

第三届“粤港澳”核物理会议

原子核质量模型的不确定度分析

华南理工大学

报告人：叶伟虎

指导教师：万牛副教授

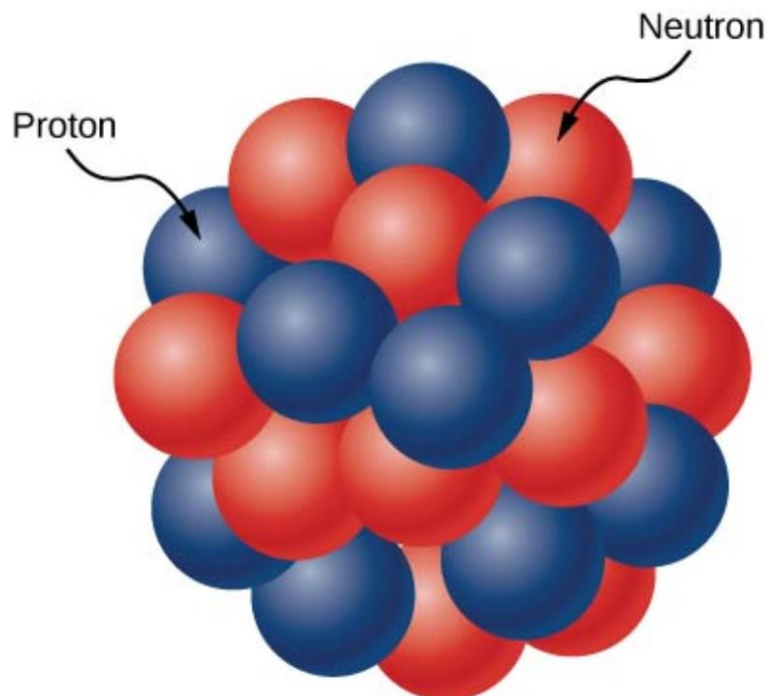
专业：理论物理

华南理工大学

报告提纲

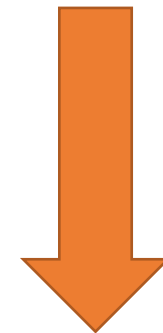
- ◆ 1. 研究背景
- ◆ 2. 研究动机
- ◆ 3. 研究方法
- ◆ 4. 结论

研究背景



核力主导
量子多体关联

$$\text{mass} = N \times m_n + Z \times m_p - \text{结合能}$$



核结构：壳效应，质量差如 α 衰变能，剩余核子有效相互作用...

核反应：反应率 ...

核天体：r-process, rp-process ...

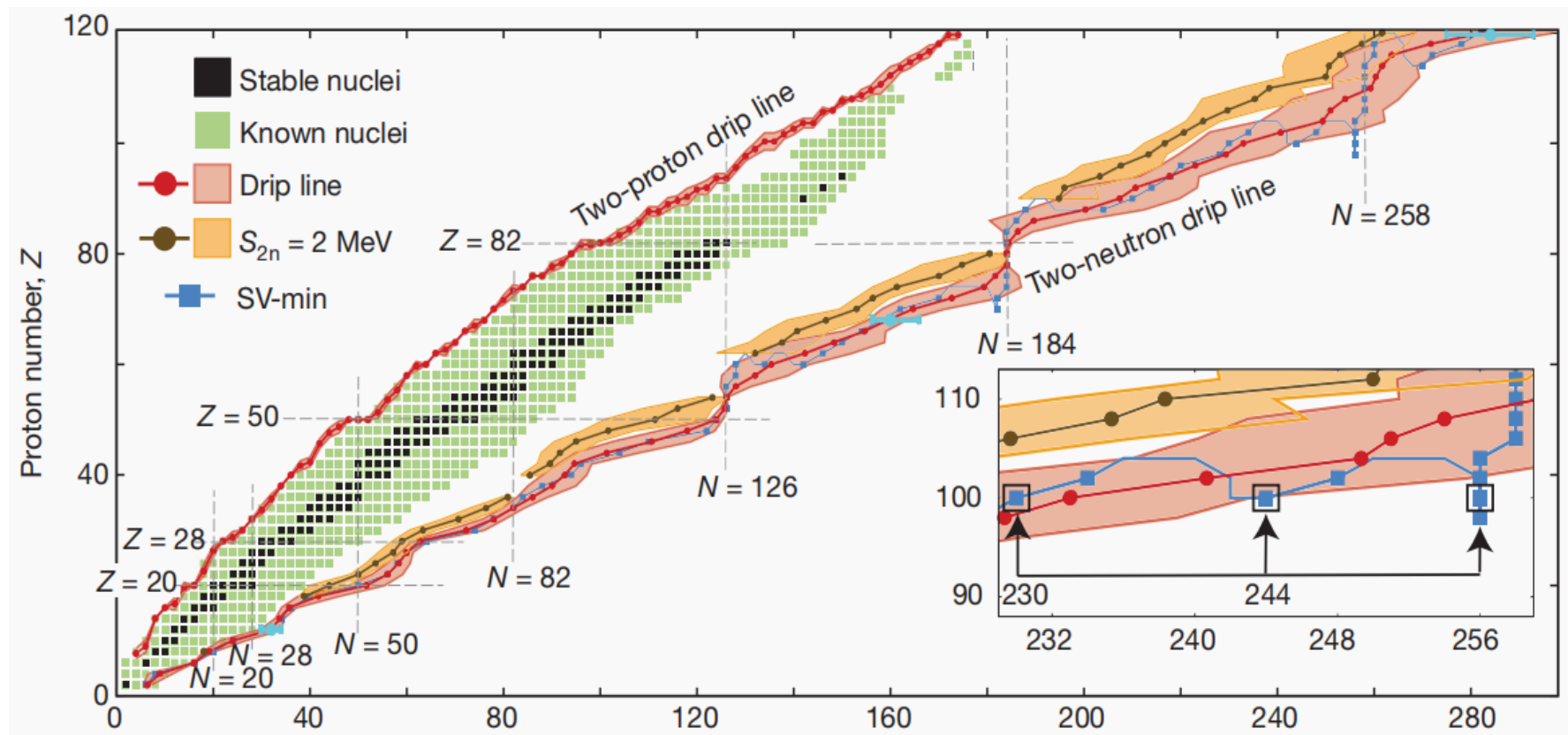
研究背景

核素边界

实验已知: 约2500

理论预言: 7000-10000

稳定核: 约285



大量质量未知核素集中在丰中子区域

研究背景

宏观-微观

- FRDM
- WS3
- DZ
- ...

微观

- HFB
- ab initio
- ...

局域质量

- Garvey-Kelson
- IMME
- ...

机器学习

- ANN
- BNN
- GPR
- SVM
- ...

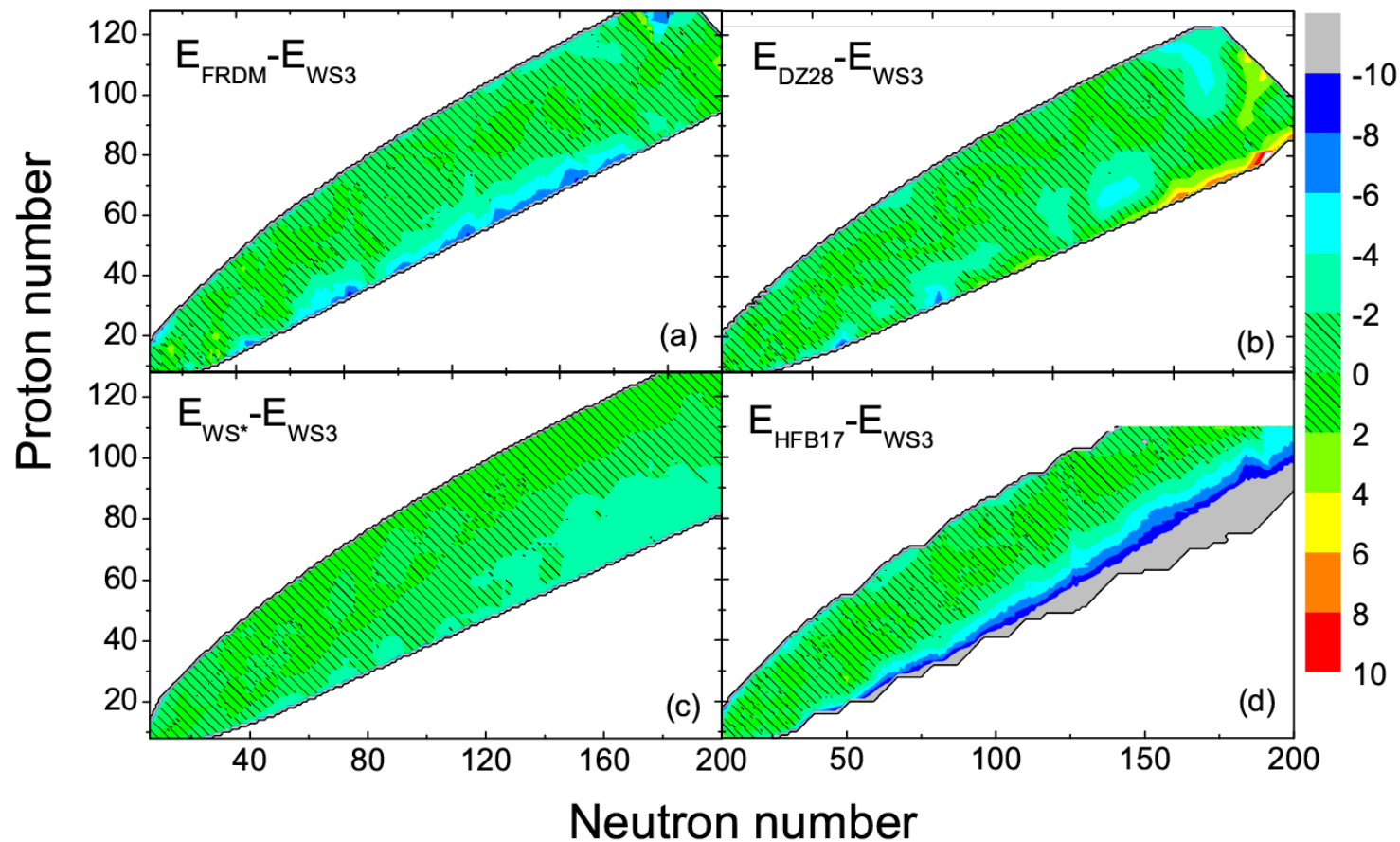
Möller P, Myers W D, et al. PRL, 2012, 108(5): 052501.

Wang N, Liu M, Wu X. PRC, 2010, 81(4): 044322.

Duflo J, Zuker A P. PRC, 1995, 52(1): R23.

Ormand W E. PRC, 1997, 55(5): 2407.

研究动机



Why?

不同理论模型在预测丰中子核素时差异甚至高达几十个MeV

为了去研究不同质量模型外推的质量差非常大

- 1. 直接对相同能量项下的不同模型做差研究不确定度**
- 2. 通过机器学习方法研究不确定度**

结果讨论

1. 直接对不同模型的项做差研究不确定度

WS3
$$BE(N, Z, \beta) = E_{LD}(N, Z) \prod_{k \geq 2} (1 + b_k \beta_k^2) + \Delta E_{shell}(N, Z, \beta),$$

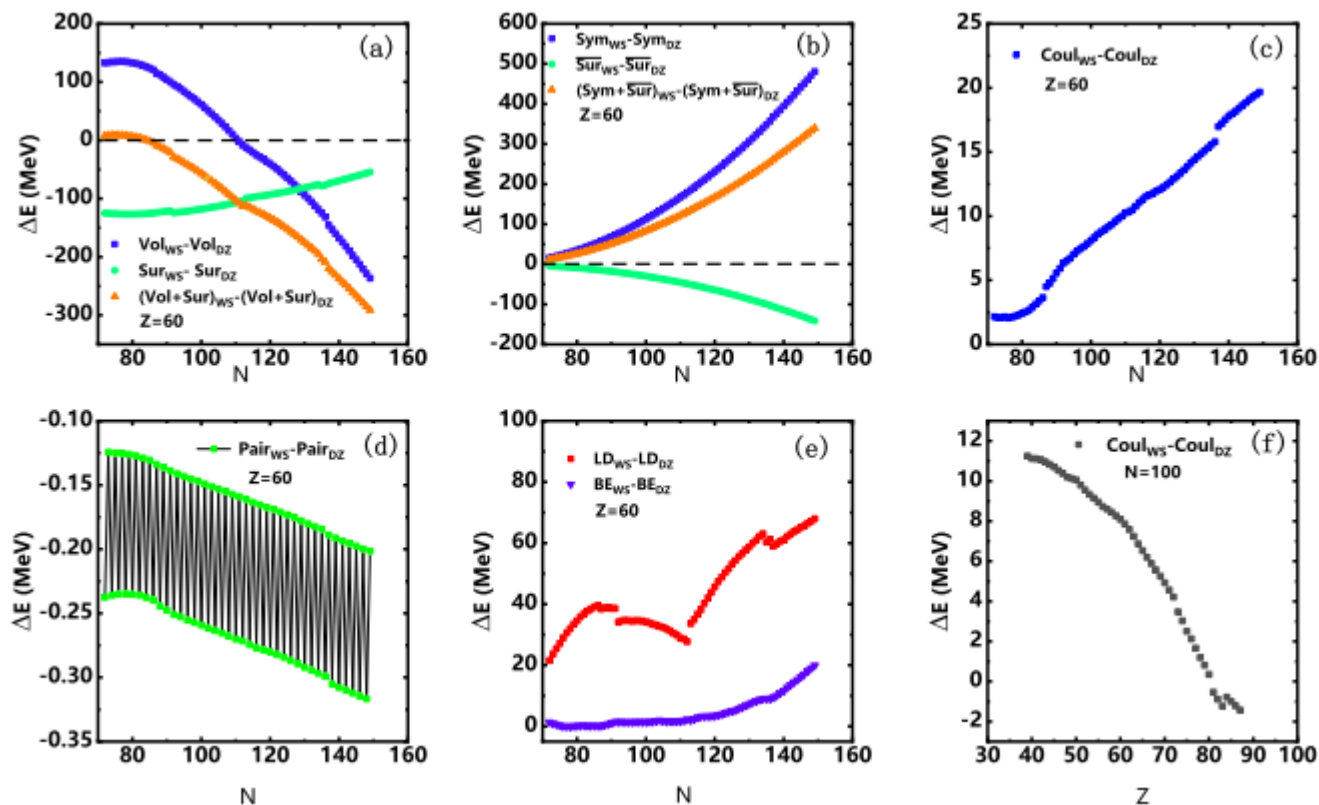
$$E_{LD} = a_1 E_{vol} + a_2 E_{sur} + a_3 E_C + a_4 E_{sym} + a_5 E_{ssym} + a_6 E_{pair},$$

$$= a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} (1 - Z^{-2/3}) + a_4 I^2 A - a_5 I^2 A^{2/3} + a_6 A^{-1/3} \delta_{np}, \quad (3)$$

DZ10
$$BE = E_{LD} + \langle H_m \rangle$$

$$E_{LD} = a_1 E_C - a_2 E_{sym} + a_3 E_{ssym} + a_4 E_P + a_5 E_{vol} + a_6 E_{sur},$$

$$= a_1 \frac{-Z(Z-1) + 0.76(Z(Z-1))^{2/3}}{\rho} - a_2 \frac{T(T+2)}{A^{2/3}} + a_3 \frac{T(T+2)}{A^{2/3} \rho^2} + a_4 \frac{\delta_{np}}{\rho} + a_5 M/\rho + a_6 (M+S)/\rho, \quad (6)$$



2. 通过机器学习方法研究质量不确定度

Model: Gaussian Process Regression (GPR)

高斯过程：高斯过程定义了一个分布，用于描述所有可能的函数，这些函数在每个输入点处的输出都符合某种正态分布。可以理解为，对于每一个输入点，输出点是根据一个正态分布随机采样出来的。

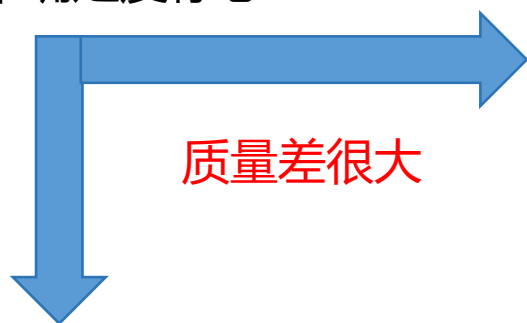
TABLE I. Three sets of features for the GPR model.

model	feature
GPR-M5	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}$
GPR-M9	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}, (N-Z)/A, Z(Z-1)/A^{1/3}, N_{eo}, Z_{eo}$
GPR-M12	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}, (N-Z)/A, Z(Z-1)/A^{1/3}, N_{eo}, Z_{eo}, v_n, v_z, P$

结果讨论

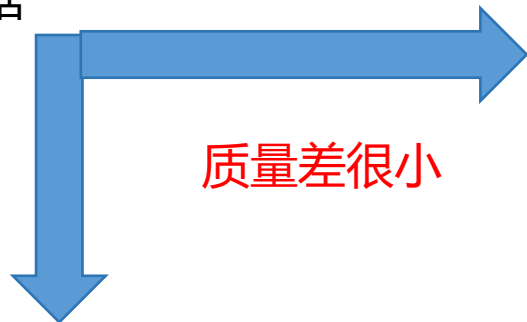
2. 通过机器学习方法研究质量不确定度

1. 计算不同质量模型间的质量差，作为不确定度标志



质量差很大

2. 通过GPR机器学习模型学习质量差数据



质量差很小

3. 解释模型对于质量差的物理

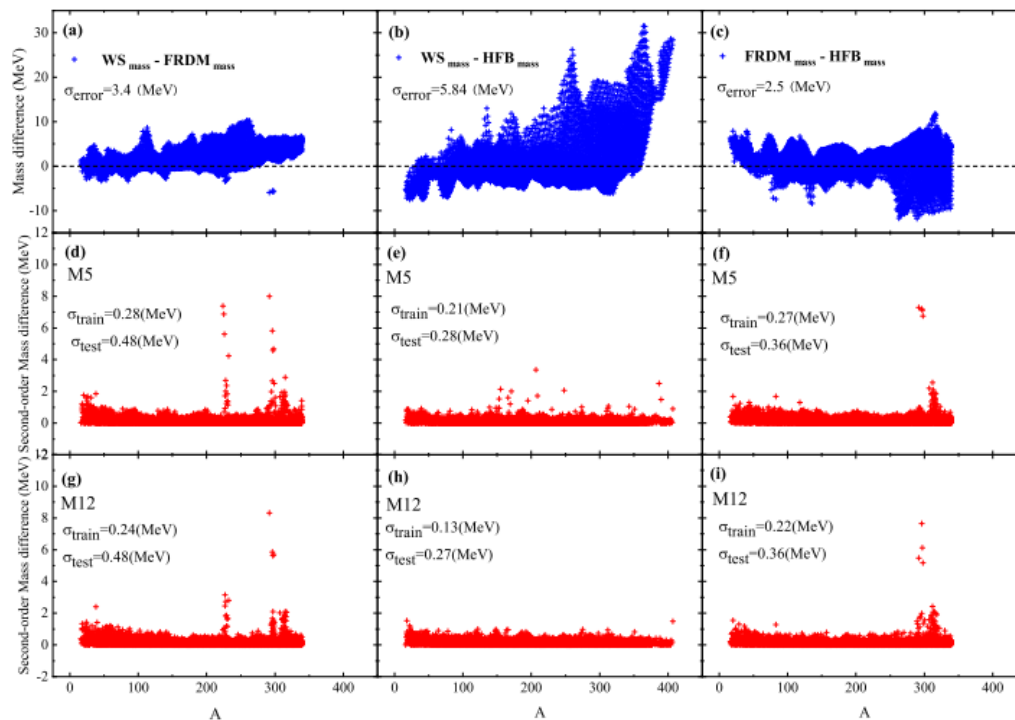


FIG. 2. The upper panels denote the differences (in MeV) between the mass models for the whole nuclear landscape, and the corresponding middle and lower panels represent the absolute second-order differences between the outputs of the GPR models with 5 and 12 features, respectively, and the mass differences. See text for more details.

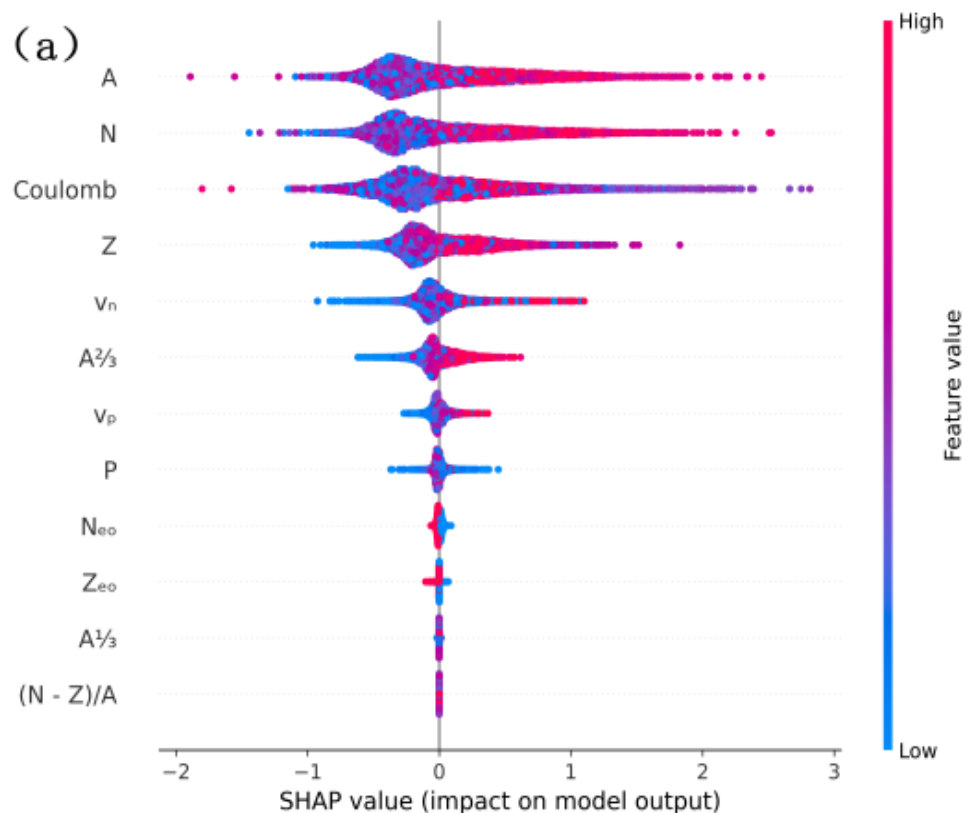
考虑12个宏观特征元模型方均根误差约0.2MeV，若想进一步减小误差，需考虑微观效应

结果讨论

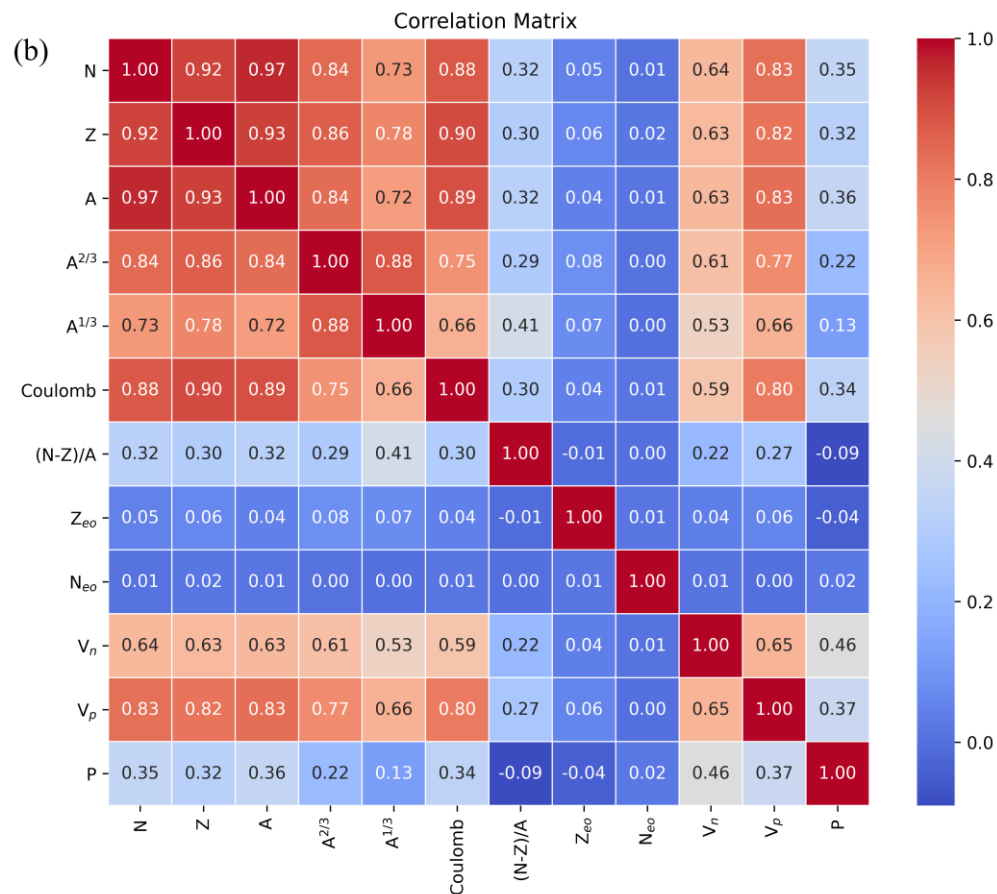
解释机器学习模型对于质量差中隐含的物理

对特征元进行重要性和相关性分析

Tool: SHAP (SHapley Additive exPlanations)



Pearson Method



结论

- 通过逐项比较法对WS3和DZ10进行项与项之间的比较由此去研究质量不确定度，更为细致的得到是哪些物理项导致外推差异过大，得到对称能、体积能和表面能的不确定度较大
- 采用机器学习方法研究质量差异过大背后的物理原因。引入12个宏观特征元对质量残差建模，残差降低到约0.2MeV，未来若想进一步减小误差，需引入微观效应。我们通过对12个特征元进行重要性和相关性分析，深入解释了特征元对模型输出的影响，这对降低外推不确定度提供了改进方向

Many thanks for your
attention

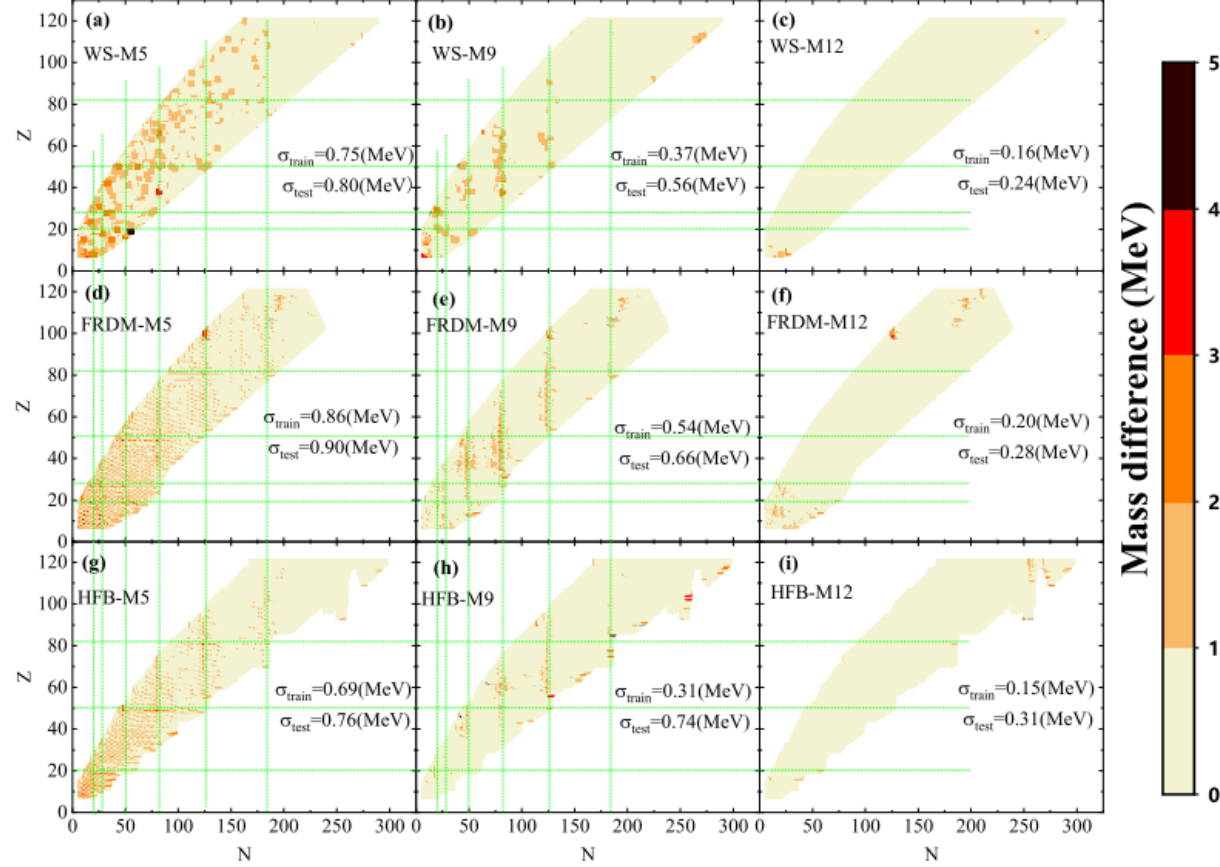


FIG. 1. Theoretical mass excess differences (in MeV) between the mass models and the output of the GPR with the three feature sets, and their magnitude is represented by the color bar. The σ_{train} and σ_{test} (in MeV) are calculated by Eq. 3. See text for details. For guiding eyes, the green dotted line marks the location for nuclei with magic numbers ($N(Z)=8, 20, 28, 50, 82, 126, 184$).

TABLE I. Three sets of features for the GPR model.

model	feature
GPR-M5	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}$
GPR-M9	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}, (N-Z)/A, Z(Z-1)/A^{1/3}, N_{eo}, Z_{eo}$
GPR-M12	$N, Z, A, A^{2/3}, A^{1/3}, (N-Z)/A, Z(Z-1)/A^{1/3}, N_{eo}, Z_{eo}, v_n, v_z, P$