UNIVERSITY NAME

DOCTORAL THESIS

Thesis Title

Author:
John SMITH

Supervisor:
Dr. James SMITH

A thesis submitted in fulfillment of the requirements
for the degree of Doctor of Philosophy

in the

Research Group Name
Department or School Name

21 de junio de 2021

Declaration of Authorship

I, John SMITH, declare that this thesis titled, «Thesis Title» and the work presented in it are my own. I confirm that:

- This work was done wholly or mainly while in candidature for a research degree at this University.
- Where any part of this thesis has previously been submitted for a degree or any other qualification at this University or any other institution, this has been clearly stated.
- Where I have consulted the published work of others, this is always clearly attributed.
- Where I have quoted from the work of others, the source is always given. With the exception of such quotations, this thesis is entirely my own work.
- I have acknowledged all main sources of help.
- Where the thesis is based on work done by myself jointly with others, I have made clear exactly what was done by others and what I have contributed myself.

Signed:

Date:

«Thanks to my solid academic training, today I can write hundreds of words on virtually any topic without possessing a shred of information, which is how I got a good job in journalism.»

Dave Barry

UNIVERSITY NAME

Resumen

Faculty Name
Department or School Name

Doctor of Philosophy

Thesis Title

by John SMITH

The Thesis Abstract is written here (and usually kept to just this page). The page is kept centered vertically so can expand into the blank space above the title too…

Agradecimientos

The acknowledgments and the people to thank go here, don't forget to include your project advisor…

Índice general

Índice de figuras

Índice de cuadros

For/Dedicated to/To my...

Capítulo 1

Solución a la ecuación de Ornstein-Zernike mediante redes neuronales

Las *redes neuronales* fungen como aproximadores universales [HSW89; Hor91; Cyb89], y como tal pueden ser utilizadas para aproximar cualquier función continua para un determinado tipo de arquitectura. En particular, se espera que una red neuronal pueda servir como paramatrización de la función puente en la condición de cerradura de la ecuación de OZ, y así evitar la decisión arbitraria de aproximaciones escogiendo una función puente en particular.

En este capítulo se detalla la metodología creada y los fundamentos matemáticos bajo los cuales se puede hacer uso de redes neuronales para resolver la ecuación de OZ. Se comparan estos resultados con los obtenidos con simulación por computadora. En el apéndice se describe la solución general a la ecuación de OZ, mientras que en este capítulo se detalla su modificación para emplear redes neuronales.

1.1. Parametrización de la función puente

La ecuación de Ornstein-Zernike está dada por

$$\begin{aligned} c(\mathbf{r}) &= h(\mathbf{r}) + n \int_V c(\mathbf{r}') h(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \\ c(\mathbf{r}) &= \exp\left[-\beta u(\mathbf{r}) + \gamma(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r})\right] - \gamma(\mathbf{r}) - 1 \end{aligned}$$

con la notación ya conocida para esta ecuación.

Sea $N_\theta(\mathbf{r})$ una red neuronal con pesos θ. Se propone que $N_\theta(\mathbf{r})$ reemplace a la función puente $B(\mathbf{r})$ en la ecuación anterior tal que ahora se tiene la siguiente expresión para la cerradura

$$c(\mathbf{r}) = \exp\left[-\beta u(\mathbf{r}) + \gamma(\mathbf{r}) + N_\theta(\mathbf{r})\right] - \gamma(\mathbf{r}) - 1, \tag{1.2}$$

y la ecuación de OZ queda de la misma forma. Se pretende trabajar a partir de esta hipótesis donde la función puente pueda tomar cualquier valor en particular que permita la solución de la ecuación de OZ.

1.2. Esquema de entrenamiento

Ahora que se tiene la parametrización, se debe desarrollar una forma para ajustar los pesos de la red neuronal $N_\theta(\mathbf{r})$, y que al mismo tiempo permita la solución de la ecuación de OZ.

1.2.1. Función de costo

Para crear un esquema de entrenamiento se requiere primero de una **función de costo** que sea utilizada para generar información del ajuste necesario de los pesos θ. Tomando en cuenta que el esquema iterativo de Piccard crea una sucesión de funciones estimadas $\{\gamma_1(\mathbf{r}), \gamma_2(\mathbf{r}), \dots, \gamma_n(\mathbf{r})\}$, se propone que la función de costo sea

$$J(\theta) = [\gamma_n(\mathbf{r};\theta) - \gamma_{n-1}(\mathbf{r};\theta)]^2 \tag{1.3}$$

donde $\gamma_n(\mathbf{r};\theta)$ es la enésima función estimada de $\gamma(\mathbf{r})$ mediante el método iterativo. La notación $\gamma(\mathbf{r};\theta)$ indica que depende implícitamente de los pesos de la red neuronal, como se puede ver en el ecuación (1.2). Esto significa que si los pesos de $N_\theta(\mathbf{r})$ cambian, entonces la función γ debe cambiar. Sin embargo, esto no significa que γ depende *directamente* de los pesos.

1.2.2. Problema de optimización

Usando la función de costo (1.3) ahora se puede plantear un problema de optimización que permita el ajuste de los pesos de $N_\theta(\mathbf{r})$.

El problema de optimización en este caso es *sin restricciones* y está definido de la siguiente forma

$$\min_\theta \quad J(\theta) \tag{1.4}$$

Esto significa que buscamos los parámetros óptimos θ^* que minimicen la diferencia entre las iteraciones calculadas de las funciones $\gamma(\mathbf{r};\theta)$. Este problema de optimización se puede resolver de forma iterativa, al mismo tiempo que se resuelve la ecuación de OZ.

1.2.3. Actualización de pesos

El método iterativo empleado está basado en la técnica de *descenso de gradiente* para actualizar los pesos de la red neuronal. Esto significa que la regla de actualización es

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \nabla_\theta J(\theta). \tag{1.5}$$

En este cálculo se necesita la información del gradiente de la función de costo respecto a los pesos. El cálculo detallado del gradiente se describe en el apéndice.

1.3. Resultados