

Podemos chamar de *malha de elementos finitos*, ou simplesmente *malha*, uma discretização do domínio geométrico em formas menores e simples, tais como triângulos e quadriláteros em 2D e tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides em 3D (Bern e Plassmann, 2000).

As malhas são usadas em diversas áreas. Elas podem servir como representação de terrenos em aplicações de cartografia e geografia. Em computação gráfica, objetos são normalmente reduzidos a malhas de triângulos para serem renderizados. Em animação por computador, malhas de tetraedros e de hexaedros podem ser utilizadas como arcabouço para a movimentação e deformação de objetos e personagens. Além disso, as malhas são o artefato fundamental para a execução de processos de mecânica computacional, como a simulação de fluxo.

As malhas referenciadas nesta dissertação são as malhas de simulação. Elementos formadores destas malhas devem ser convexos e a topologia desta malha é tal que elementos distintos e_i e e_j ($i \neq j$) só podem se interceptar em uma face, uma aresta ou um vértice, ou seja:

$$e_i \cap e_j = \begin{cases} \emptyset \\ \text{vértice} \\ \text{aresta} \\ \text{face} \end{cases} \quad (2-1)$$

Dito de outra forma, dois elementos de malha em uma determinada dimensão só podem se interceptar em uma entidade de dimensão inferior. Quando elementos que se interceptam são de dimensões diferentes (por exemplo, um triângulo e um tetraedro), a dimensão da interseção pode ser igual ao elemento de dimensão inferior (Gattass, Celes Filho e Fonseca, 1991).

Observando a relação de conectividade entre os elementos constituintes da malha, Bern e Plassmann (2000), classificam as malhas em 3 categorias:

1. **Malhas estruturadas.** Neste tipo de malha, os vértices interiores têm topologia similar, ou seja, têm a mesma quantidade de vizinhos (4 em 2D e 6 em 3D). Neste tipo de malha, os vértices estão dispostos numa grade

regular, simplificando o acesso a estes elementos. Malhas estruturadas em 2D são formadas por quadriláteros, e em 3D por hexaedros.

2. **Malhas não estruturadas.** Neste tipo de malha, a quantidade de vizinhos de seus vértices é arbitrariamente variável. São exemplos deste tipo de malha a malha gerada por triangulação de Delaunay em 2D e por tetraedrização de Delaunay em 3D (Berg et al., 2008).
3. **Malhas híbridas.** Estas são formadas por porções de malhas estruturadas ligadas por porções não estruturadas.

A Figura 2.1 mostra exemplos desses tipos de malhas.

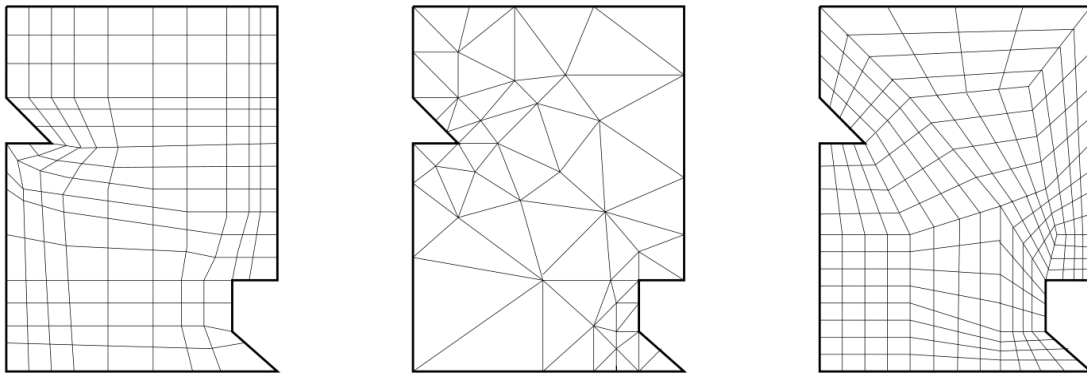


Figura 2.1: Exemplos de malhas. À esquerda, malha estruturada. Ao centro, malha não estruturada. À direita, malha híbrida. Adaptada de (Bern e Plassmann, 2000).

Dependendo do propósito da malha gerada, a qualidade de seus elementos pode ser um fator importante. Simulações de fluxo em 3D dependem de os elementos constituintes terem uma boa qualidade. A qualidade dos elementos da malha são normalmente função de sua regularidade, ou seja, o quanto o elemento é equilátero. Segundo Knupp (2003), normalmente grande esforço é empreendido para criar uma malha inicial de qualidade minimamente aceitável e, na ausência de conhecimento detalhado sobre a solução, o melhor que se tem a fazer é confiar nas propriedades geométricas da malha, acreditando que estas correspondam de alguma forma às necessidades da análise subsequente. Tais métricas destacam a presença de elementos de baixa qualidade para que estes sejam eliminados ou modificados. Uma das formas de se melhorar a qualidade da malha é movendo os seus vértices. Os trabalhos de Hale (2001, 2002) e de Fernandes e Gattass (2009) são exemplos de técnicas que usam o movimento dos vértices para melhorar a qualidade da malha.

2.1

Malhas atômicas

Hale (2001) demonstra uma técnica de geração de malhas de triângulos e de tetraedros usando uma abordagem inspirada em partículas carregadas ou átomos que, ao mesmo tempo, mantém entre si uma distância adequada à densidade de feições de interesse no dado e se posicionam sobre as feições de interesse em si. Naquele trabalho, Hale defende que o processo de análise de imagens inerente à geração de malhas pode ocorrer em três passos:

1. Processar a imagem de forma a ressaltar suas características de interesse;
2. Preencher o espaço com uma malha computacional alinhada às características de interesse;
3. Simular algum processo usando a malha computacional gerada.

No caso em que as feições de interesse da imagem são formadas pelo conjunto de elementos ou pixels que possuem o maior gradiente, os operadores de Sobel podem ser utilizados para ressaltar tais elementos (Gonzales e Woods, 2000).

O método de Hale, batizado de *imagens atômicas*, pode ser computado em três passos:

1. Preencher o espaço ocupado pela imagem com um arranjo pseudo-regular de átomos, de forma que a distância nominal entre um átomo e seus vizinhos varie suavemente de acordo com a densidade de feições de interesse na imagem;
2. Mover os átomos a fim de minimizar uma função potencial total, definida como a média ponderada entre a energia potencial atômica e a energia potencial da imagem;
3. Conectar os átomos usando a triangulação de Delaunay (ou outra) para formar a malha.

Naquele trabalho, cria-se um modelo de interação entre átomos com uma força entre pares dos mesmos, de tal forma que a força total exercida sobre um átomo pelos seus vizinhos é a soma das forças exercidas por cada um deles. A função de força interatômica é definida de forma que átomos muito próximos geram uma força de repulsão (positiva), e átomos distantes, dentro de um limite, geram uma força de atração (negativa).

Seja $d(\mathbf{x})$ a *distância nominal* entre átomos tomando por base a posição $\mathbf{x}$, que é a distância dentro da qual a força varia de repulsiva a atrativa.

A força é definida como função da distância euclidiana $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$ entre átomos nas posições $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ dada pela expressão:

$$f(u) = \begin{cases} \frac{9}{8} - \frac{19}{8}u^2 + \frac{5}{4}u^3, & 0 \leq u < \frac{3}{2} \\ 0, & \frac{3}{2} \leq u, \end{cases} \quad (2-2)$$

onde u é a distância normalizada entre átomos, definida por:

$$u \equiv \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{d(\mathbf{x}_j)}. \quad (2-3)$$

A Figura 2.2 ilustra esta função de força.

O equilíbrio, ou seja, força de módulo igual a zero, ocorre quando pares de átomos têm sua distância normalizada igual a 1. Se $u < 1$, então os átomos se repelem. Se $u > 1$, então os átomos se atraem. O limite dentro do qual se calcula a força entre pares de átomos é $u < 1.5$.

Ao invés de definir um vetor de força em cada posição da imagem, Hale sugere o cálculo de um potencial escalar que, posteriormente, será usado para derivar a força via diferenças finitas. Assim, o potencial escalar é dado por:

$$\phi(u) = \begin{cases} \frac{153}{256} - \frac{9}{8}u + \frac{19}{24}u^3 - \frac{5}{16}u^4, & 0 \leq u < \frac{3}{2} \\ 0, & \frac{3}{2} \leq u. \end{cases} \quad (2-4)$$

A função de potencial escalar $\phi(u)$ é usada para definir o campo potencial atômico dado por:

$$a(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^n \phi \left[\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{d(\mathbf{x}_j)} \right]. \quad (2-5)$$

A Figura 2.2 ilustra a função de potencial atômico.

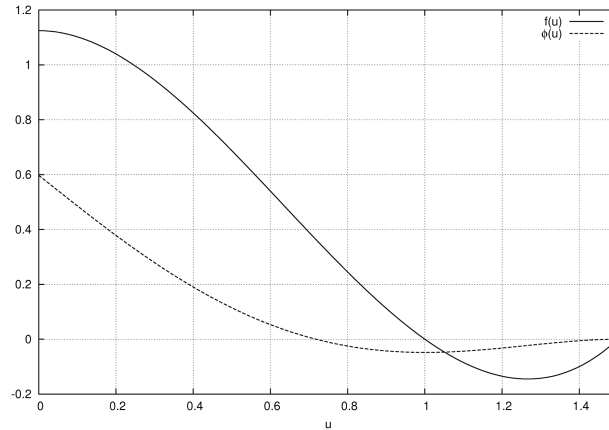


Figura 2.2: Gráfico com as funções de força ($f(u)$) e potencial ($\phi(u)$).

Daí, a energia potencial atômica é definida como:

$$A = A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a(\mathbf{x}_i). \quad (2-6)$$

De forma similar, define-se a energia potencial da imagem como:

$$B = B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sum_{i=1}^n b(\mathbf{x}_i), \quad (2-7)$$

onde cada elemento $b(\mathbf{x})$ corresponde ao campo potencial de imagem na posição $\mathbf{x}$. O campo potencial $b(\mathbf{x})$ é mínimo (-1) nas feições de interesse máximo na imagem ou volume, e máximo (0) nos pixels os voxels de interesse mínimo. Hale sugere um processamento prévio da imagem no intuito de ressaltar a característica de interesse e, assim, o mapeamento entre o valor do pixel e seu campo potencial de imagem é direto.

A movimentação dos átomos ocorre de forma a minimizar a energia potencial total dada por:

$$P = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = (1 - \beta)A + \beta B, \quad (2-8)$$

onde o parâmetro β está no intervalo $[0, 1]$ e pode ser entendido como uma ponderação entre a regularidade da malha (com valor igual a 1) e a acuidade do posicionamento de átomos sobre feições de interesse (com valor 0).

O arranjo inicial dos átomos corresponde às posições dos vértices de estruturas regulares de um cristal (Mello e Cavalcanti, 2000). Esta disposição inicial leva em conta três fatores: (1) minimiza localmente a energia potencial atômica, (2) é regular e (3) é consistente com a função de distância nominal. O algoritmo de otimização da malha fica encarregado, posteriormente, de movimentar os átomos de tal forma que estes fiquem melhor posicionados em relação às feições de interesse no dado, minimizando assim energia potencial de imagem, e mantenham, ainda assim, a regularidade do reticulado.

2.2

Malhas atômicas melhoradas

Esperança, Oliveira e Cavalcanti (2008) evoluem a forma de fazer o posicionamento inicial de átomos proposto em Hale (2001), e sugerem que existe uma ordem intrínseca na colocação de átomos sobre a imagem, ao que se chama de projeção. Neste método, chamado de *improved atomic meshes* ou, em tradução livre, malhas atômicas melhoradas, cada átomo é posicionado conforme um arranjo regular (hexagonal, no caso de imagens) com distância entre os átomos sendo $\sqrt{3}/3$ da distância nominal interatômica. Para cada posição, é verificada numa vizinhança esférica de raio d , a metade da distância nominal interatômica, qual é o ponto da imagem que tem o maior valor em relação às feições de interesse. Cada par formado pela posição inicial do átomo e pela melhor posição na vizinhança deste é colocado numa lista de prioridades ordenados (i) pela distância entre a posição inicial e a melhor posição e (ii) pelo valor na melhor posição. Ordenados todos os pares, um a um, ocorrem

tentativas de projetar cada átomo na melhor posição da vizinhança, para a qual fica reservada uma área de cobertura, variável de acordo com o valor associado do potencial da imagem neste ponto. Desta forma, vários átomos são projetados diretamente sobre as feições de interesse e diversos outros cobrem o restante da imagem, respeitando a densidade de feições, e diminuindo, assim, o valor da energia potencial da imagem em relação à abordagem em Hale (2002).

A movimentação dos átomos segundo o método das malhas atômicas melhoradas é regida por uma formulação modificada de energia potencial. A energia potencial atômica é agora dada por:

$$A = \kappa \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \phi \left[\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{d(\mathbf{x}_j)} \right] \right) + (1 - \kappa) \sum_{i=1}^n \frac{\mathcal{L}(\mathbf{x}_i)}{d(\mathbf{x}_i)}, \quad (2-9)$$

onde o fator $\mathcal{L}(\mathbf{x}_i)$ corresponde às coordenadas Laplacianas do ponto em relação a seus vizinhos de aresta e é dado por

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}_i) = \mathbf{v}_i - \frac{1}{|\mathcal{N}(\mathbf{v}_i)|} \sum_{\mathbf{v}_j \in \mathcal{N}(\mathbf{v}_i)} \mathbf{v}_j, \quad (2-10)$$

onde $\mathcal{N}(\mathbf{v})$ representa a lista dos vizinhos de um vértice na posição $\mathbf{v}$.

O parâmetro κ está no intervalo $[0, 1]$ e é uma ponderação entre a energia potencial atômica original dos trabalhos de Hale (com valor 1) e a energia baseada em coordenadas Laplacianas (com valor 0). O valor sugerido do parâmetro κ , segundo (Esperança, Oliveira e Cavalcanti, 2008) é de 0.7. Assim, a nova formulação de energia potencial atômica tende a aumentar ainda mais a regularidade da malha induzida pelos átomos, embora traga a priori um custo adicional quando da computação da energia potencial total, uma vez que há a necessidade de descobrir a vizinhança de aresta de um átomo.

2.3

Malhas atômicas não determinísticas

Esta seção descreve com detalhes um método proposto para geração de malha de triângulos e tetraedros a partir de um dado sísmico. A versão 2D do método foi tema de um artigo a ser publicado (Fernandes e Gattass, 2009).

2.3.1

Posicionamento inicial dos átomos

A qualidade da malha atômica descrita por Hale depende, como mencionado, do posicionamento entre os átomos, ou seja, da regularidade da malha, e destes átomos em relação à imagem ou volume a ser mapeado, ou seja, a propriedade de o átomo estar posicionado sobre as feições de interesse na imagem ou no volume. As *malhas atômicas melhoradas*

(Esperança, Oliveira e Cavalcanti, 2008) explicitamente posicionam átomos inicialmente sobre as feições de interesse para, depois, cobrir o restante da imagem ou do volume com átomos. Dependendo da quantidade de átomos que se queira posicionar no objeto de estudo, o tempo computacional pode se tornar alto. No capítulo de resultados é feita uma análise empírica de desempenho comparativamente ao método proposto.

O método aqui chamado de *malhas atômicas não determinísticas* tem o mesmo propósito do método das malhas atômicas melhoradas, usando uma forma diferente de posicionamento e movimentação dos átomos, descrito a seguir.

Inicialmente as amostras da imagem ou do volume são transformadas para valores de probabilidade, cuja soma total é 1. As posições para os átomos são sorteadas de acordo com estas probabilidades. Sempre que um átomo é posicionado, ele demarca uma região dentro da qual nenhum novo átomo poderá ser colocado.

O método de seleção ou sorteio das amostras é o das *tabelas-guias*. Devroye (1986) mostra que o desempenho do método das tabelas-guia é superior a de outros métodos de inversão para geração de números aleatórios¹.

Há mais de uma forma de proibir posicionamentos próximos a átomos existentes. Uma delas seria zerando a probabilidade na vizinhança, mas isso acarretaria a reconstrução das tabelas-guias. Optou-se, então, em armazenar estruturas de círculos de descarte para cada átomo posicionado. Desta forma, um insucesso ocorre quando uma nova posição de átomo é sorteada mas está dentro de um dos círculos de descarte.

O método aqui proposto aplica correções gama à imagem original.

A correção gama é uma técnica de correção de intensidades dos sinais das componentes das cores das imagens. Se uma correção gama tem valor maior que 1, a imagem resultante terá sua luminância aumentada; se tem valor menor que 1, a imagem perderá luminância. Tal valor é positivo não nulo. A expressão que descreve a correção gama pode ser dada por

$$S_s = S_e^{1/\gamma},$$

onde S_s e S_e são os sinais de saída e entrada respectivamente. A Figura 2.3 mostra o efeito de aplicação de diferentes valores de correção gama a uma imagem em escala de cinza. A Figura 2.4 mostra o gráfico das correções gama para a sequência de imagens.

Para executar o posicionamento de átomos, inicialmente valores de γ

¹No Apêndice B encontram-se mais detalhes de utilização desta técnica.

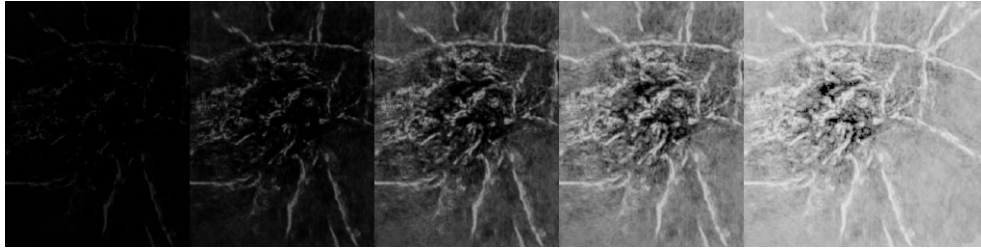


Figura 2.3: Correção gama sobre imagem. Original ao centro, adaptada de (Hale, 2001).

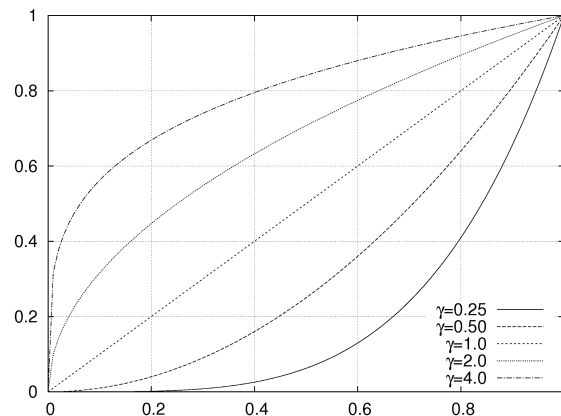


Figura 2.4: Gráfico das correções gama aplicadas às imagens da Figura 2.3

menores que 1, crescentes, são aplicados à imagem original, resultando em imagens cujas feições de interesse (caracterizadas pelas feições mais claras) são ressaltadas. Posteriormente, valores maiores que 1, crescentes, são aplicados à imagem original, uniformizando, gradativamente, a luminância de toda a imagem.

Cada imagem corrigida é transformada em um vetor de probabilidades que serve como entrada para o gerador de números aleatórios baseado em *tabelas-guias*. O resultado de um sorteio usando uma *tabela-guia* é uma posição na imagem, cuja probabilidade é proporcional ao seu valor de feição de interesse após a correção gama. Assim, para cada valor γ e, conseqüentemente, para cada nova *tabela-guia* associada, novos sorteios de posições de átomos são feitos e, quando um limite de insucessos sucessivos em posicionar um novo é atingido, um valor maior γ é utilizado para corrigir a imagem original e repetir o processo de sorteio e posicionamento.

A imagem 2.5 ilustra o processo de fortalecimento e enfraquecimento das feições de interesse quando da aplicação de correções gama com valores crescentes em cada passo.

Este procedimento termina por posicionar mais átomos sobre as feições de interesse, sem deixar de cobrir toda a imagem ou volume, induzindo a

criação de uma malha com vértices alinhados às feições da imagem e, ao mesmo tempo, com elementos (triângulos ou tetraedros) cuja qualidade é adequada a uma malha inicial de simulação. A qualidade dos elementos constituintes de tais malhas é discutida no capítulo de resultados. Na Figura 2.3 utilizou-se os valores 0.25, 0.5, 1.0, 2.0 e 4.0. O posicionamento de átomos sobre as primeiras reforça as feições, e sobre as últimas, tende a posicionar átomos mais uniformemente na área da imagem ainda não coberta.

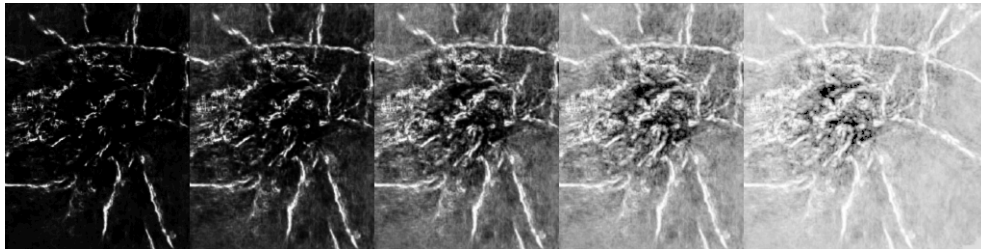


Figura 2.5: Normalização aplicada às imagens com correção gama da Figura 2.3.

A Figura 2.6 resume o algoritmo proposto para posicionamento inicial dos átomos, detalhado em seguida.

Entradas: Uma imagem I com feições de interesse ressaltadas, a quantidade máxima de átomos m a serem posicionados na imagem e quantidade máxima de insucessos sucessivos de posicionamento de um átomo f .

Saída: um conjunto de átomos A

01. Gerar, a partir da imagem de entrada, uma lista de n tabelas-guias T
02. Esvaziar o conjunto de átomos A
03. $pos \leftarrow 1$
04. Enquanto $((pos \leq n) \text{ e } (|A| < m))$, faça:
 05. Seja x a posição correspondente à probabilidade gerada segundo $T[pos]$
 06. Se for possível inserir um átomo na posição x da imagem:
 07. Zerar o contador insucessos
 08. Inserir o átomo em A na posição x reservando espaço ao redor do ponto
 09. Senão:
 10. Incrementar o contador de insucessos
 11. Se o contador de insucessos for maior que f :
 12. $pos \leftarrow pos + 1$
 13. Retorne A

Figura 2.6: Algoritmo para posicionamento de átomos

2.3.2

Otimização da malha gerada

Hale sugere o uso de um otimizador para mover os átomos a fim de minimizar a energia potencial total. Cada rodada de utilização do otimizador é precedida de um novo reposicionamento de todos os átomos, deslocados de até 10% da distância nominal interatômica em relação à posição original. Iterações de otimização ocorrem até que não haja diminuição significativa da energia potencial total. O mesmo processo ocorre em (Esperança, Oliveira e Cavalcanti, 2008), sendo que neste a formulação de energia potencial atômica melhora a regularidade da malha. Agüero (2005) faz uso do método dos gradientes descendentes a fim de minimizar a energia potencial total.

Pode ser necessário aplicar um filtro passa-baixa na imagem, como um gaussiano (Gonzales e Woods, 2000), a fim de criar uma gradação mais suave de posicionamento de átomos e suavizar os vetores de gradiente da imagem.

Dada a natureza não determinística do problema, neste trabalho é proposto que o posicionamento seja feito utilizando um algoritmo genético (Goldberg, 1989).

Algoritmos genéticos (AGs) são algoritmos de busca baseados na mecânica da seleção e da genética naturais (Goldberg, 1989). Uma população de indivíduos, criaturas artificiais, evolui a cada geração. Um AG funciona selecionando os indivíduos que estão melhor adaptados e com eles realizando cruzamentos e mutações, criando uma nova geração a priori melhor adaptada. A avaliação da adaptação é uma função que varia conforme a natureza do problema em questão. Um indivíduo numa população, representado computacionalmente como uma lista de elementos de mesmo tipo, é uma solução completa para o problema de busca ou otimização a cargo de um AG. Tais elementos são os chamados alelos, e são a unidade fundamental de informação de um indivíduo.

O cruzamento é a troca estruturada e aleatória de informação, ou seja, de parte da cadeia de alelos entre indivíduos distintos. Sejam $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ e $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ indivíduos distintos de mesmo comprimento n de cadeia de alelos. Uma posição i ($1 \leq i \leq n$) é aleatoriamente definida, e a partir dela a carga dos indivíduos distintos é trocada, resultando nos indivíduos $A' = \{a_1, a_2, \dots, a_{(i-1)}, b_i, b_{(i+1)}, \dots, b_n\}$ e $B' = \{b_1, b_2, \dots, b_{(i-1)}, a_i, a_{(i+1)}, \dots, a_n\}$.

A mutação equivale à mudança de valor de um ou mais alelos num indivíduo. Seja $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ um indivíduo. Uma posição j ($1 \leq j \leq n$) é aleatoriamente definida e o elemento a_k de A sofre mudança de valor.

Um algoritmo genético, então, funciona tentando criar, a cada iteração

ou geração, uma população de novos indivíduos que herdaram alelos dos melhores indivíduos da geração anterior, e, sobre estes novos indivíduos, realiza cruzamentos e mutações.

Para o problema de otimização da malha de triângulos e tetraedros, cada indivíduo na população de soluções é composto pelas posições de todos os átomos inseridos pelo processo de posicionamento inicial. A cada nova geração, a solução de melhor adequação, isto é, a de menor energia potencial total, é selecionada para dela descenderem os demais indivíduos da nova população de soluções. A evolução ocorre através do cruzamento entre indivíduos e da mutação de indivíduos cruzados.

No contexto deste trabalho, o cruzamento é a troca de posições de um grupo de átomos entre soluções. Átomos são inicialmente identificados, e suas posições são trocadas entre dois indivíduos distintos. É selecionada uma posição de cruzamento, ou seja, até esta posição, os átomos são mantidos e, a partir desta, suas posições são trocadas entre soluções.

Após a realização do cruzamento, um indivíduo ou solução pode sofrer mutação. Neste trabalho, mutação significa movimentação, ou seja, se um átomo deve sofrer mutação, então sua posição deverá ser alterada. A alteração segue a sugestão de Hale de afastar o átomo de sua posição inicial de até 10% da distância nominal interatômica. A direção do movimento pode ser aleatória ou pode seguir o gradiente descendente de energia potencial total, tendo estas duas opções iguais probabilidades de serem escolhidas.

Após realizar um conjunto de cruzamentos entre indivíduos de uma população e sobre estes aplicar mutação, o resultado é um conjunto diferente de soluções, ou de grupos de posicionamento de átomos sobre a imagem. A solução a ser retornada do algoritmo é, como dito, a que tem melhor adequação, ou menor energia potencial total.

Algumas restrições podem ser aplicadas ao algoritmo genético de forma a diminuir seu tempo de resposta. Dentre elas estão o número de gerações consecutivas sem progresso e o número máximo de iterações ou de gerações.

O algoritmo da Figura 2.7 resume o processo de otimização da malha baseada em algoritmo genético.

Entradas: Um conjunto de átomos A , o tamanho da população P , o tamanho máximo do deslocamento aplicado a um átomo Tr_{max} , número máximo de cruzamentos por indivíduo Cr_{max} , número máximo de mutações por indivíduo Mut_{max} , máximo de iterações It_{max} , máximo de iterações sem progresso SP_{max} .

Saída: um conjunto de átomos A' com posicionamento otimizado

01. Criar a primeira geração (corrente) de indivíduos como cópias de A
 02. $it \leftarrow 0$
 03. Para $i \leftarrow 1$ até It_{max} :
 04. Apagar próxima geração
 05. Computar a energia potencial total em cada indivíduo da geração corrente
 06. Selecionar o indivíduo c da geração corrente com menor energia
 07. Adicionar indivíduo selecionado na próxima geração
 08. Para $j \leftarrow 1$ até $P/2$:
 09. Selecionar indivíduos a e b da geração corrente, que não seja o selecionado no passo 06.
 10. $(a', b') \leftarrow \text{cruzamento}(a, b, Cr_{max})$
 11. $a'' \leftarrow \text{mutação}(a', Mut_{max}, Tr_{max})$
 12. $b'' \leftarrow \text{mutação}(b', Mut_{max}, Tr_{max})$
 13. Adicionar a'' e b'' à próxima geração
 14. Selecionar o indivíduo n da próxima geração com menor energia
 15. Se $\text{energia}(n) \leq \text{energia}(c)$:
 16. $it \leftarrow it + 1$
 17. Senão:
 18. $it \leftarrow 0$
 19. Copiar a próxima geração sobre a geração corrente
 20. Se $it \geq SP_{max}$, então saia do laço
 21. Faça $A' \leftarrow n$ e retorne
-

Figura 2.7: Algoritmo para otimização de átomos baseado em algoritmo genético.