

Universidade de Brasília – UnB
Faculdade UnB Gama – FGA
Engenharia Eletrônica

Controle Adaptativo de Microscópio de Varredura por Tunelamento

Autor: Victor Eduardo Ramos Camargo
Orientador: Dr. Marcus Vinicius Batistuta

Brasília, DF
2023



Victor Eduardo Ramos Camargo

Controle Adaptativo de Microscópio de Varredura por Tunelamento

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Eletrônica da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Eletrônica.

Universidade de Brasília – UnB

Faculdade UnB Gama – FGA

Orientador: Dr. Marcus Vinicius Batistuta

Brasília, DF

2023

Victor Eduardo Ramos Camargo
Controle Adaptativo de
Microscópio de Varredura por Tunelamento/ Victor Eduardo Ramos Camargo. –
Brasília, DF, 2023-
87 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Dr. Marcus Vinicius Batistuta

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília – UnB
Faculdade UnB Gama – FGA , 2023.

1. STM. 2. Redes Neurais. I. Dr. Marcus Vinicius Batistuta. II. Universidade
de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Controle Adaptativo de
Microscópio de Varredura por Tunelamento


CDU 02:141:005.6

Victor Eduardo Ramos Camargo


Controle Adaptativo de Microscópio de Varredura por Tunelamento

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Eletrônica da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Eletrônica.


Trabalho aprovado. Brasília, DF, 30 de Outubro de 2023:

Documento assinado digitalmente
 **MARCUS VINICIUS BATISTUTA**
Data: 13/02/2024 17:18:33-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Dr. Marcus Vinicius Batistuta
Orientador

Documento assinado digitalmente
 **CRISTIANO JACQUES MIOSSO RODRIGUES MEN**
Data: 12/02/2024 22:32:22-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Dr. Cristiano Jacques Miosso
Convidado 1

Documento assinado digitalmente
 **DIOGO DE OLIVEIRA COSTA**
Data: 13/02/2024 13:14:26-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Ms. Diogo de Oliveira Costa
Convidado 2

Brasília, DF
2023

Agradecimentos

Com profundo respeito e imensa gratidão, desejo expressar meu sincero agradecimento aos meus pais, Ana Claudia e Absai, cujo amor, dedicação e sacrifícios foram a base fundamental da minha jornada. Sua inabalável crença em mim e seu apoio incondicional foram a força motriz por trás do meu crescimento pessoal e acadêmico. A educação que me proporcionaram, repleta de valores, resiliência e inspiração, moldou-me não apenas como estudante, mas como ser humano.

Gostaria de estender um agradecimento à minha irmã, Ana Gabrielle. Desde os meus primeiros anos, sua presença protetora e carinhosa foi um verdadeiro pilar em minha formação. Agradeço imensamente por todos os momentos em que cuidou de mim, oferecendo não apenas seu tempo e atenção, mas também seu amor e paciência incondicionais.

À minha namorada, Júlia Andrade, sou grato pelo suporte inabalável nos momentos difíceis e pela sua contribuição valiosa na revisão deste trabalho. Agradeço-lhe imensamente por caminhar ao meu lado, compartilhando sabedoria, amor e inspiração, elementos cruciais que me ajudaram a alcançar este importante marco em minha vida.

Além disso, gostaria de expressar minha gratidão à minha sogra, Verônica Cavalcanti, por seu apoio, compreensão e conselhos que foram de grande ajuda ao longo desta jornada acadêmica. Sua generosidade e acolhimento não apenas me proporcionaram um ambiente tranquilo e propício para meus estudos, mas também me inspiraram com seu exemplo de força e sabedoria.

Um agradecimento especial é reservado ao meu orientador, Marcus Batistuta, cuja paciência, compreensão e orientação exemplares foram fundamentais para a realização deste estudo. Sua humildade e sabedoria foram fontes de inspiração e aprendizado.

Aos meus queridos amigos, Thiago Martins, Marcus Vinicius, Caio Tkaczyk, Guilherme Maciel e Daniel Fábio, estendo minha gratidão pela amizade genuína e apoio constante ao longo da minha jornada universitária.

Resumo

O Microscópio de Varredura por Tunelamento - STM, é um equipamento de microscopia de alta resolução que permite a visualização da topografia e das propriedades eletrônicas de diversos materiais em escalas atômicas, por meio do uso de um fenômeno da mecânica quântica conhecido como corrente de tunelamento.

Este estudo tem como objetivo avaliar cinco abordagens de controle adaptativo e uma abordagem de controle clássico, para o controle da distância entre a ponta de prova e a amostra em um STM. Essas abordagens de controle incluem: PID Clássico, Adaptativo com Redes Neurais Feedforward com Aproximação Estática do Gradiente, Adaptativo com Redes Neurais Feedforward com Identificador da Planta, PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta, IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta.

Inicialmente, foi desenvolvido, sobre o sistema operacional Windows, utilizando a linguagem de programação Python, juntamente com as bibliotecas Numpy e PyTorch, um ambiente de simulação da corrente de tunelamento do STM, que inclui a dinâmica histerética da ponta de prova do STM e os sistemas de controle adaptativos. Os modelos propostos foram examinados em termos do tempo de resposta e das convergências dos erros de controle, dos controladores e dos seus parâmetros intrínsecos.

Palavras-chaves: STM. controle adaptativo. redes neurais.

Abstract

The Scanning Tunneling Microscope (STM) is a high-resolution microscopy equipment that image the topography and electronic properties of various materials at atomic scales, through the use of a quantum mechanics phenomenon known as tunneling current.

This study aims to evaluate five adaptive control approaches and one classic control approach for controlling the tip-sample distance in an STM. These control approaches are: Classic PID, Adaptive with Feedforward Neural Networks and Static Gradient Approximation, Adaptive with Feedforward Neural Networks and Plant Identifier, Adaptive PID with Static Gradient Approximation, Adaptive PID with LMS Algorithm and Plant Identifier, Adaptive IIR with Recursive LMS Algorithm and Plant Identifier.

Initially, a simulation environment for the STM's tunneling current was developed on Windows operating system, using Python programming language, along with the Numpy and PyTorch libraries. The simulation environment includes the hysteretic dynamics of the STM's probe tip and the control systems. The proposed models were examined in terms of response time and the convergence of control errors, controllers, and their intrinsic parameters.

Key-words: STM. adaptive control. neural networks.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação simplificada de um STM, a ponta de prova metálica se aproxima da amostra e é aplicada uma tensão de polarização que produz uma corrente de tunelamento entre a ponta de prova metálica e a amostra. Essa corrente de tunelamento é posteriormente utilizada para produzir imagens da superfície da amostra (BIAN et al., 2021)	19
Figura 2 – As figuras representam uma superfície de Grafeno, a figura à esquerda foi gerada utilizando métodos de DFT com a teoria de Tersoff-Harmann, para gerar a imagem teórica de um STM foi utilizado o modo de operação é altura constante, com tensão de polarização de 500mV e distância entre a ponta-amostra de 1Å. A figura à direita é uma imagem real, em uma escala de 500pm, da topologia do grafeno obtida por meio de um STM (CHOUDHARY et al., 2021; LI; LUICAN; ANDREI, 2009)	19
Figura 3 – Representação simplificada de um AFM, há uma sonda flexível com uma ponta de prova bastante afiada, ao aproximar a ponta de prova da amostra há forças de interação dos átomos da ponta de prova e da amostra que flexiona a sonda, a imagem é obtida por um sistema que mensura a magnitude de flexão da sonda (BIAN et al., 2021).	20
Figura 4 – Gráfico da força interatômica versus distância, a distância entre a ponta de prova e a amostra é dada pelo eixo horizontal, ao diminuir essa distância forças de atração aproximam a ponta de prova da amostra (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998)	21
Figura 5 – Arquitetura de um STM(AL, 2005)	24
Figura 6 – Eletrônica e controle de um STM (CHEN, 2021)	24
Figura 7 – Descrição do efeito túnel - (a) Barreira de potencial unidimensional retangular finita (b) Barreira de potencial devido ao vácuo no espaço entre a ponta de prova do STM e a amostra (MURPHY, 2014)	26
Figura 8 – Modo de operação do STM em corrente constante, a ponta de prova segue a topografia da amostra, estabilizando a corrente de tunelamento em um valor de referência (AL, 2005)	28
Figura 9 – Modo de operação do STM em altura constante (AL, 2005)	29
Figura 10 – Construção de um atuador empilhado. A célula piezoelétrica é fatiada em várias partes, essas células são empilhadas com a inserção de eletrodos entre elas (YI; VEILLETTE, 2005)	32
Figura 11 – Circuito de um sistema controlador de carga, os resistores possibilitam a realimentação do sinal DC no circuito (YI; VEILLETTE, 2005)	32
Figura 12 – Modelo de um neurônio artificial (HAYKIN, 2005)	35

Figura 13 – Funções de ativação: sigmoide, tangente hiperbólica, ReLU e Leaky ReLU	36
Figura 14 – Rede neural feedforward com 5 entradas, 2 camadas ocultas com 3 neurônios e uma entrada de viés(em azul) cada e uma camada de saída com 1 neurônio e uma entrada de viés	37
Figura 15 – Tipos de aprendizagem	38
Figura 16 – Sistema simplificado de aprendizagem por reforço	40
Figura 17 – Diagrama de um <i>Zero Order Hold</i> , esse sistema <i>Zero Order Hold</i> (ZOH) retém o último valor amostrado de uma função contínua	41
Figura 18 – Diagrama de blocos de um filtro FIR, a função $A(z)$ não possui polos .	43
Figura 19 – Diagrama de blocos um filtro IIR, as funções de $A(z)$ e $B(z)$ possuem não possuem polos	44
Figura 20 – Diagrama de blocos de um sistema de controle PID	45
Figura 21 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo por modelo de referência (LANDAU et al., 2013)	46
Figura 22 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo direto baseado em redes neurais(ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022). .	47
Figura 23 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022). .	47
Figura 24 – Diagrama de blocos da abordagem série-paralelo de um identificador de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).	48
Figura 25 – Diagrama de blocos da abordagem paralelo de um identificador de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).	48
Figura 26 – Diagrama simplificado do sistema desenvolvido	49
Figura 27 – Diagrama aprofundado do STM	50
Figura 28 – Altura de uma amostra teórica com velocidade de varredura de $0,72 \text{ \AA}_s^{-1}$	51
Figura 29 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Clássico	52
Figura 30 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Aproximação Estática do Gradiente	53
Figura 31 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Identificador da Planta	56
Figura 32 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente . . .	58

Figura 33 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta	60
Figura 34 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta(Widrow, 2016)	63
Figura 35 – Resultados da simulação do Controlador PID em 50 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente desejada pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	67
Figura 36 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Aproximação Estática do Gradiente durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	68
Figura 37 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Aproximação Estática do Gradiente durante 200 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	69
Figura 38 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da altura dos átomos, b) Erro de controle, c) Erro de identificação, d) Acompanhamento da corrente de tunelamento do sistema de identificação, e) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, f) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	71
Figura 39 – Resultados do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	72
Figura 40 – Adaptação dos coeficientes do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, a) coeficiente K_P , b) coeficiente K_I e c) coeficiente K_D	73

Figura 41 – Adaptação dos coeficientes do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta, em vermelho coeficiente K_P , em azul coeficiente K_I e em verde coeficiente K_D	74
Figura 42 – Adaptação dos zeros do identificador IIR para o Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta	75
Figura 43 – Adaptação dos polos e do viés do identificador IIR para o Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta	75
Figura 44 – Erros do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, a) Erro de controle, b) Erro de identificação c) Acompanhamento da corrente de tunelamento do STM pelo sistema de identificação	76
Figura 45 – Resultados do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, c) Acompanhamento da corrente de tunelamento do sistema de identificação, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	77
Figura 46 – Adaptação dos zeros do identificador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	78
Figura 47 – Adaptação dos polos e do viés do identificador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	78
Figura 48 – Adaptação dos zeros do controlador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	79
Figura 49 – Adaptação dos polos e do viés do controlador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	79
Figura 50 – Erros do Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, a) Erro de controle, dado pela diferença do valor de referência pela corrente de tunelamento do STM, b) Erro de identificação, dado pela diferença do valor do modelo de identificação pela corrente de tunelamento do STM	80
Figura 51 – Resultados do Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Acompanhamento da corrente de tunelamento do STM pelo sistema de identificação, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM	81

Lista de tabelas

Tabela 1 – Constantes utilizadas na simulação numérica	50
--	----

Lista de abreviaturas e siglas

STM	Scanning Tunneling Microscope
SPM	Scanning Probe Microscope
AFM	Atomic Force Microscope
MRAC	Model Reference Adaptive Control
RNA	Redes Neurais Artificiais
FNN	Feedforward Neural Networks
CNN	Convolutional Neural Networks
RNN	Recurrent Neural Networks
MSE	Mean Squared Error
MAE	Mean Absolute Error
PID	Proportional Integrative Derivative Controller
PI	Proportional Integrative Controller
FIR	Finite Impulse Response
IIR	Infinite Impulse Response
LMS	Least Mean Squares

Lista de símbolos

w_{kj}	Matriz de pesos de uma camada de k neurônios e j entradas
b_i	<i>Bias</i> ou Viés dos neurônios da camada i
ϕ	Função de ativação
α	Taxa de aprendizagem
ψ	Função de onda do elétron no STM
z	Distância da ponta de prova à amostra
\hbar	Constante de Planck reduzida
m_e	Massa do elétron
U_0	Energia da barreira potencial
E	Energia do sistema
W	Largura da barreira potencial
φ	Função trabalho
σ	Constante de proporcionalidade da altura aparente da barreira de tunelamento
I_t	Corrente de tunelamento
G_t	Condutância de tunelamento
V_t	Tensão de polarização
m	Massa do dispositivo piezoelétrico
$z(t)$	Deslocamento do dispositivo piezoelétrico
c	Coefficiente de viscosidade
$F(t)$	Força restauradora
$f(t)$	Força excitante
a	Razão entre a rigidez pós-escoamento e rigidez pós escoamento
k_f	Rigidez pós-escoamento

k_i	Rigidez pré-escoamento
F_y	Força de escoamento
u_y	Deslocamento de escoamento
$x(t)$	Variável histerética adimensional não observável
A	Variável adimensional do modelo de Bouc-Wen
γ	Variável adimensional do modelo de Bouc-Wen
β	Variável adimensional do modelo de Bouc-Wen
n	Variável adimensional do modelo de Bouc-Wen
$x_1(t)$	Posição do atuador piezoelétrico
$x_2(t)$	Velocidade do atuador piezoelétrico
$x_3(t)$	Variável não-observável da histerese do atuador piezoelétrico
K_P	Coefficiente proporcional
K_I	Coefficiente integrativo
K_D	Coefficiente derivativo

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	História do STM	17
1.2	Breve Introdução à Microscopia de Varredura por Sonda	18
1.2.1	Microscópio de Varredura por Tunelamento	18
1.2.2	Microscópio de Força Atômica	20
1.3	O Problema do Controle da Ponta de Prova de um STM	21
1.4	Estratégias de Controle dos Atuadores Piezoelétricos de um STM	22
1.5	Objetivos	22
2	EMBASAMENTO TEÓRICO DO STM	24
2.1	Tunelamento Quântico	25
2.1.1	Altura Aparente da Barreira de Tunelamento	27
2.2	Modos de Operação do STM	28
2.2.1	Modo de Corrente Constante	28
2.2.2	Modo de Altura Constante	29
2.3	Posicionador Piezoelétrico	30
2.3.1	Modelo Massa-Mola-Amortecedor	30
2.3.2	Modelo de Bouc-Wen	30
2.3.3	Atuadores Piezoelétricos Empilhados e Controle de Carga	31
3	EMBASAMENTO TEÓRICO DAS REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	34
3.1	Topologia de uma Rede Neural Artificial	34
3.2	Aprendizagem de uma Rede Neural	37
3.2.1	Aprendizagem Supervisionada	38
3.2.2	Aprendizagem Não-Supervisionada	39
3.2.3	Aprendizagem por Reforço	39
3.3	Ajuste dos Pesos pelo Método <i>Backpropagation</i>	39
4	EMBASAMENTO TEÓRICO DOS SISTEMAS DE CONTROLE	41
4.1	Controle Digital	41
4.1.1	Transformada Z	42
4.2	Controle com Filtros FIR	43
4.3	Controle com Filtros IIR	43
4.4	Controle PID	44
4.5	Controle Adaptativo	45
4.5.1	Controle Adaptativo por Modelo de Referência	46

4.5.2	Controle Adaptativo Baseado em Redes Neurais	47
5	MATERIAIS E MÉTODOS	49
5.1	Implementação do Simulador de um STM	49
5.2	Implementação do Controlador PID Clássico	51
5.3	Implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Aproximação Estática do Gradiente	53
5.3.1	Treinamento da Rede	54
5.4	Implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Identificador da Planta	55
5.4.1	Treinamento da Rede e Seleção dos Hiperparâmetros	55
5.5	Implementação do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente	58
5.5.1	Ajuste dos Coeficientes	59
5.6	Implementação do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta	59
5.6.1	Ajuste dos Coeficientes	61
5.7	IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	62
5.7.1	Ajuste dos Coeficientes	63
5.8	Implementação do Modelo de Referência	64
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	66
6.1	Desempenho dos modelos	66
6.1.1	PID Clássico	66
6.1.2	Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Aproximação Estática do Gradiente	67
6.1.3	Controlador Adaptativo com Redes Neurais <i>Feedforward</i> com Identificador da Planta	69
6.1.4	Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente	72
6.1.5	Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta	73
6.1.6	Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta	77
6.2	Análise dos Modelos	81
7	CONCLUSÃO	83
	REFERÊNCIAS	84

1 Introdução

1.1 História do STM

Qualificar a superfície dos materiais é uma tarefa que teve um caráter subjetivo por longos períodos, uma vez que não havia a prática de cumprir um protocolo científico rígido por parte dos pesquisadores das diversas áreas do conhecimento. Além disso, havia uma ausência dos componentes adequados para efetuar as medições, propiciando o desenvolvimento de julgamentos subjetivos, os quais resultavam, em muitos casos, em análises inverossímeis (SUDEROW et al., 2014).

No começo do século XX, começaram a aparecer as primeiras metodologias responsáveis por realizar a medição superficial, como é o caso dos perfilógrafos, dos fonógrafos e dos fotomicroscópicos. No ano de 1932, houve a criação de uma técnica delicada e sensível denominada perfilômetro *Stylus*, a qual era capaz de representar as curvas associadas ao perfil topográfico de corpos de provas. Essas informações eram tratadas por meio de atribuições de valores percentuais do perfil à rugosidade superficial do componente (BRIHUEGA et al., 2012).

Em 1972, foi elaborado o *Topografiner*, capaz de efetuar o mapeamento topográfico de materiais com alta resolução. Esse dispositivo era do tipo não contato e era empregado na microtopografia de componentes metálicos. Essa técnica foi advinda de outras tecnologias presentes no período, como o tunelamento metálico-vácuo-metal e a emissão de campo. No *Topografiner*, aproximava-se uma ponta de prova emissora de campo, cujo raio da ponta oscilava entre $10^2 \sim 10^4$ Å, de uma superfície condutora dentro de uma câmara de vácuo. Concomitantemente, aplicava-se uma corrente elétrica constante na ponta emissora de campo e havia uma varredura da superfície da amostra com um sistema de 3 dispositivos piezoelétricos (YOUNG; WARD; SCIRE, 1972).

No ano de 1981, na empresa IBM, foi realizado um novo modo de avaliar a escala de componentes pequenos pelos pesquisadores Rohrer, Binnig e Gerber. Na ocasião, surgiu o *Scanning Tunneling Microscope*(STM) ou Microscópio de Varredura por Tunelamento, que se baseava na interação direta de um fio extremamente afilado de molibdênio ou de tungstênio contendo aproximadamente 1 nm de diâmetro com um corpo de prova do tipo condutor. Esses materiais estavam separados por uma distância de 1 nm e contavam com a estabilidade igual a 10^{-2} nm . Em tal interação, havia a aplicação de um campo elétrico entre a amostra metálica e o fio extremamente afilado, propiciando o aparecimento de uma corrente elétrica, chamada de corrente de tunelamento (BIAN et al., 2021).

O STM apresentou um enorme impacto nas mais variadas áreas, como é o caso da tecnologia de implantes médicos, da micromecânica, da catálise, da química orgânica, da termodinâmica de superfícies, da ciência dos materiais, entre outras (BIAN *et al.*, 2021). Após a criação do STM, foi desenvolvido o *Atomic Force Microscope* (AFM) ou Microscópio de Força Atômica, o qual utiliza forças intermoleculares para obter o perfil topográfico da amostra. Desse modo, o AFM possibilitou realizar um imageamento molecular de materiais não-condutivos ou que oxidam, proporcionando uma nova alternativa de imageamento de amostras e estabelecendo um crescimento significativo nas pesquisas de *Scanning Probe Microscopy* (SPM) (TSUKRUK; SINGAMANENI, 2011).

1.2 Breve Introdução à Microscopia de Varredura por Sonda

Microscopia de Varredura por Sonda ou SPM é uma nomenclatura empregada para se referir a uma série de técnicas utilizadas na obtenção de imagens, bem como na investigação de superfícies. Nesse caso, há uma característica comum na adoção de um *cantilever* (sonda) pequeno que conta, normalmente, com uma ponta microscópica acoplada. A ponta é a responsável por interagir de forma direta com uma pequena parte da superfície da amostra, permitindo a compreensão do material (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998).

É possível associar o avanço dos microscópios à capacidade de coletar imagens contendo uma resolução tridimensional elevada. É possível efetuar a varredura em um plano em uma faixa que varia de dezenas de micrômetros até dezenas de nanômetros, com resoluções que podem atingir unidades de Angstroms. Contudo, esses parâmetros variam em função do equipamento, assim como dos objetivos almejados nas análises (KLAPETEK, 2013).

Por meio do SPM, podem-se representar inúmeras características dos materiais, como campos magnéticos, campos elétricos, estrutura eletrônica, topografia superficial, entre outros tipos de propriedades que são de grande interesse para a nanotecnologia e a nanociência (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998). Além disso, ele permite mensurar as propriedades físicas e químicas sem a destruição da amostra. Portanto, isso comprova a excelência do componente em mecanismos de investigação (WANG *et al.*, 2021).

1.2.1 Microscópio de Varredura por Tunelamento

O princípio do funcionamento do STM consiste em mensurar a corrente de tunelamento produzida pela aplicação de um potencial elétrico entre uma ponta de prova metálica afilada e a superfície da amostra, vide Fig. 1. O espaço entre a ponta de prova e a superfície da amostra é da ordem de algumas unidades de Angstroms. Por meio da

utilização de dispositivos piezelétricos, realizam-se as varreduras da superfície da amostra e os ajustes da distância entre a ponta de prova e a superfície da amostra, formando imagens similares a Fig. 2. A medição da corrente de tunelamento também possibilita o ajuste do espaço existente entre a amostra e a ponta de prova mediante um sistema de controle (CHEN, 2021).

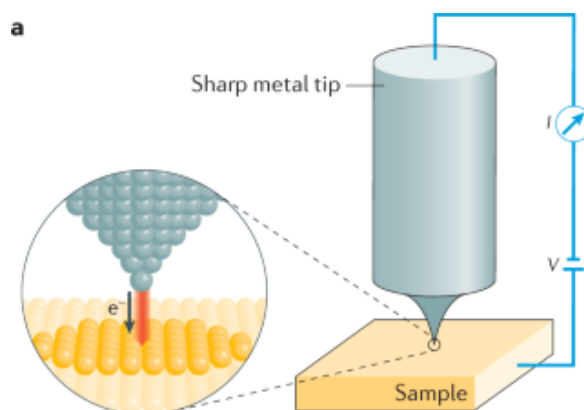


Figura 1 – Representação simplificada de um STM, a ponta de prova metálica se aproxima da amostra e é aplicada uma tensão de polarização que produz uma corrente de tunelamento entre a ponta de prova metálica e a amostra. Essa corrente de tunelamento é posteriormente utilizada para produzir imagens da superfície da amostra (BIAN et al., 2021)

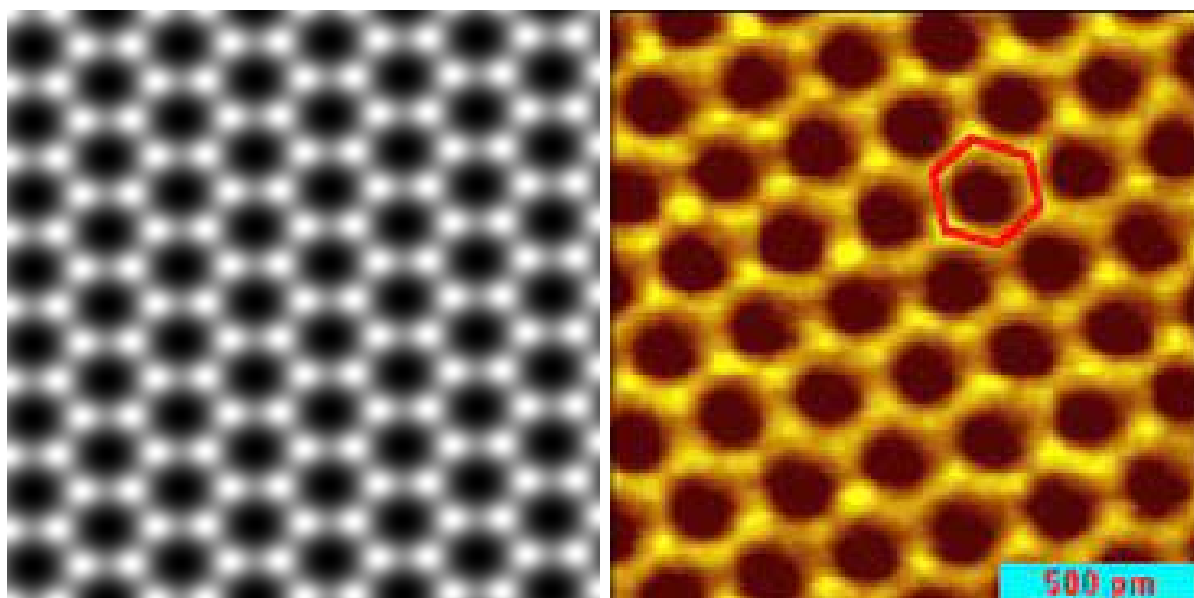


Figura 2 – As figuras representam uma superfície de Grafeno, a figura à esquerda foi gerada utilizando métodos de DFT com a teoria de Tersoff-Harmann, para gerar a imagem teórica de um STM foi utilizado o modo de operação é altura constante, com tensão de polarização de 500mV e distância entre a ponta-amostra de 1Å. A figura à direita é uma imagem real, em uma escala de 500pm, da topologia do grafeno obtida por meio de um STM (CHOUDHARY et al., 2021; LI; LUICAN; ANDREI, 2009)

Um dos maiores desafios enfrentados na construção de um STM é a instrumentação dos componentes do sistema eletrônico e do sistema de controle. Isso ocorre devido à necessidade da obtenção de uma resolução na distância entre a ponta de prova e a amostra da ordem de 1 picômetro, bem como de uma resolução na superfície da amostra da ordem de 10 picômetros. Ademais, é fundamental garantir um bom condicionamento dos sinais, em virtude da presença de ruídos inerentes, causados por efeitos térmicos, efeitos mecânicos, interferências eletromagnéticas, capacitâncias e indutâncias parasitas (POHL, 1986).

1.2.2 Microscópio de Força Atômica

O funcionamento do microscópio de força atômica é análogo ao microscópio de varredura por tunelamento, diferenciando-se apenas pelo mecanismo de mensuração da superfície da amostra, o STM utiliza a corrente de tunelamento entre a ponta de prova e a amostra, enquanto o AFM utiliza a força interatômica para estimar a distância entre uma sonda e a superfície da amostra, conforme Fig. 3.

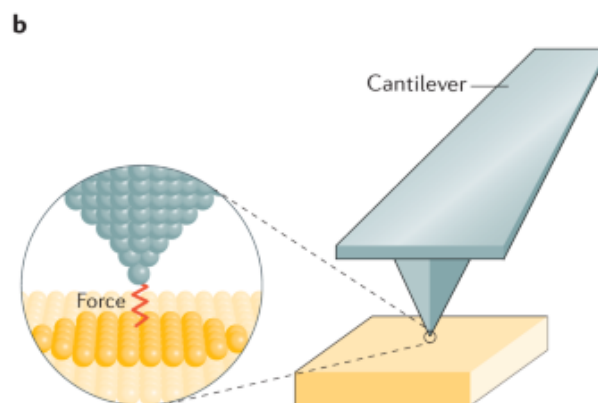


Figura 3 – Representação simplificada de um AFM, há uma sonda flexível com uma ponta de prova bastante afiada, ao aproximar a ponta de prova da amostra há forças de interação dos átomos da ponta de prova e da amostra que flexiona a sonda, a imagem é obtida por um sistema que mensura a magnitude de flexão da sonda (BIAN et al., 2021).

Essa medida de distância pode ser obtida de diversas maneiras, por meio da interferência óptica, de uma ponta de prova com corrente de tunelamento e da utilização de uma sonda constituída de uma material piezo-resistivo. O ponto comum desses métodos é medir o grau de deflexão da sonda em consequência da ação da força interatômica. O mecanismo de ação da força interatômica pode ser visualizado na Fig. 4.

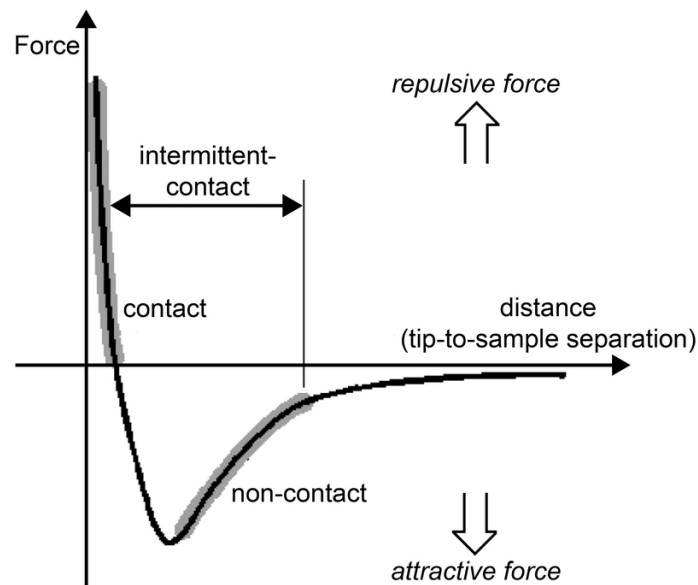


Figura 4 – Gráfico da força interatômica versus distância, a distância entre a ponta de prova e a amostra é dada pelo eixo horizontal, ao diminuir essa distância forças de atração aproximam a ponta de prova da amostra (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998)

1.3 O Problema do Controle da Ponta de Prova de um STM

Freqüentemente, nos STMs, há sistemas de controle em malha fechada, as quais utilizam controladores PID, com o objetivo de ajustar a posição da ponta de prova, excluindo a parte derivativa para evitar ultrapassagens na corrente de tunelamento, devido a descontinuidades na amostra, inerentes à ausência de átomos (CHEN, 2021; MARTÍ N-VEGA et al., 2021; TAJADDODIANFAR, 2018). No entanto, a ausência do componente derivativo nos controladores PID e o ajuste autônomo dos parâmetros do controlador tornam o imageamento lento e instável. Isso pode ocasionar efeitos indesejáveis de deslocamento da amostra e de colisão da ponta de prova com a amostra, comprometendo a qualidade da imagem final do perfil da amostra obtida.

Outros fatores, como os diferentes tipos de substratos, a geometria da ponta de prova, a histerese do dispositivo piezoelétrico e os variados tipos de ruído alteram os parâmetros da planta de um STM. Por isso, a extração empírica de uma equação da dinâmica da planta pode ser laboriosa. Assim, é possível encontrar na literatura métodos de identificação da planta de um STM por meio de abordagens de varredura em frequência (TAJADDODIANFAR, 2018) e pela utilização de redes neurais (HADJIISKI et al., 1995).

Além disso, no controle dos STMs é essencial manter uma distância segura da ponta de prova à amostra, com o intuito de evitar a ocorrência de danos à ponta de prova e o comprometimento do contraste da imagem. Quando há variações dos parâmetros da

planta, por exemplo, na função trabalho ou na condutância da amostra, os controladores dos dispositivos piezoelétricos podem se tornar instáveis. Dessa maneira, é necessária a construção de um sistema de controle do dispositivo piezoelétrico que se ajuste às variações e às irregularidades do sistema de forma autônoma, eficiente e segura.

1.4 Estratégias de Controle dos Atuadores Piezoelétricos de um STM

Na literatura, notam-se abordagens de controle dos atuadores piezoelétricos de precisão, de maneira que existe a utilização de modelos de identificação da planta, baseados em redes neurais, com a finalidade de ajustar o sistema de controle dos atuadores supracitados (YANG; CHANG, 2006; RIBEIRO et al., 2021). Outra abordagem consiste em usar controladores PID modificados, incorporando redes neurais para estender e otimizar as funções do controlador PID em domínios não-lineares, causados pela histerese do atuador piezoelétrico e outros fatores externos (KUNG; FUNG, 2002; WEI; HU; ZHANG, 2011; YU et al., 2020).

1.5 Objetivos

O objetivo do presente trabalho é investigar seis abordagens de controle, sendo cinco de controle adaptativo e uma de controle clássico, para controlar a varredura da ponta de prova de um STM operante em modo de corrente constante. Essas abordagens podem contribuir para a construção de sistemas de controle eficientes de STM, para o aprimoramento do contraste das imagens das superfícies e para a obtenção de velocidades rápidas de varredura.

Para possibilitar os testes dos controladores da ponta de prova, foi desenvolvido, implantado e testado um simulador da dinâmica de um STM, em ambiente *Windows*, na linguagem de programação *Python*, no ambiente de desenvolvimento *Visual Studio Code*. Foi desenvolvido, implantado e testado seis controladores no simulador do STM, enumerados a seguir:

1. Sistema de Controle Não Adaptativo - PID Clássico
2. Sistema de Controle Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente
3. Sistema de Controle Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta
4. Sistema de Controle PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta
5. Sistema de Controle IIR adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

Todos os sistemas de controle foram avaliados, de forma comparativa, em termos do seu desempenho.

2 Embasamento Teórico do STM

A arquitetura simplificada de um STM pode ser visualizada na Fig. 5, o bloco *Scan Generator* é responsável por realizar a varredura da superfície da amostra, por meio do controle das coordenadas XY do microscópio, esse bloco realiza o controle de um amplificador de alta tensão que gera as deformações necessárias nos materiais piezelétricos. O bloco *Feedback Electronics* realiza o controle da distância entre a ponta de prova e a amostra de forma análoga ao bloco *Scan Generator*, controlando o eixo Z, com um sistema de controle em malha fechada. Concomitantemente a esses processos, o computador calibra, gerencia e armazena as imagens do STM (AL, 2005).

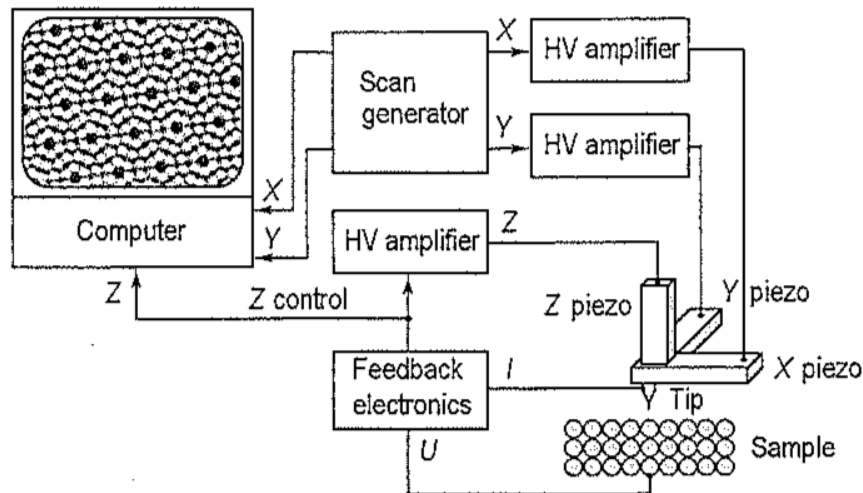


Figura 5 – Arquitetura de um STM(AL, 2005)

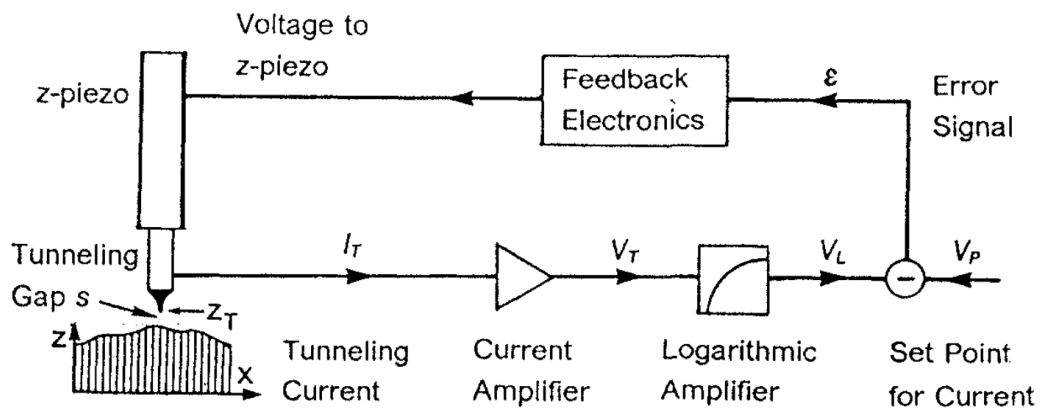


Figura 6 – Eletrônica e controle de um STM (CHEN, 2021)

Usualmente encontra-se em trabalhos acadêmicos a topologia de condicionamento da corrente de tunelamento utilizada em STMs (CHEN, 2021), conforme a Fig. 6. Essa topologia consiste em amplificar a corrente de tunelamento proveniente da ponta de prova com um amplificador de transimpedância. Em seguida, a tensão de saída do amplificador, que apresenta uma relação exponencial não-linear com a distância entre a ponta de prova e a amostra, é aplicada em um amplificador logarítmico para linearizar o sinal. Posteriormente, é realizada a diferença entre o sinal de saída do amplificador logarítmico com uma tensão desejada, obtendo-se assim o erro de posicionamento da ponta de prova. Esse sinal de erro é utilizado para controlar a posição da ponta de prova por meio de aplicações de tensões elétricas no dispositivo piezoelétrico, que provoca sua deformação mecânica.

2.1 Tunelamento Quântico

O tunelamento consiste em um mecanismo de transporte da matéria condensada muito relevante para a ciência. Tal mecanismo de transporte não pode ser descrito pela física clássica como é o caso dos processos de difusão (ASSIG et al., 2013). Portanto, é possível entender esse conceito apenas em termos da teoria quântica, utilizando de forma usual a equação de Schrödinger independente do tempo unidimensional, dada pela Eq. 2.1.

$$E\psi(z) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) \quad (2.1)$$

onde, $\psi(z)$ é a função de onda do elétron, E é a energia do sistema, $V(z)$ é a função energia potencial do sistema, \hbar é a constante de Planck reduzida e m_e é a massa do elétron. É interessante ressaltar que o termo $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2}$ é a energia cinética da partícula, pois a equação de Schrödinger é obtida através da aplicação do operador Hamiltoniano à função de onda. Considerando uma partícula e uma barreira de energia potencial, levando em consideração que o elétron possui uma energia inferior a energia da barreira de potencial, conforme a Fig. 7, é possível realizar a modelagem matemática do efeito túnel

Considerando a física clássica a partícula não conseguiria atravessar uma barreira como citado anteriormente, contudo, pelo caráter ondulatório da partícula, o elétron consegue transpor a barreira (KOEPEKE et al., 2013). Adicionalmente, o módulo quadrado da função de onda tem um significado probabilístico, através da interpretação de Copenhague, por esse motivo é possível associar ao efeito túnel uma probabilidade de transmissão e reflexão do elétron, isto é, as funções de onda encontradas nas regiões I e III da Fig. 7, estão associadas a probabilidade de reflexão e transmissão, respectivamente, essa relação é dada de acordo com a Eq. 2.2.

$$T + R = 1 \quad (2.2)$$

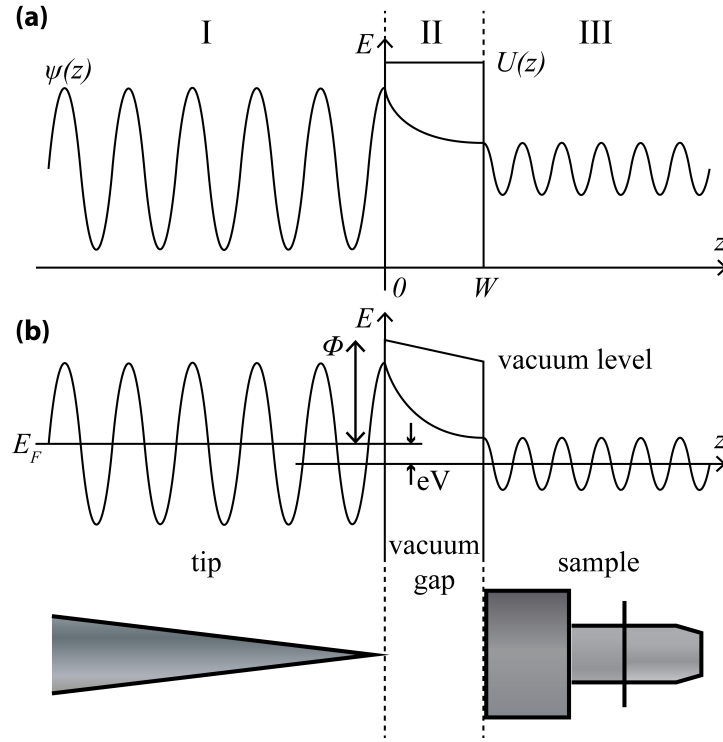


Figura 7 – Descrição do efeito túnel - (a) Barreira de potencial unidimensional retangular finita (b) Barreira de potencial devido ao vácuo no espaço entre a ponta de prova do STM e a amostra (MURPHY, 2014)

Se associarmos uma função de onda a cada região da Fig. 7, que quando superpostas descrevem a função de onda da partícula, podemos calcular o parâmetro de transmissão(T) e o de parâmetro de reflexão(R), conforme a Eq. 2.3.

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_I(z), & -\infty < z < 0 \\ \psi_{II}(z), & 0 \leq z \leq W \\ \psi_{III}(z), & W < z < \infty \end{cases} \quad (2.3)$$

A equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo é uma equação diferencial ordinária homogênea de 2ª ordem, conseqüentemente, a solução da função de onda é dada pela superposição de exponenciais complexas, conforme a Eq. 2.4.

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_I(z) = A_1 e^{ik_1 z} + A'_1 e^{-ik_1 z}, & -\infty < z < 0 \\ \psi_{II}(z) = A_2 e^{k_2 z} + A'_2 e^{-k_2 z}, & 0 \leq z \leq W \\ \psi_{III}(z) = A_3 e^{ik_3 z} + A'_3 e^{-ik_3 z}, & W < z < \infty \end{cases} \quad (2.4)$$

Analisando a Figura 7, temos uma onda incidente de $z = -\infty$ após ultrapassar a barreira potencial, temos uma transmissão da partícula, sem possibilidade de reflexão, logo o termo $A'_3 = 0$, simplificando a análise. Além disso, a amplitude da função de onda incidente é dada pelo termo A_1 , o da função de onda refletida é A'_1 e o da função de onda

transmitida é A_3 . Diante disso, as probabilidades de transmissão e reflexão são definidas pela Eq. 2.5.

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \quad R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 \quad (2.5)$$

Os valores das probabilidades de transmissão e reflexão são muito bem conhecidos na literatura, e podem ser obtidos analiticamente (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1977), o coeficiente de transmissão é dado pela Eq. 2.6, onde U_0 é a energia da barreira de potencial, E é a energia do sistema, m é a massa da partícula e W é a largura da barreira de potencial.

$$T = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh \left(\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} W \right)} \quad (2.6)$$

2.1.1 Altura Aparente da Barreira de Tunelamento

Algumas aproximações, advindas de cálculos da mecânica quântica, sugerem que a corrente entre a ponta de prova e a amostra no vácuo possuem uma relação de proporcionalidade com a tensão de polarização entre essas partes e é uma função exponencial da distância de separação destas (BINNIG; ROHRER, 2000), essa relação pode ser obtida manipulando a Eq. 2.6, quando $\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} W \gg 1$, a Eq. 2.6 torna-se:

$$T = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} W \right] \quad (2.7)$$

Considerando que a corrente de tunelamento possui uma relação de proporcionalidade com o produto da tensão de polarização pela probabilidade de transmissão do elétron na barreira potencial (OLESEN et al., 1996), podemos definir a corrente de tunelamento conforme a Eq. 2.8.

$$I_t(x, y, z) \propto V_b \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} z \right] \quad (2.8)$$

Definindo a corrente de tunelamento como $I_t(x, y, z)$, que depende das características da amostra e da geometria da ponta de prova, a tensão de polarização como V_b , a função trabalho como $\varphi = U_0 - E$, que para o tunelamento quântico é da ordem de algumas unidades de elétron-volt ($eV \approx 1.602 \cdot 10^{-19} J$), a largura da barreira de potencial (z) da ordem de Angström, calculamos a constante da exponencial como aproximadamente 1.025 e obtemos a seguinte expressão para a corrente de tunelamento:

$$I_t(x, y, z) = V_b G_t(x, y, z) \exp[-1.025\sqrt{\varphi}z] \quad (2.9)$$

onde, $G_t(x, y, z)$ é a condutância de tunelamento. A equação 2.9 representa a *Apparent Barrier Height* ou altura aparente da barreira de tunelamento, que é amplamente documentada na literatura científica. Essa equação demonstra que a corrente de tunelamento é diretamente proporcional ao produto da tensão de polarização e a função exponencial da distância entre a ponta de prova e a amostra (TAJADDODIANFAR, 2018). No presente trabalho consideramos a condutância de tunelamento como sendo constante, para simplificar o processo de desenvolvimento do ambiente de simulação da planta, todavia, em um ambiente real a condutância de tunelamento depende de diversos parâmetros intrínsecos à amostra e ao STM.

2.2 Modos de Operação do STM

2.2.1 Modo de Corrente Constante

O modo de operação da corrente constante é o mais empregado quando se deseja avaliar a topografia da superfície. Nesse caso, assegura-se que a corrente de tunelamento seja mantida em um valor previamente determinado, algo possível devido à utilização de um circuito de controle realimentado, responsável por atuar na chamada distância ponta-amostra (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998).

O circuito mencionado anteriormente permite que a ponta possa contornar o relevo superficial da amostra ao longo do processo de varredura. O processo de construção da topografia se dá por meio da gravação do sinal elétrico que é aplicado pelo circuito no componente piezoelétrico em cada uma das posições em estudo (HAQ et al., 2014).

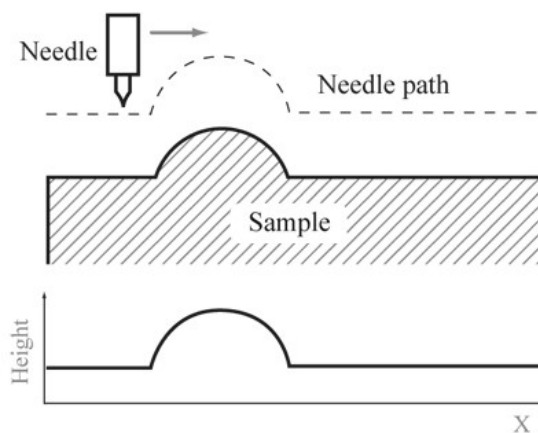


Figura 8 – Modo de operação do STM em corrente constante, a ponta de prova segue a topografia da amostra, estabilizando a corrente de tunelamento em um valor de referência (AL, 2005)

É importante mencionar que a velocidade da aquisição das imagens tem uma limitação que se dá pelo intervalo de tempo requerido para que haja a movimentação e a estabilização da ponta em cada um dos pontos amostrais. O tempo é completamente dependente da resposta do sistema de controle do piezoelétrico, assim como da inércia da movimentação do sistema piezoelétrico existente em todas as direções espaciais (MOHN et al., 2013).

2.2.2 Modo de Altura Constante

No modo de altura constante é efetuada a varredura no plano x-y com uma velocidade superior à resposta do circuito de controle realimentado. Com isso, não se consegue analisar as mudanças que ocorrem instantaneamente no relevo, algo que promove o deslocamento da ponta para um plano superior ao da amostra (WIESENDANGER; GÜNTHERODT, 1996).

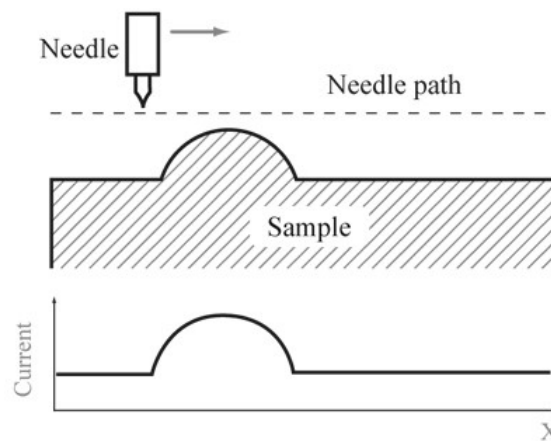


Figura 9 – Modo de operação do STM em altura constante (AL, 2005)

Na operação a altura constante tem-se a construção de uma imagem por meio do monitoramento de oscilações que ocorrem na corrente de tunelamento. Tal método pode ser utilizado somente quando se tem amostras com uma superfície contendo baixa rugosidade. Caso isso não ocorra é possível que haja a interação da ponta com as irregularidades intrínsecas à superfície, algo que, normalmente, resulta na perda da resolução ou na colisão da ponta de prova com a amostra (NIE et al., 2012).

A velocidade de aquisição de um STM no modo de altura constante é superior ao modo de corrente constante, devido ao fato de não exigir uma compensação mecânica da altura, o que torna esse modo de operação ágil para a extração da topografia de superfícies suaves (HOWLAND; BENATAR; SYMANSKI, 1998)

2.3 Posicionador Piezoelétrico

O posicionador piezoelétrico desempenha um papel fundamental na formação da imagem de um STM, por meio da manipulação precisa da ponta de prova. Esse componente, constituído por um material piezoelétrico, têm a capacidade de expandir ou contrair de forma controlada quando uma tensão é aplicada.

Por meio da aplicação de tensões precisas, o posicionador piezoelétrico permite o ajuste extremamente fino da posição da ponta de prova do STM em relação à superfície da amostra. Isso é essencial para realizar experimentos de varredura com alta precisão, onde a distância entre a ponta e a amostra deve ser mantida em escala nanométrica. Portanto, o posicionador piezoelétrico desempenha um papel crucial na capacidade do STM de investigar as propriedades das superfícies em níveis atômicos.

2.3.1 Modelo Massa-Mola-Amortecedor

O modelo massa-mola-amortecedor é uma abordagem amplamente utilizada para compreender o comportamento dinâmico de um dispositivo piezoelétrico linear. Nesse modelo, o dispositivo é representado como uma massa, que corresponde à parte móvel do dispositivo piezoelétrico, conectada a uma mola, que simboliza a rigidez da estrutura, e a um amortecedor, que representa a dissipação de energia devido ao atrito e outros fatores. Ao aplicar uma tensão no piezoelétrico, a expansão ou contração do material piezoelétrico resulta em uma força que afeta a massa, causando oscilações (MOHANTY; DWIVEDY, 2016). Esse comportamento é bem descrito pela seguinte equação:

$$m \frac{d^2 z(t)}{dt^2} + \gamma \frac{dz(t)}{dt} + kz(t) = f(t) \quad (2.10)$$

Em que $z(t)$ é o deslocamento do piezoelétrico, m é a massa do piezoelétrico, γ é o coeficiente de viscosidade do piezoelétrico, k é o coeficiente de rigidez do piezoelétrico e $f(t)$ é uma força restauradora, essa força é proveniente de excitações elétricas. Trata-se de um sistema de equações diferenciais lineares não-homogêneas de segunda ordem, em que podemos ter comportamentos oscilatórios devido a existência de transientes ou excitações na frequência de ressonância.

2.3.2 Modelo de Bouc-Wen

Durante a modelagem de um dispositivo piezoelétrico, é comum encontrar um comportamento não linear decorrente da histerese do dispositivo e outros fatores. A histerese pode ser definida como a tendência do sistema de manter suas propriedades quando ocorre uma mudança em seu estado, o que pode ser considerado uma espécie de memória do sistema. Para modelar a histerese de um dispositivo piezoelétrico, uma das opções é

utilizar o modelo de Bouc-Wen, que se destaca pela sua versatilidade em modelar uma ampla variedade de comportamentos histeréticos. (CHANG; STRANO; TERZO, 2016)

Considere a seguinte equação para modelagem da dinâmica de um dispositivo piezoelétrico restrito a movimentar-se unicamente sobre o eixo z :

$$m \frac{d^2 z(t)}{dt^2} + c \frac{dz(t)}{dt} + F(t) = f(t) \quad (2.11)$$

Em que m é a massa total do dispositivo piezoelétrico, c é o coeficiente de viscosidade, $F(t)$ é uma força restauradora e $f(t)$ é uma força excitante. A força restauradora pode ser representada por meio da seguinte equação:

$$F(t) = a \frac{F_y}{u_y} z(t) + (1 - a) F_y x(t) \quad (2.12)$$

Em que $a = \frac{k_f}{k_i}$ é a razão entre a rigidez pós-escoamento (k_f) e a rigidez pré-escoamento (k_i), F_y é a força de escoamento, u_y é o deslocamento de escoamento e $x(t)$ é uma variável histerética adimensional não observável. Essa variável é modelada conforme a seguinte equação, tendo como condição de contorno $x(0) = 0$:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{dz(t)}{dt} \left\{ A - \left[\gamma + \beta \operatorname{sign} \left(\frac{dz(t)}{dt} x(t) \right) \right] |x(t)|^n \right\} \quad (2.13)$$

Nessa equação, as variáveis A , γ , β e n são variáveis adimensionais que devem ser ajustadas para reproduzir o comportamento histerético do dispositivo piezoelétrico, a função $\operatorname{sign}(\cdot)$ é a função sinal, dada pela seguinte equação:

$$\operatorname{sign}(x) = \begin{cases} +1 & , \text{ se } x > 0 \\ 0 & , \text{ se } x = 0 \\ -1 & , \text{ se } x < 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

2.3.3 Atuadores Piezoelétricos Empilhados e Controle de Carga

Frequentemente, a presença de histerese e as restrições de deslocamento inerentes a células piezoelétricas constituem desafios substanciais no contexto do controle de sistemas que incorporam atuadores piezoelétricos. A adoção de atuadores piezoelétricos empilhados proporcionam uma redução na histerese, bem como uma redução notável no tempo de resposta e na saturação do atuador piezoelétrico. Adicionalmente, essa configuração amplia significativamente o alcance de deslocamento do atuador piezoelétrico, aprimorando o processo de posicionamento preciso de dispositivos piezoelétricos (YI; VEILLETTE, 2005; GOLDFARB; CELANOVIC, 1997; PARK et al., 1995).

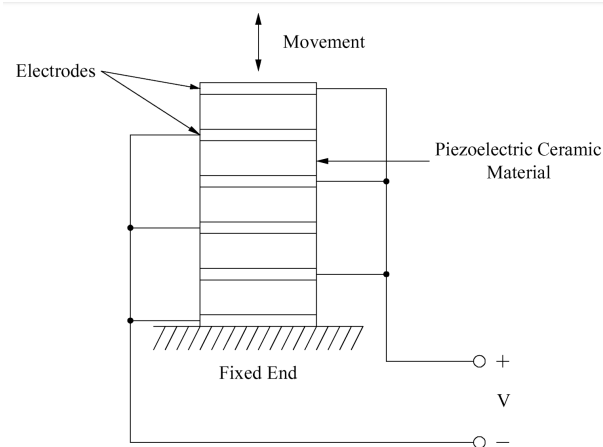


Figura 10 – Construção de um atuador empilhado. A célula piezoelétrica é fatiada em várias partes, essas células são empilhadas com a inserção de eletrodos entre elas (YI; VEILLETTE, 2005)

Uma estratégia eficaz para mitigar os efeitos da histerese e alcançar um comportamento linear no posicionamento preciso de um dispositivo piezoelétrico envolve a substituição do controle de tensão por controle de carga no atuador piezoelétrico. Esse controlador pode ser implementado em um circuito utilizando amplificadores operacionais, capacitores e resistores.

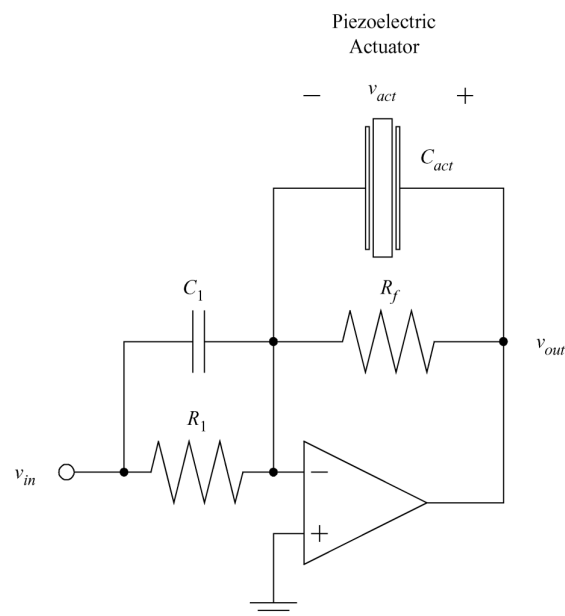


Figura 11 – Circuito de um sistema controlador de carga, os resistores possibilitam a realimentação do sinal DC no circuito (YI; VEILLETTE, 2005)

A função de transferência do circuito da Fig. 11 é dada pela Eq.2.15.

$$H(s) = \frac{v_{out}}{v_{in}} = -\frac{R_f}{R_1} \frac{R_1 C_1 s + 1}{R_f C_{act} s + 1} \quad (2.15)$$

Geralmente, em aplicações que envolvem o posicionamento preciso de dispositivos piezoelétricos, há um circuito amplificador de alta tensão para atenuar a influência dos ruídos do sistema no posicionamento do atuador piezoelétrico. Outro ponto de melhoria é a adição de um compensador de avanço de fase, cuja função nesse sistema é melhorar a estabilidade comprometida pelo circuito amplificador de tensão.

3 Embasamento Teórico das Redes Neurais Artificiais

As redes neurais artificiais (RNAs) são amplamente utilizadas em sistemas de controle devido a sua capacidade de aprendizado e de adaptação em ambientes com uma dinâmica complexa e não-linear e também pela sua capacidade de capturar relações complexas entre os dados, o que permite uma melhor modelagem da realidade subjacente às informações. Ao contrário dos sistemas de controle clássicos, que geralmente utilizam modelos matemáticos mecanicistas, as RNAs aprendem diretamente a partir dos dados do processo, permitindo que o controlador se adapte às mudanças na dinâmica do sistema e em sua operação (AGGARWAL, 2018).

Além disso, a evolução dos algoritmos de treinamento dessas redes, bem como a disponibilidade de computadores mais poderosos, têm permitido a sua aplicação em uma ampla variedade de problemas, como em problemas de classificação, de processamento de linguagem natural, de processamento e análise de imagens e de recomendações de conteúdos. Apesar dos avanços alcançados, ainda há desafios a serem superados no desenvolvimento e aplicação dessas redes, como a falta de interpretabilidade de suas saídas e a necessidade de grandes quantidades de dados para o seu treinamento.

As RNAs são frequentemente concebidas como estruturas capazes de aprenderem uma função de mapeamento entre entradas em \mathbb{R}^m e saídas em \mathbb{R}^n . É amplamente reconhecido que elas são excelentes aproximadores de funções, incluindo funções não lineares. Isso é apoiado pelo teorema de Cybenko (CYBENKO, 1989), que afirma a possibilidade de aproximar uma função limitada com um erro arbitrariamente pequeno usando uma RNA com uma única camada oculta e a função sigmóide como função de ativação.

O Teorema de Representação de Arnold-Kolmogorov estabelece que qualquer função multivariada contínua pode ser aproximada através da superposição de duas funções univariadas contínuas (SCHMIDT-HIEBER, 2020). Esse teorema tem importantes implicações para o uso de RNAs, que podem ser consideradas como uma combinação de funções não lineares univariadas, para aproximar funções multivariadas desconhecidas. Assim, esse teorema fornece um fundamento teórico para a utilização de RNAs na aproximação de funções multivariadas.

3.1 Topologia de uma Rede Neural Artificial

As RNAs são técnicas computacionais que se inspiram nas estruturas neurais presentes em organismos dotados de sistemas nervosos, baseando-se em modelos matemáticos

que representam a dinâmica desse sistema de forma simplificada (AGGARWAL, 2018; ES-FANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022). Para se compreender o funcionamento das RNAs, é importante partir do estudo de seu componente fundamental, o neurônio artificial. O objetivo deste elemento é imitar o comportamento de um neurônio biológico, a estrutura de um neurônio artificial pode ser visualizado na Fig. 12.

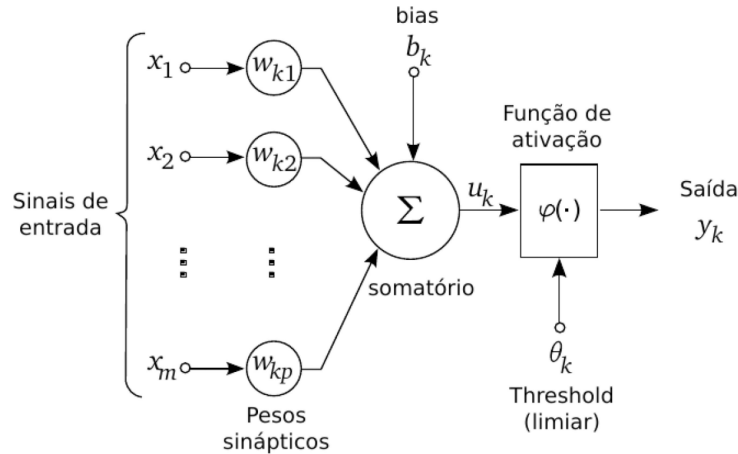


Figura 12 – Modelo de um neurônio artificial (HAYKIN, 2005)

O neurônio artificial é composto por sinais de entrada, conexões sinápticas, uma conexão de viés (*bias*), um somador e uma função de ativação, conforme ilustra a Fig. 12. A operação inicial consiste na multiplicação de cada entrada pelo seu peso sináptico correspondente. Em seguida, realiza-se a soma dos produtos resultantes desta operação, junto ao viés do neurônio, conforme a Eq. 3.1.

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j + b_k \quad (3.1)$$

A saída do neurônio, dada por $y_k = \phi(u_k)$, é obtida após a aplicação da função de ativação $\phi(\cdot)$ na variável u_k computada. Normalmente, utilizam-se as funções: sigmoide, tangente hiperbólica, Rectified Linear Unit (ReLU) e Leaky ReLU, como funções de ativação, essas funções estão ilustrada na Fig. 13.

Com mais neurônios e mais camadas são construídas RNAs com maiores complexidades, o modelo mais genérico é a rede neural feedforward, conforme ilustra a Fig. 14. Nessa arquitetura, o pesos sinápticos são descritos pela notação $w_{ij}^{(n)}$, em que j é o índice do neurônio de saída, i é o índice neurônio de destino, e (n) é a localização da camada. No caso da Fig. 14, há uma camada de entrada dada pelas entradas x_n , as camadas ocultas $h^{(1)}$ e $h^{(2)}$ e a camada de saída dada pelo neurônio y_1 .

A escolha da topologia adequada para uma tarefa específica é um aspecto importante na aplicação de redes neurais artificiais (RNA). Entre as várias topologias disponíveis, destacam-se as redes neurais *feedforward* (FNN), as máquinas de Boltzmann,

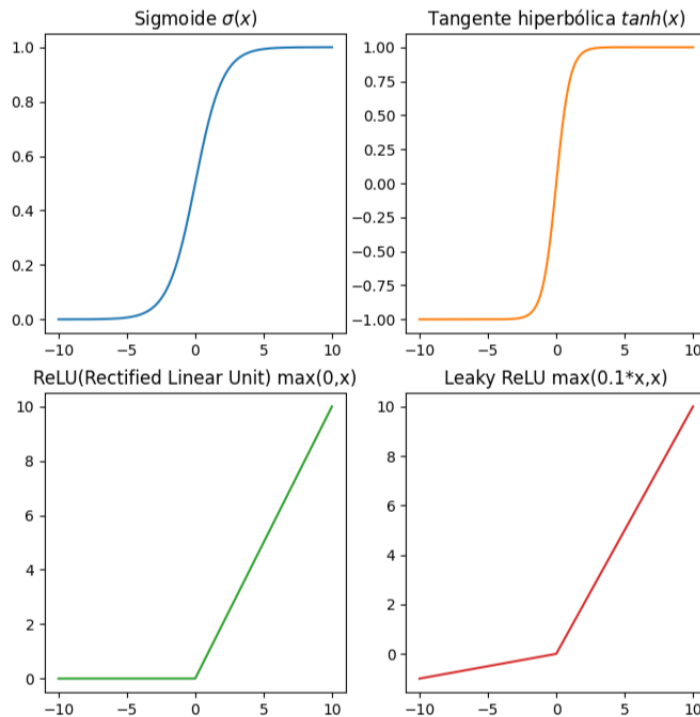


Figura 13 – Funções de ativação: sigmoide, tangente hiperbólica, ReLU e Leaky ReLU

os Autoencodificadores, as redes neurais convolucionais (CNN) e as redes neurais recorrentes (RNN). Essas topologias podem ser empregadas em diversos problemas, como em problemas de classificação binária, classificação multiclasse, regressão, redução de dimensionalidade e sistemas de recomendação.

Antes de iniciar o processo de aprendizagem, são necessárias algumas etapas prévias para garantir a eficácia do treinamento da rede. Estas etapas incluem a seleção de dados de treinamento adequados, a definição da arquitetura da rede, a escolha do algoritmo de aprendizagem, a inicialização dos pesos da rede, a configuração dos hiper-parâmetros e dos métodos de regularização (AGGARWAL, 2018).

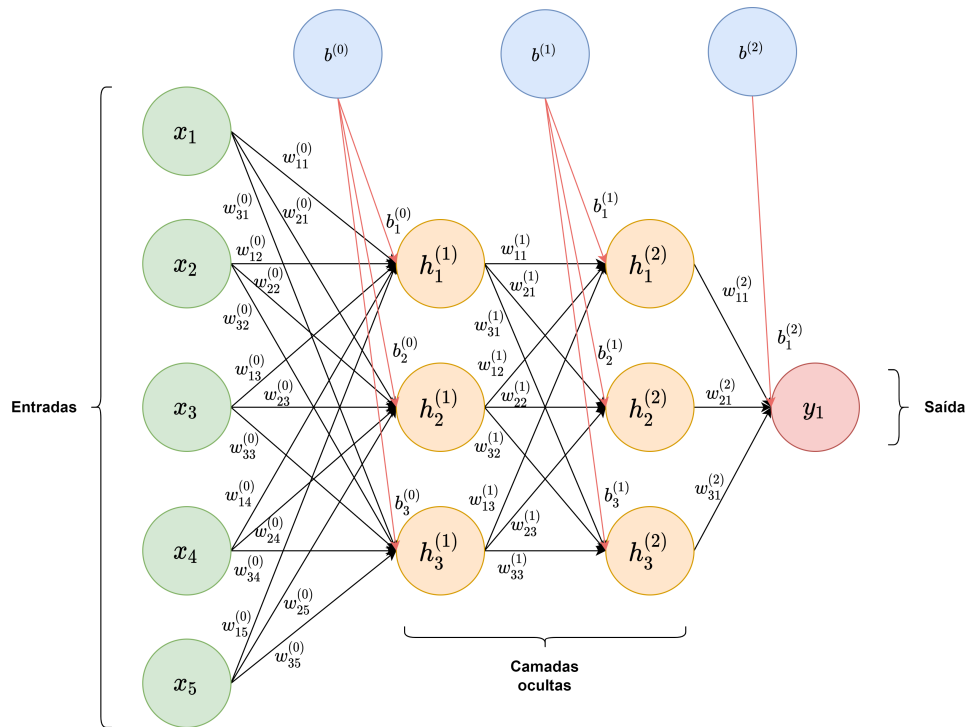


Figura 14 – Rede neural feedforward com 5 entradas, 2 camadas ocultas com 3 neurônios e uma entrada de viés(em azul) cada e uma camada de saída com 1 neurônio e uma entrada de viés

3.2 Aprendizagem de uma Rede Reural

A problemática relacionada à aprendizagem das redes neurais pode ser resolvida por meio de três principais abordagens: a aprendizagem supervisionada, a aprendizagem não-supervisionada e a aprendizagem por reforço, conforme ilustra a Figura 15. Cada uma dessas técnicas apresenta suas próprias aplicações e desafios, a escolha da técnica mais apropriada depende do tipo de problema que está sendo abordado (SAH, 2020).

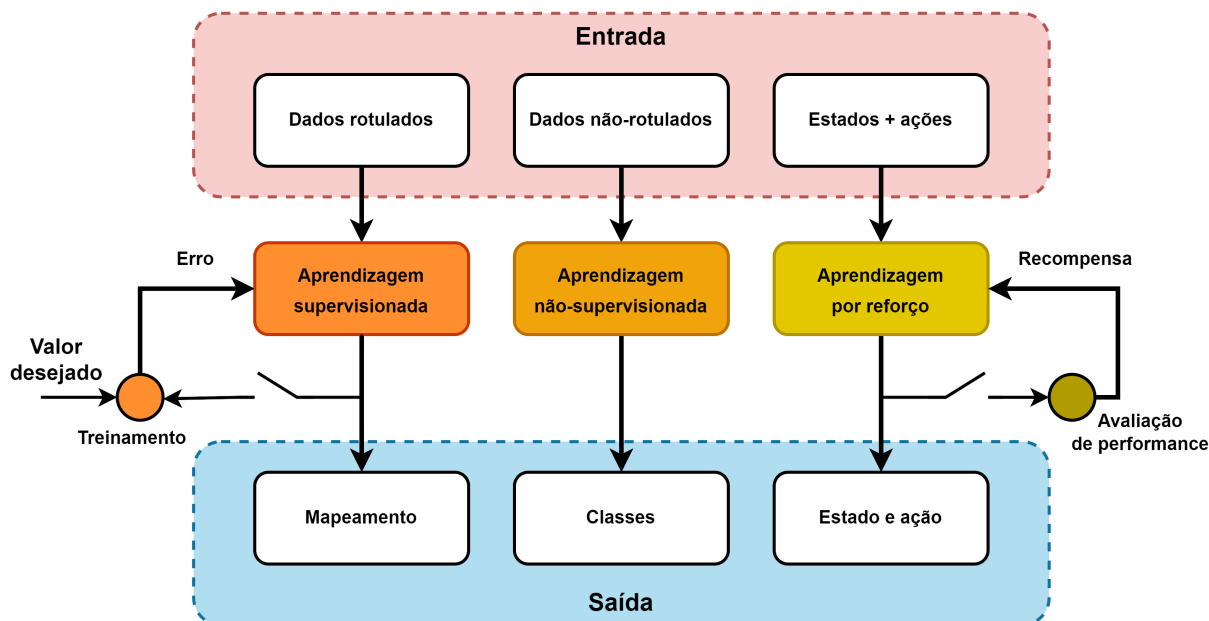


Figura 15 – Tipos de aprendizagem

Além das três técnicas mencionadas anteriormente, é possível identificar outras abordagens de aprendizagem conhecidas como abordagens híbridas, como a aprendizagem semi-supervisionada, a aprendizagem auto-supervisionada e a aprendizagem autodidata. Essas técnicas empregam uma combinação de aprendizagem supervisionada e não supervisionada para realizar previsões e rotular os dados. Em resumo, as abordagens híbridas constituem uma estratégia promissora para lidar com problemas complexos de aprendizagem de máquina, especialmente quando há restrições de recursos ou dados rotulados (SAH, 2020).

3.2.1 Aprendizagem Supervisionada

A aprendizagem supervisionada é uma técnica de aprendizado de máquina que utiliza exemplos rotulados para treinar um modelo. O processo de treinamento envolve alimentar o modelo com um conjunto de dados de entrada e saída rotulados, para que ele possa aprender a mapear da melhor forma os dados de entrada para as saídas desejadas. Esse tipo de aprendizagem é muito comum em problemas de regressão e classificação de dados.

Em redes neurais, existem duas formas de aprendizagem supervisionada: a aprendizagem online e a aprendizagem offline. Na aprendizagem online, os dados de entrada são fornecidos à rede sequencialmente e os pesos são ajustados de forma correspondente. Em contraste, na aprendizagem offline, os dados de entrada são enviados em lotes e os pesos são ajustados em conformidade.

Os sistemas de controle baseados em redes neurais são frequentemente empregados

quando a função de transferência da planta não é conhecida. Nesses casos, a aprendizagem *online* é uma abordagem comum para aprender a dinâmica da planta e controlá-la, por meio do ajuste dos pesos das redes neurais que compõe o sistema, a partir da aplicação de diversas entradas.

A aprendizagem online é particularmente útil em situações em que os parâmetros do sistema podem mudar com o tempo ou não são conhecidos com precisão, permitindo a adaptação contínua do controle da planta. No entanto, é importante ressaltar que a aprendizagem online requer cuidados especiais para garantir a estabilidade do sistema, já que os ajustes dos pesos da rede neural são realizados em tempo real e podem levar a mudanças abruptas no comportamento do sistema de controle. Nesse sentido, são necessárias implementações de técnicas adequadas para garantir a robustez e a estabilidade do sistema de controle baseado em RNAs.

3.2.2 Aprendizagem Não-Supervisionada

A aprendizagem não-supervisionada é uma técnica de aprendizado de máquina que utiliza exemplos não rotulados para treinar um modelo. O processo de treinamento envolve alimentar o modelo com dados de entrada não rotulados e permitir que ele descubra por conta própria padrões e estruturas nos dados. O objetivo é descobrir padrões e estruturas nos dados de entrada, sem informação prévia sobre o que o modelo deve aprender. Esse tipo de aprendizagem é bastante comum em problemas de clusterização e em sistemas de recomendação.

3.2.3 Aprendizagem por Reforço

A aprendizagem por reforço é uma técnica de aprendizado de máquina em que um modelo, denominado de agente, aprende a tomar decisões com base em um sistema de recompensa e punição. O processo de treinamento envolve alimentar o modelo com um ambiente simulado, geralmente utilizando a abordagem de repetição de experiência, permitir que ele interaja com o ambiente tomando ações e recebendo recompensas ou punições em resposta, vide Fig. 16. O objetivo é treinar o modelo para tomar decisões que maximizem uma recompensa ao longo do tempo. Esse tipo de aprendizagem é muito utilizado em problemas de robótica e automação.

3.3 Ajuste dos Pesos pelo Método *Backpropagation*

Uma das formas de se realizar o ajuste de pesos de uma rede neural é utilizando o algoritmo *Backpropagation* ou retropropagação do erro, esse algoritmo consiste em otimizar uma função de custo, com o método do gradiente descendente. Normalmente, em problemas de regressão, utiliza-se como função de custo o *Mean Squared Error*(MSE) ou

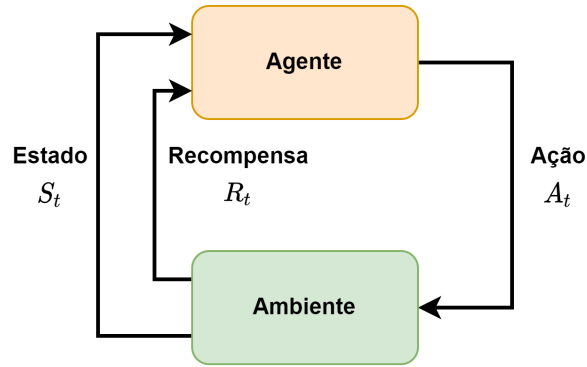


Figura 16 – Sistema simplificado de aprendizagem por reforço

erro médio quadrático, o *Mean Absolute Error* (MAE), essas funções podem ser vistas nas Eqs. 3.2 e 3.3, respectivamente.

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n} \quad (3.2)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |\hat{y}_i - y_i|}{n} \quad (3.3)$$

Para realizar a otimização dessa função de custo, denotada pela função $C(\hat{y}, y)$, em que \hat{y} é o valor predito pela rede neural e y é o valor real. Usualmente utiliza-se o algoritmo de gradiente descendente, que consiste em atualizar os pesos sinápticos e os vieses da rede baseado na influência desses para o erro de classificação. Conforme as Equações 3.4 e 3.5, em que α é a taxa de aprendizagem, não necessariamente restrita a ser uma constante, podendo alterar-se durante o treinamento, por exemplo na taxa de aprendizagem com decaimento exponencial.

$$w_{ij}^{(n)} := w_{ij}^{(n)} - \alpha \frac{\partial C(\hat{y}, y)}{\partial w_{ij}^{(n)}} \quad (3.4)$$

$$b_i^{(n)} := b_i^{(n)} - \alpha \frac{\partial C(\hat{y}, y)}{\partial b_i^{(n)}} \quad (3.5)$$

4 Embasamento Teórico dos Sistemas de Controle

4.1 Controle Digital

Com a evolução dos computadores digitais, o custo de implementar sistemas de controle mais precisos, robustos e flexíveis diminuíram. Atualmente, é possível implementar sistemas em minicomputadores que anteriormente necessitavam de computadores de alto custo ou de circuitos eletrônicos com uma miríade de componentes (NISE, 2013; FRANKLIN; POWELL; WORKMAN, 1997).

Os principais benefícios da utilização do controle digital envolvem a flexibilidade de desenvolver o sistema de controle, a redução do custo com componentes físicos, a facilidade de armazenar o histórico de atuação do controlador, a redução de ruídos e a atenuação de interferências.

Frequentemente, a representação discreta de uma função contínua é realizada utilizando um amostrador ideal, que pode ser descrito pela seguinte equação:

$$f[k] = f^*(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kT)\delta(t - kT) \quad (4.1)$$

Além disso, também são utilizados sistemas capazes de reter em sua saída a última amostra obtida, como no caso do *Zero Order Hold*(ZOH), que é posicionado em cascata com um amostrador, com o propósito de propiciar a interação com um sistema contínuo, mediante uso de uma função discretizada.

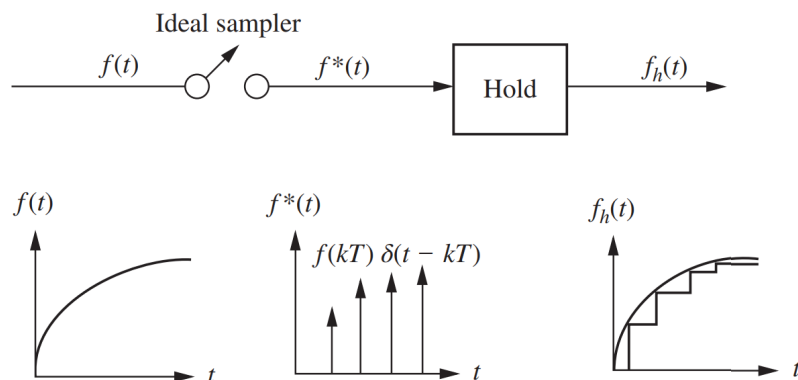


Figura 17 – Diagrama de um *Zero Order Hold*, esse sistema *Zero Order Hold*(ZOH) retém o último valor amostrado de uma função contínua

A função de transferência do ZOH é dado pela seguinte equação:

$$G_h(s) = \frac{1 - e^{-Ts}}{s} \quad (4.2)$$

Outro aspecto relevante, para a representação discreta de funções contínuas, é a utilização do método de Euler, em que $f(t)$ é uma função contínua, T é a taxa de amostragem, k é um número inteiro e $f[k]$ é a representação amostrada da função contínua supracitada.

$$\dot{f}(t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\delta f(t)}{\delta t} \quad (4.3)$$

$$\dot{f}[k] \approx \frac{f[k+1] - f[k]}{T} \quad (4.4)$$

Essa representação pode ser utilizada no lugar das derivadas de uma equação dinâmica contínua, assim essa equação dinâmica pode ser representada de forma discretizada. Essas equações são conhecidas como equação das diferenças e podem ser resolvidas de forma iterativa por um computador digital em passos de tamanho T .

4.1.1 Transformada Z

A transformada Z, uma técnica matemática, permite que sinais discretos sejam analisados e manipulados no domínio da frequência, facilitando a compreensão das características dos sistemas, como estabilidade, resposta em frequência e comportamento transitório. Paralelamente, a transformada Z é imprescindível para formulações e para soluções de equações de diferenças que descrevem sistemas lineares invariantes no tempo (LTI).

A transformada Z unilateral é obtida por meio da aplicação da transformada de Laplace unilateral na Eq. 4.1:

$$F^*(s) = \sum_{k=0}^{\infty} f(kT)e^{-kTs} \quad (4.5)$$

Considerando $z = e^{Ts}$, podemos representar a Eq. 4.5 na forma:

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f[k]z^{-k} \quad (4.6)$$

Desse modo, dado uma representação geral de um sistema LTI discreto:

$$a_n y[n] + a_{n-1} y[n-1] + \dots + a_{n-k} y[n-k] = b_n x[n] + b_{n-1} x[n-1] + \dots + b_{n-l} x[n-l] \quad (4.7)$$

Em que y e x representam, respectivamente, a saída e a entrada do sistema. É possível representar essa equação de forma simplificada por meio da transformada Z:

$$Y(z)(a_n + a_{n-1}z^{-1} + \dots + a_{n-k}z^{-k}) = X(z)(b_n + b_{n-1}z^{-1} + \dots + b_{n-l}z^{-l}) \quad (4.8)$$

Manipulando a equação para obter a função de transferência $H(z) = \frac{Y(z)}{X(z)}$:

$$H(z) = \frac{Y(z)}{X(z)} = \frac{b_n + b_{n-1}z^{-1} + \dots + b_{n-l}z^{-l}}{a_n + a_{n-1}z^{-1} + \dots + a_{n-k}z^{-k}} \quad (4.9)$$

A representação da função de transferência no domínio Z é útil nas implementações digitais de sistemas dinâmicos discretos, pois permitem uma modelagem simplificada dos sistemas em questão, devido aos índices nas variáveis " z " denotarem os estados anteriores da saída e entrada do sistema.

4.2 Controle com Filtros FIR

Um filtro *Finite Impulse Response*(FIR) ou filtro de resposta finita ao impulso é um filtro não recursivo, habitualmente causal, cuja principal característica é possuir uma resposta de duração finita ao impulso, ou seja, a resposta do sistema decai para zero ao longo do tempo.

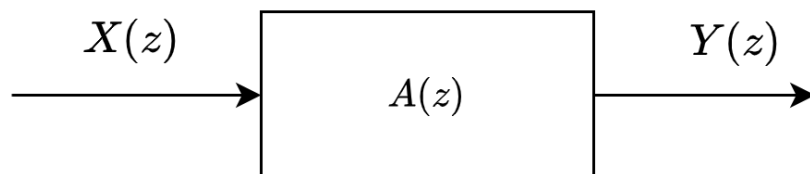


Figura 18 – Diagrama de blocos de um filtro FIR, a função $A(z)$ não possui polos

A função de transferência desse filtro é dada por:

$$A(z) = \frac{Y(z)}{X(z)} = (b_0 + b_1z^{-1} + \dots + b_Nz^{-N}) \quad (4.10)$$

Analisando a função de transferência desse filtro, observa-se que ela não possui pólos, somente zeros. Portanto, esse filtro é estável, caso as entradas sejam limitadas.

4.3 Controle com Filtros IIR

Um filtro *Infinite Impulse Response*(IIR) ou filtro de resposta infinita ao impulso é um filtro recursivo, habitualmente causal, cuja principal característica é possuir uma

resposta de duração infinita ao impulso, ou seja, o sistema continua a responder, devido à característica de realimentação da saída do filtro, caso o filtro seja estável a resposta tende a zero, caso contrário tende ao infinito.

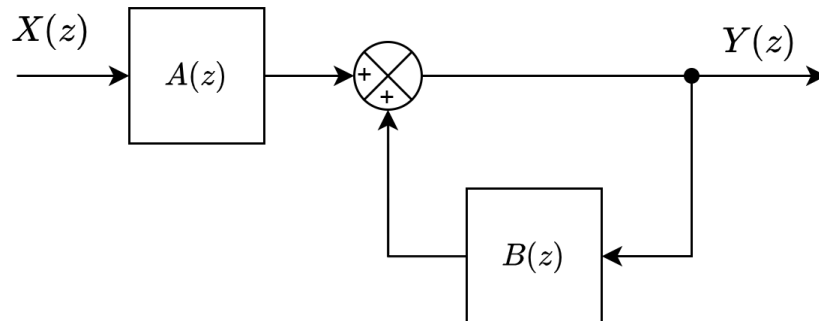


Figura 19 – Diagrama de blocos um filtro IIR, as funções de $A(z)$ e $B(z)$ possuem não possuem polos

A função de transferência desse filtro pode ser obtida utilizando a seguinte manipulação algébrica:

$$\begin{aligned}
 Y(z) &= X(z)A(z) + Y(z)B(z) \\
 Y(z)(1 - B(z)) &= X(z)A(z) \\
 \frac{Y(z)}{X(z)} &= \frac{A(z)}{1 - B(z)}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Como esse filtro é causal, é necessário impor que a saída de $B(z)$ é dada somente pela resposta dos estados passados de $Y(z)$, resultando em uma função de transferência da forma:

$$H(z) = \frac{a_0 + a_1z^{-1} + a_2z^{-2} + \dots + a_Nz^{-N}}{1 - b_1z^{-1} - b_2z^{-2} - \dots - b_Mz^{-M}} \tag{4.12}$$

Analisando a função de transferência desse filtro, observa-se que ela possui pólos e zeros. Portanto, esse filtro pode ser instável, caso os pólos desse filtro não estejam localizados dentro do círculo de raio unitário no plano- z ($|z| < 1$).

4.4 Controle PID

O controle PID ou controle Proporcional-Integral-Derivativo é uma técnica de controle em malha fechada, a qual envia sinais de entrada para uma planta, utilizando o erro do sinal de saída, dado pela diferença do sinal de saída e um valor desejado (NISE, 2013).

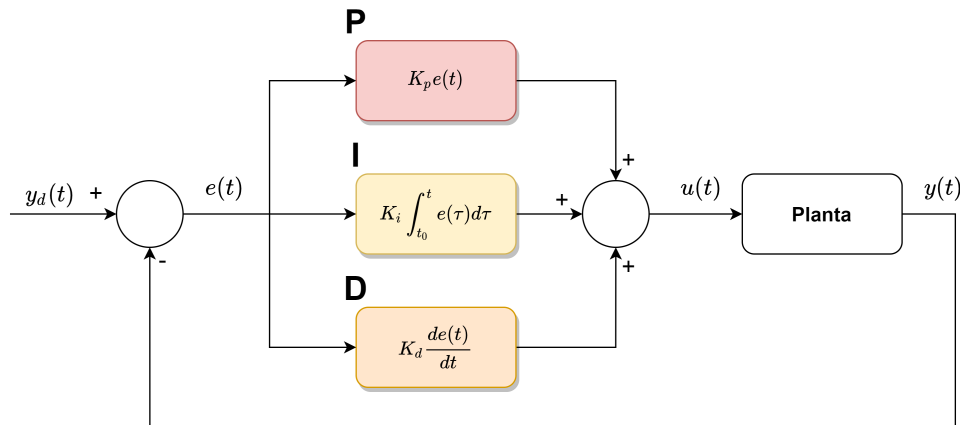


Figura 20 – Diagrama de blocos de um sistema de controle PID

O controlador é dado por três elementos principais: um elemento proporcional - responsável por atuar proporcionalmente no erro entre o valor desejado e o valor da planta, aumentando o tempo de resposta -, um componente integrativo - que atua integrando o erro ao longo do tempo, eliminando o erro acumulado ao longo do tempo - e um componente derivativo - que atua antecipando a tendência de variação do erro, de modo a prevenir oscilações indesejadas. No entanto, é importante destacar que o controle PID costuma ser eficiente quando a planta possui uma dinâmica simples. Geralmente, o controle PID é suficiente para controlar processos de até segunda ordem, com tempo morto reduzido e sem modos oscilatórios (ASTROM; HAGGLUND, 1995).

4.5 Controle Adaptativo

O controle adaptativo é um paradigma de controle que busca adaptar um sistema de controle cujos parâmetros variam, ou são inicialmente incertos. Há uma vasta quantidade de topologias de modelos de controle adaptativo, entre eles destacam-se os métodos: *Model Reference Adaptive Control* (MRAC) ou Controle Adaptativo por Modelo de Referência, Controle Adaptativo por Autoajuste, Controle Adaptativo por Controle Preditivo, Controle adaptativo por Redes Neurais Artificiais (LANDAU et al., 2013; ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022; ÅSTRÖM; WITTENMARK, 2013; SHEKHAR; SHARMA, 2018; Widrow, 2016).

Além disso, no controle adaptativo há dois tipos de abordagens, a abordagem indireta e direta. Na abordagem indireta, existe um sistema responsável por estimar os parâmetros da planta com base na sua dinâmica, na saída do controlador e na saída da planta. A partir disso, há o envio desses parâmetros para um sistema que calcula os parâmetros de ajuste e configura o controlador. Já na abordagem direta, existe um processo de ajuste do controlador com base no histórico de saída e entrada da planta, sem a necessidade de um modelo de identificação da planta (LANDAU et al., 2013; ESFANDIARI;

ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

4.5.1 Controle Adaptativo por Modelo de Referência

O Controle Adaptativo por Modelo de Referência (MRAC) consiste em encontrar uma lei de controle modificadora da função de transferência do controlador da planta, com o intuito de estimular a planta emitir um sinal de saída igual ao modelo de referência (SHEKHAR; SHARMA, 2018; Widrow, 2016).

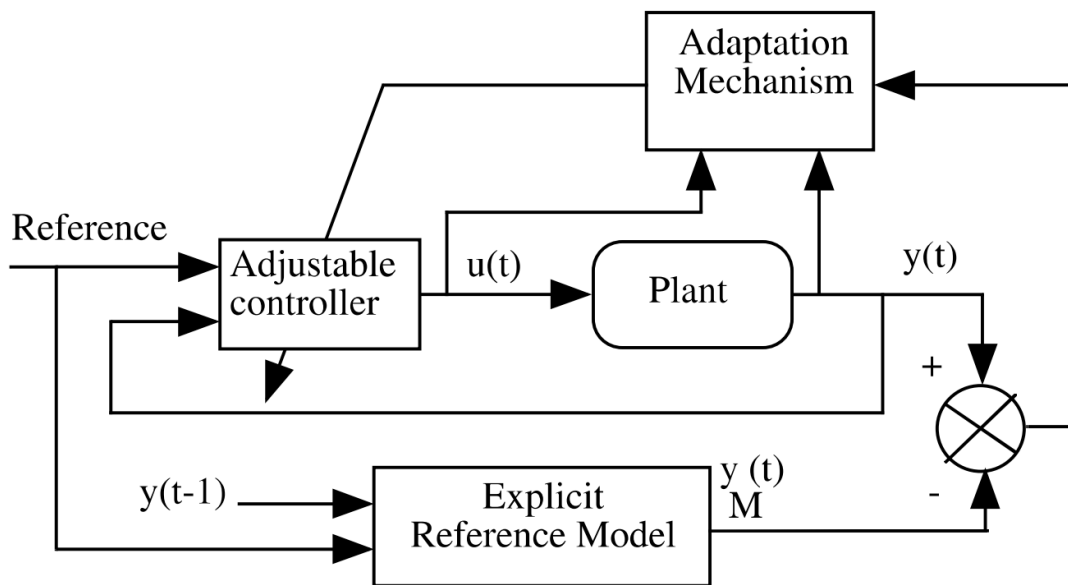


Figura 21 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo por modelo de referência (LANDAU et al., 2013)

Esse sistema é descrito de forma simplificada pelo seguinte processo iterativo:

- Aplica-se na entrada do controlador e do modelo de referência um sinal de referência
- O controlador responde ao sinal de referência e envia um sinal de controle para a planta
- Calcula-se o erro desse sistema realizando a diferença entre o sinal de saída da planta e do modelo de referência
- Por meio de um algoritmo de adaptação que utiliza as entradas, saídas e erro da planta, ajusta-se o controlador

4.5.2 Controle Adaptativo Baseado em Redes Neurais

Grande parte dos métodos de controle adaptativo exigem uma análise prévia da planta e do sistema de controle para formular "leis adaptativas" e estimar os parâmetros de adaptação do sistema, uma forma de contornar esse empecilho é por meio da utilização de redes neurais artificiais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022; Widrow, 2016).

Desse modo, com um conjunto de vetores de entrada e saída previamente computados na planta, realiza-se o treinamento de uma rede neural de controle capaz de aprender aproximadamente as leis adaptativas do sistema de controle. Os sistemas de controle adaptativo direto e indireto baseados em redes neurais podem ser visualizados nas Figs. 22 e 23.

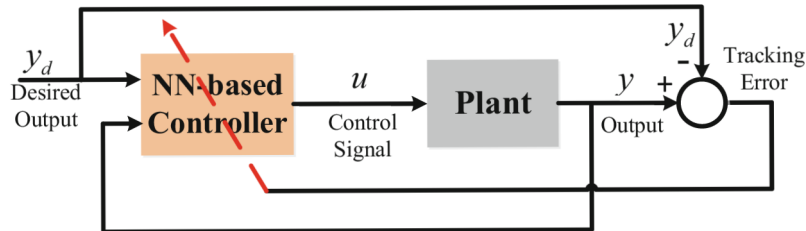


Figura 22 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo direto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

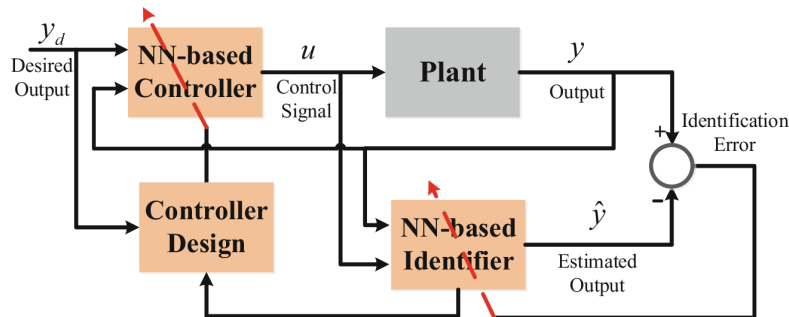


Figura 23 – Diagrama de blocos de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

No sistema direto, o controlador, respaldado em redes neurais, adapta-se de forma que o erro na saída fique em torno de zero, utilizando o erro de saída da planta. No sistema indireto, há uma etapa intermediária, um bloco identificador, que consiste em uma rede neural artificial que aprende os parâmetros e a dinâmica da planta. Após a identificação da dinâmica da planta, realiza-se o ajuste do bloco de controle baseado em uma rede neural, por meio das saídas do bloco identificador (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

No sistema de controle indireto baseado em redes neurais, destaca-se a utilização de duas abordagens de sistema identificador, conhecidas por série-paralelo e paralelo, essas

abordagens estão disponíveis nas Figs. 24 e 25.

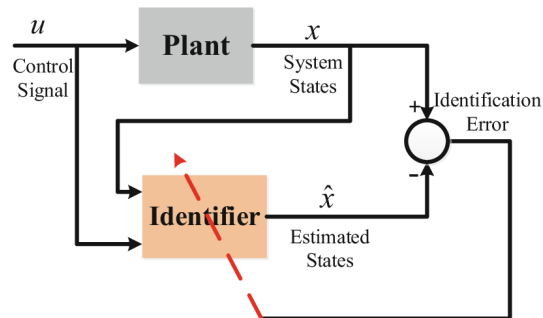


Figura 24 – Diagrama de blocos da abordagem série-paralelo de um identificador de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

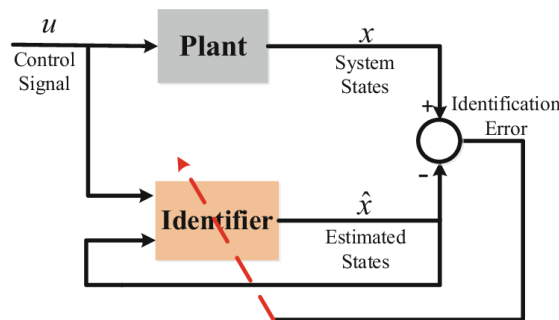


Figura 25 – Diagrama de blocos da abordagem paralelo de um identificador de um sistema de controle adaptativo indireto baseado em redes neurais (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022).

Na abordagem série-paralelo, utilizam-se todos os sinais da planta, já na abordagem paralelo, utilizam-se os sinais de entrada da planta e uma retroalimentação do próprio identificador. Frequentemente, a estabilidade da abordagem série-paralelo é superior a da abordagem paralelo, pois há um rastreamento das entradas e saídas da planta, não retroalimentando o bloco identificador. A abordagem paralelo é mais utilizada quando os estados do sistema não estão disponíveis.

A principal vantagem de sistemas de controle adaptativos indiretos em relação aos sistemas de controle adaptativos diretos é a possibilidade de estimar a dinâmica da planta em paralelo à tarefa de controle. Entretanto, a exigência de um bloco de controle identificador que aprende a dinâmica da planta aumenta a complexidade do projeto, impondo a necessidade de realizar dois treinamentos, um para o bloco de controle e o outro para o bloco identificador.

5 Materiais e Métodos

Neste estudo, foi realizada a avaliação da eficácia de diferentes abordagens de controle adaptativo baseadas em redes neurais. Foram desenvolvidos em um computador digital, utilizando a linguagem Python sobre a plataforma *Windows*, um ambiente de emulação digital da planta de um STM e os sistemas de controle adaptativo dessa planta. Utilizou-se a linguagem Python devido à ampla documentação e à existência de bibliotecas especializadas para o desenvolvimento de redes neurais artificiais e manipulação de *arrays* multidimensionais, como o PyTorch, NumPy e SciPy.

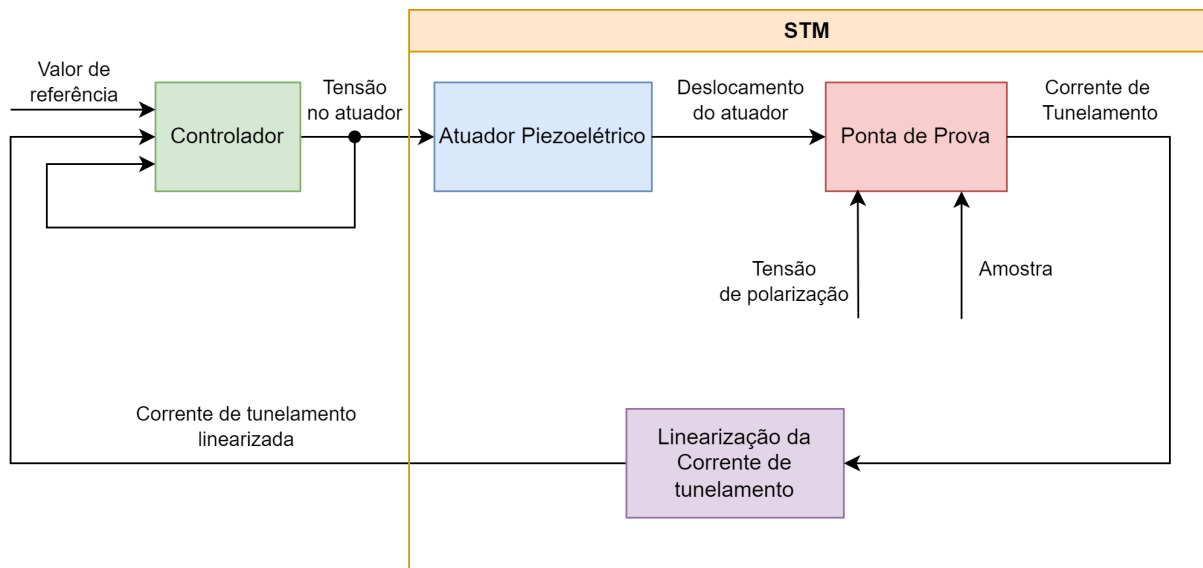


Figura 26 – Diagrama simplificado do sistema desenvolvido

5.1 Implementação do Simulador de um STM

Esse ambiente de simulação é responsável por realizar a simulação numérica do atuador piezoelétrico da ponta de prova do STM, bem como o cálculo da corrente de tunelamento e de sua respectiva linearização. Para simplificações do processo de desenvolvimento, foram considerados algumas constantes para a modelagem da planta do STM, vide Tabela 5.1, mas foi considerado que os controladores testados não utilizam nenhum conhecimento da planta.

Devido à utilização de redes neurais no processo de construção dos controladores da ponta de prova, foram desenvolvidas uma classe e uma função de ativação, na biblioteca PyTorch, que representam a planta do STM. Os algoritmos foram utilizados no método de controle com aproximação estática do gradiente, que foi definido como gradiente da

função de ativação da planta: $\frac{\partial y}{\partial u} = -\frac{1}{A_c}$. Além disso, foi desenvolvida uma função idêntica à função de ativação usando somente a biblioteca NumPy, que foi utilizada para testar as abordagens de controle adaptativo com identificador.

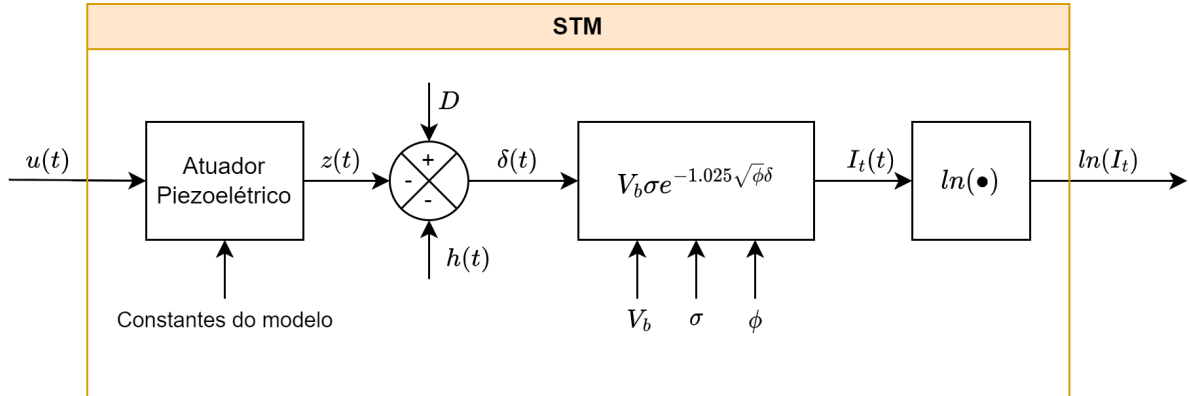


Figura 27 – Diagrama aprofundado do STM

Tabela 1 – Constantes utilizadas na simulação numérica

Constantes	Descrição	Valor
σ	Condutância da amostra	$20\Omega^{-1}$
ϕ	Função trabalho	4.7
V_b	Tensão de polarização	0.5 V
m	Massa do piezoelétrico	0.1 Kg
c	Coefficiente de viscosidade	$4Nsm^{-1}$
k_i	Coefficiente de rigidez	90
a	Razão da rigidez pós escoamento pela rigidez pós escoamento	0.95
d	Ganho do sinal de entrada	90
α	Parâmetro adimensional histerético	1
β	Parâmetro adimensional histerético	0.8
γ	Parâmetro adimensional histerético	0.2
n	Parâmetro adimensional histerético	2

A emulação da dinâmica do atuador piezoelétrico foi realizada através do modelo de Bouc-Wen, utilizando o método de Euler, com passos $dT = 10^{-3}s$, para solucionar o conjunto de equações a seguir:

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1(t) &= x_2(t) \\
 \dot{x}_2(t) &= \frac{1}{m} (du(t) + -cx_2(t) - ak_i x_1(t) - (1 - a)k_i x_3(t)) \\
 \dot{x}_3(t) &= x_2(t) (\alpha - [\beta \text{sign}(x_2(t)x_3(t)) + \gamma] |x_3(t)|^n)
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Em que $x_1(t)$ é a posição do atuador piezoelétrico ($z(t)$), $x_2(t)$ é a velocidade do atuador piezoelétrico ($\dot{z}(t)$), $x_3(t)$ é uma variável não-observável da histerese do atuador piezoelétrico e $du(t)$ é um sinal de entrada ao atuador, na Eq. 2.11 é representado por $f(t)$.

Após a obtenção da posição $z(t)$ do atuador piezoelétrico, realizou-se o cálculo da distância da ponta de prova até a amostra, por meio da expressão $\delta(t) = D - z(t) - h(t)$, em que $\delta(t)$ é a distância da ponta de prova à amostra, D é uma distância de offset do atuador piezoelétrico, $z(t)$ é o deslocamento do piezoelétrico e $h(t)$ é a altura em que se encontra 90% da densidade de estados eletrônicos da amostra. Com a distância da amostra à ponta de prova, calculou-se a corrente de tunelamento por meio da Eq. 2.9 e realizou-se a sua linearização aplicando o logaritmo natural na corrente de tunelamento, obtendo:

$$\ln(I_t) = \ln(\sigma V_b) - 1.025\sqrt{\phi\delta} \quad (5.2)$$

Nas simulações, as funções $h(t)$ e $h(x)$ consideradas para a adaptação dos controladores representam a altura em função do tempo e da posição, conforme as equações 5.3 e 5.4. Em que T é o tempo de simulação [s], n é a quantidade de átomos varridos e L é o comprimento de varredura [Å], como mostrado na Fig. 28.

$$h(t) = \sin^2\left(\frac{\pi n}{T}t\right) \quad (5.3)$$

$$h(x) = \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \quad (5.4)$$

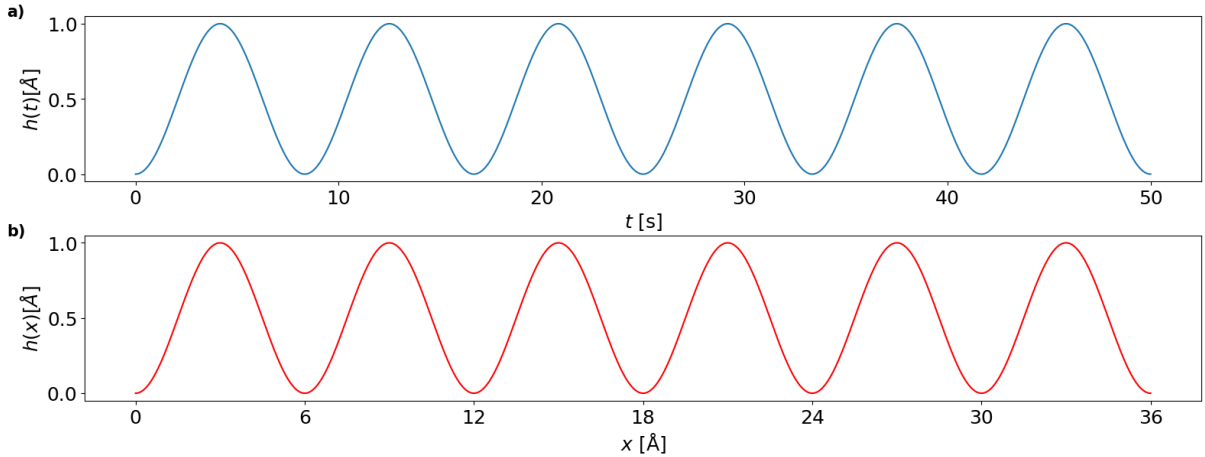


Figura 28 – Altura de uma amostra teórica com velocidade de varredura de $0,72 \text{ \AA s}^{-1}$

5.2 Implementação do Controlador PID Clássico

Para a implementação do Controlador PID Clássico, foram desenvolvidas uma função geradora personalizada e uma classe dedicada ao controlador.

A classe do controlador foi concebida com um método inicializador - que recebe como argumentos os parâmetros da planta do STM, uma taxa de amostragem e os coeficientes proporcional, integrativo e derivativo. Além disso, há um método específico para o controle da planta do STM, que recebe como argumentos a altura da amostra e uma corrente de tunelamento de referência.

Em paralelo, a função geradora foi projetada para criar um sinal de controle apropriado para o STM, o qual tenta ajustar a saída do STM para uma corrente de tunelamento de referência. Essa função geradora exerce a dinâmica de um PID discreto (FRANKLIN; POWELL; WORKMAN, 1997), descrita pelo conjunto de equações 5.5.

$$\begin{aligned}
 u_P[k] &= K_P e[k] \\
 u_I[k] &= u_I[k - 1] + K_I T_s e[k] \\
 u_D[k] &= K_D \frac{e[k] - e[k - 1]}{T_s} \\
 u[k] &= u_P[k] + u_I[k] + u_D[k]
 \end{aligned}
 \tag{5.5}$$

Em que u_P , u_I e u_D representam, respectivamente, os termos proporcional, integrativo e derivativo do erro do sistema a ser controlado. O erro do sistema a ser controlado é dado pela diferença entre o valor de saída do sistema e o valor de referência.

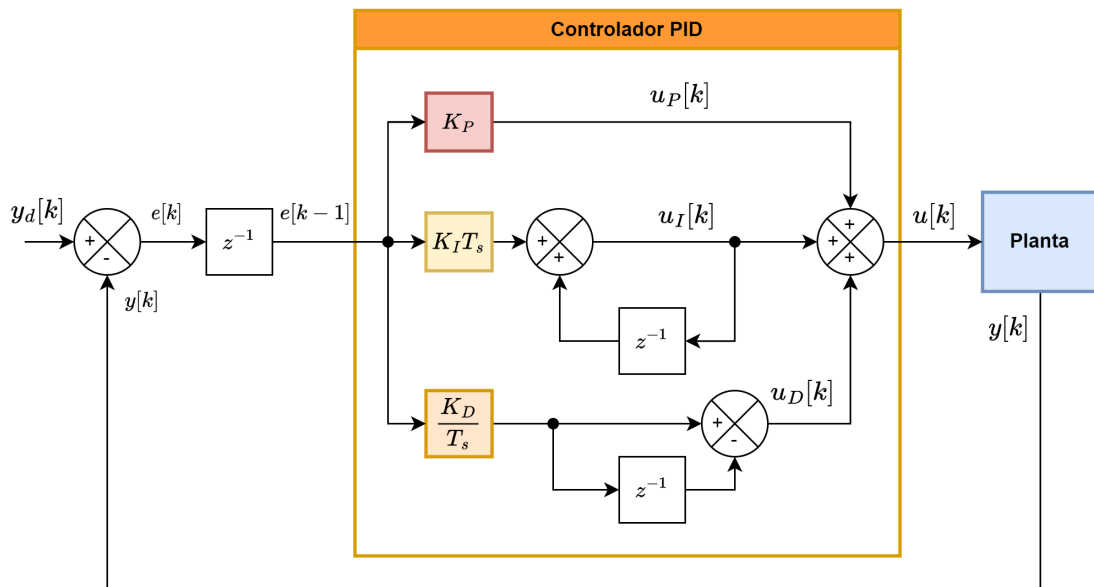


Figura 29 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Clássico

Os coeficientes do PID foram ajustados manualmente por tentativa e erro.

5.3 Implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente

Para a implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente no STM, foi desenvolvida uma classe do que implementa a rede neural artificial controladora por meio da biblioteca PyTorch. A estrutura do controlador foi projetada com base na arquitetura da Fig. 22. Entretanto, no início do processo de ajuste dos pesos da rede neural, foi adicionado um modelo de referência, que define o valor desejado da corrente de tunelamento linearizada, para aumentar a estabilidade do posicionamento da ponta de prova e para evitar a colisão da ponta de prova com a amostra. A arquitetura utilizada pode ser visualizada na Fig. 30.

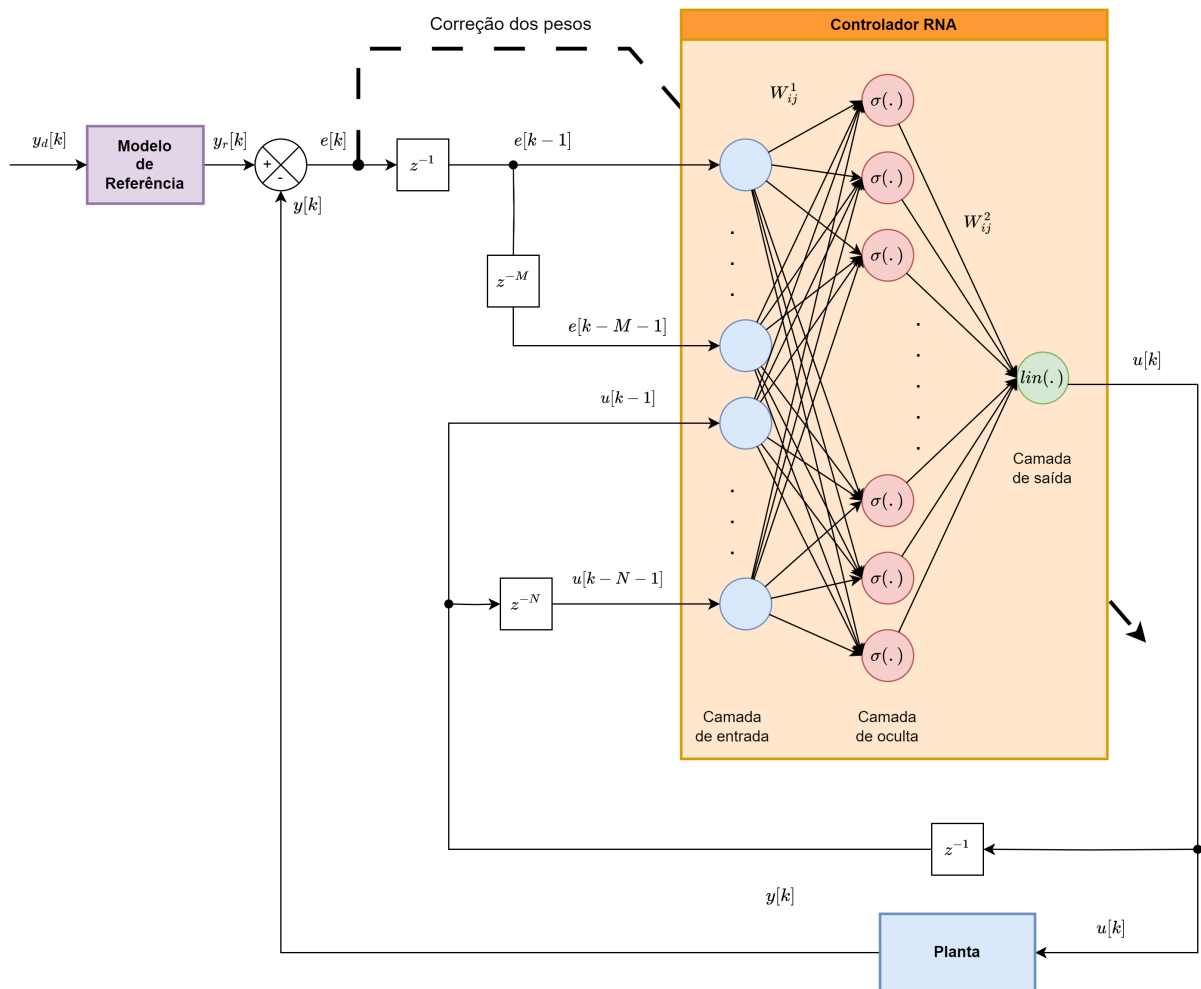


Figura 30 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente

A rede neural de controle é composta por 10 neurônios de entrada, que recebem 5 valores anteriores do erro da saída da planta com relação ao valor desejado de referência e

5 valores anteriores do sinal de entrada aplicado à planta. Ademais, é constituída por uma camada oculta com 100 neurônios com função de ativação sigmoide e por uma camada de saída com 1 neurônio com a função linear.

5.3.1 Treinamento da Rede

A função custo(\mathcal{L}) minimizada foi a função erro médio quadrático, com erro dado pela saída da planta com relação ao valor desejado de referência, conforme a Eq. 5.6.

$$\begin{aligned} e[k] &= y[k] - y_r[k] \\ \mathcal{L} &= \frac{1}{2}e[k]^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

Em que $y[k]$ é a saída da planta e $y_r[k]$ é o valor de referência.

Conforme citado na introdução desse capítulo, como foi utilizada a abordagem direta, a função da planta é desconhecida. Logo, a seguinte aproximação foi realizada $\frac{\partial y}{\partial u} = -\frac{1}{A_c}$ para representar a variação da saída da planta com o sinal de entrada (ESFANDIARI; ABDOLLAHI; TALEBI, 2022). Em que A_c é a constante de Hurwitz e no treinamento do modelo foi definida como $A_c = -1$. O ajuste dos pesos são alterados pela Eq. 5.7.

$$\begin{aligned} W_{ij}^n[k+1] &= W_{ij}^n[k] - \lambda \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e[k]} \frac{\partial e[k]}{\partial y[k]} \frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial W_{ij}^n[k]} \\ W_{ij}^n[k+1] &= W_{ij}^n[k] - \lambda e[k] \left(-\frac{1}{A_c} \right) \frac{\partial u[k]}{\partial W_{ij}^n[k]} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Para ajustar os vieses dos neurônios da rede, realiza-se de forma análoga:

$$\begin{aligned} b^n[k+1] &= b^n[k] - \lambda \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial e[k]} \frac{\partial e[k]}{\partial y[k]} \frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial b^n[k]} \\ b^n[k+1] &= b^n[k] - \lambda e[k] \left(-\frac{1}{A_c} \right) \frac{\partial u[k]}{\partial b^n[k]} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Os pesos da rede foram inicializados com valores aleatórios entre 0 e 10^{-2} . Com o objetivo de evitar sinais de entrada elevados no início do treinamento, pois a rede estava aprendendo a controlar a planta.

Foram realizados diversos testes com o controlador, verificou-se que o controlador apresenta um melhor desempenho com taxas de aprendizagem superiores a 10^{-3} , uma vez que abaixo disso o controlador apresenta instabilidades. Foi definido para a taxa de aprendizagem um valor $\lambda = 10^{-3}$.

Métodos de regularização L2 foram testados, mas a regularização não impactou de forma significativa o treinamento do controlador. Em alguns casos, quando foi utilizada a constante de regularização com valores elevados, houve divergências nas iterações de treinamento do controlador. Portanto, foi definido um valor $\nu = 0$ como a taxa de decaimento dos pesos.

5.4 Implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta

Para a implementação do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta, foram desenvolvidas duas classes: uma que implementa a rede neural artificial controladora e outra que implementa a rede neural artificial identificadora. Essas redes neurais foram desenvolvidas por meio da biblioteca PyTorch.

A estrutura do sistema de controle foi projetada com base na arquitetura da Fig. 23. No entanto, pelo mesmo motivo do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente, foi adicionado um modelo de referência ao sistema de controle, que define o valor desejado da corrente de tunelamento linearizada.

Além disso, nesse sistema temos outra rede neural artificial denominada de rede neural identificadora, cujas funções abrangem aprender a dinâmica da planta e contribuir para o ajuste dos pesos da rede neural controladora, sem precisar utilizar a aproximação $\frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} = -\frac{1}{A_c}$. Além disso, caso bem treinada, essa rede neural pode ser utilizada para simulações futuras sem necessitar da utilização de um STM físico. A arquitetura do sistema de controle utilizado pode ser visualizada na Fig. 31.

A rede neural de controle é composta por 10 neurônios de entrada, que recebem 5 valores anteriores do erro da saída da planta com relação ao valor desejado de referência e 5 valores anteriores do sinal de entrada aplicado a planta. Ademais, há uma camada oculta com 100 neurônios, com função de ativação sigmoide, e uma camada de saída com 1 neurônio com a função linear.

A rede neural identificadora é composta por 11 neurônios de entrada que recebem 5 valores anteriores do erro da saída da planta com relação ao valor predito pela rede identificadora, 5 valores anteriores do sinal de entrada aplicado a planta e 1 valor do sinal de entrada aplicado a planta. Ademais, há uma camada oculta com 50 neurônios, com função de ativação sigmoide, e uma camada de saída com 1 neurônio com a função linear.

5.4.1 Treinamento da Rede e Seleção dos Hiperparâmetros

Foram utilizadas duas funções custo (\mathcal{L}_1 e \mathcal{L}_2), em que a função custo \mathcal{L}_1 foi utilizada para treinar o controlador e a função custo \mathcal{L}_2 foi utilizada para treinar a rede

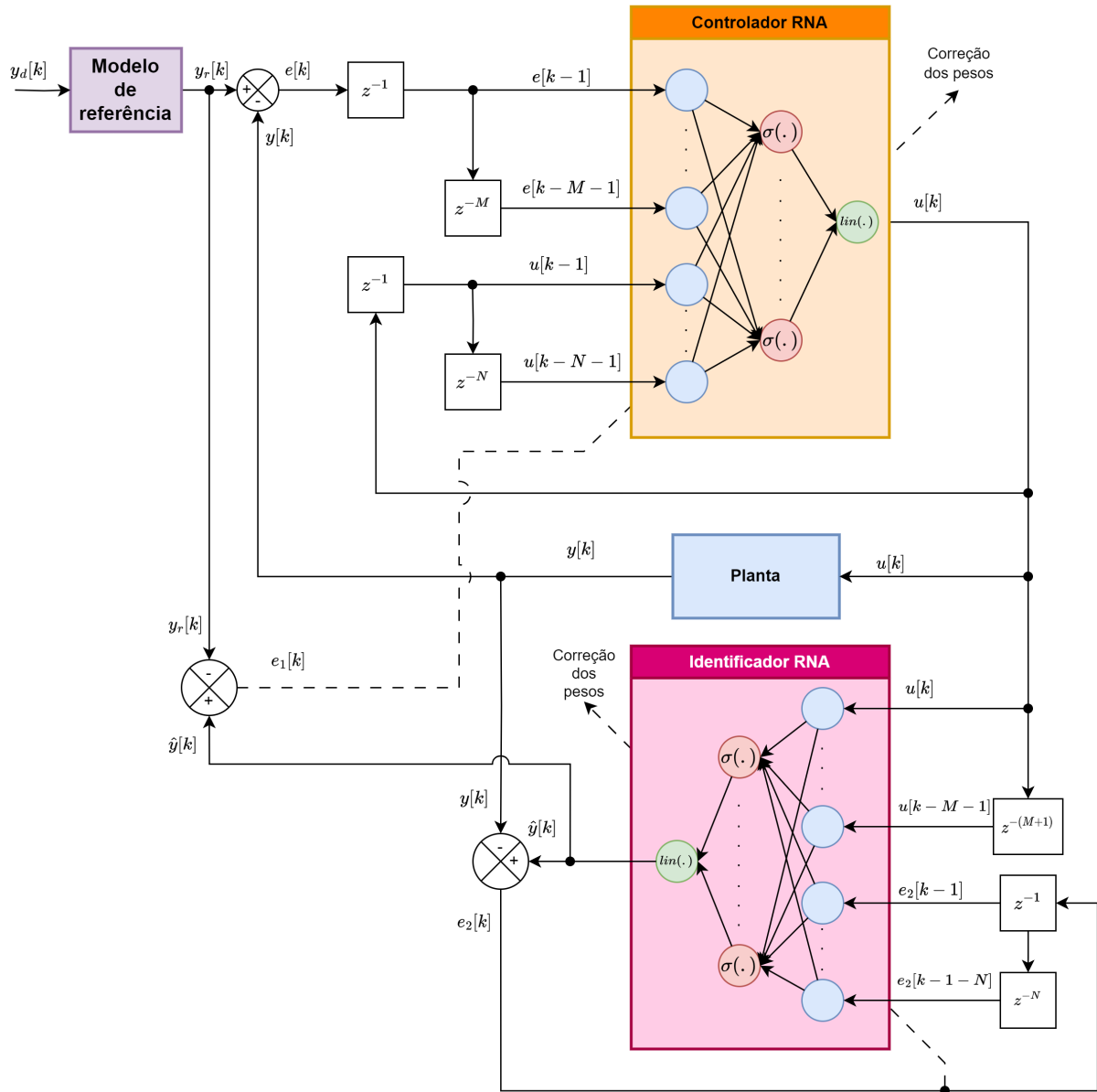


Figura 31 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta

identificadora. Em ambas funções custo, minimizou-se o erro médio quadrático, conforme a Eq. 5.9.

$$\begin{aligned}
 e_1[k] &= \hat{y}[k] - y_r[k] \\
 e_2[k] &= \hat{y}[k] - y[k] \\
 \mathcal{L}_1 &= \frac{1}{2} e_1[k]^2 \\
 \mathcal{L}_2 &= \frac{1}{2} e_2[k]^2
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

Em que $y[k]$ é a saída da planta, $y_r[k]$ é o valor de referência e $\hat{y}[k]$ é o sinal de

saída predito pela rede identificadora.

Os pesos da rede identificadora foram ajustados pela Eq. 5.10.

$$\begin{aligned} V_{ij}^n[k+1] &= V_{ij}^n[k] - \lambda_2 \frac{\partial \mathcal{L}_2}{\partial e_2[k]} \frac{\partial e_2[k]}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial V_{ij}^n[k]} \\ V_{ij}^n[k+1] &= V_{ij}^n[k] - \lambda_2 e_2[k] \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial V_{ij}^n[k]} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Para ajustar os vieses dos neurônios da rede identificadora, realiza-se de forma análoga:

$$\begin{aligned} b'_n[k+1] &= b'_n[k] - \lambda_2 \frac{\partial \mathcal{L}_2}{\partial e_2[k]} \frac{\partial e_2[k]}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial b'_n[k]} \\ b'_n[k+1] &= b'_n[k] - \lambda_2 e_2[k] \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial b'_n[k]} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Os pesos da rede controladora foram ajustados pela Eq. 5.12.

$$\begin{aligned} W_{ij}^n[k+1] &= W_{ij}^n[k] - \lambda_1 \frac{\partial \mathcal{L}_1}{\partial e_1[k]} \frac{\partial e_1[k]}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial W_{ij}^n[k]} \\ W_{ij}^n[k+1] &= W_{ij}^n[k] - \lambda_1 e_1[k] \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial W_{ij}^n[k]} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Para ajustar os vieses dos neurônios da rede controladora, realiza-se de forma análoga:

$$\begin{aligned} b_n[k+1] &= b_n[k] - \lambda_1 \frac{\partial \mathcal{L}_1}{\partial e_1[k]} \frac{\partial e_1[k]}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial b_n[k]} \\ b_n[k+1] &= b_n[k] - \lambda_1 e_1[k] \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial b_n[k]} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Os pesos da rede identificadora e controladora foram inicializados com valores aleatórios entre 0 e 10^{-2} . Com objetivo de evitar sinais de entrada elevados no início do treinamento, pois a rede está aprendendo a controlar a planta.

Foram realizados diversos testes com o controlador e a rede identificadora, verificando-se que ambas apresentaram melhores desempenhos com taxas de aprendizagem superiores a 10^{-3} , pois abaixo disso o controlador apresenta instabilidades. Foi definido um valor $\lambda_1 = \lambda_2 = 10^{-3}$ para a taxa de aprendizagem.

Métodos de regularização L2 foram testados, mas a regularização não impactou de forma significativa o treinamento de ambas as redes. Quando se utilizou a constante de

regularização com valores elevados, as iterações de treinamento apresentaram divergências em alguns casos. Portanto, foi definido um valor $\nu = 0$ como a taxa de decaimento dos pesos das redes.

5.5 Implementação do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente

Para a implementação do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, foi desenvolvido um procedimento, no qual o sistema de controle recebe o erro do sistema, ajusta os coeficientes do PID e calcula o próximo sinal de entrada.

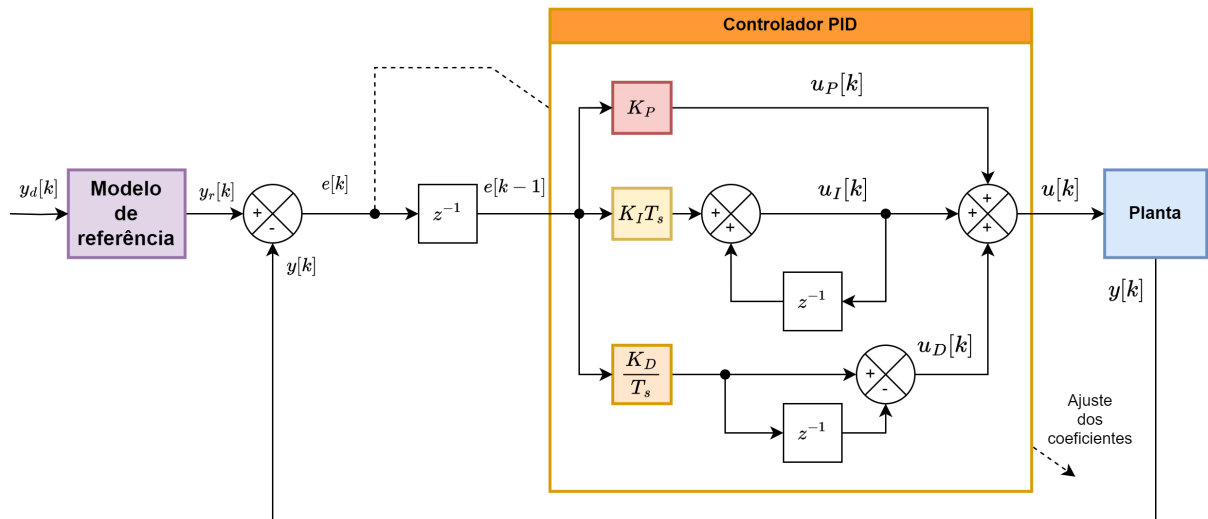


Figura 32 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente

Os sinais para cada ramo do controlador PID adaptativo foram calculados com a Eq. 5.14.

$$\begin{aligned}
 u_P[k] &= K_P e[k-1] \\
 u_I[k] &= u_I[k-1] + K_I T_s e[k-1] \\
 u_D[k] &= K_D \frac{e[k-1] - e[k-2]}{T_s} \\
 u[k] &= u_P[k] + u_I[k] + u_D[k]
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Os coeficientes do controlador foram ajustados utilizando o *Backward Propagation* com a abordagem direta. Portanto, foi utilizada a aproximação $\frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} = -\frac{1}{A_c}$ para calcular o gradiente da planta e ajustar os coeficientes do PID.

5.5.1 Ajuste dos Coeficientes

A função custo(\mathcal{L}) minimizada foi a função erro médio quadrático, com erro dado pela saída da planta com relação ao valor desejado de referência, conforme a Eq. 5.15.

$$\begin{aligned} e[k] &= y[k] - y_r[k] \\ \mathcal{L} &= \frac{1}{2}e[k]^2 \end{aligned} \quad (5.15)$$

Em que $y[k]$ é a saída da planta e $y_r[k]$ é o valor de referência.

O ajuste dos coeficientes desse PID foram realizados pelo seguinte conjunto de equações 5.16.

$$\begin{aligned} K_P[k+1] &= K_P[k] - \lambda_P \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y[k]} \frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_P[k]} \frac{\partial u_P[k]}{\partial K_P[k]} \\ K_I[k+1] &= K_I[k] - \lambda_I \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y[k]} \frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_I[k]} \frac{\partial u_I[k]}{\partial K_I[k]} \\ K_D[k+1] &= K_D[k] - \lambda_D \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y[k]} \frac{\partial y[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_D[k]} \frac{\partial u_D[k]}{\partial K_D[k]} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Calculando as derivadas parciais:

$$\begin{aligned} K_P[k+1] &= K_P[k] - \lambda_P e[k] \left(-\frac{1}{A_c} \right) e[k-1] \\ K_I[k+1] &= K_I[k] - \lambda_I e[k] \left(-\frac{1}{A_c} \right) (T_s) \{e[k-1] + e[k-2]\} \\ K_D[k+1] &= K_D[k] - \lambda_D e[k] \left(-\frac{1}{A_c} \right) \left(\frac{1}{T_s} \right) \{e[k-1] - e[k-2]\} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Os coeficientes K_P , K_I e K_D foram adaptados com diferentes taxas de aprendizagem, respectivamente, $\lambda_P = 10^{-3}$, $\lambda_I = 10^2$ e $\lambda_D = 10^{-4}$.

5.6 Implementação do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta

Para a implementação do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta no STM, foi desenvolvido um procedimento específico. Esse método consiste na recepção do erro por um sistema, no ajuste dos coeficientes de um filtro IIR identificador, no ajuste dos coeficientes do PID e no cálculo do próximo sinal de entrada.

Os sinais para cada ramo do controlador PID adaptativo foram calculados com a Eq. 5.18:

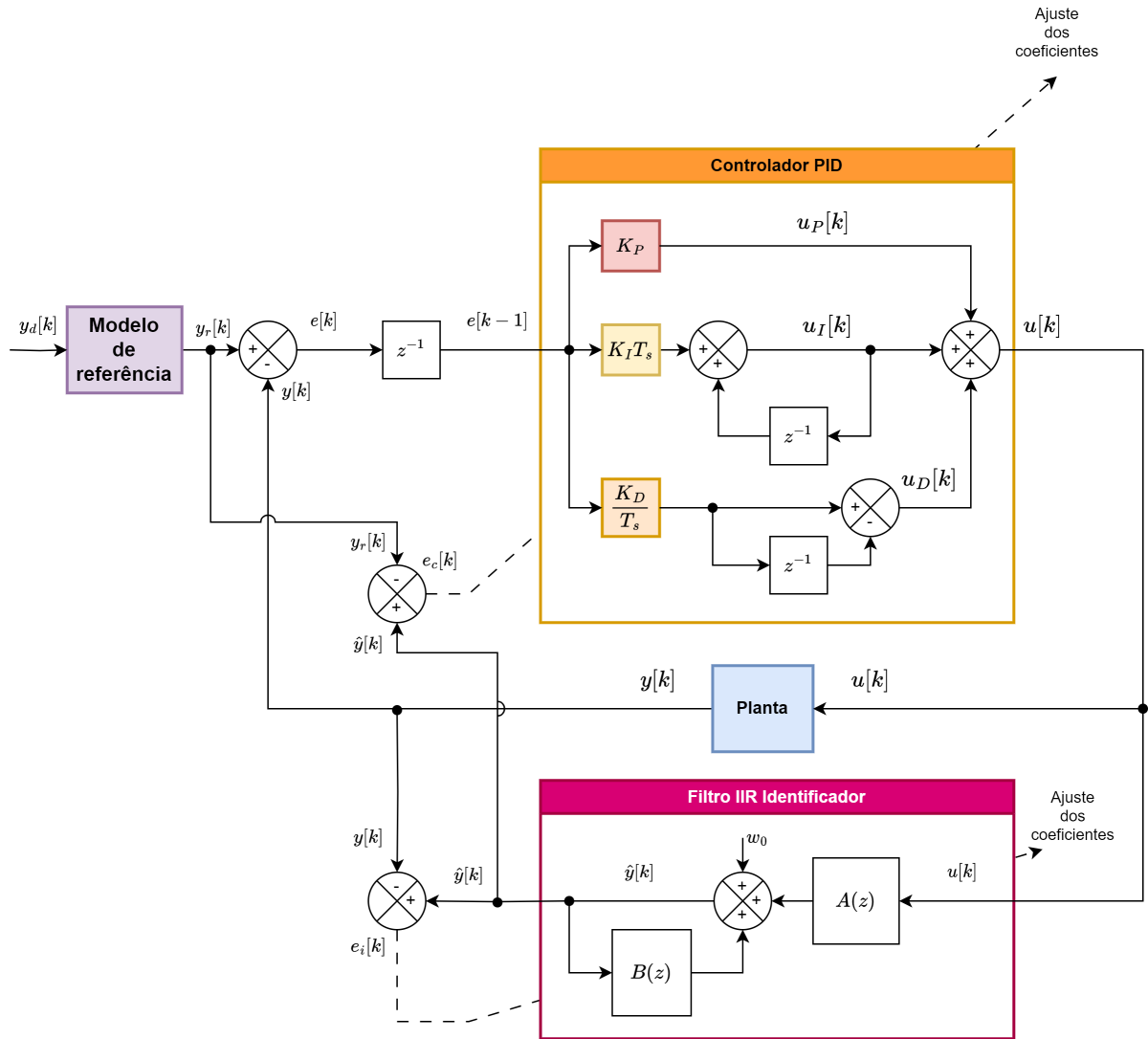


Figura 33 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta

$$\begin{aligned}
 u_P[k] &= K_P e[k-1] \\
 u_I[k] &= u_I[k-1] + K_I T_s e[k-1] \\
 u_D[k] &= K_D \frac{e[k-1] - e[k-2]}{T_s} \\
 u[k] &= u_P[k] + u_I[k] + u_D[k]
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Para o filtro IIR identificador, a função do sinal de saída estimado é dada pela Eq. 4.12 com a adição de um viés, sendo $N = 6$ e $M = 2$. Assim, houve a obtenção da seguinte função de estimação de saída no domínio do tempo discreto:

$$\hat{y}[k] = \sum_{i=0}^6 a_i x[k-i] + \sum_{j=1}^2 b_j \hat{y}[k-j] + w_0 \tag{5.19}$$

Os coeficientes do filtro IIR e do controlador foram ajustados utilizando o *Backward Propagation*, utilizando o gradiente da planta identificadora para ajustar os coeficientes do PID adaptativo

5.6.1 Ajuste dos Coeficientes

Foram utilizadas duas funções custo ($\mathcal{L}_{control}$ e $\mathcal{L}_{identif\ ier}$). A função custo $\mathcal{L}_{control}$ foi utilizada para treinar o controlador e a função custo $\mathcal{L}_{identif\ ier}$ foi utilizada para treinar o filtro identificador. Em ambas funções custo, minimizaram-se os erros médios quadráticos de controle e de identificação, de acordo com o conjunto de equações 5.20.

$$\begin{aligned} e_{identif\ ier}[k] &= \hat{y}[k] - y[k] \\ e_{control}[k] &= \hat{y}[k] - y_r[k] \\ \mathcal{L}_{identif\ ier} &= \frac{1}{2}e_{identif\ ier}[k]^2 \\ \mathcal{L}_{control} &= \frac{1}{2}e_{control}[k]^2 \end{aligned} \quad (5.20)$$

$e_{identif\ ier}[k]$ é o erro do filtro identificador, $e_{control}[k]$ é o erro do controlador, $\hat{y}[k]$ é a saída do filtro identificador, $y[k]$ é a saída da planta e $y_r[k]$ é o valor de referência. Além disso, o erro que é aplicado na entrada do PID é dado por $e[k] = y_r[k] - y[k]$. Os ajustes dos coeficientes do filtro IIR foram realizados pelo conjunto de equações 5.21.

$$\begin{aligned} a_i[k+1] &= a_i[k] - \lambda \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\ ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial a_i[k]} \\ b_j[k+1] &= b_j[k] - \lambda \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\ ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial b_j[k]} \\ w_0[k+1] &= w_0[k] - \lambda \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\ ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial w_0[k]} \end{aligned} \quad (5.21)$$

Calculando as derivadas parciais:

$$\begin{aligned} a_i[k+1] &= a_i[k] - \lambda e_{identif\ ier}[k] x[k-i] \\ b_j[k+1] &= b_j[k] - \lambda e_{identif\ ier}[k] y[k-j] \\ w_0[k+1] &= w_0[k] - \lambda e_{identif\ ier}[k] w_0[k] \end{aligned} \quad (5.22)$$

Os ajustes dos coeficientes do PID foram realizados pelo conjunto de equações 5.23.

$$\begin{aligned}
K_P[k+1] &= K_P[k] - \lambda_P \frac{\partial \mathcal{L}_{control}}{\partial y[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_P[k]} \frac{\partial u_P[k]}{\partial K_P[k]} \\
K_I[k+1] &= K_I[k] - \lambda_I \frac{\partial \mathcal{L}_{control}}{\partial y[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_I[k]} \frac{\partial u_I[k]}{\partial K_I[k]} \\
K_D[k+1] &= K_D[k] - \lambda_D \frac{\partial \mathcal{L}_{control}}{\partial y[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial u[k]} \frac{\partial u[k]}{\partial u_D[k]} \frac{\partial u_D[k]}{\partial K_D[k]}
\end{aligned} \tag{5.23}$$

Calculando as derivadas parciais:

$$\begin{aligned}
K_P[k+1] &= K_P[k] - \lambda_P e_{control}[k] a_0 e[k-1] \\
K_I[k+1] &= K_I[k] - \lambda_I e_{control}[k] a_0 (T_s) \{e[k-1] + e[k-2]\} \\
K_D[k+1] &= K_D[k] - \lambda_D e_{control}[k] a_0 \left(\frac{1}{T_s}\right) \{e[k-1] - e[k-2]\}
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Os coeficientes do filtro IIR identificador foram ajustados com uma taxa de aprendizagem $\lambda = 10^{-3}$ e os K_P , K_I e K_D foram adaptados com diferentes taxas de aprendizagem, respectivamente, $\lambda_P = 10^{-3}$, $\lambda_I = 10^2$ e $\lambda_D = 10^{-5}$.

5.7 IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

O Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta é baseado na implementação do algoritmo *filtered-x LMS* (Widrow, 2016). Foi desenvolvido um procedimento em que o sistema de controle ajusta os coeficientes de um filtro IIR identificador, calcula a saída do filtro IIR identificador dado uma entrada desejada, ajusta os coeficientes do filtro IIR controlador e calcula o próximo sinal de entrada.

Para o filtro IIR identificador, a função do sinal de saída estimado é dada pela Eq. 4.12 com a adição de um viés (w'_0), sendo $N = 10$ e $M = 5$. Assim, houve a obtenção da seguinte função de estimativa de saída no domínio do tempo discreto:

$$\hat{y}[k] = \sum_{i=0}^{10} a'_i u[k-i] + \sum_{j=1}^5 b'_j \hat{y}[k-j] + w'_0 \tag{5.25}$$

Em que $\hat{y}[k]$ representa a saída do modelo identificador, $u[k]$ a entrada do modelo identificador e w'_0 um viés do modelo ajustável. Os coeficientes do filtro IIR identificador foram ajustados utilizando o *Backward Propagation*.

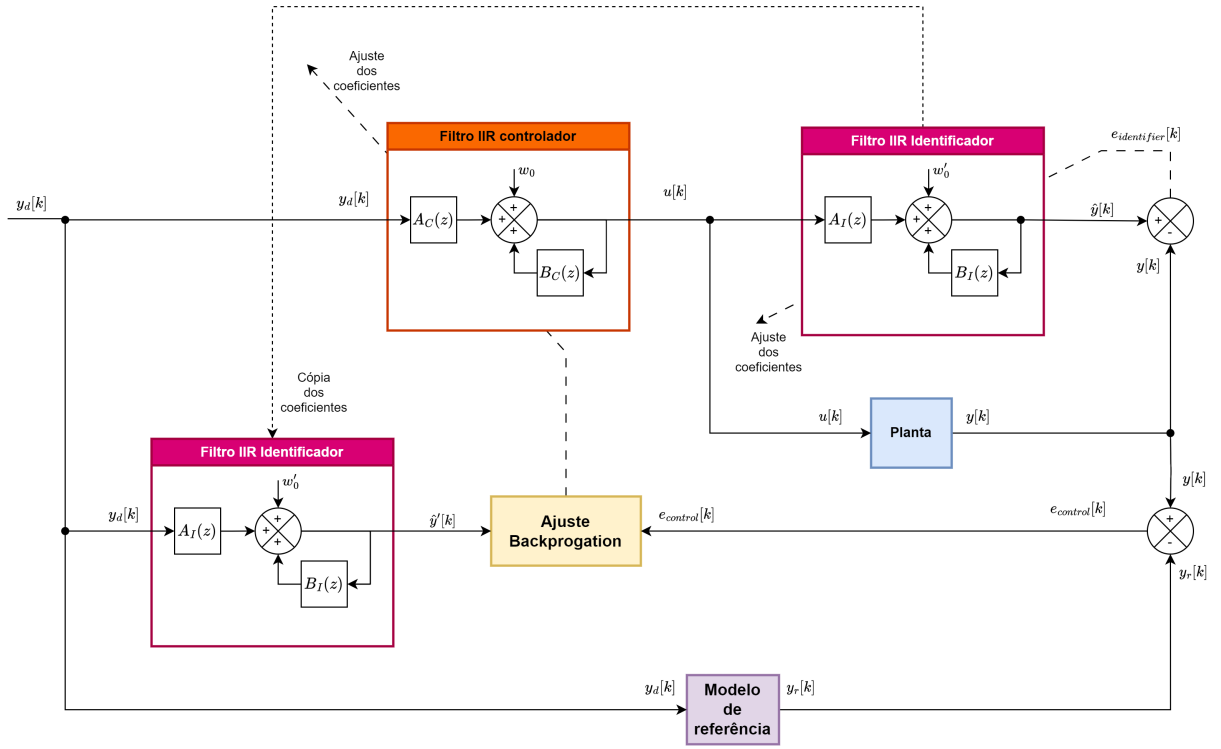


Figura 34 – Diagrama de blocos do controlador implantado, trata-se de um Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta (Widrow, 2016)

Para o filtro IIR controlador, a função do sinal de controle também é dada pela Eq. 4.12 com a adição de um viés (w_0), sendo $N = 50$ e $M = 10$. Desse modo, houve a obtenção da seguinte função de controle no domínio do tempo discreto:

$$u[k] = \sum_{i=0}^{50} a_i y_d[k - i] + \sum_{j=1}^{10} a_j u[k - j] + w_0 \quad (5.26)$$

Em que $u[k]$ representa a saída do modelo controlador, esse sinal será aplicado na planta, $y_d[k]$ o valor desejado na saída da planta e w'_0 um viés do modelo ajustável. Os coeficientes do filtro IIR controlador foram ajustados utilizando o *Backward Propagation*.

5.7.1 Ajuste dos Coeficientes

Foram utilizadas duas funções custo ($\mathcal{L}_{control}$ e $\mathcal{L}_{identifiser}$). A função custo $\mathcal{L}_{control}$ foi utilizada para treinar o controlador e a função custo $\mathcal{L}_{identifiser}$ foi utilizada para treinar o filtro identificador. Em ambas funções custo, minimizaram-se os erros médios quadráticos

de controle e de identificação, de acordo com a Eq. 5.27.

$$\begin{aligned}
e_{identif\,ier}[k] &= \hat{y}[k] - y[k] \\
e_{control}[k] &= y[k] - y_r[k] \\
\mathcal{L}_{identif\,ier} &= \frac{1}{2}e_{identif\,ier}[k]^2 \\
\mathcal{L}_{control} &= \frac{1}{2}e_{control}[k]^2
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Em que $e_{identif\,ier}[k]$ é o erro do filtro identificador, $e_{control}[k]$ é o erro do controlador, $\hat{y}[k]$ é a saída do filtro identificador, $y[k]$ é a saída da planta e $y_r[k]$ é o valor de referência. Os ajustes dos coeficientes do filtro IIR foram realizados pelo conjunto de equações 5.28.

$$\begin{aligned}
a'_i[k+1] &= a'_i[k] - \lambda_I \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\,ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial a'_i[k]} \\
b'_j[k+1] &= b'_j[k] - \lambda_I \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\,ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial b'_j[k]} \\
w'_0[k+1] &= w'_0[k] - \lambda_I \frac{\partial \mathcal{L}_{identif\,ier}}{\partial \hat{y}[k]} \frac{\partial \hat{y}[k]}{\partial w'_0[k]}
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Calculando as derivadas parciais:

$$\begin{aligned}
a'_i[k+1] &= a'_i[k] - \lambda_I e_{identif\,ier}[k] u[k-i] \\
b'_j[k+1] &= b'_j[k] - \lambda_I e_{identif\,ier}[k] y[k-j] \\
w'_0[k+1] &= w'_0[k] - \lambda_I e_{identif\,ier}[k] w'_0[k]
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Os ajustes dos coeficientes do controlador foram realizados pelo conjunto de equações 5.30.

$$\begin{aligned}
a_i[k+1] &= a_i[k] - \lambda_C e_{control}[k] \hat{y}[k-i] \\
b_j[k+1] &= b_j[k] - \lambda_C e_{control}[k] u[k-j] \\
w_0[k+1] &= w_0[k] - \lambda_C e_{control}[k] w_0[k]
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Os coeficientes do filtro IIR identificador foram ajustados com uma taxa de aprendizagem $\lambda_I = 10^{-4}$ e os coeficientes do filtro IIR controlador foram ajustados com uma taxa de aprendizagem $\lambda_C = 10^{-5}$

5.8 Implementação do Modelo de Referência

Para implementar o modelo de referência em todos os controladores adaptativos abordados no presente trabalho, escolheu-se um sistema de primeira ordem, devido à

simplicidade e à suavidade da resposta perante uma entrada desejada constante. A função de transferência do modelo de referência utilizado é dada pela Eq. 5.31.

$$R(s) = \frac{K}{\tau s + 1} \quad (5.31)$$

Em que K é o ganho do modelo de referência e τ é a constante de tempo do modelo de referência. Para a implementação desse modelo, foi utilizada a função `cont2discrete` da biblioteca `SciPy`, cujo objetivo é converter uma função de transferência no domínio contínuo para o domínio discreto. Portanto, utilizou-se o método de Euler, com taxa de amostragem igual ao simulador do piezo ($dT = 10^{-3}$), para discretizar a função de transferência do modelo de referência.

O ganho do modelo de referência e a constante de tempo foram definidos como $K = 1$ e $\tau = 0.2$. Desse modo, a resposta estacionária do modelo de referência foi o próprio valor desejado da corrente de tunelamento e o transiente foi suave o suficiente para não ocorrer instabilidades no período de adaptação dos controladores. Assim, apresenta-se a seguinte função de transferência no domínio z :

$$R(z) = \frac{0.005z^{-1}}{1 - 0.995z^{-1}} \quad (5.32)$$

6 Resultados e Discussões

A proposta desse trabalho é avaliar diferentes abordagens de controle adaptativo para a ponta de prova de um STM frente ao controle PID Clássico. Por isso, foram explorados detalhadamente diversos aspectos relacionados ao desempenho dos controladores adaptativos em comparação com os controladores PID.

Inicialmente, examinaram-se os erros associados aos controladores adaptativos e aos sistemas identificadores, destacando suas características, variações e tendências ao longo do tempo. Além disso, foi realizada uma análise da evolução da adaptação dos coeficientes dos controladores IIR e PID, destacando como essas técnicas se adaptam a diferentes cenários e demandas de controle.

Por fim, houve a comparação do erro obtido pelos controladores adaptativos em relação ao controlador PID, identificando os pontos fortes e as limitações de cada abordagem.

6.1 Desempenho dos modelos

Em todas as abordagens os controladores, foram ajustados com os mesmos parâmetros de planta, descritos na Tab. 5.1, a mesma taxa de amostragem(10^{-3}), velocidade de varredura($0,72\text{Ås}^{-1}$) e corrente de tunelamento de referência($1nA$).

Taxas de amostragem inferiores às selecionadas prolongaram as iterações de treinamento, aumentando o tempo para a adaptação dos controladores. Enquanto as taxas de amostragem superiores às selecionadas apresentaram instabilidades no processo de adaptação dos controladores.

O ajuste dos controladores com correntes de tunelamento de referência elevadas apresentaram maiores instabilidades diante das correntes de tunelamento de referência menores. Portanto, o processo de desenvolvimento dos controladores foi realizado com a corrente de tunelamento de referência supracitada.

6.1.1 PID Clássico

Os coeficientes do Controlador PID Clássico foram extensivamente testados e foi verificado que o PID Clássico apresentou resultados satisfatórios para $K_P = 1$, $K_I = 15$ e $K_D = 0$. O coeficiente derivativo foi ajustado para zero devido à recorrente ocorrência de instabilidades no controlador. O controlador apresentou oscilações do erro da saída após o ajuste da corrente de tunelamento em torno da corrente de tunelamento desejada.

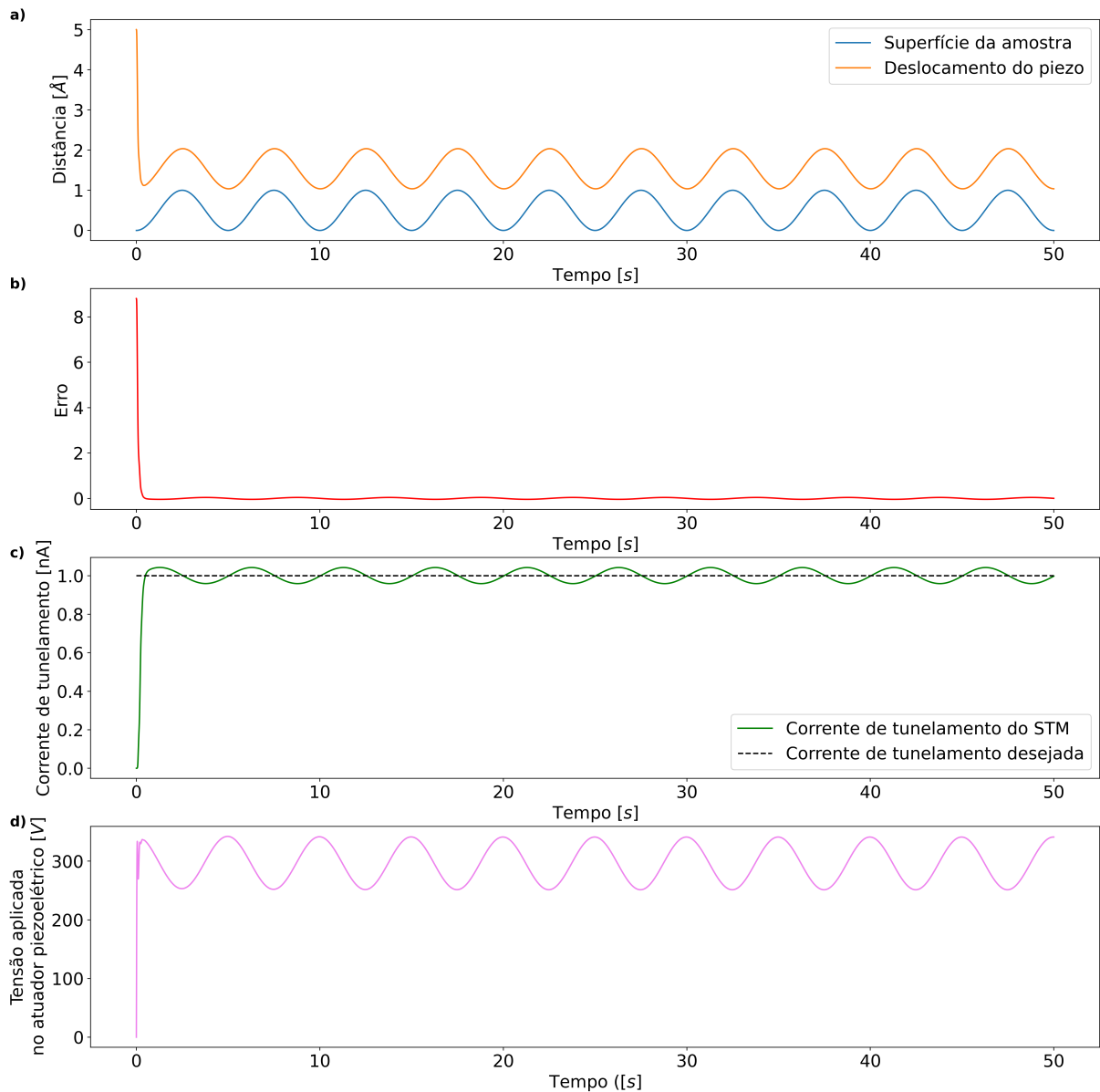


Figura 35 – Resultados da simulação do Controlador PID em 50 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente desejada pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

6.1.2 Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente

O Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente apresentou instabilidades com taxas de aprendizagem maiores que 10^{-4} . Já para taxas de aprendizagem inferiores, a adaptação do controlador foi demasiadamente lenta. A remoção de neurônios na camada oculta dificultou o processo de

adaptação do controlador. No entanto, o aumento aprimorou a performance de aprendizado, para otimizar o processo de treinamento da rede neural.

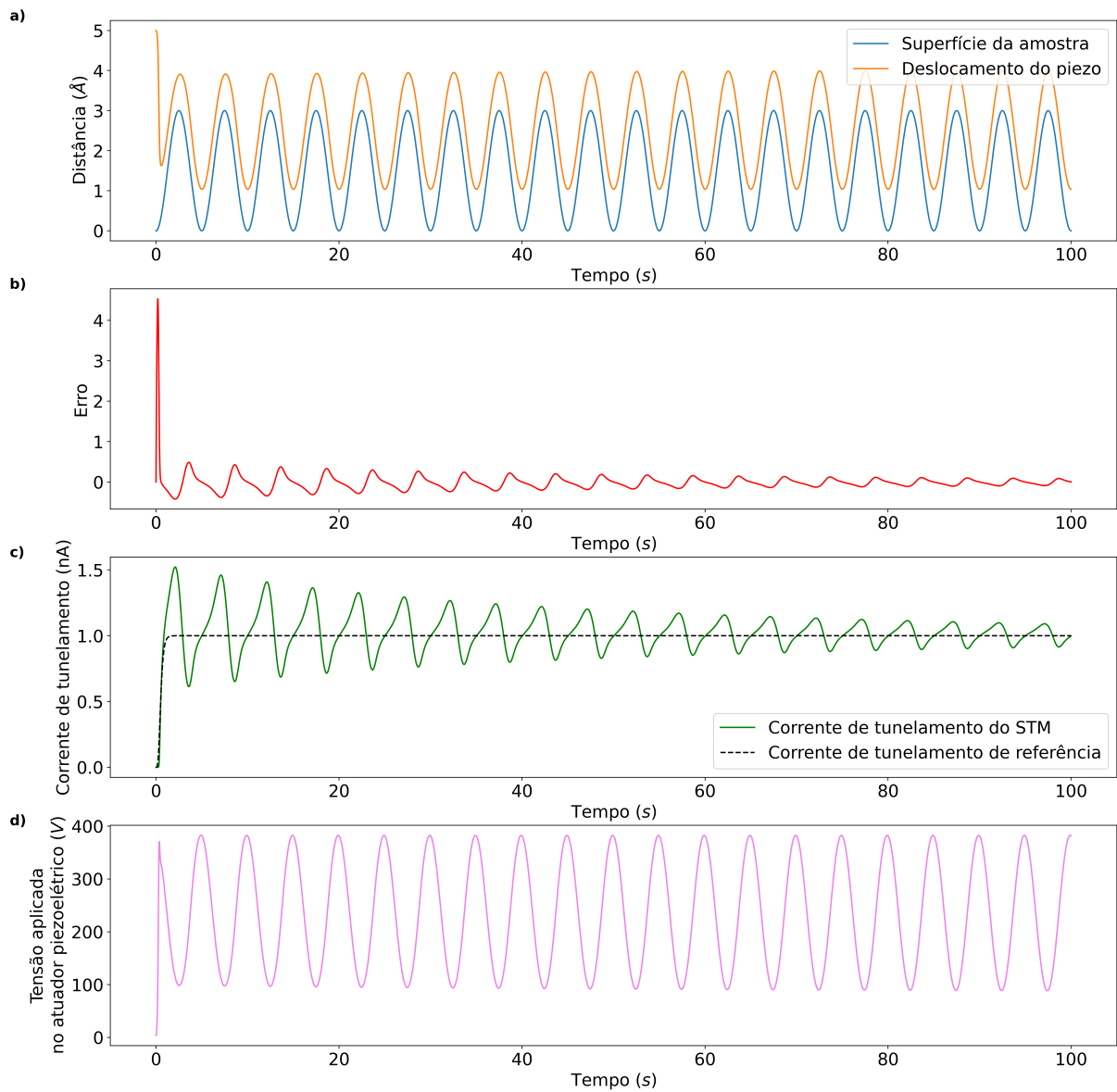


Figura 36 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

Outro aspecto a se destacar é a apresentação de oscilações desse controlador após um determinado período de simulação, conforme Fig. 37.

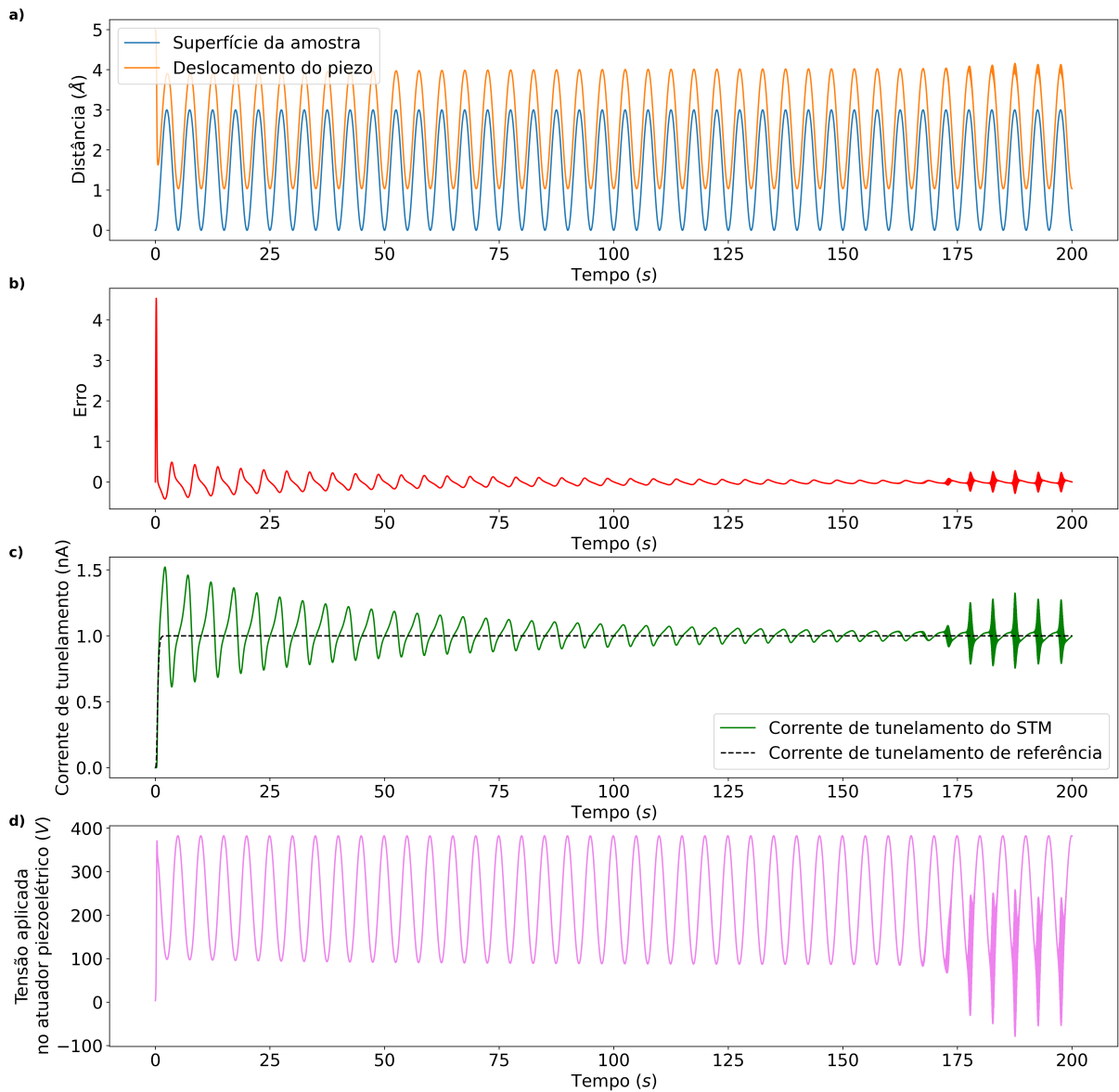


Figura 37 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente durante 200 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

6.1.3 Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta

O Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta apresentou instabilidades com taxas de aprendizagem maiores que 10^{-3} . Já as taxas de aprendizagem inferiores apresentaram aprendizado demasiadamente lento. A remoção de neurônios na camada oculta dificultou o processo de adaptação do controlador. No

entanto, o aumento aprimorou a performance do aprendizado.

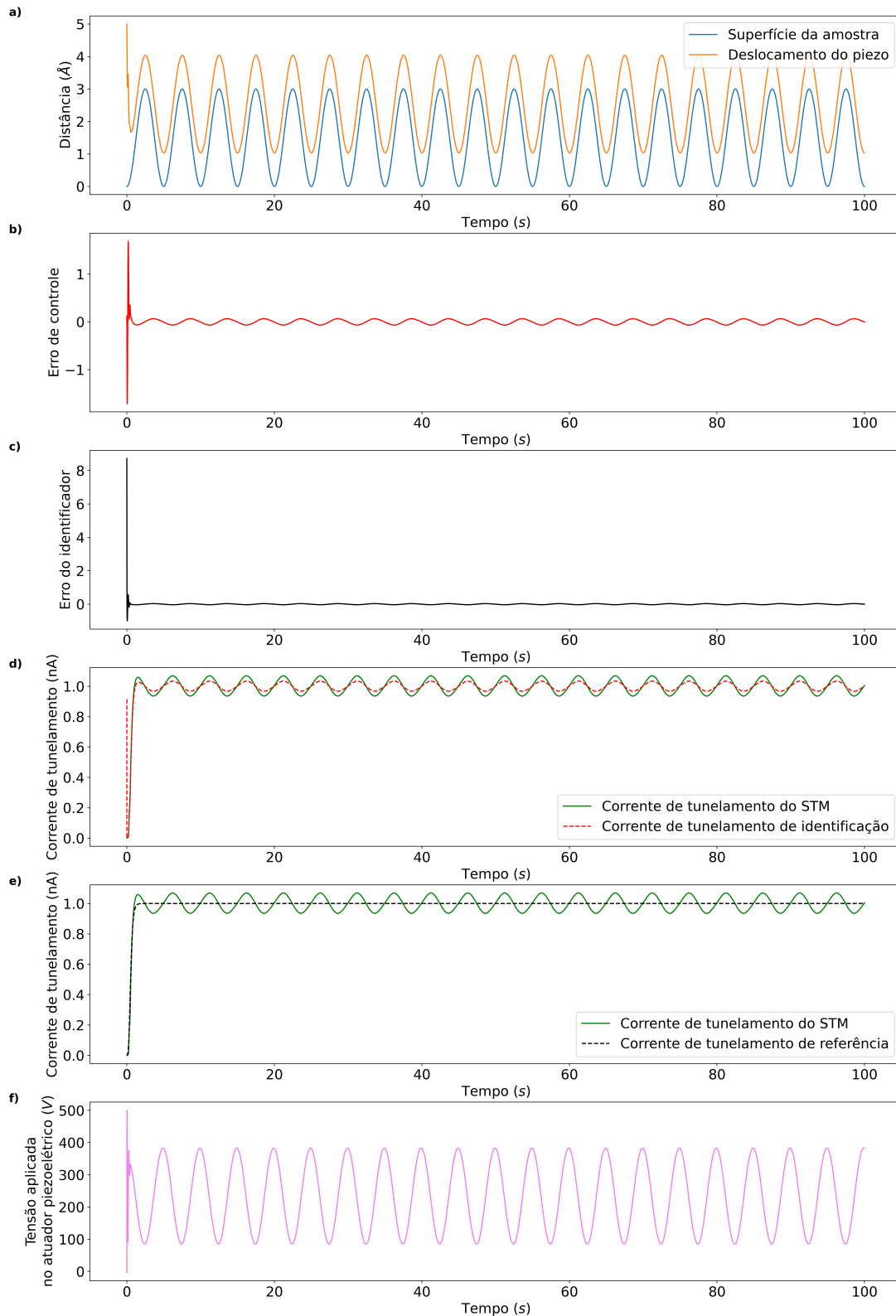


Figura 38 – Resultados do Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, **a)** Acompanhamento da altura dos átomos, **b)** Erro de controle, **c)** Erro de identificação, **d)** Acompanhamento da corrente de tunelamento do sistema de identificação, **e)** Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, **f)** Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

6.1.4 Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente

O Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente obteve uma eficiente adaptação para as taxas de aprendizagem selecionadas, apresentando um elevado coeficiente integrativo e um coeficiente derivativo bastante inferior aos demais.

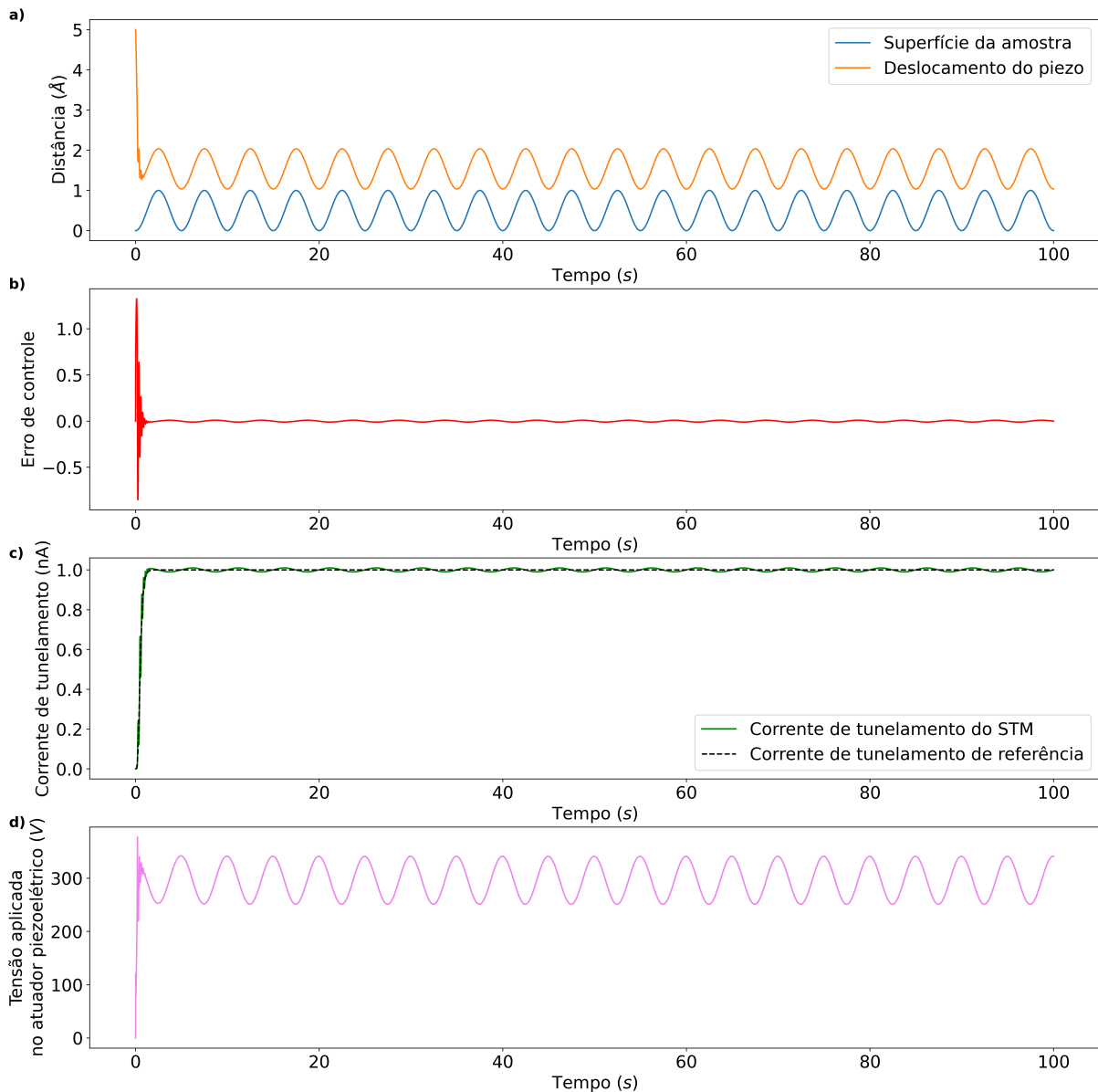


Figura 39 – Resultados do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente durante 100 segundos de simulação, a) Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, b) Erro dado pela diferença do valor desejado pela corrente de tunelamento do STM, c) Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, d) Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

Os coeficientes do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente estabilizaram em torno dos valores $K_P = 0.63954$, $K_I = 63.954$ e $K_D =$

0.042585. Entretanto, os coeficientes proporcionais e integrativos continuaram a aumentar seus valores ligeiramente.

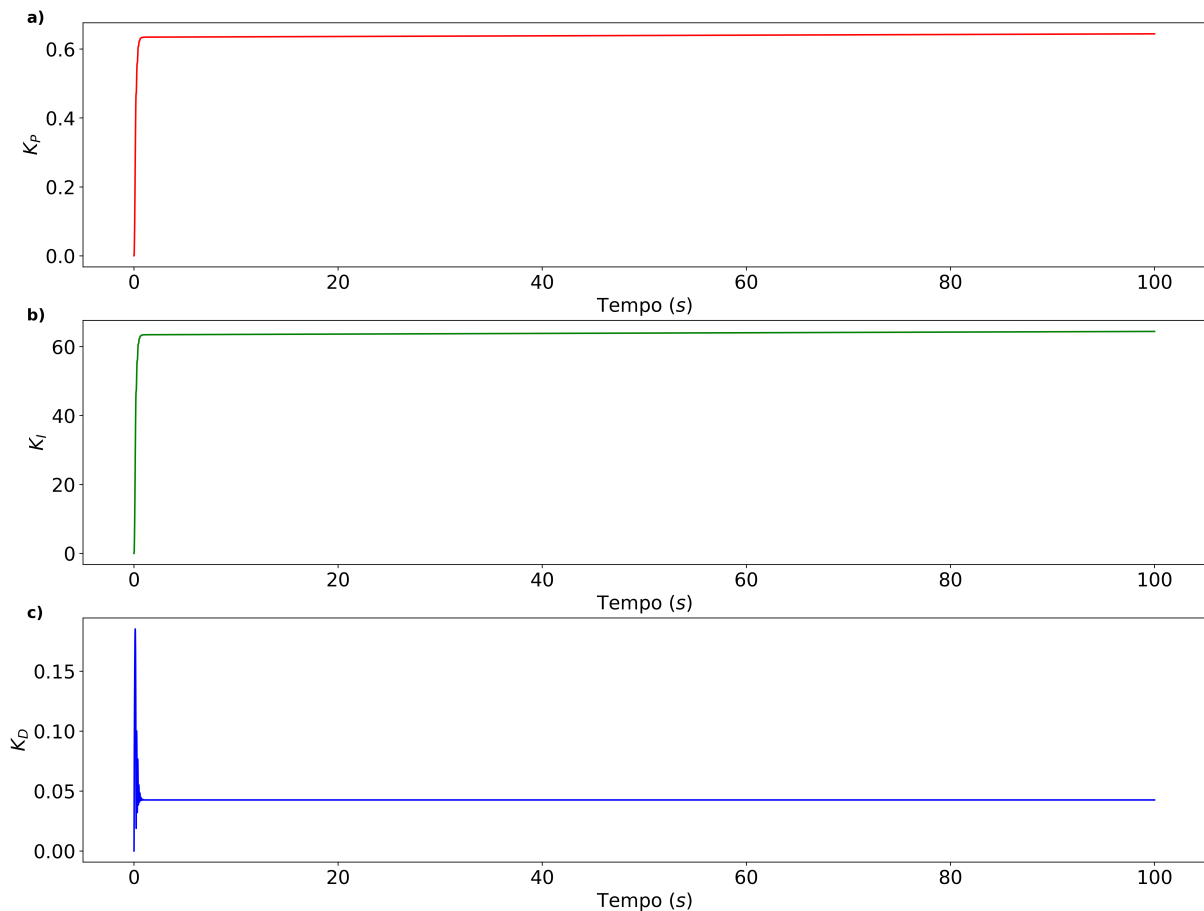


Figura 40 – Adaptação dos coeficientes do Controlador PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, a) coeficiente K_P , b) coeficiente K_I e c) coeficiente K_D

6.1.5 Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta

Os Controladores PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta e PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente apresentaram uma eficiente adaptação para as taxas de aprendizagem selecionadas. Além disso, obtiveram um elevado coeficiente integrativo e um coeficiente derivativo inferior aos demais.

Os coeficientes proporcional e integrativo do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta continuaram a crescer monotonicamente, sem apresentar uma estabilização. Já o coeficiente derivativo apresentou uma estabilização em torno de $K_D = -5.569 \times 10^{-3}$.

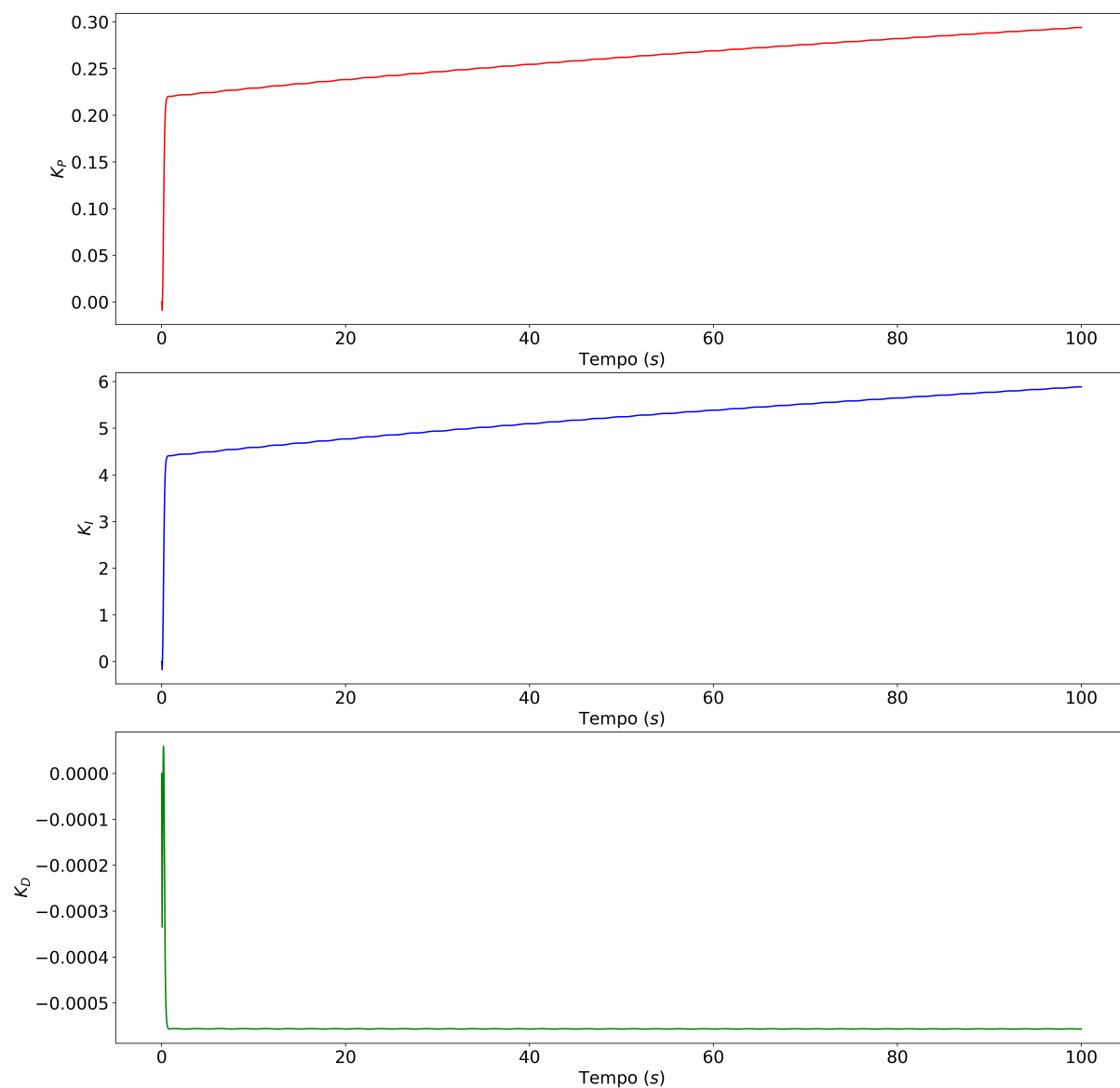


Figura 41 – Adaptação dos coeficientes do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta, em vermelho coeficiente K_P , em azul coeficiente K_I e em verde coeficiente K_D

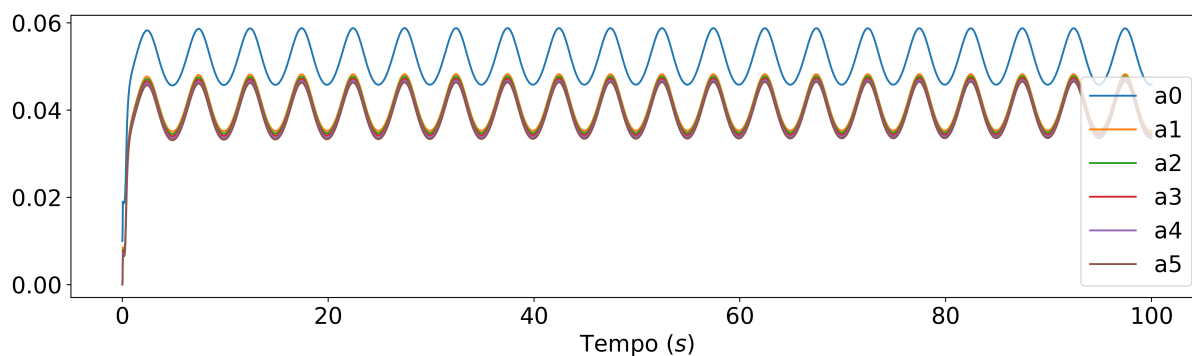


Figura 42 – Adaptação dos zeros do identificador IIR para o Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta

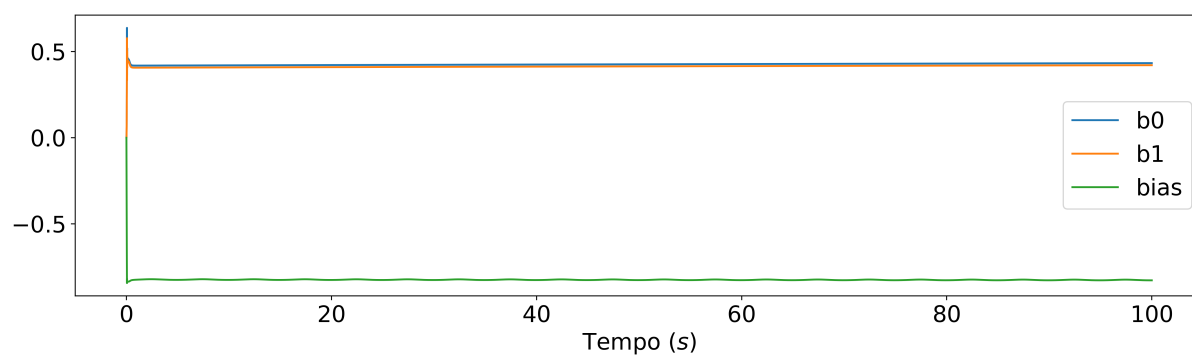


Figura 43 – Adaptação dos polos e do viés do identificador IIR para o Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta

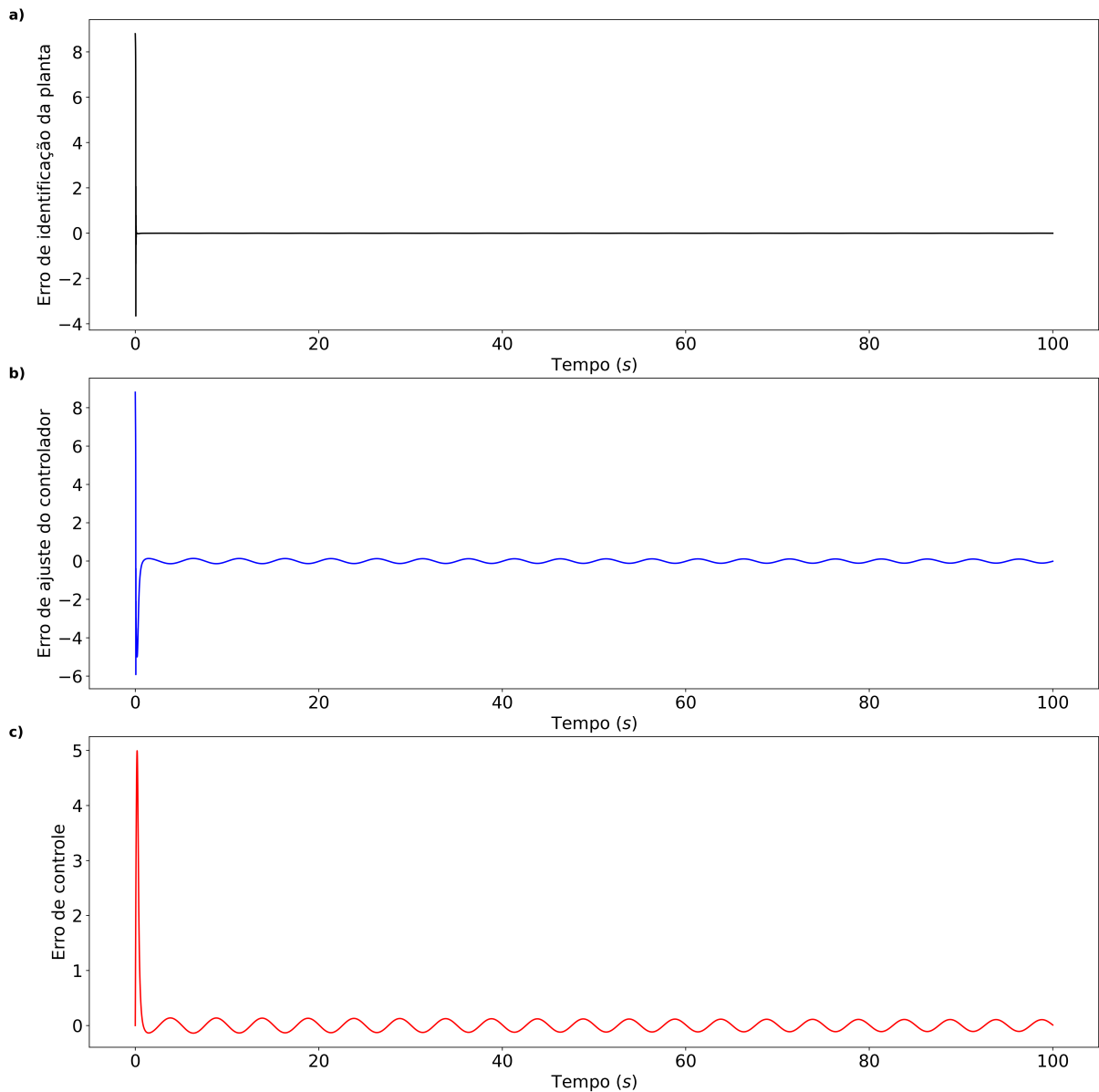


Figura 44 – Erros do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, **a)** Erro de controle, **b)** Erro de identificação **c)** Acompanhamento da corrente de tunelamento do STM pelo sistema de identificação

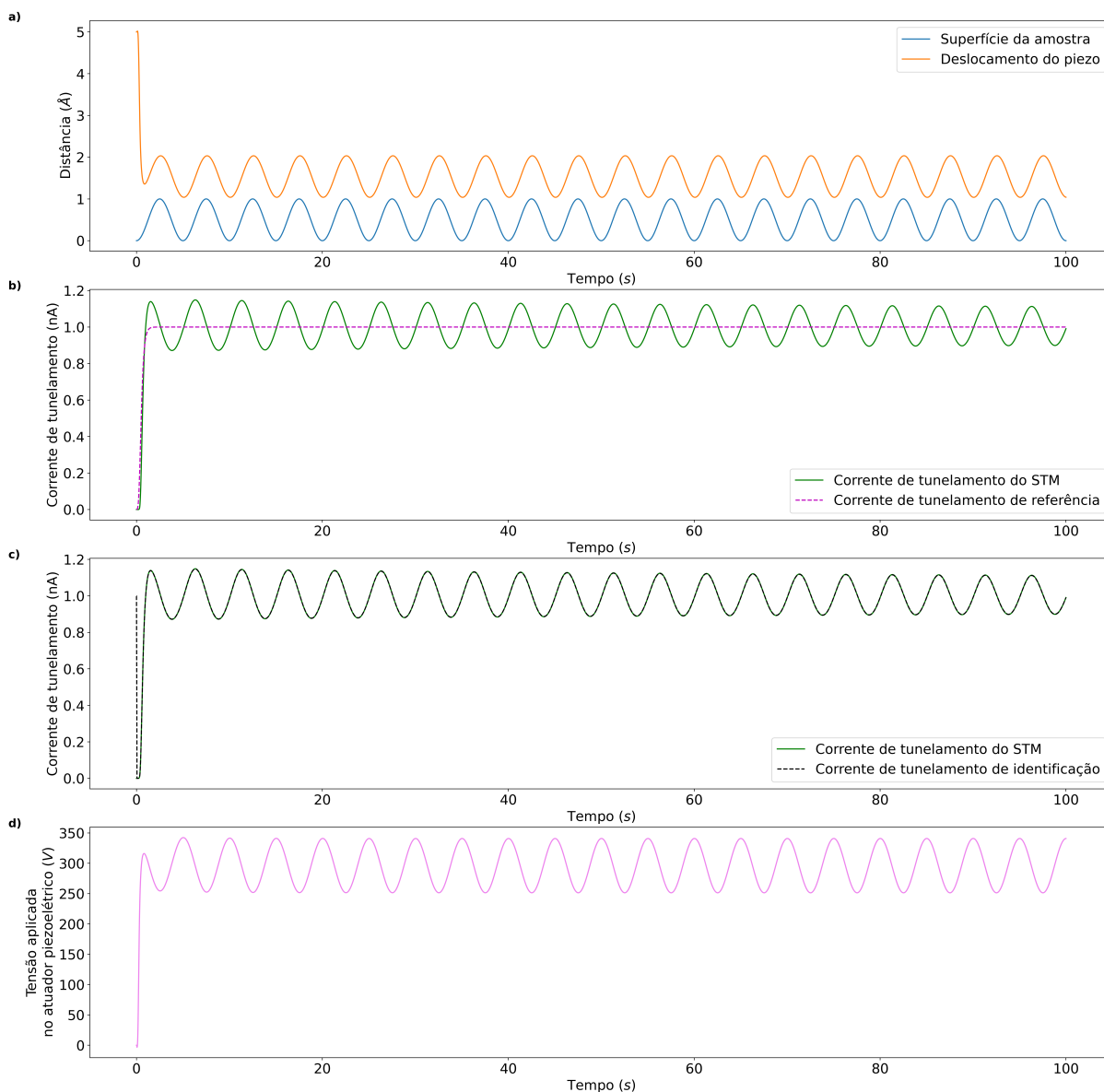


Figura 45 – Resultados do Controlador PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, **a)** Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, **b)** Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, **c)** Acompanhamento da corrente de tunelamento do sistema de identificação, **d)** Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

6.1.6 Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

O Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta apresentou uma eficiente adaptação para as taxas de aprendizagem selecionadas, apresentando uma excelente convergência do modelo identificado. Entretanto, a corrente do STM apresentou uma oscilação em torno da corrente de tunelamento desejada, devido

ao erro de controle.

Os polos e viéses do sistema identificador e controlador apresentaram convergências assintóticas em torno de valores bem definidos e os zeros apresentaram oscilações com frequências análogas à superfície mapeada pelo STM.

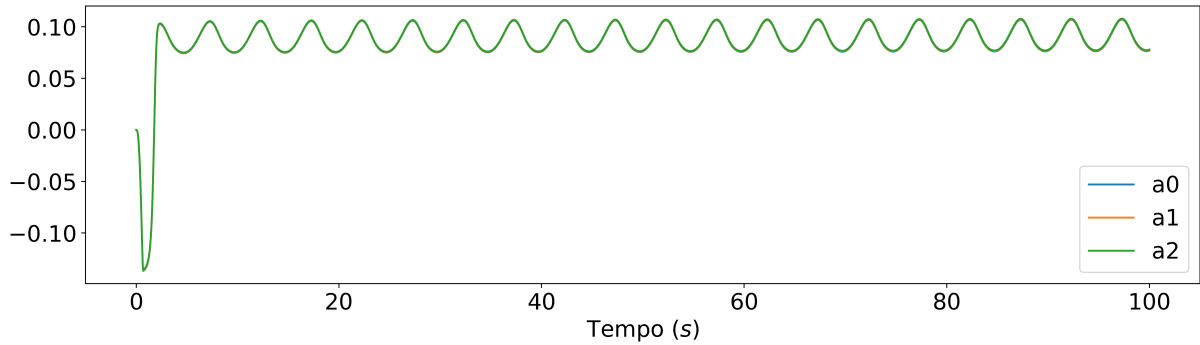


Figura 46 – Adaptação dos zeros do identificador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

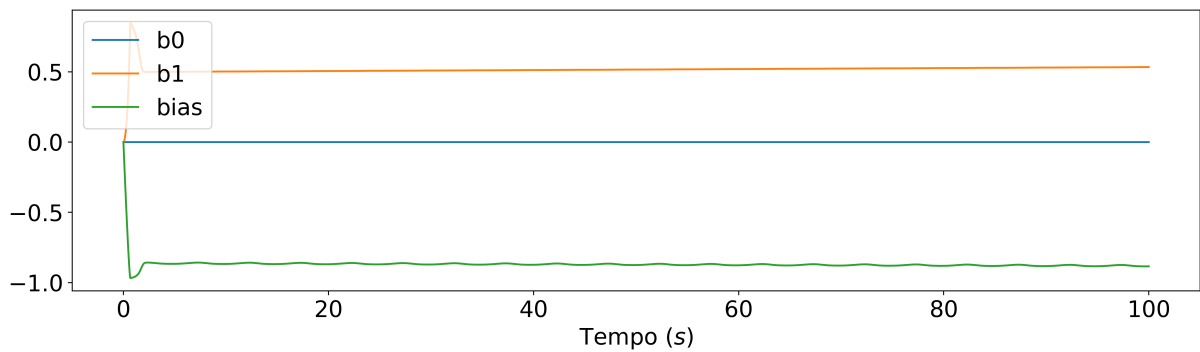


Figura 47 – Adaptação dos polos e do viés do identificador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

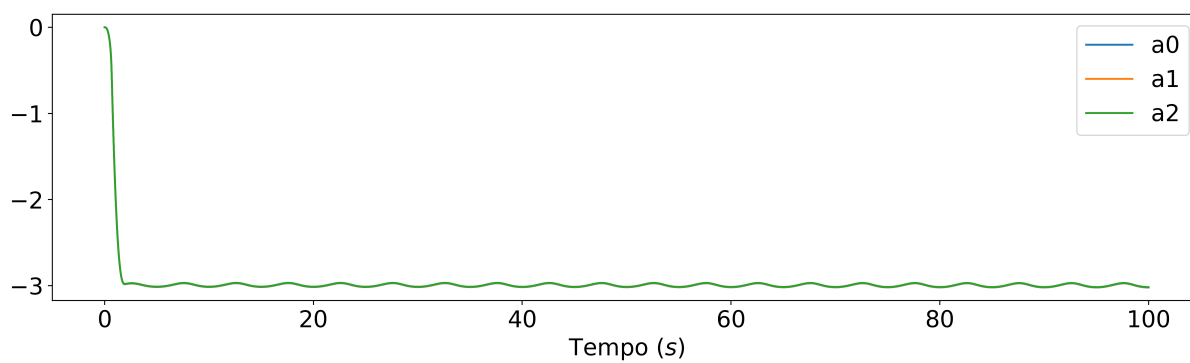


Figura 48 – Adaptação dos zeros do controlador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

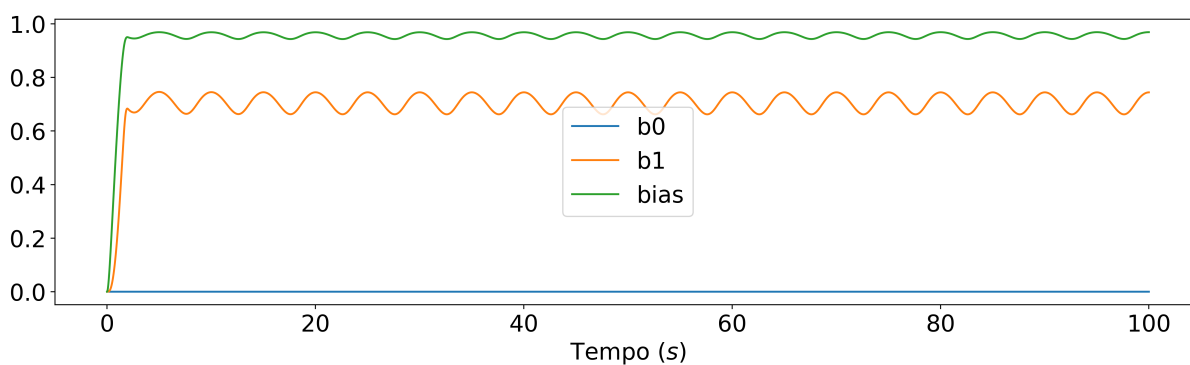


Figura 49 – Adaptação dos polos e do viés do controlador IIR para o Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta

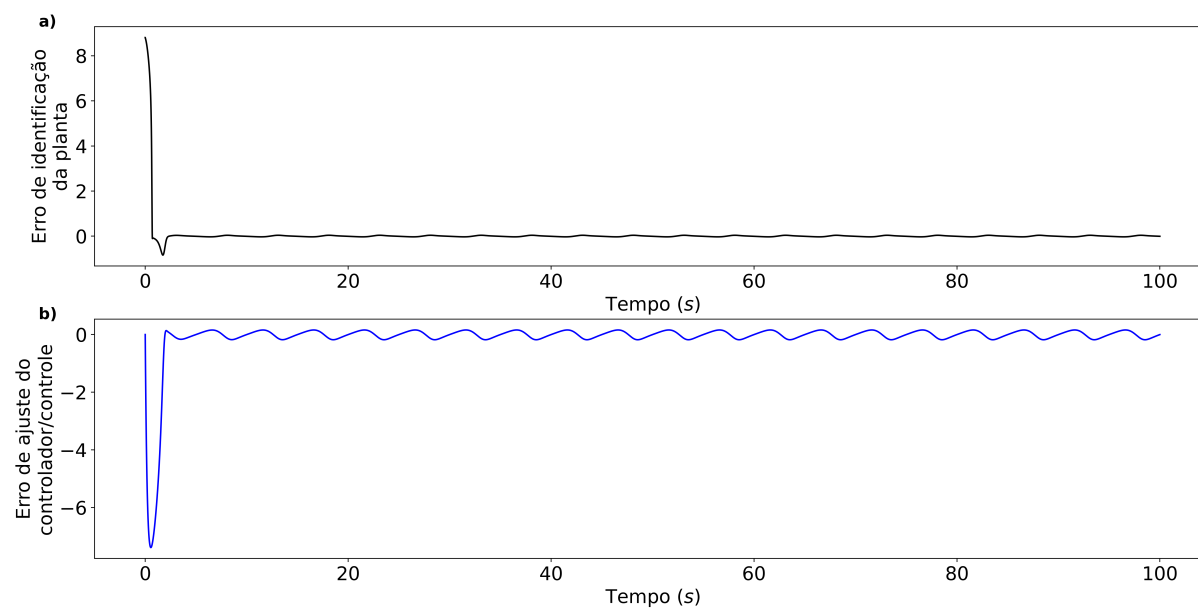


Figura 50 – Erros do Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, **a)** Erro de controle, dado pela diferença do valor de referência pela corrente de tunelamento do STM, **b)** Erro de identificação, dado pela diferença do valor do modelo de identificação pela corrente de tunelamento do STM

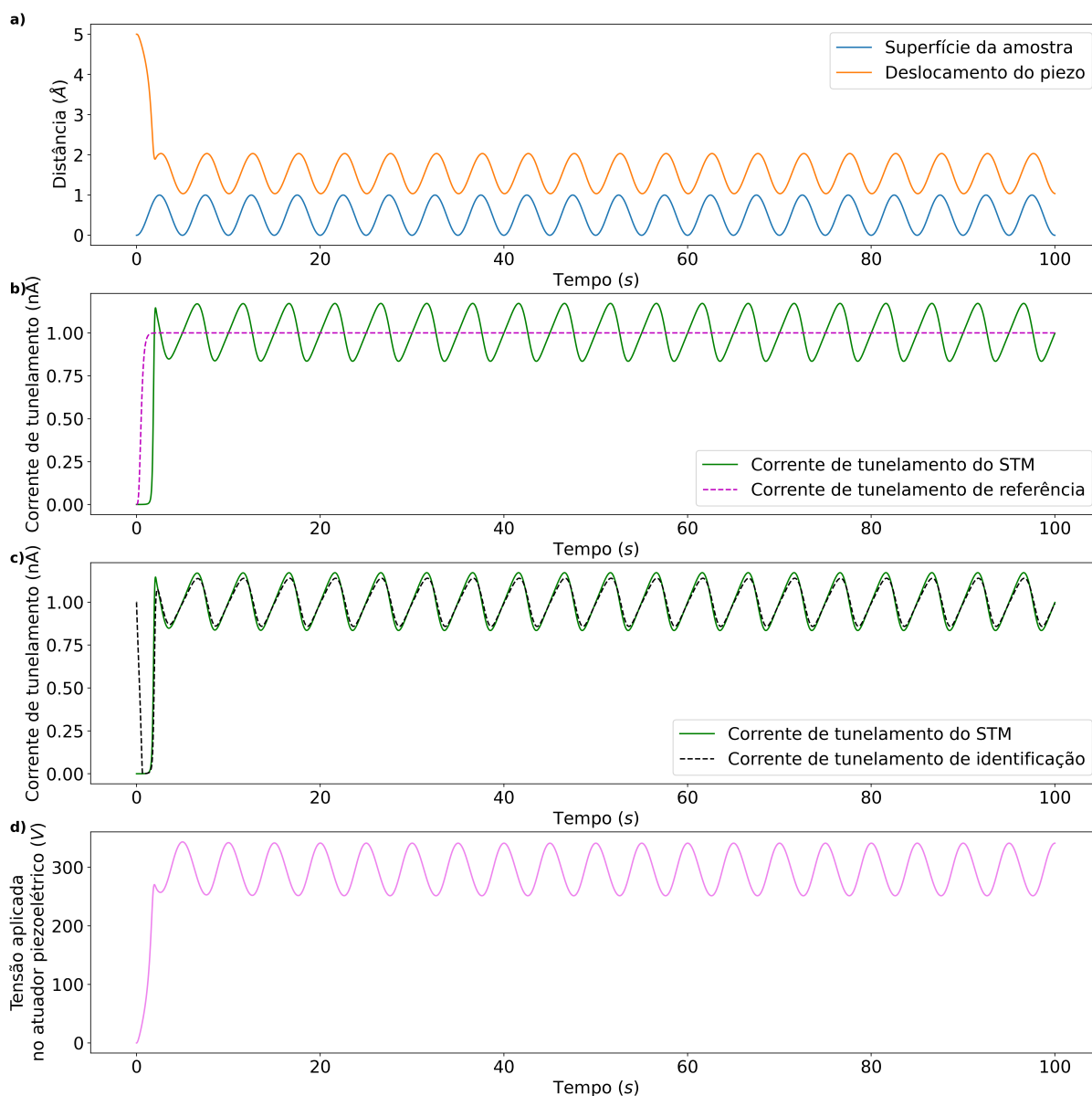


Figura 51 – Resultados do Controlador IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta durante 100 segundos de simulação, **a)** Acompanhamento da superfície pela ponta de prova, **b)** Acompanhamento da corrente de tunelamento do STM pelo sistema de identificação, **c)** Acompanhamento da corrente de referência pelo STM, **d)** Tensão aplicada no atuador piezoelétrico do STM

6.2 Análise dos Modelos

Os controladores avaliados convergiram em torno da corrente de tunelamento desejada de 1 nA, os controladores com aproximação estática do gradiente apresentaram maiores velocidades de convergência e menores erros estacionários que os controladores com identificadores, possivelmente devido a ausência de transmissões dos gradientes dos

sistemas identificadores no ajuste dos sistemas controladores.

O Controlador Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente apresentou uma instabilidade após 70 segundos de varredura, essa instabilidade é supostamente proveniente da taxa de aprendizagem fixa e da aproximação estática do gradiente da planta, pois o controlador pode oscilar em torno de um mínimo local/global e alterar sua equação dinâmica devido à essa oscilação.

Os Controladores PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente e PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta apresentaram um convergência de seus coeficientes de controle, todavia os coeficientes proporcional e integral apresentaram um ligeiro crescimento, provavelmente devido a existência de uma dinâmica não linear do atuador piezoelétrico, inerente à histerese. Pressupõe-se que os coeficientes proporcional e integrativo adaptam-se continuamente para compensar essa dinâmica não linear.

Os Controladores IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta apresentaram oscilações permanentes nos coeficientes zeros. Enquanto que os coeficientes dos polos e viéses apresentaram convergências assintóticas em torno de valores bem definidos. A utilização de taxas de aprendizagem pequenas no processo de adaptação dos identificadores dificultaram o ajuste desses à dinâmica do STM, bem como no controle do STM.

7 Conclusão

O controle adaptativo é uma técnica que não requer conhecimento prévio do modelo comportamental do que se deseja controlar. Diversos fatores com valores desconhecidos definem a dinâmica não linear de um STM, como a histerese e a saturação do atuador piezoelétrico e a dependência exponencial da corrente de tunelamento em função da distância da ponta de prova à amostra.

Foram simulados e avaliados os seguintes controladores: PID Clássico, Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Aproximação Estática do Gradiente, Adaptativo com Redes Neurais *Feedforward* com Identificador da planta, PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, PID Adaptativo com Algoritmo LMS e Identificador da Planta, IIR Adaptativo com Algoritmo LMS Recursivo e Identificador da Planta.

Dos controladores adaptativos testados, os que usaram a identificadores do modelo comportamental do STM apresentaram oscilações persistentes não amortecidas em torno de um mínimo. Não podendo ser avaliado se o mínimo é local ou global.

Das abordagens adaptativas não-lineares testadas nesse trabalho, se mostrou mais promissora a do PID Adaptativo com Aproximação Estática do Gradiente, que apresentou o menor erro residual e a melhor taxa de convergência.

Neste caso, a linearização do comportamento exponencial da corrente de tunelamento em função da distância e do controle de carga elétrica do atuador piezoelétrico permitiram implantar identificadores lineares do modelo comportamental do STM. Esses identificadores aumentaram a velocidade de convergência no processo de aprendizado, garantindo a estabilidade de operação e prevenindo colisões da ponta de prova com a amostra.

Futuramente, pretende-se aprimorar o ambiente de simulação do STM, adicionando a possibilidade de varreduras em 3 dimensões utilizando simulações de amostras com o modelo de interações de Tersoff-Hamann a partir da *Density Functional Theory*(DFT).

Planeja-se avaliar todas as arquiteturas consideradas neste trabalho no controle de um STM real, com a condução de uma análise mais detalhada, especialmente em cenários que envolvam amostras com defeitos intersticiais e em situações onde haja a presença de ruído. Como objetivos principais, o aumento da velocidade de varredura e do contraste das imagens geradas pelo STM.

Referências

- AGGARWAL, C. C. *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook*. 1st. ed. [S.l.]: Springer Publishing Company, Incorporated, 2018. ISBN 3319944622. Citado 3 vezes nas páginas 34, 35 e 36.
- AL, K. O. et. *Surface science : an introduction*. [S.l.]: Springer, 2005. (Advanced texts in physics). ISBN 3540005455,9783540005452. Citado 4 vezes nas páginas 7, 24, 28 e 29.
- ASSIG, M. et al. A 10 mK scanning tunneling microscope operating in ultra high vacuum and high magnetic fields. *Review of Scientific Instruments*, AIP Publishing, v. 84, n. 3, p. 033903, mar. 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4793793>>. Citado na página 25.
- ÅSTRÖM, K.; WITTENMARK, B. *Adaptive Control: Second Edition*. Dover Publications, 2013. (Dover Books on Electrical Engineering). ISBN 9780486319148. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=4CLCAgAAQBAJ>>. Citado na página 45.
- ASTROM, K. J.; HAGGLUND, T. *PID controllers*. 2. ed. Research Triangle Park: ISA, 1995. Citado na página 45.
- BIAN, K. et al. Scanning probe microscopy. *Nature Reviews Methods Primers*, Springer Science and Business Media LLC, v. 1, n. 1, maio 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s43586-021-00033-2>>. Citado 5 vezes nas páginas 7, 17, 18, 19 e 20.
- BINNIG, G.; ROHRER, H. Scanning tunneling microscopy. *IBM J. Res. Dev.*, IBM Corp., USA, v. 44, n. 1–2, p. 279–293, jan 2000. ISSN 0018-8646. Disponível em: <<https://doi.org/10.1147/rd.441.0279>>. Citado na página 27.
- BRIHUEGA, I. et al. Unraveling the intrinsic and robust nature of van Hove singularities in twisted bilayer graphene by scanning tunneling microscopy and theoretical analysis. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 109, n. 19, nov 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.196802>>. Citado na página 17.
- CHANG, C.-M.; STRANO, S.; TERZO, M. Modelling of Hysteresis in Vibration Control Systems by means of the Bouc-Wen Model. *Shock and Vibration*, Hindawi Limited, v. 2016, p. 1–14, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1155/2016/3424191>>. Citado na página 31.
- CHEN, C. J. *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*. Oxford University Press, 2021. ISBN 9780198856559. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/oso/9780198856559.001.0001>>. Citado 5 vezes nas páginas 7, 19, 21, 24 e 25.
- CHOUDHARY, K. et al. Computational scanning tunneling microscope image database. *Scientific Data*, Springer Science and Business Media LLC, v. 8, n. 1, fev. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41597-021-00824-y>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 19.

- COHEN-TANNOUJJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics, Volume 1*. Nashville, TN: John Wiley & Sons, 1977. (Quantum Mechanics). Citado na página 27.
- CYBENKO, G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of control, signals and systems*, Springer, v. 2, n. 4, p. 303–314, 1989. Citado na página 34.
- ESFANDIARI, K.; ABDOLLAHI, F.; TALEBI, H. A. *Neural Network-Based Adaptive Control of Uncertain Nonlinear Systems*. Springer International Publishing, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-030-73136-6>>. Citado 7 vezes nas páginas 8, 35, 45, 46, 47, 48 e 54.
- FRANKLIN, G. F.; POWELL, J. D.; WORKMAN, M. L. *Digital control of dynamic systems*. 3. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 52.
- GOLDFARB, M.; CELANOVIC, N. Modeling piezoelectric stack actuators for control of micromanipulation. *IEEE Control Systems Magazine*, v. 17, n. 3, p. 69–79, 1997. Citado na página 31.
- HADJIISKI, L. et al. Application of neural networks to a scanning probe microscopy system. *Thin Solid Films*, v. 264, n. 2, p. 291–297, 1995. ISSN 0040-6090. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0040609095058516>>. Citado na página 21.
- HAQ, S. et al. Versatile bottom-up construction of diverse macromolecules on a surface observed by scanning tunneling microscopy. *ACS Nano*, American Chemical Society (ACS), v. 8, n. 9, p. 8856–8870, set. 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nm502388u>>. Citado na página 28.
- HAYKIN, S. *Redes neurais: Princípios e prática*. 2nd. ed. [S.l.]: Bookman, 2005. ISBN 9788573077186. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 35.
- HOWLAND, R.; BENATAR, L.; SYMANSKI, C. *A Practical Guide to Scanning Probe Microscopy*. DIANE Publishing Company, 1998. ISBN 9780788171260. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=07lMAAAACAAJ>>. Citado 5 vezes nas páginas 7, 18, 21, 28 e 29.
- KLAPETEK, P. Optical measurements. In: *Quantitative Data Processing in Scanning Probe Microscopy*. [S.l.]: Elsevier, 2013. p. 265–293. Citado na página 18.
- KOEPKE, J. C. et al. Atomic-scale evidence for potential barriers and strong carrier scattering at graphene grain boundaries: A scanning tunneling microscopy study. *ACS Nano*, American Chemical Society (ACS), v. 7, n. 1, p. 75–86, jan. 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nm302064p>>. Citado na página 25.
- KUNG, Y.-S.; FUNG, R.-F. Precision control of a piezoceramic actuator using neural networks. In: *IEEE 2002 28th Annual Conference of the Industrial Electronics Society. IECON 02*. [S.l.: s.n.], 2002. v. 3, p. 1866–1871 vol.3. Citado na página 22.
- LANDAU, I. D. et al. *Adaptive control*. London, England: Springer, 2013. (Communications and Control Engineering). Citado 3 vezes nas páginas 8, 45 e 46.

- LI, G.; LUICAN, A.; ANDREI, E. Y. Scanning tunneling spectroscopy of graphene on graphite. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 102, n. 17, abr. 2009. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.176804>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 19.
- MARTÍ N-VEGA, F. et al. Simplified feedback control system for scanning tunneling microscopy. *Review of Scientific Instruments*, AIP Publishing, v. 92, n. 10, oct 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063%2F5.0064511>>. Citado na página 21.
- MOHANTY, S.; DWIVEDY, S. Linear and nonlinear analysis of piezoelectric based vibration absorber with acceleration feedback. *Procedia Engineering*, v. 144, p. 584–591, 2016. ISSN 1877-7058. International Conference on Vibration Problems 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705816302600>>. Citado na página 30.
- MOHN, F. et al. Different tips for high-resolution atomic force microscopy and scanning tunneling microscopy of single molecules. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 102, n. 7, p. 073109, fev. 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4793200>>. Citado na página 29.
- MURPHY, B. E. *The physico-chemical properties of fullerenes and porphyrin derivatives deposited on conducting surfaces*. Tese (Doutorado) — Trinity College Dublin, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 26.
- NIE, S. et al. Scanning tunneling microscopy study of graphene on Au(111): Growth mechanisms and substrate interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 205406, May 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.205406>>. Citado na página 29.
- NISE, N. S. *Engenharia de sistemas de controle*. 6. ed.. ed. [S.l.]: LTC, 2013. ISBN 978-85-216-2136-2. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 44.
- OLESEN, L. et al. Apparent barrier height in scanning tunneling microscopy revisited. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 76, p. 1485–1488, Feb 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.1485>>. Citado na página 27.
- PARK, K. et al. High speed micro positioning system based on coarse/fine pair control. *Mechatronics*, Elsevier BV, v. 5, n. 6, p. 645–663, set. 1995. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0957-4158\(95\)00033-2](https://doi.org/10.1016/0957-4158(95)00033-2)>. Citado na página 31.
- POHL, D. W. Some design criteria in scanning tunneling microscopy. *IBM Journal of Research and Development*, v. 30, n. 4, p. 417–427, 1986. Citado na página 20.
- RIBEIRO, V. H. A. et al. Comparison of deep learning architectures for nonlinear system identification of a hysteretic piezoelectric precise positioner. In: *Proceedings do XV Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente*. SBA Sociedade Brasileira de Automática, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.20906/sbai.v1i1.2658>>. Citado na página 22.
- SAH, S. Machine learning: A review of learning types. MDPI AG, jul. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.20944/preprints202007.0230.v1>>. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.

- SCHMIDT-HIEBER, J. *The Kolmogorov-Arnold representation theorem revisited*. arXiv, 2020. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2007.15884>>. Citado na página 34.
- SHEKHAR, A.; SHARMA, A. Review of model reference adaptive control. In: *2018 International Conference on Information , Communication, Engineering and Technology (ICICET)*. [S.l.: s.n.], 2018. p. 1–5. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- SUDEROW, H. et al. Imaging superconducting vortex cores and lattices with a scanning tunneling microscope. *Superconductor Science and Technology*, IOP Publishing, v. 27, n. 6, p. 063001, may 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0953-2048%2F27%2F6%2F063001>>. Citado na página 17.
- TAJADDODIANFAR, F. *Control System Design for High Performance Scanning Tunneling Microscopy*. Tese (Doutorado) — University of Texas at Dallas, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 28.
- TSUKRUK, V. V.; SINGAMANENI, S. *Scanning probe microscopy of soft matter*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag, 2011. Citado na página 18.
- WANG, Y. et al. Scanning probe microscopy for electrocatalysis. *Matter*, v. 4, n. 11, p. 3483–3514, 2021. ISSN 2590-2385. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590238521004690>>. Citado na página 18.
- WEI, Q.; HU, C.; ZHANG, D. Neural network adaptive control of piezoelectric actuator in scanning tunneling microscope. In: *2011 Second International Conference on Digital Manufacturing & Automation*. [S.l.: s.n.], 2011. p. 767–771. Citado na página 22.
- Widrow. *Adaptive signal processing*. Philadelphia, PA: Pearson Education, 2016. Citado 6 vezes nas páginas 9, 45, 46, 47, 62 e 63.
- WIESENDANGER, R.; GÜNTHERODT, H.-J. (Ed.). *Scanning Tunneling Microscopy III*. Springer Berlin Heidelberg, 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-642-80118-1>>. Citado na página 29.
- YANG, C.-h.; CHANG, K.-m. Adaptive neural network control for piezoelectric hysteresis compensation in a positioning system. In: *2006 IEEE International Symposium on Industrial Electronics*. [S.l.: s.n.], 2006. v. 2, p. 829–834. Citado na página 22.
- YI, K.; VEILLETTE, R. A charge controller for linear operation of a piezoelectric stack actuator. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, v. 13, n. 4, p. 517–526, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 7, 31 e 32.
- YOUNG, R.; WARD, J.; SCIRE, F. The topografiner: An instrument for measuring surface microtopography. *Review of Scientific Instruments*, AIP Publishing, v. 43, n. 7, p. 999–1011, jul. 1972. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1685846>>. Citado na página 17.
- YU, Z. et al. Modeling and compensation of hysteresis in piezoelectric actuators. *Heliyon*, v. 6, n. 5, p. e03999, 2020. ISSN 2405-8440. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405844020308434>>. Citado na página 22.