

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 539.14

DOI: 10.17223/00213411/65/7/3

ОПТИМИЗАЦИЯ ГИПЕРПАРАМЕТРОВ АЛГОРИТМА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
ЭКСТРАПОЛЯЦИИ ВАРИАЦИОННЫХ РАСЧЕТОВ*А.О. Белозеров¹, А.И. Мазур¹, А.М. Широков²¹ Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия² НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ, г. Москва, Россия

Предложен метод оптимизации гиперпараметров разработанного нами алгоритма машинного обучения для экстраполяции результатов вариационных расчетов в квантовой механике. Метод позволяет достаточно быстро получить оптимальные значения гиперпараметров для обучения искусственных нейронных сетей. Показано, что отклонение значений некоторых гиперпараметров от оптимальных приводит к ухудшению предсказаний результатов экстраполяции.

Ключевые слова: машинное обучение, методы экстраполяции, энергии связанных состояний, модель ядерных оболочек.

Введение

Существенный прогресс в экспериментальных исследованиях последних лет стал причиной растущей потребности в создании новых методов описания атомных ядер. Особое место среди них занимают подходы *ab initio*, которые не используют никаких предположений и упрощений, основанных на тех или иных модельных представлениях. Модель оболочек без инертного кора (МОБИК) [1] представляется на данный момент одним из наиболее последовательных и перспективных среди *ab initio* подходов. В этом подходе, в отличие от стандартной модели оболочек, рассматриваются все возможные возбуждения нуклонов, удовлетворяющие принципу Паули.

Результаты расчетов в МОБИК для заданного реалистического потенциала зависят от максимального числа осцилляторных квантов возбуждения $N_{\max}$ и величины осцилляторной энергии $\hbar\Omega$.

При увеличении $N_{\max}$ число базисных функций растет экспоненциально, что приводит к возможности проведения расчетов ядер с массовым числом $A \lesssim 20$ только для $N_{\max} \lesssim 20$ даже на суперкомпьютерах. В связи с этим важной и актуальной задачей является развитие методов экстраполяции результатов МОБИК на случай бесконечного базиса. Наряду с относительно простыми методами экстраполяции, такими как Extrapolation B [2], большое развитие получают методы экстраполяции, основанные на алгоритмах машинного обучения.

Машинное обучение применяется в ядерной физике. Так, искусственные нейронные сети (ИНС) используются для описания масс [3] и зарядовых радиусов [4] ядер, определения энергий отделения протонов [5], идентификации прицельных параметров в столкновении тяжелых ионов [6–8], оценки периодов полураспада бета-радиоактивных ядер [9]. Также ИНС применяются в физике высоких энергий.

Применение методов машинного обучения для экстраполяции расчетов МОБИК, проведенных с модельным потенциалом Daejeon16 [10] для ядра ${}^6\text{Li}$ было реализовано в работе [11]. Однако предсказанные диапазоны лежат на 0.2 МэВ ниже теоретического значения, полученного с помощью Extrapolation B, и на 0.1 МэВ ниже экспериментального.

В настоящей работе мы развиваем метод, предложенный в [11]. Особое внимание уделяется разработке такого алгоритма, который способен работать с малым количеством входных данных, что характерно для результатов МОБИК, но при этом обеспечивать достаточно хорошие результаты экстраполяций. Алгоритм метода апробируется на простой модельной задаче, вариационные

* Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005), гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (№ 21-1-1-67-3) и гранта РФФИ № 20-02-00357.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>