

Universidade Federal do Rio de Janeiro

**Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e
Pesquisas Computacionais**

Gilberto Silva dos Santos

**REDE DE NANOSSENSORES:
Comunicação Molecular – Um Novo
Paradigma para Conectividade**

Rio de Janeiro

2014

Gilberto Silva dos Santos

REDE DE NANOSSENSORES:

**Comunicação Molecular – Um Novo Paradigma
para Conectividade**

Monografia apresentada para obtenção do título de Especialista em Gerência de Redes de Computadores no Curso de Pós-Graduação Lato Sensu em Gerência de Redes de Computadores e Tecnologia Internet do Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro – NCE/UFRJ.

Orientador:

Cláudio Miceli Farias, M.Sc., UFRJ, Brasil

Rio de Janeiro

2014

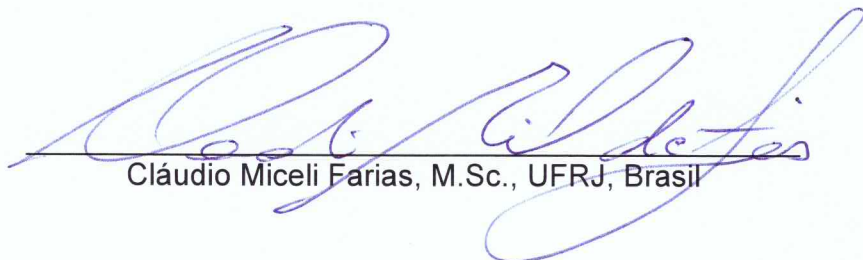
Gilberto Silva dos Santos

REDE DE NANOSSENSORES:

**Comunicação Molecular – Um Novo Paradigma
para Conectividade**

Monografia apresentada para obtenção do título de Especialista em Gerência de Redes de Computadores no Curso de Pós-Graduação Lato Sensu em Gerência de Redes de Computadores e Tecnologia Internet do Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais da Universidade Federal do Rio de Janeiro – NCE/UFRJ.

Aprovada em março de 2014.



Cláudio Miceli Farias, M.Sc., UFRJ, Brasil

Dedico esta monografia aos meus pais, à minha mulher, Luciana Moraes dos Santos, e às minhas filhas, Larissa Moraes dos Santos e Ana Beatriz Moraes dos Santos a quem serei eternamente grato pelo apoio que contribuiu para o triunfo em mais uma etapa de minha carreira acadêmica.

AGRADECIMENTOS

A Deus e a todos os espíritos que me deram direção e luz, contribuindo, assim, para o meu sucesso na realização deste curso.

Aos meus pais, às minhas irmãs, à minha mulher, Luciana Moraes dos Santos, às minhas filhas, Larissa Moraes dos Santos e Ana Beatriz Moraes dos Santos, e a toda minha família que, com muita dedicação e carinho, não mediram esforços para que eu chegasse até esta etapa da vida.

Ao professor Cláudio Miceli Farias pela preciosa dedicação prestada durante o desenvolvimento desta monografia.

Ao professor Moacyr Henrique Cruz de Azevedo a quem serei eternamente grato pelo incentivo e apoio para realização deste curso e pela forma coerente com a qual coordenou o trabalho, proporcionando-nos uma formação de excelência na área de gerência de redes.

Agradeço a todos os professores que me acompanharam durante a pós-graduação, contribuindo igualmente para realização deste trabalho.

A todos os amigos que colaboraram direta ou indiretamente para a elaboração deste trabalho, em especial ao Bruno Rohr da Silva pelas palavras de exortação, que muito fortaleceram o propósito de realização deste maravilhoso curso.

RESUMO

SANTOS, Gilberto Silva dos. **REDE DE NANOSSENSORES: Comunicação Molecular – Um Novo Paradigma para Conectividade. Monografia** (Especialização em Gerência de Redes e Tecnologia Internet). Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2014.

A nanotecnologia insere-se num campo de pesquisa muito abrangedor que, na atualidade, incorpora várias áreas da atividade humana e tem promovido verdadeiras revoluções em diversas áreas. Assim, observa-se a sua influência na medicina, na indústria, no meio ambiente, na Física Quântica e na esfera militar. Entretanto, a possibilidade de comunicação entre dispositivos de escala nanométrica, baseada nas propriedades das nanopartículas, constitui o foco do presente trabalho. A possibilidade de implementação de uma rede interconectada por vários nanossensores permite a cobertura de áreas amplas com topologias aplicadas de acordo com as necessidades de cada domínio particular. Neste panorama, temos, **entre outras possibilidades**, a Comunicação Molecular, um tipo de comunicação na qual a transmissão e a recepção de informação são realizadas através de codificação molecular, segundo um paradigma que, naturalmente, exige a implementação de novos modelos de canais, criação de arquiteturas de redes diferentes e desenvolvimento de novos protocolos. Este trabalho tem por objetivo a promoção do conhecimento do estado da arte relativo às nanorredes de comunicação no contexto da nanotecnologia, mostrando os avanços científicos e motivando o interesse pela pesquisa nesta área.

ABSTRACT

SANTOS, Gilberto Silva dos. **REDE DE NANOSSENSORES: Comunicação Molecular – Um Novo Paradigma para Conectividade.** Monografia (Especialização em Gerência de Redes e Tecnologia Internet). Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2014.

Nanotechnology is part of a research field that incorporates several areas of human activity and has promoted real revolutions in several areas. Thus, we see its influence in medicine, industry, the environment, in quantum physics and in the military sphere. However, the possibility of communication between devices on the nanoscale, based on the properties of nanoparticles, is the focus of this study. The possibility of implementing a network interconnected by various nanosensors allows coverage of large areas with topologies applied according to the needs of each particular domain. In this scenario, we have, **among other possibilities**, the Molecular Communication, a type of communication in which the transmission and the reception of information is performed by using molecular coding, according to a paradigm that naturally requires the implementation of new channel models, the creation of different networks architectures and the development of new protocols. This work aims to promote knowledge of the state of the art concerning nano communication networks within the context of nanotechnology, thus showing the scientific advances and motivating the interest in research in this area.

RÉSUMÉ

SANTOS, Gilberto Silva dos. **REDE DE NANOSSENSORES: Comunicação Molecular – Um Novo Paradigma para Conectividade**. Monografia (Especialização em Gerência de Redes e Tecnologia Internet). Instituto Tércio Pacitti de Aplicações e Pesquisas Computacionais, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2014.

La nanotechnologie fait partie d'un domaine de recherche qui englobe plusieurs de domaines de l'activité humaine et a fait la promotion de véritables révolutions dans plusieurs de domaines. Ainsi, nous voyons son influence dans la médecine, l'industrie, l'environnement, la physique quantique et dans le domaine militaire. Toutefois, la possibilité de communication entre les dispositifs à l'échelle nanométrique, sur la base des propriétés des nanoparticules, est au centre de cette étude. La possibilité de mettre en place un réseau interconnecté par divers nanocapteurs permet de couvrir de grandes surfaces avec des topologies appliquées selon les besoins de chaque domaine particulier. Dans ce scénario, nous avons, **entre autres possibilités**, la Communication Moléculaire, un type de communication dans lequel la transmission et la réception des informations sont effectuées en utilisant un codage moléculaire, selon un paradigme qui nécessite naturellement la mise en œuvre de nouveaux modèles de canaux, la création de différentes architectures de réseau et le développement de nouveaux protocoles. Ce travail vise donc à promouvoir la connaissance de l'état de l'art concernant les réseaux de communication nano, en montrant le progrès scientifique dans ce domaine, ce que pousse le développement de la recherche.

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1 – Opções de Comunicação para Rede de Nanossensores Wireless	19
Figura 2 – Esquema de uma Nanorrede Molecular com dois Nós	23
Figura 3 – Nanorrede Composta de Cinco Nós	24
Figura 4 – Circuito Integrado de um Dispositivo Nanossensor	25
Figura 5 – Tipos de Nanossensores	26
Figura 6 – Nanotubos de Carbono: Benefícios e Riscos Potenciais da Nanotecnologia na Medicina Nuclear	27
Figura 7 – Nanotubo de Carbono	27
Figura 8 – Diagrama com os Passos Necessários para Realização de uma Simulação no <i>N3Sim</i>	43
Figura 9 – Arquivo de Configuração Utilizado no <i>N3Sim</i>	44
Figura 10 – Script para Automatização de Simulação Combinando Listas e Valores para dois Parâmetros	44
Figura 11 – Ambiente de Simulação Criado a Partir da Execução do <i>N3Sim-07.jar</i>	45
Figura 12 – Comandos de Execução do <i>N3Sim</i> Realizados em Java no Ambiente Windows.	45
Figura 13 – Comparação de Simulação entre Espaços Limitados e Ilimitados	48
Figura 14 – Representação de um Cenário de Difusão Normal	50
Figura 15 – Representação de um Cenário de Difusão Anômala	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros Usados nas Simulações Validadas pelo *N3Sim*

Página
49

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CNTs	Carbon Nanotubes
DNA	Deoxyribonucleic Acid
GNRs	Graphene Nanoribbons
FET	Field-Effect Transistor
DMC	Diffusion-based Molecular Communication

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO	13
2 CONCEITOS BÁSICOS	17
2.1 NANOSSENSORES	17
2.2 COMUNICAÇÃO MOLECULAR	19
2.3 COMUNICAÇÃO NANOELETROMAGNÉTICA	20
2.4 FUNDAMENTOS DA COMUNICAÇÃO MOLECULAR	20
2.5 NANORREDE DE COMUNICAÇÃO MOLECULARA COM DOIS NÓS	21
2.6 PROCESSO DE TRANSMISSÃO	21
2.7 PROCESSO DE PROPAGAÇÃO	22
2.8 PROCESSO DE RECEPÇÃO	22
2.9 NANORREDE DE COMUNICAÇÃO MOLECULARA COM VÁRIOS NÓS	23
2.10 ARQUITETURA DOS DISPOSITIVOS NANOSSENSORES	25
2.11 A UNIDADE SENSORIAL	26
2.12 NANOSSENSORES FÍSICOS	26
2.13 NANOSSENSORES QUÍMICOS	28
2.14 NANOSSENSORES BIOLÓGICOS	28
2.15 UNIDADE DE ATUAÇÃO	29
2.16 UNIDADE DE ENERGIA	29
2.17 UNIDADE DE PROCESSAMENTO	30
2.18 UNIDADE DE ARMAZENAMENTO	31
2.19 NANOANTENAS	32
2.20 PRIMITIVAS DE PROTOCOLOS PARA COMUNICAÇÃO DE NANOESCALA	33
3 TRABALHOS RELACIONADOS	35
4 ESTUDO DO CANAL FÍSICO DE COMUNICAÇÃO MOLECULAR BASEADA EM DIFUSÃO ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO	38
4.1 COMUNICAÇÃO MOLECULAR BASEADA EM DIFUSÃO	39
5. TESTE E SIMULAÇÃO	41
5.1 SIMULAÇÃO DE ARQUITETURA	41
5.2 OS MODELOS DE TRANSMISSOR E DE RECEPTOR	46
5.3 MODELO DA PARTÍCULA	47
5.4 ESPAÇO PARA SIMULAÇÃO	47
5.5 RESULTADOS DE SIMULAÇÃO	48
6 CONCLUSÕES E TENDÊNCIAS FUTURAS	51
REFERÊNCIAS	

1 INTRODUÇÃO

Na atualidade, a comunicação sem fio é algo imprescindível no âmbito de interação global, onde as redes crescem exponencialmente e a demanda por informação é algo que passa a fazer parte do dia-a-dia de uma forma cada vez mais natural. Neste panorama, as respostas às requisições devem ser rápidas, seguras e confiáveis.

As redes de nanossensores - formadas por grupos de nanossensores com capacidades sensitivas e de comunicação sem fio - são um resultado dos avanços tecnológicos no sentido de produzir dispositivos de comunicação cada vez mais apurados e capazes de trazer benefícios aos diversos domínios.

A comunicação entre nanossensores é algo que certamente impulsionará a capacidade e a aplicação dos dispositivos nanométricos, o que implicará o aumento de complexidade e da faixa de operação nas redes. Surge, neste contexto, um novo modelo de comunicação, acompanhado de novos paradigmas.

As redes de **nanossensores** caracterizam-se pela facilidade de implementação e apresentam uma boa gestão de energia, operando de forma muito econômica com grande autonomia, o que atende aos preceitos do desenvolvimento sustentável. **A miniaturização dos dispositivos contribui significativamente para a redução de custo na industrialização dos componentes. Com os avanços da micro e da nanotecnologia, as dimensões dos dispositivos eletromecânicos foram reduzidas à nanoescala. Tais avanços têm contribuído para que diversos sistemas e dispositivos micro e nanoeletromecânicos sejam utilizados em uma ampla gama de aplicações. Estes dispositivos são responsáveis pela realização de tarefas simples, uma vez que possuem limitações de recursos, processamento, armazenamento, comunicação e energia. Evidentemente, torna-se imperativo que esses dispositivos**

possam se comunicar entre si de forma cooperativa a fim de realizar tarefas complexas que não podem ser realizadas individualmente. Temos, portanto, neste novo modelo, os atributos de economia, autonomia e miniaturização que formam o conceito de poeira inteligente (*smart dust*).

Hoje, observam-se implementações de redes de nanossensores acadêmicas em várias universidades, o que evidencia o interesse por esse novo paradigma. O novo modelo também tem encontrado respaldo crescente no setor comercial, que começa a se interessar pela produção de aplicativos destinados ao suporte de dispositivos nanossensores.

O estudo das redes de nanossensores é, portanto, uma atividade de grande importância na atualidade. Além de trazer avanços extraordinários na área de comunicação, estimula a busca de novos paradigmas que certamente contribuirão para implementação de novas aplicações na área de redes, somando elementos positivos às soluções já existentes. Sabemos, por exemplo, que o uso das tecnologias de comunicação convencionais, tais como ondas eletromagnéticas e acústicas, não é adequado ao universo das nanorredes, o que ratifica a busca de novas técnicas. Surgem, então, os novos modelos, inspirados, sobretudo, nos sistemas biológicos, hoje o paradigma de comunicação mais promissor para o ambiente das nanorredes.

O objetivo deste trabalho é promover o conhecimento do estado da arte relativo às nanorredes de comunicação, tendo por base a Comunicação Molecular, uma das possíveis formas de comunicação para redes de nanossensores existentes no âmbito da nanotecnologia. Em meio a atual revolução nanotecnológica, as pesquisas dinamizam o surgimento de inúmeras alternativas de comunicação,

permitindo variadas combinações, aplicáveis de acordo com a natureza do problema em questão.

O presente trabalho apresenta vários conceitos relativos à concepção e à aplicação dos dispositivos empregados nas nanorredes, nos mais altos níveis de desenvolvimento científico, tendo por base testes e simulações apresentados pela comunidade científica ao longo dos últimos anos. Além disso, procuramos enfatizar o potencial das nanorredes de comunicação de acordo com os dispositivos nanossensores existentes. Assim, propomos um estudo quantitativo e qualitativo, no qual abordamos modelos, mecanismos, arquiteturas e abstrações relativas aos protocolos empregados na comunicação nanoescalar. Ressaltamos as questões relevantes e os desafios em aberto, motivando a comunidade científica à exploração do tema proposto. Esperamos, portanto, que a presente pesquisa sirva como base à comunidade científica, caracterizando-se como material de referência para estudos futuros e desenvolvimento de soluções na área de nanorredes de comunicação.

Este trabalho será dividido em 6 capítulos que serão descritos a seguir.

O **Capítulo 1** trata da introdução do tema e apresenta uma visão geral sobre sua importância no panorama atual, proporcionando ao leitor uma visão ampla dos aspectos a serem abordados ao longo do trabalho.

O **Capítulo 2** apresenta a definição de vários conceitos relativos ao desenvolvimento e à aplicação dos dispositivos empregados nas nanorredes.

O **Capítulo 3** versa sobre os trabalhos relacionados.

O **Capítulo 4** faz uma abordagem sobre a comunicação molecular baseada em difusão a partir do artigo *Exploring the Physical Channel of Diffusion-based Molecular Communication by Simulation* - publicado pela IEEE - e no projeto *N3Sim*,

desenvolvido pelo Centro de Nanorredes da Catalunha e publicado em <http://www.n3cat.upc.edu/n3sim>.

O **Capítulo 5** apresenta os resultados dos testes e simulações realizados no âmbito da comunicação molecular baseada em difusão, tomando por base o artigo e o simulador supracitados.

Por fim, o **Capítulo 6** apresenta a conclusão deste trabalho e algumas considerações sobre as tendências futuras, o que poderá ser útil às próximas gerações de pesquisadores interessados por este tema.

2. CONCEITOS BÁSICOS

Nos últimos anos, muitos estudos foram realizados no campo de nanorredes, o que tem proporcionado uma série de informações e experimentos novos neste domínio. O estudo no nível da nanoescala insere-nos em uma nova dimensão. Novos paradigmas surgem a fim de adequar a comunicação molecular ao panorama das redes, possibilitando, assim, disponibilidade e transparência na prestação dos serviços oferecidos pela rede. A invisibilidade das redes das próximas gerações, como exemplo, é uma das características do novo paradigma. A comunicação molecular dá lugar a infinitas configurações no universo nanoescalar. Por isso, seus conceitos e definições precisam ser bem estudados a fim de que se possa compreender o tema proposto como, veremos a seguir.

2.1 NANOSSENSORES

Nanossensores são dispositivos sensoriais utilizados para transmitir informações. Caracterizam-se pela capacidade de fazer uso das propriedades das nanopartículas a fim de detectar ou medir eventos presentes na nanoescala [3] e podem ser aplicados com diversas finalidades. Os dispositivos nanossensores enquadram-se em uma nova classe de computadores, radicalmente, diferenciados do hardware do passado em função de sua ubiquidade e capacidade analítica e coletiva. A combinação de nanossensores, softwares e atuadores possibilita um número infinito de aplicações que tende a revolucionar o dia-a-dia de nossa sociedade. Estima-se que dentro de uma década, o nanossensoriamento aliado à computação distribuída irá invadir residências, escritórios, fábricas, carros e ruas. Os nanossensores realizarão tarefas específicas exigidas por uma vasta gama de

aplicações, seja nas áreas militar, industrial, ambiental ou biomédica. Seu uso é extremamente amplo, podendo ser empregados como base para a construção de outros nanoproductos, como *chips* de computador que atuam em nanoescala e nanorrobôs. Atualmente, existem várias maneiras propostas para fazer nanossensores, incluindo litografia de cima para baixo, montagem de baixo para cima, e automontagem molecular.

A nanotecnologia tem possibilitado a produção de dispositivos com dimensões nanométricas. Neste nível, os elementos e partículas apresentam propriedades e comportamento não perceptíveis ao microscópio. É sabido que a nanotecnologia produz componentes miniaturizados. Entretanto, seu objetivo não se restringe a isso. As aplicações são diversas e, além disso, o dispositivo não tem que ser necessariamente miniaturizado. O essencial é que ele seja capaz de fazer uso das propriedades intrínsecas das nanopartículas a fim de que possa detectar e medir eventos presentes na escala nanométrica. Entre os exemplos de aplicabilidade dos nanossensores na vida prática, temos a detecção de componentes químicos em uma dada concentração e de agentes infecciosos como vírus e bactéria, o que pode ser muito útil à medicina.

A capacidade de aplicação dos nanossensores tem crescido infinitamente, tanto em complexidade quanto em área de operação. Todavia, os sensores devem estar dispostos em uma mesma área da abrangência de um dado fenômeno para que possam acessar as propriedades nanométricas inerentes ao cenário. Uma rede de nanossensores pode atingir grandes áreas. Entretanto, as tecnologias de sensores de escala nanométrica podem exigir excitação externa e equipamentos de medição para operar [3].

A comunicação entre nanossensores e micro e macro dispositivos apresentam duas alternativas: comunicação molecular e comunicação nanoeletromagnética (figura 1).

2.2 COMUNICAÇÃO MOLECULAR

Neste tipo de comunicação a informação é codificada em moléculas [1], [18], [12]. A integração dos transceptores com os nanodispositivos é muito fácil em função do seu tamanho e domínio de operação. Os transceptores reagem a determinados tipos de moléculas e liberam outras como resposta a algum tipo de comando interno ou após realizarem algum processamento. Após serem liberadas, as moléculas se propagam de três modos: seguem uma difusão espontânea no meio fluido (*diffusion-based*), realizam uma difusão guiada (*flow-based*) ou são conduzidas por portadoras que seguem rotas predefinidas (*walkway-based*) [3]. Trata-se de um paradigma de comunicação radicalmente diferente que, por isso, exige novos modelos de canais, novas arquiteturas de redes e novos protocolos de comunicação.

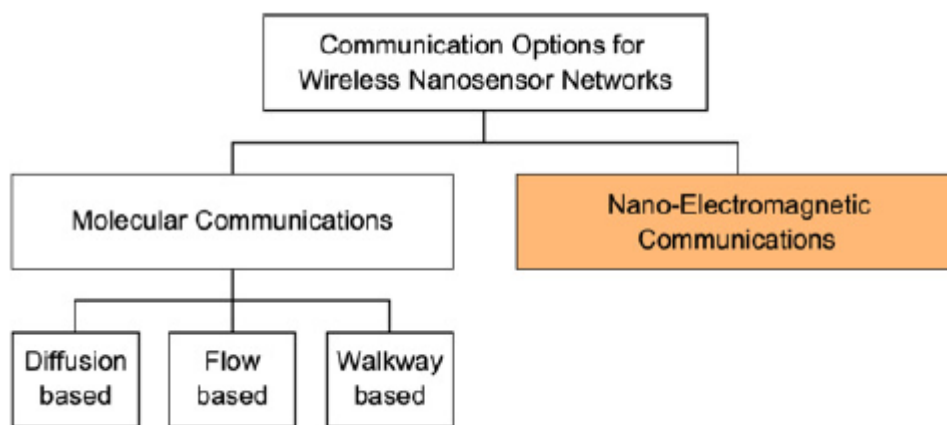


Figura 1 - Opções de Comunicação para Rede de Nanossensores Wireless. Extraída de [3], página 4

2.3 COMUNICAÇÃO NANOELETRROMAGNÉTICA

Trata-se da transmissão e recepção da radiação eletromagnética que emana dos componentes produzidos a partir de nanomateriais. O avanço tecnológico da eletrônica molecular e de carbono fez surgir uma nova geração de nanocomponentes, como nanobaterias, nanomemórias, circuito lógico em nanoescala e, até mesmo, nanoantenas. Do ponto de vista de comunicação, as propriedades únicas observadas nos novos nanomateriais decidirão sobre as larguras de banda específicas para emissão de radiação electromagnética [8], a defasagem temporal da emissão, ou da magnitude da energia emitida para uma determinada entrada de energia. Aqui também é importante observar que tudo isso implica a alteração no atual modelo de comunicação, exigindo, portanto, uma adequação ao novo paradigma a fim de que se possa usufruir do potencial oferecido pela comunicação entre nanossensores.

2.4 FUNDAMENTOS DA COMUNICAÇÃO MOLECULAR

A nanotecnologia tem disponibilizado um novo conjunto de ferramentas para a comunidade de engenharia, permitindo, desse modo, o controle das entidades nas escalas atômica e molecular. Entre esses novos recursos, temos as nanomáquinas (*nanomachines*), dispositivos funcionais integrados que consistem de componentes nanoescalares, concebidos para realizar tarefas que vão desde computação e armazenamento de dados até sensoriamento e atuação. A ativação de nanomáquinas interconectadas e a formação de nanorredes ampliarão os domínios de aplicação no nível da comunicação molecular.

Existem três fatores que fazem o uso da comunicação molecular bastante atrativo: a comunicação molecular entre as entidades da nanoescala ocorre na

natureza; as nanorredes podem ser implementadas tendo como base a ocorrência de fenômenos naturais, o que oferece soluções de engenharia mais rápidas; muitas aplicações requerem biocompatibilidade e, portanto, necessitam das propriedades facilmente oferecidas pelas nanorredes que utilizam a comunicação molecular [2].

2.5 NANORREDE DE COMUNICAÇÃO MOLECULAR COM DOIS NÓS

Trata-se do tipo de rede mais básico e compõe-se de duas nanomáquinas. Neste modelo, a rede é formada por três blocos funcionais. Assim, temos o bloco de transmissão (*transmitter*), o bloco de propagação (*channel*) e o bloco de recepção (*receiver*), como podemos ver na figura 2. Assume-se que as nanomáquinas são usadas em um espaço preenchido com um meio fluido, como o citoplasma celular ou ar, onde as moléculas podem se propagar.

2.6 PROCESSO DE TRANSMISSÃO

O processo de emissão de moléculas produz um sinal de saída gerado através da emissão de moléculas em um espaço segundo um dado *input* [2]. No modelo proposto em [15], o processo de emissão baseia-se na modulação da concentração de moléculas de acordo com uma *taxa de concentração molecular*, o que corresponde à quantidade de moléculas liberadas em uma unidade de tempo. A natureza discreta das moléculas afeta o processo de emissão com geração de ruído. Moléculas individuais que fluem para fora do transmissor influenciam a taxa de concentração emitida em instantes discretos de tempo. Estes instantes discretos não são igualmente espaçados, devido aos componentes aleatórios presentes no movimento das moléculas [2].

2.7 PROCESSO DE PROPAGAÇÃO

O processo de propagação possibilita o transporte do sinal modulado durante a emissão por meio de um mecanismo de difusão de molécula, definido como movimento de moléculas de fluido de uma área de concentração alta para outra, de concentração mais baixa. Como resultado, a medida de concentração de partículas é influenciada por dois efeitos de ruído. O primeiro efeito é dado pela quantificação da medida de concentração por um número discreto de moléculas presentes no receptor. O segundo é dado por flutuações na concentração medida, unicamente, em função dos eventos de entrada e saída de moléculas nas imediações do receptor [2].

2.8 PROCESSO DE RECEPÇÃO

O processo de recepção proporciona a extração da mensagem de informação do sinal recebido. Na proposta apresentada em [2], o receptor contém um conjunto de N_R *receptores químicos*, e o foco concentra-se na modelagem molecular do receptor a partir da análise do processo de união ligante. Cada receptor químico pode ligar-se às moléculas com uma probabilidade de ligação, ou libera-se de moléculas previamente aderidas com uma probabilidade de liberação. A relação entre o número de receptores químicos vinculados e o número total de receptores é a saída do processo de recepção e tende a ser proporcional à entrada da concentração molecular na proximidade do receptor. As flutuações aleatórias que ocorrem nas reações químicas subjacentes ao processo de vinculação do receptor geram ruídos no processo de recepção.

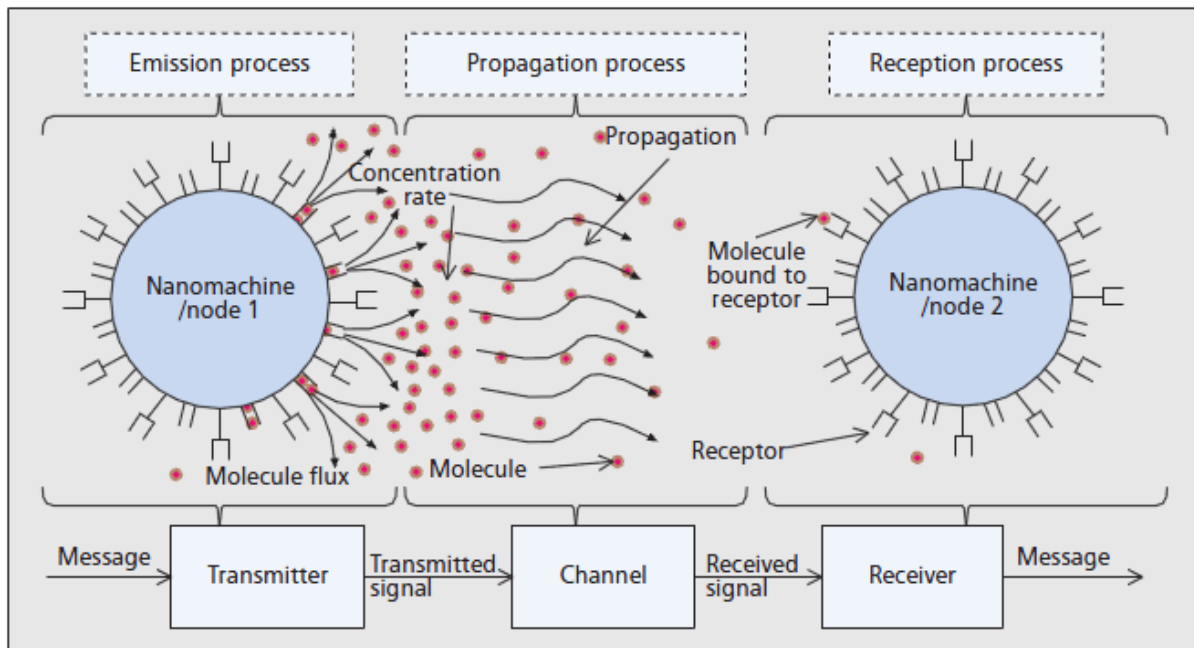


Figura 2 - Esquema de uma Nanorrede Molecular com dois Nós. Extraída de [2],
página 14

2.9 NANORREDE DE COMUNICAÇÃO MOLECULAR COM VÁRIOS NÓS

A presença de várias nanomáquinas compartilhando o mesmo meio altera os processos mencionados acima e os seus modelos, o que acarreta diferenças na informação da caracterização teórica nos processos de emissão, propagação e recepção de informação molecular (figura 3).

O processo de emissão é afetado pela presença de moléculas liberadas por outros nós. A estrutura interna de um emissor molecular não muda de acordo com o que foi descrito acima. Entretanto, sua *performance*, em termos de atenuação e atraso, sofre variação. Diferentemente da comunicação clássica, na rede de comunicação molecular, as transmissões de outros nós podem bloquear fisicamente a transmissão de uma dada nanomáquina. Ao mesmo tempo em que isso pode ser um grande problema em cenários específicos, também pode ser interpretado como um mecanismo intrínseco nas redes moleculares para controlar a transmissão de

informação em redes altamente carregadas. O modelo de propagação introduzido acima muda quando vários nós compartilham o mesmo meio, uma vez que as moléculas liberadas por diferentes nós interagem no canal: elas colidem e mudam o que seria o seu sentido de propagação normal. Este resultado representa outra grande diferença em relação à interferência eletromagnética em redes sem fio. Quando vários transmissores estão presentes no espaço, a concentração elevada de moléculas aumenta a probabilidade de colisão. Deste modo, um processo de emissão adicional a partir de um nó pode afetar a velocidade de propagação da informação proveniente de outros nós.

O modelo de receptor descrito acima não muda fundamentalmente para o caso de vários nós de transmissão. A razão principal para isto é que ele não se baseia em um processo de difusão, mas na teoria de vinculação ao ligante. No entanto, devido a um aumento esperado do número de moléculas no sistema, o ruído que afeta a recepção do sinal molecular é previsivelmente maior.

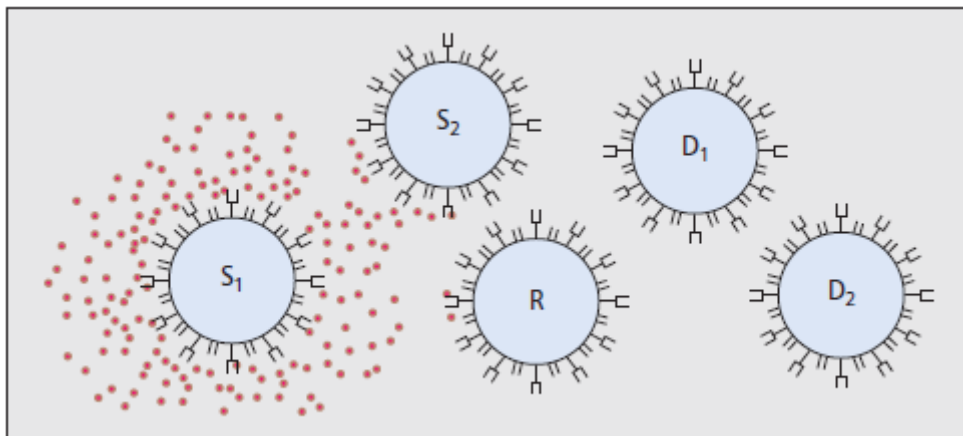


Figura 3 - Nanorrede Composta de Cinco Nós. Extraído de [2], página 14

2.10 ARQUITETURA DOS DISPOSITIVOS NANOSSENSORES

O nanossensor se apresenta como um dispositivo integrado com dimensão ao nível da nanoescala e capacidade para executar tarefas computacionais. Embora seja semelhante aos dispositivos sensores da micro e macroescala, o nanossensor apresenta limitações no processo de fabricação em função da tecnologia empregada e está condicionado às leis da Física. Entretanto, não podemos concebê-lo apenas como um dispositivo sensorial pequeno e simplificado. É importante observar que existe um grande compromisso entre o tamanho, a capacidade e o tipo de aplicação em que pode ser empregado [3]. Em meio dinâmico processo de pesquisa existente no âmbito da nanotecnologia, surgem diferentes soluções para a implementação para cada subparte componente de um nanossensor. Tomando por base o esquema representado pela figura 4, abordaremos os aspectos mais relevantes de cada uma delas.

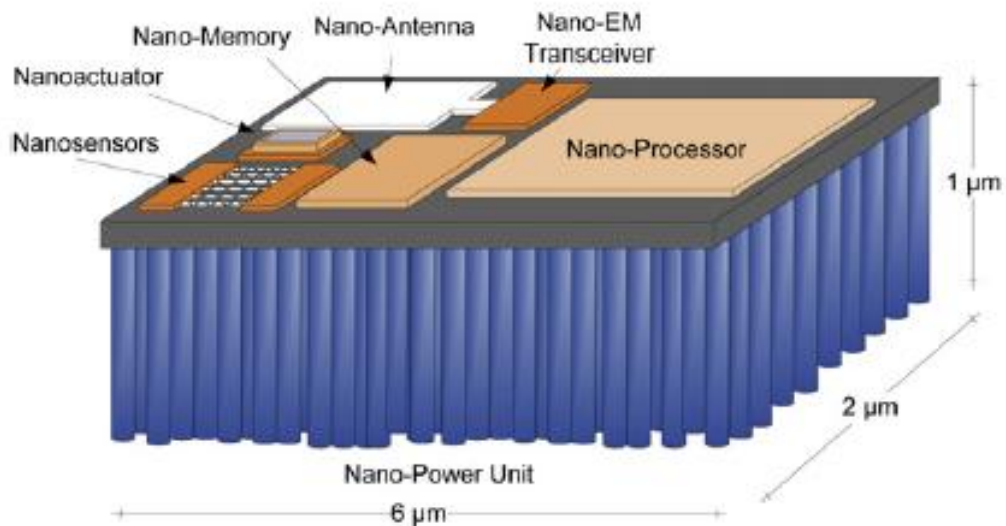


Figura 4 - Circuito Integrado de um Dispositivo Nanossensor. Extraída de [3],

2.11 UNIDADE SENSORIAL

Os nanomateriais, como o *graphene* e seus derivados denominados *Graphene Nanoribbons* (GNRs) e os *Carbon Nanotubes* (CNTs), apresentam grande capacidade sensorial e, por isso, constituem a base para vários tipos de sensores empregados nos diversos projetos de nanotecnologia. Os nanossensores classificam-se de acordo com a natureza de sua magnitude que segue a distribuição apresentada na figura 5.

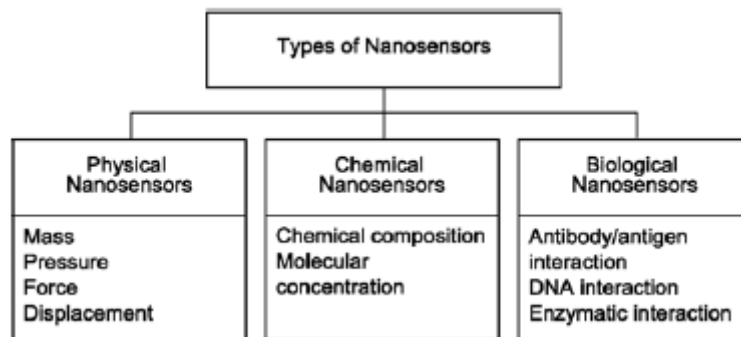


Figura 5 - Tipos de Nanossensores. Extraída de [3], página 4

2.12 NANOSSENSORES FÍSICOS

São empregados para realização de medidas de grandezas como massa, pressão, força ou deslocamento. O princípio básico de seu funcionamento baseia-se nas propriedades eletrônicas dos nanotubos e das nanofitas quando submetidos a uma deformação ou dobradura. Um CNT, por exemplo, pode ser usado para construção de um FET - *Field-effect transistor* (transistor de efeito de campo) cujo limiar de ativação seja condicionado às várias características do tubo, tais como dimensão, forma e temperatura. Desse modo, uma deformação local do tubo, pode provocar uma mudança na voltagem limiar de um determinado transistor [3].

Dependendo do processo de produção os nanotubos apresentam características físicas e químicas diferentes, o que permite uma aplicação específica

para cada projeto. Tudo isso só é possível em função das propriedades dos alótropos de carbono, que permitem configurações moleculares diferenciadas, como podemos ver nas figuras 6 e 7, variando, portanto, o comportamento das estruturas.

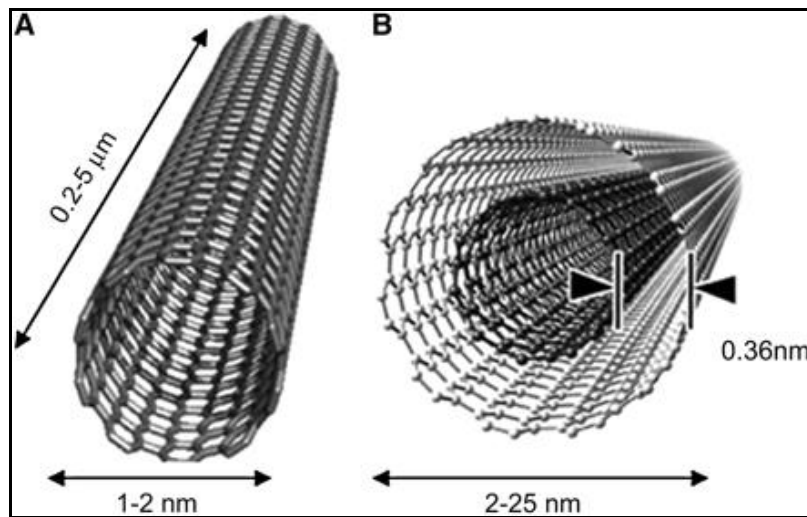


Figura 6 - Nanotubos de Carbono: Benefícios e Riscos Potenciais da Nanotecnologia na Medicina Nuclear. Extraída de [21]

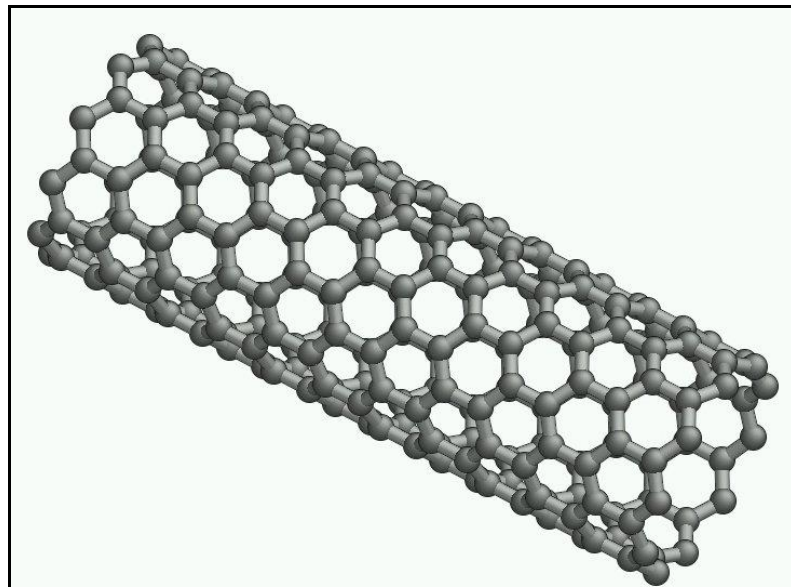


Figura 7 - Nanotubo de Carbono. Extraída de [23]

2.13 NANOSSENSORES QUÍMICOS

Utilizados para medir concentração de gases, presença de determinados tipos de moléculas ou para verificar a composição de uma determinada substância. Da mesma forma que ocorre com os nanossensores físicos, quando um nanotubo ou uma nanofita é usada na configuração de um transistor, a presença de um tipo específico de molécula é suficiente para mudar a tensão limiar do transistor [3]. Até o presente momento, centenas de nanossensores químicos, baseados neste princípio, foram fabricados para fim de detecção de diferentes tipos de substâncias [5].

2.14 NANOSSENSORES BIOLÓGICOS

Estes tipos de nanossensores são utilizados para fazer monitoramento de processos biomoleculares presentes nos seres vivos. Entre eles temos a interação entre anticorpos e antígenos, as interações em nível de DNA, as interações enzimáticas e a própria comunicação celular entre outros. Um nanossensor biológico é geralmente composto de um sistema de reconhecimento biológico ou *biorreceptor*, tal como um anticorpo, uma enzima, uma proteína ou de uma estirpe de DNA, e um mecanismo de transdução, como um detector electroquímico, um transdutor óptico, ou um detector amperométrico, voltaico ou magnético [3, 20]. Tendo por base o princípio de trabalho, os nanossensores biológicos classificam-se em dois tipos principais: nanossensor biológico eletroquímico e nanossensor biológico fotométrico.

Diversas são as possibilidades de aplicação dos nanossensores biológicos. Entre os possíveis modos de atuação temos: monitoramento dos níveis de colesterol, oxigênio e hormônios; controle de doenças como o diabetes e a mitigação de males degenerativos; atuação como transmissores e receptores

auxiliares de sinais elétricos das sinapses nervosas; detecção de agentes maliciosos como células cancerígenas e provimento de uma interface amigável entre órgãos transplantados e o organismo. Já na área militar, as nanomáquinas podem ser usadas, por exemplo, para detecção de agentes químicos, biológicos e nucleares e coordenação de resposta defensiva. Por fim, na área ambiental, elas podem ser usadas para acelerar o processo de biodegradação nos depósitos de lixo, o que é de extrema importância para a política de desenvolvimento sustentável.

2.15 UNIDADE DE ATUAÇÃO

É a unidade responsável pela interação entre os nanossensores no meio. Até o presente momento, um grande número de nanoatuadores já foram desenvolvidos. Estes podem ser classificados como nanoatuador físico, atuando segundo a interferência de uma corrente elétrica, ou onda eletromagnética, ou como nanoatuadores químico e biológico, baseados na interação entre nanomateriais e nanopartículas, campos eletricomagnéticos e calor.

2.16 UNIDADE DE ENERGIA

Na atualidade, um grande esforço tem sido empreendido para reduzir as fontes de energia existentes à uma dimensão nanoescalar. Os nanomateriais têm possibilitado a fabricação de nanobaterias com alta densidade de energia, tempo de vida razoável e controle gerenciado da taxa de carga e descarga. Entretanto, a necessidade de recarga periódica limita o tempo de utilização das nanobaterias em aplicações reais. A solução para esta limitação tem sido proposta através do conceito de nanodispositivo autossuficiente. O princípio de trabalho desses dispositivos

baseia-se na conversão de energia, processo realizado por meio do efeito piezoelétrico observado nos nanofios de óxido de zinco (ZnO). Desse modo, temos: energia mecânica - produzida pelos movimentos humanos ou alongamento muscular; energia vibratória - gerada por ondas acústicas ou até mesmo por vibrações estruturais produzidas pelas edificações e energia hidráulica - produzida pelos fluidos do corpo ou pela circulação sanguínea.

Hoje, a energia extraída do ambiente é a solução mais útil para alimentar os nanossensores. Entretanto, além das fontes mecânica, hidráulica e vibratória, acredita-se na possibilidade de produção de energia a partir de ondas eletromagnéticas presentes na nanoescala [3].

2.17 UNIDADE DE PROCESSAMENTO

Processadores nanométricos estão sendo implementados através do desenvolvimento de transistores FET cada vez menores. Nanomateriais, tais como os nanotubos de carbono e, especialmente, GNR, podem ser usados para construir transistores em escala nanométrica. Os transistores baseados em grafeno são menores e previsivelmente, mais rápidos, permitindo o transporte quase balístico dos elétrons. Logo, os elétrons podem viajar distâncias maiores sem sofrer dispersão, o que permite o desenvolvimento de dispositivos de comutação mais rápidos. Além disso, a redução do comprimento do canal, também contribui para uma resposta mais rápida [3]. Não há dúvida de que a operação dos transistores ao nível nanoescalar revolucionará a comunicação entre as nanorredes, pois as altas velocidades de operação permitirão grande eficiência no processamento. Neste contexto, o futuro delineia um cenário altamente promissor, onde o principal desafio é a integração de futuras arquiteturas de processadores. Testes experimentais de

transistores individuais têm sido realizados com êxito. No entanto, arquiteturas de processamento simples, baseadas nesses testes, ainda estão sendo investigadas e, até o momento, as arquiteturas dos processadores futuros baseadas em CNTs e grafeno ainda precisam ser definidos [3].

2.18 UNIDADE DE ARMAZENAMENTO

Os novos processos de fabricação e a existência dos nanomateriais têm permitido a implementação de nanomemórias que utilizam um único átomo para armazenar um único *bit*. O mecanismo de armazenamento baseia-se no conceito de memória atômica introduzida por Richard Feynman em 1959. Segundo este conceito, existe a possibilidade de armazenamento de um *bit* de informação em um único átomo. A implementação deste mecanismo tem sido muito pesquisada nos últimos tempos.

A tecnologia empregada na produção de nanodispositivos de armazenamento está em plena fase de desenvolvimento e possui muitos limites a serem superados. Em [?], é apresentado um modelo de memória que armazena um *bit* de acordo com a presença ou a ausência de um átomo de silício. De forma semelhante às faixas presentes em um CD-ROM, a memória proposta baseia-se numa superfície de silício, contendo monocamadas de ouro utilizadas para definir as faixas. O processo de escrita foi realizado por meio de remoção de átomos de silício a partir da estrutura do ouro. A leitura da memória foi realizada por meio de uma nanoponta capaz de detectar a presença ou a ausência de silício átomos. Este tipo de memória não é regravável. No entanto, vislumbra-se a possibilidade de sua restauração por meio da reorganização das faixas de ouro.

Recentemente, a IBM demonstrou o conceito de memória atômica magnética, implementado através da disposição de átomos magnéticos sobre uma determinada superfície por meio de força magnética. Hoje, são inúmeros os desafios no desenvolvimento das nanomemórias. Em primeiro lugar, as memórias nanoescalares existentes até o presente momento requerem máquinas complexas de altíssimo custo, empregadas no processo de escrita. A capacidade de leitura e escrita em nanomemórias será necessária para a programação dos dispositivos nanossensores. Em segundo lugar, de modo semelhante aos nanoprocessadores, um dos principais desafios é a massificação da produção de nanomemórias compactas [3], o que elevará o número de dispositivos a um patamar muito superior à quantidade de modelos prototípicos desenvolvidos nos laboratórios e centros de pesquisa.

2.19 NANOANTENAS

O Tamanho reduzido das antenas utilizadas nos nanodispositivos exigiria altíssimas frequências de operação, o que, certamente, poderia comprometer a viabilidade da comunicação eletromagnética entre os nanossensores. No entanto, esta limitação foi superada através da utilização dos CNTs e GNRs que permitem taxas de propagação inferiores à velocidade da luz.

Até o presente momento, foram desenvolvidos vários *designs* de nanoantenas baseados em grafeno e nanotubos de carbono, porém ainda são grandes os desafios neste âmbito, uma vez que se trata de um nanocomponente que deve atuar de modo confiável e seguro. Desta forma, é necessário em primeiro lugar a definição de modelos de nanoantenas mais precisas baseados em nanotubos e nanofitas e capazes de prover detalhes sobre a operação de banda, radiação da largura de

banda e eficiência de radiação, entre outras características. Tudo isso será determinante para a compatibilidade entre os dispositivos nanossensores. Em segundo lugar, deve haver o desenvolvimento de novos *designs* de antena e de nanoestrutura de radiação a partir da exploração das propriedades dos nanomateriais e das novas técnicas de fabricação.

Espera-se que seja possível a criação de uma nova nanoantena de precisão automática através do uso do grafeno, onde a simetria terá um papel muito importante. Podemos pensar, por exemplo, na nanoantena fractal, um tipo de antena com ressonância para diferentes frequências na banda de *terahertz*. Em último lugar, porém não menos importante, é preciso a implementação de uma nova teoria de antena levando em consideração os efeitos quânticos observados na nanoescala [3].

2.20 PRIMITIVAS DE PROTOCOLOS PARA COMUNICAÇÃO DE NANOESCALA

O ambiente da nanoescala apresenta um conjunto de primitivas genéricas que serão apresentadas a seguir. A identificação das primitivas tem por objetivo a construção de um conjunto de blocos essenciais capazes de oferecer alcançabilidade e compatibilidade com uso de protocolos de abstração complexa dentro do ambiente de operação da nanoescala.

Em enviar (*send*), moléculas são introduzidas externamente no sistema. A entrada desta primitiva de comunicação é o sinal a ser transmitido. Pode ser codificado tanto na concentração desejada de um tipo de sinal no meio fluido, quanto através de gatilhos físicos que estimulam a liberação de sinal molecular a partir da entidade transmissora. A saída desta primitiva é a concentração efetiva de sinal molecular no meio fluido, o que resulta na recepção do sinal desejado pela entidade receptora. No bloco (*block*), as moléculas são absorvidas e retiradas do sistema,

possivelmente através da intervenção de uma nanomáquina. A primitiva encaminhar (*forward*) tem por objetivo a ampliação e o encaminhamento de um determinado sinal recebido. Transformar (*transform*) é uma primitiva de comunicação responsável pela conversão de um sinal em outro. Identificador de inserção (*insert-identifier*) permite alguns métodos de inclusão de identificadores na portadora de informação. Por exemplo, isto pode ser obtido através do uso de marcadores biológicos, que são entidades biológicas amplamente utilizadas na reação entre a informação da portadora e o receptor. Recebimento condicional (*conditional-receive*) permite que uma nanomáquina receba informação. Combinação lógica (*logic-combine*) é uma primitiva de comunicação que permite que uma nanomáquina compute as funções lógicas das entradas recebidas de múltiplas nanomáquinas transmissoras [2].

3. TRABALHOS RELACIONADOS

A grande variedade de trabalhos referenciados e relacionados ao tema abordado nesta pesquisa demonstra o nível de interesse pelo desenvolvimento e pela implementação de sistemas aplicáveis à nanoescala. A riquíssima literatura disponível permite um estudo aprofundado sobre vários conceitos relativos ao desenvolvimento e à aplicação das nanorredes. No universo de trabalhos referenciados, podemos citar o artigo intitulado *Electromagnetic Wireless Nanosensor Networks (Redes de Nanossensores sem Fio Eletromagnéticas)*, de autoria de Ian F. Akyildiz e Josep Miquel Jornet. O documento enquadra-se em um patamar de alto nível no que concerne ao estado da arte em tecnologia de nanossensores, apresentando aspectos arquiteturais e detalhes sobre seus componentes individuais. Além disso, aborda processos e técnicas de industrialização de dispositivos nanossensores e ressalta algumas aplicações para as redes de nanossensores enfatizando, assim, a necessidade de comunicação entre dispositivos nanossensores.

No que se refere à troca de informação através da emissão de moléculas, destaca-se o artigo intitulado *Deterministic Capacity of Information Flow in Molecular Nanonetworks (Capacidade Determinística do Fluxo de Informações em Nanorredes Moleculares)*, de Bares Atakan e Ozgur B. Akan. O documento expõe, de forma precisa e objetiva, uma análise determinística das redes moleculares, apresentado a derivação da expressão de capacidade para cada tipo de canal. De grande relevância é o documento *MoNaCo: Fundamentals of Molecular Nano-Communication Networks (Fundamentos de Redes de Nanocomunicação Molecular)*, de autoria de Ian F. Akyildiz, Faramarz Ferki, Raghupathy Sivakumar,

Craig R. Forest e Brian K. Hammer, membros do Instituto de Tecnologia da Georgia. Este *paper* destaca-se, sobretudo, pela abordagem das abstrações de protocolos para redes nanomoleculares, visto que a comunicação molecular representa um paradigma radicalmente novo, exigindo fundamento teórico, desenvolvimento de arquiteturas e protocolos de redes específicos a serem aplicados em nanomáquinas.

Os trabalhos referentes ao estudo do canal físico de comunicação molecular baseada em difusão também são numerosos e permitem a verificação de vários sistemas na dimensão nanoescalar. Entre eles, destaca-se - pelo profundo teor científico - *Diffusion-Based Noise Analysis for Molecular Communication in Nanonetworks (Análise de Ruído Baseado em Difusão da Comunicação Molecular em Nanorredes)*, de Massimiliano Pierobom e Ian F. Akyildiz, um *paper* que tem como objetivo a análise das fontes de ruídos na comunicação molecular baseada em difusão. Este estudo é, especialmente, importante para estimular a melhoria das características da portadora de transmissão na comunicação molecular, proporcionando uma comunicação mais confiável, protegendo as moléculas de fontes de ruído externo, e, finalmente, possibilitando a criação de múltiplos canais independentes utilizando o mesmo meio.

Ainda nesta perspectiva, distingui-se *Mobile Ad Hoc Nanonetworks with Collision-based Molecular Communication (Nanorredes Móveis Ad Hoc com Comunicação Molecular Baseada em Colisão)* de autoria de Aydin Guney, Baris Atakan e Ozgur B. Akan, artigo no qual se apresentam três abordagens diferentes para o desenvolvimento de nanomáquinas: *de baixo para cima (bottom-up)*, *de cima para baixo (top-down)* e *bio-híbrido (bio-hybrid)*. Igualmente, inserido no contexto de estudo do canal físico, evidencia-se o artigo intitulado *Deterministic Capacity of Information Flow in Molecular Nanonetworks* - já referenciado acima - que enfoca um

modelo de canal real proposto para comunicação molecular, onde os nanodispositivos são capazes de trocar informações como odores, sabores, luminosidade ou qualquer outro estado químico.

Por fim, devemos ressaltar o artigo *Exploring the Physical Channel of Diffusion-based Molecular Communication by Simulation (Explorando o Canal Físico da Comunicação Molecular por Simulação)*, realizado em conjunto por Ignacio Llatser, Iñaki Pascual, Nora Garralda, Albert Cabellos-Aparicio, Massimiliano Pierobon, Eduard Alarcón e Josep Solé-Pareta e publicado pela IEEE em dezembro de 2011. Trata-se de um documento que tem como finalidade principal a apresentação do *N3Sim*, um simulador muito eficiente aplicado em comunicação molecular baseada em difusão. O *N3Sim* permite a modelagem do movimento das moléculas, contribuindo, assim, para a validação de cenários produzidos no canal físico.

Apesar da existência de outros simuladores para validação, o *N3Sim*, disponível em www.n3cat.upc.edu/n3sim, é a primeira plataforma de simulação que permite a execução de testes de DMC tanto para difusão normal quanto anômala. Em trabalhos mais recentes, o *N3Sim* foi capaz de identificar várias particularidades da DMC [7], permitindo, assim, a avaliação de modulação baseada em impulso e a validação das características do canal físico do DMC [10]. Daí a motivação para um estudo mais detalhado sobre os fundamentos da comunicação baseada em difusão.

4. ESTUDO DO CANAL FÍSICO DE COMUNICAÇÃO MOLECULAR BASEADA EM DIFUSÃO ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO

A comunicação molecular baseada em difusão é um paradigma biológico altamente utilizado na implementação de nanorredes. As particularidades do canal físico da comunicação molecular requisitaram o desenvolvimento de novos modelos, técnicas e protocolos, desenvolvidos a partir de um cenário validado através de simulação, o que possibilita um número infinito de validações na comunicação molecular. Neste contexto, surgiu o *N3Sim*, um ambiente de simulação específico para comunicação molecular baseada na difusão. O *N3Sim* permite simular cenários onde transmissores codificam as informações, liberando moléculas no meio e variando, assim, a sua concentração local. O *N3Sim* modela o movimento destas moléculas de acordo com a dinâmica browniana, levando em conta a inércia e as interações entre eles. Os receptores decodificam a informação ao sentir a concentração de partículas em sua vizinhança [11].

Na comunicação molecular, diferentes métodos são utilizados em função das diferentes distâncias entre emissores e receptores. Tais procedimentos classificam-se em método de curto alcance (de nm a μm), método de médio alcance (de μm a mm) e método de longo alcance (de mm a m) [11]. Os estudos revelam que várias técnicas foram propostas para o método de longa distância. Entre elas, destacam-se, por exemplo, feromônios, pólen e esporos [12].

A técnica de sinalização molecular (*molecular signaling*) tem sido amplamente estudada e, desse modo, tem obtido uma posição de destaque no ambiente de nanorredes. Nesta técnica, transmissores suspensos num meio fluido emitem moléculas segundo um padrão que codifica a informação transmitida. As moléculas

emitidas movem-se num trajetória irregular em virtude das colisões com as moléculas do fluido. Como consequência desse movimento e das interações entre as moléculas emitidas (tais como colisões e forças eletrostáticas), estas se difundem por todo o meio, acarretando a propagação de moléculas por todo o espaço. Por fim, os receptores medem a concentração local de moléculas na vizinhança e decodificam a informação transmitida [11].

4.1 COMUNICAÇÃO MOLECULAR BASEADA EM DIFUSÃO

Na *Comunicação Molecular Baseada em Difusão (Diffusion-based Molecular Communication - DMC)*, a evolução da concentração molecular em todo o espaço e durante todo o tempo é modelada como um processo de difusão. Dependendo da situação, diferentes modelos de difusão podem ser utilizados, os quais podem ser agrupados em duas categorias: difusão normal e difusão anômala [19]. A difusão normal refere-se ao caso em que a dinâmica das moléculas emitidas pode ser modelada pelo movimento browniano [9], o que se verifica quando as forças viscosas dominam o movimento das moléculas emitidas e as interações entre eles podem ser negligenciadas. Neste caso, não há correlação entre o movimento intermolecular e, por conseguinte, o processo de difusão pode ser, macroscopicamente, modelado pelas leis de difusão [13] de Fick. Já a difusão anômala ocorre quando a interação entre as moléculas emitidas afetam o processo de difusão. Por exemplo, no caso particular de sinalização molecular conhecida como sinalização de cálcio, baseada no íon positivo de cálcio (Ca^{2+}), a força eletrostática entre esses íons impactam o processo de difusão.

Muitos modelos de canal físico para DMC já foram desenvolvidos. No entanto, muitos desses modelos ainda devem ser validados, o que exige estudo

experimental ou simulação. Mesmo com os avanços no campo da Biologia Sintética, a configuração experimental para a comunicação molecular ainda representa um grande desafio. Em tese, um simulador deve permitir a criação de um ambiente de DMC e a medição de várias métricas, permitindo uma projeção de sua performance. O *N3Sim* foi o primeiro ambiente de simulação DMC capaz de lidar com difusão normal e anômala e seu uso tem permitido a identificação de uma série de particularidades do DMC, bem como a caracterização do canal físico [10].

5 TESTE E SIMULAÇÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados dos testes e simulações realizados no âmbito da comunicação molecular baseada em difusão, tomando por base o artigo *Explorando o Canal Físico da Comunicação Molecular por Simulação* [11] e tendo como referência as proposições observadas em [22]. Seu objetivo principal é expor os aspectos positivos do *N3Sim* que se caracteriza por ser uma apurada ferramenta de simulação, utilizada na validação de múltiplas instâncias de sistemas de modo preciso e eficiente.

5.1 SIMULAÇÃO DE ARQUITETURA

O *N3Sim* foi concebido com o objetivo de simular um conjunto de nanomáquinas que se comunicam por difusão molecular em um meio fluido [15]. A informação enviada pelas nanomáquinas modula a taxa na qual estas liberam as moléculas moduladas como partículas no meio. Por exemplo, a transmissão de um bit lógico “1” pode ser representada pela emissão de um conjunto de partículas, enquanto a transmissão do bit “0” pode ser representada pela ausência de emissão. O processo de emissão causa variações da concentração local das partículas que se propagam no meio em função do movimento browniano e da interação entre elas. Os receptores são capazes de fazer uma estimativa da concentração de partículas na vizinhança através da contagem do número de partículas em um dado volume do meio circundante. A partir dessa aferição, eles podem codificar a informação transmitida.

O diagrama em blocos com os passos necessários para a execução de uma simulação é apresentado na figura 8. Inicialmente, os usuários especificam os

valores dos parâmetros de simulação em um arquivo de configuração (figura 9). Estes parâmetros incluem o número e a localização dos transmissores e dos receptores, o sinal a ser transmitido, o tamanho das partículas e o coeficiente de difusão do meio, entre outros. Um *script* (figura 10) permite ao usuário a execução de múltiplas simulações automaticamente, usando apenas um arquivo de configuração, o que é útil para avaliar a influência de um parâmetro específico (por exemplo, o número de partículas transmitidas) na saída do sistema. Num próximo passo, o simulador recebe o arquivo de configuração e os *scripts* como entrada e executam a simulação do cenário DMC proposta. Assim, efetuamos a simulação a partir do ambiente criado em *Gilberto (E:) ► N3Sim ►*, máquina de simulação local (figura 11) empregada para a execução do *Framework*. Utilizamos o *prompt* de comando (figura 12), dando início ao processo de validação do cenário a ser avaliado. O simulador de difusão computa a posição e a velocidade de cada partícula de cada passo da simulação. Ao final, os dados de saída são armazenados nos arquivos receptores, que contêm a concentração registrada por cada receptor em função do tempo. Por fim, um conjunto de *scripts* pode ser usado para organizar os resultados de vários receptores e representá-los graficamente em um único cenário [11].

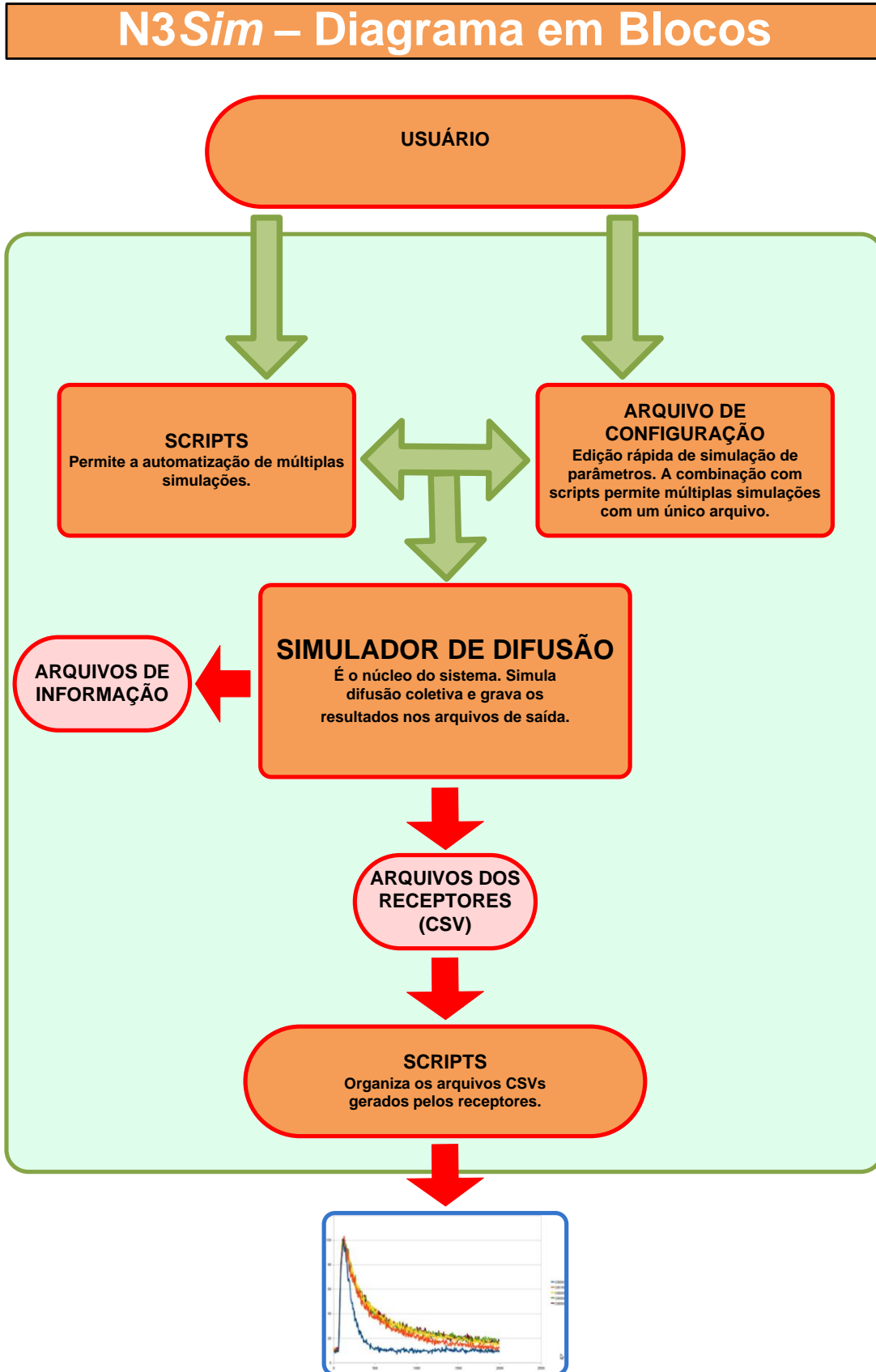


Figura 8 - Diagrama com os Passos Necessários para Realização de uma Simulação no *N3Sim*. Extraído de [22]

```

### N3Sim CONFIG FILE
### SIMULATION PARAMS
outPath=param
graphics=false
infoFile=true
activeCollision=false
BMFactor=1
inertiaFactor=0
time=200000
timeStep=1000

### SPACE PARAMS
boundedSpace=true
constantBGConcentration=false
constantBGConcentrationWidth=0
xSize=2500
ySize=2000
D=param
bgConcentration=10
sphereRadius=param

### EMITTER PARAMS
emitters=1
emitterRadius=100
x=1000
y=500
startTime=1000
endTime=2000
initV=0
punctual=false
concentrationEmitter=false
color=white
emitterType=1
amplitude=1000

### RECEIVER PARAMS
receivers=1
name=rx500
x=1500
y=500
absorb=false
accumulate=false
end=true

```

Figura 9 – Arquivo de Configuração Utilizado no *N3Sim*. Proposto em [22]

```

#!/bin/sh
# These script will launch simulations combining values of PARAM1_LIST
# with values of PARAM2_LIST.
# Simulation results will be stored in folders named "myTest-i-j",
# where i and j are the values of the parameters.
PARAM1_LIST=(1 2 5 10)
PARAM2_LIST=(0.6 0.7 0.8 0.9)

for i in ${PARAM2_LIST[@]}; do
  for j in ${PARAM2_LIST[@]}; do
    java -jar N3Sim.jar myConfigFile.cfg myTest-${i}-${j} $i $j
  done
done
done

```

Figura 10 – Script para Automatização de Simulação Combinando Listas e Valores para dois Parâmetros. Proposto em [22]

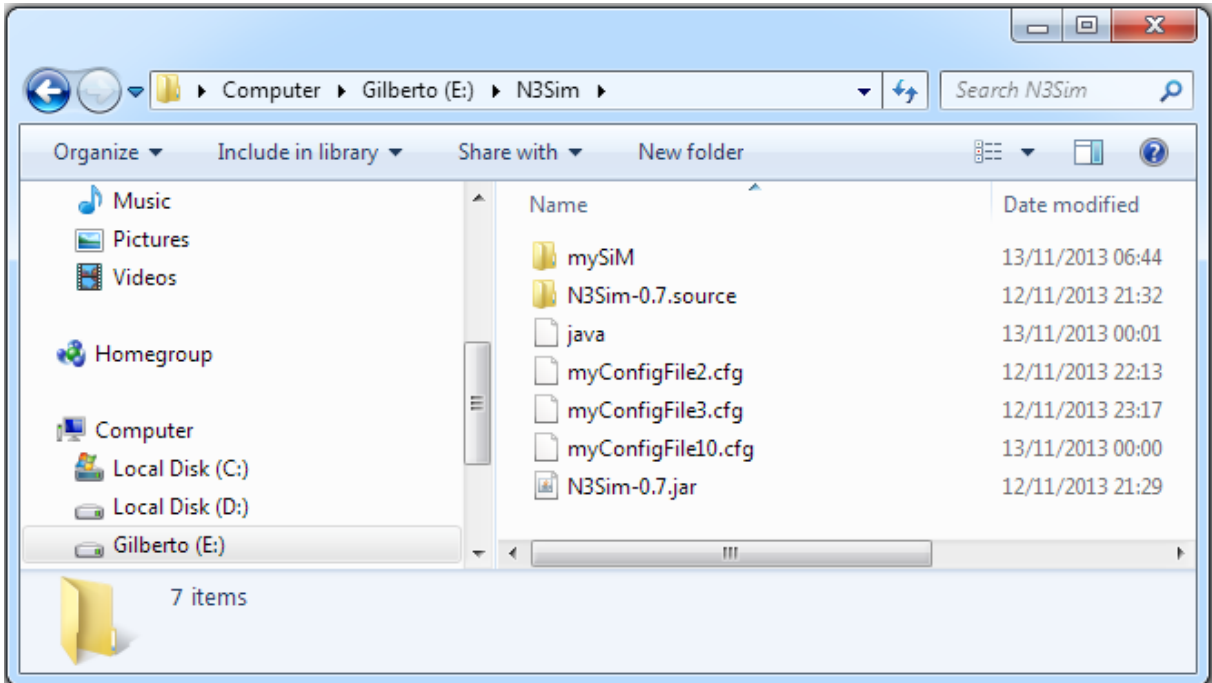


Figura 11 – Ambiente de Simulação Criado a Partir da Execução do N3Sim-07.jar.

Extraído da Máquina de Simulação Local

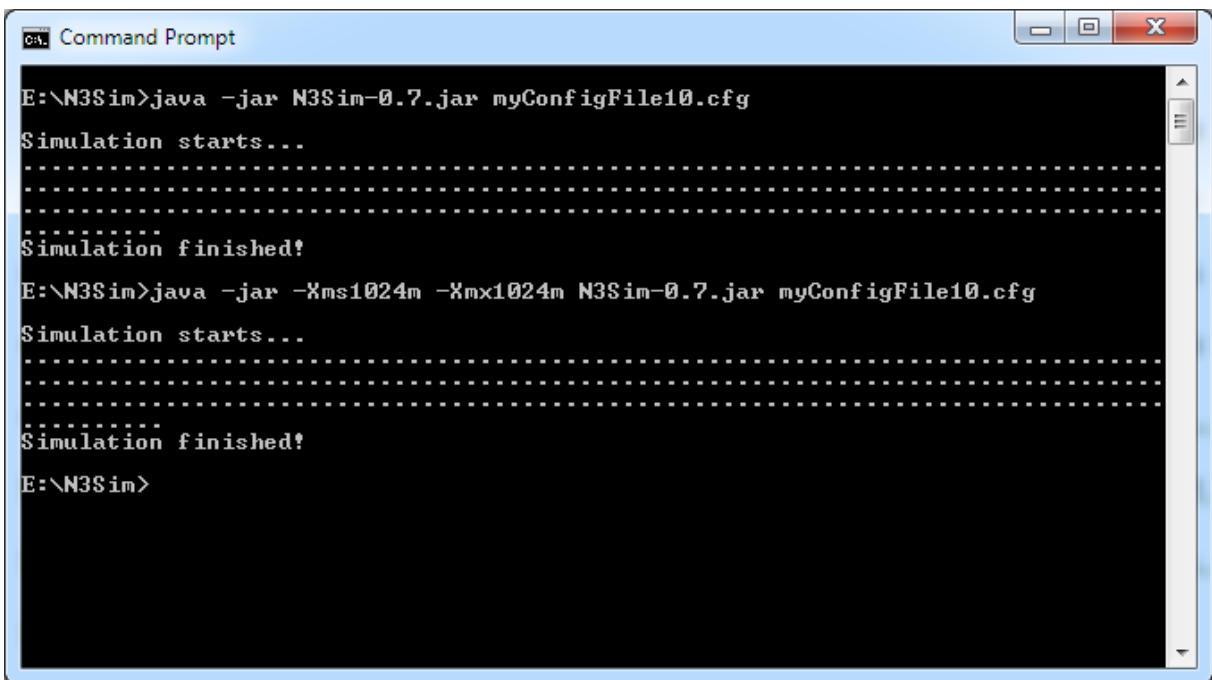


Figura 12 – Comandos de Execução do N3Sim Realizados em Java no Ambiente

Windows. Extraído da Máquina de Simulação Local

5.2 OS MODELOS DE TRANSMISSOR E DE RECEPTOR

O transmissor é definido pela sua localização no espaço de simulação e pelo seu tamanho, o que determina a sua influência espacial (a região onde ele pode liberar partículas). Cada transmissor modula a informação a ser enviada em uma forma de onda associada, que define o seu padrão de liberação da partícula. Esta forma de onda pode ser escolhida entre uma série de formas predefinidas, como um pulso quadrado, um pulso gaussiano ou um trem de pulsos. Uma forma de onda também pode ser definida pelo usuário [11].

O receptor pode ser modelado como uma esfera ou um cubo capaz de medir o número instantâneo de partículas dentro do seu intervalo de detecção, tornando possível a estimativa da concentração local. Este modelo é uma idealização do receptor ligante, um mecanismo de ligação encontrado na natureza [17]. Muitos parâmetros do receptor são personalizáveis. Por exemplo, após a detecção de um grupo de partículas, ele pode absorvê-las ou comportar-se de forma totalmente transparente. O *N3Sim* também permite ao usuário a utilização de múltiplos transmissores e receptores no campo de experimentação, simulando, assim, uma comunicação multiponto a multiponto. O usuário só precisa definir as características de cada transmissor e de cada receptor, ou seja, a posição, a forma e o tamanho, que podem ser diferentes para cada um deles. Isto permite o estudo de vários aspectos de comunicação, tais como a viabilidade de difusão molecular ou a natureza das interferências, quando mais de um transmissor emite ao mesmo tempo.

5.3 MODELO DA PARTÍCULA

As partículas emitidas são modeladas como esferas indivisíveis. A principal razão para esta escolha é a simplicidade de detecção de colisão pelo algoritmo para esta forma de partícula. As colisões entre as partículas emitidas e as moléculas do fluido promovem a difusão em todo o meio. Seria, computacionalmente, inviável modelar cada tipo de colisão, individualmente, uma vez que o número de colisões entre cada partícula e o fluido, é da ordem de 10^{20} por segundo [14]. Felizmente, a movimentação aparentemente aleatório das partículas suspensas - provocada por colisões entre as partículas e as moléculas menores do fluido - podem ser modelados matematicamente segundo o movimento browniano. Assumindo que as partículas não têm inércia, a dinâmica browniana permite calcular estatisticamente o seu movimento. Este pode ser modelado como uma variável aleatória gaussiana com valor igual a zero e cuja raiz quadrada do deslocamento, em cada dimensão depois de um tempo t , é $\sqrt{2Dt}$, onde D é o coeficiente de difusão do meio [6].

5.4 ESPAÇO PARA SIMULAÇÃO

O *N3Sim* pode ser utilizado para simulações bidimensionais ou tridimensionais. A concentração inicial de partículas constitui um dos parâmetros do espaço de simulação. Se for igual a zero, é possível a simulação de um espaço limitado ou ilimitado como pode ser observado na representação gráfica da figura 13. Entretanto, a concentração inicial maior que zero implica a limitação do espaço de simulação.

A simulação em espaço limitado é mais realista para aplicações de prospecção em comunicação molecular. Por exemplo, em um conjunto de nanomáquinas comunicantes, localizado em um vaso sanguíneo, quando uma

partícula colide com a parede do vaso (processo conhecido como *tunica íntima*), ela será rebatida. A fim de evitar que as partículas liberadas pelos transmissores aumentem a concentração ao longo do tempo, o *N3Sim* inclui um mecanismo opcional que permite que algumas partículas desapareçam quando atingem os limites do espaço de simulação, de acordo com as leis da difusão [11]. Este mecanismo elimina algumas partículas perto dos limites de espaço, como se estivessem saindo dos limites espaciais. Para ativar esse mecanismo, o parâmetro ***constantBgConcentration*** deve ser definido como verdadeiro [22].

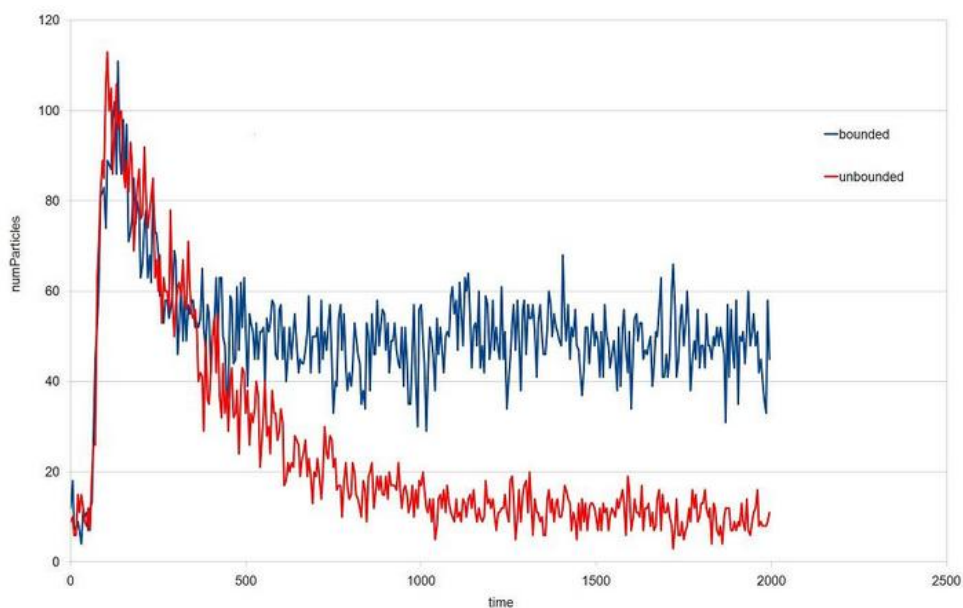


Figura 13 – Comparação de Simulação entre Espaços Limitados e Ilimitados.

Extraída de [11]

5.5 RESULTADOS DE SIMULAÇÃO

Os resultados apresentados a seguir baseiam-se em [11] e foram realizados em ambiente de difusão normal e anômala. A tabela e as figuras propostas são importantes para a compreensão dos resultados produzidos em cada cenário.

Com o intuito de demonstrar a eficiência do simulador *N3Sim*, são apresentadas várias simulações de comunicação molecular baseadas em difusão ponto a ponto em um espaço bidimensional. No referido artigo, tanto o transmissor quanto o receptor possuem forma circular. A tabela 1 apresenta os valores dos parâmetros para emulação de um cenário real de sinalização molecular entre células vivas. Durante o processo de simulação, o *N3Sim* computa a concentração de partículas registrada pelo receptor quando um pulso de 10^5 partículas é transmitido. Com isso, é possível a comparação entre casos de difusão normal e difusão anômala.

PARÂMETROS USADOS NAS SIMULAÇÕES	
Parâmetro	Valor
• Intervalo de tempo	2 ms
• Tempo de simulação	5 s
• Distância de transmissão	50 μm
• Raio do transmissor	5 μm
• Raio do receptor	5 μm
• Número de partículas liberadas	10^5
• Difusão constante	1 nm^2/ns

Tabela 1- Parâmetros Usados nas Simulações Validadas pelo *N3Sim*. Extraída de [11]

A figura 14 apresenta um cenário de difusão normal, em que a interação entre as partículas é ignorada. Ao atingir o local do receptor, o sinal transmitido sofre uma distorção formando uma longa cauda devido aos efeitos do processo de difusão. Como esperado em um cenário de difusão normal, a concentração de partícula medida pelo receptor (pontos vermelhos) corresponde ao resultado analítico de leis de difusão de Fick (linha azul tracejada).

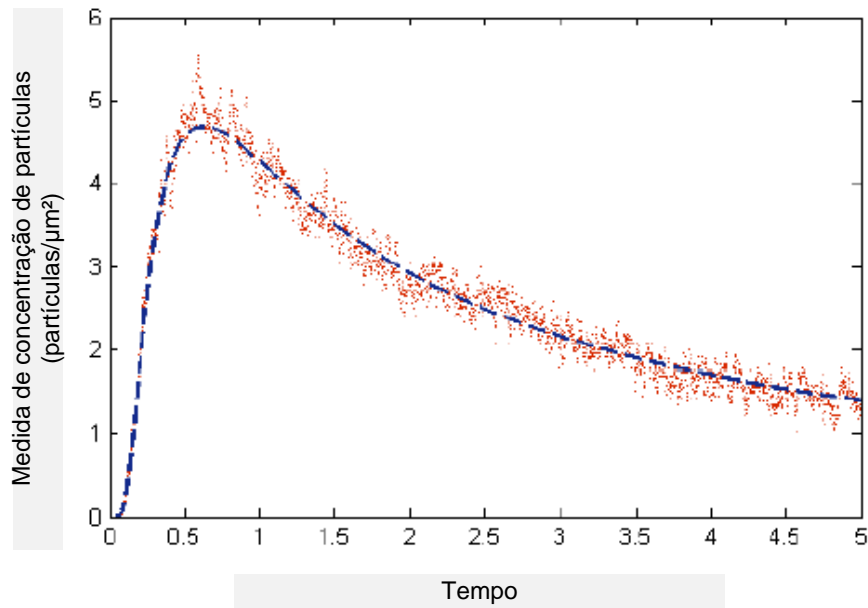


Figura 14 - Representação de um Cenário de Difusão Normal. Extraída de [11]

A figura 15 representa um cenário de difusão anômala e a simulação é realizada com os mesmos parâmetros. As colisões entre as partículas, bem com sua inércia são consideradas. Na representação é possível perceber que não há correspondência entre a concentração de partículas (pontos vermelhos) e os resultados da lei de difusão de Fick (linha tracejada em azul).

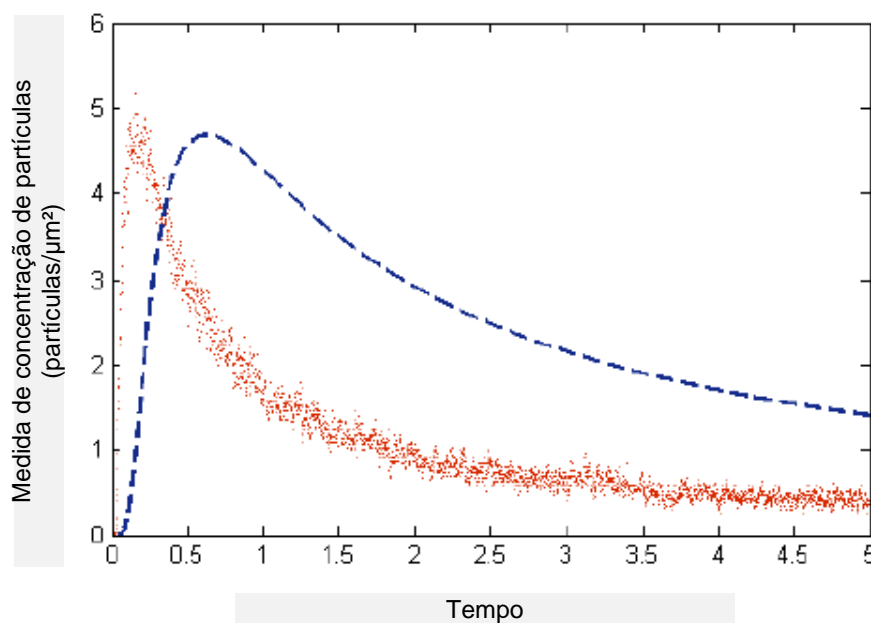


Figura 15 – Representação de um Cenário de Difusão Anômala. Extraída de [11]

6 CONCLUSÕES E TENDÊNCIAS FUTURAS

No presente trabalho, estudamos uma série de conceitos relativos à implementação das redes de nanossensores bioinspiradas. Concluimos que no domínio da comunicação a nível nanoescalar, o objetivo principal é a combinação de primitivas que possibilitem o desenvolvimento de protocolos capazes de prover, acima de tudo, funcionalidades de comunicação de alta complexidade. Isto só é possível em função do grau de liberdade característico do canal (*channel*) das nanorredes, que permite uma programação atuante e ativa na nanoescala. Não fosse assim, pouco poderíamos realizar, pois as abstrações tradicionais são mais atuantes nos sistemas finais, tendo pouca ingerência no canal, onde atuam de modo simplista.

No capítulo IV, lançamos o olhar sobre a comunicação molecular baseada na difusão, um paradigma inspirado na biologia e altamente promissor para a implementação de nanorredes. Concluimos que o canal físico da DMC é completamente diferente daqueles empregados na comunicação clássica, o que demanda novas arquiteturas de redes e protocolos de comunicação validados através de ambientes de simulação. O *N3Sim* é, sem dúvida, uma ferramenta essencial para projeção e avaliação dos protocolos da camada física. A expectativa é que esta poderosa ferramenta cumpra um papel importante na avaliação dos modelos atuais e contribua para o *design* de novas técnicas e novos sistemas.

No futuro, a técnica de manipulação dos átomos e das moléculas proporcionará a concepção de dispositivos altamente eficientes e capazes de explorar as propriedades da nanoescala. As pesquisas atuais projetam este horizonte, inicialmente, previsto pelo físico Richard Feynman em 1959, no discurso intitulado *Há Muito Espaço na Parte Inferior*. Sendo assim, o caráter puramente

ficcional da nanotecnologia, tende a ser modificado em função da projeção bem sucedida de estruturas moleculares perfeitamente aplicáveis na nanoescala. Conseqüentemente, as atividades inerentes à nanotecnologia aumente a cada dia, o que faz com que o termo venha se tornando cada vez mais aceito pela sociedade.

Por fim, devemos ratificar a importância da nanotecnologia como elemento contextualizador para a presente pesquisa. Vivemos uma verdadeira revolução inspirada, sobretudo, pelo avanço das tecnologias de comunicação que, inevitavelmente, apontam para o novo campo da nanocomunicação. Não por acaso, a projeção do elevadíssimo número de dispositivos conectados à *Internet das Coisas* (*Internet of Things – IoT*) até o final da próxima década expressa a efervescência da atual revolução nanotecnológica na qual estamos inseridos. Eis que surge um novo horizonte, onde a nanocomunicação revela-se como o novo paradigma comunicacional. A codificação molecular é uma realidade possível e respaldada pela exploração do universo quântico que possibilitou a criação de nanossistemas e a concepção das nanomáquinas, capazes de manipular a estrutura molecular ao nível do átomo. Neste contexto, as moléculas assumem uma existência menos virtual e adquirem um *status* mais material, permitindo uma total reconfiguração da estrutura física. Evidencia-se, assim, a interação entre corpo e código, o que confere um caráter científico à Nanotecnologia, classificando-a no patamar das tecnologias de comunicação.

REFERÊNCIAS

- [1] I. F. Akyildiz, F. Brunetti, C. Blazquez, **Nanonetworks: a new communication paradigm**, Computer Networks (Elsevier) Journal 52 (12) (2008) 2260_2279.
- [2] I. F. Akyildiz, F. Ferki, R.Sivakumar, C. R. Forest, and B. Hammer, **MoNaCo: Fundamentals of Molecular Nano-Communication Networks**, IEEE Wireless Communications, Oct 2012, pp. 12-18.
- [3] I. F. Akyildiz, J. M. L. Jornet, **Electromagnetic wireless nanosensor networks**, Broadband Wireless Networking Laboratory, School of Electrical and Computer Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332, United States, May 2010.
- [4] B. Atakam, O. B. Akan, **Deterministic capacity of information flow in molecular nanonetworks**, Next generation Wireless Communications Laboratory, Department of Electrical and Electronics Engineering, Middle East Technical University, 06531, Ankara, Turkey, Mar. 2010.
- [5] P. Bondavalli, P. Legagneux, D. Pribat, **Carbon nanotubes based transistors as gas sensors: state of the art and critical review**, Sensors and Actuators B: Chemical 140 (1) (2009) 304_318.
- [6] A. Einstein, **Investigations on the theory of the brownian movement**, 1915.
- [7] N. Garralda, I. Llatser, A. Cabellos-Aparicio, and M. Pierobon, **Simulation-based Evaluation of the Diffusion-based Physical Channel in Molecular Nanonetworks**, in to appear in 1st IEEE International Workshop on Molecular and Nanoscale Communication (MoNaCom), 2011.
- [8] J. M. Jornet, I.F. Akyildiz, **Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band**, in: Proc. of 4th European Conference on Antennas and Propagation, EUCAP, April 2010.
- [9] I. Karatzas and S. Shreve, **Brownian motion and stochastic calculus**. Springer, 1991.
- [10] I. Llatser, E. Alarcón, and M. Pierobon, **Diffusion-based Channel Characterization in Molecular Nanonetworks**, in to appear in 1st IEEE International Workshop on Molecular and Nanoscale Communication (MoNaCom), 2011.
- [11] I. Llatser, I. Pascual, N. Garralda, A. Cabellos-Aparicio, M. Pierobon, E. Alarcón, J. Solé-Pareta, **Exploring the Physical Channel of Diffusion-based Molecular Communication by Simulation**, Global

Telecommunications Conference (GLOBECOM 2011), December 2011 IEEE.

- [12] L. Parcerisa, I.F. Akyildiz, **Molecular communication options for long range nanonetworks**, Computer Networks (Elsevier) Journal 53 (16) (2009) 2753_2766.
- [13] J. Philibert, **One and a Half Century of Diffusion: Fick, Einstein, before and beyond**, Diffusion Fundamentals, vol. 4, no. 6, pp. 1–19, 2006.
- [14] J. Piasecki, **Centenary of Marian Smoluchowski's Theory of Brownian Motion**, Acta Physica Polonica Series B, vol. 38, no. 5, p. 1623, 2007.
- [15] M. Pierobon and I. F. Akyildiz, **A Physical End-to-end Model for Molecular Communication in Nanonetworks**, *IEEE JSAC*, vol. 28, n. 4, May 2010, pp. 602-11.
- [16] M. Pierobon and I. F. Akyildiz, **Diffusion-based Noise Analysis for Molecular Communication in Nanonetworks**, *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 59, no. 6, pp. 2532–2547, 2011.
- [17] J. P. Rospars, V. Krivan, and P. Lánský, **Perireceptor and receptor events in olfaction. Comparison of concentration and flux detectors: a modeling study**. *Chemical senses*, vol. 25, no. 3, pp. 293–311, Jun. 2000.
- [18] T. Suda, M. Moore, T. Nakano, R. Egashira, A. Enomoto, **Exploratory research on molecular communication between nanomachines**, in: Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO), Late Breaking Papers, June 2005.
- [19] L. Vlahos, H. Isliker, Y. Kominis, and K. Hizanidis, **Normal and anomalous diffusion: A tutorial**, *Order and Chaos*, vol. 10, no. March 2008, pp. 1–40, 2008.
- [20] T. Vo-Dinh, B.M. Cullum, D.L. Stokes, **Nanosensors and biochips: frontiers in biomolecular diagnostics**, *Sensors and Actuators B: Chemical* 74 (1_3) (2001) 2_11.
- [21] <http://jnm.snmjournals.org/content/48/7/1039/F1.expansion.html>, acessado em agosto de 2013.
- [22] <http://www.n3cat.upc.edu>, acessado em novembro de 2013.
- [23] http://www.ati.surrey.ac.uk/topics?topic_id=32&level=1, acessado em agosto de 2013.