Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 9, с. 527 – 533

Уточнение расчетов *ab initio* наблюдаемых ядер с $A = 6$ методами машинного обучения

Р. Э. Шарыпов[+], *А. И. Мазур*[+1)], *А. М. Широков*[*]

[+] *Тихоокеанский государственный университет, 680035 Хабаровск, Россия*

[*] *Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 сентября 2025 г.
После переработки 21 сентября 2025 г.
Принята к публикации 23 сентября 2025 г.

Метод экстраполяции результатов вариационных расчетов на большие модельные пространства на основе машинного обучения ансамбля искусственных нейронных сетей применен к исследованию свойств ядер с $A = 6$. На основе расчетов *ab initio* в модели оболочек без инертного кора с NN-взаимодействием Daejeon16 проведена экстраполяция энергий и среднеквадратичных радиусов распределений точечных протонов, нейтронов и нуклонов (материи) основных состояний ядер ^{6}He и ^{6}Li. Впервые проведена экстраполяция энергий и среднеквадратичных радиусов резонансных состояний ядер: основного состояния ядра ^{6}Be и возбужденных состояний $(0^+, 1)$ и $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li.

DOI: 10.7868/S3034576625110022

1. Введение. Одним из наиболее перспективных подходов *ab initio* для исследования легких атомных ядер, т.е. подходов, где не используется каких-либо модельных предположений и феноменологических приближений, является модель оболочек без инертного кора (No-Core Shell Model, NCSM) [1]. В NCSM все нуклоны являются спектроскопически активными, а единственной входной информацией, определяющей свойства исследуемого ядра, является реалистическое NN-взаимодействие. Многочастичными базисными состояниями в NCSM являются слэтеровские детерминанты, построенные из одночастичных осцилляторных функций, включающие все возможные комбинации нуклонов с полным числом квантов возбуждения вплоть до $N_{\max}$. Параметрами NCSM являются осцилляторная энергия $\hbar\Omega$ и $N_{\max}$, определяющее модельное пространство.

Результаты NCSM в пределе $N_{\max} \to \infty$ являются точными. Однако, размерность многочастичного базиса NCSM экспоненциально увеличивается с ростом $N_{\max}$, и даже на современных суперкомпьютерах расчеты в NCSM с разумной точностью можно выполнить лишь для ядер с массовыми числами $A \lesssim 20$. Поэтому развитие существующих и разработка новых методов экстраполяции результатов расчетов NCSM и других методов *ab initio* на бесконечно большие модельные пространства является актуальной задачей.

Большинство современных методов экстраполяции базируется на экспоненциальных или полиномиальных подгонках результатов, полученных в небольших модельных пространствах, и обеспечивают неплохие приближения к энергиям связанных состояний [2–11]. Эти методы были обобщены [5, 6, 8–12] и для экстраполяции наблюдаемых, не подчиняющихся вариационному принципу. Например, в работе [12] предложен метод экстраполяции TTE (Twisted Tape Extrapolation), основанный на анализе поведения двумерной зависимости результатов от $\hbar\Omega$ и $N_{\max}$, который был успешно применен к исследованию среднеквадратичных радиусов распределений точечных протонов r_p, нейтронов r_n и нуклонов (материи) r_m в ядрах ^{6}He [12] и ^{6}Li [13]. Все перечисленные методы не имеют строгого теоретического обоснования и являются феноменологическими, что ограничивает их применимость.

Физически обоснованным можно считать подход [14], в котором результат экстраполяции энергии связанных состояний определяется путем локализации полюсов S-матрицы.

Перспективным для решения проблемы экстраполяции представляется использование методов машинного обучения, которые все более широко применяются в теоретических и экспериментальных исследованиях атомных ядер (см. обзор [15]).

Впервые возможность применения машинного обучения ансамбля искусственных нейронных сетей (ИНС) для экстраполяции результатов расчетов в

[1)] e-mail: amazur.pnu.khb@mail.ru

NCSM на случай больших модельных пространств была исследована в работах [16, 17]. В предложенном подходе (ниже мы будем ссылаться на него как ISU) использовались простые ИНС прямого распространения с одним скрытым слоем, обучение которых проводилось на совокупности расчетов в NCSM энергии основного состояния E и среднеквадратичного радиуса распределения точечных протонов r_p в конкретном ядре в разных модельных пространствах $N_{\max}$ с набором значений $\hbar\Omega$. Аналогичные ИНС для экстраполяции результатов NCSM использовались также в работах [18, 19].

В альтернативном подходе TUDa [20, 21] на основе сходящихся к точным значениям расчетов NCSM ядер ^{2}H, ^{3}H и ^{4}He с различными NN-взаимодействиями для каждой исследуемой величины строится ансамбль универсальных ИНС, которые затем используются для непосредственной экстраполяции результатов, полученных в небольших модельных пространствах NCSM более тяжелых ядер. Сравнение в работе [22] экстраполяций ISU и TUDa энергий основных состояний E и среднеквадратичных радиусов r_p изотопов Li демонстрирует согласованность этих подходов.

В работах [23, 24] мы продолжили развитие подхода ISU [16, 17]. Мы предложили использовать более сложную топологию нейронных сетей, исследовали особенности формирования обучающего набора и сформулировали строгие критерии отбора обученных сетей. В результате мы получили универсальный метод экстраполяции на случай бесконечного базиса расчетов *ab initio* в небольших модельных пространствах, в котором отсутствует проблема переобучения ИНС, нет необходимости делить входные данные на обучающий и тестовый наборы, и гарантируется высокая статистическая достоверность результатов.

В настоящей работе мы применяем развитый подход к исследованию свойств основных состояний ядер ^{6}He$(J^\pi, T = 0^+, 1)$ и ^{6}Li$(1^+, 0)$. Мы также исследуем характеристики основного состояния ядра ^{6}Be$(0^+, 1)$ и возбужденных состояний $(3^+, 0)$ и $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li. Все эти состояния лежат в области непрерывного спектра, но распад состояния $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li по единственному открытому каналу $\alpha + d$ запрещен по спин-четности и изоспину. Применение методов, основанных на ИНС, для изучения состояний непрерывного спектра проводится впервые. Отметим, что основные состояния ядер ^{6}He, ^{6}Be и возбужденное состояние $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li образуют изотопический триплет. На основе результатов NCSM с NN-взаимодействием Daejeon16 [25], полученных в модельных пространствах с $N_{\max} = 4, 6, 8, ..., 18$, проведена экстраполяция энергий E и среднеквадратичных радиусов r_p, r_n и r_m перечисленных состояний. Анализ сходимости результатов по мере включения в обучающий набор данных из все более высоких модельных пространств позволяют детально исследовать их свойства.

2. Алгоритм экстраполяции и критерии отбора. Основная идея нашего подхода заключается в обучении ансамбля ИНС для анализа результатов расчетов NCSM и предсказания значений наблюдаемых для больших значений $N_{\max}$, при которых достигается сходимость расчетов NCSM. Алгоритм метода детально рассмотрен в работах [23, 24] и содержит следующие этапы.

2.1. Обучение ИНС. Каждая из 1024 сетей ансамбля состоит из входного, выходного и трех скрытых слоев по 10 нейронов в каждом (см. рис. 1). Мы считаем, что такая более сложная по сравнению с пионерскими работами [16, 17] топология ИНС позволяет получить более стабильные результаты. К такому же выводу пришли авторы работы [26] в задаче предсказания масс ядер.

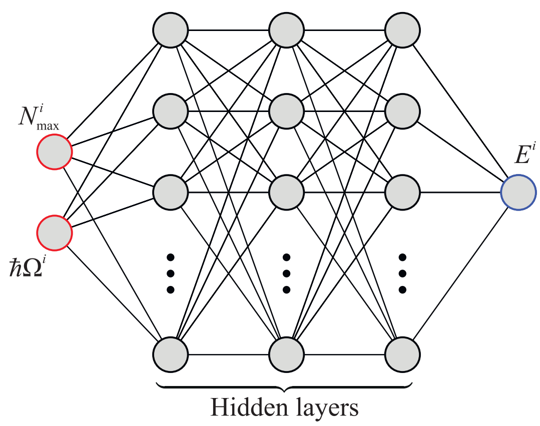

Рис. 1. (Цветной онлайн) Топология ИНС

Один нейрон входного слоя получает значение $N_{\max}$, другой – $\hbar\Omega$, которые передаются нейронам первого скрытого слоя. Каждый нейрон i скрытого слоя p собирает сигналы x^j_{p-1} от всех нейронов предыдущего слоя, суммирует их с весами w^{ij}_p и добавляет смещение b^i_p: $y^i_p = \sum_j \omega^{ij}_p x^j_{p-1} + b^i_p$. Полученные результаты преобразуются активирующей функцией f_p; нейронам слоя $p+1$ передаются сигналы $x^i_p = f_p\left(y^i_p\right)$. На первом скрытом и на выходном слоях мы используем линейные активирующие функции $f(x) = x$, на втором и третьем скрытых слоях – сигмоидальные активирующие функции $f(x) = 1/[1 + \exp(-x)]$. В выходном слое формируются предсказания соответствующей наблюдаемой.

Веса ω_p^{ij} и смещения b_p^i являются обучаемыми параметрами. Перед обучением в каждой сети веса ω_p^{ij} инициализируются случайным образом; начальные смещения b_p^i полагаются равными 0.

После каждого расчета с помощью ИНС набора значений исследуемой наблюдаемой (энергии данного состояния или соответствующего среднеквадратичного радиуса) для используемого обучающего набора пар параметров NCSM $N_{\max}$ и $\hbar\Omega$ вычисляется функция потерь L, которая представляет собой среднее значение квадратов отклонений полученных с помощью ИНС результатов от соответствующих результатов расчетов в NCSM. Затем с помощью алгоритма Adam [27] на основе метода градиентного спуска [28, 29] обучаемые параметры изменяются так, чтобы минимизировать L. Процесс обучения регулируется параметрами обучения (гиперпараметрами), набор которых был тщательно оттестирован при экстраполяции различных расчетов в работах [23, 24].

Обучающий набор данных включает в себя параметры $N_{\max}$, $\hbar\Omega$ и соответствующие значения исследуемой наблюдаемой, рассчитанные в NCSM в модельных пространствах от $N_{\max}^i = 4$ до $N_{\max}^u$ в некоторых диапазонах $\hbar\Omega$. Для анализа сходимости метода мы расширяем обучающий набор данных NCSM, последовательно увеличивая верхнюю границу $N_{\max}^u$.

Стабильность и сходимость результатов экстраполяции существенно зависят от выбора обучающего набора данных. Оптимальный интервал значений $\hbar\Omega$ для каждого значения $N_{\max}$ в обучающем наборе для предсказания энергии ограничен слева минимумом зависимости $E(\hbar\Omega)$ (что согласуется с выбором данных в методе SS-HORSE–NCSM [14]), а справа – $\hbar\Omega = 40$ МэВ. При экстраполяции радиусов мы использовали данные из интервала $\hbar\Omega \in [12.5, 40]$ МэВ.

Каждый тип данных перед обучением ИНС линейно масштабирован к интервалу $[0, 1]$.

2.2. Построение массива предсказаний осуществляется путем генерации результатов для модельных пространств $N_{\max+2}^u, N_{\max+4}^u, \ldots, N_{\max}^f = 300$ для всех значений $\hbar\Omega$ из обучающего набора.

2.3. Отбор обученных ИНС. Вследствие случайной начальной инициализации обучаемых параметров, являющихся аргументами функции потерь L, в процессе минимизации реализуются различные локальные минимумы этой многомерной функции и, как следствие, предсказания ИНС, входящих в ансамбль, различаются. Анализ поведения предсказаний ИНС в модельных пространствах $N_{\max} > N_{\max}^u$ для разных значений $\hbar\Omega$ позволяет исключить ИНС, приводящие к заведомо неверным результатам. Мы сформулировали следующие критерии отбора [24].

∘ Мягкий вариационный принцип (для энергий): из-за ошибок округления предсказания могут незначительно нарушать вариационный принцип. В наших расчетах допускаемое нарушение вариационного принципа при $N_{\max}^f = 300$ не превышает 0.1 кэВ.
∘ Принцип прямизны: слабая зависимость предсказаний от $\hbar\Omega$ при $N_{\max}^f = 300$. Максимально допустимая разность между максимумом и минимумом зависимостей от $\hbar\Omega$ составляет 2 кэВ для энергий и 0.002 фм для радиусов.
∘ Принцип сходимости (для энергий): для каждой ИНС из ансамбля определяется минимальное $N_{\max}^c \in \left[N_{\max}^u, N_{\max}^f\right]$, для которого: 1) разница между максимумом и минимумом предсказаний энергии $E(\hbar\Omega)$ не превышает 20 кэВ и 2) разница между минимумами энергий в пространствах $N_{\max}^c, N_{\max}^c + 2$ не превышает 1 кэВ. Из полученного распределения отбрасываются 20 % ИНС с наибольшими значениями $N_{\max}^c$.
∘ Дополнительно отбрасываются 5% сетей с наибольшими значениями функции потерь L.

ИНС, не удовлетворяющая любому из перечисленных критериев, исключается из дальнейшего анализа. Таким образом, в конечные результаты вносят вклад только ИНС, демонстрирующие стабильные и физически согласованные предсказания.

2.4. Статистический анализ предсказаний ансамбля ИНС, прошедших отбор. Для корректного описания результатов с учетом асимметричности распределения предсказаний ансамбля ИНС мы используем метод "boxplot rule", описанный в [30] и детально рассмотренный в [24]. В соответствии с ним распределение результатов по их величине разбивается на четыре области (квартили), в каждой из которых находится по 25 % результатов. Соответствующую медиане энергию обозначим как $\bar{E}$, энергии, определяющие границы первого и третьего квартилей — как $\bar{E} - \Delta\bar{E}_1$ и $\bar{E} + \Delta\bar{E}_2$. Затем результаты, находящиеся за пределами границ $[\bar{E} - \Delta\bar{E}_1 - 1.5\Delta\bar{E}]$ и $[\bar{E} + \Delta\bar{E}_2 + 1.5\Delta\bar{E}]$ (здесь $\Delta\bar{E} = \Delta\bar{E}_1 + \Delta\bar{E}_2$), отбрасываются. После фильтрации рассмотренная процедура повторяется, и в качестве окончательных предсказаний и соответствующих погрешностей принимаются значения $E^{+\Delta E_2}_{-\Delta E_1}$ обновленного распределения. Очевидно, в общем случае $\Delta E_2 \neq \Delta E_1$. Аналогично формируются предсказания и для среднеквадратичных радиусов.

Число отобранных обученных ИНС зависит от конкретной задачи, но, как правило, составляет не менее половины от исходного ансамбля из 1024 ИНС. Таким образом, статистическая достоверность наших предсказаний выше, чем в работах [16, 17], где конечные результаты получаются при обработке предсказаний 50 ИНС.

3. Результаты. На основе расчетов в NCSM с NN-взаимодействием Daejeon16 [25] мы провели экстраполяции энергий E и среднеквадратичных радиусов распределений точечных протонов r_p, нейтронов r_n и нуклонов (материи) r_m основных состояний ядер ^{6}He, ^{6}Li, ^{6}Be и возбужденных состояний $(0^+, 1)$ и $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li. Расчеты NCSM проводились с шагом по $\hbar\Omega = 2.5$ МэВ. Отметим, что увеличение числа данных для обучения за счет уменьшения шага по $\hbar\Omega$ не приводит к уточнению результатов.

Особый интерес с точки зрения демонстрации работы нашего метода [23, 24] представляет основное состояние ядра ^{6}Li, которое исследовалось с использованием других нейросетевых моделей [16, 17, 20–22] на основе идентичных расчетов в NCSM с NN-потенциалом Daejeon16 в модельных пространствах $4 \le N_{\max} \le 18$, но с различающимися обучающими наборами: в подходе ISU [17, 16] используются данные из диапазонов значений $\hbar\Omega \in [8, 50]$ МэВ (вариант ISU-a) или $\hbar\Omega \in [10, 30]$ МэВ (ISU-b [22]), в подходе TUDa [20, 21, 22] – из диапазона $\hbar\Omega \in [10, 20]$ МэВ.

Все подходы, основанные на машинном обучении, приводят к результатам для энергии основного состояния ^{6}Li, лежащим ниже широко используемой феноменологической экстраполяции B [3] (см. левую панель рис. 2). По сравнению с ISU и TUDa наш подход демонстрирует более быструю сходимость при включении в обучающий набор результатов NCSM, полученных в расчетах в бóльших модельных пространствах с числом квантов $N_{\max}$ вплоть до $N^u_{\max}$, и меньшую погрешность экстраполяций при всех $N^u_{\max}$ (менее 0.005 % при $N^u_{\max} = 18$).

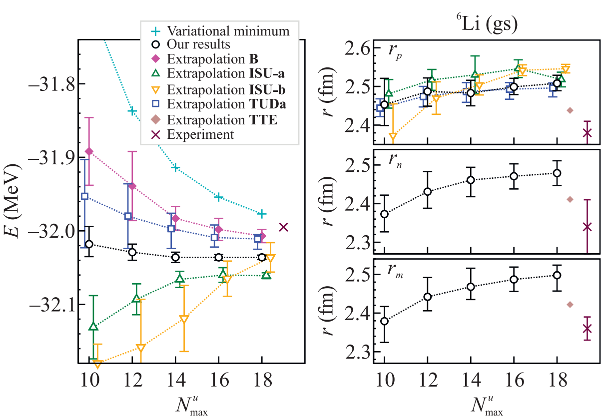

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сходимость экстраполяций энергии (слева) и среднеквадратичных радиусов (справа) основного состояния ядра ^{6}Li. Обозначения – на левой панели

Важно, что предсказания энергии основного состояния ^{6}Li во всех этих подходах статистически различимы: только при $N^u_{\max} = 10, 12$ наши результаты перекрываются с предсказаниями TUDa в пределах погрешности. Отметим, что предсказания TUDa с учетом погрешности перекрываются с экстраполяцией B. Сравнение двух вариантов расчетов в модели ISU наглядно показывает зависимость результатов экстраполяции от формирования обучающего набора: в варианте ISU-b сходимость отсутствует. Следовательно, применение методов машинного обучения для экстраполяции ядерных наблюдаемых требует аккуратности.

Первое возбужденное состояние $(3^+, 0)$ с энергией возбуждения $E^{ex} = 2.186$ МэВ находится в непрерывном спектре и распадается по каналу $\alpha + d$ с энергией 0.712 МэВ [31]. Интересно, что распад более высокого второго возбужденного состояния $(0^+, 1)$ с $E^{ex} = 3.563$ МэВ [31] по каналу $\alpha + d$ запрещен как по спин-четности, так и по изоспину, а порог следующего канала распада $\alpha + n + p$ лежит на 136 кэВ выше по энергии. Поэтому ширина состояния $(0^+, 1)$ $\Gamma = 8.2$ эВ обусловлена только электромагнитным переходом в основное состояние и ничтожно мала по сравнению с шириной состояния $(3^+, 0)$ $\Gamma = 20$ кэВ. Таким образом, второе возбужденное состояние является связанным.

Второе возбужденное состояние $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li и основные состояния $(0^+, 1)$ ядер ^{6}He и ^{6}Be образуют изоспиновый триплет. Основное состояние ядра ^{6}He слабосвязанное. Возбужденное состояние $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li, как отмечалось выше, также связанное. Протонно-избыточное ядро ^{6}Be в основном состоянии не связано и распадается по каналу $\alpha + p + p$, образуя резонанс с энергией 1.371 МэВ и шириной 92 кэВ. Несмотря на эти существенные различия, сходимости экстраполяций энергий (верхние панели рис. 3) во всех случаях хорошие: значения предсказаний стабилизируются начиная с $N^u_{\max} = 12$, а их погрешности уменьшаются. Это справедливо и для лежащего в непрерывном спектре состояния $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li. Таким образом, методы машинного обучения можно использовать для экстраполяции энергий, по крайней мере, достаточно узких резонансных состояний в ядрах с шириной, не превышающей 100 кэВ.

Окончательные предсказания энергий основных состояний ядер ^{6}Li, ^{6}He, ^{6}Be и возбужденных состояний $(0^+, 1)$ и $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li, полученные на основе обучающих наборов с $N^u_{\max} = 18$ в сравнении с экспериментальными данными и результатами экстраполяций других нейросетевых моделей и феноменологической экстраполяции B, приведены в табл. 1. Наи-

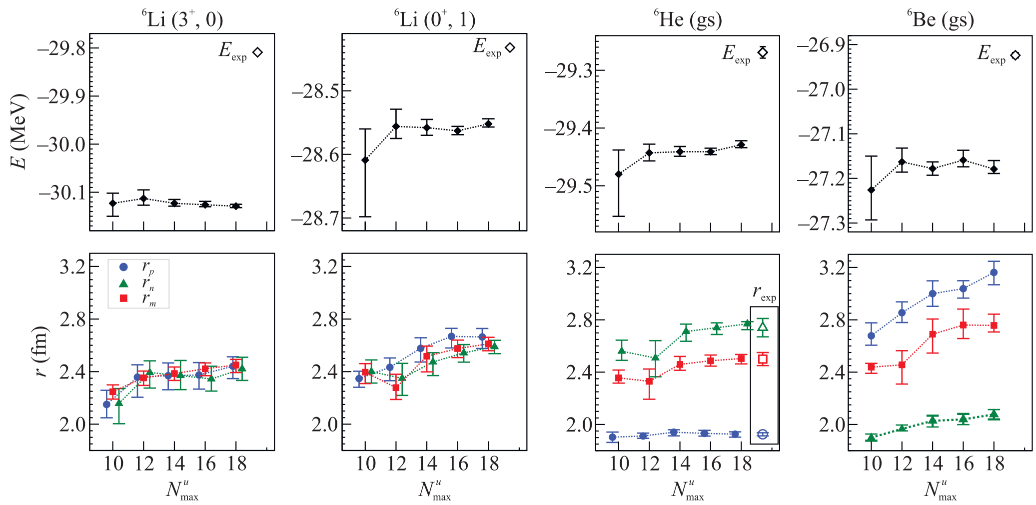

Рис. 3. (Цветной онлайн) Сходимость экстраполяций энергий (вверху) и среднеквадратичных радиусов (внизу) первого возбужденного состояния ядра ^{6}Li($3^+, 0$) и изотопического триплета состояний ядер ^{6}He(gs), ^{6}Li($0^+, 1$), ^{6}Be(gs). Экспериментальные данные (все энергии и среднеквадратичные радиусы ядра ^{6}He) представлены пустыми символами

Таблица 1. Результаты экстраполяций энергий (в МэВ) состояний ядер ^{6}He, ^{6}Li и ^{6}Be, полученные с $N^u_{\max} = 18$. Погрешности предсказаний приведены в круглых скобках, для асимметричных распределений указаны верхние и нижние пределы. Экспериментальные данные взяты из работы [31]

Our results	$E_{\exp}$ [31]	Other extrapolations	
^{6}**He** (gs)			
$-29.429^{+0.007}_{-0.005}$	$-29.269(10)$	$-29.41(1)$	**B**
^{6}**Li** (gs)			
$-32.036(3)$	-31.995	$-32.007(9)$ $-32.061(4)$ $-32.011^{+0.006}_{-0.014}$	**B** **ISU-a** **TUDa**
^{6}**Li** (3$^+$,0)			
$-30.129^{+0.004}_{-0.003}$	$-29.809(2)$	$-30.10(1)$	**B**
^{6}**Li** (0$^+$,1)			
$-28.552^{+0.008}_{-0.005}$	$-28.434(1)$	$-28.507(4)$	**B**
^{6}**Be** (gs)			
$-27.18^{+0.02}_{-0.01}$	$-26.924(5)$	-27.13(2)	**B**

Таблица 2. Результаты экстраполяций среднеквадратичных радиусов (в фм), полученные с $N^u_{\max} = 18$. Экспериментальные данные взяты из компиляции [32], результаты экстраполяции TTE ($N_{\max} = 14$) из [12] (^{6}He) и [13] (^{6}Li)

	Our results	Experiment	Other extrapolations	
^{6}**He** (gs)				
r_p	1.93(2)	1.925(12)	1.871(6)	TTE
r_n	$2.77^{+0.02}_{-0.04}$	2.74(7)	2.663(3)	TTE
r_m	$2.50^{+0.03}_{-0.04}$	2.50(5)	2.430(6)	TTE
^{6}**Li** (gs)				
r_p	2.51(2)	2.38(3)	2.438 2.518(19) $2.496^{+0.013}_{-0.023}$	TTE ISU-a TUDa
r_n	2.48(3)	2.34(7)	2.411	TTE
r_m	$2.50^{+0.03}_{-0.04}$	2.36(3)	2.422	TTE
^{6}**Li** (0$^+$, 1)				
r_p	$2.66^{+0.06}_{-0.09}$	–	2.443	TTE
r_n	2.59(5)	–	2.502	TTE
r_m	2.61(5)	–	2.467	TTE

большая относительная погрешность предсказания энергии при $N^u_{\max} = 18$ наблюдается для ядра ^{6}Be и не превышает $\sim 0.01\,\%$. Использование аккуратных экстраполяций на основе машинного обучение демонстрирует, что NN-взаимодействие Daejeon16 приводит к небольшим пересвязкам всех рассмотренных состояний: 41, 160, 256 и 320, 118 кэВ соответственно для энергий основных состояний ядер ^{6}Li, ^{6}He, ^{6}Be и состояний $(3^+, 0)$, $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li. Предсказанные значения энергий возбуждения состояний $(3^+, 0)$ и $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li (1.907 и 3.484 МэВ) немного меньше соответствующих экспериментальных значений (2.186 и 3.563 МэВ [31]).

Сходимость среднеквадратичных радиусов основного состояния ядра ^{6}Li более медленная, а относительные погрешности предсказаний – больше, порядка 1 % при $N^u_{\max} = 18$ (см. правую панель рис. 2). Окончательные предсказания r_p, r_n и r_m основного состояния ядра ^{6}Li (табл. 2) совпадают в пределах погрешности, что является следствием одинакового числа протонов и нейтронов и соответствует экспериментальной ситуации. Однако полученные нами значения этих радиусов больше экспериментальных [32] и результатов экстраполяции TTE [13]. В то же время, наши предсказания r_p хорошо согласуются с подходами TUDa и ISU-a.

Сходимость экстраполяций r_p, r_n и r_m слабосвязанного основного состояния ядра ^{6}He (см. рис. 3) не хуже, чем у основного состояния ядра ^{6}Li. Значения предсказаний и погрешности стабилизируются, начиная с $N^u_{\max} = 14$, и прекрасно согласуются в экспериментальными значениями. Радиус r_p ядра ^{6}He значительно меньше r_n, что обусловлено наличием в этом ядре пары слабосвязанных нейтронов. Погрешности экстраполяций радиусов ядра ^{6}He аналогичны погрешностям для экстраполяций радиусов в основном состоянии ^{6}Li. Интересно, что в пределах этих погрешностей полученное нами значение материального радиуса r_m ядра ^{6}He совпадает с радиусами r_p, r_n и r_m в основном состоянии ^{6}Li.

Для изоспин-аналога основного состояния ^{6}He – связанного состояния $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li, – наблюдаются аналогичные тренды сходимости среднеквадратичных радиусов. Как и в случае основного состояния ^{6}Li, мы получаем одинаковые в пределах погрешности значения радиусов r_p, r_n и r_m, но для самих этих экстраполированных значений радиусов и для оценки погрешности их экстраполяций в возбужденном состоянии $(0^+, 1)$ мы получаем несколько бóльшие значения, чем в основном состоянии ^{6}Li. Окончательные предсказания для среднеквадратичных радиусов основных состояний ^{6}Li и ^{6}He и возбужденного состояния $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li немного больше результатов TTE (см. табл. 2).

Третий член изоспинового триплета – основное состояние протонно-избыточного ядра ^{6}Be – не связано и распадается по каналу $\alpha + p + p$. Как видно на рис. 3, протонный радиус r_p растет с увеличением $N^u_{\max}$, т.е. сходимость r_p отсутствует, что и ожидается для резонансного распадающегося состояния. Нейтронный радиус r_n этого ядра существенно меньше протонного и тоже растет, но медленнее. Материальный радиус r_m принимает промежуточные значения и также не демонстрирует сходимость.

Для несвязанного состояния $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li следует также ожидать отсутствие сходимости экстраполяций радиусов r_p, r_n и r_m. Однако экстраполяции этих радиусов, как видно на рис. 3, стабилизируются в области $N^u_{\max} = 12{-}16$, и только при $N^u_{\max} = 18$ намечается небольшой рост экстраполированных значений, как бы намекающий на начало расходимостей радиусов при дальнейшем увеличении обучающего набора данных за счет включения в него результатов, полученных с бóльшими значениями $N_{\max}$. По всей видимости, это является артефактом медленной сходимости энергии дейтрона, что приводит к тому, что в расчетах в NCSM с $N_{\max} \leq 16$ с различными $\hbar\Omega$ основная часть результатов соответствует тому, что это состояние оказывается связанным, а канал распада $\alpha + d$ закрытым из-за недостаточного значения энергии связи дейтрона. В то же время, часть данных в обучающем наборе, соответствующая оптимальному для сходимости дейтрона интервалу $\hbar\Omega$, приводит к открытию канала распада этого состояния, а наличие таких разных данных для машинного обучения приводит к росту погрешностей экстраполяции радиусов в этом состоянии. Следует ожидать, что расчеты в NCSM с бóльшими значениями $N_{\max}$ действительно позволят получить расходящиеся экстраполяции радиусов в этом состоянии.

4. Заключение. В подходе с использованием машинного обучения, предложенного в работе [17] и модифицированного нами в работах [23, 24], проведена экстраполяция энергий и среднеквадратичных радиусов распределений точечных протонов, нейтронов и нуклонов, рассчитанных в NCSM с NN-взаимодействием Daejeon16 с использованием кода MFDn [33–36] в модельных пространствах вплоть до $N^u_{\max} = 18$. Впервые подобный подход применен к анализу состояний непрерывного спектра. Благодаря использованию большого ансамбля ИНС предлагаемой топологии, аккуратному формированию обучающего набора и строгим критериям отбора обученных ИНС, наш подход гарантирует высокую достоверность предсказаний.

Показано, что методы машинного обучения применимы для экстраполяции энергий не только связанных, но и резонансных состояний в ядрах, по крайней мере для резонансов с шириной до 100 кэВ. Экстраполированные значения энергий основных состояний ядер ^{6}He, ^{6}Li, ^{6}Be и возбужденных состояний $(3^+, 0)$, $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li, полученных в расчетах в NCSM с NN-взаимодействием Daejeon16 [25], лежат ниже результатов феноменологической экстраполяции B [3] и экспериментальных данных – от 41 кэВ для основного состояния ядра ^{6}Li до 320 кэВ для возбужденного состояния $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li. Экстраполяции энергий связанных и несвязанных состояний демонстрируют хорошую сходимость с ростом $N^u_{\max}$ с относительной погрешностью, не превышающей 0.01 %.

В отличие от энергий, сходимость экстраполяций среднеквадратичных точечных радиусов наблюдается только для связанных состояний: основных состояний ядер ^{6}Li, ^{6}He и состояния $(0^+, 1)$ ядра ^{6}Li (с относительными погрешностями ~ 1 %). Предсказания точечных радиусов r_p, r_n, r_m основного состояния ядра ^{6}Li лежат выше экспериментальных значений, тогда как для слабосвязанного основного состояния ядра ^{6}He результаты экстраполяций радиусов в пределах погрешностей совпадают с экспериментом.

В случае экстраполяции среднеквадратичных точечных радиусов основного состояния протонноизбыточного ядра ^{6}Be сходимости не наблюдаются: результаты растут по мере увеличения $N^u_{\max}$. По всей видимости, при включении в обучающий набор результатов расчетов в NCSM с бóльшими значениями $N_{\max}$, не будет сходимости экстраполяций радиусов и для несвязанного возбужденного состояния $(3^+, 0)$ ядра ^{6}Li, распадающегося по каналу $\alpha + d$.

В целом наши исследования показывают, что машинное обучение является перспективным инструментом для решения задач экстраполяции расчетов *ab initio* в теории структуры ядра. Предложенный метод универсален и может применяться к другим наблюдаемым ядер: квадрупольным моментам, вероятностям электромагнитных переходов и т. д.

Финансирование работы. Работа поддержана Российским научным фондом, грант # 24-22-00276.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. R. Barrett, P. Navrátil, and J. P. Vary, Prog. Part. Nucl. Phys. **69**, 131 (2013).
2. S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, P. Maris, R.J. Perry, A. Schwenk, and J.P. Vary, Nucl. Phys. A **801**, 21 (2008).
3. P. Maris, J. Vary, and A. Shirokov, Phys. Rev. C **79**, 014308 (2009).
4. R. Roth, Phys. Rev. C **79**, 064324 (2009).
5. R.J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **86**, 031301 (2012).
6. S. A. Coon, M. I. Avetian, M. K. G. Kruse, U. van Kolck, P. Maris, and J.P. Vary, Phys. Rev. C **86**, 054002 (2012).
7. E. D. Jurgenson, P. Maris, R. J. Furnstahl, P. Navrátil, W. E. Ormand, and J. P. Vary, Phys. Rev. C **87**, 054312 (2013).
8. S. N. More, A. Ekström, R. J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **87**, 044326 (2013).
9. R. J. Furnstahl, S. N. More, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **89**, 44301 (2014).
10. R.J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, and K. A. Wendt, J. Phys. G **42**, 034032 (2015).
11. K. A. Wendt, C. Forssén, T. Papenbrock, and D. Sääf, Phys. Rev. C **91**, 061301 (2015).
12. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, Phys. Rev. C **106**, 034305 (2022).
13. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, JETP Lett. **118**, 153 (2023).
14. A. M. Shirokov, A. I. Mazur, and V. A. Kulikov, Phys. At. Nucl. **84** (2), 131 (2021).
15. A. Boehnlein, M. Diefenthaler, N. Sato et al. (Collaboration), Rev. Mod. Phys. **94**, 031003 (2022).
16. G. A. Negoita, G. R. Luecke, J. P. Vary, P. Maris, A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, E. G. Ng, and C. Yang, *Computational Tools 2018: The Ninth International Conference on Computational Logics, Algebras, Programming, Tools, and Benchmarking*, IARIA, Wilmington, DE, USA (2018), p. 20.
17. G. A. Negoita, J. P. Vary, G. R. Luecke, P. Maris, A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, E. G. Ng, C. Yang, M. Lockner, and G. M. Prabhu, Phys. Rev. C **99**, 054308 (2019).
18. W. G. Jiang, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **100**, 054326 (2019).
19. I. Vidaña, Nucl. Phys. A **1032**, 122625 (2023).
20. M. Knöll, T. Wolfgruber, M. L. Agel, C. Wenz, and R. Roth, Phys. Lett. B **839**, 137781 (2023).
21. T. Wolfgruber, M. Knöll, and R. Roth, Phys. Rev. C **110**, 014327 (2024).
22. M. Knöll, M. Lockner, P. Maris, R. J. McCarty, R. Roth, J. P. Vary, and T. Wolfgruber, arXiv:2501.18252 (2025).
23. A. I. Mazur, R. E. Sharypov, and A. M. Shirokov, Mosc. Univ. Phys. Bull. **79**(3), 318 (2024).
24. R. E. Sharypov, A. I. Mazur, and A. M. Shirokov, Phys. At. Nucl. **87**, Suppl. 2, S400 (2024).
25. A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris, and J. P. Vary, Phys. Lett. B **761**, 87 (2016).
26. X. Le, N. Wang, and X. Jiang, Nucl. Phys. A **1038**, 122707 (2023).
27. D. P. Kingma and J. Ba, arXiv:1412.6980 [cs.LG].
28. S. Ruder, arXiv:1609.04747 [cs.LG] (2023).
29. S. Haji and A. Abdulazeez, PalArch's J. of Archaeology of Egypt/Egyptology **18**(4), 2715 (2021).
30. R. R. Wilcox, *Basic Statistics. Understanding Conventional Methods and Modern Insights*, Oxford University Press, Cary, NC, USA (2009).
31. D. Tilley, C. Cheves, J. Godwin, G. Hale, H. Hofmann, J. Kelley, C. Sheu, and H. Weller, Nucl. Phys. A **708**, 3 (2002).
32. I. Tanihata, H. Savajols, and R. Kanungo, Prog. Part. Nucl. Phys. **68**, 215 (2013).
33. H.M. Aktulga, C. Yang, E.G. Ng, P. Maris, and J.P. Vary, Concurr. Comput.: Pract. Exp. **26**, 2631 (2014).
34. P. Maris, M. Sosonkina, J. P. Vary, E. Ng, and C. Yang, Proc.Comput. Sci. **1**, 97 (2010).
35. P. Maris, C. Yang, D. Oryspayev, and B. C. Cook, J. Comput. Sci. **59**, 101554 (2022).
36. B. Cook, P.J. Fasano, P. Maris, C. Yang, and D. Oryspayev, in *Proceedings of the 8th InternationalWorkshop, WACCPD2021, Lecture Notes in Computer Science 13194*, ed. by S. Bhalachandra, C. Daley, and V. Melesse Vergara, Springer, Cham, Switzerland (2022).