

Санкт-Петербургский государственный университет

Козлов Александр Владимирович

Выпускная квалификационная работа

**Применение искусственных нейронных сетей для решения уравнения
Шрёдингера в пространствах высокой размерности**

Магистратура:

Направление: 03.04.01 «Прикладные математика и физика»

Основная образовательная программа: «ВМ.5510.* Прикладные физика и математика»

Научный руководитель:

**Профессор, кафедра
вычислительной физики, д. ф.-м. н.
Руднев Владимир Александрович**

Рецензент:

**Профессор, кафедра
вычислительной физики, д. ф.-м. н.
Руднев Владимир Александрович**

Санкт-Петербург
2024

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	2
1 ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О НЕЙРОННЫХ СЕТЯХ	4
1.1 НЕЙРОННЫЕ СЕТИ	4
1.2 ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ	4
1.3 МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ	4
2 РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА	5
2.1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ	5
2.2 ПОСТРОЕНИЕ РЕШЕНИЯ	5
2.3 ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ	5
2.4 МЕТОД МОНТЕ–КАРЛО	5
3 КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР	6
4 АТОМ ГЕЛИЯ	7
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	8
Список литературы	9

Введение

Технологии машинного обучения все глубже проникают в жизнь человека, находя свое применение в широком спектре областей человеческой деятельности — от детектирования редких смертельных заболеваний [1] до прогнозирования индексов климатических мод Земли [2]. Неотъемлемой составляющей каждой технологии машинного обучения является используемая модель машинного обучения — много-параметрическое преобразование, производящее трансформацию входных данных. В последние десятилетия наиболее широкое распространение получили искусственные нейронные сети (НС). Главным преимуществом данной модели машинного обучения является большое количество свободных параметров, при правильном выборе которых удаётся со сколь угодно высокой точностью аппроксимировать любую функциональную зависимость [3]. Стоит заметить, что из-за большого количества параметров, процесс их подбора долгое время оставался крайне тяжелой вычислительной задачей, успешно начать решать которую позволило развитие технологий многомерной оптимизации.

Ввиду того, что НС успешно решают многомерные задачи (обработка натурального языка, генерация изображений и т.д.), естественным представляется использовать НС при решении многомерных задач математической физики. В таком приложении зачастую используются полносвязные НС прямого распространения, которые получили название *physics-informed neural networks* [4], хотя их отличие от остальных типов НС заключается лишь в форме минимизируемого функционала — в него добавлены имеющие физическую интерпретацию члены. Форма минимизируемого функционала (функционала потерь или целевого функционала) зависит от специфики решаемой физической задачи, так, если ставится задача получить приближенное решение некоторого уравнения и НС используется в качестве пробной функции, то в функционал потерь разумно включить норму невязки НС по уравнению, граничное условие, если таковое имеется, а также все прочие соотношения, которым должно удовлетворять решение.

В 90-ые годы прошлого века было предложено использовать НС для решения задач на собственные значения и собственные функции — в работе [5] предлагается решать стационарное уравнение Шредингера с помощью НС с одним скрытым слоем, включая в функционал потерь квадратичную норму невязки пробной функции по уравнению. Такой подход позволил находить основное состояние, а также несколько возбужденных состояний стационарных квантово-механических систем. Подход, применяемый в [5], подразумевает, что каждому состоянию отвечает отдельная НС, а состояния находятся последовательно, начиная с основного (при отыскании возбужденных состояний в функционал потерь включаются члены, отвечающие за ортогональность искомого состояния к уже найденным состояниям).

В работе [6] предложено использовать одну НС для отыскания сразу нескольких состояний, для этого в функционал потерь добавляют члены, отвечающие за взаимную

ортогональность пробных функций, отвечающим различным состояниям. Кроме того, в данной работе предлагается использовать не равномерное распределения точек в координатном пространстве, а распределение, характеризующиеся плотностью вероятности, пропорциональной средней по рассматриваемым состояниям плотности вероятности. Предложенный подход выглядит привлекательно с той точки зрения ускорения решения спектральных задач высокой размерности.

Однако, работа [6] полна спорных моментов, главным из которых является используемый функционал потерь — в работе [7] приводится строгое доказательство того, что используемый в [6] функционал потерь имеет минимумы на функциях, не являющихся решениями задачи. В работе [7] показывается, что добавление в функционал потерь среднеквадратической невязки по уравнению Шрёдингера исправляет ситуацию и позволяет получать волновые функции стационарных систем сразу для нескольких состояний. Были рассмотрены задачи низкой размерности при этом использовалось равномерное распределение точек в координатном пространстве.

В качестве целей выпускной квалификационной работы было избрано распространение успехов работы [7] на задачи высокой размерности. В настоящей работе будут рассмотрены задачи размерности от 3 до 6, при этом будет проверена эффективность предлагаемого в [6] метода сэмплирования точек в координатном пространстве...

1 ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О НЕЙРОННЫХ СЕТЯХ

1.1 НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

1.2 ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ

1.3 МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

2 РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

2.1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

2.2 ПОСТРОЕНИЕ РЕШЕНИЯ

2.3 ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ

2.4 МЕТОД МОНТЕ–КАРЛО

3 КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

4 АТОМ ГЕЛИЯ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Rock Christian Tomas, Anthony Jay Sayat, Andrea Nicole Atienza, Jannah Lianne Danganan, Ma. Rollene Ramos, Allan Fellizar, Kin Israel Notarte, Lara Mae Angeles, Ruth Bangaoil, Abegail Santillan, and Pia Marie Albano. Detection of breast cancer by atr-ftir spectroscopy using artificial neural networks. *PLOS ONE*, 17(1):1–24, 01 2022.
- [2] Zane K. Martin, Elizabeth A. Barnes, and Eric Maloney. Using simple, explainable neural networks to predict the madden-julian oscillation. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 14(5):e2021MS002774, 2022. e2021MS002774 2021MS002774.
- [3] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366, 1989.
- [4] Maziar Raissi, Paris Perdikaris, and George Em Karniadakis. Physics informed deep learning (part i): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations, 2017.
- [5] I.E. Lagaris, A. Likas, and D.I. Fotiadis. Artificial neural network methods in quantum mechanics. *Computer Physics Communications*, 104(1):1–14, 1997.
- [6] Hong Li, Qilong Zhai, and Jeff Z. Y. Chen. Neural-network-based multistate solver for a static schrödinger equation. *Phys. Rev. A*, 103:032405, Mar 2021.
- [7] Цыренов Эрдэм Цыденжапович. Выпускная квалификационная работа. Численное решение стационарного уравнения Шредингера с использованием искусственных нейронных сетей. *СПбГУ*, 2022.