质子诱发核散裂反应中产物截面的贝叶斯神经网络预测方法

彭丹, 魏慧玲*, 普洁, 程凯旋, 王玉廷, 魏啸宝, 陈茜茜, 马春旺*

河南师范大学物理学院, 粒子物理与原子核物理研究所, 新乡 453007

*联系人, 魏慧玲, E-mail: htuwuhling@126.com; 马春旺, E-mail: machunwang@126.com

收稿日期: 2021-11-01; 接受日期: 2021-12-17; 网络出版日期: 2022-04-19

国家自然科学基金(编号: 11975091)和河南省高校科技创新团队(编号: 21HRTSTHN011)资助项目

摘要 核的散裂反应是由几十MeV以上能量的轻粒子诱发的一类剧烈核反应, 可以产生种类繁多的放射性核素. 散裂反应中的余核产生截面数据是核物理和核技术应用领域的关键基础数据, 但由于反应涉及的体系从小到大, 反应能量跨越3-4个数量级, 以及产生余核的电荷和质量数范围很宽, 整体上现有的多种理论模型对余核产生截面的预测精度有待进一步提高. 本文以机器学习方法中的贝叶斯神经网络方法为例, 建立对质子诱发核散裂反应中余核产生截面的贝叶斯直接学习方法和物理模型引导的间接学习方法, 提高对质子诱发核散裂反应中余核产生截面的预测范围和预测精度.

关键词 机器学习, 贝叶斯神经网络, 散裂反应, 余核反应截面

PACS: 25.70.Pq, 25.70.Mn, 21.65.Cd

1 引言

原子核散裂反应通常指中高能轻粒子(比如质子、中子、 α 粒子等)与原子核碰撞诱发的一种剧烈核反应. 散裂反应的入射粒子能量范围从每核子几十兆电子伏特(MeV)到吉电子伏特(GeV)以上. 开展核散裂反应研究的原因和动力来自核物理、核技术应用、宇宙与元素演化等许多方面. 比如, 太空中的宇宙射线(包括银河宇宙射线(Galactic Cosmic Ray)和太阳宇宙射线(Solar Cosmic Ray), 主要成分是质子)与航天器、星际物质发生反应, 从而导致宇宙元素浓度的变化^[1]. 同时核散裂反应的产物, 可以追溯行星、陨石等在宇宙

射线下的暴露历史^[2]和对电子设备及航天员实施辐射防护^[3]. 散裂反应通常用于中子源装置和放射性核束装置. 例如散裂中子源(如中国散裂中子源)能够提供安全、高通量的中子束流, 用于探测物质内部结构和运动(<http://english.ihep.cas.cn/csns/>). 通过散裂反应产生的中子也能用于加速器驱动的次临界系统(ADS)进行核废料嬗变和核能利用^[4,5]. 在放射性核束工厂, 尤其是同位素在线分离类型的工厂中(如北京奇异核素工厂等, http://www.ciae.ac.cn/subpage/pingtai_3.htm), 散裂反应是产生奇异核素和放射性束流的重要实验装置^[6,7]. 在极端条件下的核物质性质, 例如新幻数的出现、原子核集团效应、奇特原子核、天体中重元素的

引用格式: 彭丹, 魏慧玲, 普洁, 等. 质子诱发核散裂反应中产物截面的贝叶斯神经网络预测方法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 252012
Peng D, Wei H L, Pu J, et al. Bayesian neural network prediction methods for fragment cross sections in proton-induced spallation reactions (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252012, doi: [10.1360/SSPMA-2021-0298](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0298)

核合成过程、丰中子的单粒子特性等的研究中发挥着重要的作用. 在医疗上, 利用中高能质子与物质作用的布喇格峰特性, 可以开展肿瘤癌变治疗, 精准杀死癌细胞, 但对周围正常细胞和组织的损伤较小^[8,9], 从而形成技术优势.

由于散裂反应在核物理、核天体和核能利用中的重要作用, 世界各国主要的加速器和实验室开展了大量的中高能质子诱发核散裂反应的实验测量研究. 这些实验研究的数据可以大体上分为两类: 一类是对核散裂反应中产生的余核截面的测量, 主要是为了研究核反应机制和核反应产物的性质, 例如参考文献^[10-24]; 另一类实验主要为了满足核天体物理研究的需求, 重点围绕在不同能量下某个核反应中余核的激发曲线测量, 用以对宇宙成因核素的激发曲线性质进行系统的理解^[25]. 在散裂反应理论方面, 人们试图重现发射粒子的能量、角分布, 以及余核的质量、电荷和同位素分布等, 从而研究散裂反应的内部机制. 现已发展的理论模型有包括量子分子动力学模型(QMD)^[26]、统计多重碎裂模型(SMM)^[27-29]、级联模型(INC)^[30,31]等. 这些模型通常与退激发过程(主要为蒸发或裂变)的计算相结合. 还有一些模型通过对实验数据进行经验拟合, 从而形成半经验公式, 如EPAX的系列版本^[32-34]、SPACS公式^[35]等. 20世纪90年代中期OECD的核能机构(NEA)系统地比较了不同理论模型和方法对中高能区散裂反应产物的预测能力^[36-39]. 结果发现, 这些模型在适用范围和预测精度等方面都需要进一步提高, 以促进对关键应用问题的研究.

随着机器学习技术的发展与完善, 作为大数据研究的优秀工具, 机器学习方法在各个研究领域的研究中获得了广泛的应用. 在核物理基础问题研究中, 机器学习技术提供了新颖的研究方法, 在如量子多体问题^[40]、物质相变^[41-43]、重离子碰撞的温度^[44]和碰撞参数确定^[45]、核液气相变转移^[46]、核退激发^[47]、核质量^[48,49]、核半径^[50]、 β 衰变寿命^[51]、中子诱发反应^[52]、核裂变产额^[53,54]、散裂反应截面^[55,56]、核对称能^[57]等研究中取得重要成果. 近年来, 贝叶斯神经网络在非线形建模、预测中越来越普遍. 相较于传统网络难以控制模型复杂度, 贝叶斯方法通过定义一些超参数的模糊先验和分层模型来控制模型复杂度, 最终的模型是后验分布对整个模型的复杂度加权求平

均得到, 并能进行不确定度量化^[58,59]. 本文将基于贝叶斯神经网络方法学习和评估现有的质子散裂截面, 并比较贝叶斯直接学习方法和加入物理模型引导的间接学习方法的预测精度和模型泛化能力.

2 模型和方法

2.1 贝叶斯神经网络方法

贝叶斯方法的主要原理是基于现有的样本数据, 对模型中所有的未知量建立后验概率分布, 本文使用的网络模型为多层感知器, 该网络接受一组真实的输入 x_i , 通过几个隐藏层, 可以计算一个或多个输出 $f_k(x)$. 具有单个隐藏层的典型网络函数为

$$f_k(x; \theta) = a_k + \sum_{j=1}^H b_{jk} \tanh \left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ji} x_i \right). \quad (1)$$

式中, H 为隐藏单元数, I 为输入变量的个数. $d_{ji}(b_{jk})$ 是输入单元 i (隐藏单元 j)到隐藏单元 j (输出单元 k)的连接权重. $c_j(a_k)$ 是隐藏单元(输出单元)的偏置. 这些权重和偏置组成神经网络的参数 θ , 即 $\theta = \{a_k, b_{jk}, c_j, d_{ji}\}$. 网络的每个输出值 $f_k(x)$ 由隐藏单元值加上一个偏置加权求和得到; 每个隐藏单元值由输入值加权求和后作用于激活函数得到. 这里选用的激活函数为双曲正切函数(tanh).

当考虑只有一个真值目标的回归模型, 给定输入变量 x , 目标变量 t 的条件概率分布 $p(D|\theta)$ 通常定义为以 $f_k(x)$ (此时 $k = 1$, 简写为 $f(x)$)为均值, α 为标准差的高斯分布, 具体函数形式如下:

$$p(D|\theta) = \exp(-\chi^2/2), \quad \chi^2 = \sum_i^N [t_i - f(x_i; \theta)]^2 / \alpha_i^2, \quad (2)$$

式中, 训练数据 $D = (x_i, t_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N$), x_i 和 t_i 分别为网络的输入和输出变量. 在对质子散裂反应中余核截面的模拟中, 本文同时使用了贝叶斯直接学习方法和加入物理模型进行引导的间接学习方法. 两种学习方法均采用5个输入变量(即 $\{x_i\} = \{A_{pi}, Z_{pi}, E_i, Z_{fi}, A_{fi}\}$, 依次代表炮弹核的质量数和质子数、入射能量、余核的质子数和质量数)、单个隐藏层和1个输出变量. 贝叶斯直接学习方法直接学习实验测量的余核产生截面

数据, 网络模型的输出为 $t = \lg \sigma_{\text{exp}}$; 而间接学习方法则学习实验测量的截面与理论计算的截面之间的差值, 网络模型的输出为 $t = \lg \sigma_{\text{exp}} - \lg \sigma_{\text{th}}$, 其中 σ_{exp} 表示实验测量截面, σ_{th} 表示理论模型计算截面. 隐藏神经元的个数根据学习集来选择.

2.2 样本数据说明与分析

本文使用的样本数据共分为两类: 同位素截面和余核的激发曲线数据. 表 1 中列出了同位素截面的实验数据来源, 大约有 3000 个数据点, 命名为 D1. 余核激发曲线的数据来自 Michel 等人^[25]汇总的质子诱发的余核产生截面, 反应系统中靶核包括 ^{nat}C , ^{nat}N , ^{nat}O , ^{nat}F , ^{nat}Mg , ^{27}Al , ^{nat}Si , ^{nat}Ca , ^{nat}Ti , ^{nat}V , ^{55}Mn , ^{nat}Fe , ^{59}Co , ^{nat}Ni , ^{nat}Cu , ^{nat}Sr , ^{89}Y , ^{nat}Zr , ^{93}Nb , ^{nat}B 和 ^{197}Au 核素, 入射能量高达 2.6 GeV, 大约有 10000 多个数据点, 命名为 D2. 为了提高模型精度, 我们排除了入射能量小于 30 MeV/u 的反应系统, 测量误差大于 30% 的数据以及拾取反应产物的数据.

根据网络的输入变量分析样本数据 D1 和 D2 的数据分布特点可知: (1) D1 中包含的靶核和入射能量的信息相对较少; (2) D1 中的反应产物大多是中等质量和大质量碎片; (3) D2 中包含的余核的信息相对较少; (4) D2 中的余核都是宇宙成因核素. 根据这些数据特点, 我们首先比较单独使用 D1 或 D2 作为学习集时贝叶斯直接和间接学习方法的模型精度; 接着同时使用 D1 和 D2 作为学习集, 分析增加学习集的信息量对两种方法的模型精度的影响.

表 1 本文使用的质子诱发散裂反应中产物截面的实验数据

Table 1 A list of the adopted data for the measured fragments in the proton induced spallation reactions

反应系统	入射能量 (MeV)	元素范围 (Z)	参考文献
$^{56}\text{Fe} + \text{p}$	300; 500; 750; 1000; 1500	8–27	[10]
$^{36}\text{Ar} + \text{p}$	361; 546; 765	9–17	[18]
$^{40}\text{Ar} + \text{p}$	352	9–17	[18]
$^{40}\text{Ca} + \text{p}$	356; 565; 763	10–20	[19]
$^{136}\text{Xe} + \text{p}$	200	48–55	[11]
	500	41–56	[12]
	1000	3–56	[13]
$^{113}\text{Nb} + \text{p}$	113	37–42	[21]
$^{93}\text{Zr} + \text{p}$	105	36–41	[22]
$^{107}\text{Pd} + \text{p}$	118; 196	42–47	[23]
$^{137}\text{Cs} + \text{p}$	185	51–56	[24]
$^{90}\text{Sr} + \text{p}$	185	34–39	

3 结果与讨论

本节将具体分析比较基于不同的学习集和学习方法建立的 BNN, BNN+SPACS 和 BNN+sEPAX 模型对质子散裂反应中的同位素截面和余核的激发曲线的预测结果, 并使用余核截面与其结合能的经验关系来验证各种模型的预测精度和泛化能力.

图 1 展示了基于 D1 作为学习集, 贝叶斯直接和间接学习方法对 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应中产生的同位素截面的外推结果, 其中贝叶斯间接学习方法使用的理论模型为 SPACS 半经验参数化公式, 因此两种学习方法分别标记为 BNN 和 BNN+SPACS 方法(参考文献[55]). SPACS 公式是在 EPAX 公式的启发下发展而来的一组具有能量依赖的半经验参数化公式, 主要用于散裂反应截面的预测^[35]. 由于实验数据的限制, 为了分析模型外推结果的合理性, 本文用余核截面与结合能($\sigma \sim B'$)的经验关系(请参考文献[60–62])来验证预测结果的合理性, 结果见图 1(b)和(d). 根据图 1 可知: (1) SPACS 公式对轻余核截面的预测远没有重余核截面的预测理想; (2) 当学习集包含的信息量不足时, BNN 方法容易出现非物理的外推结果; (3) 在 SPACS 公式的引导下, BNN+SPACS 模型的外推结果遵守 $\sigma \sim B'$ 函数关系, 结果更加合理.

由于 D2 涉及的入射能量很多, 且 SPACS 公式的参数复杂, 根据图 1 中 SPACS 公式对散裂反应产生的不同余核的预测精度相差甚远. 这促使我们在贝叶斯间接方法中舍弃了包含能量依赖项的 SPACS 公式, 改为对 SPACS 的原初 EPAX 公式^[32]进行简化. 简化中只保留反应最主要的特点, 并将之称为 BNN+sEPAX 方法, 预测结果见图 2. 图 2 展示了基于 D2 作为学习集, 贝叶斯直接和间接学习方法对 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应产生的同位素截面的预测, 以及与实验数据的比较结果. 由图分析可知, 由于 D2 中包含的余核的信息较少且余核主要是放射性核素, 这使得 BNN 模型的预测值与实验误差较大. 而在 sEPAX 公式的引导下, BNN+sEPAX 模型能够更好地符合实验值, 但预测精度仍需提高. 经过计算, BNN 模型和 BNN+sEPAX 模型对 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应产生的 $6 \leq Z \leq 54$ 范围内所有实验测量的余核截面的预测值 (TH) 与实验值 (EXP) (取自文献[13]) 的均方根误差 (Root Mean Square Error) 分别为 10.02 和 3.58. 图 1 和 2 的结果均证明, 贝叶斯间接学习方法在学习信

息较少的情况下, 能够产生较高的预测精度, 而贝叶斯直接学习方法基于不足的信息量难以进行合理的

图 1 (网络版彩图) 基于学习集 D1 建立的 BNN (红色圆形) 和 BNN+SPACS 模型 (蓝色三角形) 对 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应产生的 $Z = 17$ 和 41 同位素截面的外推 (a), (c) 和 $\sigma \sim B'$ 函数关系 (b), (d), 并与实验数据 (黑色方形) 和 SPACS 公式 (绿色星形) 作比较

Figure 1 (Color online) The $Z=17$ and 41 isotopic cross sections produced in 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ reaction ((a), (c)) and the $\sigma \sim B'$ function ((b), (d)) extrapolated by BNN (red circles) and BNN+SPACS models (blue triangles) with D1 as the learning set. The results are also compared with experimental data (black squares) and SPACS formula (green stars).

图 2 (网络版彩图) 基于 D2 学习集建立的 BNN (红色圆形) 和 BNN+sEPAX 模型 (蓝色三角形) 对 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应中产生的 $Z = 6, 30, 48$ 和 54 同位素截面的预测, 并与实验数据 (黑色方形) 作比较

Figure 2 (Color online) The isotopic cross sections for the $Z = 6, 30, 48$ and 54 isotopes produced in 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ reaction extrapolated by BNN (red circles) and BNN+sEPAX (blue triangles) models with D1 as the learning set. The results are also compared with experimental data (black squares).

预测。

由于 sEPAX 公式继承了 EPAX 公式的主要特点, 不包含入射能量依赖项, 贝叶斯神经网络方法需要通过不同入射能量下的实验数据的学习, 来获得余核产生截面与反应系统入射能量的依赖关系。图 3 展示了基于 D1 和 D2 作为学习集建立的 BNN 和 BNN+sEPAX 模型对 $^{52}\text{Cr} + \text{p}$ 反应产生的 ^7Be , ^{28}Mg , ^{44}Sc 和 ^{48}Cr 核素的激发曲线的预测, 以及与实验数据 [63]、SPACS 和 sEPAX 公式的比较结果。由图分析可知: 由于 sEPAX 公式没有能量依赖项, 因此给出的碎片的激发曲线是一条平行于入射能量的直线; SPACS 公式对低能反应和轻碎片的预测精度较差; BNN 和 BNN+sEPAX 模型均能较好地再现现有的实验数据, 这说明这两种方法能够给出余核截面与入射能量的依赖关系; 两种方法对比, BNN+sEPAX 模型对 ^7Be 和 ^{48}Cr 核素的激发曲线的预测精度优于 BNN 模型。这两种模型对反应中的同位素截面的外推情况如图 4 所示。图 4 展示了这两种模型对 $^{40}\text{Ca} + \text{p}$ 反应产生的 $Z=16$ 同位素和 $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应产生的 $Z=40$ 的外推结果以及相应的 $\sigma \sim B'$ 函数关系。由于实验点的限制, 只能给出部分同位素的拟合线。由图分析可知: 对于这两种模型预测没

图 3 (网络版彩图) 基于 D1 和 D2 学习集建立的 BNN (红色圆形) 和 BNN+sEPAX 模型 (蓝色三角形) 对 $^{52}\text{Cr} + \text{p}$ 反应中 ^7Be , ^{28}Mg , ^{44}Sc 和 ^{48}Cr 核素的激发曲线的外推结果, 并与实验数据 [63] (黑色方形)、SPACS (绿色星形) 和 sEPAX 公式 (橙色线形) 作比较

Figure 3 (Color online) The excitation functions of ^7Be , ^{28}Mg , ^{44}Sc and ^{48}Cr isotopes predicted by BNN (red circles) and BNN+sEPAX models (blue triangles) with D1 and D2 as the learning set in $^{52}\text{Cr} + \text{p}$ reactions. The results are also compared with experimental data [63] (black squares), SPACS (green stars) and sEPAX formulas (orange lines).

图 4 (网络版彩图)基于D1和D2作为学习集建立的BNN (红色圆形)和BNN+sEPAX模型(蓝色三角形)对356 MeV/u能量下 $^{40}\text{Ca} + \text{p}$ 反应产生的 $Z=16$ 同位素和1 GeV/u能量下 $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ 反应产生的 $Z=40$ 同位素截面的外推以及相应的 $\sigma \sim B'$ 函数关系,并与实验数据作比较(黑色方形)

Figure 4 (Color online) The extrapolation results of BNN (red circles) and BNN+sEPAX (blue triangles) models with D1 and D2 as the learning set for 356 MeV/u $^{40}\text{Ca} + \text{p}$ and 1 GeV/u $^{136}\text{Xe} + \text{p}$ reactions and the correlation between σ and B' for isotopes with $Z=16$ and 40. The results are also compared with experimental data (black squares).

有分歧的部分,二者均符合 $\sigma \sim B'$ 函数关系;对于二者预测有分歧的部分,BNN+sEPAX模型优于BNN模型.

根据上述贝叶斯直接和间接学习方法给出的激发曲线、同位素分布和 $\sigma \sim B'$ 关系的结果,总结得出如下结论: (1) 贝叶斯直接学习方法需要充足的学习信息才能达到合理的预测; (2) 贝叶斯间接学习方法可以基于较少的信息量作出合理的预测; (3) 增加学习集的信息量可以很大程度提高BNN和BNN+sEPAX模型的预测精度和模型泛化能力; (4) 无论是单独使用D1或D2,还是同时使用D1和D2作为学习集,BNN+sEPAX方法的预测精度和模型泛化能力均优于BNN方法. 本工作中所建立的BNN+sEPAX方法,对于质子诱发的核散裂反应中的余核产生截面具有较高预测精度,其入射能量覆盖30 MeV至几个GeV区间,反应系统的炮弹核范围从轻核到重核,但不超过 ^{136}Xe 或类似大小的系统.

4 总结与展望

本文提出利用贝叶斯神经网络构造预测质子诱发

核散裂反应中余核产生截面的贝叶斯直接和间接学习方法,用于预测散裂反应中的同位素截面和余核的激发曲线. 在贝叶斯间接学习方法中,由于样本数据中涉及的反应系统比较多,本工作中选择简化后的EPAX公式(sEPAX)作为物理引导模型. 通过比较两种方法给出的同位素分布、激发曲线和 $\sigma \sim B'$ 关系发现,贝叶斯间接学习方法可以基于不足的信息量训练出较优的预测模型,而贝叶斯直接学习方法需要足够的信息才能给出合理的预测. 我们建议使用贝叶斯间接学习方法预测质子诱发核散裂反应中产生的余核截面,其能高精度地预测能量范围从30 MeV/u到几个GeV/u、炮弹核范围从轻核到 ^{136}Xe 、余核范围从轻核到类炮弹核素的反应截面. 本文提出的BNN+sEPAX模型对于核物理、核天体、质子治疗、核能和新一代奇异核素工厂等与散裂反应相关的应用具有较好的帮助. 未来希望获得更精确完整的实验数据和更可靠的理论模型来提高贝叶斯直接和间接学习方法对散裂反应的产物截面以及其他亟待解决的物理问题的预测精度和泛化能力.

参考文献

- 1 Arnould M, Goriely S. Astronuclear physics: A tale of the atomic nuclei in the skies. *Prog Particle Nucl Phys*, 2020, 112: 103766
- 2 Mashnik S G. On solar system and cosmic rays nucleosynthesis and spallation processes. arXiv: astro-ph/0008382
- 3 Durante M, Cucinotta F A. Physical basis of radiation protection in space travel. *Rev Mod Phys*, 2011, 83: 1245–1281
- 4 Letourneau A, Galin J, Goldenbaum F. Neutron production in bombardments of thin and thick W, Hg, Pb targets by 0.4, 0.8, 1.2, 1.8 and 2.5 GeV protons. *Nucl Instrum Methods Phys Res Sect B*, 2000, 170: 299–322
- 5 Gudowski W. Accelerator-driven transmutation projects. The importance of nuclear physics research for waste transmutation. *Nucl Phys A*, 1999, 654: c436–c457
- 6 Charity R J, Webb T B, Elson J M. Observation of the exotic isotope ^{13}F located four neutrons beyond the proton drip line. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 132501
- 7 Ma C W, Wei H L, Liu X Q, et al. Nuclear fragments in projectile fragmentation reactions. *Prog Particle Nucl Phys*, 2021, 129: 103911
- 8 Schardt D, Elsässer T, Schulz-Ertner D. Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits. *Rev Mod Phys*, 2010, 82: 383–425
- 9 Knopf A, Parodi K, Bortfeld T. Systematic analysis of biological and physical limitations of proton beam range verification with offline PET/CT scans. *Phys Med Biol*, 2009, 54: 4477–4495
- 10 Villagrasa-Canton C, Boudard A, Ducret J E. Spallation residues in the reaction $^{56}\text{Fe} + \text{p}$ at 0.3A, 0.5A, 0.75A, 1.0A, and 1.5A GeV. *Phys Rev C*, 2007, 75: 044603
- 11 Paradela C, Tassan-Got L, Benlliure J. Isotopic production cross sections of residual nuclei in the spallation reaction ^{136}Xe (200A MeV) + p. *Phys Rev C*, 2017, 95: 044606
- 12 Giot L, Alcántara-Núñez J A, Benlliure J. Isotopic production cross sections of the residual nuclei in spallation reactions induced by ^{136}Xe projectiles on proton at 500A MeV. *Nucl Phys A*, 2013, 899: 116–132
- 13 Napolitani P, Schmidt K H, Tassan-Got L. Measurement of the complete nuclide production and kinetic energies of the system ^{136}Xe +hydrogen at 1 GeV per nucleon. *Phys Rev C*, 2007, 76: 67–79
- 14 Rejmund F, Mustapha B, Armbruster P. Measurement of isotopic cross sections of spallation residues in 800A MeV $^{197}\text{Au} + \text{p}$ collisions. *Nucl Phys A*, 2001, 683: 540–565
- 15 Audouin L, Tassan-Got L, Armbruster P. Evaporation residues produced in spallation of ^{208}Pb by protons at 500A MeV. *Nucl Phys A*, 2006, 768: 1–21
- 16 Enqvist T, Wlazlo W, Armbruster P. Isotopic yields and kinetic energies of primary residues in 1A GeV $^{208}\text{Pb} + \text{p}$ reactions. *Nucl Phys A*, 2001, 686: 481–524
- 17 Taieb J, Schmidt K H, Tassan-Got L. Evaporation residues produced in the spallation reaction at 1A GeV. *Nucl Phys A*, 2003, 724: 413–430
- 18 Knott C, Albergo S, Caccia Z. Interactions of relativistic ^{36}Ar and ^{40}Ar nuclei in hydrogen: Isotopic production cross sections. *Phys Rev C*, 1997, 56: 398–406
- 19 Chen C X, Albergo S, Caccia Z. Systematics of isotopic production cross sections from interactions of relativistic ^{40}Ca in hydrogen. *Phys Rev C*, 1997, 56: 1536–1543
- 20 Sun X H, Wang H, Otsu H. Spallation and fragmentation cross sections for 168 MeV/nucleon ^{136}Xe ions on proton, deuteron, and carbon targets. *Phys Rev C*, 2020, 101: 064623
- 21 Nakano K, Watanabe Y, Kawase S. Isotope production in proton-, deuteron-, and carbon-induced reactions on ^{93}Nb at 113 MeV/nucleon. *Phys Rev C*, 2019, 100: 044605
- 22 Kawase S, Nakano K, Watanabe Y, et al. Study of proton- and deuteron-induced spallation reactions on the long-lived fission product ^{93}Zr at 105 MeV/nucleon in inverse kinematics. *Prog Theor Exp Phys*, 2017, 2017: 093D03
- 23 Wang H, Otsu H, Sakurai H, et al. Spallation reaction study for the long-lived fission product ^{107}Pd . *Prog Theor Exp Phys*, 2017, 2017: 021D01
- 24 Wang H, Otsu H, Sakurai H. Spallation reaction study for fission products in nuclear waste: Cross section measurements for ^{137}Cs and ^{90}Sr on proton and deuteron. *Phys Lett B*, 2016, 754: 104–108
- 25 Michel R, Otuka N. Database for Proton Induced Residual Production Cross Sections up to 2.6 GeV. Technical Report. International Atomic Energy Agency, 2014. 1–231
- 26 Xu S, Yang G, Jin M. Probing the deuteron breakup and linking the cross sections of residue production between the neutron- and deuteron-induced spallation at 500 MeV/nucleon. *Phys Rev C*, 2020, 101: 024609
- 27 Bondorf J P, Botvina A S, Iljinov A S. Statistical multifragmentation of nuclei. *Phys Rep*, 1995, 257: 133–221
- 28 Botvina A S, Iljinov A S, Mishustin I N. Multifragment break-up of nuclei by intermediate-energy protons. *Nucl Phys A*, 1990, 507: 649–674
- 29 Buyukcizmeci N, Ogul R, Botvina A S. Isospin and symmetry energy effects on nuclear fragment production in liquid-gas-type phase transition region. *Eur Phys J A*, 2005, 25: 57–64

- 30 Boudard A, Cugnon J, David J C. New potentialities of the Liège intranuclear cascade model for reactions induced by nucleons and light charged particles. *Phys Rev C*, 2013, 87: 014606
- 31 Mancusi D, Boudard A, Carbonell J. Improving the description of proton-induced one-nucleon removal in intranuclear-cascade models. *Phys Rev C*, 2014, 91: 034602
- 32 Sümmerer K, Brühl W, Morrissey D J. Target fragmentation of Au and Th by 2.6 GeV protons. *Phys Rev C*, 1990, 42: 2546–2561
- 33 Sümmerer K, Blank B. Modified empirical parametrization of fragmentation cross sections. *Phys Rev C*, 2000, 61: 034607
- 34 Sümmerer K. Improved empirical parametrization of fragmentation cross sections. *Phys Rev C*, 2012, 86: 014601
- 35 Schmitt C, Schmidt K H, Kelić-Heil A. Erratum: SPACS: A semi-empirical parameterization for isotopic spallation cross sections [Phys. Rev. C 90, 064605 (2014)]. *Phys Rev C*, 2016, 94: 039901
- 36 Blann M, Gruppelaar H, Nagel P, et al. International Code Comparison for Intermediate Energy Nuclear Data. Technical Report. Nuclear Energy Agency, 1993
- 37 Fasso A, Ferrari A, Ranft J. Intermediate Energy Nuclear Data: Models and Codes. Technical Report. Nuclear Energy Agency, 1994
- 38 Filges D, Nagel P, Neef R D. Thick Target Benchmark for Lead and Tungsten. Technical Report. Nuclear Energy Agency, 1995
- 39 Michel R, Nagel P. International Codes and Model Intercomparison for Intermediate Energy Activation Yields. Technical Report. Nuclear Energy Agency, 2017
- 40 Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 2016, 355: 602–606
- 41 Carrasquilla J, Melko R G. Machine learning phases of matter. *Nat Phys*, 2017, 13: 431–434
- 42 van Nieuwenburg E P L, Liu Y H, Huber S D. Learning phase transitions by confusion. *Nat Phys*, 2017, 13: 435–439
- 43 Rodriguez-Nieva J F, Scheurer M S. Identifying topological order through unsupervised machine learning. *Nat Phys*, 2019, 15: 1–6
- 44 Song Y D, Wang R, Ma Y G. Determining the temperature in heavy-ion collisions with multiplicity distribution. *Phys Lett B*, 2021, 814: 136084
- 45 Li F, Wang Y, Gao Z. 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
- 46 Wang R, Ma Y G, Wada R. Nuclear liquid-gas phase transition with machine learning. *Phys Rev Res*, 2020, 2: 043202
- 47 Neufcourt L, Cao Y, Giuliani S. Beyond the proton drip line: Bayesian analysis of proton-emitting nuclei. *Phys Rev C*, 2020, 101: 014319
- 48 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
- 49 Gao Z P, Wang Y J, Lü H L. Machine learning the nuclear mass. *Nucl Sci Tech*, 2021, 32: 109
- 50 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
- 51 Niu Z M, Liang H Z, Sun B H. Predictions of nuclear β -decay half-lives with machine learning and their impact on r -process nucleosynthesis. *Phys Rev C*, 2019, 99: 064307
- 52 Talou P, Young P G, Kawano T. Quantification of uncertainties for evaluated neutron-induced reactions on actinides in the fast energy range. *Nucl Data Sheets*, 2011, 112: 3054–3074
- 53 Wang Z A, Pei J, Liu Y. Bayesian evaluation of incomplete fission yields. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 122501
- 54 Qiao C Y, Pei J C, Wang Z A. Bayesian evaluation of charge yields of fission fragments of ^{239}U . *Phys Rev C*, 2021, 103: 034621
- 55 Ma C W, Peng D, Wei H L. Isotopic cross-sections in proton induced spallation reactions based on the Bayesian neural network method. *Chin Phys C*, 2020, 44: 014104
- 56 Ma C W, Peng D, Wei H L. A Bayesian-neural-network prediction for fragment production in proton induced spallation reaction. *Chin Phys C*, 2020, 44: 124107
- 57 Wang Y, Li F, Li Q. Finding signatures of the nuclear symmetry energy in heavy-ion collisions with deep learning. *Phys Lett B*, 2021, 822: 136669
- 58 Fan C L, Sun S T, Jin Z H. Modeling and predictive method of Bayesian neural network (in Chinese). *J Chin Iner Tech*, 2009, 17: 85–88 [樊春玲, 孙四通, 金志华. 贝叶斯神经网络建模预测方法及其应用. 中国惯性技术学报, 2009, 17: 85–88]
- 59 Neal R M. Bayesian Learning for Neural Networks. New York: Springer-Verlag, 1996
- 60 Tsang M B, Lynch W G, Friedman W A. Fragmentation cross sections and binding energies of neutron-rich nuclei. *Phys Rev C*, 2007, 76: 132–148
- 61 Ma C W, Song Y D, Wei H L. Binding energies of near proton-drip line $Z = 2228$ isotopes determined from measured isotopic cross section distributions. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2019, 62: 012013
- 62 Wei H L, Song Y D, Ma C W. Cross-section prediction for isotopes near neutron drip line in $^{70,80}\text{Zn}$ projectile fragmentation reactions. *Chin Phys C*, 2019, 43: 074103
- 63 Titarenko Y E, Batyaev V F, Titarenko A Y. Measurement and simulation of the cross sections for nuclide production in ^{56}Fe and $^{\text{nat}}\text{Cr}$ targets irradiated with 0.04- to 2.6-GeV protons. *Phys Atom Nuclei*, 2011, 74: 523–536

附录 简化的EPAX参数化公式

EPAX公式是描述碎片截面的一组经验参数化公式, 由Sümmerer等人^[32–34]提出. 为简便计算, 本文中对EPAX参数化公式进行了适当简化, 简介如下.

在EPAX公式中, 炮弹核(A_p, Z_p)与靶核(对于质子 $A_t = Z_t = 1$)碰撞产生的碎片(A, Z)的截面为

$$\sigma(A, Z) = Y_A \sigma_Z(Z_{\text{prob}} - Z) = Y_A \cdot n \cdot \exp(-R |Z_{\text{prob}} - Z|^U). \quad (\text{a1})$$

式中, 第一项 Y_A 代表质量产额, 是质量数为 A 的所有等量异位素碎片截面的总和; 第二项 σ_Z 描述“电荷分布”, 代表质量数在最大值 Z_{prob} 附近的元素截面分布. 电荷分布的形状由宽度参数 R 和丰中子(或丰质子)侧剩余通道的指数 U_n (U_p)控制. $n = \sqrt{R/\pi}$ 是标准化电荷分布积分的归一化因子.

质量产额曲线指数依赖 A_p - A , 曲线斜率 P 是炮弹质量数的函数, 总体比例因子 S 描述外围反应, 依赖于

碰撞核与靶核的半径, 它们分别具有如下形式:

$$\begin{aligned} Y_A &= S \cdot P \cdot \exp[-P \cdot (A_p - A)], \\ P &= \exp(-1.731 - 0.01339 \cdot A_p), \\ S &= 0.27 \times [(A_p)^{1/3} + (A_t)^{1/3} - 1.8]. \end{aligned} \quad (\text{a2})$$

参数 R , Z_{prob} 和 U 之间相互关联, 因此很难通过最小二乘法拟合得到. U 值在 β -稳定线的丰质子侧和丰中子侧略有差别, 分别为 U_p 和 U_n , 简化时统一取为高斯分布, 即 $U = U_p = U_n = 2.0$.

电荷分布的最大值 Z_{prob} 与 β -稳定线的位置相关

$$Z_{\text{prob}} \simeq Z_\beta = A/(1.98 + 0.0155 \cdot A^{2/3}). \quad (\text{a3})$$

与 Z_{prob} 类似, 宽度参数 R 依赖碎片的质量数,

$$R \simeq \exp(-0.015 \cdot A + 3.2 \times 10^5 \cdot A^2). \quad (\text{a4})$$

Bayesian neural network prediction methods for fragment cross sections in proton-induced spallation reactions

PENG Dan, WEI HuiLing*, PU Jie, CHENG KaiXuan, WANG YuTing, WEI XiaoBao, CHEN XiXi & MA ChunWang*

Institute of Particle and Nuclear Physics, School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China

Nuclear spallation reactions can be induced by light particles with the incident energy greater than 10 MeV resulting in the production of various radioactive nuclides. The cross sections of fragment creation and fragment production are the fundamental and basic data, respectively for nuclear physics and nuclear applications in a wide variety of fields. Due to the complexity in spallation systems varying from light to heavy, incident energy ranging from MeV to GeV, fragment charge and mass numbers, the current models should be upgraded for increased precision. Using the Bayesian neural network (BNN), machine learning approaches have been established to predict the fragment cross sections in the proton-induced nuclear spallation reactions. The direct BNN method, together with the physical model guided BNN + SPACS and BNN + sEPAX methods, has been shown to improve the precision of fragment cross sections.

machine learning, Bayesian neural network, spallation reaction, fragment cross section

PACS: 25.70.Pq, 25.70.Mn, 21.65.Cd

doi: [10.1360/SSPMA-2021-0298](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0298)