

Otimização Evolucionária da Distribuição e Parametrização

Neste capítulo são apresentadas as metodologias empregadas na construção de funções de base. Algumas considerações são feitas sobre o projeto de funções de base e são descritos em detalhes quais os procedimentos gerais para se empregar técnicas baseadas em Algoritmos Evolucionários para a construção dessas funções de base. Em cada seção é apresentada uma breve descrição teórica dos métodos utilizados e a forma de utilizar a computação evolucionária conjuntamente com tais métodos.

4.1.

Projeto de funções de base

Não existe um método definitivo para gerar funções de base. A construção de uma nova função de base é uma arte (LEACH, 2001). Na verdade, existem diversos métodos que resultaram em um grande número de funções de base diferentes.

O desenvolvimento de uma função de base para cálculos moleculares é uma tarefa que demanda muito tempo de processamento. O grande número de parâmetros a serem otimizados e a natureza não linear desse problema de otimização induz os pesquisadores a usarem funções de base otimizadas para átomos em moléculas (GOMES, 2006). Com o objetivo de resolver o problema do custo computacional, métodos alternativos foram desenvolvidos, eliminando a necessidade de determinar todos os expoentes (GOMES, 2006), (SOMORJAI, 1968), (SOMORJAI, 1969) (BISHOP, 1970), (MOHALLEM, 1986).

Cada orbital atômico é representado por uma combinação linear de gaussianas, mas a quantidade de termos requeridos para que a descrição seja exata é uma quantidade não finita. Para que seja possível realizar implementações computacionais é necessário utilizar um número finito de termos para descrever

esses orbitais, e essa quantidade tem relação direta com a energia de correlação eletrônica dada pela Equação (2-13). Para construir uma função de base, especifica-se a quantidade de termos que irão compor a combinação linear. Para tanto, a notação utilizada é a seguinte: $Xs Yp Zd$ onde, X , Y e Z são números naturais, enquanto s , p e d são os orbitais atômicos. Porém, como dito anteriormente, a especificação desses valores está diretamente relacionada com a energia de correlação eletrônica, que deve ser a mínima possível. Resumidamente, foram apresentados dois desafios para construir funções de base:

- obter boas parametrizações;
- alocar a quantidade correta de primitivas para representar os orbitais atômicos.

No entanto, existe outra grande barreira, a definição do intervalo que contém boas soluções. Essa questão é difícil de ser resolvida. Para que fique clara a dificuldade de realizar tal tarefa, exemplos de três soluções aceitáveis para a configuração $21s 11p$ para o átomo de Ne são mostradas na Tabela 4-1. Nessa tabela é mostrado o conjunto de parâmetros que correspondem aos expoentes das primitivas gaussianas.

Tabela 4-1 Exemplo de parametrizações de funções de base para o Ne .

<i>a)</i>		<i>b)</i>		<i>c)</i>	
<i>s</i>	<i>p</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>s</i>	<i>p</i>
0.228550	0.146607	0.220998	0.140324	0.223398	0.142445
0.504595	0.341639	0.485294	0.326410	0.487337	0.327391
1.114048	0.796124	1.065666	0.759268	1.063112	0.752466
2.459603	1.855214	2.340115	1.766146	2.319148	1.729444
5.430331	4.323218	5.138699	4.108262	5.059158	3.974902
11.989125	10.074425	11.284160	9.556294	11.036412	9.135793
26.469682	23.476502	24.779086	22.229050	24.075627	20.997429
58.439966	54.707456	54.412832	51.707353	52.520313	48.259852
129.024202	127.485164	119.486094	133.753693	114.571605	110.918977
284.860618	297.079565	262.381618	311.687162	249.934779	254.169152
628.917445	692.286578	576.168412	726.326763	545.225789	952.604679
1388.528733		1265.218356		1189.394936	
3065.604329		2778.315256		2594.632067	
6768.264625		6100.951368		5660.117892	
14943.026274		13397.186484		12347.390201	

32991.327405		40215.187429		35411.786653	
72838.504330		89000.743268		77901.462052	
160813.405534		196968.677969		171373.386192	
355045.063558		435913.888768		807259.131163	
783871.199904		964726.576733		1825564.842770	

Como pode ser observado, o menor intervalo que contém todas as soluções apresentadas é o intervalo $[0.142445 \ 1825564.842770]$ e essas soluções provavelmente não são ótimos globais, mas são boas soluções. Ao mesmo tempo em que não há uma metodologia bem definida para especificar o espaço de busca no qual se encontram boas soluções, não é muito difícil observar que a ordem de grandeza do tamanho do espaço de busca é elevada, o que torna essa questão um pouco mais difícil de ser resolvida.

Para ilustrar o tamanho do espaço de busca para o caso da parametrização de funções de base, suponha que a solução esteja contida no intervalo $[X_0 \ X_1]$ e que esse represente a solução para uma função de base que esteja configurada da seguinte forma $Xs \ Yp \ Zd$ e que seja requisitada apenas uma precisão de w casas decimais. A dimensão do espaço de busca nesse caso é $X+Y+Z$, ou seja, a representação da solução é dada por um vetor de $X+Y+Z$ dimensões. O número de pontos admitidos como soluções válidas, caso o espaço apenas contivesse soluções válidas, é dado pela Equação (4-1) e, para o caso em que a configuração da base é também variável, é dado pela Equação (4-2).

$$EB = [(X_1 - X_0) * 10^w]^{X+Y+Z} \quad (4-1)$$

$$EB = XYZ[(X_1 - X_0) * 10^w]^{X+Y+Z} \quad (4-2)$$

onde,

EB é o número de elementos contidos no espaço de busca;

X_1 é o valor máximo que pode ser assumido pelo expoente da base;

X_0 é o valor mínimo que pode ser assumido pelo expoente da base;

X, Y e Z são os números de termos utilizados para a representação de cada orbital.

Outro fato que contribui para que o problema se torne mais complexo é que o espaço de busca não é convexo, pois nem todos os pontos do espaço

representam soluções válidas. Como o domínio não é convexo, a função custo também não pode ser convexa sobre o domínio.

4.2.

Construção de funções de base por Algoritmos Evolucionários

A otimização evolucionária é uma técnica que emprega algoritmos evolutivos para resolver problemas de alta complexidade, como por exemplo, localizar mínimos globais em funções não-convexas. Quando essa técnica é aplicada com a finalidade de realizar a construção de algo, tem-se a origem do projeto evolucionário.

Algoritmos Evolucionários poderão ser utilizados sempre que houver uma forma de mensurar a qualidade de uma solução proposta. Sendo assim, o mesmo algoritmo pode ser utilizado sem que seja necessária a formulação de novos procedimentos de otimização, e é possível reutilizar o otimizador para resolver problemas diferentes, sendo apenas necessárias as devidas mudanças na função objetivo.

Construir funções de base nada mais é do que resolver um problema de otimização cuja função objetivo é o cálculo da energia associada à função de onda descrita pela combinação linear das primitivas gaussianas.

A aplicação de Algoritmos Evolucionários para resolver problemas de otimização cujo domínio seja real é simples, uma vez que o algoritmo em questão possui representação direta no domínio do problema. Mais especificamente, cada dimensão do espaço de busca é associada a um gene de um indivíduo da população do algoritmo evolutivo. Para o caso de funções de base, pode ser dito que ocorreu uma parametrização direta.

A grande questão no caso das funções de base é que o espaço de busca grande demais e a aplicação direta do algoritmo evolucionário pode não ser bem sucedida. Para contornar esse problema, é possível recorrer a artifícios que podem ser considerados formas indiretas de realizar parametrizações. Esses artifícios são empregados para codificar e decodificar soluções apresentadas pelo algoritmo evolutivo. Portanto, é possível afirmar que o sucesso da aplicação de um algoritmo evolutivo está relacionado com a forma que os cromossomos

representam as soluções. Normalmente, a busca é feita pelo logaritmo natural do parâmetro, e não pelo parâmetro.

Para que sejam obtidos os expoentes das gaussianas utilizadas como funções de base, é uma prática comum, desde a década de 1970, a utilização de séries como, por exemplo, *Well Tempered* e *Even-Tempered*, e outras funções paramétricas para gerar conjuntos de coeficientes. No entanto, não é intuitiva a escolha da família de funções mais adequadas para gerar os expoentes das primitivas gaussianas.

O grande incentivo para que sejam utilizadas funções paramétricas na construção de funções de base é a redução significativa do número de parâmetros a serem otimizados, o que diminui, por exemplo, a complexidade do espaço de busca e o esforço computacional exigido pelo algoritmo de otimização. No entanto, esse artifício também pode gerar resultados imprecisos ou procedimentos ineficazes.

A primeira questão a ser respondida, quando é utilizada a Computação Evolucionária, está é a escolha do paradigma a ser utilizado, ou seja, é de fundamental importância a escolha do tipo de Algoritmo Evolutivo a ser utilizado. Como já mencionado, AGs clássicos podem apresentar certas desvantagens em relação aos Algoritmos Genéticos com Inspiração Quântica.

As abordagens discutidas para se realizar a construção de funções de base neste trabalho são: o método da coordenada geradora; a neuro-evolução; o Caos Polinomial; as expansões polinomiais de quarto e quinto grau; a otimização completa do conjunto de base; e a aplicação de algoritmos co-evolucionários. Os detalhes de cada uma das abordagens serão discutidos nas próximas seções.

A construção de funções por Algoritmos Evolucionários (AEs), independentemente se utilizar de funções paramétricas, é ilustrada pelo fluxograma apresentado na Figura 4-1. O projeto de funções de bases pelas metodologias propostas é iniciado com a parametrização do AE, AGs convencionais ou com inspiração quântica, seguida da configuração do simulador. A evolução do algoritmo consiste da geração dos indivíduos de acordo com as configurações especificadas e posterior decodificação desses indivíduos segundo critérios previamente especificados. Uma vez que o indivíduo é decodificado, é feita a simulação da função de base representada pelo mesmo, e por último é feita

a atribuição da sua aptidão, ou seja, é associada ao indivíduo a energia referente à simulação da base.

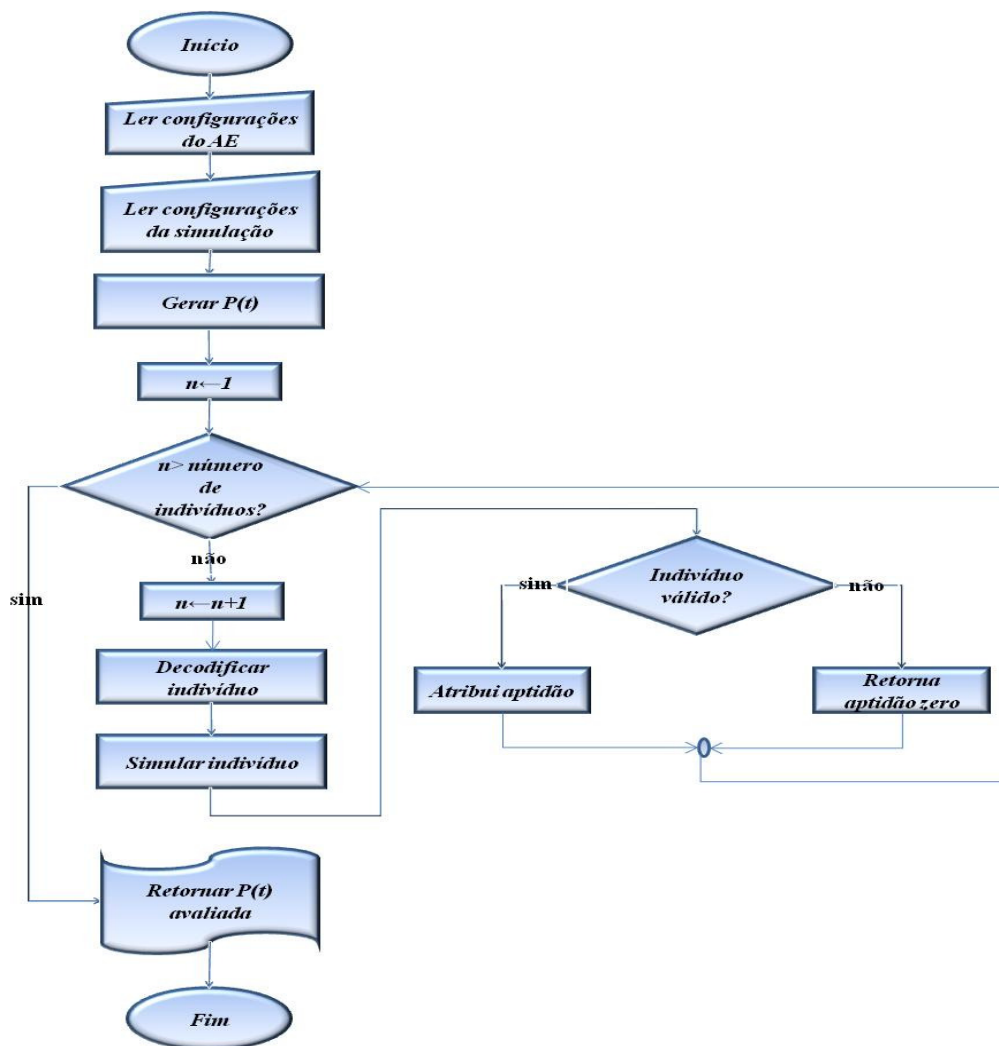


Figura 4-1 Fluxograma da construção de funções de base por Algoritmos Evolucionários.

A utilização de computação evolucionária possibilita mais do que a otimização de parâmetros. Pois, o algoritmo otimizador pode resolver com facilidade problemas cujo domínio seja um espaço inteiro e um contínuo ao mesmo tempo. Dessa forma, é possível especificar o número de funções Gaussianas que irão ser combinadas para representar cada orbital atômico. Essa característica também torna possível a redução de funções de base. Para resolver

esse problema, classificado como problema de programação mista², são aplicados algoritmos co-evolucionários, pois além de especificar o número de termos da combinação linear, também conseguem boas parametrizações para os coeficientes dos termos utilizados para representar cada orbital.

4.2.1.

Otimização simultânea de todos os coeficientes

Nesse tipo de abordagem é proposta uma forma de otimizar cada um dos expoentes. Assim, a quantidade de parâmetros a serem otimizados é o número de termos presentes na função de base. Para um orbital com N expoentes, a representação do cromossomo será definida da seguinte forma:

$$\text{cromossomo} = [\alpha_0 \Delta_1 \Delta_2 \Delta_3 \dots \Delta_n] \quad (4-3)$$

onde α é o expoente inicial, com valor no intervalo de 0 a 1 e Δ_i o fator de multiplicação para o novo expoente, no intervalo $[\min \max]$. Logo, o valor do i -ésimo expoente é dado pela Equação (4-4).

$$\alpha_i = \alpha_{i-1} * \Delta_i \quad (4-4)$$

4.2.2.

Redes Neurais e Neuro-evolução aplicados à síntese de funções de base

Nos últimos anos, foram realizados grandes avanços na identificação de processos e sistemas não-lineares com a utilização de modelos provenientes da inteligência computacional.

Nessa área destacam-se os modelos obtidos a partir de regras (Lógica Difusa) e, principalmente, os que utilizam funções de ativação (Redes Neurais).

Na visão da inteligência computacional, uma rede neural é composta de camadas de unidades processadoras interconectadas através de pesos e conhecidas por neurônios. Um sinal ao passar por um neurônio sofre uma transformação, em geral não-linear, aplicada por uma função de ativação. As Redes Neurais mais utilizadas são as do tipo *feedforward*. Esse tipo de rede normalmente pode ser representada como mostra a Figura 4-2.

² Denomina-se programação mista, um problema de otimização cuja função custo possui variáveis contínuas e discretas.

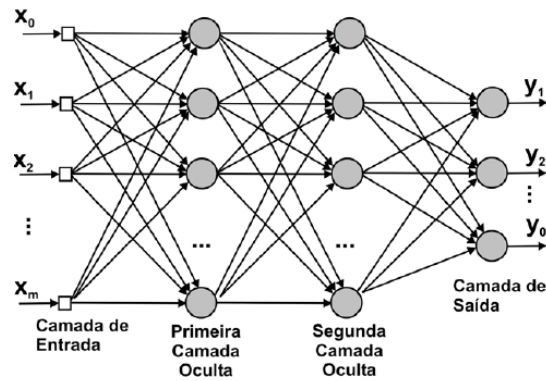


Figura 4-2 Rede neural tipo *feed forward*.

Tal arquitetura caracteriza-se por um processamento de informações dividido em camadas. Conforme demonstrado (CYBENKO, 1990), é possível aproximar qualquer função contínua com redes compostas de duas camadas: uma intermediária e uma de saída. Nesse caso, as redes *feedforward* que possuem uma saída e uma camada intermediária, podem ser descritas como:

$$z = g\left(\sum_{i=1}^N w_i \cdot g\left(\sum_{j=1}^M \alpha_{i,j} \cdot x_j + b_i\right)\right) + b \quad (4-5)$$

Onde:

N, M: são os números de neurônios da camada intermediária e de variáveis de entrada, respectivamente;

z: valor de saída;

w_i e $\alpha_{i,j}$: pesos da camada de saída e entrada, respectivamente ($i=1,\dots,N$ ($j=1,\dots,M$)).

b_i e b : bias da camada intermediária ($i=1,\dots,N$) e da camada de saída;

g: mapeamento não-linear. Alguns dos mais utilizados são a função sigmóide e a tangente hiperbólica;

$X = [x_1, x_2 \dots x_M]^T$: vetor de variáveis de entrada;

Dessa forma, cabe a utilização de funções da forma sugerida pela equação (4-5), pois segundo (CYBENKO, 1990) e (HAYKIN, 2001), esta forma funcional tem capacidade de aproximar um conjunto bastante grande de funções diferenciáveis e contínuas.

A utilização de Redes Neurais para sintetizar funções de base difere das formas mais comuns de suas aplicações em outros contextos, pois é realizado um procedimento, ao qual se poderia chamar de Neuro-Evolução fracamente supervisionada. Baseados em Algoritmos Evolucionários, são feitos ajustes dos

pesos, isto é, dos parâmetros da rede neural, para que seja efetuada a minimização do sistema em questão. Essa abordagem neuro genética pode ser entendida e utilizada para outros problemas de otimização.

É possível utilizar Redes Neurais como séries³, uma vez que uma rede neural é um aproximador universal de funções. Para tanto, basta que a função descrita pela rede neural esteja distante de um limiar \mathcal{E} da função que gera o vetor de coeficientes ótimos para as funções de base.

Dessa forma, é possível aproximar a função que rege a dinâmica da série responsável por gerar o conjunto de parâmetros ótimos para as funções gaussianas utilizadas como funções de base. Abaixo é enunciado o conceito de aproximador.

Seja $f: \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}^n$ uma função, seja $x \in \mathfrak{R}^m$ e $\varepsilon \in \mathfrak{R}$. É dito que f^* é um aproximador de f em x se $\|f^* - f\| < \varepsilon$.

Para que seja possível utilizar uma rede neural como uma série que gera coeficientes para funções de base, são localizados n pontos na imagem da função representada pela rede neural e são adotados como conjunto solução. Esse processo é considerado como decodificação do cromossomo no algoritmo neuro-evolutivo. Outro aspecto importante é que os valores de entrada apresentados a rede neural sempre estão contidos no intervalo $[-1 \ 1]$. Isso é feito através da normalização dos valores possíveis da entrada da rede.

A busca realizada pelo algoritmo evolutivo é em um conjunto de funções. Para que seja possível realizar essa busca, são realizados três passos: a) faz-se a transformação de um indivíduo da população do algoritmo evolutivo em uma rede neural; b) são apresentados valores entre o intervalo contidos no intervalo $[-1 \ 1]$ a rede neural, e c) são registrados os valores da saída rede neural em um vetor que será a solução avaliada pelo simulador. A Figura 4-3 mostra como ocorre o processo de decodificação do cromossomo pelo algoritmo evolutivo.

³ Uma série pode ser modelada como uma função, que está definida num domínio que é um conjunto bem ordenado e o contradomínio é o conjunto dos reais ou complexos.

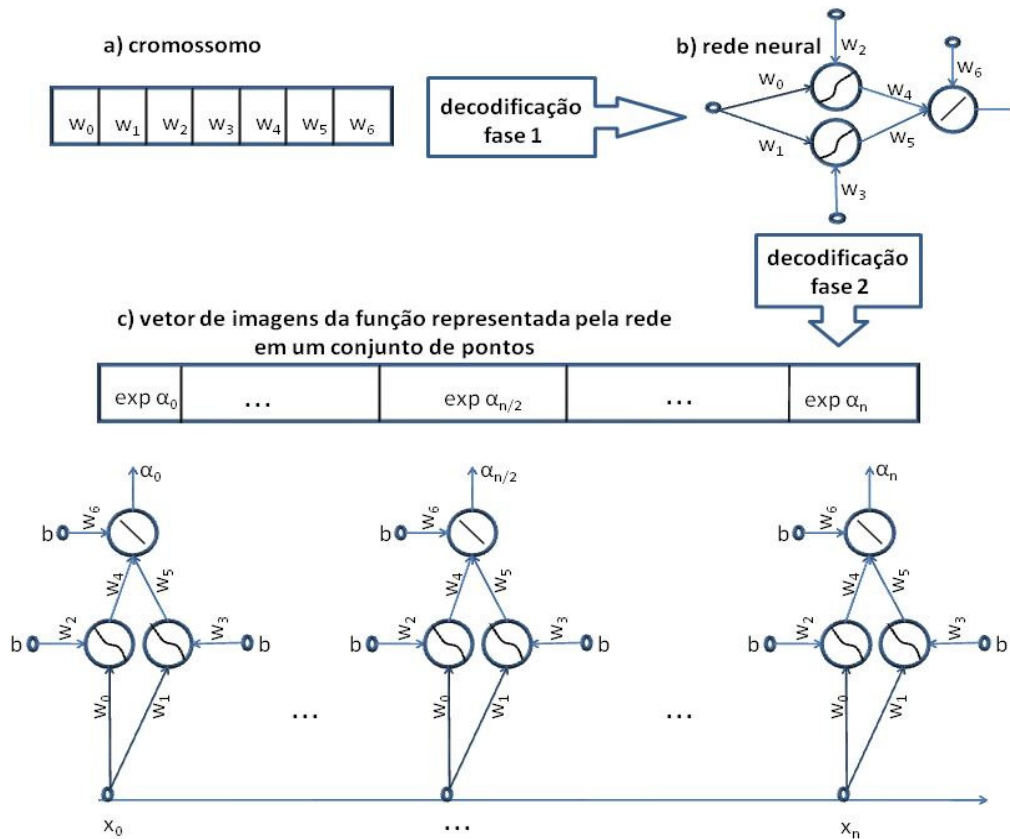


Figura 4-3 Decodificação do cromossomo utilizado na neuro-evolução.

O resultado do procedimento adotado é uma variação de séries geradoras de coeficientes em função de valores numéricos dados pelo cromossomo apresentado pelo algoritmo evolutivo. Na Figura 4-4 são mostradas duas curvas que representam conjuntos dos logaritmos de 12 e 18 valores utilizados como coeficientes de funções de base e outra que simboliza 20 valores numéricos arbitrários. Mostra-se nessa figura uma correspondência entre a variação da família a qual pertence a função e os coeficientes das primitivas. Essa variação ocorre por que são consideradas as imagens das funções, que se alteram para um domínio fixo, uma vez que a função é o objeto de variação.

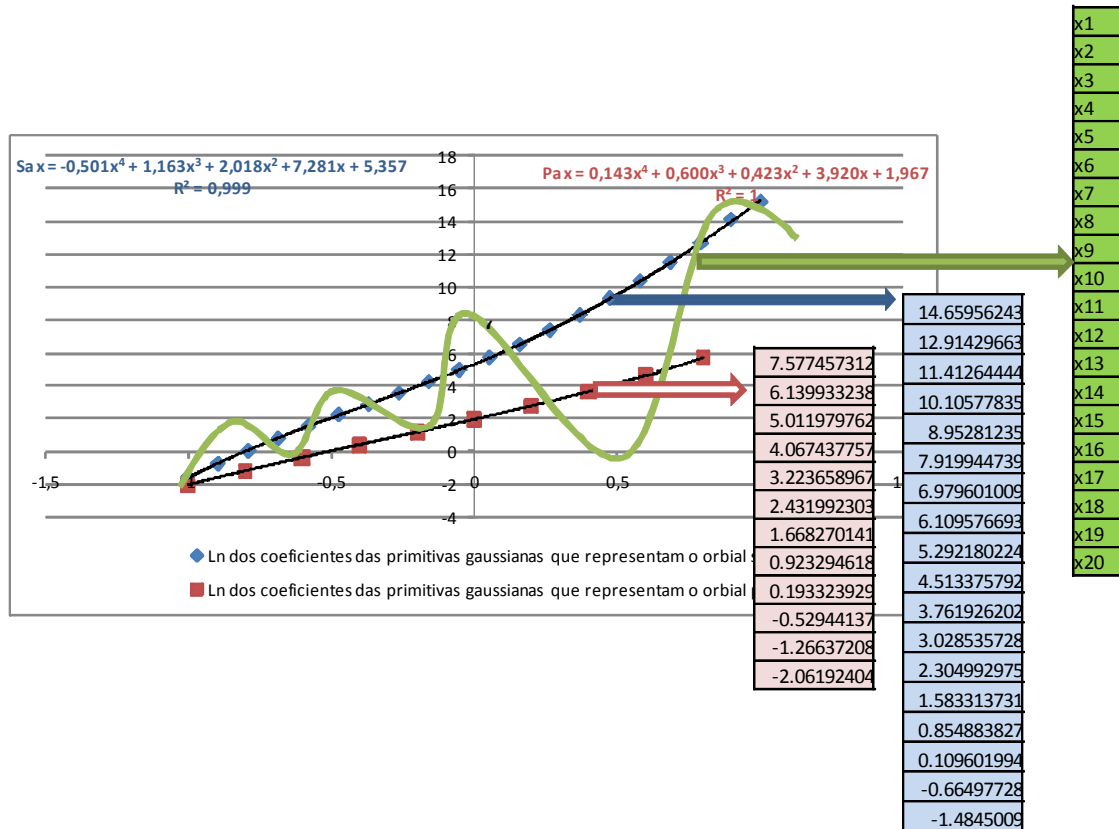


Figura 4-4 Curvas que representam séries utilizadas para gerar coeficientes.

4.2.3.

Expansões em Caos Polinomial aplicados à síntese de funções de base

A expansão em caos polinomial é uma técnica de expansão de funções em termos de polinômios ortogonais, provenientes da resolução da equação de *Sturm Liouville* (DUNHAM, 2004), (REFAAT, 2006), (THEODORE, 1978).

Como já dito anteriormente são propostas na literatura diversas séries para gerar conjuntos de coeficientes. No entanto, a fórmula que rege a dinâmica do comportamento da série que gera o conjunto de parâmetros ótimos não é conhecida. Em outras palavras, pode-se dizer que uma série de valores numéricos é uma função que pode ser aproximada por diversas técnicas. Dessa forma, propõe-se a expansão em caos polinomial da série em conjunto com a utilização de Algoritmos Evolutivos. O papel dos Algoritmos Evolutivos nesse caso é achar a expansão que mais se aproxima da série que gera os coeficientes para as funções gaussianas.

Segundo (BUTKOV, 1978), é possível desenvolver uma função bem comportada⁴ $f(x)$ em uma série de funções características, normalmente tomadas como ortogonais. Exemplo de expansões são as séries de *Fourrier*, de *Fourrier-Legendre* e de *Fourrier-Bessel* dentre outras. Dessa forma, uma função arbitrária bem comportada $f(x)$ pode ser representada pela Equação 4-6.

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (4-6)$$

c_n coeficientes da expansão

$\psi_n(x)$ base no espaço das funções

Como a função que gera o logaritmo natural dos coeficientes das funções de base, pode ser expandida em uma série de polinômios, podemos utilizar o conjunto de polinômios de *Hermite*, *Legendre*, *ChebShev*, *Laguerre* como base para a expansão a ser realizada. Assim, a série de logaritmos naturais dos coeficientes primitivas pode ser modelada pela equação (4-7).

$$\ln \alpha_j = \sum_{k=0}^{kmax} C_k \psi_k \left(\frac{2j-2}{N_{prim}-1} - 1 \right) \quad (4-7)$$

Onde,

α_j é o coeficiente da j -ésima gaussiana;

N_{prim} é o número de primitivas;

C_k é o coeficiente da combinação linear;

$\psi_k(\cdot)$ é o polinômio escolhido de k -ésima ordem.

Para que seja empregada essa técnica, é necessário supor que a função que gera os coeficientes das funções de base é uma função bem comportada. O termo bem comportada, nesse contexto, especifica que a função seja quadrado integrável e continuamente diferenciável em todos os pontos.

⁴ Defini-se nesse contexto, uma função bem comportada como uma função que seja contínua e seu quadrado seja integrável.

A decodificação do cromossomo nesse caso segue duas etapas e é feita da seguinte forma: associa-se cada gene do indivíduo a um coeficiente da combinação linear dos polinômios, e é calculado o valor da função resultante para cada elemento do conjunto contido no intervalo [-1 1], o conjunto de valores obtidos é adotado como solução e é simulado. A Figura 4-5 demonstra a realização do processo.

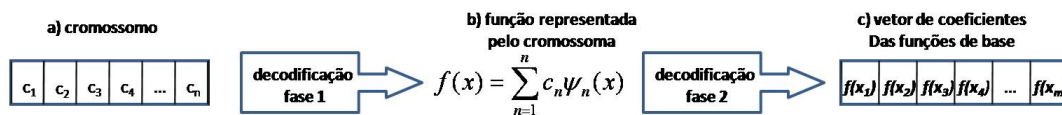


Figura 4-5 Decodificação do cromossomo utilizado na expansão em caos polinomial.

4.2.4. Expansões polinomiais aplicadas à síntese de funções de base

A aplicação de expansões polinomiais já é uma técnica difundida desde 1993 quando proposta por (KLUBOWKI, 1993). Essa técnica emprega polinômios de grau n para gerar os coeficientes das funções de base. O diferencial deste trabalho é a aplicação de algoritmos evolutivos para efetuar a parametrização dos polinômios em função do cálculo da energia fornecida pelas funções de base construídas. Assim, o melhor polinômio obtido será o que fornecer o conjunto de coeficientes que proporcionar a menor energia para uma dada função de base. O processo de decodificação pelo algoritmo evolutivo é descrito da Figura 4-6. Novamente a decodificação é feita em duas etapas. A transformação do cromossomo em um polinômio de grau n; aqui, são apresentados aos polinômios números contidos no intervalo [-1 1], o resultado desse cálculo é posto em um vetor que é avaliado pela função objetivo.

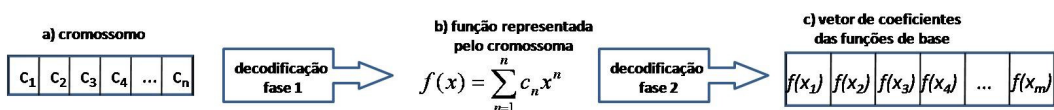


Figura 4-6 Decodificação do cromossomo utilizado em expansões polinomiais.

4.3.

Síntese de funções de base por algoritmos co-evolucionários com inspiração quântica

Alguns problemas de programação não-linear apresentam características adicionais, tais como, dependência entre as variáveis, e isso pode tornar o problema em questão mais complicado de ser resolvido.

Existem duas razões principais pelas quais Algoritmos Evolucionários convencionais não são totalmente adequados para resolver este tipo de problema. Em primeiro lugar, os AGs convencionais impedem, em longo prazo, a preservação de certos componentes da solução, pois, por estarem codificados por completo em um indivíduo, eles são avaliados como um todo e apenas os subcomponentes que pertencem a indivíduos com avaliações altas serão preservados. Em segundo lugar, o fato da representação estar relacionada a uma solução completa e por não haver interações entre os membros da população, não existe pressão evolucionária para a ocorrência de co-adaptação, ou seja, não existe pressão para a adaptação de um subcomponente dada à ocorrência de uma mudança em outro subcomponente (CRUZ *et al*, 2006).

No modelo co-evolucionário, duas ou mais espécies formam um ecossistema. Como na natureza, as espécies são geneticamente isoladas, isto é, cada indivíduo pode somente se reproduzir juntamente com outro indivíduo da mesma espécie. Isto é obtido simplesmente isolando cada espécie em uma população separada. As diferentes espécies somente interagem umas com as outras através de um domínio compartilhado e possuem uma relação de cooperação.

Nesse trabalho é empregado o conceito de co-evolução cooperativa, inspirada na definição de simbiose⁵. Na co-evolução cooperativa, duas ou mais espécies interagem e colaboram para a evolução uma da outra através de um modelo domínio⁶. Nesse modelo, para que as soluções possam ser devidamente avaliadas, essas são montadas a partir da participação de todas as espécies

⁵ Simbiose é uma relação mutuamente vantajosa entre dois ou mais organismos vivos de espécies diferentes.

⁶ Um modelo domínio é um mecanismo que constrói uma solução a partir da junção de vários cromossomos, segundo um conjunto de regras pré-estabelecidas.

envolvidas. A montagem da solução é feita concatenando os cromossomos de cada espécie, como é mostrado na Figura 4-7.

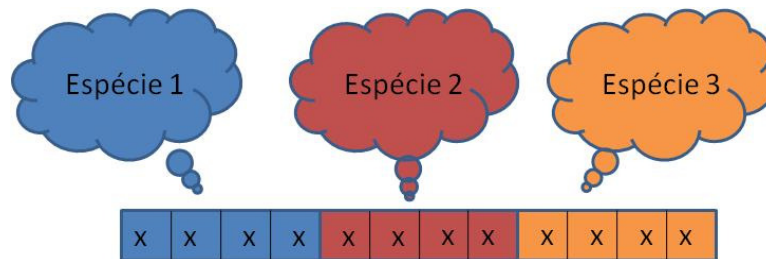


Figura 4-7 Colaboração de vários indivíduos compondo um cromossomo.

Apesar de serem mostradas apenas três espécies neste modelo, o mesmo pode ser usado para n espécies diferentes. Cada espécie evolui em sua própria população e se adapta ao ambiente através de repetidas aplicações do algoritmo evolucionário. Mas, o modelo proposto utiliza esquema de evolução proposto em (CRUZ *et al*, 2005) para cada espécie, conforme discutido detalhadamente no capítulo 3.

A interação entre as espécies no modelo cooperativo é feita seguindo a seguinte sequência de passos:

- 1) Seleciona-se o melhor indivíduo da população i ;
- 2) Formam-se conjuntos de indivíduos concatenando todos os indivíduos, colaboradores, das demais populações como ilustrado pela Figura 4-8;
- 3) Posteriormente, o indivíduo selecionado no passo um é concatenado com todos os indivíduos formados no passo dois;
- 4) As soluções são avaliadas e as aptidões são atribuídas aos indivíduos construídos no passo dois;
- 5) O processo é iterado e executado até todos os indivíduos terem sido avaliados.

O modelo co-evolucionário cooperativo genérico com inspiração quântica é ilustrado na Figura 4-8.

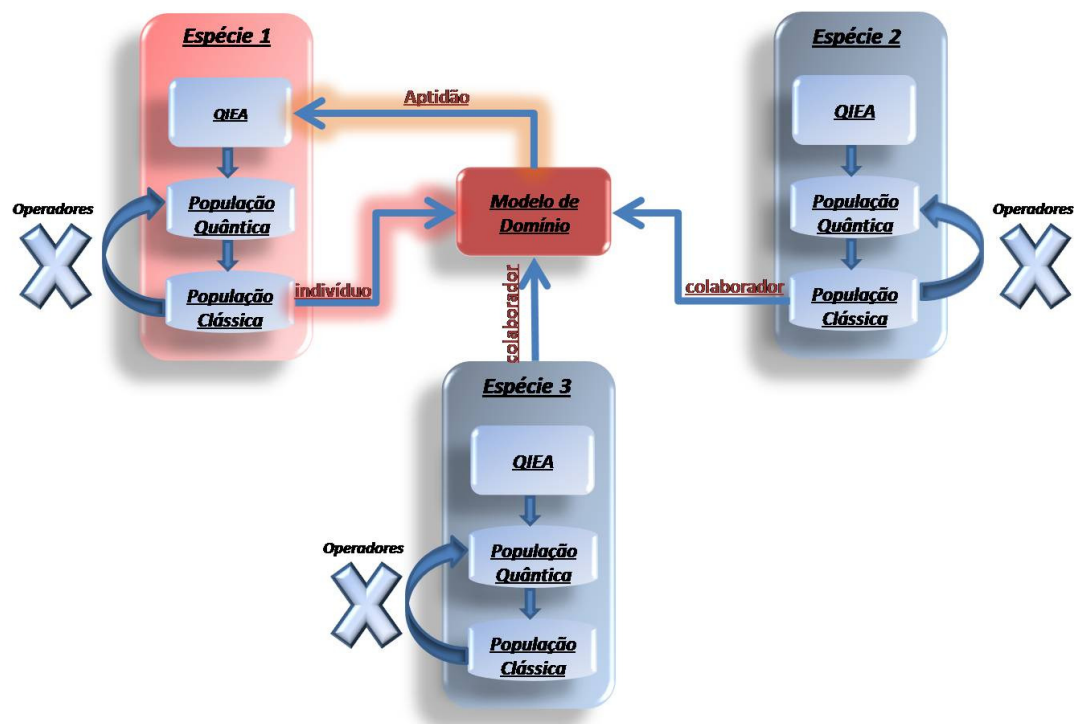


Figura 4-8 Esquema de co-evolução empregando três espécies.

A dinâmica de um processo co-evolutivo conduz a pontos com características especiais. Em (BUCCI, 2007) é mostrado que esses pontos podem ser caracterizados como equilíbrios de *Nash*.

A construção completa de uma função de base é feita realizando-se duas tarefas: a parametrização das primitivas gaussianas e as suas alocações entre os diversos orbitais. Como essas duas tarefas são diretamente relacionadas, cabe a utilização de algoritmos co-evolucionários.

4.4.

Otimização multiobjetivos aplicada à construção de funções de base

Uma ferramenta completa para construir funções de base seria concebida se acaso existisse uma ferramenta capaz de realizar parametrizações, distribuir as primitivas gaussianas da melhor forma possível e minimizasse a quantidade de termos a ser utilizada.

A minimização da quantidade de termos é uma tarefa difícil de ser realizada, pois teoricamente quanto mais funções de base melhor será a descrição do orbital atômico em questão. Então, tem-se a seguinte questão: qual é a

quantidade de termos necessários para representar um orbital atômico? Resposta, infinitos. Porém, como já mencionado não se pode representar uma quantidade infinita computacionalmente. Mas, cabe aqui uma reformulação do questionamento para que essa questão seja um problema com resposta computacionalmente viável. Transforma-se então, a pergunta anterior nessa outra: qual é a quantidade de termos necessários para representar um orbital atômico de um sistema com energia de correlação eletrônica diferente de zero? Resposta, uma quantidade finita, mas indeterminada. Essa quantidade, apesar de finita, apenas pode ser encontrada após ser estabelecida uma meta.

Dessa forma, é possível formular a questão de como projetar funções de base como um problema de otimização multicritério ou multiobjetivo, onde a variável a ser minimizada é a distância entre a energia de correlação eletrônica e a precisão estabelecida. Nesse contexto, podem ser aplicados os conceitos apresentados na seção 3.2.3.

Uma questão que pode ser discutida é a respeito dos métodos que podem ser utilizados. Aqui são discutidos apenas os métodos de distância ao alvo, mas podem ser aplicados outros métodos ou outras formas de realizar a agregação dos objetivos.

Para que seja possível a otimização multiobjetivo é sugerido que todos os critérios tenham pelo menos a mesma ordem de grandeza. Apesar de não ser uma condição necessária, isso pode dificultar a resolução do problema. É dada pela equação (4-8) um forma de se avaliar uma solução por critérios multiobjetivo. Ainda pode ser usar a equação (4-9), ou qualquer uma que tenha condições de mensurar a distância a um objetivo com a mesma finalidade.

$$\xi = \sqrt[n]{\left(\frac{\varepsilon_r - \varepsilon_{AEIQ}}{\varepsilon_r}\right)^n + \left(\frac{Ns_r - Ns_{AEIQ}}{Ns_r}\right)^n + \left(\frac{Np_r - Np_{AEIQ}}{Np_r}\right)^n} \quad (4-8)$$

$$\xi = 100 * \log [1 + \mathit{abs}(\varepsilon_r - \varepsilon_{AEIQ})] + (Ps_{AEIQ} + Pp_{AEIQ})^2 \quad (4-9)$$

ξ é o fator de agregação dos objetivos;

ε_r é a energia de correlação eletrônica exigida;

ε_{AEIQ} é a energia de correlação eletrônica sugerida pelo AEIQ;

Ns_r é o número de termos exigidos para representar orbital s ;

Np_r é o número de termos exigidos para representar orbital p ;

Ns_{AEIQ} é o número de termos sugeridos pelo AEIQ para representar orbital s ;

Np_{AEIQ} é o número de termos sugeridos pelo AEIQ para representar orbital p ;

P_s, P_p é um número percentual de um máximo estabelecido de número de termos para representar os orbitais s e p .