



Contribution ID: 542

Type: Sectional talk

Применение машинного обучения для предсказания формирования атомной пары из трехатомного столкновения

Thursday 10 July 2025 14:45 (15 minutes)

При исследовании спин-обменного взаимодействия между атомами в газовой ячейке существует задача поиска условий, при которых данное взаимодействие происходит. Одним из таких условий является долгоживущая атомная пара в газовой ячейке, механизм формирования которой описывается ван-дер-Ваальсовым потенциалом. Примером реализации механизма является трехатомные столкновения, когда один атом может «забрать» излишек энергии оставив два других атома в потенциальной ловушке. Так при рассмотрении трехатомных столкновений, которые часто происходят в газовой смеси, только их малая доля приводит к образованию связанной атомной пары. Целью работы является демонстрация эффективности методов машинного обучения для распознавания формирования атомной пары по начальным условиям трехатомного столкновения. Были рассмотрены простые методы такие как «полиномиальная регрессия» в паре с «логистической регрессией», «градиентный бустинг», так и сложные: «многослойный перцептрон». В предоставленных данных частота формирования атомной пары была в соотношении 1 к 10000. В результате удалось в 2000 раз уменьшить количество рассматриваемых начальных условий, при этом не потеряв ни одного случая формирования атомной пары.

Author: KIM, Stanislav (ITMO University)

Presenter: KIM, Stanislav (ITMO University)

Session Classification: Methods and Technologies for Experimental Data Processing