

RESUMO

COSTA, Elan Gonçalves. *Otimização de estrutura de dendrímeros*. 87 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Eletrônica) - Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, 2021.

Neste trabalho, o foco dos estudos está nos dendrímeros conhecidos como PAMAM, cujas aplicações vão desde eluição de fármacos a encapsulação molecular e terapia gênica, e desde blocos de construção para nanoestruturas até micelas como agentes de descontaminação. Este trabalho desenvolve alguns métodos que substituem os utilizados originalmente no programa PyPolyBuilder, visando diminuir o tempo de execução e melhorar as moléculas geradas ao final do programa, tornando-as maiores e com um formato mais esférico. Para desenvolver os métodos, as simulações foram realizadas usando-se o PAMAM. Primeiramente, o método que gera a matriz-Z foi melhorado. Esse método era o gargalo computacional do programa e, por ser uma das primeiras etapas do mesmo, ocasionava grande dificuldade em se realizar testes nas etapas seguintes. Em sequência, foi desenvolvida uma nova função de aptidão para a otimização global. Ela possibilita um maior controle da forma do dendrímero que é gerado nessa etapa do programa. E, finalmente, com a intenção de melhorar os indivíduos gerados pela otimização global, alguns dos principais algoritmos de computação evolutiva foram testados e ajustados na geração zero do PAMAM, quais sejam: GA (*Genetic Algorithm*), DE (*Differential Evolution*), PSO (*Particle Swarm Optimization*) e CMA-ES (*Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy*). Cada um dos algoritmos tem sua própria variedade de métodos e parâmetros a serem ajustados. Para evitar o problema conhecido como “a maldição da dimensionalidade”, uma metodologia aleatória foi utilizada nos ajustes, pois não demanda uma quantidade exageradamente grande de execuções e, ainda assim, garante a diversidade dos indivíduos no espaço de busca observado. Após os algoritmos terem seus parâmetros e métodos ajustados, os dez melhores são selecionados e simulados para as gerações um, dois, três, quatro, cinco, sete e dez do PAMAM, para então os melhores parâmetros e métodos serem definidos para cada algoritmo. Assim, os algoritmos são comparados entre si utilizando-se os melhores métodos e parâmetros escolhidos. Os algoritmos baseados no GA têm os piores resultados entre os observados. A CMA-ES apresenta os melhores re-

sultados para as gerações menores, mas apresenta erro de memória na geração dez. Com a CMA-ES sendo excluída da análise, a DE apresenta os melhores resultados para as gerações menores e o PSO apresenta os melhores para as gerações maiores do PAMAM.

Palavras-chave: Dendrímeros; PAMAM; Computação Evolutiva; GA; DE; PSO; CMA-ES.