

2 Inteligência Computacional no Apoio à Nanotecnologia

A Inteligência Computacional é inspirada na natureza e nos últimos anos teve um grande desenvolvimento em teorias, modelos e técnicas, tais como Redes Neurais Artificiais, Lógica Fuzzy e Computação Evolucionária.

Já a Nanotecnologia e a Nanociência compreendem a pesquisa e o desenvolvimento de dispositivos e materiais na escala nanométrica, isto é, trabalha-se próximo do nível atômico e molecular. O desenvolvimento destas áreas nos últimos anos foi impulsionada pela descoberta de novos materiais na escala nanométrica, tais como nanotubos e fulerenos, além do desenvolvimento de equipamentos que permitem a manipulação da matéria próximo destes níveis atômico e molecular.

Aliado a este desenvolvimento da nanotecnologia e da nanociência vem o desenvolvimento de modelos computacionais de sistemas químicos e físicos, que permitem aos pesquisadores a simulação de possíveis nanomateriais, dispositivos e aplicações. Este apoio dos sistemas de computação recebe o nome de “Nanotecnologia Computacional”. Alguns desses sistemas de apoio à nanotecnologia utilizam técnicas de inteligência computacional, o que poder-se-ia chamar de “Nanotecnologia Computacional Inteligente” (alguns exemplos são mostrados mais adiante). Porém, o uso de técnicas de inteligência computacional no desenvolvimento e auxílio da nanotecnologia e da nanociência pode ser mais explorado, até mesmo pelo fato de se poder considerar a nanotecnologia como uma ciência nova e ainda pouco explorada.

De maneira inversa, a nanotecnologia e a nanociência podem inspirar o desenvolvimento de novas técnicas de inteligência computacional, por serem estas inspiradas na natureza. A nanociência explora uma natureza diferente daquela com a qual estamos acostumados, com novas características e leis. À medida que estas pesquisas se desenvolvem novas descobertas são feitas, podendo inspirar os pesquisadores a criar novos sistemas de computação que sejam úteis no desenvolvimento de problemas do dia a dia.

Este capítulo primeiramente descreve resumidamente as técnicas de inteligência computacional, fornecendo uma breve explicação sobre o princípio de funcionamento dos Algoritmos Genéticos (AG), das Redes Neurais Artificiais (RNA), da Lógica Fuzzy (LF) e de Sistemas Híbridos (SH). Em seguida será discutido o apoio da inteligência computacional à nanotecnologia, apresentando alguns exemplos de trabalhos já desenvolvidos.

2.1. Inteligência Computacional

2.1.1. Algoritmos Genéticos

Essencialmente, Algoritmos Genéticos constituem métodos de busca e otimização, altamente paralelos, inspirados nos princípios Darwinianos de seleção natural e reprodução genéticas [6][7][8], que privilegiam os indivíduos mais aptos com maior longevidade e, portanto, com maior probabilidade de reprodução.

Estes algoritmos são inspirados nos processos genéticos de organismos biológicos para procurar soluções ótimas ou sub-ótimas. Para tanto, procede-se da seguinte maneira: cada possível solução de um problema pode ser codificada em uma estrutura chamada “cromossomo”, que é composta por uma cadeia de bits ou símbolos. Então, estes cromossomos representam indivíduos, que são evoluídos ao longo de várias gerações, de forma similar aos seres vivos, de acordo com os princípios da seleção natural e sobrevivência dos mais aptos, conforme descrito por Charles Darwin em seu livro “A Origem das espécies” [9]. Simulando estes processos, os algoritmos genéticos são capazes de “evoluir” soluções de problemas do mundo real.

O processo de evolução começa com a criação aleatória dos indivíduos que formarão a população inicial. A partir de um processo de seleção baseado na aptidão de cada indivíduo, são escolhidos indivíduos para a fase de reprodução, que cria novas soluções utilizando para isto um conjunto de operadores genéticos (basicamente cruzamento e mutação). Estas novas soluções serão avaliadas e suas aptidões irão determinar sua probabilidade de permanecer nas gerações seguintes.

O procedimento básico de um algoritmo genético [10] é apresentado na figura 1 abaixo.

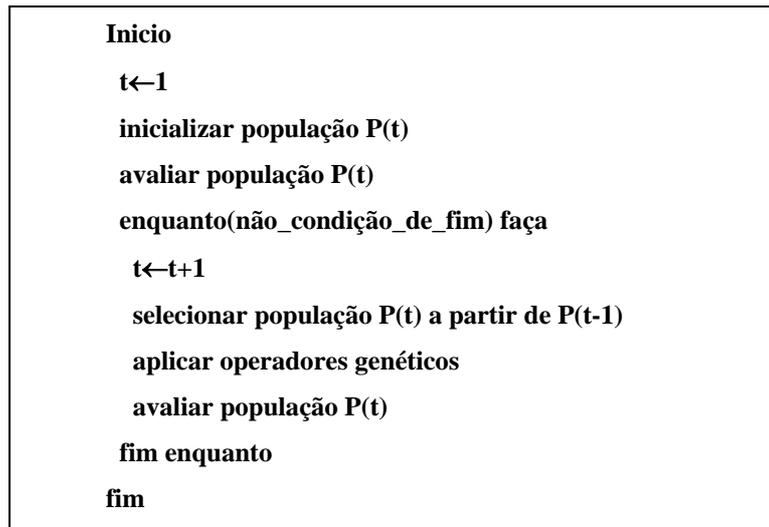


Figura 1– **Procedimento básico do algoritmo genético.**

A condição de parada do algoritmo pode ser determinada de várias maneiras: número de gerações, número de indivíduos criados, obtenção de um dado valor de avaliação, isto é, um ponto ótimo ou sub-ótimo, além de tempo de processamento e grau de similaridade entre os indivíduos de uma população (que indica convergência).

2.1.2. Lógica Fuzzy

A imprecisão e a incerteza são dois dos principais aspectos da imperfeição da informação. As teorias mais conhecidas para tratar de imprecisão e incerteza são, respectivamente, a teoria dos conjuntos e a teoria de probabilidades [11]. Estas teorias, embora muito úteis, nem sempre conseguem captar a riqueza da informação fornecida por seres humanos. Seres humanos são capazes de lidar com processos bastante complexos, baseados em informações imprecisas ou aproximadas. A estratégia adotada pelos operadores humanos é também de natureza imprecisa e geralmente possível de ser expressa em termos lingüísticos. A Teoria de Conjuntos Fuzzy e os conceitos de Lógica Fuzzy podem ser utilizados para traduzir em termos matemáticos a informação imprecisa expressa por um conjunto de regras lingüísticas. O resultado é um sistema de inferência baseado em regras, na qual a Teoria de Conjuntos Fuzzy e a Lógica Fuzzy fornecem o ferramental matemático para se lidar com tais regras lingüísticas [12].

A Teoria dos Conjuntos Fuzzy foi inicialmente introduzida por Zadeh [13], que observou a impossibilidade de modelar sistemas com fronteiras mal definidas através das abordagens matemáticas rígidas e precisas dos métodos clássicos. A Teoria de Conjuntos Fuzzy proporciona uma estrutura matemática que permite trabalhar com a imprecisão e a incerteza da informação fornecida por seres humanos.

Cada vez mais esta teoria tem sido usada em sistemas que utilizam informações fornecidas por seres humanos e tem produzido bons resultados nas mais variadas aplicações [14][15][16].

A Teoria dos Conjuntos Fuzzy, quando utilizada juntamente com conceitos de Lógica, resulta nos chamados sistemas de inferência Fuzzy. No entanto, quando usada para efetuar operações aritméticas, os conjuntos Fuzzy são conhecidos como números Fuzzy.

Um Conjunto Fuzzy é a ponte que liga o conceito impreciso a sua modelagem numérica, atribuindo-se a cada elemento do universo um valor entre 0 e 1, que representa o grau de pertinência deste indivíduo ao conjunto Fuzzy.

Um conjunto Fuzzy F definido no universo de discurso U pode ser representado como um conjunto de pares ordenados de um elemento genérico x e seu grau de pertinência, μ . Este valor de pertinência é obtido mediante uma função de pertinência que mapeia os elementos de U para o intervalo $[0, 1]$, conforme descrito pela eq. (1).

$$F = \{(x, \mu(x)) / x \in U\} \quad (1)$$



Figura 2– Componentes de um Conjunto Fuzzy.

A figura 2 ilustra os componentes de um conjunto Fuzzy. O eixo x corresponde aos números reais, que constituem o domínio do conjunto Fuzzy, o eixo y, com valores entre 0 e 1, representa o grau de pertinência ao conjunto, e a curva representa a função de pertinência do conjunto, conectando cada elemento do domínio com o seu grau de pertinência [12][14][15].

2.1.3. Redes Neurais

Redes Neurais [17] são modelos computacionais não lineares inspirados na estrutura de neurônios interconectados existente no cérebro humano, sendo capazes de realizar as seguintes operações: aprendizado, associação, generalização e abstração. As redes neurais são compostas por diversos elementos processadores (neurônios artificiais), altamente interconectados, que efetuam operações simples, transmitindo seus resultados aos processadores vizinhos. A habilidade das redes neurais em realizar mapeamentos não-lineares entre suas entradas e saídas as tem tornado prósperas no reconhecimento de padrões e na modelagem de sistemas complexos.

Devido a sua estrutura, as redes neurais são bastante eficazes no aprendizado de padrões a partir de dados não-lineares, incompletos, com ruído ou mesmo compostos por exemplos contraditórios.

Na literatura pode-se encontrar muitos tipos de redes neurais com diferentes arquiteturas e algoritmos de aprendizado. Neste trabalho será utilizado a Rede Neural do tipo Hopfield, que será rapidamente apresentada mais à frente, no capítulo que trata do simulador de QCA.

2.1.4. Sistemas Híbridos

O conceito de sistema híbrido inteligente é bastante complexo e pode englobar diferentes tipos de abordagem. De uma maneira geral, sistemas híbridos inteligentes são aqueles que englobam dois ou mais métodos inteligentes. Estes sistemas híbridos inteligentes têm se tornado bastante populares e têm chamado a atenção de diversos pesquisadores.

Dentre as vantagens do desenvolvimento dos sistemas híbridos inteligentes pode-se destacar: a integração de duas ou mais técnicas permite que uma compense as deficiências da outra; a ampliação da capacidade do sistema de adquirir novas informações; a possibilidade de abordar problemas mais complexos; e o aumento do desempenho devido ao processamento paralelo de informação pelos diferentes módulos[18].

Além das vantagens apresentadas, os sistemas híbridos inteligentes imitam ainda mais o funcionamento dos seres humanos, já que estes não utilizam apenas um método para solução de um determinado problema.

Podemos destacar alguns tipos [18] de sistemas híbridos inteligentes, tais como: Sistemas Simbólicos-Difusos, Simbólicos-Genéticos, Neuro-Genéticos, Neuro-CBR e Neuro-Simbólicos.

Um dos sistemas híbridos inteligentes mais estudado e desenvolvido é o sistema Neuro-Fuzzy [19][20], que é um sistema Neuro-Simbólico. Os sistemas Neuro-Fuzzy combinam a capacidade de aprendizado das redes neurais artificiais com o poder de interpretação lingüística dos sistemas de inferência Fuzzy. A idéia básica de um sistema Neuro-Fuzzy é implementar um sistema de inferência Fuzzy numa arquitetura paralela distribuída, de tal forma que os paradigmas de aprendizado comuns às redes neurais possam ser aproveitados nessa arquitetura híbrida.

2.2. Sistema de Apoio à Nanotecnologia

Nesta seção são citados alguns trabalhos científicos que têm relação com o uso das técnicas de inteligência computacional no apoio à nanotecnologia, ou seja, a “nanotecnologia computacional inteligente”. O objetivo é comprovar que essas técnicas vêm sendo utilizadas por outros pesquisadores, com bons resultados e expectativas.

Klimeck, Stoica e outros pesquisadores [21][22] apresentam uma aplicação onde um algoritmo genético (AG) é utilizado, juntamente com um simulador de dispositivos quânticos, com o objetivo de obter os parâmetros de dispositivos nanoeletrônicos (diodos de tunelamento ressonante) que melhor aproximem a curva I-V obtida por dados experimentais podendo, assim, estimar a espessura das

camadas e a concentração de dopantes encontradas no dispositivo real. Além disso, os pesquisadores especulam sobre a síntese de futuros circuitos nanométricos utilizando estes dispositivos.

Em outro trabalho, Sarkar utiliza redes neurais artificiais e algoritmos genéticos com o propósito de encontrar parâmetros otimizados para a realização de modelos de nanodispositivos [31]. Estes parâmetros podem ser usados nos processos de fabricação de nanodispositivos (ex. Poços Quânticos de GaAs) mais eficientes.

Tour et. al. descrevem a utilização de algoritmos genéticos na síntese de dispositivos moleculares em uma nanocélula, onde o posicionamento e a conexão das chaves moleculares internas são indefinidas [23], um trabalho semelhante ao uso de AG em uma FPGA. Os resultados obtidos mostram que a utilização de AG possibilita a fabricação das nanocélulas como portas lógicas, definindo a sua estrutura interna. Dentre as portas lógicas sintetizadas estão: uma porta NAND, uma porta NOR e um somador de 1 bit.

Outro trabalho que tem o propósito de desenvolver a arquitetura de um circuito molecular é apresentado por Masiero et. al. [32]. Neste trabalho, os diodos moleculares de Tour-Reed são utilizados como unidades básicas, porém a curva I-V destes diodos possui variações na magnitude e no pico de corrente, o que pode dificultar no desenvolvimento da arquitetura. Neste trabalho, técnicas de Hardware Evolucionário, que utilizam algoritmos genéticos, são utilizadas para resolver este problema, desenvolvendo uma arquitetura adequada.

Alguns trabalhos propõem que uma possibilidade para o desenvolvimento da nanoeletrônica realizando funções complexas, utilizando *single-electron transistors* (SET), envolve a utilização da arquitetura de redes neurais artificiais [24][25][26][27]. Assim, é possível desenvolver circuitos mais robustos e tolerantes a falhas. Simulações mostram que os circuitos propostos nestes trabalhos são capazes de funcionar mesmo com uma grande taxa de defeitos nos dispositivos.

Os trabalhos citados acima estão relacionados ao uso de técnicas de inteligência computacional na nanoeletrônica. A seguir são citados outros trabalhos que utilizam técnicas de inteligência computacional, porém em outras áreas da nanotecnologia.

Recentes estudos mostram que algoritmos genéticos estão sendo empregados no desenvolvimento de novas moléculas. Globus et. al. apresenta um trabalho que sintetiza novas moléculas representadas por grafos (i. é. conjunto de átomos e ligações entre eles). Muitos problemas associados ao desenvolvimento da nanotecnologia requerem o desenvolvimento de novas moléculas. Frequentemente é possível definir com precisão o que uma molécula deve fazer, porém o desenvolvimento e a síntese destas moléculas não são triviais. Logo, o uso de técnicas que automaticamente sintetizam moléculas fornece um grande auxílio aos pesquisadores, conforme demonstrado em [28].

Semelhante ao trabalho acima, Lameijer et. al. apresentam uma ferramenta chamada “*Molecule Evoluator*” idealizada com o objetivo de auxiliar os químicos no desenvolvimento de novas moléculas para medicamentos [29]. Os autores apresentam resultados inovadores, sugerindo que a ferramenta pode ser usada para aumentar a capacidade e conhecimento dos químicos, além de fazerem perspectivas animadoras para o futuro desenvolvimento de novos medicamentos.

Exner e Brickmann apresentam um trabalho que utiliza um sistema fuzzy para o tratamento de complementabilidade da superfície de moléculas [30]. A identificação do complemento da superfície de uma molécula é o primeiro passo para saber onde uma molécula pode ou não ser posicionada. Este trabalho tem grande importância, como no desenvolvimento de moléculas para a medicina, na atividade biológica, na química supramolecular e no desenvolvimento da nanotecnologia.

A possibilidade de criar novos polímeros condutores explorando o conceito de copolimerização tem atraído atenção dos pesquisadores nos pontos de vista teórico e experimental. Devido à rica reatividade do carbono, um número quase infinito de novas estruturas é possível e o procedimento de tentativa e erro tem sido a regra. Em [33][34] utiliza-se Algoritmos Genéticos para gerar novas estruturas com propriedades pré-especificadas pelo usuário. Os resultados encontrados são bastante satisfatórios e fornece perspectivas promissoras.

Além destes trabalhos acima citados, inúmeros outros [35][36][37][38][39][40] exemplificam o uso das técnicas de inteligência computacional como auxílio à nanotecnologia. Porém, muito ainda pode ser feito e o uso das técnicas de IC pode ajudar em muito no desenvolvimento de outros dispositivos, equipamentos e circuitos nanométricos.

Por outro lado, a mecânica quântica, que domina a física na escala nanométrica, tem inspirado o desenvolvimento de uma nova forma de computação chamada de “Computação Quântica”. A idéia de Computação Quântica, onde a informação é tratada de maneira quântica, tem sido desenvolvida teoricamente ao longo de várias décadas, a fim de solucionar as questões sobre a capacidade e limitações de máquinas. Em computadores quânticos, os zeros e uns dos computadores digitais clássicos são substituídos pelos estados quânticos de um sistema de dois níveis [41]. Recentemente, as pesquisas sobre Computação Quântica têm inspirado o desenvolvimento de novos algoritmos evolucionários [42][43][44][45]. Estes algoritmos evolucionários com inspiração quântica utilizam o conceito de bits quânticos, ou *qbits*, e o conceito da superposição dos estados quânticos.

Analogamente, os recentes avanços nos estudos de sistemas, teorias e dispositivos nanométricos podem inspirar o desenvolvimento de novas teorias, modelos e técnicas de inteligência computacional, criando novas ferramentas para solucionar problemas do mundo real.

Autor e Referência	Título	Técnica	Observações
Klimeck, et. al. [21]	Genetically Engineered Nanoelectronics	Algoritmo Genético	Otimiza parâmetros de dispositivos nanoeletrônicos
Stoica, et. al.[22]	Evolutionary Design of Electronics Devices and Circuits	Algoritmo Genético	Otimiza parâmetros de dispositivos nanoeletrônicos
Sarkar , Biswas e Choudhury [31]	Soft Computing Tools for the Simulation of Efficient Nanodevice Models	Algoritmo Genético e Redes Neurais	Otimiza parâmetros de nanodispositivos
Tour, et. al. [23]	Nanocell Logic Gate for Molecular Computing	Algoritmo Genético	Sintetiza dispositivos moleculares
Masiero, et al. [32]	Apoio a Síntese de Circuitos Moleculares	Algoritmo Genético	Sintetiza circuitos moleculares
Roermund e Hoerkstra [24]	From Nanotechnology to Nanoelectronics Systems, From SETs to Neural Nets	Redes Neurais	Desenvolve circuitos mais robustos e tolerantes à falha
Roermund e	Spike Correlation Based Learning for Unsupervised	Redes Neurais	Desenvolve circuitos mais robustos e

Hoerkstra [27]	Neural Lattice Structures		tolerâtes à falha
Schimid e Leblebici [25]	Robust Circuit and System Design Methodologies for Nanometer-Scale Devices and Single-Electron	Redes Neurais	Desenvolve circuitos mais robustos e tolerâtes à falha
Oya, et. al.[26]	Single-Electron Circuit for Inhibitory Spiking Neural Network with Fault-Tolerant Architecture	Redes Neurais	Desenvolve circuitos mais robustos e tolerâtes à falha
Globus, et. al. [28]	Automatic Molecular Design Using Evolutionary Techniques	Algoritmo Genético	Sintetiza novas moléculas
Lameijer, et. al. [29]	The Molecule Evoluator: an Interactive Evolutionary Algorithm for Designing Drug Molecules	Algoritmo Genético	Sintetiza novas moléculas
Exner e Brickmann [30]	The identification of complementarity of molecular surfaces using fuzzy set theory	Lógica Fuzzy	Identifica o complemento da superfície de uma molécula.
Giro, Cyrillo e Galvão [33]	Using Artificial Intelligence Methods to Design New Conducting Polymers	Algoritmo Genético	Criação de novas estruturas de polímeros
Pacheco e Masiero [34]	Projeto de Novos Polímeros Condutores	Algoritmo Genético	Criação de novas estruturas de polímeros
Brown e McShane [35]	Optimal Design of Nanoengineered Implementable Optical Sensors Using a Genetic Algorithm	Algoritmo Genético	Otimização de nanosensores ópticos
Lohn, et. al. [36]	Evolvable Systems for Space Applications	Algoritmo Genético	Síntese de nanodispositivos para aplicações espaciais
Jonhson, et. al. [37]	Nanosat Intelligent Power System Development	Algoritmo genético	Síntese de nanodispositivos para aplicações espaciais
Toth, et. al. [38]	Quantum Cellular Neural Network	Rede Neural	Utilização de redes neurais em células quântica

Cavalcanti e Freitas [39]	Collective Robotic Coherence Behaviour for Nanosystems with Sensor-Based Neural Motion	Rede Neural	Utilização de redes neurais em nanosistemas
Durakbasa, et. al.[40]	Artificial Intelligence Based Supervision and Confirmation of Complex Measurement Systems	Logica Fuzzy	

Tabela 1– **Trabalhos em nanotecnologia utilizando Inteligência Computacional.**

O próximo capítulo introduz a teoria de autômatos celulares com pontos quânticos (QCA).