

深度学习驱动的原子核第一性原理研究

杨一龙

北京大学物理学院

目录

- 引言
- 深度学习驱动的变分蒙特卡洛方法： *FeynmanNet*
- 应用： ^{11}Li 中的晕结构
- 总结与展望

原子核的第一性原理研究

- 从第一性原理出发预测原子核的结构性质是核物理重要的前沿领域

Machleidt and Sammarruca, *Phys. Rep.* **137**, 104117 (2024)

► 通过核子-核子散射等实验数据确定核力

AV18、Bonn 势, ...

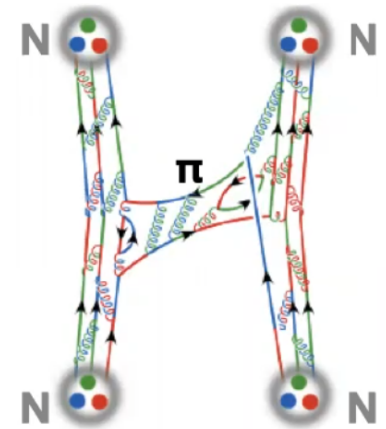
Wiringa et al., *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995)

Machleidt, *Adv. Nucl. Phys.* (1989)

手征有效场论 ...

Weinberg, *Phys. Lett. B* **251**, 288 (1990)

Weinberg, *Nucl. Phys. B* **363**, 3 (1991)

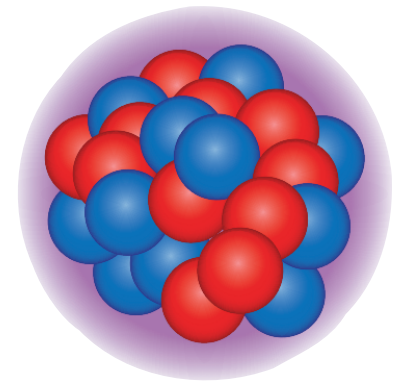


► 利用第一性原理方法求解核多体问题

结构性质: 能量、电荷半径...

散射性质: 响应函数、截面...

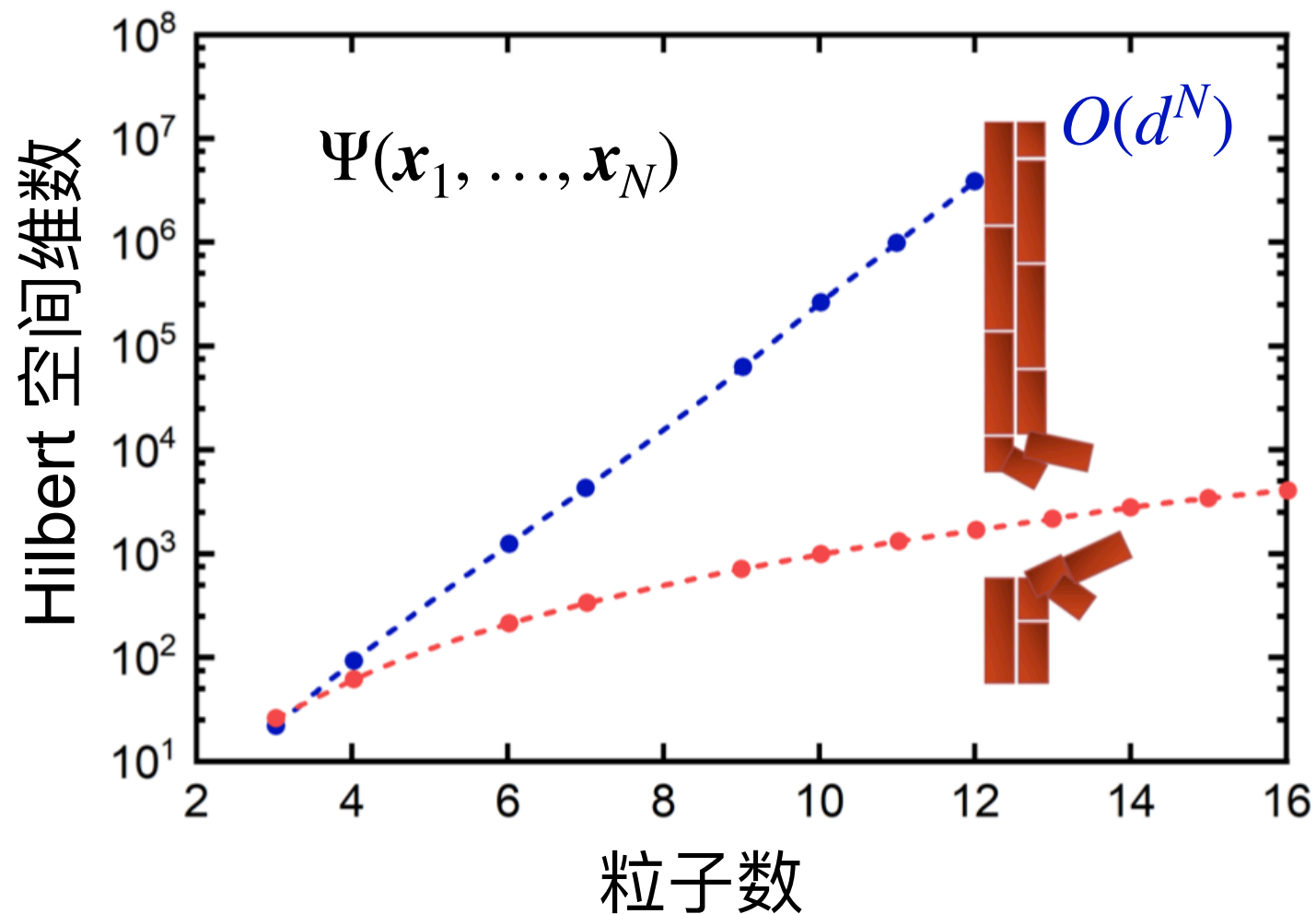
衰变性质: β 衰变、双 β 衰变...



- 由于核多体关联的复杂性, 如何提升第一性原理方法的**计算精度和效率**是该领域长期面临的核心挑战

指数墙

- 由于核子间的多体关联，严格表征量子多体波函数所需的 Hilbert 空间维度随粒子数的增加呈指数增长



- 如何**高效**地捕捉物理上最重要的 Hilbert 子空间，实现**高精度**的理论预测？

量子蒙特卡洛

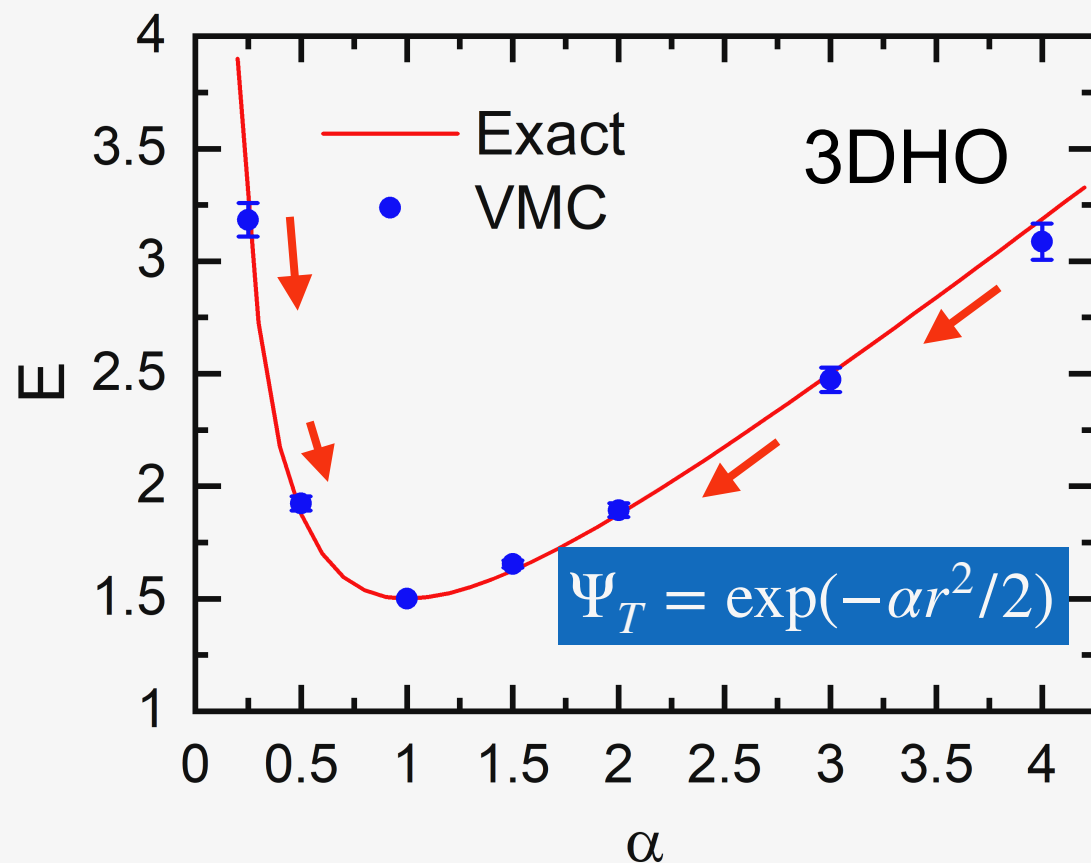
- 量子蒙特卡洛: 利用蒙特卡洛方法求解量子系统
通过随机采样**显著缓解**了“指数墙”问题

Carlson et al., Rev. Mod. Phys. 87, 1067 (2015)



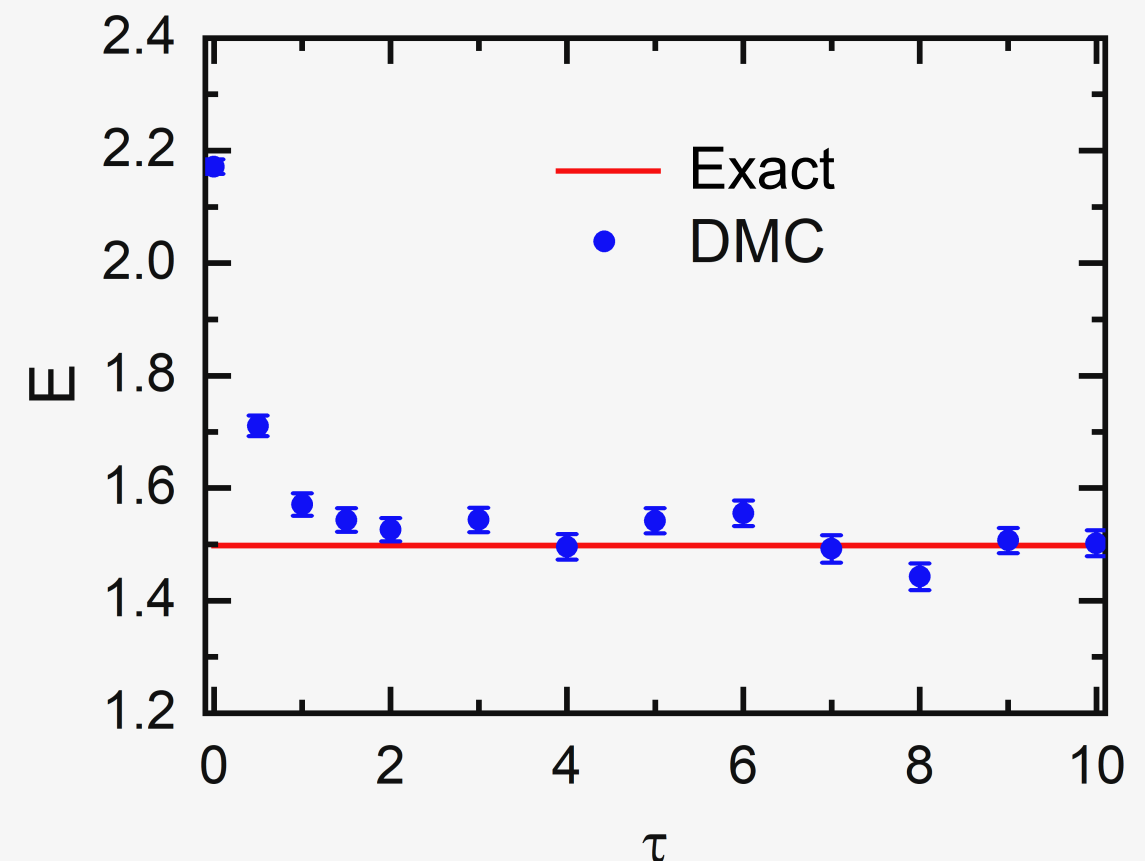
变分蒙特卡洛

$$E_0 \leq E_T = \frac{\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle}$$



扩散蒙特卡洛

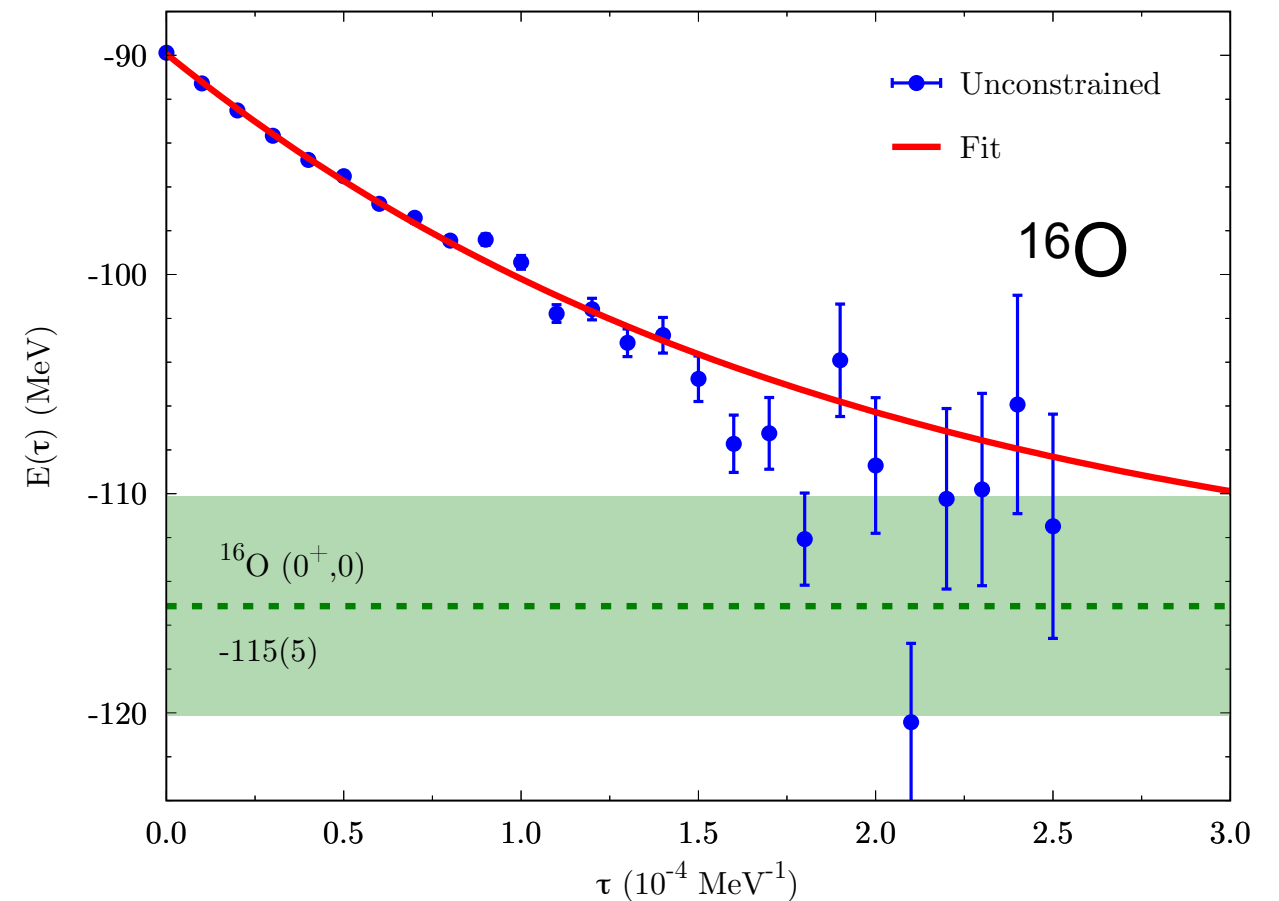
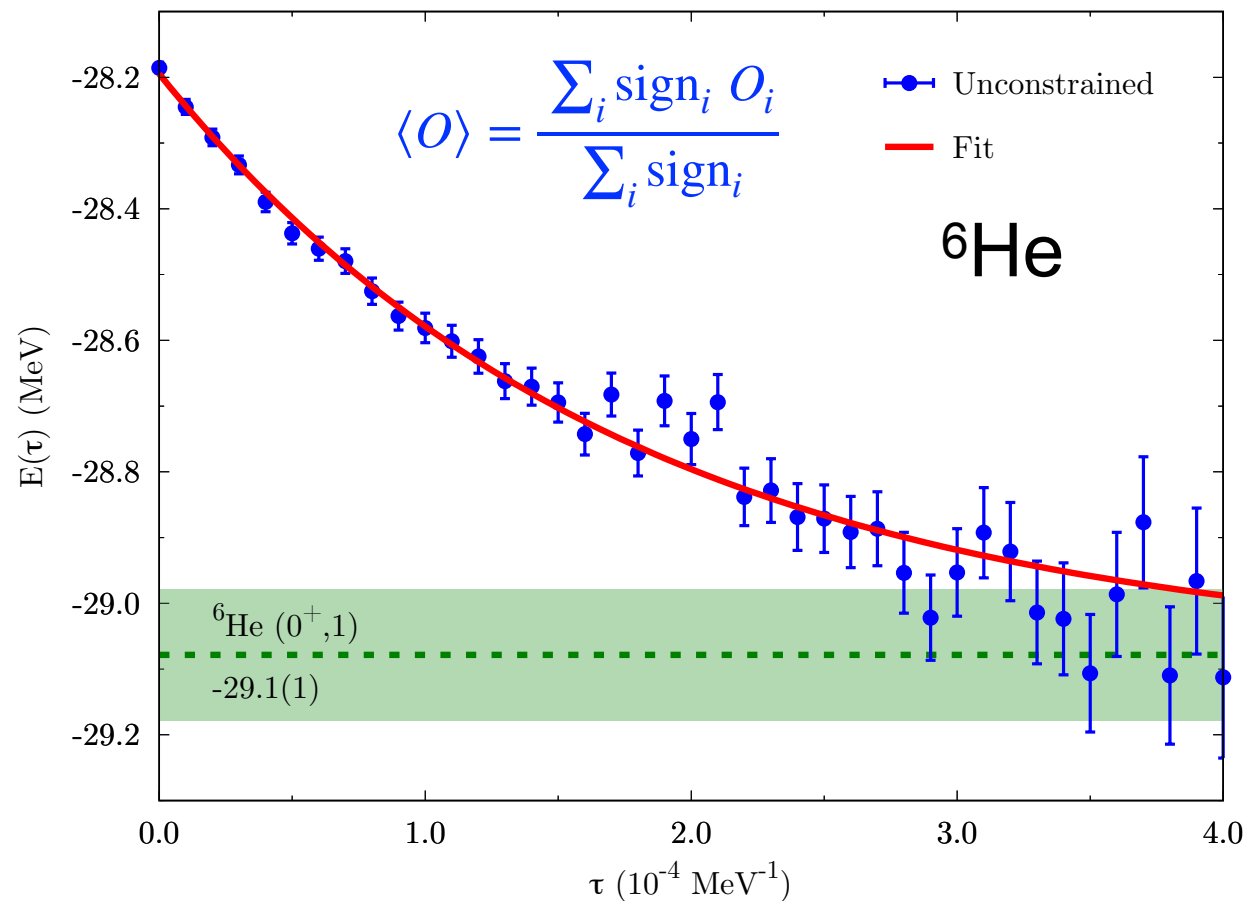
$$|\Psi_0\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-H\tau} |\Psi_T\rangle$$



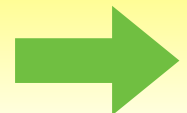
费米子符号问题

- 扩散蒙特卡洛面临费米子符号问题，信噪比随虚时间和粒子数增长指数恶化

Troyer and Wiese, Phys. Rev. Lett. 94, 170201 (2005)



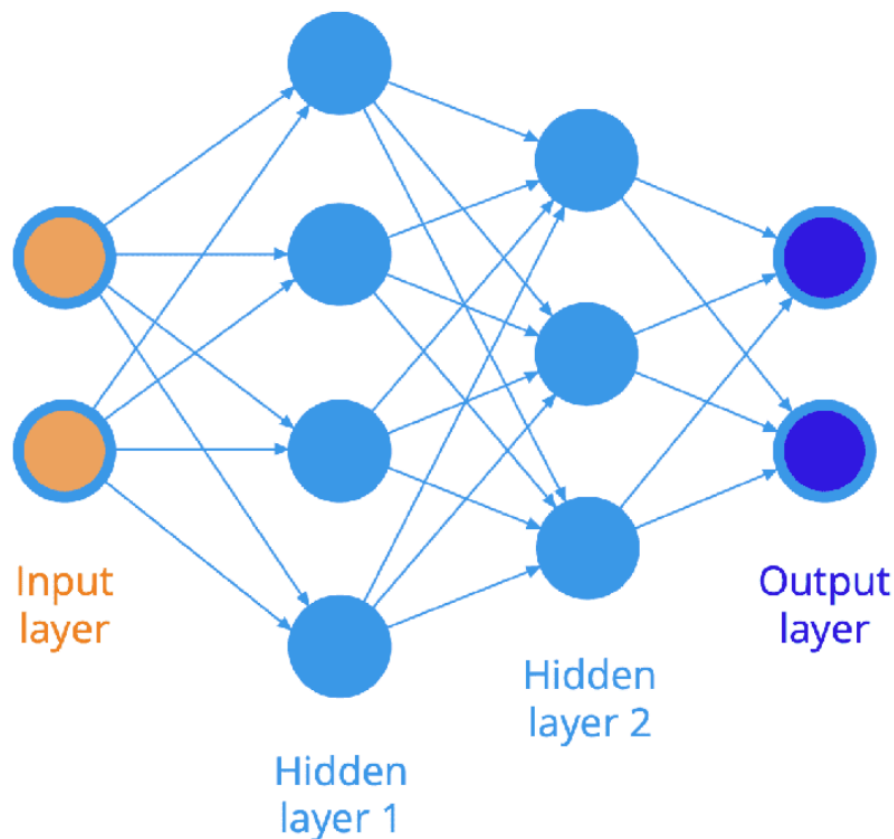
Lonardonì et al., Phys. Rev. C 97, 044318 (2018)



需要构建**精度更优且计算高效**的试探波函数

人工神经网络

- 人工神经网络具有强大的函数逼近能力



$$h^{(0)} = v$$

$$h^{(\ell)} = f_{\ell}(h^{(\ell)}) = \sigma_{\ell} \left(W^{(\ell)} h^{(\ell-1)} + b^{(\ell)} \right),$$

$\ell = 1, \dots, L$, $h^{(0)}$: 输入层, $h^{(L)}$: 输出层, L : 深度

$W^{(\ell)}, b^{(\ell)}$: 权重与偏置

σ : 非线性函数, 例如 $\tanh(x)$, $\ln(1 + e^x)$, ...

万能近似定理 Hornik et al., Neural Networks 2, 359 (1989)

理论上严格的试探波函数

一个单隐藏层的神经网络, 只需包含足够多的神经元, 便能近似任何连续函数

深度学习驱动的变分量子蒙特卡洛

Science

Current Issue

First release papers

Archive

About

Submit ma

Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks

GIUSEPPE CARLEO  AND MATTHIAS TROYER [Authors Info & Affiliations](#)

Science 355, 602 (2017)

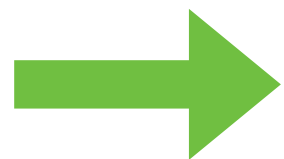
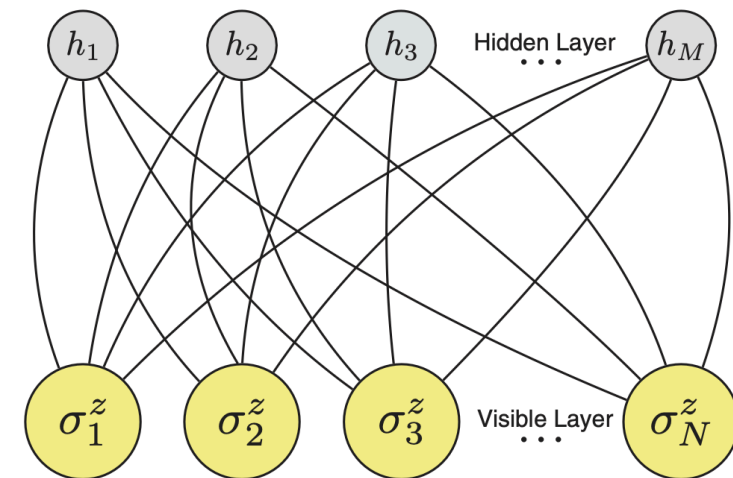


G. Carleo



M. Troyer

$$\Psi \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array} \right) =$$



第一性原理量子化学

FermiNet PauliNet ...

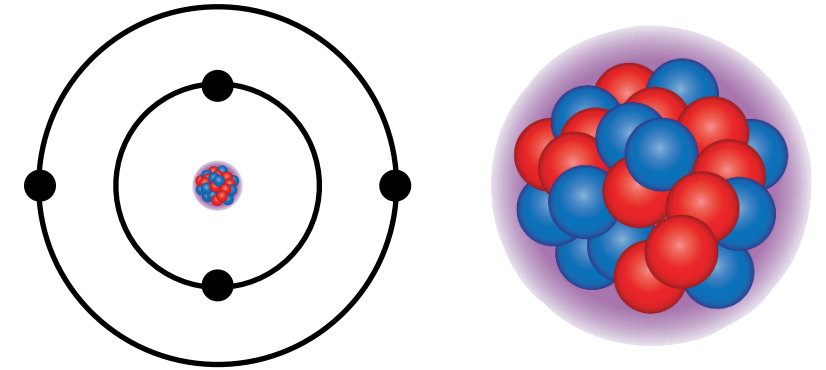
Pfau et al., Phys. Rev. Res. 2, 033429 (2020)

Hermann et al., Nat. Chem. 12, 891 (2020)

原子核的神经网络波函数

- 相较于多电子系统，原子核具有独特的复杂性

- ▶ 自束缚系统（平移不变性）
- ▶ 额外的同位旋自由度
- ▶ 核力具有非微扰性、自旋-同位旋依赖性



- 深度学习驱动的变分量子蒙特卡洛方法: *FeynmanNet*

PHYSICAL REVIEW C **107**, 034320 (2023)

Deep-neural-network approach to solving the *ab initio* nuclear structure problem

Y. L. Yang  and P. W. Zhao *

State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

目录

- 引言
- 深度学习驱动的变分蒙特卡洛方法： *FeynmanNet*
- 应用： ^{11}Li 中的晕结构
- 总结与展望

变分蒙特卡洛

- 核多体薛定谔方程

$$\left(\sum_{i=1}^A \frac{-\nabla_i^2}{2M} + \sum_{i<j} v_{ij} + \dots \right) \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = E \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) \quad \mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, s_i, t_i)$$

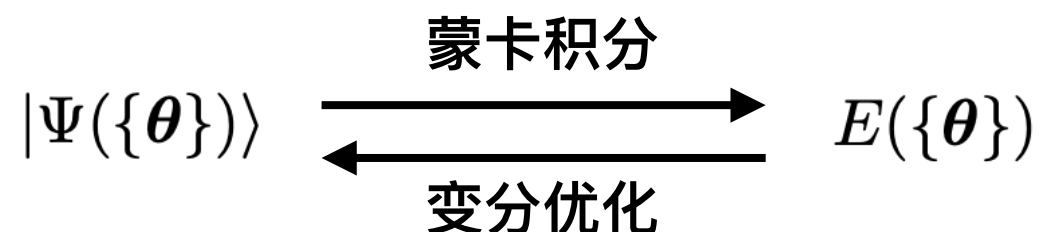
- 变分原理

$$E_0 \leq E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_{s,t} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_A \Psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) \hat{H} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)}{\sum_{s,t} \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_A |\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)|^2}$$

- 蒙特卡洛积分 N. Metropolis et. al., J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953); W. K. Hastings, Biometrika 57, 97 (1970)

$$\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \simeq \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E(\mathbf{X}^{(n)}), \quad \{\mathbf{X}^{(n)} = (\mathbf{x}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{x}_A^{(n)})\}_{n=1}^N \sim |\Psi(\mathbf{X})|^2$$

- 变分蒙特卡洛：给定**试探波函数**形式，优化其参数以最小化能量期望值

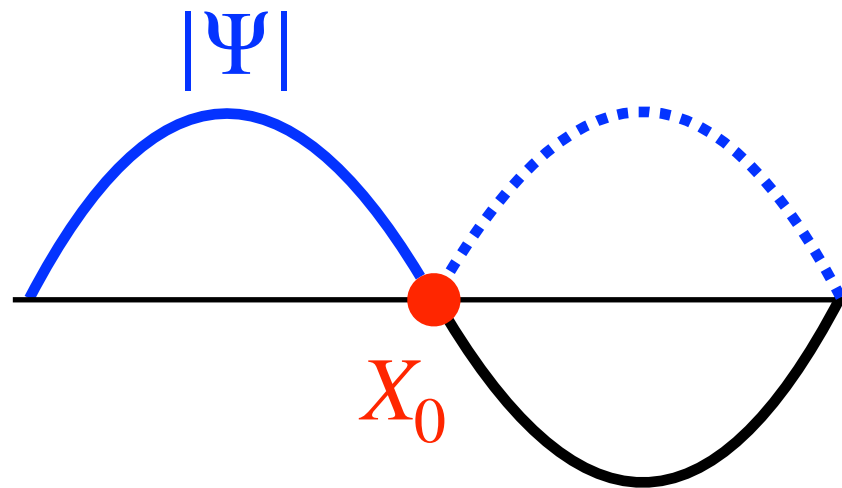


核多体波函数的性质

- 核子的交换反对称性 $\Psi(\dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots)$

- 核多体波函数 $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = |\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)| e^{i \arg \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)}$

- ▶ 振幅 $|\Psi(X)|$: 承载概率密度信息 $\rho(X) = |\Psi(X)|^2$
- ▶ 节点面 $\{X_0 : \Psi(X_0) = 0\}$: 承载波函数符号 (相位) 结构



- 最简单的费米子体系试探波函数为 Slater 行列式, 不含多体关联

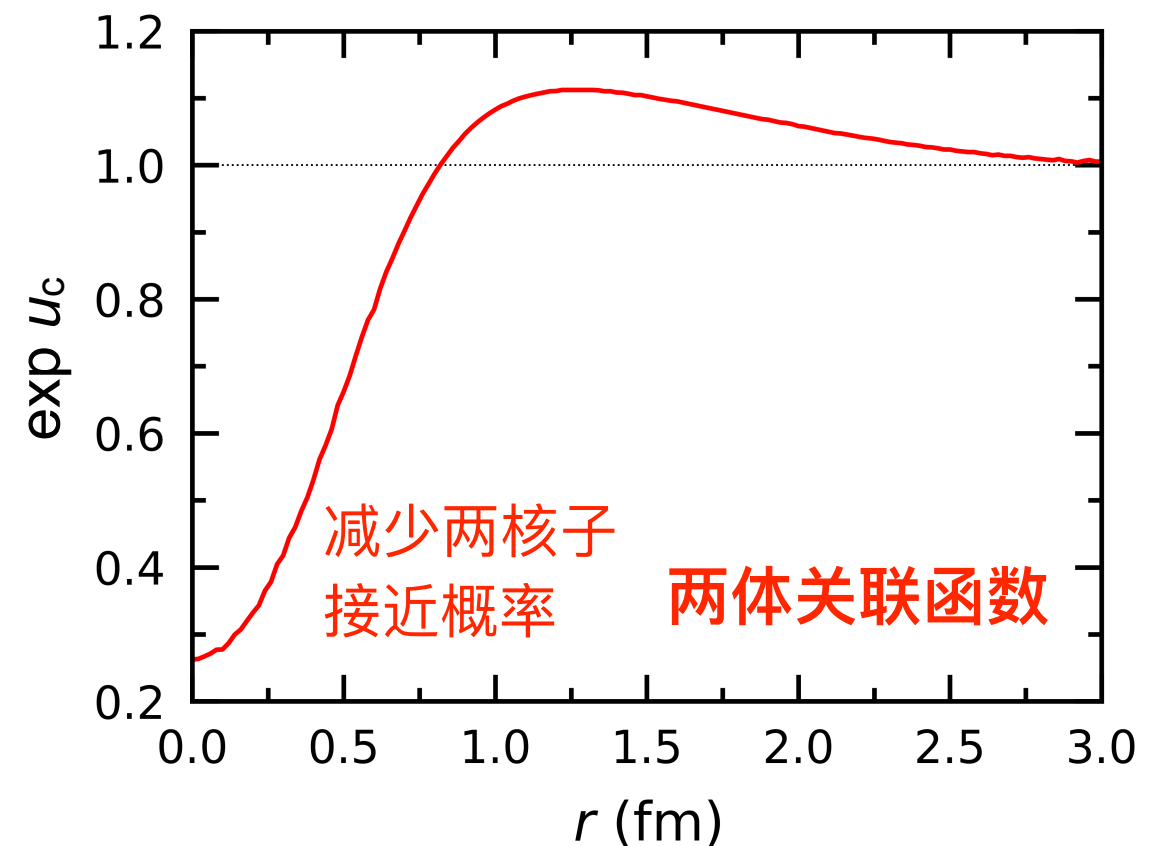
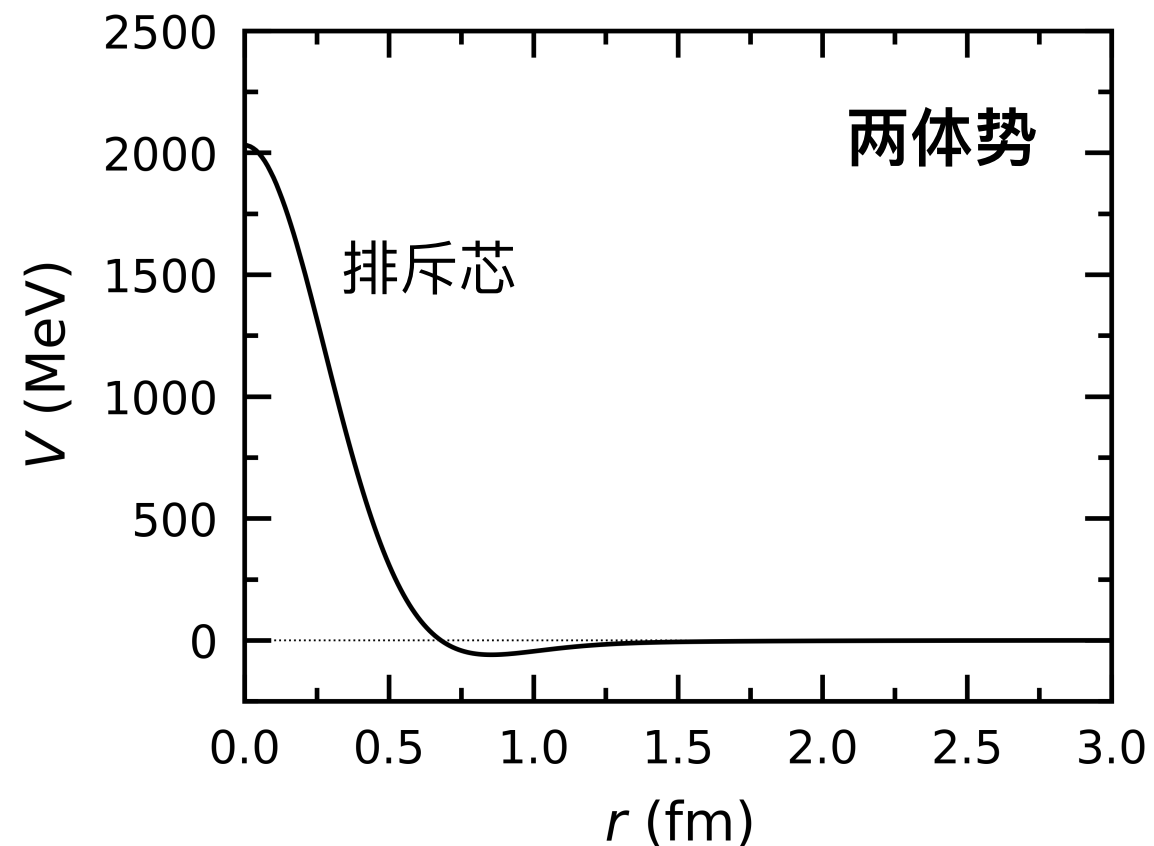
$$\Phi_{\text{Slater}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = \mathcal{A}[\phi_1(\mathbf{x}_1)\phi_A(\mathbf{x}_2)\dots, \phi_A(\mathbf{x}_A)]$$

- 多体关联: 振幅修正 + 节点面修正

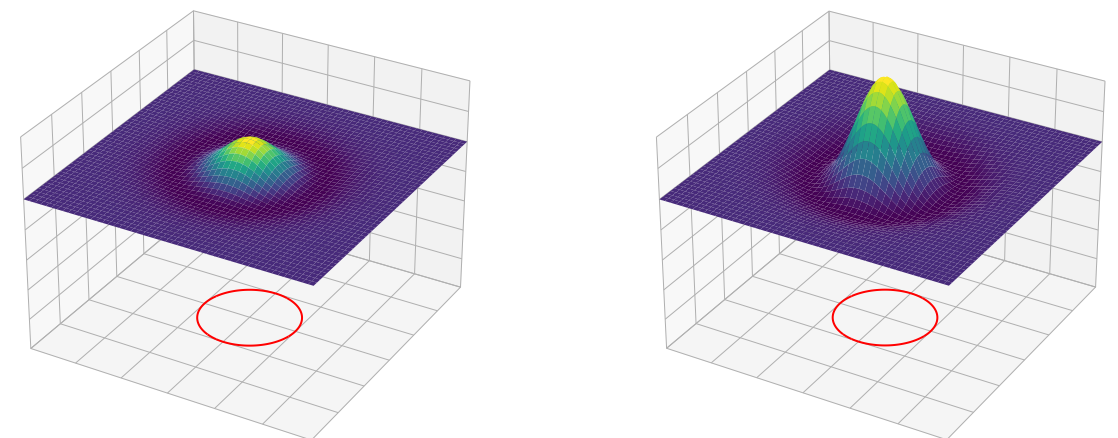
Jastrow 因子：振幅修正

- Jastrow 因子通过修正波函数振幅引入关联 [Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 \(1955\)](#)

$$|\Psi\rangle = \exp \left[\sum_{i < j} u_c(r_{ij}) \right] |\Phi_{\text{Slater}}\rangle$$

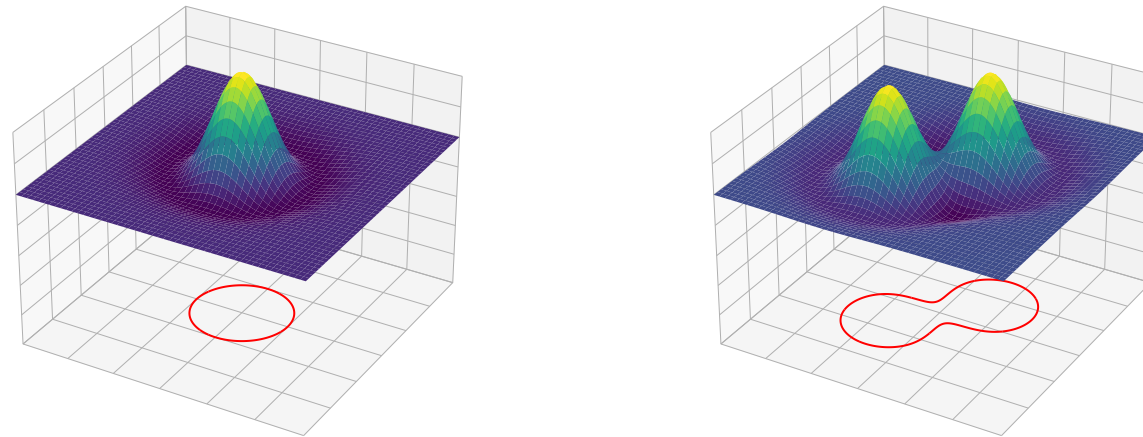


- Jastrow 因子是正定的，无法改变节点面



Backflow 变换：节点面修正

- Backflow 变换 $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_i + \sum_{i < j} \eta(|\mathbf{r}_{ij}|)(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ Feynman and Cohen, Phys. Rev. 102, 1189 (1956)



- 对于原子核，需考虑空间、自旋和同位旋相互耦合的 backflow 变换

YLY and Pengwei Zhao, Phys. Rev. C 107, 034320 (2023)

$$\det[\mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)] = \begin{vmatrix} f_1(\mathbf{x}_1; \{\mathbf{x}_{1/}\}) & \dots & f_1(\mathbf{x}_A; \{\mathbf{x}_{1/}\}) \\ f_2(\mathbf{x}_1; \{\mathbf{x}_{1/}\}) & \dots & f_2(\mathbf{x}_A; \{\mathbf{x}_{1/}\}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_A(\mathbf{x}_1; \{\mathbf{x}_{1/}\}) & \dots & f_A(\mathbf{x}_A; \{\mathbf{x}_{1/}\}) \end{vmatrix}$$

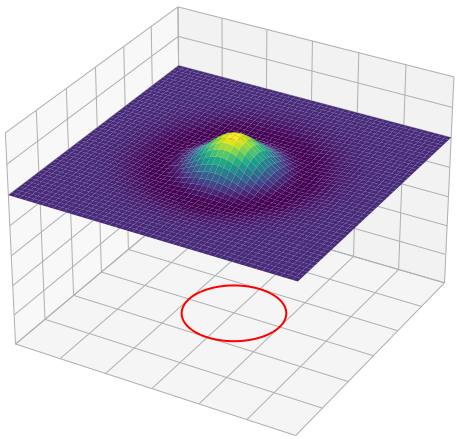
$$f_\mu(\mathbf{x}_i, \{\mathbf{x}_{i/}\}) = \rho_\mu \left(\phi(\mathbf{r}_i, s_i, t_i) + \sum_{i < j} \boxed{\eta(\mathbf{r}_{ij}, |\mathbf{r}_{ij}|, s_i, s_j, t_i, t_j) e^{-r_{ij}/R^2}} \right) \rho, \eta, \phi : \text{ANNs}$$

Spin-isospin-dependent backflow

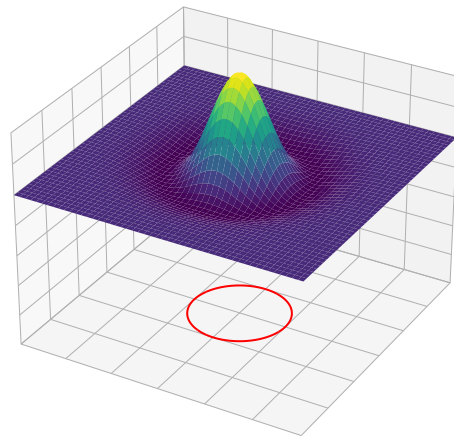
FeynmanNet

- Multi-determinant Slater-Jastrow-Backflow 形式的试探波函数

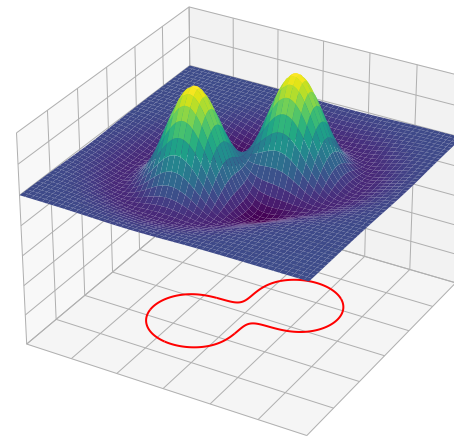
$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = e^{\mathcal{U}(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_A)} \sum_{n=1}^{N_{\text{det}}} \det \left[\mathbf{f}^{(n)}(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_A) \odot \Phi^{(n)} \right]$$



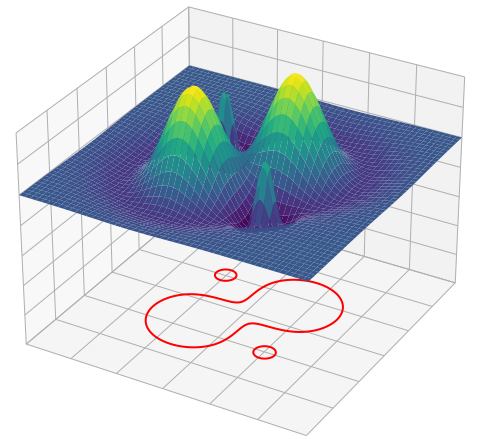
Slater 行列式



Jastrow 因子



Backflow 变换



行列式叠加

YLY and Pengwei Zhao, Phys. Rev. C 107, 034320 (2023)

- 在试探波函数中嵌入原子核物理特性

► $\bar{\mathbf{x}}_i = (\bar{\mathbf{r}}_i, s_i, t_i)$, $\bar{\mathbf{r}}_i = \mathbf{r}_i - \frac{1}{A} \sum_j \mathbf{r}_j$ 为质心系内坐标, 严格保证了平移不变性

► 引入原子核的壳结构信息 $\Phi_{\mu i} = \sum_{k=1}^{N_f} w_{\mu k}^{(n)} \tilde{\varphi}_k(\bar{\mathbf{x}}_i)$ $\tilde{\varphi}_k(\bar{\mathbf{x}}_i)$ 为谐振子波函数

► 宇称和时间反演对称性 $\Psi^\pi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = (1 + \pi \hat{\mathcal{P}})(1 + \hat{\mathcal{T}})\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A)$

无 π 介子哈密顿量

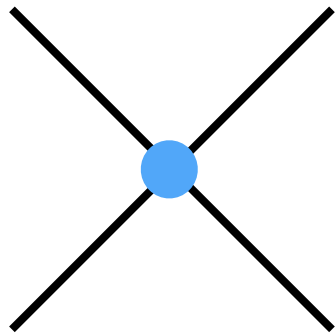
- 领头阶的无 π 介子有效场论哈密顿量

Schiavilla et al., Phys. Rev. C 103, 054003 (2021)

$$H_{\text{LO}} = \sum_{i=1}^A \frac{-\nabla_i^2}{2m_N} + \sum_{i<j} (v_{ij} + v_{ij}^{\text{Coul}}) + \sum_{i<j<k} V_{ijk}$$

短程两体相互作用:

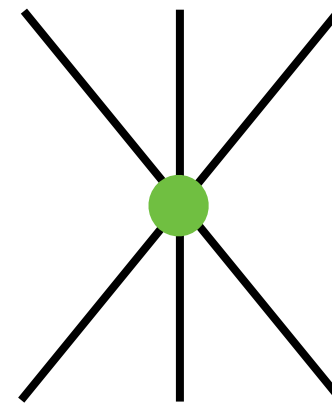
由 NN 1S_0 和 3S_1 散射相移确定



$$v_{ij} = \sum_{S,T} C_{ST} \delta_{R_T}(r_{ij}) P_S^\sigma P_T^\tau$$

短程三体相互作用:

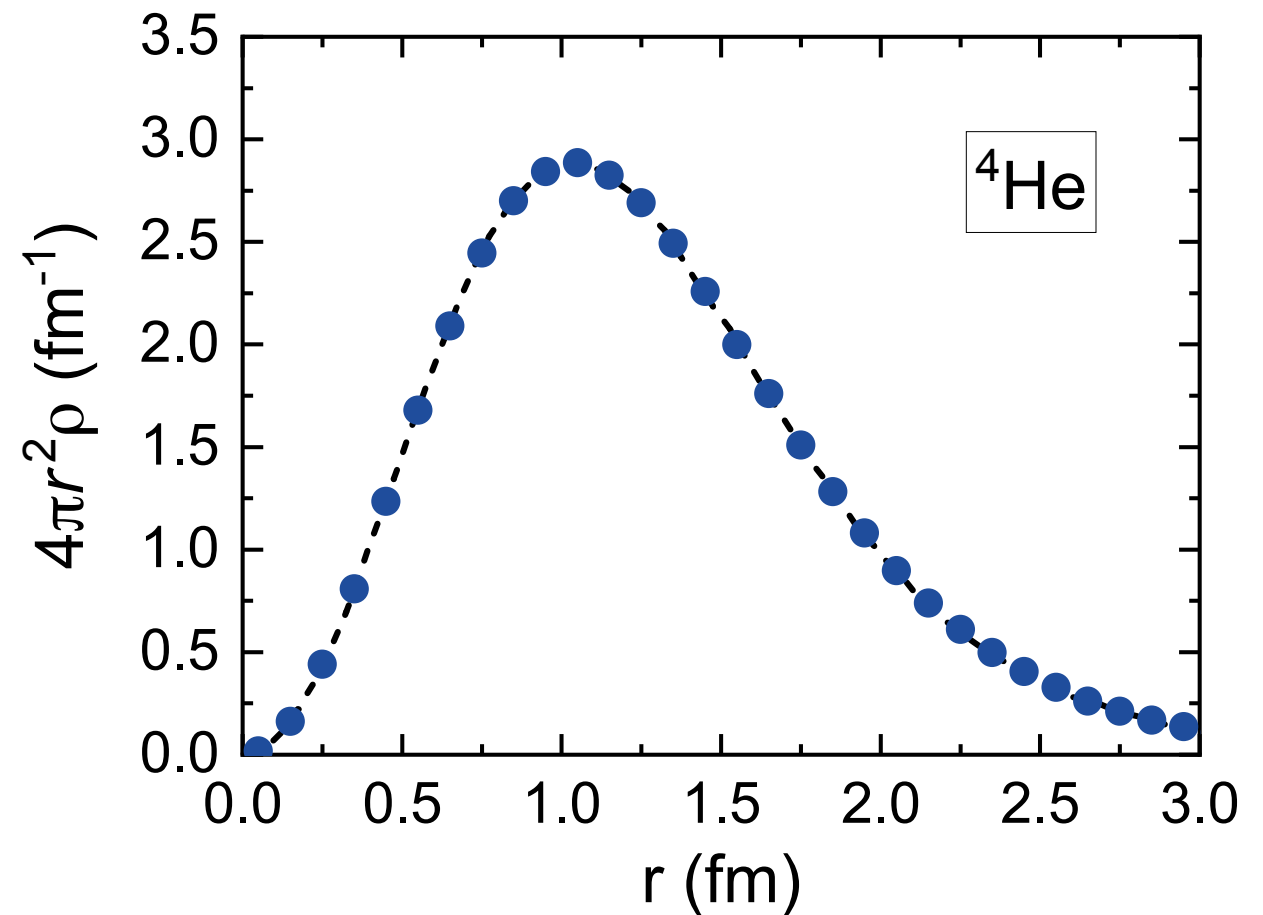
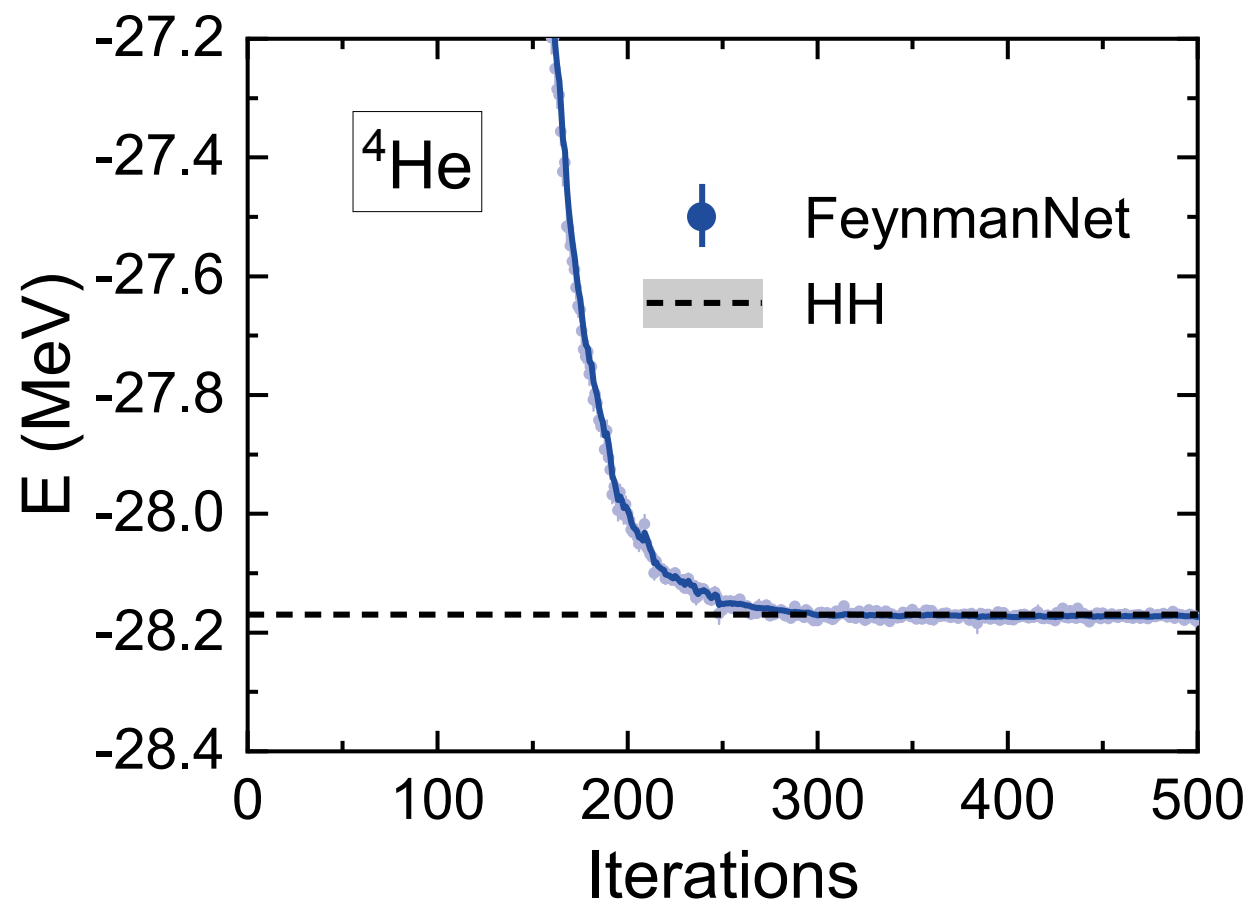
由 ^3H 基态能量确定



$$V_{ijk} = D \sum_{\text{cyc}} \delta_{R_3}(r_{ij}) \delta_{R_3}(r_{ik})$$

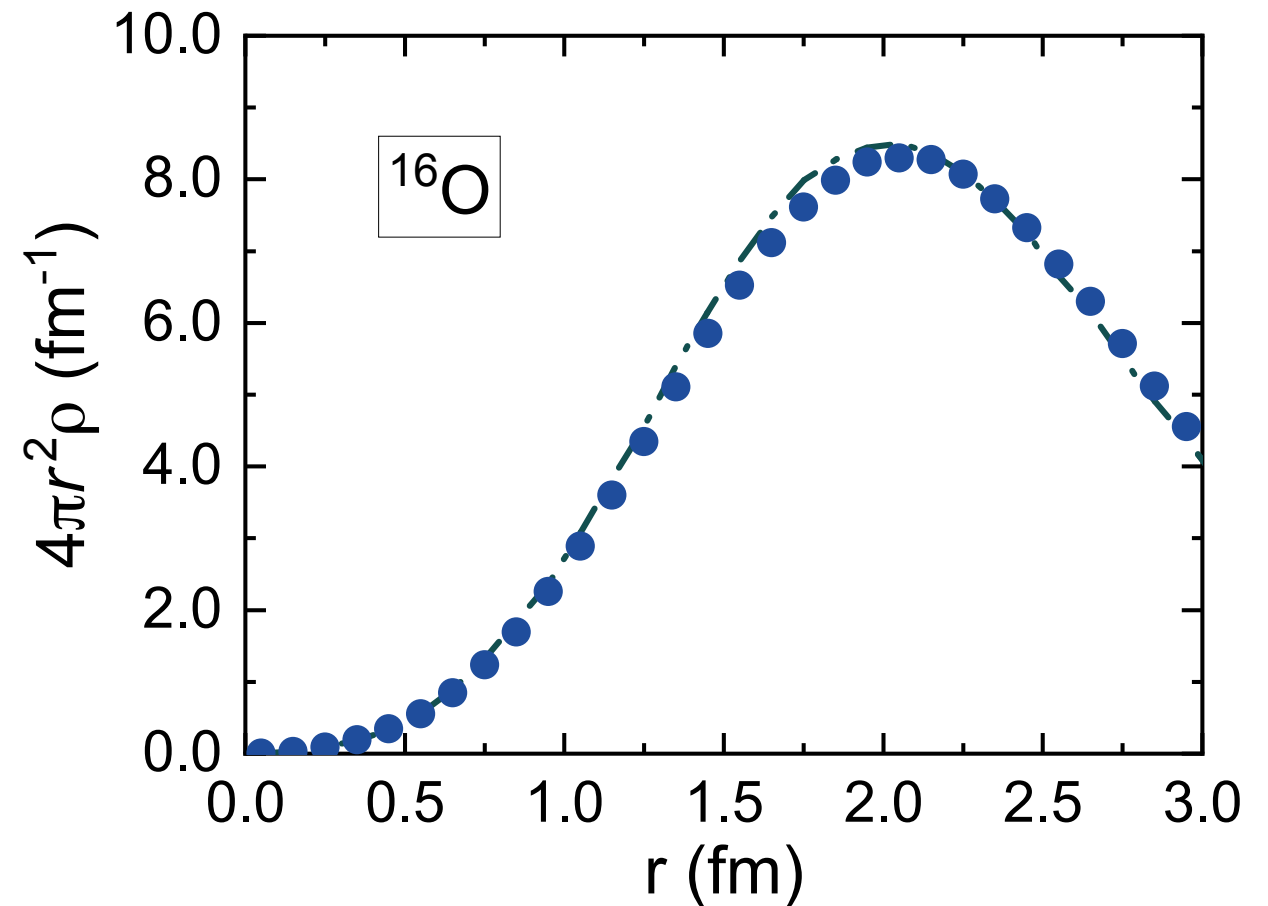
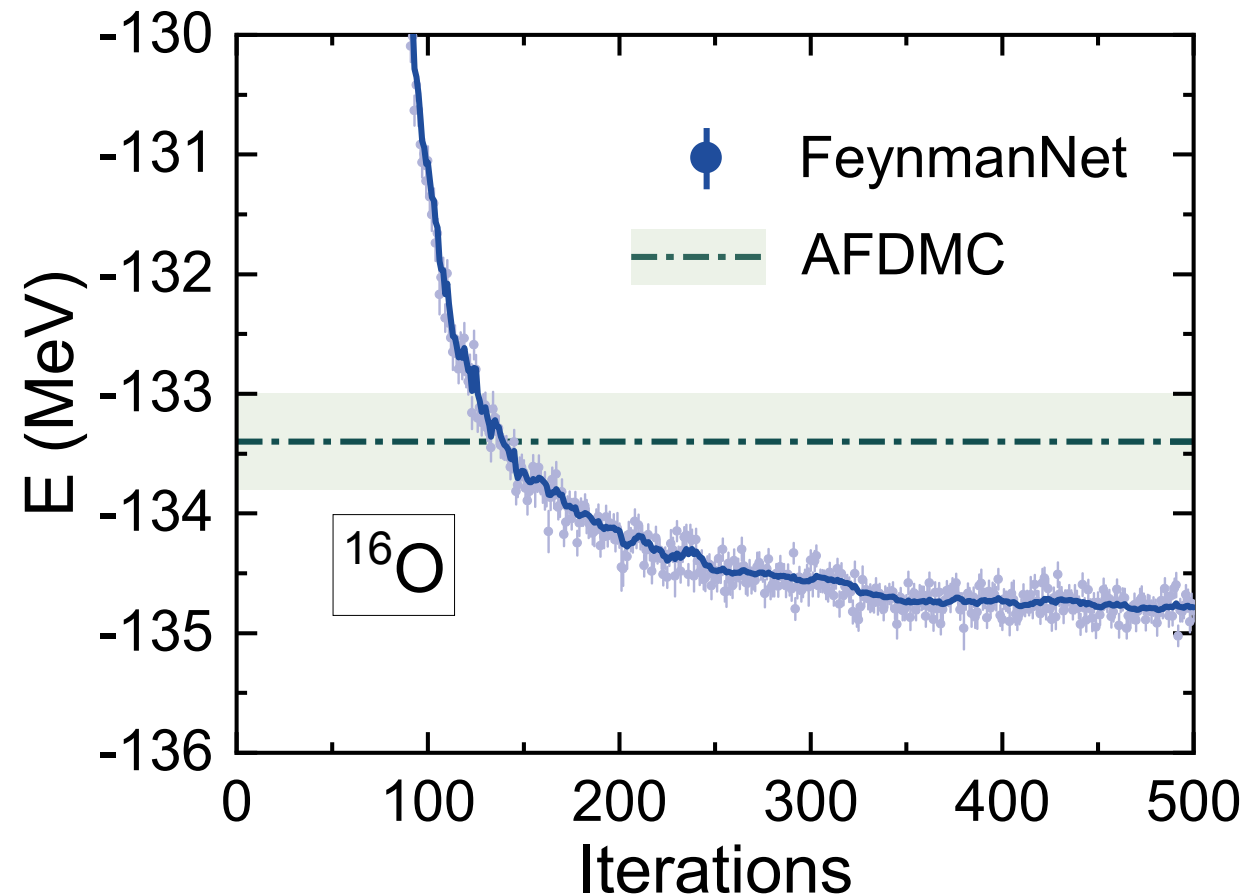
^4He 基态能量与单核子密度

- 变分迭代收敛稳定, 300 步后基态能量收敛至 0.01 MeV 以内
- FeynmanNet 给出的基态能量和密度分布与数值精确解 (HH) 一致



^{16}O 基态能量与单核子密度

- 与采用同一哈密顿量的辅助场扩散蒙特卡洛 (AFDMC) 的计算结果相比, FeynmanNet 给出的能量更低、精度更高 AFDMC: Schiavilla et al., PRC 103, 054003 (2021)



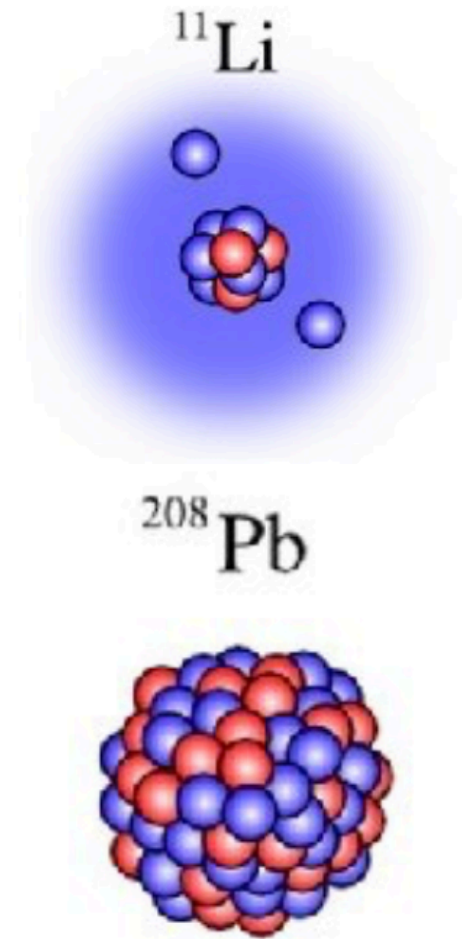
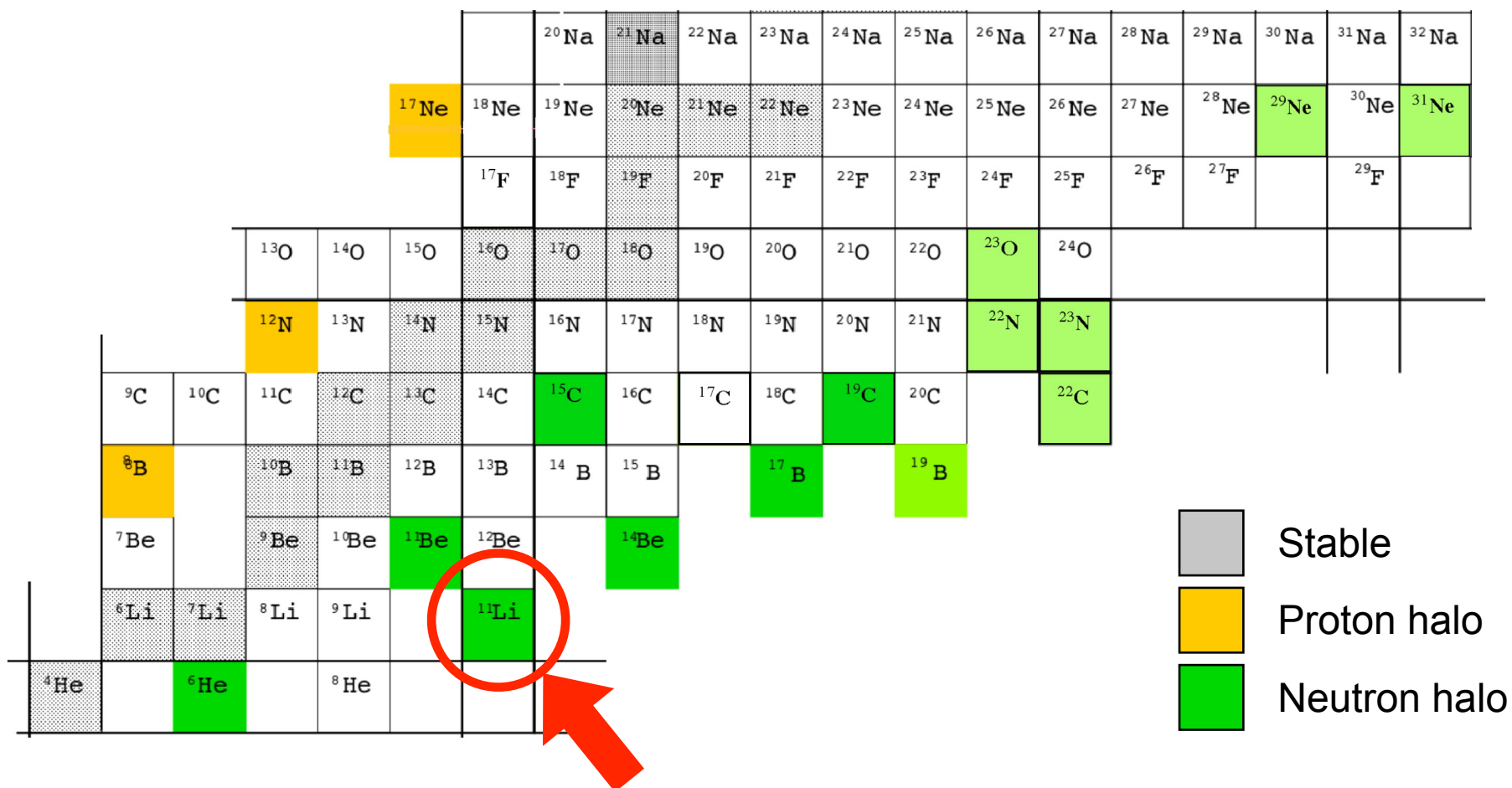
A. Lovato, G. Carleo *et al.*, arXiv:2602.13826:

FeynmanNet ansatz achieves **high accuracy (高精度)** while remaining **robust and efficient (可靠、高效)** during the training process. ... Notably, because VMC **do not suffer from a fermion-sign problem (不受费米子符号问题的困扰)**, they are able to employ local chiral-EFT interactions ...

^{11}Li 中的晕现象

- **晕核**：一类奇特的弱束缚系统，其核子密度会延展至紧束缚核芯之外很远处
- **^{11}Li** ：历史上首个发现的晕核，实验表明其两个弱束缚中子弥散分布于 ^9Li 核芯周围，空间延展范围可达 ^{208}Pb 核的尺度

Tanihata et al., Phys. Rev. Lett. 55, 2676 (1985)

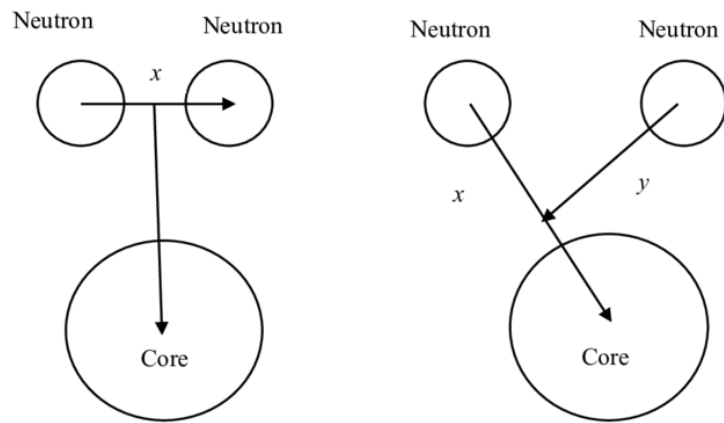


Tanihata et al., Prog. Part. Nucl. Phys. 68, 215 (2013)

^{11}Li 的理论研究

- ^{11}Li 的束缚弱、空间延展大，涉及束缚态与连续谱的耦合，对理论描述构成重大挑战，因此现有理论一般从两种不同的近似图像出发：

三体模型 ($^9\text{Li} + n + n$)

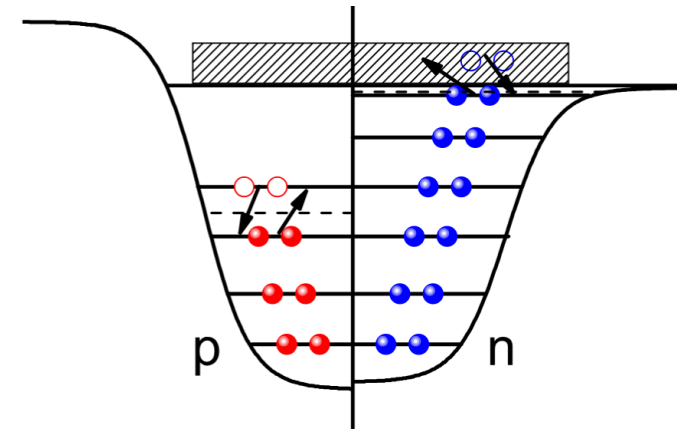


✓ 包含晕中子关联效应

✗ 冻结 ^9Li 核芯自由度

Hansen et al., Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 45, 591 (1995)

平均场模型 (独立粒子近似)



✓ 包含所有核子自由度

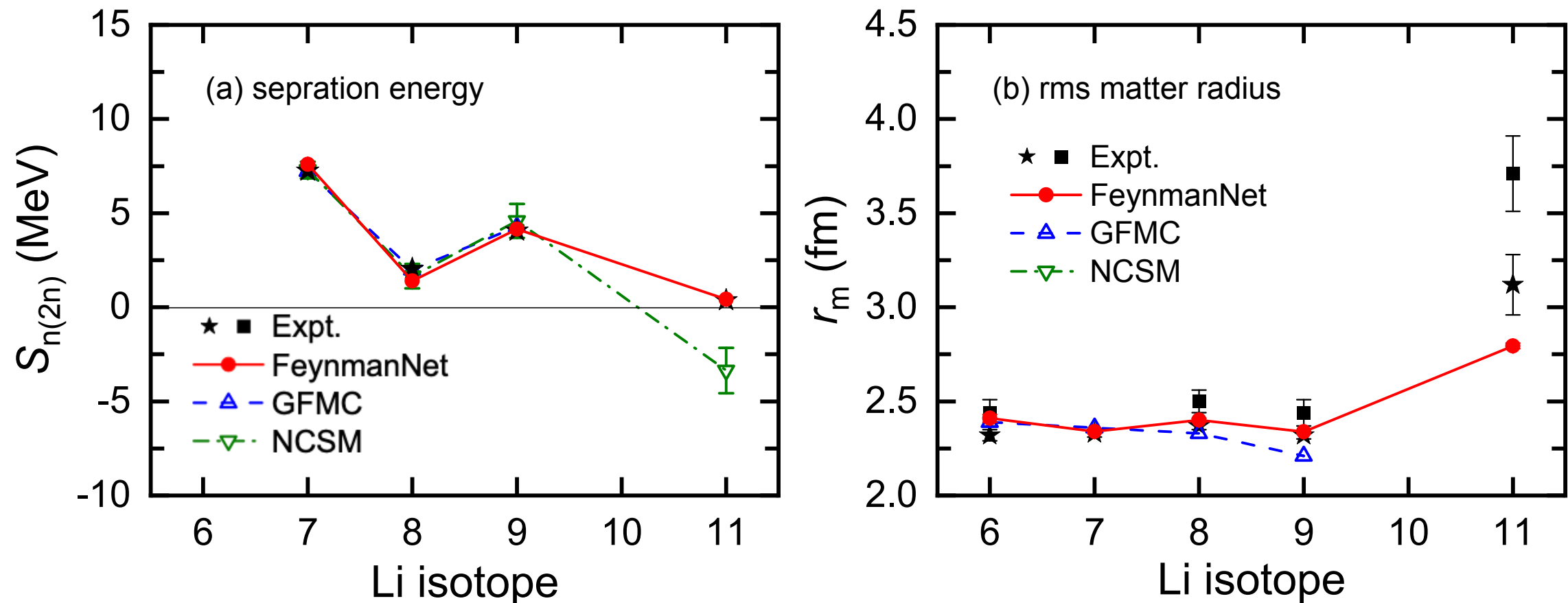
✗ 缺失多体关联效应

Meng et al., Prog. Part. Nucl. Phys. 57, 470 (2006)

^{11}Li 的晕现象是如何从量子多体关联中涌现的？

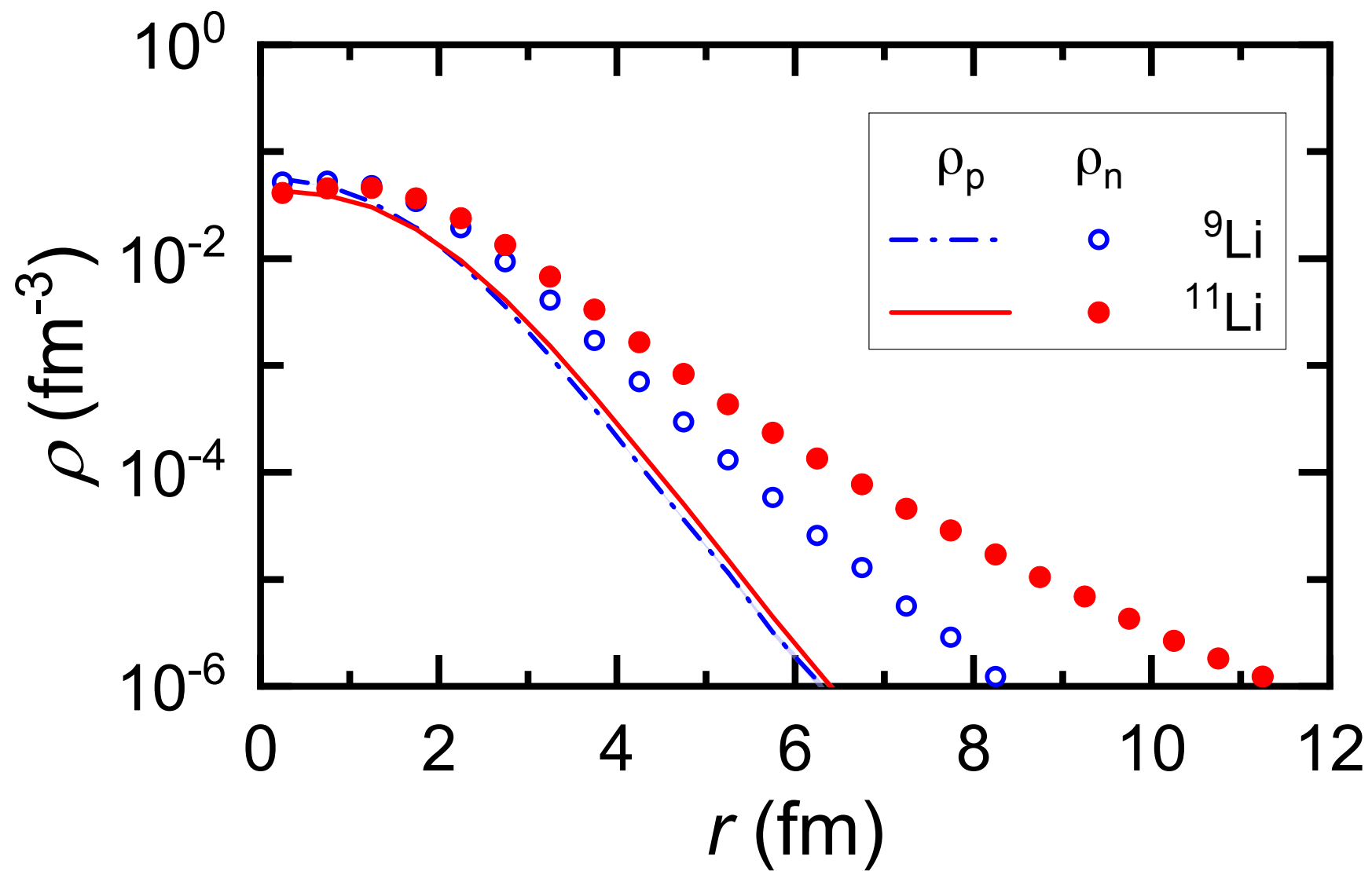
分离能与物质半径

- FeynmanNet 很好地描述了 ^{11}Li 的弱束缚特性与物质半径的突然增加



密度分布

- ^{11}Li 的物质半径突然增加源于两个价中子形成的弥散密度分布



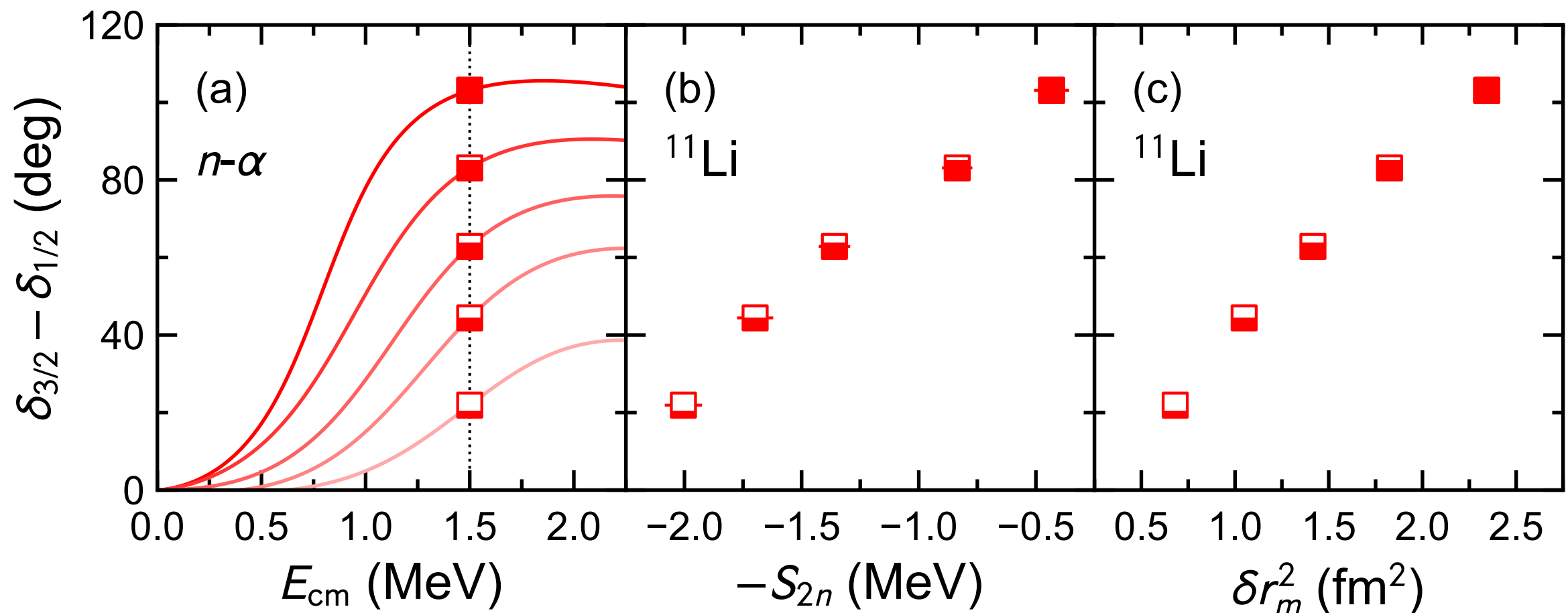
^{11}Li 晕的形成与中子- α 粒子相互作用的关联

- 随着中子- α 粒子 $P_{3/2}$ 和 $P_{1/2}$ 散射相移劈裂的增大

- ✓ 分离能 S_{2n} 减小, ^{11}Li 更加弱束缚

- ✓ 物质半径变化 $\delta r_m^2 = (r_m^{11})^2 - (r_m^9)^2$ 更大

➔ 中子- α 粒子间的强自旋-轨道力对 ^{11}Li 晕的形成起重要作用



YLY and P. W. Zhao, in preparation

总结

- 建立了一种深度学习驱动的高精度第一性原理方法 *FeynmanNet*

基于深度神经网络，引入自旋-同位旋依赖的 backflow 变换，并结合原子核特性构建了核多体试探波函数

YLY and Pengwei Zhao, Phys. Rev. C 107, 034320 (2023)

- 研究了 ^{11}Li 的晕现象是如何从量子多体关联中涌现的

中子- α 粒子间的自旋-轨道力起到关键作用

YLY and P. W. Zhao, in preparation

原子核电磁结构、散射、衰变性质...

YLY, E. Epelbaum, C. Ji, and P. W. Zhao, arXiv:2509.01303 (2025)

YLY, E. Epelbaum, J. Meng, L. Meng, and P. W. Zhao, Phys. Rev. Lett. 135, 172502 (2025)

YLY and P. W. Zhao, Phys. Rev. Lett. 134, 242502 (2025)

超核、奇特强子态(夸克模型)

Z. X. Zhang, YLY, W. B. He, P. W. Zhao, B. N. Lv, and Y. G. Ma, Phys. Lett. B. 874, 140285 (2026)

W. L. Wu, L. Meng, and S. L. Zhu, Phys. Rev. Lett. 136, 071901 (2026)

致谢

- 感谢我的导师与合作者

北京大学：孟杰、赵鹏巍

东南大学：孟璐

华中师范大学：计晨

德国波鸿鲁尔大学：Evgeny Epelbaum

- 感谢国家自然科学基金青年学生基础科研项目（博士研究生）的资助

谢谢大家！

附录

What is ab initio?

- 基于有效场论（EFT）原则，采用拉格朗日量、哈密顿量或能量密度泛函，并选择能够最大程度提升理论预测能力的自由度

Employing Lagrangians, Hamiltonians, or energy density functionals based on EFT principles and with degrees of freedom such that it maximizes our predictive capabilities

A. Ekström, C. Forssén, and Hagen et. al., “What is ab initio nuclear theory”, *Front. Phys.* 11, 1129094 (2023)

- 能够解释自由空间散射实验的同一种核力，在应用于核多体理论时，是否也能够同时解释有限原子核与核物质的性质？

Do the same nuclear forces that explain free-space scattering experiments also explain the properties of finite nuclei and nuclear matter when applied in nuclear many-body theory?

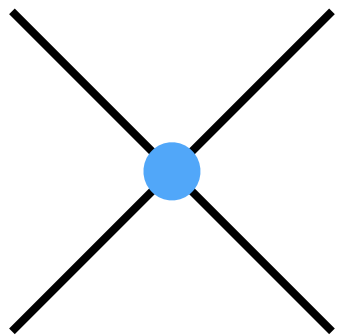
R. Machleidt, What is ab initio, *Few-Body Syst.* 64, 77 (2023)

无 π 介子有效场论相互作用

- 领头阶的无 π 介子有效场论相互作用 Schiavilla et al., Phys. Rev. C 103, 054003 (2021)

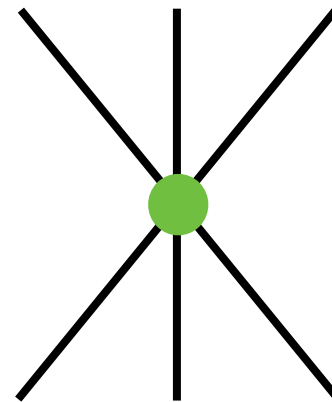
$$H_{\text{LO}} = \sum_{i=1}^A \frac{-\nabla_i^2}{2m_N} + \sum_{i<j} (v_{ij} + v_{ij}^{\text{Coul}}) + \sum_{i<j<k} V_{ijk}$$

短程两体相互作用:



$$v_{ij} = \sum_{S,T} C_{ST} \delta_{R_T}(r_{ij}) P_S^\sigma P_T^\tau$$

短程三体相互作用:



$$V_{ijk} = D \sum_{\text{cyc}} \delta_{R_3}(r_{ij}) \delta_{R_3}(r_{ik})$$

r -space cutoff: $\delta_R(r) = \frac{1}{\pi^{3/2} R^3} e^{-r^2/R^2}$

$R_{T=0} \simeq 1.5 \text{ fm}, R_{T=1} \simeq 1.8 \text{ fm}, R_3 = 1.0 \text{ fm}$

Spin-orbit interactions

- Improving the leading-order Hamiltonian with a spin-orbit term

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{-\nabla_i^2}{2M} + \sum_{i<j} (v_{ij}^{\text{EM}} + v_{ij}^{\text{c}} + v_{ij}^{\text{so}}) + \sum_{i<j<k} V_{ijk}^{\text{c}} \quad v_{ij}^{\text{so}} = -C_{\text{so}} \frac{\partial_r \delta(r_{ij})}{r_{ij}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

- Determine the strength with the splitting in P -wave neutron-alpha scattering phase shifts

