

# Elektroninio sužadavimo dinamikos dvimatėse sistemose aprašymas pasitelkiant neuroninius tinklus

## Using neural networks to describe the dynamics of electron excitation in two dimensional systems

Pranas Juknevičius, Andrius Gelžinis, Jevgenij Chmeliov  
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius  
<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[pranas.juknevičius@gmail.com](mailto:pranas.juknevičius@gmail.com)

**Ivadas.** Bandydami aprašyti kompleksinės sistemos evoliuciją mokslininkai dažniausiai kuria supaprastintus modelius, kad sistemą būtų galima aprašyti matematinėmis lygtimis. Tačiau dažniausiai tos lygtys išlieka per sudėtingos spręsti analitiškai, tad tokiu atveju yra pasitelkiami skaitiniai metodai. Jais galima pasiekti kiek norima tikslų rezultatą, tačiau tam reikia daug laiko arba didelių kompiuterinių išteklių. Alternatyva šiam uždavinio sprendimo būdui yra naudoti dirbtinį neuroninį tinklą, kuris išmokytų susieti sistemą aprašančius parametrus su sistemos evoliuciją nusakančiais parametrais. Duomenis, kuriais neuroninis tinklas būtų apmokomas, galima gauti iš eksperimentinių matavimų arba skaitiniais metodais sprendžiant sistemą aprašančias lygtis. Jeigu neuroniniam tinklui pavyktų išmokti sąsają tarp sistemos parametrų ir jos laikinės kinetikos, galėtumėme greitai ir mažais kompiuteriniais ištekliais prognozuoti sistemos laikinę evoliuciją. Taigi šiame darbe taikysime neuroninius tinklus siekdami aprašyti elektroninio sužadavimo dinamiką dvimatėse sistemose.

**Naudoti metodai.** Šiame darbe nagrinėjome modelinę sistemą. Panašūs modeliai yra taikomi modeliuojant pernašą tarp realių fotosintetinių kompleksų [1]. Ši sistema yra sudaryta iš mazgų, kurie gali:

1. būti sužadinti;
2. perduoti savo sužadimą artimiausiems kaimynams;
3. atiduoti sužadimą aplinkai.

Mazgai yra dviejų tipų: „žali“ ir „raudoni“. Raudoni ir žali mazgai skiriasi savo sužadavimo perdavimo spartomis, relaksacijos sparta, savo skaičiumi. Visi šie mazgai sudaro 10x10 kvadratinę gardelę. Visa gardelė yra apibūdinama 4 parametrais:

1.  $k_{hop}$  šuolio sparta tarp 2 vienodų mazgų;
2.  $k_{RG}$  šuolio sparta tarp raudono ir žalio mazgų;
3.  $k_{trap}$  raudono mazgo relaksacijos sparta;
4.  $n_r$  vidutinis raudonų mazgų skaičius gardelėje.

Spręsdami sistemą aprašančią pagrindinę kinetinę lygtį ir susumavę visų taškų užpildas gauname sistemos gesimo kreivę. Prie jos priderinus reikiamos formos funkciją, gauname parametrus, kurie nusako sistemos kinetiką. Taip gauname duomenis, iš kurių mokysis neuroninis tinklas. Neuroniniam tinklui paduodami gardelę apibūdinantys parametrai, ir jis turi atspėti, kokie bus priderintos funkcijos koeficientai.

Skaičiavimams buvo naudojamas nuoseklus neuroninis tinklas sudarytas iš 9 sluoksnių su „relu“ aktyvacijos funkcijomis bei naudojami grupelių normalizacijos (angl. *batch normalization*) sluoksniai.

Neuroninis tinklas buvo treniruojamas su ~30000 duomenų rinkiniu.

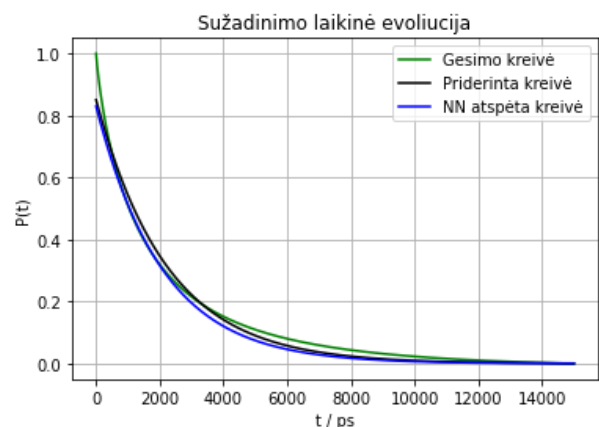
**Rezultatai.** Rezultatai priklauso nuo derinamos funkcijos formos.

1 lentelė. Skirtingų derinamų funkcijų palyginimas.

Skirtumas pateiktas vidutiniu kvadratinu nuokrypiu.

Pasirinkta funkcija	Pasirinktos priderintos gesimo kreivės skirtumas	Neuroninio tinklo spėjimo ir priderintos kreivės skirtumas	Neuroninio tinklo spėjimo ir gesimo kreivės skirtumas
$Aexp(Bt)$	$3,395 \cdot 10^{-4}$	$2,43 \cdot 10^{-3}$	$9,86 \cdot 10^{-3}$
$Aexp(Bt^C) + Dexp(Et^F)$	$3,023 \cdot 10^{-5}$	$3,49 \cdot 10^{-2}$	$2,69 \cdot 10^{-2}$

Kaip matyti iš 1 lentelės, daugiau koeficientų turinti funkcija yra tiksliau priderinama prie sužadavimo gesimo kreivės. Tačiau neuroniniam tinklui yra sunkiau atspėti didesnę skaičių koeficientų, todėl skirtumas tarp neuroninio tinklo spėjamos funkcijos ir suskaičiuotos sužadavimo gesimo kreivės nesumažėja.



1 pav. Sužadavimo gesimo kreivė, priderinta kreivė (eksponentė) ir neuroninio tinklo spėjama kreivė.

*Reikšminiai žodžiai:* modeliavimas, neuroniniai tinklai, sužadavimas.

### Literatūra

- [1] J. Chmeliov, G. Trinkunas, H. van Amerongen, L. Valkunas, J. Am. Chem. Soc. **136**, 8963–8972, 2014.