

Određivanje energija vezanja atomskih jezgara strojnim učenjem

Krešimir Šura*

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička 32, Zagreb

(Dated: 22. siječnja 2023.)

Energija vezanja temeljno je svojstvo atomske jezgre. Može se mjeriti eksperimentalno, ali ne za sve jezgre koje su potrebne za modeliranje nukleosinteze. Postoje mnogi teorijski modeli koji opisuju energije vezanja kroz cijelu mapu nuklida. U ovom radu proučen je pristup određivanja energije vezanja atomskih jezgara pomoću neuralnih mreža koje su strojnim učenjem naučene na eksperimentalne podatke iz baze nuklearnih podataka AME2016. Prediktivna moć neuralne mreže uspoređena je s eksperimentalnim podacima, kao i s drugim metodama određivanja energija vezanja. Dobro naučene neuronske mreže s dva i četiri ulazna parametra pokazale su se veoma učinkovitima u preciznom reproduciranju eksperimentalnih podataka sa srednjim kvadratnim odstupanjem $RMS = 1.274$ MeV i 0.584 MeV, respektivno. Ovakvi rezultati usporedivi su s tradicionalnim modelima. Neuronske mreže i strojno učenje pokazali su se kao perspektivni pristupi istraživanja nuklearnih svojstava daleko od stabilnih jezgara.

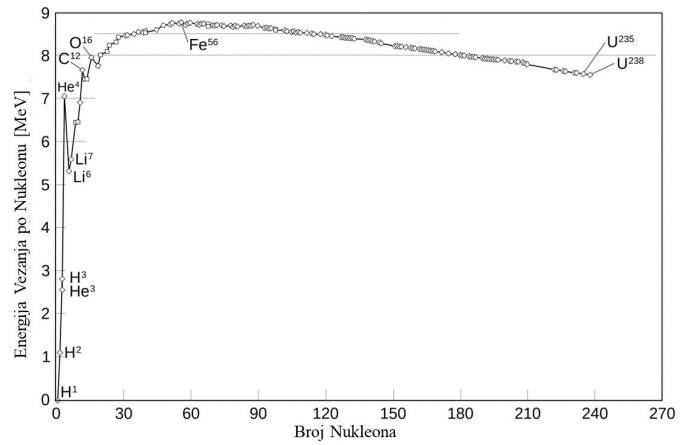
I. UVOD

Atomske jezgre su jako vezani mnogočestični kvantni sustavi protona i neutrona uslijed djelovanja nukleon-nukleon (NN) interakcije, ostatka jake nuklearne sile odgovorne za hadronizaciju kvarkova u složene čestice - nukleone. Energija vezanja jezgre (E_B) jest energija koja je potrebna kako bi se svi sastavni nukleoni jezgre iz nje izdvojili. Ona je razlika masa slobodnih nukleona i jezgre,

$$E_B(Z, N) = Zm_H + Nm_n - m_{atom}. \quad (1)$$

Zbog komplicirane prirode NN interakcije ne postoji egzaktan opis nuklearne sile. Poznato je da ona ovisi o udaljenosti, spinu, izospinu. Prisutne su dvočestične ali i tročestične interakcije, kao i efekti sparivanja.¹ Na skalama energija atomskih jezgara problemu nije moguće pristupiti perturbativnim računom kvantne kromodinamike (QCD). Sustavi lakih jezgara su riješeni *ab initio* metodama i efektivnom teorijom polja, no takav pristup je previše zahtjevan za opis težih jezgara.¹³ Za lake jezgre energija vezanja po nukleonu EB/A raste linearno s brojem nukleona zbog nuklearne sile, dok za teže jezgre, zbog električne sile, ona linearno opada. Graf energije vezanja po nukleonu prikazan je na slici 1.

Slika 2 je prikaz mape nuklida s eksperimentalnim podacima iz baze masa atomskih jezgara AME2016⁶. Na slici se vide linije koje označavaju *magične brojeve* (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126), a stabilne jezgre su posebno istaknute. Vidljivo je da se lakše stabilne jezgre nalaze oko $N = Z$ linije, teže su jezgre bogatije neutronima kako bi se NN sila suprotstavila električnoj. Stabilne jezgre nalaze se u tzv. *dolini stabilnosti* u mapi nuklida. Oko magičnih brojeva protona i neutrona, atomske jezgre su posebno stabilne. Jezgre izvan doline stabilnosti imaju sve kraća vremena poluživota i nuklearnim raspadima se gibaju prema dolini stabilnosti. Upravo te nestabilne

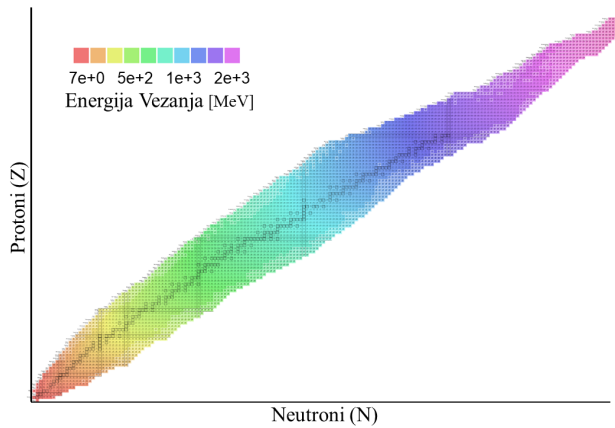


Slika 1. Energija vezanja po nukleonu - maksimum EB po nukleonu postiže se za maseni broj 56, iznosi oko 8.75 MeV. Preuzeto iz⁴.

jezgre izvan doline stabilnosti su posebno bitne u astrofizičkim procesima i kozmologiji kako bi se razumjelo podrijetlo težih elemenata u svemiru.⁹ Daleko od doline stabilnosti, u području velikog broja nukleona, pretpostavlja se da postoje *otoci stabilnosti* na kojima bismo mogli pronaći, do sada, neotkrivene jezgre superteških kemijskih elemenata.⁸

Do danas su razvijene mnoge metode rješavanja sustava atomskih jezgara, uz već ranije spomenute *ab initio* metode, Monte-Carlo varijacijske metode¹¹, model kapljice, parametrizirane Skyrme sile¹⁴, model ljusaka, koji dobro opisuju jezgre duž doline stabilnosti, metode samosuglasnog srednjeg polja poput Hartree-Fock (HF) i Hartree-Fock-Bogoljubov (HFB)², relativistička aproksimacija srednjeg polja¹², koje daju bolje rezultate za teže jezgre $Z > 20$, te algebarski modeli. Spomenute metode oslanjaju se na numeričko rješavanje problema dijagonalizacijom nuklearnog hamiltonijana te iteriranjem do konvergencije. Pojedine metode izvrsne su za specifične slučajeve, ali od eksperimenta odstupaju za ostale. Različite nuklearne modele možemo uspoređivati sred-

* ksura.phy@pmf.hr



Slika 2. Mapa nuklida - x-os predstavlja broj neutrona N, y-os broj protona Z, crvene nijanse predstavljaju niže energije vezanja, plave nijanse više.

njim kvadratnim odstupanjem izračunatih vrijednosti od eksperimentalno poznatih vrijednosti, RMS (eng. *root-mean-square*),

$$RMS = \sqrt{\sum_i^N \frac{(E_{Bi} - E_{Bi}^{EXP})^2}{N}}. \quad (2)$$

Model koji najbolje reproducira sve eksperimentalne podatke energija vezanja jest HFB-31 s RMS odstupanjem od 0.561 MeV.¹⁵

Posljednjih godina, neuralne mreže (ANN - eng. *artificial neural network*) postale su veoma popularno rješenje traženja uzoraka u golemim količinama podataka. Pronašle su svoje mjesto u podatkovnoj znanosti (eng. *data science*), primjenjivane su u biologiji, kemiji, a sve više i u nuklearnoj fizici. Neuralne mreže i slične tehnike strojnog učenja pokazale su se korisnim alatom za modeliranje globalnih svojstava atomskih jezgara s obzirom na veliku količinu dostupnih eksperimentalnih podataka. ANNovi su iskorišteni za računanje vremena β -raspada.⁵ Primjenjeni su u modeliranju kinetike fisij-skih reaktora¹⁰ i kontrolu plazme u fuzijskim reaktorima.

S prikladno odabranim ulaznim parametrima neuronska mreža s unaprijednim prijenosom i propagacijom unatrag (eng. *feedforward backpropagation*) je u stanju naučiti iz dostupnih podataka i predviđati svojstva za nove nuklide. Predviđanja dobro naučenih ANNa su bila usporediva s rezultatima tradicionalnih mikroskopskih i fenomenoloških modela.

Strojno učenje je jedan vid umjetne inteligencije pri kojem računalo prolazeći kroz skup podataka za koje je poznat rezultat pokušava naučiti uzorke ulaznog skupa kako bi se što bolje reproducirali očekivani rezultati. Upravo zbog toga ANN su veoma obećavajuće u nuklearnoj fizici jer postoji mogućnost da dobro istrenirana mreža ima prediktivne mogućnosti koje pokrivaju cijelu mapu nuklida. ANN se sastoji od neurona podjeljenih u slojeve koji

su međusobno povezani, a informacije teku samo unaprijed. Ulazni i izlazni slojevi su obavezni, a između njih se može nalaziti, po potrebi, proizvoljan broj skrivenih slojeva s jednako proizvoljnim brojem neurona. Mreže s više od jednog skrivenog sloja nazivaju se duboke neuralne mreže i s njma se asocira pojam dubokog učenja (eng. *deep learning*).

Podaci idu u ulazni sloj, a aktivnosti neurona u sljedećim slojevima se ažuriraju redom jedan po jedan. Nakon što je ANN inicijaliziran s hiperparametrima (broj ulaza, slojeva, neurona...), ponašanje istog je potpuno određeno jačinama veza između neurona koje su na početku nasumično postavljene. Kako se mreža trenira - izlaže podacima - parametri veza se mijenjaju tako da se minimizira COST funkcija, najčešće RMS.

ANN je nelinearna funkcija koja mapira ulazne podatke i parametre kroz slojeve linearnih kombinacija - neurona. Za mrežu s jednim skrivenim slojem funkcija je dana kao

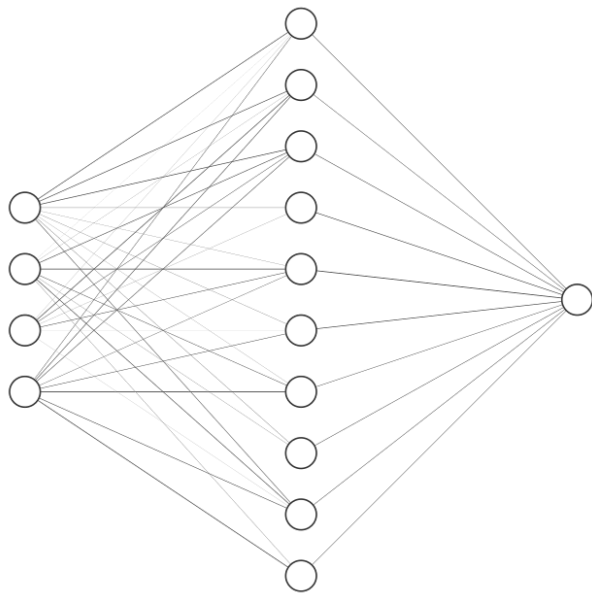
$$f(x) = \alpha + \sum_n^N \beta_n \phi(\gamma_n + \sum_m \delta_{nm} x_n). \quad (3)$$

N je broj skrivenih neurona, $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ su parametri modela koje treniramo, $\phi()$ je aktivacijska funkcija neurona, njena vrijednost govori mreži je li neuron u aktivnom stanju ili ne. Broj parametara veza jedna je od glavnih značajki dizajna neuralne mreže i ključan je za njenu uspješnost. Za mrežu s L skrivenih slojeva po N neurona, s I ulaznih vrijednosti i O izlaznih imamo ukupno P parametara,

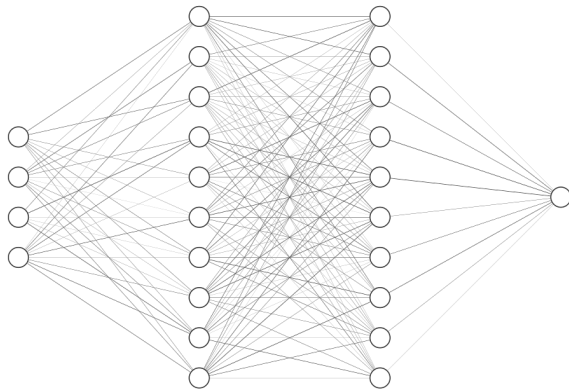
$$P = (1 + I) * N + (N(N + 1))^{L-1} + (N + 1) * O. \quad (4)$$

Za ANN na slici 3 imamo ukupno 61 parametar koje treba treniranjem ugoditi podacima. Kada bismo dodali još jedan skriveni sloj, u mrežu bismo dodali još 110 novih veza, i skoro utrostručili broj parametara koje treba namjestiti.

S obzirom da je skup podataka s kojim treniramo mrežu reda veličine par stotina jezgara, besmisleno je imati mrežu s par stotina parametara. Dodavanjem više neurona povećavamo vrijeme treniranja mreže bez ikakvog dobitka na njenoj učinkovitosti. Plitke ANN lakše su za dizajniranje i istrenirati, prikladne su za rad s manje dostupnih podataka. Duboke mreže mogu modelirati složenije funkcije i tražiti uzorke u podacima na više načina istovremeno te bolje generaliziraju, no imaju problem koji se javlja kada istrenirana mreža zapamti uzorke prisutne u skupu za treniranje i nema nikakvu moć predviđanja dalje od njega (eng. *overfitting*). Isti problem se javlja i ako ANN predugo treniramo s istim podacima. Suprotnu situaciju imamo kada mreža nije dovoljno kompleksna da modelira funkciju ili je ne treniramo dovoljno dugo (eng. *underfitting*). Razuman kompromis između kompleksnosti mreže i vremena treniranja rezultira najboljim slaganjem predviđanja neuralne mreže s podacima.



(a) ANN (4-10-1)



(b) ANN (4-10-10-1)

Slika 3. Shematski prikaz neuralne mreže s 4 neurona u ulaznom, 10 u skrivenom(a) i 10 u dva skrivena sloja (b) te 1 u izlaznom sloju, debljina linije koja spaja neurone predstavlja jačinu veze.

Standardni algoritam za treniranje zove se eng. *“vanilla backpropagation”*. On optimizira traženje minimuma prvim derivacijama. U drugim derivacijama sadržano je još više informacija te je u principu moguće minimizirati funkciju ranije, no u više dimenzija račun viših derivacija je zahtjevniji. Adam algoritam aproksimira druge derivacije i mnogo je brži za optimiziranje neuralnih mreža.¹⁷

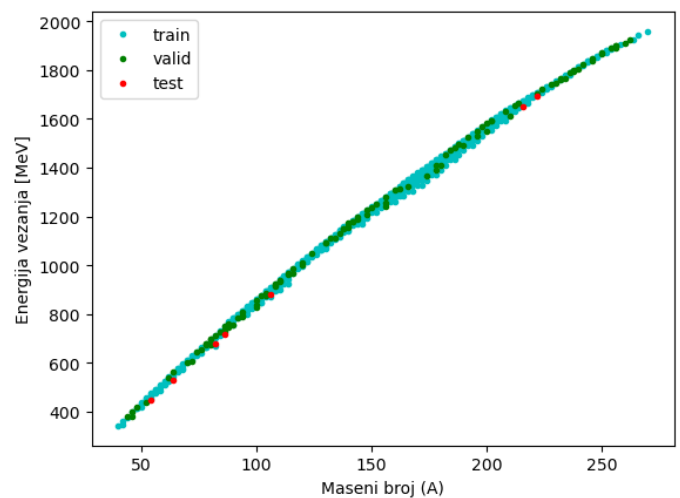
II. METODA

Skup za treniranje sastoji se od energija vezanja jezgara iz baze podataka AME2003⁷. Podijeljen je na dva djela (trening podaci i validacijski podaci) nasumičnim odabirom u omjeru 80% : 20%. Testni skup podataka su jezgre dodane u AME2016 u odnosu na AME2003.

Trening skup se koristi za učenje ANNa i ugođavanje parametara veza između neurona tako da se minimizira RMS s validacijskim skupom. Nakon treniranja mreže koristimo novi skup podataka, koji ANN nije susreo, kao skup za testiranja kako bismo ocijenili učinkovitost svježih naučenih neuralnih mreža.

Energije vezanja za mikroskopske modele s realističnim energijskim funkcionalima (EDF - eng. *energy density functional*) - SKM* i relativističke EDF - DD-PC1 preuzete su iz baze podataka nuklearnih masa MassExplorer¹⁸. Podaci za HFB-24 preuzeti su s javnog GitHub repozitorija objavljenog znanstvenog rada slične tematike¹⁹.

Ograničavamo model koji ANN uči na parno-parne jezgre teže od $Z = 20$ radi usporedbe s drugim metodama. Sveukupno u skupovima su podaci za 575 atomskih jezgara - slika 4.



Slika 4. Energija vezanja za sve atomske jezgre korištene u treniranju neuralnih mreža. Skup za testiranje označen je crvenom bojom i u njemu su jezgre dodane u bazu podataka AME2016 poslije 2003.

Neuralna mreža izvedena je u programskom jeziku Python korštenjem Alfabetovog open source paketa umjetne inteligencije za strojno učenje TensorFlow uz Keras API za duboko učenje.³ Generalno koristimo Adam algoritam za treniranje, RMS kao COST funkciju te tanh kao aktivacijsku funkciju neurona. Kako bi se dobila mreža koja najbolje modelira podatke, isprobane su različite kombinacije hiperparametara ANNa (stopa učenja, broj neurona, broj epoha). Stopa učenja (eng. *learning rate*) je hiperparametar neuronske mreže u rasponu od 0 do 1. Vrijednost stope učenja utječe na iznos promjene parametara veza među neuronima prilikom svakog ažuriranja. Broj epoha definira koliko će puta algoritam za treniranje mreže iskoristiti cijeli skup podataka, odnosno koliko će puta podaci proći kroz treniranje. Treniranje neuralnih mreža podrazumjeva velike vrijednosti broja epoha, od par tisuća do nekoliko stotina tisuća. Jasno je da će treniranje ANNa biti duže za

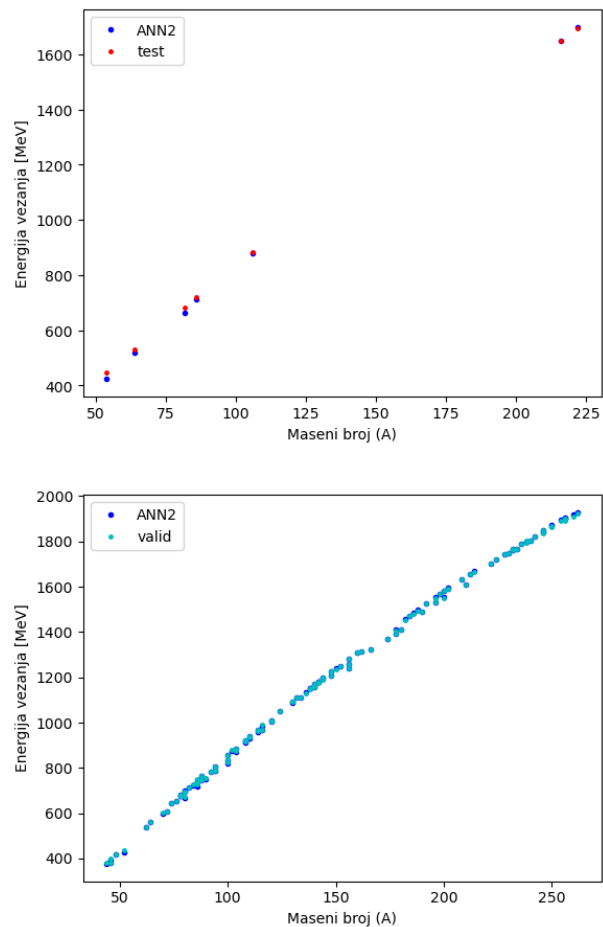
više epoha. Prilikom treninga ne koriste se svi podaci odjednom, već se skup za treniranje podjeli u serije (eng. *batch*). Veličina serije određuje koliko je algoritmu za trening potrebno iteracija da završi jednu epohu.

Za početak pokušavamo trenirati mrežu s dva ulazna parametra, broj protona i broj neutrona, kao minimalni skup vrijednosti o kojoj ovisi energija vezanja -ANN2. U suštini i dobro istrenirana neuralna mreža ne zna ništa o fizici koju modelira, i dok ona iz uzoraka u eksperimentalnim podacima može naslutiti postojanje, npr. strukture ljusaka, ona ne prepoznaje njihovu relevantnost. Zbog toga u drugom koraku model proširimo s više ulaznih parametara. Osim broja protona i neutrona, ANN sada prima još dva parametra koji su mjera koliko protona te neutrona nedostaje do punih ljusaka. Na ovaj način smo obogatili mrežu sa znanjem nuklearne fizike i strukture ljusaka. Iako su podaci za treniranje jednaki, dva dodatna ulaza promjeniti će kako, sada nova, mreža uči -ANN4.

Svojstva istrenirane mreže ocjenjujemo RMS odstupanjem predviđenih vrijednosti od eksperimentalnih vrijednosti skupa za testiranje, jednadžba (2). Na isti način uspoređujemo učinkovitost strojnog učenja i tradicionalnih metoda, uspoređujući njihove RMS vrijednosti.

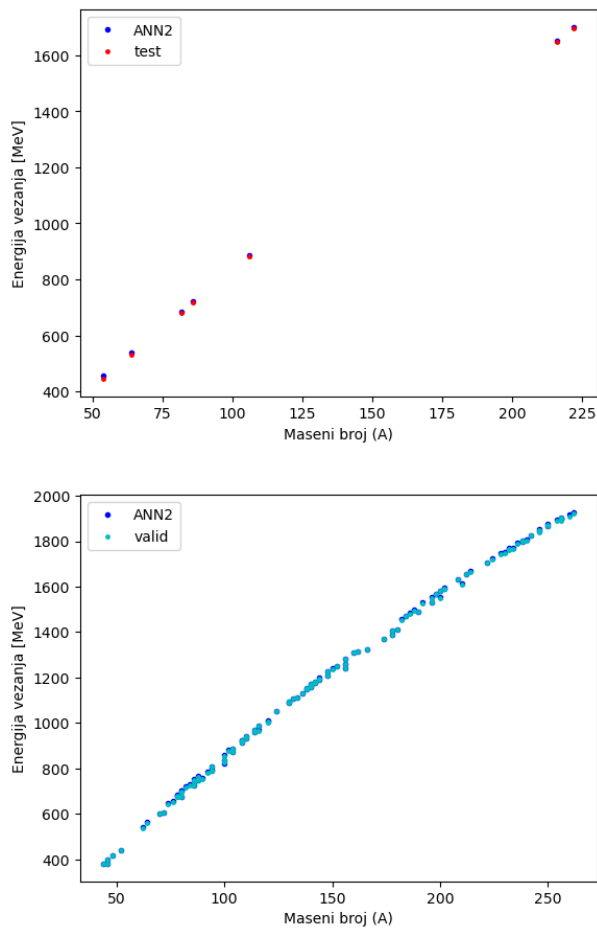
III. REZULTATI I DISKUSIJA

Za potrebe ovog rada istrenirano je oko 200 neuronskih mreža s različitim kombinacijama hiperparametara, kako bi se empirijski odredila ona koja najbolje reproducira eksperimentalne podatke energija vezanja atomskih jezgara. U oba slučaja, ANN2 i ANN4, trenirali smo mreže s između 16 i 132 neurona u skrivenom sloju, te su granice uzete kao razumna pretpostavka s obzirom na dostupnu količinu podataka²⁰. Trenirali smo u serijama od 35 što znači da se po epohi algoritam iterirao 13 puta. Početna stopa učenja (eng. *learning rate*) postavljena je na 0.0001 što algoritmu daje dosta fleksibilnosti pri učenju, s obzirom da se parametri iz epohe u epohu ne mjenjaju jako. Budući da se parametri sporo ažuriraju, za početak je postavljen broj epoha od 100000. Rezultati treniranja prikazani su na slici 5.



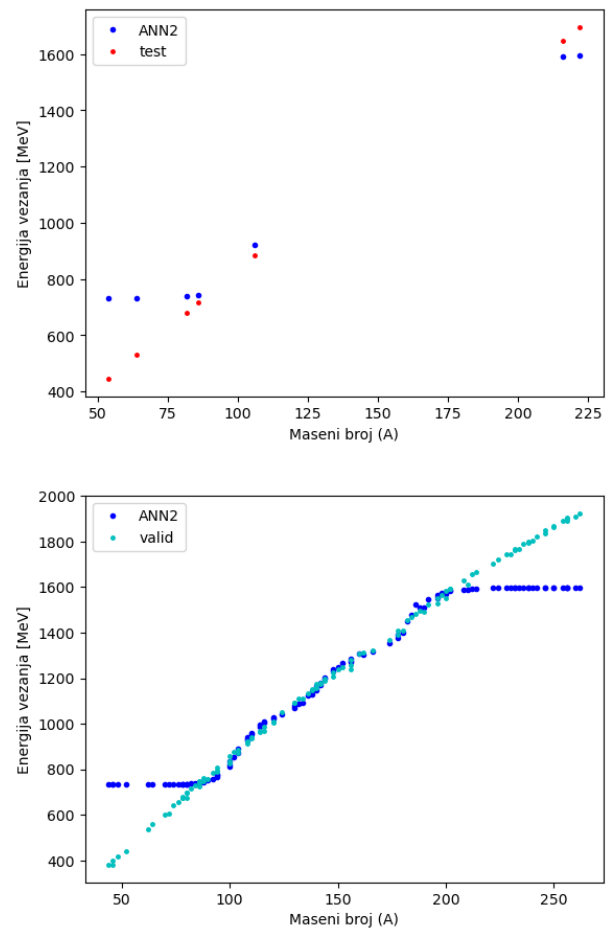
Slika 5. Grafički prikaz predviđanja neuronske mreže ANN2 s 72 skrivena neurona, trenirane kroz 100000 epoha uz stopu učenja 0.0001. Panel gore predstavlja usporedbu skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 11.832 MeV. Panel dolje predstavlja usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže uz RMS = 2.967 MeV.

Pokazalo se da mreže trenirane s niskom stopom učenja nisu savladale podatke te nisu bile korisne. Mreže s velikom brojem epoha > 50000 zapamtile su podatke, ali nisu imale prediktivna svojstva, što se vidi na slici 5. Na gornjem panelu je prikazan skup za testiranje i rezultati modela neuronske mreže te vidimo da je svaka točka promašena. Donji panel prikazuje da predviđanja mreže prate trend podataka, ali uz primjetna odstupanja. Bolje rezultate postizemo povećavanjem stope učenja te vrijednost postavljamo na 0.01. Ove mreže uče dovoljno brzo da treniranje kroz veliki broj epoha ima negativan utjecaj. Jako velike i jako male mreže trenirane kroz više desetaka tisuća epoha daju loše rezultate.



Slika 6. Grafički prikaz predviđanja neuronskih mreža ANN2 s 132 skrivena neurona, trenirane kroz 50000 epoha uz stopu učenja 0.01. Panel gore usporedba je skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 5.046 MeV. Donji panel predstavlja usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 2.467 MeV.

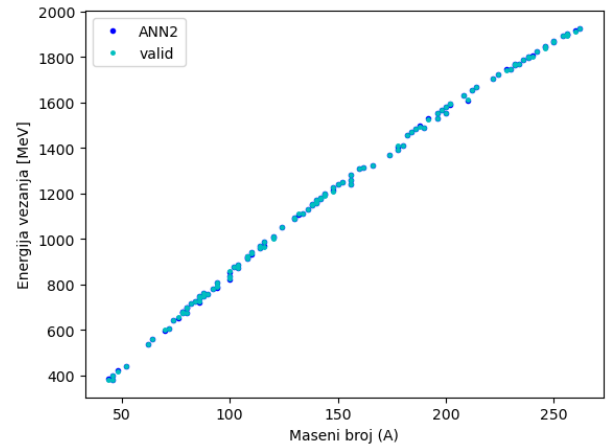
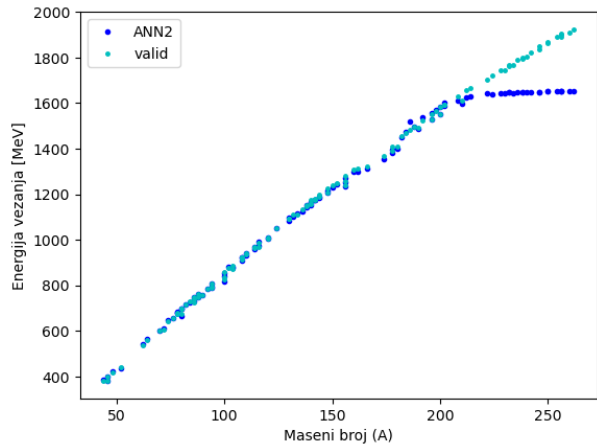
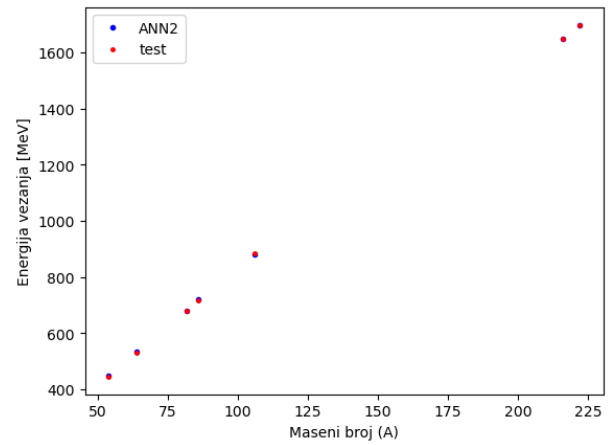
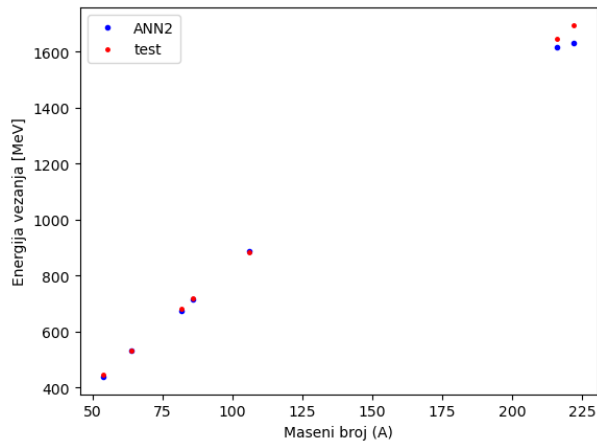
Velike mreže s više od 100 neurona prevelike su da bi naučile generalizirati. Primjer je prikazan na slici 6. U ovom slučaju došlo je do *overfita* podataka. Male mreže s manje od 30 neurona prejednostavne su da bi uspješno modelirale kompleksnije funkcije i zbog toga nisu korisne. Primjer *underfit* mreže prikazan je na slici 7. Vidi se da trenirana mreža nije uspjela pratiti eksperimentalne podatke s dva "repa" za lake i teške jezgre. Predviđanja nekih manjih mreža odgovaraju samo dijelovima mape nuklida, dok druge uopće ne mogu postići slaganje čak ni s puno treninga.



Slika 7. Grafički prikaz predviđanja neuronskih mreža ANN2 s 16 skrivena neurona, trenirane kroz 20000 epoha uz stopu učenja 0.01. Panel gore prikazuje usporedbu skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 142.326 MeV. Donji panel usporedba je skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 111.267 MeV.

Testiranjem mnogih konfiguracija pokazalo se da su mreže srednje veličine, s oko 70 neurona, idealne, odnosno da daju najbolje rezultate s obzirom na ulazne podatke.

Kratko trenirane mreže, opet, nemaju dobre prediktivne mogućnosti jer nemaju dovoljno vremena da pronađu uzorke među podacima i ne mogu modelirati energije vezanja za sve atomske jezgre. U najboljim slučajevima to uspijevaju za lakše jezgre, jedan primjer tako istrenirane mreže prikazan je na slici 8. Ovdje vidimo razumno slaganje za lake jezgre, no već za $A > 100$ predviđanja ANN2 se ne slažu s podacima, što je pogotovo vidljivo za teže jezgre $A > 200$.



Slika 8. Grafički prikaz predviđanja neuronskih mreža ANN2 s 64 skrivena neurona, trenirane kroz 2000 epoha uz stopu učenja 0.01. Panel gore predstavlja usporedbu skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 27.44 MeV. Panel dolje predstavlja usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 56.755 MeV.

Pregled rezultata odabranih istreniranih, mreža koje nisu zadovoljavajuće, prikazan je u tablici I.

epohe	neuroni	stopa učenja	RMS(test)	RMS(train)
100 000	72	0.0001	11.832 MeV	2.967 MeV
50 000	132	0.01	5.046 MeV	2.467 MeV
50 000	24	0.01	24.96 MeV	9.758 MeV
20 000	16	0.01	142.326 MeV	111.267 MeV
2 000	64	0.01	27.44 MeV	56.755 MeV

Tablica I. Tablica odabranih istreniranih ANN2 s različitim hiperparametrima i njihovim svojstvima.

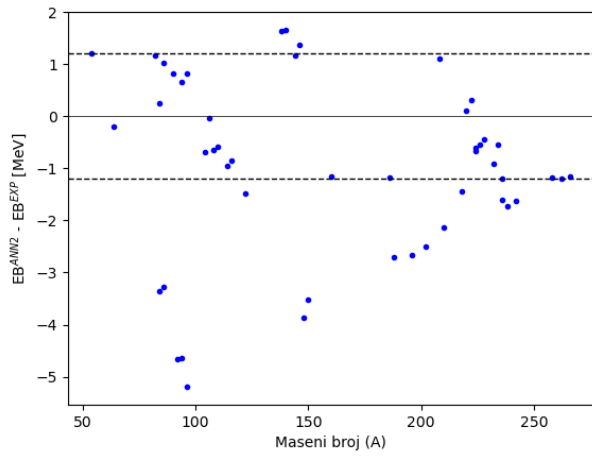
Najbolji rezultat za ANN2 postignut je za neuronsku mrežu s 72 neurona u skrivenom sloju, koja je trenirana 10000 epoha pri stopi učenja od 0.01. Predviđanja mreže prikazana su na slici 9. Mreža dovoljno dugo uči iz podataka te je dovoljno složena da dobro modelira energije vezanja. Iz skupa za testiranje vidimo da mreža može generalizirati naučeno na nove podatke (RMS = 1.274 MeV).

Slika 9. Grafički prikaz predviđanja neuronske mreže ANN2 s 72 skrivena neurona, trenirane kroz 10000 epoha uz stopu učenja 0.01. Gornji panel predstavlja usporedbu skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže RMS = 1.313 MeV. Donji panel predstavlja usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 1.234 MeV.

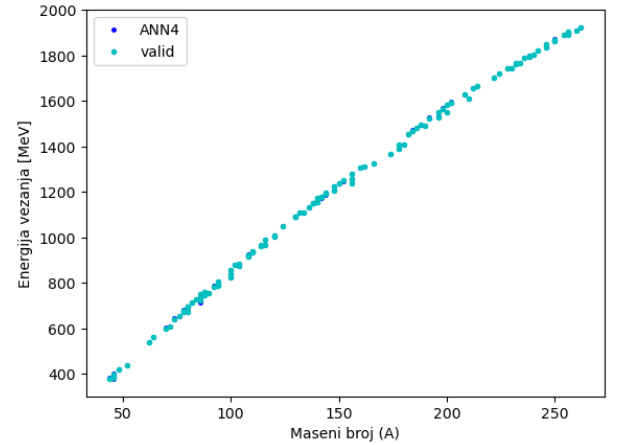
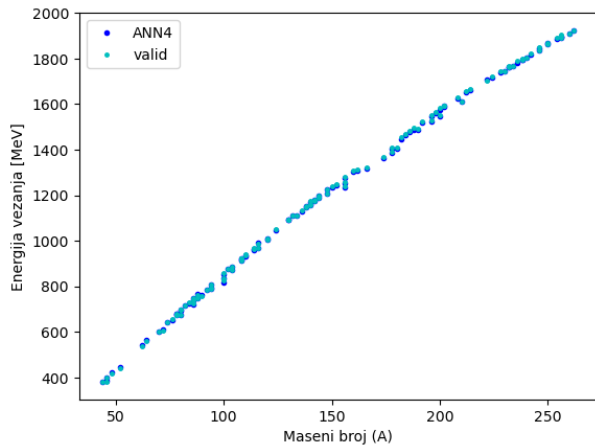
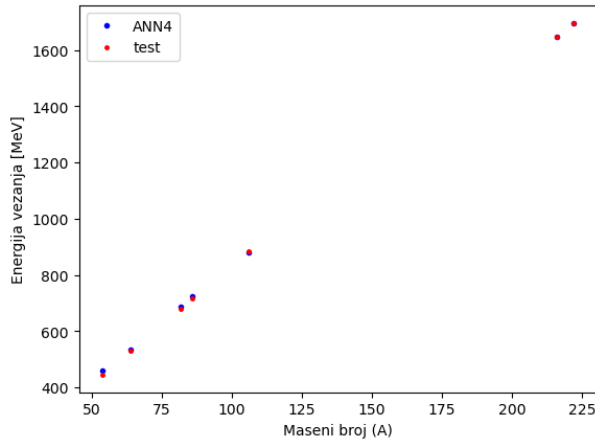
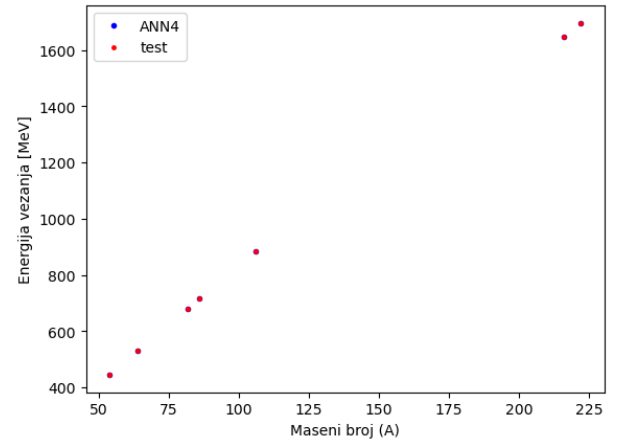
Na slici 10 vidimo grafički prikaz razlika vrijednosti energija vezanja dobivenih istreniranim ANN2 modelom i poznatih eksperimentalnih podataka za 50 nasumično odabranih jezgara iz ukupnog skupa podataka. Vidi se da većina upada u interval RMSa najbolje istrenirane ANN2 mreže.

Budući da se za neuronsku mrežu s dva ulazna parametra (ANN2) najbolje pokazao broj skrivenih neurona 72 koji rezultira s 289 veza, odnosno parametara koje valja odrediti treniranjem, pretpostavka je da proširenu mrežu s još dva ulazna parametra (ANN4) konstruiramo tako da broj veza ostane otprilike jednak. Ako za ANN4 koristimo 48 skrivenih neurona, imamo jednaki broj parametara za ugađanje. Ako sve ostale hiperparametre zadržimo i istreniramo novu mrežu dobijemo daleko lošiji rezultat od ANN2 (RMS = 5.79 MeV). Rezultat je prikazan na slici 11.

S obzirom da ANN4 ima više ulaznih podataka za učiti isplati se povećati stopu učenja mreže više od 0.01. S višom stopom učenja rasla je i učinkovitost mreže te je



Slika 10. Razlika energija vezanja dobivenih ANN2 mrežom i eksperimentalno mjenjenih podataka, za nasumično odabrane atomske jezgre. Crtkane linije na grafu označavaju odstupanje energije vezanja za 1.2 MeV.

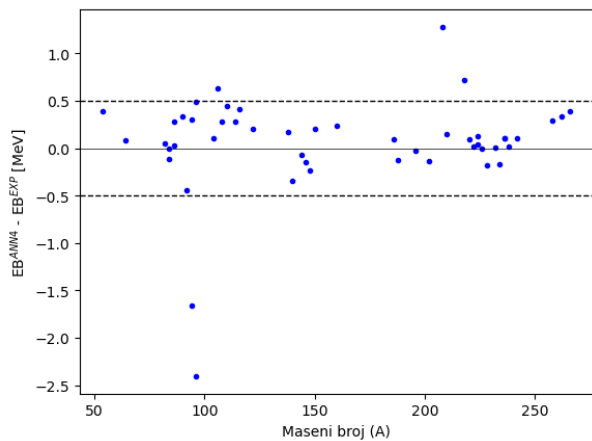


Slika 11. Grafički prikaz predviđanja neuronske mreže ANN4 s 48 skrivena neurona, trenirane kroz 10000 epoha uz stopu učenja 0.01. Panel gore predstavlja usporedbu skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 6.104 MeV. Na donjem panelu vidi se usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 5.458 MeV.

Slika 12. Grafički prikaz predviđanja neuronske mreže ANN4 s 96 skrivenih neurona, trenirane kroz 7500 epoha uz stopu učenja 0.05. Na gornjem panelu prikazana je usporedba skupa za testiranje i predviđanja neuronske mreže, RMS = 0.576 MeV. Donji panel prikazuje usporedbu skupa za validaciju i predviđanja neuronske mreže, RMS = 0.592 MeV.

bilo potrebno i manje epoha da se mreža istrenira uz dobre rezultate, usporedive s ANN2 pri stopi učenja od 0.04.

Daljnijim povećanjem stope učenja na 0.05 postignuti su najbolji rezultati s 96 skrivenih neurona i treningom kroz 7500 epoha. Poboljšana ANN4 neuronska mreža sposobna je učiti brže od ANN2 uz puno bolje slaganje s eksperimentalnim podacima, bez gubitka moći generaliziranja na novim podacima. Predviđanja mreže prikazana su na slici 12 (RMS = 0.584 MeV). ANN2 s istim hiperparametrima generalizira puno lošije uz RMS = 2.948 MeV.



Slika 13. Razlika energija vezanja dobivenih ANN4 mrežom i eksperimentalno mjerenih podataka, za nasumično odabrane atomske jezgre. Crtkane linije označavaju odstupanje energije vezanja od 0.5 MeV.

Slika 13 grafički prikazuje razliku energije vezanja dobivene neuronskom mrežom ANN4 i energija iz eksperimentalnih baza podataka. 50 atomskih jezgara je nasumično odabrano. Vidljivo je da se velika većina točaka nalazi unutar 0.5 MeV intervala, na grafu označenog crtkanim linijama.

MODEL	RMS [MeV]
ANN2	1.274
ANN4	0.584
SKM* ¹⁴	1.055
DD-PC1 ¹²	1.009
HFB-24 ¹⁶	0.377

Tablica II. Usporedba RMSa istreniranih neuronskih mreža s drugim teorijskim modelima za isti skup parno-parnih atomskih jezgara iz AME2016 baze nuklearnih podataka.

IV. ZAKLJUČAK

S obzirom na rezultate dobivene treniranjem neuronskih mreža jasno je da je strojno učenje vrlo perspektivno područje istraživanja računalne fizike i da su ANNovi primjenjivi u nuklearnoj fizici. S trenutno razvijenom teh-

nologijom strojno je učenje u stanju konkurirati tradicionalnim globalnim modelima energija vezanja. Mreže konstruirane u ovome radu koristile su 2 i 4 ulazna parametra, no dodavanjem još, dobro odabranih parametara, poboljšala bi se prediktivna svojstva. Konkretno smo za treniranje mreža koristili samo podatke o energijama vezanja parno-parnih atomskih jezgara. Proširivanjem modela na sve jezgre bilo bi poželjno dodati parametre koji uključuju efekte sparivanja, deformacije jezgre i druge. U model bi trebalo uključiti različite magične brojeve za protone i neutrone kada se radi o superteškim jezgrama bogatim neutronima. Promatranjem utjecaja odabira dodatnih parametara na učinkovitost ANNa, možemo utvrditi koliko su te veličine relevantne za nuklearne interakcije. Uključivanjem svih eksperimentalno opisanih atomskih jezgara povećao bi skup podataka za treniranje što bi omogućilo korištenje dubokih neuronskih mreža. Duboko učenje moglo bi dati uvide u do sada nepoznate čimbenike nuklearne sile što bi pospješilo razvoj novih i boljih nuklearnih modela. Modeli bazirani na neuronskim mrežama, koji dosljedno opisuju atomske jezgre u nepoznatim dijelovima mape nuklida, mogli bi biti korisni u modeliranju astrofizičkih procesa i simulaciji eksperimenata. Iako istrenirane mreže ANN2 i ANN4 nisu reproducirale mjerene vrijednosti energija vezanja jednako dobro kao HFB-24 metoda model zasnovan na efektivnoj Skyrme interakciji (vidi tablicu II za usporedbu RMSa modela strojnog učenja i tradicionalnih modela), dobro istrenirana neuronska mreža puno bolje ekstrapolira podatke atomskih jezgara za koje nemamo eksperimentalne podatke, dok modeli srednjeg polja mogu divergirati u neistraženom području.

Na kraju, bitno je spomenuti da, iako se u ovom radu strojno učenje koristilo za modeliranje energija vezanja atomskih jezgara, princip konstrukcije i treniranja neuronskih mreža jednak je za modeliranje drugih opservabli. Uz dovoljno veliki skup podataka za treniranje i inteligentno konstruiranu mrežu s prigodnim odabirom ulaznih parametara rezultat će biti dobro istrenirana mreža, u stanju da predviđa sva nuklearna svojstva od interesa.

V. ZAHVALE

Hvala mentoru, prof. dr. sc. Nilsu Paaru na prijedlogu ideje za ovaj seminar i pomoći oko njegove realizacije.

¹ Kenneth S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*, John Wiley & Sons, New York, USA, 1988.

² Carlos A. Bertulan, *Nuclear Physics in a Nutshell*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, USA, 2007.

³ Ivan Vasilev, Daniel Slater, Gianmario Spacagna, Peter Roelants, Valentino Zocca, *Python Deep Learning: Exploring deep learning techniques, neural network architectures and GANs with PyTorch, Keras and TensorFlow*, Packt Publishing, 2019.

⁴ William F. Bleam, *Soil and Environmental Chemistry*, Academic Press, Burlington, MA, USA, 2012.

⁵ Z. M. Niu, H. Z. Liang, B. H. Sun, W. H. Long, and Y. F. Niu, Predictions of nuclear β -decay half-lives with machine learning and their impact on r-process nucleosynthesis, *Phys. Rev. C* 99, 2019.

⁶ Wang, Meng, Audi, Georges, Kondev, Filip, Huang, Wenjia, Naimi, S. Xu, Xing, *The AME2016 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references*. *Chinese Physics*

- C. 41., 2017.
- ⁷ A.H. Wapstra, G. Audi, C. Thibault, The Ame2003 atomic mass evaluation: (I). Evaluation of input data, adjustment procedures, Nuclear Physics A, Volume 729, Issue 1, 2003.
 - ⁸ Oganessian, Yu. Ts.; Sobiczewski, A.; Ter-Akopian, G. M., "Superheavy nuclei: from predictions to discovery", Physica Scripta. 92, 2017.
 - ⁹ Cowan, John J.; Thielemann, Friedrich-Karl Thielemann, "R-Process Nucleosynthesis in Supernovae", Physics Today. 57, 2004.
 - ¹⁰ Walker Payne, <https://towardsdatascience.com/applying-machine-learning-and-exploratory-data-analysis-to-nuclear-reactor-kinetics-d1dae16fb081>, 2021.
 - ¹¹ J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, Steven C. Pieper, R. Schiavilla, K.E. Schmidt, and R.B. Wiringa, Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics, Rev. Mod. Phys. 87, 1067, 2015.
 - ¹² T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, P. Ring, DIRHB—A relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei, Computer Physics Communications, Volume 185, Issue 6, 2014.
 - ¹³ Petr Navratil, Ab initio no-core shell model calculations for light nuclei, arXiv:0711.2702, 2007.
 - ¹⁴ Bartel, J., Quentin, P., Brack, M., Guet, C., Håkansson, H.-B., Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces: A critical study of the SkM force, Nuclear Physics A386, 1982.
 - ¹⁵ S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. XVI. Inclusion of self-energy effects in pairing, Physical Review C 93, 2016.
 - ¹⁶ S. Goriely, R. Capote, Uncertainties of mass extrapolations in Hartree-Fock-Bogoliubov mass models, Physical Review C 89, 2014.
 - ¹⁷ Diederik P. Kingma, Jimmy Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization, arXiv:1412.6980, 2015.
 - ¹⁸ <http://massexplorer.frib.msu.edu>
 - ¹⁹ Léo Neufcourt, Yuchen Cao, Witold Nazarewicz, Frederi Viens, Bayesian approach to model-based extrapolation of nuclear observables, Physical Review C 98, 2018.
 - ²⁰ Steve Lawrence, C. Lee Giles, Ah Chung Tsoi, What Size Neural Network Gives Optimal Generalization? Convergence Properties of Backpropagation, Technical Report, Institute for Advanced Computer Studies, University of Maryland, 1996.