



第四届全国核物理及核数据中的机器学习应用研讨会@2025.11.02, 湖南·衡阳

基于卷积神经网络的核质量预测

李 剑

吉林大学物理学院

E-mail: jianli@jlu.edu.cn



» 原子核质量的研究现状

- 质量(或结合能)是原子核的基本物理量，对于理解原子核结构和研究天体核合成过程都具有至关重要的作用。
- 实验：精确测量；《原子质量评估AME2020》推荐了3557个原子核质量。
- 理论：全局模型和局域关系模型等

M. Wang, W. Huang, F. G. Kondev, G. Audi, and S. Naimi. Chin. Phys. C 45, 030003(2021)

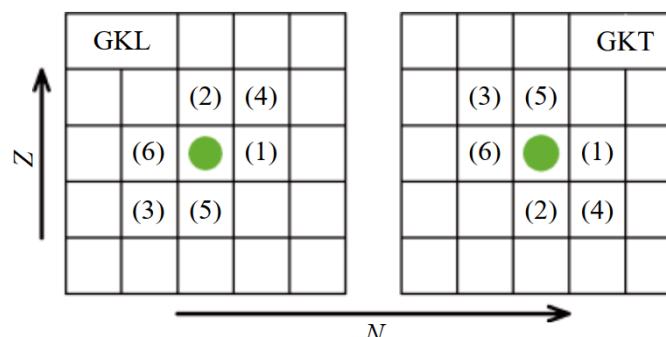
- ✓ 全局模型 (BW2、KTUY、FRDM12、WS4、HFB-31、DZ28 等) 得到的最高精度约为 0.3 MeV (WS4)

N. Wang, M. Liu, X.Z. Wu, J. Meng, Phys. Lett. B 734 (2014) 215.

基于相对论密度泛函理论的原子核质量表：**RCHB \Rightarrow DRHBC**

At. Data Nucl. Data Tables 121–122 (2018) 1–215; At. Data Nucl. Data Tables 144 (2022) 101488; At. Data Nucl. Data Tables 158 (2024) 101661

- ✓ 局域关系模型：基于中子-质子相互作用关系发展的局域型关系模型的精度大约为 0.2 MeV



Jiang H, Fu G J, Sun B, et al. Phys Rev C, 2012, 85: 054303.

$$D_L(N, Z) = M(N+1, Z) + M(N, Z+1) + \\ M(N-1, Z-1) - M(N+1, Z+1) - \\ M(N, Z-1) - M(N-1, Z) \approx 0,$$

$$D_T(N, Z) = M(N+1, Z) + M(N, Z-1) + \\ M(N-1, Z+1) - M(N+1, Z-1) - \\ M(N, Z+1) - M(N-1, Z) \approx 0.$$

鲍曼, 姜慧, 赵玉民. 原子核质量及相关物理量的系统研究. 原子核物理评论, 2023, 40:141

尽管核质量模型的预测准确性有了显著提高，仍然未能满足对核结构、天体核合成和基础物理的研究需求。



机器学习预测原子核质量

model	reference
SVM	Clark2006IJMPB
KRR	Wu2020PRC, Wu2021PLB, Du2023CPC, Wu2022PLB, Wu2024PRC, Wu2023Front. Phys.
RBF	Wang2011PRC, Niu2013,2016PRC,2018SciB
ANN	Gazula1992NPA, Athanassopoulos2004NPA, Bayram2014ANE, Zhang2017JPG, Ming2022NST, Yuksel2021IJMPE, Li2022PRC, Zeng2024PRC
BNN	Utama2016PRC, Niu2018PLB, Niu2019PRC, Niu2022PRCL, Rodriguez2019EPL, Rodriguez2019JPG
CNN	Yang2023PRC, Lu2025PRC
DNN	ChenPRC2022, To-Chung-Yiu2024CPC

model	reference
PUN	Babette-DellenPLB2024
LightGBM	Gao2021NST
BGP	Neufcourt2018,2020PRC, Neufcourt2019PRL
NBP	Liu2021PRC
CLEAN	Morales2010PRC
MDN	A. E. Lovell2022PRC
PIML	Mumpower2022PRC
KAN	Liu2025PRC
GBDT, XGBoost, LightGBM, CatBoost	liu2025PRC

✓ 提高预测精度：

✓ 物理信息集成：原子核质量的多重约束（南京理工大学 钱以斌）/ KRR,PCA（福州大学 吴鑫辉）/结合多种互补观测量的各向异性核岭回归方法预测原子核的质量（广西师范大学 田俊龙）

✓ 外推能力提升、不确定量化：

✓ 量子机器学习探索：量子贝叶斯分类方法研究原子核质量（中国石油大学 刘健）

✓ 模型可解释性：

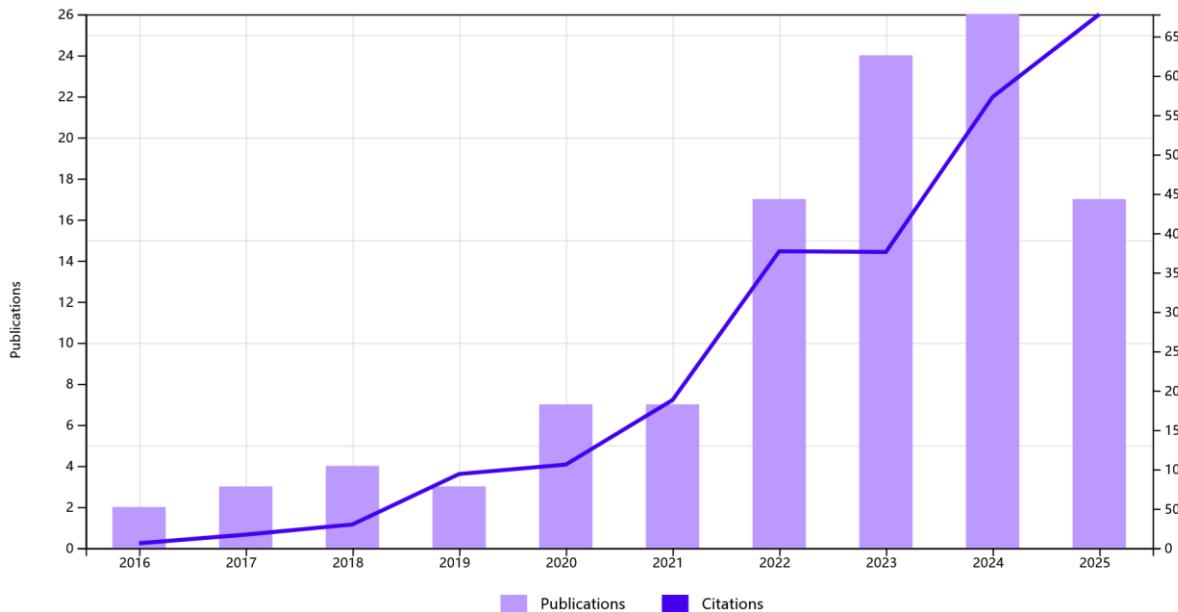
✓



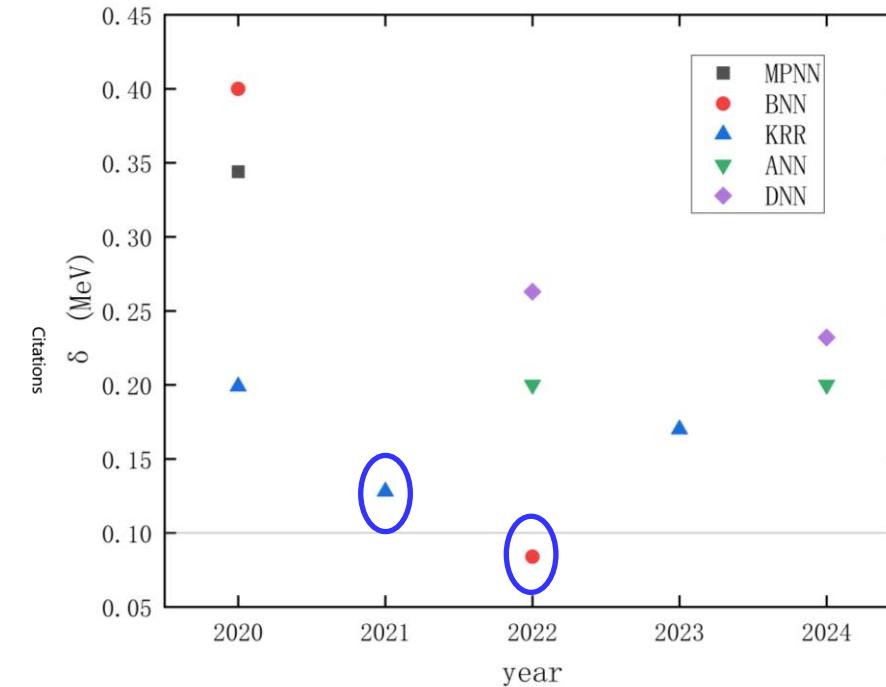


机器学习预测原子核质量

每年的论文发表和引用数量



预测精度



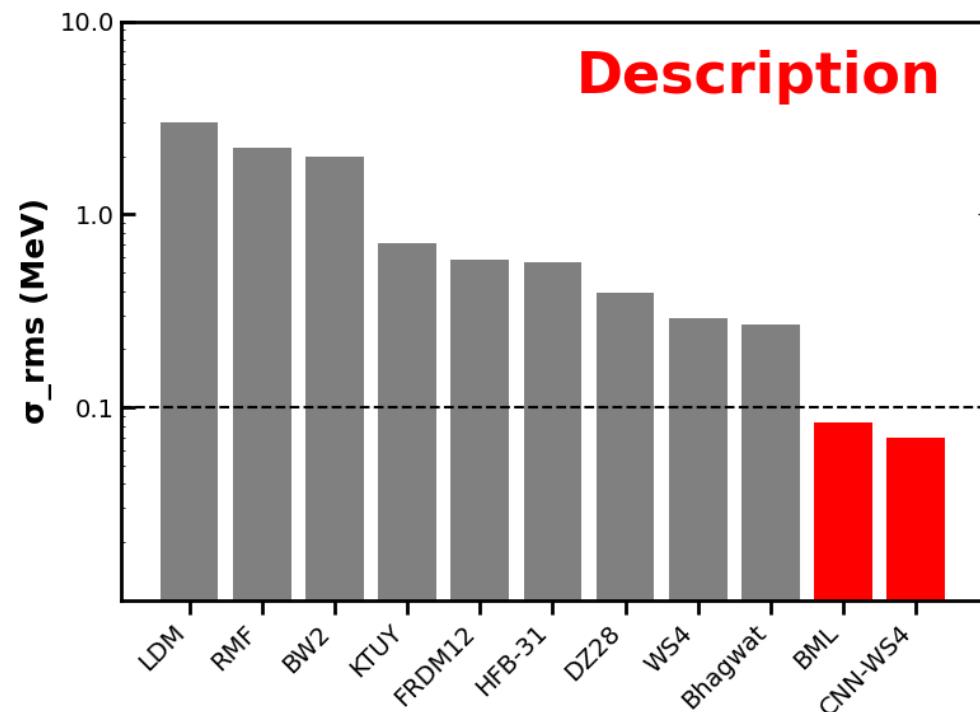
- ✓ 许多研究采用机器学习来预测核质量，但多数研究的精度在0.2 MeV 左右。
- ✓ 为突破这一精度瓶颈，有必要考虑更多的物理信息进行优化。





研究动机

- ✓ 大多数与机器学习相关的工作只考虑**全局理论模型**，而不能有效地提取核质量的局部物理关系。
- ✓ 提出了一种基于卷积神经网络（CNN）的全局-局部模型。通过逐步引入更多的物理因素，进一步提高学习精度，得到0.070 MeV的精度。

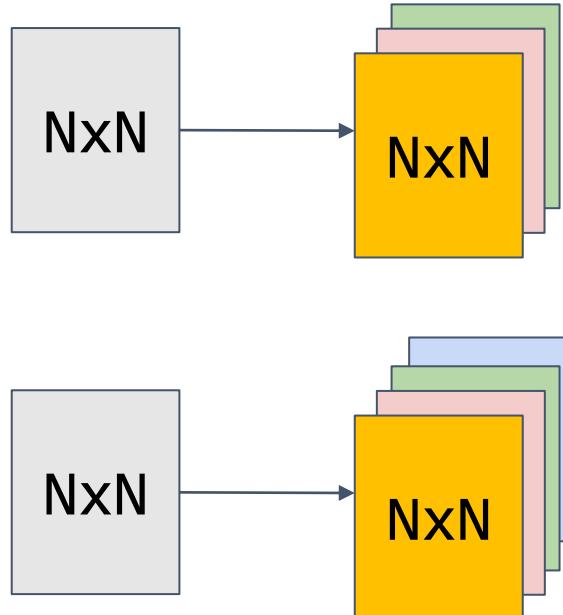


Nuclear mass predictions based on a convolutional neural network, Yanhua Lu, Tianshuai Shang, Pengxiang Du, et al., Phys. Rev. C 111 (2025), 014325



卷积神经网络细节

^{54}Zn	^{55}Zn	^{56}Zn	^{57}Zn	^{58}Zn
^{53}Cu	^{54}Cu	^{55}Cu	^{56}Cu	^{57}Cu
^{52}Ni	^{53}Ni	^{54}Ni	^{55}Ni	^{56}Ni
^{51}Co	^{52}Co	^{53}Co	^{54}Co	^{55}Co
^{50}Fe	^{51}Fe	^{52}Fe	^{53}Fe	^{54}Fe



CNN-I3

输入: 3(通道数) $\times 5 \times 5$
通道: Z, N, the binding energy of nearby nuclei.

CNN-I4

输入: 4(通道数) $\times 5 \times 5$
通道: Z, N, the binding energy of nearby nuclei, pairing δ

$$\delta = [(-1)^N + (-1)^Z]/2$$

✓ 卷积核的大小设置为 3×3 , 步幅为 1。二维卷积公式表示为:

$$O(u, v) = \sum_i \sum_j g(i, j) h(u - i, v - j)$$

✓ 激活函数: ReLU(Rectified Linear Unit)

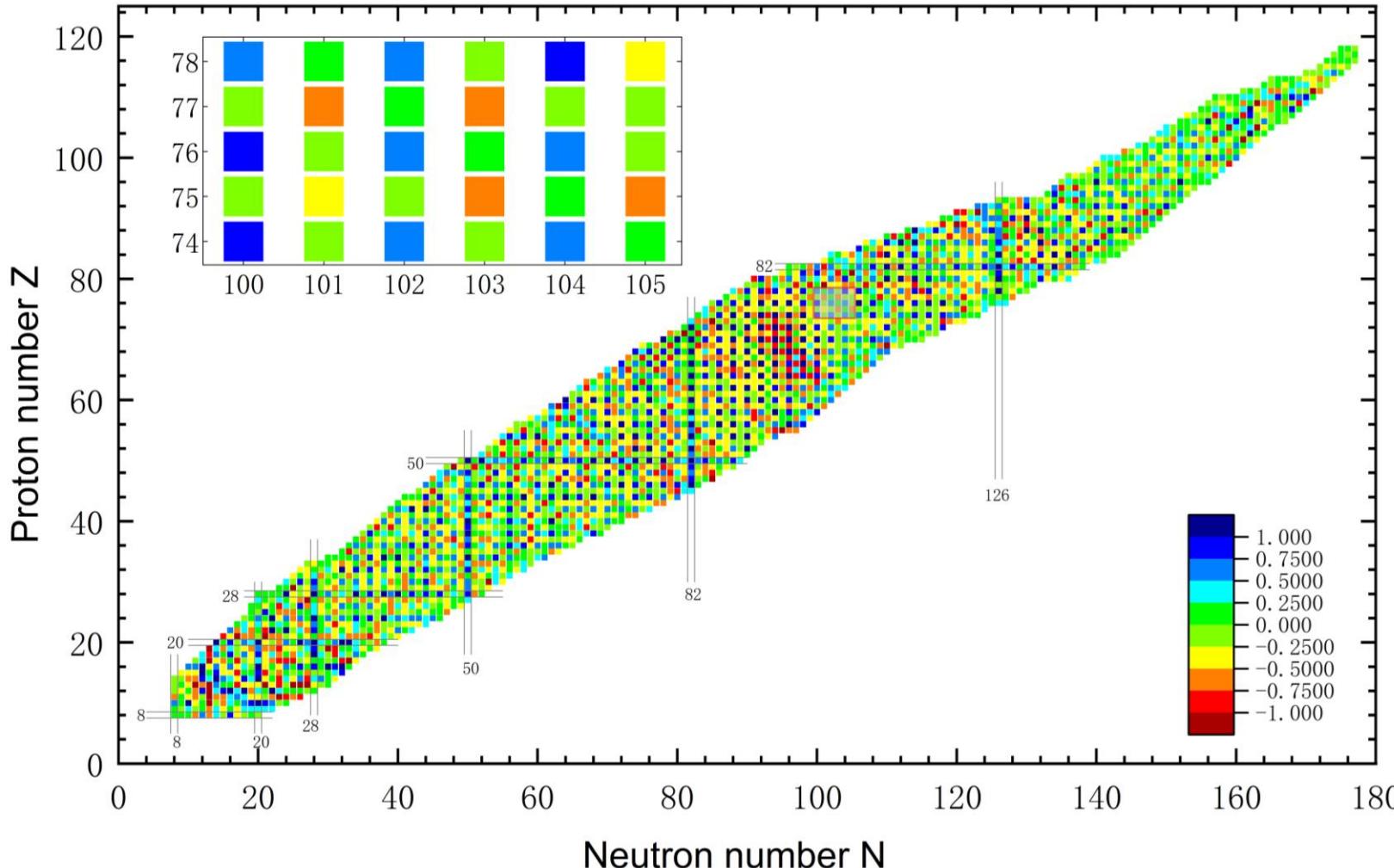
$$\text{ReLU}(x) = \begin{cases} x & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} = \max(0, x)$$

✓ 原子核质量实验值(**推荐**)与原子核质量理论值之差 ΔM

$$\Delta M = M_{exp.} - M_{th.}$$



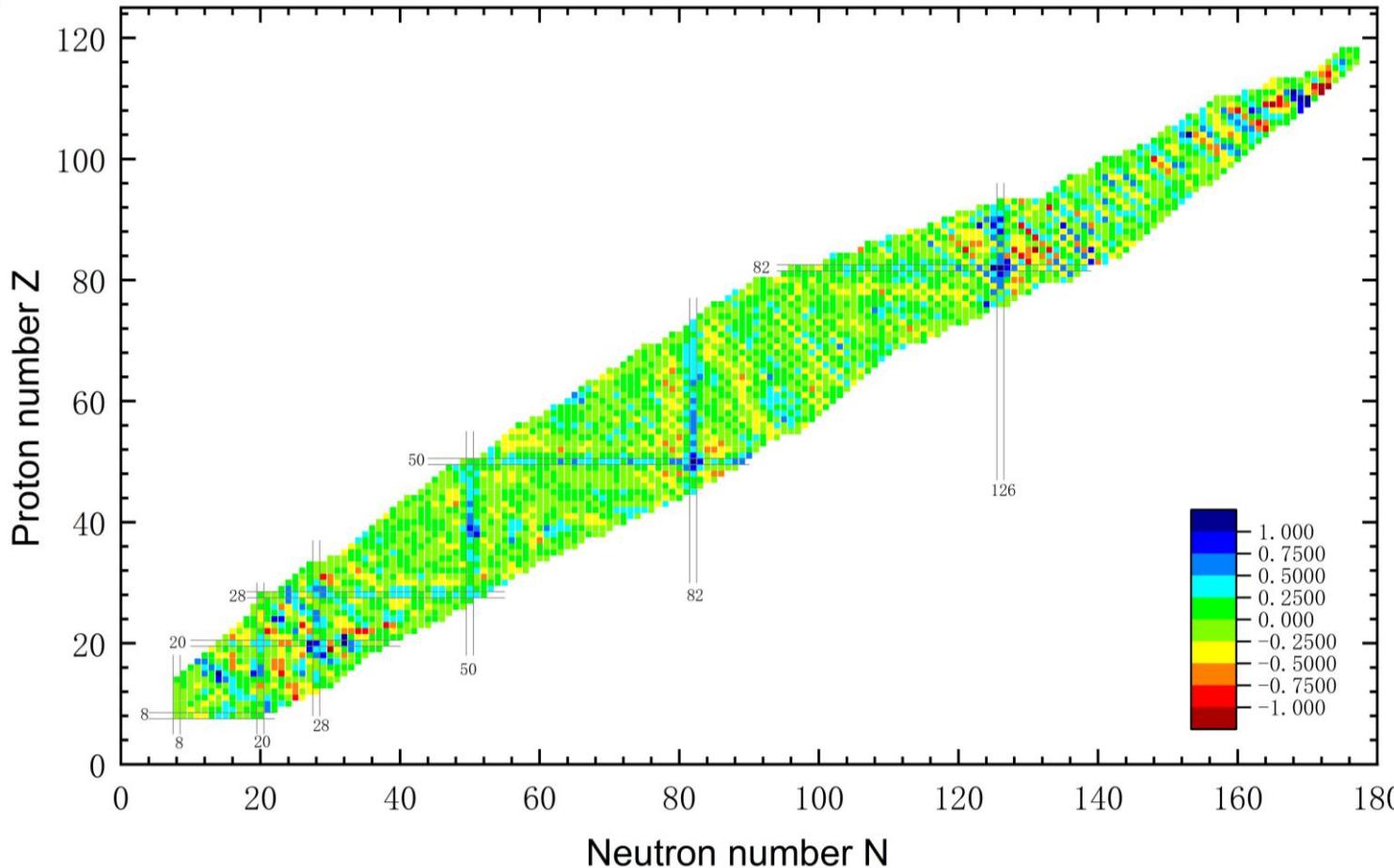
直接学习原子核质量 CNN-I3: Z、N、neighbor mass



- ✓ 实验质量与CNN-I3模型预测的质量差，总体RMSE: **0.535 MeV**;
- ✓ 结果展现出明显的奇偶振荡现象。



直接学习原子核质量 CNN-I4: Z, N, neighbor mass, paring

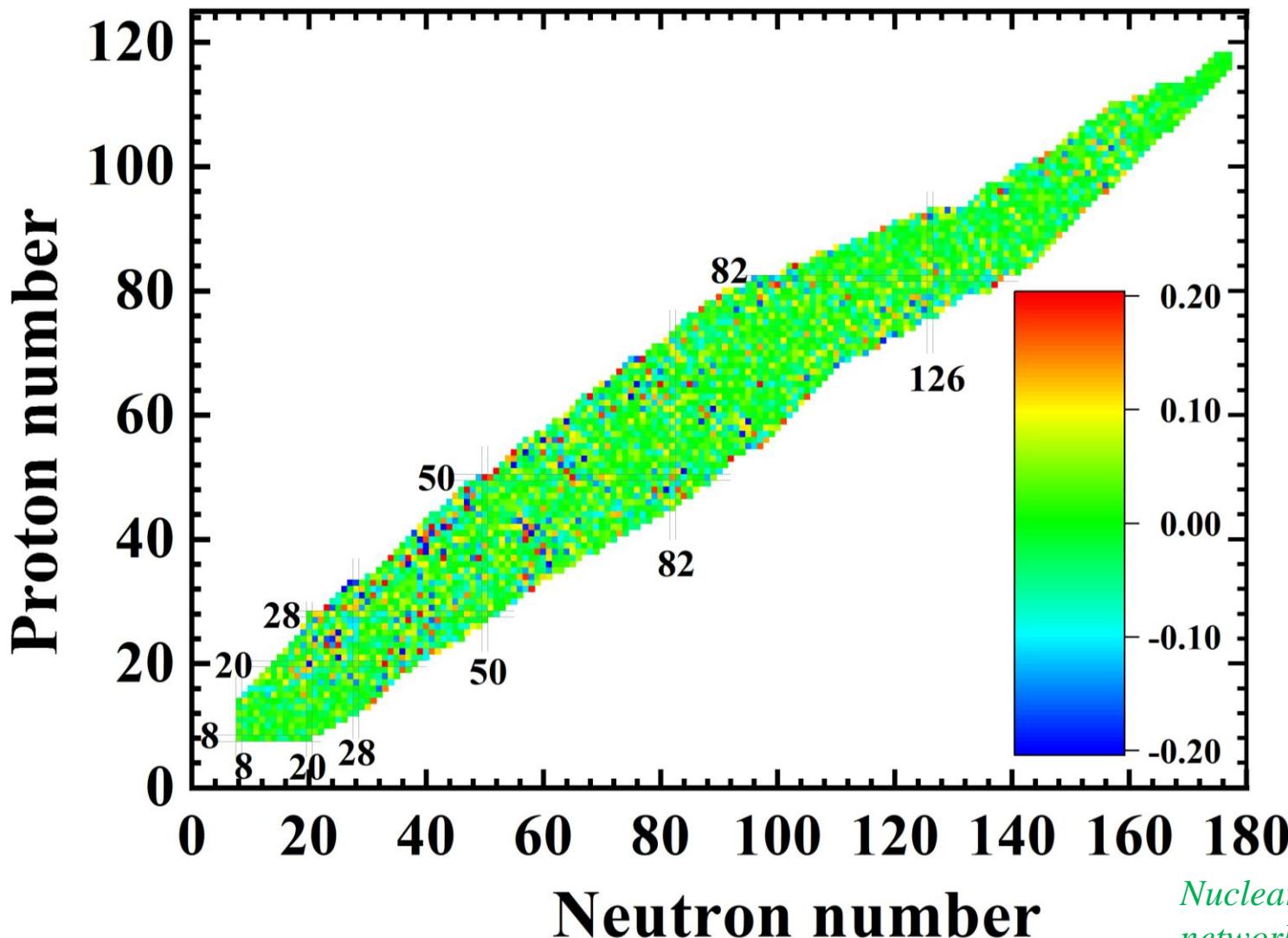


- ✓ 实验质量与CNN-I4预测的质量差，总体RMS: 0.291MeV
- ✓ 输入对效应后，整体学习效果得到显著提高，并且在 CNN-I3 模型的结果中观察到的明显的奇偶振荡现象几乎消失

$$\delta = [(-1)^N + (-1)^Z]/2$$



学习实验值与全局理论预测值的差 CNN-WS4: Z、N、neighbor mass、paring

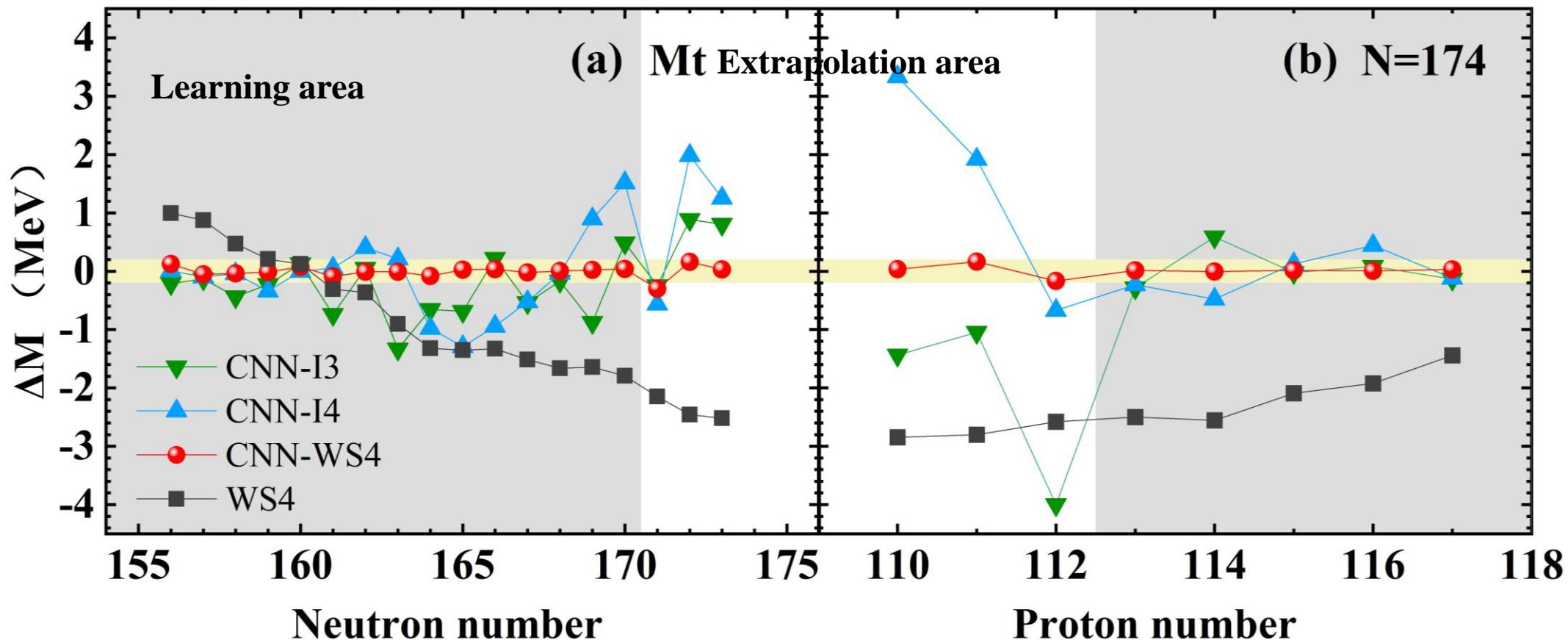


- ✓ 将WS4核质量模型纳入卷积神经网络，整体预测能力显著提高。
- ✓ 在已知实验数据范围内，RMSE降至 0.070 MeV，证明了CNN-WS4方法将全局理论模型与能够提取局部特征的方法相结合进行核质量预测的有效性。

Nuclear mass predictions based on a convolutional neural network, Yanhua Lu, Tianshuai Shang, Pengxiang Du, et al., Phys. Rev. C 111 (2025), 014325



Z=109 and N=174 chain: 学习和外推能力



- ✓ 外推: 总体RMSE为0.211MeV (来自AME2020的新出现的原子核)。
- ✓ Z=109: 0.994 MeV to -2.519 MeV; N=174: systematic deviation \Rightarrow 考虑到更多的物理因素, 特别是考虑到物理模型, 外推和学习都取得了很好的效果。





五十余年来, **Physical Review C**始终是核物理学界不可或缺的支撑力量。在这段漫长岁月中,期刊编委会始终恪守严格的同行评审标准,使其成为全球科研团队信赖并倚重的学术基石。该本刊专注于基础研究领域,每年发表论文约千篇,但出版过程绝非单向流程, **它实则是一场多方协力的“共舞”,需要期刊编辑、学术编辑、审稿人和作者共同参与并相互配合。**

Chris Wesselborg早在1993年便加入**Physical Review C**期刊。本次访谈聚焦的问题包括:**如何充分发挥顶级同行评审机制的价值;核物理领域的前沿热点;该刊区别于同领域其他刊物的独特之处。**

对话 Physical Review C 主编: 核物理领域的前沿热点,与给每位作者的投稿建议

原创 APS APSPhysics 2025年09月23日 10:59 北京



目前您正密切关注核研究领域的哪些方向或细分领域?

Chris Wesselborg:

令我深感惊讶的是,一些原本在其他学科中早已成熟确立的理论,随着时间推移竟在**Physical Review C**中扎根生长。以“**能量密度泛函理论**”为例,它在化学与原子物理领域早已根深叶茂、体系完备;如今,我们看到一些传统核物理理论方法也开始被纳入这一理论框架之下,与之融合。

我们也注意到,**机器学习**正以多种方式悄然渗透到核物理研究。虽然现阶段它在某些层面仍偏重现象描述,但其已开始催生全新的分析视角与研究路径。面对这一领域日新月异的发展,我们不禁对今后两三年可能出现的突破满怀期待。

量子计算无疑是当前学界关注的焦点,目前我们已观察到首批严谨的概念性研究正在涌现。由于这一领域存在大量基础框架亟待构建,相关论文往往篇幅宏大、论述极为详尽。这一现状促使我们思考:期刊是否应当引入更多文章类型?例如回顾综述与前景展望类论文,或是那些对海量数据集进行全面分析、虽暂未触及核物理深层机理却为未来突破奠定基础的综合性研究。

合作者：

吉林大学：卢衍华、尚天帅、杜鹏祥

安徽大学：牛中明

东京大学：梁豪兆

谢谢大家！

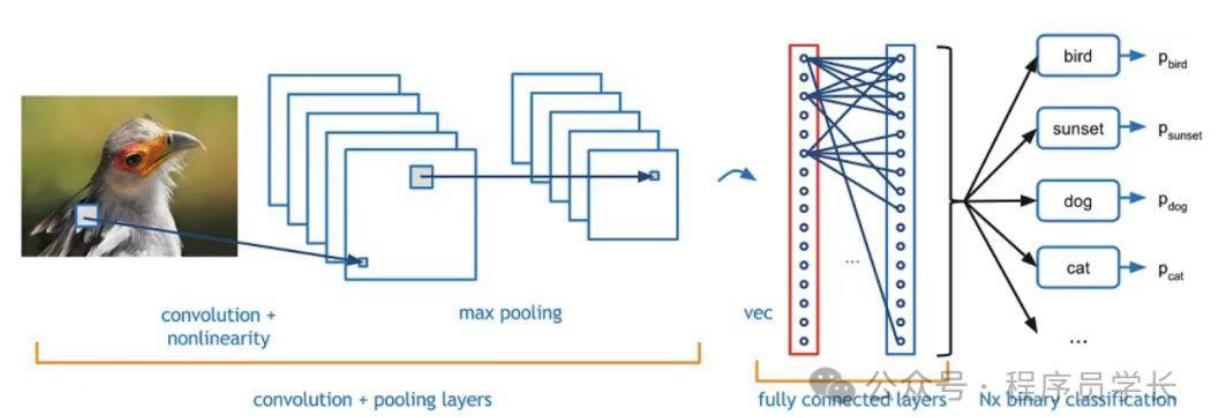


>> CNN: 卷积神经网络

卷积神经网络（CNN）是至少有一个卷积层的神经网络。卷积层是使用卷积运算代替普通矩阵乘法运算的网络层。

Input Volume (+pad 1) (7x7x3)	Filter W0 (3x3x3)	Output Volume (3x3x2)
x[:, :, 0]	w0[:, :, 0]	$\sigma[:, :, 0]$
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 2 2 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 1 0 1 0 0 0 1 0 1 1 1 0 0 0 2 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0	1 1 -1 -1 0 1 -1 -1 0 -1 0 -1 0 0 -1 1 -1 0	-1 -1 0 -1 1 0 -1 1 0 1 -1 0 -1 0 -1 -1 0 0 w1[:, :, 1] w1[:, :, 2] Bias b0 (1x1x1) b0[:, :, 0]
x[:, :, 1]	w0[:, :, 1]	$\sigma[:, :, 1]$
0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 2 0 0 0 0 2 1 1 2 0 0 1 2 0 0 2 0 0 0 2 1 2 1 0 0 2 0 1 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0	0 1 0 1 0 1 0 -1 1 -1 0 1 1 0 1 0 -1 0	-1 0 1 1 0 1 0 -1 0 w1[:, :, 1] w1[:, :, 2] Bias b1 (1x1x1) b1[:, :, 0]
x[:, :, 2]	w0[:, :, 2]	$\sigma[:, :, 2]$
0 0 0 0 0 0 0 0 2 0 2 0 2 0 0 0 0 1 2 1 0 0 1 0 2 2 1 0 0 2 0 2 0 0 0 0 0 1 1 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0	1	0

toggle movement



蓝色框表示一个数据窗口。红色框是卷积核（过滤器），最后的绿色方块是卷积的结果（数据窗口中的数据逐元素相乘和求和）

