

Implementación de Métodos de Aprendizaje Automatizado en problemas colisionales

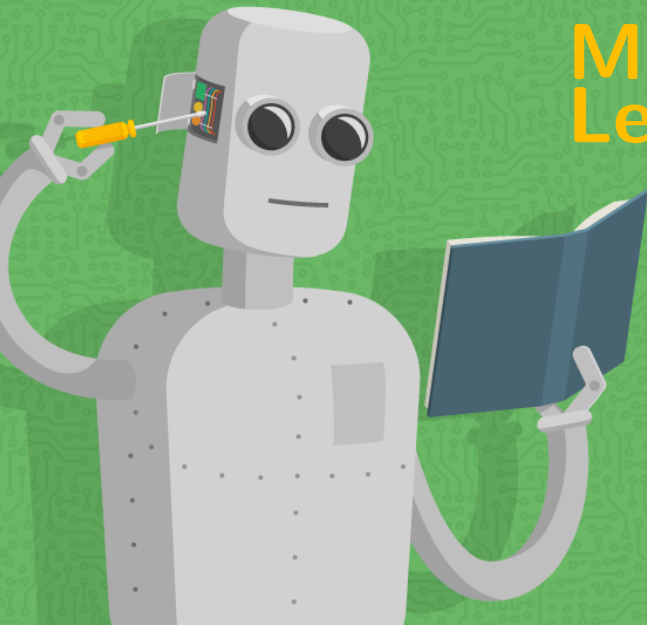


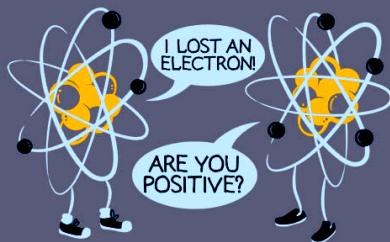
Alejandra Mendez,
Juan Di Filippo,
Sebastián López,
Darío Mitnik,

alemendez@iafe.uba.ar

1 de Septiembre – Buenos Aires

Machine Learning





Método de Inversión Depurada (DIM)

$$T_{fi} = |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$$

Método de Inversión Depurada (DIM)

¿Cómo
conocemos V ?

$$T_{fi} = |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$$

Método de Inversión Depurada (DIM)

¿Cómo
conocemos V ?

$$T_{fi} = |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{nl}(r) \right] P_{nl}(r) = E_{nl} P_{nl}(r)$$

Método de Inversión Depurada (DIM)

¿Cómo
conocemos V ?

$$T_{fi} = |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z_{nl}(r)}{r} \right] P_{nl}(r) = E_{nl} P_{nl}(r)$$

Método de Inversión Depurada (DIM)

¿Cómo
conocemos V ?

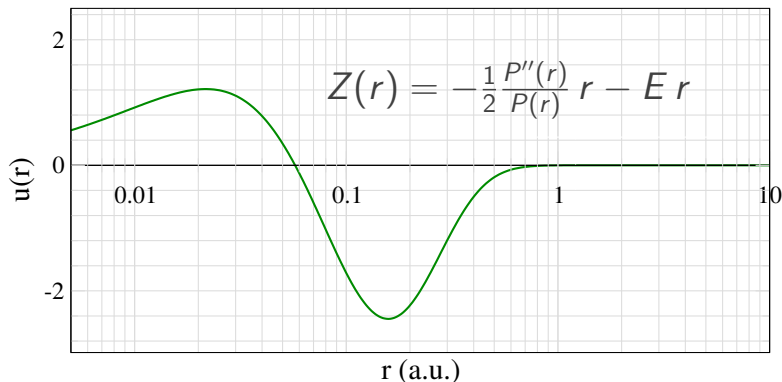
$$T_{fi} = |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z_{nl}(r)}{r} \right] P_{nl}(r) = E_{nl} P_{nl}(r)$$

$$Z_{nl}(r) = -\frac{1}{2} \frac{P_{nl}''(r)}{P_{nl}(r)} r + \frac{l(l+1)}{2r} - E_{nl} r$$

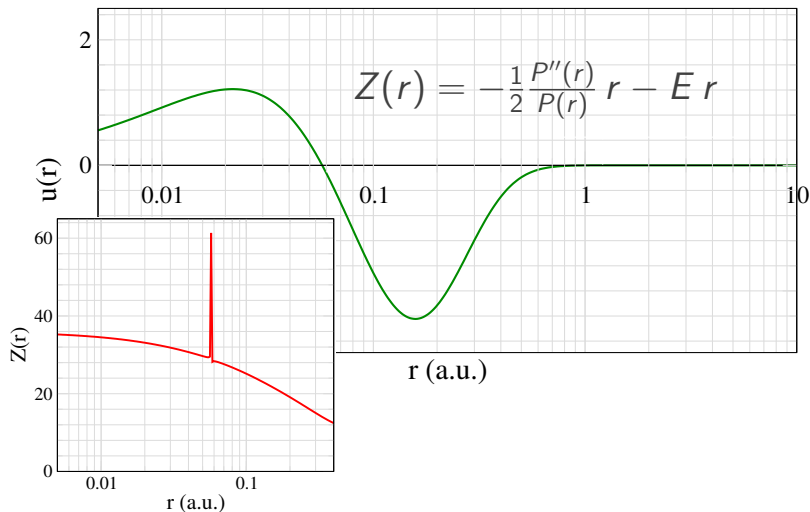
Houston, we have a problem!

2s Kr



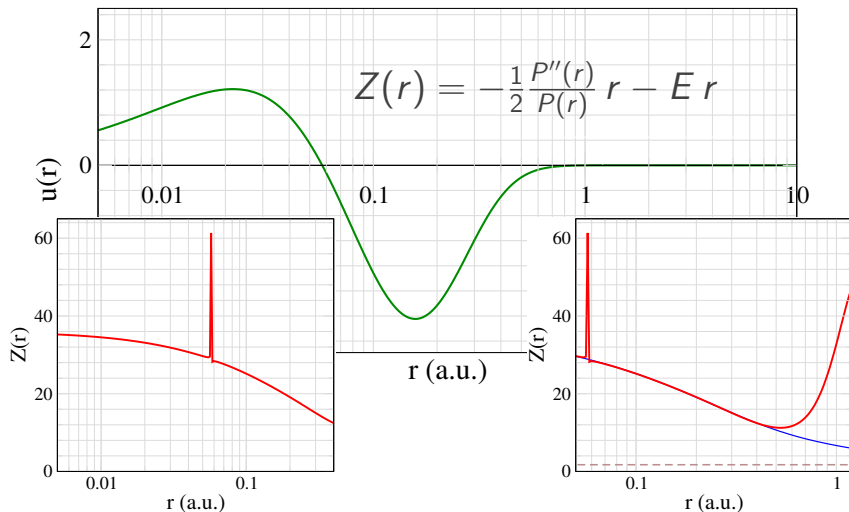
Houston, we have a problem!

2s Kr

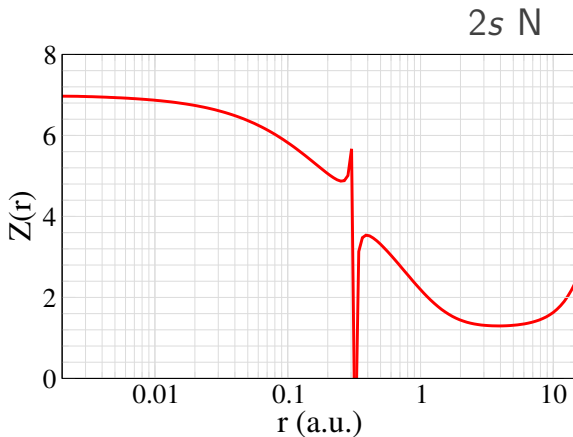


Houston, we have a problem!

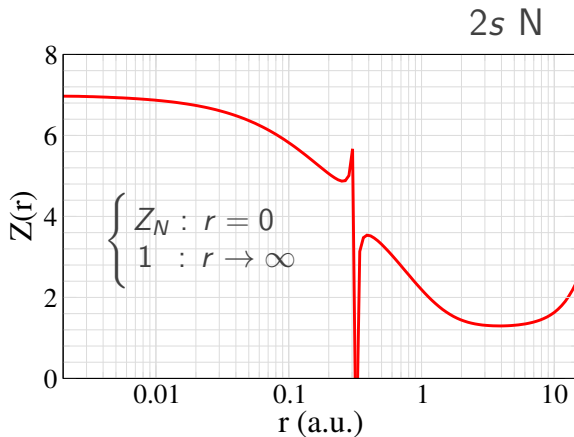
2s Kr



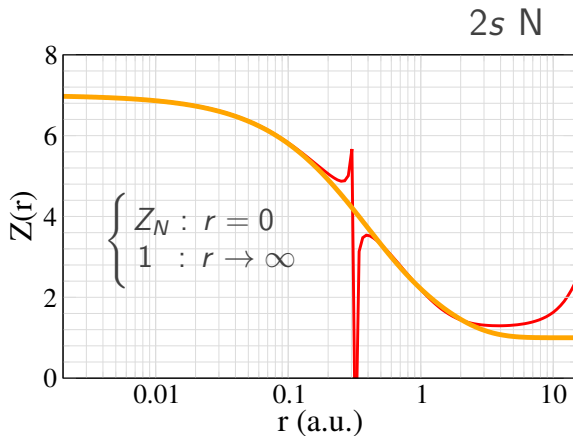
Depuración



Depuración

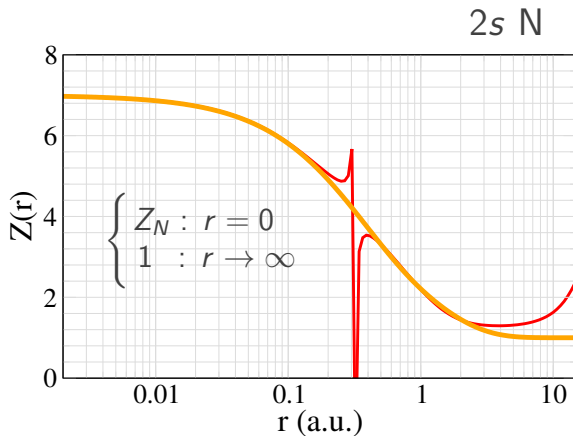


Depuración



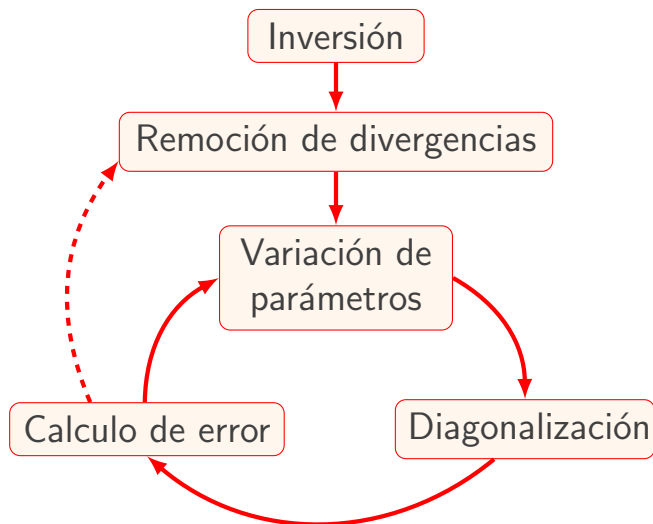
$$Z(r) = 1 + \sum_j \alpha_j e^{-\beta_j r}$$

Depuración

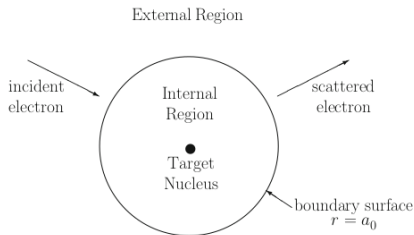


$$Z(r) = 1 + \sum_j \alpha_j e^{-\beta_j r}$$

Procedimiento



R-Matrix



Estructura del blanco

AUTOSTRUCTURE



Región interna

RMATRXI



Región externa

STGF

Descripción del blanco

$$\Phi_i(\mathbf{r}) = \sum_j c_{ji} \phi_j(\mathbf{r})$$

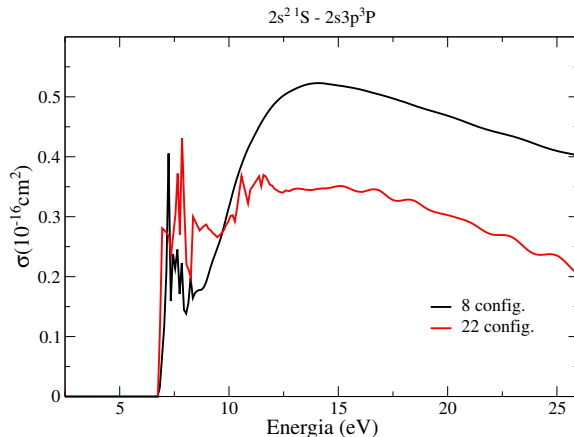
Configuration
interaction

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{nl}^{\text{eff}}(\lambda_{nl}, r) + E_{nl} \right] P_{nl}(r) = 0$$

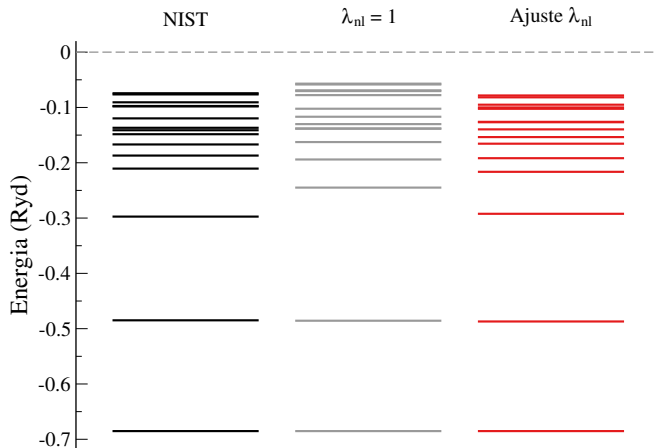
- Thomas–Fermi–Dirac–Amaldi
- Slater-Type-Orbital de Burgess

Ejemplo: Berilio

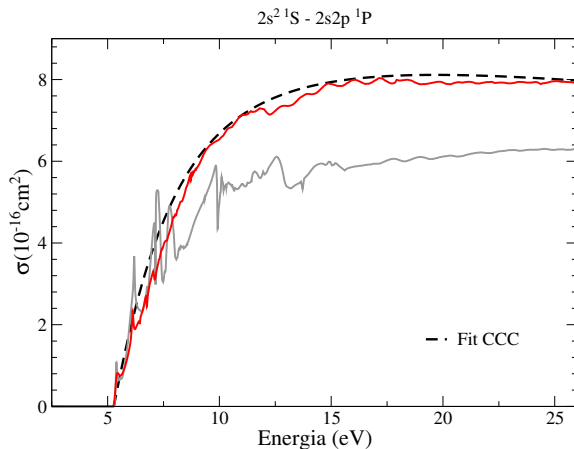
$1s^2 2s^2$
 $1s^2 2snl$
 $1s^2 2p^2$
 $1s^2 2pnl$



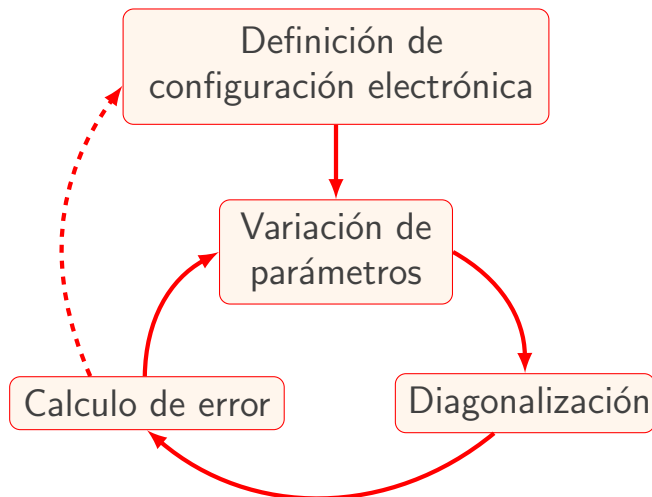
Ejemplo: Berilio



Ejemplo: Berilio



Procedimiento



Síntesis del problema

$$J = \sum_j \left| \frac{E_j^{\text{calc}}(\xi) - E_j^{\text{teo}}}{E_j^{\text{teo}}} \right|$$

- DIM: $\xi = \{\alpha, \beta\}$
- R-Matrix: $\xi = \{\text{Configuraciones}, \lambda\}$



Procesos Gaussianos



Resultados DIM

Resultados R-Matrix

