

P 6644

Métodos de aprendizaje automatizado en problemas colisionales

Mendez A¹, Di Filippo J², López S¹, Mitnik D^{1 2}¹ Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA² Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

La resolución de procesos colisionales en el marco de la expansión de *close-coupling* requiere una descripción precisa del blanco [1,2,3]. Sin embargo, la determinación de una estructura atómica adecuada a menudo requiere experiencia y recursos computacionales significativos. En general, la función de onda del blanco se expresa mediante el método de *configuration interaction* (CI). Además, la parte radial de las funciones de onda de un electrón se puede obtener con potenciales modelo que contienen parámetros de escaleo. La precisión de los cálculos se puede mejorar aumentando el número de configuraciones en el CI, lo que a su vez aumenta el número de parámetros que se pueden variar. Sin embargo, no existe una receta sistemática ni lógica para este procedimiento.

Actualmente estamos estudiando técnicas de *machine learning* para realizar este tipo de optimizaciones de forma automática. Para ilustrar una de estas implementaciones, consideramos el átomo de berilio neutro. La estructura atómica se calcula con el código AUTOSTRUCTURE [4], y las funciones de onda radiales se obtienen con orbitales de tipo Slater que contienen λ_{nl} parámetros de escaleo. Estos parámetros se optimizan implementando el método de *Gaussian Processes* con un kernel exponencial cuadrado y una función de adquisición tipo *expected improvement*. En la presente contribución, utilizamos los códigos GPyOpt [5] para calcular el mejor conjunto de hiperparámetros que minimiza la función de costo

$$J = \sum_{nl} \left| \frac{E_{nl} - E_{nl}^{A.S.}}{E_{nl}} \right|, \quad (1)$$

es decir, la diferencia relativa total entre las energías calculadas $E_{nl}^{A.S.}$ y las de referencia E_{nl} [6,7].

[1] Bartschat, K *et al* 2004 *J. Phys. B* **37** 2617[2] Zatsarinny, O *et al* 2016 *J. Phys. B* **49** 235701[3] Ballance, C P *et al* 2003 *Phys. Rev. A* **68** 062705[4] Badnell, N R 2011 *Comput. Phys. Commun.* **7** 1528[5] The GPyOpt authors 2016 <http://github.com/SheffieldML/GPyOpt>[6] Jönsson, P *et al* 1999 *J. Phys. B* **32** 1233[7] Kramida, A *et al* NIST Atomic Spectra Database (version 5.6.1)