

USANDO REDES NEURAS PARA A REPRODUÇÃO DA REPRESENTAÇÃO BASE NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER. *Antonio C. S. Souto, Sergio M. Santos, Adelmo L. Cechin, Bardo B.E.J. Bodmann* (Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Instituto de Informática, Centro 6, UNISINOS).

Resolver a Equação de Schrödinger é um problema numérico típico de auto-valor/auto-vetor. A abordagem apresentada visa a elaboração de uma alternativa para determinar o espectro e a densidade espectral para um dado potencial. Através de um procedimento Monte Carlo são determinados a base truncada de Hilbert e os dados de treinamento da rede neural. Uma vez que redes neurais são aproximadores universais é possível representar a função de onda multidimensional desejada por meio de três diferentes abordagens: (a) a rede neural propriamente dita; (b) através dos coeficientes relativos a uma base conhecida apropriada; (c) uma rede neural como operador em uma abordagem quântica. Até onde sabemos, as abordagens (b) e (c), são totalmente novas e inexploradas. Para validar as abordagens (a) e (b), um grupo de superposições randômicas para a função de onda foi analisado pela rede neural e sua representação base foi reproduzida. A abordagem (c) é apresentada como proposta. Sob o ponto de vista físico, redes neurais podem ser usadas como uma eficiente ferramenta para a decomposição de uma função de onda em sua representação base. Um conjunto de redes treinadas para diferentes representações base deve ser portanto uma ferramenta válida para se decidir qual base é mais adequada para um dado sistema Schrödinger. Sob o ponto de vista computacional, nós também argumentamos que o algoritmo proposto é eficiente para encontrar as diversas soluções do tipo auto-valor/auto-vetor para a Equação de Schrödinger de um dado potencial, e mostramos uma nova maneira de identificar as funções de onda para diferentes potenciais. (UNBIC).