

## 8

### Conclusões e Trabalhos Futuros

Este trabalho propôs investigar o apoio das técnicas de Inteligência Computacional no desenvolvimento da Nanociência e Nanotecnologia. Tal apoio é aqui denominado de “Nanotecnologia Computacional Inteligente”. Vários estudos de caso foram apresentados e propostos de forma a investigar o apoio das técnicas de IC no projeto, caracterização, simulação e otimização de estruturas nanométricas e subnanométricas. O uso de Redes Neurais Artificiais é apresentado para inferir as características de nanoestruturas a partir dos parâmetros de entrada para a síntese. De posse destes sistemas de inferência, pode-se usar um Algoritmo Genético para obter o conjunto de parâmetros ótimo para sintetizar a nanoestrutura desejada. Os Algoritmos Genéticos são também usados, juntamente com simuladores de nanodispositivos, para encontrar as estruturas e parâmetros ótimos para a síntese dos nanodispositivos desejados. Os cálculos de modelagem molecular dependem fortemente dos parâmetros usados. Os métodos *ab initio* utilizam funções gaussianas para aproximar as funções de onda dos átomos. As funções gaussianas utilizadas necessitam de expoentes otimizados para a boa representação destas funções de onda. Por fim, os agregados atômicos e moleculares têm sido largamente estudados e Algoritmos Genéticos são usados para a obtenção do isômero de menor energia e outros isômeros de baixa energia. Neste trabalho foram otimizadas as estruturas de agregados de Li e F, além de agregados de  $H_2O$ .

Com relação à inferência e otimização de parâmetros para a síntese de nanoestruturas, os resultados obtidos demonstram o grande potencial das técnicas de Inteligência Computacional. Mesmo com uma base de dados pequena ou bastante heterogênea, a Rede Neural Artificial foi capaz de inferir características muito semelhantes àquelas obtidas pelos resultados experimentais. Os erros obtidos para os dois casos apresentados ficaram em torno de 10% e 4%, respectivamente. Apesar dos resultados apresentados inferirem características específicas de pontos quânticos e de nanocompósitos, as técnicas computacionais utilizadas podem ser facilmente estendidas para outras características destes materiais e, até mesmo, para inferir propriedades de outros materiais, tais como nanotubos, supramoléculas, dendrímeros, etc. Os sistemas propostos e aplicados neste trabalho diminuem significativamente o número de experimentos necessários nos laboratórios, já que eles

podem ser usados para guiar a busca pelos parâmetros ótimos. Como consequência da diminuição na quantidade de experimentos, há uma redução significativa nos custos das pesquisas. Os resultados preliminares são bastante promissores, principalmente para aplicações industriais, mostrando que as técnicas de Inteligência Computacional podem ser parte fundamental da nanoinformática e, conseqüentemente, acelerar o desenvolvimento da Nanotecnologia. O desenvolvimento de ferramentas de manipulação de dados, como mostrado neste trabalho, é fundamental para o desenvolvimento da Nanoinformática. A única desvantagem da heurística proposta é a dependência de dados experimentais confiáveis, em grande quantidade e bem distribuídos. A inferência só pode ser realizada a partir de uma quantidade de dados mínima e o sistema resultante é totalmente dependente da qualidade dos dados usados.

Em uma outra alternativa estudada para o projeto de nanodispositivos, Algoritmos Genéticos são aplicados juntamente simuladores dedicados. Estes simuladores são os responsáveis pela avaliação dos nanodispositivos propostos pelo AG, indicando o quão bom é cada uma das soluções evoluídas. Dois diferentes projetos foram realizados e, em ambos, os resultados obtidos foram surpreendentes, apresentando estruturas inovadoras e mais eficientes que aquelas anteriormente propostas na literatura. O uso de um sistema de projeto automático possibilita explorar todo o espaço de busca permitido para a construção dos nanodispositivos e, conseqüentemente, não fica limitado às regras de projeto usadas por especialistas. Por esta razão, muitas vezes os nanodispositivos obtidos apresentam estruturas e configurações inimagináveis. Os resultados apresentados para os circuitos de QCA são um exemplo disto. As estruturas obtidas possuem um grau de polarização das células de saída semelhante àquelas propostas pelos especialistas, porém aquelas obtidas pelo sistema proposto possuem uma redução significativa no número de células. Por outro lado, as estruturas construídas pelos especialistas são muito mais amigáveis e fáceis de serem entendidas. Contudo, é exatamente a liberdade de construção, sem a preocupação do entendimento, que permite aos sistemas de projeto automático encontrarem soluções inovadoras. A mesma observação pode ser feita sobre a otimização dos OLEDs multicamadas, basta observar que as concentrações obtidas pelo AG se diferenciam daquelas propostas pelos especialistas.

Com relação à otimização dos expoentes das funções de base, esta tese propôs a otimização dos parâmetros do método GCHF. Os resultados obtidos através da aplicação do Algoritmo Genético na otimização destes parâmetros foram satisfatórios. As energias obtidas para a heurística SOGBS são semelhantes àquelas descritas na literatura. Para este caso o AG converge rapidamente para o mesmo valor em todos os experimentos realizados, indicando que o mínimo global é obtido. Já para as heurísticas DOGBS e TOGBS, o AG é capaz de obter energias

inferiores às aquelas apresentadas na literatura. Este trabalho também apresenta outras alternativas para a otimização destes expoentes. Para o caso conhecido como *full-optimized*, onde todos os expoentes são otimizados um a um, os resultados preliminares igualaram aqueles descritos na literatura. Porém, o AG não é muito dependente do ponto de otimização inicial, diferentemente do método anteriormente proposto na literatura.

Este trabalho apresentou o uso de técnicas de Inteligência Computacional em três propostas diferentes para a otimização de funções de base. Em todas elas, o uso da computação evolutiva apresentou resultados iguais ou melhores do que aqueles anteriormente propostos na literatura. O primeiro e o segundo casos apresentados utilizam-se de uma equação para a geração dos expoentes das funções de base. Os resultados obtidos nesta tese apresentam melhorias para ambos os casos. A segunda alternativa, otimização dos parâmetros da expansão polinomial, também introduziu a otimização da distribuição das primitivas gaussianas entre as simetrias. Tal distribuição nunca foi otimizada anteriormente na literatura, já que os especialistas sempre se utilizam de seus conhecimentos e intuições. Apesar de não haver uma distribuição radicalmente diferente do que foi apresentado anteriormente na literatura, esta flexibilização permitiu uma diminuição significativa da energia. Por fim, o terceiro e último caso propôs a otimização total dos expoentes. Claramente esta é a alternativa que fornece os melhores resultados. Porém, o custo computacional para a otimização é extremamente alto, devido à grande quantidade de parâmetros. Os resultados obtidos foram semelhantes ao já apresentados na literatura, a metodologia proposta neste trabalho não é dependente do ponto de otimização inicial, diferentemente dos métodos anteriormente propostos na literatura.

Finalmente, este trabalho também apresentou o uso de Algoritmos Genético na busca pela geometria de agregados atômicos e moleculares. Dois casos diferentes foram estudados. O uso de AG na busca pela geometria de menor energia já foi utilizado com sucesso em diferentes trabalhos. Porém, no primeiro caso deste trabalho, o AG foi utilizado pela primeira vez para encontrar a estrutura de menor energia e outros isômeros de baixa energia. Além disso, este trabalho também propôs um novo operador genético para combinar aglomerados que possuam mais de um tipo de átomos diferentes. No segundo caso apresentado, um AG semelhante ao utilizado para os agregados de Li e F foi usado para obter os aglomerados de  $(H_2O)_n$  neutros de menor energia. Contudo, este caso trata de um aglomerado molecular e a representação genética se diferencia da representação do primeiro caso, conforme já discutido anteriormente. Por fim, uma nova estratégia evolutiva, utilizando um AEIQ, foi usada para encontrar aglomerados formados pela união de aglomerados de  $(H_2O)_n$  neutros com diferentes íons positivos e um negativo. Os resultados apresentaram estruturas inovadoras, diferentes daquelas apresentadas

anteriormente na literatura.

Apesar do uso de técnicas de Inteligência Computacional já ter sido realizada pontualmente em um ou outro projeto em Nanociência e Nanotecnologia, esta tese apresentou pela primeira vez uma avaliação mais ampla do apoio destas ferramentas computacionais no desenvolvimento nanotecnológico. Os resultados obtidos neste trabalho indicam que os métodos de Inteligência Computacional poderão ter um impacto positivo no desenvolvimento da Nanociência e Nanotecnologia. Como previsto na introdução deste trabalho, as técnicas de IC podem ser utilizadas na caracterização, projeto, simulação e otimização de estruturas nanométricas e sub-nanométricas.

O sucesso da aplicação destas técnicas nas mais diversas áreas da ciência e da indústria é mais um fator de otimismo no desenvolvimento da Nanotecnologia. Contudo, a Nanociência e a Nanotecnologia possuem uma grande vantagem quando comparadas às outras áreas onde a Inteligência Computacional foi aplicada com sucesso. Diferentemente das outras áreas, a Nanociência e a Nanotecnologia formam um campo de pesquisa e desenvolvimento ainda pouco explorado e com um potencial de crescimento enorme. Os nanodispositivos e as nanoestruturas obtidas com o auxílio da IC certamente serão usadas em aplicações inovadoras, que transformarão muito o estilo e qualidade de vida da sociedade. Como comparação podemos citar o uso dos Algoritmos Genéticos no desenvolvimento de circuitos eletrônicos. Apesar do sucesso deste tipo de aplicação, quando ela foi usada pela primeira vez a indústria da eletrônica já estava consolidada. Logo, os circuitos eletrônicos revolucionários criados pelos AGs não causaram grande impacto na sociedade e em grande parte somente são aplicados em pesquisas avançadas, tal como explorações espaciais. Já a indústria da Nanotecnologia ainda não está totalmente consolidada, na verdade ela está em seus estágios iniciais, e a continuação das pesquisas apresentadas neste trabalho pode ser um fator acelerador do desenvolvimento esperado.

## 8.1

### Trabalhos Futuros

Conforme já foi discutido anteriormente, este trabalho apresentou uma série de projetos envolvendo a aplicação das técnicas de Inteligência Computacional no desenvolvimento da Nanociência e Nanotecnologia. O sucesso dos resultados obtidos credenciam a aplicação da IC em diversos outros projetos.

Com relação aos projetos realizados pode-se propor:

- Sistemas híbridos de inferência e otimização podem ser usados para o controle da fabricação de outras nanoestruturas, tais como: nanotubos de carbono, nanotubos inorgânicos, filmes finos, nanocatalisadores, dendrímeros, nanopartículas, nanofármacos, etc.

- O uso de simuladores de OLEDs mais completos, tal como alguns já disponíveis comercialmente, possibilitarão a otimização não somente da concentração dos portadores de carga, mas também da estrutura do nanodispositivo como um todo, ou seja, o número de camadas, a espessura de cada uma delas, os materiais usados, etc.
- Algoritmos Genéticos tradicionais ou com inspirações quânticas podem ser usados para a otimização de funções de base para todos os átomos da tabela periódica em diferentes níveis de teoria. Os mesmo algoritmos podem ser usados para a otimização de parâmetros de campos de forças utilizados na simulação de diversas nanoestruturas diferentes.
- Agregados de diferentes átomos ou moléculas podem ser explorados usando os eficientes métodos de busca pela geometria mais estável.

Além das aplicações anteriormente citadas, acredita-se que novas metodologias inteligentes e sistema híbridos podem ser extremamente valiosos no desenvolvimento da Nanociência e Nanotecnologia. Este trabalho explorou basicamente as Redes Neurais Artificiais e os Algoritmos Evolutivos, mas muitas outras metodologias existentes ou ainda a serem propostas podem auxiliar no desenvolvimento nanotecnológico. Dentre algumas outras ferramentas, pode-se citar:

- Programação Genética;
- Sistemas Fuzzy;
- Sistemas Neuro-Fuzzy;
- Sistemas Neuro-Genéticos;
- Agentes Inteligentes;
- Sistema Monte-Carlo-Fuzzy;
- Algoritmos com Inspiração Quântica.

Alguns projetos sugeridos são:

- Programação Genética para o desenvolvimento de “Experimentos Virtuais”, tal como demonstrados com Redes Neurais Artificiais;
- Programação Genética para a criação de funcionais de troca e correlação para cálculos DFT;
- Agentes Inteligentes aplicados à simulação de sistemas de auto-montagem;
- Sistema Monte-Carlo-Fuzzy para avaliar a incerteza de posicionamento de átomos em cálculos moleculares;

- O desenvolvimento de novos algoritmos inteligentes inspirados no comportamento de nanoestruturas.

O número de aplicações e projetos é incontável e dependem basicamente do conhecimento dos especialistas e das ferramentas computacionais.