利用机器学习研究原子核四极形变在中能重离子碰撞中的效应

高泽鹏^{1,2}, 王永佳^{1*}, 李庆峰^{1,2,3*}, 刘玲²

1. 湖州师范学院理学院, 湖州 313000;

2. 沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034;

3. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000

*联系人, 王永佳, E-mail: wangyongjia@zjhu.edu.cn; 李庆峰, E-mail: liqf@zjhu.edu.cn

收稿日期: 2021-11-05; 接受日期: 2022-03-01; 网络出版日期: 2022-04-20

国家自然科学基金(编号: 11875125, U2032145, 12147219)和国家重点研发计划(编号: 2020YFE0202002)资助项目

摘要 本文基于极端相对论量子分子动力学(UrQMD)模型, 在模型初始化部分考虑弹靶核的四极形变, 研究形变对不同入射能量(每核子0.4, 1.0和1.5 GeV)下的 $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$ 碰撞的影响. 利用机器学习中的LightGBM决策树算法训练初始化过程中有无形变效应所给出的反应末态的自由质子、带电碎片(质量数 $A>1$)以及带电 π 介子的横动量(p_T)与快度(y_0)的分布, 使决策树算法具备从逐事件给出的末态粒子分布中识别原子核形变的能力. 利用LightGBM算法中的重要特征分析发现弹靶快度区的带电碎片数敏感于弹靶核的四极形变, 可以作为用重离子碰撞探测原子核四极形变的探针.

关键词 重离子碰撞, 原子核形变, 机器学习

PACS: 25.70.-z, 21.10.-k, 07.05.Mh

1 引言

核物质状态方程表征的是核子能量与核物质密度、同位旋不对称度等物理量的热力学关系, 一直以来都是核物理研究的重要内容之一. 重离子碰撞实验结合输运模型模拟是目前常用的提取核物质性质的方法^[1-16]. 近年来, 越来越多的理论与实验研究发现, 重离子碰撞中诸如原子核形变、核子动量分布、中子皮效应以及团簇效应等原子核的初态结构对反应末态的

一些观测量具有一定的影响^[17-30]. 四极形变是原子核的基本结构信息之一, 在重离子碰撞中研究原子核四极形变效应引起了越来越多的关注. 例如, 在中低能核反应中, 形变核极端取向碰撞(长轴对长轴、短轴对短轴)下, 核阻止、集体流、 π 介子产额等观测量具有明显的差异, 尤其在中心碰撞下长轴对长轴碰撞会有较大的椭圆流产生^[31-34]. 对于高能核反应, 平均场的作用占比减小, 初始核的结构对一些末态观测量的影响增强, 比如小碰撞中心度下的末态粒子的平均横动量

引用格式: 高泽鹏, 王永佳, 李庆峰, 等. 利用机器学习研究原子核四极形变在中能重离子碰撞中的效应. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 252010
Gao Z P, Wang Y J, Li Q F, et al. Application of machine learning to study the effects of quadrupole deformation on the nucleus in heavy-ion collisions at intermediate energies (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252010, doi: 10.1360/SSPMA-2021-0308

与高阶椭圆流 [35–37]. 利用重离子碰撞逐事件观测量的方法提取原子核形变信息有一定的挑战, 因为原子核的初态涨落以及随机的核-核碰撞会削弱原子核形变对观测量的影响.

机器学习是人工智能的一个子集, 目前已经被广泛地应用到基础理论研究中, 这主要得益于它对大量数据的处理和分析能力. 目前较为流行的一些机器学习算法包括深度神经网络(DNN)、卷积神经网络(CNN)、贝叶斯神经网络(BNN)等神经网络算法以及分布式梯度提升算法(LightGBM)、随机森林(RF)等决策树算法. 机器学习在核物理领域的研究中表现出很强的潜力, 在核质量的研究中, BNN和LightGBM等几个机器学习算法在已有的质量模型上给出了很好的修正 [38–41]; 裂变产额以及碎裂反应截面也可以由BNN很好地描述 [42–44]; CNN具有较强的图像识别能力, 被用于对称能的分类 [45]、碰撞参数的重构 [46, 47]等问题的研究. 同时, 机器学习也被用于原子核电荷半径 [48], α 衰变的半衰期和衰变能 [49]、 β 衰变的半衰期 [50], 以及各类原子核反应等问题的研究 [51–55]. 最近, 文献[56]利用CNN研究了初态原子核的四极形变在高中能重离子碰撞中的效应. 然而中低能核反应与高能核反应的机制不同, 末态观测量对初始化信息的敏感度需要进一步研究. 机器学习能够敏感地、高效地识别数据间的内在关联, 本文将通过机器学习方法从重离子碰撞中的末态观测量来提取初始化时弹靶核的四极形变.

本文分为如下几个部分: 第2节简要介绍所使用的极端相对论量子分子动力学(UrQMD)模型以及特征量的处理, 第3节介绍LightGBM决策树算法以及机器学习的过程, 第4节为预测结果与重要特征分析, 最后为结论与展望.

2 UrQMD模型和特征量

UrQMD模型主要包括初始化、势修正、核子-核子碰撞以及末态碎片构建等部分. 现版本通过引入Skyrme能量密度泛函, 考虑碰撞项截面介质修正和泡利阻塞等, 已被广泛地应用于研究多个能区的重离子碰撞 [57–61]. 在模型中核子由具有一定宽度的高斯波包来表示 [62]:

$$\phi_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_r^2)^{3/4}} \exp\left(\frac{-(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))^2}{4\sigma_r^2} + \frac{i\mathbf{p}_i(t) \cdot \mathbf{r}(t)}{\hbar}\right), \quad (1)$$

其中 $\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{p}_i$ 分别为第 i 个核子在相空间的波包中心的位置及动量, 波包宽度参数 σ_r^2 取 2 fm^2 .

对于初始化部分, 模型在一定约束条件下通过蒙特卡罗的方法抽取核子的坐标与动量, 核基态核子密度服从Woods-Saxon分布:

$$\rho(r, \theta, \phi) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-R(\theta, \phi))/a}}, \quad (2)$$

其中, $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$, a 为原子核表面弥散宽度. $R(\theta, \phi)$ 为原子核中心到表面的距离. 考虑到原子核四极形变, 这一项可以表示为

$$R(\theta, \phi) = R_0[1 + \beta_2 Y_{2,0}(\theta, \phi)], \quad (3)$$

其中, $R_0 = 1.128A^{1/3} - 0.89A^{-1/3}$ 为球形核的半径, β_2 为四极形变参数, $\beta_2 < 0$ 的原子核为扁椭球形核, 反之为长椭球形核. $Y_{2,0}(\theta, \phi)$ 为球谐函数. 在这样一个具有四极形变的原子核内, 我们可以随机抽取核子的坐标:

$$R_x = \xi^{(1/3)} R(\theta, \phi) \sin \theta \cos \phi, \quad (4)$$

$$R_y = \xi^{(1/3)} R(\theta, \phi) \sin \theta \sin \phi, \quad (5)$$

$$R_z = \xi^{(1/3)} R(\theta, \phi) \cos \theta, \quad (6)$$

其中, ξ 为0–1的随机数, $\theta(0, \pi)$ 和 $\phi(0, 2\pi)$ 为随机的角度. 抽取核子坐标时需保证该核子与已抽取的核子之间的距离大于 1.6 fm , 否则重新抽样. 所有核子的坐标确定之后, 模型根据核子所在位置的密度计算相应的费米动量 $p_F(i)$, 每个核子的初始动量由半径为 $p_F(i)$ 的费米球内随机抽取得到, 抽取的方式与随机给定核子坐标的方式相同. 抽样得到原子核初态的坐标和动量后, 计算其结合能, 若每核子结合能与实验值相差小于 1 MeV , 则使用本次抽样, 否则重新抽样.

在平均场中, 核子的坐标和动量的动力学演化遵循哈密顿正则方程:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (7)$$

其中, H 为系统的总哈密顿量, 可以写作以下形式:

$$H = \sum_i \sqrt{p_i^2 + m_i^2} + U. \quad (8)$$

两体相互作用势能 U 包括由Skyrme能量密度泛函给出的密度依赖部分、库仑项、动量相关项、表面能项、表面不对称项以及对称能项 [2, 3, 63, 64], 具体形式为

$$U = \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^A \frac{\langle \rho \rangle_i}{\rho_0} + \frac{\beta}{\eta + 1} \sum_{i=1}^A \frac{\langle \rho \rangle_i^\eta}{\rho_0^\eta}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{C_{\text{Coul}}}{2} \sum_{i=1}^A \sum_{j,j \neq i}^A Z_i Z_j \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \text{erf} \left(\frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{2\sigma_r} \right) \\
& + \frac{t_{\text{md}}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{j,j \neq i}^A \ln^2 \left[1 + a_{\text{md}} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2 \right] \rho_{ij} \\
& + \frac{g_{\text{sur}}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{j,j \neq i}^A \left[\frac{3}{2\sigma_r^2} - \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}{4\sigma_r^4} \right] \rho_{ij} \\
& + \frac{g_{\text{sur,iso}}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{j,j \neq i}^A t_i \cdot t_j \left[\frac{3}{2\sigma_r^2} - \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}{4\sigma_r^4} \right] \rho_{ij} \\
& + \sum_{i=1}^A \left(A_{\text{sym}} \frac{\langle \rho \rangle_i}{\rho_0} + B_{\text{sym}} \frac{\langle \rho \rangle_i^\eta}{\rho_0^\eta} + C_{\text{sym}} \frac{\langle \rho \rangle_i^{5/3}}{\rho_0^{5/3}} \right) \delta^2. \quad (9)
\end{aligned}$$

这里 i 和 j 表示第 i 个核子与第 j 个核子, $\rho_{ij} = \frac{1}{(4\pi\sigma_r^2)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}{4\sigma_r^2} \right]$ 为两体相互作用密度, $\langle \rho \rangle_i = \sum_{j,j \neq i}^A \rho_{ij}$. $\delta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p}$ 为同位旋不对称度. Z_i 表示核子的电荷数, 对于质子(中子) $t_i = 1(-1)$. 其中 $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$, $\alpha = -393 \text{ MeV}$, $\beta = 320 \text{ MeV}$, $\eta = 1.14$, $C_{\text{Coul}} = 1.44 \text{ MeV fm}$, $t_{\text{md}} = 1.57 \text{ MeV}$, $a_{\text{md}} = 0.0005 \text{ c}^2/\text{MeV}^2$, $g_{\text{sur}} = 18.2 \text{ MeV fm}^2$, $g_{\text{sur,iso}} = 8.9 \text{ MeV fm}^2$, $A_{\text{sym}} = 20.3 \text{ MeV}$, $B_{\text{sym}} = 14.4 \text{ MeV}$, $C_{\text{sym}} = -9.2 \text{ MeV}$. 由以上参数给出的核物质状态方程的不可压缩系数 $K_0 = 200 \text{ MeV}$, 对称能斜率参数 $L_{\text{sym}} = 81 \text{ MeV}$, 对称能曲率参数 $K_{\text{sym}} = -79.1 \text{ MeV}$. 这些值都在目前约束的合理范围之内 [2,3,65].

此外, 对于核子-核子碰撞部分, 模型中引入了密度、动量以及同位旋依赖的介质修正以及泡利阻塞效应 [2,3,63,65]. 最后, 模型通过同位旋依赖的最小生成树(iso-MST)方法判别末态碎片 ($A > 1$). 当两个质子(两个中子, 质子-中子)之间的相空间距离 $\Delta R_{ij} < 2.8(3.8) \text{ fm}$, $\Delta p_{ij} < 0.28 \text{ GeV/c}$, 这两个核子就被看作在同一个碎片中.

集体流表征反应末态粒子的集体运动情况, 其结果受反应过程中的热密区与旁观者的空间几何形状的共同影响, 而弹靶核的基态形变效应会影响反应过程中的重叠形状. 因此, 我们有必要研究弹靶核初始化形变效应在集体流上的影响. 这里, 我们主要讨论直接流与椭圆流. 对末态粒子方位角分布做傅里叶展开得到的前两项系数分别为直接流(v_1)、椭圆流(v_2):

$$v_1 \equiv \langle \cos(\phi) \rangle = \left\langle \frac{p_x}{p_t} \right\rangle, \quad (10)$$

$$v_2 \equiv \langle \cos(2\phi) \rangle = \left\langle \frac{p_x^2 - p_y^2}{p_t^2} \right\rangle, \quad (11)$$

其中, $p_t = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ 为粒子的横动量. 文献[32,34]重点研究了固定取向弹靶核碰撞(尖对尖、腰对腰)对末态集体流的影响, 初态弹靶核为球形核与变形核造成的末态集体流的差异较大. 然而, 实验上每次碰撞过程中弹靶核的取向是随机的, 本文的结果均为模拟弹靶核随机取向碰撞的结果.

近年来, 我们通过对UrQMD模型初始化、平均场、两体碰撞、末态碎片构建等部分的更新, 该版本对中能区重离子碰撞的实验有较强的再现能力, 参见文献[2,63–67]等. 图1展示了UrQMD模拟的弹靶核为形变核与球形核的末态质子的直接流与椭圆流随快度的变化. 其中, 约化快度 $y_0 = y_z/y_{\text{pro}}$, 快度 $y_z = \frac{1}{2} \ln \frac{E+p_z}{E-p_z}$, y_{pro} 为质心系下初始弹核的快度. $b_0 = b/b_{\text{max}}$, 这里 b_{max} 为弹核和靶核的半径之和. u_0 为横向速度, 与横动量 p_t 有相似的意义, 在入射能量为每核子 0.4 GeV 时, 对于核子则有 $u_0 = p_t/0.431$. 可以看出, 对于质子的直接流与椭圆流, UrQMD模型的结果在大快度范围内都能与实验符合得很好. 但形变核与球形核给出的随机取向的平均结果并无较大差异, 因此很难单从末态质子的集体流评判弹靶核的初始化形变.

基态原子核的四极形变受诸多因素影响, 不同核的形变程度具有一定差异, 为了避免其他因素的影响, 在模型中考虑具有不同 β_2 的 ^{238}U 进行碰撞. 本工作模拟了每核子 $0.4, 1.0$ 以及 1.5 GeV 的三个入射能量下的 $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ 中心碰撞 ($b_0 < 0.15$), 每个能量下选取 5 个 β_2 , 主要研究中能重离子碰撞中初始化四极形变对末态观测量的影响, 并试图从不同形变参数给出的反应末态粒子分布 p_t - y_0 谱来反推弹靶核初始形变. 对于末态碎片, 我们采用每核子横动量 (p_t/A) 作为特征量. 不同的快度区间对应着重离子碰撞中不同的反应区域, 中心快度区间 ($|y_0| < 0.2$) 的粒子多产生于高密度区域, 这里的核子经历较多的核子-核子散射过程, z 方向动量更容易被抵消. 而来自旁观者的核子经历的核子-核子散射较少, 核子倾向于以初始的动量运动, 末态快度多处在弹靶核快度区域 ($0.8 < |y_0| < 1.2$).

本文利用机器学习中的LightGBM决策树算法训练初始化过程中有无形变效应所给出的反应末态的自

由质子、带电碎片以及 π^+ , π^- 介子的 p_t - y_0 谱, 使决策树算法具备识别原子核形变的能力. 图2中的散点图是入射能量为1.0 GeV/nucleon的 $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$ 中心碰撞的单事件自由质子的 p_t - y_0 分布. 将这样一个二维散点图分布划分为 15×15 个格子, 统计单事件下落入每个格子中的自由质子数, 就得到了一张 15×15 “像素”的图片. 带电碎片与 π 介子也做相同处理, 这样就得到了一个三通道的二维矩阵, 将三通道的二维矩阵拉伸成一维向量(包含675个元素)并将其输入到LightGBM决策树模

型中. 我们之前的工作评估了划分的格子数目对预测结果的影响, 过少的格子数会丢失粒子分布细节的信息, 过多的格子数会导致涨落信号的增强淹没形变效应带来的差异, 并大幅度降低模型的训练速度^[47].

图3展示了三个随机事件的末态质子数的快度分布. 计算时采用了5个不同的形变参数. 对于单次重离子碰撞, 初始化时弹靶核中每个核子的坐标和动量、形变核的取向、碰撞参数的设定以及输运过程的核-核碰撞等都具有随机性. 这些随机性的叠加所带来

图 1 (网络版彩图)入射能量为每核子0.4 GeV的 $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$ 碰撞末态质子直接流 v_1 (a)与椭圆流 v_2 (b)随快度 y_0 的变化. 实线与虚线分别为模拟球形($\beta_2 = 0$)弹靶核与扁椭球形($\beta_2 = -0.12$)弹靶核碰撞的结果. 散点为FOPI 组的实验数据^[68]

Figure 1 (Color online) The direct flow v_1 (a) and the elliptic flow v_2 (b) of protons from $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$ collisions at $E_{\text{lab}} = 0.4$ GeV/nucleon as a function of y_0 . The solid line and the dashed line are the results of collision with the spherical nuclei ($\beta_2 = 0$) and the oblate ellipsoid nuclei ($\beta_2 = -0.12$), respectively. The corresponding experimental data from FOPI^[68] are given by the open symbols.

图 2 (网络版彩图)入射能量为每核子1.0 GeV的 $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$ 中心碰撞的一个随机事件给出的自由质子的 p_t - y_0 分布(a), 散点分布对应的每个格子区间内的质子数(b)

Figure 2 (Color online) The p_t - y_0 scatter plot for free protons produced in one central $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$ collision event at $E_{\text{lab}} = 1.0$ GeV/nucleon (a), number of free protons in each bin (b).

图 3 (网络版彩图) $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ 反应体系在入射能量为每核子 1.0 GeV 的中心碰撞给出的三个随机事件的自由质子的快度分布. (a)–(c) 为 $0 < p_t < 0.2 \text{ GeV/c}$ 区间下的结果; (d)–(f) 为 $0.2 < p_t < 0.4 \text{ GeV/c}$ 区间下的结果

Figure 3 (Color online) Proton rapidity distribution obtained from three random $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ central collision events at $E_{\text{lab}} = 1.0 \text{ GeV/nucleon}$. (a)–(c) Results obtained with $0 < p_t < 0.2 \text{ GeV/c}$, (d)–(f) the results obtained with $0.2 < p_t < 0.4 \text{ GeV/c}$.

的末态观测量的涨落, 很大程度上掩盖了弹靶核形变的信号. 因此, 很难仅通过单事件质子分布谱上找出形变效应的规律. 甚至, 这些质子分布还存在着较强的简并性(不同的形变参数设置下给出极为相近的质子分布).

对观测量的多事件平均能够一定程度消除随机涨落带来的影响. 然而, 由于弹靶核的初始化取向是随机的, 很多情况下, 形变核给出的观测量经多事件平均后与球形核给出的观测量大致相同. 不同之处在于极端中心碰撞下的形变核重叠区域的体积要略小于球形核, 这些微小的差异会在一些诸如平均横动量、核阻止本领等观测量上产生影响. 在理论模拟时碰撞参数可以设置为 0 fm, 而实验上, 通常只能给出某个碰撞中心度范围下的结果. 考虑到这一因素, 在本次研究中选取了碰撞参数为某一范围的碰撞事件进行研究. 图 4 展示了弹靶核为两个球形核($\beta_2 = 0$)与两个较大四极形变核($\beta_2 = 0.4$)的 U + U 反应给出的带电碎片 p_t - y_0 谱分布. 每个子图中显示的是平均 100 个事件的结果. 多事件平均一定程度上降低了每个格子中的粒子数涨落. 然而, 即使选择大跨度的初始化形变差异进行比较, 并

通过多事件平均将其影响放大, 还是很难发现明显的规律.

图 4 (网络版彩图) $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ 反应体系在入射能量为每核子 1.0 GeV 的中心碰撞($b_0 < 0.15$)给出的 100 事件平均的带电碎片的 p_t - y_0 分布, (a)–(c) 以及 (d)–(f) 分别为 $\beta_2 = 0.0$ 和 $\beta_2 = 0.4$ 下的结果

Figure 4 (Color online) The p_t - y_0 distribution (which obtained by combining 100 collision events) of charged fragments at $E_{\text{lab}} = 1.0 \text{ GeV/nucleon}$ central ($b_0 < 0.15$) collisions. Upper panel ((a)–(c)) and lower panel ((d)–(f)) are the results of $\beta_2 = 0$ and $\beta_2 = 0.4$, respectively.

3 LightGBM决策树算法

本工作基于机器学习算法中LightGBM决策树模型. GBDT(梯度提升决策树)是机器学习中十分流行的决策树算法, 2016年微软公司在这一算法的基础上做了部分优化, 推出了LightGBM决策树算法. 随着不断的优化和调整, LightGBM算法目前具有以下优点: (1) 更高的预测精度, (2) 更快的训练速度, (3) 更小的内存占用, (4) 支持并行训练和GPU学习, (5) 能够处理大规模数据. 此外, 决策树的特征使得模型具有很强的可解释性, 比如对特征量重要性分析的过程中, 可以从中得到某些重要的信息, 对发展理论模型和方法能起到一定的借鉴作用.

在此项工作中, 模型允许生成最多50000棵决策树以防止训练过拟合. 其他不同的参数设置(如叶子节点数、正则化参数等)对结果的影响不大, 因此采用LightGBM算法的默认值. 训练过程中, 模型通过递归的方式根据特征量(p_t - y_0 格子中的粒子数)与模型残差(模型当前生成的决策树给出的预测值与真实值的偏差)之间的关系生成新的决策树, 直到模型在验证集上给出的损失函数达到收敛则停止训练. 训练结束后, 模型对生成的每棵决策树在单个样本上给出的叶子节点值求和就是模型给出的预测结果.

4 结果及分析

4.1 二分类准确率

此项工作分别选取了200000个(p_t - y_0 , β_2)单事件和100000个100事件平均的样本作为两类数据集. 在每一类数据集中随机选取80%的样本用于训练, 20%的样本用于测试, 其预测结果展示在图5中. 尽管在图3和4中很难看出不同 β_2 下模拟的重离子碰撞的末态粒子的 p_t - y_0 谱分布的差异, 然而从分类的准确率上可以发现, 不同能量下的分类准确率均随着 β_2 的增加而增加, 这反映了机器学习算法能够从末态粒子谱分布中识别弹靶核初始化四极形变的信息.

对于单事件来说, 弹靶核有无初始化形变的二分类的准确率在60%–70%之间. 考虑到前文所提及的初始化及动力学演化过程的随机性带来了较强的涨落信号, 形变信号很大程度上被其掩盖, 这个结果是合理的. 对于不同入射能量, 模型的分辨能力不同. 大入

射能量下, 平均场对体系的影响相对较弱, 核子-核子散射占主要地位, 并且弹靶核的反应时间较为短暂, 相比于低能碰撞在大入射能量下末态粒子更容易保留初态形变信息, 因此具有相对较高的准确率. 此外, UrQMD在初始化的过程中会在 z 方向将弹靶核向两侧平移, 例如入射能量为每核子0.4 GeV时, 弹靶核质心各向两侧平移8.7 fm, 需经过大约3 fm/c后两原子核开始接触, 这个预碰撞过程中, 由于核子的初始费米动量以及平均场的作用, 弹靶核的形变会被一定程度地改变, 导致真正碰撞时弹靶核形变程度不同于预设的形变程度. 同样地, 这个效应会在大入射能量下减弱. 经测试, 如果消除预碰撞过程的动力学演化, 即将弹靶核表面的距离设置为0, 图5中单事件分类的准确率将进一步提升7%–12%. 这也反映了弹靶核初始化形变对反应末态的观测量有一定的影响.

对于事件平均的结果, 粒子末态分布的涨落信息被大幅度抵销, 模型分类的准确率可以达到80%以上. 然而, 不同入射能量下分类准确率的高低与单事件有所区别. 小入射能量下会保留更多的带电碎片信息, 而从下文的特征重要性解释中我们可以发现, 相比于质子和带电 π 介子, 带电碎片的分布信息能够更直接、更准确地引导机器学习模型辨别弹靶核初始化形变的有无. 在涨落信号和带电碎片信息对分类准确率竞争作用的状态下, 多事件平均减少了涨落信号对准确率的负贡献, 入射能量为每核子0.4 GeV的弹靶核碰撞由于携带了更多带电碎片的信息, 其分类的准确率就略高于大能量下的准确率.

4.2 重要特征分析

机器学习的可解释性一直是人们所关心的话题, 而这正是决策树算法的优势所在. 对于图像分类问题, 我们希望能够从图像中找到最敏感、最直接、对预测最有帮助的区域. LightGBM可以通过计算每个格子对预测值的总增益来分析图像中的重要区域. 图6展示了模型给出的重要区域分布. 可以明显看出, 对于多事件平均的分类问题, 弹靶快度区域的带电碎片数表现出了较强的重要性. 对于中心碰撞, 如果弹靶核为球形核, 那么绝大部分核子均处在弹靶重叠区域. 如果弹靶核为形变核, 由于其空间取向的随机性, 一定会存在一些长轴两端的核子未进入到重叠区域直接参与反应的情况. 这些核子经历了较少的核子-核子散射, 动力学

图 5 (网络版彩图)二分类的准确度与形变参数的关系. (a) 采用单事件给出的粒子谱分布作为输入得到的结果; (b)与(a)相同, 但训练与测试的特征量输入是多事件平均的粒子谱

Figure 5 (Color online) The accuracy of two-class classification task is plotted as a function of β_2 . (a) The accuracy by using classifier trained with event-by-event particle spectra; (b) similar as (a) but with events-averaged spectra as input for training and testing.

图 6 (网络版彩图) LightGBM中的重要特征分析给出的自由质子((a)和(d))、带电碎片((b)和(e))以及带电 π 介子((c)和(f))的粒子谱中的重要区域分布. 上图是入射能量为每核子0.4 GeV的结果, 下图是入射能量为每核子1.5 GeV的结果

Figure 6 (Color online) Important map of p_t - y_0 distribution of free protons ((a) and (d)), charged fragments ((b) and (e)) and charged pions ((c) and (f)) obtained with feature importance technology of LightGBM algorithm. Upper panels and lower panels are the results of $E_{\text{lab}} = 0.4$ GeV/nucleon and $E_{\text{lab}} = 1.5$ GeV/nucleon, respectively.

演化的随机涨落影响较小, 更容易保留初始化信息. 同时, 这些核子多以碎片的形式出射并倾向于保持初始的快度(弹靶核快度). 这就解释了弹靶快度区域的带电碎片数的重要性较强而自由质子数的重要性不明显的原因. 此外, 中心快度的核子经历了较多的核子-核子散射, 初始化信息会被涨落信号大幅度掩盖, 因此, 中心快度区域的粒子对初始化形变的敏感度不高.

π 介子作为核子非弹性碰撞的产物, 多产生于中心快度区域. 同时, 其产生和被核子吸收形成 Δ 共振态

的多次循环过程也极大得减弱了入射道的信息[65], 因此 π 介子在预测过程中没有体现出较强的重要性. LightGBM在遍历样本数据的过程中很好地捕捉到了这些内在联系, 进而在训练以及预测的过程中对敏感的区域给予了更高的权重.

为了定性分析初始化形变对反应末态分布的不同快度区域的粒子数的影响. 我们计算了不同快度区间的有无初始化形变下的粒子产额比. 如图7所示, 中心快度与弹靶核快度区间有无形变对应末态自由质子数近似相等. 然而, 随着形变参数的增加, 弹靶核快度区

图 7 (网络版彩图)初态有无形变所给出的产额比随形变参数的变化, 空心点为入射能量在每核子0.4 GeV下的结果, 实心点为每核子1.5 GeV的结果

Figure 7 (Color online) The ratio of yield obtained with and without deformation in the initialization is plotted as a function of β_2 . The empty dots and solid dots are results of $E_{\text{lab}} = 0.4$ GeV/nucleon and $E_{\text{lab}} = 1.5$ GeV/nucleon, respectively.

间的带电碎片数表现出较为明显的差异,这与LightGBM给出的重要性特征结果相吻合.机器学习能够通过重要性特征分析的方法给出观测量中敏感于初态形变参数的窗口,这可以为相关的理论及实验研究提供一定的帮助.

5 结论与展望

本文基于UrQMD模型模拟三个入射能量下的不同初始化四极形变的U+U碰撞,得到末态自由质子、带电碎片、带电 π 介子的 p_T - y_0 谱分布.利用机器学习中的LightGBM决策树算法学习初始化四极形变参数 β_2 与粒子谱分布之间的内在联系,进而利用模拟的粒子分布反推初始化四极形变的有无.结果表明,单事件下的粒子分布受到涨落信号带来的较大影响,其二分类的准确率在60%–70%之间.较高入射能量下平均

场作用较弱,核子相对容易保留初态分布信息因而具有较高的准确率.利用多事件平均的谱分布作为机器学习模型的输入量,可以大幅提高分类的准确性,因为涨落被削弱.利用LightGBM中的重要特征分析的方法发现弹靶快度区间的带电碎片数敏感于弹靶核的初始形变,这与UrQMD模拟的粒子产额比的理论分析相一致.

弹靶核的初态结构对重离子碰撞末态的可观测量具有一定的影响.机器学习方法具备对大量的、复杂的、高维度的、深度关联的数据的处理和分析能力,可以通过分析碰撞末态数据反推初态结构.本文通过机器学习辨别弹靶核四极形变的有无,接下来还可以继续利用重离子碰撞以及机器学习方法研究高阶形变、中子皮、结团现象等基态核结构性质,并发展深层可解释的机器学习方法,进而为理论和实验研究提供新技术和新思路.

参考文献

- 1 Li B A, Chen L W, Ko C M. Recent progress and new challenges in isospin physics with heavy-ion reactions. *Phys Rep*, 2008, 464: 113–281
- 2 Wang Y J, Li Q F. Application of microscopic transport model in the study of nuclear equation of state from heavy ion collisions at intermediate energies. *Front Phys*, 2020, 15: 44302
- 3 Zhang Y X, Wang N, Li Q F, et al. Progress of quantum molecular dynamics model and its applications in heavy ion collisions. *Front Phys*, 2020, 15: 54301
- 4 Feng Z Q. Nuclear dynamics and particle production near threshold energies in heavy-ion collisions. *Nucl Sci Tech*, 2018, 29: 40
- 5 Ono A. Dynamics of clusters and fragments in heavy-ion collisions. *Prog Particle Nucl Phys*, 2019, 105: 139–179
- 6 Xu J. Transport approaches for the description of intermediate-energy heavy-ion collisions. *Prog Particle Nucl Phys*, 2019, 106: 312–359
- 7 Colonna M. Collision dynamics at medium and relativistic energies. *Prog Particle Nucl Phys*, 2020, 113: 103775
- 8 Ma Y G, Xu N, Liu F. Study of the QCD phase structure at HIAF (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2020, 50: 112009 [马余刚, 许怒, 刘峰. 基于HIAF集群的QCD相结构研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 112009]
- 9 Zhao H W, Xu H S, Xiao G Q, et al. Huizhou accelerator complex facility and its future development (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2020, 50: 112006 [赵红卫, 徐珊珊, 肖国青, 等. 惠州加速器集群装置及其未来发展. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 112006]
- 10 Wang S T, Hu Q, Sun Y Z, et al. Progress of study on the properties of nuclear matter with high baryon density at CSR energy region (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2019, 49: 102006 [王世陶, 胡强, 孙亚洲, 等. CSR能区的高重子密度核物质研究进展. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 102006]
- 11 Xu J, Liu H, Che M K. Elliptic flow splittings between particles and their antiparticles in relativistic heavy-ion collisions (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2020, 65: 790–799 [徐骏, 刘鹤, Che Ming Ko. 相对论重离子碰撞中正反粒子椭圆流的劈裂. 科学通报, 2020, 65: 790–799]
- 12 Xiao Z G. Heavy ion reactions and equation of state of nuclear matter (in Chinese). *Physics*, 2020, 49: 137–143 [肖志刚. 重离子核反应与核物质状态方程. 物理, 2020, 49: 137–143]
- 13 Xiao Z G. Transport of isospin degree of freedom in heavy ion reactions and the constraint of symmetry energy (in Chinese). *Nucl Phys Rev*, 2020, 37: 249–259 [肖志刚. 重离子碰撞中同位旋自由度输运和对称能约束. 原子核物理评论, 2020, 37: 249–259]
- 14 Li Q F, Li Z X. The density- and isospin-dependent Δ -formation cross section and its decay width. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2019, 62: 972011

- 15 Xu J. Semiclassical descriptions for quantum transport of heavy ion collisions (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2019, 49: 072001 [徐骏. 重离子碰撞量子输运的半经典描述. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 072001]
- 16 Feng Z Q. Strange particle production and hypernucleus formation in medium and high energy heavy-ion collisions (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2018, 63: 735–744 [冯兆庆. 中高能重离子碰撞中奇异粒子产生和超核形成机制. 科学通报, 2018, 63: 735–744]
- 17 Liu Z H, Bao J D. Effects of target deformation on synthesis of superheavy nuclei (in Chinese). *Nucl Phys Rev*, 2004, 21: 370–373 [刘祖华, 包景东. 超重核合成中的靶核形变效应. 原子核物理评论, 2004, 21: 370–373]
- 18 Wang X, Niu Q, Zhang J, et al. Nucleon momentum distribution of ^{56}Fe from the axially deformed relativistic mean-field model with nucleon-nucleon correlations. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2021, 64: 292011
- 19 Li Q, Zuo W, Li W, et al. Deformation and orientation effects in the driving potential of the dinuclear model. *Eur Phys J A*, 2005, 24: 223–229
- 20 Xu H J, Wang X, Li H, et al. Importance of isobar density distributions on the chiral magnetic effect search. *Phys Rev Lett*, 2018, 121: 022301
- 21 Li H, Xu H, Zhao J, et al. Multiphase transport model predictions of isobaric collisions with nuclear structure from density functional theory. *Phys Rev C*, 2018, 98: 054907
- 22 Zhang S, Ma Y G, Chen J H, et al. Nuclear cluster structure effect on elliptic and triangular flows in heavy-ion collisions. *Phys Rev C*, 2017, 95: 064904
- 23 Filip P, Lednicky R, Masui H, et al. Initial eccentricity in deformed $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$ and $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}}=200$ GeV at the BNL relativistic heavy ion collider. *Phys Rev C*, 2009, 80: 054903
- 24 Shou Q Y, Ma Y G, Sorensen P, et al. Parameterization of deformed nuclei for Glauber modeling in relativistic heavy ion collisions. *Phys Lett B*, 2015, 749: 215–220
- 25 Wei G F. Elimination of the influence of neutron-skin size difference of the initial colliding nuclei in Pb+Pb collisions. *Phys Rev C*, 2015, 91: 014616
- 26 Wei G F, Li B A, Xu J, et al. Influence of neutron-skin thickness on the $\pi^-\pi^+$ ratio in Pb + Pb collisions. *Phys Rev C*, 2014, 90: 014610
- 27 Sun X Y, Fang D Q, Ma Y G. Nuclear equation of state dependence of the probe of neutron skin thickness. *Nucl Phys Rev*, 2016, 33: 8–12
- 28 Li H, Xu H J, Zhou Y, et al. Probing the neutron skin with ultrarelativistic isobaric collisions. *Phys Rev Lett*, 2020, 125: 222301
- 29 Sun X Y, Fang D Q, Ma Y G, et al. Nuclear equation of state dependence of the probe of neutron skin thickness (in Chinese). *Nucl Phys Rev*, 2016, 33: 8–12 [孙小艳, 方德清, 马余刚, 等. 中子皮厚度测量探针对核物质状态方程的依赖性. 原子核物理评论, 2016, 33: 8–12]
- 30 Sun X Y, Fang D Q, Ma Y G, et al. Neutron/proton ratio of nucleon emissions as a probe of neutron skin. *Phys Lett B*, 2010, 682: 396–400
- 31 Xu J, Martinot Z, Li B A. Disentangling effects of collision geometry and symmetry energy in U + U collisions. *Phys Rev C*, 2012, 86: 044623
- 32 Li B A. Uranium on uranium collisions at relativistic energies. *Phys Rev C*, 2000, 61: 021903
- 33 Luo X F, Dong X, Shao M, et al. Stopping effects in U+U collisions with a beam energy of 520 MeV/nucleon. *Phys Rev C*, 2007, 76: 044902
- 34 Yang J Y, Liu L, Li P C, et al. Effects of nuclear deformation in U+U collisions at the intermediate energy (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2021, 51: 112011 [杨佳烨, 刘玲, 李鹏程, 等. 弹靶核的形变效应对中能区U+U碰撞的影响. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2021, 51: 112011]
- 35 Giacalone G, Jia J, V Somà. Accessing the shape of atomic nuclei with relativistic collisions of isobars. arXiv: 2102.08158
- 36 Zhou M, Jia J. Centrality fluctuations in heavy-ion collisions. *Phys Rev C*, 2018, 98: 044903
- 37 Jia J. Probing triaxial deformation of atomic nuclei in high-energy heavy ion collisions. arXiv: 2109.00604
- 38 Utama R, Piekarewicz J, Prosper H B. Nuclear mass predictions for the crustal composition of neutron stars: A Bayesian neural network approach. *Phys Rev C*, 2016, 93: 014311
- 39 Niu Z M, Liang H Z. Nuclear mass predictions based on Bayesian neural network approach with pairing and shell effects. *Phys Lett B*, 2018, 778: 48–53
- 40 Zhang H F, Wang L H, Yin J P, et al. Performance of the Levenberg-Marquardt neural network approach in nuclear mass prediction. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2017, 44: 045110
- 41 Gao Z P, Wang Y J, Lü H L, et al. Machine learning the nuclear mass. *Nucl Sci Tech*, 2021, 32: 109
- 42 Wang Z A, Pei J, Liu Y, et al. Bayesian evaluation of incomplete fission yields. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 122501
- 43 Ma C W, Peng D, Wei H L, et al. A Bayesian-neural-network prediction for fragment production in proton induced spallation reaction. *Chin Phys C*, 2020, 44: 124107
- 44 Ma C W, Peng D, Wei H L, et al. Isotopic cross-sections in proton induced spallation reactions based on the Bayesian neural network method.

- [Chin Phys C](#), 2020, 44: 014104
- 45 Wang Y, Li F, Li Q, et al. Finding signatures of the nuclear symmetry energy in heavy-ion collisions with deep learning. [Phys Lett B](#), 2021, 822: 136669
- 46 Li F, Wang Y, Gao Z, et al. Application of machine learning in the determination of impact parameter in the $^{132}\text{Sn}+^{124}\text{Sn}$ system. [Phys Rev C](#), 2021, 104: 034608
- 47 Li F, Wang Y, Lü H, et al. Application of artificial intelligence in the determination of impact parameter in heavy-ion collisions at intermediate energies. [J Phys G-Nucl Part Phys](#), 2020, 47: 115104
- 48 Utama R, Chen W C, Piekarewicz J. Nuclear charge radii: Density functional theory meets Bayesian neural networks. [J Phys G-Nucl Part Phys](#), 2016, 43: 114002
- 49 Yuan Z, Bai D, Ren Z, et al. Theoretical predictions on α -decay properties of some unknown neutron-deficient actinide nuclei using machine learning. [Chin Phys C](#), 2022, 46: 024101
- 50 Niu Z M, Liang H Z, Sun B H, et al. Predictions of nuclear β -decay half-lives with machine learning and their impact on r -process nucleosynthesis. [Phys Rev C](#), 2019, 99: 064307
- 51 Pang L G, Zhou K, Su N, et al. An equation-of-state-meter of quantum chromodynamics transition from deep learning. [Nat Commun](#), 2018, 9: 210
- 52 Du Y L, Zhou K, Steinheimer J, et al. Identifying the nature of the QCD transition in relativistic collision of heavy nuclei with deep learning. [Eur Phys J C](#), 2020, 80: 516
- 53 Steinheimer J, Pang L G, Zhou K, et al. A machine learning study to identify spinodal clumping in high energy nuclear collisions. [J High Energy Phys](#), 2019, 2019(12): 122
- 54 Song Y D, Wang R, Ma Y G, et al. Determining the temperature in heavy-ion collisions with multiplicity distribution. [Phys Lett B](#), 2021, 814: 136084
- 55 Wang R, Ma Y G, Wada R, et al. Nuclear liquid-gas phase transition with machine learning. [Phys Rev Res](#), 2020, 2: 043202
- 56 Pang L G, Zhou K, Wang X N, Interpretable deep learning for nuclear deformation in heavy ion collisions. arXiv: [1906.06429](#)
- 57 Bass S. Microscopic models for ultrarelativistic heavy ion collisions. [Prog Particle Nucl Phys](#), 1998, 41: 255–369
- 58 Li Q, Shen C, Guo C, et al. Nonequilibrium dynamics in heavy-ion collisions at low energies available at the GSI schwerionen synchrotron. [Phys Rev C](#), 2011, 83: 044617
- 59 Du Y S, Wang Y J, Li Q F, et al. The effect of Lorentz-like force on collective flows of K^+ in Au+Au collisions at 1.5 GeV/nucleon. [Sci China-Phys Mech Astron](#), 2018, 61: 062011
- 60 Liu Y, Wang Y, Li Q, et al. Collective flows of pions in Au+Au collisions at energies 1.0 and 1.5 GeV/nucleon. [Phys Rev C](#), 2018, 97: 034602
- 61 Ye Y, Wang Y, Li Q, et al. Beam energy dependence of cumulants of the net-baryon, net-charge, and deuteron multiplicity distributions in Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}=3.0\text{--}5.0$ GeV. [Phys Rev C](#), 2020, 101: 034915
- 62 Aichelin J. “Quantum” molecular dynamics—A dynamical microscopic n -body approach to investigate fragment formation and the nuclear equation of state in heavy ion collisions. [Phys Rep](#), 1991, 202: 233–360
- 63 Wang Y, Guo C, Li Q, et al. Collective flow of light particles in Au + Au collisions at intermediate energies. [Phys Rev C](#), 2014, 89: 034606
- 64 Wang Y, Guo C, Li Q, et al. Constraining the high-density nuclear symmetry energy with the transverse-momentum-dependent elliptic flow. [Phys Rev C](#), 2014, 89: 044603
- 65 Liu Y, Wang Y, Cui Y, et al. Insights into the pion production mechanism and the symmetry energy at high density. [Phys Rev C](#), 2021, 103: 014616
- 66 Li P, Wang Y, Li Q, et al. Effects of the in-medium nucleon-nucleon cross section on collective flow and nuclear stopping in heavy-ion collisions in the Fermi-energy domain. [Phys Rev C](#), 2018, 97: 044620
- 67 Wang Y, Guo C, Li Q, et al. Determination of the nuclear incompressibility from the rapidity-dependent elliptic flow in heavy-ion collisions at beam energies 0.4A–1.0A GeV. [Phys Lett B](#), 2018, 778: 207–212
- 68 Reisdorf W, Leifels Y, Andronic A, et al. Systematics of azimuthal asymmetries in heavy ion collisions in the regime. [Nucl Phys A](#), 2012, 876: 1–60

Application of machine learning to study the effects of quadrupole deformation on the nucleus in heavy-ion collisions at intermediate energies

GAO ZePeng^{1,2}, WANG YongJia^{1*}, LI QingFeng^{1,2,3*} & LIU Ling²

¹*School of Science, Huzhou University, Huzhou 313000, China;*

²*College of Physics Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China;*

³*Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China*

The influence of quadrupole deformation on the projectile and target nucleus in $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ collisions at beam energies of 0.4, 1.0, and 1.5 GeV/nucleon is investigated using the ultra relativistic quantum molecular dynamics (UrQMD) model. The effect of quadrupole deformation is investigated using the LightGBM decision tree algorithm. LightGBM's ability to identify nuclear deformation from particle spectra is demonstrated on an event-by-event basis by learning the two-dimensional (transverse momentum and rapidity) distributions of free protons, charged fragments (mass number $A > 1$), and charged π mesons produced in $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ collisions with and without deformed initializations. Using the important characteristic analysis of LightGBM, the yield of charged fragments around target/projectile rapidities is found to be sensitive to the quadrupole deformation of both the projectile and the target. It can be used as a promising observable to probe quadrupole deformation with heavy-ion collision.

heavy-ion collision, nuclear deformation, machine learning

PACS: 25.70.-z, 21.10.-k, 07.05.Mh

doi: [10.1360/SSPMA-2021-0308](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0308)