

Nanociência e a Computação

Alexandre Zamberlan

Universidade Franciscana - UFN

Círculo de Palestras IFRS - Ibirubá

Agenda

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

Agenda

1 Contexto

2 Computação: Modelagem e Simulação

3 Computação: IA e Nanociências

4 Simulação via Sistemas Multiagentes

5 Considerações

Contexto

Computação: Modelagem e Simulação
Computação: IA e Nanociências
Simulação via Sistemas Multiagentes
Considerações

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

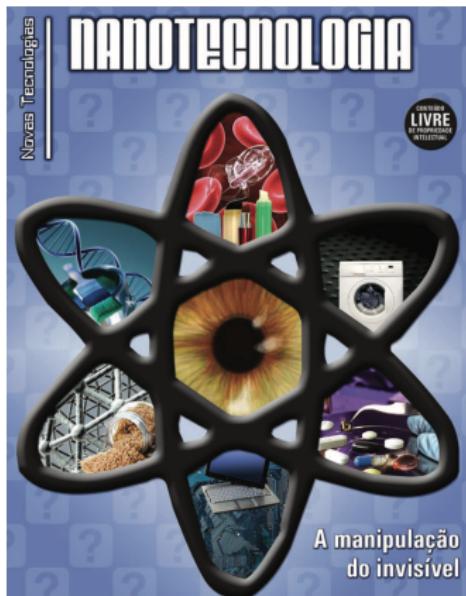
Dispersões particuladas ou partículas sólidas com um tamanho na faixa de 10-1000nm

**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

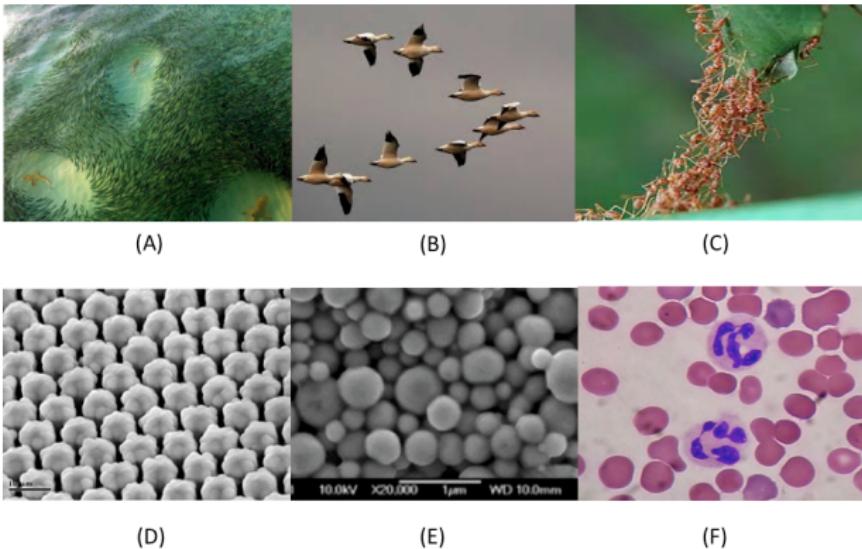


Figure 1: Auto-organização biológica e/ou química. (A) Cardume de peixes; (B) gansos; (C) formigas; (D) nanotubos de carbono; (E) nanopartículas poliméricas; (F) células do sistema imunológico.

Aplicações de Nanociências

- Entrega de fármacos
- Cosméticos
- Engenharia de materiais
- Eletrônica

Agenda

- 1 Contexto
- 2 Computação: Modelagem e Simulação
- 3 Computação: IA e Nanociências
- 4 Simulação via Sistemas Multiagentes
- 5 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

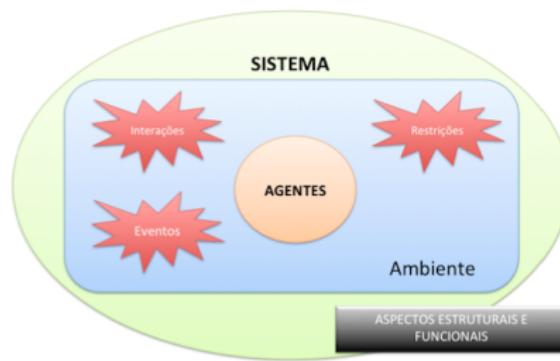
Tipos de Simulação

Propósito Geral

Diversas áreas do conhecimento

Dinâmica Molecular

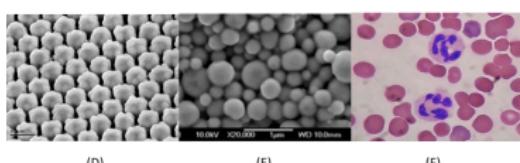
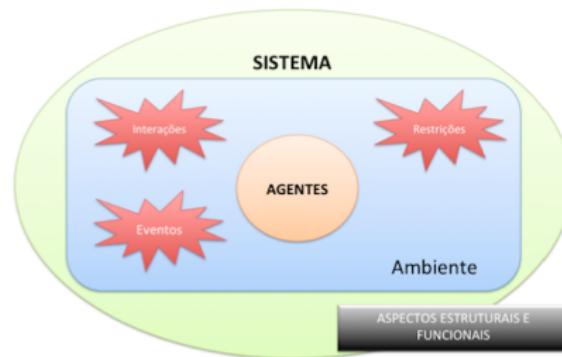
Clássica X Quântica



SMA

Comportamento coletivo

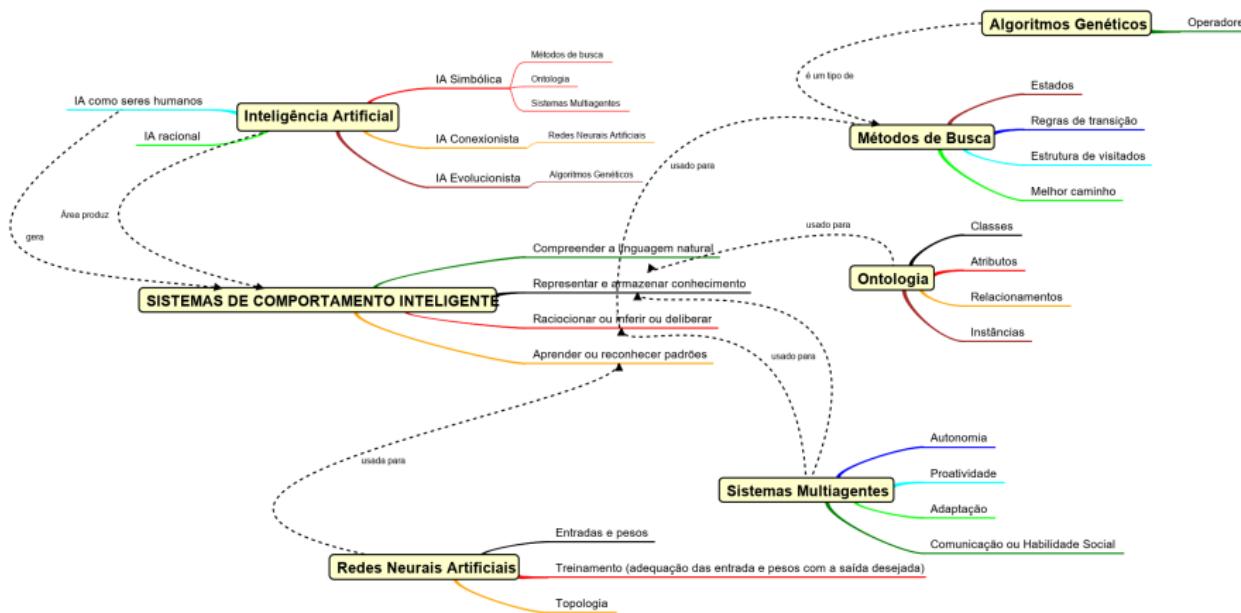
Simulação Molecular: Dinâmica X SMA



Agenda

- 1 Contexto
- 2 Computação: Modelagem e Simulação
- 3 Computação: IA e Nanociências**
- 4 Simulação via Sistemas Multiagentes
- 5 Considerações

Mapa mental da área



Agenda

- 1 Contexto
- 2 Computação: Modelagem e Simulação
- 3 Computação: IA e Nanociências
- 4 Simulação via Sistemas Multiagentes
- 5 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 official website for Jason, a Java-based interpreter for an extended version of AgentSpeak. The header features a painting by Gustave Moreau titled "Jason" (1882). The main title "Jason" is in a large serif font, followed by a subtitle: "a Java-based interpreter for an extended version of AgentSpeak". Below the title is a navigation bar with links: Home, Description, Documents, Examples, Demos, Teaching, Projects, and a search bar. The central content area includes a logo for "Agent Programming" with a portrait of a woman, a section titled "About Jason" describing its purpose and availability, a "Links" section with links to GitHub and Sourceforge, and a "Authors" section mentioning the development team. On the right side, there are download links for the latest version of Jason and an Eclipse plug-in, news items, and a sidebar with a link to watch replays of matches.

Jason

a Java-based interpreter for an extended version of AgentSpeak

Home Description Documents Examples Demos Teaching Projects Search

Download the latest version of Jason!

DOWNLOAD

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

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-customizable 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

25/09/2017

The [Multi-Agent Programming Contest](#) 2017 had two teams using Jason:

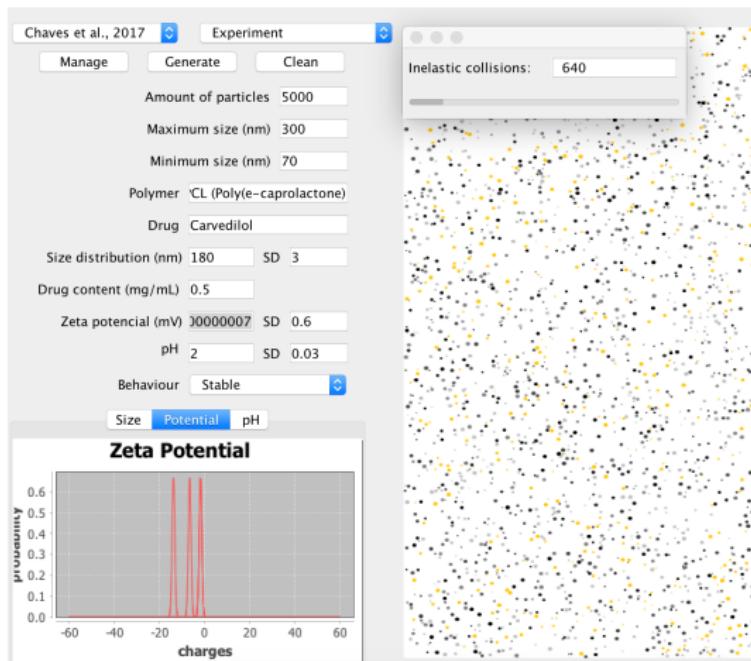
- 2nd place: Jason-DTU
- 4th place: SMART-JaCoMo (using JaCoMo)

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

20/09/2017

[Bordini and Hübner 2009]

MASPN



[Zamberlan et al. 2016]

Alexandre Zamberlan

IFRS - IBIRUBÁ/RS - Julho 2020

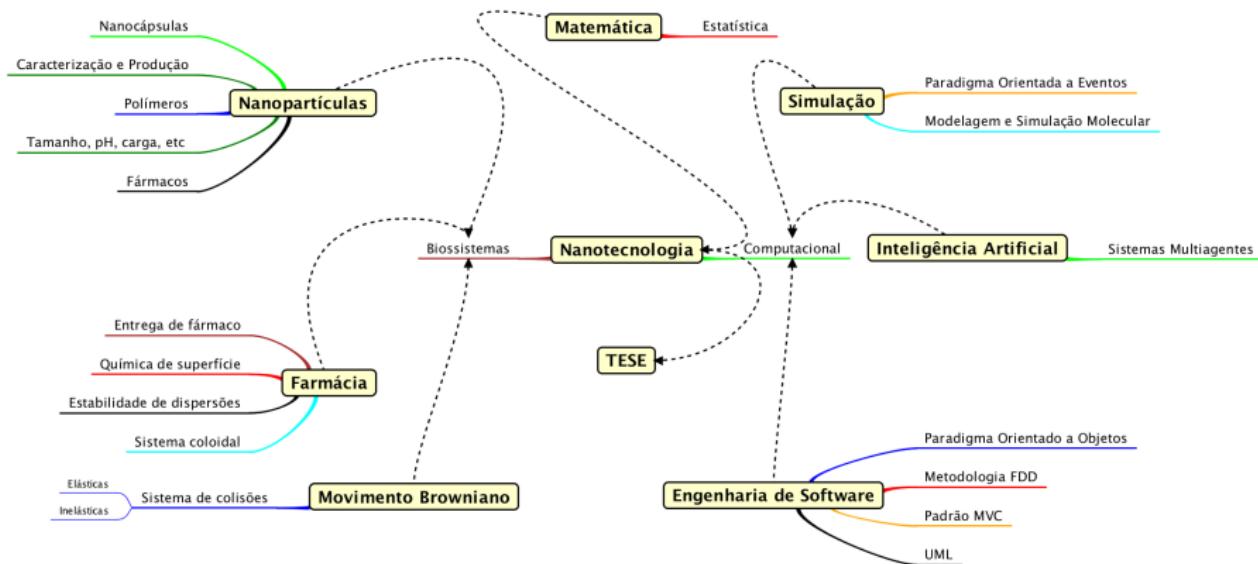
Agenda

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

Base de estudo

- Estruturas de Dados
- Programação Orientada a Objetos
- Modelagem e Simulação
- Programação Paralela e Distribuída
- Sistemas Distribuídos
- Inteligência Artificial
- Modelagem de Processos

Possibilidades de trabalho



Oportunidades de estudo



Institucional

EAD

Ensino

Pesquisa

Extensão

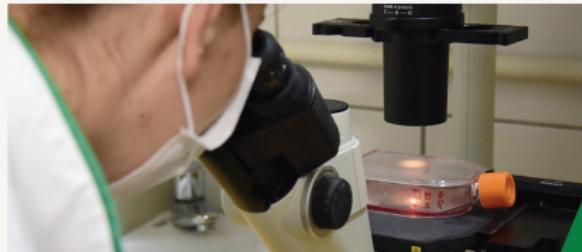
Cultura

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 102/2011.
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.

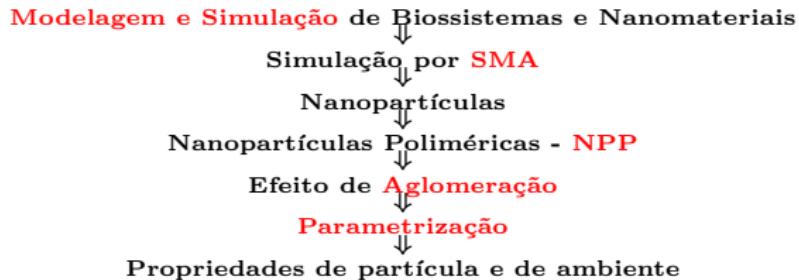
Doutorado: Mestres em Nanociências e/ou em Biomedicina, Ciência da Computação, Farmácia, Física, Matemática, Química, Engenharias, Sistemas de Informação ou áreas afins.

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	Modelagem e simulação de biossistemas e nanomateriais
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.



Referências



Bordini, R. H. and Hübner, J. F. (2009).

Agent-based simulation using bdi programming in jason.

In *M. Uhrmacher ; Danny Weyns. (Org.). Multi-Agent Systems: Simulation and Applications, Modeling and Simulation*, 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.

Contexto

Computação: Modelagem e Simulação

Computação: IA e Nanociências

Simulação via Sistemas Multiagentes

Considerações

Obrigado

Alexandre Zamberlan

alexz@ufn.edu.br

<http://www.lapinf.ufn.edu.br/>