

RESOLVENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM REDES NEURAIIS GUIADAS POR PRINCÍPIOS FÍSICOS

Geovani V. Silva¹, Andre P. Gomes², Gabriel I. Barboza³, Vitor Petri Silva⁴, Lucia Catabriga⁵,
Isaac P. Santos⁶

Ciências Exatas e da Terra

Introdução e Objetivo

A aplicação de Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs) representa uma abordagem poderosa na solução de equações diferenciais (RAISSI; PERDIKARIS; KARNIADAKIS, 2019). Este trabalho explora essa metodologia no contexto da equação de Schrödinger, que é crucial na física quântica e em diversas outras áreas da ciência. O desafio consiste em utilizar as redes PINNs para descobrir simultaneamente as autofunções (funções de onda) e os autovalores (níveis de energia) de um sistema. Abordagens anteriores frequentemente utilizavam funções de perda de regularização que, embora eficazes em prevenir soluções triviais, não possuíam uma fundamentação física explícita e podiam introduzir erros numéricos ou carecer de interpretação física direta.

Para superar essas limitações, este trabalho adota e valida a metodologia proposta por (JIN; MATTHEAKIS; PROTOPAPAS, 2022), que introduz uma função de perda de regularização informada pela física. O objetivo é, portanto, implementar e demonstrar a eficácia de uma PINN na resolução da Equação de Schrödinger para o Oscilador Harmônico Quântico (OHQ). As contribuições-chave desta metodologia são: (1) o uso de um parâmetro de rede treinável para a descoberta direta do autovalor; (2) a incorporação de simetrias físicas (paridade) na arquitetura da rede para acelerar a convergência (MATTHEAKIS et al., 2020); e (3) a introdução de funções de perda com significado físico, notadamente a perda de normalização ($\mathcal{L}_{\text{norm}}$) e a perda de ortogonalidade ($\mathcal{L}_{\text{orto}}$), que previnem soluções triviais e guiam a rede na busca sequencial por autoestados fisicamente coerentes.

Método e Metodologia

A metodologia aborda o problema de autovalor geral na forma: $Lf(x) = \lambda f(x)$, onde L é um operador diferencial, $f(x)$ é a autofunção e λ é o autovalor associado. Para este problema, a solução

¹Mestrando em Física, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, geovani.v.silva@edu.ufes.br;

²Mestrando em Informática, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, andre.p.gomes@edu.ufes.br;

³Mestrando em Informática, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, gabriel.i.barboza@edu.ufes.br;

⁴Mestrando em Física, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, vitor.p.silva@edu.ufes.br;

⁵Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, luciac@inf.ufes.br.

⁶Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, isaac.santos@ufes.br.

é aproximada por uma rede neural $\mathcal{N}(x, \lambda)$ através de um ansatz paramétrico:

$$f(x, \lambda) = f_b + g(x)\mathcal{N}(x, \lambda)$$

onde f_b é o valor constante da condição de contorno e $g(x)$ é uma função de envelope que impõe essas condições.

Para o caso específico deste trabalho, a Equação de Schrödinger estacionária, essa notação se traduz em: $L \rightarrow \hat{H}$ (operador Hamiltoniano), $\lambda \rightarrow E$ (autovalor de energia) e $f(x) \rightarrow \psi(x)$ (função de onda). A solução da rede, $\psi(x, E)$, é, portanto, construída como:

$$\psi(x, E) = f_b + g(x)\mathcal{N}(x, E)$$

O sistema analisado é o Oscilador Harmônico Quântico (OHQ), onde a condição de contorno homogênea implica $f_b = 0$. A arquitetura da rede também incorpora a simetria de paridade do potencial para acelerar a convergência.

Função de Perda Informada pela Física: A rede é otimizada minimizando uma função de perda total $L = \mathcal{L}_{DE} + \mathcal{L}_{reg}$, composta por termos que representam a física do sistema.

- **Perda da Equação Diferencial ($\mathcal{L}_{DE}$):** Este termo mede o resíduo da Equação de Schrödinger e é definido como o erro quadrático médio sobre o domínio:

$$\mathcal{L}_{DE} = \left\langle \left(\hat{H}\psi(x, E) - E\psi(x, E) \right)^2 \right\rangle_x$$

onde $\langle \cdot \rangle_x$ denota a média sobre os pontos de colocação (pontos amostrados no domínio). As derivadas em $\hat{H}$ são calculadas via diferenciação automática.

- **Perdas de Regularização ($\mathcal{L}_{reg}$):** Este termo, definido como a soma $\mathcal{L}_{reg} = \mathcal{L}_{norm} + \mathcal{L}_{orto}$, é fundamentado em princípios físicos para evitar soluções triviais e encontrar múltiplos autoestados sequencialmente.

- **Perda de Normalização ($\mathcal{L}_{norm}$):** Evita a solução trivial ($\psi = 0$) ao forçar que a integral da autofunção ao quadrado se aproxime de um valor alvo constante, derivado da discretização da condição de normalização quântica. É definida como:

$$\mathcal{L}_{norm} = \left(\langle \psi(x, E), \psi(x, E) \rangle - \frac{M}{L} \right)^2$$

onde o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é aproximado pelo produto escalar discreto, M é o número de pontos de colocação e L é o comprimento do domínio.

- **Perda de Ortogonalidade ($\mathcal{L}_{orto}$):** Para encontrar estados excitados, esta perda penaliza soluções que não sejam ortogonais às k autofunções ψ_j já descobertas:

$$\mathcal{L}_{orto} = \sum_{j=1}^k \langle \psi_j, \psi(x, E) \rangle^2$$

Isso força a rede a buscar novos autoestados no subespaço ortogonal aos já conhecidos.

Fluxo de Treinamento: O treinamento é conduzido de forma não supervisionada em um domínio de $x \in [-6, 6]$ por 110.000 épocas. Em cada época, pontos de treinamento são amostrados e perturbados para aumentar a robustez. A otimização é realizada por retropropagação do gradiente da função de perda total. A perda de ortogonalidade é ativada e a paridade da rede é alternada em épocas pré-definidas para explorar diferentes famílias de soluções. As implementações foram realizadas em ambiente Python com CUDA, utilizando NumPy, PyTorch e Matplotlib. O código completo se encontra disponível em repositório público do GitHub ¹.

Discussão e Resultados

A eficácia do modelo foi avaliada por meio da análise da convergência da energia e da comparação das autofunções obtidas com as soluções analíticas conhecidas para o OHQ. O treinamento foi dividido em fases para encontrar sequencialmente os quatro primeiros autoestados ($n = 0, 1, 2, 3$).

A Figura 1 (A) exibe o histórico da energia prevista pela rede. Observa-se a formação de platôs estáveis que convergem precisamente para os autovalores teóricos $E_n = n + \frac{1}{2}$ (linhas tracejadas), indicando o sucesso da rede em encontrar os níveis de energia discretos. A transição entre os platôs ocorre nas épocas em que a perda de ortogonalidade é ativada e a simetria da rede é trocada, forçando o modelo a buscar o próximo autoestado de energia superior com a paridade correta. A Figura 1 (B) mostra o histórico da perda total, que diminui consistentemente, validando a estabilidade do processo de otimização.

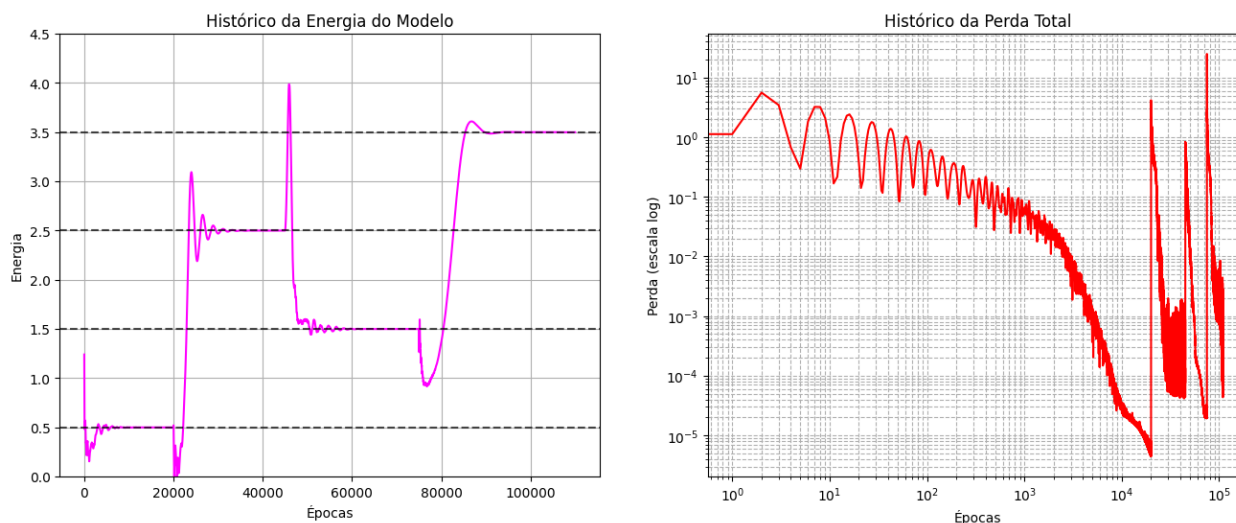


Figura 1: Gráficos de convergência do treinamento. (A) Histórico da energia, com linhas tracejadas indicando os valores teóricos. (B) Histórico da perda total em escala logarítmica.

Os autovalores de energia finais, extraídos dos modelos com menor perda em cada fase, demonstram excelente concordância com os valores teóricos, como detalhado na Tabela 1. O erro

¹<<https://github.com/geovanivsoares/SchrodingerPINN1D>>

relativo para todos os quatro estados permaneceu abaixo de 0,01%, evidenciando a alta precisão do método.

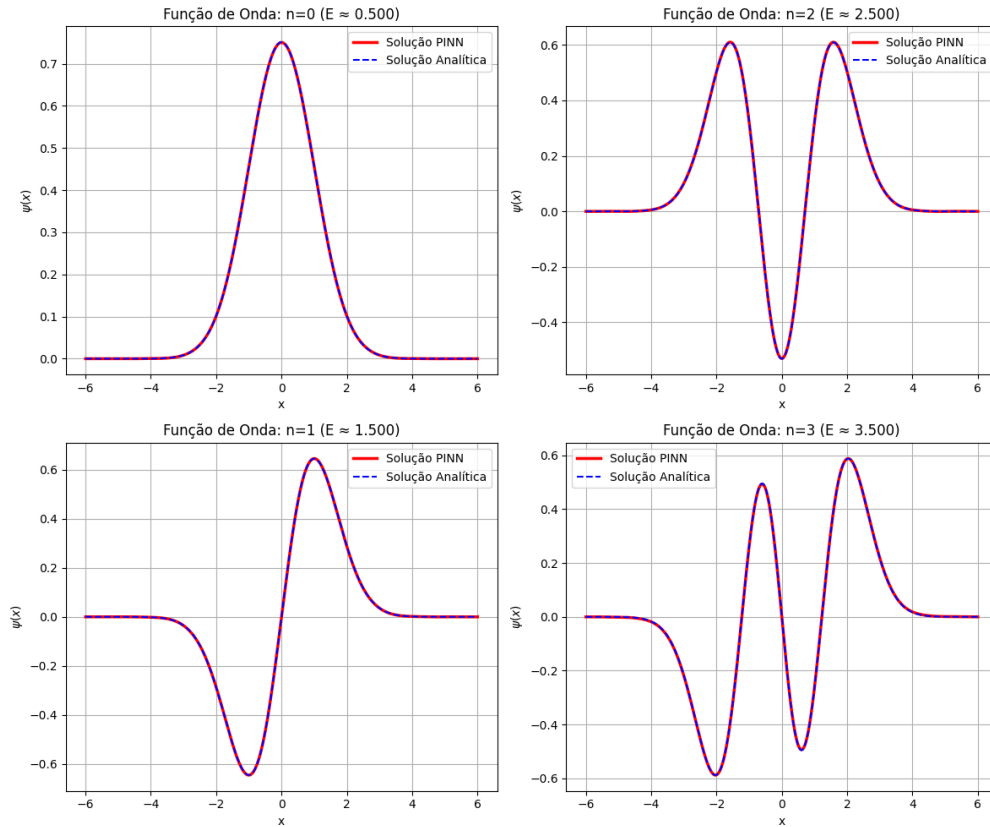


Figura 2: Funções de onda normalizadas para os quatro primeiros estados do OHQ. A solução da PINN (vermelho) é comparada com a solução analítica (azul tracejado).

Tabela 1: Comparação entre as energias obtidas pela PINN e os valores teóricos.

Estado (n)	Energia PINN (E_{pinn})	Energia Teórica (E_{teo})	Erro Relativo (%)
0	$4,9996 \times 10^{-1}$	$5,0000 \times 10^{-1}$	0,01
1	$2,5000 \times 10^0$	$1,5000 \times 10^0$	0,00
2	$1,5000 \times 10^0$	$2,5000 \times 10^0$	0,00
3	$3,4996 \times 10^0$	$3,5000 \times 10^0$	0,01

Além dos autovalores, a PINN também reproduziu com fidelidade as autofunções ($\psi_n(x)$), conforme ilustrado na Figura 2. As soluções da rede (linha contínua vermelha), após normalização numérica, apresentam uma sobreposição quase perfeita com as funções de onda analíticas (linha tracejada azul), que são baseadas nos polinômios de Hermite. A correspondência é notável tanto para os estados de paridade par ($n = 0, 2$) quanto ímpar ($n = 1, 3$), confirmando que a arquitetura com simetria embutida e as funções de perda físicas guiaram o modelo para soluções corretas e fisicamente significativas.

Considerações Finais

Este trabalho demonstrou com sucesso a aplicação de uma Rede Neural Informada pela Física para resolver o problema de autovalores da Equação de Schrödinger para o Oscilador Harmônico Quântico. A metodologia, baseada em (JIN; MATTHEAKIS; PROTOPAPAS, 2022), mostrou-se altamente eficaz, determinando todos os quatro primeiros autovalores de energia com um erro relativo inferior a 0,01% e reproduzindo as autofunções correspondentes com notável precisão.

A introdução de funções de perda com significado físico, como a de normalização e ortogonalidade, juntamente com a arquitetura de rede que incorpora a simetria de paridade, foram fundamentais para evitar soluções triviais e guiar o treinamento para autoestados fisicamente consistentes. Os resultados validam o potencial das PINNs como uma ferramenta poderosa e flexível para a física computacional, capaz de resolver problemas quânticos complexos de forma não supervisionada. Como perspectivas futuras, esta abordagem pode ser estendida para potenciais mais complexos, sistemas com múltiplos corpos ou problemas em dimensões superiores, onde soluções analíticas são inexistentes.

Referências

JIN, H.; MATTHEAKIS, M.; PROTOPAPAS, P. Physics-informed neural networks for quantum eigenvalue problems. In: IEEE. *2022 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*. [S.l.], 2022. p. 1–8.

MATTHEAKIS, M. et al. *Physical Symmetries Embedded in Neural Networks*. 2020. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1904.08991>>.

RAISSI, M.; PERDIKARIS, P.; KARNIADAKIS, G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 378, p. 686–707, 2019.