

神经网络在原子核质量中的应用

曲 爽

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2025年3月9日; 录用日期: 2025年4月10日; 发布日期: 2025年4月18日

摘 要

本文采用贝叶斯神经网络方法对多个核质量模型进行了优化, 包括宏观模型LDM、宏观-微观模型FRDM12, 微观模型RMF等。基于AME2020核质量数据表, BNN方法有效降低了实验值与理论预测值之间的均方根误差, 尤其在LDM模型和RMF模型中, 均方根误差都降低了80%。通过对轻、中和重核的单中子分离能进行测试, 结果显示BNN优化后的核质量模型的单中子分离能与实验数据能够较好地趋近, 并且再现了奇偶交错现象。

关键词

原子核质量, 神经网络, 贝叶斯方法

The Application of Neural Networks in Nuclear Masses

Shuang Qu

College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Mar. 9th, 2025; accepted: Apr. 10th, 2025; published: Apr. 18th, 2025

Abstract

This paper employs the Bayesian neural network method to optimize multiple nuclear mass models, including the macroscopic model LDM, the macroscopic-microscopic model FRDM12, and the microscopic model RMF, etc. Based on the AME2020 nuclear mass data table, the BNN method effectively reduces the root mean square error between experimental values and theoretical predictions, especially in the LDM and RMF models, where the root mean square error is reduced by 80%. By testing the single-neutron separation energies of light, medium, and heavy nuclei, the results show that the single-neutron separation energies of the BNN-optimized nuclear mass models can better approach the experimental data and reproduce the odd-even staggering phenomenon.

Keywords

Nuclear Mass, Neural Network, Bayesian Method

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

核质量或结合能是原子核的基本性质。通过精确测量原子核质量或结合能，可以揭示原子核壳效应[1][2]和形变[3][4]等核结构特征，因此对原子核质量的精确测量在核物理的研究中至关重要。目前大约有 2500 多个核素的质量已经被实验测量[5]，但仍有相当数量的核素质量未得到有效测量，因此需要借助理论模型预言这些核素的质量。

早期的核质量模型如液滴模型(Liquid Drop Model, LDM) [6]，它是描述原子核结合能的经典宏观模型。其次在原子核质量预测中主要还包括两种全局核质量模型：宏观 - 微观质量模型和微观质量模型。宏观 - 微观质量模型例如 Duflo-Zuker (DZ)模型[7][8]，有限范围液滴模型 Finite-Range-Droplet Model (FRDM12) [9]和 Weizsäcker-Skyrme (WS)质量模型[10]-[13]。微观质量模型如 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)模型[14]-[16]以及 Relativistic Mean-Field (RMF)模型[17]。

对原子核质量的预测精度范围已有较好的研究成果，但对于未知核区核素的质量精度要求仍有进一步的提高空间。随着计算机技术的高速发展，机器学习(Machine Learning, ML)在核物理领域的应用逐渐成为趋势，机器学习在核质量中的应用有望弥补传统理论模型存在的不足。神经网络是机器学习中的一个重要方法，机器学习中预测核质量使用的神经网络方法例如径向基函数[18]、贝叶斯神经网络(Bayesian Neural Network, BNN) [19]和 Levenberg-Marquardt (LM)神经网络等。

本文使用贝叶斯神经网络方法对核质量模型进行优化来提高核质量预言精确度。第二部分给出贝叶斯神经网络的理论介绍，第三部分基于 AME2020 核质量数据表[20]对核质量模型进行优化，其次对 BNN 方法优化后的单中子分离能进行了讨论，最后给出总结。

2. 贝叶斯神经网络模型

贝叶斯神经网络的思想就是把概率方法加入到神经网络模型中，目的是让网络能输出预测结果，得到预测结果的不确定性。贝叶斯神经网络会给每个参数设置一个概率分布，通过不断学习数据以更新这些参数的概率分布，最终给出预测结果的概率分布。贝叶斯神经网络基于贝叶斯定理来推断模型参数的后验分布，假设有一个给定的训练数据集 $D = \{(x_n, y_n)\}$ ，其中 x_n 是输入数据， y_n 为输出数据。模型的目标是从给定的数据 D 中推断出模型参数 θ 的后验分布。根据贝叶斯定理，后验分布 $p(\theta|D)$ 可表示为

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)} \quad (1)$$

本文定义 y_n 为核质量的实验值 M_{exp} 与理论值 M_{th} 之间的质量残差

$$y_n = M_{\text{exp}}(Z_n, N_n) - M_{\text{th}}(Z_n, N_n) \quad (2)$$

本文将均方根误差(Root Mean Square Error, RMSE)作为损失函数，定义为

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (y_n - \hat{y}_n)^2} \quad (3)$$

这里 y_n 是第 n 个数据的实验质量残差, $\hat{y}_n$ 是模型预测的质量残差。

本文采用的神经网络模型[19]为

$$f(x_n, \theta) = a + \sum_{j=1}^H b_j \tanh\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ji} x_i\right) \quad (4)$$

式中 $\theta = \{a, b_j, c_j, d_{ji}\}$ 表示神经网络的参数, H 为隐藏神经元, I 为输入参量。函数 $f(x_n, \theta)$ 与输入参量和网络参数的选择有关。 x 包含四个输入参量, 即 $x = (Z, N, \delta, P)$, Z 和 N 分别为质子数和中子数, δ 和 P 是原子核的对效应和壳效应。

3. 模型训练

BNN 优化的 LDM 模型

以 LDM 模型为例检验 BNN 方法对模型的优化效果, 本文计算原子核结合能的 LDM 公式[21]为

$$E_{LDM}(Z, A) = a_v \left(1 + \frac{4k_v}{A^2} T_z (T_z + 1)\right) A + a_s \left(1 + \frac{4k_s}{A^2} T_z (T_z + 1)\right) A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} + f_p \frac{Z^2}{A} + E_p \quad (6)$$

其中 $a_v, k_v, a_s, k_s, a_c, f_p$ 为可调参数, Z, A, T_z 分别为质子数, 质量数及同位旋三分量。

$$E_p = \begin{cases} \frac{d_n}{N^{1/3}} + \frac{d_p}{Z^{1/3}} + \frac{d_{np}}{A^{1/3}}, & Z \text{ 和 } N \text{ 为奇数,} \\ d_p / Z^{1/3}, & Z \text{ 为奇数, } N \text{ 为偶数,} \\ d_n / N^{1/3}, & Z \text{ 为偶数, } N \text{ 为奇数,} \\ 0, & Z \text{ 和 } N \text{ 为偶数.} \end{cases} \quad (7)$$

式中 d_n, d_p, d_{np} 为可调参数, 通过线性拟合得到最佳参数分别为 $a_v = -15.628$, $k_v = -1.860$, $a_s = 17.881$, $k_s = -2.292$, $a_c = 0.711$, $f_p = -1.120$, $d_n = 4.873$, $d_p = 5.102$, $d_{np} = -7.188$ 。拟合后的结合能均方根误差为 2.543 MeV。

本文训练贝叶斯神经网络的原子核质量数据取自 AME2020, 所用数据为 $N \geq 8$ 和 $Z \geq 8$ 的 2457 个原子核, 将 2457 个原子核组成的数据集随机分为 90% 的数据作为学习集和 10% 的数据作为验证集。

实验值与预测值之间的结合能偏差如图 1 所示, 计算结果在表 1 中给出。图中可以明显看到 LDM 模型在双闭壳核处实验值与预测值有较大的偏差, 而使用 BNN 方法后, LDM 模型整体的均方根误差从 2.543 MeV 降到了 0.458 MeV, 表明 BNN 方法的质量预测之间的残差部分有效消除了 LDM 模型在计算结合能时产生的误差。

在表明 BNN 方法的有效性的情况下将贝叶斯神经网络应用于宏观微观质量模型 FRDM12, 微观质量模型 RMF。原始模型预测的核质量均方根误差与使用 BNN 方法优化的误差之间的对比结果如表 1 所示。

表 1 展示了 BNN 方法改进的各种质量模型及其对应模型的学习集和验证集中的核质量相对于实验数据的均方根误差。结果显示三个核质量模型的均方根误差都得到了降低, 尤其是液滴模型学习集的均方根误差从 2.552 MeV 降至 0.352 MeV, 均方根误差减少了 80%, RMF 模型学习集的均方根误差从 2.109 MeV 降至 0.388 MeV, 均方根误差也同样减少了 80%。在验证集上的均方根误差的表现也较好, 证明了

BNN 方法预测核质量的有效性。

为了直观地显示 BNN 方法预测核质量的效果，图 2 给出了 LDM 模型的整个集合中每个原子核质量的实验数据和模型理论数据之间的质量差异以及 BNN 方法改进的质量预测之间的偏差。从图 2(a)可以明显看出在幻数周围的区域实验数据与理论数据之间存在较大差异，从图 2(b)看到 LDM 模型的误差分布经 BNN 方法优化后得到改善，表明 BNN 方法较好地优化了实验数据与 LDM 模型预测之间的质量偏差。

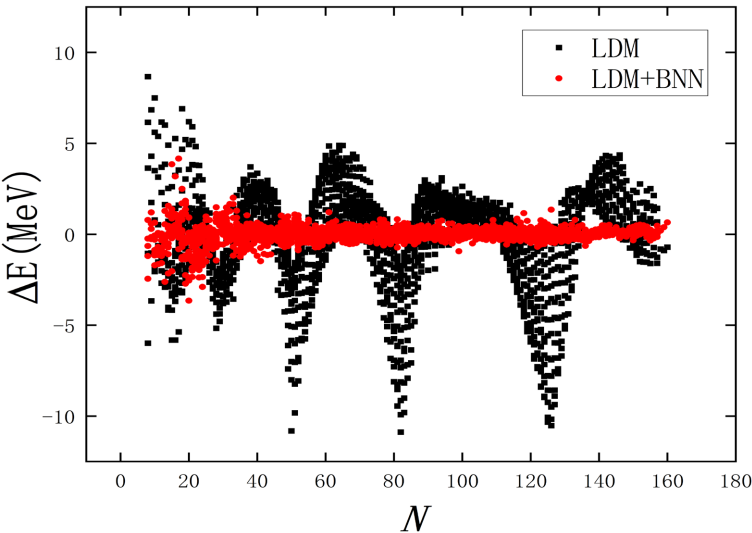


Figure 1. Difference between the calculated and the experimental binding energies

图 1. 理论结合能与实验结合能的偏差

Table 1. Correction results of BNN for different models

表 1. BNN 方法对不同模型的修正结果

模型		LDM	FRDM12	RMF
学习集	σ_{pre} (MeV)	2.552	0.607	2.109
	σ_{post} (MeV)	0.352	0.289	0.388
	$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$	0.862	0.523	0.816
	σ_{pre} (MeV)	2.389	0.589	2.011
验证集	σ_{post} (MeV)	0.494	0.393	0.547
	$\Delta\sigma/\sigma_{\text{pre}}$	0.793	0.333	0.728

本文进一步对轻、中、重核的单中子分离能进行测试，计算了质子数 $Z=166,280$ 的同位素链单中子分离能。测试方法为使用 BNN 方法优化后的 FRDM12、LDM 以及 RMF 模型的核质量数据计算出这些核质量对应的单中子分离能，然后与 AME2020 数据表中的实验值进行比较。结果如图 3 所示。将计算的结果与 AME2020 数据表中的实验数据进行比较，发现使用 BNN 方法改进后的 RMF 模型的核质量的单中子分离能在轻核区域表现较好，而在中核与重核区域存在部分与 AME2020 实验值的偏差，但总体数据变化趋势趋近 AME2020 数据表的实验值，BNN 方法改进后的 FRDM12、LDM 模型的核质量的单中子分离能与 AME2020 数据表的实验值的变化趋势都有较好的贴近，而且单中子分离能的奇偶交错变化也得到了再现。BNN 方法有效优化了 FRDM12、LDM 以及 RMF 模型的核质量数据，并且对优化后的核质量计算出的单中子分离能也与 AME2020 数据表中的实验值有较好的重合，验证了 BNN 方法预测核质量的

准确性。

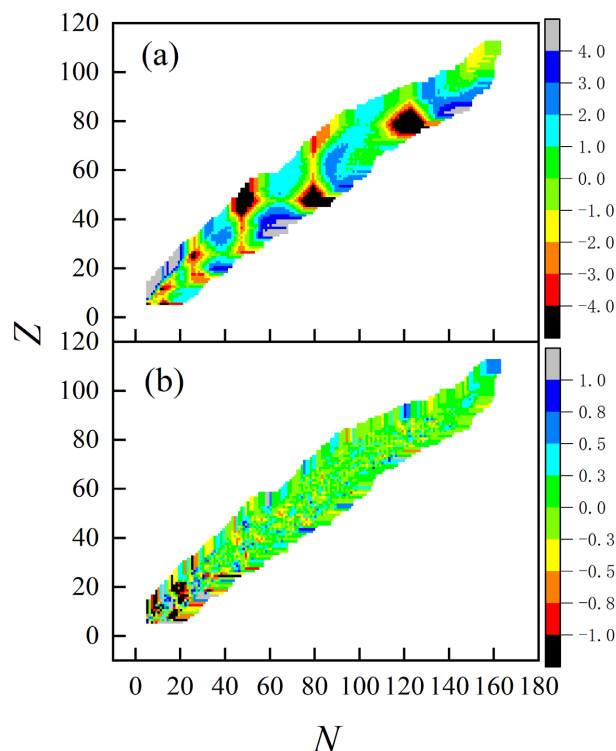


Figure 2. Panels (a) represent the mass differences between the experimental values and the predictions of the LDM model for the entire dataset. Panels (b) show the mass differences between the experimental values improved using the BNN method and the predictions of the LDM model

图 2. (a)整个集合中实验值与 LDM 模型预测值之间的偏差；(b) 表示使用 BNN 方法改善的实验值与 LDM 预测值之间的偏差

4. 结论

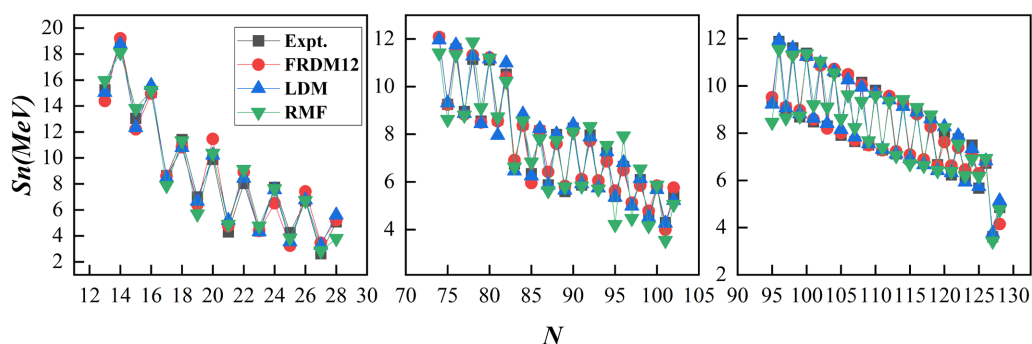


Figure 3. The single-neutron separation energies (S_n) of $Z = 166,280$

图 3. $Z = 166,280$ 的单中子分离能

本文采用贝叶斯神经网络方法基于 AME2020 核质量数据表优化了包括宏观模型 LDM，宏观 - 微观模型 FRDM12，微观模型 RMF 等，结果表明 BNN 方法有效减少了实验值与理论预测值之间的均方根误差。本文还对 BNN 方法优化后的核质量数据的轻、中、重核的单中子分离能进行了测试，以 $Z = 166,280$ 的原子核为例，发现 BNN 优化后的 FRDM12、LDM 和 RMF 模型的核质量数据与 AME2020 数据表的实

验值有很好的趋近。综上所述, 本文通过对神经网络输入参量和超参数的合理调整使得 BNN 方法有效降低了核质量模型的均方根误差, 改善了核质量的预测精度, 这为核物理研究提供了重要的预测工具。

参考文献

- [1] Ramirez, E.M., Ackermann, D., Blaum, K., Block, M., Droese, C., Düllmann, C.E., *et al.* (2012) Direct Mapping of Nuclear Shell Effects in the Heaviest Elements. *Science*, **337**, 1207-1210. <https://doi.org/10.1126/science.1225636>
- [2] Wienholtz, F., Beck, D., Blaum, K., Borgmann, C., Breitenfeldt, M., Cakirli, R.B., *et al.* (2013) Masses of Exotic Calcium Isotopes Pin down Nuclear Forces. *Nature*, **498**, 346-349. <https://doi.org/10.1038/nature12226>
- [3] Hager, U., Eronen, T., Hakala, J., Jokinen, A., Kolhinen, V.S., Kopecky, S., *et al.* (2006) First Precision Mass Measurements of Refractory Fission Fragments. *Physical Review Letters*, **96**, Article ID: 042504. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.042504>
- [4] de Roubin, A., Atanasov, D., Blaum, K., George, S., Herfurth, F., Kisler, D., *et al.* (2017) Nuclear Deformation in the $a \approx 100$ Region: Comparison between New Masses and Mean-Field Predictions. *Physical Review C*, **96**, Article ID: 014310. <https://doi.org/10.1103/physrevc.96.014310>
- [5] Wang, M., Huang, W.J., Kondev, F.G., Audi, G. and Naimi, S. (2021) The AME 2020 Atomic Mass Evaluation (II). Tables, Graphs and References. *Chinese Physics C*, **45**, Article ID: 030003. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddaf>
- [6] Gamow, G. (1930) Mass Defect Curve and Nuclear Constitution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **126**, 632-644.
- [7] Duflo, J. and Zuker, A.P. (1995) Microscopic Mass Formulas. *Physical Review C*, **52**, R23-R27. <https://doi.org/10.1103/physrevc.52.r23>
- [8] Zuker, A.P. (2008) Shell Formation and Nuclear Masses. *Revista Mexicana de Física*, **54**, 129.
- [9] Möller, P., Sierk, A.J., Ichikawa, T. and Sagawa, H. (2016) Nuclear Ground-State Masses and Deformations: FRDM (2012). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **109**, 1-204. <https://doi.org/10.1016/j.adt.2015.10.002>
- [10] Wang, N., Liu, M. and Wu, X. (2010) Modification of Nuclear Mass Formula by Considering Isospin Effects. *Physical Review C*, **81**, Article ID: 044322. <https://doi.org/10.1103/physrevc.81.044322>
- [11] Wang, N., Liang, Z., Liu, M. and Wu, X. (2010) Mirror Nuclei Constraint in Nuclear Mass Formula. *Physical Review C*, **82**, Article ID: 044304. <https://doi.org/10.1103/physrevc.82.044304>
- [12] Liu, M., Wang, N., Deng, Y. and Wu, X. (2011) Further Improvements on a Global Nuclear Mass Model. *Physical Review C*, **84**, Article ID: 014333. <https://doi.org/10.1103/physrevc.84.014333>
- [13] Wang, N., Liu, M., Wu, X. and Meng, J. (2014) Surface Diffuseness Correction in Global Mass Formula. *Physics Letters B*, **734**, 215-219. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2014.05.049>
- [14] Goriely, S., Chamel, N. and Pearson, J.M. (2013) Further Explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov Mass Formulas. XIII. the 2012 Atomic Mass Evaluation and the Symmetry Coefficient. *Physical Review C*, **88**, Article ID: 024308. <https://doi.org/10.1103/physrevc.88.024308>
- [15] Goriely, S., Chamel, N. and Pearson, J.M. (2013) Hartree-Fock-Bogoliubov Nuclear Mass Model with 0.50 MeV Accuracy Based on Standard Forms of Skyrme and Pairing Functionals. *Physical Review C*, **88**, Article ID: 061302. <https://doi.org/10.1103/physrevc.88.061302>
- [16] Goriely, S., Chamel, N. and Pearson, J.M. (2016) Further Explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov Mass Formulas. XVI. Inclusion of Self-Energy Effects in Pairing. *Physical Review C*, **93**, Article ID: 034337. <https://doi.org/10.1103/physrevc.93.034337>
- [17] Geng, L., Toki, H. and Meng, J. (2005) Masses, Deformations and Charge Radii-Nuclear Ground-State Properties in the Relativistic Mean Field Model. *Progress of Theoretical Physics*, **113**, 785-800. <https://doi.org/10.1143/ptp.113.785>
- [18] Niu, Z.M., Zhu, Z.L., Niu, Y.F., Sun, B.H., Heng, T.H. and Guo, J.Y. (2013) Radial Basis Function Approach in Nuclear Mass Predictions. *Physical Review C*, **88**, Article ID: 024325. <https://doi.org/10.1103/physrevc.88.024325>
- [19] Utama, R., Piekarewicz, J. and Prosper, H.B. (2016) Nuclear Mass Predictions for the Crustal Composition of Neutron Stars: A Bayesian Neural Network Approach. *Physical Review C*, **93**, Article ID: 014311. <https://doi.org/10.1103/physrevc.93.014311>
- [20] Huang, W.J., Wang, M., Kondev, F.G., Audi, G. and Naimi, S. (2021) The AME 2020 Atomic Mass Evaluation (I). Evaluation of Input Data, and Adjustment Procedures. *Chinese Physics C*, **45**, Article ID: 030002. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddb0>
- [21] Bhagwat, A. (2014) Simple Nuclear Mass Formula. *Physical Review C*, **90**, Article ID: 064306. <https://doi.org/10.1103/physrevc.90.064306>