

# 基于物理信息机器学习的重离子熔合截面与势垒分布预测 \*

陆哲鹏<sup>1)2)</sup> 吴锦涵<sup>1)2)</sup> 张书桐<sup>1)2)</sup> 马春旺<sup>3)</sup> 程凯旋<sup>3)</sup>  
李志才<sup>1)2)†</sup> 罗文<sup>1)2)‡</sup>

1) (南华大学, 核科学技术学院, 衡阳 421001)

2) (南华大学, 先进核能技术设计与安全教育部重点实验室, 衡阳 421001)

3) (河南师范大学, 物理学院, 新乡 453007)

获取亚势垒区的重离子熔合截面信息是实现超重核合成的关键。鉴于现有唯象模型和纯数据驱动模型预测的截面偏差有待进一步降低, 本文利用残差学习策略将轻量级梯度提升机算法 (Light Gradient Boosting Machine, LightGBM) 与 Swiatecki-Wilszczynska (S-W) 唯象公式结合, 构建基于物理信息机器学习的 PI-LightGBM 模型。利用 16 种典型反应的重离子熔合截面和势垒分布开展训练和验证, 发现 PI-LightGBM 的熔合截面预测值与实验值的均方根对数偏差仅为 0.26, 明显小于纯数据驱动的 LightGBM 模型和仅结合物理信息的神经网络模型。在预测势垒分布方面, PI-LightGBM 的势垒高度预测的决定系数达 0.984, 并可用于修正同位素效应和转移通道对提取熔合势垒分布带来的不利影响。特征重要性研究表明, PI-LightGBM 对亚势垒区的预测修正主要取决于原子核壳效应和形变信息的合理引入。本研究表明了 PI-LightGBM 在预测重离子熔合截面和势垒分布方面的可行性, 有望为超重核合成实验参数的评估和核-核相互作用势的预测提供一种有效的候选方案。

**关键词:** 重离子熔合截面; 势垒分布; 物理信息机器学习; 残差学习

**PACS:** 25.70.Jj, 24.10.Eq, 07.05.Mh

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2022YFA1603300)、南华大学高层次人才项目 (批准号: 5524GC015) 和湖南省大学生创新训练项目 (批准号: S202510555210) 资助的课题。

† 通信作者. E-mail: lizhicai@usc.edu.cn, wenluo-ok@163.com

第一作者. E-mail: lu\_zhepeng@163.com

# 1 引 言

重离子熔合反应是实现超重元素与新核素合成的关键手段,在揭示原子核结构与反应动力学深层机制方面扮演重要作用<sup>[1-5]</sup>。尽管全球多个国家正在依托中国重离子加速器冷却储存环<sup>[6]</sup>、美国稀有同位素束流装置等大科学装置推进相关实验<sup>[7]</sup>,但由于极端的实验条件和量子多体问题等因素的复杂影响,从实验上精确测量和从理论上准确预测重离子熔合截面与势垒分布,仍旧面临着一些挑战。譬如,准确预测熔合截面的主要挑战在于亚势垒区的量子多通道耦合效应对势垒分布的影响难以被常规模型描述和拟合<sup>[8-12]</sup>

近年来,机器学习 (Machine Learning, ML) 方法已被广泛应用于众多的科学研究领域。作为 ML 的重要分支,神经网络和决策树长期以来在预测建模中发挥着重要作用,为众多任务提供了有效的解决方案。在核物理领域,ML 在研究核质量<sup>[13]</sup>、结合能<sup>[14]</sup>、重离子碰撞<sup>[15]</sup>、原子核的电荷半径<sup>[16]</sup>、核密度分布<sup>[17]</sup>、裂变碎片<sup>[18]</sup>、放射性核素鉴定<sup>[19]</sup>、半衰期<sup>[20]</sup>和基态能量<sup>[21]</sup>方面展现出强大的能力。尽管将 ML 方法应用于研究核物理方面的问题取得显著进展,然而目前研究主要依靠纯数据驱动的方法,在实际的模型训练过程中往往受到一定的物理规律的约束。在重离子熔合预测中,纯数据驱动模型正在显示一些不足,常规的 ML 方法虽然在数据密集的能区具有较强的拟合能力,但由于缺乏宏观库仑相互作用的物理定律支配和渐近行为约束,实验数据稀缺的极低能区(即深亚势垒区)易产生非物理的扭曲与发散,从而导致过拟合与外推失效<sup>[3,4]</sup>。因此,将物理信息合理地融入 ML 模型至关重要,这能使它们能够遵循一定物理约束而不是完全依赖数据驱动。

近年来,将物理信息融入 ML 算法研究融合截面取得了一定进展。2020 年, Akkoyun 等人将弹核与靶核的电荷数、中子数、质量数以及入射能量作为特征参数输入到人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) 预测不同反应系统的熔合蒸发截面,测试集偏差为 0.105<sup>[22]</sup>; 2022 年, Dell'Aquila 等人结合遗传编程和神经网络成功导出了一个全局唯象公式,能自动选择重要物理特征描述轻、中质量核系统从势垒附近到高能区的熔合趋势<sup>[23]</sup>; 2024 年, Gao 等人将物理信息融入神经网络,高效地优化 Woods-Saxon 势的参数从而对熔合截面进行预测,表现出良好的预测性能<sup>[24]</sup>。Li 等人将经验耦合通道 (Empirical Coupled Channel, ECC) 模型和一些基本物理特征融入模型进行训练预测,成功将预测结果的平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE) 降低到 0.07<sup>[25]</sup>; 2025 年, Cheng 等人利用贝叶斯神经网络 (Bayesian neural network, BNN) 预测  ${}^6,7\text{Li}$ ,  ${}^9\text{Be}$  和  ${}^{10}\text{B}$  的完全熔合截面,并与单势垒穿透模型对比分析抑制效应,揭示了核结构对势垒穿透的影响<sup>[26]</sup>。同一年内, Li 等人在 LightGBM 模型中不仅输入了基本原子核属性,还引入了 Wong 公式和利用遗传编程计算得到的理论值作为物理信息,对截面的预测结果与实验值的 MAE

从 0.14 降至 0.08，更重要的是，模型计算出的势垒分布与实验数据符合得更好，证明了物理先验信息对修正势垒形状的关键作用 [27]。

尽管上述工作利用 ML 在提升熔合截面的预测精度以及势垒分布方面取得了一定进展，但对于亚势垒能区存在的量子隧穿等影响难以给出精确预测。另一方面，由于常规的 ML 模型 (如 ANN、BNN 等) 本身存在的黑盒性质，且将物理信息的融入仍停留在特征工程层面，难以估计和解释所引入的物理信息对模型预测结果带来的影响。

为解决以上问题，本文在前人研究的基础上，将微观特征物理信息融入 LightGBM 模型，再通过残差学习策略对模型的优化目标进行转换，构建了基于物理信息机器学习模型 PI-LightGBM，对重离子熔合截面和势垒分布进行了预测，并利用特征重要性分析归纳了物理信息对于模型预测结果的影响。本文余下部分结构安排如下：在第 2 节中，我们介绍了本研究的理论模型、机器学习算法的介绍和模型的建立过程。第 3 节介绍了模型的训练过程和预测结果的详细讨论，并与其他模型进行详细比较，验证了模型预测结果的稳健性和准确性，并展示了引入的物理信息对亚势垒区的重要影响。第 4 节提供了总结和展望。

## 2 研究方法

### 2.1 重离子熔合截面的理论计算模型

在亚势垒区，重离子反应的熔合截面强烈依赖于弹核与靶核内部自由度的耦合。在给定的质心系能量  $E_{c.m.}$  下，重离子熔合截面  $\sigma_{fus}$  通常可以通过对各分波  $J$  的穿透概率  $T(E_{c.m.}, J)$  求和来近似表示：

$$\sigma_{fus}(E_{c.m.}) = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E_{c.m.}} \sum_{J=0}^{J_{max}} (2J+1) T(E_{c.m.}, J) \quad (1)$$

其中， $\mu$  为碰撞体系的约化质量。为了计算穿透概率，Wong 公式假设有效势垒为一个一维的倒谐振子抛物线势。基于 Hill-Wheeler 穿透概率，其  $s$  波 ( $J=0$ ) 下的熔合截面可采用如下解析表达式描述 [28,29]：

$$\sigma_{Wong}(E_{c.m.}) = \frac{\hbar\omega}{2E_{c.m.}} R_B^2 \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{2\pi(E_{c.m.} - V_B)}{\hbar\omega} \right) \right] \quad (2)$$

其中， $V_B$ 、 $R_B$  和  $\hbar\omega$  分别对应库仑势垒的高度、位置和曲率。然而，这种抛物线近似在能量远低于  $V_B$  的深亚势垒区会迅速失效。

为了更好的拟合亚势垒区产生的多通道耦合效应，S-W 公式基于单高斯势垒高度分布形式，将不同势

垒下的透射几率加权平均，得到熔合截面的解析表达式如下 [30]：

$$\sigma_{SW}(E_{c.m.}) = \frac{\pi v}{2E_{c.m.}} R_B^2 \left[ X(1 + \operatorname{erf} X) + \frac{e^{-X^2}}{\sqrt{\pi}} \right] \quad (3)$$

其中， $X = (E_{c.m.} - V_B)/v$ ， $v$  为反映耦合强度的势垒分布方差。尽管该公式在一定程度上改善了对阈下截面的描述，但由于其核心假设为势垒高度分布必须是单一对称的高斯分布，而真实势垒分布还会受到集体激发、核形变等耦合通道的影响，因此在向极重核体系外推时，这种刚性的解析假设会导致产生较大偏差 [31,32]。因此如何提高理论模型在计算重离子熔合截面的精准度成为一项挑战，而机器学习方法可以为解决这一问题提供思路。

## 2.2 物理信息机器学习模型的构建

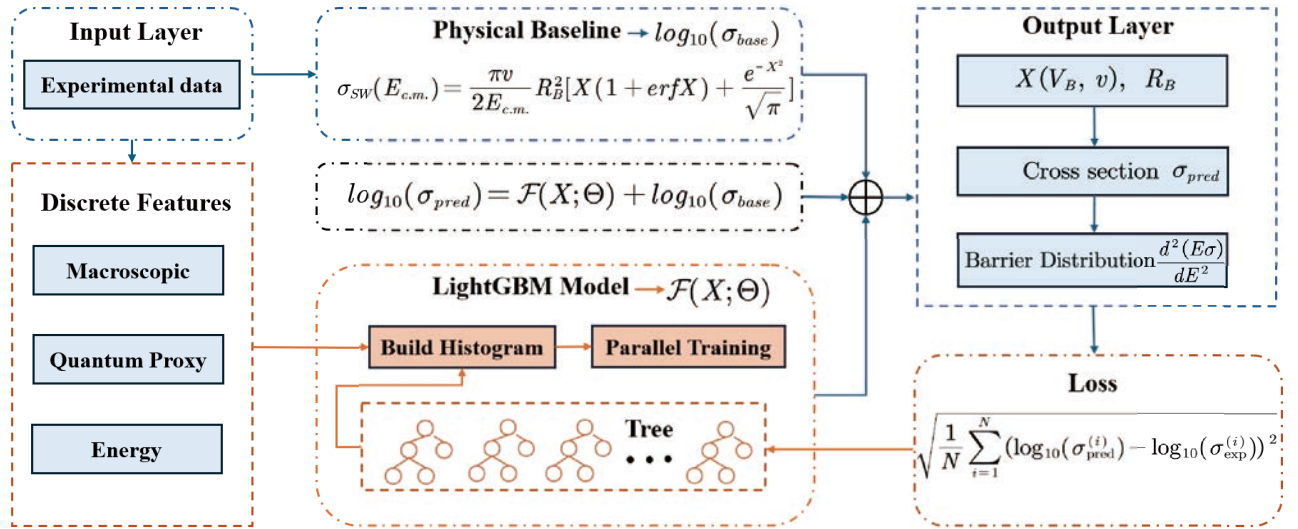


图 1 本研究的物理信息机器学习框架

Fig. 1. Physics-informed machine learning architecture in this work

LightGBM 是一个基于决策树算法的高效梯度提升框架，它使用梯度提升决策树 (GBDT) 作为基本模型，逐步构建多个决策树，并将它们的预测结果结合起来以提高模型的整体性能。一旦输入组织好的训练数据，不同组的特征将被分离、重新组合并捆绑进行训练，以创建 GBDT 直方图。在定义的超参数设置下，通过验证其均方根误差来评估最终模型 [33]。

首先，本文从低能核反应数据库 [34] 中收集 235 个  $12 \leq A_{pt} \leq 232$ 、 $Z_{pt} \geq 6$  且实验数据多于 6 个的反应体系 ( $A_{pt}$  表示弹核和靶核的质量数， $Z_{pt}$  表示弹核和靶核的质子数)，共计 3842 个截面-能量点 ( $E, \sigma_{fus}$ ) 作为数据集 (具体见表 1)。数据集中的 219 个反应体系，共计 3585 个截面-能量点作为训练数据，

并按照 4: 1 的比例随机划分为训练集和验证集。测试集由余下的 16 个反应体系，共计 257 个截面-能量点构成，其与训练数据按反应体系完全隔离。其次，以 Eq. (3) 所计算的库伦势垒作为模型的预测下限，为极重核体系的势垒提供物理基准，进一步利用残差学习策略将模型的优化目标  $\mathcal{F}(\mathbf{X})$  从熔合截面的预测值  $\sigma_{\text{pred}}$  转变为对数比例修正预测残差  $\mathcal{F}(\mathbf{X}; \Theta)$  [35]。最后，通过集成子模型的不决策迭代，输出得到最佳预测参数  $V_B$ 、 $R_B$  和  $v$ ，并得到熔合截面、势垒高度和势垒分布的预测值，具体研究架构如图 1 所示。

同时为了克服常规经验模型在处理重离子熔合反应时的所产生的刚性解析局限，以及避免纯数据驱动模型在未知反应的发散，本文保留了宏观物理特性并作为特征融入 LightGBM 进行残差学习和训练，则模型预测的熔合截面可表达为：

$$\log_{10}(\sigma_{\text{pred}}) = \mathcal{F}(\mathbf{X}; \Theta) + \log_{10}(\sigma_{\text{base}}) \quad (4)$$

其中  $\Theta$  为 LightGBM 算法的超参数空间。通过这一转换，复杂的量子多体修正问题被转变为残差回归问题。在模型训练过程中，使用均方根对数误差 (Root Mean Square Logarithmic Error, RMSLE) 作为基础损失函数  $\mathcal{L}$ ：

$$\mathcal{L}(\Theta) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \log_{10}(\sigma_{\text{pred}}^{(i)}) - \log_{10}(\sigma_{\text{exp}}^{(i)}) \right)^2} \quad (5)$$

LightGBM 通过计算损失函数对当前预测值的负梯度，不断迭代生成新的回归树。其次，为了使模型能够进一步的学习多通道耦合效应对熔合截面的残差修正，如表 2 所示，我们提取了一组深层微观物理特征变量。其中库伦基准势垒  $V_{B0}$  为不考虑核形变和转移通道等其他效应计算得到的最基本的库伦势垒尺度，计算公式如下 [36]：

$$V_{B0} = \frac{Z_p Z_t e^2}{r_0 \left( A_p^{1/3} + A_t^{1/3} \right)} \quad (6)$$

复合核形变潜力 ( $P = d(Z_p)d(N_p) + d(Z_t)d(N_t)$ ) 代表形变与振动对隧穿的增强能力 [37]、同位旋非对称度 ( $\Delta I = |(N_p - Z_p)/A_p - (N_t - Z_t)/A_t|$ ) 表征电荷平衡与转移通道活跃度 [11]、壳效应距离 ( $\Delta_{\text{magic}} = d(Z_p) + d(N_p) + d(Z_t) + d(N_t)$ ) 反映原子核结构的刚性 [38]，其余特征均为宏观基本输入物理特征。考虑到单个反应实验数据的稀缺性，为了量化模型预测的不确定性，我们在模型框架中引入了集成不确定性量化机制。具体而言，以反应体系为采样单元，对训练集进行有放回重采样，构建  $M = 10$  个相互独立的物理信息 LightGBM 子模型，即自举训练子集。每个子集内部仍由多棵提升树组成，对于任意输入样本，最终预测值取这  $M$  个子模型预测结果的平均值，而不同子模型预测结果之间的离散程度则用于估计模型的

表 1 数据集

Table 1. Data set

| 系统                               | 数据点 | 能量范围 (MeV)  | 系统                               | 数据点 | 能量范围 (MeV)  | 系统                               | 数据点 | 能量范围 (MeV)  |
|----------------------------------|-----|-------------|----------------------------------|-----|-------------|----------------------------------|-----|-------------|
| $^{124}\text{Sn}+^{40}\text{Ca}$ | 9   | 114.8–141.6 | $^{19}\text{F}+^{192}\text{Os}$  | 8   | 74.5–95     | $^{34}\text{S}+^{64}\text{Ni}$   | 18  | 53.8–63.5   |
| $^{124}\text{Sn}+^{48}\text{Ca}$ | 11  | 112.2–156.3 | $^{19}\text{F}+^{208}\text{Pb}$  | 32  | 76.9–144.7  | $^{34}\text{S}+^{89}\text{Y}$    | 31  | 73–91       |
| $^{12}\text{C}+^{144}\text{Sm}$  | 14  | 47–74.9     | $^{19}\text{F}+^{40}\text{Ca}$   | 11  | 23.6–48.8   | $^{34}\text{Si}+^{238}\text{U}$  | 7   | 142.9–177.8 |
| $^{12}\text{C}+^{154}\text{Sm}$  | 11  | 47.7–60.7   | $^{19}\text{F}+^{54}\text{Fe}$   | 9   | 31.6–41.4   | $^{35}\text{Cl}+^{112}\text{Sn}$ | 7   | 106.7–129.1 |
| $^{12}\text{C}+^{160}\text{Gd}$  | 11  | 70.6–119.8  | $^{19}\text{F}+^{56}\text{Fe}$   | 9   | 31.8–41.9   | $^{35}\text{Cl}+^{120}\text{Sn}$ | 7   | 107.9–131.2 |
| $^{12}\text{C}+^{181}\text{Ta}$  | 11  | 57.3–97.8   | $^{20}\text{Ne}+^{238}\text{U}$  | 16  | 107–208     | $^{35}\text{Cl}+^{24}\text{Mg}$  | 11  | 26.8–35.9   |
| $^{12}\text{C}+^{194}\text{Pt}$  | 9   | 56.5–73     | $^{20}\text{Ne}+^{27}\text{Al}$  | 6   | 41.5–100    | $^{35}\text{Cl}+^{25}\text{Mg}$  | 11  | 27.9–37.1   |
| $^{12}\text{C}+^{198}\text{Pt}$  | 9   | 56.5–73     | $^{23}\text{Na}+^{48}\text{Ti}$  | 10  | 33.2–45.2   | $^{35}\text{Cl}+^{26}\text{Mg}$  | 11  | 28.5–37.9   |
| $^{12}\text{C}+^{204}\text{Pb}$  | 13  | 53.7–84.9   | $^{24}\text{Mg}+^{26}\text{Mg}$  | 11  | 21.9–32.9   | $^{35}\text{Cl}+^{50}\text{Ti}$  | 21  | 48.2–74.6   |
| $^{12}\text{C}+^{206}\text{Pb}$  | 7   | 56.5–80.2   | $^{27}\text{Al}+^{70}\text{Ge}$  | 20  | 50.9–59.9   | $^{35}\text{Cl}+^{58}\text{Ni}$  | 8   | 60.5–87.2   |
| $^{12}\text{C}+^{208}\text{Pb}$  | 11  | 59.8–94     | $^{27}\text{Al}+^{72}\text{Ge}$  | 16  | 50.2–60.4   | $^{35}\text{Cl}+^{60}\text{Ni}$  | 7   | 59.5–81.6   |
| $^{12}\text{C}+^{238}\text{U}$   | 20  | 66–124      | $^{27}\text{Al}+^{73}\text{Ge}$  | 17  | 50.7–61.7   | $^{35}\text{Cl}+^{62}\text{Ni}$  | 14  | 59.9–108.4  |
| $^{12}\text{C}+^{29}\text{Si}$   | 19  | 14.9–34.7   | $^{27}\text{Al}+^{74}\text{Ge}$  | 17  | 50–61.5     | $^{35}\text{Cl}+^{64}\text{Ni}$  | 8   | 59.2–83.8   |
| $^{12}\text{C}+^{30}\text{Si}$   | 19  | 15–35       | $^{27}\text{Al}+^{76}\text{Ge}$  | 18  | 49.6–61.7   | $^{36}\text{S}+^{100}\text{Mo}$  | 8   | 76.2–88     |
| $^{12}\text{C}+^{46}\text{Ti}$   | 17  | 18–45       | $^{28}\text{Si}+^{100}\text{Mo}$ | 14  | 67.7–96.6   | $^{36}\text{S}+^{100}\text{Ru}$  | 7   | 78.1–88     |
| $^{12}\text{C}+^{48}\text{Ti}$   | 15  | 19.6–45.5   | $^{28}\text{Si}+^{178}\text{Hf}$ | 12  | 108.6–138.4 | $^{36}\text{S}+^{101}\text{Ru}$  | 7   | 78.3–88.2   |
| $^{12}\text{C}+^{50}\text{Ti}$   | 17  | 18–47.3     | $^{28}\text{Si}+^{24}\text{Mg}$  | 20  | 21.4–30.1   | $^{36}\text{S}+^{102}\text{Ru}$  | 6   | 79–88.5     |
| $^{132}\text{Sn}+^{40}\text{Ca}$ | 14  | 110.9–135.7 | $^{28}\text{Si}+^{26}\text{Mg}$  | 19  | 22.2–30     | $^{36}\text{S}+^{204}\text{Pb}$  | 27  | 137.5–179   |
| $^{132}\text{Sn}+^{48}\text{Ca}$ | 12  | 112.1–150.4 | $^{28}\text{Si}+^{28}\text{Si}$  | 20  | 23.1–36.1   | $^{36}\text{S}+^{206}\text{Pb}$  | 11  | 135.9–170   |
| $^{13}\text{C}+^{169}\text{Tm}$  | 11  | 64–85.2     | $^{28}\text{Si}+^{29}\text{Si}$  | 15  | 27.9–42.1   | $^{36}\text{S}+^{48}\text{Ca}$   | 23  | 38–60.9     |
| $^{13}\text{C}+^{232}\text{Th}$  | 7   | 58.7–74.9   | $^{28}\text{Si}+^{58}\text{Ni}$  | 15  | 49.6–62.1   | $^{36}\text{S}+^{58}\text{Ni}$   | 18  | 54.3–85.7   |
| $^{13}\text{C}+^{48}\text{Ti}$   | 14  | 21.3–47.6   | $^{28}\text{Si}+^{62}\text{Ni}$  | 6   | 48.7–57.3   | $^{36}\text{S}+^{64}\text{Ni}$   | 23  | 52–82.9     |
| $^{14}\text{N}+^{232}\text{Th}$  | 8   | 74.6–91.6   | $^{28}\text{Si}+^{64}\text{Ni}$  | 12  | 48.4–63.8   | $^{36}\text{S}+^{90}\text{Zr}$   | 27  | 74.2–87.2   |
| $^{16}\text{O}+^{112}\text{Sn}$  | 29  | 46.7–61.1   | $^{28}\text{Si}+^{68}\text{Zn}$  | 11  | 52.2–70.7   | $^{36}\text{S}+^{94}\text{Mo}$   | 7   | 75.3–86.5   |
| $^{16}\text{O}+^{116}\text{Sn}$  | 32  | 46.5–61.4   | $^{28}\text{Si}+^{90}\text{Zr}$  | 12  | 67.3–92.4   | $^{36}\text{S}+^{96}\text{Mo}$   | 6   | 75.8–87     |
| $^{16}\text{O}+^{144}\text{Nd}$  | 12  | 54.9–81     | $^{28}\text{Si}+^{92}\text{Zr}$  | 21  | 66.2–88.2   | $^{36}\text{S}+^{96}\text{Zr}$   | 32  | 71.6–87.4   |
| $^{16}\text{O}+^{144}\text{Sm}$  | 27  | 63.4–99.9   | $^{28}\text{Si}+^{94}\text{Mo}$  | 12  | 67.7–95.8   | $^{36}\text{S}+^{98}\text{Mo}$   | 6   | 76.2–87.5   |
| $^{16}\text{O}+^{147}\text{Sm}$  | 7   | 62.9–74.9   | $^{28}\text{Si}+^{94}\text{Zr}$  | 14  | 65–93.5     | $^{37}\text{Cl}+^{100}\text{Mo}$ | 7   | 85.8–94.5   |
| $^{16}\text{O}+^{148}\text{Sm}$  | 24  | 61.4–81.9   | $^{29}\text{Si}+^{178}\text{Hf}$ | 11  | 110.9–136.4 | $^{37}\text{Cl}+^{24}\text{Mg}$  | 11  | 26–34.7     |
| $^{16}\text{O}+^{149}\text{Sm}$  | 9   | 61.5–75     | $^{30}\text{Si}+^{170}\text{Er}$ | 10  | 110.1–143.1 | $^{37}\text{Cl}+^{25}\text{Mg}$  | 11  | 27–35.9     |
| $^{16}\text{O}+^{150}\text{Nd}$  | 6   | 65–80       | $^{30}\text{Si}+^{24}\text{Mg}$  | 17  | 21.5–28.5   | $^{37}\text{Cl}+^{26}\text{Mg}$  | 11  | 27.3–36.4   |
| $^{16}\text{O}+^{150}\text{Sm}$  | 7   | 61.2–75     | $^{30}\text{Si}+^{26}\text{Mg}$  | 20  | 21.4–29.4   | $^{37}\text{Cl}+^{70}\text{Ge}$  | 11  | 63.8–75.2   |
| $^{16}\text{O}+^{152}\text{Sm}$  | 6   | 61.2–75     | $^{30}\text{Si}+^{30}\text{Si}$  | 55  | 59.1–84.5   | $^{37}\text{Cl}+^{72}\text{Ge}$  | 13  | 64.6–76.3   |
| $^{16}\text{O}+^{154}\text{Sm}$  | 38  | 58.4–109.9  | $^{30}\text{Si}+^{58}\text{Ni}$  | 9   | 49–61.3     | $^{37}\text{Cl}+^{73}\text{Ge}$  | 11  | 64.9–76.9   |
| $^{16}\text{O}+^{159}\text{Tb}$  | 6   | 75.1–94.4   | $^{30}\text{Si}+^{62}\text{Ni}$  | 10  | 48.1–62.4   | $^{37}\text{Cl}+^{74}\text{Ge}$  | 8   | 65.2–74.5   |
| $^{16}\text{O}+^{166}\text{Er}$  | 16  | 59.3–93.9   | $^{30}\text{Si}+^{64}\text{Ni}$  | 11  | 48.7–63.2   | $^{37}\text{Cl}+^{76}\text{Ge}$  | 13  | 64.3–75.1   |
| $^{16}\text{O}+^{169}\text{Tm}$  | 7   | 74.9–94.6   | $^{31}\text{P}+^{175}\text{Lu}$  | 10  | 116.7–140.1 | $^{37}\text{Cl}+^{98}\text{Mo}$  | 6   | 85.1–93.8   |
| $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$    | 25  | 8.2–13.8    | $^{31}\text{P}+^{176}\text{Lu}$  | 7   | 116.8–129.6 | $^{40}\text{Ar}+^{112}\text{Sn}$ | 13  | 97.8–120.4  |
| $^{16}\text{O}+^{174}\text{Yb}$  | 27  | 60.2–94.9   | $^{32}\text{S}+^{100}\text{Mo}$  | 10  | 74–90.7     | $^{40}\text{Ar}+^{116}\text{Sn}$ | 13  | 97.1–126.8  |
| $^{16}\text{O}+^{176}\text{Yb}$  | 27  | 60.1–94.9   | $^{32}\text{S}+^{100}\text{Ru}$  | 8   | 77.8–90.7   | $^{40}\text{Ar}+^{122}\text{Sn}$ | 17  | 95.9–129.3  |
| $^{16}\text{O}+^{186}\text{W}$   | 37  | 63–96.7     | $^{32}\text{S}+^{102}\text{Ru}$  | 8   | 78.2–91.1   | $^{40}\text{Ar}+^{144}\text{Sm}$ | 10  | 118.4–140   |

Continued on next page

表 1 (续) 数据集

Table 1. (continued) Data set

| 系统                              | 数据点 | 能量范围 (MeV) | 系统                              | 数据点 | 能量范围 (MeV)  | 系统                               | 数据点         | 能量范围 (MeV)  |
|---------------------------------|-----|------------|---------------------------------|-----|-------------|----------------------------------|-------------|-------------|
| $^{16}\text{O}+^{190}\text{Os}$ | 6   | 90–140     | $^{32}\text{S}+^{103}\text{Rh}$ | 7   | 79.9–91.3   | $^{40}\text{Ar}+^{148}\text{Sm}$ | 11          | 114.9–140.7 |
| $^{16}\text{O}+^{194}\text{Pt}$ | 6   | 73.5–93.4  | $^{32}\text{S}+^{104}\text{Pd}$ | 6   | 81.2–91.5   | $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  | 15          | 50–67.1     |
| $^{16}\text{O}+^{204}\text{Pb}$ | 11  | 67.5–94.2  | $^{32}\text{S}+^{104}\text{Ru}$ | 8   | 78.5–91.5   | $^{40}\text{Ca}+^{44}\text{Ca}$  | 15          | 48.7–67.6   |
| $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ | 38  | 70.2–83    | $^{32}\text{S}+^{106}\text{Pd}$ | 6   | 81.6–91.9   | $^{40}\text{Ca}+^{46}\text{Ti}$  | 24          | 54.7–79.3   |
| $^{16}\text{O}+^{24}\text{Mg}$  | 11  | 19.5–48.6  | $^{32}\text{S}+^{108}\text{Pd}$ | 7   | 80.8–92.3   | $^{40}\text{Ca}+^{48}\text{Ca}$  | 33          | 88.3–134.8  |
| $^{16}\text{O}+^{26}\text{Mg}$  | 12  | 20–50.1    | $^{32}\text{S}+^{110}\text{Pd}$ | 30  | 80.1–99.7   | $^{40}\text{Ca}+^{48}\text{Ti}$  | 27          | 54.2–81.1   |
| $^{16}\text{O}+^{28}\text{Si}$  | 18  | 36–78      | $^{32}\text{S}+^{112}\text{Sn}$ | 33  | 90–108.7    | $^{40}\text{Ca}+^{50}\text{Ti}$  | 23          | 54.1–69.2   |
| $^{16}\text{O}+^{30}\text{Si}$  | 25  | 15.6–40    | $^{32}\text{S}+^{120}\text{Sn}$ | 44  | 88.7–111    | $^{40}\text{Ca}+^{58}\text{Ni}$  | 19          | 68.8–90.3   |
| $^{16}\text{O}+^{50}\text{Ti}$  | 7   | 23.9–48.9  | $^{32}\text{S}+^{12}\text{C}$   | 106 | 16.5–28.1   | $^{40}\text{Ca}+^{62}\text{Ni}$  | 25          | 68.9–106.7  |
| $^{16}\text{O}+^{58}\text{Ni}$  | 38  | 29–46.9    | $^{32}\text{S}+^{13}\text{C}$   | 19  | 48–70       | $^{40}\text{Ca}+^{64}\text{Ni}$  | 25          | 64.7–94     |
| $^{16}\text{O}+^{60}\text{Ni}$  | 18  | 32.4–56.8  | $^{32}\text{S}+^{144}\text{Sm}$ | 17  | 115.5–188.4 | $^{40}\text{Ca}+^{90}\text{Zr}$  | 39          | 135.4–159.4 |
| $^{16}\text{O}+^{62}\text{Ni}$  | 49  | 28.2–46    | $^{32}\text{S}+^{150}\text{Sm}$ | 18  | 113.8–189.6 | $^{40}\text{Ca}+^{94}\text{Zr}$  | 58          | 88.9–113.2  |
| $^{16}\text{O}+^{63}\text{Cu}$  | 7   | 35.2–56.8  | $^{32}\text{S}+^{152}\text{Sm}$ | 19  | 114.2–190   | $^{40}\text{Ca}+^{96}\text{Zr}$  | 10          | 84.8–106.8  |
| $^{16}\text{O}+^{65}\text{Cu}$  | 8   | 32.2–57.4  | $^{32}\text{S}+^{181}\text{Ta}$ | 14  | 140.9–254.9 | $^{48}\text{Ca}+^{48}\text{Ca}$  | 16          | 46.8–60.8   |
| $^{16}\text{O}+^{66}\text{Zn}$  | 8   | 29.5–54.5  | $^{32}\text{S}+^{208}\text{Pb}$ | 41  | 134.6–183.6 | $^{48}\text{Ca}+^{90}\text{Zr}$  | 32          | 91.2–113.1  |
| $^{16}\text{O}+^{70}\text{Ge}$  | 25  | 32.1–48.5  | $^{32}\text{S}+^{40}\text{Ca}$  | 6   | 83–108.6    | $^{48}\text{Ca}+^{96}\text{Zr}$  | 37          | 89.1–112.1  |
| $^{16}\text{O}+^{72}\text{Ge}$  | 28  | 32.1–51.6  | $^{32}\text{S}+^{48}\text{Ca}$  | 20  | 36.8–53.7   | $^{48}\text{Ti}+^{58}\text{Ni}$  | 13          | 73.8–90.7   |
| $^{16}\text{O}+^{73}\text{Ge}$  | 26  | 33.4–51.5  | $^{32}\text{S}+^{58}\text{Ni}$  | 20  | 56.3–68.3   | $^{48}\text{Ti}+^{60}\text{Ni}$  | 14          | 74–92.4     |
| $^{16}\text{O}+^{74}\text{Ge}$  | 28  | 31.9–54.1  | $^{32}\text{S}+^{64}\text{Ni}$  | 12  | 53.9–73.1   | $^{48}\text{Ti}+^{64}\text{Ni}$  | 17          | 72.7–95.3   |
| $^{16}\text{O}+^{76}\text{Ge}$  | 25  | 31.7–50.1  | $^{32}\text{S}+^{89}\text{Y}$   | 22  | 73.4–91.1   | $^{50}\text{Ti}+^{60}\text{Ni}$  | 13          | 73.7–90.8   |
| $^{17}\text{O}+^{144}\text{Sm}$ | 24  | 61.4–99.9  | $^{32}\text{S}+^{90}\text{Zr}$  | 40  | 73.7–95.3   | $^{58}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$ | 7           | 130.8–149.2 |
| $^{18}\text{O}+^{150}\text{Sm}$ | 10  | 62.5–111.6 | $^{32}\text{S}+^{94}\text{Zr}$  | 49  | 70.5–96.4   | $^{58}\text{Ni}+^{54}\text{Fe}$  | 23          | 85.8–108    |
| $^{18}\text{O}+^{192}\text{Os}$ | 6   | 77.8–112.9 | $^{32}\text{S}+^{96}\text{Mo}$  | 8   | 77–89.8     | $^{58}\text{Ni}+^{58}\text{Ni}$  | 16          | 188–220     |
| $^{18}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ | 17  | 70.6–93.8  | $^{32}\text{S}+^{96}\text{Zr}$  | 49  | 70.4–97.1   | $^{58}\text{Ni}+^{60}\text{Ni}$  | 32          | 92.6–119.2  |
| $^{18}\text{O}+^{24}\text{Mg}$  | 9   | 20–41.1    | $^{32}\text{S}+^{98}\text{Mo}$  | 9   | 75.9–90.2   | $^{58}\text{Ni}+^{64}\text{Ni}$  | 16          | 90.4–112.7  |
| $^{18}\text{O}+^{44}\text{Ca}$  | 16  | 20.1–42.2  | $^{33}\text{S}+^{90}\text{Zr}$  | 12  | 75.1–96.3   | $^{58}\text{Ni}+^{90}\text{Zr}$  | 11          | 127.9–151.6 |
| $^{18}\text{O}+^{58}\text{Ni}$  | 15  | 30.4–48.2  | $^{33}\text{S}+^{91}\text{Zr}$  | 15  | 74.6–96     | $^{58}\text{Ni}+^{91}\text{Zr}$  | 15          | 127–152.3   |
| $^{18}\text{O}+^{60}\text{Ni}$  | 6   | 30.8–48.5  | $^{33}\text{S}+^{92}\text{Zr}$  | 15  | 73.4–96.9   | $^{58}\text{Ni}+^{92}\text{Mo}$  | 7           | 135.6–156.4 |
| $^{18}\text{O}+^{63}\text{Cu}$  | 7   | 32.8–49.8  | $^{34}\text{S}+^{168}\text{Er}$ | 40  | 112–162.8   | $^{58}\text{Ni}+^{94}\text{Zr}$  | 18          | 123.3–154.2 |
| $^{18}\text{O}+^{64}\text{Ni}$  | 7   | 30.9–49.7  | $^{34}\text{S}+^{204}\text{Pb}$ | 8   | 136.8–170.9 | $^{60}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$ | 13          | 123.3–163.3 |
| $^{18}\text{O}+^{65}\text{Cu}$  | 8   | 33–50.3    | $^{34}\text{S}+^{206}\text{Pb}$ | 8   | 137–171     | $^{64}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$ | 13          | 121.7–158.8 |
| $^{18}\text{O}+^{74}\text{Ge}$  | 25  | 30.5–49    | $^{34}\text{S}+^{208}\text{Pb}$ | 10  | 134.6–171.4 | $^{64}\text{Ni}+^{64}\text{Ni}$  | 18          | 89.7–109.1  |
| $^{19}\text{F}+^{139}\text{La}$ | 12  | 65.1–114.1 | $^{34}\text{S}+^{238}\text{U}$  | 7   | 142.9–177.8 | $^{64}\text{Ni}+^{92}\text{Mo}$  | 8           | 132.6–152.4 |
| $^{19}\text{F}+^{159}\text{Tb}$ | 8   | 89–129     | $^{34}\text{S}+^{24}\text{Mg}$  | 10  | 24.7–31.4   | $^{64}\text{Ni}+^{92}\text{Zr}$  | 13          | 124.9–160.5 |
| $^{19}\text{F}+^{169}\text{Tm}$ | 8   | 79.6–115.7 | $^{34}\text{S}+^{25}\text{Mg}$  | 18  | 25.2–32     | $^{64}\text{Ni}+^{96}\text{Zr}$  | 13          | 124–160.5   |
| $^{19}\text{F}+^{181}\text{Ta}$ | 8   | 77–108.8   | $^{34}\text{S}+^{26}\text{Mg}$  | 20  | 24.9–33.5   | <b>Total systems</b>             | <b>235</b>  |             |
| $^{19}\text{F}+^{188}\text{Os}$ | 9   | 73.4–94.3  | $^{34}\text{S}+^{58}\text{Ni}$  | 13  | 56.1–71.8   | <b>Total points</b>              | <b>3842</b> |             |

表 2 模型输入特征

Table 2. Features for the model.

| 类别   | 特征      | 计算公式                    |
|------|---------|-------------------------|
| 基本属性 | 质子数     | $Z_p, Z_t$              |
|      | 质量数     | $A_p, A_t$              |
| 结构特征 | 质量不对称度  | $\alpha$                |
|      | 库仑因子    | $Z_p Z_t$               |
|      | 尺寸因子    | $A_p^{1/3} + A_t^{1/3}$ |
|      | 库仑基准势垒  | $V_{B0}$                |
| 微观效应 | 同位旋非对称度 | $\Delta I$              |
|      | 壳效应距离   | $\Delta_{\text{magic}}$ |
|      | 复合核形变潜力 | $P\text{-factor}$       |

不确定性。其中预测中位值  $\mu_\sigma$  和物理预测方差  $S_\sigma^2$  计算公式如下：

$$\mu_\sigma = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \log_{10}(\sigma_{\text{pred},m}) \quad (7)$$

$$S_\sigma^2 = \frac{1}{M-1} \sum_{m=1}^M (\log_{10}(\sigma_{\text{pred},m}) - \mu_\sigma)^2 \quad (8)$$

利用方差  $S_\sigma$ ，模型为每个能量点构建了 90% 的物理置信区间 ( $\mu_\sigma \pm 1.645S_\sigma$ )。

在当前的集成树模型设置中，集成规模被设定为 10。在训练过程中，算法基于训练集中的物理特征与核心势垒参数 ( $V_B$ 、 $R_B$  和  $v$ ) 之间的关系生成一系列决策树。为了客观评估模型并防止数据泄露，研究采用了一个严格隔离的保留测试集来代替常规的交叉验证，这同样有助于防止过拟合并消除选择偏差。训练完成后，模型使用该测试集进行预测，测试集中的每一个重离子碰撞体系都会遍历训练期间生成的集成树。集成中的这 10 个子模型都会根据各个核系统的特征物理量对预测值做出独立贡献，最终的预测结果通过聚合这些模型的预测分布期望值来得出，进而计算出预测的重离子熔合截面与势垒分布，并同步生成不确定性量化的误差置信带。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 模型的训练与验证

在上述分析的基础上, 我们采用 20%、50% 和 80% 三种不同比例的均匀随机采样构建了训练集, 以独立训练 LightGBM 模型, 并记录了每组在训练轮次中的损失函数演化轨迹, 结果展示在图 2 (a) 中, 随着训练轮次的增加, 模型的损失均呈现出显著的指数型衰减, 并最终收敛至特定的平稳误差基线。此外, 随着训练样本馈入比例的增加, 损失趋于减小, 模型对熔合截面的预测能力逐渐增强, 其损失函数的收敛渐近线持续下探, 说明充足的高质量数据能够有效驱动模型逼近亚势垒区量子隧穿概率的真实物理分布。

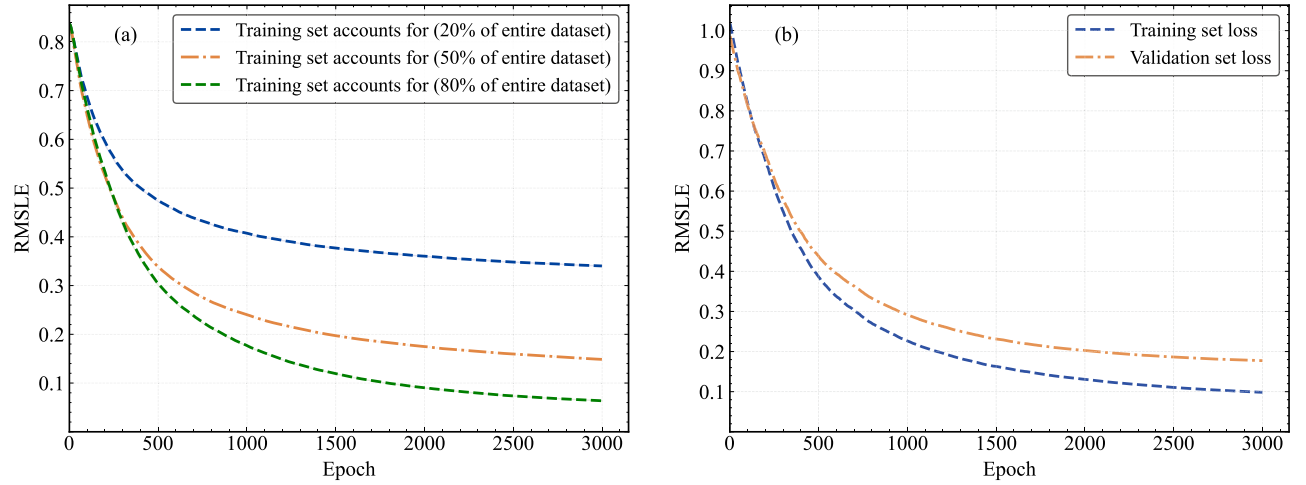


图 2 (a) 在 20%、50%、80% 数据量下, 模型损失函数随训练轮数的变化情况; (b) 训练集 (蓝色虚线) 和验证集 (黄色虚线) 的损失函数随训练轮数的变化关系

Fig. 2. (a) Variation of the model loss function with training epochs under data volumes of 20%, 50%, and 80% (b) Variation of the loss function for the training set (blue curve) and validation set (yellow curve) with training epochs.

在模型优化的阶段, 单纯依赖训练集内损失函数的持续下降并不能真实反映模型对未见核反应体系的外推与泛化能力, 且会导致模型陷入对训练样本局部涨落的过拟合, 从而在未知核区产生较大的预测偏差。为了直观评估模型的泛化性能, 我们对模型在独立验证集上的表现进行记录如图 2 (b) 所示。在训练的初始阶段, 验证集上的预测精度持续提高, RMSLE 值逐渐减小。在训练后期, 验证集误差平稳收敛, 全程未出现任何发散或误差反弹的过拟合特征, 这表明引入的物理信息以及算法超参数中施加的正则化约束与树深限制, 成功剥离了由宏观库仑尺度的非物理噪声。

### 3.2 模型泛化能力验证与性能对比

为了进一步评估验证本模型框架在预测重离子熔合截面的能力，我们将模型在测试集当中所包含的 16 个反应体系上的预测结果与实验数据和其他模型预测的结果进行了比较，具体结果如图 3 所示。同时，各模型在全局测试集上的量化预测误差对比参见表 3。通过对比不同物理与 ML 模型的预测曲线可以发现，在高于库仑势垒的阈上能区 ( $E_{c.m.} > V_B$ )，由于熔合过程主要由经典势垒穿透机制主导，各模型的预测结果与实验数据符合程度较好。然而，在亚势垒区 ( $E_{c.m.} \ll V_B$ )，预测结果表现出强烈的模型依赖性。在这一能区，弹靶核在靠近过程中激发出的内部自由度 (如非弹性激发、核子转移及静态形变) 等耦合通道效应会显著降低等效势垒高度并拓宽势垒分布。S-W 模型 (蓝色虚线) 和 Wong 公式 (紫色虚线) 主要基于一维静态势垒假设，未能充分计入这些动力学自由度的贡献。因此，它们在阈下能区呈现出过快的截面衰减，明显低估了实验测量值<sup>[39]</sup>，其损失分别高达 3.03 和 2.86。另一方面，纯数据驱动模型 (LightGBM, 绿色虚线) 虽然在数据相对密集的能区具有一定的拟合能力，但由于缺乏宏观库仑相互作用的物理渐近行为约束，其预测曲线在实验数据稀缺的极低能区出现了非物理的扭曲与发散。这一现象表明，在处理核反应这类极度非线性的多体系统时，脱离物理机制的纯粹 ML 算法在向未知核区外推时容易发生严重的过拟合。基于神经网络拟合 Woods-Saxon 势参数的 NN-fit 模型 (黑色虚线) 虽然在一定程度上改善了外推问题，将损失降低至 0.86，但对于部分涉及显著形变靶核 (如  $^{16}\text{O} + ^{238}\text{U}$ ) 的反应体系，由于其刚性的解析势的影响仍难以准确预测亚势垒区的熔合截面值<sup>[40]</sup>。

表 3 不同模型及其对应损失值的比较

Table 3. Comparison of different models and their corresponding loss values

|                               | 模型           | 参数来源                       | 损失值  |
|-------------------------------|--------------|----------------------------|------|
| $\sigma_{\text{LightGBM}}$    | S-W          | LightGBM                   | 0.94 |
| $\sigma_{\text{PI-LightGBM}}$ | S-W          | PI-LightGBM+Eq. (3)        | 0.26 |
| $\sigma_{\text{S-W}}$         | S-W          | 参考文献 <sup>[31,32]</sup>    | 3.03 |
| $\sigma_{\text{Wong}}$        | Hill-Wheeler | 参考文献 <sup>[29,30]</sup>    | 2.86 |
| $\sigma_{\text{NN-Fit}}$      | Hill-Wheeler | Neural Network+Eqs. (1)(2) | 0.86 |

相比之下，本文提出的 PI-LightGBM 模型 (红色虚线) 对所有测试体系的实验数据所在能区均表现出最佳的预测性能，其损失进一步降低至 0.26。这种预测精度的显著提升进一步证明了模型构建的物理残差学习架构以及壳效应距离、同位旋不对称度  $\Delta I$  及形变因子等物理信息的引入，补偿了多通道耦合带来的

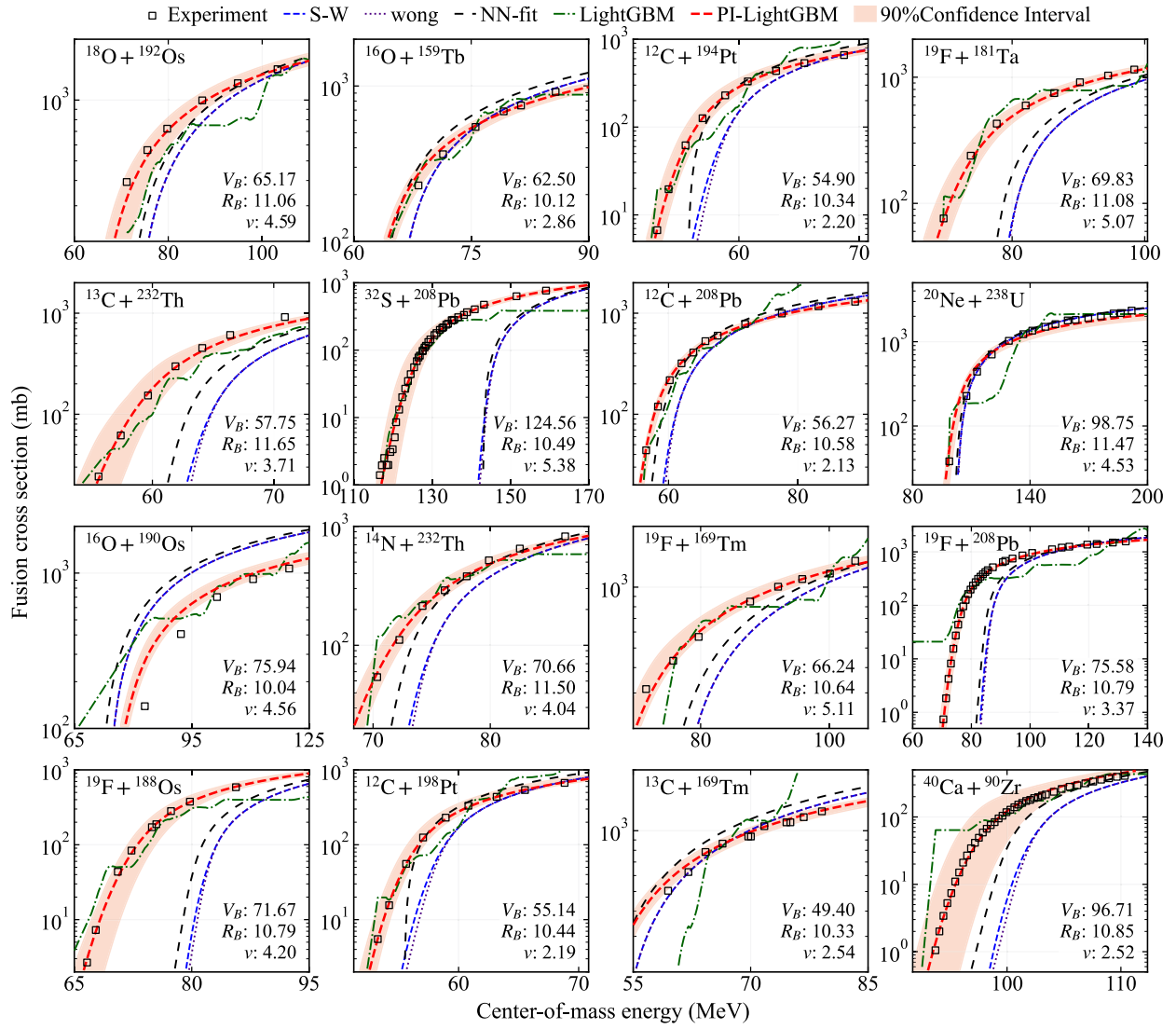


图 3 不同模型对测试集上重离子反应体系的熔合截面预测结果对比图。图中黑色方框代表该反应体系的实验数据 [34]、S-W 代表理论模型 Eq. (3) 预测结果 (蓝色虚线)、Wong 代表理论模型 Eq. (2) 预测结果 (紫色虚线)、NN-fit 代表融入物理信息的神经网络模型预测结果 [24] (黑色虚线)、LightGBM 代表纯数据驱动下的预测模型 (绿色虚线)、PI-LightGBM 代表本文模型预测结果 (红色虚线)、90% Confidence Interval 代表决策树生成的预测方差分布带 Eqs. (7)(8)

Fig. 3. Comparison of fusion cross-section predictions for heavy-ion reaction systems in the test set obtained from different models. The black square symbols represent the experimental data for the corresponding reaction systems [34]. S-W denotes the predictions of the theoretical model given by Eq. (3) (blue dashed curve), while Wong corresponds to the predictions of the theoretical model in Eq. (2) (purple dashed curve). NN-fit represents the predictions of the physics-informed neural network model [24] (black dashed curve), and LightGBM denotes the purely data-driven prediction model (green dashed curve). PI-LightGBM corresponds to the predictions of the proposed model (red dashed curve). The 90% Confidence Interval indicates the predictive variance band generated by the decision trees, as defined in Eqs. (7) and (8).

截面增强。此外，本模型输出的 90% 物理置信带 (红色阴影区域) 的分布宽度随碰撞能量展现出合理的动态变化。在阈上能区，穿透概率趋近于极值，置信带显著收窄；而在亚势垒区，量子隧穿引发的非绝热动力学涨落增强<sup>[41]</sup>，置信带也相应展宽。这不仅覆盖了熔合截面测量固有的较大实验误差，也客观反映了亚势垒区核反应动力学的内在物理不确定性，表明本模型对于亚势垒区的熔合截面具有较好的预测能力。

### 3.3 势垒分布的预测及残差分析

为了评估模型对势垒分布的预测表现，本研究对 PI-LightGBM 输出的势垒高度  $V_B$  及其实验值进行了相关性分析和预测势垒偏差统计，结果如图 4 所示。从图 4 (a) 可以看出，测试集样本的预测值与实验值收敛于理想的  $y = x$  对角线附近。图中每一个散点代表一个特定的重离子碰撞体系。对于主导反应阈值尺度的  $V_B$ ，模型的预测决定系数 ( $R^2$ ) 为 0.984，均方根误差 (RMSE) 为 4.50 MeV，说明模型对多数碰撞体系的  $V_B$  实现了有效拟合。此外，散点附带的误差棒由集成学习框架中的 10 棵独立物理决策树计算得出，反映了亚势垒区微观多体相互作用对预测结果产生的物理涨落。分析图 4 (a) 内嵌的概率密度直方图及高斯拟合曲线可知，预测势垒偏差  $\Delta V_B$  服从近似以零为中心 ( $\mu = -0.008$ )、标准差  $\sigma = 0.075$  的正态分布。图 4 (b) 展示了预测偏差随实验势垒高度的变化情况，预测偏差项在所考察的势垒范围内呈现均匀散布，大部分数据点落在  $\pm 1\sigma$  的区间内，且未随  $V_B$  绝对数值的增加而表现出趋势性发散，说明模型在不同质量区间均保持了稳定的预测精度，不存在明显的系统性偏差。为比较模型预测势垒  $V_B$  与库仑基准势垒  $V_{B0}$  之间的差异，本研究对测试集中 16 个反应体系的  $V_B$  与  $V_{B0}$  进行了比较分析，相关结果如图 4 (c) 所示。结果表明，模型预测的  $V_B$  整体低于相应的  $V_{B0}$ ，其势垒差量  $\Delta V = V_{B0} - V_B$  约为 7.23 MeV，势垒相对差量  $\delta V = (V_{B0} - V_B)/V_{B0}$  为 0.092。图 4 (d) 展示了  $\delta V$  随  $V_{B0}$  的分布，不同反应体系的  $\delta V$  多数分布在 0.07–0.13 范围内，且未随由 Eqs. (6) 计算得到的  $V_{B0}$  增大而出现明显的趋势性发散。上述统计分析说明，PI-LightGBM 对势垒高度的预测性能较好，残差学习策略可以较好的修正 ECC 等微观量子效应对势垒高度预测带来的不利影响，模型预测偏差主要来自于实验数据提取环节中的固有统计涨落。其次，PI-LightGBM 对不同反应体系的  $V_{B0}$  均可以进行较为稳定的相对修正，而不同体系之间的  $\delta V$  存在一定离散性，反映了核形变、壳效应及转移通道等微观结构效应可能改变核-核相互作用势及有效势垒分布，模型可以在宏观库仑尺度基础上进一步捕捉到微观结构信息，并对模型最终预测结果进行一定修正。

准确提取熔合势垒分布 (Fusion Barrier Distribution, FBD) 对分析截面增强的复杂机制至关重要<sup>[42]</sup>。本文利用步长差分法从模型预测的熔合截面中提取 FBD，并与其他模型和实验数据进行比较，进而评估

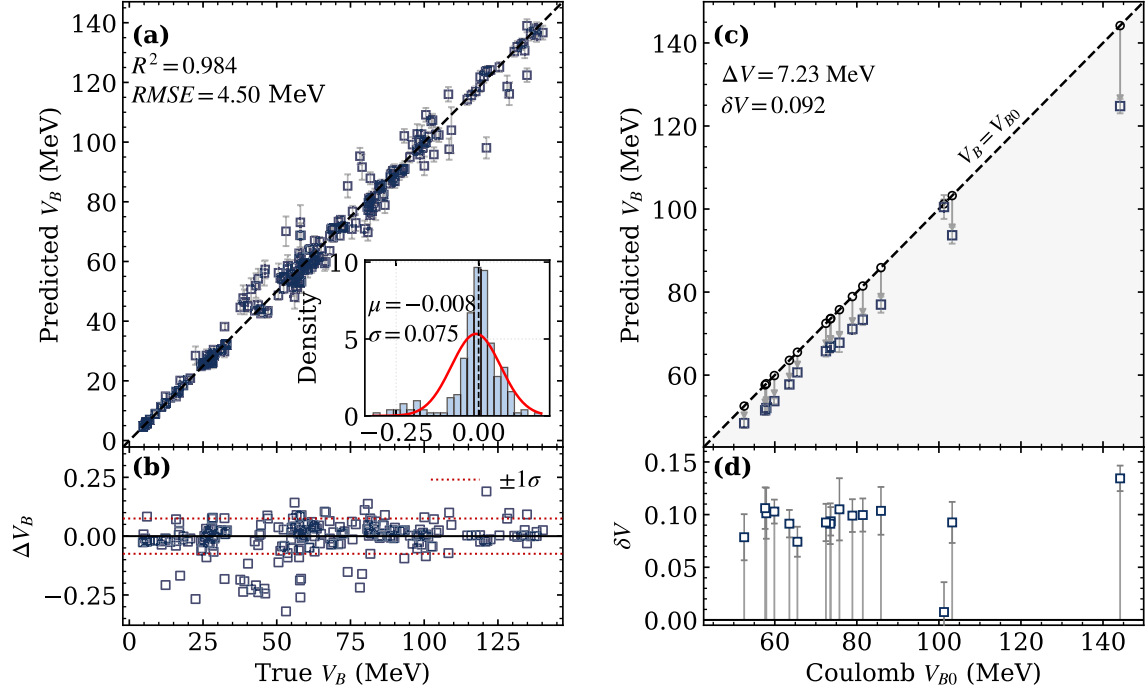


图 4 模型对势垒高度  $V_B$  的预测值和实验值、预测势垒偏差  $\Delta V_B = (V_B^{\text{pred}} - V_B^{\text{true}})/V_B^{\text{true}}$ 、库伦基准势垒  $V_{B0}$  和  $\delta V = (V_{B0} - V_B)/V_{B0}$  的关系，图中每一个空心方框散点代表一个特定的重离子碰撞体系。(a) 势垒预测值与实验值的相关性散点图，误差棒代表由亚势垒区微观相互作用引发的预测波动，内嵌图为预测势垒偏差的密度分布直方图，红色实线为高斯分布拟合曲线；(b)  $\Delta V_B$  随势垒高度实验值的分布情况，两条红色点线代表  $\pm 1\sigma$  的预测分布区间；(c) 测试集中 16 个反应体系预测势垒  $V_B$  与库伦基准势垒  $V_{B0}$  的比较散点图，黑色空心圆表示测试集反应系统的  $V_{B0}$ ，二者之间的箭头表示势垒差量；(d) 测试集反应系统的相对势垒差量  $\delta V$  随  $V_{B0}$  的分布图。

Fig. 4. Relationships among the predicted and experimental values of the barrier height  $V_B$ , the relative barrier-height prediction deviation  $\Delta V_B = (V_B^{\text{pred}} - V_B^{\text{true}})/V_B^{\text{true}}$ , the Coulomb baseline barrier  $V_{B0}$ , and the relative barrier difference  $\delta V = (V_{B0} - V_B)/V_{B0}$ . Each open-square symbol represents a specific heavy-ion collision system. (a) Correlation between the predicted and experimental barrier heights. The error bars indicate prediction fluctuations associated with microscopic interactions in the sub-barrier region. The inset shows the probability-density histogram of the barrier-height prediction deviations, and the solid red curve denotes the Gaussian fit. (b) Distribution of  $\Delta V_B$  as a function of the experimental barrier height; the two red dotted lines indicate the  $\pm 1\sigma$  prediction interval. (c) Comparison between the predicted barrier  $V_B$  and the Coulomb baseline barrier  $V_{B0}$  for the 16 reaction systems in the test set. The black open circles denote  $V_{B0}$  for the test systems, and the arrows connecting  $V_{B0}$  and  $V_B$  indicate the barrier difference. (d) Distribution of the relative barrier difference  $\delta V$  as a function of  $V_{B0}$  for the reaction systems in the test set.

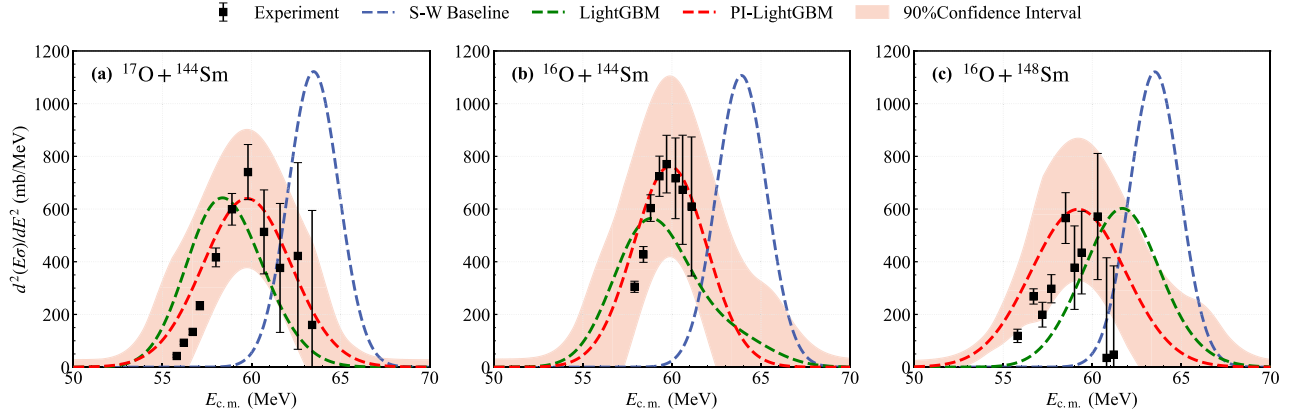


图 5  $^{17}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ 、 $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$  与  $^{16}\text{O} + ^{148}\text{Sm}$  体系的实验与模型预测熔垒势垒分布对比图。图中黑色方块为提取的实验数据, 蓝色虚线和绿色虚线分别代表 S-W 模型 Eq. (3) 和 LightGBM 模型的预测结果, 红色虚线为本文提出的 PI-LightGBM 模型的预测结果, 红色阴影区域代表决策树生成的预测方差分布带 Eqs. (7)(8)。

Fig. 5. Comparison of the experimental and model-predicted fusion barrier distributions for the  $^{17}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ ,  $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ , and  $^{16}\text{O} + ^{148}\text{Sm}$  systems. The black square symbols denote the extracted experimental data. The blue dashed and green dashed curves represent the predictions of the S-W model, Eq. (3), and the LightGBM model, respectively, while the red dashed curve corresponds to the prediction of the proposed PI-LightGBM model. The red shaded region indicates the predictive variance band generated by the decision trees, as defined in Eqs. (7) and (8).

模型对微观通道耦合效应的描述能力。步长差分法提取 FBD 的公式如下 [4]:

$$\frac{d}{dE}[E\sigma_f(E)] = \frac{(E\sigma_f)_2 - (E\sigma_f)_1}{\Delta E} \quad (9)$$

$$\frac{d^2}{dE^2}[E\sigma_f(E)] = \left[ \frac{(E\sigma_f)_3 - 2(E\sigma_f)_2 + (E\sigma_f)_1}{\Delta E^2} \right] \quad (10)$$

如图 4 所示, 本文在验证模型对反应中的势垒高度  $V_B$  预测能力较好的基础上, 结合 Eqs. (3)(9)(10) 提取 FBD, 结果见图 5。对于  $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$  体系, 由于靶核  $^{144}\text{Sm}$  为  $N = 82$  的中子闭壳核且几何形状接近球形, 其实验势垒分布呈现出窄而高的单峰结构 [43]。S-W 基准模型 (蓝色虚线) 受限于抛物线势垒近似产生的对称高斯分布, 低估了有效宽度且峰值能量存在错位, 且由于弹核的质量与自旋等核性质的不同会导致同位素效应的产生, 使得实际提取时 FBD 峰值能量会有所偏差。相比之下, PI-LightGBM 模型 (红色虚线) 预测结果与实验数据更加符合。此外, 在  $^{17}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$  体系中, 熔合前中子转移所形成的额外耦合通道会使得实验峰值向低能端移动, 并呈现出非对称展宽 [43]。纯数据驱动模型在处理此类非绝热涨落时易在低能区产生偏差, 而 PI-LightGBM 通过将同位旋不对称度  $\Delta I$  和形变因子等特征映射到残差空间, 能够较好补偿由额外耦合通道引起的势垒峰值能量降低和分布偏差。这些结果说明, 物理信息的引入可以使 PI-LightGBM 模型较好的修正同位素效应与转移通道对 S-W 模型对 FBD 提取带来的不利影响, 验证

了本模型对该势垒区具有较好的泛化预测能力，且能捕捉到有效的物理变化信息。

### 3.4 模型的物理可解释分析

为了分析模型对引入的物理信息的依赖程度，并增强模型的可解释性和透明度，本研究还引入了全局特征重要性分析（SHapley Additive exPlanations, SHAP）来解释 PI-LightGBM 模型<sup>[44]</sup>。给定特征集合  $F$  与模型预测函数  $f(x)$ ，某一特征  $i$  的 SHAP 值  $\phi_i$  定义为：

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq F \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|F| - |S| - 1)!}{|F|!} [f(S \cup \{i\}) - f(S)] \quad (11)$$

该公式计算了在所有可能的特征组合下，新增特征  $i$  对模型预测带来的边际贡献的加权平均值。

图 6 显示了基于 SHAP 方法的全局特征重要性分析结果。从图中左侧的平均绝对 SHAP 值分布可以看出，归一化碰撞能量  $E_{\text{cm}}/V_{\text{base}}$  是对预测结果贡献最大的特征变量，其权重占比高达 41.41%，其次为质量不对称度为 16.47% 与靶核电荷数  $Z_t$  为 11.15%。这一结果定量反映了归一化碰撞能量在决定熔合截面基本演化趋势中的关键作用，而质量与靶核电荷分布则对反应体系的库仑相互作用产生一定影响。进一步结合图 6 中间的环形图，对各独立特征的绝对贡献度进行了物理分类与全局聚合。结果显示，动力学特征占比最高，达 47.21%；质量与电荷分布特征占比次之，为 42.46%。这两类物理量构成了模型预测的基础。此外，壳效应与形变等微观结构特征合计占比约 10.33%，在亚势垒区的反应动力学过程中提供了必要的物理修正。这种特征权重分配表明，模型有效地结合了宏观碰撞条件与微观量子多道耦合的残差补偿机制。图中右侧的 SHAP 摘要图进一步揭示了各物理特征对模型输出影响的极性与敏感性。摘要图中的每一个散点对应测试集中的一个特定反应样本在特定能量点下的状态，散点颜色代表特征数值的高低。可以看出， $E_{\text{cm}}/V_{\text{base}}$  的高值散点（红色）显著聚集在 SHAP 正值区域，表明能量的提升直接驱动了穿透概率的增加。与之相反，靶核电荷数  $Z_t$  的高值散点则分布在 SHAP 负值区域，这反映了库仑斥力随电荷数增加而增强，进而对熔合截面产生抑制作用的物理事实。此外，对于涉及强形变核（如  $^{154}\text{Sm}$  或  $^{238}\text{U}$ ）的反应体系，尽管形变因子  $\Delta P$  的全局权重占比相对较低，但其散点在 SHAP 图中表现出显著的正向贡献。这与原子核形变与取向涨落导致的动力学势垒展宽，显著提升了亚势垒能区的熔合概率。上述特征分布规律表明，PI-LightGBM 模型依赖于学习残差空间中的微观物理变量，从而提高模型对亚势垒区的预测能力。

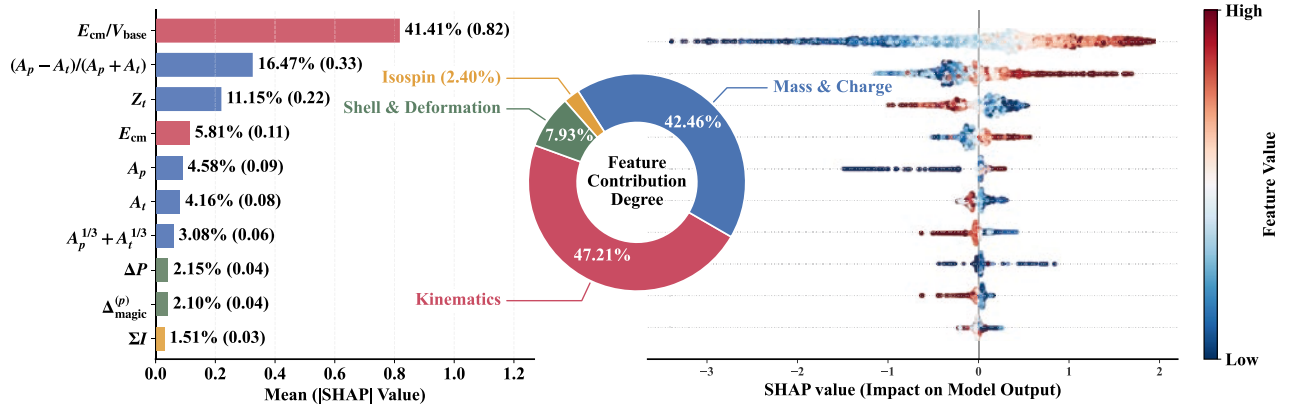


图 6 SHAP 特征解释图。左侧柱状图展示了各物理特征对模型预测输出的平均贡献权重；中间环形图将特征按物理属性聚合，展示了动力学特征 (47.21%)、质量与电荷分布 (42.46%) 及微观结构特征 (10.33%) 的总体占比；右侧 SHAP 摘要图展示了各特征对预测结果的影响极性，图中每一个散点代表一个独立反应样本，颜色由蓝到红代表特征值由低到高。

Fig. 6. SHAP feature interpretation plots. The bar chart on the left presents the average contribution weight of each physical feature to the model predictions. The central donut chart groups the features according to their physical attributes, illustrating the overall contributions from dynamical features (47.21%), mass and charge distributions (42.46%), and microscopic structural features (10.33%). The SHAP summary plot on the right displays the polarity of feature influences on the prediction results. Each scatter point corresponds to an individual reaction sample, and the color scale from blue to red indicates feature values ranging from low to high.

## 4 结 论

本研究利用残差学习策略将 LightGBM 与 S-W 唯象公式结合，并引入壳修正能量、质量数及  $P$  因子等关键物理信息，构建了 PI-LightGBM 模型对重离子熔合截面与势垒分布进行预测。研究发现，模型在测试集上 (16 组独立测试反应体系) 的熔合截面预测值与实验值的 RMSLE 仅为 0.26，其预测性能明显优于纯数据驱动的 LightGBM 模型和仅结合物理信息的神经网络模型。在势垒分布预测方面，PI-LightGBM 预测的势垒高度与实验提取值具有较高的相关性，其决定系数达到  $R^2 = 0.984$ ，均方根误差为 4.50 MeV，预测势垒偏差服从近似以零为中心 ( $\mu = -0.008$ )、标准差  $\sigma = 0.075$  的正态分布，且未随势垒高度增加表现出系统性发散。进一步对  $^{17}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ 、 $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$  和  $^{16}\text{O} + ^{148}\text{Sm}$  体系的熔合势垒分布进行提取，发现 PI-LightGBM 可修正同位素效应和转移通道产生的势垒峰位偏移和宽度低估等不利影响。全局特征重要性分析显示，原子核壳效应和形变信息等相关特征为模型预测的修正提供了关键物理信息。以上结果表明，PI-LightGBM 将可解释的物理先验模型与机器学习模型相结合，在重离子熔合截面和势垒分布预测中均表现出较好的泛化能力，物理信息的引入使模型对亚势垒区的预测能力进一步提升，并且提高了模型

的物理可解释性，验证了基于物理信息的机器学习方法在熔合反应截面和势垒分布预测中的有效性，可为超重核合成实验参数的评估和核-核相互作用势预测研究提供一种有效候选方案。

## 参考文献

- [1] Jiang C L, Back B B, Rehm K E, Hagino K, Montagnoli G, Stefanini A M 2021 *Eur. Phys. J. A* **57** 235
- [2] Back B B, Esbensen H, Jiang C L, Rehm K E 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 317
- [3] Montagnoli G, Stefanini A M 2017 *Eur. Phys. J. A* **53** 169
- [4] Montagnoli G, Stefanini A M 2023 *Eur. Phys. J. A* **59** 138
- [5] Sun X X, Guo L 2022 *Commun. Theor. Phys.* **74** 097301
- [6] Xia J W, Zhan W L, Wei B W, Yuan Y J, Song M T, Zhang W L, Yang X D, Yuan P, Gao D Q, Zhao H W 2002 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **488** 11
- [7] Liu W P 2014 *PHYSICS* **43** 150. (in Chinese)[柳卫平 2014 物理 43 150]
- [8] Balantekin A B, Takigawa N 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 77
- [9] Dasgupta M, Hinde D J, Rowley N, Stefanini A M 1998 *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **48** 401
- [10] Fröbrich P 1984 *Phys. Rep.* **116** 337
- [11] Canto L F, Gomes P R S, Donangelo R, Hussein M S 2006 *Phys. Rep.* **424** 1
- [12] Diaz-Torres A, Gasques L R, Wiescher M 2007 *Phys. Lett. B* **652** 255
- [13] Niu Z M, Liang H Z 2018 *Phys. Lett. B* **778** 48
- [14] Utama R, Piekarewicz J, Prosper H B 2016 *Phys. Rev. C* **93** 014311
- [15] Li F, Wang Y, Lü H L 2020 *J. Phys. G Nucl. Part. Phys.* **47** 115104
- [16] Wu D, Bai C L, Sagawa H 2020 *Phys. Rev. C* **102** 054323

- [17] Utama R, Chen W C, Piekarewicz J 2016 *J. Phys. G Nucl. Part. Phys.* **43** 114002
- [18] Wang Z A, Pei J, Liu Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 122501
- [19] Song L H, Zhu Z C, Yang H, Shi Z J, Wang Q, Zhang S J, Luo W 2026 *Ann. Nucl. Energy* **237** 112485
- [20] Niu Z M, Liang H Z, Sun B H 2019 *Phys. Rev. C* **99** 064307
- [21] Wu X H, Lu Y Y, Zhao P W 2022 *Phys. Lett. B* **834** 137394
- [22] Akkoyun S 2020 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **462** 51
- [23] Dell'Aquila D, Gnoffo B, Lombardo I, Porto F, Russo M 2023 *J. Phys. G Nucl. Part. Phys.* **50** 015101
- [24] Gao Z P, Liu S Y, Wen P W, Liao Z H, Yang Y, Su J, Wang Y J, Zhu L 2024 *Phys. Rev. C* **109** 024601
- [25] Li Z L, Gao Z P, Liu L, Wang Y J, Zhu L, Li Q F 2024 *Phys. Rev. C* **109** 024604
- [26] Cheng K X, He R X, Qiao C Y, Ma C W 2025 *Nucl. Sci. Tech.* **36** 194
- [27] Li Z L, Wang Y J, Li Q F 2025 *Nucl. Tech.* **48** 050012. (in Chinese)[李志龙, 王永佳, 李庆峰 2025 核技术 48 050012]
- [28] Wong C Y 1973 *Phys. Rev. Lett.* **31** 766
- [29] Hill D L, Wheeler J A 1953 *Phys. Rev.* **89** 1102
- [30] Swiatecki W J, Siwek-Wilczynska K, Wilczynski J 2005 *Phys. Rev. C* **71** 014602
- [31] Huang Z L, Li Z L, Gao Z P, Wang Y J, Li Q F 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 020117. (in Chinese)[黄智龙, 李志龙, 高泽鹏, 王永佳, 李庆峰 2026 物理学报 75 020117]
- [32] Wang B, Wen K, Zhao W J, Zhao E G, Zhou S G 2017 *At. Data Nucl. Data Tables* **114** 281
- [33] Ke G L, Meng Q, Finley T, Wang T F, Chen W, Ma W D, Ye Q W, Liu T Y 2017 In *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 30. pp 3146–3154

- [34] NRV Project 2026. <http://nr.v.jinr.ru/nrv/>. Electronic resource, cited 2026-05-29
- [35] He K M, Zhang X Y, Ren S Q, Sun J 2016 In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. pp 770–778
- [36] Karpov A V, Saiko V V 2017 *Phys. Rev. C* **96** 024618
- [37] Umar A S, Simenel C, Godbey K 2021 *Phys. Rev. C* **104** 034619
- [38] Otsuka T, Suzuki T, Fujimoto R, Grawe H, Akaishi Y 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 232502
- [39] Cheng K X, Xu C 2020 *Nucl. Phys. Rev.* **37** 809. (in Chinese)[程凯旋, 许昌 2020 原子核物理评论 37 809]
- [40] Newton J O, Butt R D, Dasgupta M, Hinde D J, Gontchar I I, Morton C R, Hagino K 2004 *Phys. Rev. C* **70** 024605
- [41] Jiang C L, Rehm K E, Back B B, Janssens R V F 2007 *Phys. Rev. C* **75** 015803
- [42] Dasso C H, Landowne S, Winther A 1983 *Nucl. Phys. A* **405** 381
- [43] Wang N 2025 *Chin. Phys. C* **49** 124106
- [44] Lundberg S M, Lee S I 2017 In *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. pp 4768–4777

# Prediction of heavy-ion fusion cross sections and barrier distributions based on physics-informed machine learning\*

LU Zhepeng<sup>1)2)</sup>   WU Jinhan<sup>1)2)</sup>   ZHANG Shutong<sup>1)2)</sup>   MA Chunwang<sup>3)</sup>  
CHENG Kaixuan<sup>3)</sup>   LI Zhicai<sup>1)2)</sup>†   LUO Wen<sup>1)2)</sup>‡

1) ( *School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang 421001, China* )

2) ( *Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Design and Safety, Ministry of Education, Hengyang 421001, China* )

3) ( *School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China* )

## Abstract

Reliable heavy-ion fusion cross sections in the sub-barrier region are essential for selecting beam-target combinations and incident energies in superheavy-nucleus synthesis, but their prediction remains difficult because quantum tunneling is strongly modified by couplings to collective excitations, nucleon transfer, and static deformation. Conventional phenomenological formulas impose rigid analytic barrier shapes, whereas purely data-driven models may violate the Coulomb asymptotic behavior when extrapolated to sparsely sampled energies. To address both limitations, we develop a physics-informed Light Gradient Boosting Machine (PI-LightGBM) by combining the Swiatecki-Wilczynska (S-W) phenomenological formula with a

---

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2022YFA1603300), the High-level Talent Program of University of South China (Grant No. 5524GC015), and the Hunan Provincial Innovation Training Program for College Students (Grant No. S202510555210).

† Corresponding author. E-mail: lizhicai@usc.edu.cn, wenluo-ok@163.com

The First Author. E-mail: lu\_zhepeng@163.com

residual-learning strategy. A database containing 3842 fusion cross-section-energy points from 235 reaction systems is assembled. Among them, 219 systems (3585 points) are used for training and validation, while 16 systems (257 points) constitute a reaction-wise isolated test set. The S-W prediction and the Coulomb baseline barrier provide the macroscopic reference, and LightGBM learns logarithmic residual corrections from projectile and target charges and masses, collision energy, mass asymmetry, Coulomb and size factors, isospin asymmetry, distance-to-magic-number indicators, and deformation-related proxies. Ten bootstrap submodels are aggregated to obtain the ensemble mean and a 90% confidence interval, thereby combining physical constraints, data-driven correction, and uncertainty quantification within a unified framework. On the independent test set, PI-LightGBM achieves a global root-mean-square logarithmic error of 0.26, compared with 0.94 for the purely data-driven LightGBM model, 3.03 for the S-W model, 2.86 for the Wong formula, and 0.86 for a physics-informed neural-network fit. For the extracted barrier heights, the coefficient of determination is 0.984 and the root-mean-square error is 4.50 MeV. The normalized barrier-height deviations are approximately Gaussian, with a mean of -0.008 and a standard deviation of 0.075, and show no systematic increase with barrier height. Relative to the Coulomb baseline, the predicted effective barriers are lower by 7.23 MeV on average, corresponding to a mean relative difference of 0.092; this behavior indicates a stable but system-dependent correction beyond the macroscopic Coulomb scale. Fusion barrier distributions extracted by finite differences for  $^{17}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ ,  $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ , and  $^{16}\text{O} + ^{148}\text{Sm}$  more closely follow the experimental peak positions and widths than the S-W baseline and the purely data-driven model, suggesting that isotope dependence and transfer-channel effects are partially accounted for. SHAP analysis further identifies normalized collision energy as the dominant individual feature, while kinematic, mass-and-charge, and microscopic shell/deformation features contribute 47.21%, 42.46%, and 10.33%, respectively. These results demonstrate that the proposed framework integrates physical asymptotics, residual learning, uncertainty quantification, and interpretable feature analysis, and provides a practical candidate for predicting fusion observables in unmeasured systems and for supporting the evaluation of reaction conditions in superheavy-nucleus synthesis and nucleus-nucleus interaction potentials.

**Keywords:** Heavy-ion fusion cross section; barrier distribution; physics-informed machine learning; residual learning