**Прогноз параметра кулоновского взаимодействия с использованием Байесовской оптимизации**

***Ахмеров Р.Ф., Гумарова И.И., Недопекин О.В.***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,   
институт физики, Казань, Россия*

*E-mail: ruslan.ahmerov123@gmail.com*

Современная материаловедение и квантовая химия сталкиваются с вызовами описания электронной структуры материалов с сильной корреляцией, таких как оксиды переходных металлов. Метод теории функционала плотности, хотя и представляет собой мощный инструмент для расчета электронной структуры вещества, он сталкивается с ограничениями в описании сильно коррелированных материалов. В числе распространенных методов, направленных на решение этой проблемы, являются гибридные функционалы [1], однако они имеют высокие вычислительные затраты.

Одним из подходов для преодоления этих ограничения является включение дополнительной поправки Хаббарда в рамках подхода теории функционала плотности, учитывающую кулоновское взаимодействие между электронами на сильно локализованных d- или f-орбиталях. В отличие от других методов, таких как гибридные функционалы, он представляет собой компромисс между скоростью и точностью расчетов, что делает его особенно подходящим для исследования материалов с сильной корреляцией.

Выбор оптимального значения параметра Хаббарда для каждого соединения представляет собой нетривиальную задачу. Значение зависит от конкретных свойств материалов, поэтому поиск оптимального значения параметра Хаббарда может быть сформулирован как задача оптимизации, аналогичная поиску глобального минимума. В этом контексте, машинное обучение предоставляет эффективный инструмент для определения оптимального значения параметра Хаббарда.

Алгоритмы байесовской оптимизации являются методами оптимизации, которые используют вероятностные модели для эффективного поиска оптимальных значений функции, которая может быть дорогостоящей для вычисления. Эти алгоритмы используют апостериорное распределение для принятия решений о том, какие комбинации гиперпараметров следует проверить следующими. Она позволяет находить оптимальное решение с помощью минимального количества итераций. Это позволяет быстро сходиться к оптимальному решению и избежать застревания в локальных минимумах.

В нашем исследовании мы представляем использование методов машинного обучения, включая Байесовскую оптимизацию, для оптимизации параметра Хаббарда на примере группы соединений FeO, MnO, CoO и NiO. Мы собрали тренировочный набор данных, включающий параметры, оказывающие наибольшее влияние на электронную структуру материалов, такие как ширина запрещенной зоны и зонный спектр. Подчеркивается эффективность данного подхода и открывают новые перспективы для развития методов машинного обучения в области расчета электронных свойств материалов.

**Литература**

1. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98. P. 5648–5652.