

DOI: doi.org/10.21009/03.1201.FA38

PENDEKATAN DEEP LEARNING UNTUK MEMPREDIKSI ENERGI KEADAAN DASAR BERDASARKAN POTENSIAL OSILATOR HARMONIK SEDERHANA DUA DIMENSI

Achmad Jaelani¹⁾, Teguh Budi Prayitno¹⁾, Yanoar Pribadi Sarwono^{2, a)}¹Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA), Universitas Negeri Jakarta, Jakarta Timur 13220, Indonesia²Pusat Riset Fisika Kuantum, Badan Nasional dan Inovasi Nasional, Tangerang Selatan 15314, IndonesiaEmail: ^{a)}yano001@brin.go.id

Abstrak

Penelitian ini mengusulkan pendekatan *deep learning* untuk memprediksi energi keadaan dasar elektron berdasarkan potensial osilator harmonik sederhana dua dimensi dari persamaan Schrödinger. Metode ini menggunakan jaringan saraf konvolusi untuk mempelajari hubungan antara potensial dan energi keadaan dasar. Dataset osilator harmonik sederhana dihasilkan dengan fungsi skalar dimana parameter-parameter dihasilkan secara acak. Kinerja pendekatan yang diusulkan dibandingkan dengan metode numerik, seperti metode beda hingga. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa pendekatan *deep learning* lebih efisien dan akurat dalam memprediksi energi keadaan dasar berdasarkan potensial osilator harmonik sederhana dua dimensi. Model mendapatkan *mean squared error* sebesar 6.37×10^{-7} mHa pada data uji. Pendekatan ini memiliki potensi aplikasi dalam berbagai bidang, seperti ilmu material, komputasi kimia, dan mekanika kuantum.

Kata-kata kunci: Deep Learning, Persamaan Schrödinger, Energi Keadaan Dasar.

Abstract

This research proposes a deep learning approach to predict the ground state energy of an electron based on the two-dimensional simple harmonic oscillator potential of the Schrödinger equation. The approach uses convolutional neural networks to learn the relationship between the potential and the ground state energy. The simple harmonic oscillator dataset is generated with a scalar function where the parameters are randomly generated. The performance of the proposed approach is compared with numerical methods, such as the finite difference methods. The results show that the deep learning approach is more efficient and accurate in predicting the ground state energy based on the two-dimensional simple harmonic oscillator potential, achieving a mean squared error of 6.37×10^{-7} mHa on the test data. This remarkable performance demonstrates the potential of the proposed approach for applications in various fields, including material science and quantum mechanics.

Keywords: Deep Learning, Schrödinger Equation, Ground State Energy.

PENDAHULUAN

Perkembangan penelitian di bidang mekanika kuantum, membuat metode pendekatan untuk menghitung parameter sistem fisika semakin meningkat. Banyak metode, baik berdasarkan pendekatan-pendekatan interaksi sistem kuantum (*tight binding*, teori fungsi densitas, teori perturbasi, dll.) atau berdasarkan penyesuaian fenomenologi terhadap hasil eksperimen (medan gaya), terus berkembang [1-6]. Metode-metode ini memungkinkan menentukan struktur elektronik atom, molekul, dan zat padat. Menciptakan metode yang lebih efisien dan/atau akurat untuk memecahkan masalah mekanika kuantum sangat penting bagi perkembangan lebih lanjut dalam fisika, kimia, dan ilmu material. Pendekatan metode pembelajaran mesin (*machine learning*) telah mengalami peningkatan dalam bidang fisika kuantum dalam beberapa tahun terakhir [7]. Walaupun istilah pembelajaran mesin baru digunakan beberapa dekade terakhir, metode ini telah digunakan dalam bidang fisika dan kimia sejak awal perkembangan komputer.

Baru-baru ini, perhitungan *ab initio* tingkat tinggi telah digunakan untuk melatih jaringan saraf buatan dalam menyesuaikan model interaksi berdimensi tinggi [8] dan membuat prediksi informasi tentang sifat-sifat material [9]. Pendekatan-pendekatan ini terbukti sangat kuat, menghasilkan model-model yang dilatih untuk spesies atomik tertentu atau berdasarkan fitur-fitur geometri yang dipilih secara manual [10]. Namun, pemilihan fitur secara manual merupakan keterbatasan yang signifikan dari pendekatan-pendekatan tersebut, dimana hasilnya sangat bergantung pada pilihan representasi input dan inklusi dari semua fitur yang relevan. Keterbatasan ini telah diketahui dengan baik dalam bidang pengenalan tulisan tangan dan klasifikasi gambar, dimana kinerja pendekatan fitur yang dipilih secara manual telah mandek [11].

Pendekatan berbasis fitur seperti itu juga digunakan dalam penemuan material untuk membantu ilmuwan material dalam menargetkan kandidat material yang menjanjikan dengan efisien. Teknik *unsupervised learning* juga telah digunakan untuk mengidentifikasi fase-fase dalam konfigurasi atom dan sistem benda-banyak [12]. Dalam penelitian lainnya, pembelajaran mesin telah berhasil menginterpolasi pemetaan posisi ke fungsi gelombang untuk potensial elektrostatik tertentu, tetapi hasilnya tidak dapat dipindahkan (*transferable*), yang juga merupakan keterbatasan dalam aplikasi jaringan saraf buatan pada persamaan diferensial parsial lainnya. Dapat dipindahkan artinya bahwa model yang dilatih pada bentuk persamaan diferensial parsial tertentu akan dengan akurat dan dapat diandalkan memprediksi hasil untuk contoh-contoh lain dengan bentuk yang sama.

Dalam penelitian ini, *Deep Neural Network* (DNN) digunakan untuk mempelajari pemetaan antara potensial elektrostatik dan energi keadaan dasar sistem Osilator Harmonik Sederhana (OHS). TensorFlow, sebuah *framework* pembelajaran mesin yang populer dan terkemuka dalam industri [13], digunakan untuk membangun arsitektur DNN. Untuk menghasilkan dataset yang diperlukan, metode beda hingga digunakan dengan memanfaatkan pustaka numerik seperti Numpy [14] dan Scipy [15], guna melakukan perhitungan numerik pada matriks yang berisi data potensial OHS sekaligus menyelesaikan persamaan eigen. Dataset yang terdiri dari gambar potensial 2D OHS ini kemudian diterapkan teknik konvolusi [16] yang telah terbukti berhasil dalam bidang *computer vision* untuk mengekstrak fitur penting dari data potensial OHS. Karena hanya perlu memprediksi satu nilai, pendekatan regresi digunakan dalam model ini. Untuk mengevaluasi kinerja model, metrik *Mean Squared Error* (MSE) digunakan, dimana semakin rendah nilai MSE, semakin baik performa model yang dicapai.

METODOLOGI

Dataset

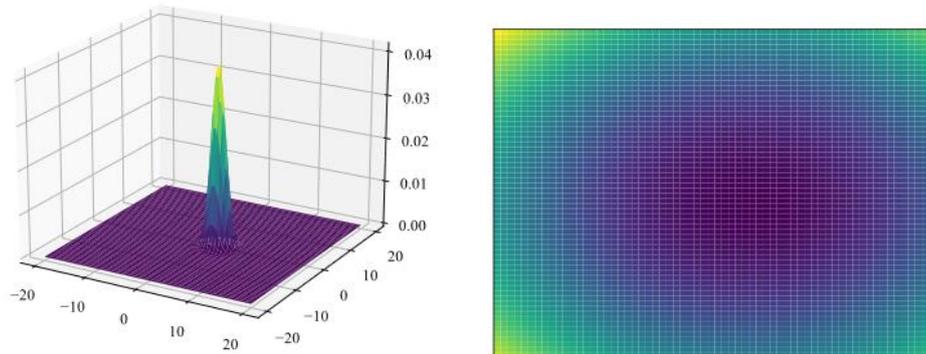
Pengembangan model DNN melibatkan desain arsitektur jaringan dan perolehan data latih. Perolehan data latih adalah aspek paling penting dari model pembelajaran mesin, karena hal tersebut menentukan tingkat akurasi model yang dihasilkan. Dalam penelitian ini, potensial OHS direpresentasikan dalam bentuk *grid* 64×64 yang mencakup rentang -20 hingga 20 a.u. pada sumbu x dan y . Potensial ini dapat divisualisasikan sebagai gambar *grayscale*, terdiri dari matriks nilai *floating point*. Potensial OHS dihasilkan dengan fungsi skalar.

$$V(x, y) = \frac{1}{2} [k_x (x - c_x)^2 + k_y (y - c_y)^2] \tag{1}$$

dimana k_x , k_y , c_x , dan c_y dihasilkan secara acak berdasarkan TABEL 1.

TABEL 1. Kriteria pembangkitan bilangan acak untuk dataset osilator harmonik sederhana

Parameter	Deskripsi	Batas bawah	Batas atas
k_x	konstanta OHS	0.0	0.16
k_y	konstanta OHS	0.0	0.16
c_x	pergeseran pusat	-8.0	8.0
c_y	pergeseran pusat	-8.0	8.0



GAMBAR 1. Rapat probabilitas $|\psi|^2$ (a) dan potensial 2D tersebut $V(r)$ (b)

Penyelesaian Numerik

Metode beda hingga (*finite difference method*) diimplementasikan untuk memecahkan masalah nilai eigen untuk setiap potensial V yang dibuat. Persamaan Schrödinger independen terhadap waktu dapat dituliskan sebagai,

$$\hat{H}\psi \equiv (\hat{T} + \hat{V})\psi = \varepsilon\psi \tag{2}$$

dimana \hat{H} adalah operator Hamiltonian, \hat{T} operator kinetik, \hat{V} operator potensial, ψ fungsi gelombang, dan ε merupakan energi keadaan dasar. Potensial yang dihasilkan dengan rentang dinamis dan skala panjang yang sesuai untuk menghasilkan energi keadaan dasar dalam rentang yang relevan secara fisika. Satuan atom digunakan, dimana $\hbar = m_e = 1$. Contoh potensial dan rapat probabilitas 2D ditunjukkan pada GAMBAR 1.

Untuk skema metode beda hingga, pendekatan yang digunakan untuk bentuk $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ adalah tiga titik *grid*. Ini akan mengubah bentuk tersebut dari fungsi gelombang kontinu menjadi fungsi gelombang diskrit.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2}, \tag{3}$$

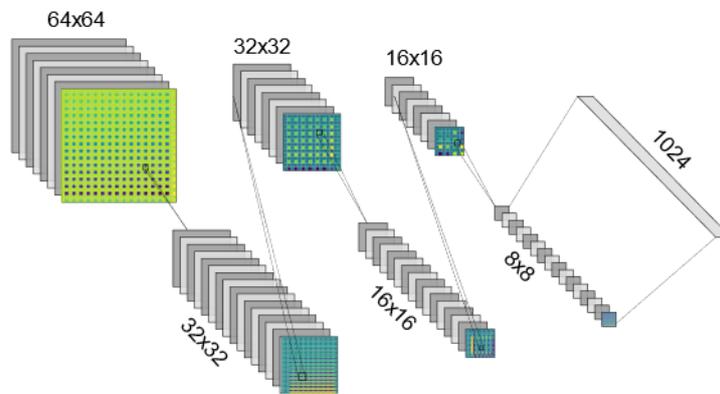
dimana $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ merupakan operator laplacian dalam operator kinetik \hat{T} , ψ_i merupakan fungsi gelombang pada *grid* ke- i , dan Δx adalah jarak antar *grid*. Berdasarkan Persamaan **Error! Reference source not found.**, persamaan Schrödinger 2D tidak bergantung waktu dapat dituliskan sebagai,

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2\Delta x^2} + V_1 & -\frac{1}{2\Delta x^2} & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{1}{\Delta x^2} + V_2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{2\Delta x^2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{1}{\Delta x^2} + V_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} = \epsilon \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} \tag{4}$$

dimana operator energi kinetik dan potensial adalah,

$$\hat{T} = -\frac{1}{2\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{bmatrix} V_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{N-1} \end{bmatrix} \tag{5}$$

Deep Neural Network



GAMBAR 2. Arsitektur DNN yang digunakan pada penelitian ini

Sebuah arsitektur DNN yang sederhana namun dalam yang ditunjukkan pada ditunjukkan pada GAMBAR 2 digunakan yang terdiri dari sejumlah unite berulang dari lapisan (*layer*) konvolusi. Dua jenis lapisan konvolusi yang berbeda, yang disebut sebagai lapisan reduksi dan lapisan non-reduksi digunakan. Lapisan reduksi beroperasi dengan ukuran filter (kernel) 3×3 piksel. Setiap lapisan reduksi memiliki 64 filter dan langkah (*stride*) sebesar 2, mengakibatkan pengurangan resolusi gambar dengan faktor 2 pada setiap iterasi (*epoch*). Di antara setiap pasangan lapisan konvolusi reduksi, dimasukkan dua lapisan konvolusi (total delapan lapisan) yang menggunakan 16 filter berukuran 4×4 dan mempertahankan resolusi gambar karena besar langkah.

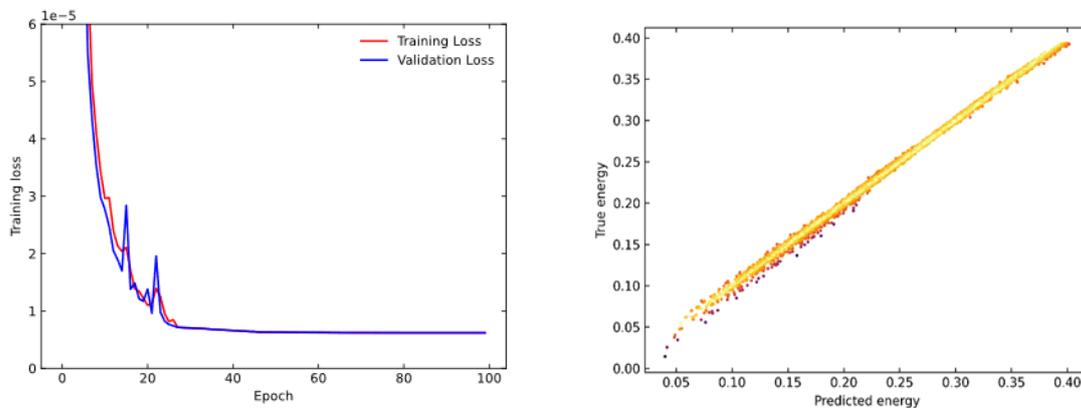
Tujuan dari lapisan-lapisan ini adalah untuk memperkenalkan parameter tambahan yang dapat dilatih ke dalam jaringan. Semua lapisan konvolusi diaktifkan menggunakan fungsi aktivasi ReLU (*rectified linear unit*). Luaran dari lapisan konvolusi terakhir disalurkan ke lapisan *fully connected* dengan panjang 1024, menggunakan aktivasi linear. Selanjutnya, lapisan ini terhubung ke lapisan terhubung penuh terakhir dengan satu luaran tunggal. Luaran ini mewakili nilai yang dihasilkan oleh DNN, yang digunakan untuk menghitung MSE antara label yang benar dan label yang diprediksi, juga dikenal sebagai *loss*.

Skema optimasi Adam dengan tingkat laju pembelajaran (*learning rate*) 0.0001 digunakan untuk meminimalkan *loss function*. Proses pelatihan berjalan selama 100 iterasi. Setiap iterasi

menggunakan ukuran *batch* sebanyak 1000 gambar. Setelah setiap iterasi, gradien dihitung menggunakan GPU, dan optimasi Adam akan menyesuaikan parameter ke arah yang meminimalkan *loss function*. Kumpulan data terdiri dari 50000 sampel, dengan 80% dialokasikan untuk pelatihan, 10% dari data latih akan digunakan untuk validasi, dan 10% dari keseluruhan data digunakan untuk data uji.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dalam penelitian ini, tujuan dari pengembangan model DNN adalah untuk memprediksi energi keadaan dasar dari potensial osilator harmonik sederhana 2D berdasarkan persamaan Schrödinger. Model ini dilatih selama 100 iterasi dan mencapai MSE sebesar 6.17×10^{-7} mHa untuk *training loss*, dan 6.24×10^{-7} pada *validation loss* pada iterasi terakhir. Hasil ini menunjukkan tingkat akurasi yang tinggi dalam memprediksi energi keadaan dasar. *Loss function*, yang mengukur perbedaan antara nilai yang diprediksi dan nilai sebenarnya, dimulai dari 0.0057 mHa dan menurun secara signifikan, seperti yang ditunjukkan dalam GAMBAR 3(a). Untuk mengevaluasi kinerja model, pengujian dilakukan menggunakan 10.000 titik data yang tidak digunakan selama proses pelatihan, dan perbandingan dilakukan antara nilai-nilai yang diprediksi dengan nilai-nilai sebenarnya. Hasilnya, seperti yang terlihat dalam GAMBAR 3(b), menunjukkan nilai sebesar 6.37×10^{-7} mHa, yang menunjukkan bahwa model ini sangat akurat dalam memprediksi energi keadaan dasar dari potensial osilator harmonik sederhana 2D.



GAMBAR 3. Grafik kurva MSE pelatihan selama 100 iterasi (a) dan histogram energi sebenarnya dan energi prediksi (b)

SIMPULAN

Dalam penelitian ini, disajikan pendekatan baru dalam menyelesaikan masalah struktur elektronik untuk molekul, material, dan zat padat, yang terinspirasi oleh suksesnya penerapan jaringan saraf konvolusi pada *computer vision*. Arsitektur jaringan saraf yang sederhana namun dalam (DNN) memanfaatkan unit berulang dari lapisan konvolusi. Lapisan konvolusi terdiri dari lapisan konvolusi reduksi dan non-reduksi. Keberhasilan DNN dalam mempelajari pemetaan antara potensial elektrostatik pembatas dan energi keadaan dasar disajikan. Hasil menunjukkan bahwa model ini sangat akurat dalam memprediksi energi keadaan dasar potensial osilator harmonik sederhana 2D. Secara keseluruhan, hasil ini menunjukkan bahwa model DNN dapat digunakan secara efektif dalam memprediksi energi keadaan dasar sistem 2D berdasarkan persamaan Schrödinger, dan memiliki potensi untuk diterapkan dalam berbagai bidang, seperti fisika dan kimia.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis ingin mengungkapkan terima kasih yang tulus kepada Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D., dan Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si., atas bimbingan dan dukungan, yang tak ternilai selama penelitian ini. Keahlian, pengetahuan, dan wawasan berharga mereka telah menjadi faktor penting dalam membentuk arah dan hasil dari penelitian ini. Penulis juga ingin mengucapkan terima kasih

kepada Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) atas dukungan dana, sarana, dan prasarana yang sangat berarti.

REFERENSI

- [1] F. U. Rahman *et al.*, "A scheme of numerical solution for three-dimensional isoelectronic series of hydrogen atom using one-dimensional basis functions," *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 118, no. 19, p. e25694, 2018.
- [2] D. Pfau *et al.*, "Ab initio solution of the many-electron Schrödinger equation with deep neural networks," *Physical Review Research*, vol. 2, no. 3, p. 033429, 2020.
- [3] Y. P. Sarwono *et al.*, "Numerical variational solution of hydrogen molecule and ions using one-dimensional hydrogen as basis functions," *New Journal of Physics*, vol. 22, no. 9, p. 093059, 2020.
- [4] F. U. Rahman *et al.*, "Solution of two-electron Schrödinger equations using a residual minimization method and one-dimensional basis functions," *AIP Advances*, vol. 11, no. 2, p. 025228, 2021.
- [5] Y. P. Sarwono and R. Q. Zhang, "Higher-order Rayleigh-quotient gradient effect on electron correlations," *Journal Chemical Physics*, vol. 158, no. 13, p. 134102, 2023.
- [6] Y. P. Sarwono *et al.*, "Study on Electron Tunneling Lifetime by Projected Green's Function Approach in Single Quantum Well Semiconductor," *Indonesian Journal of Computing, Engineering and Design (IJoCED)*, vol. 5, no. 1, pp. 1-7, 2023.
- [7] G. Carleo *et al.*, "Machine learning and the physical sciences," *Reviews of Modern Physics*, vol. 91, no. 4, p. 045002, 2019.
- [8] J. Hermann *et al.*, "Deep-neural-network solution of the electronic Schrödinger equation," *Nature Chemistry*, vol. 12, no. 10, pp. 891-897, 2020.
- [9] K. Ryczko *et al.*, "Deep learning and density-functional theory," *Physical Review A*, vol. 100, no. 2, p. 022512, 2019.
- [10] A. Pavlov *et al.*, "Machine learning and the Schrödinger equation," in *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing, vol. 1236, no. 1, p. 012050, 2019.
- [11] Y. P. Sarwono, R. Q. Zhang, "Higher-order Rayleigh-quotient gradient effect on electron correlations," *Journal Chemical Physics*, vol. 158, no. 13, 2023.
- [12] T. Armon, L. Friedland, "Quantum versus classical effects in the chirped-drive discrete nonlinear Schrödinger equation," *Physical Review A*, vol. 100, no. 2, p. 022106, 2019.
- [13] *TensorFlow*. (2023). [Online]. Available: <https://zenodo.org/record/7987192>
- [14] C. R. Harris *et al.*, "Array programming with NumPy," *Nature*, vol. 585, no. 7825, pp. 357-362, 2020.
- [15] P. Virtanen *et al.*, "SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python," *Nat. Methods*, vol. 17, no. 3, pp. 261-272, 2020.
- [16] Y. P. Sarwono *et al.*, "Solutions of Atomic and Molecular Schrödinger Equations with One-dimensional Function Approach," *Chem. J. Chin. Univ.*, vol. 42, no. 7, pp. 2286-2298, 2021.