

# OTIMIZAÇÃO DE AGREGADOS ATÔMICOS UTILIZANDO G.A.

**Aluno: André Luiz C. de A. Reis**  
**Orientador: Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco**

## Introdução

Foi feito um estudo do procedimento para otimização de agregados atômicos utilizando Algoritmos Genéticos.

## Objetivos

Desenvolver um aplicativo que encontre os mínimos globais de energia, além dos mínimos locais de baixa energia de agregados atômicos, utilizando os Algoritmos Genéticos juntamente com potenciais empíricos.

## Metodologia

Agregados atômicos e moleculares podem ser compostos por átomos ou moléculas idênticas, ou duas ou mais espécies diferentes. Estes agregados podem conter entre algumas unidades e milhões de átomos e moléculas.

Algoritmos Genéticos são inspirados no princípio Darwiniano da evolução das espécies e na genética [1]. São algoritmos probabilísticos que fornecem um mecanismo de busca paralela e adaptativa baseado no princípio de sobrevivência dos mais aptos e na reprodução.

A busca pelas geometrias de pequenos agregados depende muito do "chute" inicial da estrutura. Nos últimos anos, Algoritmos Genéticos têm sido usados para encontrar o mínimo global e os mínimos locais de baixa energia. O uso de AG para a otimização da geometria de agregados iniciou-se no começo da década de 90 por Hartke [3] e Xiao e Willians [3] para a otimização de pequenos agregados de silício e agregados moleculares, respectivamente. Em ambos os casos, a geometria do agregado era codificada por bits. Depois de trabalho pioneiro, Hartke publicou o resultado da otimização da geometria por AG para outros agregados, tais como água [3] e mercúrio [3].

Um estágio importante da evolução da otimização dos agregados por AG foi introduzido por Zeiri, que passou a representar a estrutura do agregado por genes reais [3]. Esta metodologia permitiu representar a posição dos elementos do agregado de forma contínua, removendo a necessidade de codificação e decodificação do cromossomo binário. Em seguida, Deaven e Ho desenvolveram um algoritmo híbrido onde se aplica uma minimização local por gradiente sempre que uma nova estrutura é gerada pelo AG [3]. A introdução da minimização local transforma a curva do potencial de energia em uma superfície de degraus, onde cada degrau corresponde a uma base de atração, como mostrado na figura 1. Esta simplificação facilita consideravelmente a busca pelo mínimo global, reduzindo o espaço de busca do AG. Neste contexto, a utilização da minimização local corresponde a uma evolução Lamarquiana, ao invés da Darwiniana, já que os indivíduos agregam ao seus cromossomos características que adquiriram pela minimização local, alterando parte do que foi herdado.

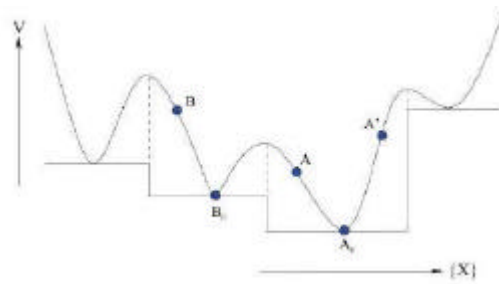


Figura 1: Simplificação da superfície de energia por degraus.

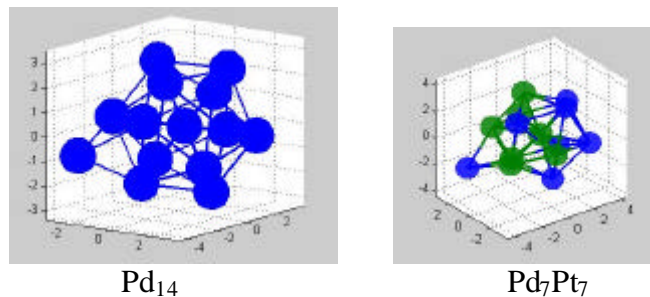
O aplicativo faz as minimizações locais usando o gradiente decrescente pelo método quase-newton L-BFGS[3] e o cálculo da energia pelo potencial de Gupta, mostrado na figura 2. Essas escolhas foram tomadas levando em consideração que a precisão não é a mais importante e sim a rapidez do processo. Outras funções de avaliação, como os cálculos *ab initio*, são mais precisas, porém requer um alto poder de processamento. A Figura 3 apresenta 2 agregados de Pd e Pt otimizados.

$$V_{\text{clus}} = \sum_i^N \{V^r(i) - V^m(i)\}$$

$$V^r(i) = \sum_j^N A(a,b) \exp\left(-p(a,b) \left(\frac{r_{ij}}{r_0(a,b)} - 1\right)\right)$$

$$V^m(i) = \left[ \sum_j^N \zeta^2(a,b) \exp\left(-2q(a,b) \left(\frac{r_{ij}}{r_0(a,b)} - 1\right)\right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Figura 2: Equações do Potencial de Gupta



Pd<sub>14</sub>

Pd<sub>7</sub>Pt<sub>7</sub>

Figura 3: 2 agregados otimizados.

## Conclusões

Os resultados preliminares confirmam que a utilização de Algoritmos Genéticos para a minimização da energia de agregados atômicos é eficiente. Agregados de baixa energia foram encontrados, semelhantes àqueles apresentados em [3].

## Referências

- 1 - GOLDBERG, D. **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning**, Addison Wesley, 1989.
- 2 – PACHECO, M. **Algoritmos Genéticos: Princípios e Aplicações**, 1999.
- 3 – JOHNSTON, R.L. **Evolving better nanoparticles: Genetic algorithms for optimising cluster geometries**, 2003.