

Conclusões

Esta pesquisa apresenta uma metodologia baseada, em princípios evolucionários, para construir conjuntos de funções de base para simulações atômicas ou moleculares.

Para que fosse possível avaliar o desempenho das metodologias propostas foram construídos conjuntos de primitivas gaussianas para sistemas no estado fundamental dos átomos B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar. Foi avaliado o desempenho de Algoritmos Evolucionários como procedimento utilizado para construir funções de base.

Nesta pesquisa, foram estudadas diferentes formas de gerar parametrizações para primitivas gaussianas, com polinômios comuns, com combinação de polinômios especiais (*Hermite, Laguerre, Legendre, Chebyshev*), e com Redes Neurais do tipo *Multi-Layer Perceptron*.

Foi desenvolvida uma ferramenta que realiza a parametrização e a distribuição, simultaneamente, de funções para representar os orbitais.

O trabalho oferece contribuições dentro do contexto de Algoritmos Evolucionários, pois através de testes sistemáticos foi mais uma vez comprovado, ainda que de forma empírica, que existe vantagem em se utilizar a inspiração em computação quântica para resolver problemas de otimização.

Foram apresentadas também formas de resolver problemas com dimensionalidade elevada através da utilização de funções não-lineares de diversos tipos, como: polinômios, Redes Neurais e séries de polinômios especiais. Essas técnicas naturalmente podem ser aplicadas para a resolução de problemas mais genéricos de programação não-linear.

Foi desenvolvido um modelo co-evolucionário que estende o modelo evolutivo apresentado em (CRUZ *et al*, 2005), (CRUZ, 2007) . Esse modelo viabiliza a nova forma de construir funções de base, aproveitando melhor as alocações de primitivas gaussianas bem parametrizadas entre os orbitais atômicos.

Além disso, com o desenvolvimento desta pesquisa, foram publicadas na literatura novas funções de base que podem ser utilizadas como *benchmarks* para o desenvolvimento de novas metodologias para a construção de conjuntos de funções de base. A aplicação de Algoritmos Evolucionários ao problema de construção de funções de base mostrou-se eficiente e teve como resultado bases que possuem grande qualidade.

Foi ainda construído um sistema que torna viável a busca de funções de base que satisfaçam um critério previamente especificado, no qual o usuário pode definir uma determinada precisão e obter o número mínimo de parâmetros e a respectiva distribuição que aproxima a meta estabelecida.