

# Solução Numérica da Equação de Schrödinger com a Utilização de Redes Neurais Artificiais e Algoritmo Genético

C. Caetano, L. R. Marim, M. R. Lemes, e A. Dal Pino Jr.

*Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica  
Praça Marechal Eduardo Gomes, 50, CEP 12228-900, São José dos Campos, São Paulo, Brasil  
e-mail: ccaetano@ita.br*

## Resumo

Neste artigo apresentamos um método para a resolução da equação de Schrödinger unidimensional através da representação de sua solução por meio de uma Rede Neural Artificial. Para o treinamento dessa rede utilizamos um algoritmo genético que busca uma configuração que minimize o erro entre a solução aproximada pela rede e a solução exata desconhecida, ou seja, usamos um método de aprendizagem não-supervisionada. Para testar esse método escolhemos dois sistemas para os quais a equação de Schrödinger possui solução analítica conhecida: o oscilador harmônico simples e um sistema descrito pelo potencial de Morse. Encontramos aproximações para o estado fundamental e para os primeiros estados excitados com erros relativos menores que 1% em média, em comparação com as soluções analíticas.

## 1 Introdução

Uma das equações diferenciais mais importantes da Física, a equação de Schrödinger [1] é fundamental para o entendimento do mundo quântico e para a investigação da estrutura da matéria [2]. Esta equação só “apresenta” solução analítica para poucos casos simples [3] e quase na totalidade dos casos realistas apenas soluções numéricas são viáveis [4].

Os métodos numéricos tradicionais para integração de equações diferenciais, como o método de Runge-Kutta [5], possuem algumas limitações práticas. Como exemplo temos o fato de resolverem o problema para pontos isolados em um dado intervalo, necessitando-se de um procedimento adicional de interpolação para a obtenção da solução em todo o intervalo.

Uma alternativa a esses métodos é a utilização de Redes Neurais Artificiais para representar a solução da equação de Schrödinger. Essa abordagem possui uma vantagem evidente. Uma vez obtida uma configuração satisfatória da rede para um conjunto de pontos num intervalo, a rede fornecerá a solução para qualquer outro ponto desse intervalo investigado.

Nosso trabalho é baseado no procedimento elaborado por Sugawara [6] de resolução da equação de Schrödinger para os estados estacionários de um sistema unidimensional. Na seção 2 apresentamos uma breve descrição da teoria das Redes Neurais Artificiais [7,8]. O método de treinamento de redes através do Algoritmo Genético [9] é explicado na seção 3. A formulação detalhada para a aplicação dessa metodologia à solução da equação de Schrödinger é apresentada na seção 4. Na seção 5, esta metodologia é aplicada à solução de dois sistemas quânticos simples: o oscilador harmônico simples e um sistema governado pelo potencial de Morse. Conclusões

sobre este trabalho e perspectivas para trabalhos futuros são apresentadas na seção 6.

## 2 Redes Neurais Artificiais

As Redes Neurais Artificiais (RNA's) são dispositivos baseados nos sistemas nervosos biológicos. Do mesmo modo que nas redes biológicas, as RNA's baseiam-se em um complexo sistema de comunicação de unidades lógicas simples, os perceptrons. A tarefa de cada neurônio em uma RNA é receber a informação vinda de diversos pontos da rede e transformá-la em um novo sinal que será transmitido para outro ponto da rede, como é exemplificado na Figura 1. Esta transformação é realizada por uma função não linear usualmente chamada de função de ativação ou transferência. Essa função pode ser do tipo degrau unitário ou, como no nosso trabalho, uma função contínua. A real capacidade de processamento de uma rede neural é resultado da quantidade de neurônios e da complexidade com que estes neurônios estão interligados [7,8].

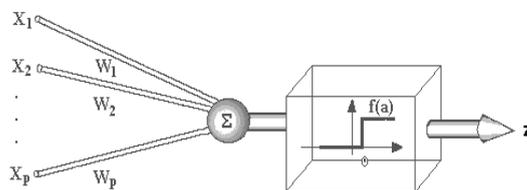


Figura 1: Esquema de funcionamento de um perceptron em uma RNA.

A arquitetura de rede mais comumente utilizada é chamada de rede neural multicamada unidirecional. Ela é constituída de uma camada de neurônios que recebem um

valor de entrada (input), uma ou mais camadas intermediárias (também chamadas ocultas) e uma camada de saída que fornece a resposta da rede (output). Nesse tipo de rede, que é exemplificado na Figura 2, a informação processada por um neurônio é enviada para a camada seguinte através das conexões. Associado a cada conexão há um parâmetro, o peso, que regula a relevância de um determinado sinal que será recebido por um neurônio dessa camada. É costume ainda adicionar um valor constante (limiar) à saída de um determinado neurônio. Conforme sabemos, os neurônios biológicos têm diferentes limiares de excitação, isto é, diferentes neurônios apresentam uma resposta distinta para um mesmo nível de excitação. É função dos limiares simular este efeito.

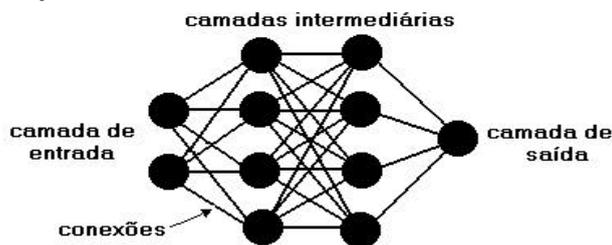


Figura 2: Rede neural multicamada unidirecional.

Um ponto crucial do trabalho com redes neurais é o seu treinamento. Este consiste na determinação de todos os pesos e limiares que permitam uma saída da rede tão próxima quanto possível da saída esperada. Existem muitas espécies de algoritmos de treinamento, sendo o mais conhecido o algoritmo de retropropagação do erro [10]. Optamos nesse trabalho em utilizar um algoritmo genético, que tem como vantagem sobre o algoritmo de retropropagação o fato de ser um método de otimização global e não local. Os detalhes desse método serão resumidos na próxima seção.

Tanto redes neurais como algoritmos genéticos são muito utilizados atualmente na resolução de problemas em várias áreas da ciência e da engenharia [11, 12, 13, 14, 15].

### 3 Algoritmo Genético

O algoritmo genético [9] é um método de otimização baseado no conceito de evolução das espécies. A idéia é que, em uma população, indivíduos mais adaptados ao meio ambiente vivem mais e reproduzem mais. Conseqüentemente, eles transmitem a seus descendentes, suas características. No decorrer de muitas gerações, as melhores características permanecem na população enquanto as piores são eliminadas.

Para a implementação do algoritmo genético, cria-se uma população inicial com N indivíduos candidatos a solução do problema gerados aleatoriamente. A seguir, três processos são realizados:

a) *competição*: dois indivíduos são escolhidos aleatoriamente na população e é verificado o quão próximo da solução do problema cada um está. O melhor indivíduo é selecionado, passando para a próxima fase. O processo é repetido até ser formado um conjunto com N indivíduos. Este procedimento permite que um mesmo indivíduo seja selecionado mais de uma vez. Deste modo, um indivíduo mais adaptado pode aparecer mais de uma vez na população da geração seguinte. Também, indivíduos pouco adaptados são eliminados por esse procedimento.

b) *cruzamento*: entre esses indivíduos selecionados, escolhem-se pares aleatoriamente que irão gerar os elementos da próxima geração. Em detalhes, o cruzamento é feito da seguinte maneira: converte-se cada um dos pais da base decimal para a base binária, formando uma seqüência de 0's e 1's; escolhe-se aleatoriamente uma determinada posição na seqüência e trocam-se os algarismos após esse ponto entre os pais, gerando dois filhos. Esse procedimento é exemplificado na Figura 3.

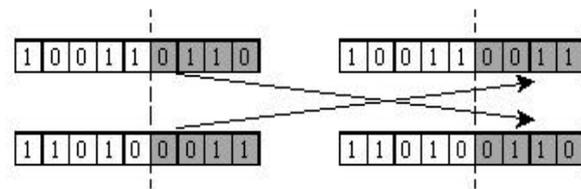


Figura 3: Cruzamento de seqüências no Algoritmo Genético.

c) *mutação*: em algumas gerações, pequenas modificações são feitas em certos indivíduos. Esse procedimento tem a finalidade de introduzir genes novos na população, evitando a convergência prematura da população.

Eventualmente, após um número grande de gerações, a solução ótima é alcançada.

## 4 Metodologia

Nosso objetivo nesse trabalho é solucionar a equação de Schrödinger unidimensional [1]:

$$H\mathbf{y}_n(x) = E_n\mathbf{y}_n(x) \quad (1)$$

onde  $E_n$  é a energia (autovalor) do  $n$ ésimo estado do sistema,  $\mathbf{y}_n(x)$  é a autofunção correspondente e  $H$  é o hamiltoniano do sistema, definido como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{8\mathbf{p}^2 m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

Nessa equação  $\hbar$  é a constante de Planck,  $m$  a massa da partícula e  $V(x)$  a energia potencial do sistema.

Para encontrarmos soluções aproximadas do sistema, ou seja, energias aproximadas  $e_n$ 's e funções tentativa  $j_n$ 's, usamos a quantidade:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^M |Hj_n(x_i) - e_n j_n(x_i)|^2}{\sum_{i=1}^M |j_n(x_i)|^2} \quad (3)$$

que é uma medida do quanto uma solução aproximada está próxima da solução exata. Evidentemente, para a solução exata,  $R=0$ . Na prática, nunca conseguimos esse resultado ideal, devido a erros inerentes ao procedimento computacional. Procuramos então minimizar  $R$  de modo a obter a melhor solução possível.

O conjunto de pontos para treinamento da rede  $\{x_1, \dots, x_M\}$  é escolhido aleatoriamente em um intervalo em torno da origem. Esse conjunto é modificado a cada geração.

Em nossa primeira abordagem mantivemos o autovalor aproximado  $e_n$  fixo, utilizando o resultado obtido analiticamente, e buscamos a função tentativa  $j_n$ .

A segunda abordagem foi tentar resolver 'completamente' a equação de Schrödinger, otimizando também o autovalor  $e_n$ . Nesse caso, demos um valor inicial aleatório em um dado intervalo (por exemplo, entre 0 e 1) para cada indivíduo da população, e o algoritmo genético encarregou-se de encontrar a energia que minimizasse  $R$ . Utilizamos populações com número de indivíduos variando entre 20 e 50, já que uma população menor aumentaria a possibilidade do processo de otimização ficar "preso" em um mínimo local. O tamanho da população permanece fixo durante o treinamento.

Inspirados na aproximação semiclássica para a função de onda [6,16], parametrizamos a solução tentativa na forma:

$$j(x_i) = A(x_i) \cdot \text{sen}[S(x_i)] \quad (4)$$

Essa parametrização possibilitou que trabalhássemos com uma rede de duas saídas ao invés de uma, pois em testes realizados previamente verificamos que essa última necessitaria de mais neurônios na camada intermediária para encontrar uma solução dentro da precisão especificada. Assim, em todo o nosso trabalho utilizamos uma rede neural com um neurônio na camada de entrada, um número variável de neurônios na camada intermediária e dois neurônios na camada de saída. Como entrada da rede temos cada elemento  $x_i$  do conjunto de treinamento e como saída  $A(x_i)$  e  $S(x_i)$ , como pode ser visto na figura 4.

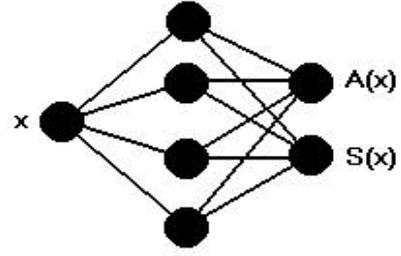


Figura 4: Arquitetura das redes utilizadas neste trabalho. Observe que um neurônio de saída corresponde a  $A(x)$  e o outro a  $S(x)$  conforme eq. 4.

O critério de escolha do número de neurônios na camada intermediária foi "tentativa e erro". Buscamos sempre o menor número de neurônios que fornecesse o erro relativo na energia menor que 1%, em um número máximo de 1000 gerações.

Na camada de entrada usamos uma função de ativação linear. Todos os neurônios da camada intermediária tiveram a função de ativação:

$$f(x) = \frac{1 - e^{-a_1 x}}{1 + e^{-a_2 x}} \quad (5)$$

E para cada um dos dois neurônios da camada de saída usamos respectivamente as funções de ativação:

$$g_1(x) = e^{-b_1 x^2} \quad \text{e} \quad g_2(x) = e^{-b_2 x^2} \quad (6)$$

Os parâmetros  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$  e  $b_2$  foram otimizados juntamente com os pesos e limiares da rede através do algoritmo genético.

## 5 Resultados

Para testar esse método, utilizamos o potencial do oscilador harmônico simples:

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad (7)$$

Nesse caso, o hamiltoniano do sistema tem a forma:

$$H = \frac{-\hbar^2}{8p^2 m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (8)$$

Fazendo uma mudança de sistema de unidades, sem perda de generalidade, para outro no qual  $m=1$  e  $\hbar=2p$  (unidades atômicas) e, por conveniência, tomando  $k=1$ , teremos:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \quad (9)$$

A solução analítica (não normalizada) para esse problema é [1]:

$$y_n(x) = H_n(x) \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

onde  $H_n(x)$  representa o  $n$ -ésimo polinômio de Hermite [17]. A energia correspondente a esse estado tem o valor:

$$E_n = n + \frac{1}{2} \text{ (u. a.)} \quad (11)$$

## 5.1 Autovalores fixos

Para o estado fundamental e para os três primeiros estados excitados do oscilador harmônico, ou seja, para  $E_n = \{0,5 ; 1,5 ; 2,5 \text{ e } 3,5\}$ , obtivemos a função de onda em

ótima concordância com a solução analítica. Os resultados podem ser conferidos na Figura 5, onde desenhamos, para o estado fundamental e para os três primeiros estados excitados a autofunção  $j_n(x)$  juntamente com a amplitude  $A(x)$  e a fase  $S(x)$ . Utilizamos 24 pontos no processo de treinamento, distribuídos aleatoriamente no intervalo  $[-6,6]$  e 20 indivíduos na população. Em todos os casos, a precisão exigida foi  $R < 0,01$ . Na escala apresentada na figura não é possível perceber diferenças entre as curvas teóricas exatas (a menos de fatores de normalização) e os resultados numéricos.

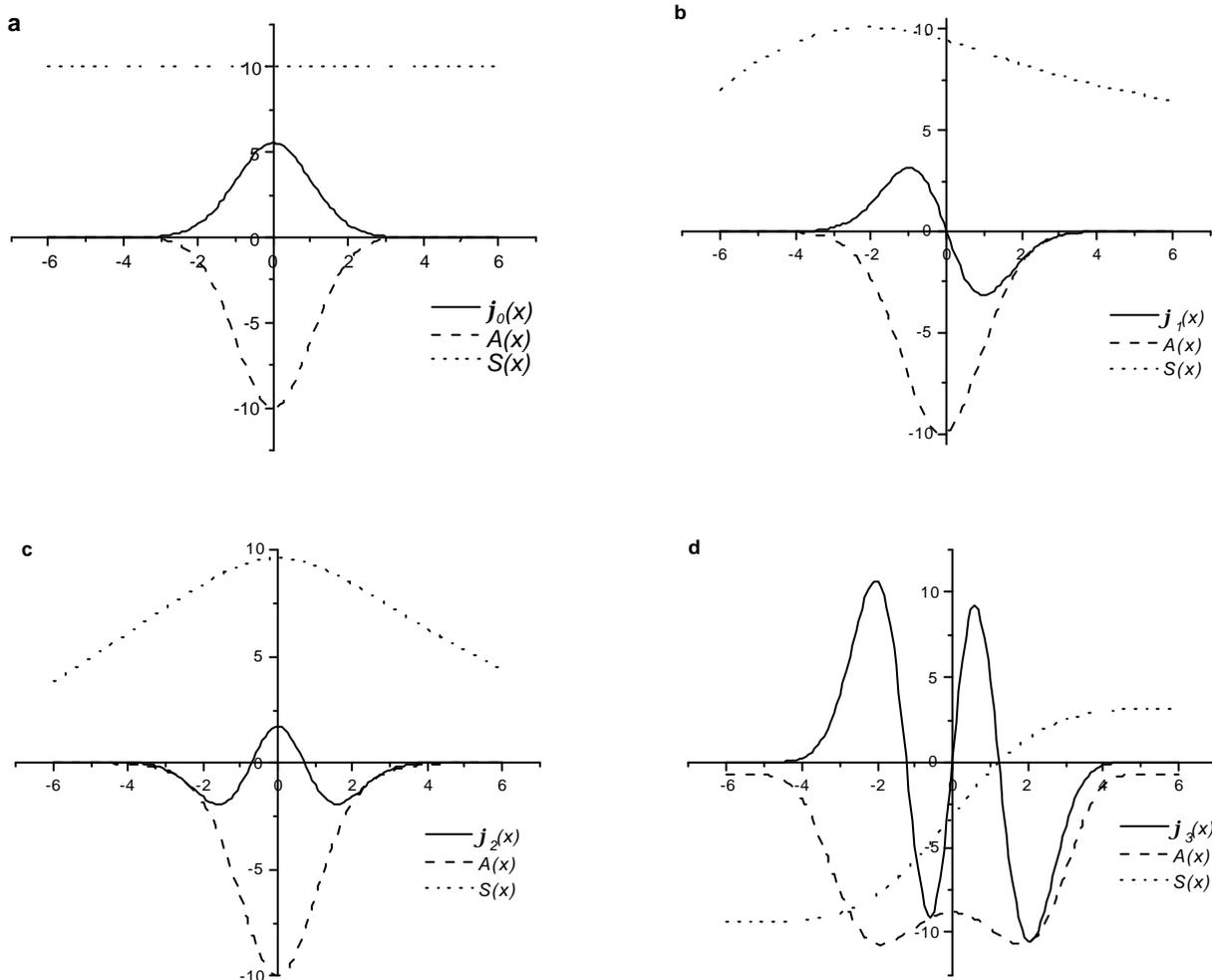


Figura 5: Representação das soluções encontradas pela rede para o estado fundamental e para os três primeiros estados excitados do oscilador harmônico simples. a) 6 neurônios na camada intermediária e 100 gerações; b) 6 neurônios na camada intermediária e 200 gerações; c) 6 neurônios na camada intermediária e 250 gerações; d) 7 neurônios na camada intermediária e 1000 gerações.

Nessa figura podemos ver que as funções de onda possuem paridade definida, ou seja, o estado fundamental e o 2º estado excitado são pares e o 1º e 3º estados excitados

são ímpares. Essa característica é resultado do fato de o potencial desse sistema ser par [3], e indicou-nos que nossa rede buscou as soluções corretas.

Como já foi dito, uma das vantagens de se usar uma rede neural para resolver a equação de Schrödinger é que, uma vez encontrada a solução para um grupo de pontos no intervalo, não necessitamos de um procedimento extra de interpolação para obtê-la em qualquer outro ponto desse intervalo. Para fazer isso, basta fixarmos os parâmetros da rede (pesos, limiares) após o treinamento desta. O quadrado de uma solução para o 2º estado excitado é apresentada na Figura 6. Como sabemos, esse valor representa a probabilidade de se encontrar a partícula em uma determinada posição [18]. Podemos notar na Figura 6 que existe certa probabilidade de a partícula ser encontrada na região classicamente proibida, ou seja, onde sua energia total é menor que a energia potencial. Essa probabilidade, como era de se esperar, diminui rapidamente e tende a 0 nas regiões distantes da origem.

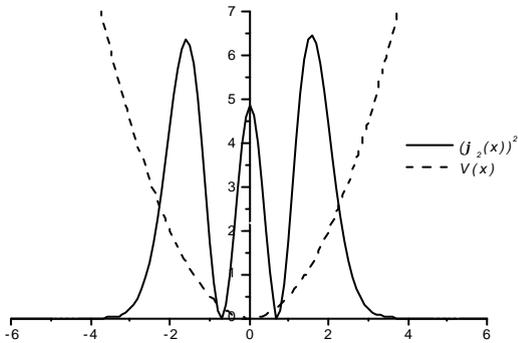


Figura 6: Quadrado da solução para o 2º estado excitado do oscilador harmônico

## 5.2 Otimização do Autovalor

Como os resultados obtidos com os autovalores fixos foram bons, passamos então à resolução completa do problema, que consiste em buscar o autovalor  $e_n$  ao mesmo tempo em que otimizamos a autofunção  $j_n(x)$ .

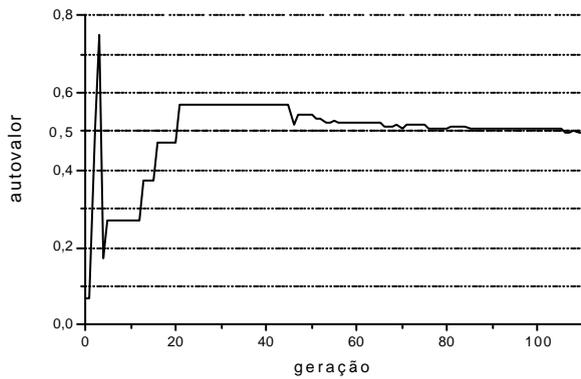


Figura 7: Exemplo de evolução do autovalor para o estado fundamental do oscilador harmônico simples, cujo valor teórico é 0,5.

Após apenas quinhentas gerações obtivemos, para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado, autovalores com erros relativos menores que 0,7% em média, comparados com os valores exatos.

Na Figura 7 mostramos um exemplo de otimização do autovalor do estado fundamental pela rede. Na Figura 8 são esboçadas as autofunções encontradas para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado, onde usamos 6 neurônios na camada intermediária da rede, 2 neurônios na camada de saída, 20 indivíduos na população e 400 gerações.

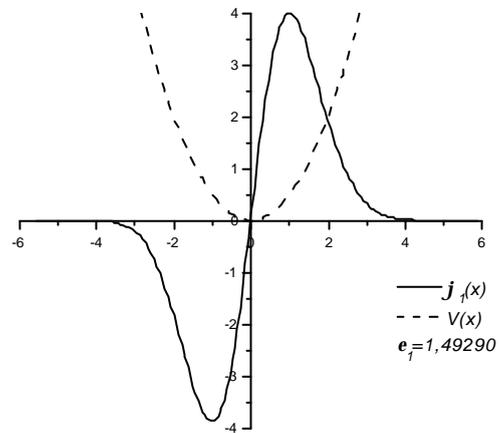
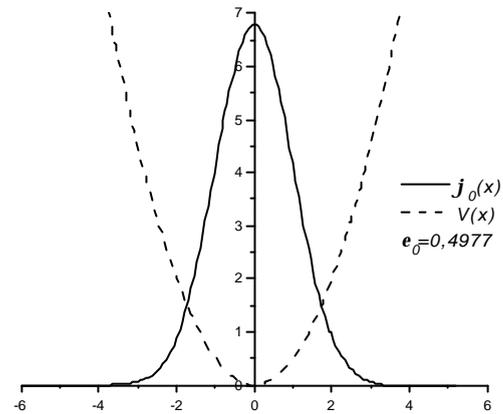


Figura 8: Estado fundamental e primeiro estado excitado (linha cheia) juntamente com o potencial do oscilador harmônico simples (linha tracejada).

## 5.3 Potencial de Morse

Este tipo de potencial é extensivamente usado para simular vibrações de moléculas diatômicas, pois tem

excelente concordância com resultados experimentais [19], possuindo a seguinte representação matemática:

$$V(x) = D(1 - e^{-gx})^2 - D \quad (12)$$

Uma aproximação analítica para os autovalores desse potencial é dada por :

$$E_n = -D + g\sqrt{2D} \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{g^2}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (u.a.) \quad (13)$$

O parâmetro  $D$  dá a profundidade do potencial, enquanto  $g$  está relacionado com o quanto esse potencial é estreito. Nesse trabalho utilizamos  $D=10$  e  $g=0,2$ . Para esses valores temos:  $E_0=-9,557786$  e  $E_1=-8,703359$ .

Como esse potencial não é simétrico, utilizamos nesse caso um conjunto com 30 pontos para treinamento gerado aleatoriamente no intervalo  $[-6,8]$ .

Também neste caso, conseguimos boas aproximações para o estado fundamental e primeiro estado excitado, com erro relativo da ordem de 0,1% em média, o que pode ser conferido na Figura 9, onde desenhamos as autofunções encontradas. Nesse caso utilizamos 6 neurônios na camada intermediária da rede, 20 indivíduos na população e 700 gerações.

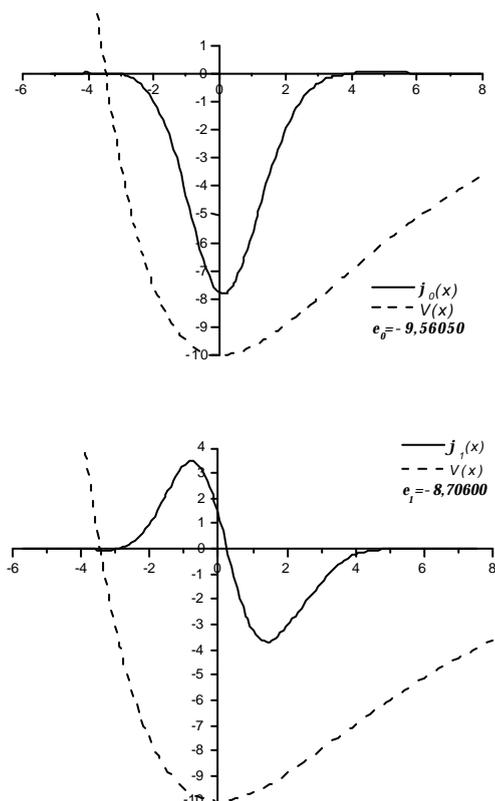


Figura 9: Soluções para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado (linha cheia) do potencial de Morse (linha tracejada).

## 6 Conclusão

Apesar desse método de solução numérica da equação de Schrödinger ainda estar em desenvolvimento, conseguimos resultados em ótima concordância com as soluções analíticas. Além disso, não foi necessário um número excessivamente grande de gerações para a obtenção desses resultados. Comparado com o método de Numerov [4], constatamos a eficiência do nosso método. Nosso procedimento utilizou apenas 30 pontos no processo de treinamento, enquanto o método de Numerov, para atingir o mesmo nível de precisão, necessitou de uma discretização em uma malha com 200 pontos.

Temos a intenção de aprimorar esse método, alian do ao algoritmo genético um procedimento de otimização local, como o algoritmo de retropropagação do erro. Também pretendemos restringir o espaço de busca dos autovalores com uma condição de ortogonalidade das autofunções, ou seja, uma vez resolvido o problema para o estado fundamental, a função tentativa para o primeiro estado excitado teria que ser ortogonal àquela. A função tentativa para o segundo estado excitado seria ortogonal à do estado fundamental e à do primeiro estado excitado e assim por diante. O objetivo é conseguir encontrar estados excitados mais elevados, ainda mais rapidamente, que os obtidos neste trabalho.

Também estamos aplicando esse método a outras equações importantes da Física, como a equação de Thomas-Fermi. Outra idéia é trabalharmos com sistemas multieletrônicos, aproveitando a versatilidade da utilização de uma Rede Neural Artificial.

## 7 Agradecimentos

Um dos autores (C. C.) agradece à CAPES e outro autor (L. R. M.) agradece à FAPESP pelo auxílio financeiro através da concessão de bolsa de estudo de mestrado e doutorado respectivamente.

## Referências

- [1] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, ed. rev., Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1994.
- [2] R. Eisberg, Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles, John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [3] S. Gasiorowicz, Física Quântica, Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1979. Trad. de A. L. L. Videira.
- [4] I. N. Levine, Quantum Chemistry, 5ª ed., Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 2000.

- [5] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [6] M. Sugawara, Comput. Phys. Comun. **140**, 366 (2001).
- [7] J. Hertz, A. Krogh, R. G. Palmer, Neural Computation, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, 1991.
- [8] S. Haykin, Neural Networks, 2<sup>a</sup> ed., Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1999.
- [9] D. E. Goldberg, Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning, Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1989.
- [10] Y. Chauvin, D. E. Rumelhart, Backpropagation: Theory, Architectures, and Applications, Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, New Jersey, 1995.
- [11] B. P. Milligen, V. Tribaldos, J. A. Jiménez, Physical Review Letters, **75**, 3594 (1995).
- [12] L. R. Marim, M. R. Lemes, A. Dal Pino Jr., Physical Review A **66**, 023203 (2002).
- [13] L. A. Tarca, B. P. A. Grandjean, F. Larachi, Ind. Eng. Chem. Res. **41**, 2543 (2002).
- [14] L. R. Marim, M. R. Lemes, A. Dal Pino Jr., Physical Review A **67**, 033203 (2003).
- [15] LiHong Hu, XiuJun Wang, LaiHo Wong, GuanHua Chen, J. Chem. Phys. **119**, 11501 (2003).
- [16] A. B. Migdal, Qualitative Methods in Quantum Theory, Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1989.
- [17] G. B. Arfken, H. J. Weber, Mathematical Methods for Physicists, 4<sup>a</sup> ed., Academic Press, San Diego, 1995.
- [18] A. F. R. T. Piza, Mecânica Quântica, Edusp, São Paulo, 2003.
- [19] S. Flügge, Practical Quantum Mechanics I, Springer-Verlag, Berlin, 1971.