

УДК 544.182.5

L₁-РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ В КВАНТОВОЙ ХИМИИ. n-ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ С УЧЕТОМ ДВУКРАТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ**М. И. Бердник, В. В. Иванов**

Обсуждается возможность использования L₁-регуляризации в описании структуры волновой функции многоэлектронной системы. На примере анализа конфигурационного состава полуэмпирической теории связанных кластеров включающей двукратные возбуждения (CCD) и теории возмущений Меллера-Плессет второго порядка (MP2) показана возможность ранжирования списка электронно-возбужденных конфигураций. Это дает возможность получения последовательного набора приближений к точному решению заданной теории. Продемонстрирована качественная схожесть получаемых регуляризованных решений для вышеуказанных теорий.

Ключевые слова: теория связанных кластеров, теория возмущений Меллера-Плессет, L₁-регуляризация, n-спряженные системы.

Введение

Использование регуляризирующего параметра является распространенным приемом статистики при решении некорректных (*ill-posed*) задач, которые характеризуются наличием плохо обусловленных или даже вырожденных матриц. Так, в методе наименьших квадратов (*Least Squares*, **LS**), регуляризация по Тихонову (в англоязычной литературе *ridge*-регрессия) заключается в добавлении к минимизируемой функции штрафной добавки [1,2]:

$$\beta_{ridge} = \arg \min_{\beta} \left\{ \|Y - X\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_2^2 \right\}. \quad (1)$$

Здесь β – искомые **LS** коэффициенты регрессии, X – матрица предикторов, а Y – вектор содержащий аппроксимируемые величины. Штрафная функция в методе Тихонова выбирается в виде квадрата евклидовой нормы (**L**₂):

$$\|\beta\|_2^2 = \beta^+ \beta = \sum_i \beta_i^2. \quad (2)$$

Параметр $\lambda \geq 0$ в (1) регулирует «силу» штрафной функции. В литературе имеется множество примеров использования (1) в самых разных научно-технических задачах (см. например [3,4]). Достаточно малая величина λ позволяет получить численно устойчивые решения задачи **LS**, однако не приводит к упрощению системы предикторов.

Лишь сравнительно недавно было обнаружено, [5], что использование в качестве штрафной функции **L**₁ нормы β (модуль) приводит к сокращению предикторного набора. **LS** вариант этого метода получил название **LASSO** (*Least Absolute Selection and Shrinkage Operator*) [5,6]:

$$\beta_{LASSO} = \arg \min_{\beta} \left\{ \|Y - X\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_1 \right\}, \quad (3)$$

$$\|\beta\|_1 = \sum_i |\beta_i|, \quad \lambda \geq 0. \quad (4)$$

Альтернативная форма задачи (3) соответствует минимизации нормы $\|Y - X\beta\|_2^2$ с учетом ограничения $\sum_i |\beta_i| \leq \tau$. Здесь величина τ – наперед заданное пороговое значение **L**₁–нормы.

Следует отметить, что несмотря на формальную схожесть (1) и (3) алгоритмическая сложность решения этих задач существенно различается. Так, нахождение β_{ridge} в терминах X , Y и λ ведет к хорошо известному простому матричному выражению. Но расчет (3), с учетом формы представления модуля в $\|\beta\|_1$, приводит к итерационной процедуре для β , которая может быть реализована в виде градиентного метода, или в виде процедуры типа самосогласования. Некоторые реализации метода **LASSO** в задаче построения регрессионных моделей биоактивности были рассмотрены нами. Вместе с тем, сравнительный детальный анализ различных способов нахождения β_{LASSO} все еще не сделан (смотри, однако, Интернет ресурс [7]).

L_1 -регуляризация, по нашему мнению, может оказаться полезной и для квантовой химии. Видится, по меньшей мере, два прикладных аспекта:

1) L_1 -решения позволяют представить волновую функцию в компактном виде. Это дает возможность интерпретировать громоздкий набор электронно-возбужденных конфигураций включающий сотни тысяч (а часто и более) членов.

2) L_1 -решения, полученные в рамках некоего приближенного метода, позволят сортировать компоненты волновой функции по их «значимости» и сформировать требуемый набор функций. Например, в случае многоконfigurационного приближения, появляется возможность формирования списка электронно-возбужденных конфигураций требуемого размера. Далее, этот набор конфигураций можно будет использовать в точных методах (CASSCF и мультиреференсные теории). На сегодняшний день в этих методах практикуется предварительный «ручной» отбор активных конфигураций.

В настоящей работе предпринята первая попытка применения L_1 -регуляризации к квантово-химической задаче (см. однако [8]). Этот подход удобно было реализовать в рамках достаточно простой низко-уровневой теории. Для этих целей подходит метод Меллера-Плессет (MP2), или, что заметно сложнее, низший уровень теории связанных кластеров с учетом лишь двукратных возбуждений (*Coupled Cluster Doubles, CCD*). В настоящей статье описаны тестовые расчеты L_1 -регуляризованных решений уравнений CCD (L_1 -CCD) и метода MP2 (L_1 -MP2, как частный случай L_1 -CCD расчета). Метод L_1 -CCD реализован нами в π -электронном (гамильтониан Попла-Паризера-Парра, ППП) варианте, что дает возможность тестировать его при расчете структурно-различных молекул. Основная цель работы – анализ вкладов двукратно-возбужденных конфигураций в зависимости от параметра регуляризации, λ .

Формулировка задачи L_1 -CCD

Волновая функция стандартного метода CCD [9,10] может быть представлена следующим образом:

$$|\Psi_{CCD}\rangle = \exp(T_2)|0\rangle = \left(1 + T_2 + \frac{1}{2}T_2^2 + \dots\right)|0\rangle. \quad (5)$$

В этом выражении $|0\rangle$ означает референсный Хартри-Фоковский (*Hartree-Fock, HF*) детерминант, а кластерный оператор T_2 , генерирующий суперпозицию двукратно-возбужденных конфигураций $|J\rangle$ относительно $|0\rangle$, выражается через матрицу амплитуд t :

$$T_2 = \sum_J t_J |J\rangle. \quad (6)$$

Форма (5) предполагает так называемую «промежуточную» нормировку волновой функции $|\Psi_{CCD}\rangle$:

$$\langle 0 | \Psi_{CCD} \rangle = 1. \quad (7)$$

Таким образом, норма $\|t\|$ может уменьшаться до нуля, что удобно при использовании L_1 -регуляризации.

Решения уравнений теории CCD обычно находят путем проектирования уравнения Шредингера, с гамильтонианом H , на набор двукратно-возбужденных конфигураций $\{|J\rangle\}$:

$$A_J(t) = \langle J | H - E_{CCD} | \Psi_{CCD} \rangle_C = \langle J | H | \Psi_{CCD} \rangle_C = 0. \quad (8)$$

Нижний индекс «C» означает, что учитываются лишь связанные «connected» термы. При этом компоненты разложения, которые включают энергию системы (E_{CCD}), аннулируются, что и составляет содержание теоремы о связанных кластерах [11]. Детальные выражения для (8) легко получить, используя диаграммную технику (см. например [12]).

L_1 -регуляризованное выражение для общей квантовомеханической модели может быть получено из соотношения Рэлея:

$$W^{(\lambda)} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle + \lambda |\Psi|_1. \quad (9)$$

Формально, модуль волновой функции можно представить следующим образом:

$$|\Psi|_1 = \langle \Psi | \text{sign}(\Psi) \rangle. \quad (10)$$

Но детальное выражение для $|\Psi|_1$ существенно зависит от выбранного представления волновой функции. Для многоконфигурационного метода CCD, согласно (5,6), норма (10) может быть представлена в виде:

$$|\Psi|_1 = \sum_J t_J \text{sign}(t_J) + \sum_{J>I} t_J t_I \text{sign}(t_J t_I) = \sum_J |t_J| + \sum_{J>I} |t_J t_I|. \quad (11)$$

Исходя из (9), с учетом (11), выражение для субградиента*, с точностью до нормировочного члена для первого слагаемого, можно представить в виде:

$$\partial W^{(\lambda)} = (H - E_{L_1\text{-CCD}}) |\Psi\rangle + \lambda |\text{sign}(\Psi)\rangle. \quad (12)$$

Уравнение для амплитуд метода L₁-CCD также можно получить путем проектирования. При этом первому члену выражения (12), согласно (8), соответствует

$$\Delta_J = \langle J | H | \Psi_{L_1\text{-CCD}} \rangle_C. \quad (13)$$

Таким образом, для J-компоненты субградиента можно записать:

$$\partial W_J^{(\lambda)} = \Delta_J + d_J. \quad (14)$$

Это выражение включает регуляризирующий член в представлении «soft threshold» (см. например [6,14]):

$$d_J = \lambda \langle J | \text{sign}(\Psi_{\text{CCD}}) \rangle, \quad (15)$$

$$d_J = \begin{cases} \lambda \text{sign}(t_J), & \text{if } |t_J| > 0, \\ +\lambda, & \text{if } t_J = 0, \& \Delta_J < -\lambda, \\ -\lambda, & \text{if } t_J = 0, \& \Delta_J > +\lambda, \\ 0, \Delta_J = 0, & \text{if } t_J = 0, \& -\lambda \leq \Delta_J \leq +\lambda. \end{cases} \quad (16)$$

С учетом (14) и (15) итерационная схема нахождения регуляризированных L₁-CCD решений для амплитуды при конфигурации |J⟩ может быть записана следующим образом:

$$t_J^{(k+1)} = t_J^{(k)} - \xi \partial W_J^{(\lambda)} / \Delta \varepsilon_J. \quad (17)$$

Здесь Δε_J – изменение одноэлектронных энергий МО, которые соответствуют переходу |0⟩ → |J⟩, а индекс k – номер итерации. ξ – параметр итерационного шага. Критерий остановки процесса (17) – достаточная малость нормы субградиента, $|\partial W_J^{(\lambda)}| < \eta$. Довольно жесткий критерий остановки, $\eta \sim 10^{-10}$, гарантирует строгое «обнуление» некоторых, наименее значимых, при данной величине λ, кластерных амплитуд t_J

Расчеты π-систем

В тестовых расчетах мы использовали π-электронное приближение Попла-Паризера-Парра (ППП) [15,16]. Использовалась идеализированная геометрия. При этом предполагается, что длина –С–С– связи равна 1.4 Å. Для циклических фрагментов использовалась геометрия правильного многоугольника. Стандартный резонансный интеграл пары связанных атомов (μ, ν):

$$\beta_0 = \langle \mu | H | \nu \rangle = -2.274 \text{ эВ}. \quad (18)$$

Двухцентровые кулоновские интегралы вычислялись по формуле Оно [17]:

$$\Gamma_{\mu\nu} = \langle \mu\nu | \mu\nu \rangle = \frac{\zeta \Gamma}{\sqrt{1 + (\Gamma \cdot R_{\mu\nu})^2}}, \quad \Gamma = \langle \mu\mu | \mu\mu \rangle, \quad (19)$$

* О соответствующих задачах оптимизации см. например [13].

где $R_{\mu\nu}$ — межъядерное расстояние, а одноцентровый кулоновский интеграл для углерода $\Gamma = 11.13$ эВ. Параметр ζ гарантирует соответствие размерностей величин, входящих в формулу (19).

Тестовые расчеты были проделаны для следующих двух молекул (рис. 1). Молекула **A** (аналог калицена) практически интересна в связи со значительными нелинейно-оптическими характеристиками [18]. Молекула нафталина (**B**) выбрана как типичный представитель π -сопряженных систем.

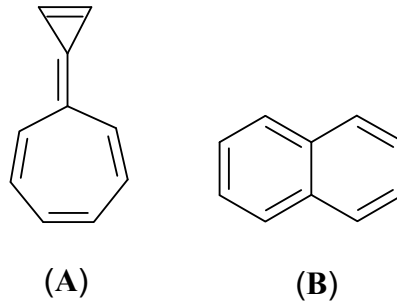


Рисунок 1. Тестовые системы

Для обозначения молекулярных орбиталей систем (**A**) и (**B**) использовались симметричные обозначения (**HF**) решений. В соответствии с этим последовательность **HF** орбиталей по энергии может быть представлена следующим образом:

$$\mathbf{A}: 1b_1^2 2b_1^2 1a_2^2 3b_1^2 4b_1^2 2a_2 3a_2 5b_1 4a_2 6b_1$$

$$\mathbf{B}: 1b_{3u}^2 1b_{1g}^2 1b_{2g}^2 2b_{3u}^2 1a_u^2 2b_{1g} 2b_{2g} 3b_{3u} 2a_u 3b_{2g}$$

Двукратно-возбужденные конфигурации, которые возникают в теории **CCD**, соответствуют промотированию двух электронов с занятых на вакантные МО. Например, переход пары электронов с НОМО орбитали на LUMO, в молекуле **A**, $(4b_1)_\alpha(4b_1)_\beta \rightarrow (2a_2)_\alpha(2a_2)_\beta$, порождает двукратно-возбужденную конфигурацию, обозначенную как $\left| \begin{smallmatrix} 2a_2 & 2\bar{a}_2 \\ 4b_1 & 4\bar{b}_1 \end{smallmatrix} \right\rangle$ (спин-орбитали с «чертой» соответствуют β -спину).

При введении регуляризирующего параметра в **CCD** расчет, величины амплитуд монотонно падают (рис. 2, молекула **A**). Причем для разных амплитуд, с разными весами в исходном **CCD** расчете, скорость уменьшения модулей амплитуд оказывается различной. На приведенной зависимости можно видеть, что с увеличением регуляризирующего параметра величина соответствующая второй по значимости амплитуде (возбуждение НОМО-LUMO) $(4b_1)_\beta(4b_1)_\alpha \rightarrow (2a_2)_\alpha(2a_2)_\beta$ быстро падает при росте λ , в то время как изначально небольшие амплитуды, которые соответствуют переходам $(3b_1)_\alpha(3b_1)_\beta \rightarrow (2a_2)_\alpha(2a_2)_\beta$ и $(1a_2)_\alpha(1a_2)_\beta \rightarrow (2a_2)_\alpha(2a_2)_\beta$ уменьшаются значительно медленнее. В конечном счете, при величине $\lambda \sim 0.7$, остается лишь три амплитуды в линейной части (5). Таким образом, соответствующая волновая функция принимает вид:

$$\left| \Psi_{L_1-CCD}(\lambda \sim 0.7) \right\rangle \approx |0\rangle + c_1 \left| \begin{smallmatrix} 5b_1 & 5\bar{b}_1 \\ 4b_1 & 4\bar{b}_1 \end{smallmatrix} \right\rangle + c_2 \left| \begin{smallmatrix} 3a_2 & 3\bar{a}_2 \\ 1b_1 & 1\bar{b}_1 \end{smallmatrix} \right\rangle + c_3 \left| \begin{smallmatrix} 2a_2 & 2\bar{a}_2 \\ 1a_2 & 1\bar{a}_2 \end{smallmatrix} \right\rangle + n. c. \quad (20)$$

Здесь *n. c.* обозначает совокупность нелинейных компонент, порождаемых указанными амплитудами, согласно (5). Исходя из рис. 2 очевидно, что величины амплитуд соотносятся следующим образом $|c_1| \gg |c_2| \approx |c_3|$. Функцию (20) можно интерпретировать как простейшее представление волновой функции **CCD** для данной системы.

В связи с тем, что в различных методах величины амплитуд могут быть различными при отсутствии регуляризирующей добавки, общий вид зависимостей амплитуд от λ также может быть различен. Из рис. 4 можно видеть, что первая по величине амплитуда $(1a_u)_\alpha(1a_u)_\beta \rightarrow (2b_{1g})_\alpha(2b_{1g})_\beta$ убывает быстрее, чем вторая по величине $(2b_{3u})_\alpha(1a_u)_\alpha \rightarrow (2b_{1g})_\alpha(2b_{2g})_\alpha$. В зависимости же, полученной методом **L₁-MP2** (рис. 3), отношение величин данных амплитуд противоположное уже в исходном расчете, когда $\lambda = 0$. Однако, относительная скорость их изменения остается такой же, как и в **L₁-CCD**. Из приведенных

зависимостей (рис. 3, рис. 4) можно также видеть, что в обоих методах одинаковые по причинам спиновой и пространственной симметрии амплитуды $(1b_{2g})_\alpha(1a_u)_\beta \rightarrow (3b_{3u})_\alpha(2b_{1g})_\beta$, $(1a_u)_\alpha(1b_{2g})_\beta \rightarrow (2b_{1g})_\alpha(3b_{3u})_\beta$ остаются одинаковыми и при сканировании λ . Таким образом, симметрия волновой функции системы, при внесении регуляризирующей добавки, не нарушается.

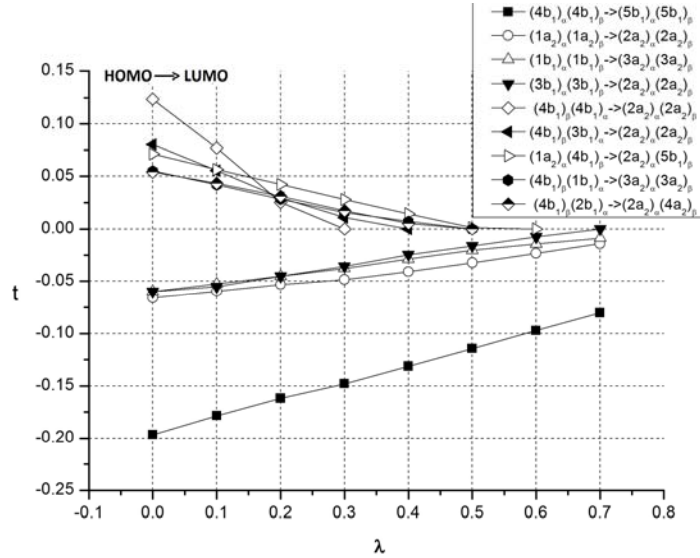


Рисунок 2. Зависимость амплитуд от величины регуляризирующего параметра λ для молекулы А. Расчет L_1 -CCD.

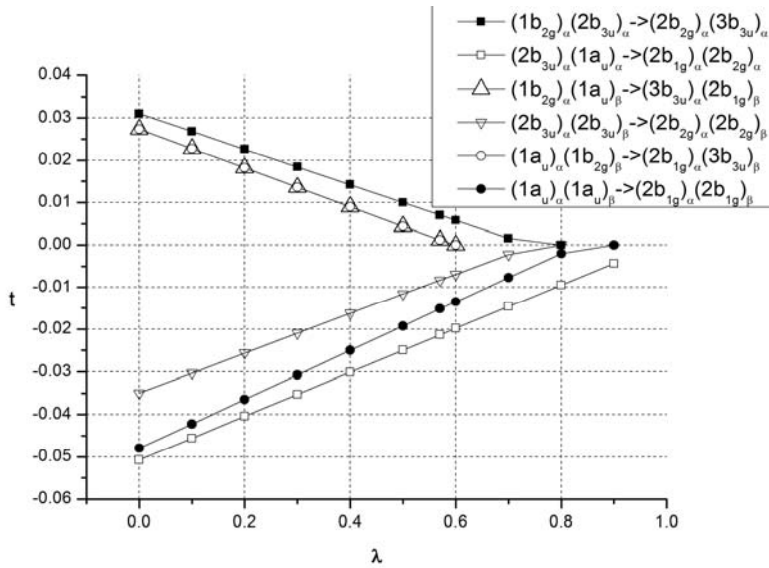


Рисунок 3. Зависимость величины амплитуд от величины регуляризирующего параметра λ для молекулы нафталина (В). Расчет L_1 -MP2.

В целом, исходя из рис. 4 одно из простейших представлений волновой функции CCD имеет вид:

$$\begin{aligned} |\Psi_{L_1-CCD}(\lambda \sim 0.7)\rangle \approx & |0\rangle + c_1 \left(\left| \begin{matrix} 2b_{1g} 2b_{2g} \\ 2b_{3u} 1a_u \end{matrix} \right\rangle + \left| \begin{matrix} 2\bar{b}_{1g} 2\bar{b}_{2g} \\ 2\bar{b}_{3u} 1\bar{a}_u \end{matrix} \right\rangle \right) + c_2 \left| \begin{matrix} 2b_{1g} 2\bar{b}_{1g} \\ 1a_u 1\bar{a}_u \end{matrix} \right\rangle + c_3 \left| \begin{matrix} 2b_{2g} 2\bar{b}_{2g} \\ 2b_{3u} 2\bar{b}_{3u} \end{matrix} \right\rangle \\ & + c_4 \left(\left| \begin{matrix} 2b_{2g} 3b_{3u} \\ 1b_{2g} 2b_{3u} \end{matrix} \right\rangle + \left| \begin{matrix} 2\bar{b}_{2g} 3\bar{b}_{3u} \\ 1\bar{b}_{2g} 2\bar{b}_{3u} \end{matrix} \right\rangle \right) + \text{н. с.} \end{aligned} \quad (21)$$

где $|c_1| > |c_2| > |c_3| > |c_4|$.

Из того же рисунка видно, что простейшая волновая функция, при $\lambda \approx 0.9$, кроме референсного состояния, включает лишь одну (пространственную) двукратно-возбужденную конфигурацию:

$$\left| \Psi_{L_1-CCD}(\lambda \sim 0.9) \right\rangle \approx |0\rangle + c_1 \left(\left| \begin{matrix} 2b_{1g} & 2b_{2g} \\ 2b_{3u} & 1a_u \end{matrix} \right\rangle + \left| \begin{matrix} 2\bar{b}_{1g} & 2\bar{b}_{2g} \\ 2\bar{b}_{3u} & 1a_u \end{matrix} \right\rangle \right), \quad (22)$$

Это практически соответствует методу ограниченного конфигурационного взаимодействия при условии независимого варьирования коэффициента c_1 .

Сечения, полученные при различных значениях параметра λ , позволяют построить сжатые списки конфигураций, определяющие различные уровни приближений к точной волновой функции.

Любопытно, что во всех рассмотренных нами примерах, при достаточно больших λ , ненулевыми оказались амплитуды при одних и тех же конфигурациях как в методе **L₁-MP2** так и в методе **L₁-CCD** (сравни рис. 3. и рис. 4.). Указанное обстоятельство позволяет надеяться на то, что выводы из анализа многоэлектронной волновой функции, на основе низкоуровневой теории, могут быть полезными при конструировании более сложных подходов.

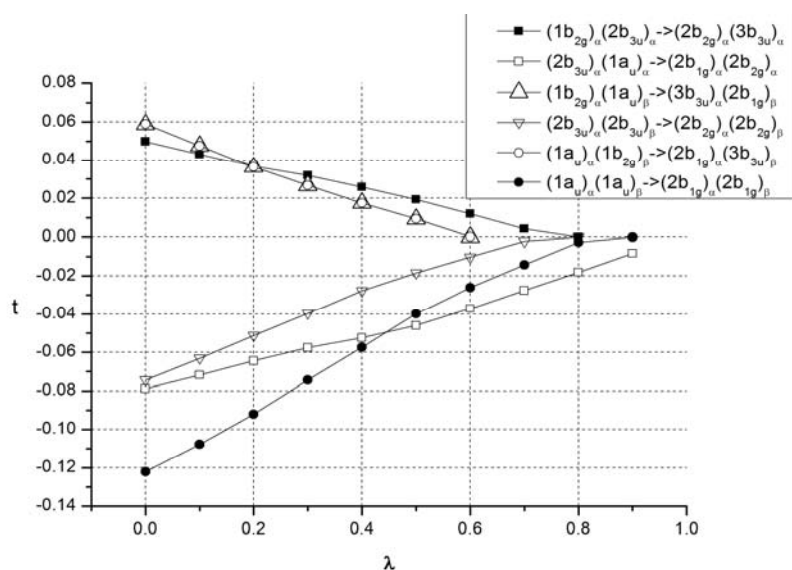


Рисунок 4. Зависимость величины амплитуд от величины регуляризирующего параметра λ для молекулы нафталина. Расчет **L₁-CCD**.

Заключение

Современная квантовая химия предлагает широкий арсенал вычислительных средств, которые с той или иной точностью способны воспроизвести нужную физико-химическую величину. Вместе с тем имеется определенный недостаток в методах интерпретации расчетных данных и волновых функций содержащих сотни тысяч (и более) конфигураций. Предложенный в настоящей работе подход может оказаться полезным как в интерпретации расчетных данных, так и в формировании активного пространства конфигураций в теориях, которые нуждаются в таком предварительном отборе. Мы убеждены, что **L₁**-решения могут быть полезны, поскольку дают альтернативную точку зрения на строение сложной многоэлектронной волновой функции. В дальнейшем предполагается применение этого подхода в построении мультиреференсной теории.

В заключение отметим, что уравнения **L₁-CCD** реализованы в базе молекулярных орбиталей, поэтому описанный метод, и соответствующая программа, применимы и в рамках неэмпирического расчета. В этом случае наборы одноэлектронных и двухэлектронных интегралов, а также молекулярные орбитали, могут быть получены в результате **XФ** расчета, с помощью программы **GAMESS** [19].

Литература / References

1. Tikhonov A. N., Arsenin V. Y. Solutions of ill-posed problems. New York, John Wiley & Sons, 1977. – 270 p.
2. Morozov V. A. Regulation Methods for ill-posed problems, CRC Press, 1993. – 273 c.
3. Binkers D., Dodge Y. Alternative Methods of Regression. New York.: John Wiley & Sons, 1993. – 228 p.
4. Chatterjee S., Hadi A. S. Regression Analysis by Example, J. Wiley & Sons.– 2006.– 375 p.
5. Tibshirani R. // J. Roy. Statist. Soc. 1996. – B58, № 1. – P. 267–288.
6. Hastie T., Tibshirani R., Wainwright M., Statistical Learning with Sparsity. The Lasso and Generalizations, CRC Press., 2015. 335 p.
7. Schmidt M. Least Squares Optimization with L₁-Norm Regularization // CS542B Project Report. – 2005, 12 p. WEB page: http://www.cs.ubc.ca/~schmidtm/Documents/2005_Notes_Lasso.pdf.
8. Ozoliņš V., Lai R., Caflisch R., and Osher S. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – V. 111(5). – P.1691–1696.
9. Cizek J., Paldus J. // Int. J. Quant. Chem. – 1971. – V. 5. – P. 359-379.
10. Bartlett R. J. // Ann. Rev. Phys. Chem. – 1981. – V. 32. – P. 359-401.
11. Brueckner K. A. // Phys. Rev. – 1955. – V. 100, № 1. – P. 36-45.
12. Bartlett R. J., Purvis G. D. // Int. J. Quant. Chem. – 1978. – V.14. – P. 561-581.
13. Bahamani S. Algorithms for Sparsity-Constrained Optimization. Springer, 2014. – 107 p.
14. Donoho D. L. // IEEE Transactions on Information Theory. – 1995. – V. 41, N 3.– P. 613-627.
15. Pariser R., Parr R. G. // J. Chem. Phys. – 1953. – V. 21. – P. 466-471.
16. Pople J. A. // Trans. Faraday Soc. – 1953. – V.49. – P. 1375-1385.
17. Onho K. // Theor. Chim. Acta. – 1964. – V. 2. – P. 219-227.
18. Zakharov A. B., Ivanov V. V. Adamowicz L. // J. Phys. Chem. C – 2014.– V. 118. – P. 8111-8121.
19. Schmidt M. W., Baldridge K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., et al. // J. Comput. Chem. – 1993. – V. 14, № 1. – P. 1347-1363.

Поступила до редакції 26 лютого 2016 р.

М. І. Бердник, В. В. Іванов. L₁-регуляризація в квантовій хімії. π-електронна теорія зв'язаних кластерів з урахуванням двократних збуджень.

Обговорюється можливість використання L₁-регуляризації в описі будови хвильової функції багатоелектронної системи. На прикладі аналізу конфігураційного складу напівемпіричної теорії зв'язаних кластерів, що включає двократні збудження (CCD), та теорії збуджень Меллера-Плессет другого порядку (MP2), показана можливість ранжування списку електронно-збуджених конфігурацій. Це дає можливість отримання послідовного ряду наближень до точного розв'язку обраної теорії. Продемонстровано якісну схожість регуляризованих рішень вищевказаних теорій.

Ключові слова: теорія зв'язаних кластерів, теорія збуджень Меллера-Плессет, L₁-регуляризація, π-спряжені системи.

M. I. Berdnyk, V. V. Ivanov. L₁-regularization in quantum chemistry. The π-electron coupled cluster doubles theory.

The possibility of using of L₁-regularization in description of the many electron wave function structure has been discussed. The analysis of the configurational structure in semiempirical coupled cluster doubles theory (CCD) and second order Moller-Plesset perturbation theory (MP2) is presented as an example. The ranging lists of electron excited configurations as an approximation to exact solution of certain approach can be obtained. The qualitative similarity of regularized solutions for the above mentioned theories is demonstrated.

Keywords: coupled cluster theory, Moller-Plesset perturbation theory, L₁-regularization, π-conjugated systems.