

Nanociênciа: Tecnologias Livres para Simulação de Sistemas Nanoparticulados

Alexandre Zamberlan/Solange Fagan

UFN

Novembro 10, 2018

Agenda

- 1 Contexto
- 2 Computação: Modelagem e Simulação
- 3 Simulação via Sistemas Multiagentes
- 4 Considerações

Agenda

1 Contexto

2 Computação: Modelagem e Simulação

3 Simulação via Sistemas Multiagentes

4 Considerações

Objetivo

- Apresentar a Nanociênci(a) (como oportunidade) de trabalho, as ferramentas e um estudo de caso de ambiente de simulação construído 100% com tecnologias livres.

Nanociência e Nanotecnologia (NN)

NANOCIÊNCIA

É o **estudo de fenômenos** e manipulações de materiais em escala atômica, molecular e macromolecular

NANOTECNOLOGIA

Preocupa-se com o **projeto, caracterização, produção e aplicação** de estruturas em escala nano $\iff 10^{-9} \text{ m}$

[Dowling et al. 2004]

Nanopartículas

Nanopartículas

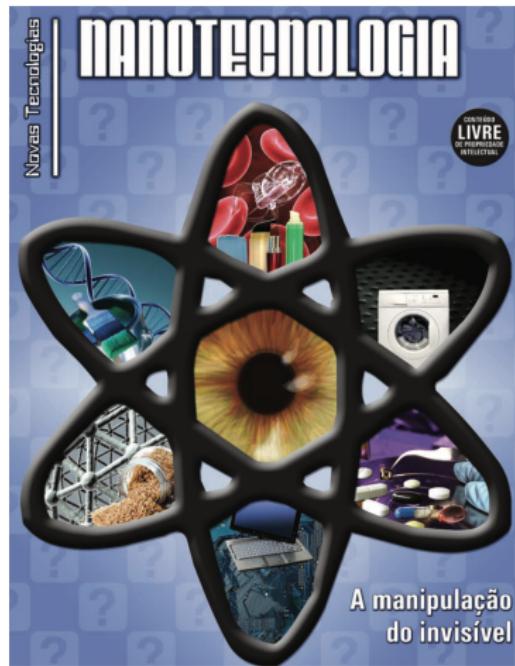
Dispersões particuladas ou partículas sólidas com um tamanho na faixa de 10-1000nm

**A NANOPARTÍCULA é
para uma BOLA de futebol
assim como a BOLA é para a TERRA**



[Guazzelli and Perez 2009]

Nanopartículas



[Guazzelli and Perez 2009]

Nanopartículas

Nanopartículas

Dispersões particuladas ou partículas sólidas com um tamanho na faixa de 10-1000nm

- **Características:**

- área superficial \iff maioria dos seus átomos está disposta na superfície do material;
- capacidade de auto-organização das partículas ou matéria [Dowling et al. 2004].

Nanopartículas

Nanopartículas

Dispersões particuladas ou partículas sólidas com um tamanho na faixa de 10-1000nm

- **Características:**

- área superficial \iff maioria dos seus átomos está disposta na superfície do material;
- capacidade de auto-organização das partículas ou matéria [Dowling et al. 2004].

- **Aplicações:**

- transporte e entrega de fármacos, armazenamento de energia química, entre outras.

[Mora-Huertas et al. 2010]

Nanopartículas

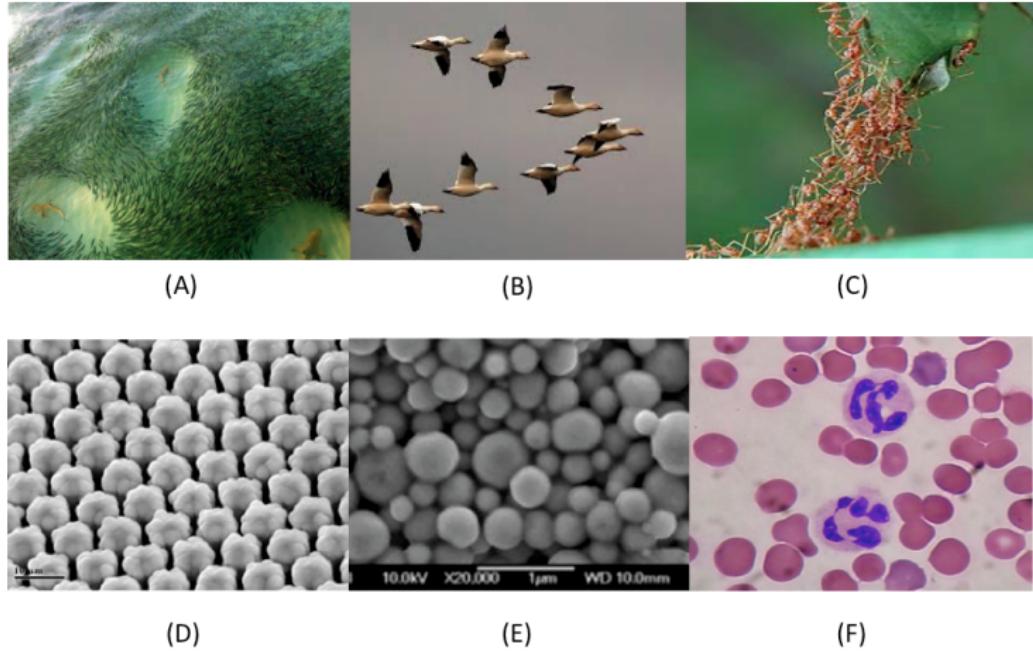


Figure 1: Auto-organização biológica e/ou química. (A) Cardume de peixes; (B) gansos; (C) formigas; (D) nanotubos de carbono; (E) nanopartículas poliméricas; (F) células do sistema imunológico.

Agenda

1 Contexto

2 Computação: Modelagem e Simulação

3 Simulação via Sistemas Multiagentes

4 Considerações

Computação Aplicada à Nanotecnologia

- Computação aplicada à Nanotecnologia:
 - compreensão de fenômenos físico-químicos;
- Simulação computacional:
 - avaliação do comportamento de auto-organização da matéria
 - modelos analíticos e fundamentos físicos, químicos e de ciência dos materiais [Neto 2014]
- Sistemas Multiagentes (SMA) como ferramenta de simulação

Oportunidades

Simulação como oportunidade

- Não perturba os sistemas que estariam sob investigação;
- Avalia sistemas hipotéticos;
- Antecipa comportamentos futuros;
- Visualizada por animações;
- Economia de tempo e de recursos.

Modelo computacional

Programa de computador com variáveis apresentando comportamento **estocástico** e **dinâmico** de um sistema real.

Oportunidades

Simulação como oportunidade

Experiência do pesquisador



Tempo *versus* precisão da análise
Custo *versus* manutenção

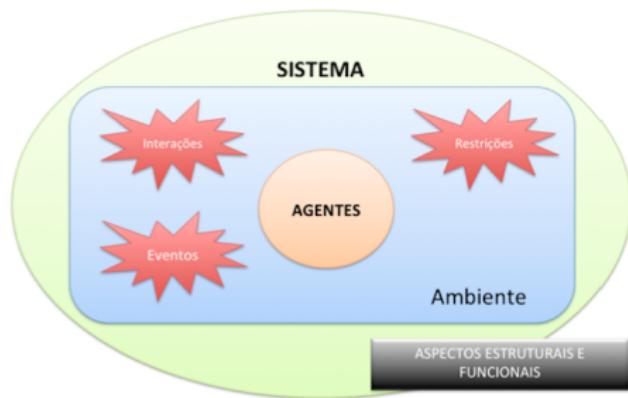
Tipos de Simulação

Propósito Geral

Diversas áreas do conhecimento

Dinâmica Molecular

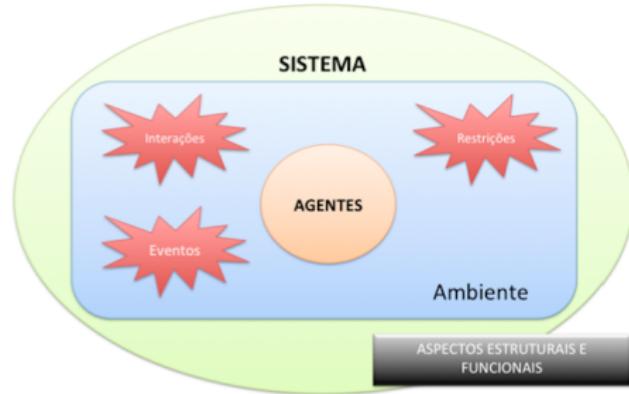
Clássica X Quântica



SMA

Comportamento coletivo

Simulação Molecular: Dinâmica X SMA



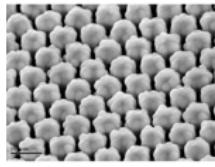
(A)



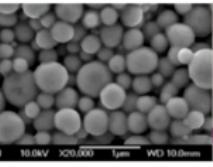
(B)



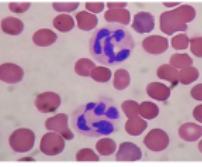
(C)



(D)



(E)



(F)

Agenda

1 Contexto

2 Computação: Modelagem e Simulação

3 Simulação via Sistemas Multiagentes

4 Considerações

Simulação via Sistemas Multiagentes

- Método baseado em comportamento coletivo
- Agentes como elementos centrais
 - autônomos
 - flexíveis e adaptáveis
 - reativos: percebem e atuam (ambiente)
 - habilidade social: interagem entre si
- Metodologias e ferramentas consolidadas
- Abordagem permite grau de abstração elevado
 - simulações \Rightarrow maior número de variáveis, restrições, operações, exceções
 - *Bottom-up* e *Top-down* \Rightarrow como sistemas particulados

[Bordini and Hübner 2009]

Kits ou ferramentas de desenvolvimento

Possuem uma variedade de características e funcionalidades:

- ambiente de desenvolvimento integrado;
- linguagem de programação;
- sistema operacional;
- suporte ao usuário (manuais e exemplos);
- integração com outras bibliotecas;
- possibilidade de executar o sistema com visualização 2D e 3D;
- propriedade de visualização de cenários de simulação.

Principais ferramentas

FLAME, **JASON**, MASON, NetLogo, Repast, SeSAM, SWARM

[Zamberlan et al. 2015]

JASON: Kit De desenvolvimento SW Livre e Aberto



The screenshot shows the homepage of the Jason project. At the top left is a painting titled "Jason" by Gustave Moreau (1865), depicting three figures in a forest setting. To the right of the painting, the word "Jason" is written in a large, bold, serif font. Below it, a subtitle reads "a Java-based interpreter for an extended version of AgentSpeak". A navigation bar at the top includes links for Home, Description, Documents, Examples, Demos, Teaching, Projects, and a search bar. On the left side, there's a logo featuring a portrait of a woman and the word "Jason" in a stylized font. The main content area contains sections for "About Jason", "Links", and "Authors", along with news items and download links for the Eclipse plug-in.

About Jason

Jason is an interpreter for an extended version of AgentSpeak. It implements the operational semantics of that language, and provides a platform for the development of multi-agent systems, with many user-customisable features. **Jason** is available Open Source, and is distributed under GNU LGPL. See more in the [Description](#) page.

Links

- Jason on [Github](#) (latest code!);
- Jason on [Sourceforge](#);
- [Screenshots](#).

Authors

Jason is developed by Jomi F. Hübner and Rafael H. Bordini, based on previous work done with many colleagues, in particular Michael Fisher, Joyce Martins, Álvaro Moreira, Renata Vieira, Willem Visser, Mike Wooldridge, but also many others, as acknowledged in

Download the latest version of Jason!

DOWNLOAD

Read the tutorial for installing Jason as an Eclipse plug-in!

ECLIPSE PLUG-IN

News

25/09/2017
The Multi-Agent Programming Contest 2017 had two teams using Jason:

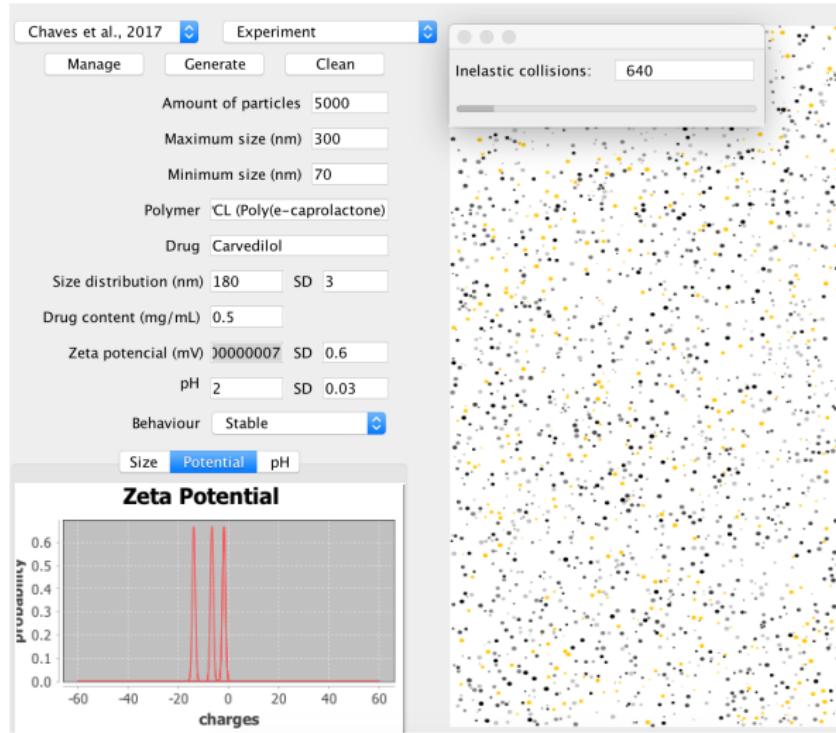
- 2nd place: Jason-DTU
- 4th place: SMART-JaCaMo (using JaCaMo)

Watch replays of the matches and see the results [here](#).

20/09/2017

[Bordini and Hübner 2009]

MASPN



[Zamberlan et al. 2016]

Agenda

- 1 Contexto
- 2 Computação: Modelagem e Simulação
- 3 Simulação via Sistemas Multiagentes
- 4 Considerações

Oportunidades de estudo



Ciência da Computação

Ensino > Graduação > Ciência da Computação



Sistemas de Informação

Ensino > Graduação > Sistemas de Informação

- Disciplinas:
 - Modelagem e Simulação
 - Programação Paralela e Distribuída
 - Sistemas Distribuídos
 - Inteligência Artificial
 - Modelagem de Processos
- Projetos de pesquisa e extensão

Oportunidades de estudo



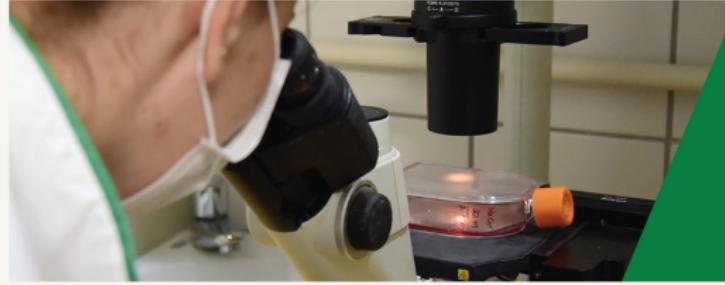
Institucional EAD Ensino Pesquisa Extensão Cultura

Busca

Eventos Notícias

Programa de Pós-graduação em Nanociências

[Ensino](#) > [Mestrado](#) > Programa de Pós-graduação em Nanociências



Programa de Pós-Graduação em
Nanociências
Universidade Franciscana

Mestrado recomendado pela CAPES em 12/07/2006. Parecer CNE/CES 103/2011.
Doutorado recomendado pela CAPES em 01/01/2012. Parecer CNE/CES 179/2012.

Oportunidades de estudo

A quem é destinado o Programa de Pós-graduação em Nanociências?

i

Mestrado Acadêmico: Licenciados ou Bacharéis em Biomedicina, Ciência da Computação, Farmácia, Física, Matemática, Química, Engenharias, Sistemas de Informação ou áreas afins.

Doutorado: Mestres em Nanociências e/ou em Biomedicina, Ciência da Computação, Farmácia, Física, Matemática, Química, Engenharias, Sistemas de Informação ou áreas afins.

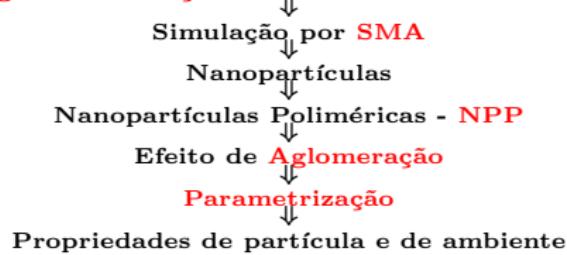
Oportunidades de estudo

Linhas de Pesquisa

Ensino > Mestrado > Programa de Pós-graduação em Nanociências > Linhas de Pesquisa

| | | |
|--------------------------|---|---|
| Linha de Pesquisa | Desenvolvimento e caracterização de sistemas bioativos e nanoestruturados | <i>Modelagem e simulação de biossistemas e nanomateriais</i> |
| Descrição | Esta linha de atuação está voltada para o desenvolvimento, caracterização e aplicação de materiais nanoestruturados, que podem ser novos compostos químicos ou substâncias bioativas. | Esta linha de atuação está voltada para a modelagem e simulação computacional de sistemas nanoestruturados. |

Modelagem e Simulação de Biossistemas e Nanomateriais



Referências

-  Bordini, R. H. and Hübner, J. F. (2009).
Agent-based simulation using bdi programming in jason.
In *M. Uhrmacher ; Danny Weins. (Org.). Multi-Agent Systems: Simulation and Applications, Modeling and Simulaton*, pages 451–476. CRC Press.
-  Dowling, A., Clif, R., and Grobert, N. (2004).
Nanoscience and nanotechnologies: opportunities and uncertainties.
Technical report, The Royal Academic of Engineering, London, UK.
-  Guazzelli, M. J. and Perez, J. (2009).
Nanotecnologia: a manipulação do invisível.
Centro Ecológico, Brasil, 1th edition.
-  Mora-Huertas, C., Fessi, H., and Elaissari, A. (2010).
Polymer-based nanocapsules for drug delivery.
International Journal of Pharmaceutics, 385(1–2):113 – 142.
-  Neto, O. P. V. (2014).
Intelligent computational nanotechnology: The role of computational intelligence in the development of nanoscience and nanotechnology.
Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, 11:1–17.
-  Zamberlan, A., Dalcin, A. J., Kurtz, G., Bordini, R., Raffin, R., and Fagan, S. (2016).
Simulation environment for polymeric nanoparticle: experiment database.
Disciplinarum Scientia, 17(3):429–446.
-  Zamberlan, A. O., Kurtz, G. C., Bordini, R. H., and Solan (2015).

Obrigado

Alexandre Zamberlan e Solange Fagan
alexz@unifra.br e solange.fagan@gmail.com