

基于决策树方法的奇  $A$  核基态自旋预测\*温湖峰<sup>1) #</sup> 尚天帅<sup>1) #</sup> 李剑<sup>1) †</sup> 牛中明<sup>2)</sup> 杨东<sup>1) ‡</sup>  
薛永和<sup>1)</sup> 李想<sup>1)</sup> 黄小龙<sup>3)</sup>

1) (吉林大学物理学院, 长春 130012)

2) (安徽大学物理与光电工程学院, 合肥 230601)

3) (中国原子能科学研究院, 核数据重点实验室, 北京 102413)

(2023 年 4 月 4 日收到; 2023 年 5 月 9 日收到修改稿)

作为原子核的基本性质, 基态自旋一直是原子核数据与核结构基础研究领域的热点. 本文采用决策树方法对核素图上的奇质量数原子核 (奇  $A$  核), 包括奇质子数原子核 (奇  $Z$  核) 与奇中子数原子核 (奇  $N$  核), 进行了深入的研究, 并分别训练了奇  $Z$  核与奇  $N$  核的基态自旋预测模型. 其中在以 75%:25% 的比例随机划分训练集与验证集的情况下, 奇  $Z$  核的训练集和验证集的正确率分别达到 98.9% 和 79.3%; 奇  $N$  核的训练集和验证集的正确率分别达到 98.6% 和 71.6%. 同时, 通过 1000 次随机选择训练集和验证集进行重复验证, 得到的正确率的标准误差均小于 5%, 进一步验证了决策树的可靠性和泛化性能; 另一方面, 决策树的正确率远高于核结构研究中常用的理论模型, 如 Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov (SHFB) 理论、协变密度泛函理论 (CDFT)、有限核液滴模型等. 接下来, 以所有自旋确定的奇  $Z$  核和奇  $N$  核为学习集, 对共计 254 和 268 个自旋未确定但有推荐值的奇  $Z$  核和奇  $N$  核的基态自旋值进行了预测, 预测集符合率分别达到 68.5% 和 69.0%. 最后, 选择  $Z = 59$ ,  $Z = 77$ ,  $N = 41$  以及  $N = 59$  四条奇质量数链, 讨论了决策树的学习 (预测) 结果与相应原子核的实验 (推荐) 值, 以及 3 种理论模型所给出结果的异同, 进一步展示了决策树在原子核基态自旋方面的研究与应用价值.

**关键词:** 基态自旋, 奇  $A$  核, 机器学习, 决策树**PACS:** 21.10.Hw, 21.60.Jz, 29.85.-c**DOI:** 10.7498/aps.72.20230530

## 1 引言

原子核的自旋, 即原子核的总角动量, 是描述原子核性质的最基本和最重要的物理量之一. 原子核的总角动量由组成原子核的质子和中子的自旋及轨道角动量贡献, 反映了原子核的内禀结构特性, 是检验和发展原子核理论模型的重要依据. 如通过研究原子核基态自旋及其关联效应 (例如磁

矩), 可以更清晰地认识原子核的内部结构和核力作用下的壳层演化规律, 进一步探索核力性质及在核力作用下的原子核量子多体体系性质<sup>[1,2]</sup>. 另一方面, 对原子核自旋自由度的准确研究, 也是原子核数据领域的重要需求. 如原子核的自旋是获取原子核衰变绝对强度的重要物理量, 而原子核衰变特征  $\gamma$  射线绝对强度是禁核试核查和反应堆运行必需的数据. 事实上, 大量裂变产物核素的射线绝对强度, 即归一化因子, 难以通过实验一一测量,

\* 吉林省自然科学基金 (批准号: 20220101017JC)、国家自然科学基金 (批准号: 11675063, 11875070, 11935001)、核数据重点实验室 (批准号: JCKY2020201C157) 和安徽省项目 (批准号: Z010118169) 资助的课题.

# 同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: jianli@jlu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: dyang@jlu.edu.cn

而计算绝对强度的常用方法依赖母核与子核的基态自旋<sup>[3-5]</sup>.

由于偶偶原子核基态自旋为零, 对奇  $A$  核的基态自旋研究和关注最多. 一方面奇质量数体系结构相对简单, 规律性较强; 另一方面足够反映出背后的物理机理. 实验上, 随着放射性束流的产生以及同位素分离技术的发展, 对远离稳定线核素的实验研究成为可能, 许多奇  $A$  核的基态性质包括自旋值可以被确定, 但仍有相当多的原子核在测量方面存在困难<sup>[6]</sup>. 理论上, 尽管最近几十年发展了很多成功的原子核结构理论方法, 但是对原子核基态自旋的描述仍主要针对特定区域或者个别原子核中的结构现象. 相比于原子核质量等基态性质的精确描述, 对基态自旋的描述仍然让人不满意, 特别是缺少微观系统的描述.

目前, 描述原子核结构性质最常用的微观理论方法主要有第一性原理 (*ab-initio*)<sup>[7-10]</sup>、组态相互作用壳模型<sup>[11]</sup>和密度泛函理论<sup>[12]</sup>. 第一性原理方法从真实核力出发对原子核进行描述, 但是由于计算量非常大, 目前它们只适用于非常轻的原子核; 组态相互作用壳模型方法在一个截断的模型空间内对原子核进行研究, 但是模型空间的维数会随着原子核价核子数目的增加而迅速变大, 这强烈地限制了它对更重原子核的描述; 密度泛函理论方法, 包括非相对论的 Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov 方法和相对论的协变密度泛函理论方法<sup>[13-16]</sup>等, 基于一个普适的能量密度泛函, 该方法可以对核素图中几乎所有原子核的基态和激发态性质给出统一的描述, 已经成为核结构研究的标准理论方法之一. 尽管密度泛函理论方法能系统地研究核素图上的原子核基态自旋, 但它们的准确率仍有较大的提升空间. 比如 SHFB 模型对 344 个奇  $Z$  核和 290 个奇  $N$  核基态自旋预测值与实验值的符合率分别为 53.49% 和 29.31%<sup>[17]</sup>; CDFT 模型对 349 个奇  $Z$  核和 366 个奇  $N$  核基态自旋预测值与实验值的符合率分别为 51.29% 和 40.98%<sup>[18]</sup>. 另一方面, 对原子核质量能够高精度描述的宏观-微观方法有限程液滴模型 (FRDM), 其对 350 个奇  $Z$  核和 364 个奇  $N$  核基态自旋预测值与实验值的符合率分别为 48.68% 和 46.98%<sup>[19]</sup>, 与微观方法相差不大. 综上所述, 不管是微观方法还是宏观-微观方法, 对奇  $Z$  核和奇  $N$  核的基态自旋描述符合率在 50% 左右, 使用微观理论方法进行原子核基态自旋系统的

研究仍然存在着挑战. 迫切需要一种更有效的计算方法, 来描述已有原子核的基态自旋规律并预测未测量的原子核基态自旋值.

机器学习方法有强大的数据处理和预测能力, 可以对任何可测量的函数逼近至一定的期望精度<sup>[20]</sup>. 目前, 机器学习已被广泛地应用于原子核结构和反应相关性质的研究<sup>[21]</sup>, 如原子核的基态性质, 包括核质量 (结合能)<sup>[22-38]</sup>、电荷半径<sup>[25,39-45]</sup>、磁矩<sup>[46]</sup>、分离能<sup>[23,25,33,38]</sup>、稳定性<sup>[47,48]</sup>、密度分布<sup>[49-51]</sup>、放射性核衰变分支比<sup>[48,52]</sup>等. 此外还有激发态<sup>[53-56]</sup>、 $\alpha$  衰变<sup>[29,30,57-60]</sup>、 $\beta$  衰变<sup>[52,61-64]</sup>、核反应截面<sup>[65-71]</sup>、裂变势垒<sup>[72,73]</sup>、巨偶极共振<sup>[74]</sup>、 $\beta$  衰变中子发射率<sup>[75]</sup>、核系统密度泛函<sup>[76]</sup>和核数据评价<sup>[77]</sup>等.

早在 1993 年, Gernoth 等<sup>[34]</sup>就用前馈神经网络学习了原子核的基态自旋: 他们使用前馈神经网络对奇  $Z$  核进行训练并验证, 训练集和验证集的奇  $Z$  核个数分别为 401 和 41, 正确率分别为 99.5% 和 73.2%. 然而用上述神经网络预测奇  $N$  核基态自旋的正确率只有 24%; 同样地, 学习了 417 个奇  $N$  核基态自旋的神经网络在预测当时新发现的 22 个奇  $N$  核时正确率达到 83%, 而用此神经网络预测奇  $Z$  核基态自旋的正确率只有 10% 左右. 这说明奇  $Z$  核基态自旋的分布规律与奇  $N$  核存在不同, 因此有必要将奇  $Z$  核和奇  $N$  核分开学习. 此后, Clark 和 Li<sup>[37]</sup>于 2006 年利用支持向量机 (SVM) 方法同样研究了核基态自旋并得到了相当高的准确率 (在训练集和测试集上能分别达到 90% 和 84%), 这进一步说明了机器学习方法在处理核基态自旋问题时的成功. 相比之下, 宏观方法预测上述 22 个奇  $N$  核的正确率仅有 62%<sup>[78]</sup>. 这说明在精度和预测能力方面, 神经网络模型可以与传统的唯象理论方法相媲美甚至将之超越. 然而一方面文献的数据集中包含非基态原子核的自旋, 另一方面核基态自旋数据随着实验的进步在更新, 如上述 Gernoth 等<sup>[34]</sup>的工作中, 他们预测的 22 个奇  $N$  核的基态自旋值在当时并未完全确定, 当时  $^{111}_{46}\text{Pd}$  基态自旋推荐值为 11/2, 而现在其基态自旋值确定为 5/2; 另外, Clark 和 Li<sup>[37]</sup>的工作中也使用了当时未被实验确定的核基态自旋值, 这可能会对结果造成了一些影响. 尽管这些文献中给出了比较好的预测结果, 随着基态自旋确定的奇  $A$  核数量不断增加以及机器学习方法的改进, 仍有必要进一步研究以得到更加可靠的结果.

决策树 (DT) 方法在机器学习领域中通常用于处理分类问题. 决策树模型保留了可解释性, 是支持决策过程可视化的白盒模型, 便于结合物理图像分析奇  $A$  核的基态自旋. 此外, 决策树还是构建其他表现更好的回归模型 (如 Random Forest<sup>[79]</sup>, XG-boost<sup>[80]</sup>) 的关键. 为了进一步探索机器学习方法的可靠性和奇  $A$  核基态自旋的规律性, 本文使用决策树方法研究原子核的基态自旋, 并与传统方法比较. 文章第 2 节将介绍决策树方法和数据集、输入、输出等量的选取, 第 3 节对决策树学习结果进行讨论, 第 4 节是总结和展望.

## 2 决策树方法简介

假设想要研究一个过程  $f$ , 将其某些输入  $X$  转换成输出  $Y$ . 也就是说  $f$  是一个函数, 满足

$$f: X \rightarrow Y, \quad (1)$$

其中输入  $X$  可以是高维矩阵, 输出  $Y$  可以是连续值或离散值, 连续值属于回归问题, 离散值则属于分类问题. 机器学习方法将函数  $f$  视为一个映射  $X$  到  $Y$  的黑盒, 放弃找到函数  $f$  的具体形式, 而去构造一个新的过程  $\tilde{f}$ .  $\tilde{f}$  和  $f$  具有相同的输入  $X$ , 输出值用  $\tilde{Y}$  来表示:

$$\tilde{f}: X \rightarrow \tilde{Y}. \quad (2)$$

过程  $\tilde{f}$  通常依赖于输入  $X$ 、参数 (在算法迭代过程中可以改变的系数)、超参数 (在学习之前设置的参数). 不同模型的学习效果也不尽相同. 为了比较不同模型的学习效果, 也就是  $\tilde{f}$  与  $f$  的符合程度, 需要定义一个评价标准. 分类问题中最常用的评价标准就是正确率:

$$P(\tilde{Y} = Y) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \delta_{\tilde{Y}_i Y_i}, \quad (3)$$

其中  $M$  为样本个数;  $\delta_{\tilde{Y}_i Y_i}$  是克罗内克函数,

$$\delta_{\tilde{Y}_i Y_i} = \begin{cases} 1, & \tilde{Y}_i = Y_i, \\ 0, & \tilde{Y}_i \neq Y_i. \end{cases} \quad (4)$$

一般来说, 模型的正确率越大,  $\tilde{f}$  与  $f$  的符合程度越好, 学习效果也就越好.

决策树是常用的机器学习算法之一. 在决策树中, 函数  $f: X \rightarrow Y$  近似为  $n$  步的阶梯函数<sup>[81]</sup>:

$$\tilde{f} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbb{I}(\Omega_i), \quad (5)$$

其中  $\Omega_i \subseteq X$ ,  $X \subset \mathbb{R}^d$ , 而且  $\Omega_i$  是  $\mathbb{R}^d$  中的半平面,  $d$  是特征数.  $\mathbb{I}(\Omega_i)$  是指示函数:

$$\mathbb{I}(\Omega_i) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega_i, \\ 0, & x \notin \Omega_i. \end{cases} \quad (6)$$

对于这样一个划分过程, 我们称划分前的集合为根结点, 划分后的集合  $\Omega_i$  为叶结点. 任何一个可测量的函数都可以用阶梯函数来拟合<sup>[82]</sup>. 因此, 只要函数  $f$  是可测量的, 这种近似就是合理的. 于是, 通过使用足够的阶梯函数, 理论上能拟合任何函数.

为了得到 (5) 式中最佳的系数  $\alpha_i$  和  $\Omega_i$ , 本文使用基尼指数作为划分标准:

$$\text{Gini}(p) = \sum_{k=1}^K p_k(1 - p_k) = 1 - \sum_{k=1}^K p_k^2, \quad (7)$$

其中  $K$  为数据集种类数量, 数据处于第  $k$  类的概率为  $p_k$ . 基尼指数可以表示样本的不确定大小, 基尼指数越大, 样本的不确定性越大. 决策树方法通过比较不同划分方式划分后集合的基尼指数, 选择基尼指数最小的划分方式, 如此就得到了最佳的系数  $\alpha_i$  和  $\Omega_i$ .

随着划分次数的增加, 模型的复杂度也随之增加. 当模型的复杂度达到一定程度时, 容易导致过拟合现象, 也就是模型在训练集数据上正确率很高, 然而在验证集正确率较低. 这时就需要通过调节最大树深, 也就是整个数据集得到叶结点所需的最大阶梯函数个数, 使模型既具有较高的正确率又尽量避免过拟合.

本文使用 python 的 scikit-learn 库来建立决策树模型<sup>[83]</sup>, 输入选择质子数  $Z$  和中子数  $N$ , 为了方便起见, 输出选择两倍自旋  $2I$ . 划分标准选择为基尼指数.

## 3 结果讨论

本文所学习的数据来源于 NNDC 网站<sup>[84]</sup>. 总共有 741 个自旋确定的奇  $A$  核, 其中 363 个为奇  $Z$  核, 其余 378 个为奇  $N$  核. 由于奇  $Z$  核和奇  $N$  核的基态自旋分布规律有所不同, 本文将其分开学习并建立不同的模型.

图 1 给出了奇  $Z$  核、奇  $N$  核的基态自旋分布情况. 可以看出, 奇  $A$  核的自旋分布具有分块分布的特性. 对于奇  $Z$  核, 同一条同位素链的原子核基态自旋大多相同, 这一点在质子数为幻数附近的同



位素链上尤为明显. 例如,  $Z = 49$  同位素链基态自旋全为  $9/2$ ,  $Z = 51$  同位素链在  $N < 72$  时基态自旋  $I = 5/2$ ,  $N \geq 82$  时基态自旋  $I = 7/2$ . 对于奇  $N$  核也是如此, 当中子数在幻数附近时, 同中异位素链上原子核自旋基本相同. 当核子数远离幻数时, 由于价核子轨道能级的变化, 同位素链和同中异位素链上的自旋并不完全相同, 可能会有多个取值. 此外, 在某些区域原子核基态自旋的分布规律较弱, 例如  $^{73}_{35}\text{Br}$  的基态自旋为  $1/2$ , 然而邻近周围并没有自旋为  $1/2$  的原子核. 尽管个别原子核的不规律性增大了决策树方法的学习难度, 但整体上分块分布的规律性为决策树取得较好的成果提供了可能.

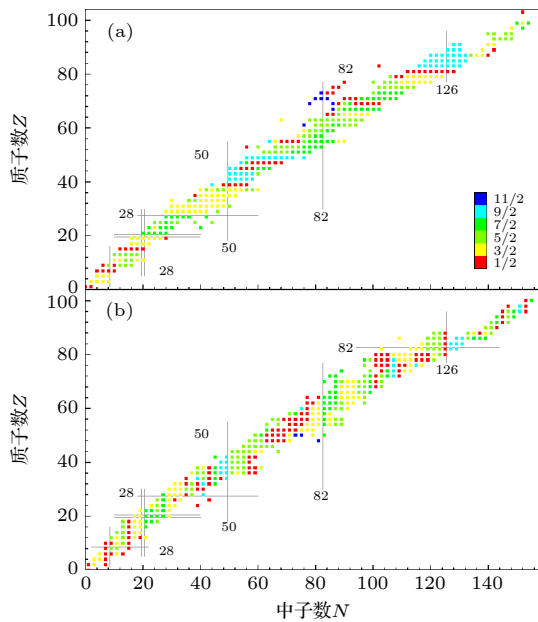


图 1 奇  $A$  核基态自旋实验值分布, 用不同颜色表示不同自旋值 (a) 奇  $Z$  核; (b) 奇  $N$  核

Fig. 1. Experimental ground-state spin of odd- $A$  nuclei: (a) Odd- $Z$  nuclei; (b) odd- $N$  nuclei. Different values are represented by different colors.

为了检验决策树的学习能力, 将全部奇  $Z$  核和奇  $N$  核分别以 75%:25% 的比例随机划分为训练集和验证集, 再用不同最大树深的决策树模型进行训练, 最终得到图 2. 首先, 在树深为 11 时奇  $Z$  核的训练集和验证集正确率分别为 98.9% 和 79.3%; 奇  $N$  核为 98.6% 和 71.6%. 此时决策树模型不光在训练集有极高的正确率, 在验证集的正确率也在 70% 以上, 特别是奇  $Z$  核的正确率接近 80%; 其次, 训练集和验证集的正确率在最大树深大于 11 后均趋于稳定. 从图 2 可以得出以下结论: 当训练集的正确率接近 100% 时, 验证集的正确率

也将趋于稳定. 此外, 决策树方法训练出的模型与 SHFB, CDFT 和 FRDM 等相比有更高的正确率.

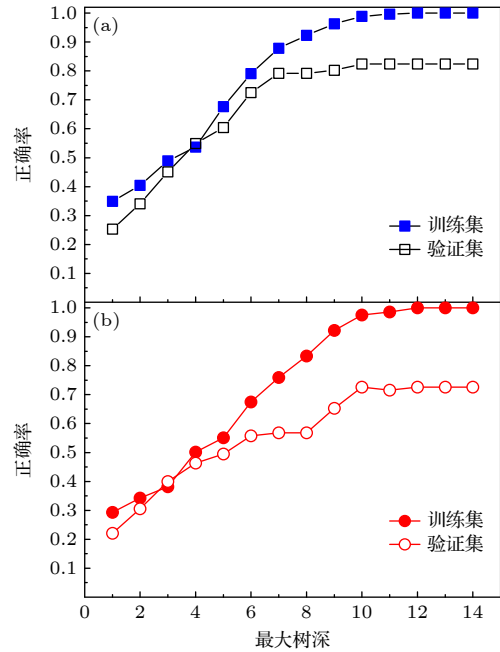


图 2 训练集和验证集的正确率随最大树深的变化 (a) 奇  $Z$  核; (b) 奇  $N$  核

Fig. 2. Change of accuracy of training set and validation set with the maximum depth of decision tree: (a) Odd- $Z$  nuclei; (b) odd- $N$  nuclei.

考虑到目前的工作只对数据集进行了单次随机划分, 不能排除偶然因素的影响. 于是取最大树深为 11 的决策树模型, 在其他参数相同的情况下, 进行 1000 次随机重复验证, 得到表 1.

表 1 最大树深为 11 时取 1000 次随机重复验证, 分别得到奇  $Z$  核和奇  $N$  核的训练集与验证集正确率平均值和正确率标准误差

Table 1. Average and standard error of the accuracy of the training set and the validation set obtained by 1000 random repetitions for odd- $Z$  nuclei and odd- $N$  nuclei, respectively.

	奇 $Z$ 核		奇 $N$ 核	
	训练集	验证集	训练集	验证集
平均值	97.6%	72.3%	96.5%	67.1%
标准误差	1.7%	4.5%	2.4%	4.9%

在表 1 中, 奇  $Z$  核和奇  $N$  核训练集的正确率平均值均高于 96%, 奇  $Z$  核验证集的正确率平均值达到 72.3%, 奇  $N$  核验证集的正确率平均值为 67.1%. 将表 1 中的正确率与图 2 比较可发现, 奇  $Z$  核和奇  $N$  核训练集的正确率相比图 2 只降低了不到 3%, 奇  $Z$  核验证集的正确率降低了 7%,

奇  $N$  核验证集的正确率仅降低了 3.5%. 此外, 表 1 同时给出了标准误差, 由下式得出:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q (P_i - \bar{P})^2}, \quad (8)$$

其中  $P_i$  是第  $i$  次重复验证的验证集正确率;  $Q$  是随机重复验证的次数, 本文中  $Q = 1000$ ;  $\bar{P}$  是 1000 次随机重复验证得到的验证集正确率的平均值. 由此公式计算出的标准误差均小于 5%, 这一结果说明训练集与验证集的划分对正确率的影响有限, 决策树方法在处理原子核基态问题时有较高的稳定性.

前面通过随机划分数数据集并多次重复验证的方式对决策树模型进行了检验, 证明决策树模型具有较高的可靠性. 现分别选取全部 363 个奇  $Z$  核、378 个奇  $N$  核为学习集, 通过改变最大树深, 得到图 3. 可以看出, 奇  $Z$  核和奇  $N$  核的学习集正确率随最大树深变化曲线基本相同, 在最大树深为 11 时正确率分别为 97.5% 和 98.4%, 并且在树深大于 11 时学习集正确率增长均比较缓慢. 结合图 2 中训练集和验证集的正确率变化趋势, 综合考虑学习集正确率并防止过拟合, 可以认为这里选择最大树深为 11 的决策树模型是最优的.

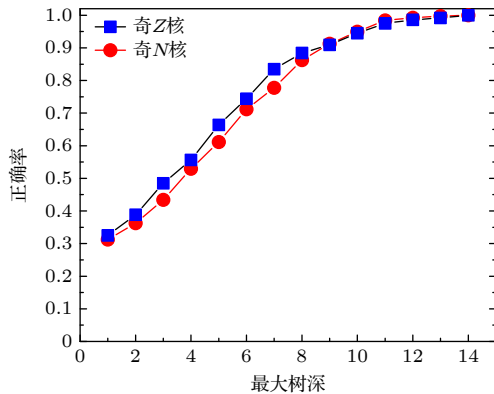


图 3 学习集正确率随最大树深的变化

Fig. 3. Change of accuracy of learning set with the maximum depth of decision tree.

接下来, 在将所有具有实验数据的原子核作为学习集的基础上, 对所有给出推荐值的原子核进行预测, 并且对所有内插核的基态自旋进行预言, 分别共计有 254 和 268 个自旋未确定的奇  $Z$  核和奇  $N$  核. 图 4 给出了决策树模型预测的基态自旋值与学习集中实验值的符合情况, 并给出与推荐值的符合情况, 同时标注了预测集中没有给出推荐值的原子核在核素图中的分布. 将决策树模型的预测结果与

给出的推荐值比较后, 奇  $Z$  核和奇  $N$  核的符合率分别为 68.5% 和 69.0%. 从图 4 可以看出, 在学习集上仅有少数几个原子核的基态自旋不能被决策树学习到, 它们分别是奇  $Z$  核的  $^{17}\text{F}$ ,  $^{133}\text{La}$ ,  $^{143}\text{Pr}$ ,  $^{145}\text{Pr}$ ,  $^{159}\text{Tm}$ ,  $^{161}\text{Tm}$ ,  $^{167}\text{Lu}$ ,  $^{171}\text{Lu}$ ,  $^{171}\text{Lu}$  以及奇  $N$  核的  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{72}\text{Zn}$ ,  $^{187}\text{Os}$ ,  $^{221}\text{Ra}$ ,  $^{225}\text{Ra}$ ,  $^{233}\text{Th}$ . 这些原子核的分布情况也不相同, 在奇  $Z$  核的数据集上, 这些学习效果不理想的核大致按同位素链分布且相邻, 这很有可能是同位素链上带头自旋的竞争引起的; 而在奇  $N$  核的数据集上, 这些核的分布没有明显的规律. 预测集上, 接近 70% 的正确率较随机划分数数据集的情况降低. 一方面, 这里采用的推荐值有很强的不确定性, 这会导致有一部分推荐值偏离决策树在学习集上寻得的规律; 另一方面, 大部分预测集分布在学习集的两端, 属于外推预测, 而决策树方法由其数学原理限制, 外推预测能力并不优秀. 综上所述, 决策树方法在预测集上的表现符合预期.

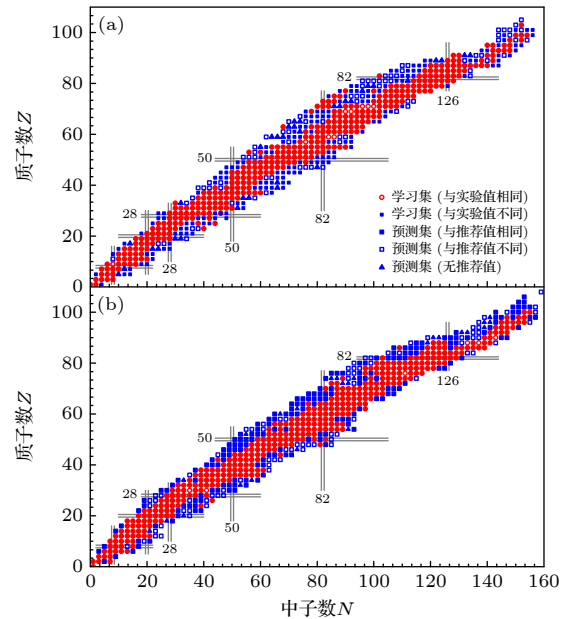


图 4 基于最大树深为 11 的决策树模型得到的原子核基态自旋学习集和预测集的结果, 其中与实验值相同 (不同) 的用红色实心 (空心) 圆圈表示; 与推荐值相同 (不同) 的用蓝色实心 (空心) 方块表示; 没有推荐值的用蓝色实心三角表示 (a) 奇  $Z$  核; (b) 奇  $N$  核

Fig. 4. Learning set and prediction set of the ground-state spin based on the decision tree model with the maximum depth of 11: (a) Odd- $Z$  nuclei; (b) odd- $N$  nuclei. The one same (different) as the experimental value is represented by a red solid (hollow) circle; the one same (different) as the recommended value is represented by blue solid (hollow) square; those with no recommended value are represented by blue solid triangles.

为了进一步研究图 4 中部分学习集上原子核的学习误差, 选取  $Z = 59$  和  $Z = 77$  的同位素链以及  $N = 41$  和  $N = 59$  的同中异位素链, 将这 4 条链上的决策树学习 (预测) 结果与它们的实验 (推荐) 值以及 3 种理论模型 (SHFB, CDFT, FRDM) 的计算结果进行比较, 结果如图 5 所示.

图 5 中每一行分别是实验值或 NNDC 网站中给出的推荐值、决策树模型预测值、SHFB 预测值、CDFT 预测值以及 FRDM 预测值; 左侧两列是  $Z = 59$  和  $Z = 77$  的同位素链, 右侧两列是  $N = 41$  和  $N = 59$  的同中异位素链. 值得注意的是, 对于原子核  $^{173}\text{Ir}$  ( $Z = 77, N = 96$ ), NNDC 网站给出的推荐值分别有  $(3/2)$  和  $(5/2)$  两个, 因此在图 5 中该处有两个值. 从图 5 可以看出: 对于很少出现的现象, 由于可供学习的物理信息不足, 当前的决策树方法无法很好地再现; 对于  $Z = 59$  的 Pr 同位素链, 在  $^{137}\text{Pr}$  之后可能存在质子  $d_{5/2}$  轨道和  $g_{7/2}$  轨道的竞争, 导致带头自旋产生  $5/2^+$  与  $7/2^+$  的竞

争关系. 由于本文使用的决策树模型采取了限制树深的方法来避免过拟合, 它会更优先考虑周围原子核的整体状态, 因此在这种竞争关系的符合情况上存在弱势; 另外, 对于  $N = 41$  同中异位素链, 在  $^{71}\text{Zn}$  处出现了显著的变化. 关于  $^{71}\text{Zn}$  基态自旋的特殊性, 文献 [85] 中给出了详细的讨论. 在 Zn 同位素链中, 从  $N = 41$  开始填充  $\nu g_{9/2}$  轨道时, 在不存在变形或相关性的情况下, 奇数 Zn 同位素的基态自旋  $I = 9/2$  将是预期的. 但是  $^{71}\text{Zn}$  并不符合预期, 它的基态自旋被实验证实为  $1/2$ . 文献 [85] 提出, 这是  $N = 50$  壳层幻数性质的证据, 并表明较轻的 Zn 同位素在基态表现出了显著的相关性, 从而导致非平凡的基态自旋, 而  $9/2^+$  态在  $^{71}\text{Zn}$  中似乎是同质异能态. 对于机器学习而言, 由于这样的演化趋势仅发生在微小的范围内, 决策树方法无法给出令人满意的结果. 这些现象在其他 3 个理论模型中也无法被预测. 另外, 在图 5 的所有 4 条链中, 决策树方法对质子数或中子数的改变相比于其他

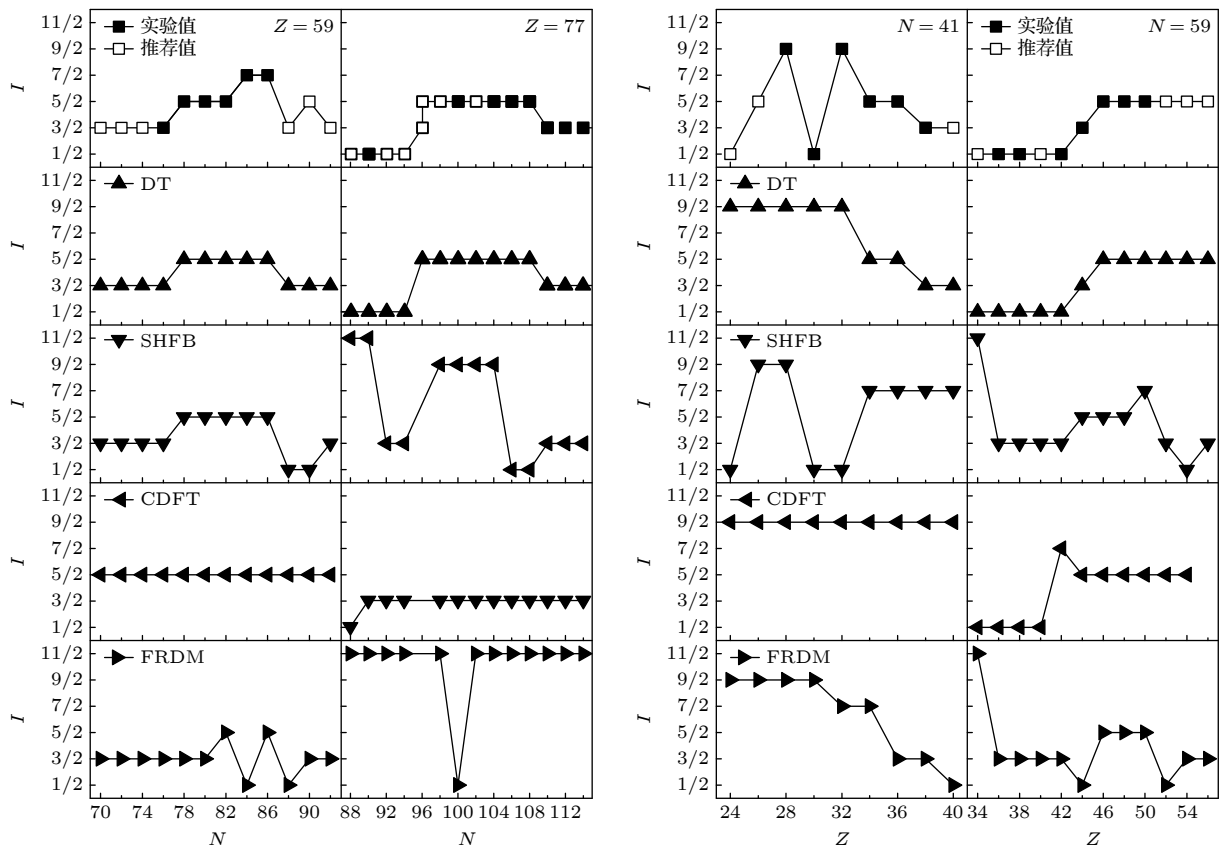


图 5 基于决策树得到的质子数  $Z = 59$ 、 $Z = 77$  的同位素链, 以及中子数  $N = 41$ 、 $N = 59$  的同中异位素链原子核的基态自旋值, 并与 SHFB、CDFT、FRDM 预测结果和相应实验值、推荐值结果的比较

Fig. 5. The ground-state spin of  $Z = 59$  and  $Z = 77$  isotopic chains (left) and  $N = 41$  and  $N = 59$  isotonic chains (right) are obtained based on the decision tree, and compared with the predicted results of SHFB, CDFT, FRDM and the corresponding experimental and recommended values.

3 个理论方法更敏感. 此外, 决策树用较低的计算成本取得了比其他 3 个理论模型更可靠的结果.

## 4 总结展望

由于现有理论对原子核基态自旋的系统描述不够准确, 本文利用决策树方法学习原子核的基态自旋, 通过划分数据集并随机重复验证的方式, 验证了决策树方法在这方面的可靠性. 在将所有实验值作为学习集的情况下, 决策树方法在奇  $Z$  核和奇  $N$  核上的正确率分别达到 97.5% 和 98.4%, 远高于 SHFB, CDFT, FRDM 这 3 种理论模型的预测结果. 与其他理论模型比较, 决策树方法用较低的计算量得到了较高的准确性, 体现了它的优势. 最后, 本文还预测了实验上基态自旋不确定的核与它们的内插核的基态自旋. 虽然本文的正确率比 SHFB, CDFT, FRDM 这 3 种理论模型高很多, 但仍有一些提高的空间: 在输入方面可以增加一些包含更多信息的物理量, 例如核子数与幻数的差值等; 在算法方面可以采用更加高级的算法, 例如随机森林、Light GBM 决策树. 此外还可以直接学习奇  $A$  核的基态自旋, 研究奇  $A$  核基态自旋的分布规律.

使用机器学习研究原子核的基态自旋存在着较大的意义: 从数据方面而言, 机器学习方法对原子核基态自旋预测工作可以取得较高的正确率, 可以给予实验工作一定帮助, 并且随着原子核基态自旋实验数据的增加, 机器学习方法的正确率也将随之增加, 两种相辅相成. 在物理意义上, 可以在机器学习过程中增加特定的物理信息, 通过观察预测结果的变化来得到这个物理量是否和原子核基态自旋有关联. 最终通过对实验规律的总结和物理信息的把握, 对现有理论给出比较好的修正.

## 参考文献

- [1] Yordanov D T, Kowalska M, Blaum K, Rydt M D, Flanagan K T, Lievens P, Neugart R, Neyens G, Stroke H H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 212501
- [2] Smirnova N, Bally B, Heyde K, Nowacki F, Sieja K 2010 *Phys. Lett. B* **686** 109
- [3] baglin C M 2012 *Nucl. Data Sheets* **113** 2187
- [4] Szuets J, Johns M, Singh B 2004 *Nucl. Data Sheets* **102** 1
- [5] Singh B 2009 *Nucl. Data Sheets* **110** 1
- [6] Yang X F, Wang S J, Wilkins S G, Ruiz R F G 2023 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **129** 104005
- [7] Carlson J A, Gandolfi S, Pederiva F, Pieper S C, Schiavilla R, Schmidt K E, Wiringa R B 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 1067
- [8] Dickhoff W, Barbieri C 2004 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **52** 377
- [9] Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M, Dean D J 2014 *Rep. Prog. Phys.* **77** 096302
- [10] Lee D 2009 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **63** 117
- [11] Caurier E, Martínez-Pinedo G, Nowacki F, Poves A, Zuker A P 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 427
- [12] Bender M, Heenen P H, Reinhard P G 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 121
- [13] Ring P 1996 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **37** 193
- [14] Meng J, Toki H, Zhou S G, Zhang S Q, Long W H, Geng L S 2006 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **57** 470
- [15] Meng J 2016 *Relativistic Density Functional for Nuclear Structure* (Singapore: World Scientific) pp305–354
- [16] Shen S, Liang H, Long W H, Meng J, Ring P 2019 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **109** 103713
- [17] Goriely S, Chamel N, Pearson J 2016 *Phys. Rev. C* **93** 034337
- [18] Xia X, Lim Y, Zhao P, et al. 2018 *At. Data Nucl. Data Tables* **121** 1
- [19] Möller P, Mumpower M R, Kawano T, Myers W D 2019 *At. Data Nucl. Data Tables* **125** 1
- [20] Benediktsson J, Swain P, Ersoy O 1990 *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* **28** 540
- [21] Boehnlein A, Diefenthaler M, Sato N, Schram M, Ziegler V, Fanelli C, Hjorth-Jensen M, Horn T, Kuchera M P, Lee D, Nazarewicz W, Ostroumov P, Orginos K, Poon A, Wang X N, Scheinker A, Smith M S, Pang L G 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 031003
- [22] Wu X H 2023 *Front. Phys.* **11** 1061042
- [23] Niu Z M, Liang H Z 2022 *Phys. Rev. C* **106** L021303
- [24] Ming X C, Zhang H F, Xu R R, Sun X D, Tian Y, Ge Z G 2022 *Nucl. Sci. Tech.* **33** 48
- [25] Shou R, Yin X, Ma C, Lin M, Zhao Y 2022 *Phys. Rev. C* **106** L061304
- [26] Gao Z P, Wang Y J, Li H L, Li Q F, Shen C W, Liu L 2021 *Nucl. Sci. Tech.* **32** 109
- [27] Neufcourt L, Cao Y, Giuliani S, Nazarewicz W, Olsen E, Tarasov O B 2020 *Phys. Rev. C* **101** 014319
- [28] Neufcourt L, Cao Y, Nazarewicz W, et al. 2018 *Phys. Rev. C* **98** 034318
- [29] Rodríguez U B, Vargas C Z, Gonçalves M, Duarte S B, Guzmán F 2019 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **46** 115109
- [30] Rodríguez U B, Vargas C Z, Gonçalves M, Duarte S B, Guzmán F 2019 *Europhys. Lett.* **127** 42001
- [31] Utama R, Piekarewicz J, Prosper H 2016 *Phys. Rev. C* **93** 014311
- [32] Bayram T, Akkoyun S, Kara S O 2014 *Ann. Nucl. Energy* **63** 172
- [33] Gazula S, Clark J, Bohr H 1992 *Nucl. Phys. A* **540** 1
- [34] Gernoth K, Clark J, Prater J, Bohr H 1993 *Phys. Lett. B* **300** 1
- [35] Niu Z, Liang H 2018 *Phys. Lett. B* **778** 48
- [36] Athanassopoulos S, Mavrommatis E, Gernoth K, Clark J W 2004 *Nucl. Phys. A* **743** 222
- [37] Clark J W, Li H 2006 *Int. J. Mod. Phys. B* **20** 5015
- [38] Niu Z M, Fang J Y, Niu Y F 2019 *Phys. Rev. C* **100** 054311
- [39] Dong X X, An R, Lu J X, Geng L S 2023 *Phys. Lett. B* **838** 137726
- [40] Dong X X, An R, Lu J X, Geng L S 2022 *Phys. Rev. C* **105** 014308
- [41] Ma J Q, Zhang Z H 2022 *Chin. Phys. C* **46** 074105
- [42] Ma Y, Su C, Liu J, Ren Z, Xu C, Gao Y 2020 *Phys. Rev. C* **101** 014304
- [43] Wu D, Bai C, Sagawa H, Zhang H 2020 *Phys. Rev. C* **102** 054323



- [44] Utama R, Chen W C, Piekarewicz J 2016 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **43** 114002
- [45] Akkoyun S, Bayram T, Kara S O, Sinan A 2013 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **40** 055106
- [46] Yuan Z, Tian D, Li J, Niu Z 2021 *Chin. Phys. C* **45** 124107
- [47] Clark J W, Gernoth K A, Dittmar S, Ristig M 1999 *Phys. Rev. E* **59** 6161
- [48] Gernoth K A, Clark J W 1995 *Neural Networks* **8** 291
- [49] Shang T S, Li J, Niu Z M 2022 *Nucl. Sci. Tech.* **33** 153
- [50] Yang Z X, Fan X H, Naito T, Niu Z, Li Z P, Liang H 2022 *arXiv: 2205.15649[nucl-th]*
- [51] Yang Z X, Fan X H, Yin P, Zuo W 2021 *Phys. Lett. B* **823** 136650
- [52] Costiris N, Mavrommatis E, Gernoth K A, Clark J W 2009 *Phys. Rev. C* **80** 044332
- [53] Wang Y, Zhang X, Niu Z, Li Z 2022 *Phys. Lett. B* **830** 137154
- [54] Akkoyun S, Kaya H, Torun Y 2022 *Indian J. Phys.* **96** 1791
- [55] Lasserri R D, Regnier D, Ebran J P, Penon A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 162502
- [56] Akkoyun S, Laouet N, Benrachi F 2020 *arXiv: 2001.08561[nucl-th]*
- [57] Ma N N, Zhao T L, Wang W X, Zhang H F 2023 *Phys. Rev. C* **107** 014310
- [58] Li C Q, Tong C N, Du H J, Pang L G 2022 *Phys. Rev. C* **105** 064306
- [59] Yuan Z, Bai D, Ren Z, Wang Z 2022 *Chin. Phys. C* **46** 024101
- [60] Kwon M, Oh Y, Song Y H, et al. 2021 *New Physics: Sae Mulli* **71** 599
- [61] Zhang X, Lin W, Yao J M, Jiao C F, Romero A M, Rodríguez T R, Hergert H 2023 *Phys. Rev. C* **107** 024304
- [62] Munoz J M, Akkoyun S, Reyes Z P, Pachon L A 2023 *Phys. Rev. C* **107** 034308
- [63] Niu Z, Liang H, Sun B, et al. 2019 *Phys. Rev. C* **99** 064307
- [64] Costiris N, Mavrommatis E, Gernoth K, Clark J, Li H 2008 *arXiv: 0809.0383[nucl-th]*
- [65] Akkoyun S, Amrani N, Bayram T 2023 *Appl. Radiat. Isot.* **191** 110554
- [66] Huang T X, Wu X H, Zhao P W 2022 *Commun. Theor. Phys.* **74** 095302
- [67] Ma C W, Wei X B, Chen X X, Peng D, Wang Y T, Pu J, Cheng K X, Guo Y F, Wei H L 2022 *Chin. Phys. C* **46** 074104
- [68] Peng D, Wei H L, Chen X X, Wei X B, Wang Y T, Pu J, Cheng K X, Ma C W 2022 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **49** 085102
- [69] Ma C W, Peng D, Wei H L, Niu Z M, Wang Y T, Wada R 2020 *Chin. Phys. C* **44** 014104
- [70] Ma C W, Peng D, Wei H L, Wang Y T, Pu J 2020 *Chin. Phys. C* **44** 124107
- [71] Ma C W, Wei H L, Liu X Q, Su J, Zheng H, Lin W P, Zhang Y X 2021 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **121** 103911
- [72] Yesilkanat C M, Akkoyun S 2023 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **50** 055101
- [73] Akkoyun S, Bayram T 2014 *Int. J. Mod. Phys. E* **23** 1450064
- [74] Wang X, Zhu L, Su J 2021 *Phys. Rev. C* **104** 034317
- [75] Wu D, Bai C, Sagawa H, Nishimura S, Zhang H 2021 *Phys. Rev. C* **104** 054303
- [76] Wu X, Ren Z, Zhao P, et al. 2022 *Phys. Rev. C* **105** L031303
- [77] Alhassan E, Rochman D, Vasiliev A, Hursin M, Koning A J, Ferroukhi H 2022 *Nucl. Sci. Tech.* **33** 50
- [78] Möller P, Nix J R 1990 *Nucl. Phys. A* **520** c369
- [79] Breiman L 2001 *Mach. Learn.* **45** 5
- [80] Chen T, Guestrin C 2016 *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining* San Francisco, USA, August 13–17, 2016 p785
- [81] Carnini M, Pastore A 2020 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **47** 082001
- [82] Maderna C, Soardi P M 1985 *Lezioni di analisi matematica (Torino: Città Studi Edizioni)* pp1–354
- [83] Pedregosa F, Varoquaux G, Gramfort A, et al. 2011 *J. Mach. Learn. Res.* **12** 2825
- [84] From ENSDF database as of 5.16, 2019. Version available at <http://www.nndc.bnl.gov/ensarchivals/> [2019-5-16]
- [85] Wraith C, Yang X, Xie L, Babcock C, Bieroń J, Billowes J, Bissell M, Blaum K, Cheal B, Filippin L, Garcia Ruiz R, Gins W, Grob L, Gaigalas G, Godefroid M, Gorges C, Heylen H, Honma M, Jönsson P, Kaufmann S, Kowalska M, Krämer J, Malbrunot-Ettenauer S, Neugart R, Neyens G, Nörtershäuser W, Nowacki F, Otsuka T, Papuga J, Sánchez R, Tsunoda Y, Yordanov D 2017 *Phys. Lett. B* **771** 385



# Prediction of ground-state spin in odd- $A$ nuclei within decision tree<sup>\*</sup>

Wen Hu-Feng<sup>1) #</sup>    Shang Tian-Shuai<sup>1) #</sup>    Li Jian<sup>1) †</sup>    Niu Zhong-Ming<sup>2)</sup>  
 Yang Dong<sup>1) ‡</sup>    Xue Yong-He<sup>1)</sup>    Li Xiang<sup>1)</sup>    Huang Xiao-Long<sup>3)</sup>

1) (*School of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

2) (*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China*)

3) (*Key Laboratory of Nuclear Data, Chinese Academy of Atomic Energy Sciences, Beijing 102413, China*)

( Received 4 April 2023; revised manuscript received 9 May 2023 )

## Abstract

Ground-state spin, as a fundamental parameter of nucleus, has consistently been a hot topic in research on nuclear data and structure. In this paper, we extensively investigate the odd-mass nuclei (odd- $A$  nuclei) on the nuclide chart by using decision trees, including odd-proton nuclei (odd- $Z$  nuclei) and odd-neutron nuclei (odd- $N$  nuclei), and train ground-state spin prediction models of odd- $Z$  nuclei and odd- $N$  nuclei. In the case of randomly dividing the training set and validation set in a ratio of 75% to 25%, the accuracy rate of the training set and validation set for odd- $Z$  nuclei reach 98.9% and 79.3%, respectively. The accuracy rate of the training set and validation set for the odd- $N$  nuclei reach 98.6% and 71.6%, respectively. At the same time, by 1000 random selections of training set and validation set, after being validated repetitively, the standard error of the accuracy rate obtained can be less than 5%, further verifying the reliability and generalization performance of the decision tree. On the other hand, the accuracy rate of decision tree is much higher than those of theoretical models commonly used in nuclear structure research, such as Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov, covariant density functional theory, and finite range droplet model. Next, by taking all spin-determined odd- $Z$  nuclei and odd- $N$  nuclei as a learning set, the ground-state spin values for 254 spin undetermined but recommended odd- $Z$  nuclei and 268 spin undetermined but recommended odd- $N$  nuclei are predicted, with the predicted set coincidence rates reaching 68.5% and 69.0%, respectively. Finally, four odd-mass number chains, i.e.  $Z = 59$ ,  $Z = 77$ ,  $N = 41$ , and  $N = 59$ , are selected to compare the learning (prediction) results of the decision tree with the experimental (recommended) values of the corresponding nuclei, and to discuss the differences and similarities in the results given by the three theoretical models, thereby further demonstrating the research and application value of the decision tree in the ground-state spin of nuclei.

**Keywords:** ground-state spin, odd- $A$  nuclei, machine learning, decision tree

**PACS:** 21.10.Hw, 21.60.Jz, 29.85.-c

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230530

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation of Jilin Province, China (Grant No. 20220101017JC), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11675063, 11875070, 11935001), the Key Laboratory of Nuclear Data Foundation, China (Grant No. JCKY2020201C157), and the Anhui Project, China (Grant No. Z010118169).

<sup>#</sup> These authors contributed equally.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [jianli@jlu.edu.cn](mailto:jianli@jlu.edu.cn)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [dyang@jlu.edu.cn](mailto:dyang@jlu.edu.cn)

## 基于决策树方法的奇A核基态自旋预测

温湖峰 尚天帅 李剑 牛中明 杨东 薛永和 李想 黄小龙

## Prediction of ground-state spin in odd-A nuclei within decision tree

Wen Hu-Feng Shang Tian-Shuai Li Jian Niu Zhong-Ming Yang Dong Xue Yong-He Li Xiang  
Huang Xiao-Long

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 152101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230530

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230530>

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

#### 基于机器学习的无机磁性材料磁性基态分类与磁矩预测

Classification of magnetic ground states and prediction of magnetic moments of inorganic magnetic materials based on machine learning

物理学报. 2022, 71(6): 060202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211625>

#### 基于机器学习 $J_1$ - $J_2$ 反铁磁海森伯自旋链相变点的识别方法

Identifying phase transition point of  $J_1$ - $J_2$  antiferromagnetic Heisenberg spin chain by machine learning

物理学报. 2021, 70(23): 230701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210711>

#### 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>

#### 基于波动与扩散物理系统的机器学习

Machine learning based on wave and diffusion physical systems

物理学报. 2021, 70(14): 144204 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210879>

#### 机器学习辅助绝热量子算法设计

Machine learning assisted quantum adiabatic algorithm design

物理学报. 2021, 70(14): 140306 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210831>

#### 基于机器学习的非线性局部Lyapunov向量集合预报订正

Machine learning based method of correcting nonlinear local Lyapunov vectors ensemble forecasting

物理学报. 2022, 71(8): 080503 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212260>