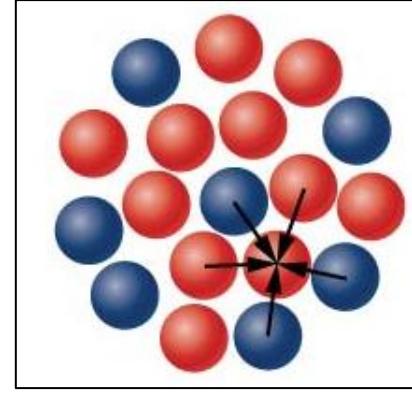




控制网络引导下的原子核结团态形成与演化研究



吕梦蛟

南京航空航天大学物理学院 科学人工智能团队

第四届全国核物理及核数据中的机器学习应用研讨会
衡阳, 2025年11月2日

科学智能

科学人工智能，或科学智能（AI4S, AI for science）将人工智能技术应用于科学研究，以帮助加速发现、优化实验、分析数据以及解决复杂的科学问题。

 中华人民共和国中央人民政府 www.gov.cn

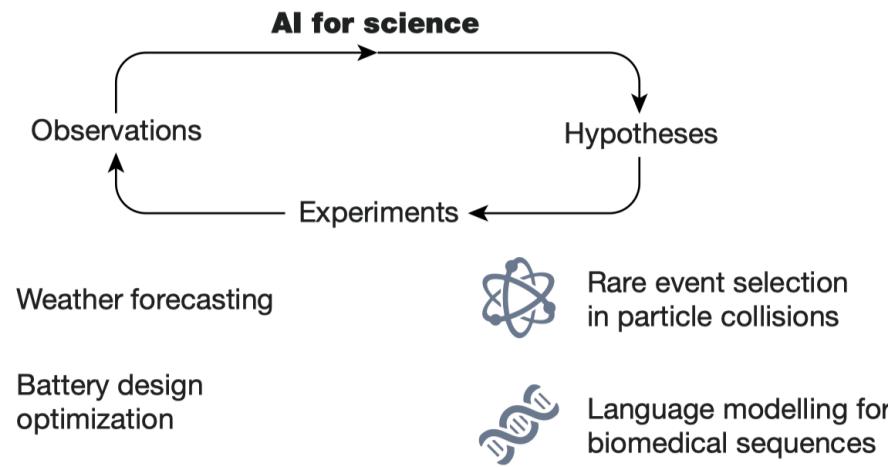
科技部启动“人工智能驱动的科学研究”专项部署工作

2023-03-27 20:09 来源：新华社

字号：默认 大超大 | 打印 |   

新华社北京3月27日电（记者 宋晨）为贯彻落实国家《新一代人工智能发展规划》，科技部会同自然科学基金委近期启动“人工智能驱动的科学研究”（AI for Science）专项部署工作，紧密结合数学、物理、化学、天文等基础学科关键问题，围绕药物研发、基因研究、生物育种、新材料研发等重点领域科研需求展开，布局“人工智能驱动的科学研究”前沿科技研发体系。

科技部有关负责人表示，当前，“人工智能驱动的科学研究”已成为全球人工智能新前沿。我国在人工智能技术、科研数据和算力资源等方面有良好基础，需要进一步加强系统布局和统筹指导，以促进人工智能与科学研究深度融合、推动资源开放汇聚、提升相关创新能力。



Wang, H. et al. Scientific discovery in the age of artificial intelligence. *Nature* **620**, 47–60 (2023).

近期科学智能的关键突破

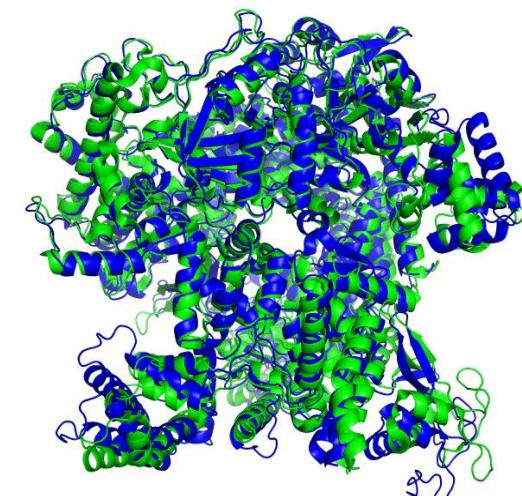
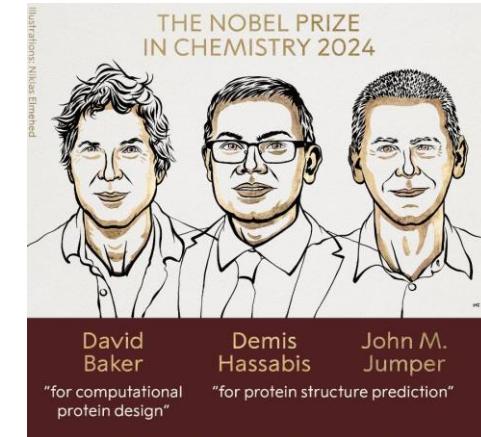
► 学习物理规律是近年来AI的前沿发展趋势

2020年，DeepMind提出AlphaFold模型，成功使用深度学习预测蛋白质折叠结构，颠覆生物学研究

2021年，OpenAI提出了CLIP模型，在图像和文本两个模态直接建立了联系，首次建立物理世界（电磁场）与文本的通用语义对齐。

2025年，DeepSeek将大语言模型与强化学习相结合（DeepSeek-R1），显著提升了大模型解决数学和科学问题的能力。

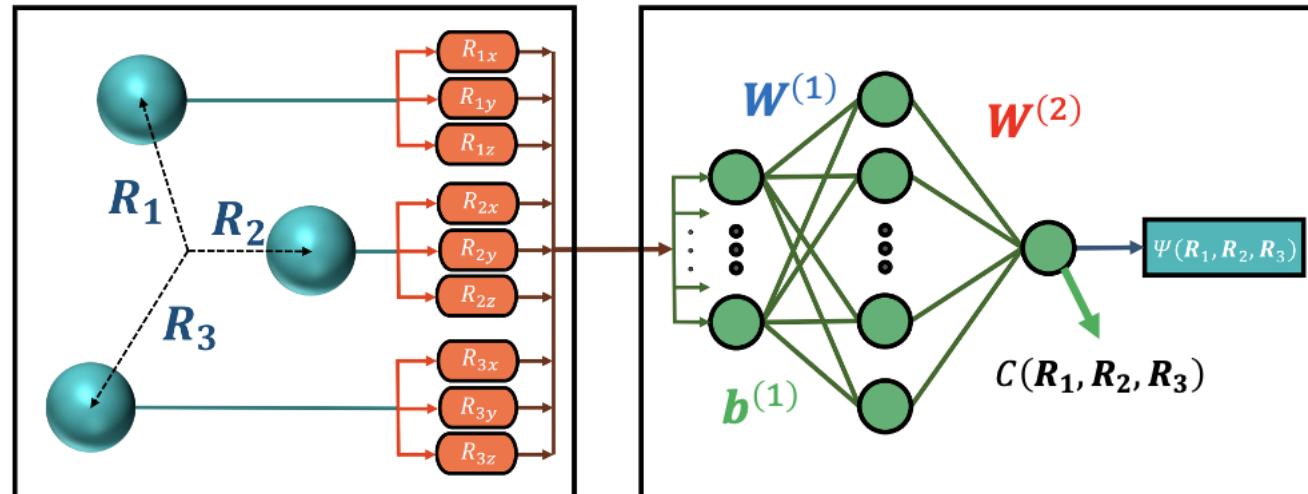
2025年，与物理世界交互，以理解物理规律为目标的“世界模型”成为AI研究前沿，支撑具身智能探索。



- ▶ MLP的非线性表示能力常被用于学习物理系统中的复杂模式
- ▶ 例如：波函数的神经网络表示

$$|\phi\rangle = \iiint C(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) |\Psi^B(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3)\rangle d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 d\mathbf{R}_3,$$

$$C(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) = \text{Exp}[\mathbf{W}^{(2)} \cdot \tanh(\mathbf{W}^{(1)} \cdot \mathbf{u}^{in} + \mathbf{b}^{(1)})]$$



示例：¹²C原子核波函数的神经网络表示

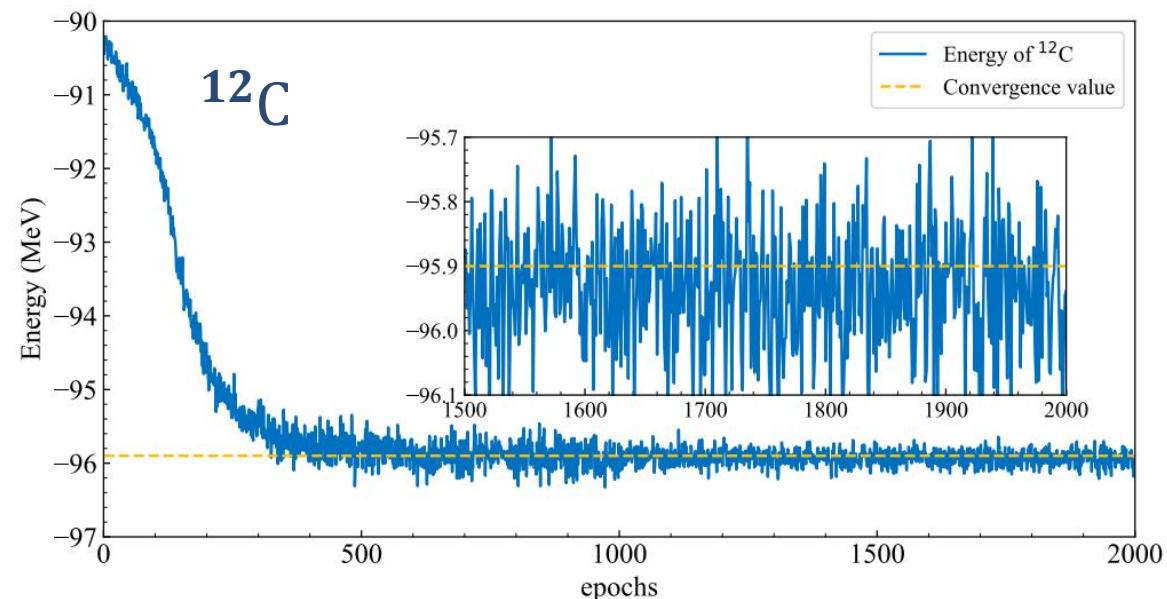
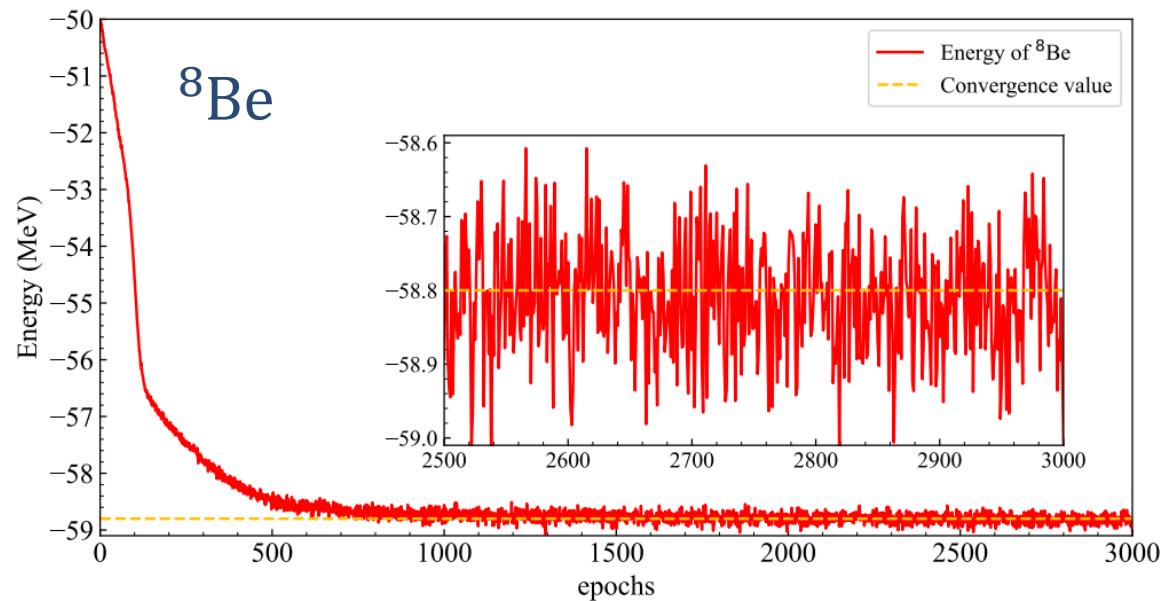
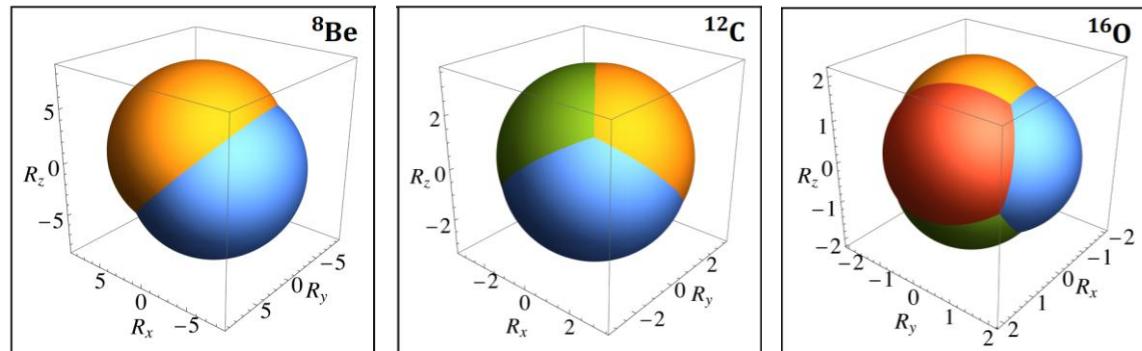
波函数变分 (神经网络训练)

利用非监督学习可实现对NN
波函数的能量变分。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial W} &= \frac{\partial}{\partial W} \frac{\int C^* C \langle \Psi^B | \hat{H} | \Psi^B \rangle d\{R\} d\{R'\}}{\int C^* C \langle \Psi^B | \Psi^B \rangle d\{R\} d\{R'\}} \\ &= 2 \frac{\langle O_W \tilde{H} \rangle_M}{\langle \tilde{N} \rangle_M} - 2 \frac{\langle O_W \tilde{N} \rangle_M \langle \tilde{H} \rangle_M}{\langle \tilde{N} \rangle_M^2}\end{aligned}$$

反向传播，

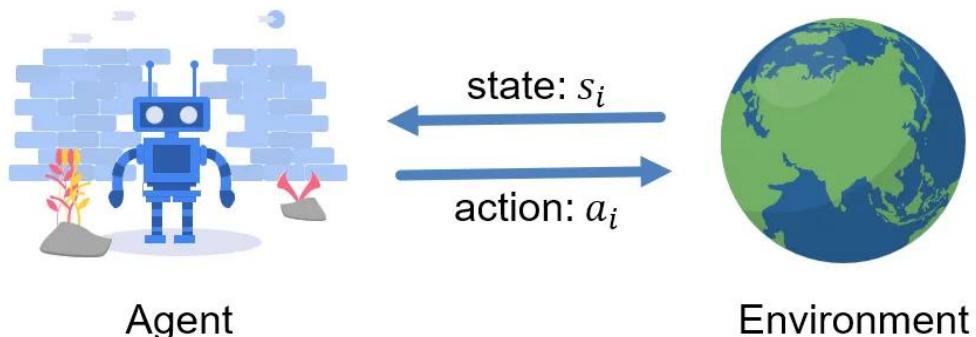
$$W_{new} = W_{per} - \eta \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial W}.$$



科学智能的另一思路：与物理世界交互

决策模型可直接与物理世界交互（或其仿真），适用于“大规模、高维状态空间”的任务，例如：自动驾驶、机器人控制等。

- 处理**高维、连续、复杂**的状态空间。
- 使用深度神经网络来表示策略或值函数
- 样本效率较低、训练时间较长
- 无可解释性
- 处理复杂任务



自 2015 年起，强化学习与深度学习结合在多个控制领域展现出超越人类专家的决策水平

深度强化学习

基于价值的方法：

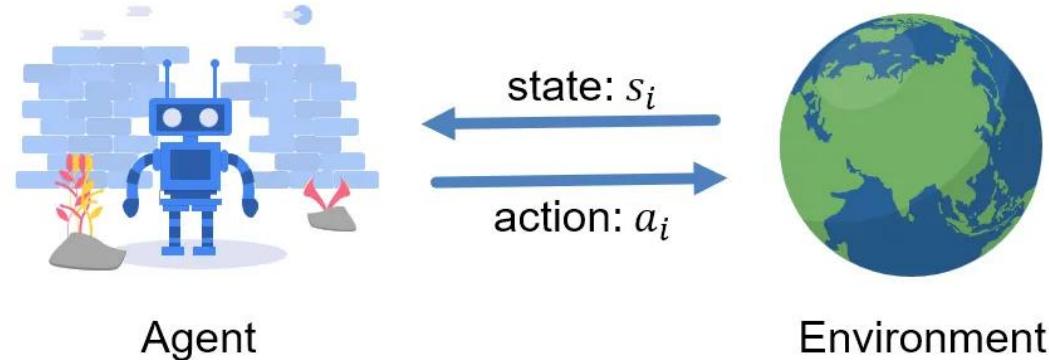
拟合一个神经网络，用于判断当前状态 s 下，动作 a 好不好？（有多少“价值”）。

例如：深度Q网络（DQN）

基于随机策略的方法：

拟合一个神经网络，用于预测当前状态下，所有动作 a_1 、 a_2 、 a_3 的概率分布

例如：近端策略优化（PPO）、优势演员—评论家（AAC）



深度强化学习约束可控热核聚变

Google Deepmind 团队

nature

Explore content ▾ About the journal ▾ Publish with us ▾

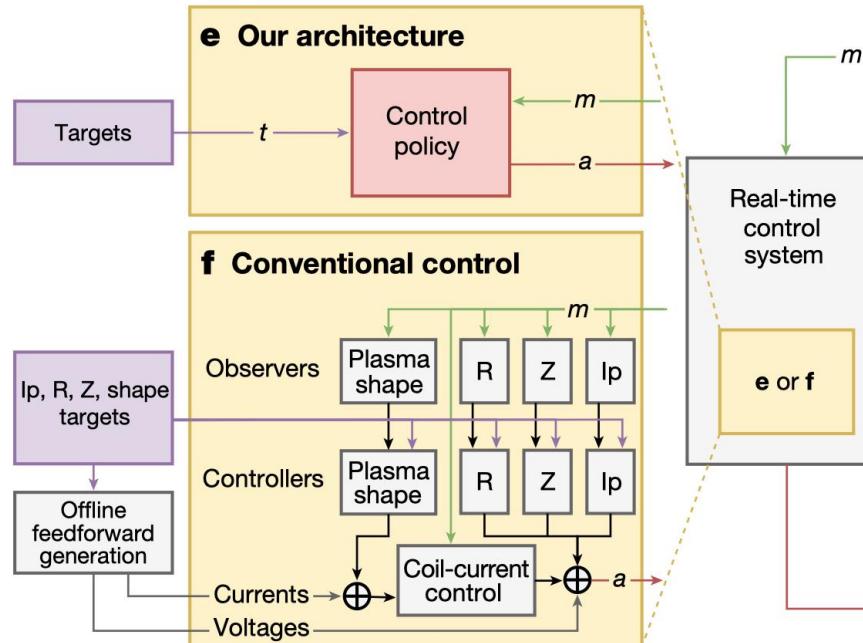
[nature](#) > [articles](#) > article

Article | [Open access](#) | Published: 16 February 2022

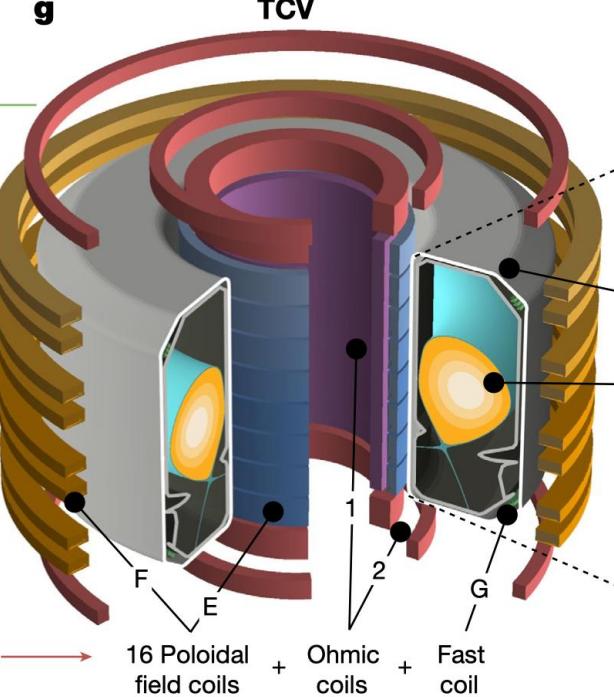
Magnetic control of tokamak plasmas through deep reinforcement learning



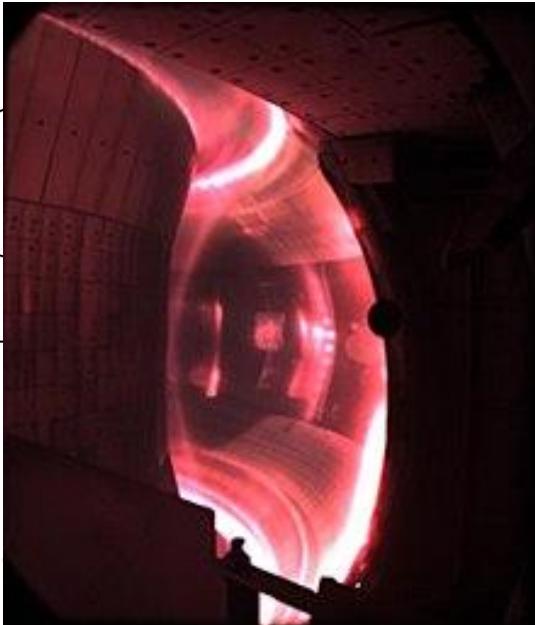
d Deployment



g TCV

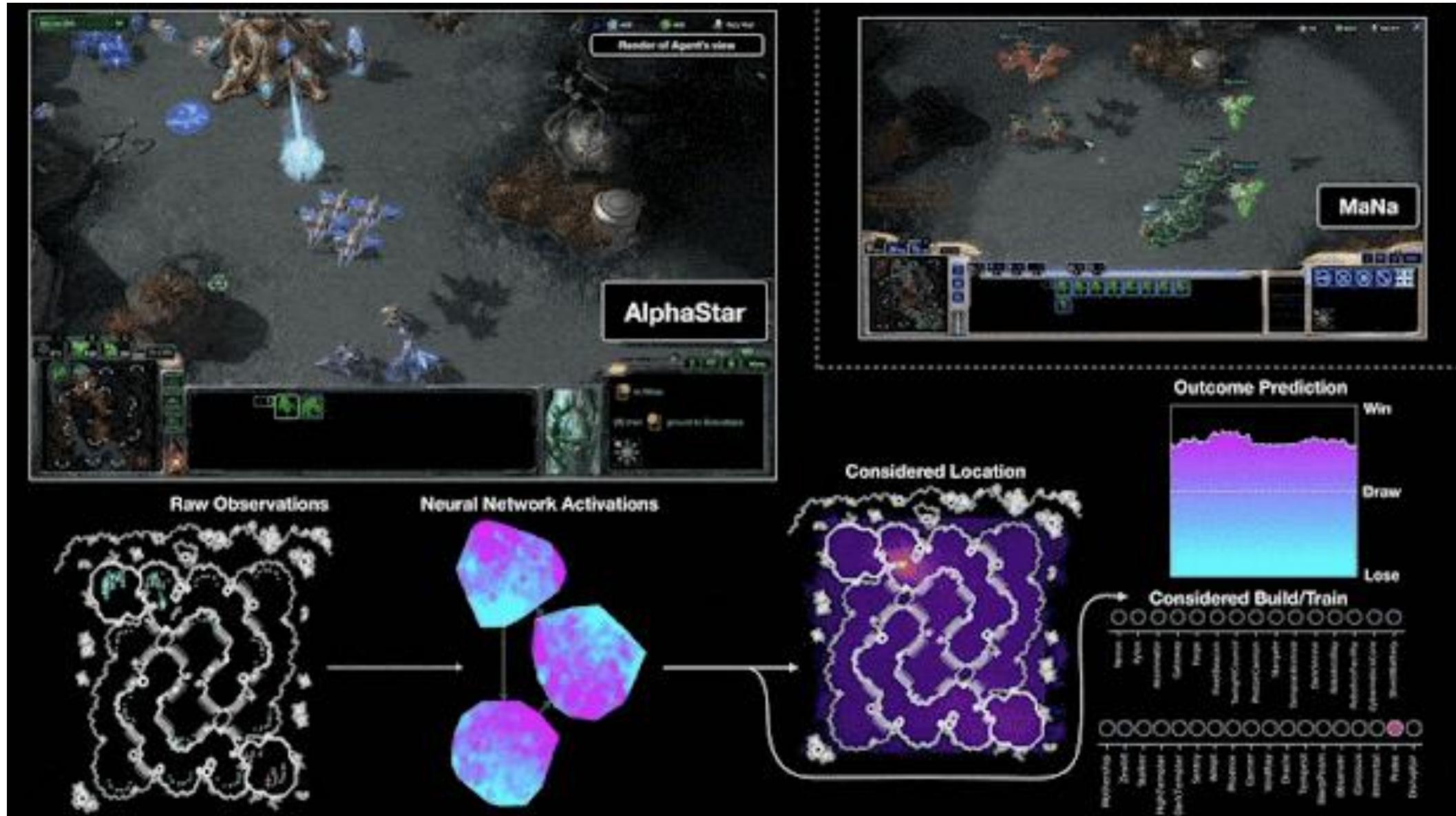


h Vessel cross section



深度强化学习超越人类选手

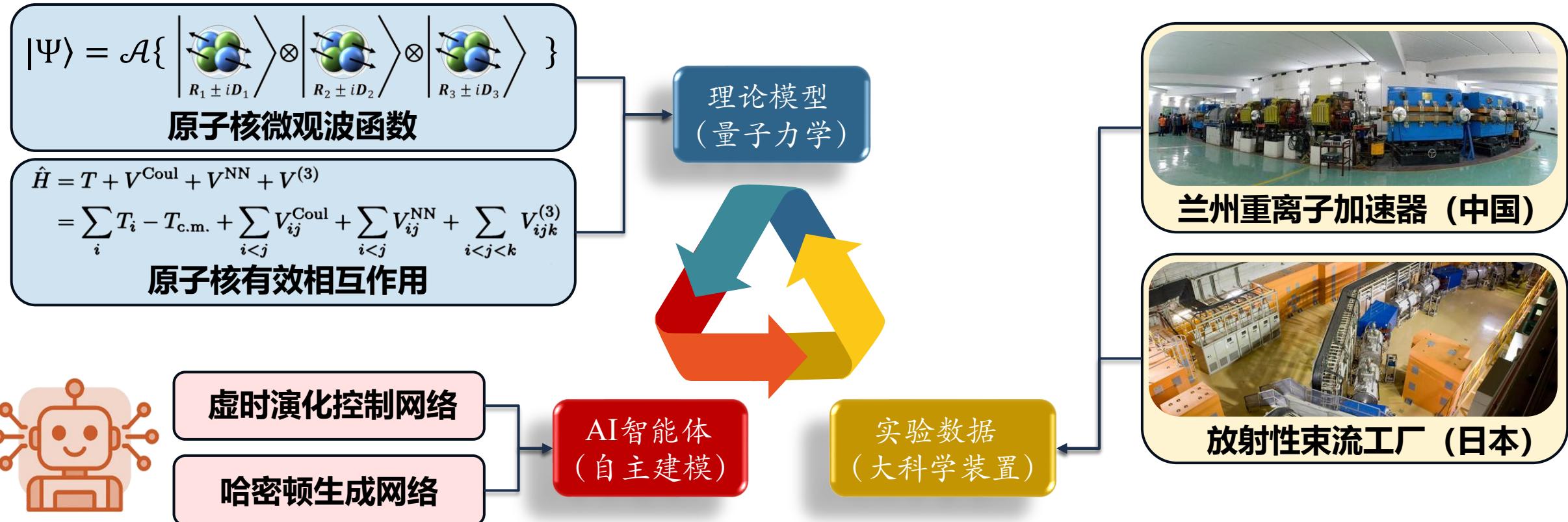
Google Deepmind 团队



AI智能体驱动的量子科学研究新范式

南航科学人工智能团队

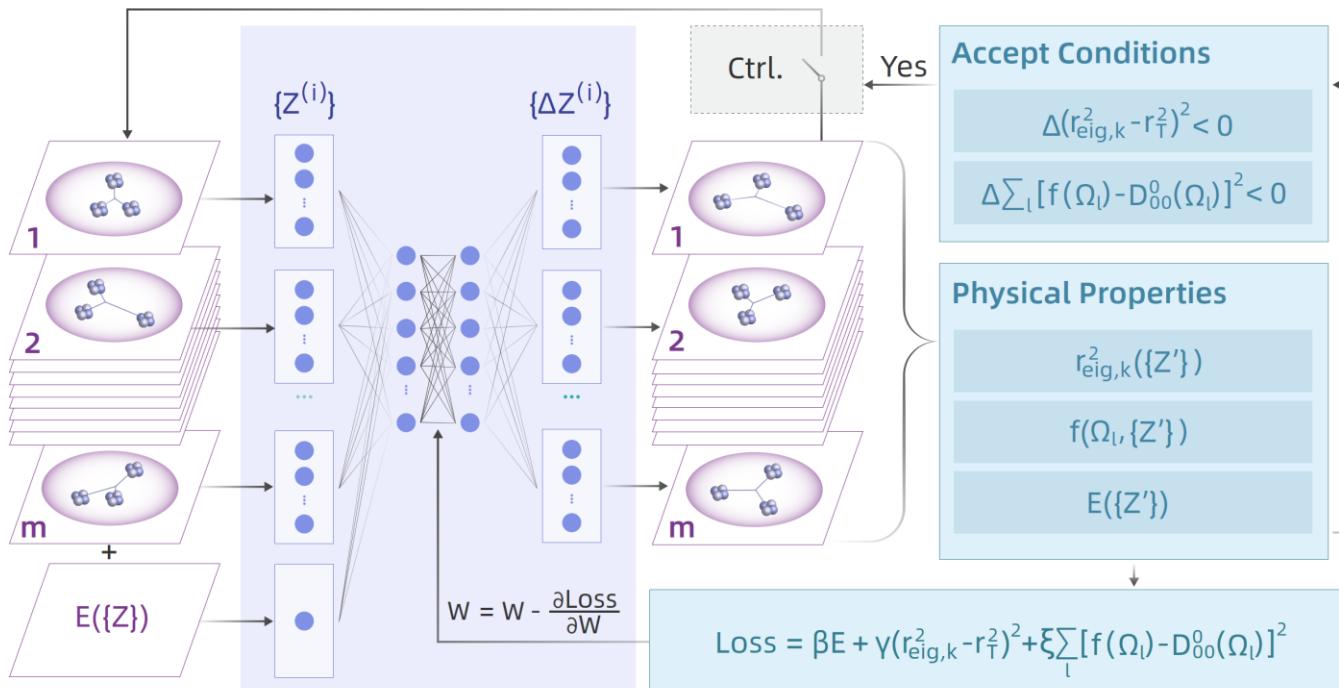
构建“理论-数据-智能”三位一体研究范式，以AI智能体驱动原子核系统量子力学微观计算，实现理论结果与实验数据的深度耦合与双向反馈，形成智能研究框架。



建立人工智能与原子核领域知识深度融合的系统性方法论，推动了量子物理研究范式革新

原子核结团态智能演化

构建“虚时演化控制网络”智能体，推理量子态演化，克服理论维度爆炸问题，实现核多体波函数高效求解^[1-4]



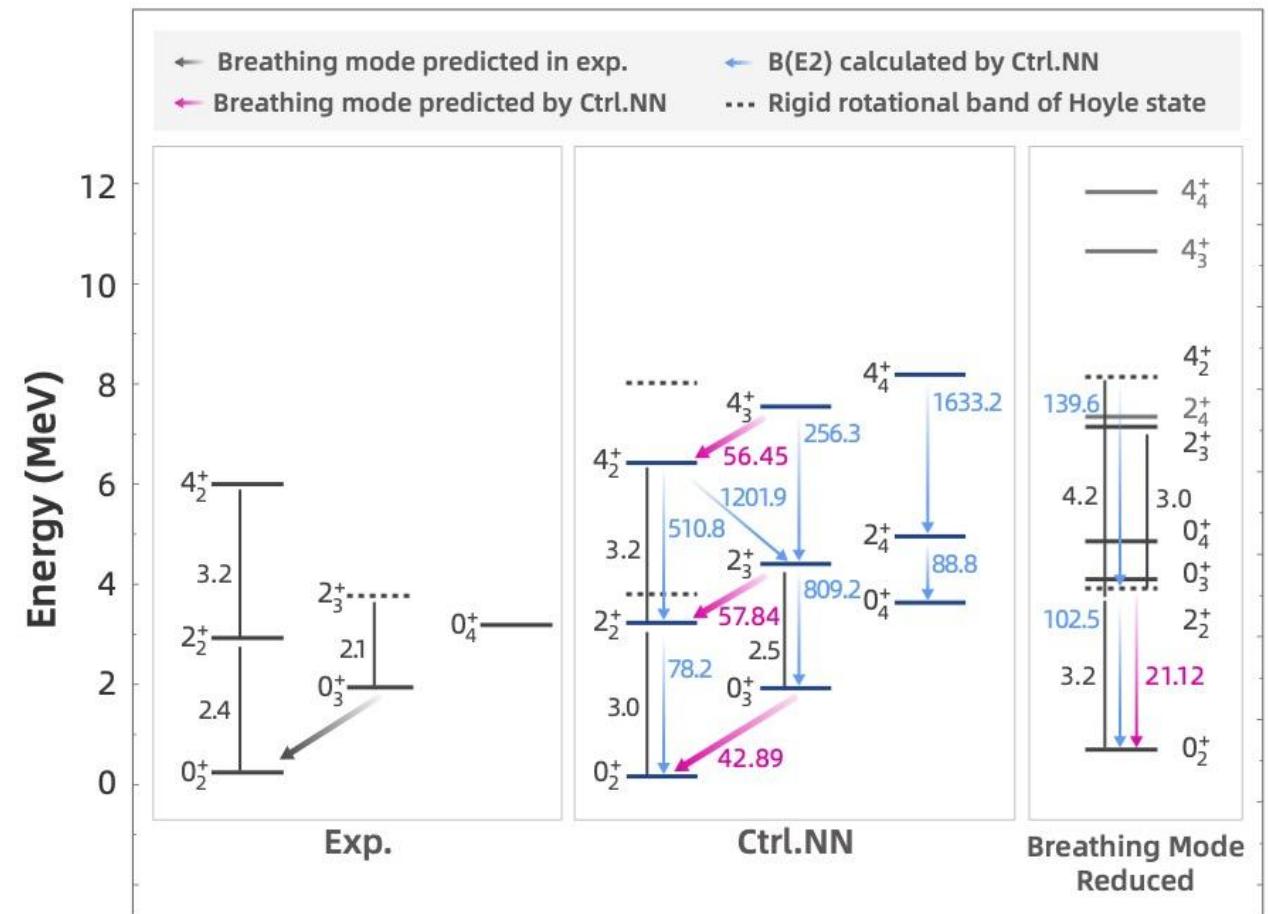
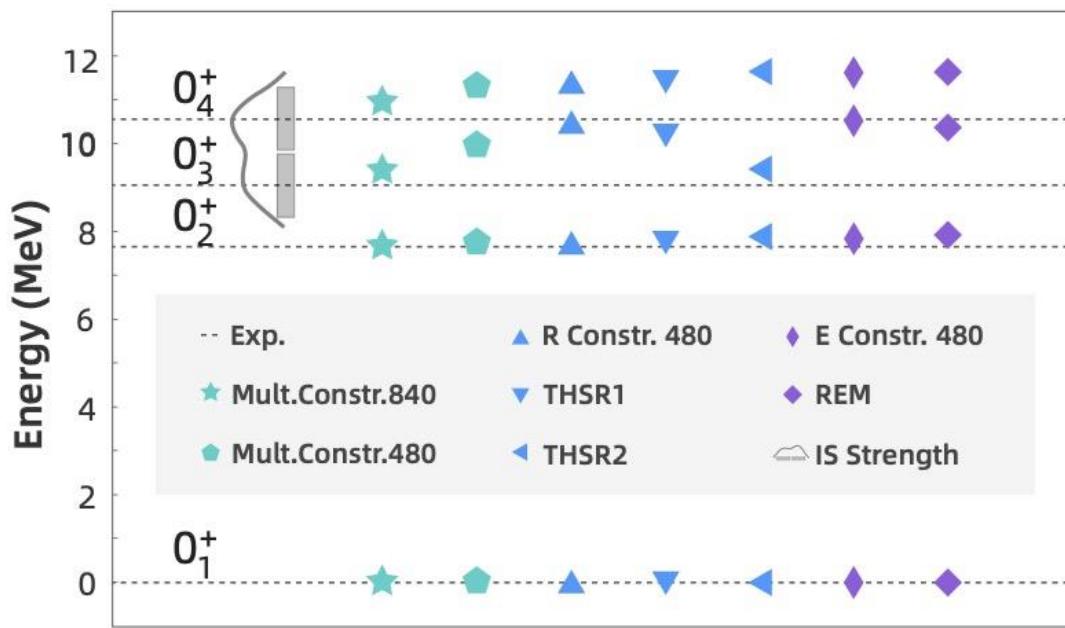
原子核系统虚时演化控制网络^[1-4]

- [1] Cheng *et al.*, Phys. Lett. B **864**, 139397 (2025).
- [2] Tian *et al.*, Phys. Lett. B **862**, 139338 (2025).
- [3] Liu *et al.*, Phys. Rev. C, accepted (2025).
- [4] Tian *et al.*, Phys. Lett. B **855**, 138816 (2024).

运用神经网络技术，初步解决了原子核虚时演化预测难题

Cluster resonance states in ^{12}C [Z. Cheng, M. Lyu et al., PLB 864, 139397 (2025)]

- Excitation energies of 0^+ states



THSR 1 : Y. Funaki. Physical Review C, 2015, 92(2): 021302.

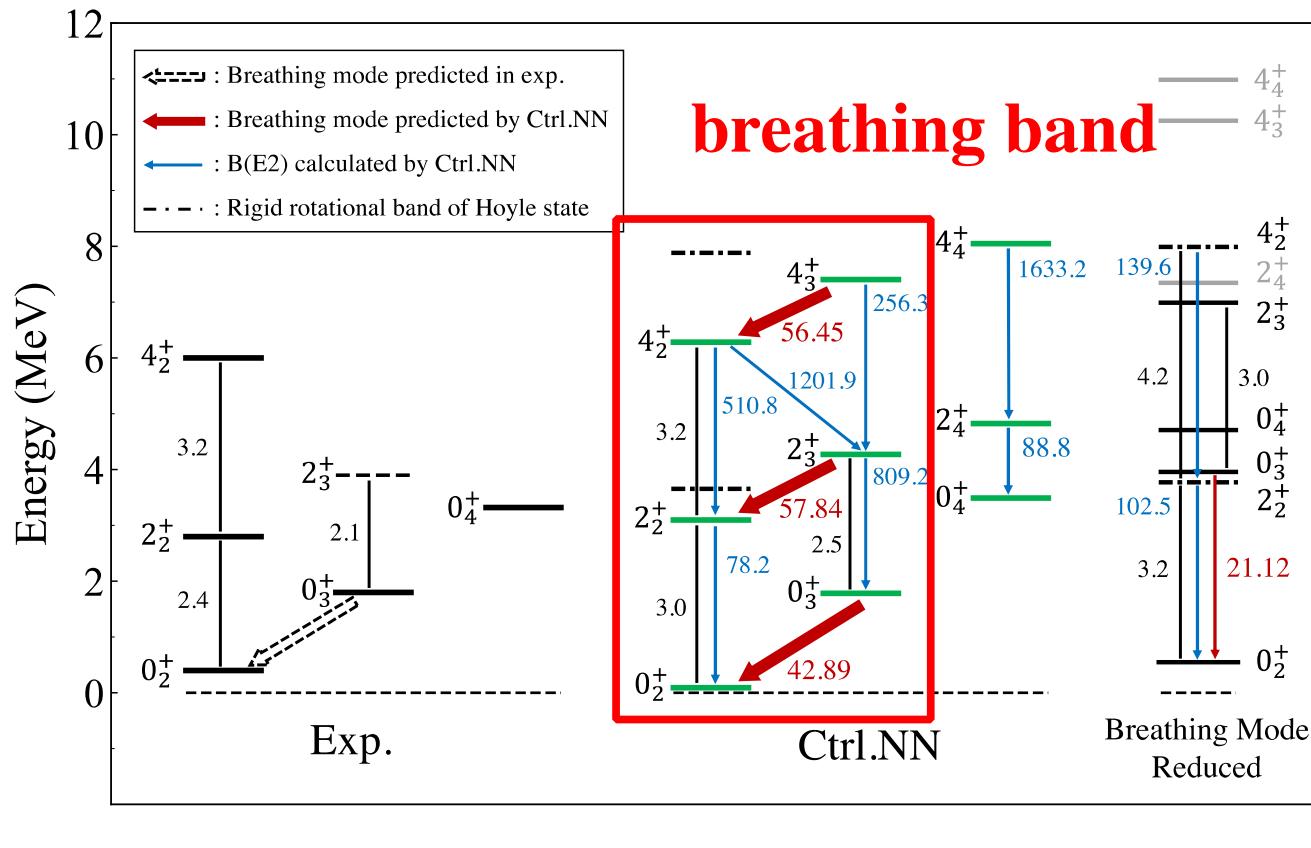
THSR 2 : B. Zhou, A. Tohsaki, H. Horiuchi, et al. Physical Review C, 2016, 94(4): 044319.

REM : Imai R, Tada T, Kimura M. Physical Review C, 2019, 99(6): 064327.

Breathing modes of ^{12}C

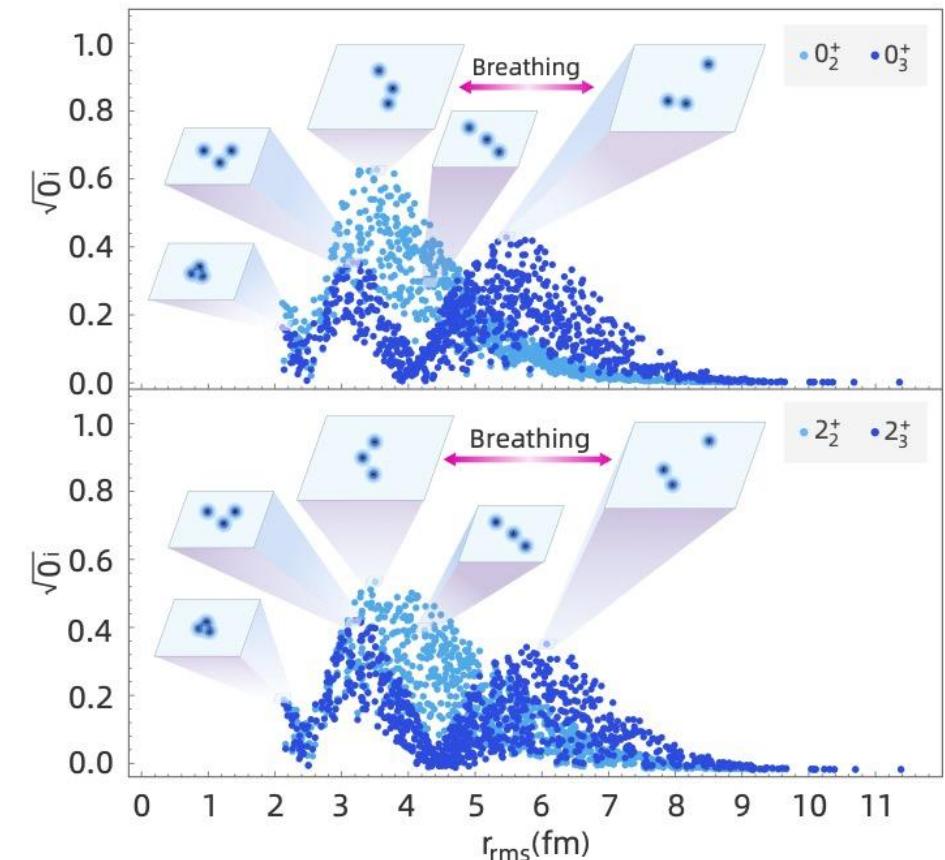
$$O_i = \frac{|\langle \Psi^{\text{Brink}}(\{R_i\}) | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi^{\text{Brink}}(\{R_i\}) | \Psi^{\text{Brink}}(\{R_i\}) \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle}$$

■ Hoyle band and breathing band



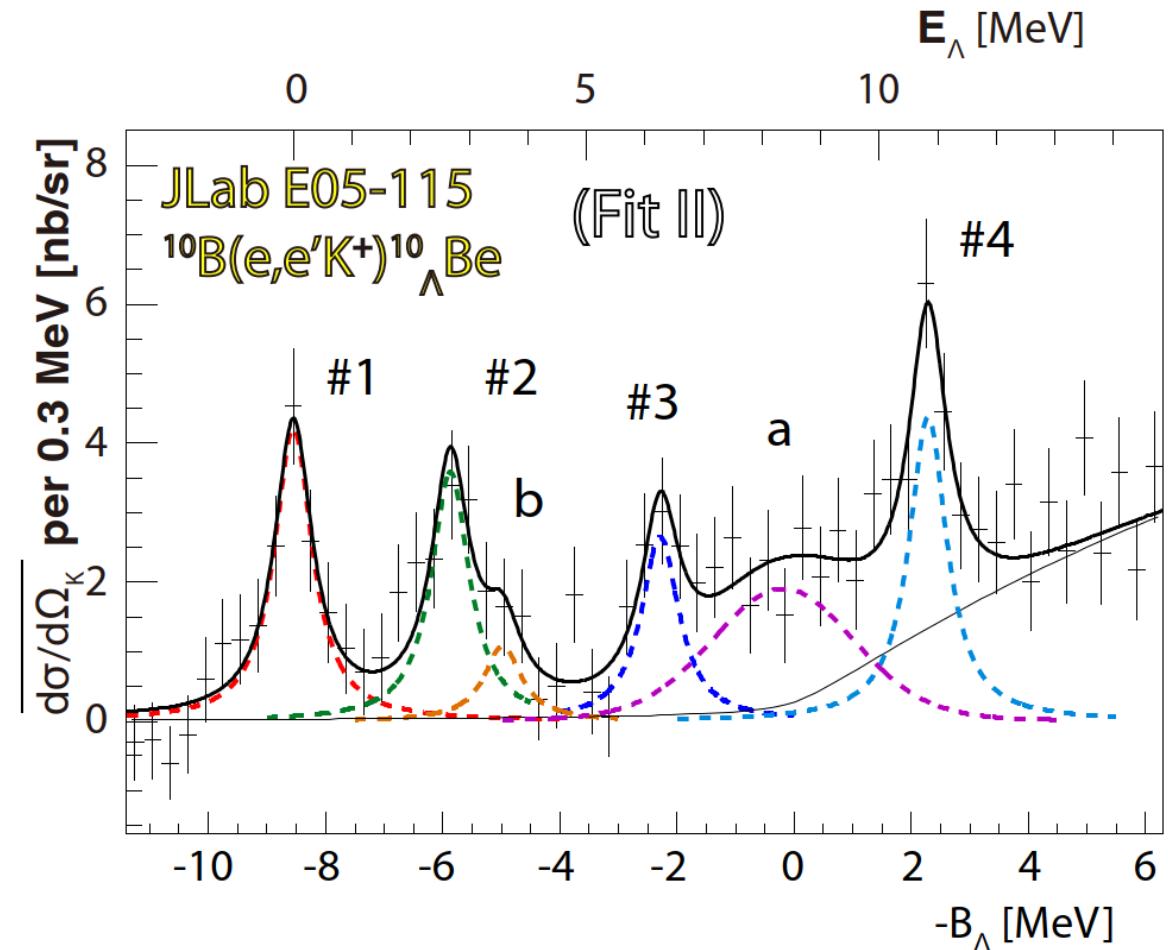
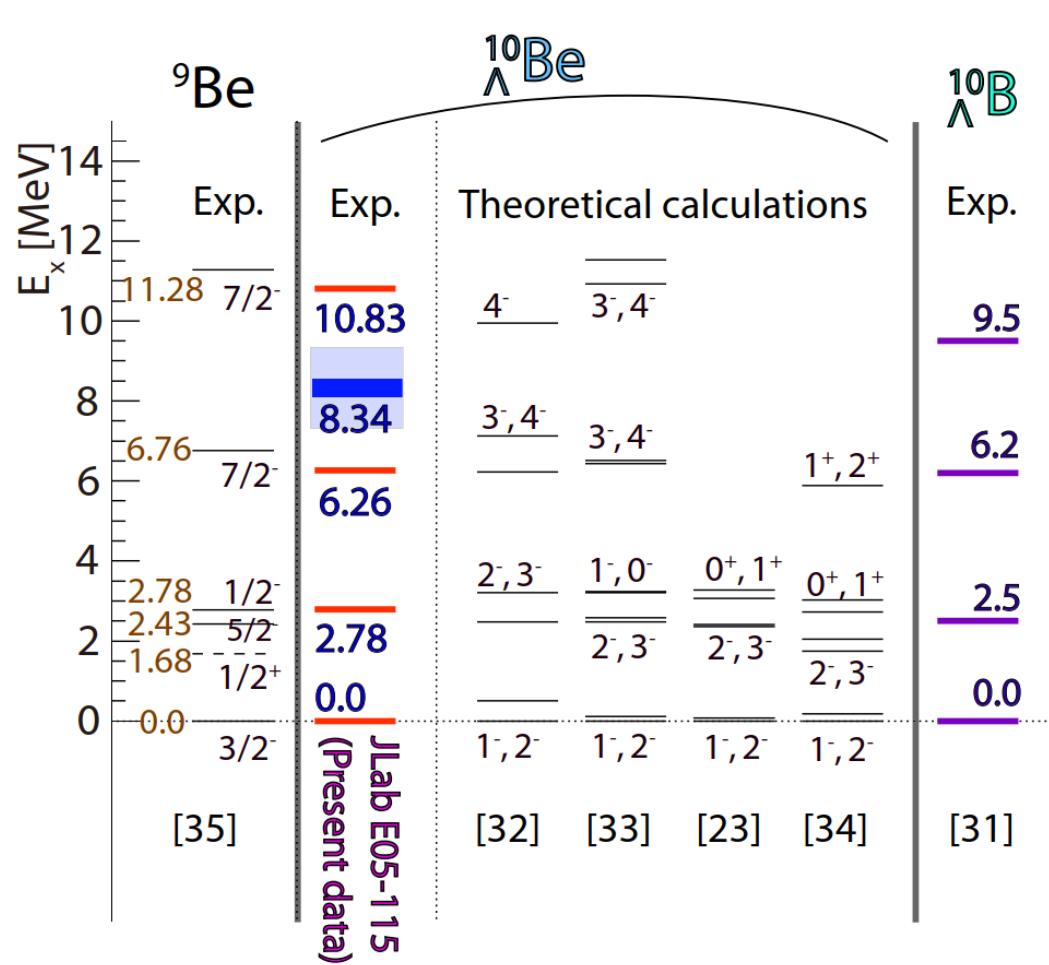
$$M(E0; J_m^+ \rightarrow J_n^+) = \frac{1}{2} \langle \Psi_{J_n^+} | \sum_{i=1}^A (r_i - r_G)^2 | \Psi_{J_m^+} \rangle,$$

■ Configuration distribution



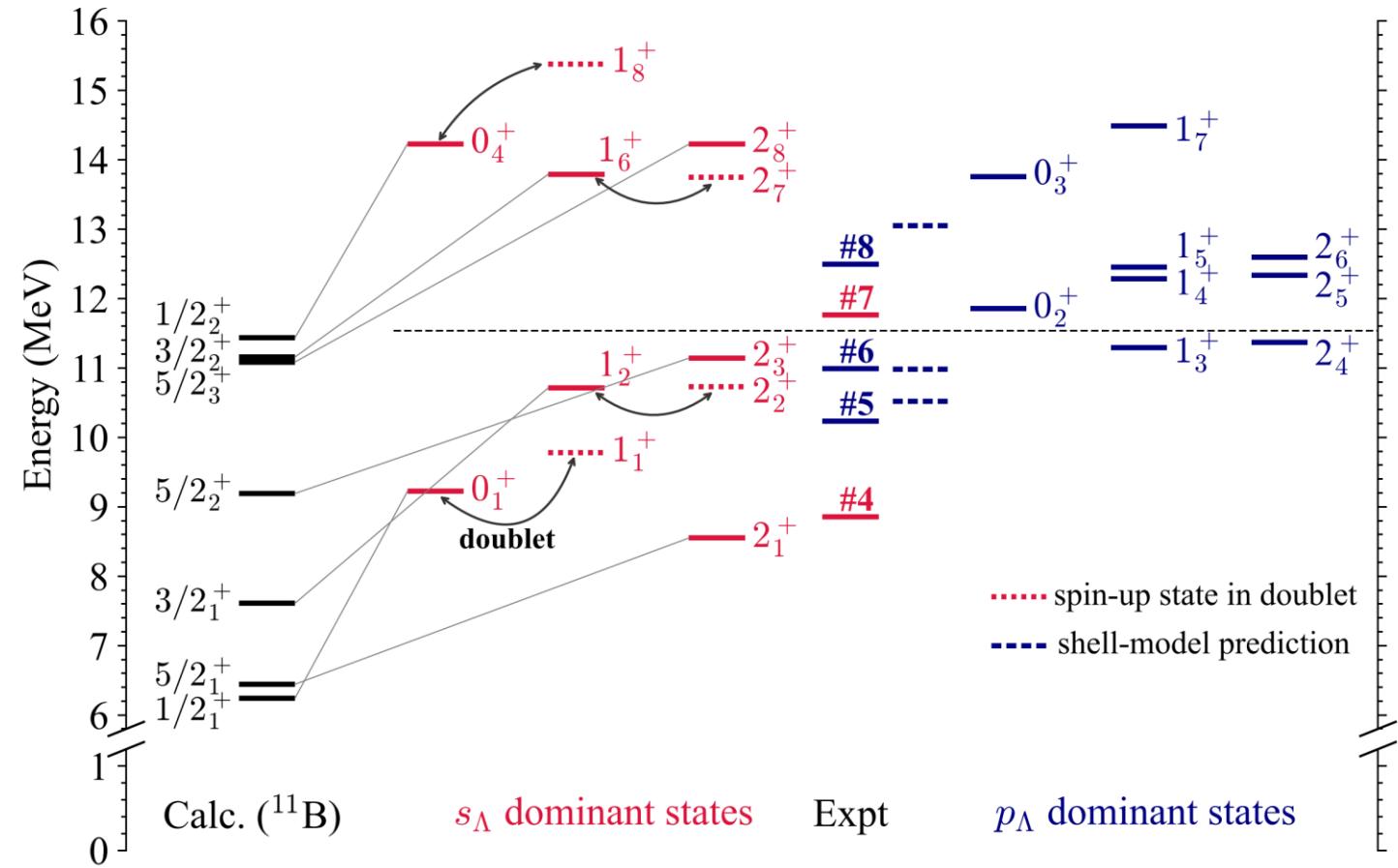
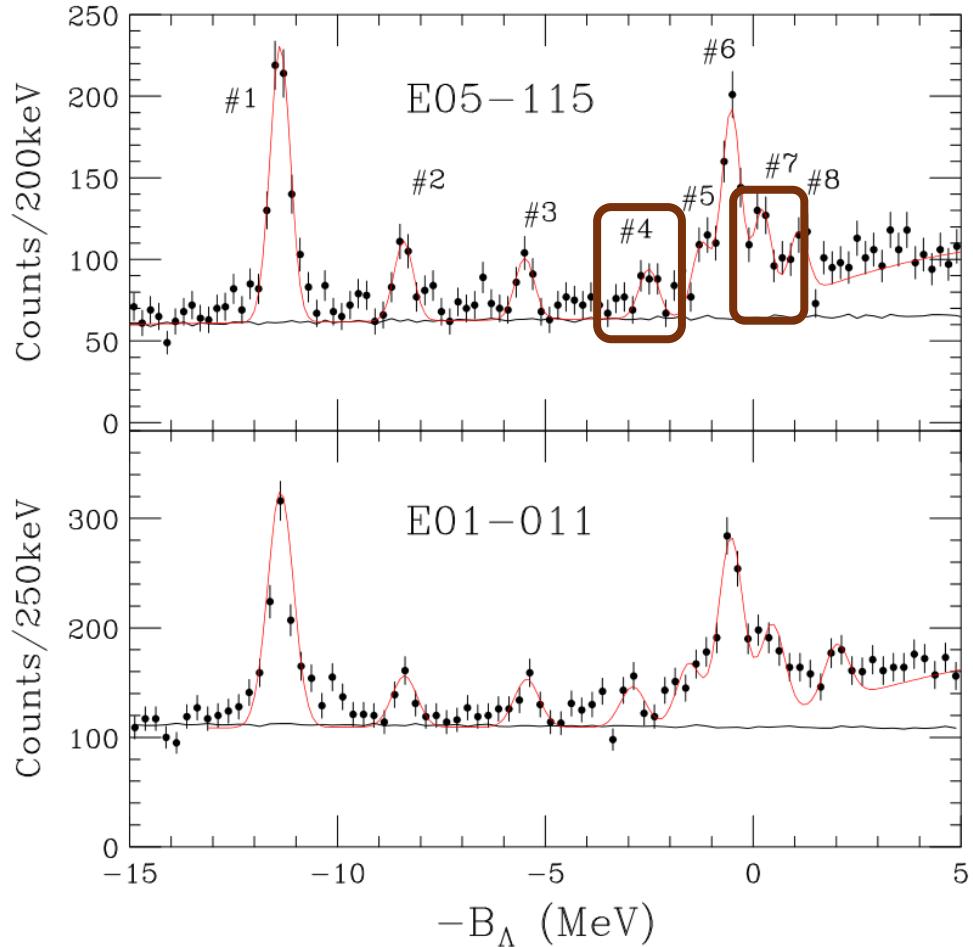
- O_i : amplitude of each basis
- r_{rms} : root-mean-square radius of each basis.

Resolving bump states of ${}^{10}\Lambda\text{Be}$ [J. Tian, M. Lyu, Z. Cheng, et al, PLB 862, 139338 (2025)]

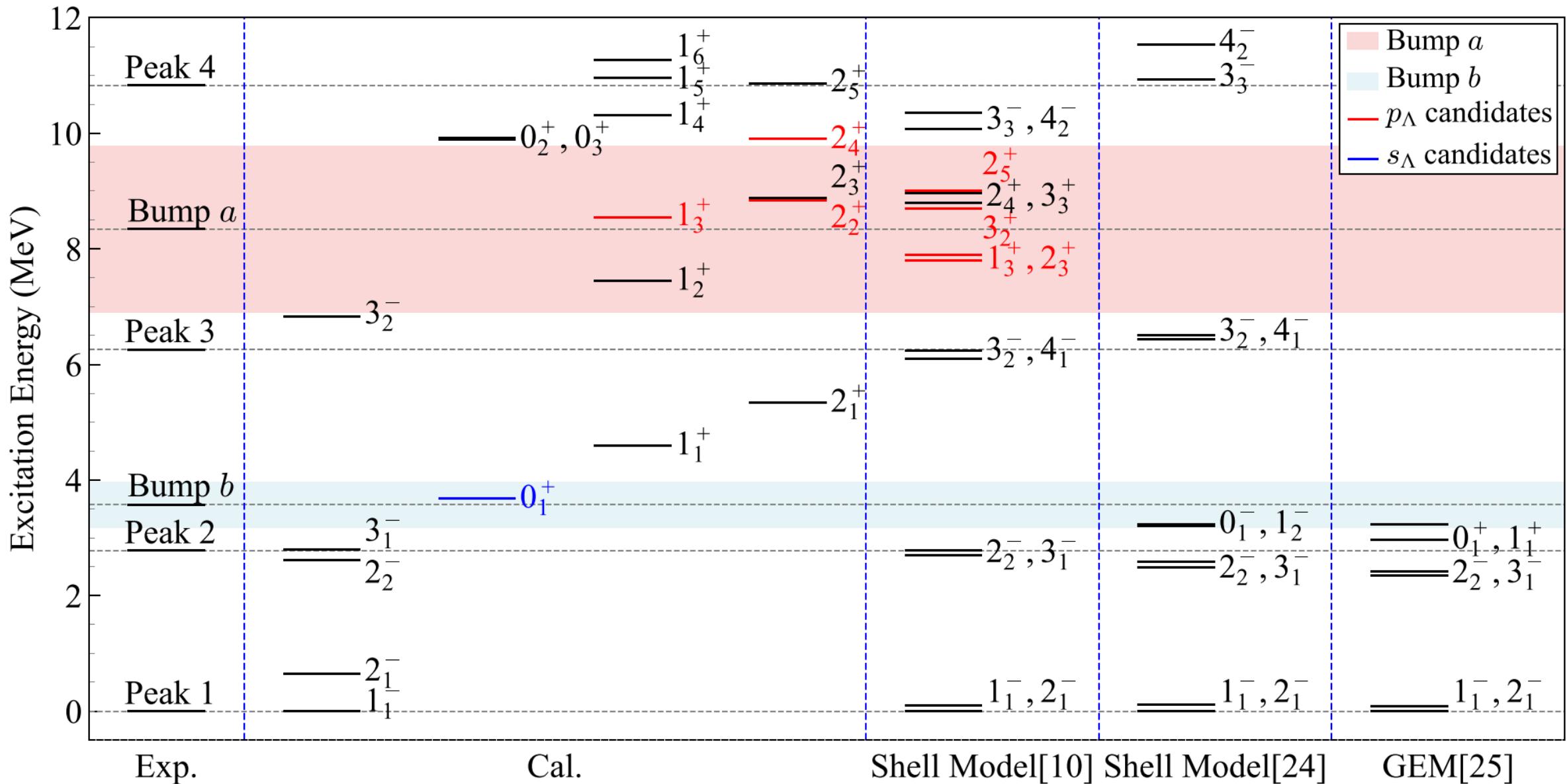


Two “bump states”

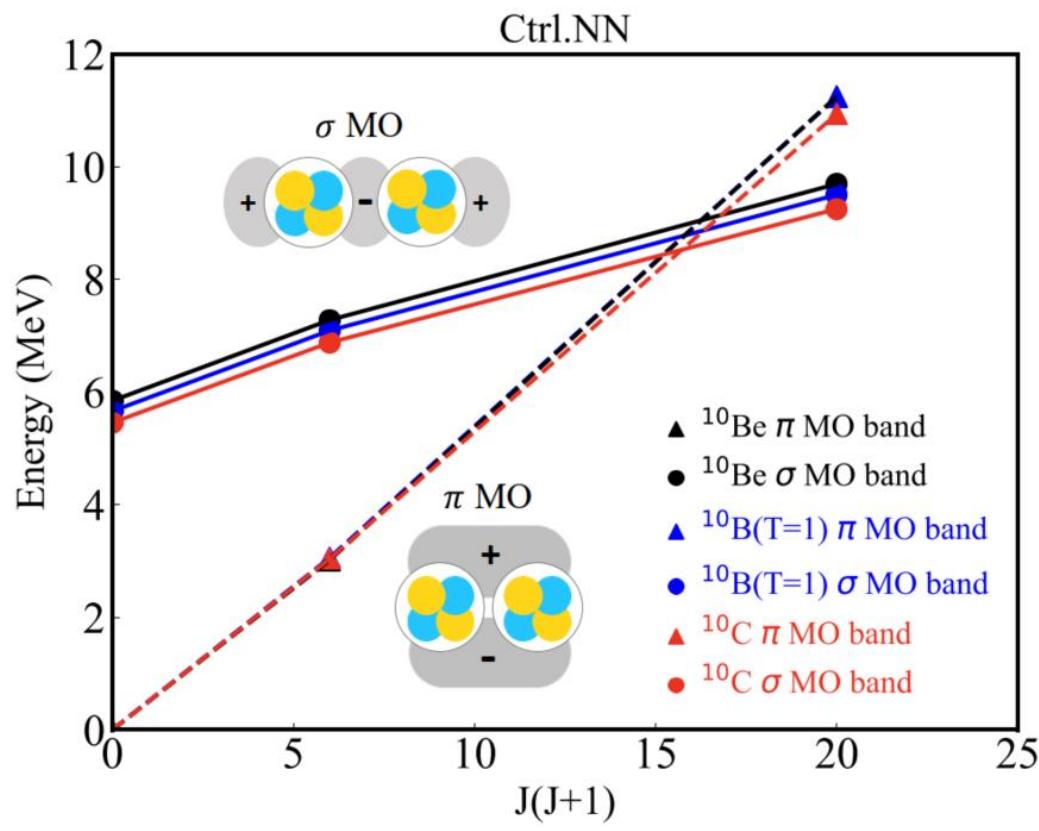
Resolving cluster states of $^{12}\Lambda$ B [Z. Liu, J. Tian, M. Lyu, et al., PRC 112, 034314 (2025)]



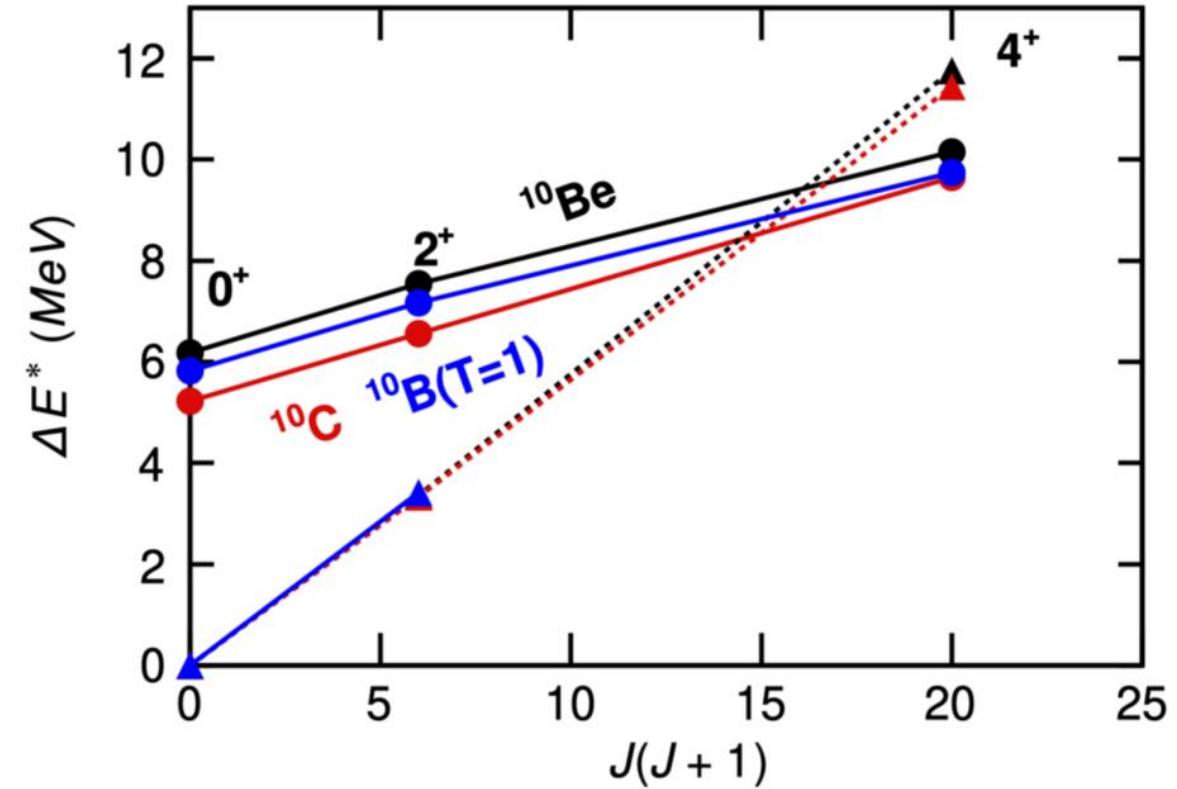
Resolving bump states of $^{10}_{\Lambda}\text{Be}$ [Z. Liu, J. Tian, M. L., et al., PRC 112, 034314 (2025)]



Spectrum of ^{10}B by Ctrl.NN (方舟, 优秀海报汇报)

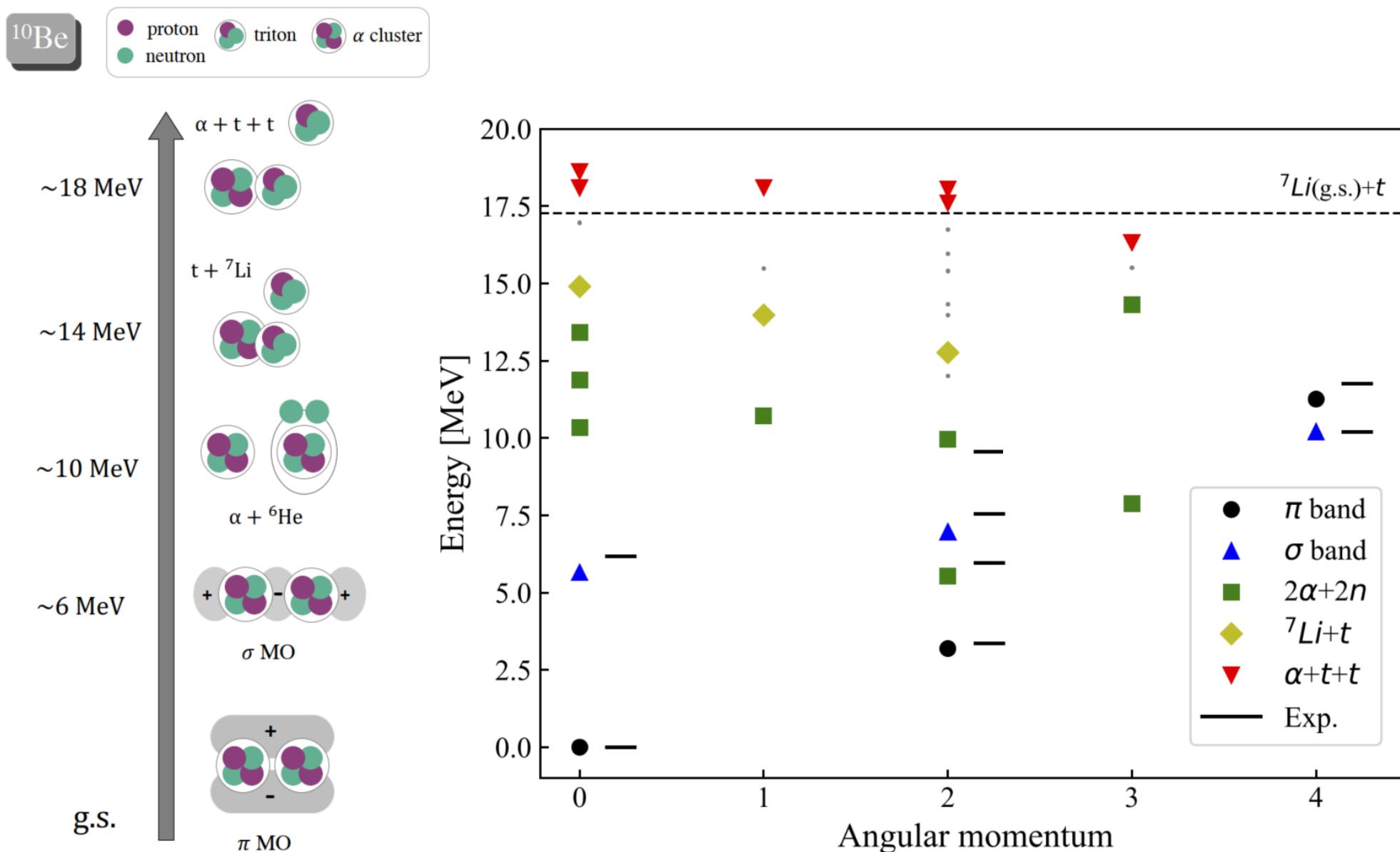


Ctrl.NN results



Exp. results

Spectrum of ^{10}Be by Ctrl.NN (Preliminary)



群体智能

智能不局限于个体，**群体**（鸟群、鱼群）通过相互作用也可**涌现智能**



椋（liáng）鸟群舞，西班牙

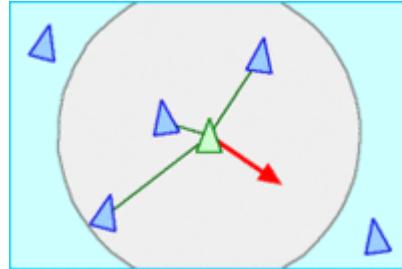


沙丁鱼群，南太平洋

鸟群协同规则

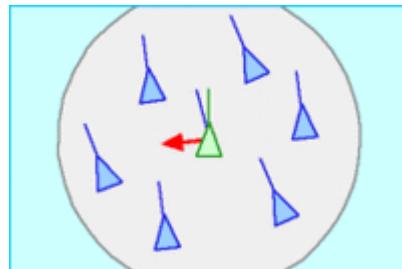
传统控制论希望通过鸟群个体间的简单协同规则（Boids model），解释群体智能行为
大规模群体通过简单规则形成的宏观协同行为也称“群智涌现”

简单 Boid 规则



分离

$$F_{ri} = \sum_{j=1}^{N_r} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2},$$



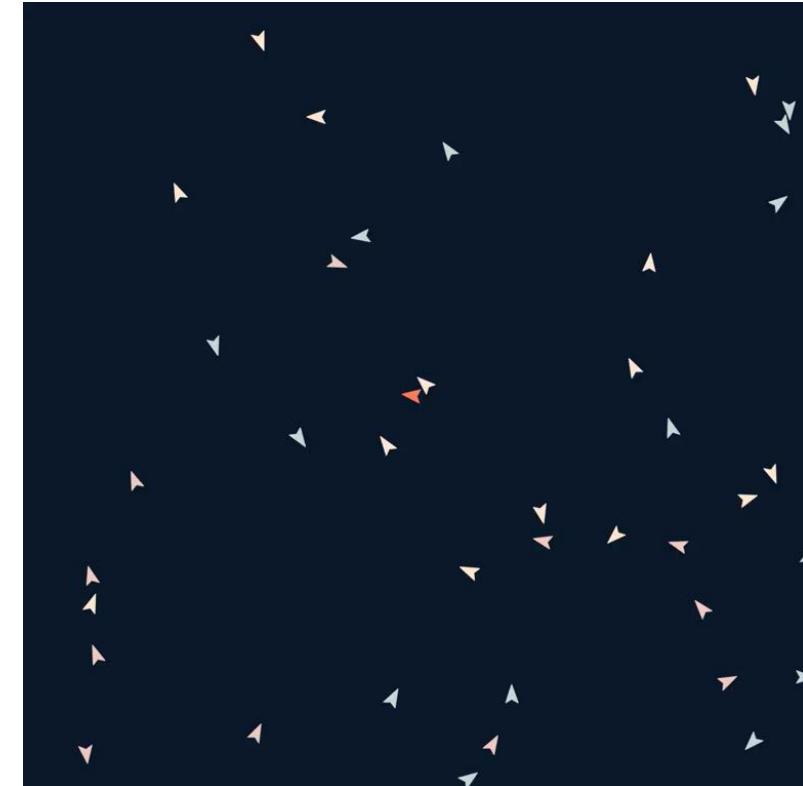
对准

$$F_{ai} = \sum_{j=1}^{N_a} \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i,$$

$$F_{hi} = \mathbf{x}_{hi} - \mathbf{x}_i,$$

内聚力

群体间协同规则体现为
相互作用形式



基于boids model的集群模拟

鸟群智能协同策略

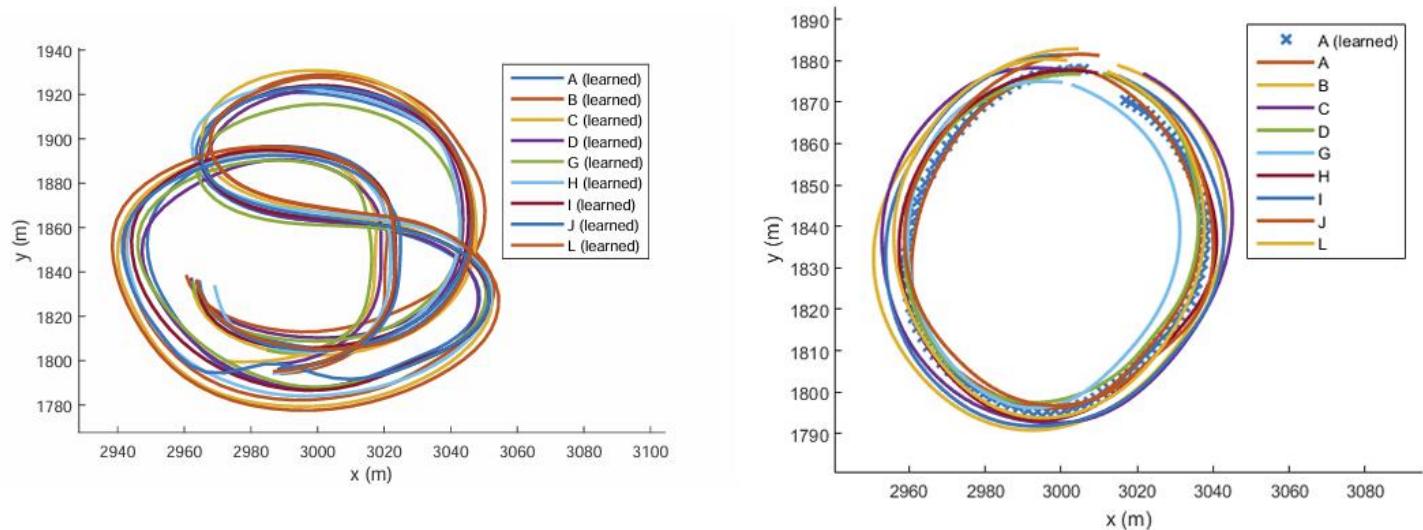
剑桥大学团队

通过行为克隆，剑桥大学团队利用逆向强化学习提取了鸟类协同规则，通过深度决策模型模仿鸟群运动

Inverse Reinforcement Learning of Bird Flocking Behavior

Robert Pinsler¹ and Max Maag² and Oleg Arenz² and Gerhard Neumann^{2,3}

Abstract—Birds within a flock are commonly assumed to be guided by simple rules, yet they show intelligent, collective behavior that is not entirely understood. We address this problem by modeling each bird as an agent of a separate Markov decision process, assuming that a bird makes decisions which maximize its own individual reward. By applying inverse reinforcement learning techniques to recover the unknown reward functions, we (1) were able to explain and reproduce the behavior of a flock of pigeons, and (2) propose a method for learning a leader-follower hierarchy. In the future, the learned reward representation could for example be used to teach a swarms of robots how to fly in a flock.



Feature	Expression	Description
Attraction	$\phi_{attr} = -\ \mathbf{x}_a - \mathbf{x}_p\ _2^2$	Stay close to others
Repulsion	$\phi_{rep} = -\exp\left(-\frac{(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_p)^2}{2\sigma^2}\right)$ ($\sigma = 3$)	Avoid crowding
Alignment	$\phi_{align} = \frac{\dot{\mathbf{x}}_a^\top \dot{\mathbf{x}}_p}{\ \dot{\mathbf{x}}_a\ \ \dot{\mathbf{x}}_p\ }$	Head in the same direction
Back Distance	$\phi_{bdist} = \log\left(1 + \exp\left(\frac{\dot{\mathbf{x}}_m}{\ \dot{\mathbf{x}}_m\ } (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_a)\right)\right)$	Avoid flying in the back of the flock ($\dot{\mathbf{x}}_m$ denotes the mean flock velocity)
Right Distance	$\phi_{rdist} = \log\left(1 + \exp\left(\frac{\mathbf{e}_z \times \dot{\mathbf{x}}_m}{\ \mathbf{e}_z \times \dot{\mathbf{x}}_m\ } (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_a)\right)\right)$	Avoid flying on the right of the flock
Action Penalty	$\phi_{act} = -\ \mathbf{a}\ ^2$	Avoid moving too much

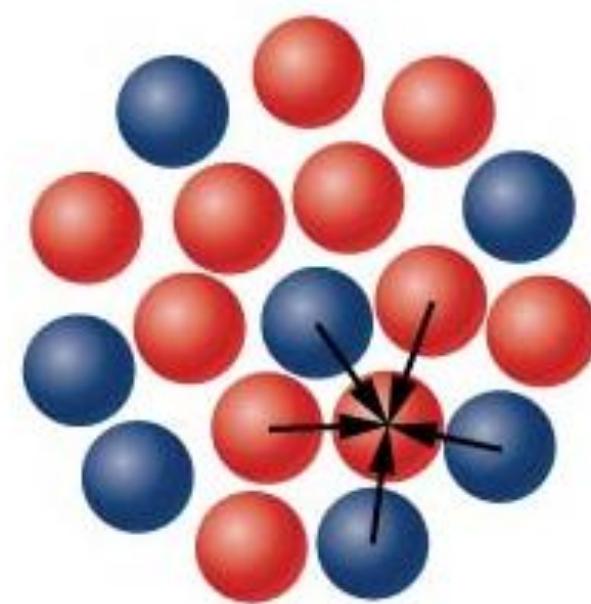
鸟类协同规则的智能提取结果

群智能与原子核物理

- 群体智能也用于无人机编队飞行控制，其中协同策略的智能生成是群智能研究前沿
- 原子核也可以看作特殊的“群”，其协同规则为“核子间相互作用”与“泡利排斥”



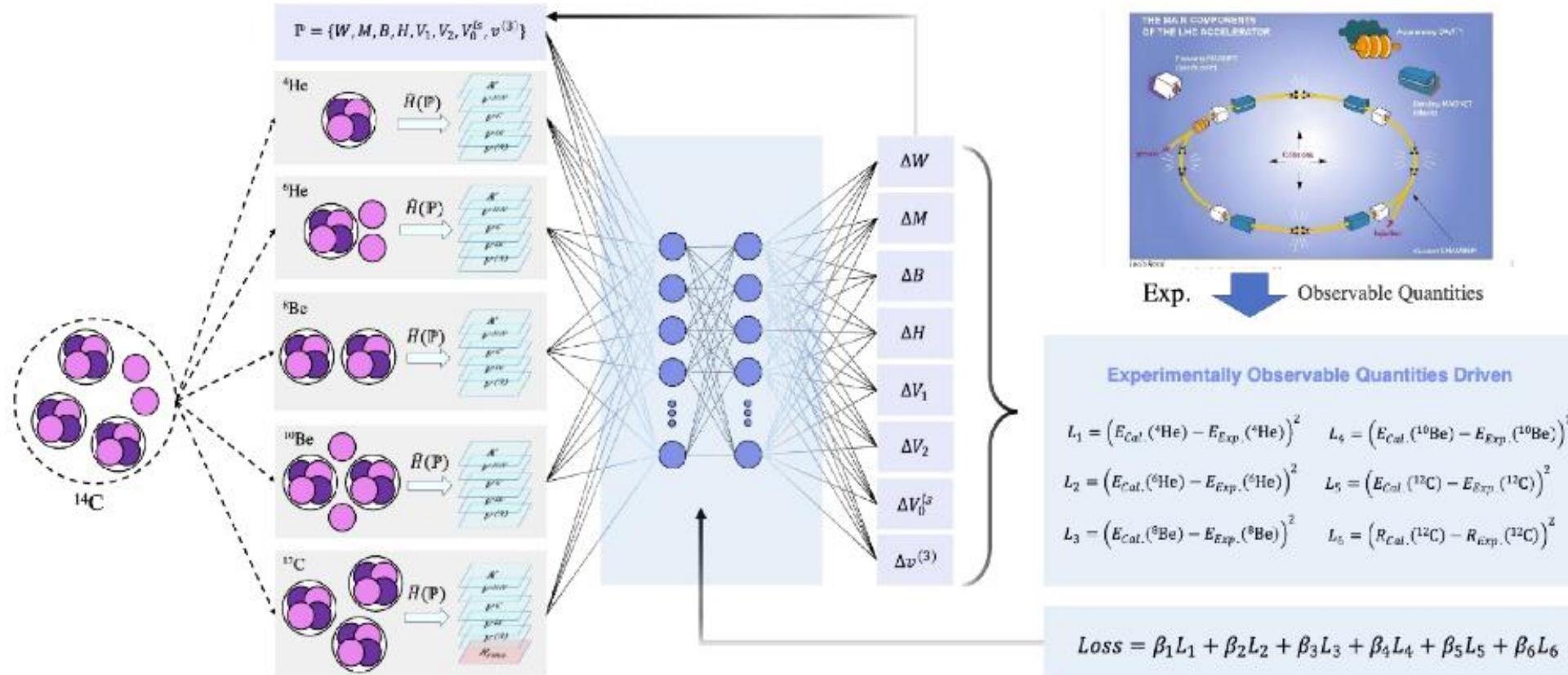
无人机集群协同策略生成



原子核哈密顿量生成

原子核结团态相互作用智能生成

构建“哈密顿生成网络”，推理优化原子核未知相互作用，实现从实验数据到理论模型的闭环构建^[1]。



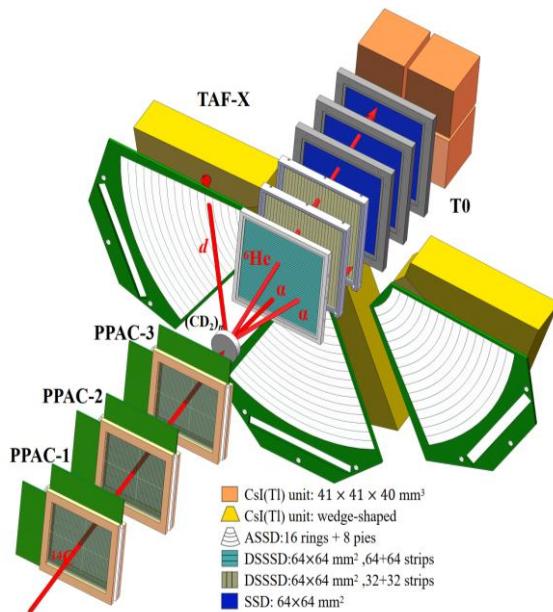
原子核结团态哈密顿生成网络

[K. Wei *et al.*, to be submitted]

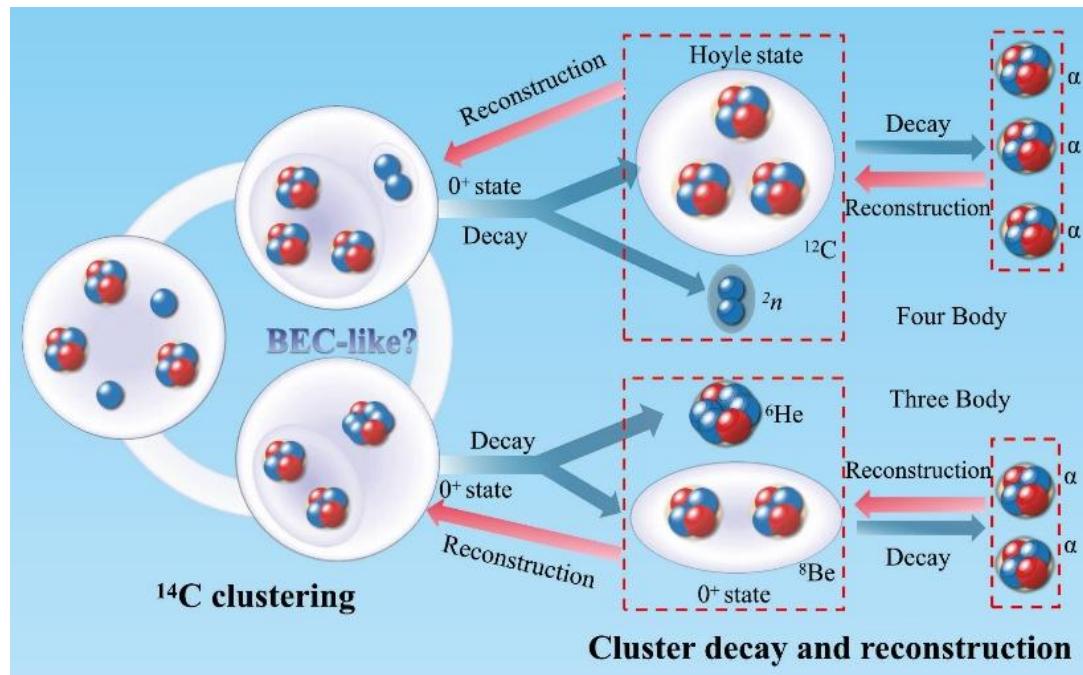
运用神经网络技术，初步解决了原子核哈密顿模型构建核心难题

AI驱动原子核新型异构凝聚态发现（程政，口头报告）

通过构建双智能体耦合驱动框架，以“哈密顿生成网络”从实验数据学习相互作用信息，同步运用“控制网络”耦合求解多体波函数，成功构建¹⁴C原子核理论模型。

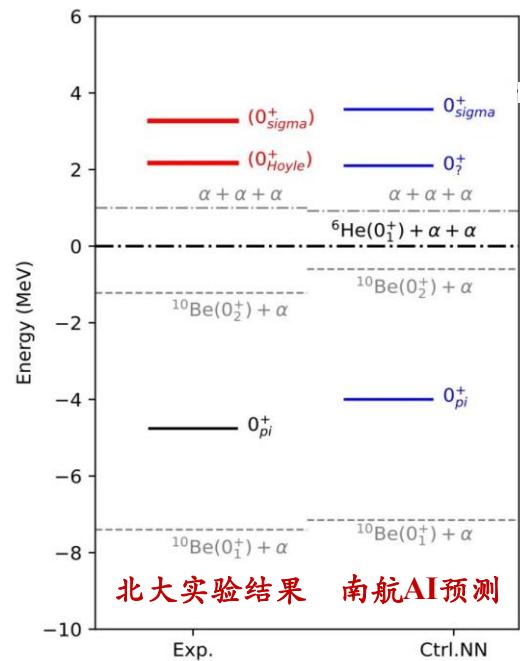


探测系统
(中科院近物所)



双智能体耦合发现新型异构 ($\alpha+\alpha+{}^6\text{He}$) 凝聚态^[1]

[1] K. Wei, Z. Cheng, Y.L. Ye, M.L. Lyu *et al.*, to be submitted



¹⁴C原子核能级

该成果证实，科学人工智能可为量子物质新形态的探索开辟新途径

谢谢

汇报结束，请批评指正！

欢迎访问南航“科学人工智能团队”！

