

基于神经网络波函数的粲偶素势模型研究 *

史焕辰¹⁾ 崔二亮^{1)†} 周丹^{2)†}

1) (西北农林科技大学, 理学院, 陕西杨凌 712100)

2) (河北师范大学, 物理学院, 河北石家庄 050024)

本研究基于神经网络波函数发展了一套完整的粲偶素势模型参数拟合框架, 旨在解决传统唯象势模型参数难以快速响应实验进展的问题。该方法将神经网络波函数作为径向薛定谔方程的变分解, 通过显式构造节点因子与残差网络结构, 精确求解粲偶素体系的基态与激发态; 在此基础上, 采用最大似然估计以及拉普拉斯近似对势模型参数进行推断, 以获得最优参数及其不确定度。应用该框架对粲偶素势模型的五个势参数进行联合优化, 优化后参数为: 正反粲夸克质量 $m_c = m_{\bar{c}} = 1.4801 \pm 0.0055$ GeV, 强相互作用耦合常数 $\alpha_s = 0.5459 \pm 0.0120$, 弦张力 $\sigma_{\text{lin}} = 0.1442 \pm 0.0028$ GeV², 涂抹半径 $\sigma_{\text{smear}} = 1.1047 \pm 0.0568$ GeV。相比于原始参数, 优化后模型对 16 个已知粲偶素态的均方根偏差 (RMSD) 从 26.26 MeV 降至 24.62 MeV。基于优化参数预测了包括 S、P、D、F 波在内的粲偶素质量谱, 结果符合势模型理论预期, 预测的高角动量态为未来实验搜寻提供了理论参考。

关键词: 粲偶素, 势模型, 量子蒙特卡洛, 神经网络波函数

PACS: 14.40.Lb, 12.39.Pn, 02.70.Ss, 84.35.+i

1 引言

粲偶素作为由正反粲夸克构成的束缚态体系, 是研究量子色动力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) 在非微扰能区的重要系统。实验上, 粲偶素谱的研究经历了从早期 e^+e^- 对撞实验到近年来北

* 国家自然科学基金 (批准号 12005172) 资助的课题。

† 通信作者. E-mail: erliang.cui@nwafu.edu.cn

† 通信作者. E-mail: danzhou@hebtu.edu.cn

京谱仪 (BESIII)、大型强子对撞机 (LHCb) 等高精度实验的长期积累, 获得了大量关于粲偶素态的质量、宽度、衰变分支比等精确数据^[1-7]。与此同时, 理论上的夸克势模型通过引入唯象的势函数, 在描述粲偶素能谱方面取得了显著成功^[8-12]。然而, 传统的势参数拟合通常依赖于手动调整或 χ^2 最小化^[13], 不同势函数形式的引入使得参数空间更为复杂, 传统拟合方法的计算流程相对繁琐, 难以快速响应实验进展的实时更新。

近年来, 机器学习 (Machine Learning, ML) 技术, 尤其是神经网络在求解偏微分方程和量子力学方程中展现出强大的能力^[14-20]。其中, 神经网络波函数 (Neural Network Wavefunction, NNWF) 作为一种变分拟设形式, 能够以高精度逼近量子系统的基态和激发态, 并被成功应用于强子物理的质量计算^[21-23]。相比传统的变分方法, NNWF 结合自动微分 (Automatic Differentiation, AD) 技术, 可以精确计算能量期望值关于势参数的梯度, 消除了有限差分带来的截断误差, 从而使得基于梯度的全局优化算法能够高效地, 在高维参数空间中搜索最优解, 这一特性为构建自动化势参数拟合框架提供了数学基础。

本文在一种基于神经网络波函数的量子求解器中^[24], 发展了一套完整势参数拟合工具, 用于粲偶素质量谱及其他重介子的唯象学研究。该工具将机器学习与传统的联合拟合方法结合, 能够自动完成神经网络训练与势参数优化, 为强子质量谱的高精度计算提供了新思路和方法。当实验数据更新时, 可快速重新拟合, 使理论计算始终与实验保持同步。这一特性对于理论上解释当前高能物理不断涌现的强子谱实验结果和理论上预言新强子态尤为重要。

2 理论与方法

2.1 唯象势模型

在非相对论性夸克模型中, 粲偶素体系由一对正反粲夸克通过唯象势相互作用描述。势能项 $V_{c\bar{c}}(r)$ 包含了从量子色动力学在非微扰能区唯象提取的相互作用, 其形式综合考虑了短程的单胶子交换、长程的禁闭效应以及自旋相关的精细结构^[10]。具体表达式如下:

$$V_{c\bar{c}}(r) = C_f \frac{\alpha_s}{r} + \sigma_{\text{lin}} r + \frac{32\pi\alpha_s}{9m_c m_{\bar{c}}} \frac{\sigma_{\text{smear}}^3}{\pi^{3/2}} e^{-\sigma_{\text{smear}}^2 r^2} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) + \frac{1}{m_c m_{\bar{c}}} \left[\left(\frac{2\alpha_s}{r^3} - \frac{\sigma_{\text{lin}}}{2r} \right) \mathbf{1} \cdot \mathbf{s} + \frac{4\alpha_s}{r^3} T_{\text{force}} \right], \quad (1)$$

其中 r 为正反夸克之间的相对距离, m_c 和 $m_{\bar{c}}$ 分别为粲夸克和反粲夸克的质量, $C_f = -4/3$ 为色因子, α_s 为强相互作用耦合常数, σ_{lin} 为弦张力常数, σ_{smear} 为涂抹半径参数, $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$ 为自旋-自旋耦合算符, $\mathbf{1} \cdot \mathbf{s}$

为自旋-轨道耦合算符， T_{force} 为张量相互作用算符。

精细作用项中，自旋-轨道耦合项以及张量力项在原点附近具有 $1/r^3$ 的发散行为，直接作为势能项纳入薛定谔方程求解时会使基态能量发散^[25]。由于波函数在原点附近受离心势抑制，微扰修正有限且收敛，因此，本文采用微扰论方法。在仅包含 $V_{\text{cornell}} = C_f \alpha_s / r + \sigma_{\text{lin}} r$ 和 $V_{\text{ss}} = \frac{32\pi\alpha_s}{9m_c m_{\bar{c}}} \frac{\sigma_{\text{smear}}^3}{\pi^{3/2}} e^{-\sigma_{\text{smear}}^2 r^2} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j)$ 的哈密顿量下求解体系的本征波函数，然后将 $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ 耦合项与张量力项在该波函数下的期望值作为能级的微扰修正。

上述势模型共包含五个可调参数：正反粲夸克质量 m_c 与 $m_{\bar{c}}$ 、强相互作用耦合常数 α_s 、弦张力 σ_{lin} 、高斯涂抹半径 σ_{smear} 。在传统方法中，这些参数通过拟合实验能谱得到，通常采用手动调整或 χ^2 最小化流程，本文引入基于神经网络波函数的变分方法，将势参数与波函数进行联合优化，实现从实验能谱到唯象势模型自动化拟合。

2.2 神经网络波函数优化方法

为了精确求解径向薛定谔方程并获得高精度本征波函数，我们引入神经网络波函数作为变分解，并特别引入了可显式控制节点数目的构造方法，以精确描述激发态波函数的节点结构。设约化径向波函数 $u(r; \mathbf{w})$ 由神经网络 $\mathcal{N}(r; \mathbf{w})$ 表示：

$$u(r; \mathbf{w}) = r \cdot \mathcal{C}(r) \cdot \mathcal{N}(r; \mathbf{w}) \cdot \mathcal{P}(r), \quad (2)$$

其中 $r = \|r\|$ 为径向距离， \mathbf{w} 为神经网络中的待优化参数， $\mathcal{C}(r)$ 为约束函数， $\mathcal{N}(r; \mathbf{w})$ 为可训练的神经网络，选用全连接网络的多层感知机结构，网络输入为径向坐标 r ，输出为一个标量值， $\mathcal{P}(r)$ 为节点因子。为保证波函数在无穷远处的渐近行为符合物理要求，我们引入约束函数

$$\mathcal{C}(r) = \exp(-\alpha r^2) \quad (3)$$

其中 α 为可调衰减系数。该高斯包络形式确保了波函数在远离原点时指数衰减，符合束缚态波函数的边界条件。

波函数的节点（即零点）是激发态的关键特征，直接影响能量本征值。本文通过可训练的节点参数实现节点结构的灵活构造：

$$\mathcal{P}(r) = \prod_{i=1}^M \tanh(\gamma(r - r_i)), \quad (4)$$

其中 M 为节点数量, $\{r_i\}_{i=1}^M$ 为可训练节点参数, γ 为缩放因子, 用于控制节点处波函数的过渡宽度。可根据目标激发态的节点结构自由设置节点数目, 通常第 n 个激发态波函数在径向具有 $n-1$ 个节点, 节点位置 r_i 作为网络参数参与训练, 使得网络能够自动优化节点分布使能量最小化, 无需预先指定节点位置。使用 \tanh 函数替代简单的线性因子 $r - r_i$, 使得节点处波函数光滑过零, 避免线性节点带来的梯度突变, 提高训练稳定性。

为了增强网络表达能力和训练稳定性, 我们采用残差连接结构。网络由多个隐藏层构成, 每层神经元数量可自定义。第一层为线性变换层, 将输入映射到隐藏空间; 后续层使用残差块, 其结构为:

$$\mathbf{h}^{(l+1)} = \mathbf{h}^{(l)} + \sigma(\mathbf{W}_2 \sigma(\mathbf{W}_1 \mathbf{h}^{(l)} + \mathbf{b}_1) + \mathbf{b}_2), \quad (5)$$

其中 σ 为激活函数。本文采用高斯激活函数, 定义为

$$\sigma(x) = \exp(-\beta x^2), \quad (6)$$

该激活函数具有局部响应特性, 适合量子态波函数的光滑性要求。

采用能量方差最小化优化方案, 损失函数定义为:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \frac{\sum_i^N (E_{L,i}(\mathbf{w}) - \bar{E}_L)^2}{\int u^2(r; \mathbf{w}) dr}, \quad (7)$$

其中 N 为采样点数, $E_{L,i}(\mathbf{w})$ 为第 i 个采样点处的局部能量, 其定义为 $E_{L,i}(\mathbf{w}) = H u_i(r; \mathbf{w}) / u_i(r; \mathbf{w})$, H 为径向哈密顿算符, \bar{E}_L 为平均局部能量。通过规定节点数 M 及轨道角动量 l , 本方法可自动计算对应激发态。

2.3 势模型参数拟合

得到本征波函数及本征能谱后, 采用基于高斯似然的最大似然估计进行势模型参数拟合。为量化参数的不确定度, 进一步引入拉普拉斯近似: 在最大似然估计点处对负对数似然进行二阶泰勒展开, 将似然函数近似为高斯分布, 从而获得参数的最优估计与协方差矩阵。

由于实验误差跨度极大, 直接采用 χ^2 拟合会导致高精度数据在拟合中占主导地位, 低精度数据贡献被严重压制。考虑到势模型的近似性以及计算本身的不确定性, 我们选取 5 MeV 作为固定理论误差, 与实验误差的平方和作为总体误差项, 避免高精度数据在拟合中过度主导, 为势模型下把一系列粲偶素态作

为整体进行联合分析提供了计算依据。

在高斯似然假设下，定义负对数似然函数为：

$$\mathcal{L}_{\text{NLL}}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \frac{(E_i^{\text{exp}} - E_i^{\text{th}}(\boldsymbol{\theta}))^2}{\sigma_i^{\text{exp}2} + \sigma_{\text{th}}^2}, \quad (8)$$

其中 $\boldsymbol{\theta} = (m_c, m_{\bar{c}}, \alpha_s, \sigma_{\text{lin}}, \sigma_{\text{smear}})$ 为待优化参数， N 为实验粒子总数， $E_i^{\text{th}}(\boldsymbol{\theta})$ 为质量计算值， σ_i^{exp} 为实验误差， σ_{th} 为固定理论误差。通过最小化 $\mathcal{L}_{\text{NLL}}(\boldsymbol{\theta})$ 得到最大似然估计点 $\boldsymbol{\theta}_{\text{MLE}}$ 作为势模型的最优参数组合。

在 $\boldsymbol{\theta}_{\text{MLE}}$ 点处计算黑塞矩阵 (Hessian Matrix) $\mathbf{H} = \nabla_{\boldsymbol{\theta}}^2 \mathcal{L}_{\text{NLL}}(\boldsymbol{\theta})|_{\boldsymbol{\theta}_{\text{MLE}}}$ ，则参数协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{H}^{-1}$ ，参数不确定度由 $\sqrt{\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma})}$ 给出。该方法利用自动微分完成优化与不确定度评估，输出势模型参数的最优值及其协方差。

3 结果与讨论

3.1 训练设置

所有计算均基于统一的计算平台：CPU 采用 Intel Core i7-13700K，GPU 使用 NVIDIA GeForce RTX 4060 Ti。神经网络模型与训练流程完全基于 PyTorch 框架实现，并利用 CUDA 加速张量运算。网络输入为标量相对距离 r ，随后经过 6 个隐藏层、每层 128 个神经元，其中第 1 层为标准线性层，后 5 层为残差块，最终输出 1 个波函数标量值。

约束函数 (式 (3)) 中的衰减系数取固定值 $\alpha = 0.008$ ，节点因子 (式 (4)) 中的缩放因子同样取固定值 $\gamma = 1.0$ ；高斯激活函数 (式 (6)) 中的参数 β 为可训练参数，初始值设为 1.0。蒙特卡洛采样点数 $N = 1000$ ，训练采用 AdamW 优化器，初始学习率为 10^{-3} ，权重衰减系数为 10^{-4} 。学习率调度器采用自定义的 LambdaLR，前 2000 步保持不变，之后每 2000 步衰减为原来的 0.1 倍。为兼顾计算精度与计算成本，在 100 步预热后，当能量方差降至 3×10^{-5} 时停止训练，典型训练步数约为 1000–3000 步。为避免由特定随机种子选择引入人为偏好，本文主计算未预先固定随机种子；因此，神经网络参数初始化和蒙特卡洛采样过程均保持其自然随机性。

3.2 势参数优化

势模型的原始参数组合来自文献^[13]，参数分别为 $m_c = m_{\bar{c}} = 1.4794$ GeV， $\alpha_s = 0.5461$ ， $\sigma_{\text{lin}} = 0.1425$ GeV²， $\sigma_{\text{smear}} = 1.09467$ GeV。优化后的参数组合为 $m_c = m_{\bar{c}} = 1.4800811$ GeV， $\alpha_s = 0.5458532$ ，

$\sigma_{\text{lin}} = 0.1441820 \text{ GeV}^2$, $\sigma_{\text{smear}} = 1.1046847 \text{ GeV}$ 。不确定度分别为: $\Delta m_c = \Delta m_{\bar{c}} = 0.0054706 \text{ GeV}$, $\Delta\alpha_s = 0.0120337$, $\Delta\sigma_{\text{lin}} = 0.0028496 \text{ GeV}^2$, $\Delta\sigma_{\text{smear}} = 0.0567969 \text{ GeV}$ 。其中 m_c 以及 σ_{lin} 的不确定度较低, 偏差较小, 而 σ_{smear} 的不确定度较高, 约 56.8 MeV。

选取 Particle Data Group 发布的最新粲偶素实验值^[1] (截止至 2025 年 1 月), 使用原始参数组合以及优化后新参数组合分别计算出能谱并给出相对偏差 $(E^{\text{th}} - E^{\text{exp}})/E^{\text{exp}} \times 100\%$, 其中 E^{th} 计算值, E^{exp} 为实验值。

表 1 势参数优化前后的粲偶素质量对比

Table 1. Comparison of charmonium masses before and after potential parameter optimization

粒子态	实验值	计算值 (原始参数)	计算值 (新参数)	相对偏差 (原始参数)	相对偏差 (新参数)
$\eta_c(1^1S_0)$	2984.1 ± 0.4	2982.35	2985.08	0.0586%	0.0328% ↓
$J/\psi(1^3S_1)$	3096.900 ± 0.006	3090.46	3094.57	0.2079%	0.0751% ↓
$\eta_c(2^1S_0)$	3637.8 ± 0.6	3630.73	3637.54	0.1943%	0.0072% ↓
$\psi(2^3S_1)$	3686.097 ± 0.011	3672.28	3679.73	0.3750%	0.1727% ↓
$\psi(3^3S_1)$	4039.6 ± 4.3	4071.65	4082.67	0.7933%	1.0663% ↑
$\psi(4^3S_1)$	4415 ± 5	4406.52	4419.31	0.1921%	0.0975% ↓
$h_c(1^1P_1)$	3525.37 ± 0.14	3515.18	3521.81	0.2889%	0.1009% ↓
$\chi_{c0}(1^3P_0)$	3414.71 ± 0.30	3427.04	3418.48	0.3612%	0.1104% ↓
$\chi_{c1}(1^3P_1)$	3510.67 ± 0.05	3505.71	3509.20	0.1414%	0.0419% ↓
$\chi_{c2}(1^3P_2)$	3556.17 ± 0.07	3554.59	3567.64	0.0443%	0.3225% ↑
$\chi_{c0}(2^3P_0)$	3922.1 ± 1.8	3867.16	3881.39	1.4009%	1.0380% ↓
$\chi_{c2}(2^3P_2)$	3922.5 ± 1.0	3967.51	3974.43	1.1474%	1.3238% ↑
$\psi(1^3D_1)$	3773.7 ± 0.7	3785.88	3794.86	0.3228%	0.5608% ↑
$\psi_2(1^3D_2)$	3823.51 ± 0.34	3800.36	3808.69	0.6054%	0.3875% ↓
$\psi_3(1^3D_3)$	3842.71 ± 0.20	3806.08	3813.89	0.9533%	0.7499% ↓
$\psi(2^3D_1)$	4191 ± 5	4143.05	4149.04	1.1441%	1.0012% ↓

注: 所有质量的单位均为 MeV, 不同参数下的计算值均来自本文所使用的计算框架。↓ 为相对偏差下降的态, ↑ 为相对偏差上升的态。

表1对比了新参数组合与原始参数组合下的能谱相对偏差，优化后多数已知态的相对偏差有所降低。为了量化势参数优化对能谱描述的改进，我们计算了 16 个已知粲偶素态的计算值与实验值的均方根偏差 (Root Mean Square Deviation, RMSD)，其定义为：

$$\text{RMSD} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i^{\text{th}} - E_i^{\text{exp}})^2}, \quad (9)$$

其中 E_i^{th} 为计算值， E_i^{exp} 为实验值。优化前 RMSD 为 26.26 MeV，优化后降至 24.62 MeV，这表明模型参数经过优化后，整体偏差水平些许下降。此外，部分高激发态的相对偏差有所增加，分别为 1^3P_2 、 1^3D_1 、 2^3P_2 以及 3^3S_1 ，该偏差的增加可能是由于提升低精度数据的贡献而引入的。另外，由于理论中通常将实验值 $\psi(4040)$ 归类为 3^3S_1 ，然而实验中明确指出 4.0 GeV 附近存在显著的阈值效应（例如 $D\bar{D}$ 、 $D^*\bar{D}$ 等开粲道的阈值），导致该能区可能存在多个共振峰的混合或复杂干涉，因此，该态在拟合中可能不适宜作为纯 3^3S_1 处理，未来可考虑引入耦合道效应^[1,26-28]。

考虑到参数不确定性以及计算精度，我们取小数点后 4 位作为最终结果： $m_c = m_{\bar{c}} = 1.4801 \pm 0.0055$ GeV， $\alpha_s = 0.5459 \pm 0.0120$ ， $\sigma_{\text{lin}} = 0.1442 \pm 0.0028$ GeV²， $\sigma_{\text{smear}} = 1.1047 \pm 0.0568$ GeV。

3.3 粲偶素质量谱预测

基于上述优化后的势参数，我们进一步计算了更多可能的粲偶素质量谱，涵盖 S 、 P 、 D 、 F 波等多个轨道角动量激发态，结果列于表 2，径向概率密度分布见附录A。为便于在统一谱表中比较已知态与待观测态的位置关系，表2保留了实验已确认的粒子态并以粗体标出，同时列出了优化参数下预测的其余高激发态和高角动量态。

从能级结构来看， n^3S_1 系列 (J/ψ 、 $\psi(2S)$ 、 $\psi(3S)$ 、 $\psi(4S)$) 的相邻能级间隔分别为 585.16 MeV、402.94 MeV、336.63 MeV，随主量子数增大逐渐减小，符合势模型中夸克禁闭势的预期行为。 n^1S_0 系列 (η_c 粒子) 亦呈现相同趋势。对于 P 波态，精细结构能级顺序为 $\chi_{c0} < \chi_{c1} < h_c < \chi_{c2}$ ，与实验观测的能级顺序一致，表明模型对自旋相关相互作用的描述是合理的。

在粲偶素态预言方面，本模型预测了 $\chi_{cJ}(n^3F_J)$ 和 $\eta_{c3}(n^1F_3)$ 系列的高角动量态 ($l = 3$)，其质量分布在 4030 至 4930 MeV 区间，与其他模型的理论预言基本一致^[29-33]。这些态尚未被实验确认，未来在 BESIII、Belle II、LHCb 等高精度对撞实验中，通过合适的产生过程（如双光子产生、辐射跃迁等）有望被观测到。

表 2 新参数组合预测的粲偶素质量谱

Table 2. Charmonium mass spectra predicted by the new parameter set

粒子态	质量 (MeV)	粒子态	质量 (MeV)	粒子态	质量 (MeV)
$\eta_c(1^1S_0)$	2985.08	$h_c(4^1P_1)$	4599.04	$\eta_{c3}(1^1F_3)$	4035.37
$J/\psi(1^3S_1)$	3094.57	$\chi_{c0}(4^3P_0)$	4548.98	$\chi_{c2}(1^3F_2)$	4040.40
$\eta_c(2^1S_0)$	3637.54	$\chi_{c1}(4^3P_1)$	4597.01	$\chi_{c3}(1^3F_3)$	4038.76
$\psi(2^3S_1)$	3679.73	$\chi_{c2}(4^3P_2)$	4627.69	$\chi_{c4}(1^3F_4)$	4030.69
$\eta_c(3^1S_0)$	4053.60	$\eta_{c2}(1^1D_2)$	3807.92	$\eta_{c3}(2^1F_3)$	4362.51
$\psi(3^3S_1)$	4082.67	$\psi(1^3D_1)$	3794.86	$\chi_{c2}(2^3F_2)$	4362.90
$\eta_c(4^1S_0)$	4396.46	$\psi_2(1^3D_2)$	3808.69	$\chi_{c3}(2^3F_3)$	4364.60
$\psi(4^3S_1)$	4419.31	$\psi_3(1^3D_3)$	3813.89	$\chi_{c4}(2^3F_4)$	4360.61
$h_c(1^1P_1)$	3521.81	$\eta_{c2}(2^1D_2)$	4168.68	$\eta_{c3}(3^1F_3)$	4657.63
$\chi_{c0}(1^3P_0)$	3418.48	$\psi(2^3D_1)$	4149.04	$\chi_{c2}(3^3F_2)$	4660.06
$\chi_{c1}(1^3P_1)$	3509.20	$\psi_2(2^3D_2)$	4169.32	$\chi_{c3}(3^3F_3)$	4660.33
$\chi_{c2}(1^3P_2)$	3567.64	$\psi_3(2^3D_3)$	4179.08	$\chi_{c4}(3^3F_4)$	4655.67
$h_c(2^1P_1)$	3942.71	$\eta_{c2}(3^1D_2)$	4485.30	$\eta_{c3}(4^1F_3)$	4930.43
$\chi_{c0}(2^3P_0)$	3881.39	$\psi(3^3D_1)$	4463.47	$\chi_{c2}(4^3F_2)$	4929.10
$\chi_{c1}(2^3P_1)$	3932.72	$\psi_2(3^3D_2)$	4484.51	$\chi_{c3}(4^3F_3)$	4932.13
$\chi_{c2}(2^3P_2)$	3974.43	$\psi_3(3^3D_3)$	4498.95	$\chi_{c4}(4^3F_4)$	4930.71
$h_c(3^1P_1)$	4290.97	$\eta_{c2}(4^1D_2)$	4772.61		
$\chi_{c0}(3^3P_0)$	4190.25	$\psi(4^3D_1)$	4747.05		
$\chi_{c1}(3^3P_1)$	4276.53	$\psi_2(4^3D_2)$	4771.57		
$\chi_{c2}(3^3P_2)$	4336.74	$\psi_3(4^3D_3)$	4789.99		

4 结 论

本文提出了一套基于神经网络波函数的粲偶素势模型参数拟合框架，实现了从实验能谱到唯象势模型的自动化拟合。通过将神经网络波函数作为径向薛定谔方程的变分解，结合显式的节点因子构造与残差网络结构，该方法能够高精度地求解粲偶素体系的基态与激发态。在此基础上，采用最大似然估计以及拉普拉斯近似对势模型参数进行推断，以获得参数的最优估计及其不确定度。

在粲偶素的唯象势模型中，我们对势参数进行了联合优化，优化后的参数为 $m_c = 1.4801 \pm 0.0055$ GeV、 $\alpha_s = 0.5459 \pm 0.0120$ 、 $\sigma_{\text{lin}} = 0.1442 \pm 0.0028$ GeV²、 $\sigma_{\text{smear}} = 1.1047 \pm 0.0568$ GeV。优化后，模型对 16 个已知粲偶素态的 RMSD 从 26.26 MeV 降至 24.62 MeV。这一结果表明，该框架能够完成势参数的自动化推断，并在当前模型形式下使整体偏差估计些许下降。基于优化后的参数，我们预测了包括多种高激发态在内的粲偶素质量谱，能级间隔与精细结构的分析表明，预测谱符合势模型的基本预期， F 波等尚未实验确认的态可为未来 BESIII、Belle II、LHCb 等实验的搜寻提供理论参考。

需要指出的是，本文框架仍存在若干局限性。首先，当前研究建立在非相对论势模型基础上，尚未系统纳入更高阶相对论修正。自旋相关项采用微扰处理，由于部分三重态对自旋相关相互作用较为敏感，其能级结果在不同神经网络初始化和蒙特卡洛采样下会表现出一定的数值波动性，这也反映出当前微扰处理在高精度计算中的局限。其次，本文尚未显式考虑开粲阈值附近的耦合道效应，因此对于受阈值效应影响较强的谱线，其描述能力仍然有限。未来工作中，我们将进一步发展更稳定的数值处理方法，以替代或改进当前的微扰处理方式，特别是针对高阶奇异项的处理；同时结合相对论修正和耦合道效应，以进一步提高谱学计算的稳定性和物理描述能力。

本方法的优势在于将机器学习技术融入传统强子唯象学，在保持物理模型透明性的同时实现了参数推断的自动化与不确定性量化。该框架不依赖于特定的势函数形式，原则上可推广至底偶素、 B_c 介子等其他重夸克体系，也可用于研究开粲道耦合效应或拓展到包含介子-介子混合的更为复杂的谱学问题。

A 附录

本附录展示了通过神经网络波函数方法获得的粲偶素各轨道角动量通道的径向概率密度分布 $P(r) = |u(r)|^2$ 。

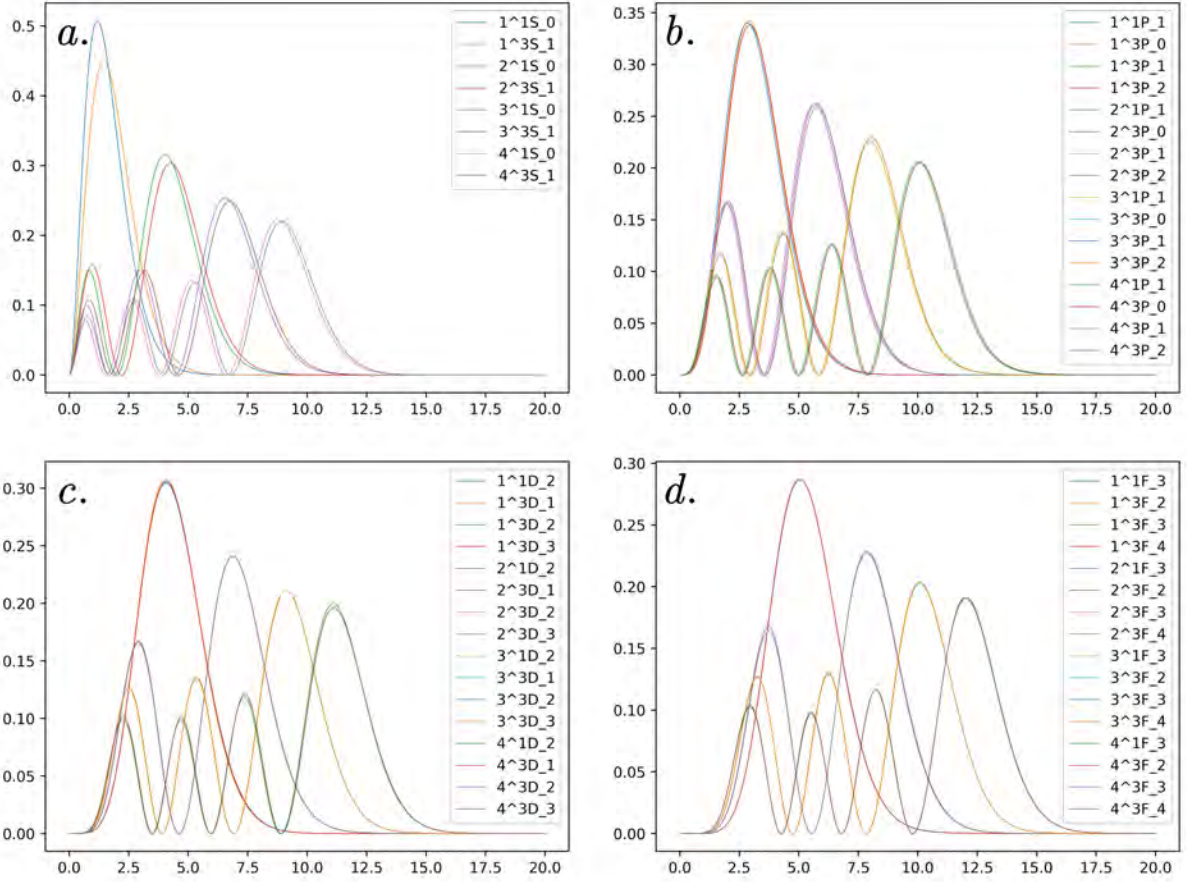


图 1 粲偶素径向概率密度分布 $|u(r)|^2$ 。图中 (a) - (d) 分别对应 $l = 0$ (S 波)、 $l = 1$ (P 波)、 $l = 2$ (D 波)、 $l = 3$ (F 波) 各轨道角动量通道。不同颜色曲线代表不同主量子数 n 的激发态。各态波函数节点数符合 $n - 1$ 规律，峰值位置随 n 增大向外移动，且 l 越大，原点附近波函数压制越明显。

Fig. 1. Radial probability density distribution $|u(r)|^2$ of charmonium. Panels (a)-(d) correspond to orbital angular momentum channels with $l = 0$ (S-wave), $l = 1$ (P-wave), $l = 2$ (D-wave), and $l = 3$ (F-wave), respectively. Curves of different colors represent excited states with different principal quantum numbers n . The number of nodes in each wavefunction follows the $n - 1$ rule, and the peak positions shift outward as n increases. Moreover, the larger the l , the more pronounced the suppression of the wavefunction near the origin.

参考文献

- [1] Navas S, et al. (Particle Data Group) 2024 *Physical Review D* **110** 030001

- [2] Aubert J J, et al. (E598 Collaboration) 1974 *Physical Review Letters* **33** 1404
- [3] Augustin J E, et al. (SLAC-SP-017 Collaboration) 1974 *Physical Review Letters* **33** 1406
- [4] Appelquist T, Politzer H D 1975 *Physical Review Letters* **34** 43
- [5] Bai J Z, et al. (BES Collaboration) 1998 *Physical Review Letters* **81** 3091
- [6] Yuan C Z 2021 *National Science Review* **8** nwab182
- [7] Wang X, Liu X, Gao Y 2026 *Rev. Mod. Phys.* **98** 021001
- [8] Eichten E, Gottfried K, Kinoshita T, Lane K D, Yan T M 1978 *Physical Review D* **17** 3090
- [9] Bykov A A, Dremin I M, Leonidov A V 1984 *Physics-Uspekhi* **27** 321
- [10] Godfrey S, Isgur N 1985 *Physical Review D* **32** 189
- [11] Lucha W, Schöberl F F, Gromes D 1991 *Physics Reports* **200** 127
- [12] Bokade C A, Bhaghyesh 2025 *Physical Review D* **111** 014030
- [13] Barnes T, Godfrey S, Swanson E S 2005 *Physical Review D* **72** 054026
- [14] Carleo G, Troyer M 2017 *Science* **355** 602
- [15] Pfau D, Spencer J S, Matthews A G D G, Foulkes W M C 2020 *Physical Review Research* **2** 033429
- [16] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E 2019 *Journal of Computational Physics* **378** 686
- [17] Han J, Zhang L, E W 2019 *Journal of Computational Physics* **399** 108929
- [18] Vicentini F, Hofmann D, Szabó A, Wu D, Roth C, Giuliani C, Pescia G, Nys J, Vargas-Calderon V, Astrakhantsev N, Carleo G 2022 *SciPost Physics Codebases* 7
- [19] Manzhos S 2020 *Machine Learning: Science and Technology* **1** 013002
- [20] Han J, Lu J, Zhou M 2020 *Journal of Computational Physics* **423** 109792
- [21] Mutuk H 2019 *Advances in High Energy Physics* **2019** 3105373

- [22] Mutuk H 2019 *Chinese Physics C* **43** 093103
- [23] Wu W L, Meng L, Zhu S L 2026 *Physical Review Letters* **136** 071901
- [24] Shi H C, Cui E L, Zhou D 2025 arXiv: 2510.17490v2 [quant-ph]
- [25] Ding Y B, Li X Q, Shen P N 2000 *Communications in Theoretical Physics* **33** 613
- [26] Ablikim M, et al. (BES Collaboration) 2008 *Physics Letters B* **660** 315
- [27] Seth K K 2005 *Physical Review D* **72** 017501
- [28] Mo X, Yuan C, Wang P 2010 *Physical Review D* **82** 077501
- [29] Radford S F, Repko W W 2007 *Physical Review D* **75** 074031
- [30] Mahmood T, Darwish J A, Hussain T, Ahmed M, Sherwani R A K 2024 *Advances in High Energy Physics* **2024** 5195790
- [31] Cao L, Yang Y C, Chen H 2012 *Few-Body Systems* **53** 327
- [32] Liao X, Manke T 2002 arXiv: hep-lat/0210030 [hep-lat]
- [33] Liu L, Moir G, Peardon M, Ryan S M, Thomas C E, Vilaseca P, Dudek J J, Edwards R G, Joó B, Richards D G 2012 *Journal of High Energy Phys.* **2012** 126

录用稿件，非最终出版稿

Study of charmonium potential models based on neural network wave functions*

SHI Huanchen¹⁾ CUI Erliang^{1)†} ZHOU Dan^{2)†}

1) (*College of Science, Northwest A&F University, Yangling 712100, China*)

2) (*Department of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China*)

Abstract

This study presents a comprehensive framework for fitting the phenomenological potential model parameters of charmonium by integrating neural network wavefunctions. This approach overcomes the limitations of traditional fitting methods, which adapt slowly to new experimental data. In this method, the radial Schrödinger equation is solved variationally using a neural network wavefunction ansatz. The wavefunction incorporates an explicitly constructed node factor that accurately represents the nodal structure of excited states. It also employs a residual network architecture to enhance expressiveness and training stability. The number of nodes is specified according to the target radial excitation, while the node positions are treated as trainable parameters, enabling the neural network to optimize the excited-state wavefunctions without preassigning their nodal locations. The energy variance is used as the training objective, and automatic differentiation is employed to calculate the derivatives required in the variational optimization and subsequent parameter inference. After determining the eigenwavefunctions and eigenenergies, the potential parameters are inferred via maximum likelihood estimation with the Laplace approximation, yielding optimal parameter values and their uncertainties. In the likelihood construction, a fixed theoretical uncertainty is introduced together with the experimental errors so that the fitting procedure reflects both experimental precision and the intrinsic approximation of the potential model. The

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12005172).

† Corresponding author. E-mail: erliang.cui@nwafu.edu.cn

† Corresponding author. E-mail: danzhou@hebtu.edu.cn

method is applied to a phenomenological charmonium potential that includes a Coulomb term, a linear confinement term, a smeared spin-spin interaction, and spin-orbit and tensor forces treated perturbatively. The fitted parameters are the charm quark mass $m_c = m_{\bar{c}} = 1.4801 \pm 0.0055$ GeV, the strong coupling constant $\alpha_s = 0.5459 \pm 0.0120$, the string tension $\sigma_{\text{lin}} = 0.1442 \pm 0.0028$ GeV², and the smearing radius $\sigma_{\text{smear}} = 1.1047 \pm 0.0568$ GeV. Compared with the original parameters, the optimized model improves the agreement with the 16 known charmonium states from the Particle Data Group. The root-mean-square deviation is reduced from 26.26 MeV to 24.62 MeV. Based on the optimized parameters, the mass spectrum of charmonium is predicted up to high excitation levels, including S, P, D, and F waves. The predicted energy level spacings and fine structures are consistent with the expected behavior of the confining potential, indicating that the optimized parameters retain the main physical features of the conventional potential model. Notably, the framework provides predictions for unobserved high-angular-momentum states such as the n^3F_J and n^1F_3 series, which may serve as references for future experimental searches at facilities such as BESIII, Belle II and LHCb. The main innovation of this work is to combine neural network wavefunctions with statistical parameter inference, so that the solution of the Schrödinger equation, the fitting of potential parameters, and the quantification of parameter uncertainties are incorporated into an automated and extensible workflow. The proposed framework can be readily extended to other heavy quark systems such as bottomonium and B_c mesons, as well as to more complex spectroscopic problems involving coupled-channel effects.

Keywords: charmonium, potential model, quantum Monte Carlo, neural network wavefunction

PACS: 14.40.Lb, 12.39.Pn, 02.70.Ss, 84.35.+i

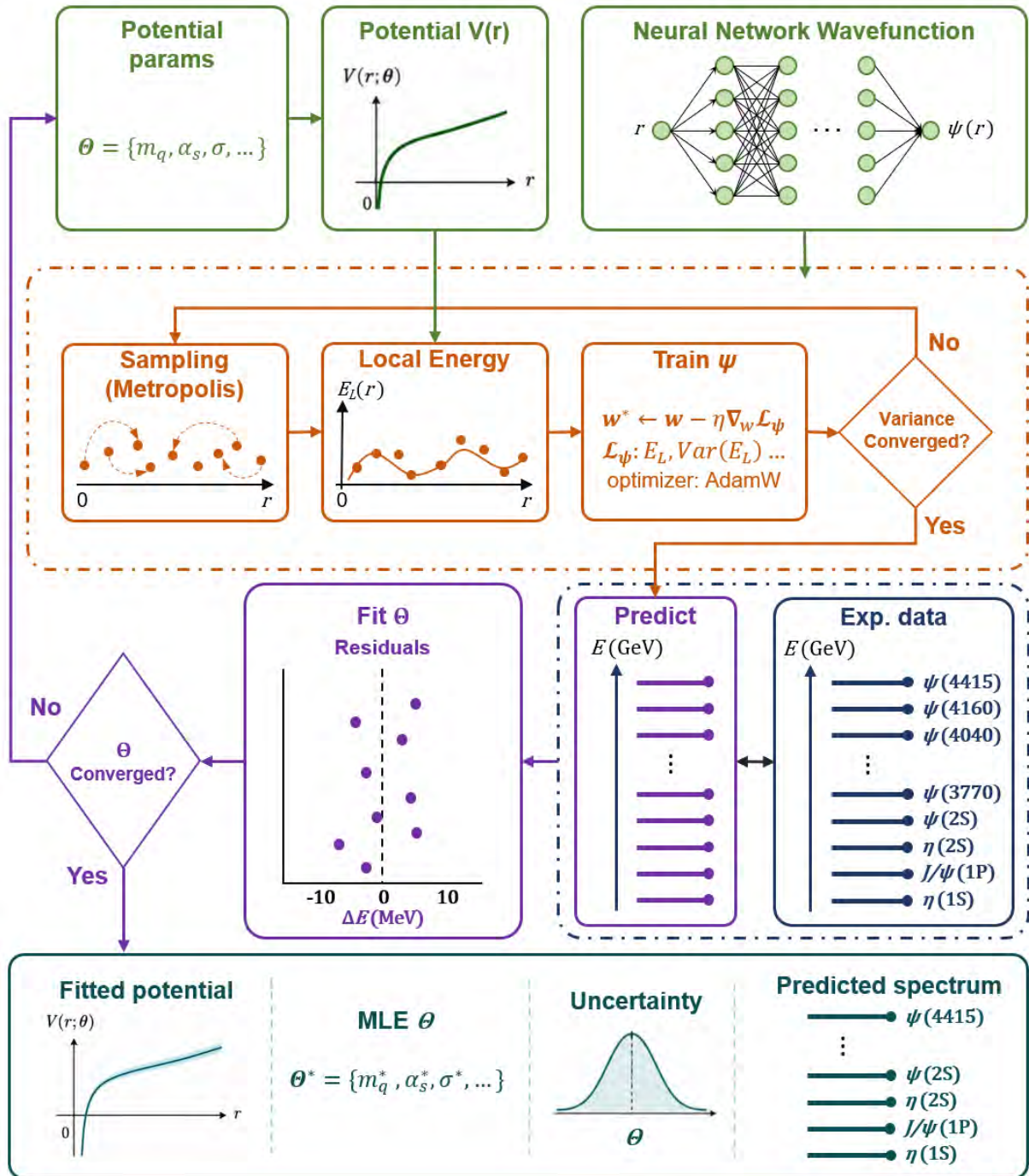


图 2 势参数拟合框架工作流程图

Fig. 2. Workflow of the potential-parameter fitting framework.