

利用反预报方法从截面预言近滴线丰质子核的结合能

马春旺^{a,b}, 宋一丹^a

(河南师范大学 a.物理与材料科学学院;b.国家物理实验教学示范中心,河南 新乡 453007)

摘要:在 Origin 等数据处理软件中,当实验数据较少时,自由参数的不同初始化设置会导致较大的结果差异,这为物理结果的确定带来较大不确定性.通过最小二乘法分析了 345 MeV/u $^{78}\text{Kr} + ^9\text{Be}$ 反应中产生的丰质子同位素的截面和结合能,并得到线性回归方程.通过回归方程,利用结合能预报部分丰质子核素的截面,以及通过实验截面对近质子滴线核素的结合能进行反预报测量.这对于近质子滴线的丰质子核素实验测量具有较好的借鉴意义.

关键词:最小二乘法;回归直线;反预报;结合能;丰质子核素

中图分类号:N37;O571.22;O571.423

文献标志码:A

在实验数据处理中,由于 Origin 等软件具有数据拟合、过程简洁、作图美观等优点所以被广泛使用.这类软件的拟合过程通常是把物理量之间的关联按照对应的函数关系进行拟合,进而得到这些物理量关联的回归方程.除了内置的标准函数之外,使用者也可以通过自定义函数进行分析^[1].但在拟合过程中,尤其是实验数据较少时,Origin 对实验数据的选择和拟合过程的初始化会导致所得到的回归方程具有较大的变化,稳定性差.此时使用者无法判断所得到的回归方程是否符合物理实际,并难以确定所提取的物理量是否准确,这将为利用 Origin 软件进行实验数据分析带来困难.

通过重离子核反应产生近滴线核素是实验核物理中产生和寻找奇异核素的一种基本方法.而质子滴线附近的核素对于核天体物理中的众多关键过程都具有重要的作用^[2],因此丰质子同位素一直受到理论和实验核物理学家的关注.但在实验上质子滴线附近核素产额非常低,关于它们产额规律的研究也较少,所以难以系统的从实验上研究它们的性质.本文将介绍通过现代误差理论与测量技术的常用的方法之一的“最小二乘法(least squares method, LSM)”研究丰质子核的产额分布提取质子滴线附近核素结合能进行“最佳”估值的实验数据分析方法.

1 研究问题

一定数量的中子有助于抵消核内质子的库伦相互作用,而一定的中子丰度有助于保持核素的稳定.因此中质比较低同位素(丰质子同位素)由于库伦斥力的原因难以稳定结合,所以核素的数目较少.质子滴线附近核素的中子-质子不对称度(N/Z)通常并不大,相对于丰中子核素来说,通过系统方法研究丰质子核素的性质存在较大的困难.

Blank 等利用日本理化研究所的大型放射性核束分离器(RIKEN-BigRIPS)测量了 345 MeV/u $^{78}\text{Kr} + ^9\text{Be}$ 反应中产生的部分近质子滴线核素的产生截面^[3].这为通过产生截面从实验上确定它们的结合能提供了可能.Tsang 等人在研究丰中子核素 Cu 时得到余核截面(σ)和每核子平均结合能($\langle B' \rangle$)关联的指数经验规律,并指出可以根据经验规律通过确定相关回归方程对结合能进行反预报^[4].该经验规律的形式如下

收稿日期:2017-06-05;修回日期:2017-09-05.

基金项目:国家自然科学基金(U1732135);河南省自然科学基金(162300410179);河南师范大学优秀青年项目(154100510007);国家大学生创新创业项目(CEPNU201510476017);河南省科技创新人才项目(154100510007).

作者简介:宋一丹(1994-),女,河南洛阳人,河南师范大学硕士研究生,主要从事重离子核反应研究.

通信作者:马春旺(1980-),男,河南师范大学特聘教授,主要从事重离子核反应研究,E-mail:machunwang@126.com.

$$\sigma = C \exp[(\langle B' \rangle - 8)/\tau], \quad (1)$$

其中, $\langle B' \rangle$ 是利用对能修正后的每核子平均结合能; C 和 τ 为自由参数, 可通过 $\sigma \sim \langle B' \rangle$ 关联进行最小二乘法拟合得到. 已有工作证明丰质子核素的产额和平均结合能与丰中子核素存在相同的指数关联^[5]. 但由于丰质子同位素的数据较少, 用 Origin 拟合得到的回归方程容易受到偏离数据点的影响, 不能给出可靠的结果. 必须利用其他方法根据(1)式的关联, 通过截面通过反预报方法预言这些丰质子核素的结合能.

2 分析方法

2.1 最小二乘法

最小二乘法是一种基于部分实验数据求未知量“最佳”估值的方法. 其原理是使等精密水平的因变量 y 的残差平方和(residual sum of square, RSS, R)或标准差的平方为极小值^[6]. 将(1)式稍作变形后可当作截距不为零的一般直线进行最小二乘法拟合, 即

$$\ln \sigma = \langle B' \rangle / \tau + (\ln C - 8/\tau), \quad (2)$$

其中 $\langle B' \rangle$ 为自变量, $\ln \sigma$ 为因变量, $1/\tau$ 和 $(\ln C - 8/\tau)$ 分别为斜率和截距, 这个截距不为零的一般线性函数可简化为:

$$y = b_1 x + b_0. \quad (3)$$

对于截距不为零的一般直线最小二乘法拟合, 需要因变量 y_i 的残差平方和最小. 其残差平方和公式为

$$R = \sum [y_i - (b_1 x_i + b_0)]^2. \quad (4)$$

残差平方和最小的充要条件为 $\frac{\delta(R)}{\delta b_0} = 0$ 和 $\frac{\delta(R)}{\delta b_1} = 0$. 通过条件易导出斜率、截距的表达式

$$b_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x}) y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2}, \quad (5)$$

$$b_0 = \frac{\sum (\sum x_i^2 / n - \bar{x} x_i) y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2} = \bar{y} - b_1 \bar{x}, \quad (6)$$

其中 x_i, y_i 为已知实验数据, \bar{x}, \bar{y} 为已知实验数据的平均值, n 为已知实验数据的组数. 综上, 对丰质子核素的截面和结合能的分析过程主要通过残差平方和计算得到直线的截距和斜率, 进而确定最优化的回归方程.

2.2 回归直线中的相关计算

2.2.1 回归直线的预报问题

运用数理统计知识可以证明, 求出回归直线的斜率和截距可以进行预报, 即根据已知自变量求因变量的过程^[6]. 对于给定值 x' , 通过简单计算就可以预报出相对应的因变量 $y' = b_1 x' + b_0$, 此预报值的不确定度公式通过下面

$$U_{y'} = t_{\nu=n-2} s_y \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x' - \bar{x})^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}} \quad (7)$$

求得, 其中, $t_{\nu=n-2}, s_y$ 分别为 t 因子和因变量标准差, 其中因变量标准差 s_y 反映了最小二乘法拟合质量的高低. 而 t 因子主要与自由度以及置信概率有关. 在最小二乘法中, 利用 n 组数据求得了斜率和截距这两个未知量, 所以它的自由度 $\nu = n - 2$. 通常情况下置信概率取 $p \approx 0.95$, 双侧区间对应的 t 值计算公式为^[7]

$$T_{0.95, \nu} \approx 1.959 + \frac{2.406}{\nu - 1.064}, \nu \geq 3, \quad (8)$$

而因变量标准差主要与斜率和截距有关, 即

$$s_y = \sqrt{\frac{R}{\nu}} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - (b_1 x_i + b_0))^2}{n - 2}}, \nu = n - 2. \quad (9)$$

由此得到预报的物理量的测量值以及不确定度 $U_{y'}$.

2.2.2 回归直线的反预报问题

反预报问题也称反预测、控制或校准问题^[6].对于通过因变量的 m' 次重复测量得到平均值 y' ,再得到反预报值 x' 的这种方法过于复杂,且物理实验数据分析中不常用到,所以这里就不再赘述.对于大多数实验数据分析中,因变量 y' 只测一次,其反预报自变量的方程为

$$x' \pm ts_{x'} = (x + \frac{y' - y}{b_1}) \pm t \frac{s_y}{b_1} \sqrt{\frac{(y' - y)^2}{b_1^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} + \frac{1}{n} + \frac{1}{m'}}. \quad (10)$$

一般情况下,上述公式中的 $1/m' = 1$, $ts_{x'}$ 为反预报自变量的不确定度.

3 结果和讨论

图1给出了 $345 \text{ MeV/u } ^{78}\text{Kr} + ^9\text{Be}$ 反应中 $Z = 22$ (Ti元素)的丰质子同位素截面 σ 和每核子结合能 $\langle B' \rangle$ 之间的关联,用 $I = N - Z$ 表示核素的中子剩余数.实心方块代表实验测得的截面和结合能,半填充方块代表仅有实验结合能(截面为预报值),空心方块代表仅有实验截面(结合能为反预报测量值).表1中列出了 $345 \text{ MeV/u } ^{78}\text{Kr} + ^9\text{Be}$ 反应中 $Z = 22$ (Ti元素)丰质子同位素截面 σ 和每核子结合能 $\langle B' \rangle$ 的部分数据,其中带上角标为预言值.直线是利用实心方块关联通过最小二乘法计算得到的线性回归方程.图1中 $I = -4, -1, 0$ 和 1 的这四个同位素的截面、结合能全为实验测量值,但由于实验值太少,Origin拟合得到的回归函数受自由参数的初始化设置影响,导致拟合结果稳定性较弱,所以将通过它们的 $\sigma \sim \langle B' \rangle$ 关联确定回归方程. $I = -2(^{42}\text{Ti})$ 和 $-3(^{41}\text{Ti})$ 仅有结合能的实验测量值,但没有实验截面.通过回归方程利用实验结合能预报截面. $I = -5(^{39}\text{Ti})$ 的同位素有截面的实验测量值,但缺少结合能的实验值,本文利用截面通过回归方程对结合能进行反预报实验预言.

首先,通过 $I = -4, -1, 0$ 和 1 核素的截面和结合能数据进行最小二乘法拟合得到最优回归方程.利用(5)式和(6)式,通过计算确定了(3)式中 b_0 和 b_1 的值,据此确定了Cu丰质子同位素截面和结合能关联的回归方程.根据回归方程(3)式和变形后的(2)式,计算得到了自由参数 C 和 τ ,其结果分别为 $C = e^{b_0 + 8b_1}$ 和 $\tau = \frac{1}{b_1}$.然后通过(3)式和(7)式预报 $I = -2$ 和 $I = -3$ 同位素的截面 σ 及其不确定度 $U_{y'}$,其值分别为 $(1.04 \pm 0.24) \times 10^{-3} \text{ mb}$ 和 $(8.56 \pm 1.24) \times 10^{-6} \text{ mb}$.

其次,对于 $I = -5$ 的同位素,通过(3)式和(10)式对结合能及其不确定度进行反预报,确定其结合能为 $299.481 \pm 5.524 \text{ MeV}$.与原子核质量表AME16中的系统评估结合能(295.386 MeV)^[8]、整体结合能误差水平较好的微观-宏观模型计算的WS4结合能(294.724 MeV)相比^[9-10],本文通过截面反预报预言的结合能存在差异,但这两种理论值均在本文预言的结合能的误差范围以内.这表明通过截面反预报的结合能具有较高的可信度.这也是首次对近质子滴线核素 ^{39}Ti 的结合能进行的较高精度预言.

4 总结

对于样本较少的实验数据处理分析,Origin等分析软件的拟合回归方程容易受到影响,难以从分析上确定恰当的回归方程.本文通过近质子滴线丰质子核素的实验测量截面和它们每核子平均结合能的关联,确定

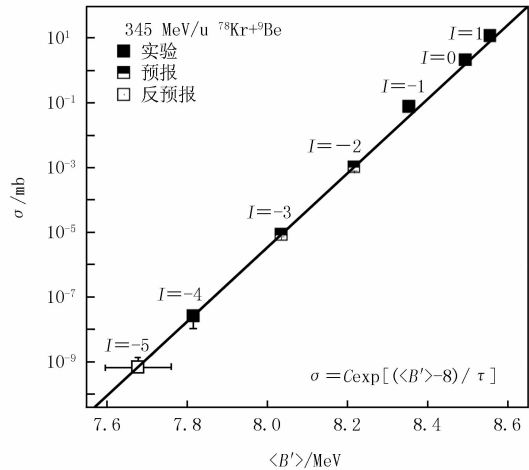


图1 $345 \text{ MeV/u } ^{78}\text{Kr} + ^9\text{Be}$ 反应中产生的丰质子同位素的截面和其每核子平均结合能之间的关联图

了它们的截面和每核子平均结合能的回归方程,并利用该回归方程预言了^{41,42}Ti 在 345MeV/u ⁷⁸Kr + ⁹Be 反应中的产生截面;同时利用该回归方程的反预报方法,从实验测量³⁹Ti 的截面对其结合能进行了预言.与理论研究结果相比较,本文所预言的³⁹Ti 的结合能在误差范围内包含理论结果.本文的最小二乘法对于在实验值较少情况时的实验数据分析和实验结果提取具有较好的借鉴作用.除此以为,利用回归方程成功预言了部分截面和结合能均未知的核素,为利用高精度储存环研究同位素余核实验的测量提供了信息^[11].

表 1 345 MeV/u ⁷⁸Kr+⁹Be 反应中产生的丰质子同位素截面和每核子平均结合能 $\langle B' \rangle$ 之间的数据

A	N	I	σ /mb	$\langle B' \rangle$ /MeV
39	17	-5	$(6.80 \pm 7.30) \times 10^{-10}$	$7.677 \pm 0.082^*$
40	18	-4	$(2.60 \pm 1.50) \times 10^{-8}$	$7.815 \pm 0.004^*$
41	19	-3	$(8.56 \pm 1.24) \times 10^{-6}^*$	$8.034 \pm 0.000\ 7$
42	20	-2	$(1.04 \pm 0.24) \times 10^{-3}^*$	$8.216 \pm 0.000\ 07$

参 考 文 献

- [1] 魏慧玲,王闪闪,普洁,等.Origin 软件多自变量多参数曲线拟合功能探究[J].河南师范大学学报(自然科学版),2012,40(3):38-40.
- [2] Schatz H, Aprahamian A, Gorres J, et al. rp-process nucleosynthesis at extreme temperature and density conditions[J]. Phys Rep, 1998, 294(4):167-263.
- [3] Blank B, Goigoux T, Ascher P, et al. New neutron-deficient isotopes from ⁷⁸Kr fragmentation [J]. Phys Rev C, 2016, 93:061301(R).
- [4] Tsang M B, Lynch W G, Friedman W A, et al. Fragmentation cross sections and binding energies of neutron-rich nuclei[J]. Phys Rev C, 2007, 76:041302(R).
- [5] 宋一丹,马春旺.炮弹碎裂反应产物的标度规律及其在丰质子核结合能测量中的应用[R].湖州:全国核反应会议暨核物理 973 项目年会, 2017.
- [6] 肖志刚,朱鹤年.新概念基础物理实验讲义[M].北京:清华大学出版社,2013.
- [7] Natrella M G. Experimental statistics[J]. Technometrics, 1963, 7(4):120-124.
- [8] Huang W J, Audi G, Wang M, et al. The AME2016 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data and adjustment procedures [J]. Chin Phys C, 2017, 41(3):030002.
- [9] Wang N, Liu M, Wu X, et al. Surface diffuseness correction in global mass formula [J]. Phys Lett B, 2014, 734:215-219.
- [10] WS4:nuclear mass table [DB/OL].[2017-03-20].<http://www.imqmd.com/Soft/ShowInfo.asp?InfoID=27>.
- [11] Yu M, Wei H L, Song Y D, et al. Experimental determination of one- and two-neutron separation energies for neutron-rich copper isotopes [J]. Chin Phys C 2017, 41(9):094001.

Binding energy of near proton-drip line Isotope predicted from cross section by a reverse prediction method

Ma Chunwang^{a,b}, Song Yidan^a

(a.College of Physics and Materials Science; b.National Demonstration Center for Experimental Teaching in Physics, Henan Normal University, Xixiang 453007, China)

Abstract: For the data analysis softwares such as Origin, when the experimental data is not enough, the initializing of parameters leads to a large difference in the fitting results. To determine the binding energies of some near proton drip-line isotopes, a least squares method (LSM) was introduced to analyze the correlation between the cross sections and binding energies of isotopes. The linear regression equation for the isotopes measured in the 345 MeV/u ⁷⁸Kr + ⁹Be reaction was obtained by the LSM, based on which the cross sections and the binding energies of near proton drip isotopes were obtained.

Keywords: least squares method; regression line; reverse prediction; binding energy; proton-rich isotope