

核物理主题数据: 实验、理论与应用专题

# 基于中子和质子分离能约束的神经网络 对原子核质量的预测\*

王东东<sup>1)</sup> 李鹏<sup>2)3)†</sup> 王之恒<sup>2)3)</sup>

1) (中国原子能科学研究院, 核物理研究所, 北京 102413)

2) (兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000)

3) (兰州大学, 稀有同位素前沿科学中心, 兰州 730000)

(2025 年 9 月 24 日收到; 2025 年 11 月 4 日收到修改稿)

原子核质量是反映核结构与稳定性的重要物理量, 在核结构研究与天体核物理过程中均具有关键作用. 目前, 基于神经网络的研究多集中于结合能或中子、质子分离能的单一预测, 较少关注结合能与分离能之间的物理约束关系. 本研究基于相对论平均场点耦合模型 PCF-PK1, 结合神经网络对原子核结合能以及单、双中子和单、双质子分离能进行了系统预测. 在训练过程中引入分离能约束, 以保持结合能与分离能之间的物理自洽性. 结果表明, 神经网络能够显著提升结合能的整体预测精度. 其中, 在特定损失函数权重组合下, 结合能的预测均方根偏差可达到 0.140 MeV. 进一步分析发现, 在保持物理自洽性的前提下, 引入分离能约束能够同时对结合能和分离能的预测结果实现小幅优化. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00239> 中访问获取.

**关键词:** 原子核质量, 神经网络, 分离能**DOI:** 10.7498/aps.75.20251315**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251315

## 1 引言

原子核质量是核物理和天体物理中的核心物理量. 在核物理中, 质量数据是理解核结构、研究反应机制与验证核力模型的基础<sup>[1,2]</sup>; 在天体物理中, 原子核质量决定了恒星核合成路径、超新星爆发演化及宇宙元素丰度的预测<sup>[3,4]</sup>. 当前实验共测得约 2600 种原子核的基态质量<sup>[5,6]</sup>, 而理论预言可能存在的核素超过 9000 种<sup>[7]</sup>. 其中大量远离稳定线的核素实验上尚无法合成, 因此, 主要依赖理论模型提供原子核质量.

现有的核质量理论模型大致可分为三类: 宏观

模型、微观模型以及宏观-微观模型. 宏观模型如经典的 Weizsäcker 公式<sup>[8,9]</sup>, 起源于液滴模型思想, 通过体积项、表面项、库仑项、对称能项等少量参数即可较好地再现核质量的整体变化趋势. 宏观模型具有物理图像直观、计算简便等优点, 适合快速计算整个核素图质量, 但由于缺乏对单粒子能级结构、壳效应以及局域形变等微观结构的刻画, 在质子数或中子数接近幻数的区域往往表现出系统性偏差. 微观模型则从核子间相互作用的层次出发, 在统一的理论框架内同时处理核质量的整体性质和局部修正, 例如基于能量密度泛函理论的 Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB) 模型<sup>[10,11]</sup>. 该类模型具有良好的理论自洽性和可推广性, 能够在不依赖过多

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2021YFA1601500)、领创项目 (批准号: CNNC-LCKY-2024-082)、国家自然科学基金 (批准号: 12075104)、国家自然科学基金理论物理专项项目 (批准号: 12447106)、兰州大学中央高校基本科研业务费 (批准号: lzujbky-2023-stlt01) 和甘肃省科技计划项目 (批准号: 24JRRA448) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 120220904501@lzu.edu.cn

经验参数的情况下外推到远离稳定线的未知核区, 包括超重核和滴线附近原子核. 然而, 微观模型通常需要大量的数值计算, 计算成本相对较高, 并且对有效相互作用参数的选择较为敏感. 宏观-微观模型在宏观液滴模型的框架下, 引入壳修正、配对效应等微观贡献项, 从而在保持计算效率的同时显著提高预测精度. 典型代表包括有限程液滴模型 (finite-range droplet model, FRDM)<sup>[12,13]</sup> 和 Weizsäcker-Skyrme (WS) 模型<sup>[14]</sup>, 精度可以达到几百 keV 的量级. 特别是, WS4 模型在核质量拟合中与实验值的均方根偏差已达到 298 keV<sup>[14]</sup>.

尽管传统模型在已知核区的预测精度持续提升, 但仍难以满足快中子俘获过程 (r-过程) 等天体物理研究高精度模拟的需求. 在远离稳定线的区域, 不同模型间的预测结果差异显著, 例如 FRDM2012<sup>[12]</sup> 与 WS4<sup>[14]</sup> 模型在部分远离稳定线区域的结合能差异超 20 MeV. 尽管二者结合能存在较大系统性偏差, 但分离能作为质量差分, 在很大程度上可抵消模型间的误差, 表现出更高一致性. 例如, 在超过 95% 的原子核中, FRDM2012<sup>[12]</sup> 与 WS4<sup>[14]</sup> 的单中子分离能差异小于 2 MeV. 由于分离能本质上反映了核子间的结合能变化, 它不仅在于减少模型系统误差方面发挥关键作用<sup>[15]</sup>, 还被广泛用作揭示壳结构演化、核子关联强度及配对效应等微观物理机制的重要指标<sup>[2,16,17]</sup>.

随着机器学习技术的快速发展, 其强大的非线性建模能力和数据驱动特性已被广泛应用于核物理研究. 机器学习能够有效挖掘实验数据与理论计算中的复杂规律, 有效提升核物理相关物理量的预测精度. 近年来, 在原子核质量<sup>[18-27]</sup>、电荷半径<sup>[28,29]</sup>、 $\beta$  衰变寿命<sup>[30-35]</sup>、 $\alpha$  衰变寿命<sup>[36-39]</sup>、裂变碎块产额分布<sup>[40,41]</sup> 等多个关键物理量的建模中, 机器学习方法均取得了显著成果. 目前, 一些高精度神经网络模型对核质量预测的均方根偏差已低于 0.1 MeV<sup>[25,26]</sup>, 远超许多传统理论模型, 展现出对传统模型的有力补充与修正能力.

目前虽然神经网络对原子核质量进行了较为广泛的研究, 但大多数工作往往仅从结合能或分离能单一角度出发, 很少将二者进行联合建模. 仅预测结合能虽能反映整体质量趋势, 但在局部结构特征的再现上可能存在精度限制. 若直接将结合能与分离能同时作为网络输出, 则需要兼顾二者之间的物理关系, 否则预测结果在局部结构上可能出现不

自洽. 本研究旨在在保持结合能与分离能物理自洽性的前提下, 探索如何在神经网络框架中同时引入二者信息. 为此, 本文采用机器学习方法对理论模型与实验数据之间的残差进行建模, 并将分离能等物理量作为约束, 以利用其所反映的局部结构规律实现结合能的有效校正. 理论部分基于相对论平均场点耦合模型 PCF-PK1<sup>[42]</sup>, 该模型是一种密度依赖的点耦合型协变能量密度泛函, 通过 Fierz 变换自洽地处理交换项, 并显式包含张量耦合, 有效消除了  $Z = 58$  和  $Z = 92$  的膺壳. 因此, PCF-PK1 为机器学习残差建模提供了稳健的物理基准, 提升了模型在未知核区的外推能力.

## 2 理论框架

本工作采用前馈神经网络. 前馈神经网络是一种基本的人工神经网络结构, 信息沿单向流动从输入层传递至输出层. 通过多层非线性映射, 它能够有效捕捉输入与输出之间的复杂关系. 在本研究中, 前馈神经网络用于建立核物理特征与实验残差之间的映射关系, 从而实现对理论模型的误差修正. 本文构建的神经网络包括四个隐藏层, 其计算流程可以表示为

$$\begin{aligned} h_0 &= x, \\ h_i &= \tanh(\omega_i h_{i-1} + b_i), \quad i = 1, 2, 3, 4, \\ y &= \omega_5 h_4 + b_5, \end{aligned} \quad (1)$$

其中,  $x$  表示输入特征向量, 本工作取为  $(Z, N, \delta, P)$ . 这里,  $Z$  和  $N$  分别表示原子核的质子数和中子数,  $\delta = (-1)^Z/2 + (-1)^N/2$  为原子核奇偶系数,  $P = (v_p v_n)/(v_p + v_n)$ , 其中  $v_p$  和  $v_n$  分别为质子数和中子数距离质子幻数 (8, 20, 28, 50, 82, 126) 和中子幻数 (8, 20, 28, 50, 82, 126, 184) 的最小距离.  $y$  为模型输出, 这里取为结合能残差:  $E_{\text{PCF-PK1}} - E_{\text{AME2020}}$ , 即 PCF-PK1 理论值与 AME2020 实验值结合能<sup>[5]</sup> 之差. 本文采用的 PCF-PK1 数据基于球形相对论 Hartree-Bogoliubov 模型, 采用 PCF-PK1 计算获得.  $h_i$  表示第  $i$  层隐藏层的输出,  $\omega_i$  和  $b_i$  分别为该层的权重和偏置项. 本文神经网络采用  $\tanh$  激活函数,  $\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ , 该函数在输出分布上具有中心化特性, 可加速训练收敛; 其平滑的非线性映射有助于刻画原子核结合能与分离能之间的连续变化特征, 相较于 ReLU 激活函数

更适合回归任务。

神经网络计算流程如图 1 所示。对于给定输入 Input1, 神经网络首先通过前向传播计算其对应的结合能残差输出 Output1。随后, 模型会自动生成其相邻核素的输入 Input2, Input3, Input4 和 Input5, 并根据与 Input1 相同的参数依次得到对应的输出 Output2, Output3, Output4 和 Output5。在获得这些神经网络预测的结合能残差后, 模型会进一步利用它们之间的差值计算分离能残差, 分别为  $\Delta S_p$  (Output6),  $\Delta S_{2p}$  (Output7),  $\Delta S_n$  (Output8) 以及  $\Delta S_{2n}$  (Output9)。通过在训练过程中引入这些分离能信息, 能够对神经网络的结合能预测施加额外的物理约束, 从而在保持预测精度的同时, 有效提升其物理一致性与可靠性。

神经网络采用  $Z, N \geq 8$  且 AME2020 中实验误差小于 0.1 MeV 的原子核数据 [6], 共计 2245 个样本, 其中训练集包含 1796 个原子核, 验证集包含 449 个原子核。为避免数据渗透问题, 在模型中构建了掩码矩阵。掩码矩阵的构造方式如下: 在训练集中, 若计算分离能所需的相邻原子核未包含在训练数据中, 则对应位置的掩码矩阵元设为 0; 若相关原子核均包含在训练集中, 则设为 1。最终, 各类分离能预测结果与该掩码矩阵相乘, 从而屏蔽潜在的信息泄露影响。验证集中的掩码矩阵亦按照相

同原则构建, 以确保评估过程的公平性与一致性。

在前向传播后, 神经网络通过损失函数确定模型的优化方向, 本文中采用加权均方误差 (mean square error, MSE) 作为模型的损失函数:

$$\text{Loss} = \alpha \text{MSE}_E + \beta (\text{MSE}_{S_n} + \text{MSE}_{S_{2n}} + \text{MSE}_{S_p} + \text{MSE}_{S_{2p}}),$$

$$\text{MSE}_X = \frac{1}{\sum_i^n M_{X,i}} \sum_{i=1}^n M_{X,i} (y_{X,i}^{\text{Pred}} - y_{X,i}^{\text{Tar}})^2, \quad (2)$$

其中,  $X \in \{E, S_n, S_{2n}, S_p, S_{2p}\}$ ,  $E$  表示原子核结合能,  $S_n, S_{2n}, S_p, S_{2p}$  分别表示单中子分离能、双中子分离能、单质子分离能和双质子分离能。  $M_X$  为对应物理量的掩码矩阵,  $n$  为样本数,  $y_X^{\text{Tar}}$  为 PCF-PK1 理论值与 AME2020 实验值残差 [6],  $y_X^{\text{Pred}}$  表示神经网络对该残差的预测值。参数  $\alpha$  和  $\beta$  分别为各部分损失的权重系数。为了便于比较分离能约束的影响, 本工作在同一神经网络结构下, 基于四组不同的损失函数权重组合进行了训练, 具体为

ANN1:  $\alpha = 1, \beta = 0$ , 损失函数仅考虑结合能部分;

ANN2:  $\alpha = 0.6, \beta = 0.1$ ;

ANN3:  $\alpha = 0.2, \beta = 0.2$ ;

ANN4:  $\alpha = 0, \beta = 0.25$ , 损失函数仅考虑分离能部分。

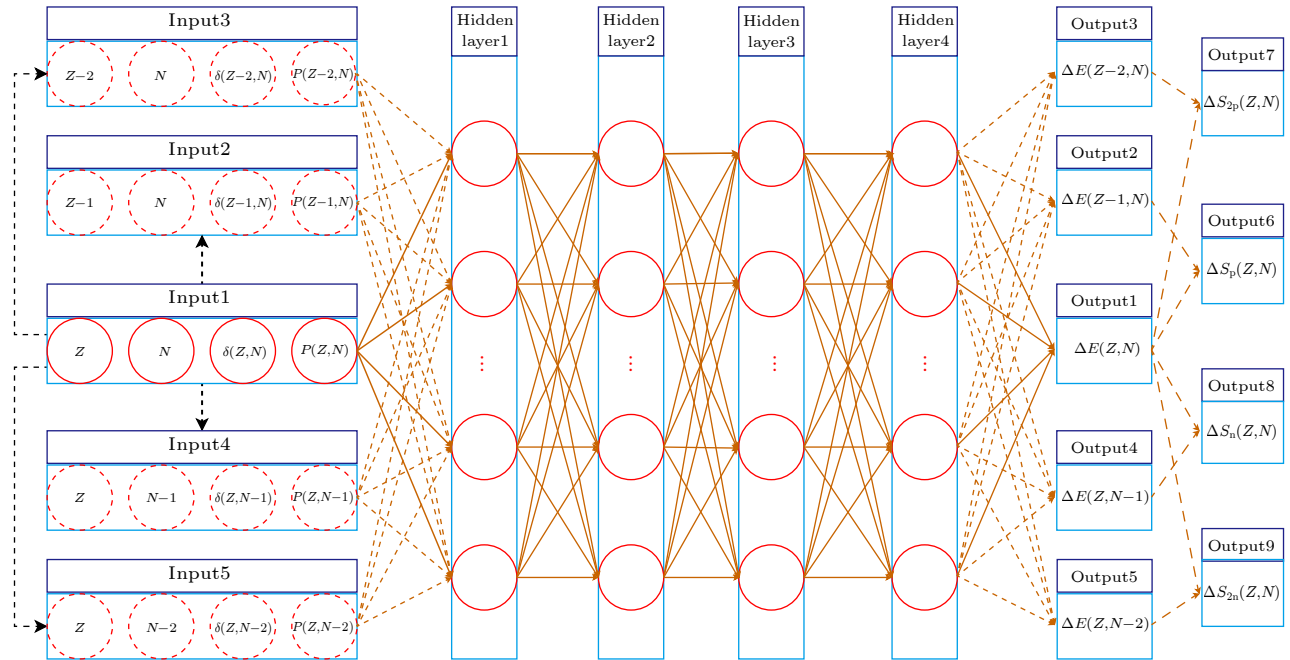


图 1 引入分离能约束的多层前馈神经网络结构示意图

Fig. 1. Diagram of the feedforward neural network with separation energy constraints.

为确保神经网络模型具有较好的预测能力,并减少由于样本划分带来的偶然性误差,采用了五折交叉验证 (five-fold cross-validation) 的方法进行模型训练. 具体做法为: 将全部样本随机划分为五个大小相等且互不重叠的子集. 在每一轮训练中,依次选取一个子集作为验证集,其余四个子集作为训练集. 为了降低模型初始化及其他随机因素带来的不确定性,每个折叠的训练过程都重复进行 200 次,并对每折的训练结果取平均,得到该折的稳定预测输出. 在每次训练过程中,同时监测训练集与验证集的均方根偏差,结果显示两者始终接近,进一步说明模型在各折训练中过拟合风险较低. 最后,将五个折叠的预测结果再次进行整体平均,得到模型在全数据集 (entire set) 上的最终综合预测结果.

为了更直观地呈现模型训练过程中损失的变化,图 2 展示了 ANN3 在训练过程中一次随机抽取的结果,反映了均方根偏差随训练步数的变化趋势. 为保证模型充分训练,我们设置了较长的训练周期 (100000 个 Epoch),以使模型能够充分遍历训练数据并获得稳定的参数优化. 同时,在训练过程中实时监测验证集误差,当其达到最小值时保存对应的模型参数,从而在保证训练充分的同时减少过拟合的影响.

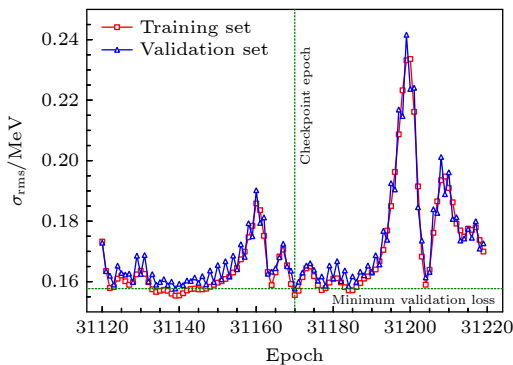


图 2 训练过程中训练集 (红色) 与验证集 (蓝色) 均方根偏差随训练步数的变化示意. 当验证集偏差达到最小值时,模型参数被保存

Fig. 2. Root-mean-square deviations of training (red) and validation (blue) sets over epochs; parameters at minimum validation deviation are saved.

对原子核质量的评估,一般会采用均方根偏差 (root-mean-square error, RMSE) 方式:

$$\sigma_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i^{\text{Pred}} - Y_i^{\text{Exp}})^2}, \quad (3)$$

其中  $Y^{\text{Pred}}$  为物理量理论预测值,  $Y^{\text{Exp}}$  为该物理量实验测量结果,  $n$  为总样本数.

### 3 结果与讨论

图 3 展示了四组不同的损失函数权重组合的神经网络与 PCF-PK1 模型对原子核结合能  $E$  以及单、双中子分离能  $S_n$ 、 $S_{2n}$  和单、双质子分离能  $S_p$ 、 $S_{2p}$  的预测性能对比. 结果显示, ANN1—ANN3 均有效修正了 PCF-PK1 理论值与实验值之间的偏差,使结合能 RMSE 从 7.181 MeV 降至不足 0.15 MeV,分离能 RMSE 从 0.791—1.241 MeV 降至 0.139—0.185 MeV. 其中,将分离能作为附加约束引入损失函数时, ANN2 和 ANN3 相较于 ANN1 对  $E$ ,  $S_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $S_p$  与  $S_{2p}$  的预测精度均有所提升. 在结合能方面, ANN2 和 ANN3 相较于 ANN1 的预测精度分别提高约 2.7% 和 4.6%. 在分离能方面, ANN2 和 ANN3 相较于 ANN1 的提升幅度更大,分别提升约 4.1%—5.2% 和 8.9%—12.0%. ANN3 (损失函数中结合能权重  $\alpha = 0.2$ , 分离能权重  $\beta = 0.2$ ) 相较于 ANN2 ( $\alpha = 0.6$ ,  $\beta = 0.1$ ) 对分离能赋予更高权重,使其对分离能规律的学习更为充分. 因此, ANN3 在分离能和结合能方面预测均优于 ANN2. 尽管损失函数中仅考虑结合能的神经网络模型 (ANN1) 已能准确再现实验数据,但在引入分离能约束后,模型对原子核内部结构规律的学习能力得到进一步增强,从而实现结合能和分离能预测精度的整体提升.

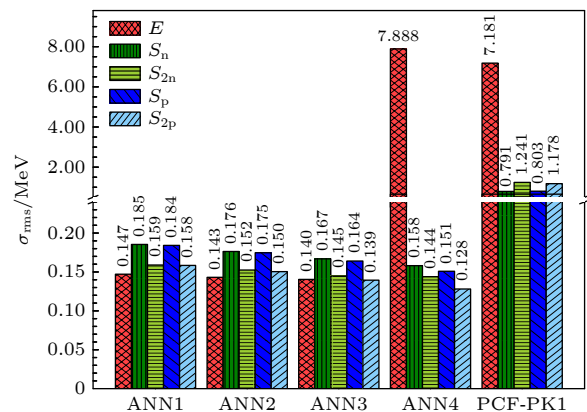


图 3 ANN1, ANN2, ANN3, ANN4 以及 PCF-PK1 模型对原子核  $E$ ,  $S_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $S_p$  和  $S_{2p}$  的预测值与 AME2020 实验值均方根偏差的对比

Fig. 3. Comparison of RMSE between ANN1, ANN2, ANN3, ANN4, and PCF-PK1 predictions and AME2020 experimental values for  $E$ ,  $S_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $S_p$ , and  $S_{2p}$ .

然而, 对于损失函数中仅包含分离能的 ANN4, 虽然在分离能预测上表现出较高精度, 但结合能预测仍存在明显偏差, 整体水平接近于 PCF-PK1. 这主要是因为 ANN4 缺少对原子核整体质量的约束, 难以准确再现结合能的整体分布. 结果表明, 仅依靠局部差值信息, 神经网络难以恢复原子核质量的整体趋势; 分离能虽然反映结合能的局部变化, 但对绝对值缺乏约束, 从而容易导致结合能预测出现整体偏移或失真.

鉴于 ANN3 的预测精度优于 ANN2, 而 ANN4 在结合能预测中表现不佳, 本文在图 4 中对比了 ANN1 与 ANN3 的预测结果. 图中阴影部分对应结合能预测值与实验值偏差  $\pm 0.1$  MeV 的区间, 该

范围的精度满足快中子俘获过程 (r-过程) 精确模拟的要求 [43]. 总体来看, 两种模型均表现良好, ANN1 与 ANN3 对结合能预测满足该精度的原子核占比为 55.10% 和 57.28%. 对大多数原子核而言, 引入分离能约束能够提升预测能力: ANN3 对  $E$ ,  $S_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $S_p$  和  $S_{2p}$  的预测相较于 ANN1 有所改善的原子核占比分别为 57.2%, 62.5%, 56.3%, 63.7% 和 61.1%. 值得注意的是, ANN3 的预测值与实验值的偏差分布与 ANN1 基本一致, 在 ANN1 表现欠佳的区域, ANN3 也未能实现显著改进.

图 5 与图 6 分别展示了 ANN1, ANN2, ANN3 对 Ca ( $Z = 20$ ), Pb ( $Z = 82$ ) 同位素链及  $N = 28$  和  $N = 126$  同中子素链结合能  $E$ 、单/双中子分离能

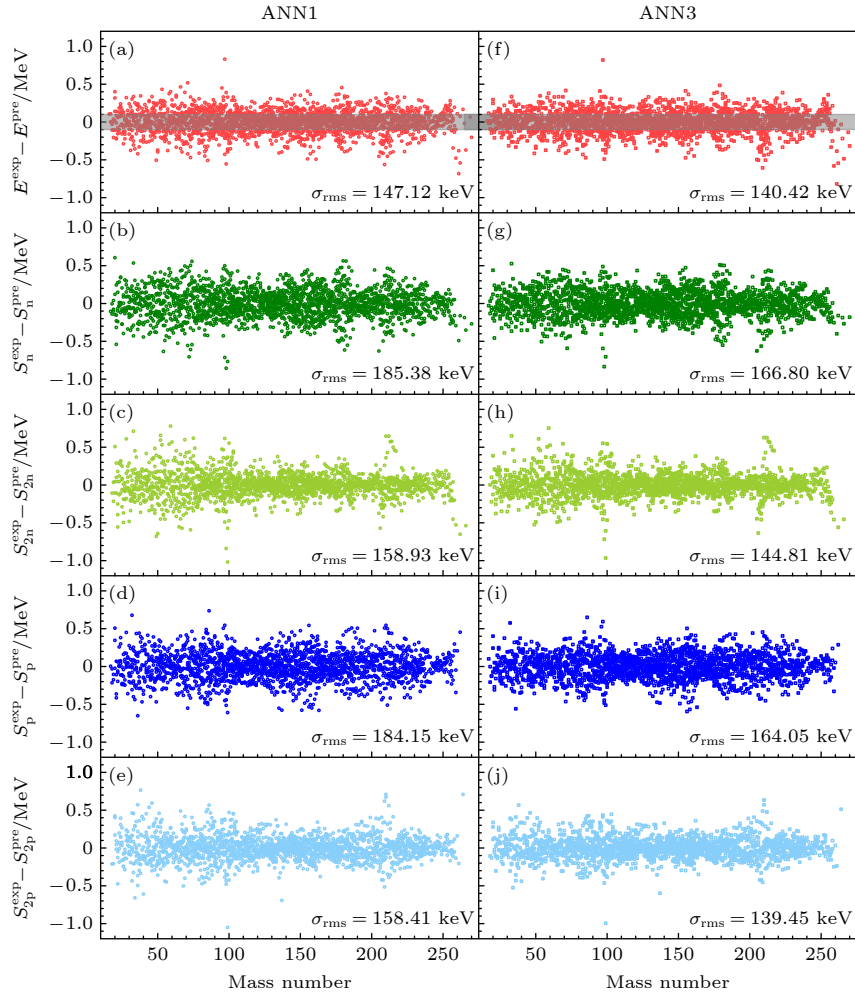


图 4 ANN1 和 ANN3 预测值相对于实验值的偏差随核质量数的变化, 包括结合能  $E$  ((a), (f)); 单、双中子分离能  $S_n$  ((b), (g)),  $S_{2n}$  ((c), (h)) 以及单、双质子分离能  $S_p$  ((d), (i)),  $S_{2p}$  ((e), (j)). 其中 (a)–(e) 为 ANN1 预测结果, (f)–(j) 为 ANN3 预测结果, 阴影区域对应结合能预测值与实验值偏差  $\pm 0.1$  MeV 的范围

Fig. 4. Deviations of ANN1 and ANN3 predictions from experimental values as a function of nuclear mass number, including binding energy  $E$  ((a), (f)), single- and double-neutron separation energies  $S_n$  ((b), (g)) and  $S_{2n}$  ((c), (h)), and single- and double-proton separation energies  $S_p$  ((d), (i)) and  $S_{2p}$  ((e), (j)). Panels (a)–(e) show ANN1 predictions, and panels (f)–(j) show ANN3 predictions. The shaded areas indicate  $\pm 0.1$  MeV deviations of binding energies.

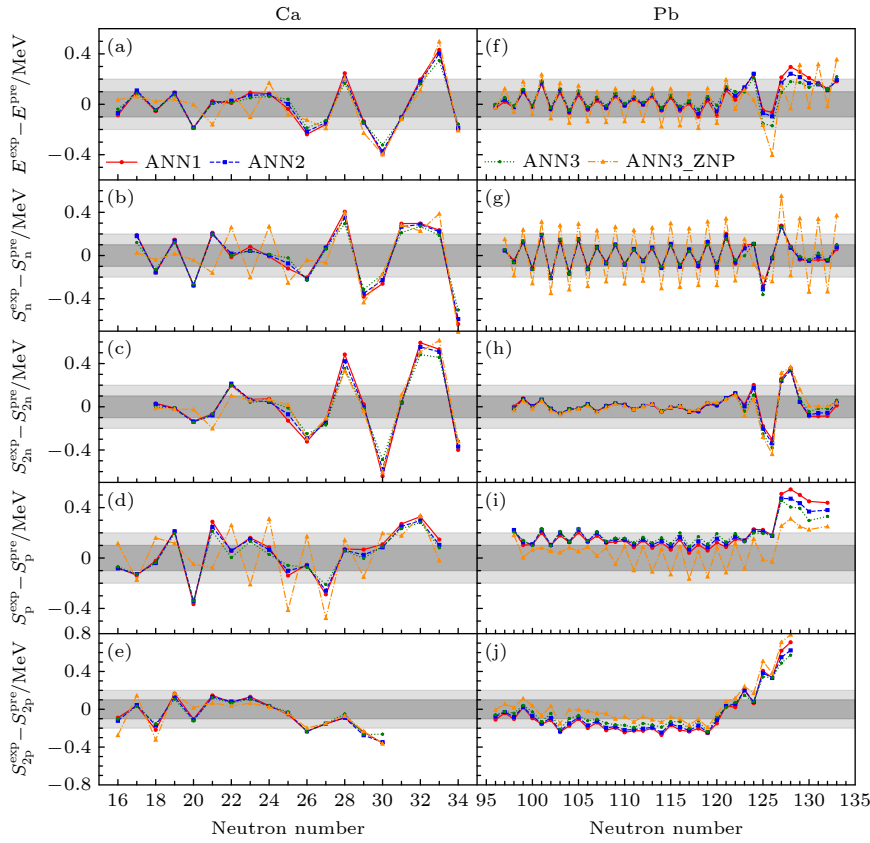


图 5 ANN1(红色实线)、ANN2(蓝色虚线)、ANN3(绿色点线)和 ANN3\_ZNP(橙色点划线)对 Ca ( $Z = 20$ )及 Pb ( $Z = 82$ )同位素链结合能  $E$ (a), (f)、单中子分离能  $S_n$  ((b), (g))、双中子分离能  $S_{2n}$  ((c), (h))、单质子分离能  $S_p$  ((d), (i))以及双质子分离能  $S_{2p}$  ((e), (j))的预测值与实验值偏差. 图中深浅不同的阴影分别对应预测值与实验值偏差在  $\pm 0.1$  MeV 和  $\pm 0.2$  MeV 的区间

Fig. 5. Deviations between the predictions and experimental values of the binding energy  $E$ ((a), (f)), single- and double-neutron separation energies  $S_n$ ,  $S_{2n}$  ((b), (g), (c), (h)), single- and double-proton separation energies  $S_p$ ,  $S_{2p}$  ((d), (i), (e), (j)), obtained with ANN1 (red solid line), ANN2 (blue dashed line), ANN3 (green dotted line), and ANN3\_ZNP (orange dash-dot line) for the Ca ( $Z = 20$ ) and Pb ( $Z = 82$ ) isotopic chains. Dark and light shaded areas represent deviations from experimental values of  $\pm 0.1$  MeV and  $\pm 0.2$  MeV, respectively.

$S_n$ ,  $S_{2n}$  与单/双质子分离能  $S_p$ ,  $S_{2p}$  的预测值与实验值的偏差. 从图中可以看出, ANN1, ANN2 以及 ANN3 对大多数原子核的预测结果相似. 这可能归因于模型结构未作调整, 神经网络参数主要用于结合能计算, 分离能约束仅在损失函数层面引入, 从而使整体预测变化有限. 然而, 从图中可以发现, 当 ANN1 对原子核结合能和分离能预测值与实验值偏差超 0.2 MeV 时, 在损失函数中引入分离能约束的 ANN2 和 ANN3 在预测精度上均有明显提升. 例如, ANN2 和 ANN3 对 Ca 同位素链  $N = 28, 30, 32, 33$  的双中子分离能、Pb 同位素链  $N = 127-132$  的单质子分离能、 $N = 28$  同中子素链  $Z = 18-21$  的双中子分离能, 以及  $N = 126$  同中子素链  $Z = 83-86$  的单中子分离能的预测结果均表现出显著改善. 随着 ANN1, ANN2, ANN3 损失函数中分离能权重逐步增加, 神经网络的预测精度

也随之逐步提高. 此外, 虽然神经网络输入中包含奇偶系数  $\delta$ , 但 ANN1, ANN2 和 ANN3 在预测单中子或单质子分离能时仍然表现出明显的奇偶振荡. 为分析奇偶特征对模型学习的影响, 本文在保持 ANN3 网络结构和训练超参数一致的条件下, 构建了去除输入特征  $\delta$  的模型 (ANN3\_ZNP). 结果表明, 当输入中去掉  $\delta$  后, 模型对结合能以及单中子、单质子分离能的预测偏差出现了更为显著的振荡. 这可能是因为  $\delta$  虽可区分偶偶核与奇偶核, 但其仅取 0 和  $\pm 1$  三个离散值, 难以准确反映不同核区配对能的幅度差异, 因此无法完全消除奇偶效应. 去除  $\delta$  后, 神经网络更难捕捉配对特征, 导致预测结果中的奇偶振荡进一步增强.

图 7 显示了 ANN3 在整个核素图范围内原子核结合能预测值与实验值之间偏差的分布, 图 8 为 ANN3 对单/双中子分离能及单/双质子分离能

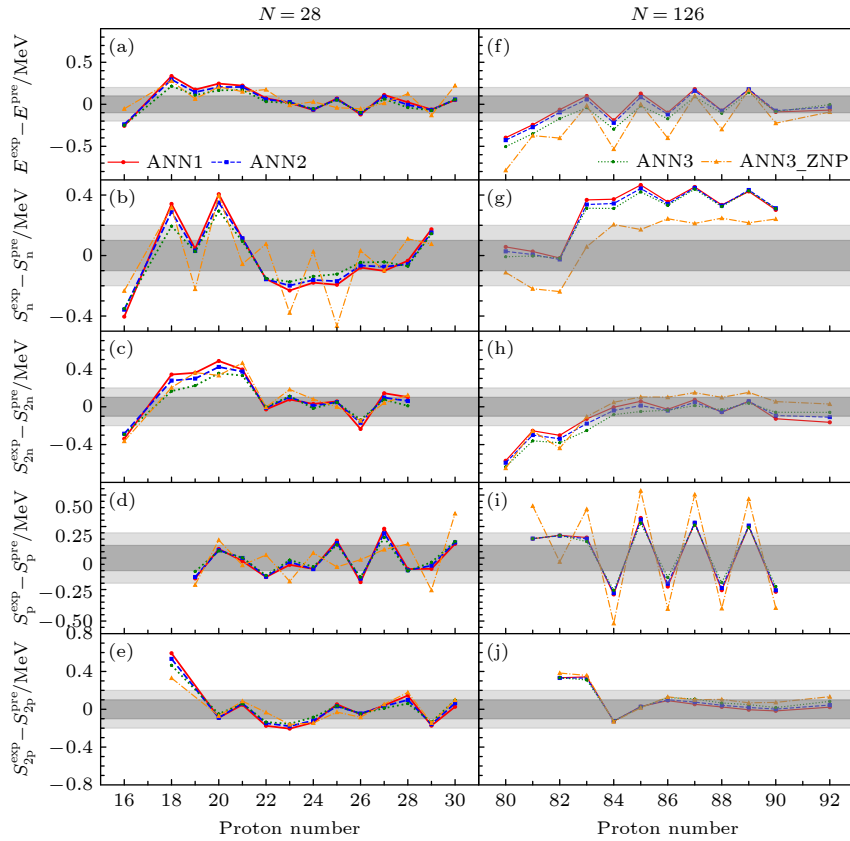


图 6 同图 4, ANN1(红色实线)、ANN2(蓝色虚线)、ANN3(绿色点线)和 ANN3\_ZNP(橙色点划线)对  $N = 28$  及  $N = 126$  同中子素链结合能  $E$ (a), (f)、单中子分离能  $S_n$  ((b), (g))、双中子分离能  $S_{2n}$  ((c), (h))、单质子分离能  $S_p$  ((d), (i)) 以及双质子分离能  $S_{2p}$  ((e), (j)) 的预测值与实验值偏差. 图中深浅不同的阴影分别对应预测值与实验值偏差在  $\pm 0.1$  MeV 和  $\pm 0.2$  MeV 的区间

Fig. 6. Similar to Fig. 4. Deviations between the predictions and experimental values of the binding energy  $E$ (a), (f), single- and double-neutron separation energies  $S_n$ ,  $S_{2n}$  ((b), (g), (c), (h)), single- and double-proton separation energies  $S_p$ ,  $S_{2p}$  ((d), (i), (e), (j)), obtained with ANN1 (red solid line), ANN2 (blue dashed line), ANN3 (green dotted line), and ANN3\_ZNP (orange dash-dot line) for the  $N = 28$  and  $N = 126 > Z = 82$ ) isotonic chains. Dark and light shaded areas represent deviations from experimental values of  $\pm 0.1$  MeV and  $\pm 0.2$  MeV, respectively.

预测值与实验数据的偏差分布. 对于 195 个闭壳原子核, ANN3 对结合能预测的 RMSE 为 0.123 MeV, 略优于其对全体原子核结合能预测的 RMSE. 对于全部原子核, 神经网络对实验值的高估与低估数量大致相当. 然而, 对于部分核素, 分离能预测表现出沿整条同位素或同中子素链的一致性偏差. 例如, 在  $S_{2n}$  的预测中, ANN3 系统性低估了所有  $N = 33$  的原子核, 而高估了所有  $N = 35$  的原子核; 同样, 在  $S_p$  的预测中, ANN3 系统性低估了所有  $Z = 65$  的原子核, 而高估了所有  $Z = 66$  的原子核. 这种现象主要源于 ANN3 对结合能预测的系统性偏差: ANN3 系统性低估了所有  $N = 33$  同中子素链原子核的结合能, 并几乎低估了所有  $Z = 65$  同位素链原子核的结合能. 这种系统性偏差可能源于神经网络未能充分学习某些同位素链或同中子素链

的复杂核结构信息, 导致母核与子核结合能的预测偏差沿整条链传递, 使得分离能在整条链上表现出一致性的高估或低估.

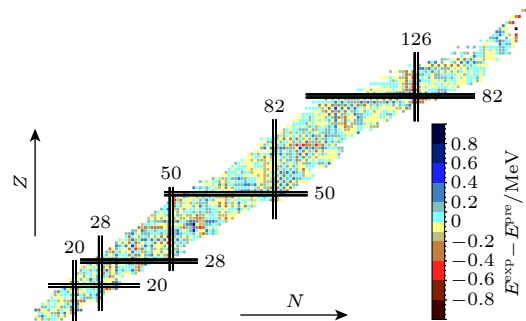


图 7 ANN3 对整个核素图上原子核结合能  $E$  的预测值与实验值的偏差分布

Fig. 7. Distribution of prediction residuals of ANN3 with respect to experimental values on the nuclear chart for the binding energy  $E$ .

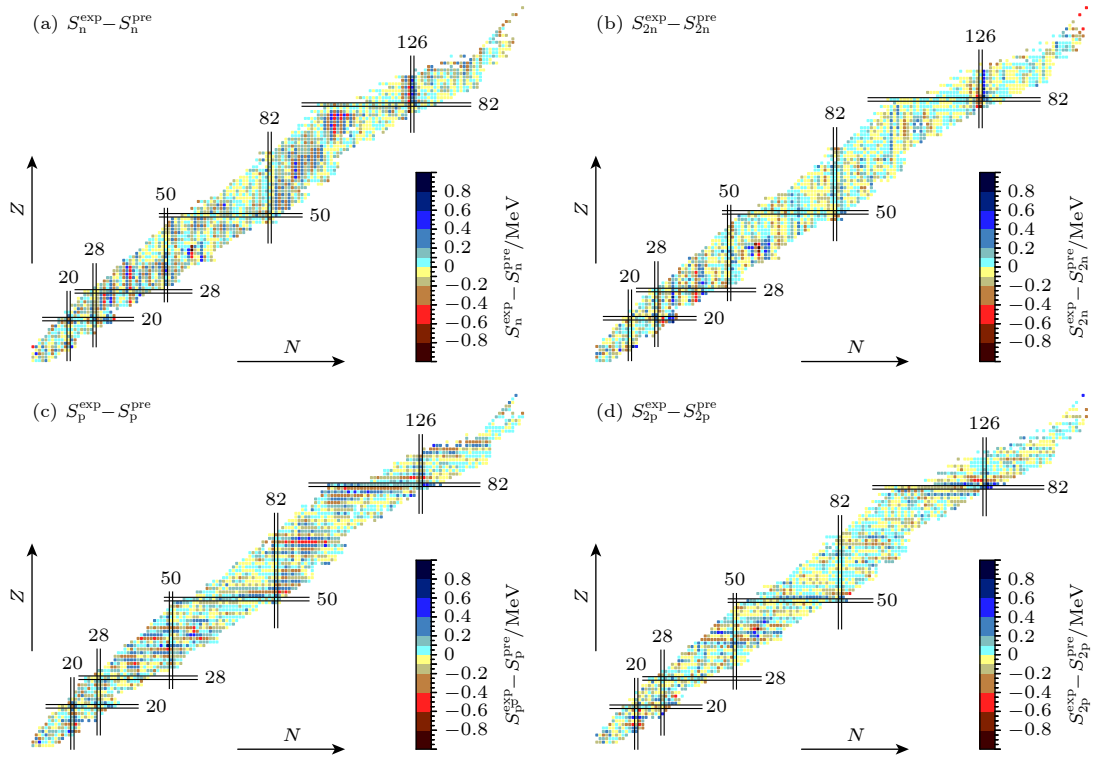


图 8 ANN3 对整个核素图上原子核单/双中子分离能  $S_n$  (a),  $S_{2n}$  (b) 以及单/双质子分离能  $S_p$  (c),  $S_{2p}$  (d) 的预测值与实验值的偏差分布  
 Fig. 8. Distribution of prediction residuals of ANN3 with respect to experimental values on the nuclear chart for the one- and two-neutron separation energies  $S_n$  (a) and  $S_{2n}$  (b), as well as one- and two-proton separation energies  $S_p$  (c) and  $S_{2p}$  (d).

## 4 总 结

本研究基于相对论平均场点耦合模型 PCF-PK1, 结合神经网络对原子核结合能以及单、双中子和单、双质子分离能进行了系统预测. 结果表明, 神经网络能够有效修正 PCF-PK1 理论值与实验值之间的偏差, 实现对结合能和分离能的高精度预测. 与损失函数仅包含结合能信息的 ANN1 相比, 引入分离能约束的 ANN2 和 ANN3 在结合能与分离能预测方面均表现出更高的精度. 对于 ANN1 预测值与实验值偏差超过 0.2 MeV 的原子核, ANN2 与 ANN3 的精度提升更为显著. 然而, 由于神经网络整体结构未发生实质性改变, 损失函数中引入的约束对全局预测结果的改进仍有限. 对于某些同位素链或同中子素链, ANN3 的分离能预测存在一致性偏差, 提示该神经网络在捕捉结合能与分离能之间的细微局部规律方面仍存在不足.

## 数据可用性说明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00239> 中访问获取.

## 参考文献

- [1] Lunney D, Pearson J M, Thibault C 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 1021
- [2] Bender M, Heenen P H, Reinhard P G 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 121
- [3] Burbidge E M, Burbidge G R, Fowler W A, Hoyle F 1957 *Rev. Mod. Phys.* **29** 547
- [4] Bethe H A 1939 *Phys. Rev.* **55** 434
- [5] Huang W J, Wang M, Kondev F G, Audi G, Naimi S 2021 *Chin. Phys. C* **45** 030002
- [6] Wang M, Huang W J, Kondev F G, Audi G, Naimi S 2021 *Chin. Phys. C* **45** 030003
- [7] Xia X W, Li M Y, Zhao P W, et al. 2018 *At. Data Nucl. Data Tables* **121** 1
- [8] Bethe H A, Bacher R F 1936 *Nucl. Phys.* **8** 82
- [9] Möller P, Myers W D, Sagawa H, Yoshida S 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 052501
- [10] Geng L, Toki H, Meng J 2005 *Prog. Theor. Phys* **113** 785
- [11] Hua X M, Heng T H, Niu Z M, Sun B H, Guo J Y 2012 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **55** 2414
- [12] Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, Sagawa H 2016 *At. Data Nucl. Data Tables* **109–110** 1
- [13] Möller P, Mumpower M R, Kawano T, Myers W D 2019 *At. Data Nucl. Data Tables* **125** 1
- [14] Wang N, Liu M, Wu X Z, Meng J 2014 *Phys. Lett. B* **734** 215
- [15] Neufcourt L, Cao Y C, Nazarewicz W, Viens F 2018 *Phys. Rev. C* **98** 034318
- [16] Otsuka T, Suzuki T, Fujimoto R, Grawe H, Akaishi Y 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 232502
- [17] Sorlin O, Porquet M G 2008 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **61** 602
- [18] Utama R, Piekarewicz J, Prosper H B 2016 *Phys. Rev. C* **93**

- 014311
- [19] Gao Z P, Wang Y J, Lü H L, Li Q F, Shen C W, Liu L 2021 *Nucl. Sci. Tech.* **32** 109
- [20] Ming X C, Zhang H F, Xu R R, Sun X D, Tian Y, Ge Z G 2022 *Nucl. Sci. Tech.* **33** 48
- [21] Wu X H, Lu Y Y, Zhao P W 2022 *Phys. Lett. B* **834** 137394
- [22] Mumpower M R, Sprouse T M, Lovell A E, Mohan A T 2022 *Phys. Rev. C* **106** L021301
- [23] Niu Z M, Liang H Z 2018 *Phys. Lett. B* **778** 48
- [24] Wu X H, Guo L H, Zhao P W 2021 *Phys. Lett. B* **819** 136387
- [25] Niu Z M, Liang H Z 2022 *Phys. Rev. C* **106** L021303
- [26] Lu Y H, Shang T S, Du P X, Li J, Liang H Z, Niu Z M 2025 *Phys. Rev. C* **111** 014325
- [27] Chen C Y, Chen A X, Qi X Q, Wang H K 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 012101 (in Chinese) [陈存宇, 陈爱喜, 戚晓秋, 王韩奎 2025 物理学报 **74** 012101]
- [28] Tao S J, Zhang L F, Zhang Q Y, Liu J, Xu C 2022 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **52** 252009 (in Chinese) [陶世杰, 张力菲, 张庆一, 刘健, 许昌 2022 中国科学: 物理学 力学 天文学 **52** 252009]
- [29] Li Z L, Wang Y J, Li Q F, Lv B F 2025 *Phys. Rev. C* **112** 014312
- [30] Costiris N J, Mavrommatis E, Gernoth K A, Clark J W 2009 *Phys. Rev. C* **80** 044332
- [31] Niu Z M, Liang H Z, Sun B H, Long W H, Niu Y F 2019 *Phys. Rev. C* **99** 064307
- [32] Li P, Bai J H, Niu Z M, Niu Y F 2022 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **52** 252006 (in Chinese) [李鹏, 白景虎, 牛中明, 牛一斐 2022 中国科学: 物理学 力学 天文学 **52** 252006]
- [33] Wei K W, Shang T S, Tian R H, Yang D, Li C J, Chen J, Li J, Huang X L, Zhu J L 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 182901 (in Chinese) [魏凯文, 尚天帅, 田榕赫, 杨东, 李春娟, 陈军, 李剑, 黄小龙, 朱佳丽 2025 物理学报 **74** 182901]
- [34] Li W F, Zhang X Y, Niu Y F, Niu Z M 2024 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **51** 015103
- [35] Li P, Niu Y F, Niu Z M 2025 *Nucl. Sci. Tech.* **36** 50
- [36] Jin Z S, Yan M S, Zhou H, Cheng A, Ren Z Z, Liu J 2023 *Phys. Rev. C* **108** 014326
- [37] Liu J, Jin Z S, Ren Z Z 2025 *Phys. Rev. C* **112** 024309
- [38] Ma N N, Zhao T L, Wang W X, Zhang H F 2023 *Phys. Rev. C* **107** 014310
- [39] Chen H J, Sheng H W, Huang W H, Wu L Q, Zhao T L, Bao X J 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 192301 (in Chinese) [陈海军, 盛浩文, 黄文豪, 吴彬琪, 赵天亮, 包小军 2025 物理学报 **74** 192301]
- [40] Wang Z A, Pei J C, Liu Y, Qiang Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 122501
- [41] Qiao C Y, Pei J C, Wang Z A, Qiang Y, Chen Y J 2021 *Phys. Rev. C* **103** 034621
- [42] Zhao Q, Ren Z X, Zhao P W, Meng J 2022 *Phys. Rev. C* **106** 034315
- [43] Mumpower M R, Surman R, McLaughlin G C, Aprahamian A 2016 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **86** 86

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

## Prediction of atomic nuclear mass using neural networks constrained by neutron and proton separation energy\*

WANG Dongdong<sup>1)</sup> Li Peng<sup>2)3)†</sup> WANG Zhiheng<sup>2)3)</sup>

1) (*Institute of Nuclear Physics, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China*)

2) (*School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China*)

3) (*Frontiers Science Center for Rare Isotopes, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China*)

( Received 24 September 2025; revised manuscript received 4 November 2025 )

### Abstract

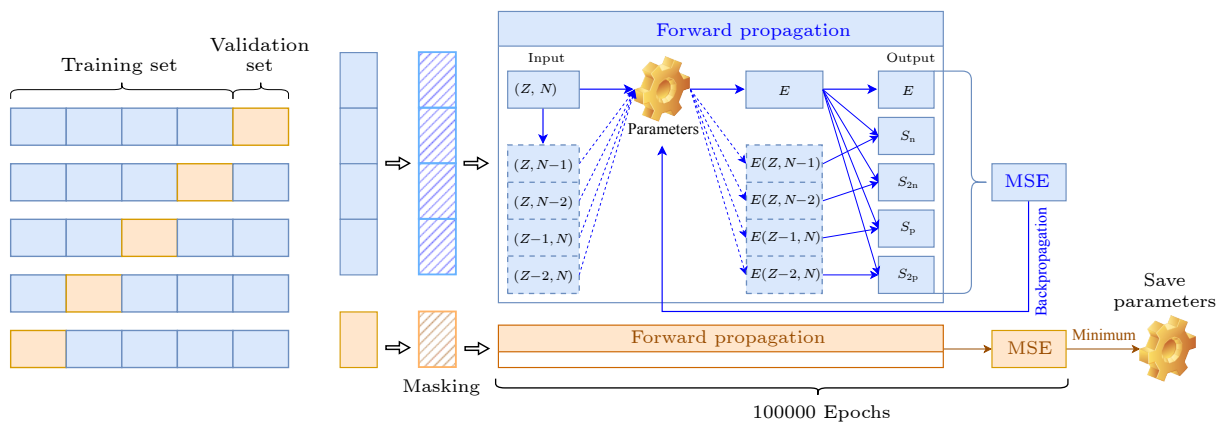
Nuclear mass is a fundamental observable value that reflects nuclear structure and stability, and plays a key role in nuclear physics and astrophysics. Most of the existing neural network research focuses on predicting the binding energy or neutron/proton separation energy alone, little attention is paid to the physical correlations between these observable quantities. A physical information-based artificial neural network (ANN)

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2021YFA1601500), the National Nuclear Corporation Leading Innovation Project, China (Grant No. CNNC-LCKY-2024-082), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12075104), the National Natural Science Foundation of China - Special Fund for Theoretical Physics (Grant No. 12447106), the Fundamental Research Fund for the Central Universities, Lanzhou University (Grant No. lzujbky-2023-stlt01), and the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 24JRRA448).

† Corresponding author. E-mail: 120220904501@lzu.edu.cn

is developed based on the relativistic point-coupling model PCK-PK1 to systematically predict nuclear binding energy and single/double neutron/proton separation energy, while maintaining the physical self-consistency of the predictions. To evaluate the influence of introducing separation-energy constraints, different combinations of loss function weights are used to train the networks, enabling a comparison between networks without separation-energy constraints (such as ANN1) and those containing such constraints (such as ANN3).

The neural network significantly improves the overall prediction accuracy of binding energy compared with the PCF-PK1 model. Without separation-energy constraints, ANN1 already achieves high precision for binding energy (RMSE  $\approx 0.147$  MeV) and separation energy (RMSE  $\approx 0.158$ – $0.185$  MeV). Incorporating the separation-energy constraints into ANN3 results in a slight improvement in overall prediction accuracy. The binding energy predictions improve by approximately 4.6%, while the separation energy predictions increase by 8.9%–12.0%. The improvement is particularly noticeable for nuclei where the deviations of ANN1 predictions from experimental values exceed 0.2 MeV. The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciedb.j00213.00239>.



**Keywords:** nuclear mass, neural network, separation energy

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251315](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251315)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251315](https://cstr.net/urn:identifier:cn:32037.14.aps.75.20251315)

基于中子和质子分离能约束的神经网络对原子核质量的预测

王东东 李鹏 王之恒

Prediction of atomic nuclear mass using neural networks constrained by neutron and proton separation energy

WANG Dongdong Li Peng WANG Zhiheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 020104 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251315

CSTR: 32037.14.aps.75.20251315

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251315>

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

基于神经网络方法研究超重核的稳定性和衰变性质

Research on stability and decay properties of superheavy nuclei based on neural network method

物理学报. 2025, 74(19): 192301 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250720>

基于物理信息神经网络的光斑质心计算

Calculation of spot centroid based on physical informed neural networks

物理学报. 2022, 71(20): 200601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220670>

基于神经网络的粒子输运问题高效计算方法

An efficient calculation method for particle transport problems based on neural network

物理学报. 2024, 73(7): 072802 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231661>

量子混合态的两种神经网络表示

Two types of neural network representations of quantum mixed states

物理学报. 2023, 72(11): 110301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221905>

贝叶斯深度神经网络对于核质量预测的研究

Prediction of unknown nuclear stability by Bayesian deep neural network

物理学报. 2022, 71(10): 102101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212387>

水平管内超临界R1234ze(E)冷却传热性能的神经网络预测

Neural network prediction of cooling heat transfer characteristics of supercritical R1234ze(E) in horizontal tube

物理学报. 2024, 73(12): 120702 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240283>