利用全局物理驱动机器学习模拟器，将电磁矩与核相互作用联系起来

Jose M. Munoz,[1] Antoine Belley,[1] Andreas Ekstr¨om,[2] Gaute Hagen,[3,4] Jason D. Holt,[5,6] 和 Ronald F. Garcia Ruiz[1]
[1] *Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts 02139, USA* [2] *Department of Physics, Chalmers University of Technology, SE-412 96 Göteborg, Sweden* [3] *Physics Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, USA* [4] *Department of Physics and Astronomy, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA* [5] *TRIUMF, Vancouver, BC V6T 2A3, Canada* [6] *Department of Physics, McGill University, Montréal, QC H3A 2T8, Canada*（日期：2026年3月31日）

理解核相互作用的特定分量如何塑造原子核的可观测性质，仍然是核结构研究中的核心挑战。尽管以往研究主要关注核能和电荷半径等整体可观测量，但不同的核相互作用算符分量如何影响核电磁矩等互补可观测量，尚不清楚。在此，我们开发了一种全球性的物理约束模拟器，以建立电磁矩与手征核力分量之间的定量联系。不同于独立改变低能常数的传统敏感性分析，我们在考虑物理支持的参数流形内部相关性的同时，对参数贡献进行了量化。我们表明，与整体可观测量不同，电磁矩能够探测相互作用中互补的自旋和同位旋扇区，并表现出显著的同位素依赖的敏感性。这些发展使我们能够定量评估未来测量的重要性，并为当前实验可及范围之外的可观测量提供具有量化不确定度的预测。

arXiv:2603.26905v1 [nucl-th] 27 Mar 2026

I. 引言

将自然界的基本力与原子核中涌现的复杂性联系起来，仍然是核科学面临的核心挑战之一。第一性原理 核理论 [1] 为建立这种联系提供了一个框架：通过手征有效场论（χ有效场论） [2–4]将量子色动力学（QCD）与核结构联系起来。然而，对于核相互作用的特定分量如何驱动跨越核素图的复杂核现象，目前仍缺乏统一的定量理解。

在 χ有效场论中，核力由一组低能常数（LEC）参数化，通常通过核子–核子散射和少体数据进行标定，并常辅以一小组额外的核结构可观测量 [5, 6]。理想情况下，第一性原理 框架应能稳健地传播计算物理可观测量时的主要不确定性来源。然而，要完整传播参数不确定性，需要复杂的统计程序，并需要进行数百万次模型评估 [7–9], 。鉴于最先进多体方法所需的计算资源，这在计算上是不可能实现的 [10]。

这一局限推动了核多体模拟器的快速发展，过去几年间逐渐形成了两种截然不同的方法。物理驱动的降阶基方法（RBM），例如特征向量延拓 [7, 11, 12] 以及与之密切相关的参数矩阵模型（PMM） [13], ，保留了哈密顿量结构并能保证外推，但通常局限于局部子空间。相比之下，数据驱动方法具有更强的表达能力，可用于插值，但缺乏可控的外推能力。一种近期开发的方法 BANNANE [14], 弥合了这一差距，成为首个能够学习多个原子核间变化趋势的模拟器。

在本工作中，我们提出两项关键的方法学进展，从而能够在核相互作用参数与复杂原子核的性质之间建立全局且忠实于物理的联系。首先，我们开发了一种全局物理驱动模拟器，将投影矩阵方法推广到多同位素核结构预测，学习组态相互作用计算中有效哈密顿量和算符随原子核及模型空间保真度的演变。该架构保留了哈密顿量结构，确保在模型空间截断之间进行受控外推，并能够快速、准确地预测同位素链中的能量和电磁可观测量。其次，我们提出一种基于夏普利值的后验积分重要性分析 [15]。这种后验积分敏感性框架超越了传统方法，即使输入参数彼此相关，也仍有明确定义，因此能够在参数空间的物理支持区域（即后验分布）内剖析各个低能常数的贡献。结合这两种方法，我们得以更深入地描绘手征相互作用的不同组成部分如何影响同位素链中的体性质和电磁矩，并揭示以往模拟器或基于先验的分析无法探查的敏感性模式。

在验证该模拟器能够为钙同位素链复现高保真度结果后，我们绘制了预测可观测量对低能常数的敏感性图谱。这揭示出，电磁相互作用（EM）矩提供的信息与结合能所提供的信息高度互补

和电荷半径。我们证明，这种独立性如今使得能够有针对性地改进手征相互作用，为指导新实验并最大限度地发挥其影响提供了定量依据。

II. 方法

我们采用动量空间中的 χ有效场论描述二核子（NN）和三核子（3N）相互作用，其中包含 Δ同位旋不变项，计算至次次领先阶（N^{2}LO）， [16] 调节器截断为394兆电子伏特。我们采用由文献 [17], 推导出的$\mathcal{O}(10^4)$ 个可信的17个低能常数取值组成的集合；该集合覆盖了与核子-核子散射相移以及截至 ^{4}He的少体系统束缚态可观测量相容的参数空间。

直接通过多体求解器传播这一庞大的集合在计算上难以实现，因此，我们通过对具有代表性的相互作用子集求解价空间介质相似性重整化群（VS-IMSRG） [18, 19] 方程，构建了一个高保真度训练集。我们使用 imsrg++ [20] 代码对哈密顿量和算符进行一致演化，随后通过壳模型代码KSHELL [21]进行精确对角化。这些计算涵盖了一系列单粒子模型空间截断（ $e_{\max} \in \{4, 6, 8, 10\}$），其中单粒子态由主量子数 n 和轨道角动量l的 $e = 2n + l$ 表征。这种多保真度设计使模拟器能够主要从计算成本较低的小模型空间中学习收敛模式，从而以极低的计算成本对完整相互作用集合进行预测。

为全面解析核力的自旋-同位旋结构，我们还使用与哈密顿量 [22] 一致演化的算符，计算磁偶极矩（μ）和电四极矩（Q）。计算磁矩和四极矩时，不使用唯象有效g因子或有效电荷；质子和中子的多体贡献均通过 VS-IMSRG 演化自然地产生重整化。算符的完整定义及分解详见补充信息 SI A。

全局物理驱动模拟。

我们将把我们的模拟器——保真度解析仿射矩阵模拟器（Fidelity-Resolved Affine Matrix Emulator，FRAME）称为一个映射$g(Z,\ N,\ f,\ \boldsymbol{\alpha}) \mapsto\ \{E, \langle O_q \rangle\}$，该映射针对每个原子核（$Z,\ N$）、模型空间保真度 f（即 $e_{\max}$）和LEC向量 $\boldsymbol{\alpha}$，对能级 E 以及 $\langle O_q \rangle \in \{R_{ch}, \mu, Q\}$的期望值进行建模，并给出一组一致的结果。其构建遵循两项设计原则：(i) 不同保真度下的预测通过依次增大模型空间的规模进行分层控制；(ii) 其依赖关系对 $\boldsymbol{\alpha}$ 仍保持仿射形式，这由我们所采用的 χ有效场论相互作用的结构所决定。

为实现这一点，FRAME 将全局骨干网络与受物理启发的算符核心相结合，并采用 BANNANE 编码器 [14],，即使用离散嵌入和线性调制层，将 $(Z、\ N、\ f)$ 映射到潜在空间 $\mathbf{h}(Z、\ N、\ f)$，如图 1 所示。这种表示方式能够组织同位素链内及不同保真度之间的关联，但不依赖于具体的核相互作用。

算符核心的灵感来自 PMMs [13]。对于每个 $(Z, N, f, \boldsymbol{\alpha})$，它将有效哈密顿量和可观测量算符构建为低维厄米矩阵，其元素取决于向量 $\mathbf{h}$ 和 $\boldsymbol{\alpha}$，从而实现可控外推。保真度共享一个共同的无限空间 极限，此外还包含少量学习得到的收敛模式，因此，更高$e_{\max}$ 的预测可以改进较低 $e_{\max}$下的预测。随后，通过对有效哈密顿量进行对角化，并与相应算符构造双线性形式，得到能量和可观测量。模型的完整说明见补充信息 SI B。我们还使用未纳入训练的精确 VS-IMSRG 计算，对模拟器的输出进行了独立验证。我们也将模拟器预测与子空间投影耦合簇 [7] 方法得到的结果进行了比较，针对的是 ^{40}Ca 的电荷半径和能量，结果吻合良好（见补充信息）。此外，该模拟器的开源实现可通过参考文献 [23]公开获取。这个全局代理模型为深入研究参数化手征相互作用的低能常数如何影响核结构奠定了基础。由于 FRAME 模拟的是 VS-IMSRG 计算，它忠实再现了这些计算所描述的物理，同时也承袭了其系统性局限，包括多体截断和算符截断效应。

后验抽样与历史匹配

使用 FRAME 探索的低能常数流形继承自文献 [17, 24]中的 χ有效场论校准。这些研究提供了一组相互作用，每个相互作用均由一个包含 17 个低能常数取值的向量指定 $\boldsymbol{\alpha}$。该系综通过 历史匹配 [9, 25, 26]构建：将少体核和无限核物质的快速模拟器与选定数据进行比较，并逐步排除低能常数空间中无法在综合实验与理论误差预算范围内再现这些数据的区域。最终得到一簇 $\mathcal{O}(10^4)$ 不太不合理的 相互作用参数化，它们能够描述质量数为 $A = 2 - 4$ 的轻核基态能量和点质子半径。本研究将这组相互作用样本用作低能常数的均匀先验分布。随后，通过将低能常数的多元高斯似然 $\mathcal{L}$ 与 $A = 2 - 4$ 或 $A = (2 - 4) + 16$ 中的数据进行比较来计算该似然，即包括 ^{16}O 的基态能量和点质子半径。对于每个校准点 k，总方差

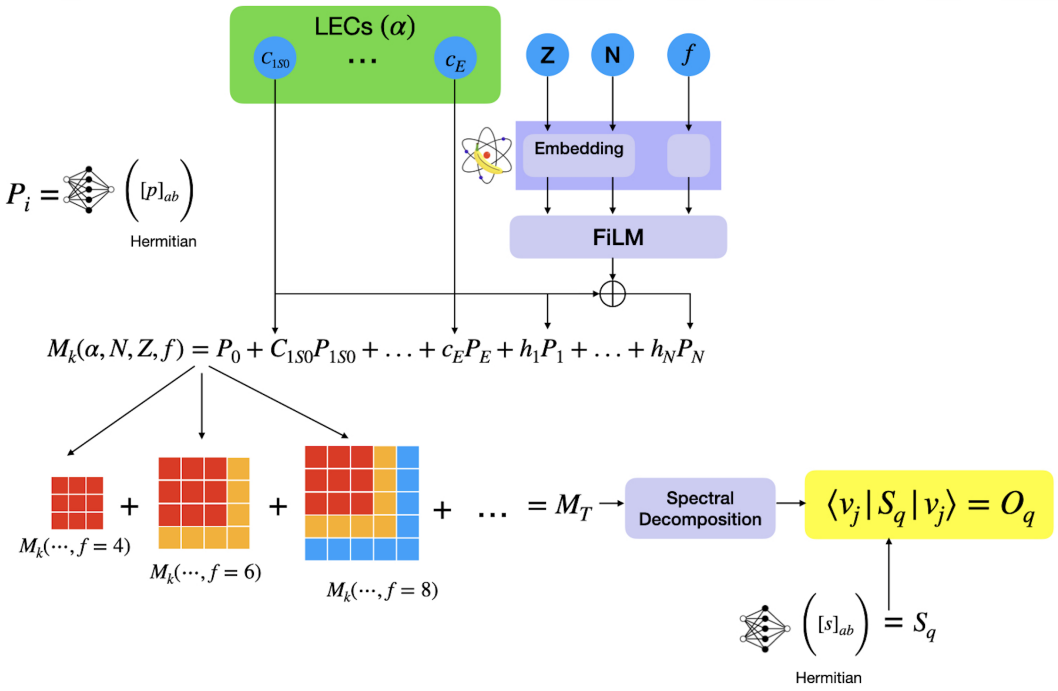


图 1. **保真度分辨仿射矩阵模拟器（FRAME）的架构**。该模拟器将 LEC 向量 α、核标识符（Z, N）和模型空间保真度 f 映射为核能和电磁可观测量。上：核标识符被嵌入连续的潜在表示中，而低能常数则直接输入算符核心。中：对于每个原子核和保真度，有效哈密顿量被构造为仿射组合 $M_k(\alpha) = P_0 + \sum_i \alpha_i P_i + \sum_j h_j P_j$ $\{P_i\}$，N, Z, f)。这里的为学习得到的厄米基矩阵，它们保留了手征相互作用所规定的、对低能常数的仿射依赖。左下：通过逐级增大模型空间的规模，对连续保真度（e_{max}）下的预测进行分层控制。右下：对组装后的矩阵 M_T进行谱分解，得到能量和本征矢量 v_j。随后，将可观测量期望值 O_q计算为双线性形式 $\langle v_j|S_q|v_j\rangle$，其中 S_q是采用相同架构构造的厄米算符。

由实验、模拟器、手征有效场论截断和多体截断不确定度以平方和开方的方式合并而成，$\sigma^2_{k,\text{tot}} = \sigma^2_{\text{exp}} + \sigma^2_{\text{emu}} + \tau^2_{\chi} + \sigma^2_{\text{MBT}}$（详情见 SIII B）。后验分布以加权样本 $\{\boldsymbol{\alpha}_i, w_i\}$ 表示，其中 w_i 分别是针对 $\mathcal{L}_{2-4}$ 或$\mathcal{L}_{(2-4)+^{16}\text{O}}$的未归一化似然权重。

非不可信系综通过随机抽样 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 并进行 VS-IMSRG 计算，定义了模拟器的训练所覆盖的低能常数空间区域；随着计算更高（模型空间）保真度，样本数量逐渐减少。我们使用最高训练保真度（$e_{\max}$=10）下非不可信相互作用的留出测试集，将模拟器与底层 VS-IMSRG 计算结果进行比较验证。结果表明，对于所有可观测量，拟合效果良好，且未显示出随质量数 A 变化的系统偏差（详情见补充信息 B）。

利用此映射（Z, N, f, $\boldsymbol{\alpha}_i$） $\mapsto \{E, R_{\text{ch}}, \mu, Q\}$，通过对低能常数后验分布进行边缘化，可得到可观测量 $Y \in \{E, R_{\text{ch}}, \mu, Q\}$ 的后验预测分布

后验分布：

$$p(Y \mid \mathcal{D}) = \int g(Z, N, f, \boldsymbol{\alpha})\, p(\boldsymbol{\alpha} \mid \mathcal{D})\, d\boldsymbol{\alpha} \approx \sum_i w_i\, g(Z, N, f, \boldsymbol{\alpha}_i),$$

其中， $\mathcal{D}$ 表示校准数据， g 表示 FRAME 模拟器， w_i 表示根据所用似然得出的归一化后验权重。下文结果中，E、 R_{ch}、 μ和 Q的所有后验预测均以带状区域表示，反映了每种同位素和可观测量对应的低能常数及模拟器的综合信念度（DoB）。

低能常数重要性的沙普利敏感性分析

为评估并应用我们的研究进展，我们定量研究了低能常数对钙同位素链（E、 R_{ch}、 μ和 Q）上各种核可观测量的影响。钙同位素链具有质子幻数 $Z = 20$，并在 $N = 20$，28、32和34处具有多个中子壳层和亚壳层闭合，因此为核理论提供了一个试验场。在这些

闭合附近，多体关联减弱，从而最大限度地降低了对多体方法的依赖，并能可靠地联系到核力。

为量化不同低能常数在解释核可观测量数值方面的重要性，我们进行了后验积分 Shapley 分析。对于每个固定的 $(Z,\ N,\ e_{\max})$ 和可观测量 $Y \in \{E, \langle O_q \rangle\}$，我们将 FRAME 作为映射 $\boldsymbol{\alpha} \mapsto Y$，作用于由$\mathcal{L}_{2-4+}{}^{16}$O 得出的后验分布加权的历史匹配低能常数组合集。

随后，我们计算每个低能常数和样本 [27]的 Shapley（SHAP）归因。单个 SHAP 值是低能常数 i 在所有可能的低能常数排序中的平均边际贡献。收集所有低能常数的归因后，我们使用权重 w_i 计算后验加权平均。由于非不可信系综上的先验分布均匀，这些权重即为定义预测带的似然权重。由此得到归一化的重要性占比，它不仅量化方差，还量化物理支持区域内各低能常数引起的可观测量变化的平均幅度。根据构造，这种方法将总预测拆解为来自手征相互作用的加性贡献，从而能够识别支配特定可观测量的具体物理机制。

与早期的 Sobol 类方差分析相比，一个重要区别是，SHAP 分析可以在后验分布上进行，因此能够兼顾低能常数之间的相关性，以及历史匹配流形的非平凡几何结构。事实上，Sobol 分析必须针对一组相互独立分布的参数值来定义，例如一个超矩形。因此，这类分析通常使用一个不可避免地包含过大范围、不合理相互作用的区域，从而忽略相关性信息。相比之下，我们的后验积分方法将敏感性分析限制在由历史匹配确定的流形上。这确保我们只将重要性归因于那些既能维持对少体数据保真度的参数变化，从而忠实反映受约束相互作用如何驱动多体可观测量的分布。方法的算法与统计细节见补充信息 C。为便于解读，我们还将各个低能常数的 SHAP 份额归为长程和短程相互作用扇区，以揭示它们沿同位素链及在不同可观测量中的变化。

III. 结果

多种核可观测量的敏感性分析

在传播低能常数空间中的不确定度后，成功再现实验数值和变化趋势，这引出了一个关键问题：每种可观测量包含多少信息。电荷半径和磁矩是否探测相同的底层参数依赖关系，决定了电磁矩能在多大程度上提供额外的有用信息。为对此进行量化，我们计算了钙同位素链 $^{37-55}$Ca 中 $E,\ R_{ch}, \mu$ 和 Q 的低能常数的后验加权重要性，如图 2 所示。面板 (a) 和 (b) 显示，结合能和电荷半径对低能常数的敏感性几乎不受中子数影响，这表明钙同位素链中整体可观测量所含信息高度冗余。此外，对于这两种可观测量，低能常数重要性主要由一组固定的低能常数决定，尤其是双π介子交换（TPE）（c_2）和三核子相互作用（c_D, c_E），且与中子数无关。这一趋势与此前针对 O、Ge 和 Ni 的基于方差的研究结果一致 [7, 14, 24]。

相比之下，电磁磁矩的低能常数重要性占比（图 2c 和图 2d）随中子数变化呈现出明显更为多变的结构，重要性不再由单组低能常数主导，而是呈现出丰富的、同位素依赖的离散分布。在低能常数空间中，SHAP重要性不再表现为单一的主导脊线，而是对于 μ和 Q 分裂成多个岛状区域，沿同位素链时隐时现。

这一有趣的结果表明，多种不同的相互作用项共同驱动钙同位素链上的物理过程，其中一些可以用简单的壳模型图像来理解。例如，三重态–P接触低能常数在磁矩中表现出很强的中子数依赖性，而 E 和 R_{ch} 则没有（见图 2c）。这种敏感性并非静态不变；随着价中子从 $f_{7/2}$ 壳层（$^{41-48}$钙）迁移至$p_{3/2}$ （$^{49-52}$钙）和$p_{1/2}$（$^{53-55}$钙）轨道，这种敏感性会发生显著变化。

此外，三核子相互作用（$c_D,\ c_E$）也表现出很强的波动性，其贡献会随同位素不同而在正负之间转换。与结合能和半径中观察到的静态干涉不同，三核子力对 μ的贡献会在壳层接近填满前陡增（图中以位于$N = 20,\ 28,\ 32$处的虚线标示）。另一方面，对于 Q，$c_D,\ c_E$ 的贡献在壳层闭合前达到最大值，并在开壳层原子核中下降。这表明三核子力会影响壳层闭合处或附近的可观测量。

为了解这一波动性的物理驱动因素，我们在图3中考察了总磁矩的分扇区重要性。总重要性主要由次领头阶自旋轨道接触项（$C_{S,\ P}$，绿色曲线）驱动，这些接触项决定了单粒子能级劈裂，进而决定价核子的角动量与自旋混合（$l_z,\ \sigma_z$）。不过，在壳层闭合处出现了一个显著特征：三核子相互作用（$c_D,\ c_E$，橙色曲线）的重要性在 $N = 20$ 和 $N = 28$处陡增，并在 $N = 32$处再次陡增。

μ的同位素依赖重要性模式表明，磁矩对低能常数空间中某些方向的线性组合敏感，而这些方向仅凭 E 和 R_{ch} 难以得到充分约束。为了研究磁矩能提供多少额外信息，我们将

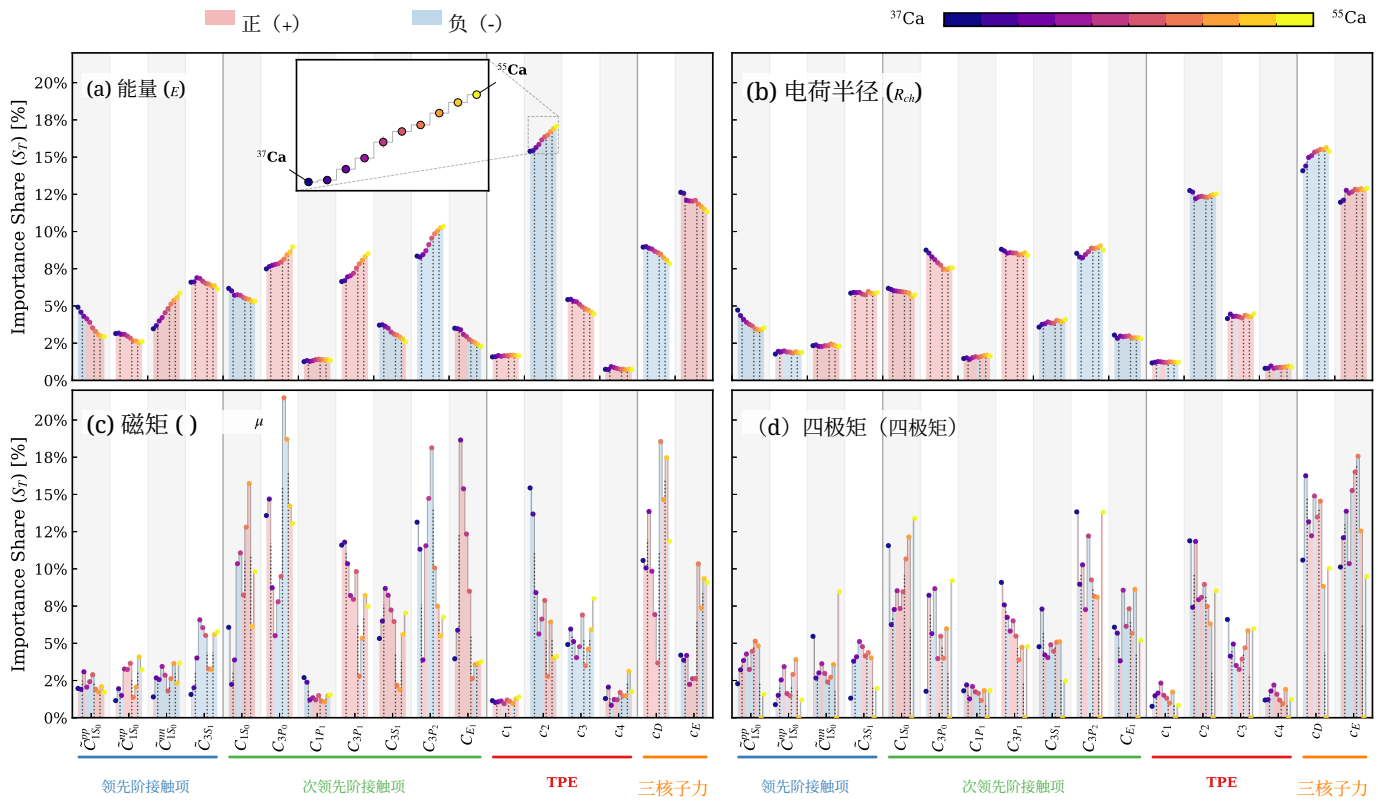


图 2. **整体可观测量与电磁可观测量的信息含量对比**。钙同位素链（^{37}Ca–^{55}Ca）上，(a) 结合能（E）、(b) 电荷半径（R_{ch}）、(c) 磁四极矩（μ）和 (d) 电四极矩（Q）的后验加权敏感性分析（S_T）。红色和蓝色柱分别表示对可观测量数值的平均正向和负向低能常数贡献。整体可观测量（上排）的低能常数重要性占比不随中子数变化，并且由特定标量耦合主导；而电磁矩（下排）的重要性占比分布分散且随同位素变化，波动很大，表明自旋-同位旋相互作用的重要性会随中子数改变。面板 a) 展示了沿同位素链变化的次领先阶双π介子交换低能常数 c_2 重要性的放大视图。

使用 ^{39,47,49,51}Ca中一组精简的磁矩校准集，对历史匹配低能常数组合集进行有针对性的贝叶斯更新。该选择聚焦于相对于 $N = 20$，28，32 [28, 29]闭壳的单粒子和单空穴组态，从而最大限度地减少多体截断误差。这样便可利用 sd、$f_{7/2}$和$p_{3/2}$ 轨道各自不同的单粒子演化来约束低能常数，从而尽量减少多体关联的影响。需要指出的是，我们的目标并非对低能常数值进行新的全局拟合，而是展示重要性分析所识别的信息如何转化为更集中的、重新组织的低能常数后验分布。

对于每个校准同位素，我们使用高斯似然，对每个 μ 的实验值进行贝叶斯更新；总方差由四种不确定度的平方和开方得到：实验不确定度和模拟器不确定度，以及由 χ有效场论 截断和多体方法导致的两种主要系统不确定度。对于前者，我们根据采用成熟相互作用计算得到的钙同位素磁偶极矩预测值的观测离散度进行估算 [29]

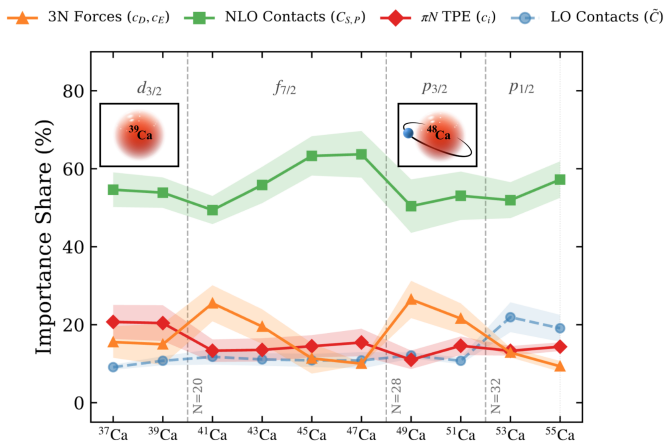


图 3. **按物理扇区解析的 重要性**。沿钙同位素链聚合的 μ 后验加权重要性，按物理扇区汇总。阴影区域表示各物理扇区内的标准差，而非统计不确定性。图中以两幅示意图分别表示几乎具有单个中子空穴的情形（^{39}Ca）和单粒子中子极限情形（^{49}Ca）。

1.8/2.0 (EM) [30],ΔNNLO$_{GO}$(394) [31], 和 NNLO$_{sat}$ [5]。对于多体截断不确定度，我们取主壳层计算结果与现有的 ΔNNLO$_{GO}$(394)多壳层计算结果之差的一半。算符不确定度被视为次要因素（见补充信息 SIII B）。

后验权重是将乘积似然 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\alpha}) = \prod_{N\in\{19,27,29,31\}} \mathcal{L}_N(\boldsymbol{\alpha})$ 经高斯因子权重温度调节后，与初始似然权重相乘得到的。关键的是，这一更新会引发低能常数后验分布的结构性重组；它并非只是缩小参数空间体积，而是强化了耦合常数之间的相关性，从而识别出仅凭 E 和 R_{ch} 仍无法有效约束的物理依赖关系。实际而言，这一更新以一种既能在低维投影中直观呈现、又能在完整空间中通过方差降低进行量化的方式，重塑了低能常数的分布： $\Delta\log|\Sigma| = \log|\Sigma_{\text{prior}}| - \log|\Sigma_{\text{post}}| = 1.2$。值得注意的是，在所分析的所有权重温度调节方案中，这一指标均为正（见 SIII C），同时有效样本量在统计上保持稳健（见补充信息）。这证实，磁矩数据提供了重要约束，同时并不违背相互作用的先验几何结构。

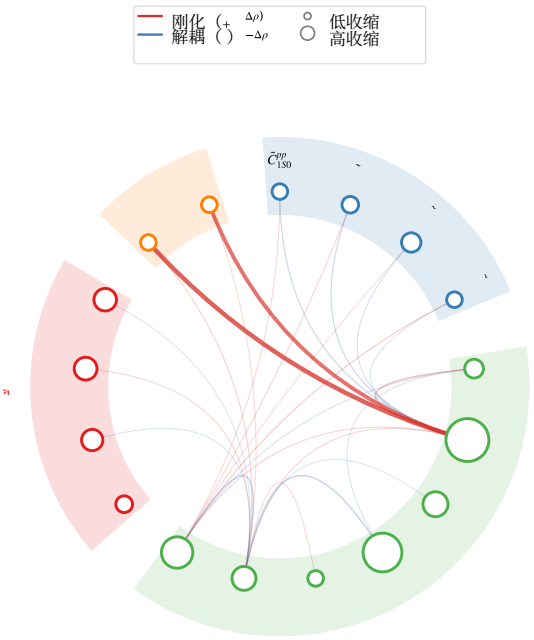


图 4. 磁矩更新导致的手征LEC相关矩阵变化。我们展示$\Delta\rho_{ij} = \rho_{ij}^{\text{post}} - \rho_{ij}^{\text{prior}}$。

红色弧线标示磁矩施加更严格约束的参数对（锁定），蓝色弧线则表示先验简并的消解（解耦）。仅显示具有统计显著性的 ($\sigma > 1.5$) 差异。节点大小与边际后验收缩程度 ($1 - \sigma_{\text{post}}/\sigma_{\text{prior}}$) 成正比。

磁矩数据的主要影响并非独立地压缩参数空间体积，而是重组手征相互作用的相关结构。为量化这一结构变化，我们通过定义差分相关矩阵 $\Delta\rho_{ij} = \rho_{ij}^{\text{post}} - \rho_{ij}^{\text{prior}}$，比较历史匹配（使用 $\mathcal{L}_{2-4+^{16}O}$ 的 ρ^{prior}）与更新后的（使用 $\mathcal{L}_{2-4+^{16}O+\mu_{\text{钙}}}$ 的 ρ^{post}）系综的相关矩阵。在所得网络中（图 4），正值（红色连线）显示磁矩在哪些方面加强了低能常数之间的联合约束，而负值（蓝色连线）则表明先验简并在哪些方面得以解除。

三核子接触项与次领先阶接触项之间观测到的显著刚化（图 4 中的红色弧线），源于它们沿同位素链的影响各不相同。三核子贡献在单体部分对 μ 的影响在壳层闭合处（^{39}钙、 ^{51}钙）呈现尖峰，而次领先阶效应则大多受到抑制，或具有不同的结构。这种差异使三核子力无法像对结合能那样，作为次领先阶变化的简单整体补偿项，

使两个扇区强烈相关。

与实验数据的比较

在考察可观测量的物理驱动因素之前，我们首先确认，传播后验能够涵盖钙同位素链相关的物理尺度。图 5 展示了电荷半径和电磁矩的整体演化，并将 FRAME 预测的 68% 置信度（DoB）后验分布与实验数据进行了比较。从头算核

理论面临的一项长期挑战，是同时再现结合能和绝对电荷半径；拟合以再现能量的相互作用往往会低估半径 [32, 33]。然而，我们发现，非不可信系综对整个同位素链上绝对电荷半径的实验尺度给出了较好的一致结果（图 5，上图）。如补充材料 S14）所述，通过计算均方根电荷半径的变化，可以消除相关误差。我们指出，再现 ^{40}Ca 与 ^{48}Ca 之间的拱形变化，以及 ^{48}Ca 之后的急剧增大，仍然是第一性原理方法面临的挑战 [32, 34–36]。

对于磁偶极矩（图 5，中间面板），预测结果同样与实验高度吻合，尤其是对占主导地位的价核子组态而言。在壳层闭合前的同位素（^{39,47,51}钙）中，物理性质由单个主壳层主导，完整预测（1BC+2BC）很好地再现了实验数据，并与近期的第一性原理研究结果一致 [28, 29]。本研究中，FRAME 是基于以 ^{40}钙核为起点的 VS-IMSRG(2) 结果训练的，但请注意，参考文献 [28] 表明，若改以 ^{28}硅核为起点，

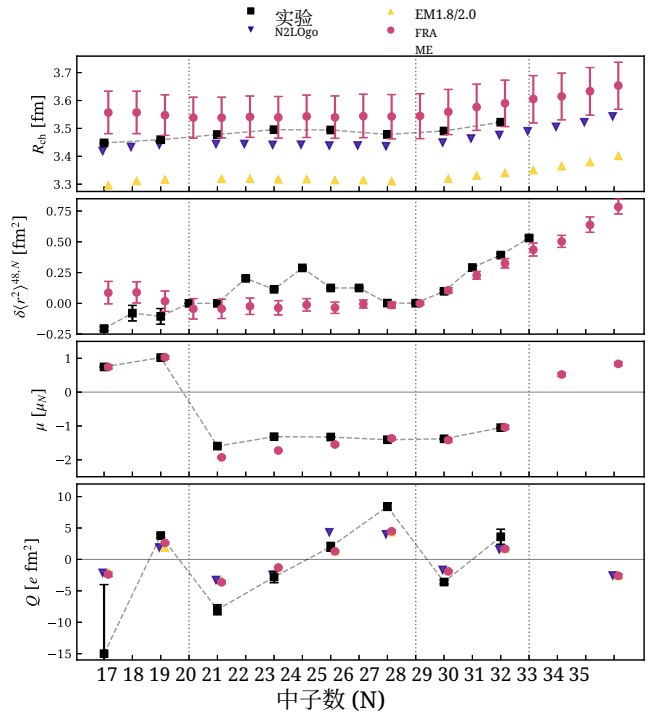


图 5. **钙中电磁观测量的整体演化**。我们比较实验值（黑色方块）[32,38, 39] 与似然的传播后验$\mathcal{L}_{2-4+\mu\mathrm{Ca}}$（紫色圆圈，68% 置信度），以及参考相互作用 $\Delta\mathrm{NNLO_{GO}(394)}$（菱形）[31]，1、8/2.0 (EM)（三角形）[30]。上：绝对电荷半径 R_{ch}。中：磁偶极矩 μ。下：电四极矩 Q。

^{41,43,45}钙的描述会有所改进。最后，尽管电四极矩的尺度得到了正确预测（图 5，底部面板），但同位素趋势的细节仍存在偏差，这与 Q 对集体形变和有效电荷的高度敏感性相符 [19, 37]。因此，必须牢记，模拟器的精度受限于其训练所依据的多体方法本身的物理描述能力。

利用核磁矩约束核力

图 6 比较了中子壳层闭合附近钙同位素的 μ 先验分布和后验分布。对于校准同位素（^{39,47,49,51}钙），后验分布如预期般在实验值附近收窄。值得注意的是，非校准同位素 ^{37}钙和 ^{53}钙的分布范围也显著缩小，同时仍与实验相符，这表明约束通过共享的低能常数依赖性在整个同位素链中一致地传播。

一个自然的问题是，这种改进是否仅限于磁矩，还是也能扩展到其他可观测量和相互作用参数。图 7 展示了纳入 μ（^{49,51}钙）后，68% 可信度预测带的收窄幅度；我们比较了两种初始配置，它们的区别在于先验中是否包含R_{ch}（^{40}钙）。由于后一种配置本身已缩小钙相关参数空间，因此在两种配置下都能持续出现的改进，可归因于磁矩信号本身。最大的提升体现在未校准同位素的预测矩上，以及次阶接触项 $C_{^3P_0}$ 上；SHAP分析将其确定为自旋-轨道分裂的关键驱动因素。与此同时，诸如 E（^{16}氧）和 R_{ch}（^{4}氦）等整体可观测量保持稳定，这证实磁矩数据提供了互补约束，同时没有扰动现有的体性质描述。

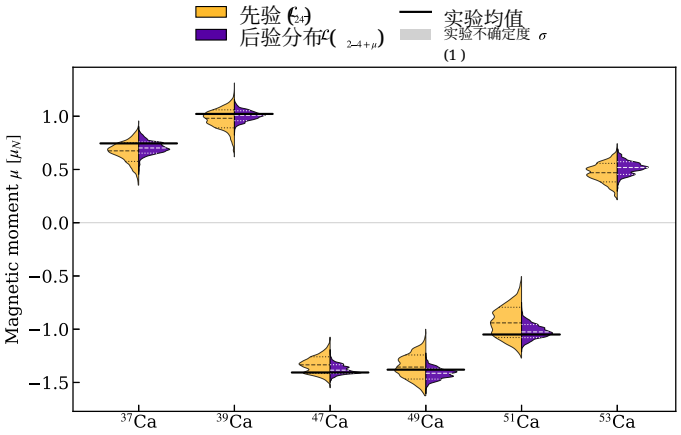


图 6. **似然更新前后 μ 的预测后验分布**。中子闭壳层附近钙同位素的核磁偶极矩。我们将先验分布（黄色）和更新后的后验分布（紫色）与实验不确定度（黑色带）进行比较。

这些见解为实验设计提供了蓝图，强调应优先获取信息增益，而非累积数据。尽管进一步测量结合能可以探究已确立的相关性，但自旋-同位旋扇区仍基本未受到整体数据的约束。要消除这种简并，需要采取有针对性的方法：对不同同位素链中的电磁矩进行精密测量，对于区分三核子相互作用与短程接触项、增进物理扇区之间的相关性至关重要。

IV. 结论与展望

我们介绍了一种全局物理驱动模拟器的开发，该模拟器将手征低能常数与不同同位素链中的核结合能、半径和电磁矩联系起来。在钙同位素中，该模拟器能够在多种模型空间保真度下复现 VS-IMSRG 计算，从而快速传播定义手征相互作用的参数对

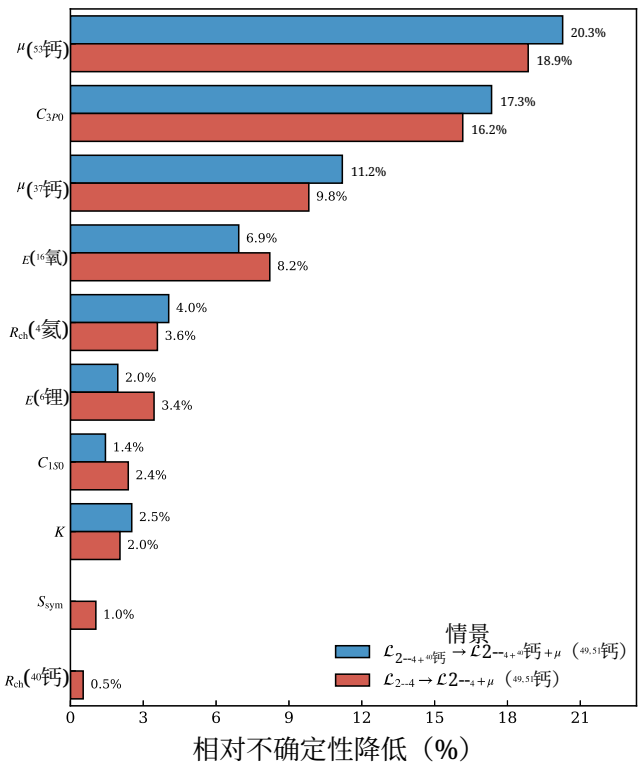


图 7. **纳入 （钙）后预测带的改善情况**。柱形表示可观测量、核物质参数及选定低能常数的后验标准差 $1-\sigma_{\mathrm{post}}/\sigma_{\mathrm{prior}}$ 的百分比降幅。先验为按 $\mathcal{L}_{2-4}$ 加权的历史匹配系综。

可观测量的影响，而系统地研究这些影响的成本原本过高。

后验积分重要性分析揭示了整体可观测量与电磁探针之间的显著差异。结合能和电荷半径取决于一部分双π介子交换项和三核子低能常数。相比之下，磁矩和四极矩表现出高度依赖同位素的敏感性，其驱动因素包括S 波和 P波接触项，以及不断演变的三核子效应。我们表明，一组最小化的钙磁矩标定数据会重塑低能常数后验分布：它收紧双π介子交换项与次领头阶接触项之间的相关性，同时使三核子扇区与领头阶短程耦合解耦。这一更新使轻核和氧同位素的预测保持稳定，说明电磁矩能够提供互补信息，可纳入全局手征有效场论标定，并约束整体可观测量无法揭示的低能常数空间区域。

将全局物理驱动的模拟器与后验积分敏感性工具相结合，为连接基本相互作用与复杂的核可观测量提供了一种灵活策略。通过对已测量和未测量的量进行快速且经过不确定性量化的预测，并确定哪些可观测量能提供关于核力不同组分的最多信息，这类方法有助于引导实验计划，并指导下一代手征哈密顿量的构建。

纳入选定的磁矩后，低能常数的后验分布会重新调整：π介子交换项与次领头阶接触项之间的相关性得到加强，同时不会削弱对其他原子核整体性质的预测。

这些结果表明，电磁矩能够为核力提供互补且具有判别力的约束，为更有针对性、更加微观地标定手征相互作用开辟了途径。这些进展是迈向原子核基础模型的关键一步。一个自然的后续方向是整合互补多体方法的预测，例如无芯壳模型、耦合簇理论、自洽格林函数和密度泛函理论。这将有助于统一并改进对多体截断、有效场论和模拟器不确定度的处理。同一架构还可扩展至更多与β衰变、中微子实验和破坏对称性的可观测量相关的算符，从而拓宽核模拟器的适用范围，使其涵盖完整的电弱探针和超越标准模型探针。

致谢

本研究使用的相似重整化群代码采用 Armadillo C++库 [40]。计算资源由 MIT物理系的 SubMIT 提供。本研究得到美国能源部核物理办公室资助，资助编号为 DESC0021176 和 DE-SC0021179。本研究还得到美国能源部（DOE）科学办公室通过 SciDAC-5（NUCLEI合作组）和 DE-SC0026198（STREAMLINE合作组）提供的支持。本研究使用了位于橡树岭国家实验室的橡树岭领导计算设施的资源；该设施由美国能源部科学办公室根据合同编号 DE-AC05-00OR22725 提供支持。我们感谢加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC） [PDF-587464-2024], 以及瑞典研究理事会（资助编号：2024-04681）的支持。

[1] A. Ekstr¨om、C. Forss´en、G. Hagen、G. R. Jansen、 *et al.*, 《Frontiers in Physics》11，1129094（2023）。[2] E. Epelbaum、H.-W. Hammer 和 U.-G. Meißner，《现代物理评论》81，1773（2009）。[3] R. Machleidt 和 D. R. Entem，《物理报告》503，1（2011）。[4] H.-W. Hammer、S. K¨onig 和 U. van Kolck，《现代物理评论》92，025004（2020）。[5] A. Ekstr¨om、G. R. Jansen、K. A. Wendt、G. Hagen、 *et al.*，《物理评论 C》91，051301（2015）。[6] T. Plies、M. Heinz 和 A. Schwenk，低分辨率核力的不确定度（ 2025 2509 24671 ），[ ] arXiv: . nucl-th . [7] A. Ekstr¨om 和 G. Hagen，《物理评论快报》123，252501（2019）。[8] S. K¨onig、A. Ekstr¨om、K. Hebeler、D. Lee 和 A. Schwenk，《物理快报 B》810，135814（2020）。[9] B. Hu、W. Jiang、T. Miyagi、Z. Sun、 *et al.*，《自然·物理》18，1196（2022）。[10] H. Hergert，《Frontiers in Physics》8，379（2020）。[11] D. Frame、R. He、I. Ipsen、D. Lee、 *et al.*，《物理评论快报》121，032501（2018）。[12] T. Duguet、A. Ekstr¨om、R. J. Furnstahl、S. K¨onig、 *et al.*，《现代物理评论》96，031002（2024）。[13] P. Cook、D. Jammooa、M. Hjorth-Jensen、D. D. Lee、*et al.*，《自然·通讯》16，5929（2025）。[14] A. Belley、J. M. Munoz 和 R. F. Garcia Ruiz，《物理评论快报》136，082501（2026）。[15] A. B. Owen，《SIAM/ASA 不确定性量化杂志》2，245（2014）。[16] H. Krebs、E. Epelbaum 和 U.-G. Meißner，Eur. Phys. J. A 32，127（2007）。[17] W. G. Jiang、C. Forss´en、T. Dj¨arv 和 G. Hagen，《物理评论 C》109，064314（2024）。[18] S. R. Stroberg、A. Calci、H. Hergert、J. D. Holt、S. K. Bogner、R. Roth 和 A. Schwenk，《物理评论快报》118，032502 2017( )。[19] S. R. Stroberg、H. Hergert、S. K. Bogner 和 J. D. Holt，《核与粒子科学年度评论》69，307（2019）。[20] S. R. Stroberg，imsrg++，https://github.com/ ragnarstroberg/imsrg（2018）。[21] N. Shimizu、T. Mizusaki、Y. Utsuno 和 Y. Tsunoda，《计算物理通讯》244，372（2019）。[22] N. M. Parzuchowski、S. R. Stroberg、P. Navr´atil、H. Herg- ert 和 S. K. Bogner，《物理评论 C》96，034324（2017）。[23] J. M. Munoz 和 A. Belley，FRAME：保真度解析仿射矩阵模拟器，https://github.com/ munozariasjm/FRAME-public（2026）。[24] A. Belley、J. M. Yao、B. Bally、J. Pitcher、 *et al.*，《物理评论快报》132，182502（2024）。[25] I. Vernon、M. Goldstein 和 R. G. Bower，《贝叶斯分析》5，619（2010）。[26] I. Vernon、M. Goldstein 和 R. Bower，《统计科学》29，81 2014( )。[27] S. M. Lundberg 和 S.-I. Lee，载于 *Adv. Neural Inf. Process.* ，第 Vol. *Syst.* 30 2017 （）。[28] T. Miyagi、X. Cao、R. Seutin、S. Bacca、R. F. G. Ruiz、K. Hebeler、J. D. Holt 和 A. Schwenk，《物理评论快报》132，232503（2024）。[29] B. Acharya、B. S. Hu、S. Bacca、G. Hagen、 *et al.*，《物理评论快报》132，232504（2024）。[30] K. Hebeler、S. K. Bogner、R. J. Furnstahl、A. Nogga、 *et al.*，《物理评论 C》83，031301（2011）。[31] W. G. Jiang、A. Ekstr¨om、C. Forss´en、G. Hagen、G. R. Jansen 和 T. Papenbrock，《物理评论 C》102，054301（2020）。[32] R. F. Garcia Ruiz、M. L. Bissell、K. Blaum、A. Ekstr¨om、*et al.*，《自然·物理》12，594（2016）。[33] J. Simonis、S. R. Stroberg、K. Hebeler、J. D. Holt 和 A. Schwenk，《物理评论 C》96，014303（2017）。[34] V. Som`a、P. Navr´atil、F. Raimondi、C. Barbieri 和 T. Duguet，《物理评论 C》101，014318（2020）。[35] T. Miyagi、S. R. Stroberg、J. D. Holt 和 N. Shimizu，《物理评论 C》102，034320（2020）。[36] M. Companys Franzke、A. Tichai、K. Hebeler 和 A. Schwenk，arXiv 电子印本，arXiv:2510.08362（2025年），arXiv:2510.08362 [nucl-th]。[37] S. R. Stroberg、J. Henderson、G. Hackman、P. Ruot- salainen、G. Hagen 和 J. D. Holt，《物理评论 C》105，034333 2022( )。[38] R. F. Garcia Ruiz、M. L. Bissell、K. Blaum、N. Fr¨ommgen、*et al.*，《物理评论 C》91，041304（2015）。[39] A. J. Miller、K. Minamisono、A. Klose、D. Garand、 *et al.*，《自然·物理》15，432（2019）。[40] C. Sanderson 和 R. Curtin，《开放源代码软件期刊》1，26（2016）。[41] E. Tiesinga、P. J. Mohr、D. B. Newell 和 B. N. Taylor，《现代物理评论》93，025010（2021）。[42] E. Perez、F. Strub、H. De Vries、V. Dumoulin、 *et al.*，载于 *Proc. AAAI Conf. Artif. Intell.*，第32卷（2018）。[43] I. Loshchilov 和 F. Hutter，解耦权重衰减正则化（2017），arXiv:1711.05101 [cs.LG]。[44] T. Chen 和 C. Guestrin，载于 *Proc. 22nd ACM SIGKDD*（2016），第785–794页。[45] G. Ke、Q. Meng、T. Finley、T. Wang、 *et al.* *Adv.* ，载于，第 *Neural Inf. Process. Syst.* 30 2017 （ ）卷。[46] T. Akiba、S. Sano、T. Yanase、T. Ohta、 *et al.* *Proc.* ，载于（ ） *25th ACM SIGKDD* 2019 2623 2631 第–页。

补充信息

补充信息。方法

A. 电磁算符

我们采用磁偶极算符的标准分解，将其分为单体流（一体电流，1BC）和二体流（二体电流，2BC）。

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_{1\mathrm{B}} + \boldsymbol{\mu}_{2\mathrm{B}}, \qquad \mu = \langle JM{=}J|\,\mu_z\,|JM{=}J\rangle. \quad \text{(S1)}$$

单体项表示为

$$\mu_{1\mathrm{B},z} = \mu_N \sum_i \left(g_i^\ell\,\ell_{i,z} + g_i^s\,\sigma_{i,z}\right), \quad \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}, \quad \text{(S2)}$$

使用自由核子 g-因子 [41]。主导二体电流取自 χ有效场论，其阶数与核相互作用相同（N^{2}LO），并包括内禀项和萨克斯项，详见参考文献 [28]。

电四极矩（Q）由演化后的四极算符的约化矩阵元得到，

$$Q(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\,\frac{\langle J||\hat{Q}^{(2)}||J\rangle}{\sqrt{2J+1}}, \qquad \hat{Q}^{(2)} = \sum_i e_i\,r_i^2\,Y_2(\hat{r}_i). \quad \text{(S3)}$$

初始算符相对于有限核参考态进行正规序化，并在 IMSRG(2) 层级上一致地演化。

B. FRAME 模拟器

Architecture

FRAME 由全局潜在编码器和收敛感知参数化算符核心构成。二者共同为 E_b、 R_{ch}、 μ和 Q 的有效哈密顿量及算符提供统一表示，涵盖所有原子核、保真度和相互作用样本。

潜在编码器。 编码器将离散问题标识符映射为连续表示 $\mathbf{h}(Z,N,f) \in\mathbb{R}^{d_h}$。质子 Z 和中子 N 数使用正弦编码进行嵌入；模型空间保真度 f 从物理 $e_{\max}$ 值映射到一组较小的序数等级；此外，类别输入还会编码偶/奇宇称类别，以及在适用情况下的壳层区域或截断信息。这些嵌入经过拼接后，传入一个带有特征级线性调制（FiLM）层 [42],的全连接块，该层根据条件输入调制隐藏特征。编码器同时输出 $\mathbf{h}(Z,N,f)$，以及用于在核心中选择适当矩阵尺寸的序数保真度索引。此潜在表示与相互作用无关：所有对低能常数的依赖都由算符核心处理。

矩阵层级 我们设定最大矩阵维数$m_{\max}$ ，并为每个离散保真度等级 f_k 指定一个矩阵尺寸 $m_k < m_{\max}$，其中 $m_0 < m_1 < \cdots < m_{F-1}$。对于每个 $(Z,N,f_k,\boldsymbol{\alpha})$，核心首先构造全局 $m_{\max}\times m_{\max}$ 算符，然后取其主子矩阵。因此，相邻保真度等级下的预测位于同一算符族的嵌套子空间中。

为稳健地模拟核哈密顿量在不同模型空间中的演化，我们采用锚定与细化策略。算符以最低保真度 $f_{\min}$（该处的训练数据最为充足）为锚点，并通过逆保真度的多项式展开进行细化。保真度为 f_k 时的主厄米矩阵写作

$$M_k(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) = \Bigg[M_{\mathrm{anc}}(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) + \quad \text{(S4)}$$

$$\sum_{p=1}^{P} \xi(f_k;\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha})^p\,\Delta M_p(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha})\Bigg]_{0:m_k,\,0:m_k}, \quad \text{(S5)}$$

其中， M_{anc} 是描述 $f_{\min}$ 处物理性质的基算符，而 $\{\Delta M_p\}$ 是控制向连续统极限演化的修正算符。锚点项和修正项均通过学习得到的厄米基底 $\{P_j\}$ 和 $\{P_{pj}\}$ 参数化：

$$M_{\mathrm{anc}}(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) = a_0(\phi)\,I + \sum_j a_j(\phi)\,P_j, \quad \text{(S6)}$$

$$\Delta M_p(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) = a_{p,0}(\phi)\,I + \sum_j a_{p,j}(\phi)\,P_{pj}, \quad \text{(S7)}$$

对于 $\phi(\mathbf{h}\ \boldsymbol{\alpha})$， $=[\mathbf{h}\ \boldsymbol{\alpha}]$。系数映射 a 为线性层，从而保留低能常数的仿射依赖性。

物理调制收敛流。收敛坐标 ξ 并非 $e_{\max}$的静态函数。相反，我们定义了一个学习得到的流变量，用以捕捉特定原子核和相互作用各自依赖物理的收敛速率：

$$\xi(f_k;\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) = \sigma(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha})\cdot\left(\frac{1}{f_{\min}} - \frac{1}{f_k}\right). \quad \text{(S8)}$$

这里，几何项（$1/f_{\min} - 1/f_k$）确保 $\xi = 0$ 在锚点 $f_{\min}$ 处成立，并随模型空间扩展而增大。缩放因子 $\sigma(\mathbf{h}\ \boldsymbol{\alpha}) \in [0.5, 1.5]$ 通过门控网络学习得到，使模拟器能够根据 $\mathbf{h}$和相互作用的强度 $\boldsymbol{\alpha}$，动态拉伸或压缩收敛路径。通过对有效哈密顿量的轨迹建模，而非孤立地拟合各个点，这一结构能够对未见过的高-$e_{\max}$ 值进行受控外推。

可观测量算符。可观测量的算符遵循相同的锚点-细化架构。对于每个

标签 q 我们写作

$$S_{q,k}(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) = \Big[S_{q,\mathrm{anc}}(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) + \tag{S9}$$

$$\sum_{p=1}^{P} \xi(f_k;\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha})^p \, \Delta S_{q,p}(\mathbf{h},\boldsymbol{\alpha}) \Big]_{0:m_k,\,0:m_k}, \tag{S10}$$

其中$S_{q,\ \mathrm{anc}}$ 和$\Delta S_{q,\ p}$ 均通过厄米基表示。作用于同一特征向量 ϕ 的逐可观测量线性适配器，将共享系数映射为各算符专属的组合，使哈密顿量和所有可观测量共享共同的潜在结构，同时拥有彼此独立的收敛流程。

Spectra, Observables, and Training

对于给定的（Z, N, f_k, $\boldsymbol{\alpha}$），我们组装 M_k，加入一个较小的对角扰动以确保数值稳定性，并通过对称特征值求解器计算其特征值和本征矢量。目标能级按索引确定。可观测量的预测值由双线性形式 $\langle \mathbf{v}_\ell | S_{q,\ k} | \mathbf{v}_\ell \rangle$ 得出。在训练过程中，我们用特征值索引上的窄高斯权重（软投影）替代尖锐的能级选择，从而在避免交叉附近正则化导数。对于间隔较大的能级，结果与通常的矩阵元一致。

损失函数是对所有输出计算的加权均方误差，并通过学习得到的任务权重，将误差拆分为能量和可观测量两部分。不同保真度的数据共同纳入训练。正则化项会惩罚锚定基的范数，以确保表示紧凑；控制细化导数 ΔM_p 的大小，以确保平滑外推；并加入特征向量重叠惩罚项，避免本征态随 $\boldsymbol{\alpha}$ 变化时发生突变。优化使用 AdamW [43] 和学习率调度器进行，并依据跨原子核、保真度和可观测量的验证表现实施早停。图 S1 展示了奇数钙同位素的典型训练曲线示例。

通过在最低保真度下奠定物理基础，并学习通向连续统的演变过程，模拟器能够对未见过的 $e_{\max}$ 值进行数学上透明的外推，并为正文中所述的按低能常数分解的敏感性分析和历史匹配分析提供清晰的依据。

FRAME Emulator Performance Studies

可观测量再现 如图 S2 所示，对于钙同位素链，FRAME 在质量数范围内以最高保真度再现了第一性原理基准值，且无系统偏差；所涉及的物理量包括结合能（E_b）、电荷半径（R_{ch}）、磁矩（μ）和四极矩（Q）。

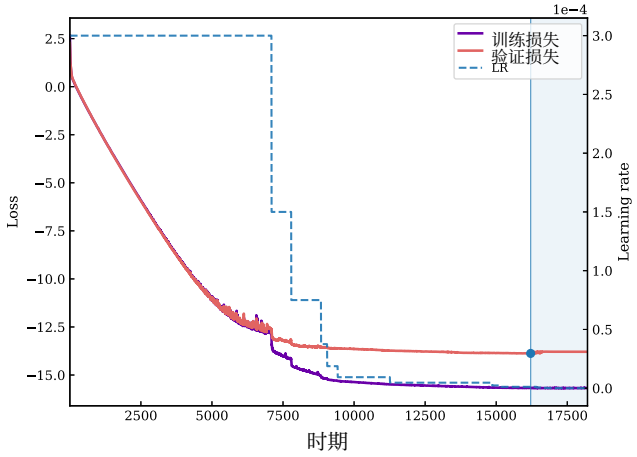


图 S1. 奇数钙同位素的典型训练曲线，同时展示了训练集和评估集，以及预定的学习率；蓝点表示最佳检查点。

a. 交叉验证研究 为交叉验证 FRAME 并评估多体截断效应，我们对 ^{40}Ca 的结合能和电荷半径进行了含单激发和双激发 [7] 的子空间投影耦合簇（SPCC）计算。SPCC 计算采用了一个包含 $e_{\max} = 10$、$e_{3\max} = 16$ 的模型空间，以及为 16 兆电子伏特的谐振子频率 $\hbar\omega =$。我们使用拉丁超立方抽样选取了 64 个训练点（快照），并允许低能常数在 $\Delta\mathrm{NNLO_{GO}(394)}$ 低能常数 [31]的基础上变化 20%。对于 FRAME 和 SPCC 得到的结果，我们使用似然$\mathcal{L}_{(2-4)+^{16}\mathrm{O}}$对输出分布进行了重新加权。结果如图 S3 所示，两者吻合良好。值得注意的是，VS-IMSRG(2) 通常与包含三激发的耦合簇结果相符，这解释了为何 FRAME 预测的结合能中心值相较于 SPCC 的中心值向左偏移了 7.3 兆电子伏特。

误差相关性 在多同位素和多目标模拟中，一个常见风险是，模拟器模型可能对某些样本拟合良好，却对所有可观测量中的其他相互作用系统性地拟合失败。为证明情况并非如此，我们考察了测试数据集中保真度最高的样本（$e_{\max} = 10$）中各可观测量之间的残差相关性，如图 S4 所示。我们没有观察到可观测量之间存在显著的相关性，这支持了关于模拟误差的异方差假设。

氧模拟 氧的 FRAME 模拟器采用与补充信息 B 节相同的架构，其中（Z、N、f）输入限制为 Z=8 和 $A \in [12, 24]$，并使用与钙分析相同的低能常数集合。图 S5 展示了保真度最高时测试集的奇偶图（$e_{\max} = 10$），比较模拟器预测与沿同位素链的结合能和电荷半径的第一性原理 VS-相似重整化群结果。模拟器能够再现这两项观测

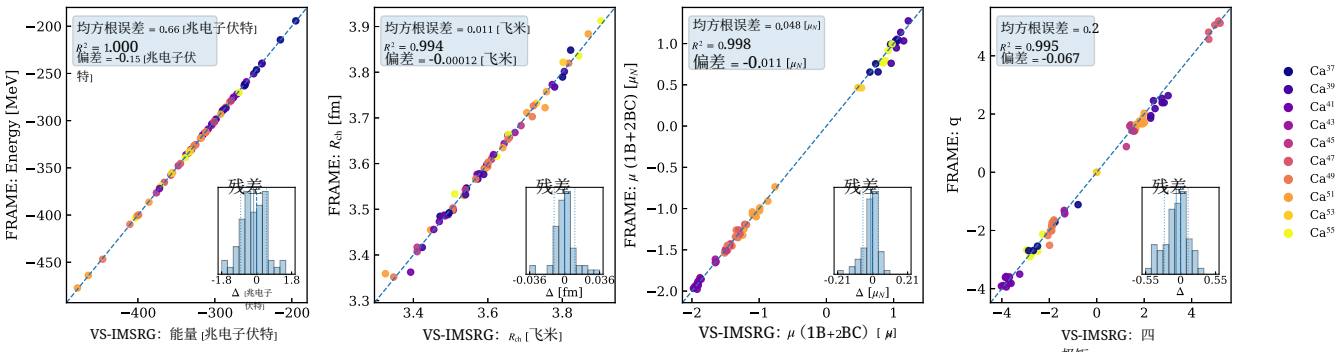


图 S2. 四个关键可观测量的奇偶图：结合能（E_b）、电荷半径（R_{ch}）、磁偶极矩（μ）和电四极矩（Q）。纵轴为模拟器（FRAME）的预测值，横轴为 *ab initio* 计算结果。对角 $y = x$ 虚线表示完全吻合。

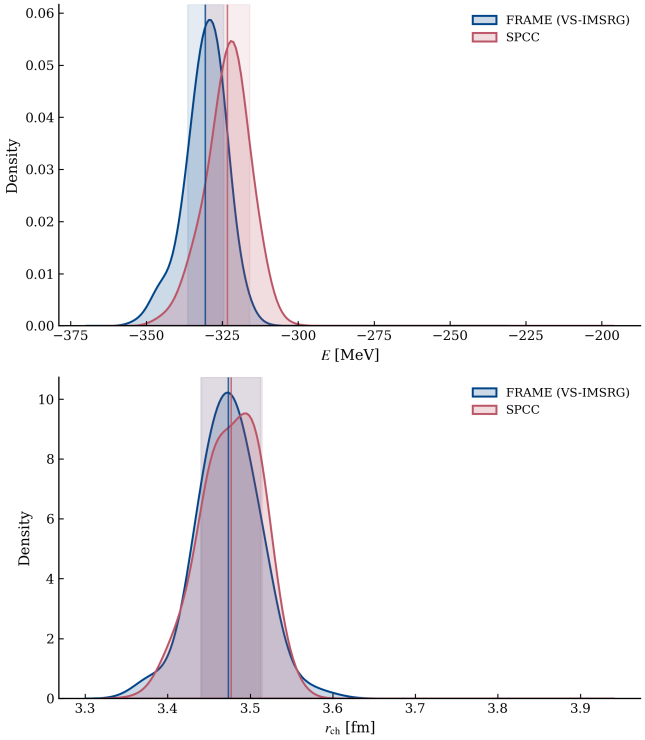


图 S3. FRAME（使用 VS-IMSRG 训练）与 SPCC 对 ^{40}Ca 的 E 和R_{ch} 后验分布比较。

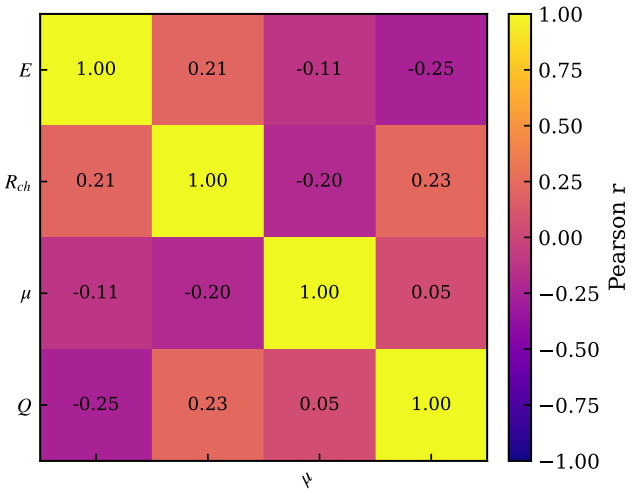


图 S4. 可观测量之间的残差相关性。该相关矩阵展示了 $e_{\max} = 10$处测试样本中各可观测量之间的误差相关性。

量： E_b 的精度达到亚兆电子伏特， $R_{\rm ch}$的精度优于 0.01 飞米，且随中子数变化没有明显的系统性漂移。

Extrapolation on Neutron Number

全局模拟（即 BANNANE [14]）最有前景的特性之一，是能够在特定 $e_{\max}$下外推到未见过的 N 。在这项实验中，我们使用奇数同位素训练模型，这些同位素来自

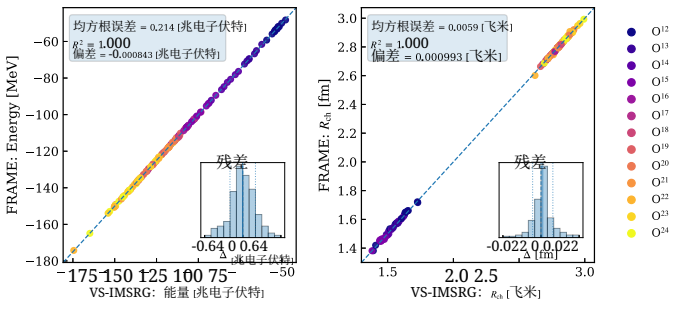


图 S5. 针对氧同位素链拟合的 FRAME 奇偶图。图中展示了 $e_{\max}$ =10 处测试集的模拟器预测值，以及结合能 E_b （左）和电荷半径 $R_{\rm ch}$ （右）的 VS-IMSRG 计算结果。对角 y=x 线表示完全吻合。

^{37}钙至 ^{51}钙，排除所有满足 $e_{\max} > 4$的 ^{53}钙值。

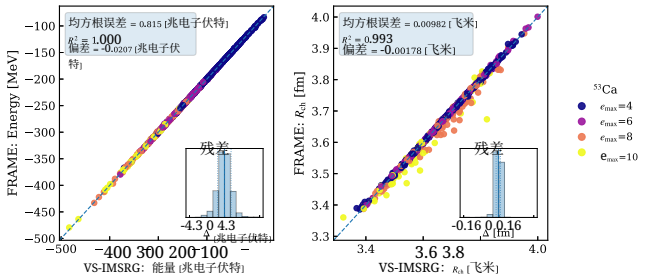


图 S6. 对 ^{53}Ca的零样本外推。该图展示了使用从 ^{37}Ca到 ^{51}Ca 的奇数同位素训练的模型，对 ^{53}Ca（其中$e_{\max} > 4$）的结合能和电荷半径进行模拟的结果与真实值（即 VS-IMSRG计算结果）的对比。

随后，我们使用训练好的模型预测 ^{53}Ca 的结合能和电荷半径，并将其外推至更高的精度。两者的结果都表现良好：对于 $e_{\max} = 10$，结合能和电荷半径的误差分别为 4.2 兆电子伏特和 0.4 飞米，如奇偶图图 S6 所示。作为参考，使用完整的 ^{53}Ca 样本集训练的模拟器，对 $e_{\max} = 10$ 的均方根误差分别为 0.6 兆电子伏特和 0.005 飞米，对应结合能和电荷半径。而使用该同位素训练的基线梯度提升树（XGBoost [44]）的均方根误差分别为 28.1 兆电子伏特和 0.05 飞米。值得注意的是，Q 和 μ 随 N增加并非单调递增，这使任务更加困难，因为壳层闭合后，模型的缩放器定义不明确。

Extrapolation on LEC

测试LEC外推的一种简单方法是改变一个常数，同时固定其他常数。然而，在我们的设定中，这种做法并不符合物理实际：历史匹配后的重加权系综将手征LEC限制在一个强相关的后验流形上。单独改变一个LEC通常会使该点偏离此流形，进入违反物理似然的区域。在这些区域中，任何看似“外推”的结果，主要探测的是支持范围之外的行为，而非物理规律。

为了在探究外推的同时尽可能贴近受支持的流形，我们针对目标低能常数 c_j构建一条一维条件均值路径。设 $\alpha = (c_j,\ \alpha_{-j})$表示LEC向量，$(\boldsymbol{\mu},\ \Sigma)$表示历史匹配后验分布的加权均值和协方差（权重为历史匹配步骤中得到的归一化似然）。在后验分布的局部高斯近似下，其余低能常数遵循条件均值

$$\mathbb{E}[\alpha_{-j} \mid c_j = t] \ \approx\ \boldsymbol{\mu}_{-j} + \Sigma_{-j,j}\,\Sigma_{jj}^{-1}\,(t - \mu_j), \qquad \text{(S11)}$$

从而得到一条路径 $\alpha(t) = (t,\ \mathbb{E}[\alpha_{-j} \mid c_j = t])$，使当 c_j 发生偏移时，其余低能常数也相应地协同变化。我们量化利用马氏距离评估几何合理性

$$D_M^2(t) = \big(\alpha(t) - \boldsymbol{\mu}\big)^{\top} \Sigma^{-1} \big(\alpha(t) - \boldsymbol{\mu}\big), \qquad \text{(S12)}$$

并将 $D_M^2 \le \chi^2_{d,\ 0.95}$（针对 d 个低能常数）的点视为位于 95% 后验椭球内。沿着这条路径，我们在固定的 (Z，N，$e_{\max}$) 处评估模拟器。图S7展示了一个代表性示例，其中钙^{43}，而 $e_{\max} = 4$随 c_2变化。

我们测试的原子核中有两个稳健的特征：(i) 在后验支持区域（阴影部分）内，所有可观测量都会随变化的 LEC 平滑变化，不会出现异常拐点或不连续性；(ii) 一旦 D_M 越过 95% 边界，响应仍会平滑延续，但应将其解读为仿真器形式延拓，而非经物理校准的预测，因为似然在该区域赋予的支持可以忽略不计。为提高透明度，我们还标出了 $\pm1\sigma$，$\pm2\sigma$，$\pm3\sigma$ 在 μ_j 周围的范围，以指示该切片偏离 c_j典型后验尺度的程度。

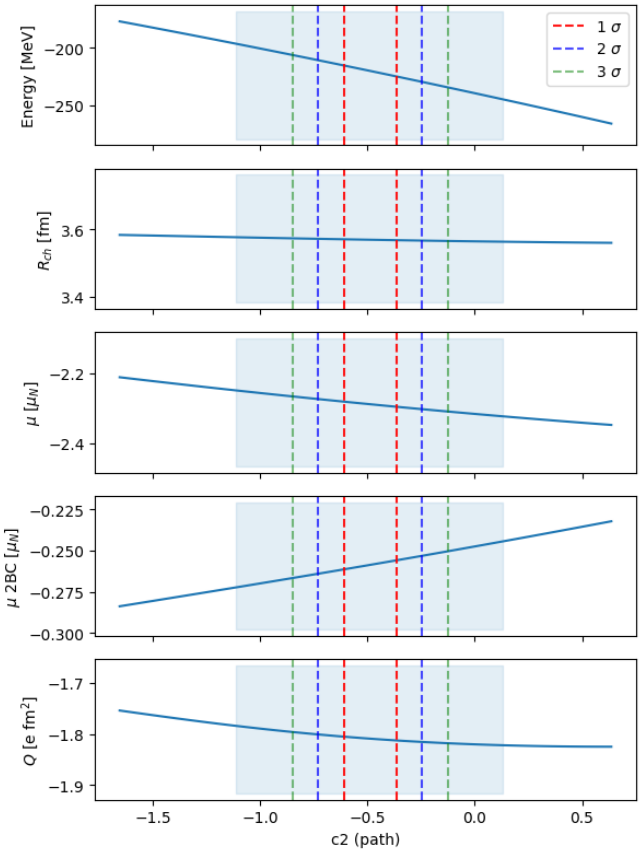


图 S7. 外推 c_2 (钙^{43}, $e_{\max} = 4$)。沿其他低能常数遵循后验条件均值的路径，绘制可观测量随c_2 的变化。蓝色阴影：95% 后验椭球（马氏距离）。虚线：$\pm1\sigma$，$\pm2\sigma$，$\pm3\sigma$。支持区域内的行为平滑；超出该区域后，曲线为形式上的（超出支持范围）延拓。

C. 后验重要性估计

对于固定的原子核（Z，N）、保真度 f 和可观测量 $Y \in \{E_b, R_{\rm ch}, \mu, Q\}$，模拟器 g：$g(Z,\ N,\ f,\ \alpha) \mapsto Y$ 将 LEC 向量 $\alpha \in \mathbb{R}^d$ 映射为 Y。LEC 集合 $\{\alpha_i\}_{i=1}^M$ 通过历史匹配获得，并依据针对校准可观测量的似然重新加权。我们用$\sum_i w_i = 1$ 表示归一化后验权重 $w_i \geq 0$，并定义有效样本量

$$\mathrm{ESS} = \frac{1}{\sum_{i=1}^M w_i^2}. \tag{S13}$$

Posterior over LECs

从通过历史匹配得到的非不可信参数集出发，我们使用基于校准可观测量构建的似然，进行离散贝叶斯/SIR更新。所得权重归一化为 w_i，并用于下文所有后验聚合。

用于局部归因的代理模型

Shapley归因需要一个易于扰动的模型。对于每个 $(Z,\ N,\ f,\ Y)$，我们在经后验重采样的低能常数云上训练一个梯度提升决策树代理模型 $\widehat{g}$：

1. Partition $\{(\alpha_i, w_i)\}$ into train/test.

2. 通过加权重采样并对每个低能常数施加小幅高斯抖动，生成增强训练集。抖动尺度由稳健的后验离散度设定（四分位距；若为零，则采用后验标准差）。

3. 使用增强后的参数云，通过模拟器重新计算标签 $Y = g(\alpha;\ Z,\ N,\ f)$。4. 使用固定的超参数，在原子核之间一致地对 $(\alpha,\ Y)$ 拟合 $\widehat{g}$。

5. 使用后验加权的 R_w^2 和均方根误差（RMSE）RMSE_w，审查留出的后验分割上的拟合；报告重要性之前，必须满足 $R_w^2 \geq 0.9$。

在此实现中，LightGBM [45] 梯度提升树在所有原子核中使用固定的超参数；在后验重采样的样本云上进行训练（最多包含 10^5 行）。对于每个分区 $\{(\alpha_i,\ w_i)\}$，使用 Optuna [46] 对拟合参数进行超参数优化，以避免回归器过拟合。

SHAP 的定义与计算

我们针对 $\widehat{g}$采用两种互补的 Shapley 方法。

干预式*SHAP*（主效应）。令 $\mathcal{B}$ 为从关于 α的后验分布中抽取的背景矩阵。干预式SHAP相对于 $\mathcal{B}$独立扰动特征 j。对于带有逐行权重 w（与后验成比例）的评估集 X，各特征归因 $\phi_j^{\rm int}(x)$ 汇总为

$$\bar{\phi}_j^{\rm int} = \sum_{x \in X} w(x)\, \phi_j^{\rm int}(x). \tag{S14}$$

$$S_j^{\rm main} = \frac{\sum_{x \in X} w(x)\, |\phi_j^{\rm int}(x)|}{\sum_{k=1}^d \sum_{x \in X} w(x)\, |\phi_k^{\rm int}(x)|} \tag{S15}$$

$S_j^{\rm main}$以主效应占比的形式报告。

路径依赖*SHAP*（主效应 +相互作用）。利用树路径扰动，我们得到逐特征的 $\phi_j(x)$ 和两两交互张量 $\Phi_{jk}(x)$。后验聚合得出主效应绝对贡献

$$M_j = \sum_{x \in X} w(x)\, |\Phi_{jj}(x)|, \tag{S16}$$

和总计

$$T_j = M_j + \sum_{k \neq j} \sum_{x \in X} w(x)\, |\Phi_{jk}(x)|. \tag{S17}$$

我们报告 $S_j^{\rm tot} = T_j / \sum_{\ell=1}^d T_\ell$，并按$\sum_x w(x)\ |\Phi_{jk}(x)|$对相互作用对进行排序。

自助法不确定性

我们通过后验分层自助法估计份额的不确定性区间，进行 B 次重复抽样：(i)从后验切片中重新抽取行；(ii)重新训练 $\widehat{g}$；(iii)重新计算 SHAP 汇总；(iv)逐点取 2.5–97.5% 分位数。

与基于方差的 Sobol 指数的关系

基于方差的 Sobol 指数定义在用户指定的超矩形上，并假设输入彼此独立。在这种情况下，低能常数的后验分布并非一个方框，且存在相关性；先验体积中的很大一部分并不合理。以该后验分布为条件，并使用从中抽取的干预背景分布，可得到反映物理上受支持区域的特征重要性。为完整起见，可以同时报告匹配超矩形上的一阶 Sobol 指数和干预式 SHAP；二者的差异可解释为后验相关性和支持域几何结构所致。

SII. 物理案例

双体流的影响

我们发现，纳入二体电流会以定性上截然不同的方式改变 μ，这种差异在壳层闭合前后均有所体现。在 ^{40}钙之前，纳入二体电流后，主壳层计算 S8 的后验分布与实验结果吻合良好。

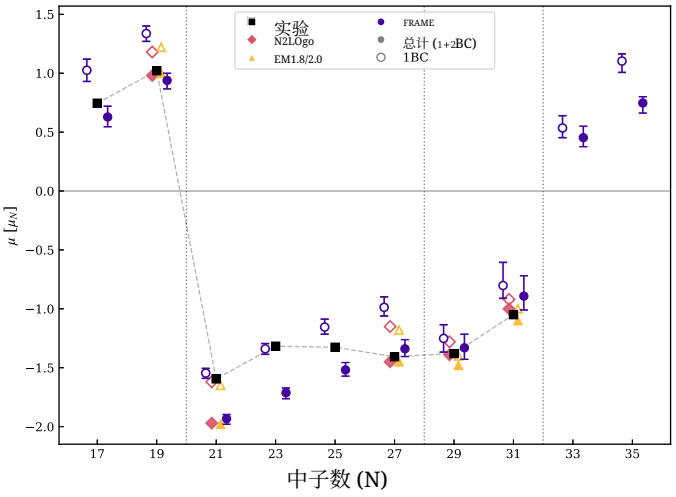


图 S8. 随着壳层闭合的推进，分别采用一体电流和 1+2BC 电流计算得到的磁偶极矩。我们将实验值（黑色方块） [38]与使用 $\mathcal{L}_{2-4+}{}^{16}O$ 得到的传播后验（紫色圆圈，68% 可信度）以及参考相互作用 N2LOgo(394)（菱形） [29, 31], 1.8/2.0（电磁相互作用）（三角形） [29, 30]进行比较。

然而，在壳层闭合后，主壳层的结果需要使用多壳层价空间进行修正，这样加入二体电流贡献后，后验分布才不会偏离实验值，如图 S8 所示。

磁矩的灵敏度分解

正文重点讨论总磁矩，以避免对流算符作出依赖于模型的解释；而在特定方案下分析其组成部分，则有助于启发性地理解相互竞争的物理机制。图 S9 展示了总磁矩（面板 a）的分扇区重要性，以及其单体贡献（面板 b）和双体贡献（面板 c）的分解。单体贡献（μ_{1bc}）可直接探测不断演变的壳结构。在这一扇区中，敏感性主要由次领头阶自旋轨道接触项（$C_{S,P}$）决定，它们决定了单粒子能级劈裂。值得注意的是，三核子力（c_D, c_E）的重要性在壳层闭合处（$N = 20,28,32$）骤增。

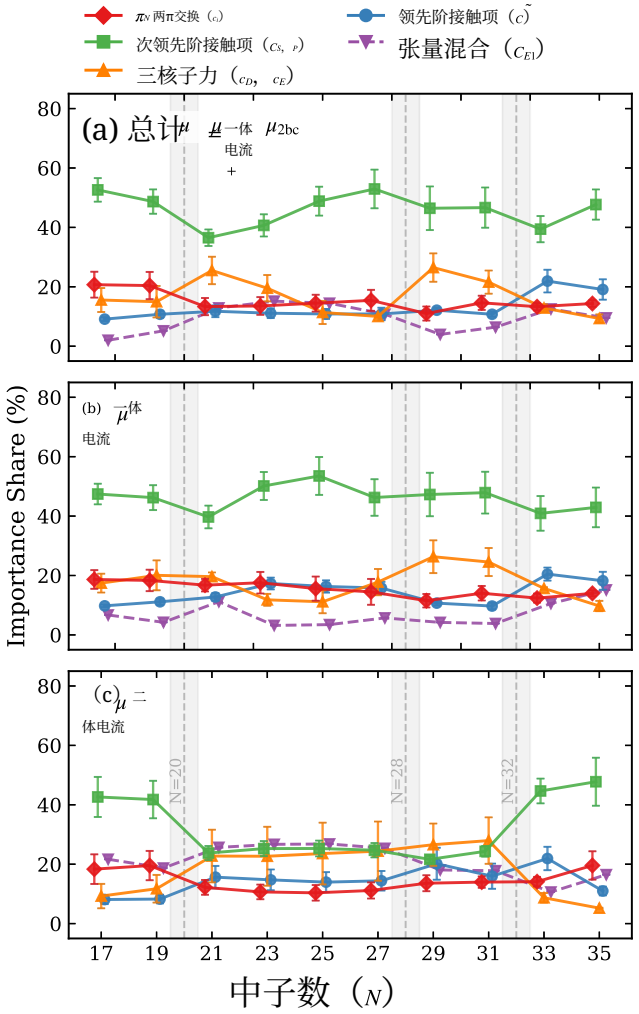


图 S9. 磁矩的分扇区重要性分解。（a）总磁矩（μ）、（b）单体流贡献（μ_{1bc}）和（c）双体流贡献（μ_{2bc}）的似然积分重要性份额。该分解表明，尽管总观测量（a）体现出不同机制之间的张力，但单体部分（b）由壳结构驱动因素（自旋轨道作用和三核子力）主导，而双体部分（c）则由算符一致性项（张量混合和两π交换）驱动。

这反映了张量力驱动的单极漂移，它会改变壳间隙（$d_{3/2} - s_{1/2}$ 和 $f_{7/2} - p_{3/2}$），并决定基态组态混合。相比之下，二体流贡献（μ_{2bc}，图 c）由算符本身的物理性质驱动。在这一领域，接触项的主导地位不复存在，取而代之的是一种混合格局，其中张量力（C_{E1}，紫色）和 π介子交换耦合（c_i，红色）占有显著权重。

SIII. 似然约束与后验稳健性

A. 抽样重要性重采样（SIR）的实现

低能常数的后验分布 $p(\boldsymbol{\alpha}|D_{\rm new})$ 通过对历史匹配集成应用抽样重要性重采样（SIR）方案进行近似。每个样本 i 的更新权重 $w_i^{\rm post}$ 计算如下：

$$w_i^{\rm post} \propto \left(w_i^{\rm prior}\right)^{1/T} \times \mathcal{L}(\mathbf{y}_{\rm Ca}|\boldsymbol{\alpha}_i), \tag{S18}$$

其中， $\mathcal{L}$是钙磁矩的似然函数， T 是应用于先验权重的温度超参数。基础先验权重$w_i^{\rm prior}$ 源自使用 $\mathcal{L}_{2-4+^{16}O}$ 似然 [17, 31]进行的原始历史匹配。

为确保分析结果不受先验温度化具体选择的主导（该选择控制初始历史匹配样本云的扩散程度），我们通过改变 T进行敏感性分析。正文中呈现的基准结果使用 $T = 5.0$，该值的选取旨在最大化有效样本量（ESS），同时保留先验的结构信息。我们通过改变 $T \in [3.0, 7.0]$ 来验证结论的稳健性。

B. 似然与误差预算

似然函数假设校准同位素 $N \in \{19, 27, 29, 31\}$ 的误差彼此独立且服从高斯分布：

$$\ln \mathcal{L} = -\frac{1}{2}\sum_k \left[\frac{(\mu_k^{\rm exp} - \mu_k^{\rm emu}(\boldsymbol{\alpha}))^2}{\sigma_{k,\rm tot}^2} + \ln\!\left(2\pi\sigma_{k,\rm tot}^2\right)\right]. \tag{S19}$$

$$\sigma_{k,\rm tot}^2 = \sigma_{\rm exp}^2 + \sigma_{\rm emu}^2 + \tau_\chi^2 + \sigma_{\rm MBT}^2. \tag{S20}$$

在本研究中，我们采用 $\tau_\chi \approx 0.04\mu_N$ （EFT 截断误差）以及依赖于核素的多体截断误差 $\sigma_{\rm MBT}$ ，后者根据单壳层与多壳层 VS-IMSRG 计算结果之间的差异推导得出。

C. 约束机制与参数收缩

此次更新在参数空间中施加了不均匀的约束。补充图 S10 详细展示了变化最显著的四组相互作用对（相关系数变化最大$|\Delta\rho|$）。在 TPE 扇区（例如 $c_3 - c_4$）中，数据导致了“刚化”（相关性正向偏移），实际上将这些常数锁定在一起，以满足一体流与二体流之间的干涉要求。

为了量化边际不确定性的降低程度，我们计算了每个低能常数的收缩比 $R_j = \sigma_j^{\rm post}/\sigma_j^{\rm prior}$ 。补充图 S11 展示了这一比值。误差棒表示改变先验调温因子 $T \in [3.0, 7.0]$时观察到的收缩变化。在这一温度范围内，收缩模式保持稳定，这证实了观察到的约束是由磁矩数据中的信号驱动的，而非加权方案造成的假象。

Cross posterior check

接下来，我们将基于Ca的低能常数后验分布传播至 ^{16}O 整体可观测量。我们从正文中使用的历史匹配系综出发，考虑低能常数云的两种权重：(i) 根据 A=2–4,16 似然得到的原始类先验权重；(ii) 第 III 节中推导的、经 Ca 磁矩更新的权重 $\{w_i^{\rm post}\}$。对于每个低能常数样本，我们在 $(Z, N) = (8, 8)$ 和 $e_{\rm max} = 10$ 处评估氧仿真器，从而得到联合样本 $\{E_b^{(i)}(^{16}\mathrm{O})\ R^{(i)}{}_{\rm ch}(^{16}\mathrm{O})\}$，其权重为 $w_i^{\rm prior}$ 或 $w_i^{\rm post}$ 。

图 S12 展示了 $(E_b,\ R_{\rm ch})$ 平面上的相应分布。蓝色填充等高线表示钙 μ 更新后的后验分布密度，实线和虚线分别标示 68% 和 95% 的最高密度区域（HDRs）。红色虚线表示原始历史匹配先验对应的最高密度区域。$E_b(^{16}\mathrm{O})$ 和 $R_{\rm ch}(^{16}\mathrm{O})$ 的一维边缘分布分别沿顶部和右侧坐标轴投影显示；图中还叠加了实验点及其标示的不确定度。

有两点值得注意。首先，钙 μ更新使 ^{16}O 的整体性质预测略微收紧： E_b 和 $R_{\rm ch}$中的 68% 可信度范围均略有缩小，同时仍以实验点附近为中心。其次，联合 $(E_b,\ R_{\rm ch})$ 分布的形状和方向基本未变。特别是，这次更新没有明显加剧由钙磁矩偏好的低能常数组合与控制 ^{16}O 能量和电荷半径的低能常数组合之间的张力。

结合正文中的钙的结果，这项跨系统检验支持我们的解读：磁矩向低能常数后验分布中注入的约束在很大程度上具有互补性，它们强化了沿自旋-同位旋方向的相互作用，而这些方向仅受到 E_b 和 $R_{\rm ch}$的较弱约束；同时，像^{16}O这样的强束缚双幻核仍能得到稳定且成功的描述。

为进一步展现更新后系综的稳健性，我们将其预测精度与成熟的高保真手征相互作用进行基准比较：1.8/2.0 (EM) [30], NNLOsat [5], 和 ΔNNLO$_{\rm GO}$ [17]。图 S13 比较了钙奇质量同位素的磁矩残差（$\Delta\mu = \mu_{\rm theory} - \mu_{\rm exp}$）。先验系综（浅色小提琴图）通常能涵盖实验值，但变异范围很大，

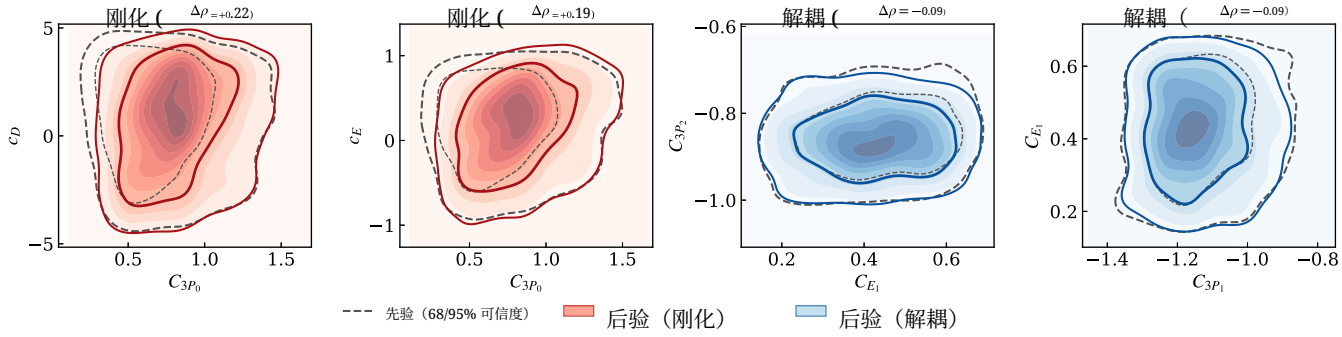


图 S10. 约束机制。相关矩阵中重组程度最大的低能常数对的核密度估计（KDE）。灰色等高线表示调温先验；彩色等高线（红色表示刚化，蓝色表示解耦）表示基于钙磁矩进行校准后的后验分布。此次更新揭示了两π交换和接触项扇区中的简并，而这些简并无法通过整体可观测量观测到。

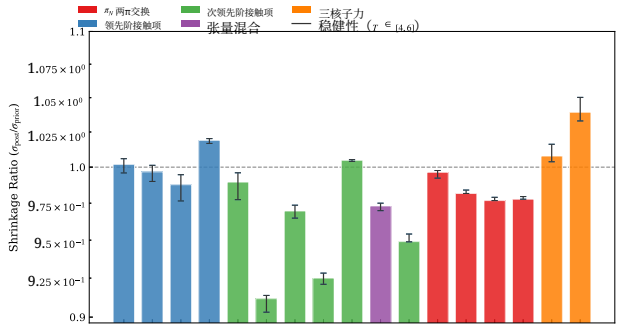


图 S11。后验收缩与稳健性。全部 17 个低能常数的后验标准差与先验标准差之比（$\sigma_{\text{post}}/\sigma_{\text{prior}}$）。数值越低，表示约束越严格。柱高表示基准温度 $T = 5.0$ 下的结果。误差条表示改变先验调温因子 $T \in [4.0, 6.0]$ 所得到的结果范围，表明对约束良好的参数（特别是两π交换和 N^2LO 扇区）的识别对于先验加权的具体细节具有稳健性。

而更新后的后验分布（深色小提琴图）显著缩小了这一范围，使残差集中在零附近。关键的是，后验分布的表现可与这些固定参数相互作用相媲美；对于复杂的 $f_{7/2}$ 中壳层同位素（^{47,49}Ca），其表现往往更胜一筹。这表明，模拟器辅助更新在不牺牲完整不确定性量化统计严谨性的前提下，实现了最先进的精度。

1. *Isotopic shift across likelihoods*

对第一性原理 预测的严格检验之一，是描述富中子同位素的电荷半径，尤其是 $N = 28$ 壳层闭合 [32]之后观测到的同位素位移特征性增大。再现这一趋势历来颇具挑战性，也引发了疑问

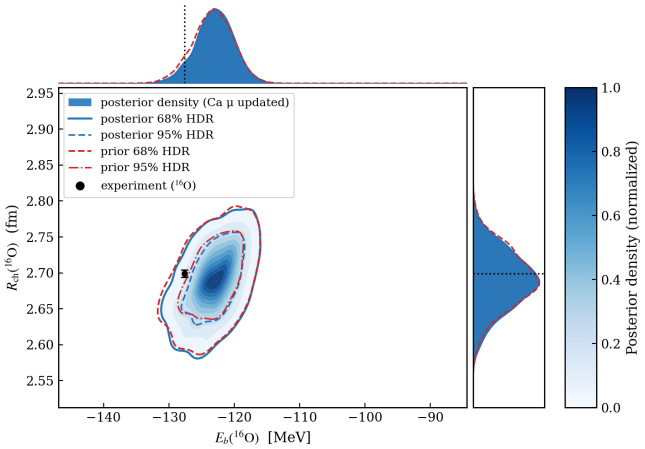


图 S12。 ^{16}O 中的跨系统稳健性检验。通过氧仿真器传播 LEC集合，在 $e_{\max}$ =10 处得到 ^{16}O 的结合能和电荷半径的联合后验分布。蓝色填充轮廓：Ca μ—更新后的后验密度，其中包含 68% 和 95% 的最高密度区域（HDRs）。红色虚线曲线：原始历史匹配先验权重对应的最高密度区域。顶部和右侧面板显示相应的 E_b 和 R_{ch} 一维边缘分布，并归一化至峰值为 1。带误差条的黑点表示实验值。

关于标准手征哈密顿量是否包含描述开壳层系统所需的物理机制 [5]。我们利用针对不同似然函数计算出的预测后验分布，评估特征行为的出现是否已被低能常数不确定性充分涵盖。

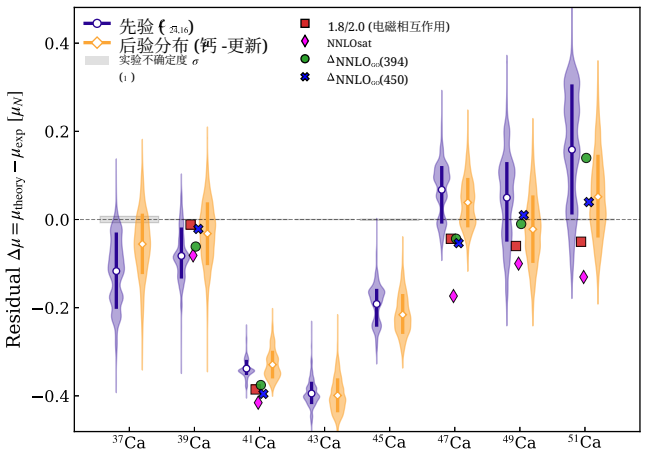


图 S13. 预测准确性基准测试。奇质量钙同位素磁偶极矩（$\Delta\mu$）的残差。我们将 FRAME 先验（浅色小提琴图）和更新后的后验分布（深色小提琴图）与实验不确定度（灰色带）及标准手征相互作用进行比较：1.8/2.0 (EM)（红色方块）、NNLOsat（洋红色菱形）以及 $\Delta\mathrm{NNLO_{GO}}$（绿色圆圈/蓝色叉号）。

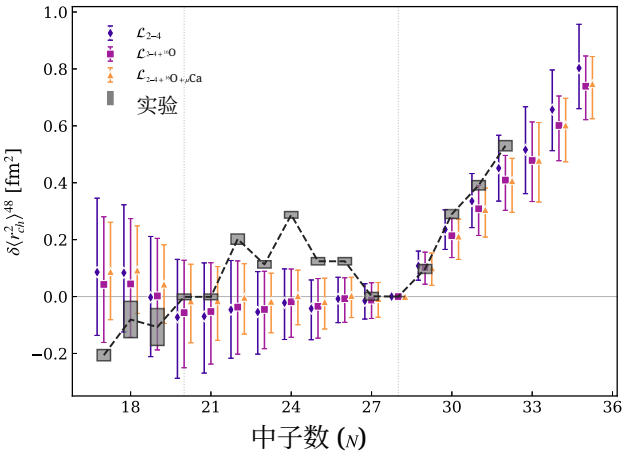


图 S14. 手征力与钙电荷半径演化的一致性。图中显示了相对于 ^{40}钙的同位素位移 $\delta\langle r_{ch}^2\rangle^{48}$，对应于同一手征LEC历史匹配系综得到的三种后验分布，但分别基于不同的似然函数进行条件化：(i) 仅 $\mathcal{L}_{2\text{–}4}$（紫色菱形）；(ii) $\mathcal{L}_{2\text{–}4+^{16}\mathrm{O}}$，并纳入 ^{16}O 数据（洋红色方块）；(iii) $\mathcal{L}_{2\text{–}4+^{16}\mathrm{O}+\mu\mathrm{Ca}}$，进一步纳入钙磁矩（橙色三角形）。色带表示后验预测分布的 95% 置信度，并综合考虑低能常数不确定性和模拟器误差。