Desenvolvimento de Algoritmo genético para determinação nanoclusters

Nelson Ribeiro de Carvalho Júnior

Breno Rodrigues Lamaghere Galvão

RESUMO

O potencial de Leonard Jones é explorada usando um algoritmo genético acoplado ao método de otimização BFGS sintonizado para procurar os mínimos de energia para cada tamanho de cluster, considerando a função potencial L-J. Na busca por mínimos disponíveis nas hipersuperfícies de energia potencial associadas aos clusters estudados, verificou-se que as energias encontradas em muitos casos ficaram estagnadas não havendo melhoras; quando os resultados obtidos da geração anterior não evoluem foi acrescentado um novo fluxo onde o número da geração é avaliado podendo alterar o valor do gradiente de busca local o que torna o Algoritmo Genético mais consistente em busca do mínimo global.

O potencial de Leonard Jones foi utilizado visando uma avaliação rápida da energia potencial do sistema como método de minimização durante as buscas do Algoritmo Genético.

Este potencial é amplamente utilizado descrevendo a interação entre dois átomos onde a energia de ligação total de um cluster é composto de N átomos.

Nesta abordagem, para um cluster de um dado tamanho e de uma dada composição, uma população inicial gerada aleatoriamente (através da geração aleatória das coordenadas de cada átomo dentro de um dado intervalo). Em seguida, suas energias são calculadas pelo potencial L-J e o passo extra de permitir que as estruturas relaxem para o mínimo local mais próximo é dado utilizando o método BFGS de minimização baseado no cálculo do vetor gradiente, este cálculo é realizado considerando um erro muito pequeno, que quase se assemelha a uma busca local a cada ponto da população de cada geração.

A conclusão do trabalho evidenciou que o Algorimo Genetico Alternado obteve melhores energias na média geral e também o desvio padrão, obtendo melhores mínimos globais. Realizar mais experimentos com composições bem maiores para verificarmos a eficacia e o comportamento deste novo metodo de otimização.

PALAVRAS CHAVE. Potencial Leonard Jones, Energia, Algoritmo Genético

https://proceedings.science/p/157879?lang=pt-br