

3

Síntese de Circuitos Moleculares

A síntese de circuitos moleculares envolve a utilização de dispositivos moleculares e de técnicas para a implementação de circuitos. O conceito de processamento de informação através das estruturas moleculares é muito complexo, pois o principal problema é sintetizar sistemas moleculares seguros e eficientes.

Neste trabalho, as estruturas moleculares estudadas e utilizadas (em simulação) para sintetizar circuitos são o Diodo Molecular de Tour-Reed e o Transistor Molecular, enquanto que a técnica utilizada para a síntese automática é o Hardware Evolucionário. As seções seguintes desse capítulo mostram os dispositivos moleculares utilizados, a técnica de implementação de circuitos e os resultados obtidos.

3.1.

Dispositivos Moleculares

Laboratórios de pesquisa espalhados pelo mundo vêm buscando alternativas para vencer a barreira de miniaturização dos componentes eletrônicos. Algumas dessas alternativas incluem a construção de dispositivos em escala molecular que possibilitem a diminuição do tamanho dos equipamentos bem como do tempo de resposta e do custo de fabricação, em relação aos dispositivos CMOS convencionais atualmente utilizados.

As moléculas que são usadas para construir estes dispositivos moleculares são capazes de conduzir e transferir energia entre si. Se o processo puder ser manipulado e controlado, será possível fazer com que essas moléculas ou estruturas moleculares executem tarefas para processamento de informação.

Contudo, a fabricação desses dispositivos envolve processos complicados que podem alterar ou dificultar o seu funcionamento, visto que os processos de fabricação [15] ainda não garantem que dois dispositivos teoricamente idênticos tenham comportamento semelhante. A seguir, apresentam-se breves descrições de dois dispositivos utilizados neste trabalho.

3.1.1.

Diodo Molecular de Tour-Reed

O Diodo Molecular de Tour-Reed [16] apresenta uma característica I-V (figura 5) similar àquela do diodo túnel retificador (RTD). Uma característica da resposta I-V de um diodo túnel é a região de resistência diferencial negativa na qual a corrente é uma função decrescente com o aumento da tensão. Como pode ser visto na figura 5, o intervalo de tensão em que se encontra a região de resistência diferencial negativa está aproximadamente entre 2,03V e 2,07V.

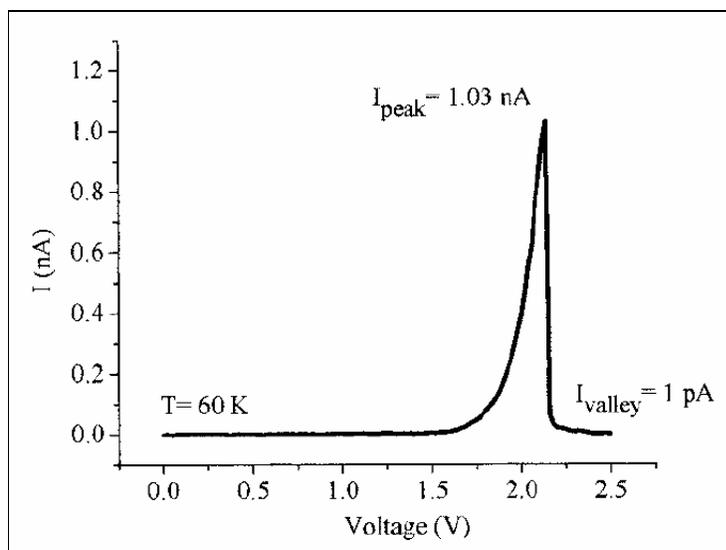


Figura 5 – Curva característica do Diodo Molecular de Tour-Reed [2].

Levando em consideração os aspectos que envolvem a fabricação e utilização desses dispositivos moleculares, a simulação é uma excelente alternativa para desenvolver pesquisas relacionadas com esses dispositivos, pois resultados experimentais dispenderiam mais tempo e mais dinheiro.

Para simular a curva do Diodo Molecular de Tour-Reed em um simulador Spice [18], foi empregada uma fonte de corrente controlada por tensão (figura 6). Como os nós de controle (NC+ e NC-) da fonte de corrente controlada por tensão são os mesmos nós dos terminais, no caso do diodo molecular, então o modelo do diodo molecular (figura 7) possui somente dois terminais, cuja resposta foi definida por uma curva (figura 8) semelhante à curva da figura 5. A função F da figura 7 representa a curva da figura 8.

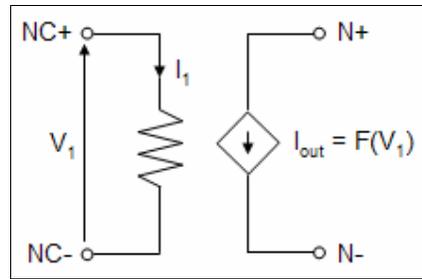


Figura 6 – Modelo da fonte de corrente controlada por tensão.

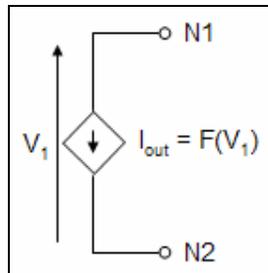


Figura 7 – Modelo simulado do diodo molecular em SPICE.

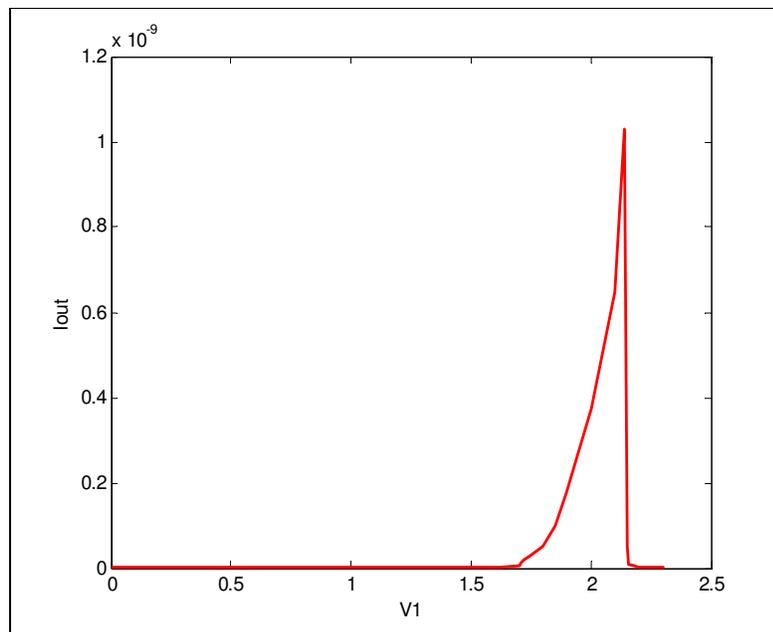


Figura 8 – Simulação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Na expressão a seguir é definido o modelo do diodo molecular para o NET LIST do Spice:

G N1 N2 TABLE {V(N1) - V(N2)} = valores da curva do diodo.

A letra *G* representa a fonte de corrente controlada por tensão, *N1* e *N2* são os nós do circuito conectados à fonte de corrente controlada por tensão e os valores da curva do diodo é uma tabela com todos os pontos da curva do diodo molecular (figura 8).

3.1.2.

Transistor Molecular

Pesquisadores do Canadá e da Inglaterra descobriram em Junho de 2005 um comportamento de um sistema molecular que pode ser comparado ao comportamento de um transistor [20]. Esse sistema molecular – que neste trabalho é chamado de Transistor Molecular – apresenta uma curva I-V similar à de um transistor comum, como pode ser visto na figura 9. Cada curva representa uma configuração do Transistor Molecular, definida por determinados parâmetros, no exemplo a distância entre as moléculas.

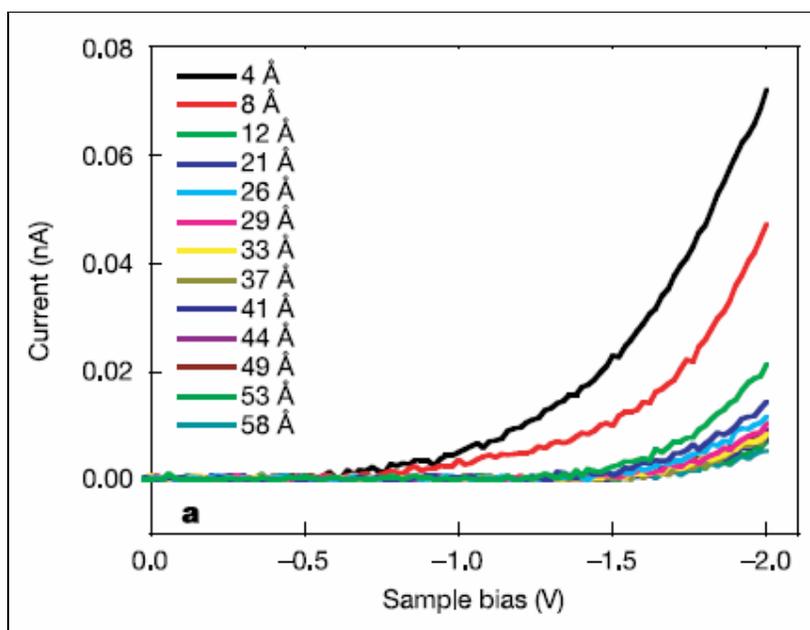


Figura 9 – Curvas características do transistor molecular.

Para simular a curva do Transistor Molecular em um simulador Spice [18], foi empregada uma fonte de corrente controlada por tensão (figura 6). Como o transistor molecular possui somente 3 terminais, somente um dos nós de controle (NC-) da fonte de corrente controlada por tensão foi eliminado (figura 10), diferentemente do proposto para o Diodo Molecular de Tour-Reed. Esse

dispositivo possui uma curva (figura 11) similar à curva preta da figura 9, que está reacionada à distância de 4 Angstroms. A função F da figura 10 representa a curva da figura 11.

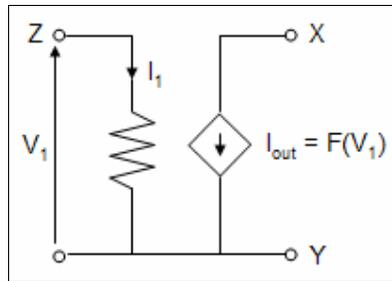


Figura 10 – Modelo simulado do transistor molecular em SPICE.

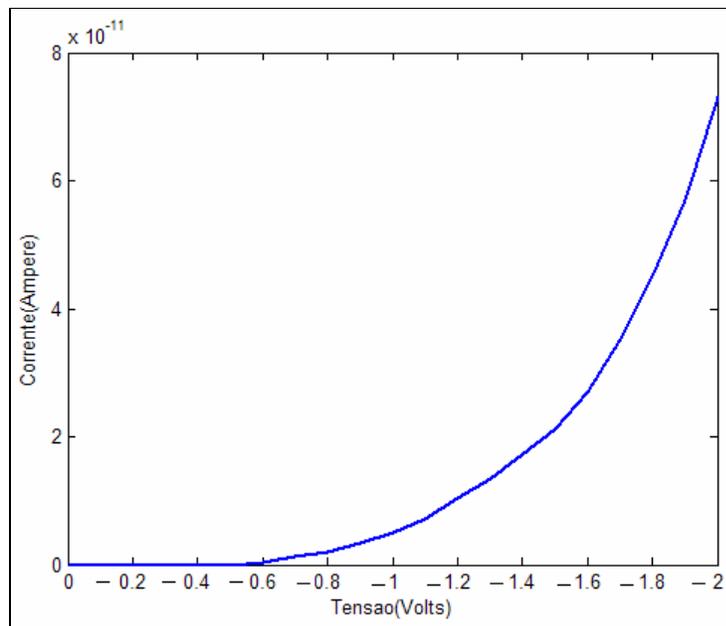


Figura 11 – Curva do dispositivo Spice que representa o Transistor Molecular.

Na expressão a seguir é definido o modelo do transistor molecular para o NET LIST do Spice:

G X Y TABLE {V(Z) - V(Y)} = valores da curva do transistor.

A letra G representa a fonte de corrente controlada por tensão, X , Y e Z são os nós do circuito conectados à fonte de corrente controlada por tensão e os *valores da curva do transistor* é uma tabela com todos os pontos da curva do transistor molecular (figura 11).

3.2.

Hardware Evolucionário

Uma abordagem que vem sendo utilizada para resolver problemas na síntese de circuitos analógicos e digitais é a técnica de Hardware Evolucionário. Esta técnica tem como fundamento a utilização de uma plataforma reconfigurável em conjunto com um Algoritmo Evolutivo.

Se a plataforma utilizada for uma plataforma física, como por exemplo a PAMA [17], uma plataforma reconfigurável analógica para a evolução intrínseca de circuitos desenvolvida no Departamento de Engenharia Elétrica da PUC-Rio, o processo é dito *intrínseco*. Se a plataforma utilizada for um simulador, como por exemplo o PSpice [18], o processo é dito *extrínseco* [19]. Para esse estudo, o processo de síntese foi extrínseco, onde a plataforma utilizada foi o simulador PSpice.

A síntese de circuitos por Hardware Evolucionário é executada como um processo de busca de um determinado circuito. Esse processo de busca é controlado pelo AG, que possui uma função de avaliação, onde o modelo do circuito é construído de acordo com os valores dos genes do cromossomo. O modelo do circuito é descrito em um arquivo, chamado de *net list*, que é o arquivo de entrada para o simulador. A solução do circuito obtida pelo simulador é armazenada no arquivo de saída. Assim, o circuito é avaliado a partir das informações obtidas do arquivo de saída do simulador (figura 12).

3.3.

Síntese de Circuitos Moleculares Robustos

Um dos motivos da síntese de circuitos moleculares ser mais complicada do que a síntese de circuitos convencionais é o fato de que dispositivos moleculares nominalmente do mesmo tipo podem não possuir comportamento idêntico devido ao complexo processo de fabricação desses dispositivos moleculares.

Devido ao complexo processo de produção desses dispositivos, as curvas características dos dispositivos podem variar de elemento para elemento [5], resultando em problemas significativos na síntese de circuitos, pois a produção em série desses circuitos pode ser afetada devido a essa variação.

Por exemplo, a curva média do Diodo Molecular de Tour-Reed possui um pico de corrente de 1,03nA a uma tensão de 2,14V, podendo essa curva variar 20% (figura 13), e a curva média do Transistor Molecular possui um pico de 73pA aproximadamente a uma tensão de -2.0V podendo ter a mesma variação de 20%.

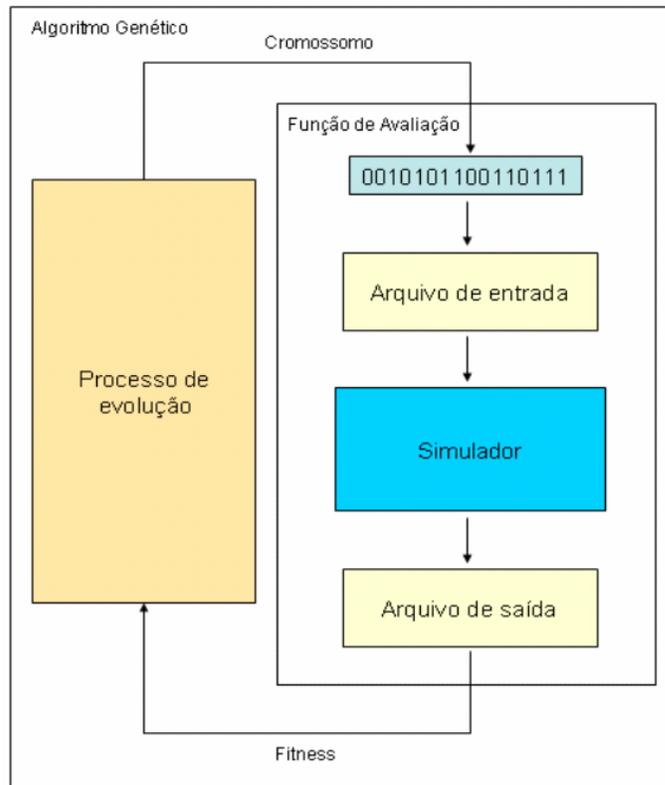


Figura 12 – Processo extrínseco de síntese de circuito do Hardware Evolucionário.

A síntese automática de circuitos moleculares robustos pode ser feita criando circuitos com a mesma topologia mas considerando as possíveis variações das características dos dispositivos básicos. Cada circuito criado utiliza dispositivos moleculares com uma determinada curva (figuras 13 e 14). Neste caso, criam-se 3 circuitos: um circuito com dispositivos representados pelas curvas azuis, um circuito com dispositivos representados pelas curvas verdes e um circuito com dispositivos representados pelas curvas vermelhas.

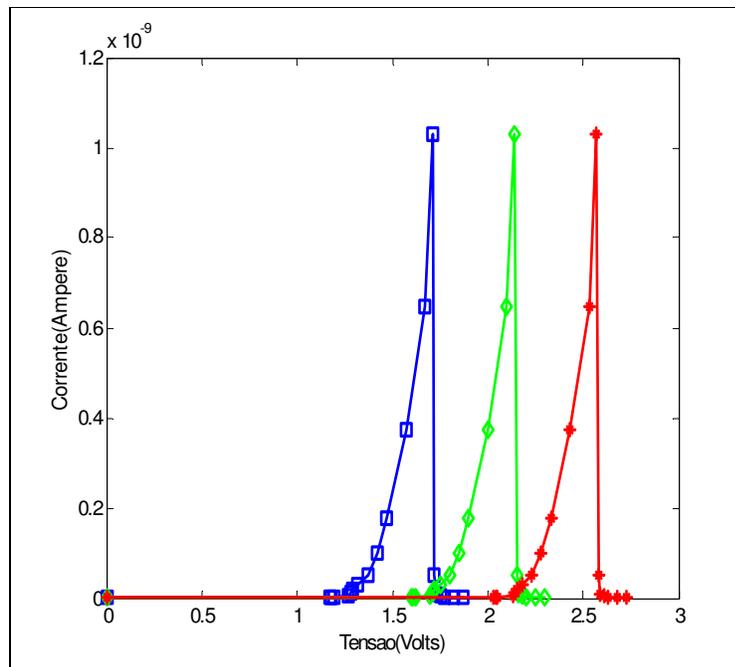


Figura 13 – Variação do comportamento do Diodo Molecular de Tour-Reed.

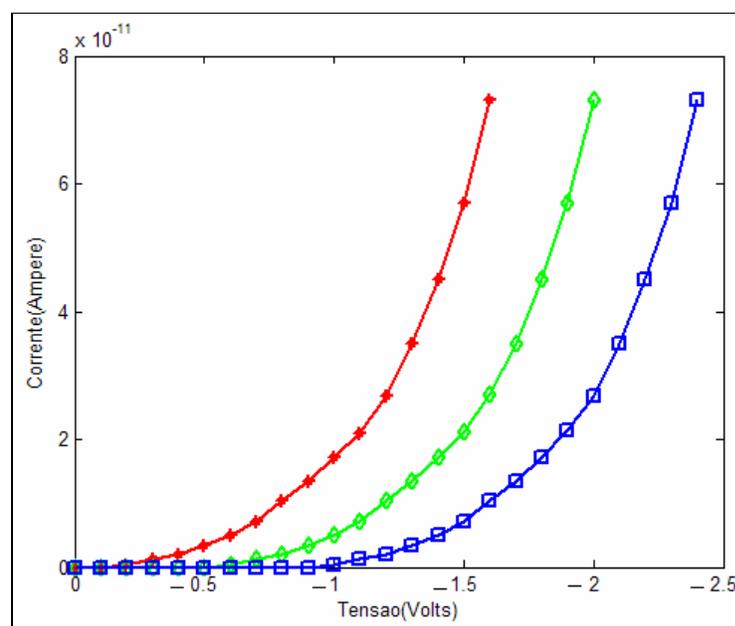


Figura 14 – Variação do comportamento do Transistor Molecular.

3.4.

Experimentos

Para testar o desempenho da técnica de Hardware Evolucionário na síntese de Circuitos Moleculares utilizando o Diodo Molecular de Tour-Reed e o

Transistor Molecular, foram realizados experimentos para sintetizar uma porta lógica INVERSOR.

Para sintetizar um circuito por Hardware Evolucionário, é necessário inicialmente criar uma representação para o tipo de circuito em questão, modelada no cromossomo do AG de forma a obter o resultado mais próximo do desejado.

Os experimentos foram feitos em duas etapas: na primeira etapa, foi utilizada somente a curva central das figuras 13 e 14 e, na segunda etapa, foram utilizadas as três curvas para uma mesma topologia. Para realizar esses experimentos, algumas representações de circuitos foram criadas. Na representação simples e na representação por matriz de adjacências são utilizados componentes de dois terminais: resistores e Diodos Moleculares de Tour-Reed. Na representação por cubo de adjacências são utilizados resistores (2 terminais) e Transistores Moleculares (3 terminais).

3.4.1.

Representação Simples

Na representação simples, a quantidade de cada tipo de componente que irá compor a topologia do circuito é fixa. Nesse tipo de representação, pode-se apenas otimizar os valores dos componentes do circuito para uma topologia fixa ou otimizar a topologia e os valores dos componentes. A seguir, são apresentados esses dois tipos de otimização.

3.4.1.1.

Otimização de Valores de Componentes

Para otimizar somente os valores dos componentes do circuito, a representação do cromossomo do AG é mais simples. O cromossomo é composto por um segmento de genes de números reais, onde cada par de genes representa o valor de um componente, como mostra a figura 15.

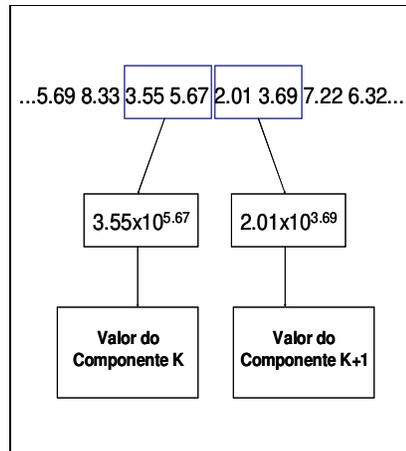


Figura 15 – Representação dos valores dos componentes na representação simples.

Baseando-se em [5], a representação do cromossomo para sintetizar uma porta INVERSOR é composta por um segmento com quatro genes de números reais pois, como mostra a figura 16, a topologia do circuito possui somente dois resistores (os parâmetros dos diodos são fixos). Além desses dois resistores, o circuito possui um diodo comum e um modelo do Diodo Molecular de Tour-Reed, uma fonte de corrente como entrada e uma fonte de tensão como RESET. O RESET é como um *clock*, que possui um pique de tensão para baixo. Esse estado de baixa tensão corresponde a um estado de alta corrente. Como um tunelamento só ocorre depois de um pico de corrente, o RESET ativa o funcionamento do diodo molecular, que tem comportamento semelhante ao diodo túnel.

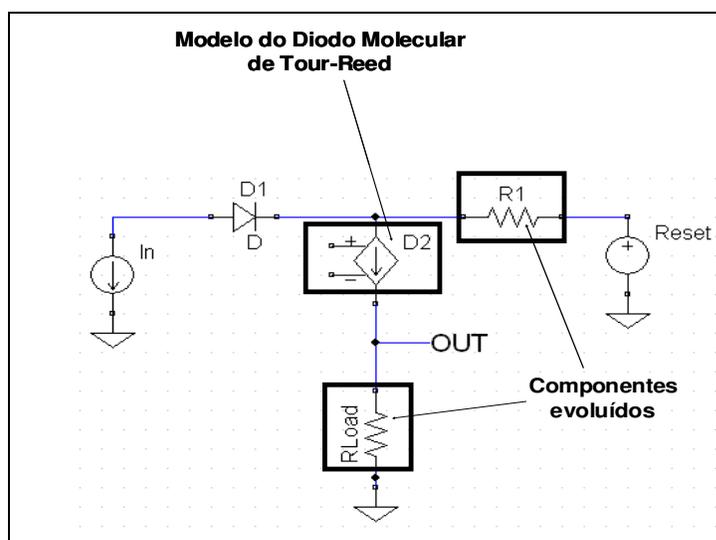


Figura 16 – Inversor com topologia fixa e valores dos resistores otimizados.

Para otimizar os valores dos componentes do circuito da figura 16, os parâmetros do AG foram os seguintes:

- Gerações: 40
- População: 40
- *Crossover*: 0,65
- Mutação: 0,7
- *Steady State*: 0,2

O parâmetro *Steady State* representa a porcentagem de indivíduos que passarão para a próxima geração (Elitismo). Na função de avaliação do INVERSOR (figura 17), cada ponto da curva de saída obtida de cada circuito criado é comparado com cada ponto da curva de saída desejada.

A robustez do circuito é medida pela soma do erro médio quadrático das curvas de saída em relação à curva desejada. Quanto menor for a soma do erro médio quadrático, maior será a robustez do circuito em questão. O erro médio quadrático é dado pela seguinte equação:

$$S = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - x_i^d)^2}{N} \quad (1)$$

onde x_i^d é o i -ésimo ponto da curva de saída desejada, x_i é o i -ésimo ponto da curva de saída obtida e N é o número de pontos das curvas.

Assim, a aptidão dos indivíduos é dada pela equação a seguir:

$$f = \frac{1}{1 + S} \quad (2)$$

onde S é a soma dos erros médios quadráticos representados pela equação 1.

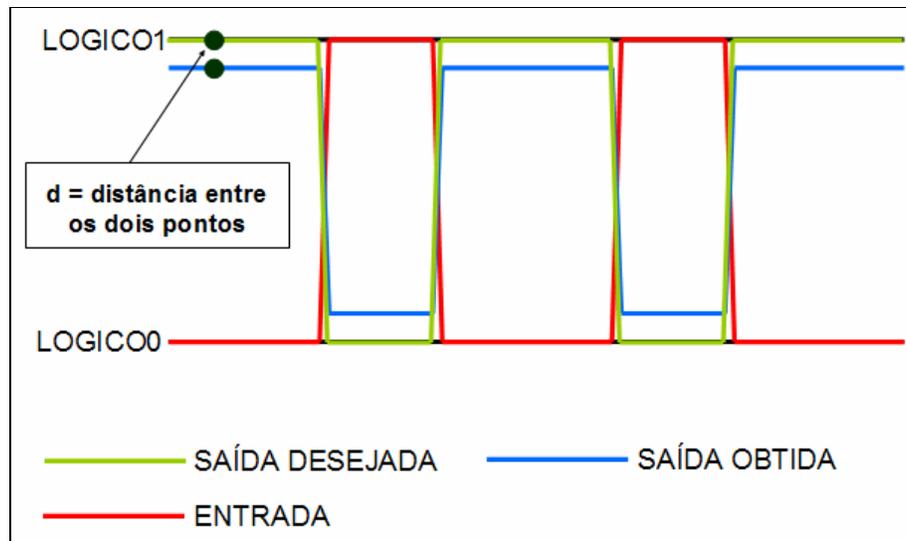


Figura 17 – Avaliação da curva do inversor.

Os valores encontrados para R_1 e R_{load} foram: $4.37 \times 10^{8.12} \Omega$ ($\sim 576 \text{M}\Omega$) e $4.79 \times 10^{1.83} \Omega$ ($\sim 323 \Omega$), respectivamente. As curvas de entrada e saída do circuito encontrado com os valores de R_1 e R_{load} mostrados acima podem ser vistas na figura 18. A variação na curva de saída é provocada pela variação da curva do RESET. A figura 19 apresenta a curva de evolução do AG para encontrar os valores de R_1 e R_{load} .

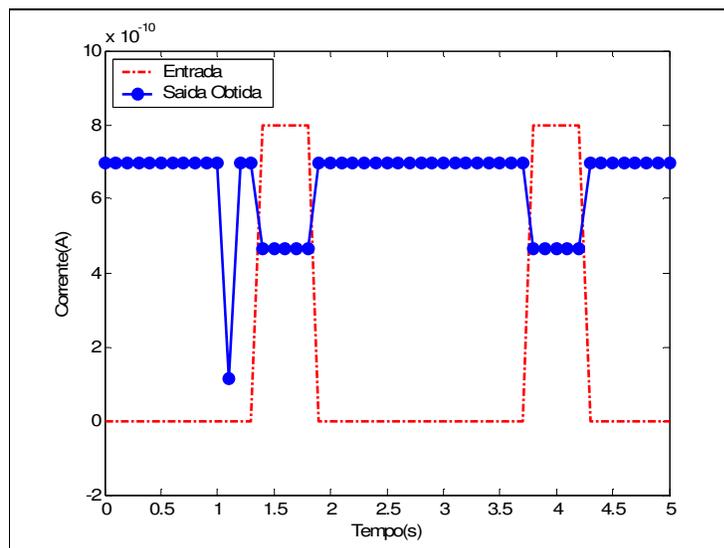


Figura 18 – Curvas de entrada e saída do circuito INVERSOR com valores otimizados dos componentes.

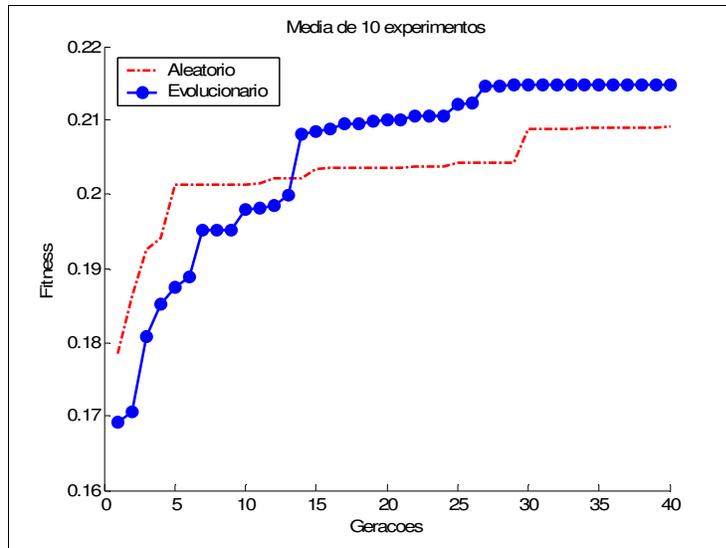


Figura 19 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização dos valores dos componentes.

Os resultados obtidos ainda não garantem que o circuito encontrado é confiável pois, se outro modelo de Diodo Molecular de Tour-Reed for usado, a curva de saída do circuito será totalmente desfigurada, como foi visto em [5]. Portanto, é necessário otimizar os valores dos componentes levando em consideração a variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed, como mostra a figura 13, onde o *fitness* de cada circuito é calculado com base na média dos erros gerados para cada variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Os valores dos parâmetros do AG utilizados são os seguintes:

- Gerações: 100
- População: 200
- Crossover: 0,65
- Mutação: 0,7
- Steady State: 0,2

O resultado da otimização dos valores dos componentes do circuito com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed pode ser visto nas figuras seguintes. Nas figuras 20, 21 e 22 são mostradas as curvas de entrada e saída do circuito para cada curva do diodo utilizada. Na figura 23 são mostradas as curvas de evolução do AG. Os valores obtidos para R_1 e R_{load} foram respectivamente $1.35 \times 10^{9.34}$ ($\sim 30 \text{G}\Omega$) e $2.29 \times 10^{7.62}$ ($\sim 95 \text{M}\Omega$).

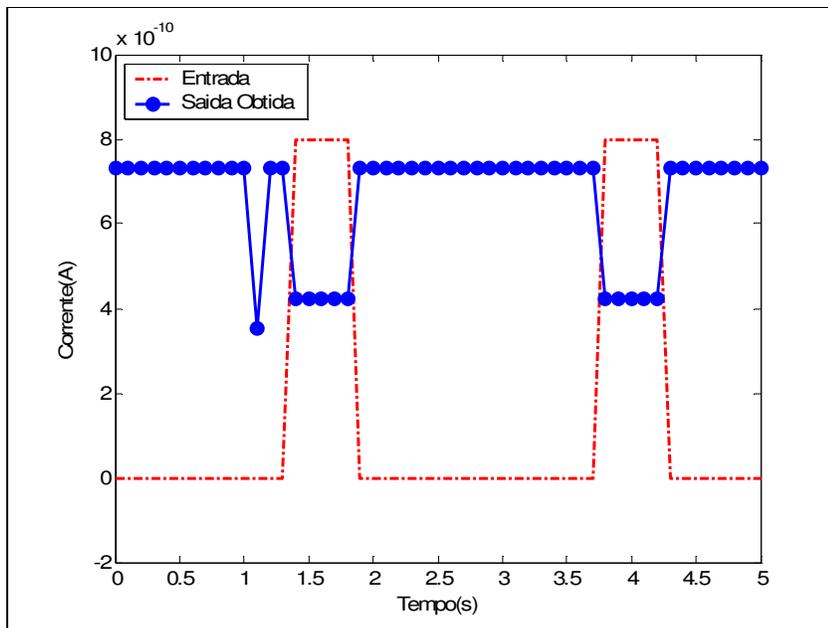


Figura 20 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.

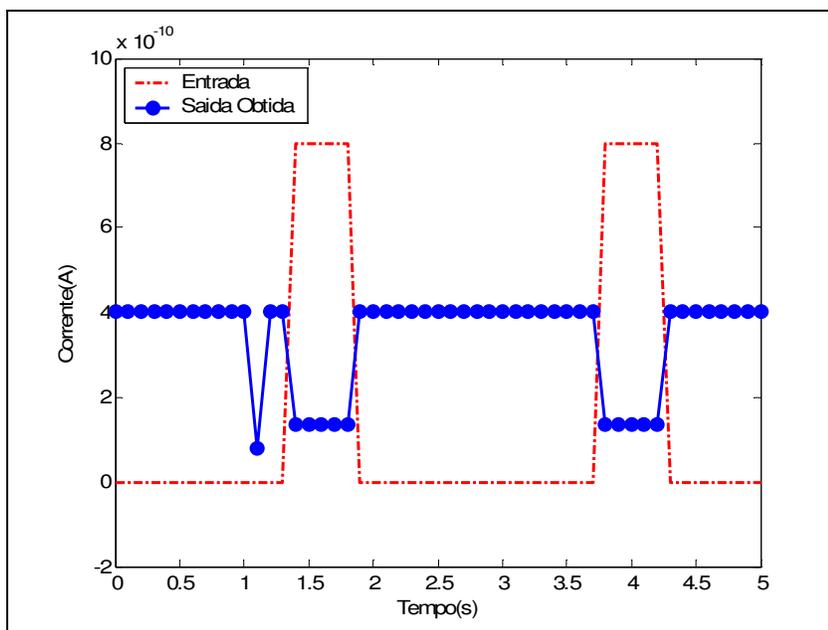


Figura 21 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva do centro (verde) da figura 13.

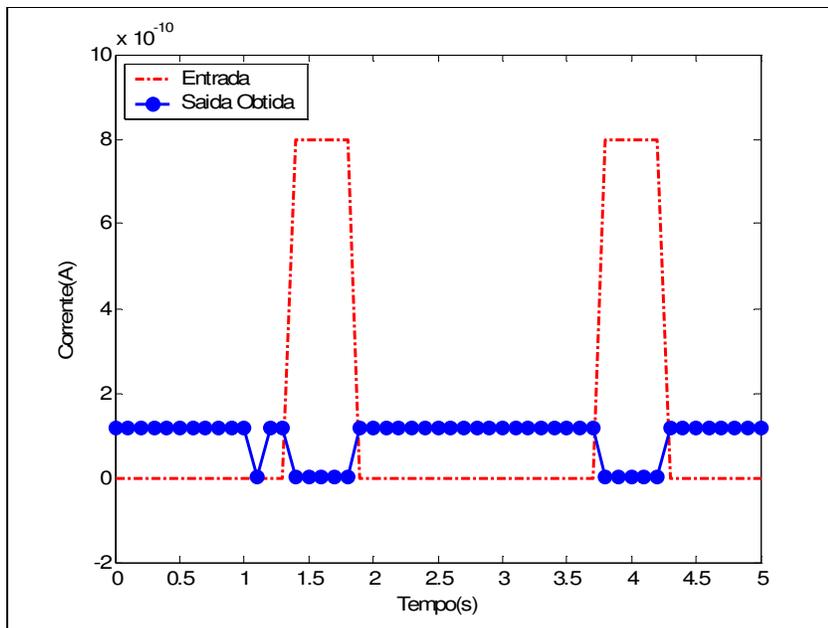


Figura 22 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.

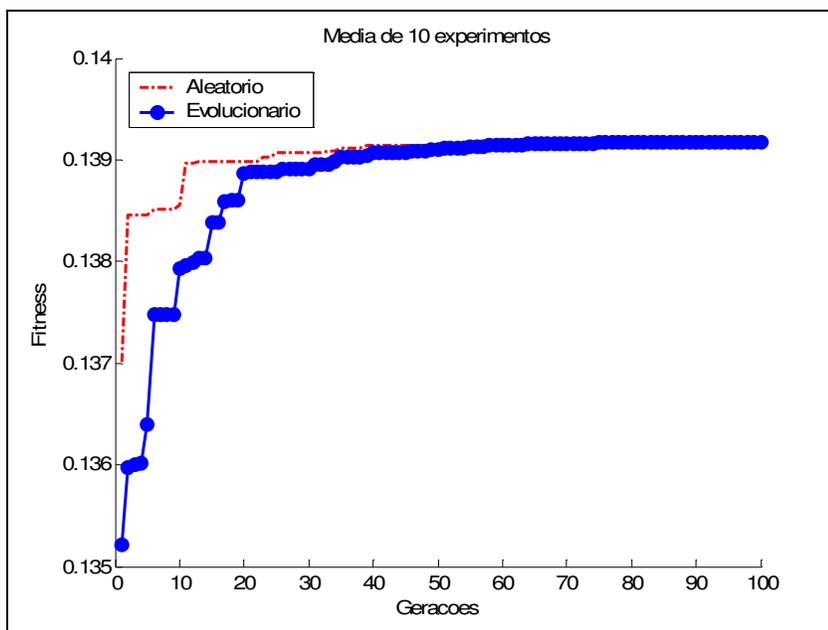


Figura 23 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização dos valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Como pode ser visto pelos resultados, a otimização somente dos valores dos componentes não é eficiente, porque fixa o número de componentes e a topologia do circuito.

3.4.1.2.

Otimização da Topologia do Circuito e dos Valores dos Componentes

Para otimizar a topologia e os valores dos componentes dos circuitos, a representação do cromossomo é mais complexa que no item anterior. Além de o cromossomo representar os valores dos componentes, deve levar em consideração quais componentes farão parte da topologia do circuito e onde eles serão colocados.

Para isso, além do primeiro segmento de genes de números reais, o cromossomo deve ter mais dois segmentos: um segmento de genes binários, que determina a posição dos componentes; e um segmento (máscara), que determina se o componente respectivo fará parte ou não do circuito.

Um exemplo da representação do cromossomo é mostrado na figura 24, onde o circuito conterà somente resistores (três mais um) e Diodos Moleculares de Tour-Reed (dois).

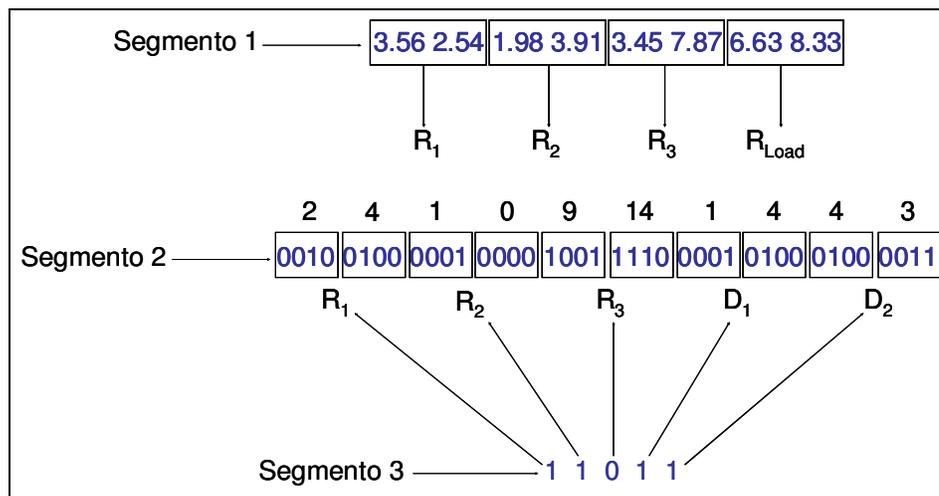


Figura 24 – Exemplo do modelo do cromossomo para otimização de topologia e valores dos componentes.

O primeiro segmento possui 8 genes de números reais, o segundo segmento contém 40 genes binários (divididos em 10 palavras de 4 bits) e o terceiro segmento contém 5 genes binários. Assim, no primeiro segmento, que determina os valores dos componentes (figura 15), nos três primeiros pares de genes estão os valores dos resistores que podem fazer parte do circuito evoluído. O último par de genes determina o valor do resistor de carga. Não é

necessário determinar os valores dos Diodos Moleculares de Tour-Reed, pois eles possuem uma curva com características fixas.

Como no PSpice [18] os componentes estão conectados a nós do circuito, o segundo segmento contém os pares de nós, os quais definem univocamente a posição de cada componente que poderá fazer parte do circuito. Portanto, no exemplo, o componente R_1 está conectado do nó 2 ao nó 4, o componente R_2 está conectado do nó 1 ao nó terra, o componente R_3 está conectado do nó 9 ao nó 14, o componente D_1 está conectado do nó 1 ao nó 4 e o componente D_2 está conectado do nó 4 ao nó 3. A posição do resistor de carga é fixa na topologia.

O terceiro segmento determina quais componentes efetivamente farão parte do circuito, sendo que cada gene representa um componente. Se o gene for igual a 1, o componente fará parte do circuito. Portanto, no exemplo, somente o componente R_3 não fará parte do circuito.

A modelagem final do circuito INVERSOR (figura 25) possui o circuito evoluído, que é determinado pelo modelo do cromossomo, uma fonte de corrente como entrada, uma fonte de tensão como *reset* e um resistor de carga.

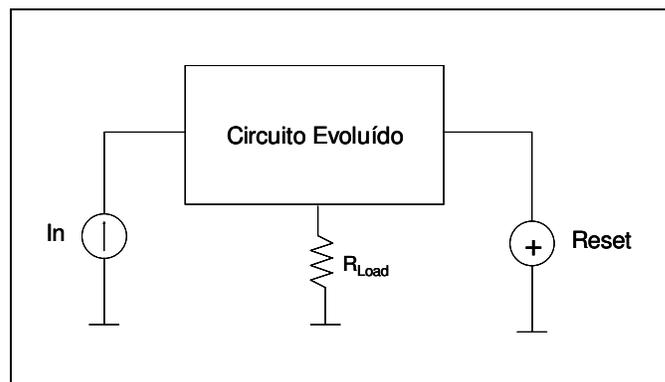


Figura 25 – Modelagem final do circuito INVERSOR.

A entrada (fonte de corrente) sempre está conectada ao nó 1 do circuito, o *reset* sempre está conectado ao nó 2 e o resistor de carga sempre está conectado ao nó 3. Isso pode causar problemas na evolução do AG pois, fixando-se esses nós (posições), todos os circuitos gerados pelo AG devem ter seus nós conectados a esses nós. Na maioria das vezes, essa combinação não acontece, fazendo com que o circuito seja inválido. Além disso, se um determinado circuito não possuir pelo menos um Diodo Molecular de Tour-Reed, este circuito é penalizado. A figura 26 mostra o circuito final gerado pelo cromossomo apresentado na figura 24.

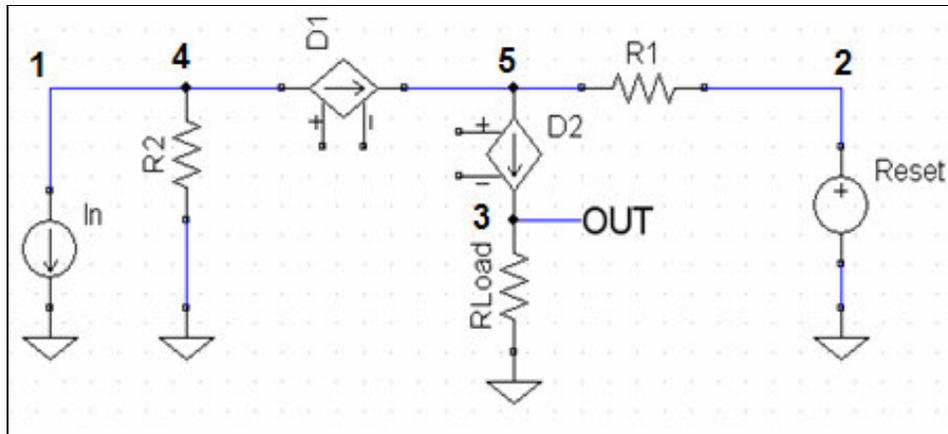


Figura 26 – Circuito final do cromossomo da figura 24.

A função de avaliação da porta INVERSOR obtida com otimização de topologia e valores dos componentes é apresentada na figura 27. OHT e OLT são os valores que se deseja obter e OHR e OLR são os valores efetivamente obtidos. α e β (que foram pré-determinados com valores 5 e 10 respectivamente, através de observações feitas em experimentos anteriores) regulam o grau de importância atribuído ao erro na amplitude e ao erro no *offset* da curva, respectivamente.

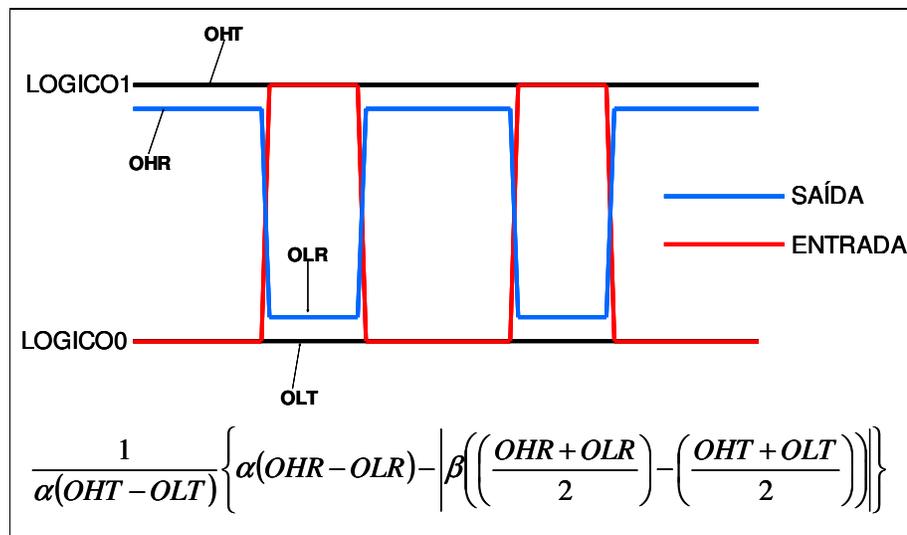


Figura 27 – Função de avaliação do cromossomo da figura 24.

Os seguintes parâmetros do AG foram usados para sintetizar um circuito INVERSOR:

- Gerações: 100
- População: 200

- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

Os resultados obtidos são apresentados a seguir. A figura 28 apresenta a topologia encontrada pelo AG, a figura 29 apresenta as curvas de entrada e saída do circuito e a figura 30 apresenta as curvas de evolução do AG.

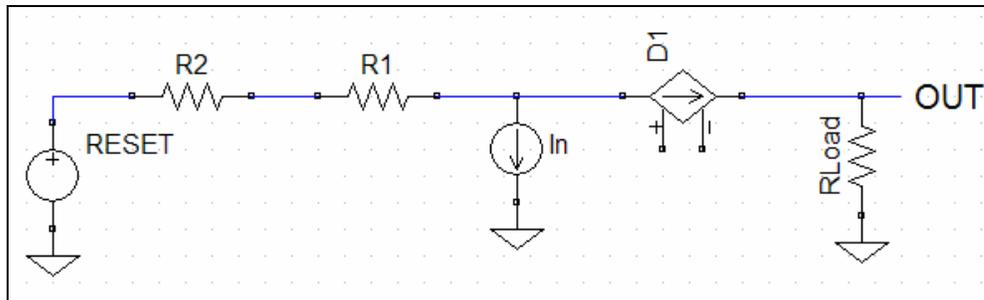


Figura 28 – Circuito sintetizado com otimização de topologia e valores dos componentes.

Os valores encontrados para cada componente do circuito representado na figura 28 estão na tabela 1.

Componente	Valor
R_1	$4,39 \times 10^{6,52}$ ($\sim 14,5 \text{M}\Omega$)
R_2	$3,00 \times 10^{8,69}$ ($\sim 1,5 \text{G}\Omega$)
R_{load}	$5,66 \times 10^{6,12}$ ($\sim 7,5 \text{M}\Omega$)

Tabela 1 – Valores dos componentes do circuito da figura 28.

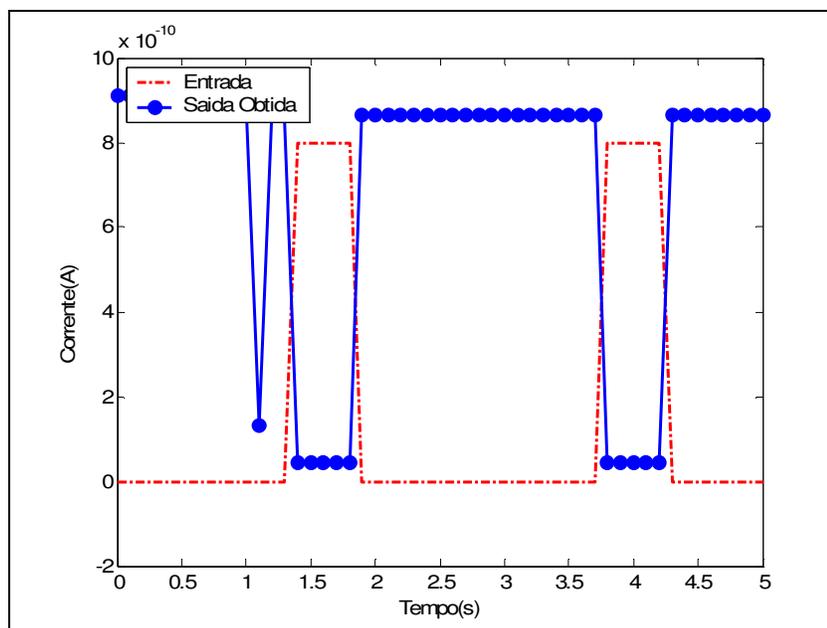


Figura 29 – Curvas do circuito da figura 28.

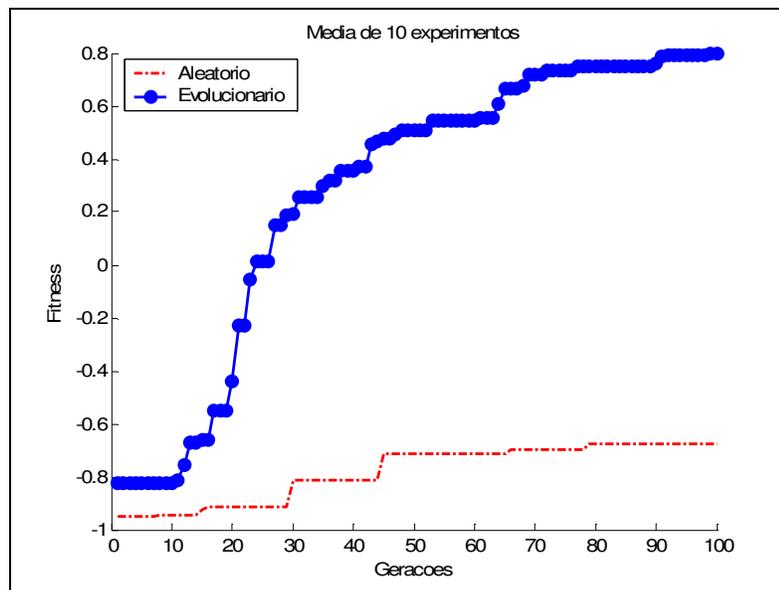


Figura 30 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização de topologia do circuito e valores dos componentes.

Como descrito anteriormente, para garantir a robustez de um circuito que utiliza dispositivos moleculares do tipo Diodo Molecular de Tour-Reed, é necessário criar circuitos que se comportem da mesma forma, usando qualquer Diodo Molecular de Tour-Reed. Portanto, é preciso fazer uma evolução em que a avaliação leve em consideração esta variação (figura 13) do comportamento dos dispositivos moleculares. Os seguintes valores dos parâmetros do AG foram utilizados:

- Gerações: 300
- População: 200
- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

Utilizando a mesma função de avaliação da figura 27, os resultados obtidos são apresentados nas figuras a seguir. A figura 31 apresenta a topologia do circuito encontrado, as figuras 32, 33 e 34 apresentam as curvas de entrada e saída relativas às variações da curva do diodo, a figura 35 apresenta as curvas de evolução do AG e a tabela 2 lista os componentes do circuito da figura 31.

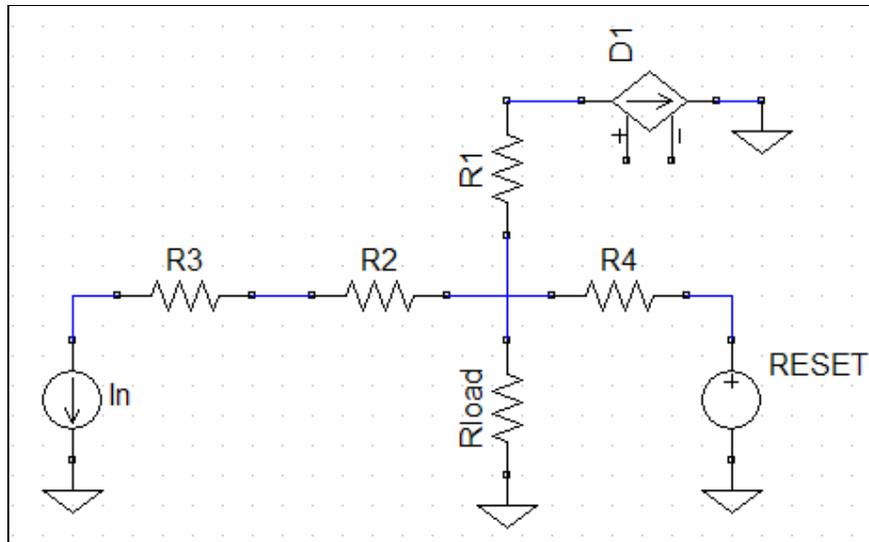


Figura 31 – Circuito encontrado otimizando a topologia e os valores dos componentes variando a curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Componente	Valor
R_1	$5,16 \times 10^{4,67}$ ($\sim 242\text{K}\Omega$)
R_2	$6,05 \times 10^{6,21}$ ($\sim 9,8\text{M}\Omega$)
R_3	$6,06 \times 10^{2,41}$ ($\sim 1,5\text{K}\Omega$)
R_4	$3,01 \times 10^{9,49}$ ($\sim 9,3\text{G}\Omega$)
R_{load}	$2,58 \times 10^{3,46}$ ($\sim 7,5\text{K}\Omega$)

Tabela 2 – Valores dos componentes do circuito da figura 31.

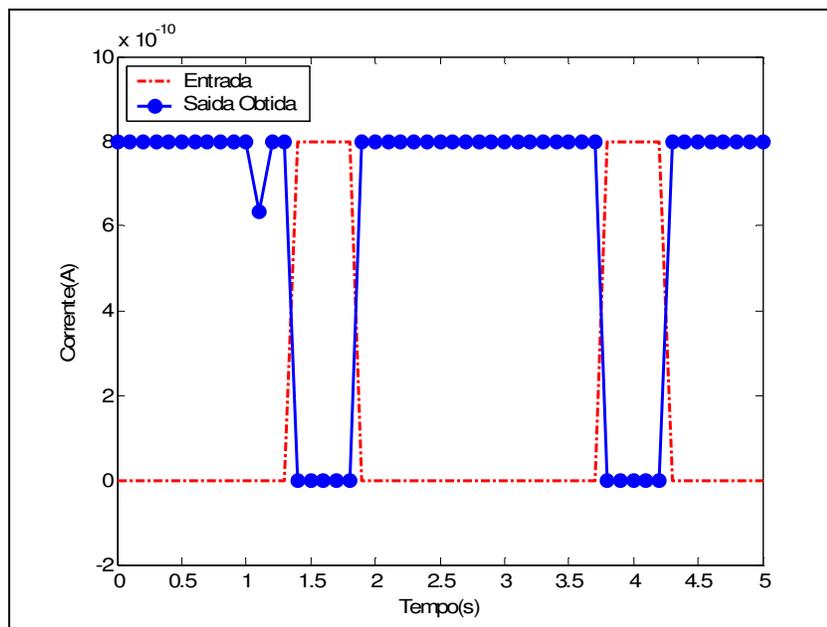


Figura 32 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.

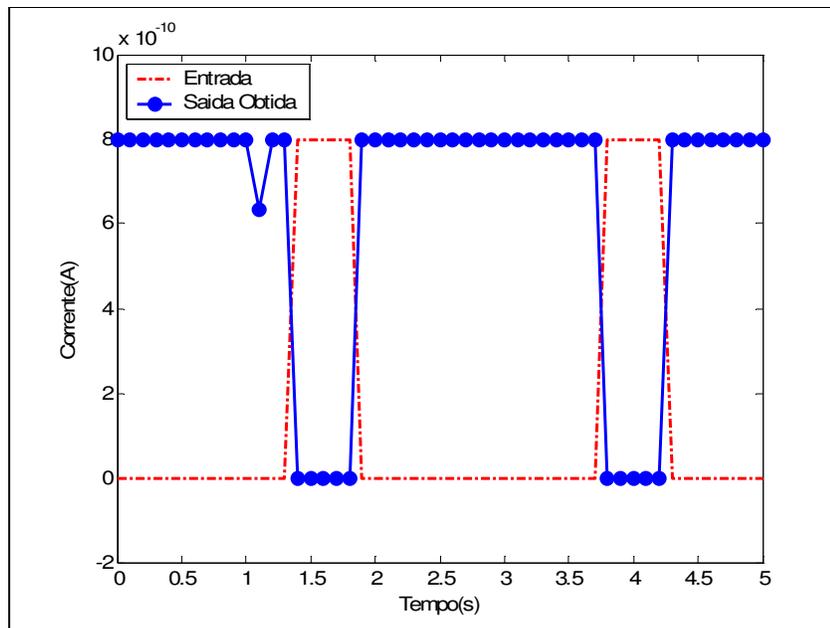


Figura 33 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva do centro (verde) da figura 13.

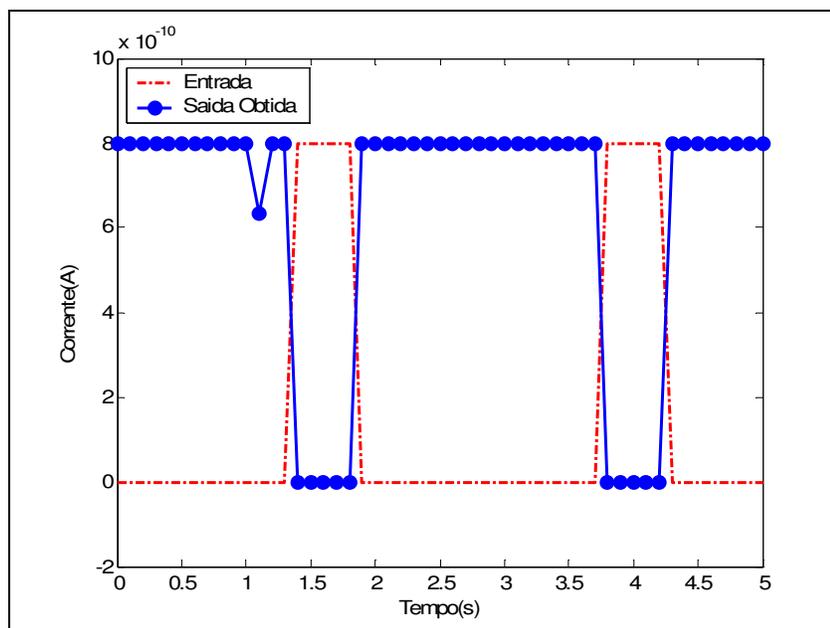


Figura 34 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.

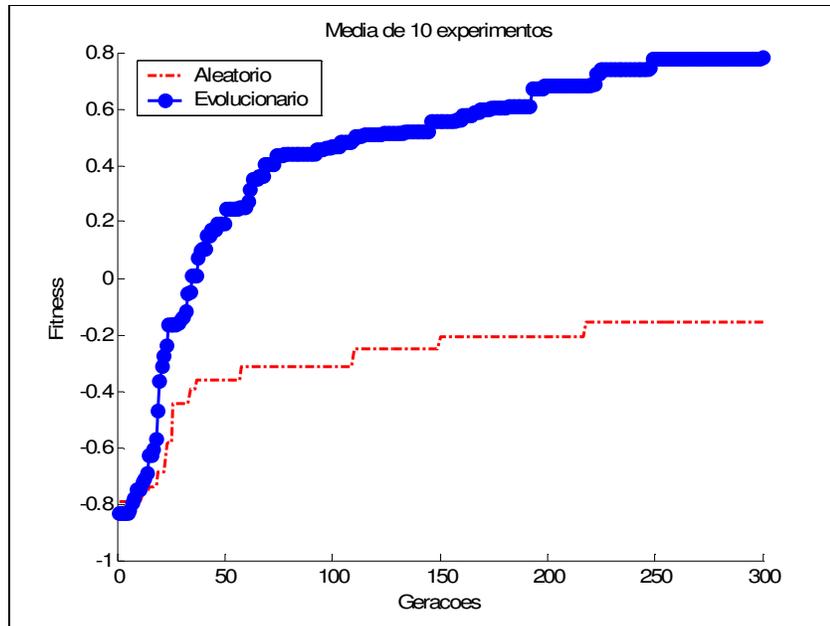


Figura 35 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Como pode ser visto, os resultados obtidos por esse método de síntese são muito superiores aos resultados do método anterior. No caso anterior, o problema era a topologia fixa, mas a maioria dos circuitos gerados eram válidos. Neste método, os circuitos gerados são inválidos na sua maioria, pois nem todos os circuitos possuem componentes conectados aos nós 1, 2 e 3 (entrada, *reset* e carga) e/ou possuem componentes desconectados, mas a variação da topologia permite encontrar circuitos melhores. Além dos indivíduos inválidos dificultarem a evolução do AG, eles demoram mais tempo para serem simulados.

3.4.2.

Representação por Matriz de Adjacências

Como pode ser visto, na representação simples existem problemas que afetam o desempenho do AG. Fixar a topologia do circuito impede que o AG encontre soluções possivelmente melhores. Por outro lado, variar a topologia de modo que cada componente possa assumir qualquer posição faz com que muitos indivíduos inválidos sejam gerados, dificultando a evolução, pois o AG não tem conhecimento de como funciona o Spice [18]. Uma solução encontrada para esses problemas é representar cada circuito por uma matriz de adjacências [3].

Em uma matriz de adjacências, a informação sobre a posição de cada vértice é relativa aos demais vértices. A informação diz que um determinado vértice é vizinho de outro vértice (figura 36).

Matriz de adjacência					
	V1	V2	V3	V4	
V1	1	1	0	1	O vértice 1 é vizinho do vértice 4
V2	1	1	0	0	O vértice 3 é vizinho do vértice 3
V3	0	0	1	0	
V4	1	1	1	0	O vértice 4 é vizinho do vértice 1

Figura 36 – Modelo de uma matriz de adjacência.

Um grafo pode ser gerado a partir de uma matriz de adjacências. Por exemplo, utilizando a matriz de adjacências da figura 36, o grafo gerado possui 4 vértices (figura 37).

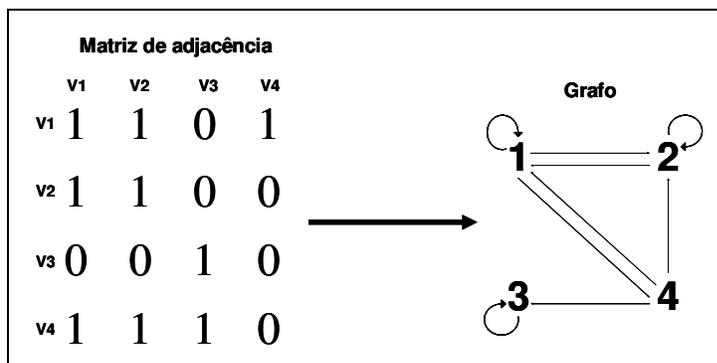


Figura 37 – Grafo gerado a partir de uma matriz de adjacência.

A síntese de circuitos pode ser feita baseando-se no modelo de um grafo gerado por uma matriz de adjacências, onde cada componente do circuito é representado por uma posição da matriz e cada nó do circuito por um vértice da matriz (no caso da figura 37, V1, V2, V3 ou V4). As posições da matriz iguais a zero indicam que não existe componente entre os vértices. O grafo da figura 37 pode ser considerado um circuito com 4 nós e 9 componentes.

Na síntese evolucionária, uma matriz de adjacências é representada por um cromossomo. Neste caso, representar uma matriz de adjacências por um cromossomo é simples. O cromossomo é composto por n^2 genes binários, onde n é a dimensão da matriz quadrada estabelecida previamente à execução do AG, determinando o número máximo de nós do circuito. Para montar a matriz, basta dividir os genes em n grupos de n genes e colocá-los em ordem em cada linha da matriz (figura 38).

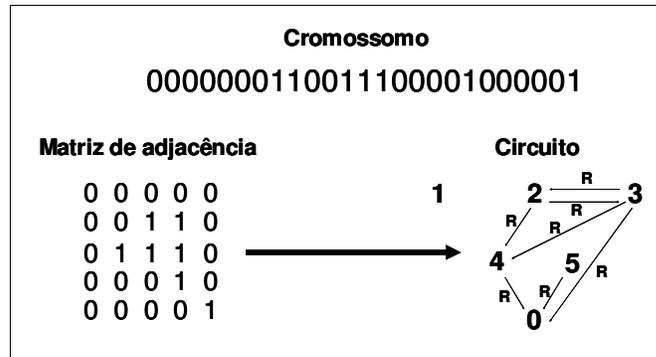


Figura 38 – Montagem da matriz de adjacência.

Depois que a matriz é montada, ela passa por um processo de validação para que não gere circuitos inválidos. O primeiro passo da validação é verificar se algum vértice da matriz possui somente zeros em sua linha e coluna. Se isso acontecer, o vértice é eliminado da matriz (figura 39), pois representa um nó do circuito que não possui nenhum componente conectado. Ao remover um vértice, todos os demais são renumerados, começando de 1 novamente.

Em seguida, quando um componente está conectado a ele mesmo (posição da diagonal principal da matriz diferente de zero), ele passa a ser conectado ao nó terra. Então, o segundo passo é verificar se existe algum componente que está conectado somente a um outro componente ou está conectado somente ao terra. Se isso acontecer, o vértice que representa essa anomalia é eliminado da matriz (figura 40) e os outros vértices são renumerados novamente a partir de 1.

O terceiro passo é verificar se a matriz possui menos vértices que o número mínimo possível de vértices. Se isso acontecer, o cromossomo é inválido e recebe uma nota ruim. Senão, o circuito é gerado (figura 41) através da matriz resultante da validação.

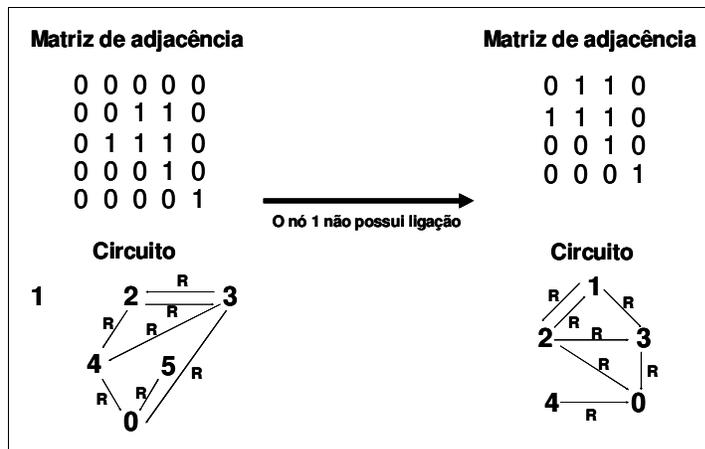


Figura 39 – Remoção de vértice que representa um nó sem ligação.

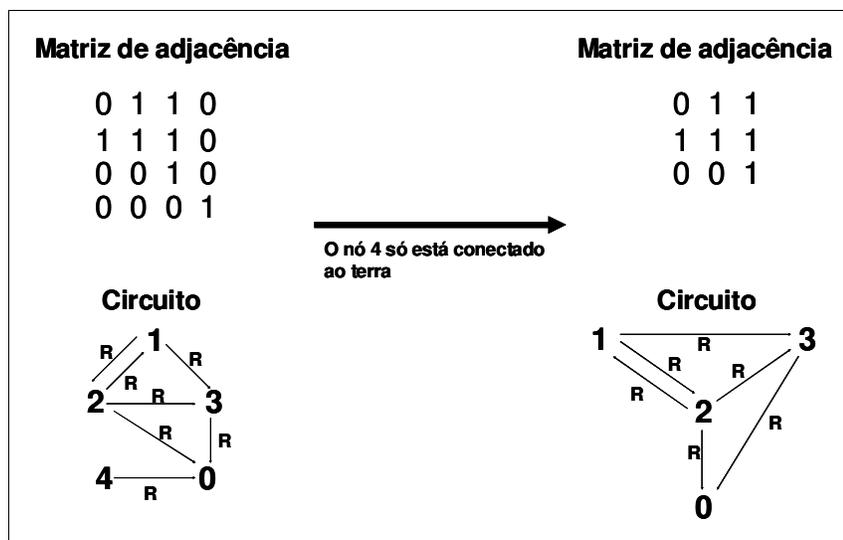


Figura 40 – Remoção de vértice que representa um nó conectado somente ao terra.

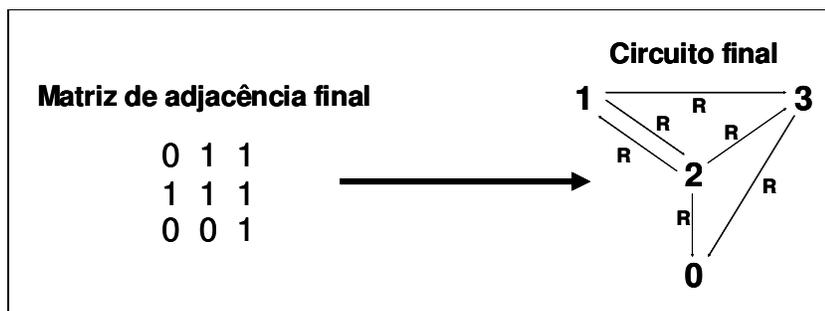


Figura 41 – Circuito final gerado através da matriz resultante da validação.

Além do segmento do cromossomo que determina a topologia do circuito estabelecida pela matriz de adjacências, há um segundo segmento de números reais que determina os valores dos resistores. Seguindo o modelo de definição de valores de resistores do subitem anterior, onde são necessários dois números

reais para determinar o valor de um resistor, o segundo segmento do cromossomo possui $2 * n^2 + 2$ genes de números reais.

Como a matriz quadrada possui dimensão n , são necessários $2 * n^2$ genes, pois cada par de genes determina o valor de um resistor. Os últimos 2 genes determinam o valor do resistor de carga. Uma matriz de valores reais também é gerada a partir desse segundo segmento e acompanha o processo de validação da matriz de adjacências. Se uma linha e uma coluna da matriz de adjacências forem removidas, serão removidas também as respectivas linha e coluna da matriz de valores dos resistores.

Como no subitem anterior, os circuitos gerados possuem resistores e Diodos Moleculares de Tour-Reed. Para diferenciar os dois componentes na matriz de adjacências, foi estabelecido que o resistor seria representado pelo número 1 e o diodo pelo número 2. A montagem final do circuito é feita da mesma forma da figura 25.

Um AG coevolucionário também foi utilizado para sintetizar circuitos moleculares com matriz de adjacências. Nesse caso, as duas populações foram compostas por cromossomos com valores da matriz de adjacências e cromossomos com valores dos resistores, respectivamente. Os seguintes parâmetros do AG são utilizados.

- Gerações: 100
- População: 100
- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

A seguir são apresentados os resultados das simulações. A figura 42 apresenta a topologia do circuito encontrada, a figura 43 apresenta as curvas de entrada e saída do circuito da figura 42, a figura 44 apresenta as curvas de evolução do AG e a tabela 3 lista os componentes do circuito da figura 42.

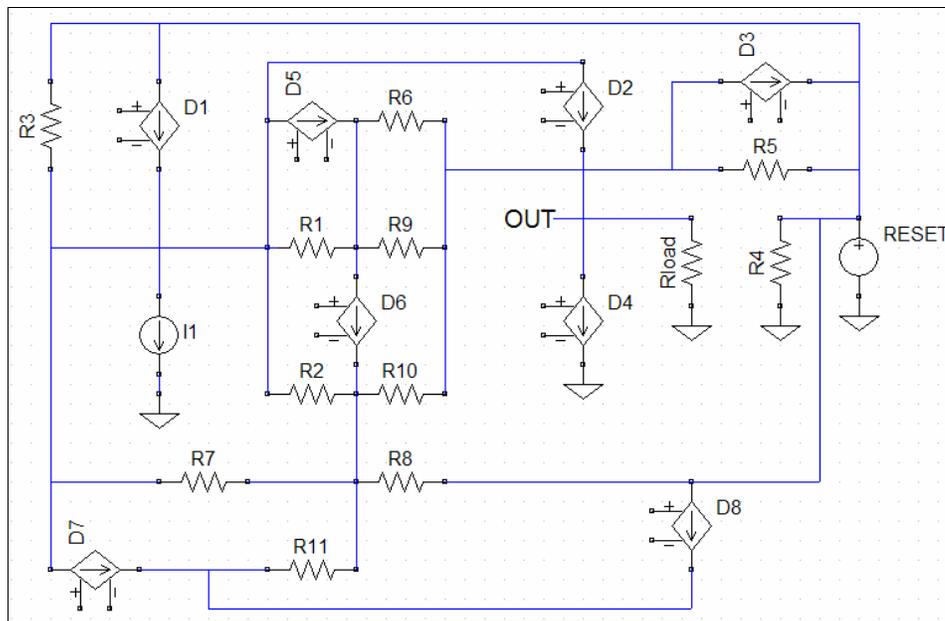


Figura 42 – Circuito encontrado utilizando matriz de adjacência.

Componente	Valor
R ₁	~170KΩ
R ₂	~650Ω
R ₃	~35GΩ
R ₄	~345KΩ
R ₅	~11GΩ
R ₆	~89MΩ
R ₇	~22Ω
R ₈	~4,6GΩ
R ₉	~8,4KΩ
R ₁₀	~2,3KΩ
R ₁₁	~709MΩ
R _{load}	~143MΩ

Tabela 3 – Valores dos componentes do circuito da figura 42.

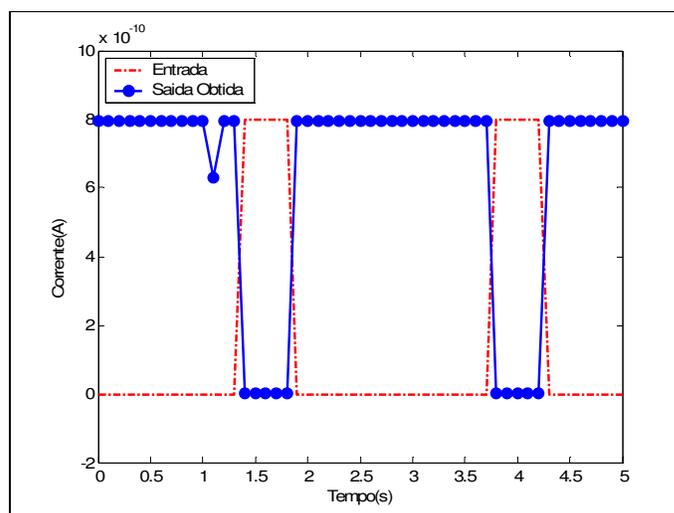


Figura 43 – Curva de saída do circuito da figura 42.

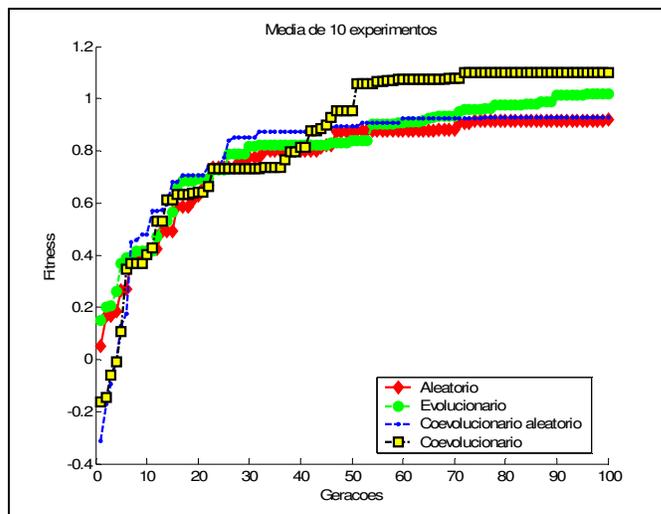


Figura 44 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com matriz de adjacência.

De forma a obter circuitos moleculares confiáveis, como nos casos anteriores, foram feitos experimentos levando em consideração as variações da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed. Foram utilizados os seguintes parâmetros do AG:

- Gerações: 200
- População: 200
- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

Os resultados são apresentados a seguir. A figura 45 apresenta a topologia do circuito encontrada, as figuras 46, 47 e 48 apresentam as curvas de entrada e saída relativas às variações da curva do diodo, a figura 49 apresenta as curvas de evolução do AG e a tabela 4 lista os componentes do circuito da figura 45.

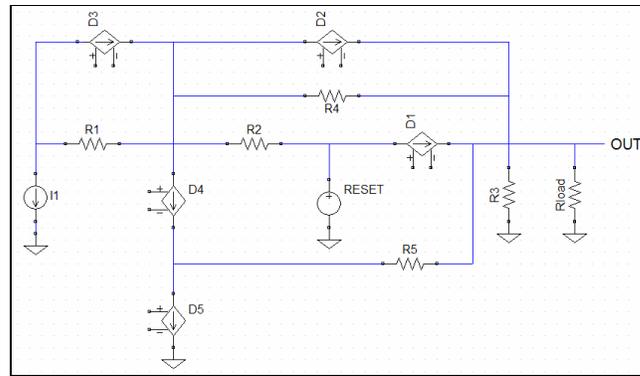


Figura 45 – Circuito encontrado utilizando matriz de adjacência com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Componente	Valor
R_1	$\sim 5,5K\Omega$
R_2	$\sim 3G\Omega$
R_3	$\sim 18M\Omega$
R_4	$\sim 2,8K\Omega$
R_5	$\sim 11,1K\Omega$
R_{load}	$\sim 9,8K\Omega$

Tabela 4 – Valores dos componentes do circuito da figura 45.

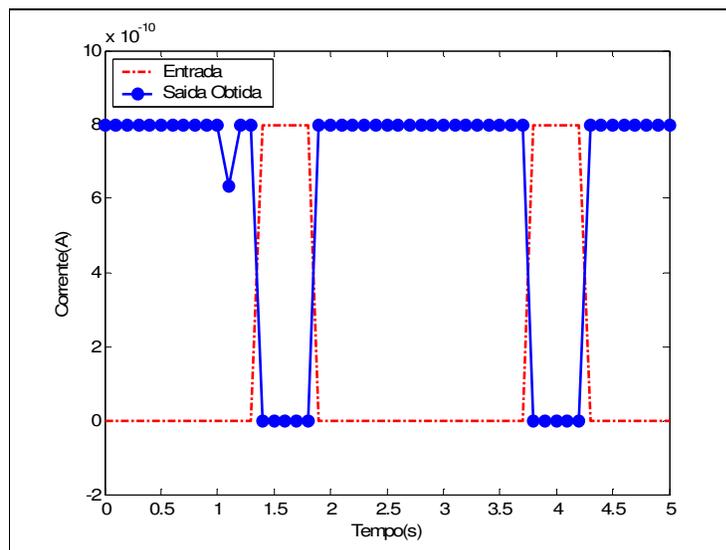


Figura 46 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.

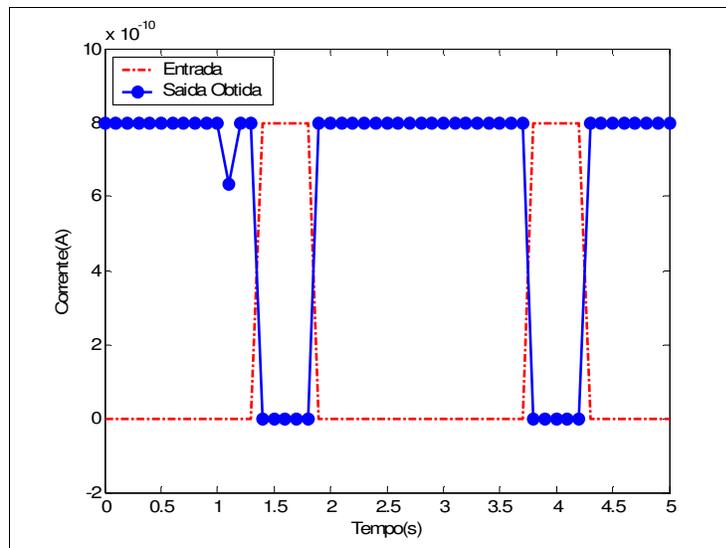


Figura 47 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva do centro (verde) da figura 13.

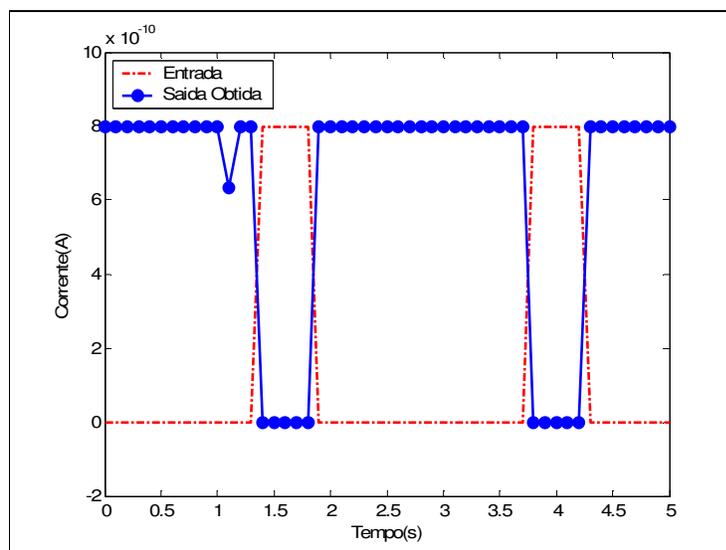


Figura 48 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.

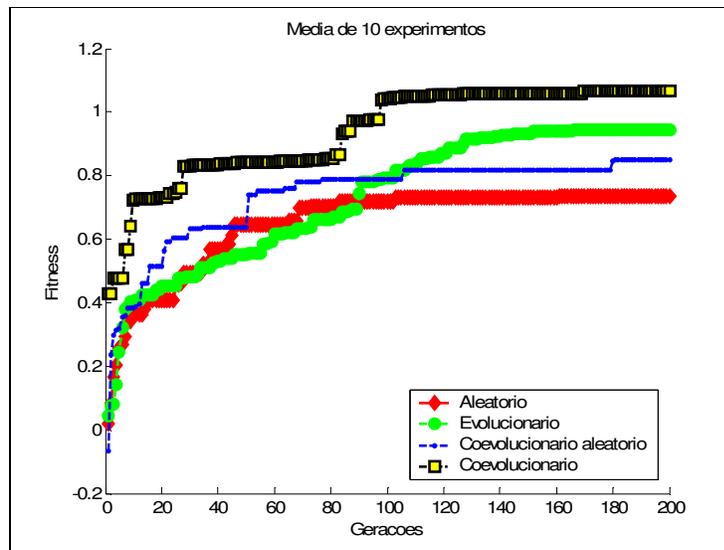


Figura 49 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com matriz de adjacência com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.

Como pode ser visto nas figuras 44 e 49, o AG coevolucionário obteve melhores resultados que o AG convencional. Com a matriz de adjacências, as curvas começam com *fitness* próximos de zero e convergem para aproximadamente 1,1 (maior que nos casos anteriores). Isso se deve ao fato de a matriz de adjacências gerar poucos indivíduos inválidos (que possuem *fitness* muito baixo), aumentando assim a eficiência do AG

3.4.3.

Representação por Cubo de Adjacências

Com a matriz de adjacências é possível diminuir o número de circuitos inválidos, diminuindo o tempo de busca e melhorando a evolução do AG. Contudo, com a matriz de adjacências não se consegue representar componentes com três terminais, visto que um terminal de um componente é representado por uma coluna ou uma linha da matriz. Para representar componentes com três terminais, seguindo o conceito de adjacência, criou-se o cubo de adjacências, que é composto por matrizes de adjacências sobrepostas. Um cubo contendo dimensão n , onde n é igual a quatro, por exemplo, possui quatro matrizes de dimensão 4×4 sobrepostas, como mostra a figura 50.

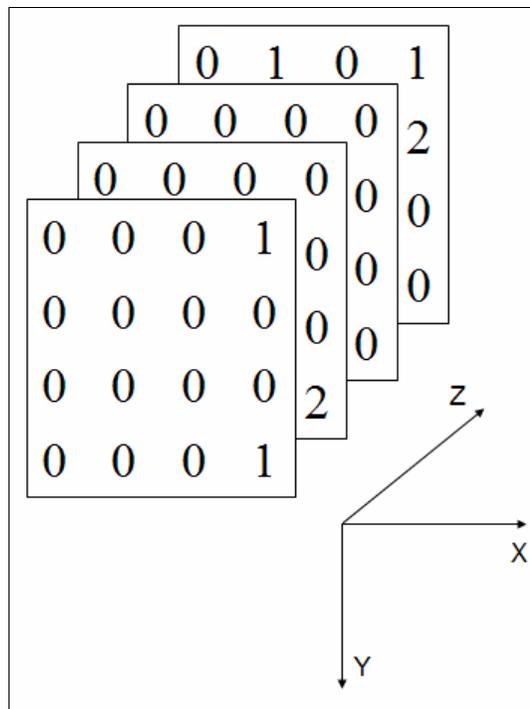


Figura 50 – Representação gráfica do cubo de adjacências.

Assim, utilizando o sistema cartesiano do cubo, cada terminal do componente pode ser representado por um eixo (figura 50). Neste trabalho, o componente de três terminais utilizado foi o transistor molecular. Por se tratar de um novo transistor, que ainda vem sendo estudado, foi utilizada a seguinte convenção: cada terminal do transistor associado a uma dimensão do cubo foi representado por uma letra (X, Y e Z), como pode ser visto na seção 3.1.2. A coluna de cada matriz do cubo representa o terminal X, a linha de cada matriz do cubo representa o terminal Y e a profundidade de cada matriz do cubo representa o terminal Z.

O cubo de adjacências da figura 50 pode ser visto de forma diferente na figura 51 onde Z define a profundidade de cada matriz no cubo. Como pode ser visto, há 3 números diferentes no cubo de adjacências: 0, 1 e 2. O número 0 representa que a posição é um circuito aberto. O número 1 representa que a posição possui um resistor e o número 2 representa que a posição possui um transistor molecular.

		X				Y											
		1	2	3	4	1	2	3	4								
Z	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
	3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	4	0	0	0	1	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0

Figura 51 – Representação em matrizes do cubo de adjacências da figura 50.

A tabela 5 contém as informações dos componentes do cubo de adjacências da figura 50. O cubo de adjacências possui 7 resistores e 2 transistores moleculares.

No.	Nós do circuito (posição)			Componente	Nome
	X	Y	Z		
1	4	1	1	Resistor (1)	R1
2	4	4	1	Resistor (1)	R2
3	1	2	2	Resistor (1)	R3
4	3	3	2	Resistor (1)	R4
5	1	4	2	Resistor (1)	R5
6	4	4	2	Transistor (2)	T1
7	2	1	4	Resistor (1)	R6
8	4	1	4	Resistor (1)	R7
9	4	2	4	Transistor (2)	T2

Tabela 5 – Componentes do cubo de adjacências da figura 50.

O circuito montado com os componentes da tabela 5 é apresentado na figura 52. A posição dos resistores é definida somente pelos valores de X e Y, pois os resistores só possuem dois terminais. A posição dos transistores moleculares é definida pelos valores de X, Y e Z, pois possuem três terminais. Como pode ser visto, o nó 3 do circuito está flutuando, fazendo com que o circuito seja inválido.

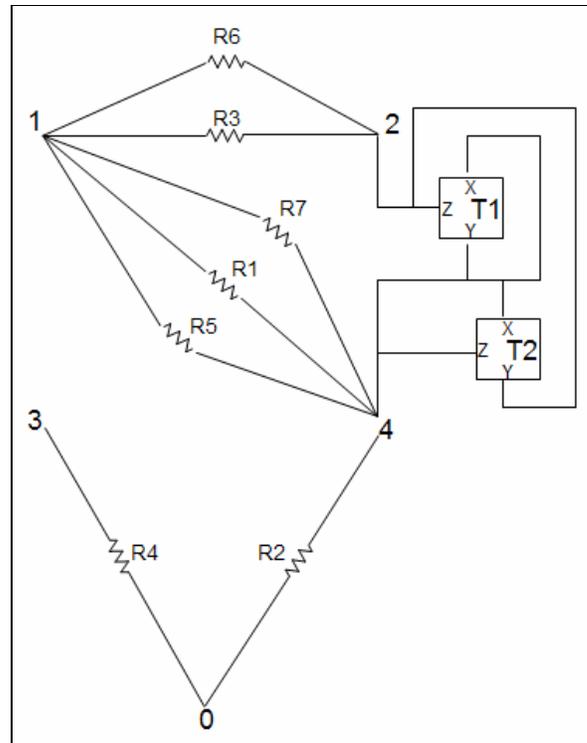


Figura 52 – Circuito representado pelo cubo de adjacências da figura 50.

O processo de validação de um cubo de adjacências é mais complexo do que a validação de uma matriz de adjacências, visto que deve-se verificar uma dimensão a mais. Portanto, além da validação já feita na matriz de adjacências, que trata somente de um plano, no cubo de adjacências trata-se também da terceira dimensão, pois componentes com 3 terminais mal posicionados também podem invalidar um circuito. Assim, como na matriz de adjacências, o nó inválido deve ser retirado do cubo de adjacências. Portanto, o nó 3 do circuito da figura 52 é removido e o novo cubo de adjacências pode ser visto na figura 53. Assim, o circuito representado pelo cubo de adjacências possui um nó a menos e é ilustrado na figura 54.

Z = 1	Z = 2	Z = 3
0 0 1	0 0 0	0 1 1
0 0 0	1 0 0	0 0 2
0 0 1	1 0 2	0 0 0

Figura 53 – Cubo de adjacências depois da remoção do nó inválido.

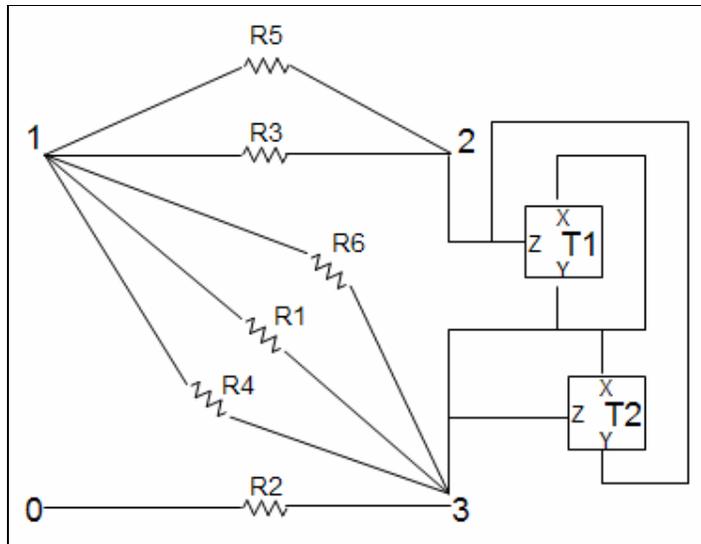


Figura 54 – Circuito montado através do cubo de adjacências da figura 53.

Além da complexidade de se validar um cubo de adjacências ser maior, existe outro problema no cubo de adjacências – o número de componentes. Com uma matriz de adjacências de dimensão n pode-se ter no máximo n^2 componentes. Com um cubo de adjacências de mesma dimensão pode-se ter n^3 componentes, ou seja, n vezes mais, gerando circuitos com muitos componentes.

Para evitar esse problema, foi definido um número máximo de componentes, originando uma restrição do AG. Para tratar essa restrição, foram implementados operadores de *crossover* e *mutação*, específicos para esse problema, que garantem um número máximo de componentes. Além disso, a função de inicialização da população foi reimplementada, de modo a obedecer a esta restrição.

A modelagem do cromossomo, neste caso, é dividida em 3 segmentos. O primeiro segmento contém os valores do cubo de adjacências, o segundo segmento contém os valores dos resistores e o terceiro segmento possui a posição da entrada, a posição do VCC, a posição do VEE e a posição do resistor de carga.

Neste caso, a montagem final do circuito é feita de forma diferente dos casos anteriores. As posições da entrada e do resistor de carga são determinadas pelo AG. No AG coevolucionário, a modelagem do cromossomo é dividida em duas populações, onde a primeira população é representada por um cromossomo de dois segmentos e a segunda, por um cromossomo de um segmento.

O primeiro segmento do cromossomo que representa a primeira população contém os valores do cubo de adjacências e o segundo contém os valores das posições da entrada, do VCC, do VEE e do resistor de carga. O segmento único do cromossomo que representa a segunda população contém os valores dos resistores que podem pertencer ao circuito. Os seguintes parâmetros do AG são utilizados.

- Gerações: 80
- População: 50
- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

A seguir são apresentados os resultados dos experimentos com o cubo de adjacências. A figura 55 apresenta a topologia do circuito encontrada, a figura 56 apresenta as curvas de entrada e saída do circuito, a figura 57 apresenta as curvas de evolução do AG e a tabela 6 lista os componentes do circuito da figura 55.

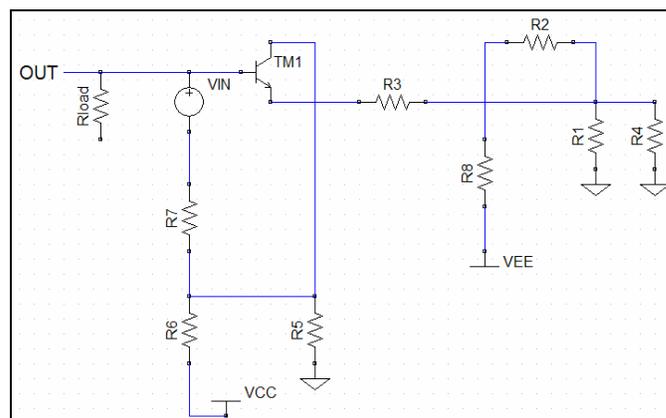


Figura 55 – Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência.

Componente	Valor
R ₁	~34KΩ
R ₂	~5,4KΩ
R ₃	~457MΩ
R ₄	~16,6KΩ
R ₅	~19MΩ
R ₆	1KΩ
R ₇	1KΩ
R ₈	1KΩ
R _{load}	~553,1MΩ

Tabela 6 – Valores dos componentes do circuito da figura 55.

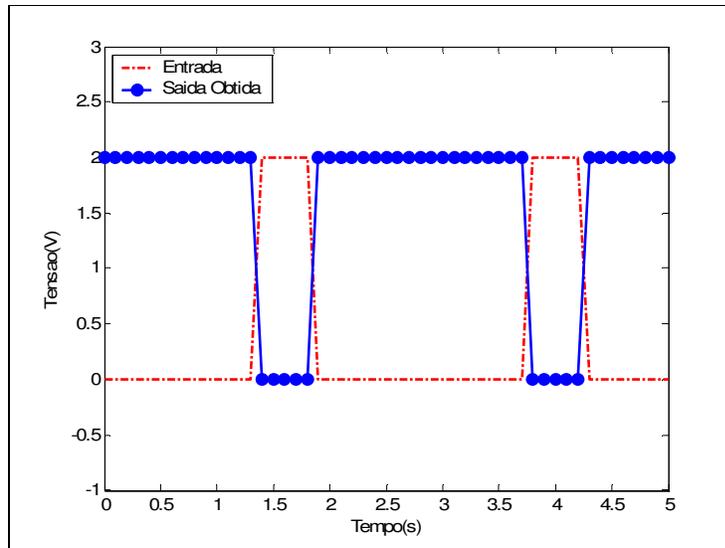


Figura 56 – Curva de saída do circuito da figura 55.

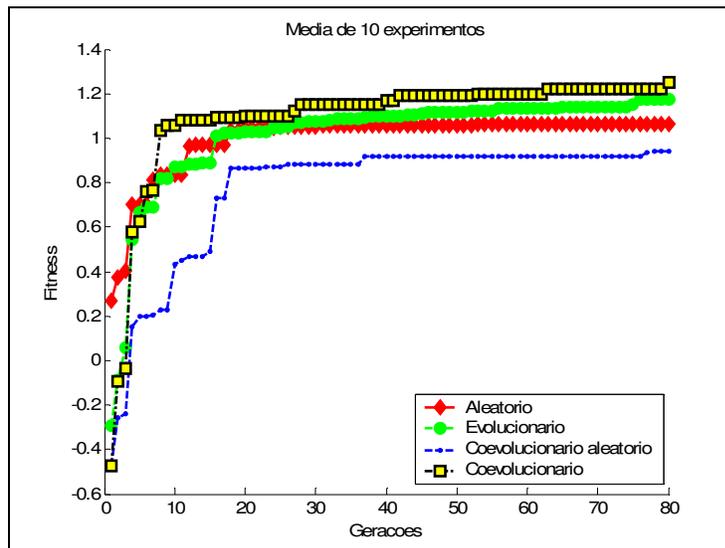


Figura 57 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com cubo de adjacência.

Com o Transistor Molecular, também foram feitos experimentos que levam em consideração as variações do dispositivo. Os seguintes parâmetros do AG foram utilizados:

- Gerações: 100
- População: 100
- *Crossover*: [0,8 – 0,75]
- *Mutação*: [0,8 – 0,9]
- *Steady State*: [0,4 – 0,2]

Os resultados são apresentados a seguir. A figura 58 apresenta a topologia do circuito encontrada, as figuras 59, 60 e 61 apresentam as curvas de entrada e saída relativas às variações da curva do diodo e a figura 62 apresenta as curvas de evolução do AG.

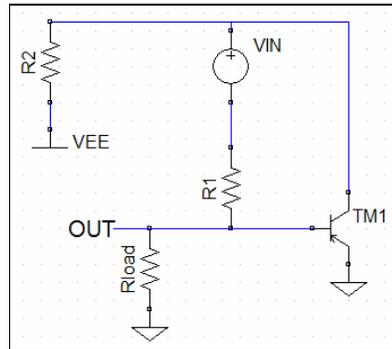


Figura 58 – Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência com variação da curva do Transistor Molecular.

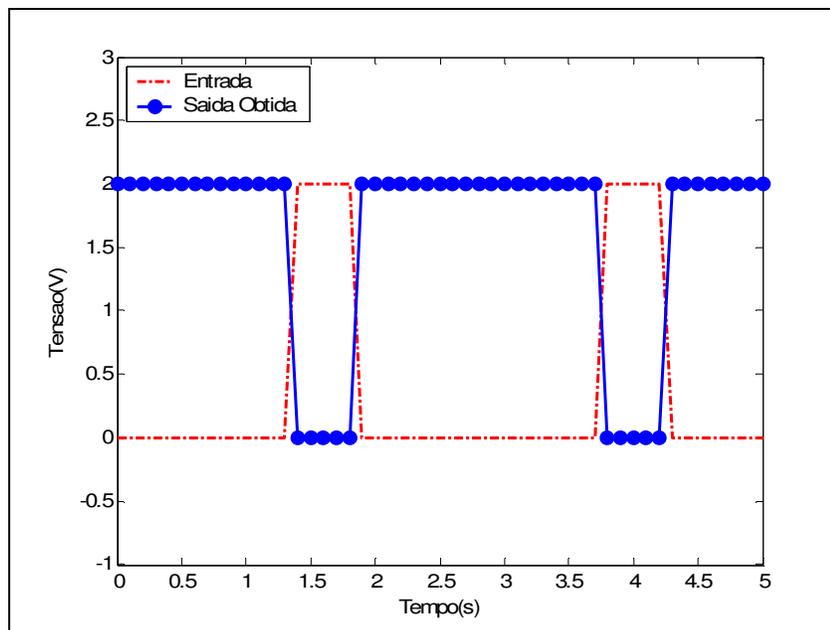


Figura 59 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 14.

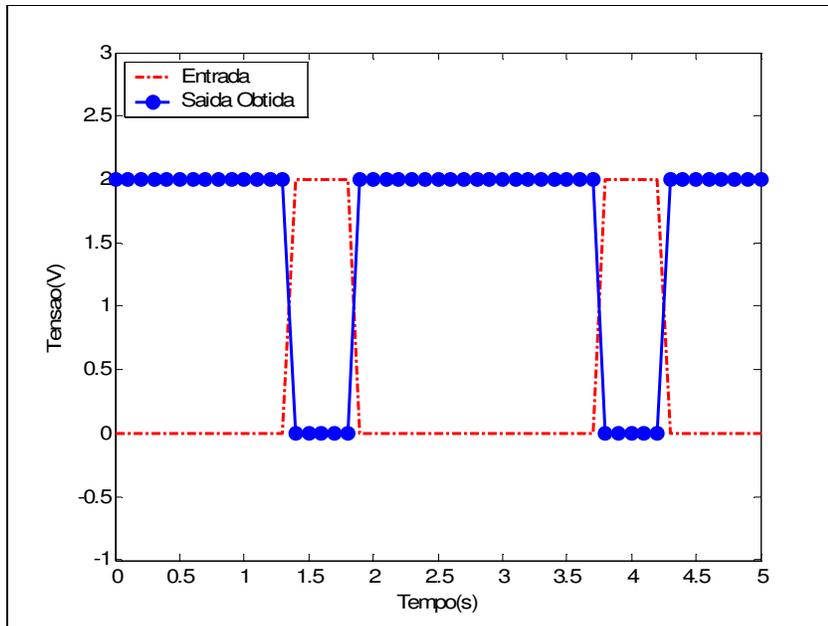


Figura 60 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva do centro (verde) da figura 14.

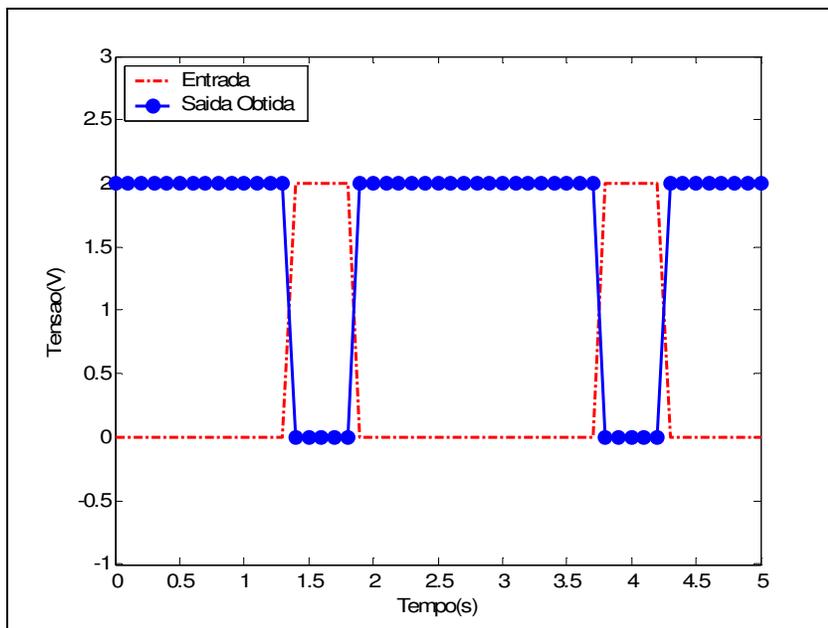


Figura 61 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 14.

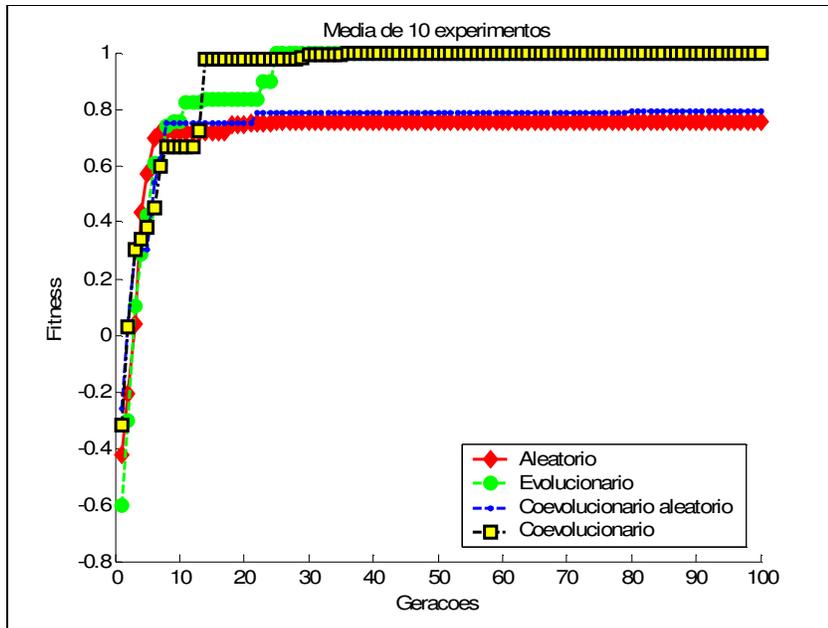


Figura 62 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com cubo de adjacência com variação da curva do Transistor Molecular.

Os resultados mostram que a variação da posição da entrada e do resistor de carga, determinados pelo AG, dificulta o início da evolução do AG, mas que, apesar disto, o AG converge para um valor próximo de 1,1, como no caso da matriz de adjacências. Além disso, a restrição de número de componentes nos segmentos do cromossomo dos experimentos com cubo de adjacências resultou em circuitos menos complexos que nos outros casos.