神经网络方法对原子核质量的预言

田大川², 陈寿万¹, 牛中明^{1*}

1. 安徽大学物理与光电工程学院, 合肥 230601;

2. 北京师范大学天文系, 北京 100875

*联系人, E-mail: zmniu@ahu.edu.cn

收稿日期: 2021-11-01; 接受日期: 2022-02-08; 网络出版日期: 2022-04-19

国家自然科学基金(编号: 11875070, 11711540016)资助项目

摘要 原子核质量包含丰富的核结构信息, 是原子核的基本物理性质之一. 本文采用前馈神经网络和贝叶斯神经网络方法研究原子核质量, 通过在网络输入层引入与原子核对效应和壳效应相关的两个物理量, 在网络输出层考虑现有核模型的质量预言, 即学习原子核质量实验值与核模型预言值之差, 大幅提高了核模型的质量预言精确度. 相比前馈神经网络中常用的优化算法, 贝叶斯方法在优化神经网络参数方面具有较大优势, 显著改进了神经网络对原子核质量预言中对效应和壳效应的描述.

关键词 原子核质量, 神经网络, 贝叶斯方法, 质量模型

PACS: 21.10.Dr, 21.60.-n, 26.30.Hj, 21.30.Fe

1 引言

质量是原子核的基本物理性质之一^[1,2]. 根据原子核质量, 不仅可以获取原子核的各种结构信息, 如壳效应^[3,4]和形变^[5,6]等, 同时还被广泛用于提取原子核有效相互作用, 如平均场有效相互作用^[7-9]和配对相互作用^[10]等. 此外, 在天体物理学中, 原子核质量通过确定核反应能影响着天体核反应性质. 因此, 原子核质量对于理解原子核结构和研究天体核合成过程^[11-13]都具有至关重要的作用.

近年来, 原子核质量的实验测量取得了很大进展^[14,15]. 最新发布的《原子质量评估AME2020》对原子核质量测量进行了全面总结, 评估并推荐了约3000个原子核的质量^[16,17]. 然而, 由于缺乏精确

的原子核相互作用和非微扰量子多体计算的困难, 原子核质量的全局精确预测仍然是核理论模型面临的一大挑战. 这里所谓的全局质量模型, 是指它们可用于描述除少量轻核之外的所有束缚原子核. 目前, 全局核质量模型主要分为三类: 宏观模型、宏观-微观模型以及微观模型. Weizsäcker^[18,19]根据原子核的液滴模型, 在1935年首次提出了原子核质量半经验公式, 即著名的Bethe-Weizsäcker (BW)质量公式, 其质量预言精确度约3 MeV. 该半经验公式属于宏观模型, 可以较好地描述大部分原子核的质量, 但对质子数或中子数在幻数附近的原子核, 其理论预言与实验质量具有系统性偏差. 这表明在该模型中缺失了一些重要的物理效应. 为此, 通过在该模型基础上进一步引入微观的壳修正项, 发展了宏观-微观模型, 例如: 有限核液滴

引用格式: 田大川, 陈寿万, 牛中明. 神经网络方法对原子核质量的预言. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 252007
Tian D C, Chen S W, Niu Z M. Nuclear mass prediction using a neural network approach (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252007,
doi: [10.1360/SSPMA-2021-0301](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0301)

模型(FRDM)^[20]和Weizsäcker-Skyrme (WS)模型^[21]等,显著提高原子核质量预言至500 keV左右. 微观质量模型从核子的层次处理原子核系统,可以在统一的框架内处理核质量的宏观部分和微观修正项,一般被认为具有较好的预测能力. 在非相对论框架下,利用Skyrme^[22,23]或Gogny^[24]有效相互作用,已经建立了一系列Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)微观质量模型,取得了与宏观-微观质量模型类似的预言精确度. 近年来,相对论平均场(RMF)模型成功地描述了各种原子核性质^[25-31],其对质量的预言精确度已经逐步提高至约1 MeV^[32-34],这些核性质还被成功用于天体核合成模拟^[35-38],因而受到越来越多的关注.

原子核质量模型的预言精确度已从宏观液滴模型的约3 MeV提高至宏观-微观质量模型的约500 keV,然而,该精确度仍然不能满足奇特核结构和天体物理核合成的研究需求,它们需要至少100 keV的核质量预言精确度. 因此,即使是现有的最好的核质量模型,仍有很大的改进空间. 还需注意,该精确度是对已知核区的原子核,而对远离稳定线的未知核区,不同核模型的质量预言具有明显差异,甚至超过几十MeV,因此,亟需进一步改进核质量模型以提高模型外推能力. 机器学习(ML)因其强大的学习能力成为处理复杂问题最流行的方法之一,已被广泛应用于语言翻译、语音识别、计算机视觉、自动驾驶以及复杂物理系统等不同领域. 在原子核物理中,机器学习也有重要应用,例如预测质量^[39-49]、电荷半径^[50-53]、激发态^[54,55]、 β 衰变^[56,57]、 α 衰变^[58,59]、原子核基态磁矩^[60]等原子核基态或激发态性质. 神经网络是当前实现机器学习的重要方式,它具有强大的数据拟合能力,并且可以推广预测未知数据. 贝叶斯方法可以借助先验自动避免模型的过拟合,并且可以量化模型预言的不确定性,因此基于该方法的神经网络,即贝叶斯神经网络(Bayesian Neural Network, BNN)特别适合描述原子核的复杂非线性质量公式.

本文将采用全连接神经网络或称前馈神经网络(Feedforward Neural Network, FNN)以及BNN两种方法研究原子核质量,通过合理设计神经网络的输入层和输出层,引入更多的物理信息,以提高核质量预言精确度. 此外,还将比较FNN和BNN的核质量预言能力,并研究FNN的初始化参数和优化算法对预言精确度的影响.

2 理论框架

神经网络中有若干组相互连接的神经元,可分为输入层、隐藏层、输出层,与生物神经元相互传递信号的方式类似,数据在各组神经元之间传播,到达输出层后将结果输出. 神经网络需要使用数据进行训练,学习数据中隐藏的规律. 在学习阶段,网络将其预测输出与学习数据进行比较,将它们之间的误差进行反向传播,从输出层依次传给输入层,各层神经元的权重进行相应调整,直到实际输出与预期输出的误差符合要求为止,从而得到训练好的神经网络,采用该网络就可以进行预测.

本文构建的FNN包含输入层、一个隐藏层和输出层,激活函数采用tanh. 设 $\mathbf{x} = \{x_i\}$ 为网络输入, $\hat{y}$ 为网络输出,则有

$$\hat{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\omega}) = a + \sum_{j=1}^H b_j \tanh\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ji} x_i\right), \quad (1)$$

其中 $\boldsymbol{\omega} = \{a, b_j, c_j, d_{ji}\}$ 表示神经网络的参数, H 和 I 分别为神经网络隐藏神经元个数和输入量的个数.

给定一个包含 N 个数据的学习集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ 和损失函数,即可以训练神经网络参数 $\boldsymbol{\omega}$. 对于回归问题,一般选择方均根偏差作为损失函数,即

$$L(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}. \quad (2)$$

损失函数可以量化神经网络输出 $\hat{\mathbf{y}}$ 与学习数据 $\mathbf{y}$ 之间的偏差,网络的学习过程就是通过适当的优化算法(优化器)调节网络参数 $\boldsymbol{\omega}$ 以减小损失函数,直到满足要求,从而得到经过数据训练后的神经网络. 本文尝试了Adam, SGD和RMSprop三种优化器训练神经网络,发现Adam优化器的效果相对较好,因此,除特别说明外,本文将使用Adam优化器得到的训练结果,优化器学习率设定为0.001. 需要指出,为了与下文BNN保持一致,FNN没有采取对输入量的规范化和分批训练等方式. 为了减小参数初始化对FNN预测结果的影响,本文将从100组随机初始参数出发训练网络,并将这些网络预测值的平均值作为最终预测结果.

本文所采用的BNN网络结构与FNN一致,但其网络参数 $\boldsymbol{\omega}$ 使用概率分布描述^[42,61,62]. 给定学习集 D 后

的 ω 分布称为后验分布, 即 $p(\omega|D)$, 根据贝叶斯定理

$$p(\omega|D) = \frac{p(D|\omega)p(\omega)}{p(D)}, \quad (3)$$

其中, $p(\omega)$ 是给定 D 之前的分布, 称为先验分布; $p(D|\omega)$ 是似然函数; $p(D)$ 是归一化常数, 确保后验分布在全参数空间积分后为1. 本文将 $p(\omega)$ 和 $p(D|\omega)$ 都取为高斯分布, 具体形式可参见文献[42]. 利用马尔可夫链蒙特卡罗方法对后验分布 $p(\omega|D)$ 进行采样[62], 进而可由下式计算BNN的预测值和不确定性:

$$\langle \hat{y} \rangle = \int \hat{y}(\mathbf{x}; \omega) p(\omega|D) d\omega, \quad (4)$$

$$\Delta \hat{y} = \sqrt{\langle \hat{y}^2 \rangle - \langle \hat{y} \rangle^2}. \quad (5)$$

为了研究不同神经网络对原子核质量的预言能力, 本文设计了多种具有不同输入和输出层的神经网络结构. 输入层分为两种, 即 $\mathbf{x} = (Z, N)$ 的两输入神经网络和 $\mathbf{x} = (Z, N, \delta, P)$ 的四输入神经网络, 其中 Z 和 N 分别为质子数和中子数, δ 和 P 是两个与原子核对效应和壳效应相关的物理量:

$$\delta = [(-1)^N + (-1)^Z]/2, \quad P = v_p v_n / (v_p + v_n), \quad (6)$$

v_p 和 v_n 分别表示质子数 Z 和中子数 N 与距离最近的幻数之差, 质子幻数取8, 20, 28, 50, 82, 126, 中子幻数取8, 20, 28, 50, 82, 126, 184. 输出层也分为两种, 一种是直接以实验质量作为输出量, 另一种是以BW模型预言与实验质量之间的残差作为输出量, 即 $\Delta M = M^{\text{exp}} - M^{\text{BW}}$. 对于两输入和四输入神经网络, 隐藏层的神经元个数分别取42和28个, 因此, 网络总参数个数均为169. 本文采用的各种神经网络的输入、隐藏和输出层的具体情况见表1.

训练神经网络所使用的质量实验数据取自《原子质量评估AME2020》[17], 但只包含了其中 $Z, N \geq 8$ 的2457个原子核的质量数据. 本文采用的计算原子核结合能的BW公式为

$$B(Z, A) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(N - Z)^2}{A} + a_p \frac{\delta}{A^{1/2}}, \quad (7)$$

其中 a_v , a_s , a_c , a_a , a_p 为模型参数, 通过最佳拟合实验数据确定其取值分别为15.54, 16.94, 0.7033, 23.02, 12.50 MeV.

3 结果与讨论

图1展示了BW模型与不同神经网络方法给出的原子核质量(Mass)和单中子分离能(S_n)与实验值的方均根偏差(RMS). 与BW模型相比, 除FNN-I2a外, FNN-I2, FNN-I4和BNN-I4的方均根偏差均明显降低, 其中质量的方均根偏差分别降低了61%, 78%, 89%, 单中子分离能的方均根偏差分别降低了32%, 47%, 62%. 对比FNN-I2a和FNN-I2的结果, 可以看出神经网络输出量的选择对结果影响很大, 这表明在神经网络输出层考虑已知的物理, 可以显著提高模型精确度. 相比FNN-I2, FNN-I4在输入层中引入了两个与原子核对效应和壳效应相关的物理量 δ 和 P , 进一步改进了神经网络对质量和中子分离能的描述. 相比采用Adam优化器的FNN-I4, BNN-I4采用蒙特卡罗方法在参数空间内进行采样, 因此更易于找到更好的参数, 质量的方均根

表1 各种神经网络的输入变量、隐藏层神经元个数以及输出变量

Table 1 Input variables, number of hidden layer neurons, and output variables of various neural networks

神经网络	输入变量 $\mathbf{x}$	H	输出变量 y
FNN-I2a	Z, N	42	M^{exp}
FNN-I2	Z, N	42	ΔM
FNN-I4	Z, N, δ, P	28	ΔM
BNN-I4	Z, N, δ, P	28	ΔM

图1 (网络版彩图) BW模型与不同神经网络方法给出的原子核质量(Mass)和单中子分离能(S_n)与实验数据的RMS偏差
Figure 1 (Color online) RMS deviations of nuclear mass and single-neutron separation energy between the experimental data and the results given by the BW model and various neural network approaches.

偏差从FNN-I4的0.680 MeV降至BNN-I4的0.333 MeV, 降幅达50%. 因此, 合理设计神经网络的输入层和输出层以引入更多的已知物理, 可以显著提升神经网络方法对核质量的预言精确度.

为了检验核模型的外推能力, 我们以《原子质量评估AME2012》中的原子核作为学习集, 以《原子质量评估AME2020》中新出现的原子核作为验证集. 对于常见的全局核质量模型, 如DZ28^[63], FRDM2012^[20], HFB-31^[23], KTUY^[64], RMF^[32]和WS4^[21], 它们对学习集中原子核质量的RMS分别为0.395, 0.582, 0.565, 0.705, 2.211和0.290 MeV, 但是对于验证集中的原子核质量, 其RMS均有一定的增大, 分别为0.836, 0.962, 0.911, 1.153, 3.410和0.366 MeV. 对于本文使用的神经网络方法, FNN-I4和BNN-I4对学习集中原子核质量的RMS分别为0.685和0.302 MeV, 而对验证集中的原子核质量, 其RMS也有一定的增大, 分别为1.048和0.586 MeV, 这与全局核模型的表现类似. 对于BNN-I4, 其精确度仍然高于DZ28, FRDM2012, HFB-31, KTUY和RMF等模型.

如图1所示, 尽管FNN-I4与BNN-I4的网络结构完全相同, 但其对原子核质量的预言精确度却相差很大. 为了研究这种偏差的原因, 图2给出了10组采用BNN参数作为FNN初始参数得到的原子核质量理论值与实验值的方均根偏差, 用FNN-I4S来标记. 作为对比, 图中也展示了对应的BNN结果以及FNN采取随机初始化参数的结果. 本文共采用了100组随机初始化参数训练FNN-I4, 图2中给出了从其中随机选取的10组. 可见, FNN-I4的质量预言精确度在0.6–1.0 MeV范围内波动, 明显大于BNN-I4的预言精确度. 然而, 将BNN参数作为初始化参数的FNN-I4S, 可以得到与BNN-I4类似的精确度, 说明相比BNN中采用的蒙特卡罗方法, 目前FNN中采用的Adam等优化算法还需进一步改进. 表2给出了FNN-I4S中核质量RMS最小的一组参数, 下文中展示的FNN-I4S结果均是采用该组参数计算得到.

方均根偏差仅能描述理论与实验数据的整体偏差, 为了更详细地研究理论与实验的偏差, 图3给出了核素图上原子核质量的实验数据与BW模型预言值之间的偏差. 尽管BW模型的预言值与实验数据的方均根偏差为3.068 MeV, 但是BW模型的质量偏差在某些核区显著大于3 MeV. 例如, 在幻数核附近, 尤其是双幻

核附近, BW模型显著高估了原子核的质量; 对于幻数之间的原子核, 尤其在 $Z = 40$ 附近的核区, BW模型一般又低估了原子核质量.

图4(a)–(c)分别展示了原子核质量的实验数据与神经网络方法FNN-I4, BNN-I4, FNN-I4S预言值之间的偏差. 与图3中BW的结果对比, FNN-I4, BNN-I4, FNN-I4S的结果与实验数据的偏差整体大幅降低, 方均根偏差分别为0.680, 0.333, 0.333 MeV. 从图4(a)可见, 尽管FNN-I4相比BW模型整体改进了不少, 但在双幻核

图2 (网络版彩图)采用10组BNN网络参数作为初始参数得到的FNN-I4S结果与实验原子核质量的方均根偏差, 图中也展示了对应的BNN-I4结果以及FNN-I4采取随机初始化参数的结果, 分别以圆球、圆形和三角形表示

Figure 2 (Color online) RMS deviations of nuclear mass between the experimental data and the FNN-I4S results obtained by using 10 BNN network parameters as initial parameters. The corresponding results of BNN-I4 and the results of FNN-I4 whose parameters are initialized randomly are also shown, which are represented by spheres, circles, and triangles.

图3 (网络版彩图)原子核质量的实验数据与BW模型预言值之间的偏差

Figure 3 (Color online) Nuclear mass differences between the experimental data and the BW predictions.

表 2 FNN-I4S 的神经网络参数

Table 2 The parameters of FNN-I4S

d_{ji}				c_j	b_j	a
-0.0071	-0.0776	-0.0035	0.0072	10.1788	44.8533	-35.6144
0.1488	-0.1045	0.0001	0.0042	1.6494	-12.0561	-
-0.0379	-0.1171	-0.0030	0.3219	10.9632	2.7979	-
-0.1428	0.1628	0.0441	0.2506	-0.8065	19.3529	-
-0.2483	0.2019	-0.1170	-0.2814	-0.1211	-1.3387	-
-0.1011	0.1400	0.0739	0.4391	0.7005	40.3447	-
0.1342	-0.0834	0.0098	0.0376	-0.1012	10.4867	-
-0.0954	-0.0903	-0.0140	-0.0769	11.9056	37.5997	-
0.0711	-0.1230	-0.0192	-0.1438	1.0723	51.2181	-
-0.2908	-0.3783	0.0785	0.6756	5.5894	-14.8559	-
0.0076	-0.0213	-0.0319	-0.2838	3.4547	4.0029	-
0.0069	0.0826	0.0061	0.0573	-11.1227	44.7962	-
0.0856	0.1409	0.0171	0.1436	-6.6236	9.5759	-
0.1357	0.1867	0.0169	0.0686	-4.7093	33.0155	-
0.2588	0.0149	0.0319	0.3432	-7.2440	-5.2329	-
-0.0994	0.3620	0.0514	0.3565	-5.9521	4.5071	-
-0.3669	0.1548	-0.0201	-0.1122	0.4167	-23.8006	-
-0.1326	0.0060	-0.0071	-0.0771	1.3555	53.1474	-
-0.0382	0.2888	0.0076	0.0291	-12.3220	-2.8950	-
-0.0775	0.0687	-0.0418	0.0382	-0.4430	12.4627	-
-0.1349	0.0053	0.0227	0.4002	11.3572	-5.7394	-
0.1982	-0.0852	0.0408	0.1024	-0.9701	16.5952	-
-0.0022	0.0097	0.6779	-0.0317	2.0853	12.4201	-
-0.3244	0.1619	-0.0393	0.6807	6.8068	-0.7301	-
0.2407	-0.0442	-0.3229	-0.2676	22.0562	-16.7270	-
0.0866	0.2419	-0.0377	0.0405	-6.5911	7.2267	-
-0.1042	-0.0729	-0.0138	-0.0733	11.1965	-37.4785	-
0.2483	0.2650	0.0321	0.1315	-7.7044	-14.3235	-

图 4 (网络版彩图)实验原子核质量与神经网络方法FNN-I4 (a), BNN-I4 (b), FNN-I4S (c)预言值之间的偏差. 对应的网络输出 $S(Z, A)$ 分别展示在(d)–(f), 图中黑色轮廓线表示已知原子核的边界

Figure 4 (Color online) Nuclear mass differences between the experimental data and the predictions of FNN-I4 (a), BNN-I4 (b), and FNN-I4S (c). The corresponding network outputs $S(Z, A)$ are shown in (d)–(f), separately, where the boundaries of known nuclei are shown by the black contours.

附近仍有明显的偏差. 仔细观察还会发现, FNN-I4与实验数据的偏差还存在奇偶振荡, 然而FNN-I4S和BNN-I4很好地改进了对幻数附近原子核质量的描述, 同时也几乎消除了质量偏差中的奇偶振荡, 这可能是由于FNN-I4中与 δ 和 P 相关的网络参数没有得到最佳优化所导致. 对比图4(b)和(c)可见, FNN-I4S与BNN-I4的预言精确度几乎一致, 而在 $Z = 50$, $N = 82$ 和 $Z = 50$, $N = 126$ 两处双幻核区, FNN-I4S将附近核区的质量偏差进一步降至1 MeV以下, 这是因为FNN-I4S在BNN-I4参数的基础上, 进一步优化了神经网络参数尤其是与壳效应相关的参数, 从而在部分幻数核区, 其预言能力进一步改进.

神经网络方法FNN-I4, BNN-I4, FNN-I4S对应的网络输出, 即神经网络预言的BW模型的质量修正 $S(Z, A)$ 分别展示在图4(d)–(f)中. 在已知核区, 即图4(d)–(f)中黑色轮廓线之内的核区, 三种神经网络方法预言的 $S(Z, A)$ 都较为接近. 在未知核区, BNN-I4和FNN-I4S的外推结果仍然几乎一致, 然而, 它们与FNN-I4的外推结果在丰中子核区存在明显差异, 例如在 $Z = 40$ – 60 的丰中子核区, 二者预言的 $S(Z, A)$ 有明显区别. 众所周知, 由于BW模型没考虑壳修正能, 在双幻核附近的原子核质量修正一般应显著小于零, 例如在 $Z = 50$, $N = 126$ 核区, 尽管FNN-I4, BNN-I4和FNN-I4S预言的 $S(Z, A)$ 均小于零, 但是FNN-I4预言的 $S(Z, A)$ 大小显著小于BNN-I4和FNN-I4S的预言值.

以Pb同位素链和 $N = 120$ 同中子素链为例, 图5和6详细展示了原子核质量实验值与BW, FNN-I4, BNN-I4, FNN-I4S理论预言值之差, 分别以矩形、三角形、圆形和圆球表示. 对于Pb同位素链, BW模型的理论值与实验数据偏差很大, 在幻数 $N = 126$ 附近甚至超过了10 MeV, 三种神经网络方法都大幅降低了这种偏差, 但FNN-I4的质量偏差中仍然存在显著的奇偶振荡现象, 而BNN-I4和FNN-I4S的结果相对较好. 对于 $N = 120$ 同中子素链, BW模型的理论值与实验数据偏差甚至超过了20 MeV, 三种神经网络方法也大幅降低了这种偏差, 但FNN-I4的质量偏差仍然显著大于BNN-I4和FNN-I4S的质量偏差.

为了检验BNN-I4模型与其他核质量模型对于极端丰中子核质量预言的差别, 以Sn同位素链为例, 图7给出了BNN-I4方法与HFB-31模型预言的核质量偏差, 作为对比, 图中还给出了其他核模型的结果. 从

图可见, 在 $N \leq 100$ 时, BNN-I4与其他模型的预言值都较为接近, 随着中子数增加, 在极端丰中子核区, 各个模型的质量偏差显著增加, 甚至可达几十MeV, 其中BNN-I4与KTUY和RMF模型类似, 其预言的核质量低于HFB-31模型的预言值, 而DZ28和WS4预言的核质量高于HFB-31模型的预言值.

4 总结与展望

本文采用前馈神经网络(FNN)和贝叶斯神经网络(BNN)方法研究了原子核质量, 通过对比不同结构的神经网络模型, 发现在输入层引入与原子核对效应和壳效应相关的两个物理量 δ 和 P , 以及在输出层考虑Bethe-Weizsäcker质量模型的已知物理, 可以使神经网络方法具有更可靠的预言能力. 对于FNN, 研究发现, 采用随机方法初始化参数很难较好地优化与输入

图5 (网络版彩图) Pb同位素链的原子核质量实验值与BW, FNN-I4, BNN-I4, FNN-I4S理论预言值之差, 分别用矩形、三角形、圆形和圆球表示

Figure 5 (Color online) Nuclear mass differences between the experimental data and the predictions of BW, FNN-I4, BNN-I4 and FNN-I4S models for Pb isotopes, which are symbolized by rectangles, triangles, circles, and spheres, respectively.

图 6 (网络版彩图)与图5相同,但是对应 $N = 120$ 的同中子素链

Figure 6 (Color online) Same as Figure 5, but for the $N = 120$ isotones.

变量 δ 和 P 相关的网络权重参数,进而影响了其对质量预言中对效应和壳效应的描述,因此,核质量最佳学习精确度仅约0.680 MeV.对于BNN,核质量的预言精确

图 7 (网络版彩图) BNN-I4, DZ28, FRDM2012, KTUY, RMF, WS4模型预言的Sn同位素链的原子核质量与HFB-31模型预言值的偏差

Figure 7 (Color online) Differences between the mass predictions of BNN-I4, DZ28, FRDM2012, KTUY, RMF, WS4 models and those of HFB-31 model for Sn isotopes.

度可以提高至0.333 MeV, 如果将BNN最优参数作为FNN初始参数, FNN也可以取得与BNN类似的质量预言精确度, 这说明贝叶斯方法在优化神经网络参数方面具有较大优势. 在未来, 发展考虑更多物理效应或物理约束的神经网络方法, 将有助于进一步提高对原子核质量的预言能力. 此外, 基于发展的核质量预言方法, 可以进一步研究超重核的 α 衰变能, 这对理解原子核的存在极限具有重要意义. 因此, 未来工作还将进一步发展神经网络方法, 使其在超重核区具有更好的预言能力, 进而研究超重核的 α 衰变能.

参考文献

- 1 Lunney D, Pearson J M, Thibault C. Recent trends in the determination of nuclear masses. *Rev Mod Phys*, 2003, 75: 1021–1082
- 2 Bender M, Heenen P H, Reinhard P G. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev Mod Phys*, 2003, 75: 121–180
- 3 Minaya Ramirez E, Ackermann D, Blaum K, et al. Direct mapping of nuclear shell effects in the heaviest elements. *Science*, 2012, 337: 1207–1210
- 4 Wienholtz F, Beck D, Blaum K, et al. Masses of exotic calcium isotopes pin down nuclear forces. *Nature*, 2013, 498: 346–349
- 5 Hager U, Eronen T, Hakala J, et al. First precision mass measurements of refractory fission fragments. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 042504
- 6 de Roubin A, Atanasov D, Blaum K, et al. Nuclear deformation in the $A \approx 100$ region: Comparison between new masses and mean-field predictions. *Phys Rev C*, 2017, 96: 014310
- 7 Alex Brown B. New Skyrme interaction for normal and exotic nuclei. *Phys Rev C*, 1998, 58: 220–231
- 8 Lalazissis G A, Nikšić T, Vretenar D, et al. New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys Rev C*, 2005, 71: 024312
- 9 Zhao P W, Li Z P, Yao J M, et al. New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with a point-coupling interaction. *Phys Rev C*, 2010, 82: 054319
- 10 Satuła W, Dobaczewski J, Nazarewicz W. Odd-even staggering of nuclear masses: Pairing or shape effect? *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 3599–3602
- 11 Burbidge E M, Burbidge G R, Fowler W A, et al. Synthesis of the elements in stars. *Rev Mod Phys*, 1957, 29: 547–650

- 12 Mumpower M R, Surman R, McLaughlin G C, et al. The impact of individual nuclear properties on r -process nucleosynthesis. [Prog Particle Nucl Phys](#), 2016, 86: 86–126
- 13 Bethe H A. Energy production in stars. [Phys Rev](#), 1939, 55: 434–456
- 14 Franzke B, Geissel H, Münzenberg G. Mass and lifetime measurements of exotic nuclei in storage rings. [Mass Spectrom Rev](#), 2008, 27: 428–469
- 15 Sun B H, Litvinov Y A, Tanihata I, et al. Toward precision mass measurements of neutron-rich nuclei relevant to r -process nucleosynthesis. [Front Phys](#), 2015, 10: 1–25
- 16 Huang W J, Wang M, Kondev F G, et al. The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures. [Chin Phys C](#), 2021, 45: 030002
- 17 Wang M, Huang W J, Kondev F G, et al. The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. [Chin Phys C](#), 2021, 45: 030003
- 18 Weizsäcker C F. Zur Theorie der Kernmassen. [Z Physik](#), 1935, 96: 431–458
- 19 Bethe H A, Bacher R F. Nuclear Physics A. Stationary states of nuclei. [Rev Mod Phys](#), 1936, 8: 82–229
- 20 Möller P, Myers W D, Sagawa H, et al. New finite-range droplet mass model and equation-of-state parameters. [Phys Rev Lett](#), 2012, 108: 052501
- 21 Wang N, Liu M, Wu X, et al. Surface diffuseness correction in global mass formula. [Phys Lett B](#), 2014, 734: 215–219
- 22 Goriely S, Chamel N, Pearson J M. Skyrme-hartree-fock-bogoliubov nuclear mass formulas: Crossing the 0.6 MeV accuracy threshold with microscopically deduced pairing. [Phys Rev Lett](#), 2009, 102: 152503
- 23 Goriely S, Chamel N, Pearson J M. Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. XVI. Inclusion of self-energy effects in pairing. [Phys Rev C](#), 2016, 93: 034337
- 24 Goriely S, Hilaire S, Girod M, et al. First Gogny-Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear mass model. [Phys Rev Lett](#), 2009, 102: 242501
- 25 Meng J, Toki H, Zhou S G, et al. Relativistic continuum Hartree-Bogoliubov theory for ground-state properties of exotic nuclei. [Prog Particle Nucl Phys](#), 2006, 57: 470–563
- 26 Vretenar D, Afanasjev A V, Lalazissis G A, et al. Relativistic Hartree-Bogoliubov theory: Static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. [Phys Rep](#), 2005, 409: 101–259
- 27 Meng J, Peng J, Zhang S Q, et al. Possible existence of multiple chiral doublets in ^{106}Rh . [Phys Rev C](#), 2006, 73: 037303
- 28 Liang H, Van Giai N, Meng J. Spin-isospin resonances: A self-consistent covariant description. [Phys Rev Lett](#), 2008, 101: 122502
- 29 Meng J. Relativistic Density Functional for Nuclear Structure. Singapore: World Scientific, 2016
- 30 Niu Z M, Niu Y F, Liu Q, et al. Nuclear β^+/EC decays in covariant density functional theory and the impact of isoscalar proton-neutron pairing. [Phys Rev C](#), 2013, 87: 051303
- 31 Niu Z M, Niu Y F, Liang H Z, et al. Self-consistent relativistic quasiparticle random-phase approximation and its applications to charge-exchange excitations. [Phys Rev C](#), 2017, 95: 044301
- 32 Geng L, Toki H, Meng J. Masses, deformations and charge radii-nuclear ground-state properties in the relativistic mean field model. [Prog Theor Phys](#), 2005, 113: 785–800
- 33 Hua X M, Heng T H, Niu Z M, et al. Comparative study of nuclear masses in the relativistic mean-field model. [Sci China-Phys Mech Astron](#), 2012, 55: 2414–2419
- 34 Peña-Arteaga D, Goriely S, Chamel N. Relativistic mean-field mass models. [Eur Phys J](#), 2016, 52: 1–10
- 35 Sun B, Montes F, Geng L S, et al. Application of the relativistic mean-field mass model to the r -process and the influence of mass uncertainties. [Phys Rev C](#), 2008, 78: 025806
- 36 Niu Z, Sun B, Meng J. Influence of nuclear physics inputs and astrophysical conditions on the Th/U chronometer. [Phys Rev C](#), 2009, 80: 065806
- 37 Niu Z M, Niu Y F, Liang H Z, et al. β -decay half-lives of neutron-rich nuclei and matter flow in the r -process. [Phys Lett B](#), 2013, 723: 172–176
- 38 Xu X D, Sun B, Niu Z M, et al. Reexamining the temperature and neutron density conditions for r -process nucleosynthesis with augmented nuclear mass models. [Phys Rev C](#), 2013, 87: 015805
- 39 Neufcourt L, Cao Y, Giuliani S A, et al. Quantified limits of the nuclear landscape. [Phys Rev C](#), 2020, 101: 044307
- 40 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
- 41 Utama R, Piekarewicz J. Refining mass formulas for astrophysical applications: A Bayesian neural network approach. [Phys Rev C](#), 2017, 96: 044308
- 42 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
- 43 Neufcourt L, Cao Y, Nazarewicz W, et al. Bayesian approach to model-based extrapolation of nuclear observables. [Phys Rev C](#), 2018, 98: 034318

- 44 Neufcourt L, Cao Y, Nazarewicz W, et al. Neutron drip line in the Ca region from bayesian model averaging. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 062502
- 45 Neufcourt L, Cao Y, Giuliani S, et al. Beyond the proton drip line: Bayesian analysis of proton-emitting nuclei. *Phys Rev C*, 2020, 101: 014319
- 46 Niu Z M, Fang J Y, Niu Y F. Comparative study of radial basis function and Bayesian neural network approaches in nuclear mass predictions. *Phys Rev C*, 2019, 100: 054311
- 47 Sprouse T M, Navarro Perez R, Surman R, et al. Propagation of statistical uncertainties of Skyrme mass models to simulations of r -process nucleosynthesis. *Phys Rev C*, 2020, 101: 055803
- 48 Pastore A, Neill D, Powell H, et al. Impact of statistical uncertainties on the composition of the outer crust of a neutron star. *Phys Rev C*, 2020, 101: 035804
- 49 Liu Y, Su C, Liu J, et al. Improved naive Bayesian probability classifier in predictions of nuclear mass. *Phys Rev C*, 2021, 104: 014315
- 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 Ma Y, Su C, Liu J, et al. Predictions of nuclear charge radii and physical interpretations based on the naive Bayesian probability classifier. *Phys Rev C*, 2020, 101: 014304
- 52 Wu D, Bai C L, Sagawa H, et al. Calculation of nuclear charge radii with a trained feed-forward neural network. *Phys Rev C*, 2020, 102: 054323
- 53 Akkoyun S, Bayram T, Kara S O, et al. An artificial neural network application on nuclear charge radii. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2013, 40: 055106
- 54 Akkoyun S, Kaya H, Torun Y. Estimations of first $2+$ energy states of even-even nuclei by using artificial neural networks. *Indian J Phys*, 2021, doi: 10.1007/s12648-021-02099-w
- 55 Lasserri R D, Regnier D, Ebran J P, et al. Taming nuclear complexity with a committee of multilayer neural networks. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 162502
- 56 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
- 57 Costiris N J, Mavrommatis E, Gernoth K A, et al. Decoding β -decay systematics: A global statistical model for β half-lives. *Phys Rev C*, 2009, 80: 044332
- 58 Rodríguez U B, Vargas C Z, Goncalves M, et al. Alpha half-lives calculation of superheavy nuclei with $Q\alpha$ -value predictions based on the Bayesian neural network approach. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2019, 46: 115109
- 59 Baños Rodríguez U, Zúñiga Vargas C, Gonçalves M, et al. Bayesian neural network improvements to nuclear mass formulae and predictions in the Super Heavy Elements region. *Europhys Lett*, 2019, 127: 42001
- 60 Yuan Z, Tian D, Li J, et al. Magnetic moment predictions of odd- A nuclei with the Bayesian neural network approach. *Chin Phys C*, 2021, 45: 124107
- 61 Bishop C M. Pattern Recognition and Machine Learning. New York: Springer Science & Business Media, 2006
- 62 Neal R M. Bayesian Learning for Neural Networks. New York: Springer Science & Business Media, 1996
- 63 Duflo J, Zuker A P. Microscopic mass formulas. *Phys Rev C*, 1995, 52: R23–R27
- 64 Koura H, Tachibana T, Uno M, et al. Nuclidic mass formula on a spherical basis with an improved even-odd term. *Prog Theor Phys*, 2005, 113: 305–325

Nuclear mass prediction using a neural network approach

TIAN DaChuan², CHEN ShouWan¹ & NIU ZhongMing^{1*}

¹*School of Physics and Optoelectronics Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China;*

²*Astronomy Department, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*

The nuclear mass contains abundant information about the nuclear structure, which is one of the most important properties of atomic nuclei. In this work, feedforward neural network and Bayesian neural network methods are used to study nuclear mass. By introducing two physical quantities related to the nuclear pairing effect and the shell effect at the input layer of the network, and considering the mass prediction of existing nuclear models at the output layer of the network, that is, learning the mass difference between the predicted experimental data by existing nuclear models, the predictive ability of the proposed model is significantly improved. Compared with the optimization algorithms commonly used in feedforward neural networks, Bayesian methods have great advantages in optimizing neural network parameters and significantly improve the description of the pairing and shell effects in mass predictions.

nuclear mass, neural network, Bayesian approach, mass model

PACS: 21.10.Dr, 21.60.-n, 26.30.Hj, 21.30.Fe

doi: [10.1360/SSPMA-2021-0301](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0301)