

УДК 004.852

НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ХАРАКТЕРА ДИНАМИКИ ИОНОВ В ТРЕХМЕРНЫХ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ ИОННЫХ ЛОВУШКАХ

Васильев М.Д. (Университет ИТМО), Васильева О.О. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – д. ф.-м. н., профессор Рождественский Ю.В.
(Университет ИТМО)

Введение. Ионные ловушки – класс широко распространенных устройств, которые находят применения как в научных исследованиях, так и в инженерных целях. Одной из наиболее перспективных областей применения ионных ловушек является область квантовых вычислений на базе ионных ловушек. С активным развитием трехмерных мультипольных ионных ловушек [1, 2] возникает проблема анализа характера движения заряженных частиц в их различных конфигурациях. Проблема связана с тем, что данный анализ подразумевает решение дифференциальных уравнений динамики частиц для бесконечного числа конфигураций электрического поля. На практике приходится решать системы уравнений для каждого отдельного случая. Данная процедура занимает большое количество компьютерного времени. Целью настоящего проекта является построение нейронной сети, способной генерировать предсказания о характере динамики заряженных частиц в ионных ловушках с произвольной конфигурацией электрического поля.

Для решения поставленных задач были применены методы машинного обучения, которые являются мощным инструментом в руках современного исследователя. В настоящее время нейронные сети применяются практически во всех областях естествознания и, в частности, в области ионных ловушек [3, 4]. Однако, до сих пор не было ни одной работы, посвященной созданию модели машинного обучения по определению характера динамики заряженных частиц в трехмерных мультипольных ионных ловушках. В связи с отсутствием каких-либо отечественных или зарубежных научных результатов подобного рода, достижение поставленной цели является актуальной задачей для дальнейших исследований и разработок.

Основная часть. Траектория движения заряженного объекта в трехмерной мультипольной ионной ловушке может быть получена при решении основного уравнения динамики (второй закон Ньютона). Причем удержание заряженной частицы в пределах ловушки происходит вследствие воздействия переменных электрических полей на частицу. Переменные электрические поля возникают благодаря переменному напряжению на электродах ловушки. Форма, количество и взаиморасположение электродов определяют различные конфигурации мультипольных ловушек. Таким образом, при решении основного уравнения динамики для системы «частица в некоторой конфигурации мультипольной ионной ловушки», мы имеем девять параметров. Шесть параметров составляют начальные условия задачи Коши (компоненты векторов начального положения и начальной скорости). Еще два параметра определяют связь между такими величинами, как масса и заряд частицы, постоянное и переменное напряжение, а также геометрический параметр ловушки. Последний параметр отражает порядок мультипольности формируемого электродами электрического поля.

Поставленная проблема может быть решена при последовательном выполнении следующих задач:

- 1) Получить набор данных, связывающих девять параметров системы с одним целевым значением, которое соответствует стабильному и нестабильному движению заряженной частицы при указанных параметрах.
- 2) Сформировать на основе полученного набора данных модель машинного обучения, способную предсказывать возможность стабильного движения при заданных условиях с указанной вероятностью такого исхода.

В рамках настоящего проекта был сгенерирован набор из «девяти параметров + одно целевое значение» для ста тысяч различных уравнений. Указанный набор данных был получен посредством компьютерной симуляции в системе Wolfram Mathematica 12.3. При каждой

симуляции все параметры системы задавались случайными в определенных диапазонах. Критерий для стабильного движения был выбран следующим образом: если в некоторый момент времени радиус-вектор частицы оказывался не меньшим геометрического параметра ловушки, то симуляция обрывалась на этом моменте; если итоговое время симуляции совпадало с некоторым заранее заданным временем длительной локализации, то считалось, что движение частицы стабильно; в противном случае, движение частицы нестабильно. Первое утверждение в критерии стабильного движения соответствует случаю, когда исследуемая частица попадала на электроды ловушки или улетала за пределы всей конструкции. Второе утверждение есть факт движения заряженной частицы в пределах ионной ловушки в течение как минимум заранее заданного времени длительной локализации. Если время симуляции меньше характерного времени длительной локализации, то характер движения частицы нестабилен.

Набор данных был разделен на train/validation/test в соотношении 80/10/10. На основе полученного датасета была обучена модель машинного обучения. Дальше была проведена кросс-валидация для предотвращения переобучения и подбора оптимальных параметров модели.

Выводы. Полученная в рамках настоящего проекта модель машинного обучения способна решать следующую задачу классификации. На вход модели подаются такие характеристики физической системы, как заряд и масса частицы, начальные условия (координаты и скорости), постоянное и переменное напряжения на электродах, а также конфигурация электрических полей ионной ловушки. На выходе получается предсказание о возможности стабильного движения при заданных условиях с указанной вероятностью такого исхода. Полученная модель может быть полезна при исследовании нового класса ионных ловушек – трехмерных мультипольных, в применении к квантовым вычислениям на плененных ионах и масс-спектрометрии, поскольку полученная модель машинного обучения позволит ограничить множество конфигураций таких ловушек и ускорить их более детальное исследование посредством предсказания возможности стабильной локализации при интересующих параметрах.

Список использованных источников:

1. Vasilyev M., Rudyi S., Rozhdestvensky Y.V. Theoretical description of electric fields in three-dimensional multipole ion traps//European Journal of Mass Spectrometry, 2021, Vol. 27, No. 5, pp. 158-165.
2. Rudyi S., Vasilyev M., Rybin V., Rozhdestvensky Y.V. Stability problem in 3D multipole ion traps//International Journal of Mass Spectrometry, 2022, Vol. 479, pp. 116894.
3. Ghadimi, Moji, et al. “Dynamic compensation of stray electric fields in an ion trap using machine learning and adaptive algorithm.” Scientific Reports 12.1 (2022): 1-8.
4. Fine, Jonathan, et al. “Graph-based machine learning interprets and predicts diagnostic isomer-selective ion-molecule reactions in tandem mass spectrometry.” Chemical science 11.43 (2020): 11849-11858.

Васильев М.Д. (автор)

Подпись

Рождественский Ю.В. (научный руководитель) Подпись