**Улучшение производительности фермионных нейронных сетей с помощью экспоненциального анзаца Слейтера**

***Кольченко М.М.1, 2, Бохан Д.А.1,2, Боев А.С.2, Фёдоров А.К.2,3,4, Трубников Д.Н.1***

*Студент, 4 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*2Российский квантовый центр, Сколково, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

*4 Технологический институт Шаффхаузена, Шаффхаузен, Швейцария*

*E-mail:* [*maria.kolchenko@gmail.com*](mailto:maria.kolchenko@gmail.com)

Описание сложных квантовых систем многих тел является огромной проблемой, решение которой имеет первостепенное значение как для фундаментальной науки, так и для практических задач в физике, химии и материаловедении. Например, в области квантовой химии количество необходимых ресурсов для *ab initio* расчётов свойств молекул растёт экспоненциально, а при использовании приближений сложность задачи даже «золотого стандарта» - метода cвязанных кластеров - растёт как N7.

В последние годы возрос интерес к использованию нейронных сетей для решения широкого круга задач, в том числе для задач квантовой химии. В частности, при их представлении в качестве модели волновой функции удалось получить достаточно хорошие результаты оптимизации энергии основного электронного состояния [1].

В работе предлагается использовать метод фермионных нейросетей с экспоненциальным анзацем Слейтера для оценки электрон-ядерных и электрон-электронных расстояний, что позволяет достичь более быстрого приближение значений энергий к целевым благодаря лучшему описанию электронных корреляций. Анализ кривых обучения показывает, что можно получить достаточно точные результаты расчёта энергии при меньшем размере исходных батчей при использовании подхода Bagging по сравнению с оригинальным методом. Для достижения ещё более точных результатов предлагается использовать экстраполяционную схему оценки интегралов Монте-Карло в пределе бесконечного числа точек.

Результаты численных экспериментов для молекул хорошо согласуются с данными, полученными с помощью оригинальных фермионных нейросетей[1], где используются большие размеры исходных батчей, чем в предложенном методе, а также с результатами, полученными по методу CCSD(T) в пределах полного базисного набора.

Таблица 1. Сравнение результатов расчёта энергии основного состояния, полученных оригинальным методом фермионных нейросетей, улучшенным, а также методом CCSD(T) в пределах полного базисного набора

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Молекула | Размер батча | | E (FermiNet), оптимизированные | E (FermiNet), оригинальные | E (CCSD(T), CBS) |
| N1 | N2 |
| LiH | 256 |  | −8.0707 | -8.0705 | -8.0707 |
| Li2 | 1024 |  | −14.9949 | -14.9948 | -14.9951 |
| CH2 | 1000 |  | −39.1331 |  | -39.1331 |
| HF | 750 |  | −100.4596 |  | -100.4597 |
| N2 | 1000 | 1500 | −109.5430 | -109.5388 | -109.5425 |
| CO | 1000 | 1500 | −113.3241 | -113.3218 | -113.3255 |
| C2H4 | 2000 | 2500 | −78.5910 | -78.5844 | -78.5888 |
| C4H6 | 2000 | 2500 | -155.9471 | -155.9263 | -155.9575 |

**Литература**

[1] Pfau, D. et al. Ab initio solution of the many-electron schrödinger equation with deep neural networks // Phys. Rev. Research. 2020. Vol. 2. P. 033429