

基于人工神经网络的单核子分离能研究

张锦衍

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2025年3月12日; 录用日期: 2025年4月11日; 发布日期: 2025年4月21日

摘要

本研究基于三个具有代表性的理论模型: 相对论连续谱Hartree-Bogoliubov (RCHB)理论, 相对论平均场(RMF)理论, Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov (SHFB)模型, 首先介绍了人工神经网络(ANN)方法, 计算出了三个模型的单核子分离能的理论预测值。随后利用神经网络对单核子分离能的理论值进行了优化训练, 降低了单核子分离能的理论预测值与实验值之间的均方根偏差(RMSD), 并在此基础上进行了两种分区优化, 分别为质子和中子的幻数分区, 分区优化训练后进一步降低了RMSD。单核子分离能分区训练后的RMSD比整体直接训练的效果更好, 特别能显著降低轻核区的RMSD, 单中子分离能进行中子幻数分区训练的效果更好, 单质子分离能进行质子幻数分区训练的效果更好。

关键词

单核子分离能, 人工神经网络, RCHB, RMF, SHFB

Research on Single-Nucleon Separation Energy Based on Artificial Neural Networks

Jinyan Zhang

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

Received: Mar. 12th, 2025; accepted: Apr. 11th, 2025; published: Apr. 21st, 2025

Abstract

This research is based on three representative theoretical models: the Relativistic Continuum Hartree-Bogoliubov (RCHB) theory, Relativistic Mean Field (RMF) theory, and Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov (SHFB) model. First, the Artificial Neural Network (ANN) method was introduced to calculate theoretical predictions of single-nucleon separation energies for these three models. Subsequently, the neural network was employed to optimize and train the theoretical values of single-nucleon separation energies, reducing the root mean square deviation (RMSD) between theoretical

predictions and experimental values. Two partitioning optimization schemes were then implemented: proton magic number partitioning and neutron magic number partitioning. The partitioned optimization training further reduced RMSD values. The partitioned training of single-nucleon separation energies demonstrated better performance than direct global training, particularly in significantly reducing RMSD in the light nuclei region. Specifically, neutron magic number partitioning showed superior effectiveness for optimizing single-neutron separation energies, while proton magic number partitioning yielded better results for single-proton separation energies.

Keywords

Single-Nucleon Separation Energy, Artificial Neural Network, RCHB, RMF, SHFB

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

原子核分离能是核物理领域重要的基本物理量之一。核结构通过核子分离能在质量系统学中表现出来,分离能的精度在一定程度上反映了模型的精度。目前,实验室已经测量了 2500 多种核素[1],但还有很多核素的基本性质是未知的。分离能的预测值对于研究原子核的性质至关重要,通过核子分离能可以有效判断原子核内中子和质子的壳层结构。分离能也可以作为测试壳层闭合的直接方法,这有助于发现超重核的稳定岛位置[2] [3]。在天体物理学和宇宙学上,分离能也具有重要意义[4]。

分离能的理论预测可以通过原子核的理论模型得出。理论模型能够反映原子核基态性质的系统变化,描述和预言已知实验数据区域外核素的基态物理量。分离能的均方根误差(Root-Mean-Square Deviation, RMSD)从 BW 模型的 3 MeV [5]到 WS 模型的 300 KeV [6],但仍不足以准确研究核结构。以原子核的理论模型为基础,通过神经网络可以使理论模型的精度进一步提高。神经网络方法早在 20 世纪 40 年代就被提出,它具有强大的学习、预测能力与适应能力,可以应对多种复杂问题。

神经网络方法在核物理学中有许多成功的应用,例如贝叶斯神经网络(Bayesian Neural Network, BNN)预测核质量[7]、 β 衰变寿命[8],人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)预测电荷半径[9],BP 神经网络(Back Propagation Neural Network, BPNN)研究原子核低激发谱[10],前馈神经网络(Feedforward Neural Network, FNN)预测 α 衰变半衰期[11]等。在分离能方面比较多的先预测核质量或结合能,再以他们为基础计算出分离能[12]。直接训练分离能能使训练的误差更有针对性,使分离能的预测结果更准确,也能反向印证核质量和结合能的预言结果。

在本文中对于单核子分离能使用了三个理论模型:相对论连续谱 Hartree-Bogoliubov (Relativistic continuum Hartree-Bogoliubov, RCHB)理论[13] [14],相对论平均场(Relativistic Mean Field, RMF)理论[15] [16],Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov (SHFB)模型[1]。使用了人工神经网络方法训练模型,进一步提高对单核子分离能的预测能力。在本文的第二节中描述了使用的人工神经网络方法,具体选取的参数和分区方式。在第三节中讨论了单核子分离能的均方根偏差在两种不同分区下训练前后的结果。

2. 方法描述

人工神经网络是目前广泛应用的神经网络模型之一,工作方式模拟人脑神经元,能够利用非线性激

活函数来建模复杂的数据关系, 通过学习大量数据来自适应地调整内部的权重和偏置, 从而改进性能, 具有层次化结构和良好的泛化能力[17][18]。人工神经网络是一个由输入层、隐藏层和输出层组成的多层神经网络。输入层负责接收外部输入信号, 多层隐藏层作为中间层处于输入层和输出层之间, 输出层输出最终结果。每一层神经网络都由被称为节点的简单处理单元组成, 节点处理数据的过程如下式所示:

$$y = f_2[\varphi_2 f_1(\varphi_1 x + b_1) + b_2] \quad (1)$$

x 是输入的数据, y 是输出层的结果, f_1 和 f_2 是隐藏层和输出层的激活函数, φ_1 和 φ_2 是隐藏层和输出层的权重, b_1 和 b_2 是隐藏层和输出层的阈值。在传递过程中, 信号传递前向传播, 先通过输入层, 再到隐藏层, 最后到输出层。误差则反向传播, 先通过输出层, 再进入隐藏层, 最后到输入层。人工神经网络便以此优化权重和偏差, 使计算值和目标值之间的误差越来越小。

在本人工神经网络中, 选取的激活函数为 ReLU (Rectified Linear Unit)函数, 学习过程通过随机梯度下降(Stochastic Gradient Descent, SGD)的方法最小化损失函数。神经网络具有 2 个隐藏层, 每个隐藏层有 20 个神经元, 使用 4 个特征值($Z, N, |Z - Z_0|, |N - N_0|$)作为输入单元, 其中 Z 和 N 分别为给定核的质子数和中子数。 Z_0 (8, 20, 50, 82, 126)和 N_0 (8, 20, 50, 82, 126)是质子和中子的幻数, 当 Z 或 N 处于两个幻数之间时, 分别算出两个 $|Z - Z_0|$ 和 $|N - N_0|$ 值后, 选用更小的值。

分离能的实验值根据国际原子质量评估(AME, Atomic Mass Evaluation) 2020 年数据表中的结合能得出[19]。在 AME2020 表的原子核数据中选取原子核质子数满足 $Z \geq 8$ 的数据, 以这些数据的结合能(B)为基础, 根据下式:

$$S_n(N, Z) = B(N, Z) - B(N-1, Z) \quad (2)$$

$$S_p(N, Z) = B(N, Z) - B(N, Z-1) \quad (3)$$

分别计算出单中子分离能(S_n), 单质子分离能(S_p)作为实验数据。用同样的方式计算出 RCHB、RMF 和 SHFB 模型的单核子分离能作为理论预测值。使用人工神经网络训练理论预测值与实验值的差值, 然后将训练后的差值与模型的预测值相加得到最终的原子核分离能计算结果。

单核子分离能在幻数附近会出现显著变化, 因此在神经网络的基础上增加了两种分区训练方式, 分别为质子幻数分区($8 \leq Z < 20, 20 \leq Z < 50, 50 \leq Z < 82, Z \geq 82$), 中子幻数分区($8 \leq N < 20, 20 \leq N < 50, 50 \leq N < 82, 82 \leq N < 126, N \geq 126$)。最后结果以分离能的预测值和实验值之间的均方根偏差(Root-Mean-Square Deviation, RMSD)作为判断标准。

3. 结果与讨论

3.1. 单中子分离能

S_n 整体的 RMSD 如表 1 所示, 分别为原始的 RMSD, 不分区神经网络直接训练后的 RMSD, Z 幻数分区训练后的 RMSD 和 N 幻数分区训练后的 RMSD。从表 1 中可以看出 S_n 的 RMSD 在不分区直接训练的情况下比原始 RMSD 降低了 2.94%~33.30%。 Z 幻数分区训练后的 S_n 的 RMSD 比不分区直接训练的 RMSD 降低了 10.15%~37.52%, 比原始的 RMSD 降低了 12.79%~58.32%。 N 幻数分区训练后的 S_n 的 RMSD 比不分区直接训练的 RMSD 降低了 13.61%~37.69%, 比原始的 RMSD 降低了 16.14%~58.44%。

经过神经网络训练后能够降低模型 S_n 原始的 RMSD。再将数据集按幻数分区分别通过神经网络训练, 分区后得到 RMSD 乘以各区数据个数, 全部相加后除以数据集总个数, 得到分区后的整体 RMSD, 如下式所示:

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^k \sigma_i * n_i}{n} \quad (4)$$

σ 为整体的 RMSD, σ_i 为第 i 个分区的 RMSD, n_i 为第 i 个分区的个数, n 为数据集的总个数, k 为分区个数, 中子分区个数 k 为 5。

通过分区训练后, S_n 的 RMSD 被进一步降低了。从表 1 也能看出, N 幻数分区的效果对 S_n 来说更好。

Table 1. RMSD (keV) of S_n for RCHB, RMF, and SHFB models: original RMSD, trained RMSD without partitioning, trained RMSD with Z magic number partitioning, and trained RMSD with N magic number partitioning

表 1. RCHB、RMF 和 SHFB 模型的 S_n 的 RMSD (keV), 分别为原始的 RMSD, 不分区直接训练后的 RMSD, Z 幻数分区训练后的 RMSD 和 N 幻数分区训练后的 RMSD

模型	原始	不分区	Z 幻数分区	N 幻数分区
RCHB	871	581	363	362
RMF	645	556	472	446
HFB	477	463	416	400

具体神经网络分区训练后的 S_n 的 RMSD 结果如表 2 和表 3 所示, 表 2 为 Z 幻数分区的结果, 表 3 为 N 幻数分区的结果。从表 2 和表 3 中可以看出, S_n 的 RMSD 在训练前后都是在重核区更低。在轻核区, 通过分区训练的方法能更大幅度地降低 RMSD, 绝大多数降幅超过 50%。

Table 2. RMSD (keV) of S_n in the Z magic number region: original RMSD (σ_1) and trained RMSD (σ_1') for RCHB; original RMSD (σ_2) and trained RMSD (σ_2') for RMF; original RMSD (σ_3) and trained RMSD (σ_3') for SHFB

表 2. Z 幻数分区的 S_n 的 RMSD (keV), 分别为 RCHB 原始的 RMSD (σ_1) 和训练后的 RMSD (σ_1'), RMF 原始的 RMSD (σ_2) 和训练后的 RMSD (σ_2'), SHFB 原始的 RMSD (σ_3) 和训练后的 RMSD (σ_3')

分区	σ_1	σ_1'	σ_2	σ_2'	σ_3	σ_3'
$8 \leq Z < 20$	1239	467	1011	594	952	649
$20 \leq Z < 50$	832	388	763	594	529	507
$50 \leq Z < 82$	883	358	526	380	312	299
$Z \geq 82$	703	267	437	341	382	331

Table 3. RMSD (keV) of S_n in the N magic number region: original RMSD (σ_1) and trained RMSD (σ_1') for RCHB; original RMSD (σ_2) and trained RMSD (σ_2') for RMF; original RMSD (σ_3) and trained RMSD (σ_3') for SHFB

表 3. N 幻数分区的 S_n 的 RMSD (keV), 分别为 RCHB 原始的 RMSD (σ_1) 和训练后的 RMSD (σ_1'), RMF 原始的 RMSD (σ_2) 和训练后的 RMSD (σ_2'), SHFB 原始的 RMSD (σ_3) 和训练后的 RMSD (σ_3')

分区	σ_1	σ_1'	σ_2	σ_2'	σ_3	σ_3'
$8 \leq N < 20$	1375	239	1086	431	1035	421
$20 \leq N < 50$	925	490	844	636	667	626
$50 \leq N < 82$	742	296	610	391	349	300
$82 \leq N < 126$	877	354	501	377	329	309
$N \geq 126$	741	304	477	358	374	333

3.2. 单质子分离能

S_p 整体的 RMSD 如表 4 所示, 分别为原始的 RMSD, 不分区神经网络直接训练后的 RMSD, Z 幻数分区训练后的 RMSD 和 N 幻数分区训练后的 RMSD。从表 4 中可以看出 S_p 的 RMSD 在不分区直接训练

的情况下比原始 RMSD 降低了 7.27%~39.27%。 Z 幻数分区训练后的 S_p 的 RMSD 比不分区直接训练的 RMSD 降低了 15.76%~35.46%，比原始的 RMSD 降低了 31.53%~59.73%。 N 幻数分区训练后的 S_p 的 RMSD 比不分区直接训练的 RMSD 降低了 18.03%~30.42%，比原始的 RMSD 降低了 24.28%~57.74%。

经过神经网络训练后能够降低模型 S_p 原始的 RMSD。通过分区训练后，如式(4)，质子分区个数 k 为 4，得到整体的 RMSD， S_p 的 RMSD 被进一步降低了。从表 4 也能看出， Z 幻数分区的效果对 S_p 来说更好。

Table 4. RMSD (keV) of S_n for RCHB, RMF, and SHFB models: original RMSD, trained RMSD without partitioning, trained RMSD with Z magic number partitioning, and trained RMSD with N magic number partitioning

表 4. RCHB、RMF 和 SHFB 模型的 S_n 的 RMSD (keV)，分别为原始的 RMSD，不分区直接训练后的 RMSD， Z 幻数分区训练后的 RMSD 和 N 幻数分区训练后的 RMSD

模型	原始	不分区	Z 幻数分区	N 幻数分区
RCHB	904	549	364	382
RMF	812	660	556	541
HFB	523	485	313	396

具体神经网络分区训练后的 S_p 的 RMSD 如表 5 和表 6 所示，表 5 为 Z 幻数分区的结果，表 6 为 N 幻数分区的结果。从表 5 和表 6 中可以看出， S_p 的 RMSD 和 S_n 同样在训练前后都是在重核区更低，但在轻核区训练的效果更好，大部分 RMSD 的降幅超过 50%。

Table 5. RMSD (keV) of S_p in the Z magic number region: original RMSD (σ_1) and trained RMSD (σ_1') for RCHB; original RMSD (σ_2) and trained RMSD (σ_2') for RMF; original RMSD (σ_3) and trained RMSD (σ_3') for SHFB

表 5. Z 幻数分区的 S_p 的 RMSD (keV)，分别为 RCHB 原始的 RMSD (σ_1) 和训练后的 RMSD (σ_1')，RMF 原始的 RMSD (σ_2) 和训练后的 RMSD (σ_2')，SHFB 原始的 RMSD (σ_3) 和训练后的 RMSD (σ_3')

分区	σ_1	σ_1'	σ_2	σ_2'	σ_3	σ_3'
$8 \leq Z < 20$	1307	320	1122	329	1047	432
$20 \leq Z < 50$	770	433	844	693	610	308
$50 \leq Z < 82$	1016	352	686	518	342	285
$Z \geq 82$	623	265	867	432	377	326

Table 6. RMSD (keV) of S_p in the N magic number region: original RMSD (σ_1) and trained RMSD (σ_1') for RCHB; original RMSD (σ_2) and trained RMSD (σ_2') for RMF; original RMSD (σ_3) and trained RMSD (σ_3') for SHFB

表 6. N 幻数分区的 S_p 的 RMSD (keV)，分别为 RCHB 原始的 RMSD (σ_1) 和训练后的 RMSD (σ_1')，RMF 原始的 RMSD (σ_2) 和训练后的 RMSD (σ_2')，SHFB 原始的 RMSD (σ_3) 和训练后的 RMSD (σ_3')

分区	σ_1	σ_1'	σ_2	σ_2'	σ_3	σ_3'
$8 \leq N < 20$	1384	451	1100	255	1173	323
$20 \leq N < 50$	961	534	875	685	734	615
$50 \leq N < 82$	754	297	795	608	378	316
$82 \leq N < 126$	955	401	746	483	338	305
$N \geq 126$	690	300	787	292	389	339

4. 总结

本文使用人工神经网络方法对 RCHB、RMF 和 HFB 模型进行了训练来预测分离能，选取特征值(Z 、

$N, |Z - Z_0|, |N - N_0|$), 优化后 S_n 和 S_p 的 RMSD 都得到了改善, 并且 RMSD 在 Z 和 N 幻数分区优化后得到了进一步的降低。三个模型 S_n 的 RMSD 在神经网络分区优化后平均降低了 250 keV 左右, S_p 的 RMSD 平均降低了 350 keV 左右。分区训练的结果比整体训练的结果更好, 能有效应用在分离能的预测上。

通过幻数分区, 能发现单核子分离能的 RMSD 随着 Z 和 N 的增加而降低, 分区训练也能显著降低本来较高的轻核区的 RMSD。整体上 S_n 的 RMSD 都在 N 幻数分区上较好, 而 S_p 的 RMSD 则在 Z 幻数分区上较好。

参考文献

- [1] 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 034337. <https://doi.org/10.1103/physrevc.93.034337>
- [2] Hofmann, S. and Münzenberg, G. (2000) The Discovery of the Heaviest Elements. *Reviews of Modern Physics*, **72**, 733-767. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.72.733>
- [3] Lunney, D., Pearson, J.M. and Thibault, C. (2003) Recent Trends in the Determination of Nuclear Masses. *Reviews of Modern Physics*, **75**, 1021-1082. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.75.1021>
- [4] Arnould, M. and Takahashi, K. (1999) Nuclear Astrophysics. *Reports on Progress in Physics*, **62**, 395-462. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/62/3/003>
- [5] Kirson, M.W. (2008) Mutual Influence of Terms in a Semi-Empirical Mass Formula. *Nuclear Physics A*, **798**, 29-60. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2007.10.011>
- [6] 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>
- [7] 娄月申, 郭文军. 贝叶斯深度神经网络对于核质量预测的研究[J]. 物理学报, 2022, 71(10): 163-172.
- [8] 李伟峰, 张晓燕, 牛中明. 贝叶斯神经网络方法对原子核 β 衰变寿命的研究[J]. 核技术, 2023, 46(8): 126-133.
- [9] 董潇旭, 耿立升. 机器学习方法研究原子核的电荷半径[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(4): 679-695.
- [10] 王逸夫, 牛中明. 多任务神经网络对原子核低激发谱的研究[J]. 原子核物理评论, 2022, 39(3): 273-280.
- [11] 卜炫德, 吴迪, 白春林. 基于神经网络预测重核 α 衰变半衰期[J]. 中国科学: 物理学, 力学, 天文学, 2022, 52(5): 51-56.
- [12] 李佳星, 赵天亮, 马娜娜, 等. 神经网络方法在核质量中的应用[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(4): 696-703.
- [13] Xia, X.W., Lim, Y., Zhao, P.W., Liang, H.Z., Qu, X.Y., Chen, Y., et al. (2018) The Limits of the Nuclear Landscape Explored by the Relativistic Continuum Hartree-Bogoliubov Theory. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **121**, 1-215. <https://doi.org/10.1016/j.adt.2017.09.001>
- [14] Meng, J. (1998) Relativistic Continuum Hartree-Bogoliubov Theory with Both Zero Range and Finite Range Gogny Force and Their Application. *Nuclear Physics A*, **635**, 3-42. [https://doi.org/10.1016/s0375-9474\(98\)00178-x](https://doi.org/10.1016/s0375-9474(98)00178-x)
- [15] Peña-Arteaga, D., Goriely, S. and Chamel, N. (2016) Relativistic Mean-Field Mass Models. *The European Physical Journal A*, **52**, Article No. 320. <https://doi.org/10.1140/epja/i2016-16320-x>
- [16] Geng, L., Toki, H., Sugimoto, S. and Meng, J. (2003) Relativistic Mean Field Theory for Deformed Nuclei with Pairing Correlations. *Progress of Theoretical Physics*, **110**, 921-936. <https://doi.org/10.1143/ptp.110.921>
- [17] 董军, 胡上序. 混沌神经网络研究进展与展望[J]. 信息与控制, 1997, 26(5): 360-368.
- [18] Mnih, V., Kavukcuoglu, K., Silver, D., Rusu, A.A., Veness, J., Bellemare, M.G., et al. (2015) Human-Level Control through Deep Reinforcement Learning. *Nature*, **518**, 529-533. <https://doi.org/10.1038/nature14236>
- [19] 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 030003. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddaf>