

# Determinando as Constantes da Fórmula Semi-Empírica de Massa com Algoritmos Genéticos

Enzo Figueiredo - 233922  
Hermes de Souza Magalhães Junior - 217859  
Lucas Lopes Maldonado - 220819

## 1 Introdução

A Fórmula Semi-Empírica de Massa é uma equação que possibilita o cálculo aproximado da massa nuclear de elementos em função do número atômico ( $Z$ ) e do número de massa atômica ( $A$ ), cuja expressão é dada por:

$$M(Z, A)c^2 = ZM_p c^2 + (A - Z)M_n c^2 + B(Z, A) \quad (1)$$

em que  $M_p$  é a massa do próton,  $M_n$  é a massa do nêutron e  $B(Z, A)$  é a energia de ligação dos núcleons (prótons e nêutrons). Esta energia de ligação é a parcela da fórmula semi-empírica de massa que carrega mais informações a cerca do núcleo uma vez que possui termos que consideram as características de volume ( $a_V$ ), de superfície ( $a_S$ ), de Coulomb ( $a_C$ ), de assimetria ( $a_A$ ) e de paridade ( $a_P$ ). O termo de volume representa a energia de ligação de todos os núcleons e considera como se cada um dos núcleons estivesse totalmente rodeado por outros. O termo de superfície é uma correção do termo de energia de volume pelo fato de os núcleons na superfície, ou próximos dela, não estarem totalmente rodeados por outros núcleons. O termo de Coulomb determina a contribuição energética do núcleo devido o potencial gerado pela carga nuclear. O termo de assimetria assegura que, no caso em que dois núcleos diferentes de mesmo número de massa atômica ( $A$ ) tenham todos os outros termos energéticos iguais, o que representa um núcleo mais estável é o núcleo tal que seu número de prótons seja o mais próximo do número de nêutrons ( $Z \approx N$ ). Por fim, o termo de paridade leva em conta o fato de que um núcleo com núcleons emparelhados é mais fortemente ligado do que um núcleo com núcleons desemparelhados, ou seja, um núcleo com número par de prótons e nêutrons (e-e) tem energia de ligação maior que um núcleo com número ímpar de prótons e par de nêutrons (o-e), ou vice-versa (e-o), que por sua vez tem energia de ligação maior que um núcleo com número ímpar de prótons e nêutrons (o-o).

Em suma, a expressão que descreve a energia de ligação de um núcleo atômico é escrita como:

$$B(Z, A) = a_V A - a_S A^{\frac{2}{3}} - a_C \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} - a_A \frac{(A - 2Z)^2}{A} + \delta(Z, A) \quad (2)$$

em que

$$\delta(Z, A) = \begin{cases} -\frac{a_P}{A^{\frac{1}{2}}}, & \text{se o núcleo é do tipo o-o} \\ 0, & \text{se o núcleo é do tipo e-o ou o-e} \\ \frac{a_P}{A^{\frac{1}{2}}}, & \text{se o núcleo é do tipo e-e} \end{cases}$$

Os coeficientes da equação anterior podem ser determinados por algoritmos através de dados experimentais ( $Z$ ,  $N$  e  $B$ ) e uma maneira bastante interessante de fazer isso é usando Algoritmos Genéticos (AG). Os AG são algoritmos inspirados em aspectos da natureza e são amplamente utilizados em problemas relativamente complexos de otimização, dentre eles, problemas que envolvem vários parâmetros e/ou características que podem ser combinadas e recombinadas em busca da melhor solução. Os aspectos da natureza que inspiram os AGs são basicamente os mecanismos de

seleção natural e recombinação genética. Pela teoria de Charles Darwin, o princípio da seleção, os indivíduos mais aptos são privilegiados em seu tempo de vida e possuem maior probabilidade de reprodução, o que acaba por aumentar o número de seus descendentes. Indivíduos com mais descendentes possuem maiores chances de perpetuarem seus códigos genéticos ao longo das futuras gerações. Consequentemente, estes códigos genéticos constituem a identidade de cada indivíduo e são representados por seus cromossomos. Tais princípios são reproduzidos na elaboração de algoritmos computacionais que têm como finalidade encontrar a melhor solução para determinado problema utilizando da evolução de populações de soluções armazenadas nos cromossomos artificiais.

Neste trabalho vamos aplicar um AG a dados de B por núcleon para encontrar os cinco coeficientes da Fórmula Semi-Empírica de Massa e compará-los com o resultado apresentado no livro *Nuclear and particle physics* [1].

## 2 Metodologia

Implementamos o método de algoritmos genéticos utilizando *python* e o código é composto por três arquivos principais. O primeiro destes arquivos contém a classe *SEMF* (de *Semi-Empirical Mass Formula*), esta classe representa um indivíduo da população, contendo cinco atributos que representam os coeficientes da Fórmula Semi-Empírica de Massa e métodos de inicialização, mutação, avaliação de B em função de Z e N e métodos para determinação do fitness. O segundo arquivo contém a classe *GA* (de *Genetic Algorithm*), esta classe contém um *array* de *SEMFs*, que é a população a passar pelo processo de evolução, ela possui métodos para o cálculo do *fitness* de toda a população, executar mutações em toda a população, realizar a etapa de reprodução e encontrar o melhor indivíduo da população. O último arquivo é o responsável pela definição de alguns parâmetros e salvar os resultados obtidos em arquivos.

Para a inicialização da população fazemos com que cada coeficiente receba um valor aleatório entre 0 e 20 MeV. Para a mutação utilizamos dois argumentos:  $\mu$  e  $\epsilon$ ,  $\mu$  representa a probabilidade de que cada coeficiente receba uma mutação,  $\epsilon$  indica que no caso de um coeficiente sofrer mutação ele será acrescido de um número aleatório entre  $-\epsilon$  e  $\epsilon$ . Na etapa de reprodução selecionamos os dois indivíduos com maior *fitness* e recriamos a população através de uma mistura dos coeficientes deles. O *fitness* é calculado como

$$f = - \sum_{(N,Z)} (B_{\text{experimental}} - B_{\text{calculado}})^2,$$

sendo que para os valores de  $B_{\text{experimental}}$  utilizamos os dados da base NuDat [2].

O código construído neste trabalho pode ser encontrado no repositório github: [https://github.com/lucaslmaldonado/GA\\_SEMF](https://github.com/lucaslmaldonado/GA_SEMF).

## 3 Resultados

Com o melhor resultado obtido encontramos os seguintes valores para os coeficientes:

$$\begin{aligned} a_V &= 14.709 \\ a_S &= 14.214 \\ a_C &= 0.651 \\ a_S &= 21.362 \\ a_P &= 11.311 \end{aligned}$$

Este resultado foi o melhor obtido entre oito populações de 500 indivíduos e 200 gerações, o que levou cerca de uma hora para ser computado. Para o cálculo do *fitness* foi utilizado uma amostra aleatória dos dados de 250 núclídeos, a fim de agilizar a execução do código.

Podemos obter resultados melhores se utilizarmos mais núclídeos no cálculo de *fitness*, aumentarmos o tamanho da população e utilizarmos um número maior de gerações, contudo, isso

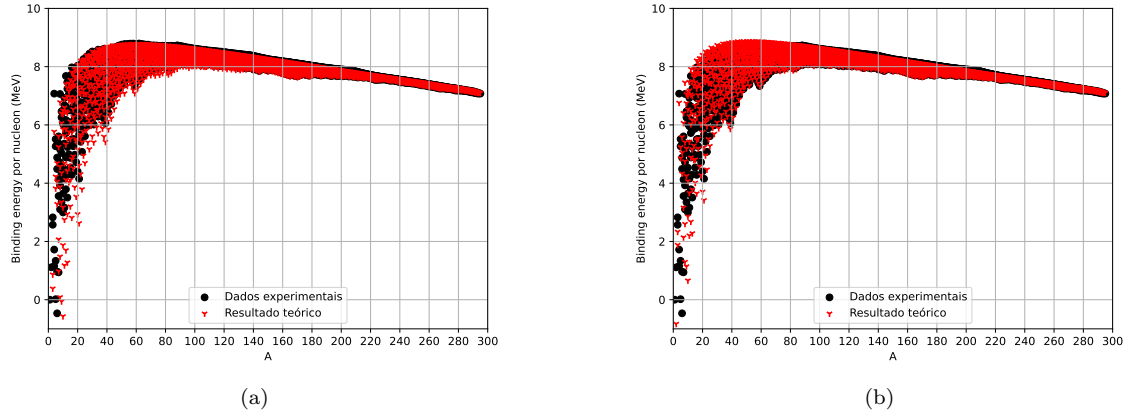


Figura 1: Energia de ligação ( $B$ ) por núcleon utilizando os coeficientes para fórmula semi-empírica de massa fornecidos pelo livro (a) e pelo algoritmo genético (b).

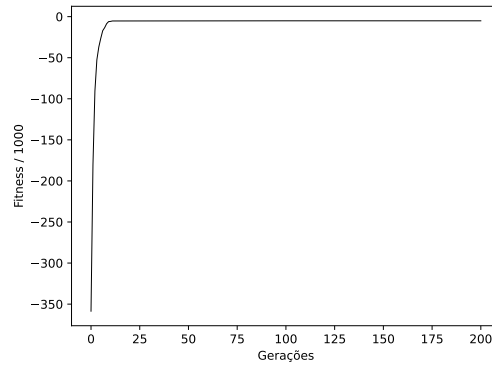


Figura 2: Evolução do *fitness* máximo observado na população por geração dividido por 1000.

aumentaria o tempo de computação. Por praticidade decidimos não realizar computações muito custosas neste trabalho.

Os coeficientes apresentados no livro *Nuclear and particle physics* são:

$$\begin{aligned} a_V &= 15.56 \\ a_S &= 17.23 \\ a_C &= 0.697 \\ a_S &= 23.285 \\ a_P &= 12 \end{aligned}$$

Veja uma comparação dos valores obtidos para  $B$  na Figura 1. Vemos que o resultado obtido nos dois casos é bem semelhante, ambos se aproximam bastantes dos dados experimentais quando a massa atômica cresce. Notamos que os coeficientes encontrados por nós possuem maior compatibilidade com os dados experimentais para massas atômicas entre 20 e 40. Em ambos casos o ajuste não é muito bom para massas abaixo de 20, mas o fornecido pelo livro *Nuclear and particle physics* é ligeiramente melhor.

Veja na Figura 2 como ocorre a evolução do *fitness* máximo na população. Perceba que o *fitness* sobe muito rapidamente nas primeiras gerações, a partir disso ele passa a subir em raros momentos e com uma amplitude cada vez menor.

## Referências

- [1] W. S. C. Williams. *Nuclear and particle physics*. Oxford University Press Inc, 1991.
- [2] National Nuclear Data Center, informação extraída da base de dados NuDat. <https://www.nndc.bnl.gov/nudat/>. Acesso em: 14 de novembro de 2022.
- [3] Randy L Haupt and Sue Ellen Haupt. *Practical genetic algorithms*. John Wiley & Sons, 2004.