

IMPLEMENTACIÓN DE MÉTODOS DE APRENDIZAJE AUTOMATIZADO EN PROBLEMAS COLISIONALES

A M P Mendez*, J I Di Filippo[†], S D López* and D M Mitnik*,[†]

*Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas and Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

[†]Departamento de Física, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

Las herramientas desarrolladas en el campo del *machine learning* resultan de gran aplicabilidad en problemas de la física que exigen constante intervención humana. En el presente reporte mostramos algunos ejemplos de dicha implementación en la física de colisiones. En particular, utilizamos herramientas de aprendizaje automatizado para describir con precisión blancos atómicos en procesos colisionales.

Los cálculos de transiciones inelásticas requieren la representación de los estados ligados y continuos involucrados. En principio, la existencia de un potencial efectivo que describa dichos estados permitiría obtener de forma directa las funciones de onda de las partículas interactuantes. El método de inversión depurada (DIM) [1] permite la obtención de potenciales efectivos orbitales atómicos y moleculares. El método consiste en la inversión directa de ecuaciones de tipo Kohn–Sham, cuyas soluciones están dadas por las ecuaciones de Hartree–Fock. El potencial resultante, plagado de polos y/o divergencias, es ajustado a través de una expresión analítica paramétrica de manera tal que las energías y valores medios originales son reproducidos con gran precisión. Sin embargo, el ajuste del potencial y optimización de los parámetros es un proceso “artesanal” que demanda recursos humanos.

Por otro lado, métodos sofisticados tales como la expansión de *close-coupling* requieren una descripción precisa del blanco [2, 3]. Sin embargo, la determinación de una estructura atómica adecuada a menudo requiere experiencia y recursos computacionales significativos. En ge-

neral, 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 escalado [4]. La precisión de la estructura 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.

La inclusión de herramientas de aprendizaje automatizado en la optimización de potenciales y funciones de onda constituye una mejora significativa en ambos métodos. A partir de su implementación, hemos logrado reducir drásticamente los niveles de intervención y recursos humanos, proporcionando incluso mejores resultados.

Referencias

- [1] A.M.P. Mendez, D.M. Mitnik, and J.E. Miraglia, *Int. J. Quant. Chem.* **116**, 1882 (2016); *Advances in Quantum Chemistry accepted* (2019).
- [2] Bartschat, K *et al* *J. Phys. B* **37** 2617 (2004).
- [3] Zatsarinny, O *et al* *J. Phys. B* **49** 235701 (2016).
- [4] Badnell, N R *Comput. Phys. Commun.* **7** 1528 (2011).