

Agent 驱动的神经网络波函数 架构自动探索

复旦大学 柴声都

2026.07.04

背景与动机

karpathy/ autoresearch

AI agents running research on single-GPU
nanochat training automatically



9

Contributors

48

Issues

89

Discussions

66k

Stars

9k

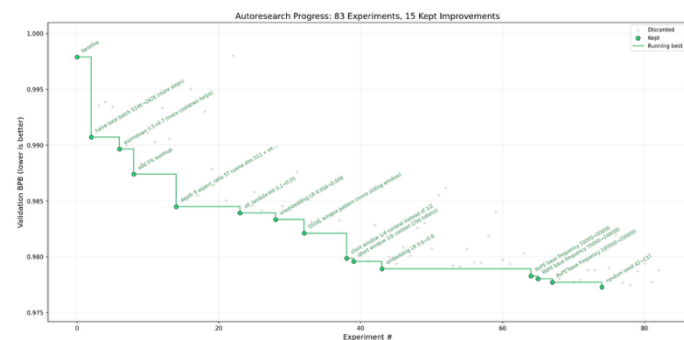
Forks



GitHub - karpathy/autoresearch: AI agents running research on single-GPU na...

From github.com

autoresearch



受 **autoresearch** 启发，我们尝试把 **agent** 接入 **神经网络波函数** 训练流程。

1

Agent 是否能在反馈明确的科学问题中，自动化的去做科研。

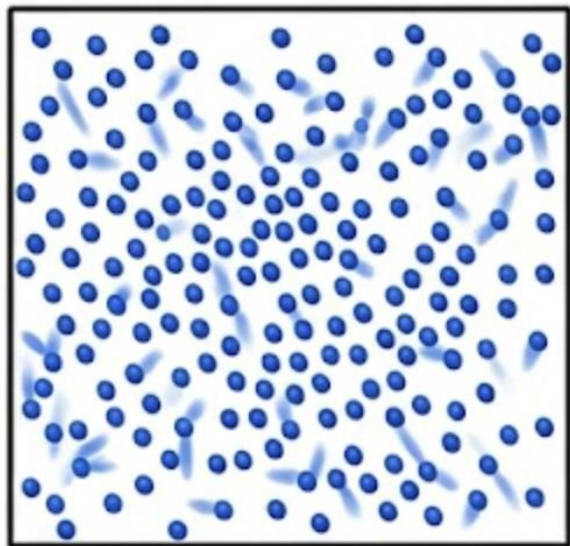
2

神经网络波函数提供了一个合适的测试场景：目清晰、结果可量化、架构改动能够直接反映到变分能量上。

二维电子气

研究对象：电子被限制在二维平面中运动

高密度，低 r_s



Liquid phase
动能主导，Fermi liquid

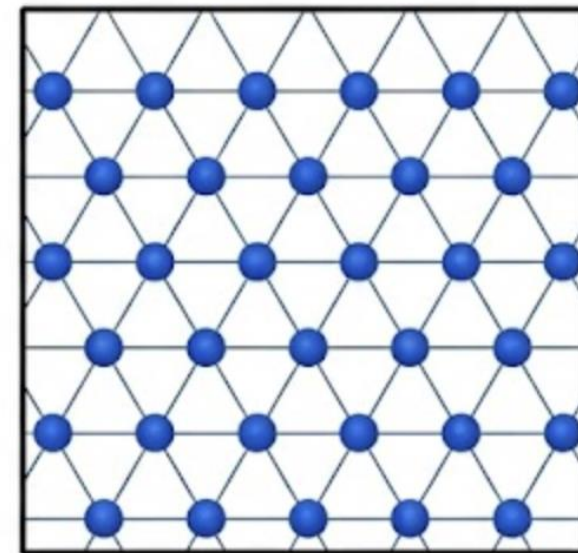
密度参数 r_s

$$r_s = \frac{1}{a_B \sqrt{\pi n}}$$

密度降低 · r_s 增大 · 关联增强

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + \frac{1}{r}$$

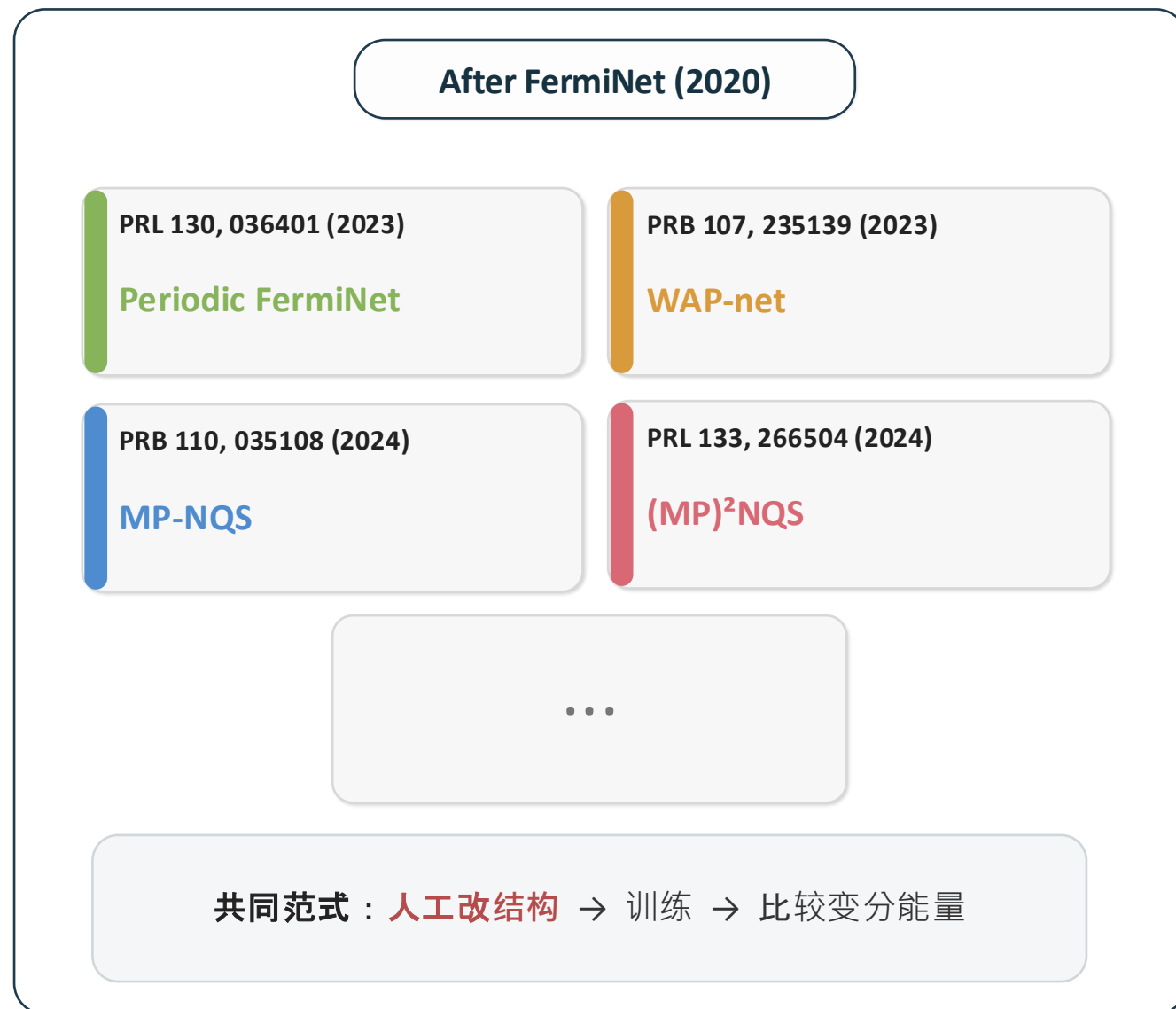
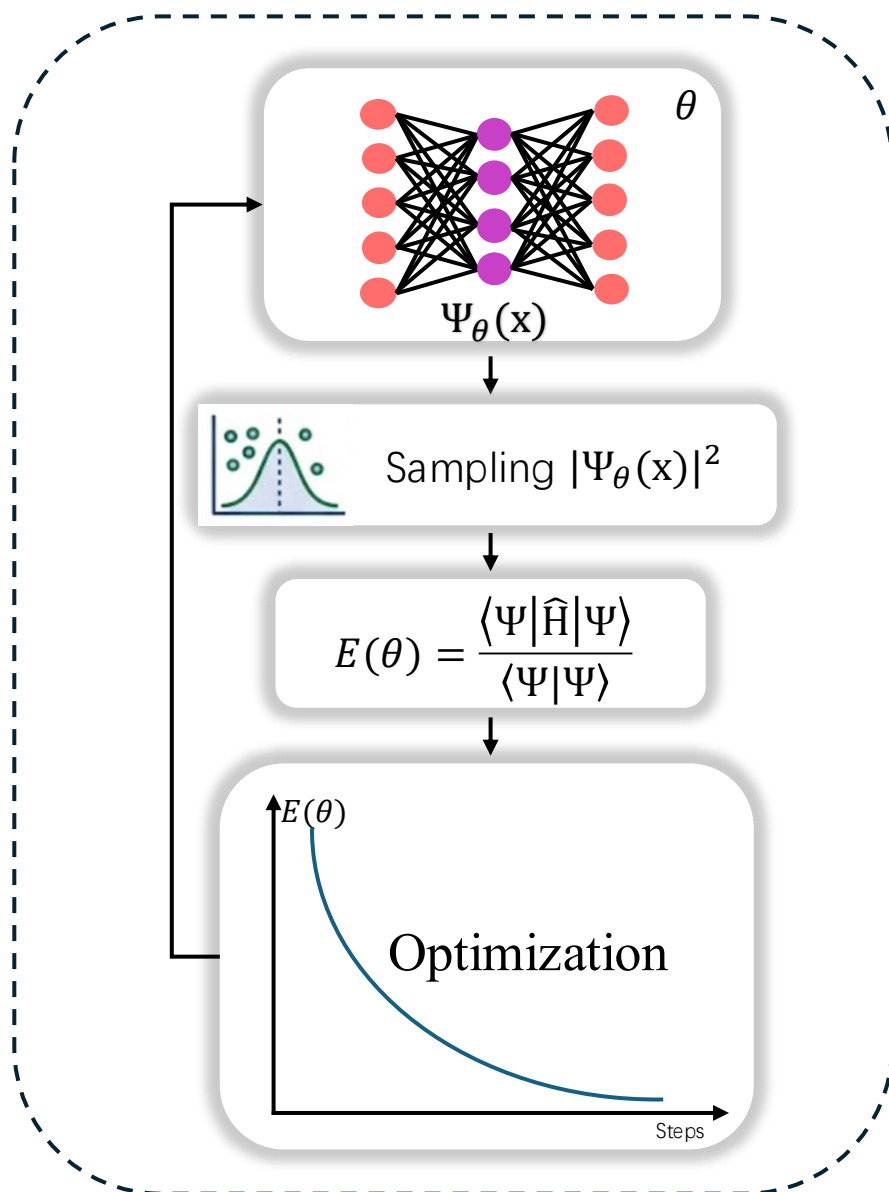
低密度，高 r_s



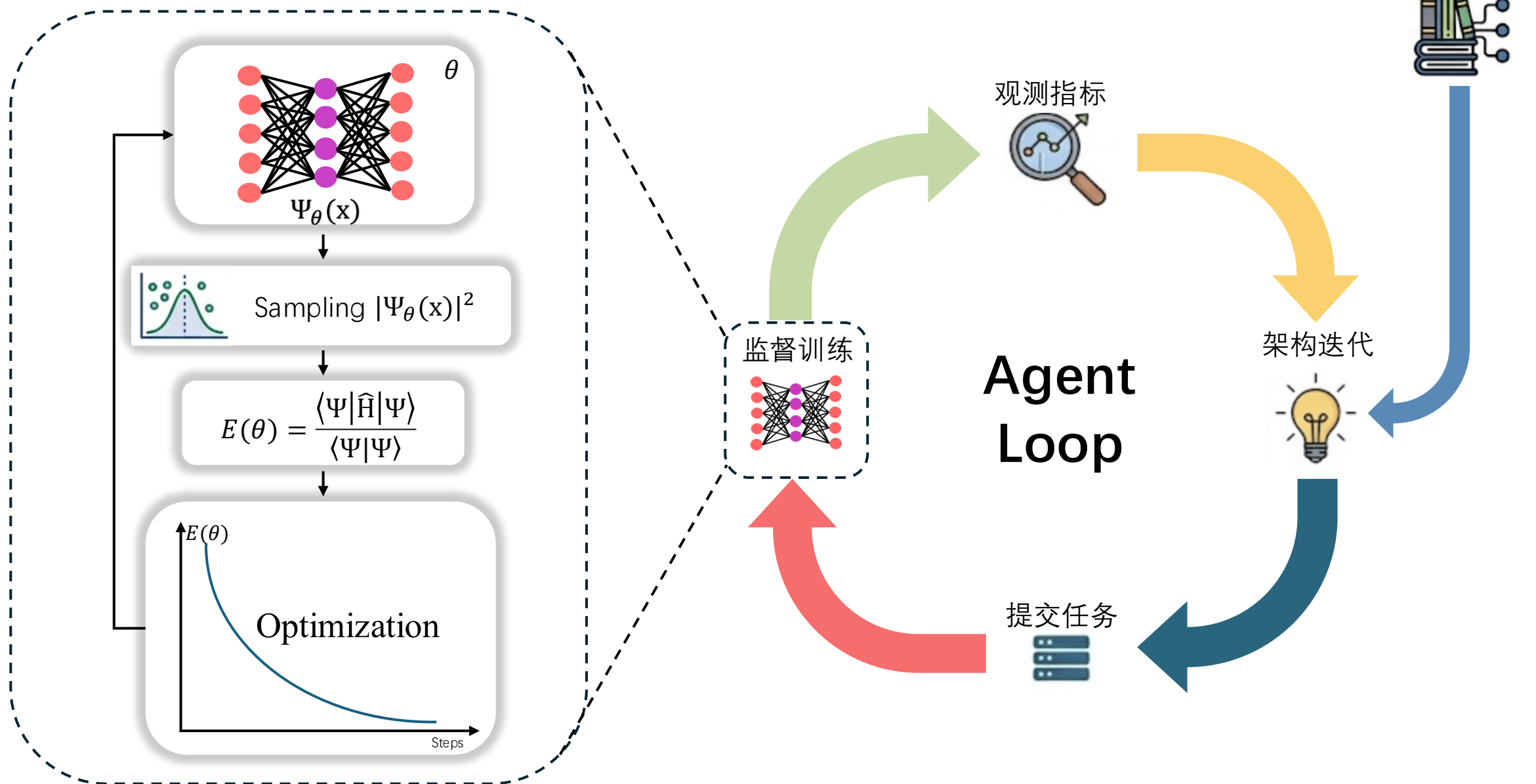
Crystal phase
库伦相互作用主导，形成 Wigner 晶体

二维电子气可以作为检验神经网络波函数能力的测试平台。

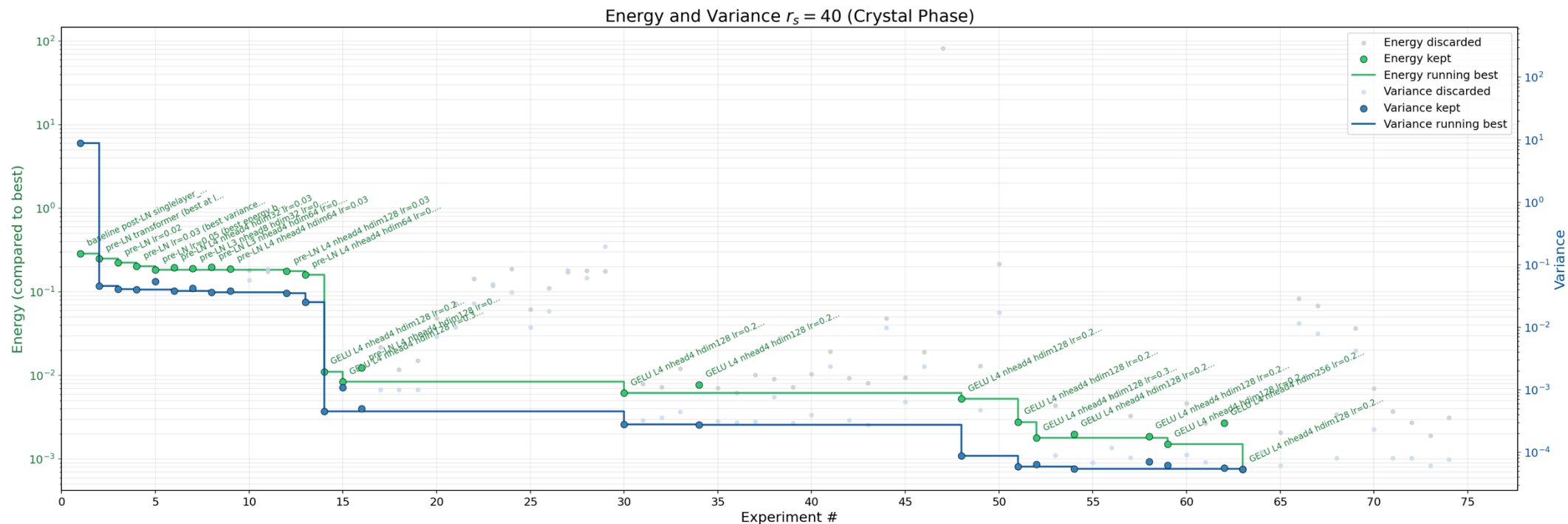
神经网络波函数



Agent Loop



第一轮: Crystal Phase ($r_s = 40$)



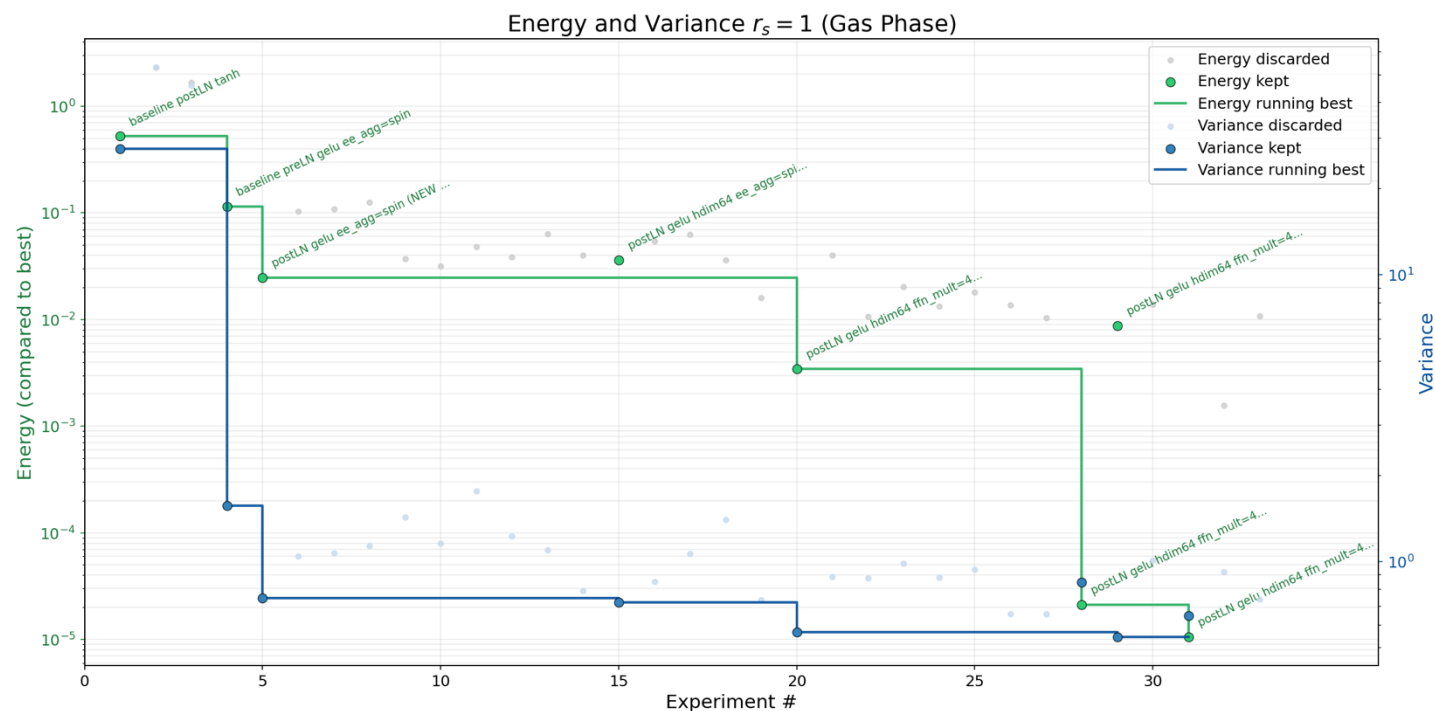
本轮迭代

- post LayerNorm $\rightarrow$ pre LayerNorm
 $LN(x + F(x)) \rightarrow x + F(LN(x))$
- 激活函数: $\tanh \rightarrow \text{gelu}$
- 加入一种全新的双电子特征

阶段结论

在 Crystal phase 中，搜索明显偏向 pre LayerNorm，这是因为因为post LayerNorm 方差会爆炸。

第二轮： Liquid Phase ($r_s = 1$) 出现相反偏好



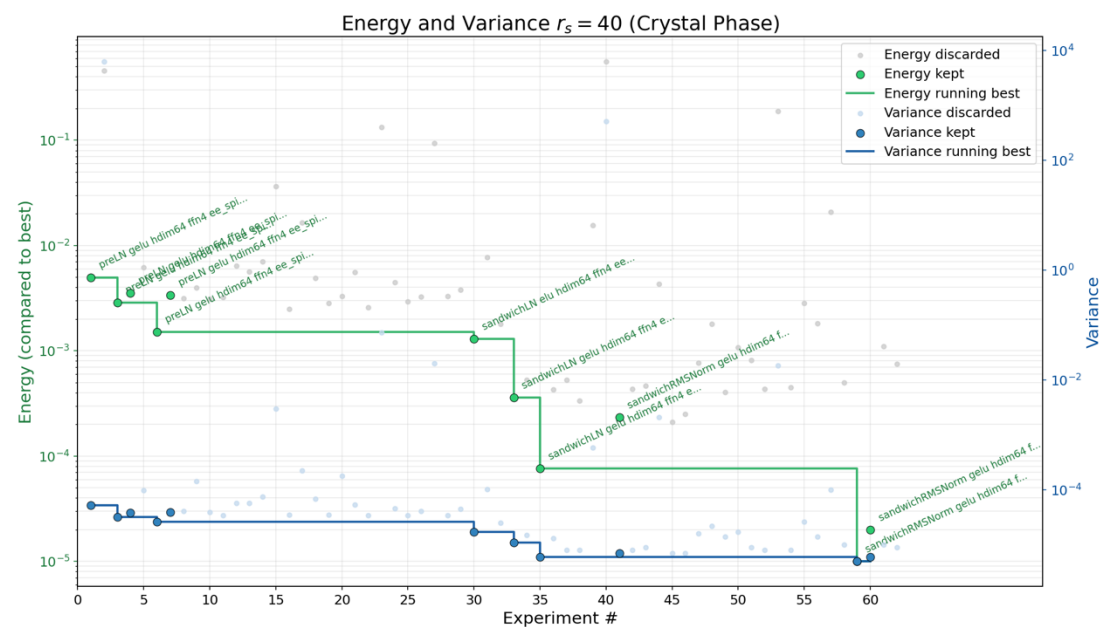
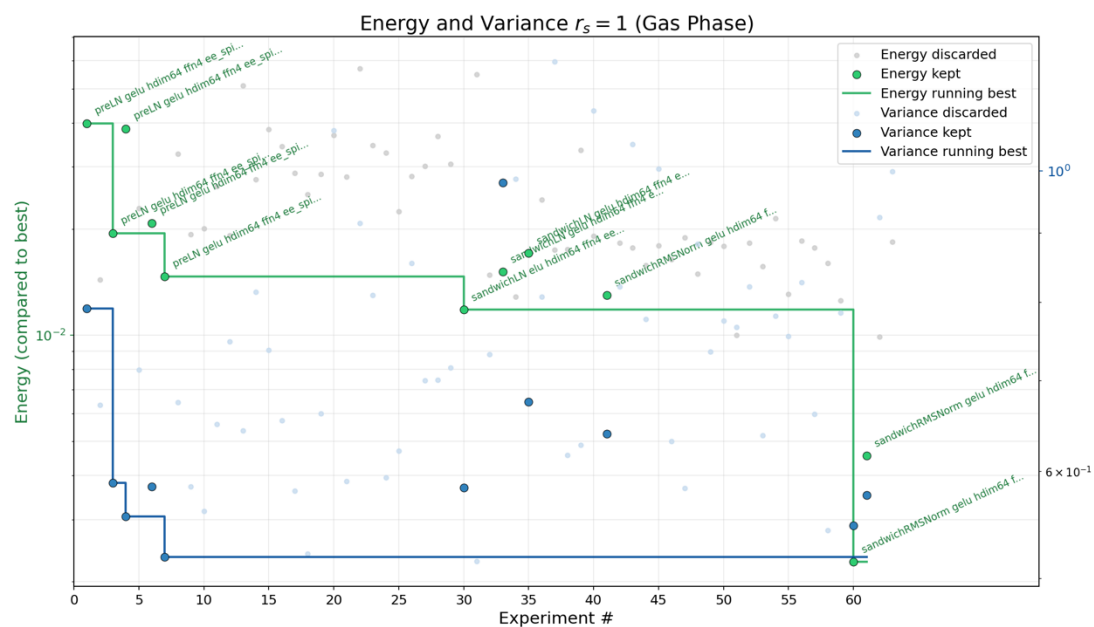
本轮迭代

- post LayerNorm + tanh $\rightarrow$ pre LayerNorm + gelu
- pre LayerNorm + gelu $\rightarrow$ post LayerNorm + gelu

阶段结论

Liquid phase 中，归一化与激活函数的最优组合与 Crystal phase 并不一致。

第三轮：调和两类相的矛盾



本轮迭代

- post / pre LayerNorm $\rightarrow$ sandwich LayerNorm
 $LN(x + F(LN(x)))$
- LayerNorm $\rightarrow$ RMSNorm

阶段结论

更合适的归一化策略可同时兼顾 Liquid phase 与 Crystal phase。

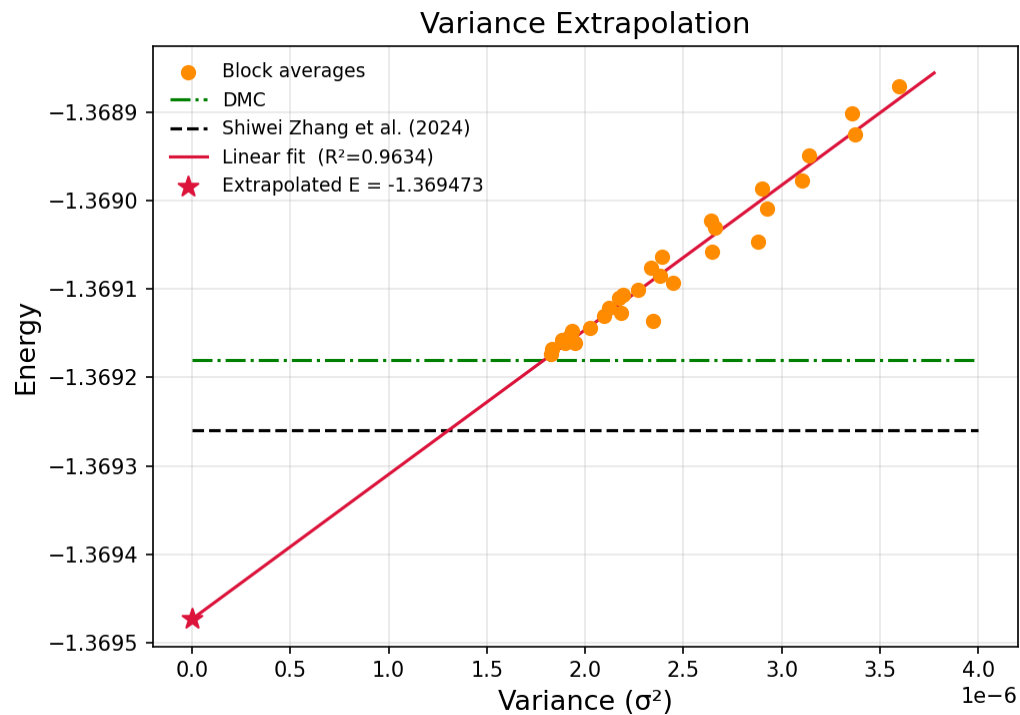
泛化性： 这些改动在更大体系上依然有效

消融实验 (N = 26)

Table 1: Ground state energies and variances of the 2D electron gas (2DEG).

Normalization	ee Feat.	Act.	$r_s = 1$		$r_s = 40$	
			Energy	Variance	Energy	Variance
postLN	w/	gelu	-5.127(15)	0.25345	-0.51(7)	5.76
preLN	w/	gelu	-5.11(2)	0.317	-0.6334(1)	2e-5
sandwichLN	w/	gelu	-5.128(15)	0.25378	-0.63546(6)	4e-6
postRMSNorm	w/	gelu	-5.14(1)	0.21702	-0.60(2)	0.83
preRMSNorm	w/	gelu	-5.10(2)	0.40119	-0.63385(1)	1.7e-5
sandwichRMSNorm	w/	gelu	-5.129(11)	0.129	-0.63536(6)	4e-6
sandwichRMSNorm	w/o	gelu	-4.83(7)	6.0	-0.6343(1)	1.4e-5
sandwichRMSNorm	w/	tanh	-5.11(1)	0.188	0.63523(7)	5e-6

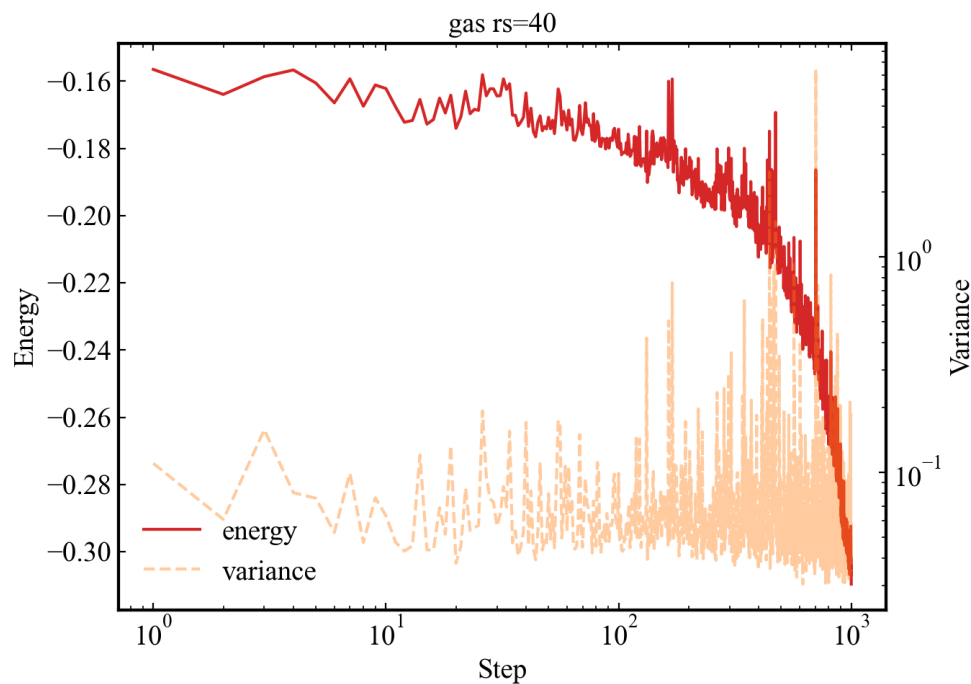
更大体系 (N = 56)



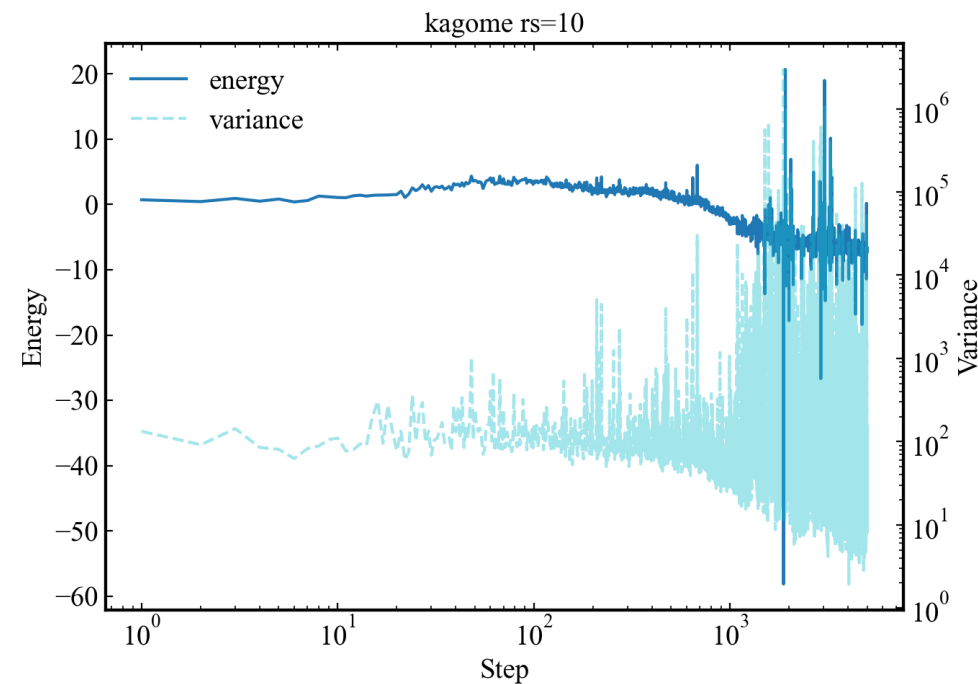
改进并非只针对单一小体系；在更大粒子数上仍能观察到收益，显示出一定泛化性。

失败案例：什么时候 agent loop 会失效

1. 训练时间过短（5 分钟 / ~1000 步）



2. 训练曲线不稳定



要让 agent loop 可靠运行，指标必须真实反映训练质量；否则 agent 的判断会被噪声误导。

结论

把 agent 接入神经网络波函数有潜力，但有前提

1

稳定训练是前提：
指标必须准确反映训练质量。

2

在波函数领域有价值的训练时长应达到 30–60 分钟，甚至更长。

3

Agent loop 不只是搜超参数，
更是在做带逻辑判断的架构探索。

4

在定义清晰的问题上，能快速迭代并逼近 SOTA。