

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Omar Paranaíba Vilela Neto

**Simulação e Síntese Automática de Circuitos de
Autômatos Celulares com Pontos Quânticos Através de
Técnicas Inteligentes**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Elétrica da PUC-Rio.

Orientadores: Marco Aurélio C. Pacheco
Carlos Roberto H. Barbosa

Rio de Janeiro, fevereiro de 2006

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Omar Paranaíba Vilela Neto

**Simulação e Síntese Automática de Circuitos de
Autômatos Celulares com Pontos Quânticos Através de
Técnicas Inteligentes**

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Elétrica da PUC-Rio.
Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Marco Aurélio C. Pacheco

Orientador
PUC-Rio

Carlos Roberto Hall Barbosa

Orientador
PUC-Rio

Rodrigo Prioli

PUC-Rio

Renato Portugal

LNCC

Maurício Pamplona

UFRJ

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador(a) Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 15 de fevereiro de 2006

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Omar Paranaíba Vilela Neto

Graduou-se em Engenharia de Computação na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro em 2004.

Ficha Catalográfica

Vilela Neto, Omar Paranaíba

Simulação e síntese automática de circuitos de autômatos celulares com pontos quânticos através de técnicas inteligentes / Omar Paranaíba Vilela Neto ; orientadores: Marco Aurélio C. Pacheco, Carlos Roberto H. Barbosa. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Engenharia Elétrica, 2006.

130 f. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia elétrica – Teses. 2. Nanotecnologia. 3. Nanoeletrônica. 4. Pontos Quânticos. 5. Autômatos Celulares. 6. Rede Neurais. 7. Algoritmos Genéticos. I. Pacheco, Marco Aurélio C. II. Barbosa, Carlos Roberto H. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

Aos meus pais Cora Alice e Paulo Antônio.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro

Aos meus orientadores Professores Marco Aurélio C. Pacheco e Carlos Roberto Hall Barbosa pelo apoio e parceria neste trabalho.

Aos demais professores pelos ensinamentos.

Aos amigos Juan Lazo Lazo, Yván Jesus Túpac Valdivia e André Vargas Abs da Cruz pelo apoio e comentários durante o desenvolvimento.

Aos amigos Leone Masiero e Richardson Sadoco pelo suporte e apoio.

Aos amigos e familiares que torceram por mim nestes dois anos.

Aos funcionários da oficina de manutenção do departamento de elétrica pela ajuda.

Aos amigos do ICA por seu contínuo apoio e colaboração.

À minha irmã, cunhado e sobrinho pelo apoio e confiança.

À Adrissa pelo amor, auxílio e paciência.

Resumo

Omar Paranaíba Vilela Neto. **Simulação e Síntese Automática de Circuitos de Autômatos Celulares com Pontos Quânticos Através de Técnicas Inteligentes**. Rio de Janeiro, 2006. 130p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Esta dissertação investiga e propõe um novo simulador de circuitos de Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA) e uma nova metodologia para a criação e otimização de circuitos lógicos, utilizando técnicas da inteligência computacional. Autômatos Celulares com Pontos Quânticos é uma nova tecnologia, na escala nanométrica, que tem chamado a atenção dos pesquisadores por ser uma alternativa à tecnologia CMOS, cujo limite físico de miniaturização será atingido nos próximos anos. QCA tem um grande potencial no desenvolvimento de circuitos com maior densidade espacial, maior velocidade, baixa dissipação e baixo consumo de energia. Ao contrário das tecnologias tradicionais, QCA não codifica a informação pelo fluxo de corrente elétrica, mas pela configuração das cargas elétricas no interior das células. A interação coulombiana entre as células garante o fluxo da informação. Apesar de simples, essas características fazem com que a arquitetura de circuitos de QCA se torne não trivial. Portanto, a criação de um simulador e de uma metodologia de elaboração e síntese automática de circuitos possibilitam aos cientistas uma melhor visualização de como esses dispositivos funcionam, acelerando o desenvolvimento desses sistemas na escala nanométrica. Para atingir o objetivo proposto, técnicas de inteligência computacional, tais como redes neurais do tipo Hopfield, para o desenvolvimento do simulador, e algoritmos genéticos, para a metodologia de criação e otimização dos circuitos, foram empregadas. Os resultados encontrados foram significativos, comprovando que as técnicas da inteligência computacional podem ser uma ferramenta estratégica para o rápido desenvolvimento da nanoeletrônica e da nanotecnologia em geral.

Palavras-chave

Nanotecnologia, Nanoeletrônica, Pontos Quânticos, Autômatos Celulares, Rede Neurais, Algoritmos Genéticos.

Abstract

Omar Paranaíba Vilela Neto. **Simulation and Automatic Syntheses of Quantum Dots Cellular Automata circuits thought Intelligent Techniques.** Rio de Janeiro, 2006. 130p. MSc. Dissertation – Department of Electrical Engineering, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro.

This dissertation investigates and considers a new simulator of Quantum Dots Cellular Automata (QCA) Circuits and a new methodology for the synthesis and optimization of logical circuits, by means of Computational Intelligence. Quantum-dot Cellular Automata (QCA) is a new technology in the nanometric scale which has called attention from researchers as one alternative for the CMOS technology, which is reaching its physical limitation. QCA have a large potential in the development of circuits with high space density and low heat dissipation, and can allow the development of faster computers with lower power consumption. Differently from the conventional technologies, QCA do not codify information by means of electric current flow, but rather by the configuration of electrical charges in the interior of the cells. The Coulomb interaction between cells is responsible by the flow of information. Despite simple, these features become the design of logical devices into a non-trivial task. Therefore, the development of a simulator and a methodology of automatic synthesis of QCA circuits make possible to the scientist a better evaluation of how these circuits work, accelerating the development of these new systems in the nanometer scale. To reach the proposed target, Computational Intelligence techniques were used. The first results show that these techniques are capable of simulating efficiently and fast, synthesizing optimized circuits with a reduced number of cells. Such optimization reduces the possibility of failures and guarantees higher speed.

Keywords

Nanotechnology, Nanoelectronic, Quantum Dots, Cellular Automata, Neural Network, Genetic Algorithm.

Sumário

1	Introdução	17
1.1.	Motivação	17
1.2.	Objetivos	19
1.3.	Descrição do Trabalho	19
1.4.	Organização da Dissertação	20
2	Inteligência Computacional no Apoio à Nanotecnologia	22
2.1.	Inteligência Computacional	23
2.1.1.	Algoritmos Genéticos	23
2.1.2.	Lógica Fuzzy	24
2.1.3.	Redes Neurais	26
2.1.4.	Sistemas Híbridos	26
2.2.	Sistema de Apoio à Nanotecnologia	27
3	Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA)	33
3.1.	Introdução	33
3.2.	Princípios dos Dispositivos	33
3.3.	Dispositivos Lógicos Básicos	37
3.4.	Células Rotacionadas e Circuitos em um Plano	39
3.5.	Zonas de <i>Clock</i>	40
3.6.	Circuitos Lógicos já Desenvolvidos	43
3.7.	Alternativas de Fabricação	43
3.7.1.	Ilhas de Metal	44
3.7.2.	Semicondutor	44
3.7.3.	Magnético	44
3.7.4.	Molecular	45
4	Simulador de QCA	46
4.1.	Introdução	46
4.2.	Simuladores de QCA Já Existentes	46

4.3. Rede Neural do Tipo Hopfield	48
4.4. Considerações Sobre os Dispositivos Simulados	49
4.4.1. Raio de Vizinhança de uma Célula	50
4.4.2. Interação entre as Células	51
4.5. A Simulação	56
4.6. Resultados	59
4.6.1. Majority Gate	59
4.6.2. Circuito com ruído	61
5 Síntese Automática de Circuitos de QCA por Algoritmos Genéticos	64
5.1. Descrição do Problema	64
5.2. Representação dos Indivíduos	66
5.3. Avaliação dos Indivíduos	70
6 Estudos de Casos	72
6.1. Porta Lógica OU de 4 Entradas	72
6.2. Multiplexador	76
6.3. Ou-exclusivo	79
6.4. Somador Completo	82
6.4.1. Alternativa 1	83
6.4.2. Alternativa 2	85
7 Conclusões e Trabalhos Futuros	88
8 Referência Bibliográficas	91
Apêndice 1	97
Células Rotacionadas Lado a Lado	97
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Lado a Lado	97
Células Convencionais Distanciadas de Meia Célula	98
Células Rotacionadas Distanciadas de Meia Célula	98
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Distanciadas de Meia Célula	99

Células Convencionais Distanciadas de Uma Célula	99
Células Rotacionadas Distanciadas de Uma Célula	100
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Distanciadas de Uma Célula	100
Células Convencionais em Diagonal	101
Células Rotacionadas em Diagonal	101
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Diagonal	102
Células Convencionais em Diagonal Distanciadas	102
Células Rotacionadas em Diagonal Distaciadas	103
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Diagonal Distanciadas	103
Células Convencionais em Meia Diagonal	104
Células Rotacionadas em Meia Diagonal	105
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Meia Diagonal	105
Células Convencionais em Meia Diagonal Distanciadas	106
Células Rotacionadas em Meia Diagonal Distanciada	107
Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Meia Diagonal Distanciadas	107
Apêndice 2	109
Inversor	109
Dois Fios Cruzando em um Plano	110
Majority Gate Tradicional	111
Porta Lógica E	113
Majority Gate Alterado	113
Somador Completo	117
Apêndice 3	123
Porta OU de 4 entradas	123
Multiplexador	124
OU Exclusivo	126
Somador Completo – Alternativa 1	127
Somador Completo – Alternativa 2	128

Lista de figuras

Figura 1– Procedimento básico do algoritmo genético.....	24
Figura 2– Componentes de um Conjunto Fuzzy.....	25
Figura 3– Diagrama de uma célula de QCA com quatro pontos quânticos em seus dois possíveis estados de polarização.....	34
Figura 4– Interação não-linear entre as células de QCA. A polarização da célula 2 é fixa e influencia a polarização da célula 1.....	34
Figura 5– Duas células lado a lado com polarizações semelhantes e com polarizações opostas.....	35
Figura 6– Um fio de QCA.....	37
Figura 7– O inversor de QCA.....	37
Figura 8– O a distribuição de sinal em um circuito de QCA.....	38
Figura 9– O <i>Majority Gate</i> e como ele pode ser usado para implementar as portas lógicas E e OU.....	38
Figura 10– Um fio de células rotacionadas.....	39
Figura 11– Interação coulombiana entre uma célula tradicional e uma rotacionada.....	40
Figura 12– Cruzamento de informações em um plano.....	40
Figura 13– As quatro fases de <i>clock</i> em QCA.....	41
Figura 14– <i>Majority Gate</i> incorreto.....	42
Figura 15– <i>Majority Gate</i> com as zonas de <i>clock</i> sincronizando a informação...	42
Figura 16– Estrutura de uma rede neural do tipo Hopfield com conexões entre todos os neurônios.....	49
Figura 17– Exemplo de <i>grade</i> para posicionamento de células.....	50
Figura 18– O raio de vizinhança de uma célula de QCA do simulador.....	50
Figura 19– Duas células lado a lado com a polarizações diferentes e polarizações semelhantes.....	52
Figura 20– Como a posição da célula inverte o sinal da “ <i>kink energy</i> ” quando uma célula convencional é vizinha de uma célula rotacionada.....	56
Figura 21- O circuito do Majority Gate (os tons de cinza representam as	

diferentes zonas de clock). E a topologia da rede neural de Hopfield que o representa.....	57
Figura 22– Algoritmo simplificado utilizado na simulação.....	58
Figura 23- O circuito do Majority Gate (os tons de cinza representam as diferentes zonas de clock). E a topologia da rede neural de Hopfield que o representa.....	59
Figura 24– Resultado da simulação do majority gate para um conjunto de entradas.....	61
Figura 25– Arranjo de células com ruído. À direita o resultado da simulação, onde a cor vermelho representa a polarização -1 e a cor azul a polarização 1.	62
Figura 26-- Arranjo de células sem ruído. À direita o resultado da simulação, onde a cor vermelho representa a polarização -1 e a cor azul a polarização 1.	63
Figura 27– Modelo co-evolucionário cooperativo genérico	65
Figura 28– Grade de um circuito com duas entradas (cinza) e uma saída (preto). Os números indicam as posições (o ponto à esquerda e abaixo do número) onde novas células de QCA podem ser posicionadas.....	66
Figura 29– Algoritmo de construção do circuito.	68
Figura 30– Criação passo a passo da topologia do circuito de acordo com os cromossomos utilizados.....	69
Figura 31– Exemplo do problema de ótimo local quando a função de avaliação só leva em consideração o número de acertos.	71
Figura 32– Média dos melhores indivíduos por geração.	74
Figura 33– Melhor circuito OU de quatro entradas evoluído pelo AG.....	74
Figura 34 – Circuito OU proposto na literatura.	75
Figura 35– Média dos melhores indivíduos por geração.	77
Figura 36– Topologia do melhor multiplexador encontrado pelo AG, contendo 14 células. Os tons de cinza representam as zonas de <i>clock</i>	78
Figura 37 – Topologia do multiplexador sugerido por Lent, contendo 21 células. Os tons de cinza representam as zonas de <i>clock</i>	79
Figura 38– Média dos melhores indivíduos por geração.	80
Figura 39– Topologia do melhor Ou-exclusivo encontrado pelo AG. Os tons de	

cinza representam as zonas de <i>clock</i>	81
Figura 40– Topologia do Ou-exclusivo proposto na literatura.	81
Figura 41– Topologia do somador completo. Partes vermelhas e verdes serão substituídas por partes menores.....	83
Figura 42– Topologia do novo circuito do somador completo.....	84
Figura 43– Média dos melhores indivíduos por geração.	86
Figura 44– Topologia do novo somador completo.	86
Figura 45– Células rotacionadas lado a lado.	97
Figura 46– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada lado a lado.....	98
Figura 47– Células convencionais distanciadas de meia célula.....	98
Figura 48– Células rotacionadas distanciadas de meia célula.	98
Figura 49– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada distanciadas de meia célula.....	99
Figura 50– Células convencionais distanciadas de uma célula.....	99
Figura 51– Células rotacionadas distanciadas de uma célula.	100
Figura 52– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada distanciadas de uma célula.....	100
Figura 53– Células convencionais em diagonal.....	101
Figura 54– Células rotacionadas em diagonal.	101
Figura 55– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada em diagonal. ...	102
Figura 56– Células convencionais em diagonal.....	102
Figura 57– Células rotacionadas em diagonal distanciadas.....	103
Figura 58– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada em diagonal distanciadas.....	103
Figura 59– As posições das células com a “ <i>kink energy</i> ” positiva. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “ <i>kink energy</i> ” é negativa devido a inversão de polarização.	104
Figura 60– Células convencionais em meia diagonal.....	105
Figura 61– Células rotacionadas em meia diagonal.....	105
Figura 62– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada em meia diagonal distanciadas.....	106
Figura 63– As posições das células com a “ <i>kink energy</i> ” positiva. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “ <i>kink energy</i> ” é negativa devido a	

inversão de polarização.	106
Figura 64– Células convencionais em meia diagonal distanciadas.	106
Figura 65– Células rotacionadas em meia diagonal.....	107
Figura 66– Uma célula convencionana e uma célula rotacionada em meia diagonal distanciadas.....	107
Figura 67– As posições das células com a “ <i>kink energy</i> ” negativa. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “ <i>kink energy</i> ” é positiva devido a inversão de polarização.	108
Figura 68– Representação do inversor.....	109
Figura 69– As simulações do inversor para os dois valores de entrada possíveis.	109
Figura 70– Representação de um circuito com dois fios cruzando em um plano.	110
Figura 71– Simulação de dois fios cruzando em um plano. Todos os conjuntos de entradas.....	111
Figura 72- Representação de um majority gate.....	111
Figura 73– Simulação de um majority gate. Todos os conjuntos de entradas. ..	112
Figura 74– Simulação de um majority gate. Todos os conjuntos de entradas. ..	113
Figura 75- Representação de um majority gate com as entradas partindo da esquerda.....	114
Figura 76– Simulação de um outro majority gate. Todos os conjuntos de entradas.....	115
Figura 77- Representação de um <i>majority gate</i> , com zonas de <i>clock</i> . Os sinais fluem da esquerda para a direita.....	115
Figura 78– Simulação passo a passo do majority gate com zonas de clock.....	117
Figura 79- Representação de um somador completo com três entradas.	117
Figura 80– Simulação passo a passo de um somador completo.	119
Figura 81- Representação de um somador completo serial com duas entradas.	120
Figura 82– Simulação passo a passo de um somador completo serial.....	122
Figura 83– Melhor circuito OU de quatro entradas evoluído pelo AG.....	123
Figura 84– Simulações da porta OU sintetizada.....	124
Figura 85– Melhor Multiplexador sintetizado.	124
Figura 86– Simulações do Multiplexador sintetizado.....	125

Figura 87– Topologia do melhor Ou-exclusivo encontrado pelo AG. Os tons de cinza representam as zonas de <i>clock</i>	126
Figura 88– Simulações da porta OU-Exclusivo sintetizada.....	126
Figura 89– Topologia do novo circuito do somador completo.....	127
Figura 90– Simulações do Somador completo 1 sintetizado.	128
Figura 91– Topologia do novo circuito do somador completo – alternativa 2..	128
Figura 92– Simulações do Somador completo 1 sintetizado.	130

Lista de tabelas

Tabela 1– Trabalhos em nanotecnologia utilizando Inteligência Computacional.	32
Tabela 2– Simuladores de QCA já desenvolvidos.....	48
Tabela 3– “ <i>Kink energy</i> ” para todas as possíveis posições que respeitem o raio de vizinhança definido.....	55
Tabela 4– O estado de polarização de cada célula, a cada passo da rede neural.	60
Tabela 5– Comparação dos dados de 10 experimentos.	73
Tabela 6– Comparação dos dados de 10 experimentos.	77
Tabela 7– Comparação entre a busca aleatória e o AG.	85