

Avaliação de arquitetura de Sistema Multiagente para efeito de aglomeração de nanopartículas

Alexandre de O. Zamberlan¹, Rafael H. Bordini², Solange B. Fagan¹

¹Programa de Pós-Graduação em Nanociências
Centro Universitário Franciscano

²FACIN-PUCRS

alexz@unifra.br, r.bordini@pucrs.br, solange.fagan@gmail.com

Abstract. *This article discusses about a proper Multiagent System architecture for the evaluation of nanoparticle agglomeration effect. Reactive or deliberative architectures of multiagent systems are employed in several simulations such as traffic control, rescue teams and evacuation procedures. Likewise, Nanotechnology, which projects, characterizes, produces and applies nano-scale structures, also uses simulations to nanostructures behavior assessments. Another important point, when investigating the universe on a very small scale, is the ability of matter self-organization, which is very similar to what happens with biological entities. In this case, the mechanisms respond to environmental stimuli without conscious control. Therefore, setting an appropriate architecture for this simulation is a key factor.*

Resumo. *Este artigo discute sobre a arquitetura de Sistema Multiagentes adequada para avaliação do efeito de aglomeração de nanopartículas. Arquiteturas reativas ou deliberativas de sistemas multiagentes são empregadas em diversas simulações, como por exemplo, controle de tráfego, equipes de salvamento, procedimentos de evacuação, entre outros. Da mesma forma, na Nanotecnologia, que projeta, caracteriza, produz e aplica estruturas em nano escala, também se utiliza de simulações para avaliações de comportamento de nanoestruturas. Um ponto importante, ao investigar o universo em uma escala muito pequena, é a capacidade de auto-organização da matéria, muito semelhante ao que acontece com entidades biológicas. Portanto, definir a arquitetura adequada para essa simulação é um fator fundamental.*

1. Introdução

Sistemas multiagentes (SMA) são empregados em investigações com diferentes propósitos, principalmente em simulações computacionais. Esses sistemas são compostos de entidades de software autônomas, denominadas agentes, que atuam e interagem em um ambiente compartilhado, alterando o estado do ambiente [Wooldridge 2001] e [Bordini et al. 2007]. A abordagem orientada a agentes permite um grau de abstração que não é usual em metodologias tradicionais de projeto e desenvolvimento de sistemas, tornando explícitas certas funcionalidades. E esse nível de abstração apresenta vantagem à medida em que as aplicações tornam-se maiores e mais complexas (como em simulações, com maior número de variáveis, restrições, operações, tratamentos de exceções, entre

outros), pois possibilita representar problemas e soluções de forma mais natural possível [Móra et al. 1998], com característica de projeto e desenvolvimento de sistema *bottom-up* ou *top-down*, ou seja, a partir do agente ou a partir da organização [Hübner et al. 2004].

O que caracteriza um agente e a sociedade que ele está inserido são as interações com o ambiente e os processos internos que possibilitam a realização dessas interações [Wooldridge 2001]. A especificação de quais e como são esses processos internos é chamada de arquitetura. Diferentes arquiteturas têm sido propostas com o objetivo de caracterizar os agentes (e a sociedade em que estão inseridos) com um nível de inteligência e de autonomia. Dessa forma, as arquiteturas podem ser classificadas, de acordo com o mecanismo utilizado pelo agente para a seleção das ações [Bordini et al. 2007].

Na modelagem e simulação molecular, na área da Dinâmica Molecular, modelar e simular referem-se a métodos para mimetizar o comportamento de moléculas ou de sistemas moleculares. Esses processos seguem leis e princípios da Física Clássica e da Física Quântica, levando em consideração campos de força e dependência do tempo [Vilela Neto 2014]. Ao lidar com estruturas na escala nanométrica, a principal característica que distingue uma nanopartícula é sua área superficial comparada com o seu volume [Bushan 2007]. E outro ponto importante, foco desta investigação, é a habilidade de auto-organização da matéria, quando em escala muito pequena, bastante similar com o que ocorre com entidades biológicas, que respondem ao ambiente sem um controle consciente [Bushan 2007]. Por isso, a simulação é uma maneira de avaliar comportamento desses elementos.

Sendo assim, surge o objetivo desta pesquisa, discutir qual a arquitetura de sistemas multiagentes adequada para este propósito de simulação. Para tanto, o texto está dividido em seções. A Seção 2 trata da Nanotecnologia e a modelagem molecular, bem como o que se espera dessa técnica. A Seção 3 discute sobre arquiteturas básicas de SMA. Finalmente, algumas considerações sobre este estudo e as referências bibliográficas.

2. Modelagem e simulação molecular

A Nanociência é o estudo de fenômenos e manipulações de materiais em escala atômica, molecular e macromolecular, em que as propriedades diferem significativamente dos em escala maior. Já a Nanotecnologia preocupa-se com o projeto, caracterização, produção e aplicação de estruturas em escala nano [Dowling et al. 2004].

Acredita-se que a Computação aplicada à Nanotecnologia (ou Nanotecnologia Computacional) tem seu foco no projeto e construção de ferramentas computacionais para auxiliar a compreensão de fenômenos físico e químicos que ocorrem em escala nanométrica aplicadas à nanoeletrônica, lógica e computação, sensores e novos materiais com características específicas. Os sistemas e a simulação computacional são realizados no tempo e no espaço utilizando modelos analíticos e fundamentos físicos, químicos e de ciência dos materiais [Vilela Neto 2014].

A modelagem molecular envolve métodos e técnicas computacionais para imitar o comportamento de sistemas atômicos e moleculares. Conforme [Vilela Neto 2014], assume-se que modelar é o processo de extrair informações realmente relevantes de determinado sistema, como aspectos estruturais (conjunto de atributos ou características e seus possíveis valores) e aspectos funcionais (operações ou métodos e suas restrições).

Os métodos computacionais da modelagem molecular estão associados à execução de cálculos de alta complexidade computacional. Esses métodos envolvem esforço computacional, com alocação extrema de recursos de *hardware* e *software*, por exemplo, a manipulação de muitas variáveis, a enorme variação de valores nessas variáveis, bem como suas inúmeras operações e restrições [Vilela Neto 2014].

A modelagem, de uma forma geral, é a criação de um modelo que possa representar um determinado domínio por meio de uma linguagem computacional (mais natural possível) que siga um ponto de vista. Portanto, um modelo deve ser a representação do conhecimento aplicado a uma ferramenta que promova o estudo do comportamento de sistemas complexos.

Há ferramentas de simulação consolidadas na área de Dinâmica Molecular, como Gromacs (<http://www.gromacs.org>) e Siesta (<http://departments.icmab.es/leem/siesta/>), em que é possível modelar e acompanhar a simulação de milhares de estruturas como moléculas, átomos e elétrons; suas restrições como tempo e campos de força; suas interações inter e intra moleculares; e os eventos relacionados à pressão, temperatura, entre outros. Entretanto, o efeito de aglomeração, objetivo desta discussão, é melhor visualizado em experimentos em laboratórios (experimentos *in vitro*). Em simulações, há o desafio de monitorar, descrever ou, até mesmo, prever o comportamento de aglomeração em nanopartículas.

Neste estudo, assume-se que aglomeração é quando as partículas estão unidas frouxamente em conjunto e que pode ser simplesmente quebrado por forças mecânicas. Já a agregação é um padrão definido de moléculas que podem estar em qualquer estado físico [Nichols et al. 2002]. A aglomeração é um processo de contato e adesão em que partículas dispersas permanecem juntas por interações físicas fracas, sendo um processo reversível [McNaught and Wilkinson 1997]. Nanopartículas aglomeram ou agregam quando colocadas em ambiente ou em fluido biológico. Mas a aglomeração frequentemente ocorre quando há elevada força iônica, que protege a repulsão devido às cargas sobre as nanopartículas. Acompanhar o efeito de aglomeração é fundamental, por exemplo para avaliação de toxicidade das partículas em escala nano, uma vez que esse efeito altera o tamanho, a área de superfície e propriedades de sedimentação das nanopartículas [Schaffazick et al. 2003].

A caracterização de nanoestruturas envolve determinar propriedades específicas, tais como morfologia, tamanho de partícula, potencial zeta, pH, taxa de associação de cinética de libertação, determinação do conteúdo, entre outros. O índice de polidispersão fornece informações sobre a homogeneidade do tamanho da distribuição e o nível de aglomeração das partículas. E, como já mencionado, essas propriedades são verificadas em experimentos reais em laboratório, sendo algumas possíveis em simulação computacional [Schaffazick et al. 2003].

3. Arquiteturas de Sistemas Multiagentes

Os SMA formam uma área de investigação na Inteligência Artificial Distribuída (IAD), tratando os aspectos referentes à computação distribuída em sistemas de inteligência artificial. A definição da arquitetura interna do agente está associada com o tipo de tarefa que o agente irá realizar e qual o seu papel na sociedade multiagente. Uma vez considerado isto, o agente pode ser classificado como [Wooldridge 2001]: reativo, em que a esco-

lha da ação (resposta) está diretamente situada na ocorrência de um conjunto de eventos (estímulos) que ele percebe no e do ambiente, captados por seus sensores ou por mensagens enviadas por outros agentes; cognitivo ou deliberativo, pois possui um processo explícito para escolher a ação a ser realizada. Essa ação pode ser escolhida, também, através de uma função de utilidade e realizada por meio de um plano e uma representação simbólica do ambiente. Um agente cognitivo é um agente racional que possui alguma representação explícita de seu conhecimento e objetivos. Um agente pode ser mais cognitivo do que outro, conforme o grau de racionalidade explícita de seu comportamento [Hübner et al. 2004] e [Wooldridge 2001].

Arquiteturas de agentes cognitivos, segundo [Oliveira 1996], podem ser classificadas em arquiteturas funcionais, em que o agente é composto por módulos que representam cada uma das funcionalidades necessárias para sua operação. O agente possui conhecimento, um conjunto de objetivos, capacidade de percepção, comunicação, decisão e raciocínio. Além dessa, há as arquiteturas baseadas em estados mentais, que adotam uma perspectiva de inspiração psicológica para definir a estrutura dos agentes, que são entidades cujo estado é constituído de componentes mentais tais como crenças, desejos, capacidades, escolhas e compromissos. Pode ocorrer que uma arquitetura baseada em estados mentais também contemple aspectos funcionais, e vice-versa, não sendo excludentes, e podendo ser complementares [Bordini et al. 2007]. As abordagens utilizadas para a modelagem de agentes são as mais diversas, e uma frequentemente utilizada é a abordagem que considera agentes como sendo sistemas intencionais. Sistemas intencionais são aqueles a que são atribuídas atitudes intencionais (estados mentais) [Móra 2000].

De acordo em [Zamberlan 2002], as definições e propriedades que caracterizam a noção de agente têm por objetivo não meramente dividir o mundo entre entidades que são e que não são agentes, mas servirem de ferramentas para analisar sistemas, bem como especificar, projetar e implementar sistemas cujos elementos básicos sejam agentes.

4. Considerações Finais

Os ambientes de simulação de nanoestruturas podem ser considerados essencialmente reativos, ou seja, ideais para arquiteturas reativas de agentes. Muitos pesquisadores tenderiam à indicação de utilização de técnicas de Resolução Distribuída de Problemas, ao invés de Sistemas Multiagentes. Mas, com o uso de SMA é possível projetar sistemas complexos de simulação, por exemplo, de maneira naturalmente distribuída e *bottom-up*.

O paradigma de SMA baseia-se em sistemas naturais, nos quais se percebe o surgimento de um comportamento inteligente a partir da interação de seus elementos, como ocorre em um formigueiro (a colônia possui um comportamento inteligente, enquanto que a formiga não) e nos neurônios (células simples, mas sua interação e organização emerge um comportamento complexo e inteligente) [Hübner et al. 2004]. A coletividade possui características que não podem ser reduzidas aos seus elementos formadores. Neste ponto, não pretende-se afirmar que nanopartículas possam vir a ter um comportamento inteligente, mas sim complexo, uma vez que interagem, há um esquema de organização e um ambiente bastante reativo. Uma característica bastante significativa na teoria orientada a agentes é a autonomia, também existente em estruturas em escala reduzida, como átomos e moléculas, apesar da forte interação existente. Em relação à organização de um sistema multiagente reativo ou cognitivo, há eventos, restrições e interações, o mesmo que ocorre

num ambiente na escala nano.

Das duas abordagens para desenvolvimento de SMA, a abordagem *bottom-up* que parte dos aspectos individuais do agente de maneira que surjam os aspectos coletivos é bastante indicada. Isso porque, os agentes são projetados independente de algum problema específico; a interação inter-agentes não é construída previamente, bastando projetar um protocolo de comunicação para situações genéricas e porque não existe um controle centralizado. Dessa forma, há vantagens como a viabilização de sistemas adaptativos e evolutivos, em que o SMA tem habilidade de adaptação de novas situações (inclusão ou exclusão de agentes ou mudanças na organização); como já mencionado, é naturalmente adequado para a modelagem de sistemas complexos e distribuídos. Assim sendo, adequado para simulações em ambientes nanoestruturados.

A área de SMA encontra-se consolidada, com metodologias e ferramentas para projeção e implementação de sistemas multiagentes, tanto reativos quanto cognitivos. Entretanto, mesmo a arquitetura reativa sendo a que melhor se enquadre no contexto desta discussão, é possível projetar e implementar a simulação de nanopartículas a partir da teoria intencional de agentes baseada em estados mentais. Uma justificativa de se utilizar arquitetura cognitiva baseada em estados mentais, segundo [Móra 2000], é que essa arquitetura baseia-se na abordagem intencional, pois possuem um forte apelo conceitual, como abstração, pois são bastante naturais para os projetistas e analistas que utilizam a abordagem orientada a agentes; fornecem descrições sucintas para sistemas complexos, além de ajudar o projetista a entender e a explicar o comportamento desses sistemas; podem ser usados pelos agentes para raciocinar sobre eles próprios e sobre outros agentes (reciprocidade, segundo nomenclatura adotada [Dennett 1987]). Outra justificativa para essa escolha, é que em *benchmark* realizados, é possível observar ferramentas, no contexto de SMA baseados em estados mentais, com bom desempenho. Por exemplo, no trabalho realizado por [Cardoso et al. 2013], procurou-se avaliar dois modelos para programação concorrente com agentes e com atores, visto que os sistemas distribuídos têm crescido com os recursos computacionais de processadores de multi núcleos. Sendo assim, um contexto adequado para aplicação de simulações de nanoestruturas.

Ressalta-se que esta pesquisa está inserida em um trabalho mais amplo, de avaliar os aspectos de aglomeração das nanopartículas por meio de sistema multiagente. Assim sendo, são necessárias algumas etapas: compreender os processos de produção e caracterização de nanopartículas; identificar e testar metodologias de análise estrutural e funcional de nanoestruturas através de ferramentas de simulação; identificar a arquitetura de sistema multiagente adequada para este contexto; projetar e implementar o ambiente de simulação baseado na teoria Multiagente. Dessa forma, neste artigo buscou-se discutir as áreas de modelagem e simulação molecular e sistemas multiagentes. As próximas ações nesta pesquisa são: i) definir a relação entre partículas e a relação das partículas com ambiente, assumindo que cada partícula será um agente no sistema, detalhando assim como se dará o uso de agentes no cenário de simulação de nanoestruturas; e ii) testar algumas métricas utilizadas em [Cardoso et al. 2013] para avaliar arquiteturas reativas e arquiteturas cognitivas implementadas em Jason.

Referências

- Bordini, R. H., Hübner, J. F., and Wooldridge, M. (2007). *Programming multi-agent systems in AgentSpeak using Jason*. Wiley.
- Bushan, B. (2007). *Handbook of nanotechnology*. Springer.
- Cardoso, R. C., Zatelli, M. R., Hübner, J. F., and Bordini, R. H. (2013). Towards benchmarking actor- and agent-based programming languages. In *Proceedings of the 2013 Workshop on Programming Based on Actors, Agents, and Decentralized Control*, AGERE! 2013, pages 115–126, New York, NY, USA. ACM.
- Dennett, D. (1987). *The intentional stance*. MIT Press, Cambridge, MA.
- Dowling, A., Clif, R., and Grobert, N. (2004). Nanoscience and nanotechnologies: opportunities and uncertainties. Technical report, The Royal Academic of Engineering.
- Hübner, J. F., Bordini, R. H., and Vieira, R. (2004). Introdução ao desenvolvimento de sistemas multiagentes com Jason. In *XII Escola de Informática da SBC*, pages 51–89, Paran. Fernando Takashi Itakura et. al.
- McNaught, A. D. and Wilkinson, A. (1997). *Compendium of Chemical Terminology (The Gold Book)*. Blackwell Scientific Publications, Oxford, <http://goldbook.iupac.org/>.
- Móra, M. (2000). *Um modelo de agente executável*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Brasil, Porto Alegre.
- Móra, M., Lopes, J., Coelho, J., and Viccari, R. (1998). BDI models and systems: reducing the gap. In *Agents Theory, Architecture and Languages Workshop*, Canarias. Springer-Verlag.
- Nichols, G., Byard, S., Bloxham, M. J., Botterill, J., Dawson, N. J., Dennis, A., Diart, V., North, N. C., and Sherwood, J. D. (2002). A review of the terms agglomerate and aggregate with a recommendation for nomenclature used in powder and particle characterization. *J. Pharm. Sci.*, 91(10):2103–2109.
- Oliveira, F. (1996). Inteligência artificial distribuída. In *IV Escola regional de informática*, Canoas, RS. Sociedade Brasileira de Computação.
- Schaffazick, S. R., Guterres, S. S., de Lucca Freitas, L., and Pohlmann, A. R. (2003). Physicochemical characterization and stability of the polymeric nanoparticle systems for drug administration. *Quim. Nova*, 26(5):726–737.
- Vilela Neto, O. P. (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.
- Wooldridge, M. (2001). *Introduction to Multiagent Systems*. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA.
- Zamberlan, A. O. (2002). Em direção a uma técnica para programação orientada a agentes BDI. Master's thesis, PUCRS.