

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”  
FACULDADE DE ENGENHARIA DE BAURU  
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**DINÂMICA NÃO LINEAR, CAOS, E CONTROLE NA  
MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA**

Autor: Ricardo Nozaki

Orientador: Prof. Dr. José Manoel Balthazar

Co orientador: Prof. Dr. Bento Rodrigues de Pontes Jr.

Bauru, 2010

SP, Brasil

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”  
FACULDADE DE ENGENHARIA DE BAURU  
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**DINÂMICA NÃO LINEAR, CAOS E CONTROLE NA  
MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA**

Autor: Ricardo Nozaki

Orientador: Prof. Dr. José Manoel Balthazar

Co-orientador: Bento Rodrigues de Pontes Jr.

Curso: Engenharia Mecânica

Área de concentração: Projeto Mecânico

Dissertação de mestrado apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Bauru, 2010

SP - Brasil

DIVISÃO TÉCNICA DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO  
UNESP - CAMPUS BAURU

Nozaki, Ricardo.

Dinâmica não linear, caos e controle na microscopia de força atômica / Ricardo Nozaki. Bauru, 2010. 84 f.

Orientador: José Manoel Balthazar

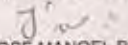
Co-orientador: Bento Rodrigues Pontes Júnior


Dissertação (Mestrado)-Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Bauru, Bauru, 2010

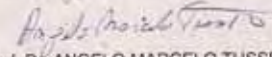
1. O microscópio de força atômica. 2. Estado de Arte. 3. Modelos de AFM. 4. Modelo de AFM pesquisado. 5. Solução analítica. 6. Teoria de Melnikov. 7. Controle linear ótimo. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Bauru. II. Título.

**ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE Mestrado DE RICARDO NOZAKI, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA, DO(A) FACULDADE DE ENGENHARIA DE BAURU.**

Aos 25 dias do mês de novembro do ano de 2010, às 15:00 horas, no(a) Anfiteatro da Pós-graduação da Faculdade de Engenharia de Bauru, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. JOSE MANOEL BALTHAZAR do(a) Departamento de Est Mat Apl Comp / Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Prof. Dr. ÁTILA MADUREIRA BUENO do(a) Departamento de Estatística, Matemática Aplicada e Computação / Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Unesp, Prof. Dr. ANGELO MARCELO TUSSET do(a) Departamento de Matemática / Universidade Federal Tecnológica do Paraná - Ponta Grossa, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da DISSERTAÇÃO DE Mestrado de RICARDO NOZAKI, intitulado "DINÂMICA NÃO LINEAR, CAOS E CONTROLE NA MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA". Após a exposição, o discente foi arguido oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: APROVADO. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que, após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

  
Prof. Dr. JOSE MANOEL BALTHAZAR

  
Prof. Dr. ÁTILA MADUREIRA BUENO

  
Prof. Dr. ANGELO MARCELO TUSSET

## **DEDICATÓRIA**

Aos meus pais que sempre me apoiaram e me incentivaram em todos os momentos da minha vida, e ao maior e melhor orientador do planeta José Manoel Balthazar.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço intensamente aos meus pais Junkiti e Tsuguiko, aos meus irmãos Gilberto, Nanci, Patrícia e ao meu sobrinho Henrique, pelos momentos de alegria.

Ao super orientador Prof. Dr. José Manoel Balthazar pelo conhecimento compartilhado, pela orientação e apoio na realização deste trabalho, ao prof. Dr. Bento Rodrigues Pontes Jr. pelo incentivo e apoio, estando sempre pronto a me ajudar, ao prof. Dr. Ângelo Tusset, cuja amizade e discussões sobre o trabalho foram muito valiosas, principalmente na ajuda com o controle e no artigo, não poupando esforços desde sua chegada à Rio Claro.

Aos grandes amigos Vinícius Piccirillo que me trouxe para o mundo não linear e sempre me ajudou com os programas do Matlab, e ao Kleber dos Santos Rodrigues pelas piadas sempre de mau gosto e pelo rock and roll. Aos colegas de mestrado, que sempre ajudaram e compartilharam de bons e maus momentos.

A CAPES pelo financiamento, e a todos os professores da UNESP Bauru e Rio Claro.

E por último ao Rock and roll que sempre me protege e dá forças.

“Às vezes sacrificamos as coisas que mais amamos, para mostrar ao mundo que podemos superar o maior dos desafios.”

-Jimi Hendrix-

## RESUMO

Nozaki, Ricardo, sobre a dinâmica não linear e caótica em um modelo matemático de um microscópio de força atômica, Bauru: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, 2010, 84 pp., Dissertação (Mestrado).

O sistema de microscopia de força atômica se tornou um instrumento popular e útil para medir as forças intermoleculares com resolução atômica que pode ser aplicado em eletrônica, análises biológicas, engenharia de materiais, semicondutores, etc. Este trabalho estuda o comportamento da dinâmica não-linear da ponta da sonda causada pelo tipo da amostra e os modos de funcionamento de um microscópio de força atômica. Utilizando-se de simulações numéricas, busca-se uma solução analítica aproximada, através do método de perturbação de múltiplas escalas e teoria de controle linear ótimo consegue-se um bom entendimento do trabalho feito e explicado a seguir.

Este trabalho está dividido em três partes, na primeira parte apresentou-se o problema, mostrando a necessidade de se controlar o comportamento caótico no sistema a ser estudado. Mostrou – se o funcionamento do microscópio atômico com todas suas variáveis de funcionamento. Foram geradas as equações de movimento e os resultados são obtidos através de integrações numéricas das equações de movimento, obteve-se oscilações regulares e irregulares (caóticos), os quais dependem da escolha dos parâmetros do sistema. Na segunda parte do trabalho, utilizou-se o método das múltiplas escalas, efetuou-se a busca de uma solução analítica aproximada para o movimento estacionário do sistema, que foi obtida através da análise de técnicas de perturbações. Este método foi desenvolvido por [10] para controlar estes sistemas.

Palavras chave: Microscopia de força atômica, Técnicas de Perturbação, força de Van der Waals, Controle Linear Ótimo.



## ABSTRACT

Nozaki, Ricardo, non-linear dynamics and chaos in atomic force microscope, Bauru: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, 2010, 84 pp., Dissertação (Mestrado).

The atomic force microscope system has become a popular and useful instrument to measure the intermolecular forces with atomic-resolution that can be applied in electronics, biological analysis, materials, semiconductors etc. This work studies the complex nonlinear dynamic behavior of the probe tip between the sample and cantilever of an atomic force microscope using numerical simulations, method of multiple scales, and optimal linear control.

This work concerns of three parts, in the first we will make the presentation of the AFM, showing various models of AFM. In second part, regular and irregular (chaotic) behaviors depend of the physical parameters and can be observed when a numerical integration is performed. When the dynamic system of the AFM becomes a chaotic oscillator, a computational and analytical study of the nonlinear dynamic behavior of the AFM oscillator is proposed and it is obtained by perturbations method. The third part is dedicated to the application and performance of the linear feedback control for the suppressing of the chaotic motion of a non ideal system, theses systems are numerically studied. We use the method developed by [10] to control both the non-ideal system. This method seeks to find an optimal linear feedback control where they find - if conditions for the application of linear control in non - linear, ensuring the stability of the problem.

Key words: Atomic Force Microscope, Perturbations techniques, Van der Waals Force, Linear feedback control.

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.2.1. Foto de uma sonda com uma esfera fixada em sua ponta da micro-viga
- Figura 1.2.2. Constituição básica de um AFM
- Figura 2.1.1. Ilustração de um micro-manipulador típico
- Figura 2.1.2. Esquema de ação da micro-viga
- Figura 2.2.1. Forças interagindo entre a esfera e a superfície de amostra
- Figura 2.2.2. Forças de van der Waals. a) Forças de orientação; b) Forças de indução; c) Forças de dispersão.
- Figura 2.3.1. Deflexão da micro-viga
- Figura 2.3.2. Regimes de operação
- Figura 2.4.1. Diagrama com regimes e os três modos de operar
- Figura 2.5.1. Oscilador AFM
- Figura 2.5.2. Foto de uma sonda
- Figura 2.5.3. Funcionamento básico de um AFM
- Figura 2.5.4. Forças entre a ponteira e a amostra
- Figura 2.5.5. Tipo de ponteira
- Figura 2.5.6. Curva típica de deflexão de uma micro-viga
- Figura 2.6.1. Imagens do AFM via modo contato e modo tapping
- Figura 2.6.2. Imagens do AFM
- Figura 2.6.3. Visualização do AFM via modo contato e modo tapping
- Figura 3.1.1. Oscilador AFM de [2]
- Figura 3.1.2. Funcionamento básico de um microscópio de força atômica, segundo Nader Jalili et. al, 2004 [2].
- Figura 3.2.2. Retrato de fase para equação 3.1
- Figura 3.2.2.1. AFM modelo de [2].
- Figura 3.2.2.2. Esquema da molécula e a geometria da superfície da amostra, segundo Nader Jalili et. AL, 2004.
- Figura 3.2.2.3. Esquema interação ponta da esfera- amostra segundo Nader Jalili,et. al, 2004 [2].
- Figura 3.2.3.1. AFM de [3].
- Figura 4.1.1. Simulação do modelo AFM
- Figura 4.1.6. Expoentes de lyapunov

Figura 5.2.1. Gráfico da função Força Van der Waals por deslocamento  $x$

Figura 5.2.2. Função Força de Van der Waals aproximada pelo deslocamento.

Figura 5.2.3. Retrato de fase com a nova Van der Waals

Figura 5.2.4. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.1$

Figura 5.2.5. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.8$

Figura 5.2.6. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.95$

Figura 5.2.7. Retrato de fase para  $A = 1, a_1 = -1, a_2 = 1, B = 0.1, C = 0.3$

Figura 5.3.1. Órbita obtida através das múltiplas Escalas

Figura 5.3.2. Retrato de fase do AFM

Figura 6.1.2. Mostra a energia nos primeiros mil pontos (segundos)

Figura 6.1.7. Para  $u = -0,1056, F = 1, \varepsilon = 1, t = 0,500$

Figura 6.1.8. Para  $\varepsilon F = 0.01$  e  $\varepsilon \mu = -0.001056$

Figura 6.1.9. Para  $\varepsilon F = 0.20$  e  $\varepsilon \mu = -0.001056$

Figura 7.3.1. Órbita obtida da solução analítica (6.1.1) obtida através do método das múltiplas escalas e considerando os valores dos parâmetros  $b = 0.17602, c = 2.6364$  e  $z = 2.5, a_1 = 0.14668, a_2 = 2.1269, L = 0.0274, J = 0.12748, I = -0.0075$  e  $H = 2.1282$ .

Fig. 7.3.2. Retrato de fase para o sistema (7.3.15)

Fig. 7.3.3.  $L(t)$  calculado na trajetória ótima

Fig. 7.3.4. Deslocamento da *micro* viga

Fig. 7.3.5. Deslocamento da *micro* viga com controle (7.3.15)

Fig. 7.3.6. Retrato de fase para o sistema com controle na trajetória (5.3.1)

Fig. 7.3.7. Retrato de fase sem e com controle (7.3.15)

## LISTA DE ACRÔNIMOS, SIGLAS OU PALAVRAS TÉCNICAS

AFM	ATOMIC FORCE MICROSCOPY
STM	SCANNING TUNELLING MICROSCOPY
SPM	SCANNING PROBE MICROSCOPY
SFM	SCANNING FORCE MICROSCOPY
MET	ELETRONIC TRANSMISSION MICROSCOPY
Fvdw	Força de Van der Waals
MMS	METHOD OF MULTIPLE SCALES
PROBE-TIP CANTILEVER	Ponta da sonda Viga
EDO	EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA
$x$	Deslocamento
$\dot{x}$	Velocidade
$\ddot{x}$	Aceleração
K	Constante Elástica
C, $\mu$	Amortecimento
SIN	Seno
COS	Cosseno
$A(t)$	Amplitude
$\beta$	Fase
H	Hamiltoniano
E	Energia
$M(\theta)$	Função de Melnikov

## SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 .....	1
INTRODUÇÃO .....	1
<b>1.1 PRELIMINARES</b> .....	3
<b>1.2 CARACTERÍSTICAS PRINCIPAIS DO AFM</b> .....	4
<b>1.3 AS VANTAGENS, DESVANTAGENS E APLICAÇÕES DO AFM</b> ....	6
<b>1.5 APRESENTAÇÃO DOS CAPÍTULOS</b> .....	8
CAPITULO 2 – ESTADO DE ARTE .....	10
DESCRIÇÃO DO PROBLEMA AFM .....	10
<b>2.1 APRESENTAÇÃO DO AFM</b> .....	10
<b>2.2 FORÇA DE VAN DER WAALS</b> .....	13
<b>2.3 MODOS DE FAZER IMAGENS NO AFM</b> .....	14
<b>2.4 MODOS DE OPERAR</b> .....	15
<b>2.5 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS CONSTITUTIVOS     USUAIS PARA O OSCILADOR DO AFM</b> .....	17
CAPÍTULO 3 - MODELOS MATEMÁTICOS DO AFM.....	23
<b>3.1 MODELO DE JALILI, DADFARNIA E DAWSON</b> .....	23
<b>3.2 MODELO DE NADER JALILI E KARTHIK LAXMINARAYANA</b> 25	
<b>3.3 MODELO DE WANG, PAI e YAU</b> .....	29
CAPÍTULO 4.....	32
PROBLEMA PESQUISADO DE AFM.....	32
<b>4.1 MODELANDO O AFM</b> .....	32
CAPÍTULO 5 .....	37
BUSCA DA SOLUÇÃO ANALÍTICA APROXIMADA .....	37
<b>5.1 MÉTODO DAS MÚLTIPLAS ESCALAS</b> .....	37
<b>5.2 FORÇA DE VAN DER WAALS</b> .....	37
<b>5.3 SOLUÇÃO ANALÍTICA APROXIMADA UTILIZANDO     TÉCNICAS DE PERTURBAÇÃO</b> .....	40
CAPÍTULO 6.....	47
PARÂMETROS OBTIDOS ATRAVÉS DA TEORIA DE MELNIKOV.....	47
<b>6.1 TEORIA DE MELNIKOV</b> .....	47
CAPÍTULO 7.....	53
CONTROLE LINEAR ÓTIMO .....	53
<b>7.1 INTRODUÇÃO</b> .....	53
<b>7.2 FORMULAÇÃO LINEAR PARA SISTEMAS NÃO LINEARES</b> ...	54
<b>7.3 APLICAÇÃO DO CONTROLE LINEAR ÓTIMO PARA A     EXCITAÇÃO COMO SENDO DO TIPO IDEAL</b> .....	58
CAPÍTULO 8.....	66
CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....	66
<b>8.1 CONCLUSÃO</b> .....	66
<b>8.2 TRABALHOS FUTUROS</b> .....	67
<b>8.3 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	67
<b>8.4 APÊNDICE 1</b> .....	76

# **CAPÍTULO 1**

## **INTRODUÇÃO**

Este é o primeiro trabalho realizado que aborda o assunto de microscopia de força atômica na área de dinâmica não linear e caos no Brasil e representa o início de um estudo na área de NEMS (Nano-eletro-mechanical-system) dentro do grupo de pesquisas do professor Doutor José Manoel Balthazar.

Com o passar do tempo houve a necessidade de se criar diversas técnicas para observação de detalhes ampliados de superfícies, como, por exemplo, as lentes, usado em um microscópio óptico, inventado no século XVIII, para o uso na medicina, engenharia, e pesquisas em geral. Neste século, foram desenvolvidos métodos de visualização baseados em feixes de íons ou de elétrons, mas a idéia dos microscópios de sonda é totalmente diferente.

Os microscópios eletrônicos são caríssimos e, requerem muito trabalho na preparação das amostras e sua utilização.

O STM foi inventado por Gerd Binnig e Heinrich Rohrer, da IBM de Zurich, em 1981 e foi o primeiro instrumento capaz de gerar imagens reais de superfícies com resolução atômica. Em 1986 os inventores ganharam por ele, o Prêmio Nobel de Física.

A partir de uma modificação do microscópio de tunelamento, combinado com um profilômetro Stylus (aparelho para medir rugosidade em escala microscópica) Binnig, Quate e Gerber, desenvolveram o AFM em 1986.

É por isso que os microscópios de varredura por sonda ou SPM (“scanning probe microscope”), isto é, sem utilização de elétrons e, sim de uma micro-ponteira que varre a amostra, têm-se tornado tão populares nos últimos 20 anos.

Seu princípio de funcionamento é muito simples e a sua melhor propriedade, não compartilhada com nenhum outro aparelho de observação nessa escala, é a visão da superfície dos objetos em três dimensões.

De um modo simplificado, um (AFM) é composto basicamente por uma ponta ou sonda, que varre a superfície da amostra em estudo.

Mede-se a força de interação entre os átomos da ponta e os da superfície e, utilizando recursos computacionais, os resultados são transformados em imagens da amostra.

Essas forças são de vários tipos, mas fundamentalmente resumem-se a forças atrativas de “Van der Waals”, de origem química, que agem a distâncias entre 100 e algumas unidades de nanômetros (1nanômetro) e, forças repulsivas que provêm do princípio de exclusão de “Pauli” e, que agem quando a ponta aproxima-se muito da superfície e, os átomos da sonda e da amostra estão tão próximos que começam a se repelir [1].

O principal objetivo norteador do estudo consiste em apresentar e formalizar, dentro de uma abordagem matemática e física, o estudo da dinâmica dos componentes de um microscópio de força atômica, mostrando e buscando soluções para se obter uma melhor imagem através de uma sonda que faz a topografia da amostra, isto é, uma sonda que determina analiticamente as medidas de área e perímetro com variações no relevo, e ainda representá-las graficamente em imagens.

Para se chegar a este objetivo busca-se formalizar uma quantidade de ferramentas teóricas.

Esta formalização toma como referência as técnicas de perturbação de múltiplas escalas, expoentes de Lyapunov, órbitas homoclínicas, teoria de Melnikov, dinâmica não linear apresentadas no livro *Perturbation Methods* e o *Nonlinear Oscillations* de Ali Hasan Nayfeh.

Basicamente ou resumidamente tem como problema o fator “melhorar a resolução da imagem” varrida ou examinada pela sonda do AFM. Para se melhorar a imagem é proposto modelar matematicamente através de equações diferenciais, que representarão através de retratos, a dinâmica do problema e buscar soluções para o momento em que a dinâmica do AFM torna se um movimento caótico.

Tem crescido o número de estudos abordando este assunto e os principais autores e artigos são os de Binning, Gerber e Quate [1], Wang et al.[3], Jalili e Laxminarayana [2], Ashab [53],e Hu e Raman [55].

Para citar alguns dos melhores trabalhos do grupo de pesquisa do professor Doutor José Manoel Balthazar pode-se indicar a leitura de Dinâmica Não Linear e Controle de um Sistema Vibratório Modelado com Memória de Forma e, Excitado por Fontes de Energia do Tipo Ideal e Não Ideal de autoria de Vinícius Piccirillo [18].

Neste capítulo, introdutório, cita – se a história e os tipos de problemas que aparecerão neste trabalho e sua organização para atingir os objetivos que serão propostos.

## 1.1 PRELIMINARES

Vem de longa data o interesse do homem em ampliar imagens, a fim de poder observar o comportamento do mundo microscópico e relacioná-lo com os acontecimentos nas dimensões sensíveis diretamente às percepções humanas.

A resolução dos olhos humanos, que é a menor distância distinguível entre dois pontos, está entre 0,1 e 0,2 mm. A utilização de um microscópio aumenta esta resolução para distâncias muito menores, podendo chegar a níveis atômicos.

Em 1931, na Alemanha, Knoll e Ruska [58] desenvolveram o primeiro microscópio eletrônico, com base no experimento de Bush (1926) que provou que era possível focalizar um feixe de elétrons utilizando uma lente eletromagnética circular.

Em 1938 a Siemens Corporation construiu o primeiro modelo comercial do MET (microscópio eletrônica de transmissão), o qual exerceu, em meados do século XX, uma imensa influência sobre a biologia e a ciência, ao permitir estudos das ultra-estruturas dos materiais.

A primeira aplicação da microscopia eletrônica de transmissão no estudo dos materiais foi a constatação de defeitos cristalinos não observáveis por microscopia óptica ou por microscopia eletrônica de varredura, tais como discordâncias e defeitos de empilhamento.

Os microscópios de força atômica, AFM em inglês “atomic force microscope”, vem se tornando um popular instrumento para se obter a topografia de uma amostra através de forças intermoleculares com resolução atômica e utiliza-se no estudo de materiais eletrônicos, análises biológicas como em tecidos humanos, materiais semicondutores etc.



Existem diversas técnicas para observação de detalhes ampliados de superfícies, como, por exemplo, com lentes, usando um microscópio ótico, inventado no século XVIII. Neste século, foram desenvolvidos métodos de visualização baseados em feixes de íons ou de elétrons, mas a idéia dos microscópios de sonda é totalmente diferente.

Um microscópio eletrônico de varredura SEM (Scanning Electron Microscope), apenas capaz de trabalhar em vácuo, pode resolver escalas nanométricas ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ) mas, em geral, com efeitos destrutivos para a amostra. Além disso, um SEM não é capaz de dar uma boa informação sobre profundidade.

Um microscópio de varredura por sonda, ou SPM (Scanning Probe Microscope) é na realidade um grupo de instrumentos compostos basicamente de sonda sensora, cerâmicas piezelétricas para posicionar o objeto amostra e fazer varreduras, circuitos de realimentação para controlar a posição vertical da sonda e um computador para mover os scanners de varredura, armazenar dados e os converter em imagens por meio de softwares específicos para esse fim.

Há diversos tipos de microscópios de sonda: o de tunelamento ou STM (Scanning Tunneling Microscope), o de força ou AFM (Atomic Force Microscope), o de campo próximo ou SNOM (Scanning Near-Field Optical Microscope) e todos os derivados.

A AFM ou microscópio de força atômica [1], ou, SFM (Scanning Force Microscope) foi inventado por Gerd Binnig em 1986, pode ser operado através da medição da deflexão de um suporte cuja extremidade livre está montada sobre a sonda.

## **1.2 CARACTERÍSTICAS PRINCIPAIS DO AFM**

O microscópio de força atômica é composto basicamente por uma pequena ponta, que pode ser de Silício, nitreto de silício ou diamante, que varre linearmente a superfície da amostra a ser analisada e que é presa a uma ponteira que se deforma conforme a força de interação produzida entre a ponta e a superfície.

A ponta de prova montada na extremidade de um braço de apoio (micro-viga) possui baixa constante elástica, que geralmente é menor que uma dezena de N/m. [12]

Introduzindo uma micro-esfera na ponta da micro-viga, a geometria das interações entre a sonda e a superfície permite “escanear” e construir a imagem através de forças de interação.

Essas forças de interação aparecem entre a ponta e os átomos da superfície da amostra analisada provocando a deflexão da micro-viga (cantilever). Esta interação resultante pode ser atrativa ou repulsiva.[12]

Quando há uma mudança na topografia da superfície (aclives, declives, decorrentes de rugosidades) temos uma mudança na deflexão da micro-viga. As grandes distâncias entre a ponta e a superfície, a interação é predominantemente atrativa, devida principalmente à força de Van der Waals.

Ao aproximarmos ainda mais a ponta da superfície, os orbitais eletrônicos dos átomos da ponta e da superfície ficam próximos e começam a se repelir.

O AFM oferece a possibilidade de obter imagens de resolução atômica com um mínimo de preparação prévia das amostras. As forças de interação acontecem entre a ponta e os átomos da superfície da amostra analisada.

As forças de atração são da ordem de  $10^{-9}$  Newtons e provocam uma deflexão da micro-viga onde a ponta está montada, fazendo variar a posição de um feixe LASER sobre um quadro fotodiodo, gerando sinais elétricos que são processados e geram um mapeamento da superfície em escala nanométrica [12].

A seguir pode se observar

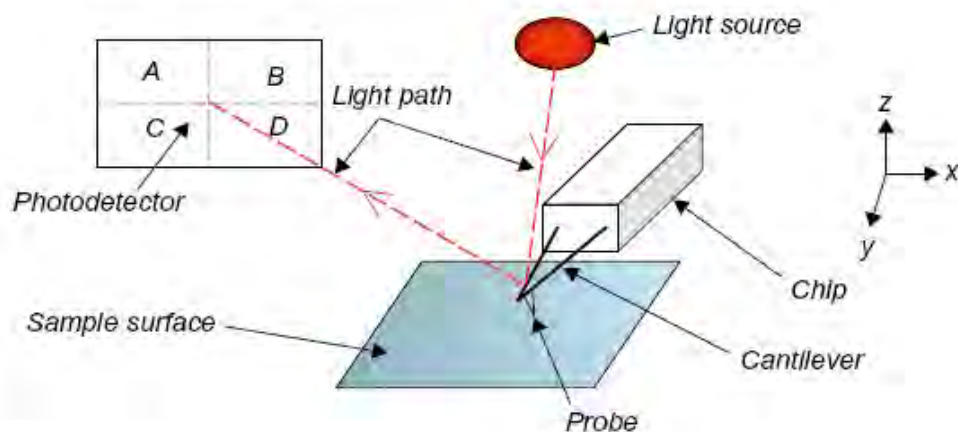


Figura 1.2.2 - Constituição básica de um AFM. A ponteira (probe) feita de Silício ou Nitreto de Silício está fixada em uma micro-viga que está fixada na base de coordenadas x,y,z (Chip) feita de um cristal piezoelétrico (corpos maciços semelhantes às utilizadas em isoladores elétricos) que permite que a posição da sonda possa ser movida em relação a amostra. A deflexão da microviga é acompanhada por um feixe de laser HeNe (Helium-Neon) que atinge um fotodetector situada acima da ponteira que automaticamente calcula a quantidade de

deflexões da ponteira ocasionadas pelas forças que interagem entre a ponteira e superfície a ser analisada [12].

O AFM mede as forças entre a amostra e a ponteira, visando gerações de imagens da superfície da amostra. No AFM um sensor detecta a deflexão da micro-viga.

O controle de movimentos em distâncias tão pequenas é possível graças ao uso de cerâmicas piezo elétricas. As cerâmicas funcionam como dipolos.

Nestes materiais ocorre uma mudança (deformação) em suas dimensões quando é aplicado uma tensão elétrica. São obtidos movimentos em (x,y,z) na ordem de alguns nanômetros, o suficiente para que a ponteira possa varrer a superfície sofrendo interações com os átomos do material ( atrativas /repulsivas ) [37].

A varredura é feita em linha podendo ser realizada de três modos básicos. No modo contato, intermitente ou não contato dependendo da possível topografia da amostra e dos objetivos de análise.

A tentativa de classificação de forças é bem extensa.

Por exemplo, as forças intermoleculares podem ser classificadas em três categorias: forças de origem puramente eletrostáticas (forças coulombianas entre cargas, dipolos permanentes ou quadrupolos), forças de polarização (provenientes dos momentos dipolares induzidos nos átomos e nas moléculas por campos elétricos de cargas vizinhas e/ou dipolos permanentes) e forças de natureza mecânica quântica, que dão lugar às ligações covalentes – incluindo as interações de transferência de cargas – e às interações repulsivas de intercâmbio (devidas ao princípio de exclusão de Pauli) e que são as que equilibram as forças atrativas a distâncias muito curtas.

Esta classificação não é rígida e, por exemplo, nela não estão incluídas as forças magnéticas pois, se comparadas com as anteriores – dentro de sua região de interação – são muito fracas [37].

### **1.3 AS VANTAGENS, DESVANTAGENS E APLICAÇÕES DO AFM**

O AFM é utilizado na análise morfológica da superfície de vários polímeros comerciais [59].

Pode ser utilizado, por exemplo, no estudo microtribológico (atrito) em filmes comerciais de politereftalato de etileno [59].

Uma aplicação interessante é a de medir a força de adesão em adesivos de, por exemplo, látex de poliestireno preparados a partir da dispersão de partículas por vários métodos em multicamadas. A força de interação da agulha com o adesivo é analisada medindo-se o amortecimento da vibração da micro-viga durante a varredura da amostra pelo método de contato intermitente [60].

Um dos pontos mais importantes da técnica de microscopia de força atômica é que ela pode gerar imagens em diferentes condições, como: amostra imersa em líquidos estudadas em [69], [67], [68], a vácuo [70], [71] em baixas temperaturas [72], [73] e principalmente nas condições ambientais. A vantagem inerente de se trabalhar em diferentes condições é a de realizar estudos das propriedades de diversos materiais nas condições ideais para os mesmos, por exemplo: operando em líquidos, pode-se observar a dinâmica de reações químicas e de processos biológicos no espaço real e no tempo com resolução molecular [74] e [75].

Os trabalhos envolvendo estudos de AFM de polímeros têm crescido significativamente dia a dia. Estes estudam a influência de diferentes processos nas características morfológicas e estruturais superficial de uma grande variedade de polímeros tais como poli (tereftalato de etileno), policarbonato, náilon, poliéster, poliuretanas, polímeros acrílicos, ABS, poliestireno, polipropileno, polietileno, proteínas, fibras vegetais, polímeros condutores, entre outros. [61]

A estrutura de biopolímeros (principalmente proteínas e ácidos nucleicos) e seus complexos supramoleculares (vírus, complexos proteínas/ácidos nucleicos envolvidos em transcrição, tradução etc.) contém a informação que os pesquisadores de biotecnologia, eletrônica molecular e nanotecnologia necessitam para realizar trabalhos com alta eficiência na escala atômica/molecular. [61]

Dentre os biopolímeros, as proteínas têm sido os mais estudados do ponto de vista estrutural, pois têm estrutura tridimensional altamente definida e singular, o que leva à necessidade da determinação da estrutura de cada proteína individualmente.

As técnicas que podem associar rapidez e resolução estão associadas às técnicas microscópicas de alta resolução, como a microscopia eletrônica de varredura (MEV). Essa técnica já vem sendo usada nos estudos de algumas proteínas, principalmente as de grande massa molecular e estrutura quaternária. A principal dificuldade da técnica MEV está na necessidade de recobrimento da amostra com material condutor [76] e [77]. Com isso, o MVT (microscópio de varredura por tunelamento), e posteriormente o microscópio de força atômica (AFM), estão sendo usados no estudo de proteínas. A principal vantagem do AFM sobre o MVT é que pode ser usado tanto em amostras condutoras quanto isolantes, como as proteínas. Alguns resultados de AFM foram obtidos com Lisozima e Glutamina sintetase. A lisozima

está sendo estudada na Embrapa Instrumentação Agropecuária, na produção de filmes ultrafinos para aplicações em biosensores e filtros biologicamente ativos. [80]

A desvantagem do uso do AFM fica por conta de que ele analisa apenas a superfície do material.

#### **1.4 OBJETIVOS DO TRABALHO**

O objetivo deste trabalho é o de pesquisar, buscar e simular a dinâmica de uma sonda (microviga) do AFM através de modelos matemáticos, usando o software Matlab®.

Um microscópio de forças atômicas pode ser representado matematicamente por uma microviga, uma mola de constante elástica  $k$ , e forças que atraem a viga até a amostra.

Deste modo, os principais objetivos desta dissertação podem ser resumidos entre os seguintes tópicos:

- 1) Adotar um modelo matemático para um oscilador AFM.
- 2) Obter da solução analítica aproximada de um oscilador AFM, para este fim, utiliza – se uma técnica de perturbação (método das múltiplas escalas).
- 3) Método de controle ótimo linear com realimentação proposto por Rafikov e Balthazar (2007) [45].

A seguir, descreve – se como será esquematizado texto.

#### **1.5 APRESENTAÇÃO DOS CAPÍTULOS**

Esta dissertação de mestrado é desenvolvida em oito capítulos, que abrange os seguintes conteúdos:

No capítulo 1, é apresentada uma breve visão tanto do surgimento bem como as propriedades e funcionamento dos microscópios.

No capítulo 2 são apresentados os diversos trabalhos e um histórico do AFM. Podemos citar as forças de Van der Waals, o modo de funcionamento (contato, não contato e contato intermitente) como propriedades primordiais a serem explicados nesta sessão.

No capítulo 3 é apresentada uma revisão de alguns modelos matemáticos constitutivos dos microscópios de força atômica, inclusive o modelo que será adotado para a formulação das equações matemáticas dos capítulos seguintes deste trabalho.

No capítulo 4, são apresentadas simulações numéricas visualizando a dinâmica não linear do sistema, tais como retratos de fase, espectros de frequência, expoentes de Lyapunov.

No capítulo 5, é apresentada a equação de movimento do sistema. Resultados numéricos são apresentados utilizando a integração direta usando o integrador Adams – Bashforth – Moulton, ODE 113 do MATLAB®, com passo de integração variável. É utilizado o método das múltiplas escalas visando à obtenção de uma solução analítica do oscilador, e é relevante aqui destacar o desempenho deste método na obtenção da solução.

No capítulo 6 é apresentado a teoria de Melnikov para órbitas homoclínicas. Os parâmetros para obtenção do comportamento caótico são encontrados a partir desta técnica.

No capítulo 7 é apresentada a técnica para encontrar um controle ótimo linear.

No capítulo 8 apresenta – se as discussões finais, conclusões e sugestões para trabalhos futuros. A seguir, lista – se as principais referências bibliográficas utilizadas no decorrer desta pesquisa e, os apêndices que completam o trabalho.

## CAPITULO 2 – ESTADO DE ARTE

### DESCRIÇÃO DO PROBLEMA AFM

Inicialmente serão apresentados alguns conceitos importantes sobre o funcionamento do AFM. Estes conceitos serão abordados neste capítulo devido a sua importância para o entendimento do problema a ser estudado.

#### 2.1 APRESENTAÇÃO DO AFM

São inúmeras as aplicações que decorrem neste tipo de pesquisa. Investigar a superfície de uma amostra resulta no conhecimento de propriedades chamadas tribológicas como rugosidade, dureza, rigidez, elasticidade, atrito, que serão utilizadas na indústria, por exemplo, para obter revestimentos de alto impacto, películas protetoras, etc.

O microscópio de força atômica pode ser separado em partes como se mostra a seguir:

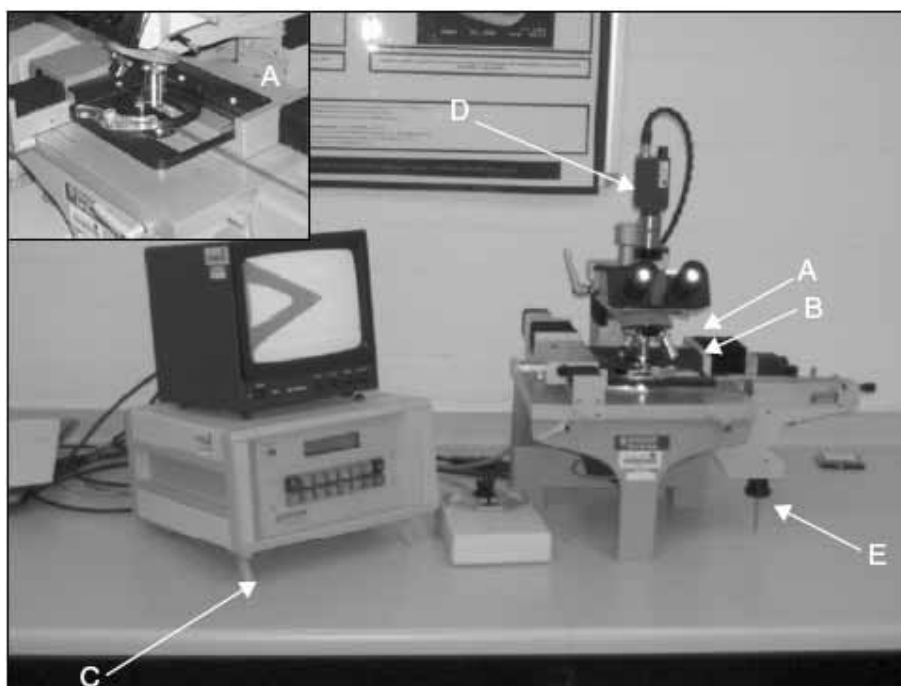


Figura 2.1.1 – Ilustração de um micro-manipulador típico. É constituída de um estágio móvel (A) montado abaixo de um microscópio óptico (B). Movimento da base pode ser controlada através de um console de controle eletrônico (C), mostrada aqui no lado esquerdo. A micro-

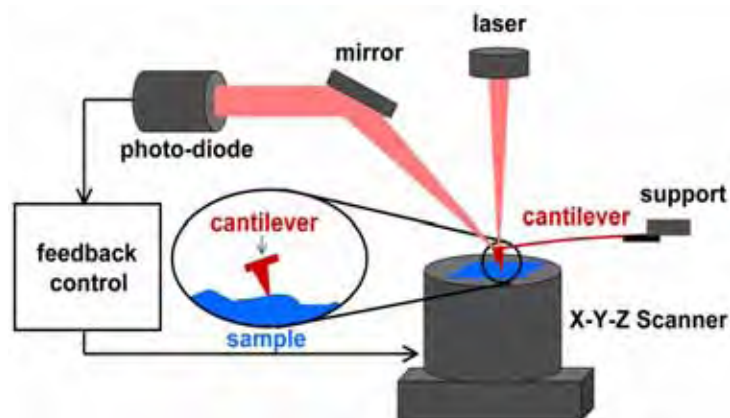
viga e a interação de partículas também pode ser acompanhada por uma câmera digital de vídeo (D) montado no microscópio. A micro-viga do AFM é introduzida debaixo de uma lâmina de microscópio montado no suporte a esquerda. O controle do balanço é feita através do joystick manipulador e vertical da unidade (E), isto é, mantém o nível ou inclinação do microscópio. No monitor, AFM uma micro-viga V-shaped (com ponteira em V) é visível. A foto foi tirada em laboratório da Departamento de Química e Engenharia Ambiental da Universidade de Nottingham.[12]

Para um bom funcionamento, também devem ser levados em conta os fatores externos ao aparelho: os ambientais, como umidade e temperatura, e vibrações provenientes do entorno onde está localizado o aparelho, que podem vir a causar interferências. Informa-se que no (AFM) convencional, um detector capta a deflexão da “micro-viga”.

As mudanças na saída do foto-detector, também são utilizadas para realimentação, isto é, para ajustar uma cerâmica piezelétrica , na direção vertical z, cujo valor é registrado em função das coordenadas (x,y), para depois ser traduzido em topografia z(x,y). As coordenadas (x,y), também são monitoradas através, de tensões aplicadas às cerâmicas piezelétricas colocadas nos “drives” (x,y) do ”scanner”, assim como em z.[62]

O controle de movimentos em distâncias tão pequenas é possível graças ao uso dessas cerâmicas piezelétricas. Estes materiais comportam-se de forma, tal que ocorre uma mudança em suas dimensões quando neles é aplicada uma tensão elétrica. (PZT é um dipolo que se deforma fisicamente quando há uma ddp entre seus terminais. Por outro lado, se deformada, apresenta uma ddp, gerada por um campo elétrico com um eixo transversal àquele onde foi aplicada a pressão.)

A seqüência de figuras a seguir, ilustram o procedimento, exposto, logo acima:





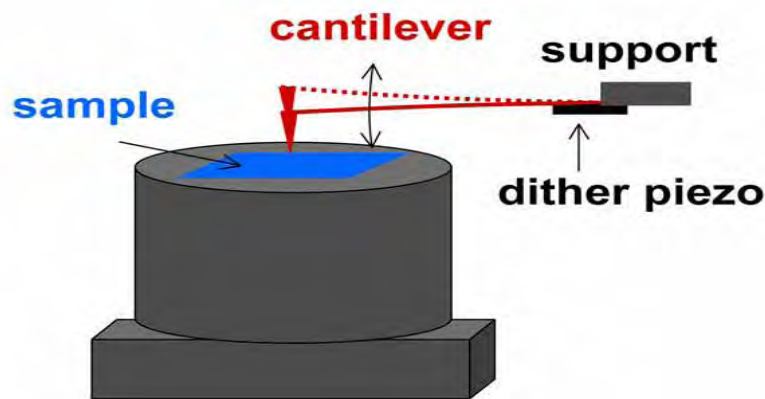


Figura 2.1.2: Esquema da ação do “microcantilever” durante a operação em “AFM”( extraída de : Sebastian et al. ; 2007) [15].

Esses desvios são causados por forças que agem entre a sonda e a amostra. As diferentes técnicas fornecem diversas oportunidades para mostrar imagens de diferentes tipos de amostras e para gerar uma ampla gama de informações.

Os métodos de produção de imagens, também chamado de digitalização ou modos de operação, referem-se principalmente a distância mantida entre a sonda (que chamamos de ponta) e da amostra no momento da digitalização, e as formas para mover a ponta sobre a superfície. [62]

Há muitas formas possíveis de fazer imagens, devido às interações diferentes, dependendo da distância entre a ponta e a amostra, bem como o regime de detecção utilizado.

A escolha do modo apropriado depende da aplicação específica do que se quer fazer. Quando a ponta se aproxima da primeira amostra é atraído para a superfície, devido a uma ampla gama de forças atrativas da região, como as forças de Van der Waals.[62]

Esta atração aumenta até que, quando a ponta é muito próxima da amostra, os átomos de ambas estão tão próximos que seus orbitais eletrônicos começam a repelir. Esta repulsão eletrostática enfraquece a força atrativa à medida que aumenta a distância.[37]

A força é nula quando a distância entre os átomos é de cerca de alguns angstroms (aproximadamente a distância característica de uma ligação química). Quando as forças se tornam positivas, podemos dizer que os átomos da ponta e da amostra estão em contato e as forças repulsivas, eventualmente dominar.[37]

## 2.2 FORÇA DE VAN DER WAALS

Certas forças, como as de van der Waals, são forças intermoleculares atrativas de longo alcance e repulsivas de curto alcance [37].

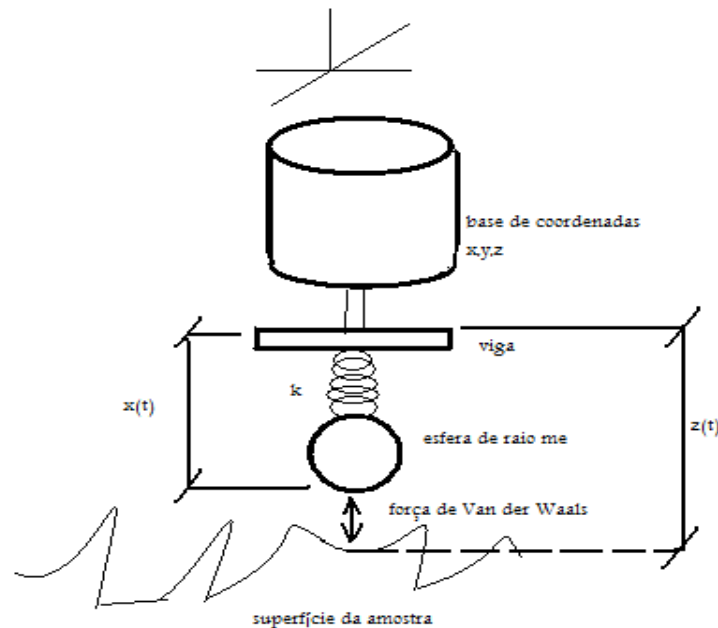


Figura 2.2.1 - Nesta figura podemos observar as forças interagindo entre a esfera e a superfície da amostra.

Em 1873 Van der Waals postulou a existência das forças intermoleculares, que ficaram conhecidas pelo seu nome. Fritz London descreveu a natureza delas e as atribuiu ao movimento dos elétrons dentro das moléculas.

As interações das forças de van der Waals devidas especificamente às flutuações dos elétrons em moléculas ficaram conhecidas com o nome de London, de flutuação de cargas, eletrodinâmicas, ou de dispersão, estão presentes até em moléculas polares permanentes e são, em geral, a maior contribuição para as forças intermoleculares.

É por isso que elas têm um papel muito importante em fenômenos diversos tais como adesão, tensão superficial e muitos outros. Este tema é muito extenso e pode ser visto em [13].

As forças de van der Waals agindo entre dois átomos ou moléculas podem ser classificadas em forças de orientação, de indução e de dispersão vista na figura 2.2.2.[13]

As forças de orientação resultam da interação entre duas moléculas polares com momentos dipolares permanentes. As forças de indução se devem à interação de uma molécula polar e uma não polar, onde a polar induz uma polaridade nas vizinhanças da outra. [13]

O campo elétrico da molécula polar destrói a simetria da distribuição de cargas da molécula não polar, resultando em uma atração semelhante à registrada entre moléculas polares.

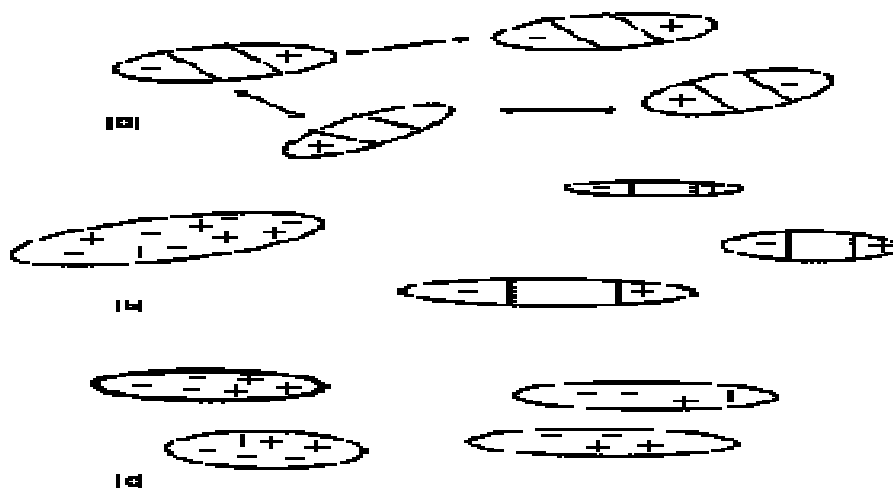


Figura 2.2.2. Forças de van der Waals. a) Forças de orientação; b) Forças de indução; c) Forças de dispersão. [13]

As moléculas não-polares possuem dipolos flutuantes finitos e momentos multipolares grandes em intervalos de tempo muito curtos, os quais interagem, dando lugar a forças de dispersão entre eles. Para as moléculas não polares, a distribuição eletrônica é, em média, simétrica. Mas, a cada instante, uma parte da molécula possui mais elétrons que outra [14]. Assim, cada molécula (ou átomo) se comporta como polar, mas esta "polarização" varia constantemente em grandeza e direção. Temos, então, momentos flutuantes. As forças de dispersão geralmente são maiores que as de orientação e de indução, exceto no caso de moléculas polares muito fortes como as de água. As forças de dispersão ou, em geral, as forças de van der Waals são normalmente atrativas e crescem rapidamente quando as moléculas, átomos ou corpos se aproximam uns dos outros.[13]

### 2.3 MODOS DE FAZER IMAGENS NO AFM

O AFM pode ser operado de diversos modos, os quais fornecem grande variedade de opções para a construção de imagens de diferentes tipos de amostras, gerando diferentes tipos de informação.

Os modos de se fazer imagens podem ser classificados em dois tipos – operação em contato ou em não-contato – dependendo das forças líquidas entre a ponteira e a amostra. Quando o aparelho é operado na região atrativa, o método chama-se não-contato. Nesta região, a micro viga do AFM se enverga na direção da amostra. A operação na região repulsiva chama-se contato e a micro viga se dobra, afastando-se da amostra. Na figura 2.3.1 é mostrada a deflexão da micro-viga em ambos os modos. No modo de não-contato ele é atraído pelas forças de capilaridade da camada de contaminação ou pelas forças de Van der Waals, quando a amostra é limpa. No modo de contato, vê-se como a deflexão da micro-viga é na direção oposta à da amostra.[62]

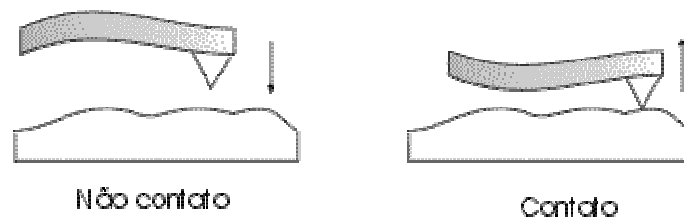


Figura 2.3.1 - Deflexão da micro-viga operando em não-contato e em contato. A figura da esquerda mostra a micro viga se aproximando da superfície da amostra e provavelmente quando estivesse próxima a alguns micrometros da amostra ela começaria a se afastar da amostra. A figura da direita mostra a micro viga tocando a amostra. Figura extraída de [62]

## 2.4 MODOS DE OPERAR

### Modo Contato (Direct contact)

Este é o modo mais utilizado para fazer imagens em AFM. A força é repulsiva e a micro viga (cantilever), em geral em V, é mole, para conseguir uma boa flexão sem deformar a amostra. A constante de elasticidade “K” da mola das micro-vigas moles mais usados varia entre 0,02 e 0,05 N/m. Eventualmente, podem ser utilizadas micro-vigas duras. Entretanto, devem ser operados a altas forças. Neste caso, durante a aproximação da ponteira, a micro-viga é atraída

fortemente para a superfície, podendo distorcê-la ou danificá-la se a amostra for pouco resistente a pequenos impactos. As constantes de mola das micro-vigas duras mais utilizadas variam entre 20 e 80 N/m. [62]

Este modo é muito eficiente também para a construção de imagens de amostras submersas ou em meio líquido. O processo é útil para preservação de amostras mais moles, pois há um certo amortecimento em meio líquido.

Em resumo, se espera que as medidas com AFM no regime de contato explorem fundamentalmente as forças de repulsão íon-íon, que decaem rapidamente com o aumento da separação ponteira-superfície.

A forte dependência com a distância das forças repulsivas íon-íon, fornece a chave para a grande resolução espacial atingida pela microscopia de força de contato.

No modo contato, a haste sobre a qual está presa a ponta, varre nas direções planas x e y, e a altura z. A varredura é feita por uma cerâmica piezo-elétrica presa à haste ou à amostra. A interação ponta - amostra é monitorada por um laser, que é incidida sobre a haste e refletido para dois pares de foto-deteciores. A deflexão da haste pode ser medida devido diferença de sinal dos fotodeteciores. [62]

Durante a varredura, através de uma realimentação com o computador, são realizadas correções na direção z para manter a deflexão da haste constante. Deste modo os valores de z são armazenados na memória, para cada posição xy, formando uma imagem completa da morfologia da superfície. [62]

### **MODO CONTATO INTERMITENTE**

No modo contato intermitente a haste oscila próximo a sua frequência de ressonância, o sinal obtido dos fotos-deteciores mede a amplitude de oscilação, que deve ser mantida constante. Neste caso, a ponta toca suavemente a superfície da amostra, e elimina a força de atrito presente no modo contato. É frequentemente chamado de tapping. Neste caso os constantes toques da esfera na amostra podem danificar a estrutura física da amostra. [62]

### **MODO NÃO-CONTATO**

Quando a ponteira se aproxima da amostra, é primeiramente atraída pela superfície, devido a uma ampla gama de forças atrativas existentes na região, como as forças de Van der Waals. Esta atração aumenta até que, quando a ponteira aproxima-se muito da amostra, os átomos de

ambas estão tão próximas que seus orbitais eletrônicos começam a se repelir. Esta repulsão eletrostática enfraquece a força atrativa à medida que a distância diminui. A força anula-se quando a distância entre os átomos é da ordem de alguns ângstroms (da ordem da distância característica de uma união química), isso se repete sucessivamente (atração e repulsão), fazendo com que não haja contato. [62]

Os modos de se fazer imagens são divididas em modos não contato, contato e contato intermitente e por isso pode se dividir graficamente na figura 2.4.1, quando é feito um estudo da força de atração em relação a distância da micro-viga até a amostra.

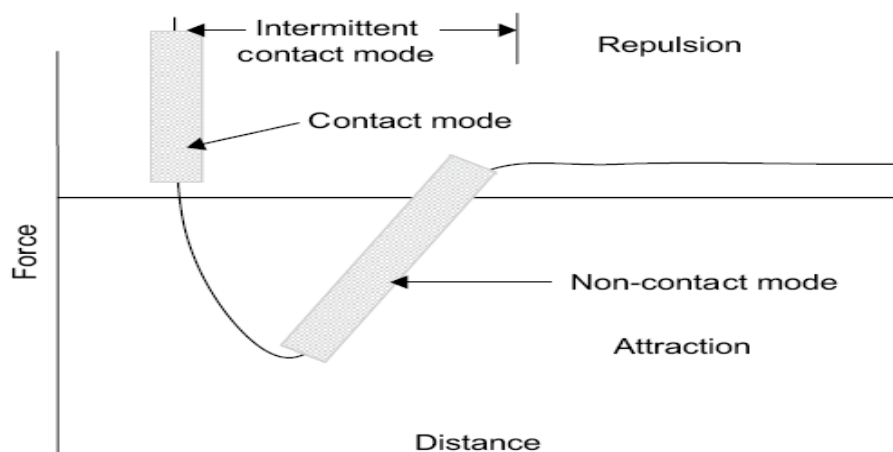


Figura 2.4.1 Diagrama ilustrando os regimes de força do AFM e os três modos de operar. Modo contato de operação está no regime de força de repulsão, em que a sonda é pressionada contra a superfície da amostra, causando uma deflexão para cima da micro-viga. O modo não-contato repele as forças antes do contato real com a superfície. Com o contato intermitente, a sonda oscila perto da superfície e vem repetidamente para dentro e fora da superfície. Figura retirada de [12].

## 2.5 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS CONSTITUTIVOS USUAIS PARA O OSCILADOR DO AFM

É sabido que a dinâmica não-linear de microscopia de força atômica (AFM) é um tema emergente de pesquisa em Ciências e Engenharia, desde a sua descoberta por [1] e de acordo com uma série de autores como [2, 4, 5, 6, 7], os modelos matemáticos que regem a dinâmica

da micro- vigas dos AFM, geralmente, tem uma das duas seguintes simplificações: supondo que a micro viga curva-se quando uma carga estática é aplicada na ponta dessa micro viga (ponteira) e com a rigidez estática correspondente para obter um único grau de liberdade do modelo massa-mola ou então um modelo de discretização da equação clássica da viga com base em seu modo normal de vibrar conduzindo a graus de um ou vários graus de liberdade.

De acordo com [2], um modelo matemático para uma interação amostra micro-viga de um processo AFM, pode ser apresentada, como mostrado na (Figura 2.5.1). A micro-viga é tomada como um sistema massa-mola único, com uma constante  $k$  da mola e de massa equivalente  $m$ . A micro-viga interage com a amostra, através de uma ponta, que é montada no fim da micro-viga. O sistema ponta da micro-viga (ponteira) até a amostra é considerada com uma esfera de raio  $R$  e massa  $m_e$ , que está suspenso por uma mola de rigidez  $k$ . (refere-se massa  $m_e$  como sendo a ponta da micro-viga). Forças de Van der Waals denotam a atração / repulsão em vigor (isto é, as forças de interação), entre a esfera e a superfície da amostra.  $Z$  representa a distância entre a estrutura de base fixa para coordenar a amostra.

Obtêm-se a órbita periódica, usando o método de múltiplas escalas que vai controlar o movimento caótico através de um o controle linear ótimo, periódico, e com sucesso.

Os resultados obtidos estão em completo acordo com os experimentos, publicados na literatura atual. Citam se Wang, Pai e Yau (2009) [3], Ashab, Salapaka, Dahleh e Mezić (1987) [53] e [54], Jalili e Laxminarayana (2004) [2], Yabuno [78],

Destaca-se que, devido à simplicidade na configuração e implementação, o controle de realimentação linear de estado, é especialmente atraente [9]. Esta abordagem é analítica, sendo usadas as técnicas de perturbação (múltiplas escalas), teoria de Melnikov e controle linear ótimo.

De acordo com [2], o modelo matemático do microscópio de força atômica que representa bem o problema é apresentado a seguir:

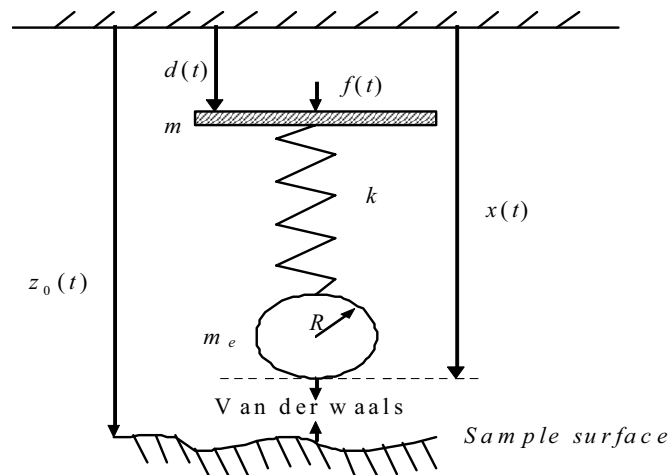


Figura 2.5.1. Oscilador AFM de [2]

A seguir é mostrada uma foto de uma ponteira e assim pode-se ter a idéia do problema matemático proposta por um sistema massa mola.

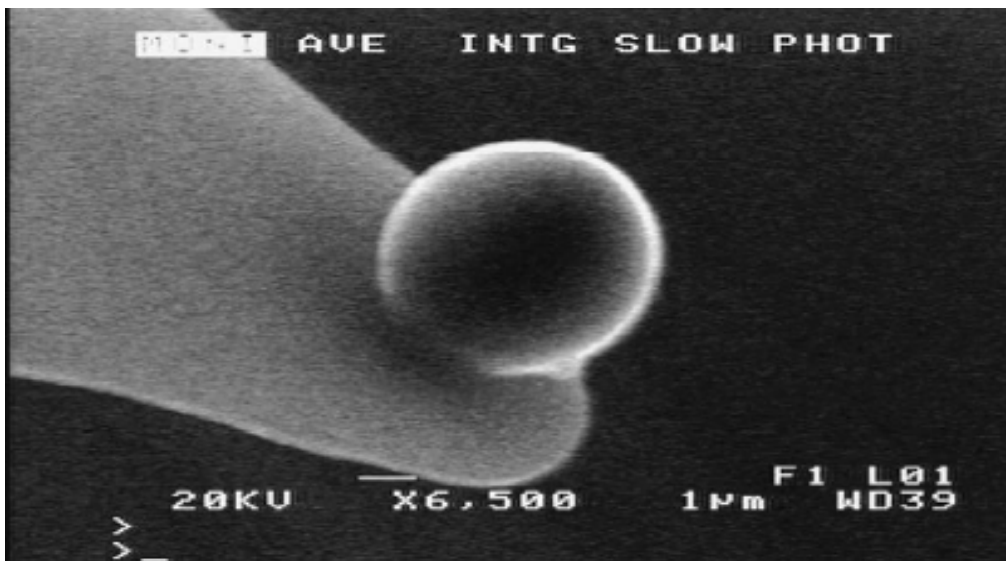


Figura 2.5.2. Foto de uma sonda com uma esfera fixada em sua ponta. Figura extraída do livro microscopy in process engineering, an introduction to afm for improved processes and products, 2009 USA. [12]

Como se pode observar na figura 2.5.1, o AFM, ou microscópio de força atômica, ou ainda, SFM (Scanning Force Microscope) [12] funciona a partir de medições das deflexões de um



suporte (de 100 a 200  $\mu\text{m}$  de comprimento) em cuja extremidade livre está montada a sonda. Basicamente, é possível descrever que a força de Van der Waals no sentido atrativo faz com que a esfera de massa  $m_e$ , seja puxada para baixo, e conseqüentemente a mola de constante elástica  $k$  puxa a micro-viga, ocasionando essas deflexões.

Estas deflexões são causadas pelas forças de capilaridade e de Van der Waals que agem entre a sonda e a amostra. As diferentes técnicas (não contato, contato e contato intermitente) fornecem diversas possibilidades para fazer a topografia de diferentes tipos de amostras e para gerar uma ampla gama de informações.

Os modos de fazer as imagens, também chamados modos de varredura ou de operação, referem-se fundamentalmente à distância mantida entre a sonda (que chamaremos ponteira) e a amostra, no momento da varredura, e às formas de movimentar a ponteira sobre a superfície a ser estudada.

Para entender o funcionamento de um AFM devemos então ter conhecimento das forças que agem entre os sistemas microscópicos a distâncias muito pequenas e cuja interação é o princípio que o microscópio utiliza para funcionar. Na figura, estão representadas as forças que agem entre a ponteira e a amostra em função da distância que as separa.

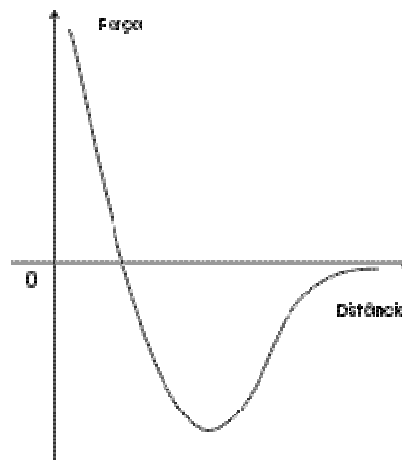


Figura 2.5.4. Forças entre a ponteira e a amostra em função da distância entre elas.

Na área abaixo da linha de força nula, as forças são atrativas. Acima da linha do zero, as forças são repulsivas. Este tipo de força é proveniente do potencial de interação entre dois ou mais átomos (que pode ser Lennard-Jones, ou qualquer outro potencial de interação entre átomos, com uma dependência desse tipo em  $r$ , sendo  $r$  a posição da ponteira em relação à superfície).

## MICRO-VIGA

A ponteira é apoiada num suporte chamada micro viga que pode ter forma de V ou de haste, em geral retangular. A força que a amostra exerce sobre a ponteira é determinada pela deflexão do micro viga, dada pela lei de Hooke  $F = -kx$ , sendo  $x$  o deslocamento do micro viga e  $k$  a sua constante de mola própria, determinada pelas características de construção. [62]

O componente mais importante do AFM é, sem dúvida, a micro viga. São necessárias grandes deflexões para atingir alta sensibilidade. Portanto, a mola deve ser bem mole. Por outro lado, é preciso uma alta frequência de ressonância para diminuir a sensibilidade a vibrações mecânicas, especialmente quando se está fazendo a varredura. Como a frequência de ressonância do sistema da mola é dada por  $f = (k/m)^{1/2}$ , onde  $m$  é a massa efetiva que carrega a mola, é claro que um grande valor para uma mola relativamente mole ( $k$  pequeno) pode ser conseguido mantendo pequena a massa  $m$  e, portanto, a dimensão do sensor deve ser tão pequena quanto possível. Estas considerações levam diretamente à idéia de utilização de técnicas de micro fabricação para produção de micro vigas.[62]

As micro-vigas em forma de V vistas na figura 2.5.5 possuem uma dureza lateral grande, se comparados com os de forma retangular. Isso reduz a sensibilidade a forças laterais de atrito que poderiam resultar em séria degradação das imagens, especialmente de superfícies topográficas com variações grandes em altura e inclinação.

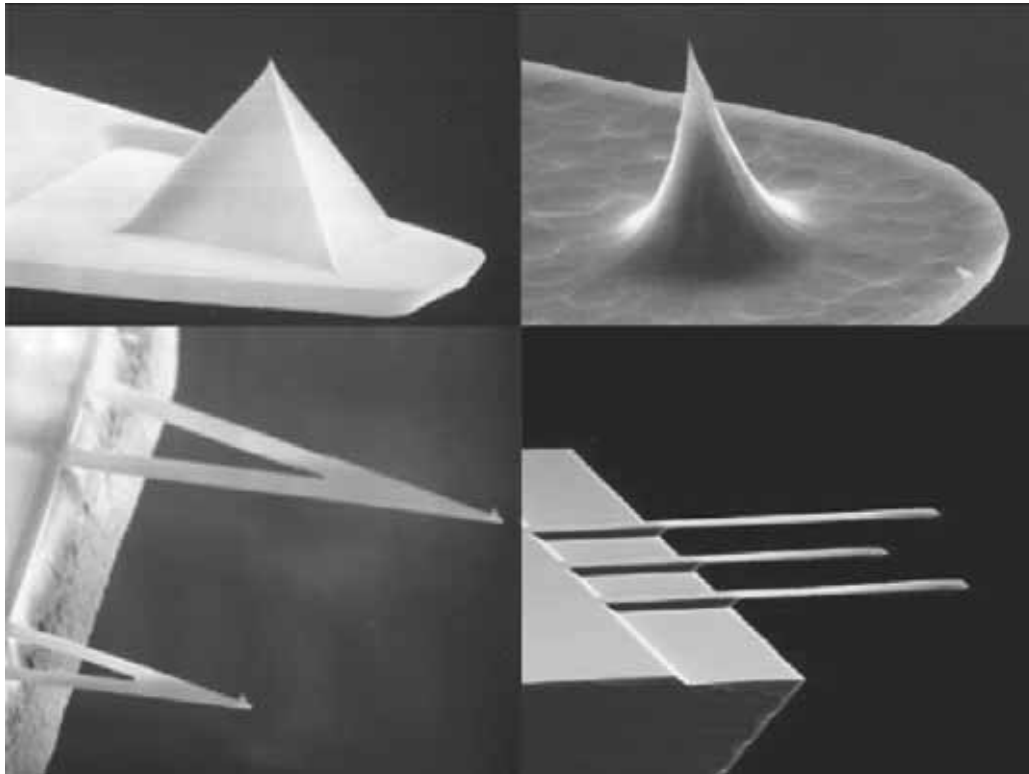


Figura 2.5.5. Tipo de ponteiras. A superior a esquerda mostra a ponteira piramidal. A superior a direita mostra uma ponteira cônica para alta performance. A inferior esquerda mostra ponteiras em V para modo contato, e a sua direita mostra ponteiras com diversos tamanhos. Figura extraída de [12].

## **CAPÍTULO 3 -           MODELOS MATEMÁTICOS DO AFM**

Neste capítulo apresentam-se uma série de modelos matemáticos de osciladores do AFM que serão importantes na visualização e compreensão da dinâmica do movimento produzido pelo AFM quando se está fazendo a varredura da amostra. O estudo dos AFM ainda é recente e pode se dividir em alguns segmentos como controle de caos em osciladores AFM no modo contato, não contato e tapping, o estudo de diagrama de bifurcações, mapas de Poincaré, atratores caóticos, estudo da teoria de Melnikov, técnicas de perturbação etc. Há extensos tópicos a se explorar sobre os AFMs. Alguns modelos são diferenciados pelo tipo de material a se fazer a varredura e outros fazem uma análise do material em meio líquido. Os modelos apresentados a seguir são os de Jalili, Dadfarnia, e Dawson (2009), Wang, Pai e Yau (2009) e Jalili e Laxminarayana (2004).

### **3.1   MODELO DE JALILI, DADFARNIA E DAWSON**

O modelo apresentado por Jalili, Dadfarnia, e Dawson, (2009) em [64] relata o microscópio de força atômica (AFM) em modo não contato e que o AFM sem contato oferece vantagens únicas sobre outras técnicas contemporâneas de digitalização da sonda como o AFM contato e o microscópio de tunelamento. Técnicas de imagem atual AFM são muitas vezes baseadas em um modelo discreto, parâmetros e equações diferenciais ordinárias (ODE) que modelam o funcionamento das micro-vigas juntamente com um método para a estimativa de interação atômica (especialmente no modo sem contato). Uma vez que a magnitude da força de interação está dentro da faixa de nano-Newtons, a estimativa da força atômica é crucial para a imagem precisas. Este trabalho visa a melhorar a técnica de medição de corrente AFM através do desenvolvimento de uma distribuição geral, os parâmetros se aproximam de modelagem base que revela um maior conhecimento sobre as características fundamentais da interação amostra à micro-viga. Para isso, as equações governantes do movimento são obtidas através do Princípio de Hamilton.

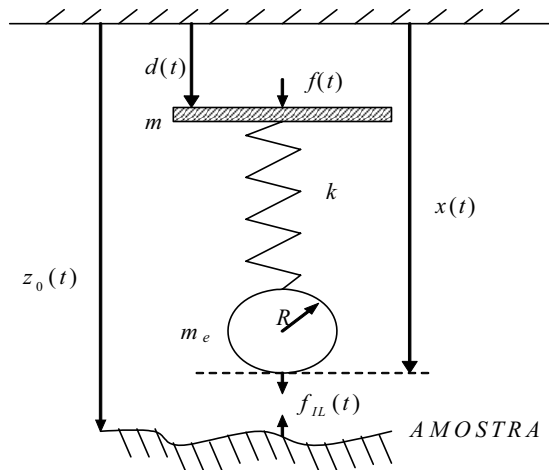


Figura 3.1. Modelo físico a parâmetros concentrados proposto por Jalili, Dadfarnia, e Dawson, 2009 [2].

O modelo com duas equações que simulam a dinâmica do sistema do microscópio de força atômica mostrado na figura 3.1 pode ser representado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} m\ddot{d}(t) + b(\dot{d}(t) - \dot{x}(t)) + k(d(t) - x(t)) &= f(t) \\ m_e\ddot{x}(t) + b(\dot{x}(t) - \dot{d}(t)) + k(x(t) - d(t)) + f_{II}(t) &= 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Onde

$x(t)$  denota a distância da base fixa de coordenadas até a ponta da esfera.

$d(t)$  denota o relativo deslocamento da viga para a base fixa de coordenadas.

$M$  denota a massa da viga.

$m_e$  denota a massa da esfera.

$K$  é a constante elástica da mola.

$b$  é o coeficiente de amortecimento. (obtida pela corrente de ar)

$F(t)$  representa a força de controle introduzida.

$f_{II}(t)$  Denota a força de Van der Waals (forças de interação, repulsão e atração) para este modelo, a qual é explicitamente definido na seguinte forma.[53,54,64]

$$f_{II}(t) = \frac{Dk}{(z_0(t) - x(t))^2} - \frac{\sigma^6 Dk}{30(z_0(t) - x(t))^8}$$

$z_0(t) \in \mathfrak{R}^1$  Representa a distância da base fixa à coordenada de amostra. A base de coordenadas em que desce. Existe a coordena x e y, conseqüentemente sentidos longitudinais e transversais da base fixa.

$Z_0(t) = z_0(t) - x(t)$  é a distancia a entre o extremo da esfera até a amostra

,  $\sigma \in \mathfrak{R}^1$  denota o diâmetro da molécula, e o parâmetro do modelo,

$D \in \mathfrak{R}^1$  é definido da seguinte forma  $D = \frac{A_H R}{6k}$  onde  $A_H \in \mathfrak{R}^1$  denota a constante de Hamaker ,  $R \in \mathfrak{R}^1$  representa o raio da esfera, além disso a diferença dos deslocamentos de  $(z_0(t) - x(t))$  deve ser positivo, para que não haja contato ( modo não contato).

A seguir o modelo viga-amostra a partir do potencial Lennard–Jones, segundo Nader Jalili et.al, 2004.

### 3.2 MODELO DE NADER JALILI E KARTHIK LAXMINARAYANA

Os autores em [2] formalizaram um modelo matemático através do potencial de Lennard-Jones. Neste esquema de modelagem, a micro-viga é modelado pela interação entre a ponta e a amostra, e é descrita por uma força em potencial (Van Der Waals ) [53,54,65]. A dinâmica forçada do sistema é analisada utilizando o método de Melnikov, afim de projetar um controlador que elimina a possibilidade de caos no sistema e, assim, substancialmente melhora o comportamento do sistema de imagens. A micro-viga é modelada como um único grau de liberdade em um sistema massa-mola. O potencial de Lennard-Jones foi usado para contabilizar as forças de interação entre as moléculas.

O modelo [2] apresenta um estudo no modo não-contato e é operado com a micro-viga perto de sua frequência de ressonância natural. Além disso, a aplicação de controle feedback têm sido desenvolvidas a fim de melhorar a operação da região do AFM. O trabalho propõe o seguinte modelo apresentado pela figura:

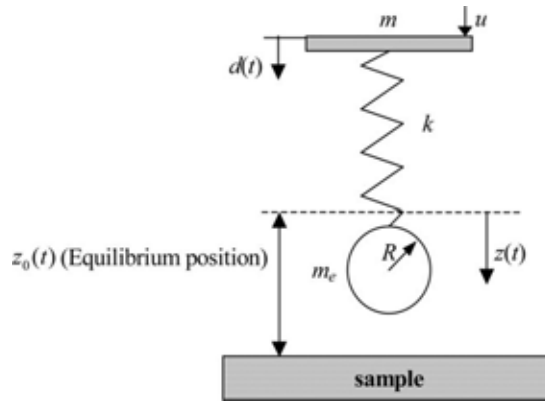


Figura 3.2.1 AFM modelo físico a parâmetros concentrados de [2] a partir do potencial Leonard-Jones.

O modelo se baseia no potencial Lennard–Jones entre duas moléculas, que é dado por:

$$w(r) = \frac{c_1}{r^{12}} - \frac{c_2}{r^6} = 4\beta \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Onde  $r$  é a distancia entre as moléculas,  $\sigma$  é o diâmetro molecular,  $c_1$  e  $c_2$  são as constantes de interação e  $-\beta$  é o mínimo do potencial. Assumindo que a amostra e a esfera tem moléculas por unidade de volume de  $\rho_2$ ,  $\rho_1$ , respectivamente, o número de moléculas é uma região de amostras onde tem espessuras  $dy$  e comprimentos  $dx$  seria  $2\pi y(dy)(dx)\rho_2$ . Conseqüentemente, o potencial de interação entre a simples molécula localizada na distancia  $z$  da amostra pode ser equacionada usando  $w(r)$ .

$$\begin{aligned} w(z) &= \int_{x=z}^{\infty} \int_{y=0}^{\infty} 2\pi\rho_2 y \left( \frac{c_1}{(x^2 + y^2)^6} - \frac{c_2}{(x^2 + y^2)^3} \right) dy dx \\ &= 2\pi\rho_2 c_1 \int_{x=z}^{\infty} dx \int_{y=0}^{\infty} \frac{y}{(x^2 + y^2)^6} - 2\pi\rho_2 c_2 \int_{x=z}^{\infty} dx \int_{y=0}^{\infty} \frac{y}{(x^2 + y^2)^3} dy \\ &= \frac{2\pi\rho_2 c_1}{90z^9} - \frac{2\pi\rho_2 c_2}{12z^3} \end{aligned}$$

Agora a interação entre a energia e a esfera e a amostra pode ser mostrada com a relação a seguir:

Observando a figura, as moléculas na distancia  $x + Dx$  da superfície falsa na secção circular de área  $\pi y^2$  e espessura  $dx$ . O número de moléculas nesta secção pode ser dado como  $\rho_1 \pi y^2 dx = \rho_1 \pi (2R - x) x dx$ . Utilizando a equação anterior, a interação da energia pode ser escrita como:

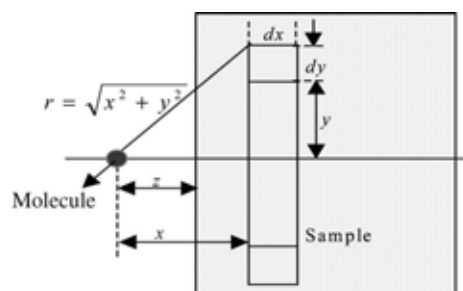


Figura 3.2.2. Esquema da molécula e a geometria da superfície da amostra, segundo Nader Jalili et. AL, 2004.

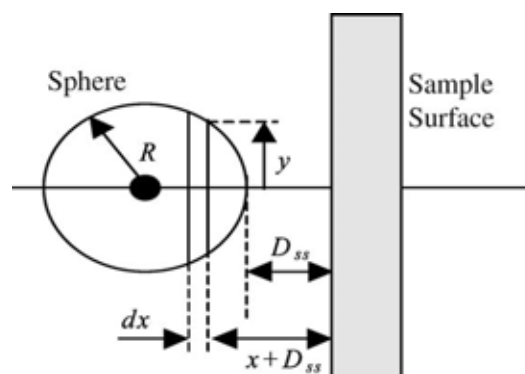


Figura 3.2.3. Esquema interação ponta da esfera- amostra segundo Nader Jalili,et. al, 2004

[2].



$$w(D_{ss}) = \int_{x=0}^{2R} \rho_1 \pi (2R-x) x \left( \frac{2\pi\rho_2 c_1}{90(x+D_{ss})^9} - \frac{2\pi\rho_2 c_2}{12(x+D_{ss})^3} \right) dx$$

$$= \frac{A_1 R}{1260 D_{ss}^7} - \frac{A_2 R}{6 D_{ss}}$$

Sobre a suposição que  $R \geq D_x$  ( no qual resulta em  $2Rx \geq x^2$  ).  $A_1 = \pi^2 \rho_1 \rho_2 c_1$  e  $A_2 = \pi^2 \rho_1 \rho_2 c_2$  são constantes de Hamacker para potenciais de atração e repulsão, respectivamente, e  $D_x$  representa a distancia entre a esfera e a superfície como mostrado na figura.

A interação extremidade da esfera à amostra pode ser modelada pela interação da energia potencial dada por:

$$V(z, z_0) = \frac{A_1 R}{1260(z_0 - z)^7} - \frac{A_2 R}{6(z_0 - z)}$$

A energia do sistema balanceado por uma efetiva massa  $m_e$  pode ser escrita como:

$$H(z, z', z_0) = \frac{1}{2} z'^2 + \frac{1}{2} \omega_1^2 (z - d)^2 - \frac{D \omega_1^2}{(z_0 - z)} + \frac{\sigma^6 D \omega_1^2}{210(z_0 - z)^7}$$

$$z_1' = z_2 = \frac{\partial H}{\partial z_2}$$

$$z_2' = -\omega_1^2 (z - d) - \frac{Dk}{(z_0 - z)^2} + \frac{\sigma^6 Dk}{30(z_0 - z)^8} = -\frac{\partial H}{\partial z_1}$$

Onde

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m_e}}$$

$$D = \frac{A_2 R}{6K}$$

Definindo as variáveis  $x_1 = z$  e  $x_2 = z'$ , então o sistema dinâmico da extremidade da esfera à amostra deriva em relação a energia Hamiltoniana e que pode ser reescrita como se mostra a seguir:

$$\begin{cases} X_1' = X_2 \\ X_2' = -\omega_1(X_1 - d) - \frac{D\omega_1^2}{(Z_0 - X_1)^2} + \frac{\sigma^6 D\omega_1^2}{30(Z_0 - X_1)^8} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} X_1' &= \frac{dX}{dX_2} \\ X_2' &= -\left(\frac{dH}{dX_1}\right) \end{aligned}$$

### 3.3 MODELO DE WANG, PAI e YAU

De acordo com Wang, Pai e Yau (2009) em [3] a micro-viga do AFM pode exibir um movimento caótico em certas condições. Esta questão tem sido experimentalmente observada em [51, 52]. Estudos teóricos, com base nas técnicas da teoria de Melnikov, foram realizados em [53,54] para provar a existência de conjuntos de invariâncias caóticas e para determinar a região no espaço de parâmetros físico onde movimento caótico está presente. Em 2006, Hu e Raman [55] utilizando experiências sistemáticas em uma variedade micro-vigas em uma ampla gama de condições operacionais e mostrou que as respostas dinâmicas de AFM micro-vigas podem ter bifurcações periódicas às oscilações caóticas perto a transição do não-contato e o tapping.

O comportamento caótico em AFM é altamente indesejável e traz efeitos negativos uma vez que este tipo de movimento irregular faz com que o AFM funcione medindo imprecisamente e tornando baixa a resolução da topografia da amostra. Para garantir o bom desempenho do microscópio e eliminar a possibilidade do movimento caótico das micro-vigas, é necessário alterar as condições de funcionamento do AFM para uma região, em que os parâmetros façam o movimento ser regular ou então projetar um controlador ativo que estabilize o sistema em uma de suas órbitas periódicas estáveis. Em 1999, Ashhab et al. [6] aplicaram um controlador proporcional e derivativo dos AFMs que calcula a função de Melnikov, em termos dos parâmetros do controlador. Usando essa relação, é possível projetar controladores que vai eliminar a possibilidade de caos em AFMs. Além disso, em 2008 Arjmand, et al. [8] utilizou um controle feedback não-linear para controlar o caos em AFMs, na qual mostrou que o comportamento caótico do AFMs é suprimida por um de seus estabilizadores de primeira ordem em órbitas periódicas estáveis através de “sliding mode control”. Salarieh e

Alasty [9] e Yamasue e Hikiyara [10] também utilizaram um “feedback control” por atraso de tempo para controlar um sistema AFM (time delay feedback control). Em 2009, Salarieh e Alasty [9], fez um estudo sobre o controle de caos no modo “tapping” e o chamou de “delayed feedback method”. Sabe-se que se um sistema de AFM operando em movimento caótico resultará em uma vibração com grandes amplitudes a qual levará a uma maior probabilidade de falha por fadiga. Suprimir o movimento caótico nos AFMs é muito importante. Publicações referentes ao controle de caos em AFMs assumiram que os parâmetros do modelo precisam estar disponíveis para a linearização feedback e o sistema não pode estar sujeito a perturbações externas. No entanto, a condição ideal não pode ser sempre fornecida. Neste trabalho [3], uma estratégia de controle foi desenvolvida para a supressão de caos, mesmo com as incertezas do modelo e perturbações externas. A estratégia proposta pertence a um esquema de controle de entrada / saída que herda as vantagens da via SMC o processo de “design backstepping”. O modelo estendido é formulado para obter um contínuo controle de entrada. Os resultados da simulação verificam que o controlador proposto pode suprimir o caos em AFMs, apesar de o modelo haver incertezas e perturbações externas. Os resultados mostraram que as vibrações não síncronas (síncronas se refere à sincronia durante uma transmissão) do sistema de AFM pode ser suprimida através da implementação de um controle de malha aberta. O esquema proposto pode ser aplicado a outros tipos de sistemas de AFM.

A modelagem matemática

Micro-viga é a principal parte para o regime de detecção utilizada pelo microscópio de força atômica.

É essencial que a dinâmica da micro-viga seja totalmente compreendida, antes de tentar desdobrar a complexa dinâmica que é introduzida devido à interação da amostra à micro-viga, modelada como mostrado na figura. 3.3.1. A micro-viga é modelada como um sistema massa-mola. A micro-viga interage com a amostra através da ponteira da sonda que está montada na micro-viga. Assim, o potencial para o conjunto da amostra de ponta é dada por Ashhab et al. [6]

$$P(X, Z) = -\frac{H_c R_s}{6(Z_b + X)} + \frac{1}{2} K_s X^2$$

Onde  $Z_b$  é a posição de equilíbrio da ponteira,  $X$  é o deslocamento da ponteira,  $H_c = 2\pi\rho_1\rho_2l_c$  é a constante de Hamaker,  $l_c$  é a constante de interação. O potencial é modelado como uma atração da ponteira de raio  $R_s$  com densidade  $\rho_1$  pela amostra de densidade  $\rho_2$ . A rede de energia do sistema dimensionado pela massa  $m_s$  da micro-viga é dada por  $E(X, X', Z_b)$  com:

$$E(X, X', Z) = \frac{1}{2}X'^2 + \frac{1}{2}\omega_s^2 X^2 - \frac{\zeta\omega_s^2}{(Z_b + X)'}.$$

Onde  $()' = \frac{d()}{dt'}$ ,  $\omega_s = \sqrt{k_s / m_s}$  é a primeira frequência modal do sistema e  $\zeta = H_c R_s / 6K_s$ .

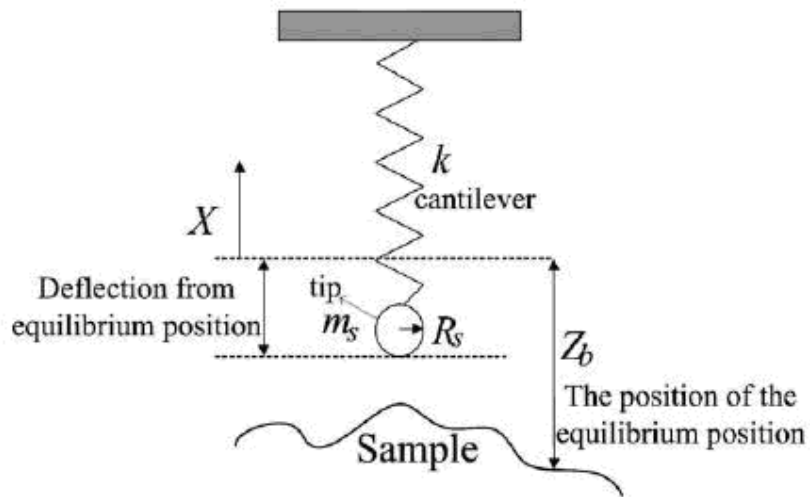


Figura 3.3.1. AFM de [3].

## CAPÍTULO 4

### PROBLEMA PESQUISADO DE AFM

#### 4.1 MODELANDO O AFM

A dinâmica não-linear das micro-vigas dos AFMs durante o processo de varredura é altamente não-linear e tem sido investigada por vários autores na literatura atual como (Wang et al. 2009) [3], (Garcia e São Paulo, 2000) [4], (Jalili e Laxminarayana, 2004) [2], (Hu e Raman, 2007) [55], (Raman et al. 2008) [6], (Ashab et al. 2008) [53], [54], (Farrokh et al. 2009) [7], (Lozano e Garcia, 2008) [5]. A interação da viga até a amostra via uma sonda é conhecida como um sistema viga – sonda – amostra na qual é modelada matematicamente por uma esfera de raio  $R_s$  e massa  $m_s$  presa por uma mola de coeficiente  $k = k_l + k_{nl}$ .

Então, o potencial do sistema é dado por:

$$P = -\frac{A_c R_c}{6(Z_b + X)} + \frac{1}{2} k_l X^2 + \frac{1}{4} k_{nl} X^4 \quad (4.1.1)$$

Energia do sistema é dada pela letra  $E$ :

$$E = \frac{1}{2} \dot{X}^2 + \frac{1}{2} \omega_1^2 X^2 + \frac{1}{4} \omega_2^2 X^4 - \frac{D \omega_1^2}{(Z_b - X)} \quad (4.1.2)$$

onde:  $k_l$  é a constante elástica linear,  $k_{nl}$  é a constante elástica não linear,  $\omega_1 = \sqrt{\frac{k_l}{m}}$

frequência de primeira ordem,  $\omega_2 = \sqrt{\frac{k_{nl}}{m}}$ ,  $D = \frac{A_c R_c}{6k_l}$ , onde  $D$  é o diâmetro molecular,  $A_c$  é

a constante de Hamaker e  $R_c$  é o raio da esfera da sonda, e  $Z_b$  é a distância da sonda até amostra.

Se  $X_1 = X$  e  $X_2 = \dot{X}$ .

A dinâmica do sistema é derivada a partir da formulação Hamiltoniana e é dada por:

$$\begin{aligned}\dot{X}_1 &= \frac{\partial E}{\partial X_2} \\ \dot{X}_2 &= -\frac{\partial E}{\partial X_1}\end{aligned}\tag{4.1.3}$$

A dinâmica não linear do sistema descreve a operação do AFM como na figura 3.3.1, e é obtida através do modelo proposto por [3], e também pela inclusão da não linearidade cúbica proposto por [78] e [79]. Substituindo (4.1.1) and (4.1.2) in (4.1.3):

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = X_2 \\ \dot{X}_2 = -\omega_1^2 X_1 - \frac{D\omega_1^2}{(Z_b + X_1)^2} \end{cases}\tag{4.1.4}$$

Esta formulação mostra apenas a parte repulsiva da força de Van der Waals. Em [3] mostra que a maioria dos modelos matemáticos de AFMs são amortecidos devido a quantidade de ar entre a sonda e a amostra, e de tão pequena pode ser desprezada, se tornando um sistema Hamiltoniano. O sistema é forçado por uma pequena força senoidal na qual é dada por  $mf \cos \omega t$ , onde,  $w$  toma o valor da frequência natural  $\omega_1$  do sistema. Yabuno em [78] faz o estudo de AFMs utilizando o incremento da não linearidade cúbica para o controle da amplitude da microviga do AFM. Os sistemas mecânicos podem ter um comportamento indesejável, inesperado e instável devido aos efeitos da não-linearidade dos sistemas. A força de Van der Waals é altamente não linear. Sua formulação matemática possui a variável de deslocamento no denominador da fração, e alguns autores [79], [52] sugerem a transformação da força em série de Taylor para uma melhor visualização dos termos cúbicos, quadráticos do sistema.

Como em [79], o modelo difere dos modelos [14, 15, 16] pela inclusão do termo cúbico que é altamente não linear. As equações não lineares do movimento são derivadas do princípio de Hamilton. Parâmetros para estabilidade são totalmente viáveis e físicos sendo deduzidos a partir do critério de Melnikov [79], [53]. Para o critério são considerados amortecimentos de pequeno porte. Este modelo difere de modelos padrão [53],[2] pois há inclusão do termo cúbico não-linear elástico que faz o sistema incorporar a influência da dispersão da microviga [79].

A equação diferencial governante do sistema pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\dot{X}_1 &= X_2 \\ \dot{X}_2 &= -\omega_1^2 X_1 - \omega_2^2 X_1^3 - \frac{D\omega_1^2}{(Z_b - X_1)^2} - f \cos wt - \phi X_2\end{aligned}\quad (4.1.5)$$

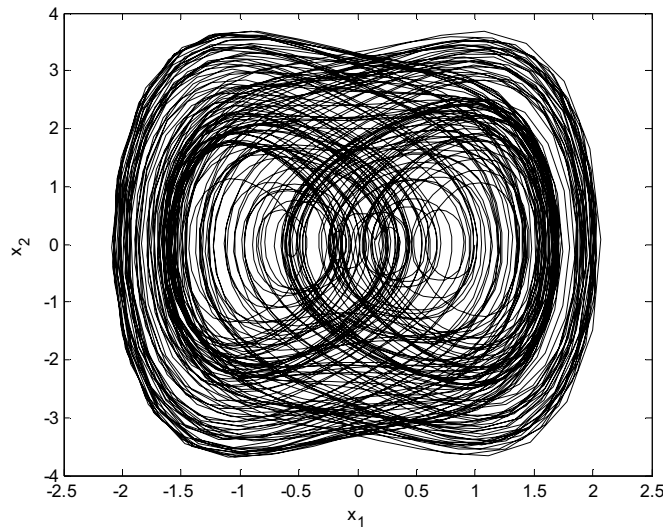
Onde a força de amortecimento  $\phi X_2$ , é inserida devido ao amortecimento do ar entre a sonda e amostra. Então o sistema pode ser adimensionalizado com  $(\phi X_2 = (a_4 \cos b - a_5 X_2))$  e o sistema segue em (4.1.7):

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -a_1 x_1 - a_2 x_1^3 - \frac{b}{(z + x_1)^2} + c \sin \tau\end{aligned}\quad (4.16)$$

onde:  $x_1 = \frac{X_1}{Z_s}$ ,  $x_2 = \frac{X_2}{\omega_s Z_s}$ ,  $z = \frac{Z_b}{Z_s}$ ,  $Z_s = \frac{3}{2}(2D)^{\frac{1}{3}}$  and  $\tau = wt$ .

Considerando os parâmetros:  $b = 0.17602$ ,  $c = 2.6364$  e  $z = 2.5$ ,  $a_1 = 0.14668$ ,  $a_2 = 2.1269$ .

Obtêm se o seguinte retrato de fase:

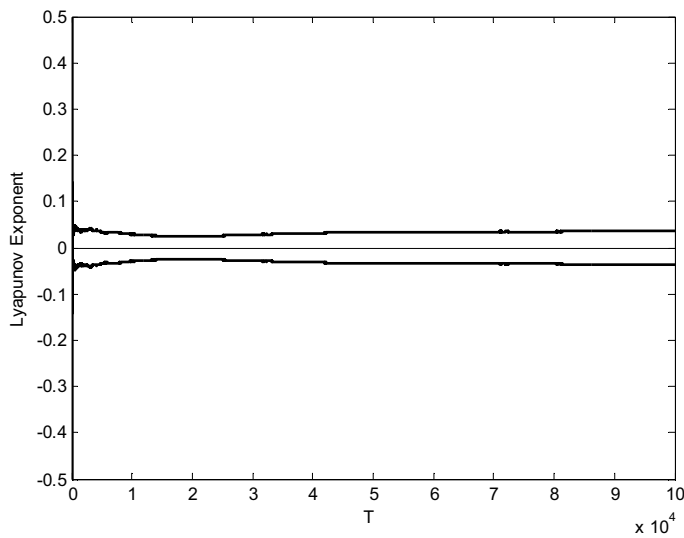


**Figure 4.1.1. Phase portrait of atomic force microscope**

Considerando (4.1.6) :

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1 &= x_2 \\
 \dot{x}_2 &= -a_1 x_1 - a_2 x_1^3 - \frac{b}{(z + x_1)^2} + c \sin x_3 \\
 \dot{x}_3 &= 1
 \end{aligned}
 \tag{4.1.7}$$

Obtêm se os expoentes de Lyapunov:



**Figure 3. Exponents of Lyapunov:**  $\lambda_1 = 0.336$ ,  $\lambda_2 = -0.336$  and  $\lambda_3 = 0$

O modelo estudado pode ser definido desta forma com as constantes elásticas definidas.

$$\begin{cases}
 X_1' = X_2 \\
 X_2' = -A(a_1 X_1 + a_2 X_1^3) - \frac{B}{(Z + X_1)^2} + C \sin b
 \end{cases}$$

Onde

$$A = \frac{a_1}{(1 - a_3 a_5)}, B = \frac{a_1 a_2}{(1 - a_3 a_5)}, C = \frac{a_3 a_4}{(1 - a_3 a_5)}$$

A técnica do cálculo do expoente de lyapunov é uma ferramenta poderosa que serve para distinguir os atratores individuais, a partir da convergência ou divergência exponencial no comportamento de trajetórias vizinhas no espaço de fase. Um atrator para um sistema



dissipativo com um ou mais expoente de Lyapunov é dito ser caótico. Os expoentes de Lyapunov avaliam a sensibilidade às condições iniciais, verificando a divergência exponencial no tempo de trajetórias vizinhas, e representa um dos critérios mais importantes utilizados para definir o caos em sistemas dinâmicos.

O artigo [65] é dedicado ao efeito do ruído sobre o célebre *well-oscillator* duplo qual é o modelo básico para o estudo de ativação térmica entre dois estados estáveis (problema de Kramers). O conceito de expoentes de Lyapunov é aplicada ao modelo. No quadro de uma análise de estabilidade linear, expoentes de Lyapunov medem a média propriedades de estabilidade de órbitas. Estes expoentes desempenham um papel essencial na teoria do caos determinístico. Em sistemas determinísticos os expoentes de Lyapunov podem ser consideradas como uma definição de caos.

## CAPÍTULO 5

### BUSCA DA SOLUÇÃO ANALÍTICA APROXIMADA

#### 5.1 MÉTODO DAS MÚLTIPLAS ESCALAS

Adota-se o método das múltiplas escalas para a busca de uma solução aproximada, para isso é realizado um balanço de ordem da seguinte forma:

Na equação (5.1), fazemos  $x = \epsilon u$ , onde  $\epsilon$  é o parâmetro responsável por este balanço, Nayfeh (1980).

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = X_2 \\ \dot{X}_2 = -A(a_2 X_1 + a_1 X_1^3) - \frac{B}{(Z + X_1)^2} + C \sin b \end{cases} \quad (5.1)$$

#### 5.2 FORÇA DE VAN DER WAALS

A força de Van der Waals é o fator mais importante na formulação matemática do modelo de AFM. Autores sugerem a transformação dessa função em uma aproximada pela série de Taylor. A seguir deve-se fazer uma aproximação em série de Taylor buscando a visualização dos termos cúbico, quadrático, linear e a constante para uma melhor manipulação dos parâmetros assim como a aplicação da técnica do método de Melnikov e a técnica de perturbação (método das múltiplas escalas).

Utiliza-se a expansão em série de Taylor até o quarto termo em torno do ponto  $x=1$ , temos a seguinte transformação da força de van der waals:

$$-\frac{b}{(z + x_1)^2} = -0.0274 + 0.0192x_1 + 0.0075x_1^2 - 0.0013x_1^3 \quad (5.2)$$

E substituindo (5.1) in (5.2):

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -L - Jx_1 - Ix_1^2 - Hx_1^3 + c \sin \tau \end{aligned} \tag{5.3}$$

Onde:  $L = 0.0274$ ,  $J = 0.12748$ ,  $I = -0.0075$ ,  $H = 2.1282$  and  $c = 2.6364$ .

Obtém-se:

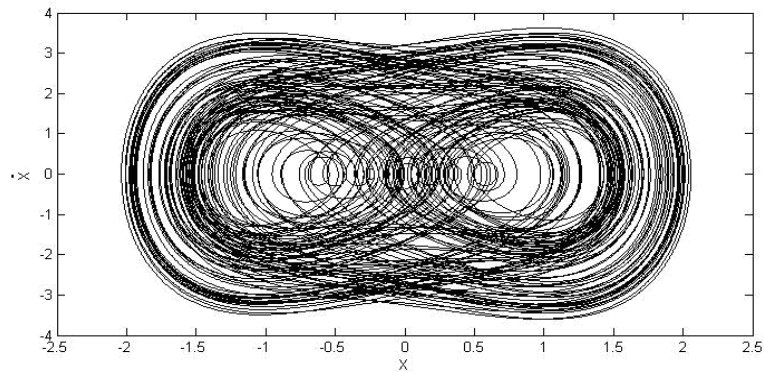


Figura 5.2.1 Retrato de fase com a nova Van der Waals

Para  $x = \varepsilon\mu$ :

$$\varepsilon^\lambda \mu'' + H\varepsilon^{3\lambda} \mu^3 + I\varepsilon^{2\lambda} \mu^2 + J\varepsilon^\lambda \mu + L - C \sin w\tau = 0$$

A expansão no ponto  $x=0$  fica:

$$\varepsilon\mu'' + A\varepsilon^3 \mu^3 + B \left( \frac{1}{\gamma^2} - \frac{2}{\gamma^3} \varepsilon\mu + \frac{3}{\gamma^4} (\varepsilon\mu)^2 - \frac{4}{\gamma^5} (\varepsilon\mu)^3 + \frac{5}{\gamma^6} (\varepsilon\mu)^4 \right) - C \sin w\tau = 0$$

Com epsilon variando de 0.1 a 0.01 temos um retrato de fase quase periódico.

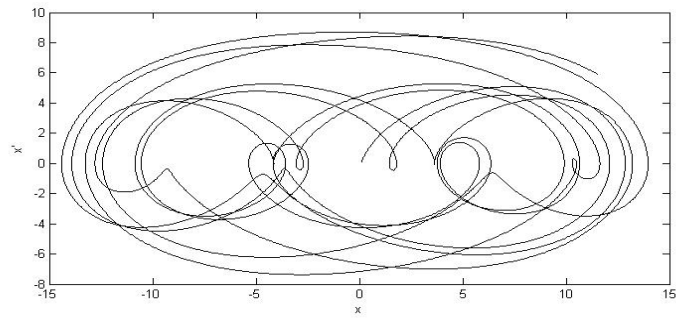


Figura 5.2.2. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.1$

Para  $x=1$ , tem-se:

$$\varepsilon\mu^4 + A\varepsilon^3\mu^3 + B\left(\frac{1}{28^2} - \frac{6}{28^3}(\varepsilon\mu - 1) + \frac{1}{2}\left(\frac{-12}{28^3} + \frac{54}{28^4}\right)(\varepsilon\mu - 1)^2 - \frac{1}{6}\left(\frac{-12}{28^3} + \frac{324}{28^4} - \frac{648}{28^5}\right)(\varepsilon\mu - 1)^3\right) - C\sin\omega t = 0$$

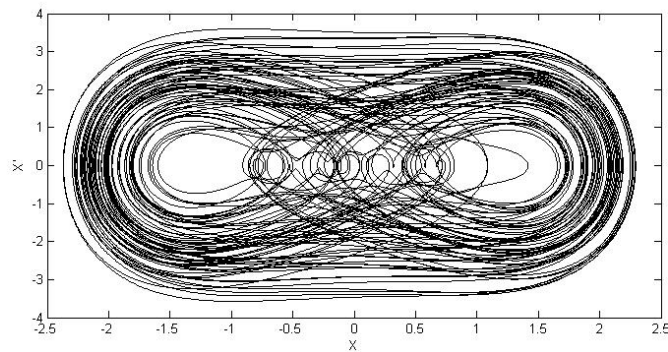


Figura 5.2.3. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.8$

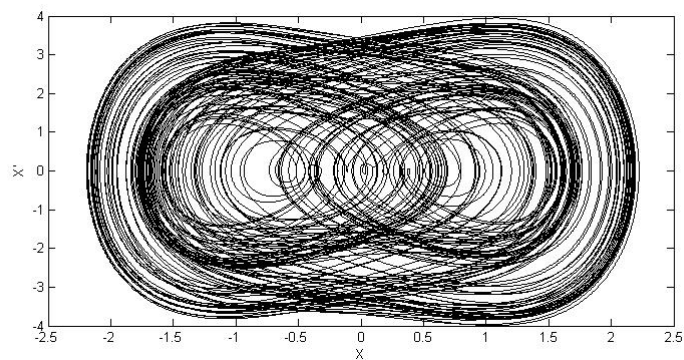


Figura 5.2.4. Retrato de fase para Para  $\varepsilon = 0.95$

### 5.3 SOLUÇÃO ANALÍTICA APROXIMADA UTILIZANDO TÉCNICAS DE PERTURBAÇÃO

Sob certas circunstâncias é possível obter soluções analíticas aproximadas das equações diferenciais do sistema na forma de séries de potência.

Este pode ser o caso quando as equações diferenciais são quase lineares ou fracamente não lineares, e autônomas, isto é, quando os termos que tornam o sistema não linear e não autônomos são relativamente pequenos.

Tais termos, conhecidos como perturbações, representam efeitos de segunda ordem identificados como um pequeno parâmetro multiplicando os termos não lineares e não autônomos.

Para tais sistemas é possível obter uma solução em termos de séries de potência para os pequenos parâmetros, em particular se o sistema é harmônico, Meirovitch (1970), Nayfeh e Mook (1979).

A técnica para tratar este tipo de sistema fracamente não linear é o método de perturbação. Embora Poisson tenha usado a técnica de perturbação para investigar problemas de mecânica celeste, a teoria de perturbação moderna é atribuída a Poincaré.

No início a tentativa de utilizar a técnica de perturbação pelos astrônomos foi frustrada devido ao surgimento de termos que aumentavam com o tempo.

Tais termos destroem a convergência da solução e são referidos como termos seculares. Uma grande quantidade de métodos de perturbação tem sido desenvolvida para tentar solucionar o problema do aparecimento dos termos seculares, inclusive um método atribuído a Poincaré.

Outros métodos que dedicam – se a este tema, podem ser encontrados em Nayfeh e Mook (1979) e Nayfeh (1980).

Assim, neste capítulo o objetivo é à busca de uma solução analítica aproximada para as equações de movimento de um oscilador AFM, a técnica de perturbação adotada para a obtenção da solução analítica é o método das múltiplas escalas (MME).

A escolha do método depende do problema a ser analisado, o método das múltiplas escalas (MME) é amplamente usado no caso ideal, Nayfeh e Mook (1979) e o método da média no caso não ideal, Kononenko (1969), mas exceções são sempre possíveis, como mostrado em Bolla et. al. (2007) e Fenili e Balthazar (2007).

Este capítulo apresenta resultados obtidos através de simulações numéricas da solução analítica aproximada obtida através do MME, com esses resultados, é possível ter um melhor entendimento da dinâmica não linear do sistema.

Observe que a equação é uma função  $\varepsilon f(\mu, \mu')$ . Onde  $\varepsilon$  é um pequeno parâmetro e os pontos denotam a derivada com relação ao tempo adimensional  $t$ , e  $u$  é a variável dependente adimensional. A função  $f$  é contínua.

No método das múltiplas escalas, a idéia principal é aplicar uma transformação na equação diferencial em estudo, sendo ela linear ou não, gerando uma série de equações diferenciais lineares acopladas. Para tornar mais explícito esta definição o método define  $n$  variáveis  $T_n$  de

tempo, dadas por  $T_n = \varepsilon^n t$ , logo substituindo

$$T_0 = t, T_1 = \varepsilon t, T_2 = \varepsilon^2 t$$

Onde estas variáveis são interpretadas como diferentes escalas de tempo (múltiplas escalas) e tomadas como independentes, desde que o parâmetro  $\varepsilon$  assuma um valor pequeno,  $\varepsilon = 0.01$ .

Para estas diferentes escalas de tempo, observamos que as derivadas na variável  $t$  também devem ser reescritas em termos das derivadas de  $T_n$  na forma

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial T_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial T_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T_2} + \dots = D_0 + \varepsilon D_1 + \varepsilon^2 D_2 \dots$$

$$\frac{d^2}{dt^2} = D_0^2 + 2\varepsilon D_0 D_1 + \dots$$

$$D_n = \frac{d^n}{dT_n^n}$$

$$\mu'' + H \varepsilon^{2\lambda} \mu^3 + I \varepsilon^\lambda \mu^2 + J \mu + \varepsilon^{2\lambda} L = \varepsilon^{2\lambda} C \sin w t$$

substituindo

$$(D_0 + \varepsilon D_1 + \varepsilon^2 D_2)^2 \mu + H \varepsilon^2 \mu^2 + I \varepsilon \mu^2 + J \mu + \varepsilon^2 L = \varepsilon^2 C \sin w t$$

Resolvendo o quadrado da soma de três termos

$$(D_0^2 + 2\varepsilon D_1 D_0 + 2\varepsilon^2 D_0 D_2 + 2\varepsilon^3 D_1 D_2 + \varepsilon^2 D_1^2 + \varepsilon^4 D_2^2)^2 \mu + H\varepsilon^2 \mu^3 + I\varepsilon \mu^2 + J\mu + \varepsilon^2 L = \varepsilon^2 C \sin \omega t$$

Onde:  $L = 0.0274$ ,  $J = 0.12748$ ,  $I = -0.0075$ ,  $H = 2.1282$  and  $c = 2.6364$ .

Reagrupando os termos da equação e separando as equações por ordens, temos três equações separadas por ordem zero, um e dois.

Sendo

$$\mu = \mu_0(T_1, T_2, T_3) + \varepsilon \mu_1(T_0, T_1, T_2) + O(\varepsilon^2)$$

torna-se

$$\begin{cases} D_0^2 \mu_0 + J \mu_0 = 0 \\ D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 D_0 \mu_0 - I \mu_0^2 \\ D_0^2 \mu_2 + J \mu_2 = -2D_0 D_2 \mu_0 - D_1^2 \mu_0 - 2D_0 D_1 \mu_1 - H \mu_0^3 - 2I \mu_0 \mu_1 - L + C \sin \omega t \end{cases}$$

Uma possível solução para a primeira equação é:

$$\mu_0 = A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} + \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0}$$

Substituindo na segunda equação obtêm-se:

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 D_0 ((T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} + \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0}) - I (A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} + \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0})^2$$

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 D_0 (A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} + \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0}) - I ((A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0})^2 + 2A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0} + (\bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0})^2)$$

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 (A' e^{i\sqrt{J}T_0} + \bar{A}' e^{-i\sqrt{J}T_0}) - I ((A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0})^2 + 2A(T_1) e^{i\sqrt{J}T_0} \bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0} + (\bar{A}(T_1) e^{-i\sqrt{J}T_0})^2)$$

Eliminando os termos seculares temos:

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 A' e^{i\sqrt{J}T_0} - I (A e^{2i\sqrt{J}T_0} + 2A \bar{A}(T_1) + \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{J}T_0})$$

Sendo  $DA = 0$  tem-se que  $A$  é constante

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -2D_1 A' e^{i\sqrt{j}T_0} - I(Ae^{2i\sqrt{j}T_0} + 2A\bar{A}(T_1) + \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0})$$

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -I(Ae^{2i\sqrt{j}T_0} + 2A\bar{A}(T_1) + \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0})$$

$$D_0^2 \mu_1 + J \mu_1 = -I(Ae^{2i\sqrt{j}T_0} + 2A\bar{A} + \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0})$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{3} A^2 e^{2i\sqrt{j}T_0} - 2IA\bar{A}(T_1) - \frac{1}{3} \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}$$

$$D_0^2 \mu_2 + J \mu_2 = -2D_0 D_2 (A(T_1)e^{i\sqrt{j}T_0} + \bar{A}(T_1)e^{-i\sqrt{j}T_0}) - \dots$$

$$\dots - D_1^2 (A(T_1)e^{i\sqrt{j}T_0} + \bar{A}(T_1)e^{-i\sqrt{j}T_0}) - 2D_0 D_1 \left(-\frac{1}{3} A^2 e^{2i\sqrt{j}T_0} - \dots\right.$$

$$\dots - 2IA\bar{A}(T_1) - \frac{1}{3} \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}) - H(A(T_1)e^{i\sqrt{j}T_0} + \bar{A}(T_1)e^{-i\sqrt{j}T_0})^3 - \dots$$

$$\dots - 2I(A(T_1)e^{i\sqrt{j}T_0} + \bar{A}(T_1)e^{-i\sqrt{j}T_0}) \left(-\frac{1}{3} A^2 e^{2i\sqrt{j}T_0} - 2IA\bar{A}(T_1) - \frac{1}{3} \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}\right) - L + C \sin Wt$$

Fazendo

$$D_1 \mu_0 = D_1 \mu_1 = 0$$

Tem-se:

$$D_0^2 \mu_2 + J \mu_2 = -2(iA' e^{i\sqrt{j}T_0} - i\bar{A}' e^{-i\sqrt{j}T_0}) - H(Ae^{i\sqrt{j}T_0} + \bar{A}e^{-i\sqrt{j}T_0})^3 - 2I(Ae^{i\sqrt{j}T_0} + \dots$$

$$\dots + \bar{A}e^{-i\sqrt{j}T_0}) \left(-\frac{1}{3} A^2 e^{2i\sqrt{j}T_0} - 2IA\bar{A} - \frac{1}{3} \bar{A}^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}\right) - L + C \sin Wt$$

$$D_0^2 \mu_2 + J \mu_2 = -2iA' e^{i\sqrt{j}T_0} - HA^3 e^{3i\sqrt{j}T_0} + \frac{2}{3} IA^3 e^{3i\sqrt{j}T_0} + 4I^2 A^2 \bar{A} e^{i\sqrt{j}T_0} - L + C \sin Wt + CC$$

$$D_0^2 \mu_2 + J \mu_2 = (-2iA' + 4I^2 A^2 \bar{A}) e^{i\sqrt{j}T_0} + (-HA^3 + \frac{2}{3} IA^3) e^{3i\sqrt{j}T_0} - L + C \sin Wt + CC$$

Eliminando os termos divergentes tem-se:

$$-2iA' + 4I^2 A^2 \bar{A} = 0$$

A possível solução para esta equação é:



$$A = \frac{1}{2} a e^{i\sqrt{j}\beta}$$

Substituindo tem se:

$$-ia'e^{i\sqrt{j}\beta} + a\beta'e^{i\sqrt{j}\beta} + 4I^2 \frac{1}{4} a^2 e^{2i\sqrt{j}\beta} \left(\frac{1}{2} a e^{-i\sqrt{j}\beta}\right) = 0$$

$$-ia'e^{i\sqrt{j}\beta} + a\beta'e^{i\sqrt{j}\beta} + 4I^2 \frac{1}{8} a^3 e^{i\sqrt{j}\beta} = 0$$

$$-ia' + a\beta' + 4I^2 \frac{1}{8} a^3 = 0$$

Como

$$a' = 0$$

$$a\beta' = -4I^2 \frac{1}{8} a^3$$

Integrando tem-se:

$$\beta = \left(-4I^2 \frac{1}{8}\right) a^2 T_2 + \beta_0$$

Substituindo A na equação  $\mu_1$ :

$$\mu_1 = -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} a e^{i\sqrt{j}\beta}\right)^2 e^{2i\sqrt{j}T_0} - 2I \left(\frac{1}{2} a e^{i\sqrt{j}\beta}\right) \left(\frac{1}{2} a e^{-i\sqrt{j}\beta}\right) - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} a e^{-i\sqrt{j}\beta}\right)^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{6} a^2 e^{2i\sqrt{j}\beta} e^{2i\sqrt{j}T_0} - 2I \left(\frac{1}{2} a e^{i\sqrt{j}\beta}\right) \left(\frac{1}{2} a e^{-i\sqrt{j}\beta}\right) - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} a e^{-i\sqrt{j}\beta}\right)^2 e^{-2i\sqrt{j}T_0}$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{6} a^2 e^{2i\sqrt{j}\beta + 2i\sqrt{j}T_0} - \frac{1}{2} I a^2 - \frac{1}{12} a^2 e^{-2i\sqrt{j}\beta - 2i\sqrt{j}T_0}$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{6} a^2 e^{2i\sqrt{j}(\beta + T_0)} - \frac{1}{2} I a^2 - \frac{1}{12} a^2 e^{-2i\sqrt{j}(\beta + T_0)}$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{6}a^2 \cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}Ia^2 - \frac{1}{12}a^2 \cos(-2\sqrt{j}\beta - 2\sqrt{j}T_0)$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{6}a^2 \cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}Ia^2 - \frac{1}{12}a^2 \cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0)$$

$$\mu_1 = \left(-\frac{1}{6} - \frac{1}{12}\right)a^2 \cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}Ia^2$$

$$\mu_1 = -\frac{3}{12}a^2 \cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}Ia^2$$

Chega em:

$$\mu_1 = \left(-\frac{3}{12}\cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}I\right)a^2$$

Sendo  $\mu$  em função de  $\mu_0$  e  $\mu_1$

$$\mu = \mu_0(T_1, T_2, T_3) + \varepsilon\mu_1(T_0, T_1, T_2) + O(\varepsilon^2)$$

Substitui-se pelas equações obtidas:

$$\mu_1 = \left(-\frac{3}{12}\cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}I\right)a^2$$

E

$$\mu_0 = a \cos(t + \beta)$$

Chega-se à:

$$\mu = a \cos(t + \beta) + \varepsilon \left(-\frac{3}{12}\cos(2\sqrt{j}\beta + 2\sqrt{j}T_0) - \frac{1}{2}I\right)a^2 + O(\varepsilon^2)$$

$$\mu = a \cos(\omega t + \beta) + \varepsilon \left(-\frac{3}{12}\cos(2\sqrt{j}\omega t + 2\sqrt{j}\beta) - \frac{1}{2}I\right)a^2 + O(\varepsilon^2)$$

E substituindo  $\beta$  achamos:

$$w = 1 + (-4I^2 \frac{1}{8})a^2 \varepsilon^2 + \dots$$

Obtem-se a órbita

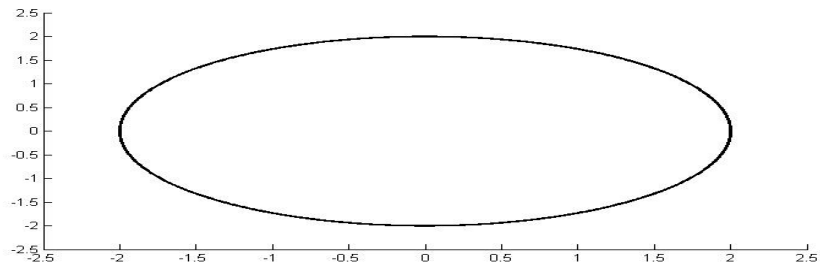


Figura 5.3.1. Órbita obtida através das múltiplas Escalas

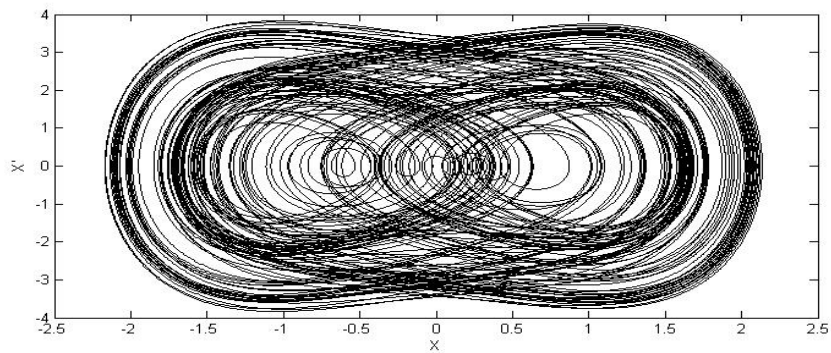


Figura 5.3.2. Retrato de fase do AFM

O processo de busca de uma solução analítica é bem sucedido encontrando uma órbita na qual será necessária para o controle ótimo linear realizado no capítulo 7. Foi mostrado que o método das escalas múltiplas transforma as equações diferenciais do problema a ser abordado, sendo ela linear ou não, em uma série de equações diferenciais *lineares* solúveis de forma *iterativa*, isto é, um sistema de equações onde uma possível solução é determinada e como foi visto, a identificação das ordens de perturbações do problema fornecem os elementos necessários para a correta determinação das equações diferenciais. Para a equação do oscilador AFM foi apresentado um valor muito pequeno para a perturbação ( $\varepsilon < 1$ ), cujos efeitos estão inteiramente determinados por suas amplitudes  $A(T1)$ .

## CAPÍTULO 6

### PARÂMETROS OBTIDOS ATRAVÉS DA TEORIA DE MELNIKOV.

#### 6.1 TEORIA DE MELNIKOV

O método de Melnikov é uma das poucas técnicas analíticas disponíveis para a detecção de caos homoclínico. Em [56] relata-se as propriedades do emaranhado homoclínico e afirma-se que os emaranhados homoclínicos estão associados com um mapa de ferradura de Smale, qual a presença de um número infinito de diferentes movimentos periódicos e não periódico pode ser estabelecida. Nayfeh e Mook (1979) [57] relatam que em muitas aplicações, a existência de um emaranhado homoclínico pode ser verificado por uma perturbação regular simples método nomeado por Melnikov. Também pode ser usado para provar a existência de outros tipos de órbitas homoclínicas e heteroclínicas no contexto dos sistemas de quase-integrável, isto é, sistemas que são pequenas perturbações de sistemas Hamiltonianas completamente integráveis.

Seja o modelo

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -a_1x_1 - a_2x_1^3 - \frac{b}{(z+x_1)^2} + c \sin \tau\end{aligned}\tag{6.1}$$

Onde:  $x = x_1$  and  $\dot{x} = x_2$

$$\ddot{x} + a_1x + a_2x^3 + \frac{b}{(z+x)^2} = \varepsilon(cF \sin \tau)\tag{6.2}$$

Quando Epsilon é zero, a equação se torna:

$$\ddot{x} + a_1x + a_2x^3 + \frac{b}{(z+x)^2} = 0\tag{6.3}$$

Onde:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 = x_2 &= \frac{\partial H}{\partial x_2} \\ \dot{x}_2 &= -a_1 x_1 - a_2 x_1^3 - \frac{b}{(z+x_1)^2} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Então o sistema é hamiltoniano com:

$$H = \frac{x_2^2}{2} + \frac{a_1 x_1^2}{2} + \frac{a_2 x_1^4}{4} - \frac{b}{(z+x_1)} \quad (6.4)$$

O nível  $H = 0$  consiste em duas órbitas homoclínicas, e um ponto de sela em  $x_1 = x_2 = 0$ :

$$\frac{x_2^2}{2} + \frac{a_1 x_1^2}{2} + \frac{a_2 x_1^4}{4} - \frac{b}{(z+x_1)} = 0 \quad (6.5)$$

Isolando  $x_2$ :

$$x_2 = \pm \sqrt{-a_1 x_1^2 - \frac{a_2 x_1^4}{2} + \frac{2b}{(z+x_1)}} \quad (6.6)$$

Para  $x_2 = 0$  tem-se:

$$-a_1 x_1^2 - \frac{a_2 x_1^4}{2} + \frac{2b}{(z+x_1)} = 0 \quad (6.7)$$

Na qual obtém as raízes e observa-se onde  $x_1$  intersecta:

$$\begin{aligned}
x_1 &= 0.5189245518 \\
x_1 &= 0.03362339025 + 0.6553550635.I \\
x_1 &= -0.5945742144 \\
x_1 &= -2.491597118 \\
x_1 &= 0.03362339025 - 0.6553550635.I
\end{aligned}$$

Em termos de  $x$  e  $\dot{x}$  é reescrito como:

$$\dot{x} = \pm \sqrt{-a_1 x_1^2 - \frac{a_2 x_1^4}{2} + \frac{2b}{(z + x_1)}} \quad (6.8)$$

Usando a separação de variáveis e considerando a parte de sinal negativa, tem-se:

$$-t + c = \int \frac{dx}{\sqrt{-a_1 x_1^2 - \frac{a_2 x_1^4}{2} + \frac{2b}{(z + x_1)}}}$$

A órbita homoclinica do lado direito do plano é dado por:  $x_1 = 0.5189245518 \sec h(u)$  and  $x_2 = -0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t)$ .

A órbita homoclinica do lado esquerdo do plano é dado por:  $x_1 = -0.5189245518 \sec h(u)$  and  $x_2 = 0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t)$ .

Usando  $x_1$  e  $x_2$ , reescreve-se:

$$\begin{aligned}
x_1' &= x_2 \\
x_2' &= A(a_1 x_1^3 + a_2 x_1) + \frac{B}{(Z + x_1)^2} - \varepsilon(F.C \sin wt + \mu x_2)
\end{aligned}$$

Então;

$$f = \left[ x_2, A(a_1 x_1^3 + a_2 x_1) + \frac{B}{(Z + x_1)^2} \right]^T$$

$$g = [0, \varepsilon F.C \sin(\omega t) + \mu x_2]^T$$

Usando  $x_1$  e  $x_2$ :

$$f = [-0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t), A((a_1 0.5189245518 \sec h(u))^3 + a_2 0.5189245518 \sec h(u)) + \frac{B}{(Z + 0.5189245518 \sec h(u))^2}]^T$$

$$g = [0, (C.F. \sin \omega t + \mu(-0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t)))]^T$$

$$M(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} -0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t).C.F. \sin[\Omega(t + \theta)] + \dots \quad (6.9)$$

$$+ \dots \mu(-0.5945742144 \sec h(t) \tanh(t))^2 dt$$

$$M(\theta) = -0.5945742144. \left( \int_{-\infty}^{\infty} C.F. \sec h(t) \tanh(t) \sin(\Omega(t + \theta)) dt - \dots \right.$$

$$\left. \dots - 0.3535184964 \int_{-\infty}^{\infty} \mu \sec h^2(t) \tanh^2(t) dt \right)$$

Tomando  $\sin[\Omega(t + \theta)] = \sin(\Omega t) \cos(\Omega \theta) + \cos(\Omega t) \sin(\Omega \theta)$

$$M(\theta) = -0.5945742144. \int_{-\infty}^{\infty} C.F. \sec h(t) \tanh(t) [(\sin(\Omega t) \cos(\Omega \theta) + \cos(\Omega t) \sin(\Omega \theta))] dt - \dots$$

$$\dots - 0.3535184964 \int_{-\infty}^{\infty} \mu \sec h^2(t) \tanh^2(t) dt$$

$$M(\theta) = -0.5945742144. \cos(\Omega \theta) C.F. \int_{-\infty}^{\infty} \sec h(t) \tanh(t) (\sin(\Omega t)) dt - \dots$$

$$\dots - 0.5945742144. \sin(\Omega \theta) C.F. \int_{-\infty}^{\infty} \sec h(t) \tanh(t) \cos(\Omega t) dt - \dots$$

$$\dots - 0.3535184964 \int_{-\infty}^{\infty} \mu \sec h^2(t) \tanh^2(t) dt$$

$$\text{Se } 0 = \int_{-\infty}^{\infty} \sec h(t) \tanh(t) (\sin(\Omega t)) dt$$

$$\text{e } \pi \Omega \sec h \left( \frac{1}{2} \Omega \pi \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \sec h(t) \tanh(t) \cos(\Omega t) dt$$

$$\text{e } \frac{2}{3} = \int_{-\infty}^{\infty} \sec h^2(t) \tanh^2(t) dt$$

$$M(\theta) = -0.5945742144 \cdot \cos(\Omega\theta) C.F \pi \Omega \operatorname{sech}\left(\frac{1}{2}\Omega\pi\right) - \frac{0.3535184964\mu \cdot 2}{3} \quad (6.10)$$

$$0.5945742144 \cdot \sin(\Omega\theta) C.F \pi \Omega \operatorname{sech}\left(\frac{1}{2}\Omega\pi\right) < -\frac{0.3535184964\mu \cdot 2}{3}$$

$$\frac{F}{\mu} < -\frac{0.1503500264}{\sin(\Omega\theta) \operatorname{sech}(0.5\Omega\pi)\pi}$$

$$\frac{F}{\mu} < -\frac{0.1503500264 \cosh\left(\frac{1\pi\Omega}{2}\right)}{\pi}$$

$$\frac{F}{\mu} < -0.075175 \cosh\left(\frac{\pi\Omega}{2}\right) \quad (6.11)$$

Soluções para F

$$F < -0.075175 \cosh\left(\frac{\pi\Omega}{2}\right) \mu \Leftrightarrow \frac{1}{\mu} > 0$$

$$F > -0.075175 \cosh\left(\frac{\pi\Omega}{2}\right) \mu \Leftrightarrow \frac{1}{\mu} < 0$$

O retrato de fase que se pode obter são:

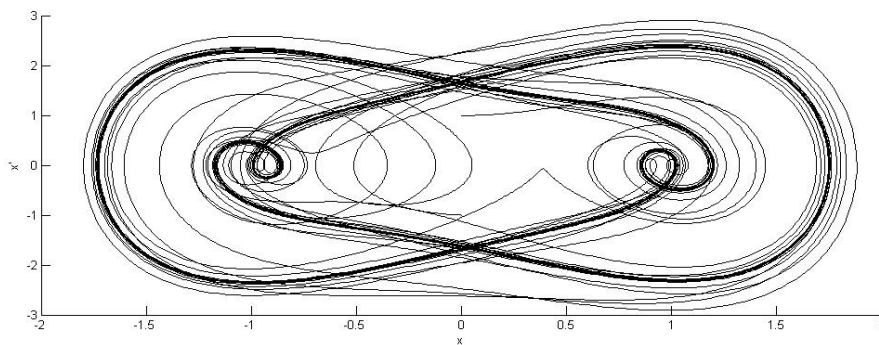


Figure 6.1. Retrato de fase para  $\mu = -0.1056$ ,  $F = 1$ ,  $\varepsilon = 1$ ,  $t = 500$



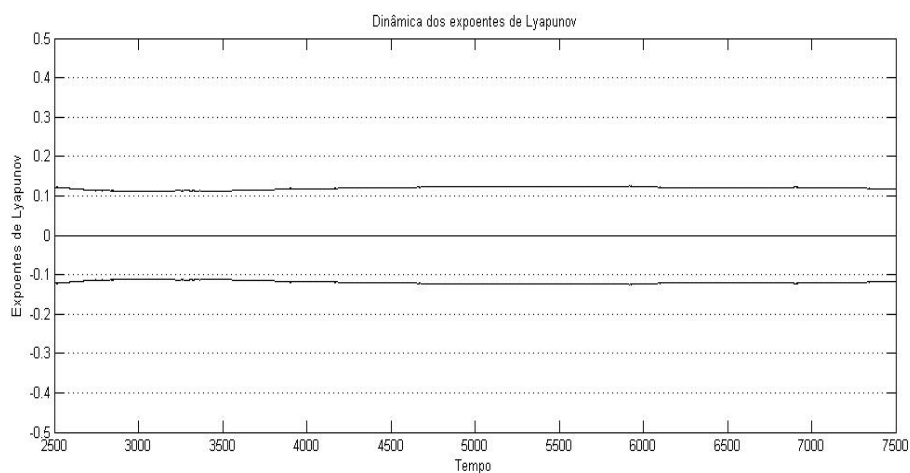


Figura 6.2. Expoentes de Lyapunov.

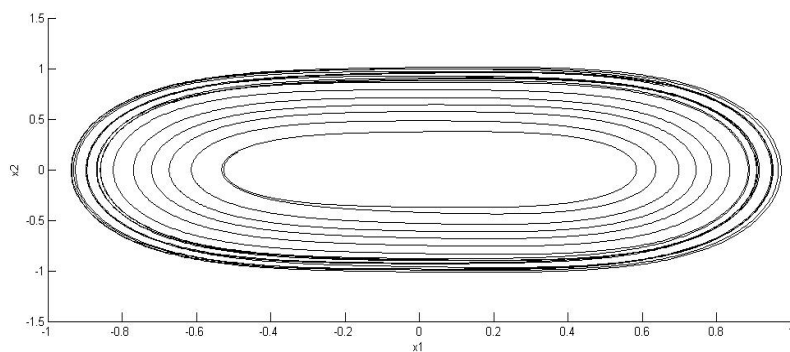


Figura 6.3. Retrato de fase para  $\varepsilon F = 0.01$ ,  $\varepsilon\mu = -0.001056$

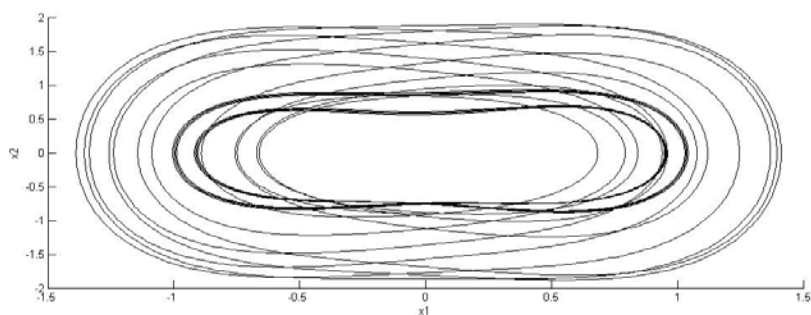


Figura 6.4. Retrato de fase para  $\varepsilon F = 0.2$  and  $\varepsilon\mu = -0.001056$

# CAPÍTULO 7

## CONTROLE LINEAR ÓTIMO

### 7.1 INTRODUÇÃO

Há quase três décadas, o comportamento atípico da dinâmica não linear e caos têm atraído a atenção de diferentes campos científicos. O comportamento caótico de sistema tem sido observado em inúmeras situações diferentes como em modelos físicos, químicos, biológicos etc.

Aplicações em engenharia estão sendo desenvolvidas em áreas como engenharia mecânica e química. Assim não é surpreendente que o assunto em questão, o controle de sistemas caóticos, tem sido investigado com detalhes tendo sido publicados inúmeros artigos durante a última década.

Surpreendentemente, o desenvolvimento deste campo foi desencadeado pela publicação de um artigo dos autores E. Ott, C. Grebogi e J. Yorke, (1990), onde o termo controle de caos foi criado e é hoje amplamente usado. Talvez, a façanha deste artigo foi a demonstração do fato de que uma significativa mudança no comportamento do sistema caótico pode ser feita por pequenos ajustes dos parâmetros.

Esta observação abriu possibilidades para mudar o comportamento do sistema sem interferir em suas propriedades inerentes, Fradkov e Evans (2005).

Desde então, várias estratégias de controle vem sendo desenvolvidas e utilizadas na literatura na busca de soluções de problemas em ciências de engenharia e sistemas complexos.

No caso de problemas não ideais poucos esforços foram feitos nesta direção.

Entre os trabalhos de controle para problemas não ideais, mencionam-se os publicados por Yamakawa e Murakami (1989) que utilizou a técnica dos gradientes conjugados em um problema de rotores; Diemetenberg et. al. (1997) que utilizou métodos heurísticos no controle da amplitude de vibração quando a passagem pela ressonância em um problema de um grau de liberdade, Balthazar et. al. (2001) utilizou a técnica de Tikhonov na obtenção de tempo mínimo de passagem pela ressonância de um problema vibratório não ideal de dois graus de liberdade;

Pontes Jr.(2003) desenvolveu um procedimento de controle de sistemas com atrito adere - desliza utilizando um controle chaveado inspirado na técnica de controle de estrutura variável, Palácios (2002) apresentou resultados numéricos da técnica de controle por saturação aplicado em um problema do pórtico plano excitado por um motor não ideal e Peruzzi et. al. (2007) utilizou a teoria de Floquet na solução de um problema não ideal baseado em técnicas de controle desenvolvidos por Sinha et. al. (2000).

Neste capítulo o objetivo é utilizar o controle desenvolvido por Rafikov e Balthazar (2004, 2005, 2007) para controlar tanto o sistema ideal quanto o não ideal. Este método visa encontrar um controle ótimo linear realimentado onde encontram – se condições para a aplicação do controle linear em sistemas não – lineares, garantindo a estabilidade do problema.

Recentemente, foi utilizado em problemas biológicos com sucesso, Chavarette et. al. (2007) e Rafikov et. al. (2007a)

Nota - se que na teoria do controle existem dois tipos de problemas, sendo o primeiro deles à função do controle  $u(t)$ , que deve ser encontrada como uma função do tempo, ou seja, nesse caso a função de controle ótimo determina uma trajetória ótima que corresponde a uma condição inicial dada do sistema.

No segundo caso, a função de controle  $u(t, x)$ , que depende do tempo e de variáveis de estado; este tipo de controle é chamado controle com realimentação podendo ser aplicado para qualquer condição inicial.

Se as variáveis do sistema são desvios do regime desejado, o controle ótimo estabiliza em torno da trajetória desejada, minimizando o funcional que caracteriza os desvios quadrados da trajetória e do controle do regime desejado Rafikov e Balthazar (2005, 2007).

A seguir, apresenta - se esta formulação do controle ótimo com realimentação, para a aplicação no problema de interesse.

## 7.2 FORMULAÇÃO LINEAR PARA SISTEMAS NÃO LINEARES

Considera – se um sistema não linear controlável

$$\dot{x} = A(t)x + g(x) + Z \tag{7.2.1}$$

Onde  $x \in R^n$  é um vetor de estado,  $A(t) \in R^{n \times n}$  é uma matriz constante,  $Z \in R^n$  é o vetor controle e  $g(x)$  é um vetor formado de funções contínuas não lineares.

Aqui a escolha de  $A(t) \in R^{n \times n}$  não é única, e esta influência o desempenho do resultado do controle. Quando o termo de controle  $Z$  é anulado, o sistema 6.1 tem um atrator caótico para um dado conjunto de parâmetros.

Em diversos problemas da engenharia, física, economia, ecologia, etc., o objetivo é encontrar a lei  $Z$  de controle que leva o sistema do regime perturbado a um ponto fixo de equilíbrio ou a uma órbita periódica ou não periódica (caótica) desejada. Considerando o vetor função  $\tilde{x}$  que caracteriza a órbita desejada. O vetor controle consiste de duas partes

$$Z = \tilde{z} + z_f$$

Onde a parte  $\tilde{z}$  do vetor de controle que mantém o sistema controlado na trajetória desejada, pode ser escrito como

$$\tilde{z} = \dot{\tilde{x}} - A\tilde{x} - g(\tilde{x})$$

E o vetor de controle  $z_f$  que estabiliza o sistema em torno da trajetória desejada tem a seguinte forma,

$$z_f = Bz$$

Onde  $B \in R^{n \times n}$  é uma matriz constante

Definindo

$$y = x - \tilde{x}$$

Como o desvio da trajetória do sistema (5.3.1) da trajetória desejada, e admitindo (7.2.2)-(7.2.4),

Chega-se à equação em desvios:

$$\dot{y} = Ay + g(x) - g(\tilde{x}) + Bz$$

Assumindo que

$$g(x) - g(\tilde{x}) = G(x, \tilde{x})(x - \tilde{x})$$

Onde  $G(x, \tilde{x})$  é uma matriz limitada, cujos elementos dependem de  $y$  e  $\tilde{x}$ . Admitindo 7.7, o sistema 6.6 tem a seguinte forma

$$\dot{y} = A(t)y + G(y, \tilde{x})y + Bz \quad (7.2.8)$$

Rafikov e Balthazar (2004, 2005) formularam o seguinte teorema:

Teorema: Se existem as matrizes  $Q(t)$  e  $R(t)$ , definidas positivas, sendo  $Q(t)$  simétrica, tais que a matriz

$$\tilde{Q}(t) = Q(t) - G^T(y, \tilde{x})P(t) - P(t)G(y, \tilde{x}) \quad (7.2.9)$$

Seja definida positiva para  $G$  limitada, então o controle com realimentação

$$z = -R^{-1}B^T P(t)y \quad (7.2.10)$$

é ótimo para transferir o sistema não linear (6.8) de qualquer estado inicial ao estado final

$$y(t_f) = 0 \quad (7.2.11)$$

Minimizando o funcional

$$\tilde{J} = \int_0^{\infty} (y^T \tilde{Q}y + z^T Rz) dt \quad (7.2.12)$$

onde a matriz simétrica  $P(t)$  é calculada através da equação algébrica não linear de Riccati.

$$\dot{P} + PA + A^T P - PBR^{-1}B^T P + Q = 0 \quad (7.2.13)$$

Satisfazendo a seguinte condição final

$$P(t_f) = 0 \quad (7.2.14)$$

Prova: Seja o controle linear com realimentação 7.10 com a matriz P determinada pela equação 7.13 que transfere o sistema não linear 7.8 de qualquer estado inicial ao estado final 7.11 minimizando o funcional 7.12 onde a matriz  $\tilde{Q}$  necessita ser determinada.

Conforme programação dinâmica (Bellman, 1957) se o mínimo do funcional (7.12) existe e V é uma função suave de condições iniciais, então ela satisfaz a equação de Hamilton – Jacobi – Bellman:

$$\min_z \left( \frac{dV}{dt} + y^T \tilde{Q}y + z^T Rz \right) = 0 \quad (7.2.15)$$

Considera – se a função de Lyapunov

$$V = y^T P(t)y \quad (7.2.16)$$

Onde P(t) é matriz positiva definida, simétrica e satisfaz a equação de Ricatti (7.2.13).

A derivada da função V, calculada na trajetória ótima com o controle (7.2.9) é

$$\begin{aligned} \dot{V} &= \dot{y}^T P(t)y + y^T \dot{P}(t)y + \dot{y}^T P(t)\dot{y} = \\ &= \left[ y^T \dot{A}(t) + y^T G^T(y, \tilde{x}) - y^T P(t)BR^{-1}B^T \right] P(t)y + y^T \dot{P}(t)y + \dot{y}^T P(t) \left[ A(t)y + G(y, \tilde{x})y + BR^{-1}B^T P(t)y \right] \end{aligned} \quad (7.2.17)$$

Então substituindo  $\dot{V}$  na equação de Hamilton – Jacobi – Bellman 7.15 obtém – se

$$y^T \left[ \dot{P} + A^T P + PA - PBR^{-1}B^T P + G^T(y, \tilde{x})P + PG(y, \tilde{x}) + \tilde{Q} \right] y = 0 \quad (7.2.18)$$

deste modo tem – se que

$$\tilde{Q} = Q - C^T(y, \tilde{x})P - PG(y, \tilde{x}) \quad (7.2.19)$$

Note que para as matrizes definidas positivas  $\tilde{Q}$  e  $R$ , o sistema controlado 6.8 é assintoticamente estável, pois existe uma função de Lyapunov 6.16 cuja derivada é dado por  $\dot{V} = -y^T \tilde{Q}y - z^T Rz$ , calculada nas trajetórias ótimas do sistema 6.8 e é definida negativa.

Observando que conforme a teoria de controle ótimo de sistemas lineares com funcional quadrático, a equação não-linear algébrica de Riccati (6.10) possui única solução positiva simétrica  $p(t)$  para quaisquer  $r(t)$  e  $q(t)$  dadas, conclui-se então a demonstração do teorema.

Se o intervalo de tempo é infinito e  $A$ ,  $B$ ,  $Q$  e  $R$  são matrizes com elementos constantes, a matriz positiva definida  $P$  é a solução da equação algébrica não linear de Riccati.

$$PA + A^T P - PBR^{-1}B^T P + Q = 0 \quad (7.2.20)$$

Recordando que para um intervalo de tempo infinito, o sistema 6.6 tem sido completamente controlável, isto é, a matriz de controlabilidade

$$K = \begin{bmatrix} B & AB & \dots & A^{n-1}B \end{bmatrix} \quad (7.2.21)$$

Deve ser não singular ou contém  $n$  vetores coluna linearmente independentes.

A seguir, discute-se a aplicação do controle ótimo no sistema com excitação ideal com o objetivo de demonstrar a eficiência desta técnica de controle.

### **7.3 APLICAÇÃO DO CONTROLE LINEAR ÓTIMO PARA A EXCITAÇÃO COMO SENDO DO TIPO IDEAL**

Aplicando agora o método proposto na seção anterior na equação do movimento do microscópio de força atômica com excitação do tipo ideal. Lembrando que esta técnica de

controle esta atuando sob a força externa do sistema. A equação que descreve o movimento de forma com a lei de controle  $U(t)$  é descrito pela seguinte equação diferencial não linear:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -A(a_1x_1 + a_2x_1^3) - \frac{b}{(z+x_1)^2} + C \sin b\end{aligned}\tag{7.3.1}$$

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -Aa_1x_1 - Aa_2x_1^3 - \frac{b}{(z+x_1)^2} + C \sin b\end{aligned}\tag{7.3.2}$$

Com controle:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -Aa_1x_1 - Aa_2x_1^3 - \frac{b}{(z+x_1)^2} + C \sin b + U\end{aligned}\tag{7.3.3}$$

Onde:

$$U = \tilde{u} + u$$

Sendo  $\tilde{u}$  o controle feedforward, e dado por:

$$\tilde{u} = \dot{\tilde{x}}_2 + Aa_1\tilde{x}_1 + Aa_2\tilde{x}_1^3 + \frac{b}{(z+\tilde{x}_1)^2} - C \sin b\tag{7.3.4}$$

e  $\mu$  o controle feedback.

Substituindo (7.3.4) em (7.3.3) e definindo os desvios da trajetória desejada como:

$$y = (x - \tilde{x})\tag{7.3.5}$$



Onde  $\tilde{x}$  é a órbita desejada, obtêm-se o sistema (7.3.3) em função dos desvios (7.3.5).

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= y_2 \\ \dot{y}_2 &= -Aa_1y_1 - Aa_2(y_1 + \tilde{x}_1)^3 + Aa_2\tilde{x}_1^3 - \frac{b}{(z + y_1 + \tilde{x}_1)^2} + \frac{b}{(z + \tilde{x}_1)^2} + u \end{aligned} \quad (7.3.6)$$

Considerando o sistema (7.3.6) na seguinte forma:

$$\dot{y} = Ay + g(x) - g(\tilde{x}) + Bu \quad (7.3.7)$$

Onde:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -Aa_1 & 0 \end{bmatrix};$$

$$g(x) - g(\tilde{x}) = G(x, \tilde{x}) = \begin{bmatrix} 0 \\ -Aa_2(y_1 + \tilde{x}_1)^3 + Aa_2\tilde{x}_1^3 - \frac{b}{(z + y_1 + \tilde{x}_1)^2} + \frac{b}{(z + \tilde{x}_1)^2} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Conforme [1], se existirem matrizes Q e R, definidas positivas com matriz Q simétrica, tal que a matriz:

$$\tilde{Q} = Q - G^T(x, \tilde{x})P - PG(x, \tilde{x}) \quad (7.3.8)$$

seja definida positiva com matriz G limitada, então o controle u é ótimo e transfere o sistemas não-linear (1) de qualquer estado inicial ao estado final:

$$y(\infty) = 0 \tag{7.3.9}$$

Minimizando o funcional:

$$J = \int_0^{\infty} (y^T \tilde{Q} y + u^T R u) dt \tag{7.3.10}$$

O controle u pode ser encontrado resolvendo a equação:

$$u = -R^{-1} B^T P y \tag{7.3.11}$$

Sendo a matriz P simétrica, e pode ser encontrada da equação algébrica de Riccati:

$$PA + A^T P - PBR^{-1}B^T P + Q = 0 \tag{7.3.12}$$

Definindo a trajetória desejada como a órbita periódica (5.3.1) obtida utilizando as técnicas de perturbação em:

$$\mu = a \cos(\omega t + \beta) + \varepsilon \left( -\frac{3}{12} \cos(2\sqrt{j}\omega t + 2\sqrt{j}\beta) - \frac{1}{2} I \right) a^2 + O(\varepsilon^2) \tag{7.3.13}$$

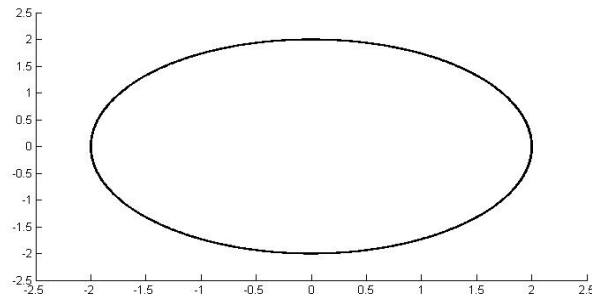


Figura 7.3.1. Órbita obtida da solução analítica (6.1.1) obtida através do método das múltiplas escalas e considerando os valores dos parâmetros;  $b = 0.17602$ ,  $c = 2.6364$  e  $z = 2.5$ ,  $a_1 = 0.14668$ ,  $a_2 = 2.1269$ ,  $L = 0.0274$ ,  $J = 0.12748$ ,  $I = -0.0075$  e  $H = 2.1282$ .

A matriz A e B tem a seguinte forma:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -0.14668 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } B = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

E definindo:

$$Q = \begin{bmatrix} 250 & 0 \\ 0 & 20 \end{bmatrix}, R = [0.1]$$

Utilizando o comando lqr do matlabr obtêm-se:

$$P = \begin{bmatrix} 86.5602 & 4.9853 \\ 4.9853 & 1.7312 \end{bmatrix} \text{ e } K = [49.8535 \quad 17.3120]$$

Substituindo em (7.3.11) obtêm-se o controle:

$$u = -49.8535y_1 - 17.3120y_2 \tag{7.3.14}$$

Em relação a x pode ser escrito o controle acima:

$$u = -49.8535(x_1 - \tilde{x}_1) - 17.3120(x_2 - \tilde{x}_2) \tag{7.3.15}$$

Retrato de fase do microscópio atômico para o sistema (7.3.3), sem o controle (7.3.15), pode ser visto na figura 7.3.2.

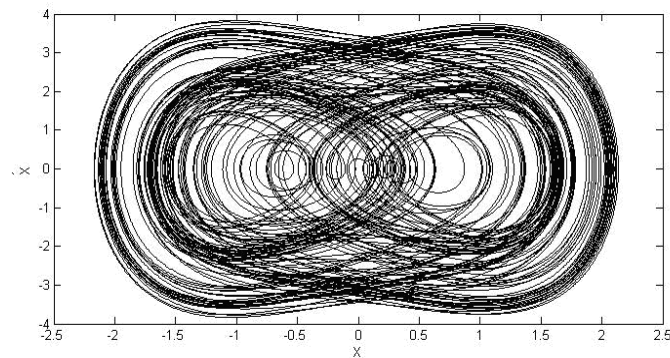


Fig. 7.3.2. Retrato de fase para o sistema (7.3.15)

É difícil analisar analiticamente a matriz  $\tilde{Q}$  neste caso. A próxima figura mostra a função positiva  $L(t) = y^T \tilde{Q} y$  calculada na trajetória ótima.

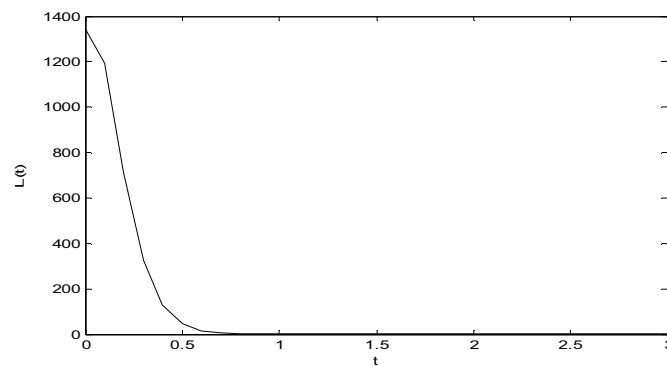


Fig. 7.3.3.  $L(t)$  calculado na trajetória ótima

Nesta figura nós podemos ver o deslocamento da micro viga considerando  $t = [0:100]$  e  $t = [400:500]$

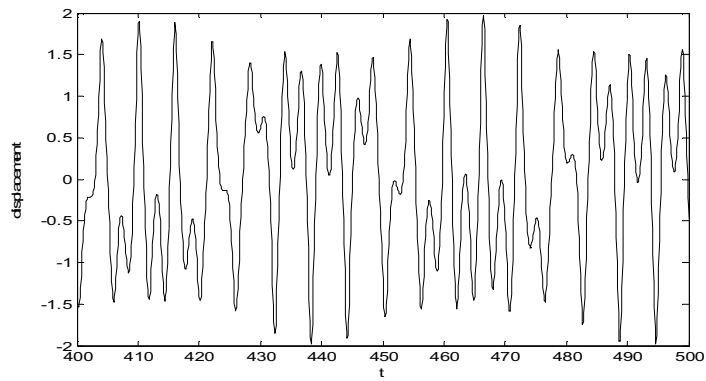
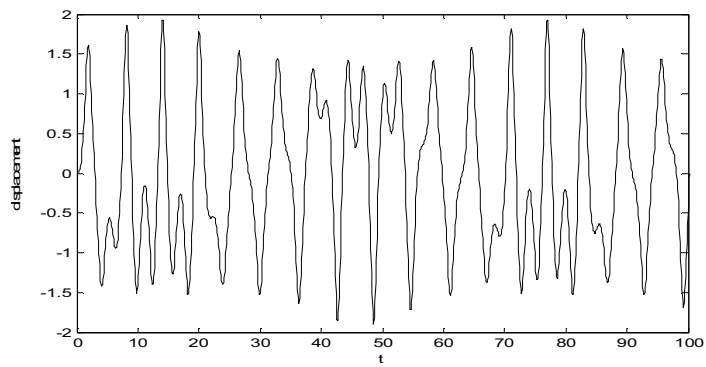


Fig. 7.3.4. Deslocamento da micro viga

Nesta figura, nós podemos ver o deslocamento da micro viga considerando a aplicação do controle (7.3.15)

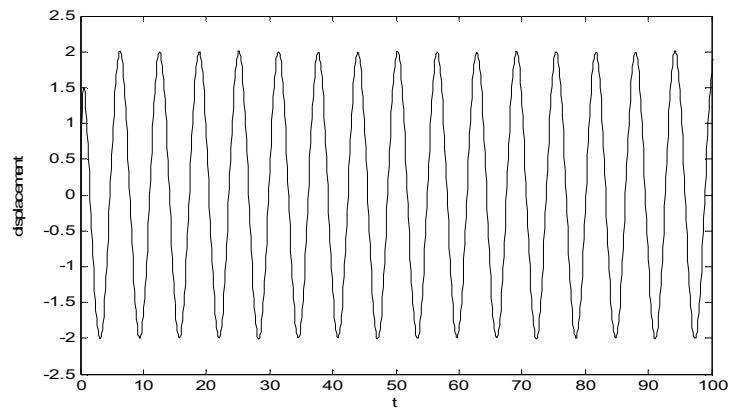


Fig. 7.3.5. Deslocamento da micro viga com controle (7.3.15)

Nesta figura, pode-se ver o retrato de fase da micro viga, considerando a aplicação do controle (7.3.15)

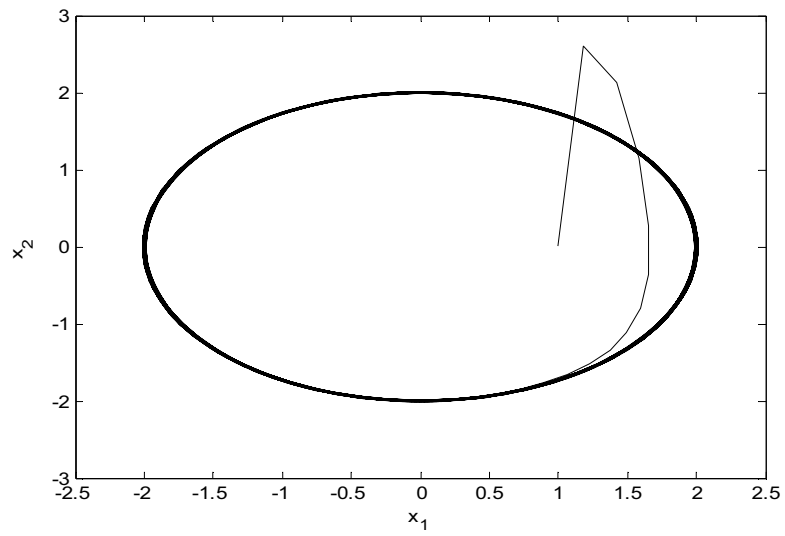


Fig. 7.3.6. Retrato de fase para o sistema com controle na trajetória (5.3.1)

Nesta figura nós podemos ver o retrato de fase da micro viga, considerando a aplicação do controle (7.3.15), e o não que não foi aplicado controle (com e sem controle).

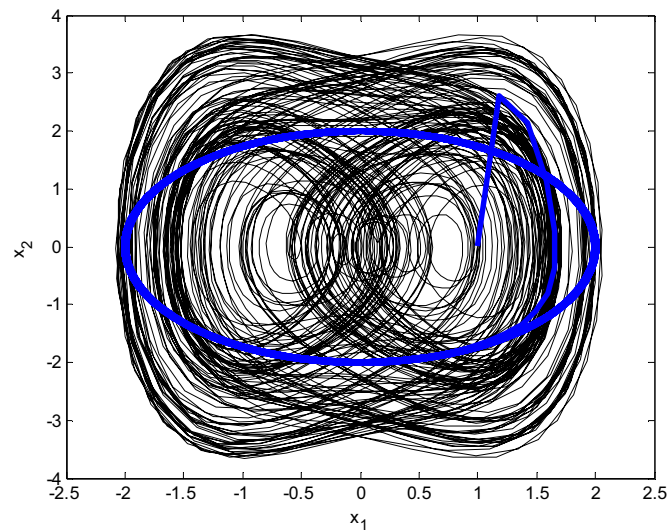


Fig. 7.3.7. Retrato de fase sem e com controle (7.3.6)

## CAPÍTULO 8

### CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

#### 8.1 CONCLUSÃO

Esta dissertação abordou a pesquisa da dinâmica não linear e controle de um sistema dinâmico sujeito a alterações devido as forças de Van der Waals.

Obteve – se a partir dos resultados apresentados nos diversos capítulos os seguintes resultados:

Foi considerado um oscilador AFM, constituído por uma sonda conectada a uma viga em uma base de coordenadas percorre movimentos longitudinais, transversais e para cima ou para baixo.

Observou o surgimento de um movimento caótico para certos parâmetros em que a força de Van der Waals atua com forças de repulsão. O enfoque para o controle foi à utilização do método das múltiplas escalas (“method of multiple scales”) na busca de uma solução analítica aproximada do oscilador, isto é, uma busca por uma órbita ótima, visto que o problema já havia sido tratado anteriormente na literatura de forma numérica.

Foram realizados ensaios numéricos de integração direta das equações de movimento, utilizando o integrador ODE113 do MATLAB® (Adams – Bashforth – Moulton) no sistema de equações de primeira ordem, tomadas como sendo as variáveis de estado.

Utilizou – se como ferramentas o Expoente de Lyapunov para se ter resposta da caracterização do sistema ter ou não movimentos regulares e irregulares para certos valores do parâmetro de controle.

O objetivo desta pesquisa foi mostrar situações em que o microscópio de força atômica operou com movimentos caóticos, e assim através de técnicas de controle alterar o seu movimento caótico em um movimento previsto dentro de uma órbita.

Para isso, desenvolveu-se uma solução analítica para mostrar a melhor possível órbita, e portanto controlar dentro de uma trajetória desejada. Foi usado a técnica de perturbação desenvolvida por Nayfeh [8], e o controle linear ótimo por Rafikov e Balthazar [9]. O método de controle linear ótimo foi muito bem sucedido, e pode se observar uma pequena aceleração que logo se estabiliza na órbita. Algumas tentativas anteriores ocorreu um deslocamento maior que 2.5, fisicamente falando, estaria destruindo a amostra, pois a distância  $z=2.5$  significa distancia da sonda até a amostra.

## 8.2 TRABALHOS FUTUROS

Finalmente, citam – se alguns trabalhos futuros que poderão ser desenvolvidos:

Pretende-se trabalhar com as energias produzidas antes e após o controle ótimo linear para se obter uma resposta à otimização do controle.

Bacias de atração, mapas de poincaré, e diagramas de bifurcação serão apresentados em um futuro artigo.

## 8.3 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] G. Binnig, C. Gerber, C. Quate, Atomic Force Microscope, Phys. Rev. Lett. 56, 930-933, 1986.

[2] Jalili, N. & Laxminarayana, K. A review of atomic force microscopy imaging systems: application to molecular metrology and biological sciences. Mechatronics 14:8, 907–945. 2004.

[3] Wang C-C et al. Chaos control in AFM system using sliding mode control by backstepping design. Communications in Nonlinear Science Numerical Simulation (2009), doi:10.1016/j.cnsns.2009.04.031



- [4] Ricardo Garcia R and San Paulo A. Dynamics of a vibrating tip near or in intermittent contact with a surface. *Physical Review B* 61, 20, 2000
- [5] Lozano, J. R. and Garcia R. Theory of Multifrequency Atomic Force Microscopy. *Physical Review Letters*. PRL 100, 076102, 2008.
- [6] Raman A., Melcher J. , and Tung R. Cantilever Dynamics in Atomic Force Microscope. *Nanotoday*, 3, 1-2, 20-27, 2008.
- [7] A. Farrokh Payam\*, M. Fathipour, M.J.Yazdanpanah, High precision imaging for non-contact mode atomic force microscope using an adaptive nonlinear observer and output state feedback controller, *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures* Vol. 4, No.3, September 2009, p. 429-442.
- [8] Nayfeh, A. H. *Introduction to Perturbation Techniques*, Wiley, New York. 1981.
- [9] Rafikov, M. and Balthazar, J.M., On control and synchronization in chaotic and hyperchaotic systems via linear feedback control, *Communications in nonlinear Science and Numerical Simulation*, 13, P.1246-1255, 2008.
- [10] Rafikov, M., Balthazar J. M., Tusset. A. M. An Optimal linear Control Design for Nonlinear Systems, *J. of the Braz. Soc. Of Mech. Sci. & Eng.*, XXX, 4, p. 279-284, 2008.
- [11] *Quantum Theory of Molecules and Solids*. John C.Slater. McGraw-Hill,1963. Biblioteca do CBPF: 530.4 s631
- [12] *Microscopy in process engineering, na introduction to afm for improved processes and products*, Edited for W. Richard Bowen and Nidal Hilal. Elsevier; 2009 USA.
- [13] *Intermolecular and Surface Forces*. Jacob Israelachvili – Academic Press, London (1995).
- [14] E.Eisenschitz and F.London, *Zs.Phys.*60, 491(1930):Teoria Quântica para as Forças de van der Waals.

- [15] Sebastian A., A. Gannepalii, M. V. Gannepali. M. V. Salapka. A review of the systems approach to the analysis of dynamic-mode atomic force microscopy. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 15(15), 952- 959 (2007).
- [16] Tusset, A.M., aplicação da teoria do controle ótimo em modelo de suspensão veicular não-linear controlada através de amortecedor magnetoreológico, Dissertação de mestrado - Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Faculdade de engenharia mecânica, Porto Alegre, Rio Grande do sul, 2008.
- [17] Balthazar, J. M., Brasil, R.M.L.R.F., Alguns comentários em dinâmica e controle não lineares. In. *Aplicon – Escola brasileira de aplicações em dinâmica e controle*, São Carlos, SP, Brasil, p. 35 – 64, 2001.
- [18] Piccirillo, V., Dinâmica Não Linear e Controle de um Sistema Vibratório Modelado com Memória de Forma e, Excitado por Fontes de Energia do Tipo Ideal e Não- Ideal, Dissertação de Mestrado – Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia Mecânica, Bauru, 2008.
- [19] Castão, K. A. L., Análise Dinâmica Não Linear de Um Sistema Não-Ideal, utilizando Amortecedor Magneto Reológico, Dissertação de Mestrado – Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia Mecânica, Bauru-SP, 2008.
- [20] Iossaqui, J. G., Uso de Absorvedores de Vibrações Eletromecânicos Lineares e Não-Lineares em Sistemas Não-Lineares e Não-Ideais Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia Mecânica, Bauru-SP, 2009.
- [21] Slotine, J. J. E. e LI, W., *Applied Nonlinear Control*, Ed. Prentice-Hall, New Jersey, 1999
- [22] Balthazar, J.M., Cheshankov, B. I., Ruschev, D. T., Barbantín, L., Weber, H. I., Remarks on the passage through resonance of a vibrating system with two degree of freedom, excited by a non ideal source. *Journal of Sound and Vibration*, 295 (5), p. 1075 – 1085, 2001.

- [23] Balthazar, J.M., Mook, D.T., Weber, H.I., Brasil, R.M.L.R.F., Fenili, A., Belato, D., Felix, J.L.P., An overview on non-ideal vibrations. *Meccanica*, Vol. 38, p.613–621, 2003.
- [24] Balthazar, J.M., Mook, D.T., Weber, H.I., Brasil, R.M.L.R.F., Fenili, A., Belato, D., Felix, J.L.P., Garzeri, F.J., A review on new vibration issues due to non-ideal energy sources.”In: *Dynamics systems and control*, edited by Udwadia FE, Weber HI, Leitman G, Stability and control: theory, methods and applications, Vol. 22, Chapman & Hallick, p. 237-258, 2004
- [25] Balthazar, J.M., Pontes Jr., B.R., On friction induced nonlinear vibrations: A source of fatigue, *Damage Prognosis – For Aerospace, Civil and Mechanical System*, Edited by D. Inman, John Wiley and Sons, 2005.
- [26] Bolla, M.R., Balthazar, J.M., Palacios, J.L., Mook, D.T., On an Approximated analytical solution to a nonlinear vibrating problem, excited by a non-ideal motor, *Nonlinear Dynamics*, 2007 (in press).
- [27] Bogoliubov, N. N. *Asymptotic methods in the theory of non-linear oscillations*. Índia: Hindustan Publishing Corporation, p. 487, 1961.
- [28] Chavarette, F.R., Balthazar, J.M., Rafikov, M., Hermeni, A.H., On Non-Linear Dynamics and an Optimal Control Synthesis of the Potential of Action Membrane (Ideal and Non-Ideal Cases) of the Hodgkin-Huxley (HH) Mathematical Model, *Chaos, Solitons and Fractal*, in press, 2007.
- [29] De Mattos, M.C., Balthazar, J.M., Mook, D.T., Wieczorek, S., An experimental study of vibrations of non ideal system. In: *Proceeding of DETEC’ 97. ASME Design Engineering Technical Conferences*. Sacramento, CA, September 1997.
- [30] Dimentberg, M. F., MCGovern, L., Norton, R. L., Chapdelaine, J., Harrison, R., Dynamics of an unbalanced shaft interacting with limited power supply. *Nonlinear Dynamic*, 13, p. 171 – 187, 1997.
- [31] Dorf, R.C.; Bishop, R., *Modern Control Systems*, 8th edition, New York, Addison-Wesley Pub Co., 1997.

- [32] El – Badawy, A.A., Behavior Investigation of a nonlinear non – ideal vibrating system, *Journal Vibration and Control*, vol. 13, p. 203 – 217, 2007.
- Falk, F., Model free – energy, mechanics and thermodynamics of shape memory alloys. *ACTA Metallurgica* 28, n°12, p. 1773 – 1780, 1980.
- [33] Fenili, A., Balthazar, J.M., On an analytical solution for a slewing flexible structure system: the analysis of the linear part of the perturbed problem. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics (JTAM)*, 2007, accepted to publication.
- [34] Fradkov, A. L., Evans, R. J., Control of chaos: Methods and applications in engineering, *Annual Reviews in Control*, 29, p. 33 – 56, 2005.
- [35] Meirovitch, L., *Methods of Analytical Dynamics*, USA: McGraw – Hill, 1970.
- [36] Nayfeh, A. H., *Perturbation Methods*, USA: John Wiley e Sons, 1973.
- [37] E.Eisenschitz and F.London, *Zs.Phys.*60, 491(1930):Teoria Quântica para as Forças de van der Waals.
- [38] Nayfeh, A.H., Balachandran, B., *Applied Nonlinear Dynamics: Analytical, Computation and Experimental Methods*. John Wiley and Sons, N.Y., 1995.
- [39] Ott, E., Grebogi, C., Yorke, J., Controlling chaos, *Physics Review Letters*, 64, p. 1196 – 1199, 1990.
- [40] Palácios, J. L., Teoria de sistemas vibratórios aporticados não lineares e não ideais. Tese de Doutorado, UNICAMP – Campinas, 2002.
- [41] Peruzzi, N., Balthazar, J.M., Pontes Jr., B.R., Nonlinear dynamics and control of an ideal/nonideal load transportation system with periodic coefficients. *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*, v. 2, p. 32-39, 2007.

[42] Pontes Jr., B. R., Dinâmica e controle de sistemas não lineares com interação auto – excitadora, sujeitos a fontes de energia do tipo ideal e não ideal. Tese de Doutorado, EESC/USP – São Carlos, 2003.

[43] Rafikov, M., Balthazar, J.M., On an optimal control design for Rossler system *Physic Letter A*, v.333, p.241-245, 2004.

[44] Rafikov, M., Balthazar, J.M., Optimal Linear and Control Design for Chaotic System. In: ASME – International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, Long Beach. Proceedings of International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, 2005.

[45] Rafikov, M., Balthazar, J.M., On control and synchronization in chaotic and hyperchaotic system via linear feedback control. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, in press, 2007.

[46] Rafikov, M. Balthazar, J.M., von Bremen, H.F., Mathematical Modeling and Control of Population Systems: Applications in Biological Pest Control, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, in press, 2007(a) R. Bellman, *Dynamic Programming*, Princeton, New Jersey, 1957.

[47] Sinha, S.C., Henrichs, J.T., Ravindra, B.A., A general approach in the design of active controllers for nonlinear systems exhibiting chaos, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 165- 178, 2000.

[48] Warminski, J., Balthazar, J.M., Vibrations of a parametrically and self – excited system with ideal and non – ideal energy sources, *RBCM - Journal of the Brazilian Society Mechanical Science*, Vol. 25, n°4, p. 413 – 419, 2003.

[49] Wolf, A., Swift, J.B., Swinney, H.L., Vastano, J.A., Determining Lyapunov exponents from a Time Series, *Physica D*, Vol. 16, p. 285-315. 1985.

- [50] Zukovic, M, Cveticanin, L., Chaotic response in a stable Duffing system of non – ideal type, *Journal of Vibration and Control*, vol. 13, No. 6, p. 751 – 767, 2007.
- [51] Burnham NA, Colton RJ, Pollock HM. Interpretation of force curves in force microscopy. *Nanotechnology* 1993;4:64–80.
- [52] Ruetzel S, Lee SI, Raman A. Nonlinear dynamics of atomic-force-microscope probes driven in Lennard–Jones potentials. *Proc R Soc Lond A* 2003;459:1925–48.
- [53] Ashhab M, Salapaka MV, Dahleh M, Mezić I. Melnikov-based dynamical analysis of microcantilevers in scanning probe microscopy. *Nonlinear Dyn* 1999;20:197–220.
- [54] Ashhab M, Salapaka MV, Dahleh M, Mezić I. Dynamical analysis and control of microcantilevers. *Automatica* 1999;35:1663–70.
- [55] Hu S, Raman A. Chaos in atomic force microscopy. *Phys Rev Lett* 2006;96:036107.
- [56] Roberto Camassa, Gregor Kova\_c & Siu-Kei Tin. A Melnikov Method for Homoclinic Orbits with Many Pulses. *Arch. Rational Mech. Anal.* 143 (1998) 105–193. c Springer-Verlag 1998
- [57] Nayfeh Ali. Hassan e Mook Dean T. *Non Oscillations*. (1979) ISBN 0-471 12142-8 John Willey e sons
- [58] História da microscopia. In *Infopédia [Em linha]*. Porto: Porto Editora, 2003-2010. [Consult. 2010-10-12].
- [59] Bhushan, B.; Koinkar, v'N.; Microtribology of Pet Polymeric Films, *Tribol. Trans.*, Vol 38, n.1, pp 119-127, (1995).
- [60] Anczykowski, B.; Chi, L.E; Fuchs, H.; AtomicForce Microscopy Investigations on Polymer Latex Films, *Surf. and Interf. Anal.*, Vo123, n. 6, pp 416-425, (1995).

[61] Herrmann, P. S. P.; Silva,; Colnago, L. A.; Mattoso L.H.C.; Vaz C.M.P.; Cruvinel. P.E. A potencialidade da microscopia de varedura por sonda na pesquisa agropecuária ISSN 1517-4778 agosto, 1999. EMBRAPA.

[62] Zanette, S. I.; Funcionamento de um microscópio de força atômica. Notas do curso ministrado no CBPF,1997. DCP/Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/MCT

[63] Filho, R. B.; Osiro, D.; Herrmann, P. S. P, Colnago, L. A.; Frommer, J. E.; Uso da microscopia de força atômica para visualização de bacteriófagos filamentosos. Dezembro/1996. EMBRAPA

[64] Jalili, N.; Dadfarnia, M.; Dawson, D. M.; Distributed parameters base modeling and vibration analysis of microcantilevers used in atomic force microscopy, Proceedings of the ASME 2009 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, IDETC/CIE 2009, August 30 - September 2, 2009, San Diego, California, USA

[65] Hutter, J.L.; Bechhoefer, J.; Calibration of atomic-force microscope tips. Rev Scientific instrum 1993;64(7):1868–73.

[66] Schimansky-Geier, L.; Herzog, H.; Positive Lyapunov exponents in the Kramers oscillator. Journal of Statistical Physics Volume 70, Numbers 1-2, 141-147, DOI: 0.1007/BF01053959

[67] Weisendanger, R. Scanning probe microscopy and spectroscopy, methods and applications. Cambridge: Cambridge University Press, 1994. 637p.

[68] Thomson, N.H.; Fritz, M.; Radmacher, M.; Cleveland, J.P.; Schmidt, C.F.; Hansma, P. K. Protein tracking and detection of protein motion using atomic force microscopy. Biophys. J., v.70, p.2421-2431, 1996.

[69] Marti, O.; Drake, B.; Hansma, P.K. Atomic force microscopy of liquid-covered surface: atomic resolution images. Appl. Phys. Lett., v.51, p.484-486, 1987.

[70] Meyer, G.; Amer, N.M. Novel optical approach to atomic force microscopy. *Appl. Phys. Lett.*, v.53, p.1045-1047, 1988.

[71] Howald, L.; Meyer, E.; Lüthi, R.; Haefke, H.; Overney, R.; Rudin, H.; Güntherodt, H.J. Multifunctional probe microscope for facile operation in ultrahigh vacuum. *Appl. Phys. Lett.* v.63, p.117-119, 1993.

[72] Kirk, M.D.; Albrecht, T.R.; Quate, C.F. Low-temperature atomic force microscopy. *Rev. Sci. Instr.* v. 59, p.833-835, 1988.

[73] Albrecht, T.R.; Gruter, P.; Rugar, D.; Smith, D.P.E. Lowtemperature force microscope with all-fiber interferometer. *Ultramicroscopy*, v.42, p.1638-1646, 1992.

[74] Drake, B.; Prater, C.B.; Weisenhorn, A.L.; Gould, S.A.C.; Albrecht, C.F.; Quate, C.F.; Cannel, D.S.; Hansma, H.G.; Hansma, P.K. Imaging crystals, polymers, and processes in water with the atomic force microscope. *Science*, v.243, p.1586-1589, 1989.

[75] Shao, Z.; Yang, J.Q. Progress in high resolution atomic force microscopy in biology. *Qut. Rev. Biophys.*, v.28, p.195-251, 1995.

[76] Cantor, C.R.; Schimmel, P.R. *Biophysical chemistry. Part II: techniques for the study of biological structure and function.* New York: Freeman, 1980.

[77] Campbell, I.D.; Dwek, R.A. *Biological spectroscopy.* Menlo Park: Benjamin/Cummings, 1984.

[78] H. Yabuno, Stabilization and utilization of nonlinear phenomena based on bifurcation control for slow dynamics; *Journal of Sound and Vibration* 315 (2008) 766–780

[79] S. Hornstein · O. Gottlieb, Nonlinear dynamics, stability and control of the scan process in noncontacting atomic force microscopy. *Nonlinear Dyn* (2008) 54: 93–122 DOI 10.1007/s11071-008-9335-5



[80] Herrmann, P. S. P.; Silva, M. A. P.; Fancisco, R. B.; Job A.L., Colnago, L. A.; Frommer, J. E.; Mattoso L.H.C. Microscopia de Varredura por Força: uma Ferramenta Poderosa no Estudo de Polímeros, Polímeros: Ciência e Tecnologia – Out/Dez - 97

## 8.4 APÊNDICE 1

### PROGRAMAS MATLAB

#### M FILE para retrato de fase

```
function dx = japones1(t,x)
```

```
A = 0.14668;
```

```
B = 0.17602;
```

```
C = 2.6364;
```

```
Z = 2.5;
```

```
a1 = 1;
```

```
a2 = 14.5;
```

```
w = 1;
```

```
epsilon = 1;
```

```
F = 1;
```

```
mi = -0.1056;
```

```
dx = zeros(2,1);
```

```
dx(1)=x(2);
```

```
dx(2)= -A.*(a2*x(1).^3+a1*x(1))+B./((Z+x(1))
```

```
clear all
clc
close all
```

```
t = 0:0.01:40;
x0=[0 -0.1]';
options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode113('japones1',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')
```

```
hold on
x0=[-0.01 0]';
options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode113('japones1',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')
```

```
hold on
x0=[-0.001 0.001]';
options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode113('japones1',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')
```

```
hold on
x0=[-0.5 0.5]';
```

```

options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode113('japones1',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')

```

```

hold on
x0=[0 0]';
options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode113('japones1',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')

```

## Lyapunov via matlab

```
function f=AFM(t,X)
```

```
% Valor dos parametros
```

```

z = 2.5;
A = 0.14668;
B = 0.17602;
C = 2.6364;
w = 1;
a=1;
b=14.5;

```

```
x=X(1); y=X(2); tt=X(3);
```

```

Y= [X(4), X(7), X(10);
    X(5), X(8), X(11);
    X(6), X(9), X(12)];

```

```
f=zeros(9,1);
```

```
%Equacao de Lorenz
```

```
%z = w*t
```

```
f(1)=y;
```

```
f(2)=-A*(a*x+b*x^3)-B*(z+x)^(-2)+C*sin(tt);
```

```
f(3)=w;
```

```
% Sistema Linearizado
```

```

Jac=[
           0,  1,  0;
    -A*(3*b*x^2+a)+B*2*((z+x)^-3),  0,  C.*cos(tt);
           0,  0,  0];

```

```
%Equacao Variacional
```

```
f(4:12)=Jac*Y;
```

% Saida do vetor coluna Os dados de saida deve ser um vetor coluna Output data must be a column vector

```
function [Texp,Lexp]=lyapunov(n,rhs_ext_fcn,fcn_integrator,tstart,stept,tend,ystart,ioutp);
```

```
% n= numero de equações nao lineares do sistema
```

```
% n2=n*(n+1)= numero de equações acrescido da parte linear
```

```
%
```

```

n1=n; n2=n1*(n1+1);

% Numero de passos

nit = round((tend-tstart)/stept);

% Memoria

y=zeros(n2,1); cum=zeros(n1,1); y0=y;
gsc=cum; znorm=cum;

% Valores iniciais

y(1:n)=ystart(:);

for i=1:n1 y((n1+1)*i)=1.0; end;

t=tstart;

% Loop principal

for ITERLYAP=1:nit

% Solucao do sistema de equacoes

[T,Y] = feval(fcn_integrator,rhs_ext_fcn,[t t+stept],y);

t=t+stept;
y=Y(size(Y,1),:);

for i=1:n1
    for j=1:n1 y0(n1*i+j)=y(n1*j+i); end;
end;

```

```

%
%   construcao de uma nova base ortonormal pelo metodo de Gram-schmidt
%

znorm(1)=0.0;
for j=1:n1 znorm(1)=znorm(1)+y0(n1*j+1)^2; end;

znorm(1)=sqrt(znorm(1));

for j=1:n1 y0(n1*j+1)=y0(n1*j+1)/znorm(1); end;

for j=2:n1
    for k=1:(j-1)
        gsc(k)=0.0;
        for l=1:n1 gsc(k)=gsc(k)+y0(n1*l+j)*y0(n1*l+k); end;
    end;

    for k=1:n1
        for l=1:(j-1)
            y0(n1*k+j)=y0(n1*k+j)-gsc(l)*y0(n1*k+l);
        end;
    end;

    znorm(j)=0.0;
    for k=1:n1 znorm(j)=znorm(j)+y0(n1*k+j)^2; end;
    znorm(j)=sqrt(znorm(j));

    for k=1:n1 y0(n1*k+j)=y0(n1*k+j)/znorm(j); end;
end;

%
%   Magnitude dos vetores
%
```

```

for k=1:n1 cum(k)=cum(k)+log(znorm(k)); end;

%
%   calculo dos expoentes
%

for k=1:n1
    lp(k)=cum(k)/(t-tstart);
end;

% Saida

if ITERLYAP==1
    Lexp=lp;
    Texp=t;
else
    Lexp=[Lexp; lp];
    Texp=[Texp; t];
end;

if (mod(ITERLYAP,ioutp)==0)
    fprintf('t=%6.4f,t);
    for k=1:n1 fprintf(' %10.6f,lp(k)); end;
    fprintf('\n');
end;

for i=1:n1
    for j=1:n1
        y(n1*j+i)=y0(n1*i+j);
    end;
end;

end;

```

**M FILE**  
**EXEMPLO CONTROLE DUFFING**

```
function y=duffing(t,x)

f = 1;
w = 1;
alpha = -1;
qsi = 0.125;
r = 2*cos(t)+sin(t);
z = -2*sin(t)+cos(t);

y=[x(2);-alpha.*x(1)-(x(1).^3)-2.*qsi.*x(2)+f.*cos(w.*t)-2.4142*(x(1)-r)-2.1771*(x(2)-z)];

A=[0 1; 1 -2*0.125];
B=[0;1];
Q=[1 0; 0 1];
R=[1];

[K,P,p]=lqr(A, B, Q, R)

clear all
clc
close all

t = 0:0.1:1000;
x0=[0 0]';
options = odeset('RelTol',1e-3,'MaxStep',1e-2);
[t,x]=ode45('duffing',t,x0,options);
y1=t;
y2=x(:,1);
```



```

y3=x(:,2);
plot(y2,y3,'k')

```

## MATLAB SIMULINK

Modelo cúbico, FFT, Energia, Van der Waals

