

核物理主题数据: 实验、理论与应用专题

机器学习在裂变势垒高度和基态结合能中的应用*

张旭喆# 李佳星# 陈婉玲 张鸿飞†

(西安交通大学物理学院, 西安 710049)

(2025 年 9 月 17 日收到; 2025 年 10 月 16 日收到修改稿)

超重核的裂变势垒高度和基态结合能是影响熔合反应中存活概率的关键物理量, 其准确性是存活概率计算中不确定性的主要来源. 本工作应用迁移学习技术来训练神经网络模型, 通过结合理论模型预测数据和实验数据, 改进了有限程液滴模型 (FRLDM) 和 WS4 理论模型对裂变势垒高度的预测. 结果显示, FRLDM 模型的均方根误差从 1.03 MeV 降低到 0.60 MeV, WS4 模型的均方根误差从 0.97 MeV 降低到 0.61 MeV. 对于结合能, 本文优化了 AME2020 的实验值与 WS4 理论预测之间的差值. 在测试集上, 均方根误差从 0.33 MeV 降低到 0.17 MeV, 而在整个数据集上, 其从 0.29 MeV 降低到 0.26 MeV. 本研究为提高裂变势垒高度和结合能预测的准确性提供了一种具有前景的方法, 这将有助于提高核反应存活概率计算的精度. 本文数据集可在 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.28388> 中访问获取.

关键词: 裂变势垒, 结合能, 机器学习, 超重核**DOI:** 10.7498/aps.75.20251278**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251278

1 引言

裂变势垒高度和基态结合能是原子核最基本的性质之一^[1-3], 准确预测其数值对于当前的核物理研究至关重要^[4,5]. 自 19 世纪 60 年代门捷列夫发现元素周期性并建立了第 1 个元素周期表以来, 元素周期表中已经正式确认了 118 种元素^[6,7]. 目前, 全球正在积极努力合成第 119 号元素和更重的元素, 但在此过程中面临着巨大的挑战. 实现这一目标不仅对加速器束流强度、反冲分离器和探测系统提出了更高的要求, 还需要对在极端条件下产生新核素的关键物理机制有深入的理解. 例如, 具有双重幻数结构 ($Z = 20, N = 28$) 和中子富集的 ^{48}Ca , 一直是合成超重元素最成功的弹丸之一^[8-10]. 然而, 由于技术限制, 当前无法制备比铪 (Cf) 更重的靶材料. 这使得由于找不到合适的靶核, 继续

使用 ^{48}Ca 作为弹丸来合成第 119 号元素变得困难. 因此, 必须探索新的合成机制, 包括使用更重的离子束作为弹核, 以推进新元素的研究. 通过理论模型精确预测最佳反应组合、入射能量和衰变路径是克服这些瓶颈的关键^[11-13]. 为此, 理论家们开发了各种模型, 旨在揭示超重核的合成机制. 在这些模型中, 裂变势垒高度和核质量是决定反应存活概率的关键因素, 因此获得这两个方面的可靠数据对于成功合成超重元素至关重要^[11,14].

经典的液滴模型曾经预测, 原子序数 $Z > 103$ 的核不能稳定存在. 然而, 随着核结构理论的发展, 研究者们发现量子壳效应可以增强超重核的稳定性, 使其的存在成为可能. 目前, 已知最重的双重幻数核是 ^{208}Pb , 其具有闭合的质子壳和中子壳, 表现出很高的稳定性. 理论预测表明, 在更高的原子序数处存在另一个双重幻数区域. 这个区域的核具有很高的裂变势垒高度和相对较长的寿命, 统称为

* 国家自然科学基金 (批准号: 12175170, 11675066) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: zhanghongfei@lzu.edu.cn

“稳定岛”. 这个稳定岛是超重核研究的核心焦点, 对于理解核力和核物质的极限非常重要. 同时, 对单核子和双核子分离能的分析提供了一种清晰的方法来识别壳闭合 [15-17]. 此外, 裂变势垒高度是衡量超重核稳定性的一个关键参数, 并为定位稳定岛提供了重要的补充信息. 然而, 超重核的这些物理量的值主要依赖于核结构模型的预测. 不同模型之间的理论假设和参数选择的差异导致其结果存在很大的不确定性. 因此, 获得可靠的裂变势垒高度和基态结合能数据对于确定超重稳定岛的位置至关重要.

神经网络受生物神经系统的结构和功能启发, 能够进行大规模并行和分布式信息处理, 并且擅长拟合复杂的非线性数据 [18-20]. 近年来, 机器学习在核物理中的应用日益广泛, 例如计算 α 衰变半衰期 [21]、估算 β 衰变能量 [22]、预测核质量 [5,18,23]、研究核结构性质 [24] 等, 同时, 在粒子物理方面也有重要的应用 [25]. 在本研究中引入了一种基于物理领域的神经网络方法, 以改进核数据的预测. 该方法遵循迁移学习的思路: 首先利用传统理论模型的结果对神经网络进行预训练, 使其能够提取和掌握核过程的基本规律; 随后, 再结合可获得的实验数据对网络进行微调, 使其预测结果向实际测量值靠拢. 通过这种方式, 该方法既能够保持理论模型的物理一致性, 又能够充分吸收实验数据所提供的准确性.

本文的结构如下: 在第 2 节中, 介绍了机器学习模型的理论框架, 详细阐述了其设计框架和基本原理; 在第 3 节中, 对结果进行分析和讨论; 在第 4 节中, 对所做的工作进行总结.

2 理论框架

2.1 神经网络方法

鉴于反向传播神经网络 (backpropagation neural network, BPNN) 涉及前向传播和反向传播两个阶段, 能够更高效、更准确地预测未知数据, 本研究采用这种方法来构建模型. 在前向传播中, 输入数据逐层传递以生成网络输出, 而在反向传播中, 通过将预测输出与目标值进行比较来调整层间关系. 本工作中使用的神经网络架构包括一个输入层、两个隐藏层和一个输出层; 输入与输出之间的函数关系可以表示为

$$y = a + \sum_{j=1}^{H_2} b_j f \left[c_j + \sum_{k=1}^{H_1} d_{jk} f \left(e_k + \sum_{i=1}^n g_{ki} x_i \right) \right], \quad (1)$$

其中, 权重参数为 $W = (b_j, d_{jk}, g_{ki})$, 偏置参数为 $B = (a, c_j, e_k)$, a 是输出神经元的偏置, b_j 是第 2 层中第 j 个隐藏神经元与输出层之间的权重参数, c_j 是第 2 隐藏层中第 j 个隐藏神经元的偏置, d_{jk} 是第 1 层中第 k 个隐藏神经元与第 2 层中第 j 个隐藏神经元之间的权重参数, e_k 是第 1 隐藏层中第 k 个隐藏神经元的偏置, g_{ki} 是第 i 个输入单元与第 1 隐藏层中第 k 个隐藏神经元之间的权重参数, H_1 是第 1 隐藏层的神经元数量, H_2 是第 2 隐藏层的神经元数量, n 是输入单元的数量; x_i 是第 i 个输入单元, f 是 BPNN 的激活函数.

在训练之前, 根据样本数据的特征构建了一个 BPNN 模型. 网络规格包括 (\mathbf{X}_i, Y_i) 以及两个隐藏层的神经元数量 (H_1, H_2) , 其中 \mathbf{X}_i 和 Y_i 分别表示第 i 个样本的输入变量和目标值. 在本工作中, 输入 \mathbf{X}_i 始终是一个二维向量, 而目标值 Y_i 是一个标量. 在训练过程中, 将 \mathbf{X}_i 代入 (1) 式得到的输出值 y_i 和 Y_i 决定了训练损失 l , 表示如下:

$$l = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - Y_i)^2, \quad (2)$$

其中, N 是数据总数; y_i 是网络对第 i 个样本的预测输出. 利用训练损失, 通过反向传播更新神经网络参数, 从而得到一组新的权重参数和偏置参数:

$$W_{e+1} = W_e - \eta \frac{\partial l_e}{\partial W_e}, \quad (3)$$

$$B_{e+1} = B_e - \eta \frac{\partial l_e}{\partial B_e}, \quad (4)$$

其中, η 是学习率, 其作为参数更新的步长, 本研究中设置动态学习率, 其范围为 $[0.1, 0.001]$, e 表示训练周期 (epoch); $\frac{\partial l_e}{\partial W_e}$ 和 $\frac{\partial l_e}{\partial B_e}$ 是通过链式法则反向传播计算出的梯度. 在更新过程中, 新的参数被重新代入 (1) 式. 随着训练周期数的增加, 权重值和偏置值不断变化, 直到损失 l 降到预设的目标范围内, 或者达到最大训练周期数.

2.2 迁移学习

迁移学习是机器学习和深度学习中的一个重要概念, 其具有将在一个任务上学到的知识或数据特征应用到另一个相关任务上的能力. 通常是指将

一个经过大规模数据集上训练的预训练模型, 应用到新的、但相关的任务上的过程. 迁移学习作为机器学习中的一种重要方法, 核物理学家已经使用其进行了很多核物理方面的相关工作^[26-28]. 在本文中, 采用受核物理过程限制的迁移学习方法, 对神经网络模型进行了深度微调. 通过这一过程, 我们不仅提升了模型的精准性, 还极大地增强了其在实际应用中的可靠性, 为相关领域的研究与实践提供了有力支持.

在这项工作中, 我们使用 Python 程序中所带有的神经网络模型架构 Tensorflow 构建裂变势垒高度模型以及结合能模型. 裂变势垒高度模型包含两个隐藏层, 每个隐藏层有 $H_1 = H_2 = 128$ 个神经元. 输入是质子数 Z 和质量数 A ; 激活函数是 ReLU (rectified linear unit). 在预训练阶段, 使用理论数据集 FRLDM^[29] 和 WS4^[4] 分别训练两个不同的模型. 随后, 冻结输入层和隐藏层的参数, 并使用实验中已经测得的裂变势垒高度数据通过迁移学习对每个模型进行微调, 从而得到最终的裂变势垒高度模型.

结合能模型同样包含两个隐藏层, 其中 $H_1 = H_2 = 128$, 并采用相同的输入变量和激活函数. 对于输出量, AME2020^[30] 中列出的 2550 个结合能 (不包括外推条目) 作为实验数据. 运用 WS4^[31] 模型中的数据作为理论数据. 针对实验数据和理论数据中含有相同的质子数 Z 和质量数 A 的原子核, 我们将实验数据和理论数据作差, 最终得到了一组 2457 个差值. 鉴于当前核物理的重点, 我们专注于超重核领域. 由此, 2457 个残差值被划分为 2410 个较轻核 ($8 \leq Z < 100$) 数据集和 47 个较重核 ($Z \geq 100$) 数据集. 结合能模型首先在较轻核数据集上进行预训练; 然后冻结隐藏层, 并使用较重核数据集进行迁移学习, 从而获得最终的结合能模型.

3 结果和讨论

3.1 裂变势垒高度模型

在本文中, 将神经网络方法与迁移学习相结合, 并将其应用于两种广泛使用的裂变势垒高度模型, 即 FRLDM 和 WS4. 我们的理论数据集专注于质子数在 $80 \leq Z \leq 120$ 、中子数 $116 \leq N \leq 184$ 以及质量数 $A > 195$ 的核, 总共包含 1239 个数据点.

这些数据被分为训练集和验证集, 比例为 6:4. 对于实验数据集, 80% 应用于训练集和验证集, 剩下的 20% 作为测试集, 以严格评估模型在未见核素上的性能. 上述 80% 的部分进一步分为 60% 的训练集和 40% 的验证集. 表 1 比较了本文人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 对测试集中 15 个核的预测裂变势垒高度与实验测量值以及原始理论模型的结果. 具体来说, ANN_F 和 ANN_W 分别代表在 FRLDM 和 WS4 数据集上预训练的神经网络模型, 然后通过迁移学习用实验数据进行微调.

表 1 测试集数据的裂变势垒高度 (单位: MeV) 与其他理论评估及实验数据^[32] 的比较

Table 1. Comparison of fission barriers (in MeV) for the test set data with other theoretical evaluations and experimental data^[32].

核素	质子数	质量数	实验值	FRLDM	ANN _F	WS4	ANN _W
²⁰⁷ Po	84	207	19.3	20.0	19.5	18.47	19.24
²⁰⁸ Po	84	208	19.9	20.8	20.5	19.92	20.36
²¹² Po	84	212	19.6	20.2	20.7	20.95	20.90
²²⁷ Ac	89	227	7.40	6.98	8.37	7.16	7.44
²³³ Th	90	233	6.65	5.47	6.24	6.95	6.96
²³⁹ U	92	239	6.00	6.21	5.94	5.50	6.17
²³⁶ Np	93	236	5.40	4.81	4.88	4.98	5.34
²³⁷ Np	93	237	5.40	4.94	5.03	4.95	5.43
²⁴² Pu	94	242	5.05	6.41	5.88	6.19	5.56
²⁴³ Pu	94	243	5.45	6.66	5.45	6.59	5.66
²⁴⁰ Am	95	240	6.00	6.12	5.23	4.72	4.75
²⁴¹ Am	95	241	5.35	6.34	5.44	5.08	4.96
²⁴³ Am	95	243	5.05	6.80	5.86	5.97	5.30
²⁴¹ Cm	96	241	5.50	6.32	5.23	4.68	4.54
²⁴⁸ Cm	96	248	4.80	6.80	5.27	7.03	5.49

表 1 结果表明, 与原始的 FRLDM 和 WS4 模型相比, 两种 ANN 模型与实验值的一致性都有了显著提高. 例如, 对于钷-243 (²⁴³Pu) 核, 经过 ANN_F 的模型训练后, 其裂变势垒高度从原先的 6.66 MeV 下降至 5.45 MeV, 与实验数据完全吻合. 同样, 经过 ANN_W 模型训练后的结果从 6.59 MeV 显著下降至 5.66 MeV, 与实验值的误差从原先的 1.14 MeV 下降至 0.21 MeV. 由此可见经过 ANN 修正后的裂变势垒高度与实验数据的偏差显著减小, 这表明神经网络有效地捕捉并纠正了理论模型中的系统误差. 同时也表现了迁移学习运用在核物理领域的可行性, 能够让模型在微调阶段更准确地捕捉实验数据的规律, 这对于精确计算核稳定性和裂变概率具有重要意义.

为了清晰地展示 ANN 模型的有效性, 将表 1 中的数据绘制在图 1 中. 我们比较了两种神经网络模型 (ANN_F 和 ANN_W)、相应的理论模型 (FRLDM 和 WS4) 以及实验数据对测试集中 15 个核的裂变势垒高度的预测. 在图 1(a) 中, 可以看到 ANN_F 模型改进了 FRLDM 的预测, 使其更接近实验值. 这种改进在钍-233(^{233}Th)、钚-243(^{243}Pu)、镅-241(^{241}Am) 和镅-248(^{248}Cm) 等核上尤为明显, ^{233}Th 的裂变势垒高度误差从 1.18 MeV 下降至 0.41 MeV, ^{243}Pu 的裂变势垒高度误差从 1.21 MeV 下降至与实验数据完全吻合, ^{241}Am 的裂变势垒高度误差从 0.99 MeV 下降至 0.09 MeV, ^{248}Cm 的裂变势垒高度误差从 2.00 MeV 下降至 0.47 MeV. 针对原子核钚-242(^{242}Pu), 钚-243(^{243}Pu), 镅-241(^{241}Am), 镅-243(^{243}Am), 镅-241(^{241}Cm), 镅-248(^{248}Cm), 经神经网络优化后, 原始模型的系统性高估得到了有效降低. 在图 1(b) 中, ANN_W 模型也明显优于 WS4 模型, 在局部上, 例如钚-242(^{242}Pu) 和钚-243(^{243}Pu), 二者的误差分别从 1.14 MeV 下降至 0.51 MeV 和 0.21 MeV. 特别是在镅-248

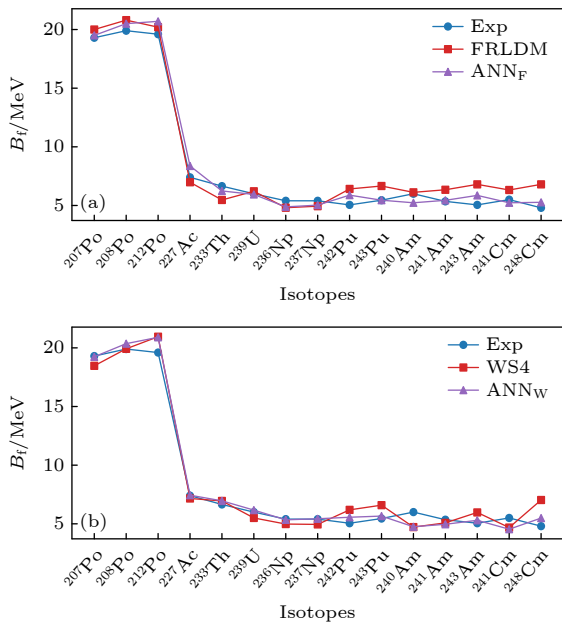


图 1 测试集中裂变势垒高度 B_f 的实验值和理论估算值的比较. 蓝色圆圈代表实验结果, 红色正方形表示 FRLDM 或 WS4 的结果, 紫色三角形表示在不同理论模型 (FRLDM 或 WS4) 的数据集上预训练的神经网络模型的结果

Fig. 1. Comparison of experimental and theoretical estimates of the fission barrier B_f in the test set. Blue circles represent experimental results, red squares indicate the results from FRLDM or WS4, and purple triangles show the results from neural network models pre-trained on datasets of different theoretical models (FRLDM or WS4).

(^{248}Cm) 上, 其裂变势垒高度误差从 2.23 MeV 下降至 0.69 MeV, 误差下降了 32%. 而在测试集数据的整体趋势上, ANN_W 更准确地匹配了实验数值的趋势, 而 WS4 则显示出一定的偏差. 两种神经网络模型 (ANN_F 和 ANN_W) 相对于原先的理论模型在锕系元素上的表现较为突出, 说明神经网络模型能更好捕捉到放射性元素的裂变势垒高度数据的规律. 这一结果再次表明了 ANN 在迁移学习的微调过程中能够有效纠正理论模型中的系统误差, 更准确地反映实验数据的特征, 提供更精确的裂变势垒高度预测.

在图 2 中, 使用均方根误差 (root mean square error, RMSE) 量化了模型在优化前后的性能. 对于测试集中的 15 个核, FRLDM 模型的均方根误差从 1.03 MeV 降至 0.60 MeV, 降低了 42%. WS4 模型的均方根误差从 0.97 MeV 降至 0.61 MeV, 降低了 37%. 这同时印证了图 1 中神经网络模型的整体曲线更加贴合实验数据曲线的结果, 表明神经网络优化显著提高了模型与实验数据的拟合度, 也表明了迁移学习在核物理领域是适用和可靠的. 此外, 误差的降低意味着裂变势垒高度的预测更加准确和可靠, 从而提高了我们对超重核存活概率准确计算的信心.

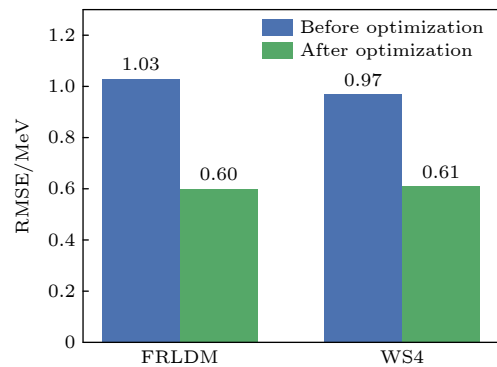


图 2 由 FRLDM 和 WS4 提供的测试数据在优化前后的均方根误差

Fig. 2. The root mean square error (RMSE) of the test data provided by FRLDM and WS4 before and after optimization.

图 3 展示了使用预训练数据集 (1239 个数据点) 的 FRLDM, ANN_F , WS4 和 ANN_W 模型的裂变势垒高度. 对于质子数 $Z < 90$ 的核, FRLDM/ ANN_F 和 WS4/ ANN_W 预测的裂变势垒高度显示出良好的一致性, 表明神经网络模型在处理此区域的数据时与原先的理论模型相似, 侧面表现了在

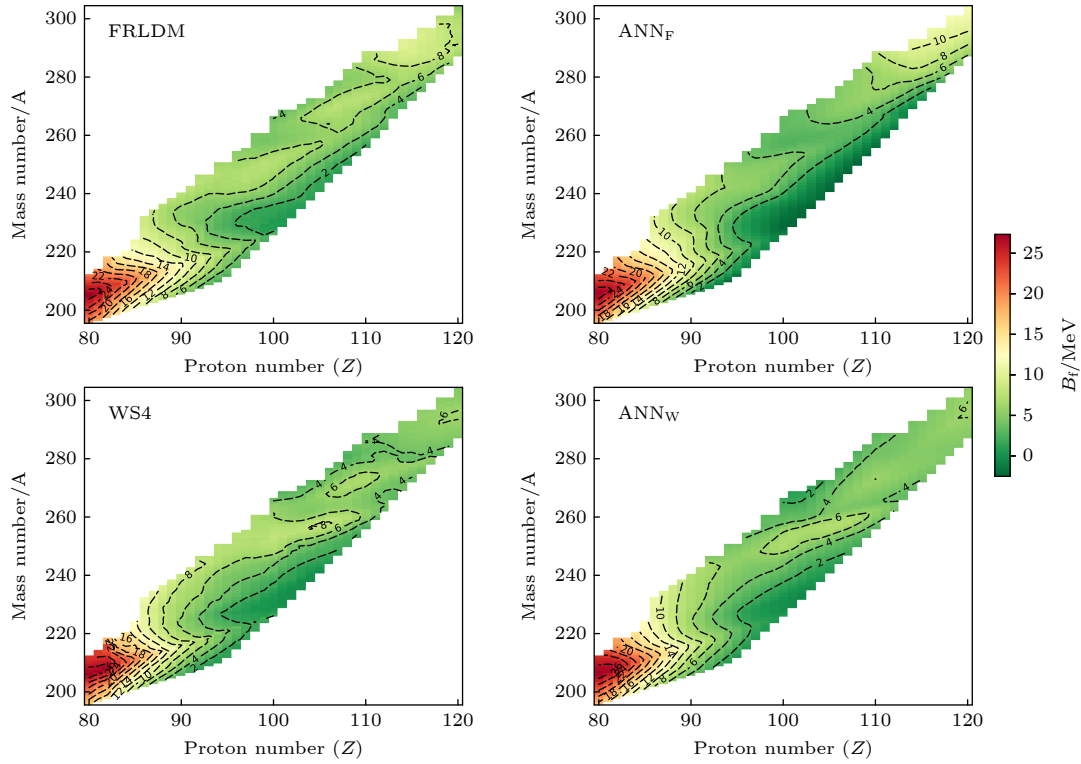

 图 3 由 FRLDM, ANN_F, WS4 和 ANN_W 对预训练数据集估计的裂变势垒 B_f 的等值线图

 Fig. 3. Contour plots of the fission barrier B_f estimated by FRLDM, ANN_F, WS4, and ANN_W for the pre-trained datasets.

该区域宏观效应占主导地位. 然而, 当 $Z \geq 90$ 时, ANN_F 系统的预测值比 FRLDM 低 1—3 MeV 的势垒. 在超重区域 ($Z \geq 104$), ANN_W 的结果通常比 WS4 的预测低 1—2 MeV. 随着质子数的增大, 这些不断增长的差异可能反映了对重核和超重核微观效应的不同理论处理方式. 对于大部分超重核, ANN_F 和 ANN_W 预测的势垒显著降低, 表明这些神经网络模型对微观效应提供了更精确的修正. 这一发现为理解超重核的稳定性和计算存活概率提供了重要的理论意义. 并且值得注意的是, ANN_F 预测的结果中, 裂变势垒高度在 $Z = 115$ 至 $Z = 120$ 范围内, 其存在一定的上升趋势, 这意味着其核结构相对稳定, 且在基态时的能量较低, 这可能对我们探索超重核稳定岛提供新的感悟与启发.

3.2 基态结合能模型

上文已经将 2457 个核数据点根据它们的原子序数分为两组: 2410 个较轻的核 ($8 \leq Z < 100$) 和 47 个较重的核 ($Z \geq 100$). 较轻的核数据集被用于模型的预训练阶段, 以充分学习低质子数和中等质子数区域核结合能的系统趋势, 而较重的核数据集

则被用于随后的迁移学习阶段, 以使模型能够更好地适应高质子数区域核性质的预测. 较轻的核数据集进一步被分为训练集 (60%) 和验证集 (40%). 对于较重的核数据集, 20% 被保留作为测试集用于最终评估, 剩余的 80% 用于训练和验证, 其中 40% 专门分配给验证集, 另外的 60% 分配给训练集. 图 4 显示了模型在不同数据集上优化前后的均方根误差. 可以看出, 测试集上的均方根误差从 0.33 MeV 显著降低到 0.17 MeV, 降低了 48%, 这表明神经网络模型对未见数据的预测能力有了显著提升, 从侧面反映出神经网络模型出色的非线性拟合性能, 展现了其优于传统理论模型的预测优势. 在对完整数据集进行分析时, 我们观察到均方根误差也有所改善, 从 0.29 MeV 降低到了 0.26 MeV, 大约降低了 10%. 这一结果表明, 尽管原始模型 (WS4) 在观测数据上已经达到了合理的拟合精度, 但通过进一步的优化和调整, 模型的性能仍然有提升的空间. 这种改进不仅验证了优化方法的有效性, 还表明神经网络模型在处理更广泛的数据时能够提供更准确的预测. 这为后续的研究和应用提供了更可靠的基础, 有助于提高模型在实际问题中的适用性和准确性.

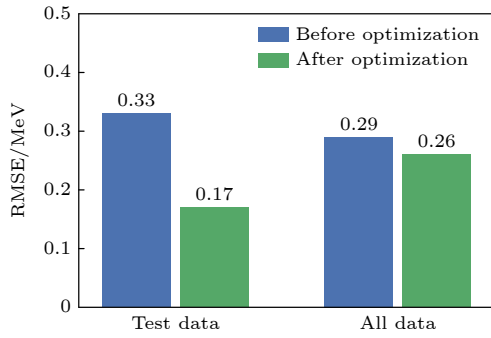


图4 WS4模型在测试集数据以及全部数据上优化前后的均方根误差

Fig. 4. Root mean square error of the WS4 model on the test dataset and the entire dataset before and after optimization.

3.3 新元素同位素链的裂变势垒高度与结合能预测

目前, 科学家已成功确认 118 种元素, 元素周期表的第 7 周期也已被填满. 因此, 如何开启第 8 周期、合成原子序数为 119 和 120 的新元素, 已成为核物理领域的前沿热点. 实验上, 合成这些超重元素主要依赖融合蒸发反应路径. 然而, 真正棘手的问题在于: 如何挑选出最合适的弹靶组合, 并精准设定入射能量. 为了提前回答这些问题, 必须

表 2 神经网络模型在 ($Z = 119, A = 293-299$) 以及 ($Z = 120, A = 294-302$) 的裂变势垒高度 (以 MeV 为单位) 以及结合能 (以 MeV 为单位) 的预言值

Table 2. Predicted fission barrier heights (in MeV) and binding energies (in MeV) for nuclides with $Z = 119$ and $A = 293-299$, as well as $Z = 120$ and $A = 294-302$, using neural network model.

质子数	质量数	ANN _F	ANN _W	ANN _{Binding}
119	293	9.52	5.94	2060.78
119	294	9.91	6.00	2066.96
119	295	10.17	5.94	2074.71
119	296	10.41	5.87	2081.35
119	297	10.66	5.80	2088.92
119	298	10.91	5.73	2094.95
119	299	11.16	5.66	2102.11
120	294	9.35	5.98	2060.90
120	295	9.75	6.12	2067.63
120	296	10.14	6.23	2075.76
120	297	10.43	6.17	2082.32
120	298	10.68	6.10	2090.27
120	299	10.92	6.03	2096.30
120	300	11.17	5.96	2103.82
120	301	11.42	5.90	2109.78
120	302	11.66	5.83	2117.13

借助超重核合成理论模型, 预测出 119 号与 120 号元素的最佳弹靶配对、最优束流能量以及可能达到的最大蒸发剩余截面. 但所有这些理论计算, 都离不开一系列基础核数据作为不可或缺的输入, 例如核结合能、裂变势垒高度等. 表 2 展示了神经网络模型在 ($Z = 119, A = 293-299$) 以及 ($Z = 120, A = 294-302$) 的裂变势垒高度和结合能的预言值. 表 2 中可以明显看到裂变势垒模型在经过不同理论数据预训练后得到的结果有较为明显的差异, 这主要是因为神经网络预训练时主要的权重和偏执已经固定, 而实验数据的范围过于局限, 导致超重核区域的结果主要受预训练数据的影响, 迁移学习阶段的微调效果不足. 因此, 由于预训练阶段理论数据集的不同, 导致表 2 中 ANN_F 预测结果整体波动于 10 MeV, 而 ANN_W 预测结果整体波动于 6 MeV 的明显差异.

4 结论

本研究运用神经网络和迁移学习技术来构建和微调裂变势垒高度和核结合能的模型. 测试集上的均方根误差展示了模型的泛化能力, 同时也展示了模型在整个数据集上的性能. 对于两种裂变势垒高度模型——FRLDM 和 WS4, 测试集上的均方根误差分别为 1.03 MeV 和 0.97 MeV. 经过优化后, 这些值分别降至 0.60 MeV 和 0.61 MeV, 分别降低了 41% 和 37%. 对于改进后的基态结合能模型, 测试集和整个数据集上的均方根误差分别为 0.17 MeV 和 0.26 MeV, 相较于原始模型的 0.33 MeV 和 0.29 MeV, 分别有了 48% 和 10% 的改进. 这些误差的减少表明, 神经网络与迁移学习相结合, 可以作为建模裂变势垒高度和核结合能的有力工具, 尤其适用于超重核结构和反应的研究, 并且在表 2 中给出了本文机器学习在 ($Z = 119, A = 293-299$) 以及 ($Z = 120, A = 294-302$) 这些核素的裂变势垒高度以及结合能的预言值. 我们希望这些结果能为该领域的进一步理论研究提供参考.

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.28388> 中访问获取.

参考文献

- [1] Schmidt K H, Jurado B 2018 *Rep. Prog. Phys.* **81** 106301
- [2] Audi G, Bersillon O, Blachot J, Wapstra A H 2003 *Nucl. Phys. A* **729** 3
- [3] Audi G, Wapstra A H, Thibault C 2003 *Nucl. Phys. A* **729** 337
- [4] Wang N, Liu M 2024 *Chin. Phys. C* **48** 094103
- [5] Bayram T, Akkoyun S, Kara S O 2014 *Ann. Nucl. Energy* **63** 172
- [6] Oganessian Y T, Utyonkov V K, Lobanov Y V, Abdullin F S, Polyakov A N, Sagaidak R N, Shirokovsky I V, Tsyganov Y S, Voinov A A, Gulbekian G G, Bogomolov S L, Gikal B N, Mezentsev A N, Iliev S, Subbotin V G, Sukhov A M, Subotic K, Zagrebaev V I, Vostokin G K, Itkis M G, Moody K J, Patin J B, Shaughnessy D A, Stoyer M A, Stoyer N J, Wilk P A, Kenneally J M, Landrum J H, Wild J F, Loughheed R W 2006 *Phys. Rev. C* **74** 044602
- [7] Oganessian Y T, Utyonkov V K, Lobanov Y V, Abdullin F S, Polyakov A N, Shirokovsky I V, Tsyganov Y S, Gulbekian G G, Bogomolov S L, Gikal B N, Mezenstev A N, Iliev S, Subbotin V G, Sukhov A M, Voinov A A, Buklanov G V, Subotic K, Zagrebaev V I, Itkis M G, Patin J B, Moody K J, Wild J F, Stoyer M A, Stoyer N J, Shaughnessy D A, Kenneally J M, Wilk P A, Loughheed R W, Il'kaev R I, Vesnovskii S P 2004 *Phys. Rev. C* **70** 064609
- [8] Rana S, Kumar R, Bhuyan M 2021 *Phys. Rev. C* **104** 024619
- [9] Jadambaa K 2017 *EPJ Web Conf.* **163** 00030
- [10] Schädel M 2015 *Philos. Trans. R. Soc. A* **373** 2037
- [11] Li J X, Zhang H F 2022 *Phys. Rev. C* **105** 054606
- [12] Feng Z Q, Jin G M, Fu F, Li J Q 2006 *Nucl. Phys. A* **771** 50
- [13] Zhu L, Xie W J, Zhang F S 2014 *Phys. Rev. C* **89** 024615
- [14] Qiang Y, Deng X Q, Shi Y, Qiao C Y, Pei J C 2024 *Phys. Lett. B* **858** 139057
- [15] Hofmann S, Münzenberg G 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 733
- [16] Lunney D, Pearson J M, Thibault C 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 1021
- [17] Ma N N, Zhang H F, Bao X J, Zhang H F 2019 *Chin. Phys. C* **43** 044105
- [18] Zhang H F, Wang L H, Yin J P, Chen P H, Zhang H F 2017 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **44** 045110
- [19] Naqa I E, Murphy M J 2015 *What Is Machine Learning? (Germany: Springer Nature)* pp21–37
- [20] Goh A T C 1995 *Artif. Intell. Eng.* **9** 143
- [21] Bayram T, Akkoyun S, Kara S O 2014 *J. Phys. : Conf. Ser.* **490** 012105
- [22] Akkoyun S, Bayram T, Turker T 2014 *Radiat. Phys. Chem.* **96** 186
- [23] Athanassopoulos S, Mavrommatis E, Gernoth K A, Clark J W 2004 *Nucl. Phys. A* **743** 222
- [24] Wen H F, Shang T S, Li J, Niu Z M, Yang D, Xue Y H, Li X, Huang X L 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 152101 (in Chinese) [温湖峰, 尚天帅, 李剑, 牛中明, 杨东, 薛永和, 李想, 黄小龙 2023 物理学报 **72** 152101]
- [25] Zhang W J, Zhang Z Y, Hu J F, Lu B N, Pang J Y, Wang Q 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 070202
- [26] Li J X, Zhang H F 2024 *Phys. Rev. C* **110** 034608
- [27] Graczyk K M, Kowal B E, Ankowski A M, Banerjee R D, Bonilla J L, Prasad H, Sobczyk J T 2025 *Phys. Rev. Lett.* **135** 052502
- [28] Yuan L, Li J X, Zhang H F 2024 *Chin. Phys. C* **48** 064106
- [29] Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, Iwamoto A, Bengtsson R, Uhrenholt H, Åberg S 2009 *Phys. Rev. C* **79** 064304
- [30] Wang M, Huang W J, Kondev F G, Audi G, Naimi S 2021 *Chin. Phys. C* **45** 030003
- [31] Wang N, Liu M, Wu X Z, Meng J 2024 *Phys. Lett. B* **734** 215
- [32] Capote R, Herman M, Obložinský P, Young P G, Goriely S, Belgya T, Ignatyuk A V, Koning A J, Hilaire S, Plujko V A, Avrigeanu M, Bersillon O, Chadwick M B, Fukahori T, Ge Zhigang, Han Yinlu, Kailas S, Kopecky J, Maslov V M, Reffo G, Sin M, Soukhovitskii E Sh, Talou P 2009 *Nucl. Data Sheets* **110** 3107

SPECIAL TOPIC—Thematic data in nuclear physics: Experimental, theoretical and applied research

Applications of machine learning in fission barrier height and ground state binding energy^{*}

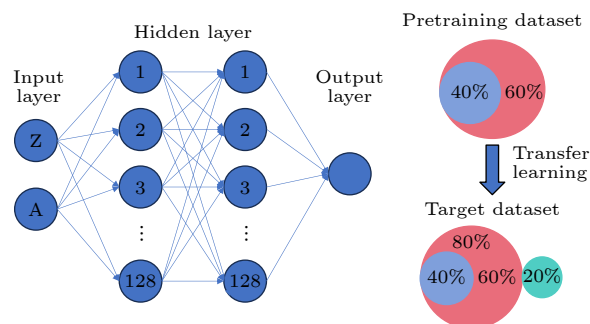
ZHANG Xuzhe[#] LI Jiaxing[#] CHEN Wanling ZHANG Hongfei[†]

(School of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 17 September 2025; revised manuscript received 16 October 2025)

Abstract

This study uses machine learning, specifically transfer learning with neural networks, to improve the predictions of fission barrier heights and ground state binding energies of superheavy nuclei, which are crucial for calculating survival probabilities in fusion reactions. Transfer learning for neural networks involve two stages: pre-training and fine-tuning, each utilizing a distinct pre-training dataset and target dataset. In this work, we split the pre-training data into 60% for training and 40% for validation, while the target data are partitioned into 20% for test, with the remaining 80% further divided into 60% for training and 40% for validation. To construct the neural-network model, we adopt the proton number Z and mass number A as the input layer, employ two hidden layers, each containing 128 neurons with rectified linear unit (ReLU) activation, and set the learning rate to 0.001. For the fission-barrier-height model, the pre-training dataset is either the FRLDM or the WS4 model data, with the experimental measurements serving as the target set. For the ground-state binding-energy model, we first calculate the residuals between WS4 predictions and the AME2020 evaluation, then divide these residuals into a light-nucleus subset and a heavy-nucleus subset according to proton number. The light-nucleus subset is used for pre-training, and the heavy-nucleus subset for fine-tuning. After optimization, the root-mean-square error (RMSE) of the FRLDM barrier model decreases from 1.03 MeV to 0.60 MeV, and that of the WS4 barrier model drops from 0.97 MeV to 0.61 MeV. For the binding-energy model, the RMSE decreases from 0.33 to 0.17 MeV on the test set and from 0.29 MeV to 0.26 MeV on the full data set. We also present the performances of the fission-barrier model before and after refinement, together with the predicted barrier heights along the isotopic chains of the new elements $Z = 119$ and $Z = 120$, and analyze the reasons for the differences in the results obtained by different models. We hope that these results will serve as a useful reference for future theoretical studies.



The datasets in this paper are openly available at <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.28388>.

Keywords: fission barriers, binding energies, machine learning, superheavy nuclei

DOI: [10.7498/aps.75.20251278](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251278)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251278](https://cstr.net/urn:nid:CNKI:32037.14.aps.75.20251278)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12175170, 11675066).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: zhanghongfei@lzu.edu.cn

机器学习在裂变势垒高度和基态结合能中的应用

张旭喆 李佳星 陈婉玲 张鸿飞

Applications of machine learning in fission barrier height and ground state binding energy

ZHANG Xuzhe LI Jiaying CHEN Wanling ZHANG Hongfei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 020105 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251278

CSTR: 32037.14.aps.75.20251278

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251278>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

机器学习在光电子能谱中的应用及展望

Application and prospect of machine learning in photoelectron spectroscopy

物理学报. 2024, 73(21): 210701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240957>

机器学习在宇宙线粒子鉴别中的应用

Application of machine learning in cosmic ray particle identification

物理学报. 2023, 72(14): 140202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230334>

蛋白质计算中的机器学习

Machine learning for *in silico* protein research

物理学报. 2024, 73(6): 069301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231618>

Z = 118—120超重核 α 衰变性质的研究

Research on α decay properties of superheavy nuclei with Z = 118120

物理学报. 2025, 74(11): 112301 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240907>

结合机器学习的大气压介质阻挡放电数值模拟研究

Numerical study of discharge characteristics of atmospheric dielectric barrier discharges by integrating machine learning

物理学报. 2022, 71(24): 245201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221555>

机器学习的量子动力学

Quantum dynamics of machine learning

物理学报. 2025, 74(6): 060701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240999>