

Recomendación de modelos de SANS mediante aprendizaje automático

José I. Robledo^{1,*}, H. Frielinghaus², P. Willendrup³, K. Lieutenant¹

¹Jülich Centre for Neutron Science (JCNS-2), FZJ, Jülich, Alemania; ²Jülich Centre for Neutron Science (JCNS-4), FZJ, Garching, Alemania; ³Data Management and Software Centre (DMSC), ESS, Copenhagen, Dinamarca

[*jrobledo@unc.edu.ar](mailto:jrobledo@unc.edu.ar)

Este trabajo introduce un modelo de red neuronal convolucional diseñado para asistir a usuarios en la selección de modelos en experimentos de dispersión a bajo ángulo de neutrones (SANS) [1]. Utilizando imágenes 2D capturadas por detectores sensibles a la posición, nuestro modelo recomienda los modelos más probables entre más de 45 modelos distintos de SANS [2], permitiendo su aplicación en tiempo real durante la adquisición de datos en una línea experimental.

Detallaremos el proceso de creación de la base de datos utilizada para el entrenamiento del modelo, así como las estrategias de entrenamiento adoptadas para maximizar la precisión del algoritmo. Además, se expondrá cómo esta herramienta se ha integrado exitosamente en la interfaz NICOS de la línea experimental KWS-I del reactor FRM-II, incluyendo una demostración de su funcionamiento en conjunto con el digital twin de la línea.

Finalmente, se explorará la extensión de esta herramienta para la estimación de parámetros de los modelos de SANS y se discutirán los desafíos para la conciliación entre las imágenes simuladas y las obtenidas experimentalmente.

[1] Robledo, J. I., Frielinghaus, H., Willendrup, P., & Lieutenant, K. (2024). Learning from virtual experiments to assist users of Small Angle Neutron Scattering in model selection. *Scientific reports*, 14(1), 14996.

[2] Robledo, J. I., Lieutenant, K., & Willendrup, P. (2024). Small angle neutron scattering in McStas: Optimization for high-throughput virtual experiments. *Journal of Neutron Research*, 26(4), 173-185.