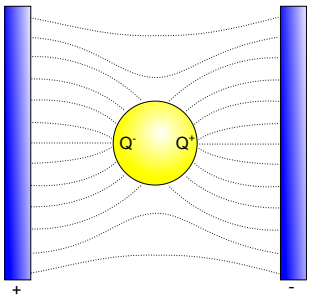
Na závěr jsem experimentálně otestoval navrhnuté regulátory na reálném elektrodovém poli. K tomu účelu jsem potřeboval vytvořit softwarové zázemí v Matlabu a Simulinku zajišťující: jednoduché ovládání experimentů, zavádění implementací regulátorů a zprostředkování potřebné zpětné vazby z obrazu kamery mikroskopu. Bližšími podrobnostmi, experimenty a jejich vyhodnocením se zabývá kapitola 6.

Kapitola 2
Dielektroforéza

V této kapitole vysvětlím základní princip dielektroforézy; zejména uvedu vztah pro průměrnou dielektroforetickou sílu. Ten je důležitý pro porozumění navrhovaným principům řízení. Detailní odvození vztahu lze nalézt v příloze B.

2.1 Dielektroforetická síla

Dielektroforéza je využívána k bezkontaktní manipulaci s objekty mikroskopických rozměrů ponořených typicky v tekutém médiu. V případě svých experimentů jsem například pro účely testování používal polystyrenové kuličky o průměru 5,5 µm a deionizovanou vodu. Prostřednictvím napětí přiváděného na mikroelektrody se pak vytváří elektrické pole, do kterého médium i s částicí umístíme. Základním požadavkem nutným pro vznik dielektroforézy je pak rozdílnost v permitivitách resp. měrných vodivostech materiálů média a částice při vysokých resp. nízkých frekvencích budicího napětí To je dáno tzv. Clausius-Mosotti faktorem popsaným níže a definovaným ve vzorci (7.3). V takovém případě se uvnitř objektu zformuje elektrický dipól a na jeho povrchu dojde k akumulaci nábojů. Na jedné jeho straně se shromažďuje náboj kladný, na druhé náboj záporný. Na tyto náboje pak působí známé Coulombovy síly. V případě, že je vnější elektrické pole homogenní (viz obr. 2.1), má síla působící na záporný i kladný náboj stejnou velikost, ale opačný směr. Vzájemně se tedy vyruší a na částici nepůsobí žádná síla, jež by ji uváděla do pohybu.

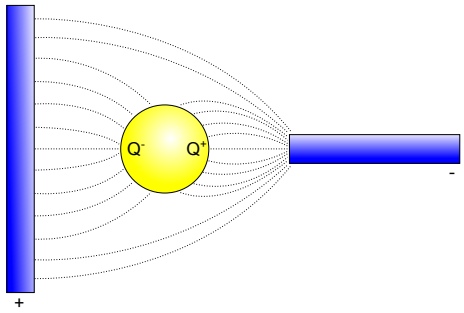


Obrázek 2.1. Polarizovaná částice v homogenním elektrickém poli. Síly působící na jednotlivé náboje jsou stejně velké a vzájemně se vyruší.

Pokud je však vnější pole nehomogenní, výslednice sil nebude nulová a lze ji vyjádřit (viz obr. 2.2) jako

$$\mathbf{F} = Q^{+}\mathbf{E}\left(\mathbf{r}+\mathbf{d}\right) - Q^{-}\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right), \tag{2.1}$$

kde $\mathbf{F}$ je výsledná síla působící na částici, Q^{+} resp. Q^{-} je kladný resp. záporný náboj dipólu, $\mathbf{E}\left(\mathbf{r}\right)$ je intenzita elektrického pole v místě o polohovém vektoru $\mathbf{r}$, který označuje



Obrázek 2.2. Polarizovaná částice v nehomogenním elektrickém poli. Síly působící na jednotlivé náboje nejsou stejně velké a částice je uvedena do pohybu. Překresleno z [1].

pozici záporného náboje vzhledem k počátku souřadnic a $\mathbf{d}$ je vektor vyjadřující pozici kladného náboje vzhledem k pozici záporného náboje.

Pokud je velikost $\mathbf{d}$ vzhledem k velikosti nehomogenity elektického pole zanedbatelná, lze výraz $\mathbf{E}(\mathbf{r}+\mathbf{d})$ aproximovat pomocí prvních dvou členů Taylorova rozvoje jako

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}+\mathbf{d}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{d}\nabla\mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{2.2}$$

Po dosazení do původní rovnice síly a po vzájemném odečtení $Q^{+}\mathbf{E}$ a $Q^{-}\mathbf{E}$ zůstane

$$\mathbf{F} = Q\mathbf{d}\cdot\nabla\mathbf{E} = (\mathbf{m}\cdot\nabla)\,\mathbf{E}, \tag{2.3}$$

kde $\mathbf{m} = Q\mathbf{d}$ reprezentuje dipólový moment.

Tento vztah je stále dosti obecný. V dalším odvození však uvažuji pouze kulaté objekty a harmonický průběh elektrického pole (takového, které je vytvářeno pomocí střídavého napětí na elektrodách). Toto pole může být v amplitudě i ve fázi prostorově proměnné. Tím se omezím pouze na konkrétní případ mé konfigurace experimentů.

Pokračování uvažující tato zjednodušení je v příloze B a bylo s úpravami převzato z [1]. Nyní proto uvedu přímo finální vztahy pro průměrnou dielektroforetickou sílu,

$$\langle\mathbf{F}\rangle = \langle\mathbf{F_{DEP}}\rangle + \langle\mathbf{F_{TWD}}\rangle, \tag{2.4}$$

$$\langle\mathbf{F_{DEP}}\rangle = 2\pi r^3\varepsilon_0\mathrm{Re}\left[K(\omega)\right]\nabla\left(E_{x0}^2 + E_{y0}^2 + E_{z0}^2\right), \tag{2.5}$$

$$\langle\mathbf{F_{TWD}}\rangle = 2\pi r^3\varepsilon_0\mathrm{Im}\left[K(\omega)\right]\left(E_{x0}^2\nabla\phi_x + E_{y0}^2\nabla\phi_y + E_{z0}^2\nabla\phi_z\right), \tag{2.6}$$

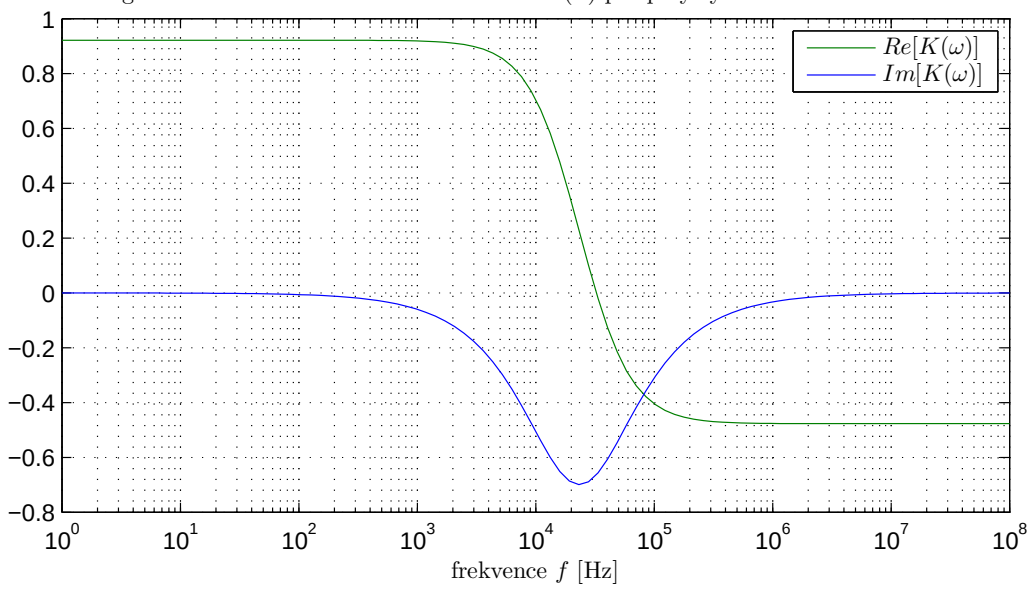
kde r je průměr kulovité částice, ε_0 je permitivita vakua, $K(\omega)$ je tzv. Clausius-Mosotti faktor popsaný níže, ω je úhlová frekvence elektrického průběhu elektrického pole, E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} jsou amplitudy elektrické intenzity v jednotlivých dimenzích x, y, z uvažovaného prostoru a ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z jsou odpovídající fázové posuny.

Průměrnou dielektroforetickou sílu je možné vyjádřit jakou součet dvou sil: $\mathbf{F_{DEP}}$, která se označuje jako dielektroforéza konvenčí a je úměrná gradientu kvadrátu velikosti elektrické intenzity a $\mathbf{F_{TWD}}$, které se říká dielektroforéza postupnou vlnou (travelling wave dielectrophoresis – *TWD*) a je úměrná gradientu fáze elektrické intenzity.

Velikost a směr DEP síly jsou také závislé na členu $K(\omega)$, tzv. Clausius-Mosottiho faktoru. Jeho reálná složka ovlivňuje konvenční DEP (2.5) a imaginární složka DEP postupnou vlnou (2.6). Podle toho zda je jeho reálná složka kladná nebo záporná, je

částice z/do míst s vysokou hodnotou intenzity elektrického pole přitahována resp. odpuzována. S ohledem na to se dělí konvenční dielektroforéza na pozitivní a negativní. Pozice extrému imaginární složky tohoto faktoru pak určuje frekvenci, na které je nejsilnější dielektroforéza postupnou vlnou. Z definice (7.3) je zřejmé, že Clausius-Mosotti faktor je závislý na kombinaci materiálů média i objektu v něm ponořeném (kombinaci jejich vodivostí a permitivit). Jeho typický průběh je znázorněn na obr. 2.3.

Reálná a imaginární složka Clausius-Mosotti faktoru $K(\omega)$ pro polystyrenovou částici v deionizované vodě



Obrázek 2.3. Příklad průběhu reálné a imaginární složky Clausius-Mosotti faktoru pro polystyrenovou částici o uvedených vlastnostech ponořenou v deionizované vodě. ($\sigma_p = 2 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{S/m}$, $\sigma_m = 5,49 \cdot 10^{-6}\,\mathrm{S/m}$, $\varepsilon_p = 2,5$, $\varepsilon_m = 80$)

2.2 Možnosti budoucích aplikací

Dielektroforéza je jev nabízející celou řadu různých způsobů využití. Mezi vhodné aplikační oblasti patří například chemie, biologie nebo zdravotnictví. V takzvaných lab-on-a-chip systémech může posloužit k separaci, třídění, zachytávání či přepravě částic. V praxi již byly například provedeny experimenty demonstrující schopnost oddělit pomocí dielektroforézy krvinky od bakterií [2], roztřídit dva různé druhy virů [3] atp. Schopnost přepravy částic by pak našla využití například v oblasti kombinatorické chemie, kde je zapotřebí ideálně v co nejmenších objemech vyvolávat a následně vyhodnocovat chemické reakce mezi řadou látek [4].

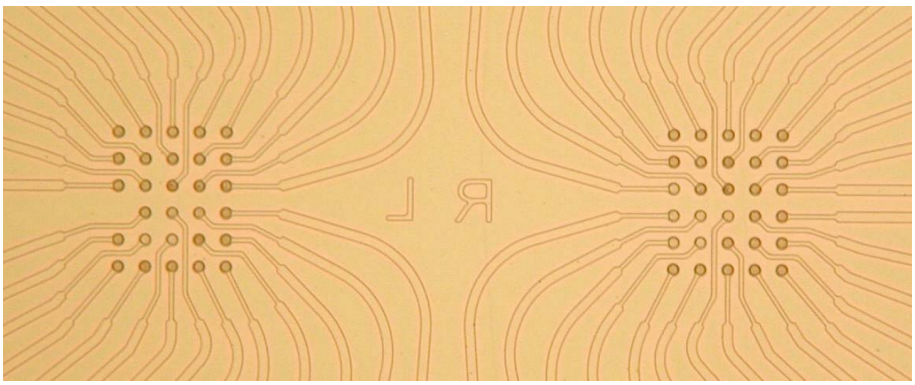
V této práci se budu zabývat právě řízením přepravy částic. Pro případ regulace pohybu více částic z rozdílných materiálů však může být užitečné mít povědomí i o principu separace částic, ke kterému je dielektroforéza prakticky předurčena a který může transport částic taktéž ovlivňovat. Separace je založena na rozdílnosti vlastností materiálů jednotlivých skupin částic, konkrétněji na rozdílnosti jejich Clausius-Mosotti faktorů. Volbou vhodné frekvence je pak možno vyvolat u jedné ze skupin například dielektroforézu pozitivní a u druhé negativní, nebo alespoň dosáhnout co největšího rozdílu rychlostí pohybu částic, čímž také po čase dojde k jejich oddělení. Stejně tak dobře lze využít rozdílného směru TWD. Dále lze využít například i rozdílných rozměrů částic a s nimi souvisejících rozdílných sil a tedy i dosažitelných rychlostí v daném médiu.

Kapitola 3
Kompletace hardware v laboratorní sestavě

3.1 Maticové elektrodové pole

Jak plyne ze vztahů pro dielektroforetickou sílu (2.5), (2.6), jsou její velikost a směr dány (kromě materiálových vlastností) také elektrickým polem. K vytvoření a snadnému tvarování tohoto elektrického pole je zapotřebí vhodné uspořádání mikroelektrod. V této práci využívám maticové elektrodové pole 60HDMEA30/10iR-ITO-pr (viz obr. 3.1) německého výrobce Multi Channel Systems MCS GmbH specializujícího se na vývoj měřicích nástrojů pro oblast elektrofyziologického výzkumu a farmacie. Toto pole se sestává z 60 elektrod uspořádaných ve dvou od sebe oddělených blocích. Každý z nich je tvořen maticí elektrod uspořádaných v 6 řádcích a 5 sloupcích. Jedna elektroda v levém poli však slouží pouze jako reference a kvůli absenci vývodu nelze bohužel využít. Elektrody mají průměr 10 µm a jejich středy jsou od sebe navzájem vzdáleny 30 µm. Umístěny jsou na skleněném podkladu. Na jeho okraji jsou kontaktní plošky spojené s elektrodami pomocí vodivých izolovaných cest. Tato základní skleněná destička má rozměry 49 mm × 49 mm × 1 mm. Ze strany elektrod je k ní navíc připevněn plastový bazének, ve kterém bude při experimentech médium s pokusnými mikročásticemi. Kontaktní plošky a přívodní cesty jsou vyrobeny z Indium tin oxide (ITO), mezi jehož nejdůležitější vlastnosti patří vodivost, transparentnost a snadnost formování do podoby tenkých filmů. Elektrody jsou pak tvořeny velmi tvrdým keramickým, ale přesto vodivým, materiálem – Titanium nitride (TiN). Podrobnější informace lze nalézt v katalogovém listu výrobce umístěném na jeho webových stránkách.

Narozdíl od rozložení elektrod ve formě rovnoběžných pásů, která se často objevují v literatuře, lze od tohoto rozvržení očekávat větší volnost v tvarování elektrického pole. Další výhodou je potenciální schopnost nezávisle řídit více částic nacházejících se v různých oblastech pole.



Obrázek 3.1. Maticové elektrodové 60HD30/10iR-ITO pole používané pro vyvolání dielektroforézy. Snímek převzat z datasheetu [1]).

[1]) `http://www.multichannelsystems.com/sites/multichannelsystems.com/files/documents/data_sheets/MEA_Layout_HighDense_IR_MEA.pdf`

3.2 Konektor k 64kanálovému generátoru

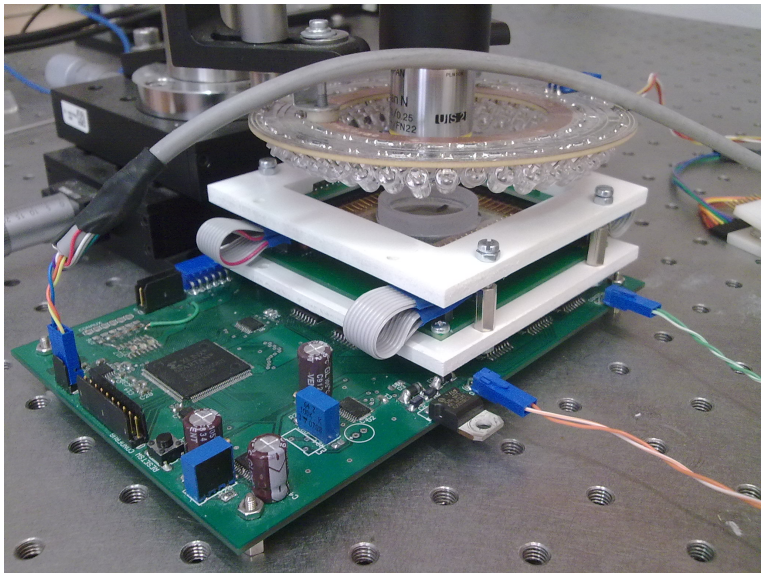
Na elektrodové pole budu během experimentů přivádět střídavé napětí z 64kanálového generátoru. Ten byl již dříve sestaven na pracovišti zadavatele. Všechny generované signály mají stejnou frekvenci nastavitelnou v rozmezí 47,7 Hz – 3,125 MHz, ale mohou se lišit fázovým posunem volitelným v krocích po $\pi/8$. Sigánaly jsou obdélníkové se střídou 50%. Generátor se ovládá počítačem prostřednictvím sériové linky a komunikačního protokolu popsaného v [5].

Použité elektrodové pole však nelze přímo připojit ke generátoru. Bylo proto nutné navrhnout vhodný mezičlánek, který toto zajistí. Ke kontaktování sklíčka s elektrodami jsem použil pružinový konektor GSCC1060-Up vyráběný stejně jako elektrodové pole firmou Multi Channel Systems (viz obr. 3.2). K němu jsem navrhl a vyrobil několik dalších součástek umožňujících jeho propojení s generátorem. Jednalo se o desku plošných spojů (DPS), která má na jedné straně pinové lišty pro připojení ke generátoru a na druhé straně mikrokonektory sloužící k připojení pružinového konektoru. Tyto mikrokonektory jsou vzájemně propojeny pomocí flexibilních spojů, které jsem nejprve realizoval s využitím pružných plošných spojů. Pro vysokou poruchovost jsem je ale nahradil propojkami vyrobenými z plochých kabelů. Maticové elektrodové pole jsem zasadil do dílu vyfrézovaného z pertinaxu, který zajišťuje jeho správnou polohu. Všechny díly jsem mechanicky zajistil stažením pomocí dvou plastových rámečků. Výsledný konektor je zobrazen s celou laborní sestavou na obr. 3.3. Vnitřní díly je možné si prohlédnout na obr. 3.4, kde jsou zachyceny ještě před sestavením. Pro lepší představu o umístění jednotlivých komponent je k dispozici schematický řez na obr. 3.5 doplněný o jejich popis.

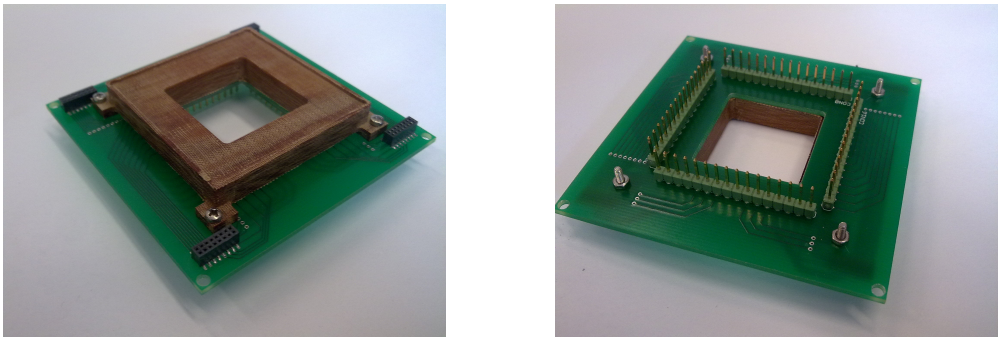
Pro ověření funkčnosti konektoru jsem z počítače posílal příkazy pro různé nastavení fází na výstupech generátoru a kontroloval toto nastavení pomocí osciloskopu.

Obrázek 3.2. Pružinový konektor GSCC1060-Up použitý ke kontaktování mikroelektrodového pole. Snímek převzat z webového katalogu firmy Multi Channel Systems [1]).

[1]) `http://www.multichannelsystems.com/products/gscc1060`

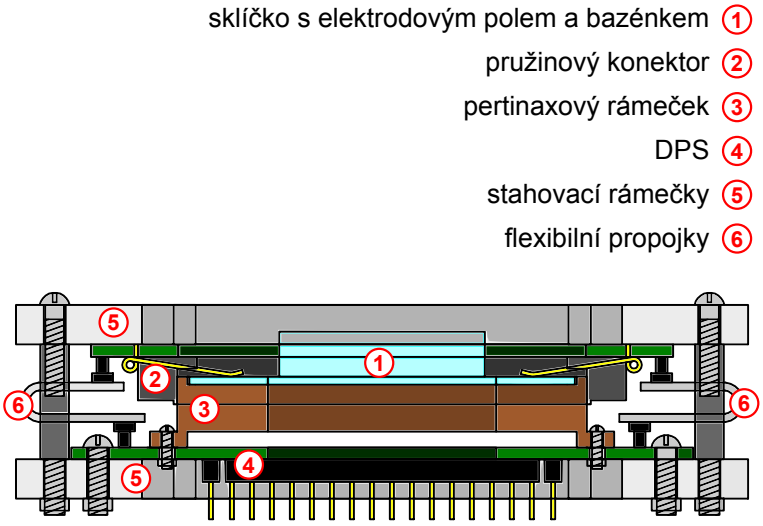


Obrázek 3.3. Fotografie kompletní laboratorní sestavy – 64kanálový generátor, konektor, maticové elektrodové pole, kamera s optikou.



a) pohled shora b) pohled ze spodu

Obrázek 3.4. Pohled na vnitřní části konektoru před jeho sestavením. Na obrázku a) je vidět pertinaxový rámeček pro uložení sklíčka, na obrázku b) pak pinové lišty pro připojení konektoru ke generátoru.



Obrázek 3.5. Schematický řez všemi částmi sestaveného konektoru.

Kapitola 4
Simulační schéma pro návrh řízení

Další částí práce bylo sestavení simulačního schématu vhodného pro návrh řízení dielektroforézy. Vstupními parametry simulace jsou fázové posuny napětí přiváděného na elektrody. Z těchto napětí se v rámci simulace vypočte rozložení elektrické intenzity a následně velikost dielektroforetické síly v prostoru nad elektrodami. Výstupem je trajektorie částice uvedené v pohyb touto silou. Vstupní parametry simulace pak nechávám v jejím průběhu měnit navrhovaným regulátorem.

V této práci se budu zabývat dvěma základními modely elektrodového pole, idealizovaným a neidealizovaným. Idealizované pole nezahrnuje přívodní cesty k elektrodám (viditelné např. na obr. 3.1), ale sestává se pouze z matice 6×5 kruhových elektrodových plošek. Neidealizovaný model pak zahrnuje i tyto přívodní vodiče. Nicméně i u něj dochází k jistým zjednodušením. Po dohodě se zadavatelem jsem například v simulaci neuvažoval izolační vrstvu.

Mezi základní požadované vlastnosti simulačního schématu, které jsem respektoval při jeho tvorbě patřily:

- možnost jeho napojení na regulátor za účelem testování řídicích algoritmů,
- dostačující fyzikální věrnost simulačního modelu,
- nepříliš vysoká časová náročnost,
- co možná největší obecnost při definici geometrického uspořádání elektrod.

Poslední vlastnost souvisí zejména s ulehčením přechodu mezi idealizovanou a neidealizovanou variantou modelu pole. Takový přechod pak není ničím více než nadefinováním jiné geometrie elektrod.

Implementoval jsem několik přístupů k simulacím, které jsem posuzoval především z hlediska věrnosti výstupu a rychlosti výpočtu. První z nich označuji dále jako klasický přístup a jedná se o implementaci metody momentů (method of moments - MOM). Druhý pak označuji jako hybridní přístup a jde o schéma, ve kterém se simulace rozdělí do dvou fází. V první fázi se připraví data na základě zadaného uspořádání elektrod a ve druhé se tato předzpracovaná data využívají k urychlení výpočtu. Výhodou je také možnost využití přesnějších dat předem vypočítaných FEM řešičem programu COMSOL Multiphysics 4.3 (dále jen Comsol).

4.1 Implementace výpočtu dielektroforetických sil

V závislosti na typu simulace (klasický/hybridní přístup) se nejprve vypočítá elektrický potenciál a následně elektrická intenzita v podobě jeho záporně vzatého gradientu resp. se elektrická intenzita vypočítá přímo hybridní metodou. K výpočtu sil konvenční DEP je dle vzorce (2.5) nutné znát především gradient kvadrátu intenzit a v případě sil TWD pak dle vzorce (2.6) především gradient fáze elektrického pole.

Gradient fáze elektrického pole však nelze v Matlabu vypočítat přímou cestou (nedokáže vzít v úvahu periodicitu fáze). Jeho jednotlivé složky se protomusí počítat dosazením do vztahu [6]

$$\frac{\partial}{\partial x}\phi_x = \frac{\mathrm{Re}\left[E_x\right]\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{Im}\left[E_x\right] - \mathrm{Im}\left[E_x\right]\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{Re}\left[E_x\right]}{\mathrm{Re}^2\left[E_x\right] + \mathrm{Im}^2\left[E_x\right]}. \tag{4.1}$$

4.2 Simulace pohybu částice

Jelikož je pohyb částice důsledkem sil na ní působících, je nutné tyto síly nejprve identifikovat. Ve všech simulacích jsem výslednou sílu určil složením sil dielektroforetických, síly tíhové a vztlakové (v kombinaci označované také jako síly sedimentační). Rychlost částice je pak určena přímo ze Stokesova zákona

$$\mathbf{F} = 6\pi\mu r\mathbf{v}, \tag{4.2}$$

kde μ je dynamická viskozita kapaliny, r je poloměr částice, $\mathbf{v}$ je její rychlost a $\mathbf{F}$ je síla na ni působící.

Tento zákon platí pouze pro kulovité částice s malým Reynoldovým číslem (např. velmi malé částice) ponořené ve spojité viskózní tekutině. Tyto předpoklady jsou v případě mé práce splněny. Dynamiku částice kvůli jejím malým rozměrům a hodnotám viskozity vody zanedbávám a uvažuji, že částice dosahuje ihned své maximální rychlosti.

Polohu částice pak lze ze zjištěné rychlosti získat řešením tří jednoduchých diferenciálních rovnic, jedné pro každou ze tří dimenzí prostoru

$$\dot{x} = v_x, \dot{y} = v_y, \dot{z} = v_z. \tag{4.3}$$

4.3 Metoda momentů

Metoda momentů, někdy též nazývaná jako metoda okrajových prvků (boundary elements method – BEM), je v podstatě numerickým způsobem výpočtu složitých integrodiferenciálních rovnic. V klasickém simulačním schématu ji používám k nalezení řešení inverzního vztahu k rovnici

$$\Phi_e\left(\mathbf{r}\right) = \iiint_V \frac{q_e\left(\mathbf{r}'\right)}{4\pi\varepsilon\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}\mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{4.4}$$

kde $\Phi_e\left(\mathbf{r}\right)$ je elektrický potenciál v místě o polohovém vektoru $\mathbf{r}$, V je objem prostoru, přes který integrujeme, $q_e\left(\mathbf{r}'\right)$ je náboj v místě o polohovém vektrou $\mathbf{r}'$ a ε je permitivita prostředí. Tato rovnice obyčejně určuje rozložení potenciálu v prostoru vytvářeného přítomnými náboji.

V mém případě jsou však role známých a neznámých hodnot zaměněny. Známý je potenciál na elektrodách (protože ten je nastavován) a potřebuji naopak zjistit, jaké rozložení náboje tento potenciál vytváří. S touto znalostí je totiž možné zpětně dle rovnice (4.4) vypočítat jeho velikost v jakémkoliv bodě prostoru. Z potenciálu pak již není problém vyjádřit další veličiny nutné pro stanovení dielektroforetické síly.

Dle filozofie metody momentů provádí simulační skript diskretizaci prostoru (viz obr. 4.1), ve kterém problém řeší. Rovina, ve které leží elektrody, se překryje čtvercovou

sítí a za plochu elektrod se dále považuje souhrn plošek, kterých se původní definice tvaru elektrod dotýká (na obr. vyznačeny žlutě). Zmíněná čtvercová síť je ve skutečnosti mnohem hustší než je naznačeno na obrázku, takže nedochází k tak velkému zkreslení tvarů elektrod. Místo uvažování spojitého rozložení náboje na plochách elektrod nyní uvažuji diskrétní rozložení náboje. Každá žlutá ploška z obr. 4.1 musí být tak malá, aby šlo na ní přítomnou nábojovou hustotu považovat za konstantní a reprezentovat ji bodovým nábojem umístěným v jejím středu.

Integrál ve vzorci (4.4) tak přechází na sumaci

$$\Phi_e\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{i=1}^{N} \frac{q_e\left(\mathbf{r_i}\right)}{4\pi\varepsilon\left|\mathbf{r} - \mathbf{r_i}\right|}, \tag{4.5}$$

kde N je počet bodových nábojů vzniklý disktretizací prostoru elektrod (počet žlutých plošek na obr. 4.1).

Potenciál tak lze určit jako součet dílčích vlivů jednotlivých nábojů nacházejících se v tomto diskrétním prostoru. Přejdu-li nyní opět k situaci, kdy znám potenciál v určitém bodě a chci zjistit hodnoty nábojů, jež ho generují, lze vzorec (4.5) vnímat jako jednu rovnici o N neznámých (hodnot nábojů/nábojových hustot). Abych tyto neznámé dokázal vypočítat, potřebuji však alespoň soustavu N rovnic. Musím tedy znát potenciál ne pouze v jednom, ale celkem v N bodech prostoru.

Každá žlutá ploška z obr. 4.1 přísluší právě jedné elektrodě, a proto mohu potenciál této plošky ztotožnit s potenciálem dané elektrody. Jelikož potenciály elektrod znám (sám je na ně nastavuji) a plošek je přesně N, využiji jejich potenciály k sestavení zmíněné soustavy rovnic

$$\begin{aligned}
\Phi_e\left(\mathbf{r_1}\right) &= \sum_{i=1}^{N} \frac{q_e\left(\mathbf{r_i}\right)}{4\pi\varepsilon\left|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_i}\right|} \\
\Phi_e\left(\mathbf{r_2}\right) &= \sum_{i=1}^{N} \frac{q_e\left(\mathbf{r_i}\right)}{4\pi\varepsilon\left|\mathbf{r_2} - \mathbf{r_i}\right|} \\
&\vdots \\
\Phi_e\left(\mathbf{r_N}\right) &= \sum_{i=1}^{N} \frac{q_e\left(\mathbf{r_i}\right)}{4\pi\varepsilon\left|\mathbf{r_N} - \mathbf{r_i}\right|}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Pokud nyní všechny rovnice v této soustavě přenásobím členem $4\pi\varepsilon$ a zapíši v maticovém tvaru, získám

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 4\pi\varepsilon\cdot\Phi_e\left(\mathbf{r_1}\right) \\ 4\pi\varepsilon\cdot\Phi_e\left(\mathbf{r_2}\right) \\ \vdots \\ 4\pi\varepsilon\cdot\Phi_e\left(\mathbf{r_N}\right) \end{bmatrix}}_{b} = \underbrace{\begin{bmatrix} \left|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_1}\right|^{-1} & \left|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}\right|^{-1} & \cdots & \left|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_N}\right|^{-1} \\ \left|\mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}\right|^{-1} & \left|\mathbf{r_2} - \mathbf{r_2}\right|^{-1} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \left|\mathbf{r_N} - \mathbf{r_1}\right|^{-1} & \cdots & \cdots & \left|\mathbf{r_N} - \mathbf{r_N}\right|^{-1} \end{bmatrix}}_{Z} \underbrace{\begin{bmatrix} q_e\left(\mathbf{r_1}\right) \\ q_e\left(\mathbf{r_2}\right) \\ \vdots \\ q_e\left(\mathbf{r_N}\right) \end{bmatrix}}_{x}, \tag{4.7}$$

kde b, Z a x je zjednodušující značení, které používám pro odkazování se na tyto matice v dalším odvození.

Postup použitý v této práci je však ještě o něco komplikovanější. Matice x nevyjadřuje výsledné náboje, ale plošné nábojové hustoty. Prvky matice soustavy Z je pak tedy nutno navíc přenásobit velikostí každé plošky. Zcela přesně je lze vyjádřit ze vztahu [7]

$$z_{mn} = \iint_{S_n} \frac{1}{\sqrt{(x_m - x')^2 + (y_m - y')^2}} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y', \tag{4.8}$$

kde z_{mn} je prvek v řádku m a sloupci n, x_m, y_m jsou souřadnice středu plošky číslo m a x', y' jsou souřadnice bodů v povrchu plošky S_n, přes který se integruje.

Tím jsem v podstatě upustil od bodové idealizace, což mi pomůže k přesnějšímu vyjádření diagonálních prvků matice Z. Ty vyjadřují vliv náboje plošky na svůj vlastní potenciál a byly by jinak nekonečně veliké. Výsledný vztah je [7]

$$z_{mm} = \int_{-a}^{a}\int_{-a}^{a} \frac{1}{\sqrt{(x')^2 + (y')^2}} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y' = \int_{-a}^{a} \log\left[\frac{\sqrt{a^2 + (y')^2} + a}{\sqrt{a^2 + (y')^2} - a}\right] \mathrm{d}y', \tag{4.9}$$

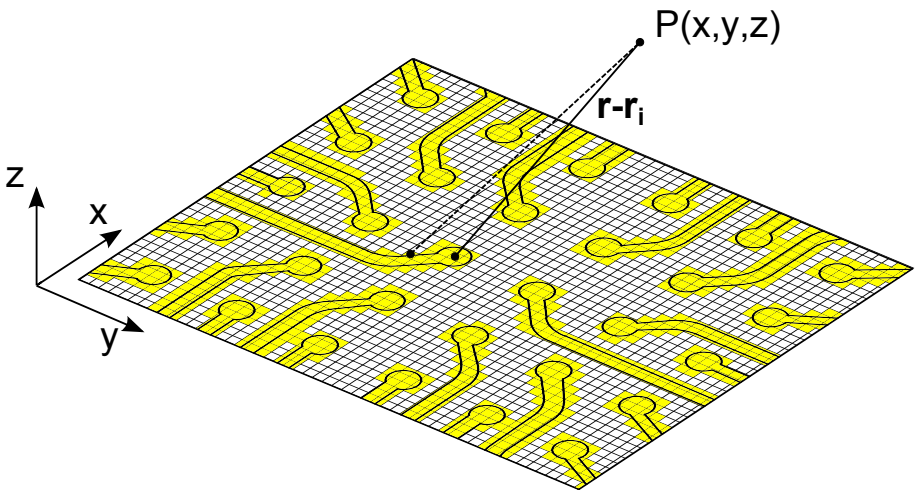
kde a je polovina délky hrany elementární plošky.

Obdobně exaktní vyjádření vzorce (4.8) použiji i pro výpočet prvků vyjadřujících vzájemné působení mezi sobě velmi blízkými ploškami (tedy prvky bezprostředně nad a pod hlavní diagonálou matice soustavy). Tím by se měla zvýšit přesnost simulace. U navzájem vzálenějších plošek je však za účelem zrychlení výpočtů ospravedlnitelné použití zjednodušené aproximace vztahu (4.8) [7]

$$z_{mn} = \frac{\Delta_s}{\sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}}, \tag{4.10}$$

kde Δ_s je plocha povrchu plošky číslo n.

Vypočtené nábojové hustoty lze integrovat přes elementární plošky na náboje a využít k výpočtu elektrického potenciálu v každém jiném bodě prostoru (nyní už i mimo zdiskretizovaný svět), což bylo mým cílem. [7–8]



Obrázek 4.1. Naznačení diskretizace elektrod pro použití metody momentů.

4.4 Popis klasického simulačního schématu

Ještě před popisem implementace se pokusím nastínit, jak celé simulační schéma v principu funguje. Na začátku se zvolí počáteční pozice částice nad elektrodovým polem a požadovaná cílová pozice (reference pro regulátor). Dále se už jedná v podstatě o uzavřený cyklus vykonávající po dobu simulace opakovaně následující úkoly:

- Z fázových posunů napětí přivedených na elektrody se na základě modelu elektrodového pole vypočítá elektrický potenciál a elektrická intenzita v blízkém okolí částice. Z nich se následně vyjádří dielektroforetická síla na částici působící.
- Ze Stokesova zákona se následně určí rychlost a směr pohybu částice a řešením tří jednoduchých diferenciálních rovnic se zjistí trajektorie pohybu částice za dobu jedné periody spuštění regulátoru.
- Z údajů o současné pozici částice a o její požadované cílové pozici regulátor určí fázové posuny napětí, které se stanou novými vstupními parametry simulace v další iteraci jejího cyklu.

Implementace klasického simulačního schématu založeného na principu metody momentů je uložena ve složce `simulation_for_regulator_design` a obsahuje dva hlavní ovládací skripty. Soubor `main.m` obsahuje popsanou simulaci s připojeným regulátorem, zatímco soubor `visualization.m` slouží ke generování grafů různých fyzikálních veličin získaných simulačním modulem. V tomto případě se konfigurace napětí na elektrodách zadávají ručně. Všechny ostatní soubory m-file implementují funkce starající se o dílčí podúkoly a zpravidla je jejich účel čitelný již z jejich názvu, případně stručného popisu na prvních řádcích souboru.

Výše nastíněný princip a hlavní strukturu simulace popíši na průchodu hlavním skriptem `main.m`. Při jeho spuštění jsou nejprve volány všechny konfigurační a inicializační rutiny. Funkce `simulation_config()` je zodpovědná za nastavení:

- všech nutných parametrů použitých materiálů,
- názvu souboru s definicí geometrie elektrodového pole (obrázek kódující svými barvami[1]) příslušnost bodů k dané elektrodě),
- přesnosti simulace (počtu elementárních oblastí, do kterých se prostor diskretizuje),
- a také parametrů, které jsou v průběhu simulace konstantní (např. amplituda a frekvence napětí na elektrodách).

`Simulation_init()` pak na základně obrázku elektrod a požadované přesnosti simulace sestaví dle vztahů (4.10),(4.9) matici soustavy (4.7). Následně se provede její Choleského dekompozice na součin dvou trojúhelníkových matic (z nichž jedna je pouhou transpozicí té druhé). Při výpočtu řešení dané soustavy rovnic lze využít jejího převodu na dvě soustavy

$$\begin{aligned} Ry &= b, \\ R^T x &= y, \end{aligned} \tag{4.11}$$

kde R a R^T jsou matice vzniklé zmíněným rozkladem. Jelikož jsou tyto matice trojúhelníkové, lze řešení získat pouhým zpětným dosazením a ušetřit tak značnou část výpočetního času. To samozřejmě platí pouze v případě, kdy je matice soustavy Z během všech výpočtů stejná a dekompozici tak stačí provést pouze jednou. Dále se již

[1]) Označíme-li si elektrody dvojicí indexů dle toho, v jakém řádku a sloupci se nacházejí (např. elektroda v druhém řádku a třetím sloupci bude $e_{2,3}$) bude mít obecná elektroda $e_{m,n}$ následující hodnoty RGB složek barvy: $R = 40 \cdot m$, $G = 40 \cdot n$ a $B = 0$

mění pouze vektor b pravých stran. Jelikož matice Z je v mém případě dána geometrií maticového pole, je během simulace konstantní a lze popsaný postup použít. Výpočetní čas nutný ke zjištění rozložení nábojů byl s jejím využitím zkrácen o 93,8 %.

Funkce `regulátor_config()` se pak stará kromě nastavení frekvence běhu regulátoru o nastavení jeho různých konstant (záleží na jeho vlastí implementaci).

`Regulator_init()` ho pak, pokud je nutné, připraví k běhu (např. načte ze souborů předdefinované konfigurace napětí na elektrodách).

Běh v `main.m` dále pokračuje zobrazením půdorysu maticového pole, ve kterém kliknutím zvolím postupně počáteční resp. požadovanou cílovou polohu mikročástice. Program následně vstoupí do cyklu, kde probíhá střídavě výpočet akčního zásahu regulátoru, výpočet rozložení nábojů na elektrodách (funkce `update_electrodes(phases)`) a simulace pohybu částice v odpovídajícím silovém poli po dobu periody regulátoru. Cyklus je ukončen po odsimulování předem nastaveného časového intervalu. Nakonec dojde k vykreslení trajektorie částice do původního obrázku s půdorysem pole. Během simulace se samozřejmě nepočítá velikost dielektroforetické síly v každém bodě uvažovaného prostoru, ale pouze v místě, kde se zrovna nachází střed mikročástice.

Z uživatelského hlediska je dobré vědět, že úpravou hodnot následujících proměnných lze simulaci přizpůsobit konkrétním nejběžnějším potřebám.

V `simulation_config()`:

- `mask_of_electrode_array` – název png souboru určující geometrii elektrod;
- `size_of_pixel` – jakou vzdálenost ve skutečnosti reprezentuje délka hrany pixelu v poskytnutém zdrojovém obrázku;
- `voltage` – amplituda napětí na elektrodách;
- `f` – frekvence napětí na elektrodách.

V `main.m`:

- `simulation_end_time` – délka simulace v sekundách;
- `bg` – název png souboru určující obrázek s půdorysem elektrodového pole, který se použije jako pozadí pro grafy s výslednou trajektorií pohybu částice. V zásadě může být stejný jako `mask_of_electrode_array`, ale je doporučeno volit spíše nějakou jeho úpravu s decentnějšími barvami.

Přesnost simulace lze pak ovlivnit několika různými způsoby:

- `number_of_elementary_areas` – (v `simulation_config.m`) počet plošek, na které jsou elektrody při výpočtu MOM děleny; vyšší počet přináší vyšší výpočetní zátěž při každé změně konfigurací fáze na elektrodách;
- `d` – (v `dep_force.m`) krok v síti bodů; může ovlivnit přesnost vypočtů dielektroforetické síly v každém bodu simulace, ale nijak neovlivní výpočetní čas;
- parametr AbsTol řešiče ODE45 – (v `main.m`) nižší číslo znamená vyšší přesnost simulace, ale zároveň prodlužuje každý její krok.

Skript `visualization.m` je výrazně jednodušší. Použitý buňkový mód (cell mode v m-file) umožňuje postupné spouštění jednotlivých výpočtů. Veškerá nastavení se provádějí buď pouze v první buňce tohoto souboru, nebo případně v `simulation_config()` tak jak bylo popsáno výše. Další buňkou se provede inicializace pro aplikaci metody momentů (sestavení matice soustavy, definice vektorů souřadnic atp.) a následují již jen výpočty a vizualize různých fyzikálních veličin (nutno spouštět postupně od první).

4.5 Hybridní přístup k simulaci

Hybridní simulační schéma využívá dále popsaných výhod plynoucích z možnosti nechat si dopředu vypočítat sadu řešení a za běhu vlastní simulace tato řešení pouze vhodně kombinovat. Mezi tyto výhody patří především nižší časová náročnost samotné simulace. Data lze navíc předem vypočítat i z modelu vytvořeného v programu Comsol, který obsahuje přesnější geometrii elektrod definovanou ve vektorovém formátu. Navíc tak lze využít přesnost FEM řešiče Comsolu i v rychlejších simulacích.

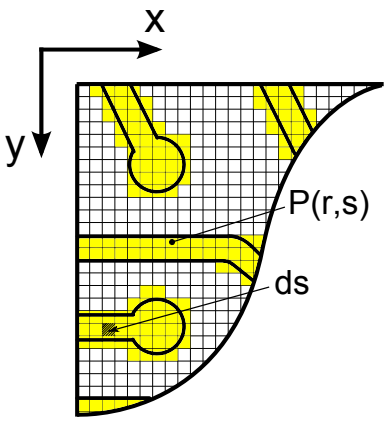
Podstatou metody je vyčíslení elektrické intenzity $\mathbf{E}$ v libovolném zadaném bodě prostoru $M(x, y, z)$ ze vstupů v podobě vektoru $\mathbf{U}$ napětí vztažených k jedné referenční elektrodě

$$\mathbf{E}\,(x, y, z) = f\,(\mathbf{U})\,. \tag{4.12}$$

Referenční elektrodu zavádím proto, abych získal hodnotu potenciálu, ke které mohu vztáhnout ostatní. Má-li pole n elektrod, bude mít tedy vektor $\mathbf{U}$ pouze $n - 1$ prvků

$$\mathbf{U} = [U_1 = \vartheta_1 - \vartheta_0, \cdots, U_n = \vartheta_n - \vartheta_0]\,, \tag{4.13}$$

kde ϑ_0 je potenciál referenční elektrody a ϑ_1 až ϑ_n jsou potenciály ostatních elektrod.



Obrázek 4.2. Diskretizace prostoru pro hybridní metodou dvourozměrného síťování elektrod. $P(r, s)$ je střed plošky r-tém řádku a s-tém sloupci. Překresleno z [9].

Hybridních metod výpočtu existuje hned několik (např. dvourozměrné síťování elektrod, trojrozměrné síťování elektrod s aplikací principu superpozice na elektrické pole nebo na elektrické potenciály). Implementoval jsem mým předchůdcem [10] vyzkoušenou varianta dvourozměrného síťování elektrod [9]. Tento přístup vychází z rozdělení plochy elektrod na $r \cdot s$ elementárních plošek (viz obr. 4.2), na nichž podobně jako v metodě momentů definuji potenciál. Elektrické pole $\mathbf{E}$ je pak součtem příspěvků elementárních nábojů $Q_{r,s}$ na povrchu elektrod v bodě $P(r, s)$ [9]

$$\mathbf{E}\,(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\varepsilon_m} \sum_{r=1}^{e_x} \sum_{s=1}^{e_y} Q_{r,s} \cdot \frac{\overrightarrow{P(r,s)M(x,y,z)}}{\left\|\overrightarrow{P(r,s)M(x,y,z)}\right\|^2} \mathrm{d}s, \tag{4.14}$$

kde ds je plocha elementární plošky, do kterých byl povrch elektrod rozdělen.

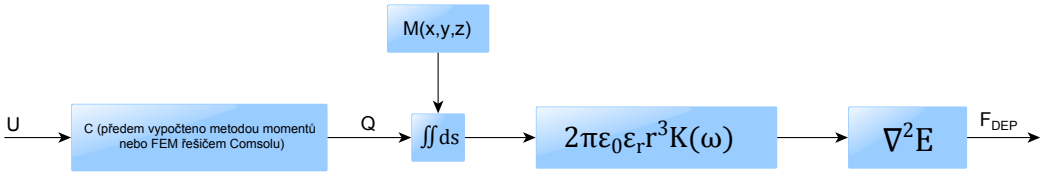
Náboj $Q_{r,s}$ je přitom vyjádřitelný s pomocí principu superpozice potenciálu [9] jako

$$Q_{r,s} = \sum_{m=1}^{n} C_{r,s,m} \cdot U_m, \tag{4.15}$$

kde $C_{r,s,m}$ je tzv. kapacitní matice sestavovaná při avizovaném předzpracování dat.

Abych mohl kapacitní matici C snadno určit, je nutno postupně provést simulační experimenty s přiváděním jednotkového napětí po řadě vždy pouze na jednu elektrodu. Tím se vynulují ve vzorci (4.15) všechny ostatní složky součtu a $C_{r,s,m}$ se pak pro danou aktivovanou elektrodu m bude rovnat $Q_{r,s}$. Pro plné určení matice C tedy stačí pouhých $n-1$ předem vypočítaných simulací, kde n je počet elektrod.

Ze získaných intenzit elektrického pole lze stejně jako v metodě momentů dopočítat další veličiny nutné k určení dielektroforetických sil. Kompletní proces metody dvourozměrného síťování je znázorněn na obr. 4.3.



Obrázek 4.3. Diagram procesu dvourozměrného síťování, použitého jako hybridní přístup k simulaci. Překresleno z [9].

4.6 Popis hybridního simulačního schématu

Princip funkce hybridního simulačního schématu se z vnějšího pohledu od toho klasického v podstatě nijak neliší. Stále se jedná o stejnou sekvenci obecných kroků vypsaných v bodovém seznamu na začátku kapitoly 4.4. Odlišnost je pouze ve způsobu získání hodnot elektrické intenzity, kterou elektrodové pole při daných vstupních napětích generuje.

Stejně se hybridní schéma podobá tomu klasickému i v oblasti implementace. Při popisu se tedy zaměřím především na jejich vzájemné rozdíly.

Veškerá implementace, včetně modelů a skriptů určených k vypočtení kapacitních matic, se nachází ve složce `simulation_for_regulation_design_hybrid_aproach`. Obdobně jako v klasické simulaci se zde nachází hlavní soubor `main.m` a na rozdíl od klasické simulace, kde byl pouze jeden, i dvojice souborů vizualizačních. Pro hybridní přístup je totiž možno data předem vypočítat různými způsoby. Jednou variantou je použití metody momentů popsané v kapitole 4.3, druhou pak využití řešiče programu Comsol a pro něj vytvořeného modelu. Dle toho se zvolí vizualizační skript `visualization_comsol.m` resp. `visualization_mom.m`. Typ preprocessingu lze samozřejmě určit i v hlavní simulaci. Soubor `main.m` je nyní rozdělen do několika buněk, z nichž ty první reprezentují právě jednotlivé způsoby vypočtení kapacitní matice C, poslední pak vlastní simulaci. Z dříve vytvořeného klasického simulačního schématu jsem vyjmul samotné jádro obsahující implementaci metody momentů, která je v rámci hybridního schématu umístěného v adresáři `simulation_using_comsol`. Preprocessing pomocí Comsolu může probíhat několika variantami. Jednou z nich je použití Live-Link rozhraní, kde jsou Comsolové simulace postupně spouštěny Matlabem

a data poté přímo načítána a případně i exportována. Druhým způsobem je zpracování již předem Comsolem vyexportovaných dat (rychlejší varianta pro opakované simulace). V prvním případě je nutno nastavit název modelu do proměnné `model_name`, v druhém případě pak cestu ke složce s exportovanými soubory (standardně `simulation_using_comsol/export/`⟨*název modelu*⟩). Mezi pokročilejší nastavení patří volba mezi interpolací dat pro výpočet hodnot v zadané mřížce bodů přímo v Comsolu nebo až Matlabu. To lze ovlivnit zakomentováním/odkomentováním funkcí `preprocessing_comsol_livelink()`/`preprocessing_comsol_liveling_grid()` a nebo případně jejich `from_exported_files` varianty. Nutné je, aby byla funkce `preprocessing_comsol_from_files_grid()` použita pouze na data generovaná jejím protějškem `preprocessing_comsol_liveling_grid()`. Tyto funkce, jež jsem implementoval, jsou vlastním jádrem hybridního simulačního schématu.

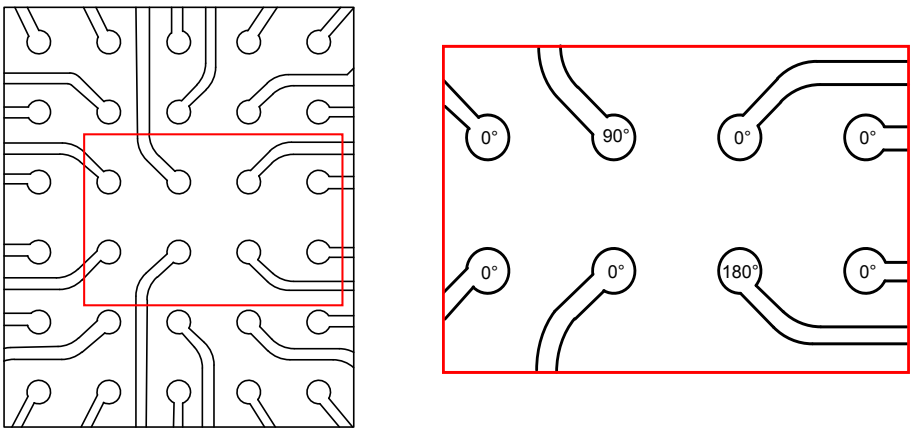
Ostatní nastavení jsou pak již víceméně totožná s implementací v klasickém přístupu a lze tedy vyjít z jejich popisu v sekci 4.4.

4.7 Porovnání jednotlivých simulačních přístupů

Pro odhad přesnosti jednotlivých přístupů jsem výsledky simulací srovnal s referenčním řešením. Za referenční výstupy lze považovat řešení generované přímo Comsolem, jelikož ta byla již v minulosti úspěšně porovnána (ačkoliv u jednoduššího modelu) s daty získanými z přesných analytických vztah [10]. Comsol jsem dosud v simulacích využíval pouze jako zdroj předem vypočítaných dat pro své hybridní simulační schéma, ale nyní jsem model rozšířil i o výpočet elektrických intenzit a dielektroforetických sil.

Takto zadaná simulace lze spustit buď přímo v Comsolu, nebo pomocí Live-Link propojení z Matlabu skrze skript `visualization_comsol.m` (umístěný ve složce `simulation_for_regulator_design_hybrid_aproach`). Cenou za přesnost výsledků této simulace je však její výpočetní a tudíž i časová náročnost (v některých případech se doby simulací pohybovaly až okolo 15–20 minut).

Porovnání jsem provedl na simulacích vzniklých na základně jednotných vstupních dat odpovídajících jednoduché, ale zato dostatečně zajímavé konfiguraci. Amplituda signálů bude 3 V, frekvence 50 kHz a rozložení fází dle obr. 4.4. Geometrie elektrod bude odpovídat neidealizovanému poli a do srovnání se proto promítnou i rozdíly v schopnosti simulovat složitější elektrodové tvary. Síly jsem určoval ve výšce 30 µm nad elektrodovým polem. Porovnání provedu z důvodu zvýšení čitelnosti grafů pouze na reprezentativním výřezu jehož přibližné umístění je na obr. 4.4 znázorněno jako červený obdélník.



Obrázek 4.4. Rozložení fází a výřez z pole, na kterém budou jednotlivá simulační schémata porovnávána. Elektrody mimo zobrazený výřez mají fázi 0°.

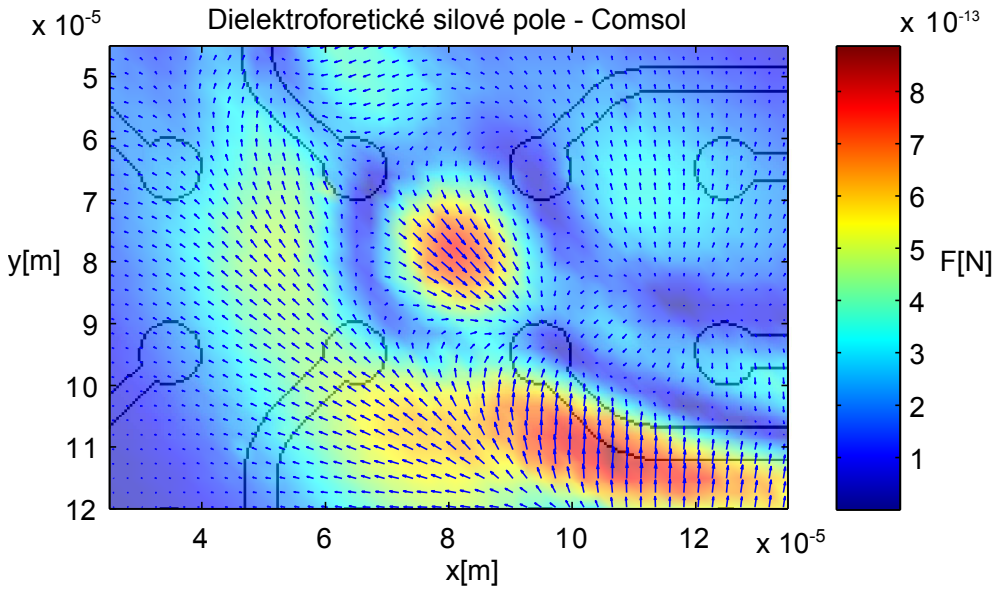
Referenčnímu řešení z programu Comsol odpovídá silové pole z grafu 4.5. Modré šipky znázorňují směr působení i vlastní velikost dielektroforetické síly. Údaj o velikosti je však pro jeho lepší čitelnost navíc podpořen i barevným podkladem vztahujícím se ke stupnici umístěné vpravo od grafu. Stejně je tomu i na dalších třech grafech (obr. 4.6, 4.7, 4.8) reprezentujících vytvořená simulační schémata.

Jak je z referenčního grafu patrné, dielektroforetická síla se v tomto případě pohybuje v řádu 10^{-13} N. V prostoru mezi čtveřicí elektrod vznikl jakýsi ostrůvek, v rámci nějž silové pole směřuje opačným směrem, než ve většině zbytku výřezu.

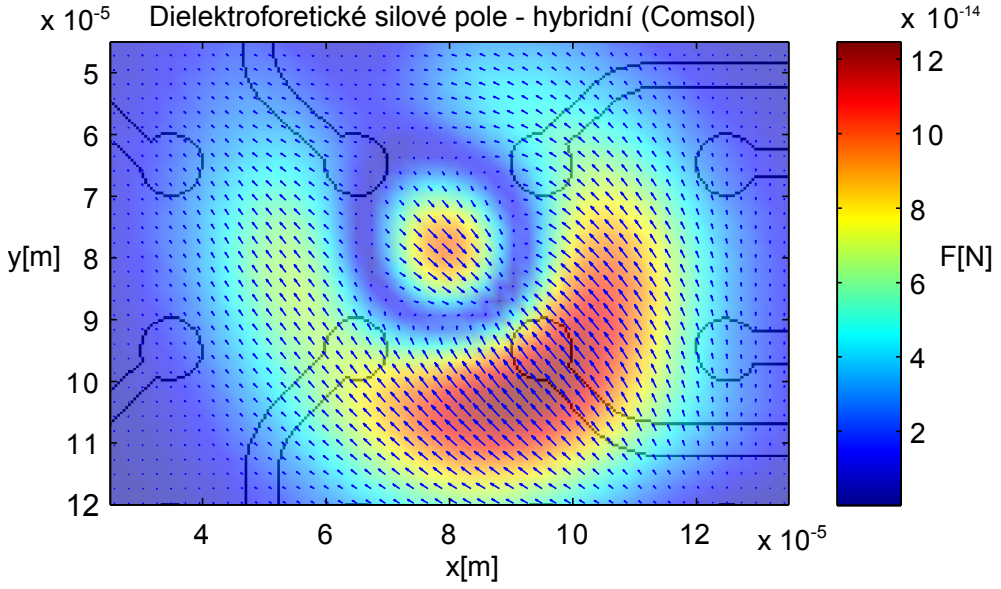
Ve srovnání se jako nejhorší ukázala být simulace hybridní s daty předem vypočítanými Comsolem (viz obr. 4.6). Od referenčního řešení se odlišuje jak řádem velikosti dielektroforetických sil, tak jejich směrem v mnoha místech simulované oblasti.

Velikostí dielektroforetické síly se s referenčním výsledkem neshoduje ani řešení získané metodou momentů (viz obr. 4.7). Rozdíl zde však činí pouze jeden řád. Co se týče rozprostření velikosti a směru síly se však toto schéma jeví spolu s posledním popsaným jako jedno z nejlepších.

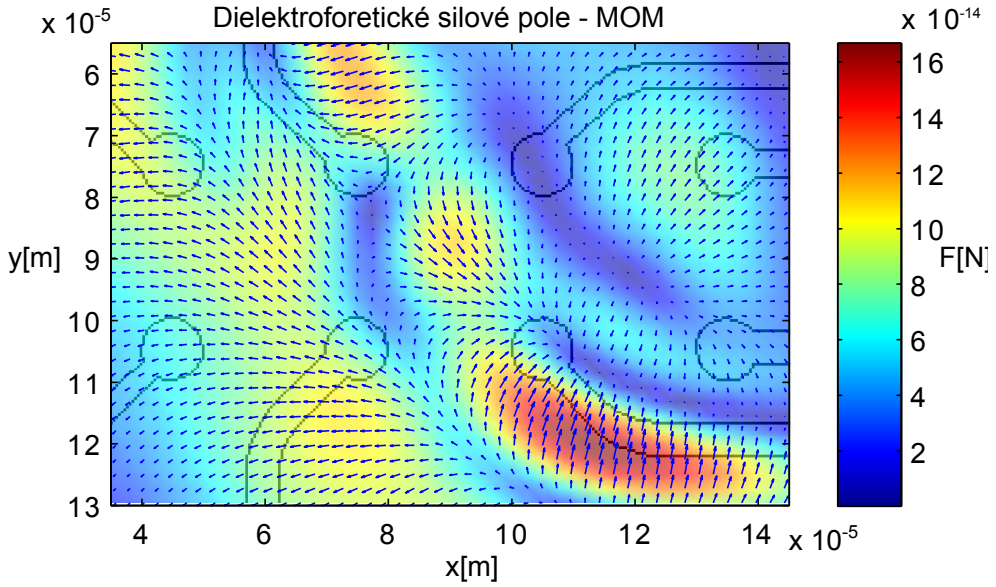
Nejlepších výsledků pak ve vzájemném srovnání dosáhlo simulační schéma využívající data předem vypočítaná metodou momentů (viz obr. 4.8). Velikosti vypočtených sil jsou srovnatelné s referenčním řešením a i směrově se shodují velmi dobře. Pro další použití v návrhu regulátorů jsem protov využil převážně této metody.



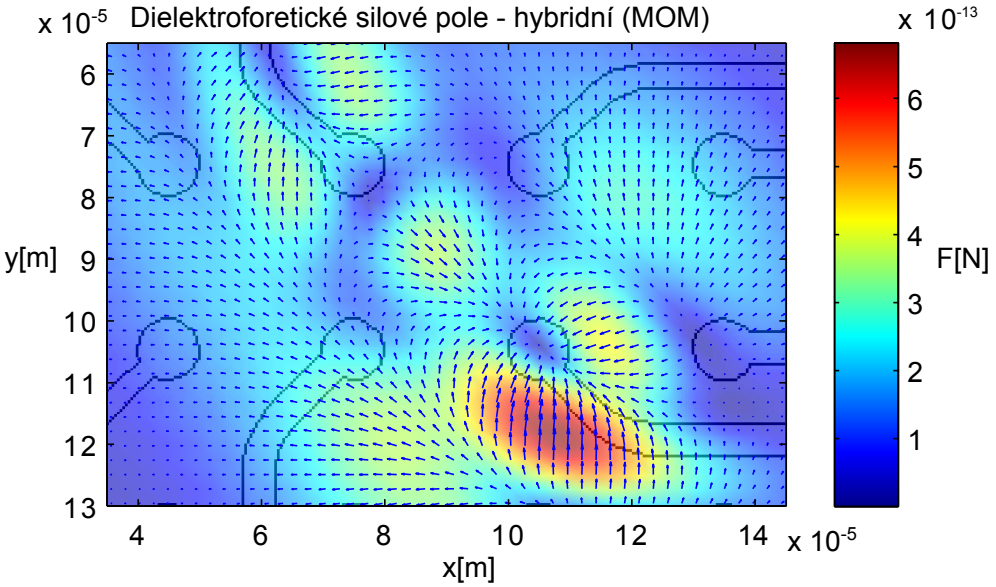
Obrázek 4.5. Výsledek simulace dielektroforetického silového pole v programu Comsol. Šipky značí směr a velikost síly. Podbarvení pak velikost síly upřesňuje.



Obrázek 4.6. Výsledek simulace dielektroforetického silového pole při použití hybridního přístupu s daty předem vypočítanými Comsolem. Šipky značí směr a velikost síly. Podbarvení pak velikost síly upřesňuje.



Obrázek 4.7. Výsledek simulace dielektroforetického silového pole při použití metody momentů. Šipky značí směr a velikost síly. Podbarvení pak velikost síly upřesňuje.



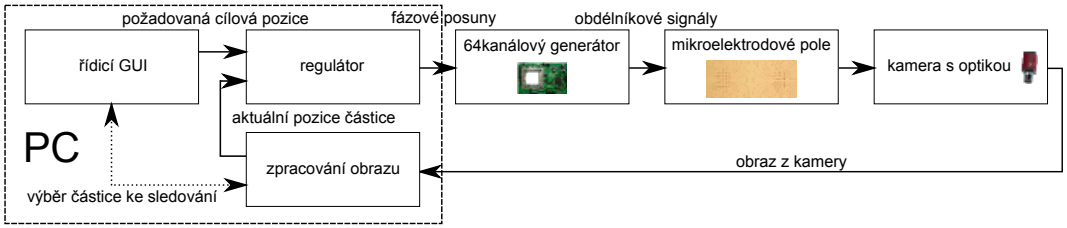
Obrázek 4.8. Výsledek simulace dielektroforetického silového pole při použití hybridního přístupu s daty předem vypočítanými metodou momentů. Šipky značí směr a velikost síly. Podbarvení pak velikost síly upřesňuje.

Kapitola 5
Návrh regulátoru polohy

Poté, co jsem vytvořil, otestoval a porovnal jednotlivá simulační schémata, jsem začal s vlastním návrhem řízení. Cílem regulační úlohy je navigovat kuličku prostřednictvím dielektroforetických sil z její počáteční pozice do daného cílového bodu. Ačkoliv se kulička pohybuje v prostoru, úkolem regulace je řízení polohy pouze v horizontální rovině. Ideálně by mělo jít s částicemi pohybovat po libovolné trajektorii.

Úlohou simulací v tomto procesu je poskytnout rychlý a dostatečně přesný náhled na úspěšnost dané řídicí strategie. Její otestování v praxi formou experimentů bývá totiž časově poměrně náročné. Regulátor může také případně data ze simulací přímo zahrnout do výpočtu svého akčního zásahu. Nejprve jsem využil simulačních schémat s modelem obsahujícím geometrii idealizovaného pole a při případném úspěchu jsem se pokusil navrhnutý řídicí algoritmus specifikovat i pro složitější neidealizovaný model.

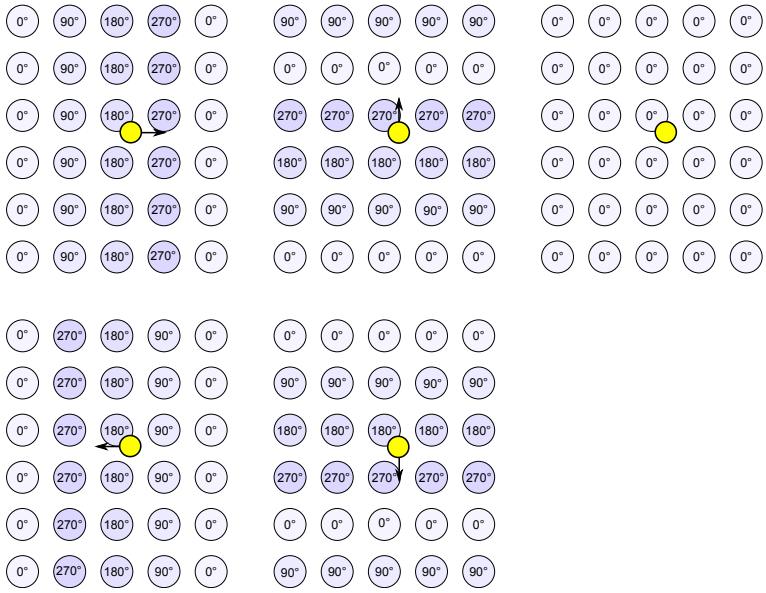
Blok regulátoru se všemi svými vstupy a výstupy je schematicky znázorněn v rámci blokového schéma celého systému na obr. 5.1. Vstupem do regulátoru je současná poloha částice (její souřadnice) a pozice, kterou vyžadujeme jako cílovou. Jejich souřadnice se od sebe v regulátoru odečtou a dle rozdílu v poloze a případně se určí fázové posuny napětí k nastavení na generátoru.



Obrázek 5.1. Blokové schéma celého systému.

5.1 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů

Nejjednodušším regulátorem pro řízení polohy částice v rovině může být algoritmus vykonávající prosté přepínání mezi pěti konfiguracemi fází ze schematického obr. 5.2. Dle aktuální situace se zvolí jeden ze čtyř základních směrů pohybu: doleva, doprava, nahoru a dolů (při pohledu na pole shora). Poslední možností je pak uplatnění konfigurace fází odpovídající klidovému stavu, která se využije v případě, že se již částice nachází v tolerovatelné vzdálenosti od cílové pozice.



Obrázek 5.2. Soustava pěti základních předdefinovaných rozložení fází využívaných regulátorem `regulator_basic`. Žlutý kruh značí částici a šipka směr jejího pohybu.

Celá implementace regulátoru je umístěna ve složce `regulator_basic` simulačního schématu a sestává se ze tří standardních již v předchozí kapitole popsaných souborů `regulator.m`, `regulator_config.m` a `regulator_init.m`. Navíc tato složka obsahuje pomocnou funkci `load_phase_configurations.m` používanou v inicializaci regulátoru k načtení připravených konfigurací z podsložek `faster_configurations` resp. `slower_configurations`. Ty se liší pouze velikostí gradientu fáze (rychlejší obsahuje viz obr. 5.2 posloupnost 0° 90° 180° atd., pomalejší pak 0° 22,5° 45° atd.) a tedy i výslednou rychlostí pohybu částice. Mezi nimi je možno přepínat v konfiguračním souboru.

Snahou tohoto regulátoru je při každé jeho iteraci minimalizovat v dané chvíli větší z dvojice odchylek souřadnic ve vodorovném a svislém směru. Důsledkem toho je pohyb po trajektoriích tvaru patrného z obr. 5.9. Tento obrázek zachycuje pohled svrchu na idealizované elektrodové pole. Každá z celkem třiceti kružnic reprezentuje jednu mikroelektrodu. Modrý kříž značí počáteční pozici částice, červený pak referenční polohu zadanou na počátku simulace (tedy pozici, na kterou se regulátor snaží částici přesunout). Barevné křivky v obrázku značí trajektorie částic při použití různých regulátorů. Pro zde popisovaný základní regulátor (`regulator_basic`) platí dle legendy modrá čára. Obrázek obsahuje pro porovnání i trajektorie částice řízené při stejných počátečních podmínkách i některými dalšími regulátory. Ty však popíši až později.

Na obr. 5.10 je obdobný výsledek, tentokrát pro neidealizované elektrodové pole, což je zdůrazněno podkladovým obrázkem obsahujícím i náčrt přívodních cest k elektrodám. Ačkoliv jsem tento regulátor navrhl k použití na poli idealizovaném, funguje dle simulací bez jakýchkoliv úprav i na poli neidealizovaném.

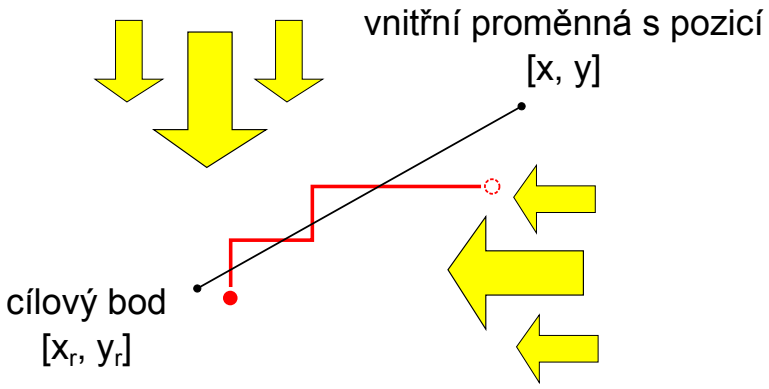
5.2 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů s pamětí

Pokud regulátoru představenému v minulé kapitole přidám schopnost uchovávat si v paměti některé jeho minulé vstupy a tyto informace poté využívat k výpočtu nového akčního zásahu, bude schopen s vhodným řídicím algoritmem zdánlivě pohybovat objektem po úsečce (potažmo jakékoliv trajektorii z úseček složené). Při přiblížení však

nebude dráha pohybu hladká, ale bude tvořena schody vzniklými neustálým přepínáním mezi pouze čtyřmi předdefinovanými směry pohybu. Tyto schody však budou s rostoucí frekvencí regulátoru stále drobnější.

Algoritmus si ve speciální proměnné uchovává každou n-tou dvojici souřadnic [x, y] řízeného objektu (n lze nastavit v konfiguračním souboru). Díky tomu je schopen si sestrojit virtuální úsečku mezi tímto a cílovým bodem, kterou následně kuličkou sleduje. Princip této činnosti je znázorněn na obr. 5.3. Regulátor při každém svém spuštění vyhodnotí, zda se kulička nachází nad či pod znázorněnou úsečkou a dle toho zvolí takový směr síly, aby se částice k úsečce přibližovala. Kdyby si regulátor nepamatoval žádnou z dřívějších pozic částice (ležících vždy v blízkosti úsečky), neměl by žádné vodítko k určení toho v jakém poměru aplikovat jednotlivé směry. Implementace regulátoru je umístěna ve složce `regulator_basic_memory`.

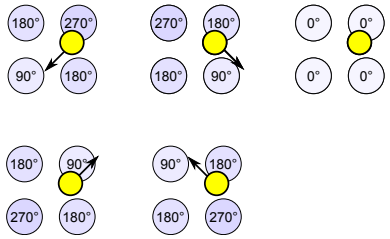
Stejně jako u předchozího regulátoru, nelze ani zde metodu dále konkretizovat pro neidealizované pole. Výsledky simulací jsou na obr. 5.9 a obr. 5.10, ve kterých jim přísluší zelené křivky.



Obrázek 5.3. Schematické znázornění principu činnosti regulátoru využívajících soustavy předdefinovaných směrů a paměti. Žluté šipky znázorňují směr síly působící na částici pokud se nachází pod resp. nad přímkou definovanou počátečním a koncovým bodem.

5.3 Regulátor využívající soustavy předdefinovaných základních směrů s lokálním působením

Tento regulátor se od prvního prezentovaného liší především tím, že u něj nedochází k nastavování směru působení dielektroforetických sil globálně na celém povrchu pole, ale pouze v oblasti vymezené čtvercem čtyř k částici nejbližších elektrod. Výhodou tohoto přístupu je zejména potenciální možnost pohybovat nezávisle s více objekty v různých částech pole. Kromě tohoto rozdílu se oba regulátory liší také v použitých konfiguracích fází. Tento využívá čtyř uspořádání (viz obr. 5.4) vyvolávajících pohyb ve směrech rovnoběžných s úhlopříčkami dané čtvercové oblasti a jedno doplňkové pro klidový stav. S těmito konfiguracemi fází bylo v simulacích uvažujících pouze čtveřice nejbližších elektrod dosaženo nejlepších výsledků (největší síly a především takřka stejný směr pohybu ve všech místech čtyřelektrodové oblasti).



Obrázek 5.4. Soustava základních čtyř předdefinovaných rozložení fází pro regulátor `regulator_basic_localized`. Žlutý kruh značí částici a šipka směr jejího pohybu.

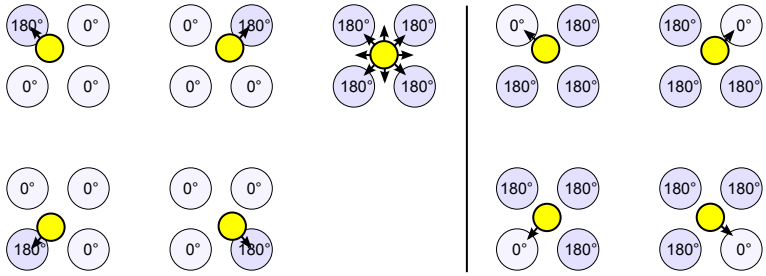
Implementace tohoto regulátoru je uložena ve složce `regulator_basic_localized`.

Výsledky simulací aplikace regulátoru na idealizovaném i neidealizovaném modelu jsou opět na obr. 5.9, resp. obr. 5.10. V obou případech jsou jim příslušné trajektroie mikročástice vyznačeny červenou křivkou. Za povšimnutí stojí, že v případě simulace s modelem neidealizované pole je trajektorie vlivem přívodních vodičů mírně zdeformovaná od případu ideálního pole.

Podobně jako u nelokalizované varianty základního regulátoru jsem i zde vytvořil klon využívající výhod paměti minulých vstupních hodnot. Výsledky z této modifikace algoritmu jsou na obr. 5.9 resp. obr. 5.10 a přísluší jim v nich tyrkysová křivka.

5.4 Regulátor využívající posuvu silové pasti

V rámci experimentování se změnami fází na elektrodách jsem zpozoroval, že při jistých rozloženích fází dochází k formování jakýchsi silových pastí. S jejich pomocí lze řízenou částici koncentrovat do středu oblasti mezi čtvercem elektrod nebo nad jednotlivé elektrody (viz obr. 5.5 s použitými konfiguracemi). Posunem této pasti se pak pohybuje i částicí. Při posunu ze středu oblasti k elektrodám je nutno si dopomoci posledními čtyřmi konfiguracemi fází oddělenými na obr. 5.5 od zbývajících svislou čarou. Řízený objekt vykazuje zig-zag pohyb pozorovatelný na obr. 5.11 s výsledky simulace pro idealizované pole. Trajektorie částice je značena modrou čarou. Pro pole neidealizované je bohužel dle simulací tento regulátor pravděpodobně nepoužitelný. Implementace tohoto regulátoru se nachází ve složce `regulator_trap` a skládá se ze tří standardních souborů s funkčností popsanou výše.



Obrázek 5.5. Soustava základních devíti předdefinovaných rozložení využívaných regulátorem `regulator_trap`. Žlutý kruh značí částici a šipka směr jejího pohybu.

5.5 Regulátor využívající „look-up“ tabulku předem vypočítanou genetickým algoritmem

Další, ještě o něco sofistikovanější, variantou regulace je využití metody optimalizace genetickým algoritmem. Ještě než popíši detaily implementace toho regulátoru a princip

využití „look-up“ tabulky, poskytnu v následující podsekci alespoň základní představení principu genetických algoritmů.

5.5.1 Princip genetického algoritmu

Genetický algoritmus je optimalizační metoda inspirující se současnými poznatky o evoluci živočichů a rostlin v přírodě. Z počáteční sady náhodných řešení problému (ovšem ne nutně kvalitních řešení) tvoří pomocí mechanismů simulujících přirozenou selekci, křížení a mutaci řešení nová, v průměru lepší. Sady řešení nazýváme generacemi, jednotlivá řešení pak genomy. Necháme-li řešení vyvíjet po vyšší počet generací, měly by postupně dokonvergovat k co možná nejlepšímu. Kvalita řešení je určována tzv. fitness funkcí (hodnotící funkcí), která každý genom ocení číslem (čím lepší řešení tím vyšší číslo nebo naopak). Správně formulovaná fitness funkce musí co nejlépe vystihovat kritéria kvality, ale zároveň musí být v zájmu efektivity algoritmu výpočetně nenáročná.

5.5.2 Implementace regulátoru

S pomocí genetického algoritmu se vypočte tabulka, přiřazující každému bodu z předem sestavené sítě a každému z předem nastavených úhlů pohybu nejlepší nalezené rozložení fází. O tom, které rozložení fází je lepší, rozhoduje hodnotící funkce, jež v našem případě preferuje především přesnost ve směru výsledné síly (a tedy i směru pohybu) a s menší vahou její velikost. V průběhu regulace se pak v sestavené tabulce v závislosti na poloze řízeného objektu hledá co se pozice částice týká nejbližší předem vypočítaný záznam. Jemu odpovídající fáze napětí se následně nechají na elektrodovém poli generovat. Pro použití „look-up“ tabulky jsem se rozhodl z důvodu poměrně vysoké časové náročnosti optimalizace genetickým algoritmem. Přichází se tak sice o výhodu nechat si určit rozložení fází pro jakýkoliv bod a libovolný směr (regulátor je omezen pouze na ty předem vypočtené), ale na druhou stranu je možné regulátor volat s dostatečnou frekvencí. Veškerá náročnost se totiž smršťuje pouze na vyhledání odpovídajícího řádku v „look-up“ tabulce.

Tento typ regulátoru lze na rozdíl od předchozích přímo specifikovat na konkrétní použité maticové pole. Stačí k tomu pouze, aby genetický algoritmus používal odpovídající přesnější simulační schéma.

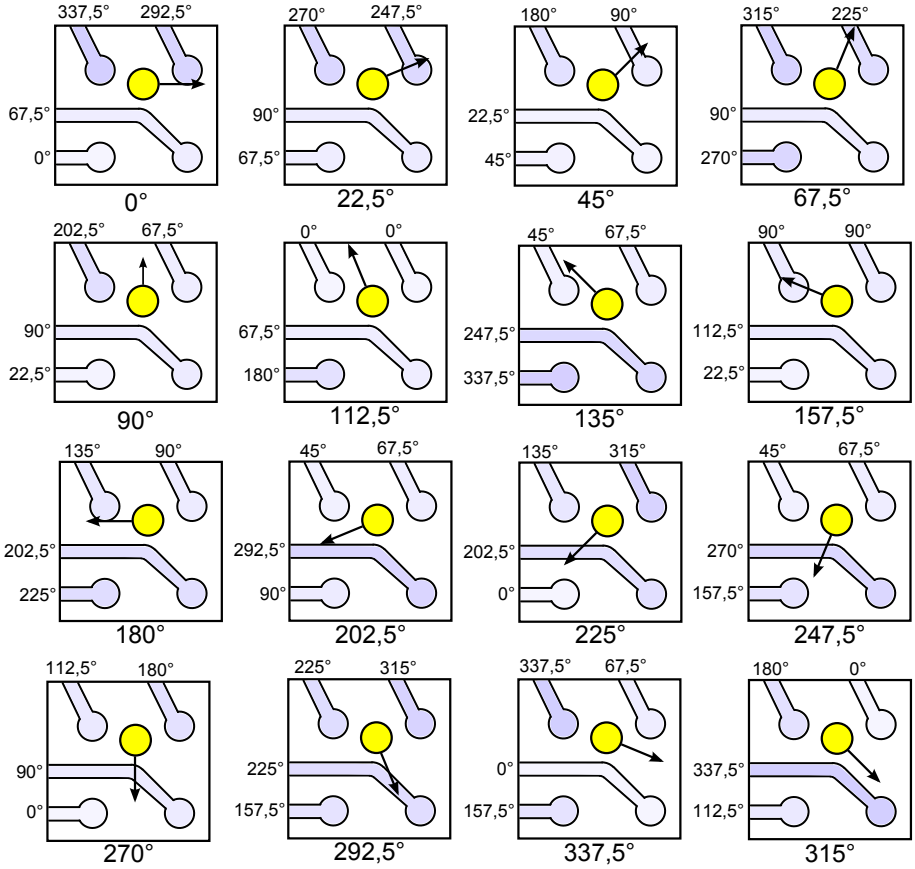
V případě idealizovaného elektrodového pole stačí vzhledem k periodicitě jeho vzorku vypočítat lookup tabulku pouze pro body ležící mezi jednou čtveřicí elektrod a tu pak nechat regulátor dle své potřeby mapovat na další umístění. U neidealizovaného případu je nutné z důvodu jeho nepravidelnosti, dané přítomností elektrodových přívodů, vytvořit dostatečně hustou mříž bodů přes celou plochu pole. Možné je též vhodně využít některé z jeho symetrií.

Šlechtění řešení pomocí genetického algoritmu je časově poměrně náročné, a bylo proto nutno program co nejvíce zrychlit. Kvůli redukci času výpočtu a rychlejší konvergenci genetického algoritmu jsem se rozhodl, že budou jednotlivé genomy v implementaci obsahovat pouze čtyři fáze nejbližších elektrod (u neidealizovaného případu výjimečně fází pět, aby se využilo i vlivu přívodu vedoucího pouze skrze uvažovanou oblast). I přes vynaložené úsilí při ladění parametrů algoritmu se mi výpočet tabulky se 750 body a 16 směry nepodařilo zkrátit na méně než 24 hodin.

Jednotlivé části genetického algoritmu (jako je např. selekce nejlepších jedinců, křížení atd.) lze realizovat řadou různých způsobů odrážejících principy evoluce ve větší či menší přesnosti. Například je vhodné si vždy ponechávat uloženo nejlepší řešení, protože i velmi dobrý jedinec nemusí v částečně náhodné selekci uspět. V této práci jsem

použil skript SpeedyGA[1]), jenž vytvořil Keki Burjorjee a je volně dostupný na webu Matlab Central. Tento skript jsem mírně upravil, tak aby odpovídal mým požadavkům (tedy například, aby fitness funkci minimalizoval namísto defaultní maximalizace). Implementace regulátoru je umístěna ve složce `regulator_ga`.

Příklad fází vypočtených genetickým algoritmem pro 16 různých směrů pohybu a pro jednu polohu kuličky je uveden na obr. 5.6.



Obrázek 5.6. Příklad fází vypočtených genetickým algoritmem pro 16 různých směrů pohybu a pro polohu kuličky naznačenou na obr. ($x = 15\,\mu\text{m}, y = 10\,\mu\text{m}$).

Výstup ze simulace tohoto regulátoru je uveden pro idealizované pole na obr. 5.12, pro neidealizované pak na obr. 5.13. Jedná se opět o vrchní pohledy na jednotlivá pole. Tentokrát však každý z obrázků obsahuje pouze jednu trajektorii označenou modrou barvou. Ideálně by v případě tohoto regulátoru měly být výsledné trajektorie částice přímými spojnicemi dvojice počátečního a koncového bodu, nicméně z obrázků je patrné, že i v případě simulace není pohyb částice zcela přímočarý. Důvodem může být například nedostatečný počet záznamů v „look-up“ tabulce vyúsťující ve velké zaokrouhlování polohy částice a následné přílišné směrové odchylky v působících silách nebo samotná neoptimálnost konfigurací nalezených genetickým algoritmem.

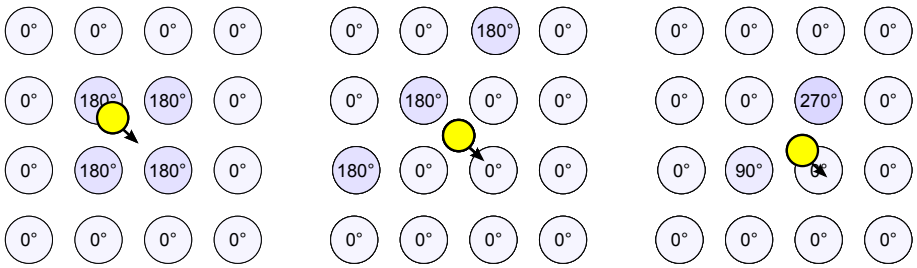
5.6 Regulátor využívající odpuzování od elektrod

Zcela jiným přístupem je pak regulátor využívající pouze odpudivých sil negativní dielektroforézy. K tomuto návrhu jsem přistoupil zejména z důvodu obav o vyvolání dosta-

[1]) `http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/15164`

tečně silné dielektroforézy postupnou vlnou při dané kombinaci vodivostí a permitivit použitých materiálu (viz Clausius-Mosotti faktor).

Na základě simulací jsem vybral sadu konfigurací fází pro každý z osmi směrů pohybu, které by měl být tento regulátor schopen vyvolat. Z této sady se, dle pozice částice ve čtvercové oblasti nejbližších čtyř elektrod, vybere jedna v dané poloze nejúčinnější konfigurace a ta se (dle své velikosti 2×2 nebo 4×4 fází) aplikuje na nejbližší 4 nebo 16 elektrod. Příklad vzniklého sledu fází pro pohyb v diagonále elektrodového pole je zobrazen na obr. 5.7.

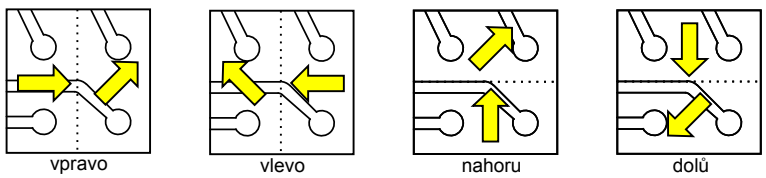


Obrázek 5.7. Příklad sledu fází nastovovaných regulátorem `regulator_repulsive` při pohybu v diagonálním směru. Žlutý kruh značí částici a šipka směr jejího pohybu.

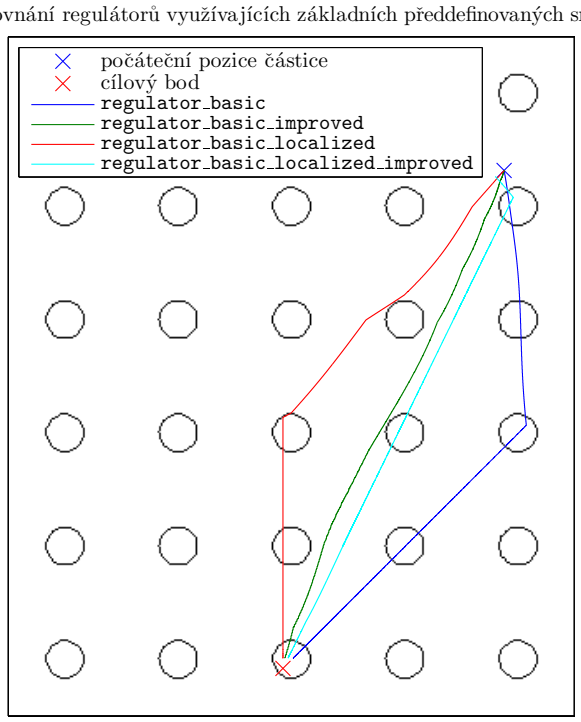
Regulátor pak z těchto osmi možných směrů pohybu volí ten nejbližší ke spojnici současného a cílového bodu. Příklad jeho činnosti a výsledné trajektorie částice je zachycen na obr. 5.14 ze simulace. Z něj je patrné, jak se částice působením sil negativní dielektroforézy snaží elektrodám vyhýbat. V případě, že se však shodou okolností dostane do oblasti přímo nad elektrodou, zůstane tam již uvězněna. Dielektroforetické síly generované touto elektrodou částici odpuzují od jejích hran a kuličku centrují nad jejím povrchem. Téměř nemožné je vymanit částici z této pozice i s pomocí blízkých elektrod, neboť jejich silový dosah je nižší než je zapotřebí. Částice proto setrvává v pozici nad elektrodou. Přesně tento jev bude pravděpodobně i na reálném elektrodovém poli největším problémem regulace. Implementace tohoto regulátoru se nachází ve složce `regulator_repulsive`.

5.7 Heuristické vylepšení regulátoru využívajícího soustavy předdefinovaných směrů

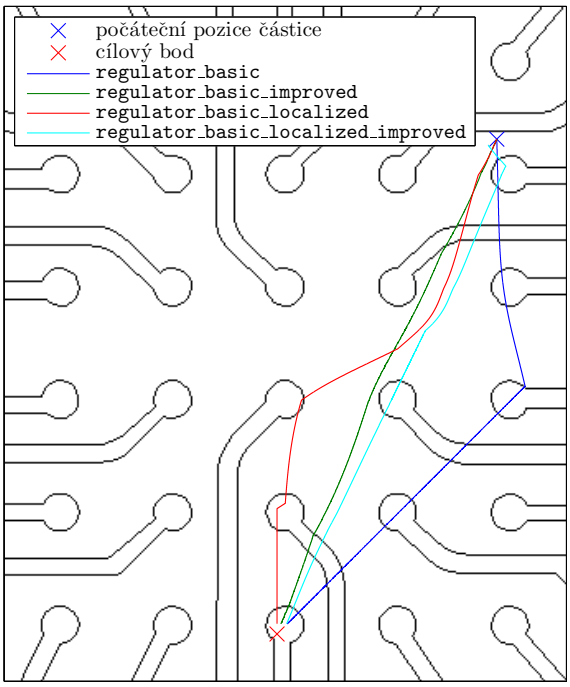
Tento regulátor nevznikl přímo z podkladů získaných simulací, ale vytvořil jsem ho až na základě pozorování učiněných během experimentů s prvním popsaným regulátorem. Jedná se v podstatě pouze o jeho úpravu, která by měla zlepšit chování v místech s přítomností vodičů patřících vzdálenějším elektrodám Z množství provedených experimentů jsem stanovil nová pravidla především pro zmíněné problematické oblasti pole. Příklad pro jednu z nich (levý horní roh pole) je na obr. 5.8. Šipky na obrázku znázorňují, jaký směr musí mít postupná vlna, pokud se částice nachází v dané oblasti. Implementace tohoto regulátoru se nachází ve složce `regulator_basic_heuristic`.



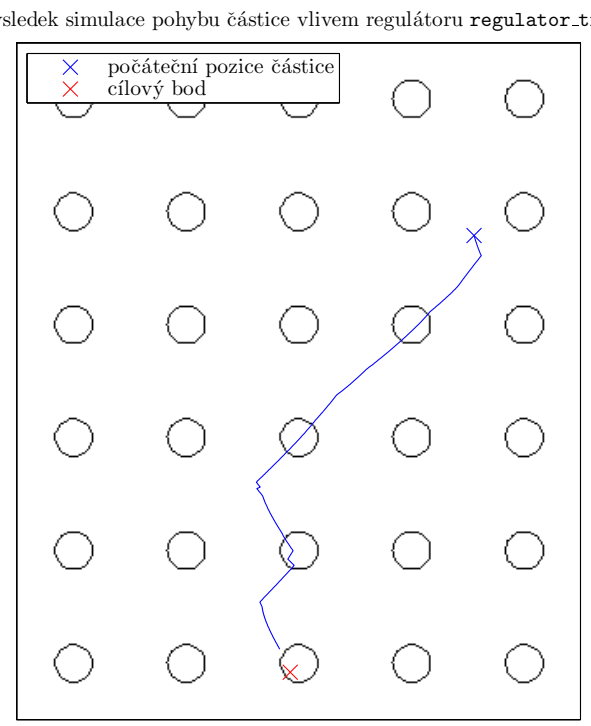
Obrázek 5.8. Příklad experimentálně nalezených směrů postupné vlny (šipky v obrázku) vylepšujících pohyb ve čtyřech základních směrech (nahoru, dolů, doleva, doprava) na neidealizovaném elektrodovém poli.



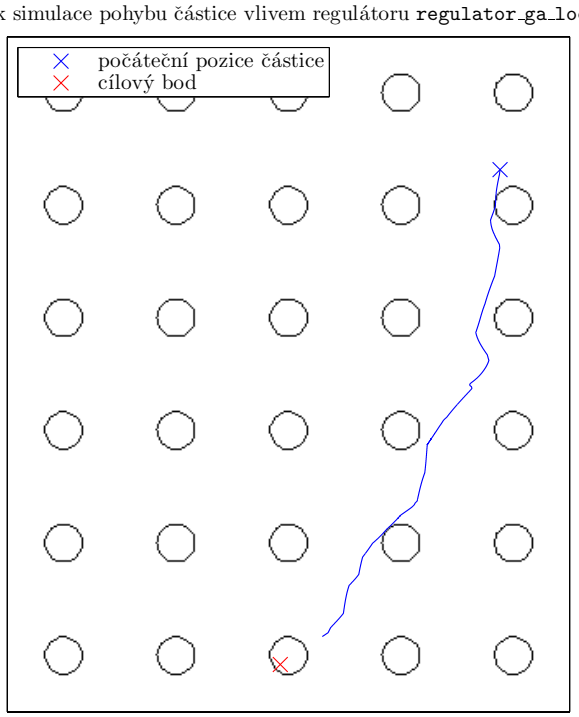
Obrázek 5.9. Porovnání výsledků simulace pohybu částice nad idealizovaným elektrodovým polem generovaného regulátory odvozenými od regulátoru `regulator_basic`.



Obrázek 5.10. Porovnání výsledků simulace pohybu částice nad neidealizovaným elektrodovým polem generovaného regulátory odvozenými od regulátoru `regulator_basic`.

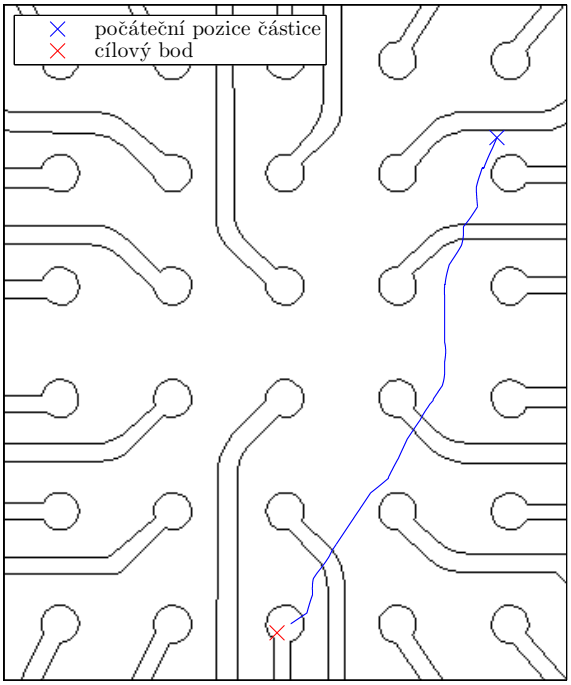


Obrázek 5.11. Výsledek simulace pohybu částice nad idealizovaným elektrodovým polem vlivem regulátoru `regulator_trap`.



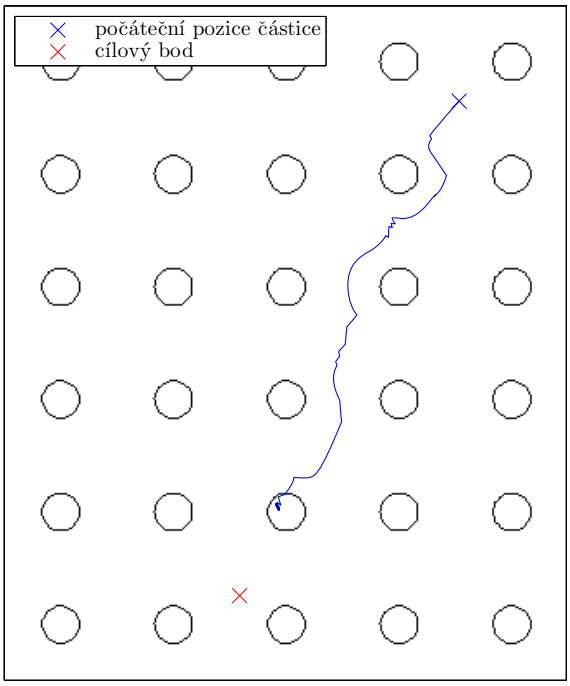
Obrázek 5.12. Výsledek simulace pohybu částice nad idealizovaným elektrodovým polem vlivem regulátoru `regulator_ga_localized`.

Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru `regulator_ga`



Obrázek 5.13. Výsledek simulace pohybu částice nad neidealizovaným elektrodovým polem vlivem regulátoru `regulator_ga`.

Výsledek simulace pohybu částice vlivem regulátoru `regulator_repulsive`



Obrázek 5.14. Výsledek simulace pohybu částice nad idealizovaným elektrodovým polem vlivem regulátoru `regulator_repulsive`.

Kapitola 6
Experimentální ověření regulátorů

Po úspěšném návrhu regulátorů, popsaném v předchozí kapitole, jsem mohl přejít k jejich vyzkoušení na kompletní laboratorní sestavě.

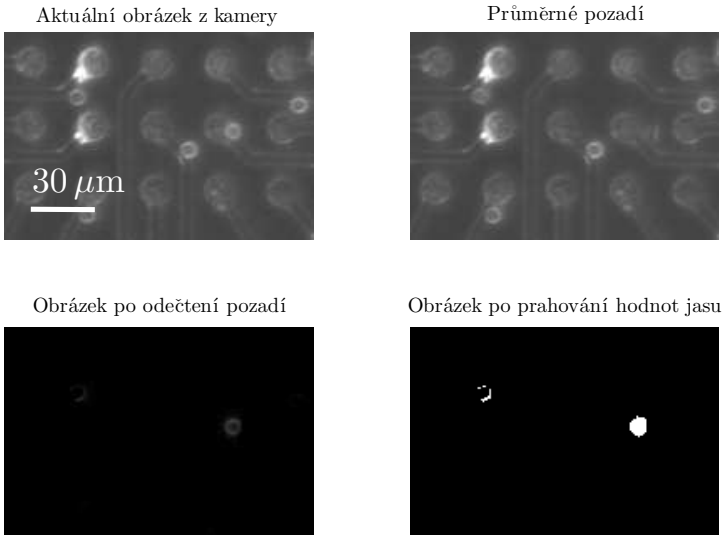
6.1 Příprava podpůrného programového vybavení

Jelikož jsem všechny regulátory realizoval jako klasické funkce v Matlabu, jejichž vstupem je referenční (cílová) a současná pozice částice a jejichž výstupem je akční zásah (tedy rozložení fází na jednotlivých elektrodách maticového pole), bylo potřeba vytvořit program dodávající funkci regulátoru právě tyto informace a naopak interpretující její výsledky. K tomu jsem zvolil prostředí Simulinku. Toto dále popisované simulační zázemí je umístěno ve složce `experimental_setup` na přiloženém CD.

Údaje o aktuální poloze částice jsou získávány její detekcí z obrazu kamery snímající oblast manipulace. Na počátku experimentu je uživatel prostřednictvím kalibrační GUI (graphical user interface – *GUI*) programu proveden jednoduchou tříkrokovou kalibrací obrazu přizpůsobující detekční algoritmus aktuálním světelným podmínkám, natočení a přiblížení elektrodového pole a dalším podobným vlivům do jisté míry unikátním při každém jeho spuštění.

V prvním kroku je uživatel požádán o definici souřadného systému kliknutím do středů tří rohových elektrod (ve tvaru písmene „L“). V dalším kroku si program zjistí obraz průměrného pozadí (statických prvků ve scéně) jako medián každého pixelu ze sady snímků zachycených během náhodného míchání částic. Toto pozadí se pak odečítá od aktuálního obrazu z kamery a ten se tak zbavuje přesvícených statických míst. V posledním kroku je pak uživatel vyzván ke stanovení horní a spodní hranice pro tzv. prahování jasových hodnot. Výsledkem vstupujícím do detekčního algoritmu je pak obraz s bílými kruhy na černém pozadí reprezentujícími rozpoznávané částice. Ukázka výsledku jednotlivých kroků v přípravě obrazu pro rozpoznávací algoritmus je na obr. 6.1.

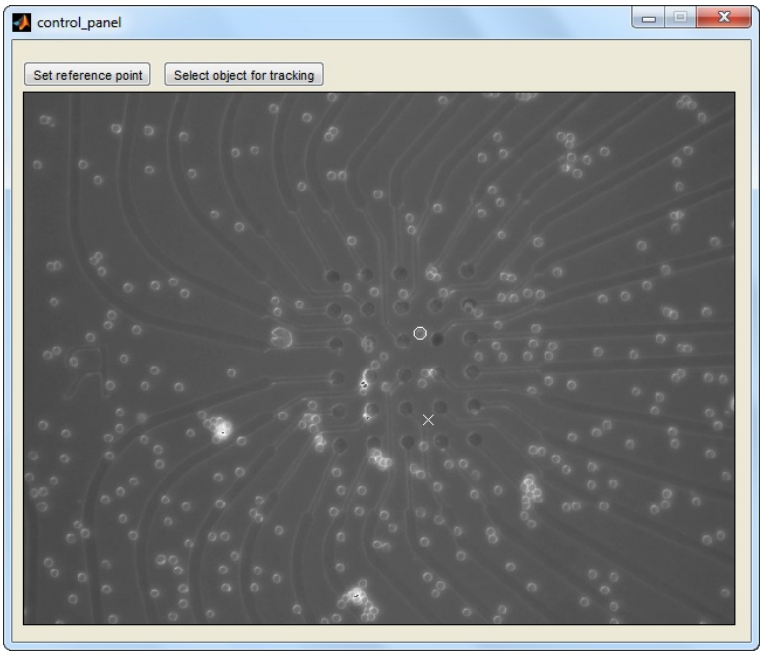
Detekční algoritmus, jenž byl již z části k dispozici na pracovišti, pak vypočítá těžiště bílých pixelů v okolí předpokládané pozice částice (buď pozice zjištěná v minulém snímku, nebo pozice udaná přímo výběrem částice v tzv. řídicím GUI) v rámci oblasti zájmu (region of interest – *ROI*) a jeho obrazové souřadnice transformuje na souřadný systém zvolený v prvním kroku kalibrace.



Obrázek 6.1. Ukázka jednotlivých fází v předzpracování obrazu pro detekční algoritmus. Jedná se pouze o výřez z celkového obrazu kamery. Při tomto experimentu byla zcela pohyblivá pouze jedna částice (odpovídající bílé tečce na posledním obrázku). Částice znázorněná na posledním obrázku částí svého obrysu se sice mírně pohybovala, ale stále byla zachycena v oblasti mezi elektrodami. Ostatní vidětelné částice pak byly statické.

Řízení průběhu experimentu se provádí prostřednictvím řídicího GUI 6.2. V něm se zobrazuje aktuální obraz z kamery doplněný o grafické zvýraznění detekované pozice kuličky a zvoleného cílového bodu. Jejich volbu lze provést kliknutím na odpovídající tlačítka a následným výběrem pozice v okně obrazu.

Z poskytnutých údajů regulátor vypočte akční zásah v podobě matice reprezentující rozložení fází na jednotlivých elektrodách. Ten je následně dle komunikačního protokolu generátoru odeslán přes sériový port počítače a po úspěšném přijetí interpretován. Tím se uzavírá jeden cyklus činnosti programu.



Obrázek 6.2. Screenshot z GUI vytvořeného za účelem snadného ovládání experimentu. Dvě tlačítka slouží k výběru řízené částice, resp. zadání její cílové polohy.

6.1.1 Zkoumání frekvenční závislosti chování

Jelikož je dielektroforéza jev frekvenčně závislý, je vhodné nastavení kmitočtu elektrického signálu na elektrodách velmi důležitou operací. Jak bylo uvedeno v teoretickém úvodu této práce, velikost a orientace vzniklých sil jsou kromě dalších veličin závislé na reálné a imaginární složce Clausius-Mosotti faktoru. Ten lze spočítat z údajů o relativní permitivitě a měrné vodivosti materiálů částice a média (viz vzorec (7.3), ve kterém je člen v závorce Clausius-Mosotti faktor).

Médiem je v tomto případě deionizovaná voda získávaná z přístroje Direct-Q Ultrapure Water System s deklarovanou vodivostí $\sigma_m = 5{,}49 \cdot 10^{-6}\,\mathrm{S/m}$. Její relativní permitivita je pak $\varepsilon_r = 80$. Částice je vyrobena z polystyrenu, o němž však výrobce neuvádí žádné podrobnější informace. Zatímco údaje o relativní permitivitě polystyrenu získané z různých zdrojů se vzájemně příliš neliší ($\varepsilon_r = 2{,}4$–$2{,}7$), u měrné vodivosti jsou rozdíly v uváděných hodnotách i deset řádů. Poměrně často udávanou hodnotou je $\sigma_p = 1 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{S/m}$, která také nejvíce souhlasí s pozorováním z prvních provedených experimentů. Na základě těchto údajů jsem vypočítal hodnota $f_{TWD} = 1{,}22\,\mathrm{kHz}$ odpovídající frekvenci s nejsilnějším vlivem dielektroforézy postupnou vlnou. Co se týká dielektroforézy konvenční, je možné vynutit pouze dielektroforézu negativní, neboť reálná složka Clausius-Mosotti faktoru je při všech frekvencích záporná.

6.2 Výsledky vlastních experimentů

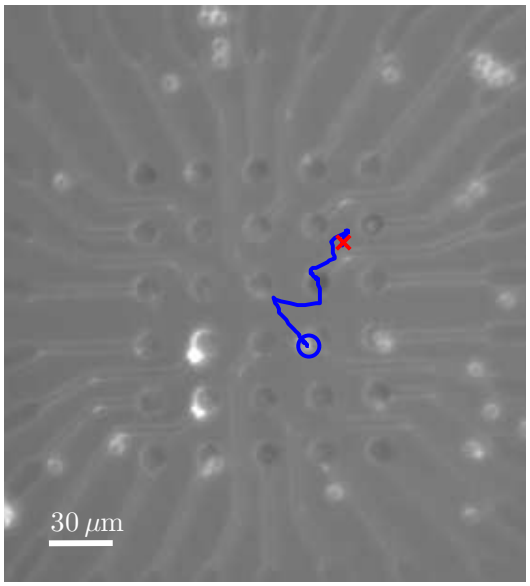
Postupně jsem vyzkoušel všechny z navrhnutých variant regulátorů a jejich činnost zdokumentoval v sadě pořízených videí, která jsou umístěna ve složce `videa`. Z nich je patrné, že se experimentální a simulované výsledky vzájemně liší.

Neosvědčil se například regulátor využívající pohyblivé silové pasti (`regulator_trap`). Při experimentech s regulátory `regulator_basic_memory`, `regulator_basic_localized` a `regulator_basic_localized_memory` se částice nepohybovala buď vůbec nebo velmi chaoticky. U lokalizované varianty regulátoru to může být způsobeno nepřesností v definici souřadného systému a v následém aktivování špatné čtyřelektrodové oblasti. V případě varianty regulátoru s pamětí pak může být problém v rychlém soustavném přepínání konfigurací fází, na než částice nestačí reagovat.

Částečných úspěchů jsem dosáhl s regulátory `regulator_basic` (obr. 6.3) a `regulator_ga` (obr. 6.6). První zmíněný částice většinou dopravil na požadovanou pozici, avšak často s většími odchylkami od předpokládané trajektorie. Problémy mu především činil přechod přes vodiče vedoucí k elektrodám uprostřed pole. Pohyb ve volné řadě či sloupci byl naopak velmi uspokojující. Regulátor využívající dat předpočtených genetickým algoritmem byl pak navzdory výborným výsledkům v simulaci bohužel horším. Při několika experimentech dokázal částici správně navést na cílovou pozici, ale ve zbylých případech byl pohyb objektu velmi chaotický s velkými oscilacemi v blízkosti elektrod (viz obr. 6.6). Lepších výsledků by mohlo být dosaženo například při zpětné vazbě z obrazu s větším zvětšením, kde by bylo možné lépe definovat souřadný systém a přesněji určovat polohu kuličky.

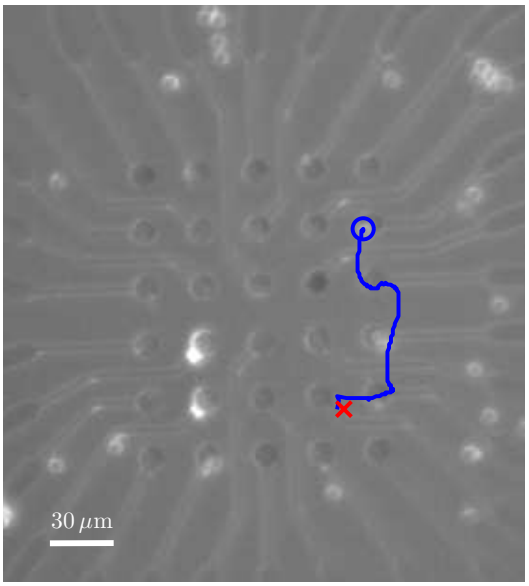
Nejlepších výsledků pak bylo dosaženo se zbylými regulátory, tedy s `regulator_basic_heuristic` (obr. 6.4) a `regulator_repulsive` (obr. 6.5). Pohyb kuličky byl plynulý a v porovnání s ostatními regulátory také nejpředvídatelnější. Největším pozorovaným problémem bylo občasné zachytávání částic nad elektrodami, kterému se však nelze jednoduše vyvarovat.

Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_basic`



a) experiment trvající 12 s

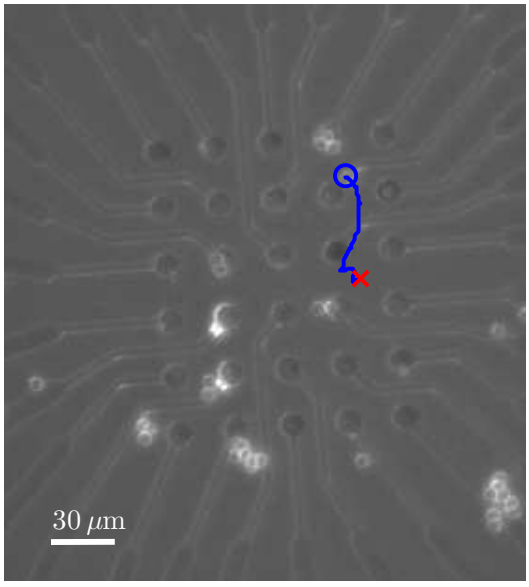
Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_basic`



b) experiment trvající 23,5 s

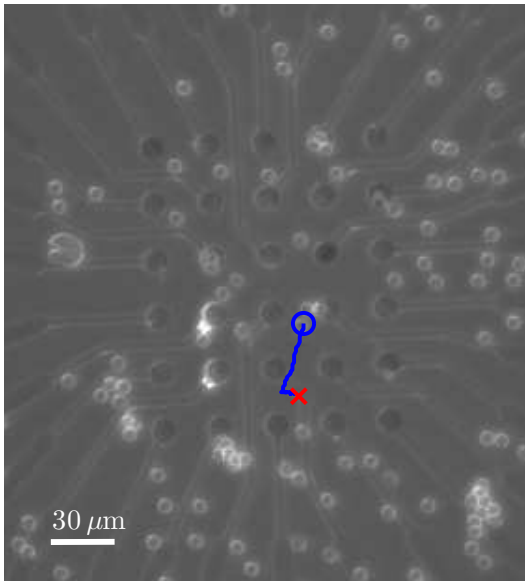
Obrázek 6.3. Trajektorie pohybu kuličky získaná z experimentů při použití regulátoru `regulator_basic` ($f = 1{,}21\,\text{kHz}$, $U = 2{,}5\,\text{V}$). Červený kříž značí požadovanou cílovou pozici, modrý kruh pozici počáteční.

Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_basic_heuristic`



a) experiment trvající 13 s

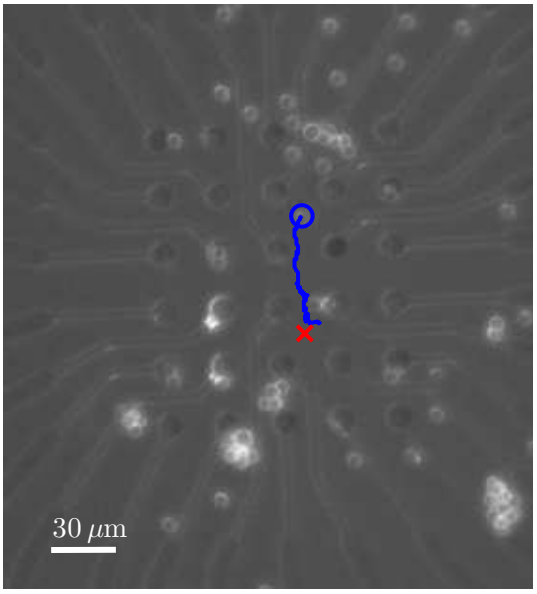
Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_basic_heuristic`



b) experiment trvající 9 s

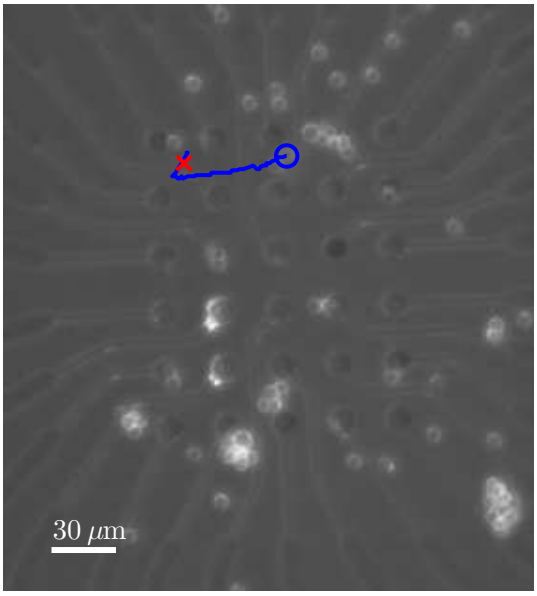
Obrázek 6.4. Trajektorie pohybu kuličky získaná z experimentů při použití regulátoru `regulator_basic_heuristic` ($f = 50\,\text{kHz}$, $U = 2\,\text{V}$). Červený kříž značí cílovou požadovanou cílovou pozici, modrý kruh pozici počáteční.

Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_repulsive`



a) experiment trvající 33 s

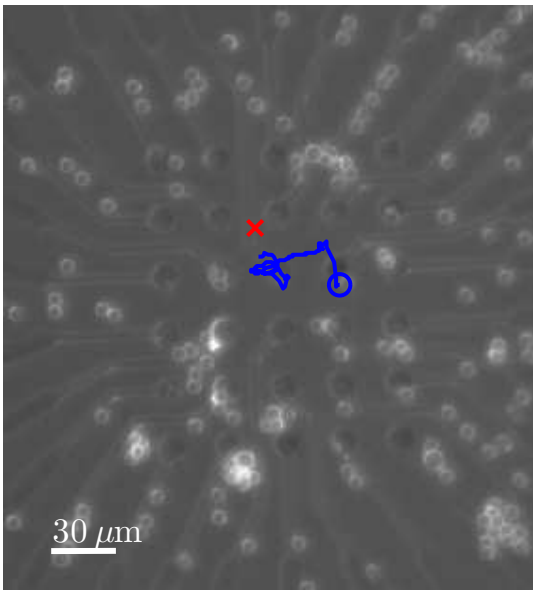
Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_repulsive`



b) experiment trvající 8,5 s

Obrázek 6.5. Trajektorie pohybu kuličky získaná z experimentů při použití regulátoru `regulator_basic_repulsive` ($f = 50\,\text{kHz}$, $U = 2\,\text{V}$). Červený kříž značí cílovou požadovanou cílovou pozici, modrý kruh pozici počáteční.

Pohyb kuličky nad elektrodovým polem
při aplikaci regulátoru `regulator_ga`



Obrázek 6.6. Trajektorie pohybu kuličky získaná z experimentů při použití regulátoru `regulator_ga` ($f = 50\,\text{kHz}$, $U = 2\,\text{V}$, zdrojová data pocházejí ze simulací ve výšce 10 μm). Červený kříž značí cílovou požadovanou cílovou pozici, modrý kruh pozici počáteční. Doba pohybu částice byla 26 s.

Kapitola 7
Závěr

Během této práce jsem nejprve navrhl a následně i úspěšně realizoval konektor umožňující propojit dostupné maticové mikroelektrodové pole s již existujícím 64kanálovým generátorem. To později umožnilo provést vlastní experimenty s řízením. Dále jsem vytvořil dvě základní simulační schémata (klasické a hybridní) pro návrh regulátoru polohy částice nad idealizovaným i neidealizovaným elektrodovým polem. Jejich výstupy jsem následně porovnal s časově náročnou simulací metodou konečných prvků v programu Comsol. Na jejich základě jsem navrhl a vyzkoušel řadu regulátorů zahrnující ty, které využívají k pohybu částice pouze několika základních směrů, ale i složitější založené např. na optimalizaci genetickým algoritmem. Tyto návrhy jsem následně experimentálně otestoval na laboratorní sestavě. Jako nejlepší se ukázala býti dvojice regulátorů, z nichž jeden využívá pouze odpuzování od hran blízkých elektrod (viz sekci 5.6) a druhý je heuristicky vylepšenou variantou regulátoru využívajícího čtyř základních směrů dielektroforetické síly postupnou vlnou (viz sekci 5.7).

Přestože alespoň některé regulátory dokázaly s pokusnou částici nad elektrodovým polem předvídatelně pohybovat, stále jsou v řízení patrné rezervy. Jednou z největších komplikací jsou přívodní cesty k elektrodám umístěným ve středu pole, se kterými se bohužel nevypořádal ani regulátor, který je bral v úvahu. Pro další experimentování by bylo vhodné zabránit sedání částic na dno bazénku a jejich zachycování u okrajů elektrod, neboť tyto kuličky pak negativně ovlivňují i pohyb ostatních stále volných částic. Přinejmenším zajímavé by pak bylo také vyzkoušet jinou kombinaci materiálů média a řízených objektů schopnou vyvolat i pozitivní dielektroforézu či silnější dielektroforézu postupnou vlnou.

Literatura

[1] Michael Pycraft Hughes. *Nanoelectromechanics in engineering and biology.* CRC Press, Boca Raton, 2003.

[2] X.-B. Wang, R. Pethig, and T.B. Jones. Relationship of dielectrophoretic and electrorotational behaviour exhibited by polarized particles. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 25:905–912, July 1992.

[3] M.P. Morgan, H. Hughes and N.G. Green. Separation of submicron bioparticles by dielectrophoresis. *Biophysical Journal*, 77(6):516–525, June 1999. `http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1300348/pdf/10388776.pdf`.

[4] X. Williard, I. Pop, L. Bourel, D. Horvath, R. Baudelle, P. Melnyk, B. Déprez, and A. Tartar. Combinatorial chemistry: a rational approach to chemical diversity. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 31(2):87–98, 1996.

[5] Jakub Drs. Čtyrsektorové elektrodové pole pro dielektroforézu Bakalářská práce, Fakulta elektrotechnická, Katedra řídicí techniky České vysoké učení technické v Praze, Praha, ČR, May 2012.

[6] Jiří Zemánek. Noncontact parallel manipulation with micro- and mesoscale objects using dielectrophoresis Diplomová práce, Fakulta elektrotechnická, Katedra řídicí techniky České vysoké učení technické v Praze, Praha, ČR, August 2009.

[7] Walton C. Gibson. *The method of moments in electromagnetics.* Chapman, Boca Raton, 2008.

[8] Magdy F. Iskander. *Electromagnetic fields and waves.* Waveland Press, Long Grove, 1992.

[9] Mohamed Kharboutly, Michael Gauthier, and Nicolas Chaillet. Modeling the trajectory of a micro particle in a dielectrophoresis device. *Journal of Applied Physics*, 106(11):1–7, December 2009. `http://hal.archives-ouvertes.fr/docs/00/52/47/10/PDF/apssamp-1.pdf`.

[10] Ivan Nikolaev. Modelling of dielectrophoresis for feedback control Bakalářská práce, Fakulta elektrotechnická, Katedra řídicí techniky České vysoké učení technické v Praze, Praha, ČR, May 2012.

[11] Nicolas Green and Hywel Morgan. *AC electrokinetics: colloids and nanoparticles.* Research Studies Press, Philadelphia, Pa, 2001.

Příloha A
Zadání práce

Pokyny pro vypracování:

Cílem této práce je navrhnout základní řízení pro mikromanipulaci pomocí dielektroforézy na maticovém elektrodovém poli a dále provést a vyhodnotit experimenty na jednom takovém poli.
1. Dokončete hardwarovou část platformy určené pro experimenty s maticovým elektrodovým polem pro dielektroforézu a zdokumentujte podstatné části.
2. Sestavte simulační schéma vhodné pro návrh řízení dielektroforézy na obecném (idealizovaném) maticovém elektrodovém poli a toto schéma dále specifikujte tak, aby fungovalo pro konkrétní elektrodové pole použité v práci.
3. Navrhněte regulátor polohy pro obecné maticové pole, který bude využívat změny gradientu fáze, a dále tento regulátor specifikujte pro konkrétní maticové pole.
4. Proveďte a vyhodnoťte experimenty s řízením polohy jednoho (případně i více) objektů na maticovém poli.

Seznam odborné literatury:

[1] H. Morgan a N. G. Green, AC Electrokinetics: Colloids and Nanoparticles. Research Studies Pr, 2003.
[2] P. R. C. Gascoyne et al., Dielectrophoresis-based programmable fluidic processors, Lab on a Chip, roč. 4, čís. 4, s. 299-309, 2004.
[3] K. W. Current et al., A high-voltage integrated circuit engine for a dielectrophoresis-based programmable micro-fluidic processor, 2005 International Conference on MEMS, NANO and Smart Systems Proceedings, 2005, s. 153-158.
[4] N. Manaresi et al., A CMOS chip for individual cell manipulation and detection, IEEE Journal of Solid-State Circuits,roč. 38, čís. 12, s. 2297-2305, 2003.

Vedoucí: Ing. Jiří Zemánek

Platnost zadání: do konce zimního semestru 2013/2014

L.S.

prof. Ing. Michael Šebek, DrSc.
vedoucí katedry

prof. Ing. Pavel Ripka, CSc.
děkan

V Praze dne 23. 1. 2013

Příloha B
Kompletní odvození dielektroforetické síly

Zde prezentované odvození dielektrofretické síly vychází zejména z postupu uvedeného v publikaci [1], přičemž se však pokusím vyhnout v ní přítomným nepřesnostem a lépe popsat větší a na první pohled možná nejasné úpravy během odvození. Detailnější popis je pak uveden také v [11].

Nejprve seznámím s pojmem komplexní permitivity, který bude v průběhu odvození využit. Následně pak naváži na úvodní část sekce 2.1, kde již byla nástiněna základní myšlenka a doplním kroky v odvození mezi vzorci (2.3) a (2.4), (2.5), (2.6).

B.1 Komplexní permitivita

Mezi charakteristické vlastnosti materiálů patří s ohledem na to, zda se jedná o (idealizované) vodiče či izolanty, jejich měrná vodivost, resp. kapacita. Reálné materiály však nelze popsat pouze jedním z těchto parametrů, neboť se tyto vlastnosti u většiny z nich vyskytují bok po boku. Pro jejich popis se proto zavádí pojem komplexní permitivita ε^*, obsahující jak složku klasické permitivity, tak vodivosti, umožňující popsat celkovou impedanci materiálu jako impedanci kondenzátoru o shodných rozměrech a permitivitě ε^*.

Odvození vztahu definujícího ε^* je poměrně přímočaré. Vyjádří se celková impedance materiálu jako paralelní spojení impedance kondenzátoru a rezistoru (tedy jako převrácenou hodnotu součtu jejich admitancí)

$$Z = \frac{1}{j\omega C + G} = \frac{1}{j\omega\varepsilon_0\varepsilon_r \frac{A}{d} + \sigma\frac{A}{d}} = \frac{1}{j\omega\left(\varepsilon_0\varepsilon_r + \frac{1}{j\omega}\sigma\right)\frac{A}{d}} = \frac{1}{j\omega C'}, \tag{7.1}$$

kde ω je úhlová frekvence napětí, C je kapacita kondenzátoru, G je vodivost rezistoru, ε_0 je permitivita vakua, ε_r je relativní permitivita izolačního materiálu kondenzátoru, A je plocha desek kondenzátoru, d je jejich vzdálenost, σ je měrná elektrická vodivost materiálu a C' je zmíněná kapacita kondenzátoru s permitivitou

$$\varepsilon^* = \varepsilon_0\varepsilon_r + \frac{1}{j\omega}\sigma = \varepsilon_0\varepsilon_r - j\frac{\sigma}{\omega}. \tag{7.2}$$

Za povšimnutí stojí její závislost na úhlové frekvenci ω. Je zřejmé, že pro nízké frekvence napětí dominuje vodivostní charakter materiálu, zatímco pro vysoké frekvence charakter kapacitní.

B.2 Dielektroforetická síla

Jelikož se spokojím s vyčíslením dielektroforetické síly pouze pro konkrétní případ této práce, lze zavést řadu zjednodušujících předpokladů. Prvním z nich je ten, že budu uvažovat pouze kulovité částice. Pro ně lze dipólový moment $\mathbf{m}$ vyjádřit skrze dielektrickou polarizaci také jako

$$\mathbf{m} = 4\pi r^3 \varepsilon_0 \left(\frac{\varepsilon_p^* - \varepsilon_m^*}{\varepsilon_p^* + 2\varepsilon_m^*} \right) \mathbf{E} = 4\pi r^3 \varepsilon_0 K(\omega)\, \mathbf{E}, \tag{7.3}$$

kde r je poloměr částice a ε_p^* resp. ε_m^* jsou komplexní permitivity materiálu částice, resp. média, ve kterém se částice nachází. Odvození tohoto vztahu zde již z důvodu stručnosti neuvádím, ale lze ho dohledat v [1]. Člen $K(\omega)$ se nazývá Clausius-Mosotti faktor a o jeho vlivu na výslednou dielektroforetickou sílu bude zmínka později.

Dalším zjednodušujícím předpokladem pro následující odvození bude to, že elektrické pole má harmonický průběh (je vytvářeno pomocí střídavého napětí přítomného na mikroelektrodách) a může být co se amplitudy a fáze týče proměnné ve všech třech dimenzích prostoru. Na základě těchto předpokladů lze tedy jeho elektrickou intenzitu zapsat jako

$$\mathbf{E}(x,y,z,t) = \begin{bmatrix} E_x(x,y,z,t) \\ E_y(x,y,z,t) \\ E_z(x,y,z,t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{x0}(x,y,z)\cos(\omega t + \phi_x(x,y,z)) \\ E_{y0}(x,y,z)\cos(\omega t + \phi_y(x,y,z)) \\ E_{z0}(x,y,z)\cos(\omega t + \phi_z(x,y,z)) \end{bmatrix}, \tag{7.4}$$

kde x, y, z jsou souřadnice bodu v prostoru, t označuje čas, E_x, E_y, E_z jsou složky elektrické intenzity pro jednotlivé dimenze prostoru, E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} jsou hodnoty amplitud těchto složek v daných bodech prostoru a ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z jsou jejich fázová posunutí.

Dosazením předešlého vzorce (7.4) do vztahu výpočet dipólového momentu (7.3), dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(x,y,z,t) &= \begin{bmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{bmatrix} = 4\pi r^3 \varepsilon_0 K(\omega) \begin{bmatrix} E_{x0}\cos(\omega t + \phi_x) \\ E_{y0}\cos(\omega t + \phi_y) \\ E_{z0}\cos(\omega t + \phi_z) \end{bmatrix} = \\ &= 4\pi r^3 \varepsilon_0 \begin{bmatrix} E_{x0}(\mathrm{Re}[K(\omega)]\cos(\omega t + \phi_x) - \mathrm{Im}[K(\omega)]\sin(\omega t + \phi_x)) \\ E_{y0}(\mathrm{Re}[K(\omega)]\cos(\omega t + \phi_y) - \mathrm{Im}[K(\omega)]\sin(\omega t + \phi_y)) \\ E_{z0}(\mathrm{Re}[K(\omega)]\cos(\omega t + \phi_z) - \mathrm{Im}[K(\omega)]\sin(\omega t + \phi_z)) \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{7.5}$$

kde m_x, m_y a m_z jsou složky dipólového momentu pro jednolivé dimenze prostoru.

Poslední provedená úprava není v publikaci [1] vůbec objasněna, proto zde tento krok podrobněji dovysvětlím. Úpravu lze provést zapsáním komplexního členu $K(\omega)$ ve složkovém tvaru, jeho roznásobením s $\cos(\omega t + \phi)$ a použitím identity $\cos\alpha = j\sin\alpha$. Tu lze snadno ověřit např. nahrazením těchto goniometrických funkcí jejich reprezentacemi využívajícími komplexních exponenciál.

Nyní již mám vše potřebné k dosazení do vzorce pro sílu (2.3). Vynásobením dipolóvého momentu $\mathbf{m}$ s diferenciálním operátorem ∇ a zmíněným dosazením tak získám vztah

$$\mathbf{F}(x,y,z,t) = \left(m_x \frac{\partial}{\partial x} + m_y \frac{\partial}{\partial y} + m_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{E} = \begin{bmatrix} m_x \frac{\partial E_x}{\partial x} + m_y \frac{\partial E_x}{\partial y} + m_z \frac{\partial E_x}{\partial z} \\ m_x \frac{\partial E_y}{\partial x} + m_y \frac{\partial E_y}{\partial y} + m_z \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ m_x \frac{\partial E_z}{\partial x} + m_y \frac{\partial E_z}{\partial y} + m_z \frac{\partial E_z}{\partial z} \end{bmatrix}. \tag{7.6}$$

V knize [1], ze které jsem čerpal se v těchto částech odvození vyskytují chyby v indexech veličin a opomenuto je často uvedení jednotkových směrových vektorů použitých v této publikaci pro rozlišení jednotlivých dimenzí.

Dále využiji toho, že rotace elektrického pole je nulová ($\nabla \times \mathbf{E} = 0$), a pro její jednotlivé složky proto platí

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = 0, \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = 0, \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = 0. \tag{7.7}$$

S pomocí těchto vztahů lze dále upravit vzorec (7.6) na

$$\mathbf{F}(x,y,z,t) = \begin{bmatrix} m_x \frac{\partial E_x}{\partial x} + m_y \frac{\partial E_y}{\partial x} + m_z \frac{\partial E_z}{\partial x} \\ m_x \frac{\partial E_x}{\partial y} + m_y \frac{\partial E_y}{\partial y} + m_z \frac{\partial E_z}{\partial y} \\ m_x \frac{\partial E_x}{\partial z} + m_y \frac{\partial E_y}{\partial z} + m_z \frac{\partial E_z}{\partial z} \end{bmatrix}. \tag{7.8}$$

Tento krok je k pochopení celkového odvození z knihy [1] velmi důležitý a jeho uvedení zde je asi největším přínosem této sekce. Jak je vidět, složky vektoru síly jsou tvořeny velmi podobnými sčítanci. Ty nyní můžu v obecném zápisu prošetřit podrobněji. S použitím vzorce (7.3) a po zderivování dostávám

$$\begin{aligned} m_a \frac{\partial E_a}{\partial b} &= 4\pi r^3 \varepsilon_0 \left(E_{a0} \left(\mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \cos\left(\omega t + \phi_a\right) - \mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \sin\left(\omega t + \phi_a\right)\right)\right) \\ &\left(\frac{\partial E_{a0}}{\partial b} \cos\left(\omega t + \phi_a\right) - \frac{\partial \phi_a}{\partial b} E_{a0} \sin\left(\omega t + \phi_a\right)\right), \end{aligned} \tag{7.9}$$

přičemž a i b nabývají hodnot x, y, z. Obdobný vztah platí i pro ostatní vektory sil. Tyto vztahy se následně zprůměrují v čase a získá se

$$\begin{aligned} \left\langle m_a \frac{\partial E_a}{\partial b} \right\rangle &= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T m_a \frac{\partial E_a}{\partial b} dt = \\ &= 2\pi r^3 \varepsilon_0 \left(\mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] E_{a0} \frac{\partial E_{a0}}{\partial b} + \mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] E_{a0}^2 \frac{\partial \phi_a}{\partial b}\right), \end{aligned} \tag{7.10}$$

kde T je doba, přes kterou se průměr počítá.

Při výpočtu integrálu se s výhodou využilo skutečnosti, že integrál součinu $\sin x \cos x = 0$ a integrál součinů $\sin^2 x$ a $\cos^2 x$ je roven $T/2$. Dosazením do vektorů sil (7.8) se dostane

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{F}\left(x,y,z,t\right)\right\rangle &= 2\pi r^3 \varepsilon_0 \begin{bmatrix} \mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0} \frac{\partial E_{x0}}{\partial x} + E_{y0} \frac{\partial E_{y0}}{\partial x} + E_{z0} \frac{\partial E_{z0}}{\partial x}\right) + \\ +\mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0}^2 \frac{\partial \phi_x}{\partial x} + E_{y0}^2 \frac{\partial \phi_y}{\partial x} + E_{z0}^2 \frac{\partial \phi_z}{\partial x}\right) \\ \mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0} \frac{\partial E_{x0}}{\partial y} + E_{y0} \frac{\partial E_{y0}}{\partial y} + E_{z0} \frac{\partial E_{z0}}{\partial y}\right) + \\ +\mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0}^2 \frac{\partial \phi_x}{\partial y} + E_{y0}^2 \frac{\partial \phi_y}{\partial y} + E_{z0}^2 \frac{\partial \phi_z}{\partial y}\right) \\ \mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0} \frac{\partial E_{x0}}{\partial z} + E_{y0} \frac{\partial E_{y0}}{\partial z} + E_{z0} \frac{\partial E_{z0}}{\partial z}\right) + \\ +\mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0}^2 \frac{\partial \phi_x}{\partial z} + E_{y0}^2 \frac{\partial \phi_y}{\partial z} + E_{z0}^2 \frac{\partial \phi_z}{\partial z}\right) \end{bmatrix} = \\ &= 2\pi r^3 \varepsilon_0 \begin{pmatrix} \mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \nabla \left(E_{x0}^2 + E_{y0}^2 + E_{z0}^2\right) + \\ \mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0}^2 \nabla \phi_x + E_{y0}^2 \nabla \phi_y + E_{z0}^2 \nabla \phi_z\right) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{7.11}$$

kde bylo v poslední úpravě využito toho, že $E_{x0} \nabla E_{x0} = \nabla E_{x0}^2$ [1]).

[1]) pomocí identity $\nabla\left(A \cdot B\right) = \left(B \cdot \nabla\right) A + \left(A \cdot \nabla\right) B + B \times \left(\nabla \times A\right) + A \times \left(\nabla \times B\right)$ a opět skutečnosti, že rotace elektrického pole je nulová ($\nabla \times E = 0$)

Pokud by se dále vnější závorka v předchozím vztahu roznásobila, lze pak průměrnou dielektroforetickou sílu zapsat jako součet dvou složek, z nichž jedna je úměrná gradientu kvadrátu velikosti elektrické intenzity a druhá gradientu její fáze. Pro první z nich se používá označení klasická dielektroforéza (nebo také konvenční, značená *DEP*), pro druhou pak dielektroforéza postupnou vlnou (travelling wave dielectrophoresis – *TWD*)

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \langle \mathbf{F_{DEP}} \rangle + \langle \mathbf{F_{TWD}} \rangle \,, \tag{7.12}$$

$$\langle \mathbf{F_{DEP}} \rangle = 2\pi r^3 \varepsilon_0 \mathrm{Re}\left[K\left(\omega\right)\right] \nabla \left(E_{x0}^2 + E_{y0}^2 + E_{z0}^2\right), \tag{7.13}$$

$$\langle \mathbf{F_{TWD}} \rangle = 2\pi r^3 \varepsilon_0 \mathrm{Im}\left[K\left(\omega\right)\right] \left(E_{x0}^2 \nabla\phi_x + E_{y0}^2 \nabla\phi_y + E_{z0}^2 \nabla\phi_z\right). \tag{7.14}$$

Příloha C
Zkratky a symboly

V textu se vyskytují následující zkratky a symboly:

C.1 Zkratky

DPS	Deska plošných spojů.
GUI	Grafické uživatelské rozhraní (graphical user interface).
DEP	Označení pro konvenční dielektroforézu, tedy jev, kdy je síla působící na částici úměrná gradientu kvadrátu elektrické intenzity.
TWD	Označení pro dielektroforézu postupnou vlnou (traveling wave dielectrophoresis), při které je síla úměrná především gradientu fáze elektrického pole.
MOM	Metoda momentů (method of moments) použitá k simulaci rozložení potenciálu nad elektrodovým polem.
BEM	Metoda okrajových prvků (boundary elements method) je pouze jiným názvem pro MOM.
FEM	Metoda konečných prvků (finite element method). Numerická metoda používaná k řešení problémů programem COMSOL Multiphysics 4.3.
ROI	Oblast zájmu, ve které se hledá těžiště bílých pixelů pro stanovení středu částice v obrazu (region of interest).

C.2 Symboly

j	Imaginární jednotka.
Z	Impedance.
G	Vodivost.
C	Kapacita.
A	Plocha desky kondenzátoru.
d	Vzdálenost desek kondenzátoru.
ω	Úhlová frekvence.
σ	Měrná elektrická vodivost.
ε_0	Permitivita vakua $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} Fm_{-1}$.
ε_r	Relativní permitivita materiálu.
Q, q_e	Elektrický náboj.
$\mathbf{r}$	Polohový vektor.
r	Poloměr polystyrenové částice.
ε^*	Komplexní permitivita, která popisuje jak vodivostní, tak i kapacitní charakter materiálu.
$K(\omega)$	Clausius-Mossotti faktor ovlivňující frekvenční chování dielektroforézy.
$\mathbf{m}$	Dipólový moment (zde kulovité částice).

ε_p^*	Komplexní permitivita částice (p – particle).
ε_p^*	Komplexní permitivita média (m – medium).
ε_p^*	Komplexní permitivita média (m – medium).
$\mathbf{E}$	Elektrická intenzita.
$\mathbf{F}$	Výsledná dielektroforetická síla působící na částici.
ϕ	Fázové posunutí harmonického průběhu elektrického pole.
μ	Dynamická viskozita kapaliny.
v_s	Rychlost pohybu částice v kapalině.
Φ_e	Potenciál elektrického pole.
V	Objem prostoru, který uvažujeme při aplikaci metody momentů.
S_n	Povrch elementární plošky vzniklé diskretizací prostoru za účelem použití MOM.
x_m, y_m	Souřadnice x a y středu elementární plošky.
a	Polovina délky hrany elementární plošky.
$Q_{r,s}$	Náboj na plošce v řádku r a sloupci s daného dělení elektrod.
f	Frekvence sinusového průběhu napětí.
$\mathbf{U}$	Vektor rozdílů potenciálů na jednotlivých elektrodách vůči jedné referenční.
$C_{r,s,m}$	Kapacitní matice sestavená při předzpracování dat pro hybridní simulaci.