

5

Projeto Automático de Nanodispositivos

5.1

Otimização de OLEDs Multicamadas

OLEDs (do inglês - Organic light emitting diodes) são constituídos por materiais orgânicos emissores de luz que, quando alimentados com corrente elétrica, podem produzir *displays* com alta qualidade. Um dos vários fatores que fazem dos OLEDs um dispositivo superior à tecnologia LCD é o fato de que estes não requerem luz de fundo, permitindo assim operarem em regime de menor consumo de potência, sem por isso perder qualidade de brilho e contraste. Além disso, tais dispositivos mantêm a clareza de visão praticamente sob qualquer ângulo. Existem, porém, algumas desvantagens que têm limitado a eficiência de OLEDs. Nas primeiras pesquisas, observou-se nos dispositivos mono-camadas que a maioria dos portadores injetados a partir dos eletrodos difundiam-se para o eletrodo oposto sem sofrer recombinação (Ma, 2002). Outra limitação típica é a alta mobilidade dos portadores de carga positiva quando comparados aos de carga negativa (Ma, 2000, Werner, 2003). Isso é uma característica presente em materiais orgânicos eletroluminescentes. Mais ainda, existe uma alta barreira de energia criada pela diferença entre a função trabalho do catodo metálico e o menor orbital molecular ocupado (LUMO) (do inglês - Lowest Unoccupied Molecular Orbital) do semicondutor, inibindo a injeção de portadores de carga negativa. Essas desvantagens resultam na formação da maioria dos pares elétron-buraco na vizinhança do catodo, suprimindo a emissão de luz (Malliaras, 1998, Koehler, 2000). Diversas metodologias foram propostas para evitar essas dificuldades, tais como estruturas multicamadas alternadas, cada uma composta de moléculas portadoras de elétron ou buracos, exclusivamente (Greenham, 1993). Outra proposta consiste em estruturas híbridas com os materiais misturados em uma mesma camada única (Cao, 1999). Recentemente, uma nova e aprimorada proposta foi idealizada e pode ser considerada como a combinação das duas técnicas anteriores. Nesse caso, um dispositivo multicamada foi desenvolvido com uma concentração graduada na camada de emissão, apresentando uma melhora na eficiência da eletroluminescência (Ma, 2002).

Com base na última metodologia citada e em um trabalho prévio para mod-

elar dispositivos monocamadas (Scott, 1997), os autores em (Gusso, 2004) apresentaram um modelo analítico para otimizar o comportamento elétrico na região emissiva dos dispositivos OLED de multicamadas graduadas. O grande número de possíveis configurações sugere que a busca empregando um algoritmo poderia ser mais apropriada neste caso. O propósito desse trabalho é a utilização de algoritmos evolucionários para encontrar as concentrações otimizadas para ETM e HTM em cada camada graduada do dispositivo.

5.1.1

O Modelo de OLED Multicamada

O modelo usado nesse trabalho foi apresentado em (Gusso, 2004) e é, de fato, uma extensão do modelo proposto em (Scott, 1997). O modelo original foi desenvolvido para descrever correntes bipolares em diodos orgânicos monocamadas. O modelo estendido pretende descrever os dispositivos com multicamadas graduadas através da aplicação do modelo original para cada monocamada. O modelo calcula o valor da relação $V/J^{0.5}$, onde V é a voltagem aplicada e J é a densidade de corrente do dispositivo. O modelo necessita também introduzir condições de contorno em cada interface. Uma vez que a descrição dos modelos em suas formas analíticas não fazem parte do objetivo dessa tese, esta não será aqui tratada em detalhe. Essa seção focará na descrição de algumas considerações físicas feitas em (Gusso, 2004).

Primeiramente, o modelo considera que a primeira e a última camadas são compostas de puro ETM e HTM, respectivamente. Entretanto, estas duas camadas foram ignoradas nos cálculos e somente a região de camadas com concentração graduadas é considerada, já que todas as recombinações elétron-buraco vão ocorrer somente nessa área dos dispositivos. Nas regiões graduadas, a concentração de HTM, chamada de r , aumenta da primeira para a última camada ($r = [HTM]/([ETM]+[HTM])$). Com o intuito dos resultados teóricos serem comparados com resultados experimentais, os seguintes valores para as mobilidades são usados (Gusso, 2004) (todos os valores em $cm^2/V.s$) :

$$\begin{aligned}\mu_n(Alq_3) &= 1x10^{-5}; \mu_p(Alq_3) = 1x10^{-7} \\ \mu_n(NPB) &= 1x10^{-7}; \mu_p(NPB) = 1x10^{-4}\end{aligned}$$

Neste caso, μ_n e μ_p são, respectivamente, a mobilidade de elétrons e buracos do material puro indicado em parenteses. Entretanto, os valores da mobilidade nas regiões graduadas (com mistura de materiais) não são facilmente obtidos. Na literatura, os resultados para alguns materiais e métodos de mistura indicam que $\mu \approx r^{-n}$, onde n pode assumir os valores: $0, 8 \leq n \leq 2$ (Gusso, 2004, Harima, 2000).

A espessura total da região graduada considerada neste trabalho é sempre 50nm, dividida igualmente por todas as camadas. De modo a comparar com os resultados experimentais de (Ma, 2002), a espessura das camadas puras de ETM e

HTM são de 20nm e 30nm, respectivamente.

Nesse trabalho, o primeiro passo foi implementar o modelo proposto na literatura de modo a validá-lo com as configurações calculadas em (Gusso, 2004). A tabela 5.1.1 apresenta os valores obtidos em (Gusso, 2004) bem como os obtidos nesse trabalho. As pequenas diferenças obtidas podem ser atribuídas aos erros de truncamento inerentes ao processo de solução numérica no método adotado.

n	n'	Perfil de Concentração [Alq ₃]:[NPB]	$V/J^{0,5}$ (Gusso, 2004)	$V/J^{0,5}$ Este Trabalho	Diferença %
1	1	10:1, 6:1, 1:1, 1:6, 1:10	22,8	23,18	1,67
2	2	2:1, 2:1, 1:1, 1:2, 1:2	18	17,97	0,17
1,5	1,5	3:1, 2:1, 1:1, 1:2, 1:3	20,3	21,51	5,96
1,5	2	3:1, 2:1, 1:1, 1:2, 1:3	19,3	20,25	4,92
1	2	7:2, 5:2, 3:2, 2:3, 1:2	20,9	21,89	4,73

Tabela 5.1: Validação do Modelo de concentração graduada. Os parâmetros n e n' são usadas para calcular a mobilidade na região graduada. O modelo calcula a relação $V/J^{0,5}$.

5.1.2

A Otimização Evolucionária

Todos os dispositivos nesse trabalho foram otimizados por um Algoritmo Genético (AG).

O objetivo do AG é minimizar o valor da razão $V/J^{0,5}$. Todos os dispositivos otimizados nesse trabalho possuem cinco camadas internas, cada uma com 10nm de espessura. A representação esquemática do dispositivo multi-camada é mostrado na figura 5.1(a), com a região graduada representada em escala de cinza. Assim, uma representação por AG foi desenvolvida para otimizar as concentrações de portadores de elétrons e buracos em cada camada da região graduada. A figura 5.1(b) mostra a representação esquemática do cromossomo usado na otimização dos dispositivos. O primeiro gene, G1, do cromossomo representa a concentração de ETM na camada L1. O segundo gene do cromossomo indica o quanto a concentração de ETM na camada L2 é diminuída em relação a camada L1 e assim por diante. Cada gene no cromossomo possui um domínio fixo.

Para evitar uma concentração de ETM perto de 100% na primeira camada, o valor máximo do primeiro gene foi fixado em 95. O limite inferior foi ajustado para 50. Tais valores foram escolhidos em razão dos valores assumidos em (Gusso, 2004). Para os outros genes, o domínio se encontra entre 0 e 40. A figura 5.2 mostra um exemplo de como um cromossomo é usado para criar uma solução para o problema.

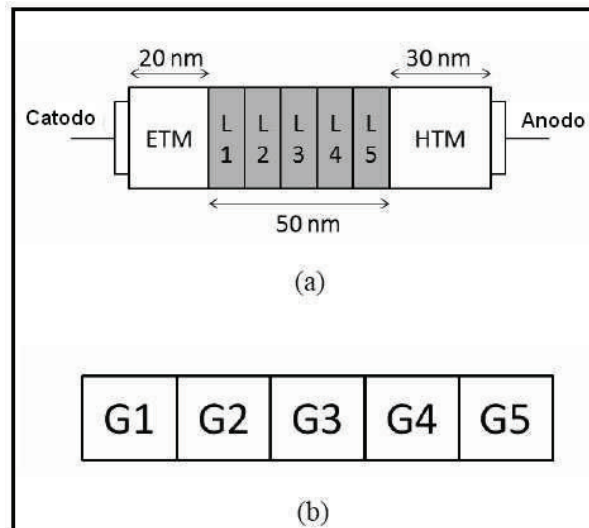


Figura 5.1: a) Representação esquemática de um dispositivo multicamada otimizado. A região graduada é representada em escala de cinza. b) A representação do cromossomo.

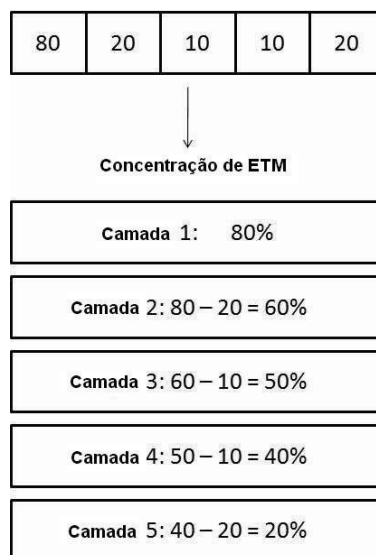


Figura 5.2: Um exemplo de como criar uma solução para um cromossomo.

Uma vez que o domínio máximo para a primeira camada foi fixado em 95%, o mesmo procedimento deve ser feito na última camada. Em outras palavras, a concentração de ETM não pode ser inferior a 5%. De modo a respeitar esta restrição e evitar soluções inválidas, o método GENOCOP, proposto por Michalewicz, foi aplicado (Michalewicz, 1994). Pode-se facilmente perceber que deseja-se otimizar um problema com uma restrição linear da forma:

$$G_1 - G_2 - G_3 - G_4 - G_5 \geq 5 \tag{5-1}$$

onde G_i é o valor do gene i . O GENOCOP é um método aplicado juntamente com o AG e fornece uma maneira de manipular restrições lineares. A ideia principal por

trás do método está na criação de operadores genéticos específicos, que garantem manter todos os cromossomos dentro do espaço de soluções permitido.

Foram feitas otimizações para cinco combinações diferentes de n e n' , de modo a comparar com os resultados apresentados em (Gusso, 2004). Para cada otimização foram usados os seguintes parâmetros:

- Número de gerações : 400;
- Tamanho da população : 150;
- GAP : 80%
- Taxa de cruzamento : [80% - 60%];
- Taxa de mutação uniforme : [5% - 10%];
- Taxa de mutação não uniforme : [8% - 30%];

O significado de cada parâmetro do AG pode ser facilmente encontrado em (Michalewicz, 1994).

5.1.3

Resultados e Discussões

Os resultados da otimização por AG são mostrados na Tabela 5.1.3. As concentrações otimizadas pelo AG minimizam a relação $V/J^{0,5}$ para todas as combinações de n e n' , quando comparadas com os resultados apresentados em (Gusso, 2004). Para a primeira e segunda configuração a melhora foi pequena, aproximadamente 1,5%. Entretanto, os perfis de concentração encontrados foram bastante diferentes daqueles apresentados em (Gusso, 2004), os quais são todos simétricos. Neste trabalho, somente para a primeira configuração otimizada pelo AG as concentrações são praticamente simétricas. Para a segunda configuração, as duas primeiras camadas, próxima do catodo, apresentaram concentração majoritária de ETM, aproximadamente 70%, enquanto as outras três camadas apresentaram concentração majoritária de HTM, aproximadamente 65%. Todas as outras configurações apresentaram comportamento similar à esta última, com pequenas variações. A diferença é maior na última configuração, onde a concentração de ETM nas duas primeiras camadas aumenta para aproximadamente 80%. Para os últimos três casos, a melhoria na relação $V/J^{0,5}$ ficou em torno de 7%. Os experimentos também foram realizado usando-se o Algoritmo Evolucionário com inspiração Quântica (AEIQ) e o Algoritmo de Enxame de Partículas (PSO, do inglês - Particle Swarm Optimization). Em ambos os casos os resultados foram semelhantes aos encontrados.

Contudo, quando um experimento é realizado, não é possível saber quais são os valores reais de n e n' . Por esse motivo, decidiu-se calcular a relação $V/J^{0,5}$ para cada configuração de n e n' com todos os perfis de concentração, de modo a entender

n	n'	Perfil de Concentração [Alq ₃]:[NPB]	$V/J^{0,5}$ anterior	$V/J^{0,5}$ otimizado	Melhoria %
1	1	7,2:1, 7,2:1, 0,9:1, 0,1:1, 0,1:1	23,18	22,82	1,54
2	2	2,1:1, 2,1:1, 0,6:1, 0,6:1, 0,6:1	17,97	17,72	1,4
1,5	1,5	2,5:1, 2,5:1, 0,5:1, 0,4:1, 0,4:1	21,51	19,98	7,13
1,5	2	2,7:1, 2,7:1, 0,6:1, 0,6:1, 0,6:1	20,25	18,76	7,37
1	2	4:1, 4:1, 0,7:1, 0,6:1, 0,6:1	21,89	20,36	6,98

Tabela 5.2: Resultados da otimização por AG. Os valores da coluna “anterior” se referem a (Gusso, 2004).

o comportamento e comparar qual o melhor modelo para uma combinação de n e n' quaisquer.

A tabela 5.1.3 mostra o melhor perfil de concentração otimizado, juntamente com os melhores perfis de concentração de (Gusso, 2004) e (Ma, 2002). As concentrações em (Ma, 2002) foram usadas em um trabalho experimental. Pode ser visto que a relação $V/J^{0,5}$ da melhor concentração otimizada nesse trabalho é aproximadamente 9,7% menor que a melhor relação $V/J^{0,5}$ da concentração experimental obtida em (Ma, 2002).

n	n'	Concentração		
		[Alq ₃]:[NPB]		
		Otimizado	(Gusso, 2004)	(Ma, 2002)
		2,5:1, 2,5:1, 0,5:1, 0,4:1, 0,4:1	2:1, 2:1, 1:1, 1:2, 1:2	9:1, 7:1, 5:2, 1:1, 1:3
		$V/J^{0,5}$		
1	1	23,33	23,97	24,86
2	2	17,91	17,98	20,65
1,5	1,5	19,98	20,36	22,32
1,5	2	18,91	19,13	21,27
1	2	20,68	21,13	22,50
	Média	20,16	20,52	22,32

Tabela 5.3: Comparação entre melhor configuração otimizada por AG, melhor configuração de (Gusso, 2004) e melhor configuração de (Ma, 2002). Em negrito o melhor resultado para cada caso.

De modo a verificar a incerteza nos valores das mobilidades de HTM puro, uma outra otimização foi realizada, considerando n e n' iguais a 1,5 e o $\mu_n(NPB) = 5 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/V$, tal como em (Gusso, 2004). O valor da relação $V/J^{0,5}$ calculada em (Gusso, 2004) é igual à 23,50 com concentração ETM:HTM de [8 : 1,4 : 1,2 : 1,1 : 1,1 : 1]. As concentrações otimizadas pelo AG fornecem um valor para $V/J^{0,5}$ igual à 22,76 e a concentração obtida é [6,4 : 16,4 : 15,4 : 10,86 : 10,86 : 1].

Nesse caso, a melhora foi de 5,9%.

Os resultados das simulações mostram que os dispositivos otimizados pelo AG apresentam uma performance $\approx 7\%$ melhor que aqueles apresentados em (Gusso, 2004). Com o objetivo de validar experimentalmente estes resultados, dois dispositivos foram fabricados no Laboratório de Dispositivos Orgânicos (LADOR) do Inmetro. O primeiro dispositivo é aquele otimizado pelo AG e mostrado na tabela 5.1.3 e o segundo dispositivo é aquele da referência (Ma, 2002) e também mostrado na tabela 5.1.3. Os resultados preliminares mostram que o dispositivo 1, fabricado com parâmetros otimizados obtidos do modelo AG, tem um desempenho muito melhor que o dispositivo 2, de (Ma, 2002). Os resultados das medidas são mostrados na figura 5.3 que apresenta a eletroluminescência (EL) características dos dois dispositivos.

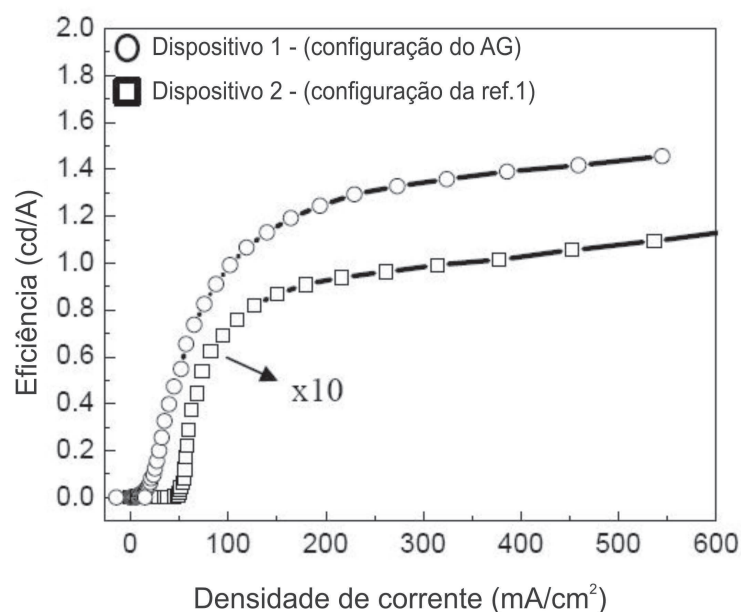


Figura 5.3: Eficiência x Densidade de Corrente dos dispositivos 1 e 2

A eficiência máxima do dispositivo 1 é em torno de 1.4 cd/A em 500 mA/cm^2 contra 0.14 cd/A em 900 mA/cm^2 para o dispositivo 2. Embora o valor da eficiência do dispositivo 2 seja diferente daquele reportado em (Ma, 2002), o ponto aqui não é seu valor absoluto, mas a comparação entre os valores da configuração dos dois dispositivos graduados obtidos pelo mesmo arranjo experimental.

Esta tese está focada no resultados teóricos e os trabalhos experimentais não serão discutidos a fundo. O apêndice D apresenta um resumo dos experimentos realizados.

5.2

Otimização de Circuitos de QCA Robustos

O grande avanço da indústria de eletrônica e computação nos últimos 60 anos é consequência da criação e miniaturização dos transistores. Porém, os dispositivos atuais estão próximos do limite físico de miniaturização devido aos diversos efeitos não encontrados em escalas maiores, tal como a fuga de correntes (VilelaNeto, 2007).

Uma possível alternativa aos atuais circuitos VLSI/CMOS é o paradigma intitulado Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA - do inglês, Quantum-Dots Cellular Automata) (Lent, 1994). A tecnologia QCA é formada por um conjunto de células que, juntas e organizadas de uma forma determinada, são capazes de realizar funções computacionais.

Uma das dificuldades que se encontra na construção de dispositivos baseados em QCA é a ausência de metodologias que permitam um arranjo automático e eficiente das células nos circuitos. Tendo em vista a resolução deste problema, o trabalho realizado anteriormente, proposto pelo autor desta tese, apresenta um método de construção de circuitos de QCA por Algoritmos Genéticos (VilelaNeto, 2007).

Porém, o trabalho anterior visou apenas sintetizar circuitos com a lógica correta, além de conterem um número reduzido de células. Este trabalho visa sintetizar dispositivos com o objetivo de serem mais resistentes às influências externas e com isso menos suscetíveis às falhas. Levando isto em consideração, utilizam-se Algoritmos Genéticos para descobrir a posição das células que, além de encontrar circuitos com a lógica correta e com poucas células, possam tornar os sinais de saída o mais forte possível.

5.2.1

Autômatos Celulares com Pontos Quânticos

A célula de um Autômato Celular com Pontos Quânticos é formada por quatro pontos, sendo que cada um destes representa um local onde a carga pode ou não estar posicionada. Cada célula possui duas cargas livres que podem tunelar para quaisquer uns dos quatro pontos quânticos. As células são construídas de modo que as cargas sejam proibidas de tunelar para o seu exterior, devido a uma barreira de potencial alta e larga. A figura 5.4 ilustra uma célula de QCA.

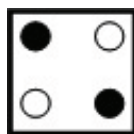


Figura 5.4: Uma célula de QCA. As cargas estão localizadas nos pontos pretos.

Devido à interação Coulombiana, as cargas presentes em uma célula tendem a se posicionar o mais distante possível umas das outras. Baseado nisto, percebe-se que as cargas ocuparão pontos que se localizam em diagonais opostas, só sendo possível obter dois estados estáveis na célula, conforme ilustrado na figura 5.5. Por convenção, um deles representará o binário “0” e o outro o binário “1”.

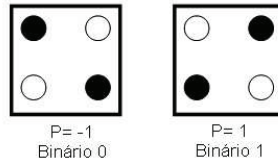


Figura 5.5: Estados de polarização de uma célula de QCA.

A letra P na figura 5.5 indica a polarização da célula e corresponde à distribuição de probabilidade da localização das cargas em seu interior. Seu valor pode variar no intervalo [-1,1]. Quanto mais próximo de um extremo este valor estiver, mais sua configuração de carga se assemelha com a polarização ilustrada na figura 5.5.

Quando duas células são posicionadas próximas uma da outra, a polarização de uma interfere na polarização da outra. As células dispostas lado a lado tendem a assumir polarizações semelhantes. Este comportamento pode ser visualizado no gráfico da figura 5.6. A curva relaciona a polarização da célula 2, no eixo horizontal, com a polarização da célula 1, no eixo vertical. Portanto, o posicionamento das células em locais corretos leva à criação de circuitos lógicos (Lent, 1994, VilelaNeto, 2006).

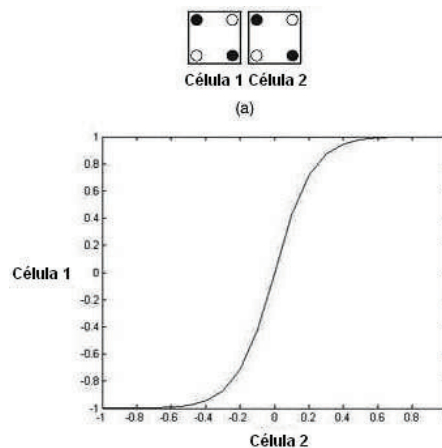


Figura 5.6: Interferência entre duas células de QCA lado a lado.

Circuitos de QCA possuem zonas de *clock*, que tem por objetivo controlar o fluxo de informação dentro do circuito. Este controle é realizado pela elevação ou diminuição da barreira de potencial entre os pontos quânticos no interior das células, de forma a permitir que as cargas tunelem ou não entre estes pontos.

O *clock* é dividido em quatro fases, a primeira delas é chamada de *switch*. Nesta fase a célula inicia despolarizada e a barreira de potencial no seu interior em um nível baixo, sendo aumentada gradativamente de modo a permitir que as células se polarizem de acordo com as polarizações de suas vizinhas. Quando a barreira alcança o seu máximo passa-se para uma nova fase chamada de *hold*. Durante esta fase, as cargas estão impossibilitadas de trocar suas posições dentro da célula, que pode assim influenciar outras células sem ser modificada. Ao final desta fase, as barreiras de potencial começam a diminuir gradativamente e as células começam a se despolarizar, esta etapa é chamada de *release*. Quando a barreira atinge seu menor nível começa a fase chamada *relax*, onde as células se mantêm despolarizadas e a barreira no seu menor nível. O ciclo, então, recomeçará pela etapa de *switch*.

As células de um circuito de QCA podem ser divididas em zonas *clock*, permitindo que um grupo de células possa realizar alguma operação que será então usada como entrada por um outro grupo em uma zona de *clock* diferente.

Em circuitos eletrônicos não é incomum o cruzamento de sinais. Informações processadas em determinados blocos podem servir para outros localizados fisicamente distantes. O transporte de informações não pode interferir no funcionamento lógico do circuito. Na tecnologia QCA o transporte se torna muito crítico, devido ao fato das células poderem interagir com toda sua vizinhança. Há atualmente duas alternativas presentes na literatura para a implantação desta funcionalidade em circuitos QCA: célula rotacionadas e multicamadas. A primeira alternativa possibilita a criação de circuitos em um plano, porém gera problemas de robustez ao circuito, sendo mais suscetíveis a influências externas.

De forma a contornar este problema foi proposto a construção de circuitos com camadas de células sobrepostas, ou seja, multicamadas. Nesta técnica a informação é transportada por camadas superiores de forma que não há interferência entre as camadas. Na figura 5.7 há um exemplo da utilização de multicamadas.

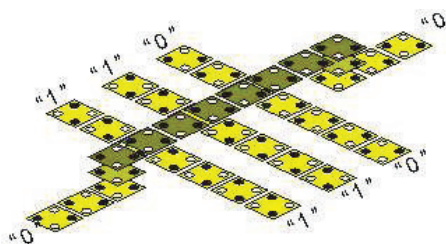


Figura 5.7: Circuito com multicamadas.

Há três camadas no circuito da figura 5.7 e deseja-se transportar a informação da célula L1 até a célula L2. As duas células estão na camada mais inferior, chamada de camada lógica, onde é realizada o processamento da informação. As demais camadas no circuito servem unicamente para auxiliar no transporte da informação

de L1 até L2, sem que haja influência em outras células da camada lógica. Desta forma é possível levar a informação de qualquer parte do circuito a outro local de interesse sem prejudicar a funcionalidade do circuito ou diminuir a robustez. A desvantagem que surge nesta técnica é o aumento da quantidade de células.

5.2.2

Descrição do Problema

Conforme descrito na seção anterior, a representação dos bits “0” e “1” é feita pelas polarizações das células em -1 e 1, respectivamente. Porém estes valores são ideais, não sendo alcançados na realidade. Entretanto é importante que as células de saída dos circuitos tenham as suas polarizações, quando atingirem um estado estável, muito próximas dos valores absolutos -1 e 1. Quanto maior o módulo da polarização da célula de saída maior a robustez do circuito, ou seja, menor será a influência de fatores externos, tal como a temperatura.

O trabalho anterior desenvolveu uma metodologia para a síntese automática de circuitos de QCA através de Algoritmos Genéticos. Além de encontrar circuitos com a lógica desejada, a metodologia também minimiza a quantidade de células nos circuitos. Porém, o trabalho não considerou a maximização da polarização da célula de saída (VilelaNeto, 2007).

Neste trabalho é utilizada a metodologia de síntese automática de circuitos de QCA proposta anteriormente, acrescida do objetivo de maximizar a polarização da célula de saída. A figura 5.8 apresenta o diagrama do sistema de evolução de circuitos de QCA. O módulo AG representa o Algoritmo Genético. Nele serão realizadas as operações inerentes à evolução dos circuitos, conforme descrito em (VilelaNeto, 2007).

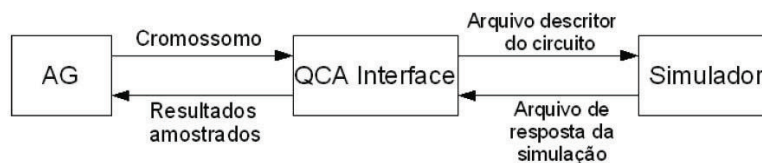


Figura 5.8: A arquitetura do modelo de síntese automática.

Cada cromossomo, durante sua fase de avaliação, gerará um novo circuito e, conseqüentemente, será simulado para que a partir dos resultados possa ser feito o cálculo de sua aptidão. Os circuitos são simulados pelo QCADesigner (Walus, 2004). De forma a permitir a comunicação entre o módulo AG e o simulador, houve a necessidade da criação de um módulo, chamado de QCAInterface.

O QCAInterface é capaz de decodificar um cromossomo gerado pelo AG e criar um arquivo de entrada para o simulador com a descrição do circuito. Este

módulo também é capaz de retirar amostras dos sinais gerados pelo simulador e organizá-las de forma que o AG possa calcular a aptidão. O módulo Simulador é composto pela interface *batch* modificada do QCADesigner, um simulador código-aberto que permitiu adaptações segundo as necessidades do problema. Porém, o núcleo responsável por toda a simulação permaneceu inalterado.

O simulador QCADesigner possui dois tipos de simulação, *bistable* e *coherence vector*. O primeiro é mais simples, porém tem menor custo computacional. O segundo é mais preciso, mas com um grande custo computacional. Neste trabalho utilizamos o método *bistable*, devido ao grande número de simulações realizadas pelo método de síntese evolucionária, sendo que após a evolução todos os circuitos obtidos foram validados com o método de simulação *coherence vector*.

Para que um circuito de QCA funcione com a lógica desejada é necessário que todas as células sejam colocadas nas posições certas e alocadas às zonas de *clocks* corretas. Tomando-se o cuidado de garantir as duas características citadas, a interação coulombiana entre as células tratará as informações de entrada de forma correta, gerando a saída desejada. Entretanto, o desenvolvimento de circuitos inovadores não é uma tarefa trivial, sendo necessário uma grande intuição e experiência para criar circuitos corretos. Porém, mesmo que os circuitos tenham a lógica desejada, o mesmo pode não ser o ideal, contendo muitas células e com uma robustez pequena.

Neste trabalho os circuitos são evoluídos por meio de uma heurística coevolutiva, com duas espécies distintas. Uma representa o posicionamento das células dentro do circuito através de um cromossomo baseado em ordem com restrição de precedência e outra representa o *clock* de cada célula por um cromossomo binário. Mais detalhes podem ser obtidos em (VilelaNeto, 2007).

A função de avaliação dos indivíduos é responsável por quantificar o quão bom é o circuito representado por um determinado par de cromossomos. Esta, ao contrário do trabalho anterior que só se preocupava com os níveis lógicos das células de saída, levará em consideração o valor da polarização da célula de saída, de forma a solucionar o problema de robustez. Para tal, em cada amostra do sinal de saída aplica-se a equação 5-2, onde os parâmetros a e b são determinados de acordo com o grau de polarização que se deseja obter. É através destes parâmetros que aumenta ou diminuí-se a importância de um resultado estar mais perto ou longe do esperado.

$$P_n = a * |O_n - D_n| + b \quad (5-2)$$

onde P_n representa o valor de aptidão da n ésima amostra, O_n é a polarização obtida da n ésima amostra, D_n é a polarização desejada da n ésima amostra e a e b são constantes. Nota-se que o valor da constante a deve ser menor que zero para que os resultados muito próximos do desejado obtenham altos valores de aptidão.

A aptidão de cada indivíduo é dada pela soma dos valores obtidos em cada amostra, conforme a equação 5-3, sendo que para cada amostra todos os possíveis valores lógicos são avaliados.

$$A = \frac{\sum_{i=0}^N P_n}{N} \quad (5-3)$$

onde A é a aptidão do circuito, P_n é a aptidão obtida pela n -ésima amostra e N é o número de amostras retiradas do sinal de saída.

Os parâmetros adotados em todos os experimentos deste trabalho foram $a = -0.5$ e $b = 1$, escolhidos após alguns experimentos preliminares.

Um outro objetivo deste trabalho é sintetizar circuitos com o menor número de células possíveis, para isso é dado um bônus na avaliação dos circuitos que apresentam todas suas saídas corretas, ou seja, possuem a lógica desejada. Este bônus é dado pela equação 5-4 e varia com relação ao número de células no circuito. Os parâmetros presentes nesta equação são determinados de forma empírica e são dependentes de cada experimento.

$$B = \frac{c}{Q} + d \quad (5-4)$$

onde B é o valor do bônus, Q o número de células presente no circuito, c e d são constantes determinadas empiricamente.

As células de entrada e saída de todos os circuitos evoluídos são determinadas *a priori* com base em circuitos presentes na literatura.

5.2.3

Resultados e Discussões

Experimento 1 - Multiplexador

Os parâmetros do AG deste experimento estão listados a seguir:

- Gerações = 300;
- Tamanho da população = 100;
- Taxa de crossover = [80%, 60%];
- Taxa de mutação = [10%, 30%];
- GAP = [60%, 20%];
- Experimentos = 8;

Os parâmetros c e d da equação 5-4 foram definidos como 8,94 e -0,297, respectivamente. A escolha desses valores foi determinada de forma que os circuitos que possuíssem 15 células recebessem um bônus de 20% do valor máximo de

aptidão da equação 5-3. A escolha desses valores foi realizada de forma empírica, determinando a pressão do bônus sobre os indivíduos.

A figura 5.9 exibe o circuito obtido neste trabalho e os circuitos propostos nos demais trabalhos.

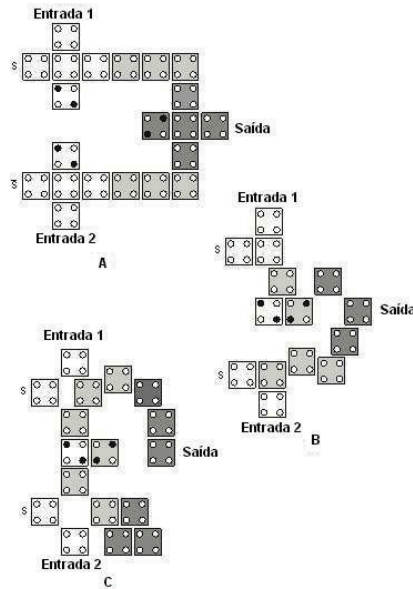


Figura 5.9: (A) Circuito sintetizado por especialista; (B) Circuito sintetizado em (VilelaNeto, 2007); (C) Circuito sintetizado neste trabalho.

O dispositivo resultante contém 17 células enquanto um circuito sintetizado por especialistas tem 21 células, sendo 20% ou quatro células menor. Esta é uma redução significativa, supondo que o custo do circuito é diretamente proporcional à quantidade de células. Em termos de polarização, o circuito obtido pelo AG conseguiu superar ao presente na literatura por cerca de 1,47%. A diferença percentual neste caso é baixa, mas deve-se ressaltar que ambos já estão com níveis muito altos de polarização.

Em (VilelaNeto, 2007) conseguiu-se obter um circuito com três unidades de células a menos que o circuito deste trabalho, mas a grande diferença está nos níveis de polarização de saída. A do trabalho anterior é cerca de 28% inferior.

Experimento 2 - Porta OU de quatro entradas

O segundo circuito sintetizado foi uma porta OU de quatro entradas. Há uma particularidade na lógica deste circuito, só existe uma saída com valor lógico “0”, que ocorre justamente quando todas suas entradas também são “0”. Esta peculiaridade dificulta a convergência do Algoritmo Genético, já que indivíduos cujas saídas sejam o nível o lógico “1” para todas as possíveis combinações das entradas terão o valor de aptidão muito próximo de um circuito que implemente a lógica correta.

De forma a acelerar a convergência da técnica, é dado um peso maior ao acerto da saída “0”, empiricamente foi escolhido um fator de 5.

- Gerações = 50;
- Tamanho da população = 100;
- Taxa de crossover = [90%, 80%];
- Taxa de mutação = [8%, 20%];
- GAP = [40%, 90%];
- Experimentos = 10;

Os demais parâmetros são os mesmo utilizados no experimento 1.

A figura 5.10 apresenta o melhor circuito obtido, além dos outros circuitos propostos na literatura.

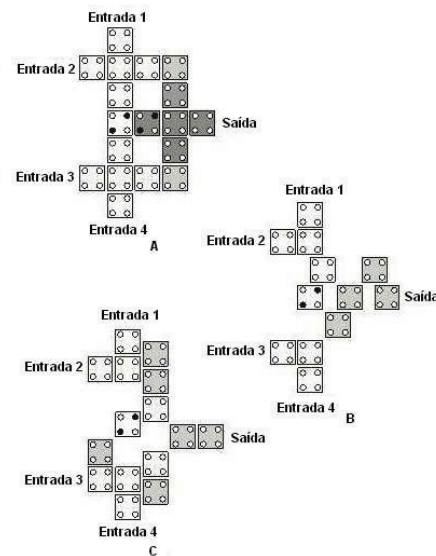


Figura 5.10: (A) Circuito sintetizado por especialista; (B) Circuito sintetizado em (VilelaNeto, 2007); (C) Circuito sintetizado neste trabalho.

Novamente o circuito evoluído teve uma quantidade de células inferior ao de especialistas, dessa vez cerca de 17% ou três células e ambos com níveis de polarização na saída praticamente idênticos, próximo de 100%. Com relação ao trabalho anterior, o circuito obtido no presente trabalho é muito superior em termos de robustez. O nível de polarização de saída é 31% superior, com um aumento de apenas três unidades de células. Este aumento na confiabilidade talvez seja determinante na viabilidade técnica do dispositivo, já que a polarização de 68,4% do ideal obtida anteriormente pode ser muito baixa para que o circuito tenha uma boa imunidade a influências externas.

Neste trabalho procurou-se aprimorar a síntese automática de circuitos baseados em QCA desenvolvida anteriormente. A obtenção de dispositivos robustos é fator primordial no avanço da tecnologia QCA. Propôs-se uma técnica que apresentou resultados superiores aos circuitos desenvolvidos por especialistas, obtendo circuitos com menos células e nível de polarização de saída elevado.

A síntese evolucionária permite a exploração de diferentes tipos de arranjos, na maioria das vezes não convencionais ou intuitivos, permitindo que circuitos alternativos sejam obtidos a partir de poucas informações fornecidas. Tal como apresentado no trabalho anterior (VilelaNeto, 2007), os algoritmos evolucionários são ferramentas poderosas para a síntese automática de circuitos de QCA. Este trabalho demonstrou que estas ferramentas são eficientes na busca por soluções otimizadas, mesmo quando outros objetivos são levados em consideração. Neste caso, a otimização da polarização da célula de saída.