

DETERMINAÇÃO DO CAMINHO DE UMA REAÇÃO QUÍMICA POR MEIO DE ALGORITMOS COEVOLUTIVOS

Aluna: Mariana Goulart
Orientador: Marco Aurélio C. Pacheco

Introdução

O *caminho de uma reação química* pode ser entendido como sendo o caminho descrito pelo conjunto de transformações (deformações, torsões, quebras e / ou formações de ligações químicas) pelo qual o(s) reagente(s) de uma reação química passa(m) até que dê(em) origem ao(s) produto(s). Esse caminho é portanto, traçado num hiperespaço em que $n-1$ dimensões correspondem às possíveis deformações moleculares e a n -ésima dimensão corresponde à energia potencial do sistema associado à conformação geométrica determinada por essas deformações. O caminho da reação normalmente corresponde ao caminho de mínima energia (*minimum energy path*, MEP) na hipersuperfície de energia potencial (*potential energy surface*, PES), ligando um mínimo local dessa superfície, correspondente aos reagentes, a outro mínimo local, correspondente aos produtos. Veja a Figura 1. O ponto máximo deste caminho corresponde ao *Estado de Transição* da reação. A obtenção tanto do *caminho da reação*, quanto do *estado de transição* é de fundamental importância para que se compreenda a cinética de uma reação e conseqüentemente se determinar ou mesmo promover (através do desenvolvimento de catalisadores) as condições para que uma reação química ocorra.

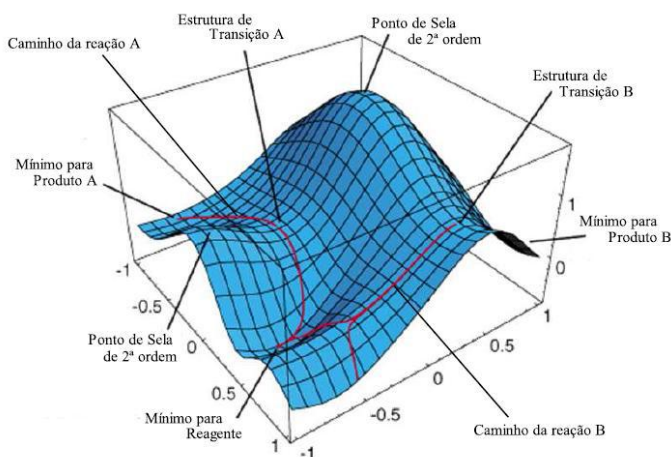


Figure 1 - Caminho de uma Reação Química

Objetivos

Aplicar técnicas de inteligência computacional, mais especificamente algoritmos coevolutivos, para se determinar o caminho aproximado de reações químicas.

Metodologia

Utilizamos algoritmos genéticos [4] coevolutivos [5] para, a partir apenas de informações associadas à geometria dos reagentes e produtos de uma reação, determinar o caminho de mínima energia potencial associado à uma determinada reação química. Os métodos tradicionais normalmente requerem um conhecimento mais aprofundado da reação

química, geralmente necessitando, como entrada, um chute inicial bem próximo da estrutura de transição [1-3].

No estágio atual da pesquisa, a metodologia proposta está sendo testada e aprimorada fazendo-se uso de problemas do tipo benchmark, normalmente utilizados para testar e comparar técnicas e algoritmos propostos para a localização de estruturas de transição ou determinação do caminho de uma reação [2].

Os resultados preliminares são bastante promissores, como podemos observar na Figura 2, em que foi obtida uma excelente aproximação para o caminho da reação, sobre a superfície de Muller-Brown [1]. No momento, estamos buscando aprimorar nosso método, investigando melhorias na função de avaliação utilizada pelo algoritmo coevolutivo. O passo seguinte será a validação da metodologia proposta em reações químicas “reais”, fazendo uso do pacote de química quântica computacional Gaussian [6].

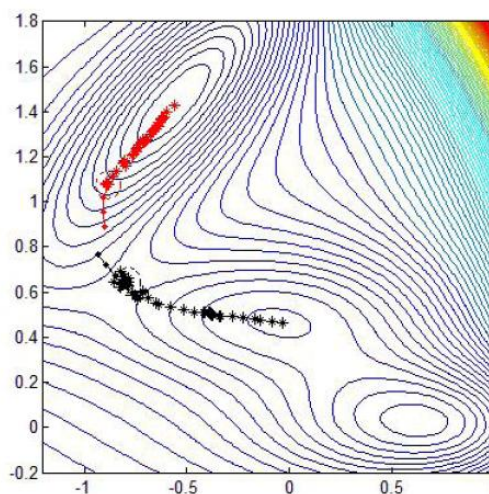


Figure 2 - Resultado obtido com o potencial de Müller-Brown.

Desafios

Diversos desafios surgiram e foram (ou vêm sendo) superados com persistência e dedicação. Pode perceber que a busca pelo conhecimento é uma eterna corrida de obstáculos em que a satisfação não está apenas na linha de chegada (ela existe?), mas sobretudo na superação de cada barreira encontrada no percurso. Dentre os principais obstáculos encontrados até aqui, poderia citar:

- Estudo de conceitos avançados de Química, relacionados com a cinética das reações químicas, como: a Superfície de Energia Potencial (PES) e as Estruturas e os Estados de Transição das Reações Químicas;
- Conceitos matemáticos e de Álgebra Linear: Pontos de Cela de n -ésima ordem, a matriz Hessiana, o cálculo de Autovalores e Autovetores da Hessiana de uma estrutura molecular como forma de caracterizá-la e identificar sua posição na PES;
- Compreensão de conceitos de Inteligência Computacional, como por exemplo os Algoritmos Genéticos e Coevolução; e
- Programação científica no ambiente Matlab.

Conclusões

A metodologia proposta se mostrou bastante promissora em problemas do tipo *benchmark*. Seu principal atrativo é a possibilidade de se obter o caminho de uma reação química a partir de um conjunto mínimo de informações (conformações moleculares dos reagentes e produtos) acerca da mesma.

Referências

- [1] - Young, D. C. "Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems", Wiley-Interscience, 2001.
- [2] - Cramer, C. J. "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley-Interscience, 2004.
- [3] - Lewars, E. "Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics", Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [4] - Michalewicz, Z. "Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs", Springer, 1992.
- [5]- De Jong, K. "Evolutionary Computation: A Unified Approach", MIT Press, 2006.
- [6] - Frisch, M. J. et al. "Gaussian 03, Revision C.02", 2003.