能量密度泛函理论框架下 β 衰变计算的模拟器辅助校准与不确定性量化

Y. Saito ,[1, 2, *] A. Ravli´c [3, †] 和 W. Nazarewicz [1, 4, ‡]

[1] *Facility for Rare Isotope Beams, Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824, USA*
[2] *Department of Physics and Astronomy, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA*
[3] *Department of Physics, Faculty of Science, University of Zagreb, Bijenička c. 32, 10000 Zagreb, Croatia*
[4] *Department of Physics and Astronomy, Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824, USA*

（日期：2026年11月24日）

富中子原子核的 β 衰变半衰期预测及其不确定度，对我们理解天体物理快速中子俘获过程有着至关重要的影响。为了在核能量密度泛函理论框架下提供经过量化的预测，我们按照惯例，对两个耦合常数进行贝叶斯校准：等标量质子-中子配对强度和等矢量自旋密度耦合。我们采用 E 最优实验设计来选择校准集。我们利用质子-中子有限振幅方法，结合 Skyrme 能量密度泛函，并使用针对半衰期和伽莫夫–泰勒共振能的模拟器。计算所得的 Q_β 值经过微调，使之与实验值相符。在贝叶斯框架中，我们综合考虑理论误差、 Q_β 值和参数不确定性对半衰期不确定度的贡献。我们对偶偶 $N = 126$ 同中子素的预测，给出了现有理论模型中富中子原子核最短的半衰期，这可能会影响重元素核合成的进程。所提出的框架能够将经过量化的理论不确定性传播至天体物理观测量，例如丰度分布和电磁辐射。

arXiv:2611.31141v1 [nucl-th] 23 Nov 2026

I. 引言

β^- 衰变在天体物理快速中子俘获过程（r过程）中的重要性，自关于元素起源的开创性研究以来便已为人所知 [1, 2]。一般而言， β 衰变会调控核合成向更大质子数 Z的推进： β^-衰变半衰期会在最终形成的丰度分布中留下印记，并决定重核的合成时间尺度 [3, 4]。在中子壳闭合处 $N = 82$ 和 126， r过程路径更接近稳定线。这会导致丰度积累，并分别在 $A \sim 130$ 和 195 处形成第二和第三个 r过程峰。受同位素束设施实验进展的推动，理论研究日益关注 $N = 126$原子核的 β衰变性质 [5–11], ，主要是因为它们与第三个 r过程峰有关。稀土峰在 $A \sim 160$ 附近形成于冻结阶段，此时物质衰变回稳定状态；其形成是 β 衰变、中子俘获和原子核形变相互作用的结果 [12–15], ，而裂变也可能产生显著影响 [16, 17]。包括中子诱发裂变和 β延迟裂变在内的裂变过程，以及自发裂变，共同决定 r过程路径的终点，并将重核的丰度重新分配至较轻的区域 [16, 18–24]。由于 β 衰变决定了可裂变原子核形成的时间尺度，裂变的贡献也可能受到 β衰变半衰期变化趋势的影响。

对于 r过程核合成计算，需要可扩展的原子核 β衰变模型，以便计算核素图中各处的衰变性质。自巨观理论的开创性研究 [25, 26] 及其改进模型 [27]以来， β 衰变的全局理论描述取得了显著进展。有限程液滴模型（FRDM）与准粒子随机相位近似（QRPA）相结合，提供了更微观的描述 [28], ，后来还纳入了第一禁戒跃迁 [29, 30]。近几十年来，能量密度泛函（EDF）理论作为一种可扩展的多体方法，与 QRPA 相结合，在全局计算 β衰变性质方面也取得了显著进展。最初，计算仅限于球形原子核 [5, 8, 31, 32]。电荷交换准粒子随机相位近似的线性响应表述 [33, 34]得以发展，使得利用非相对论 Skyrme 能量密度泛函 [35, 36]和相对论性能量密度泛函 [11]，在轴对称性条件下进行全局计算成为可能。鉴于 β衰变半衰期的全局趋势会显著影响丰度分布和电磁辐射特征等可观测量，人们已广泛研究 r过程模拟对这一趋势的灵敏度 [11, 31, 37–40], 。

在我们最近的研究中 [11], ，我们发现，利用轴对称方法计算的 β衰变半衰期适用于超出 $N = 126$ 的原子核，所有形变能量密度泛函理论的结果彼此吻合良好，但其半衰期显著长于先前的全局汇编表，例如文献 [8, 30]。较长的半衰期会减缓第三 r过程峰元素以及会发生中子诱发裂变的重核的生成 [19, 41, 42]。然而，对于非相对论 Skyrme 能量密度泛函，此前仅有一份 β衰变半衰期的全局汇编表 [36], ，因此无法与相对论性能量密度泛函进行系统比较。此外，由于预测结果缺乏不确定性评估，尚不能确定这些结果是否偏离了

* saitoy@frib.msu.edu
† ravlic@frib.msu.edu
‡ witek@frib.msu.edu

先前的全局汇编表。

在本研究中，我们利用近期开发的仿真器 [43]，对多个 Skyrme 能量密度泛函中与 β 衰变计算相关的参数进行贝叶斯校准，以解决这些问题。本文结构如下：第 II 节简要回顾与 β 衰变计算相关的 Skyrme 能量密度泛函的若干方面。随后，我们对理论估算的 Q_β 值进行修正。接下来的小节将讨论贝叶斯校准与不确定性量化的框架，包括模拟器架构，以及识别对校准具有信息价值的实验数据的方法。第 III 节介绍模拟器的性能、贝叶斯校准结果，以及偶偶 $N = 126$ 同中子素的不确定性量化。结论与展望见第 IV 节。

II. 理论方法

A. 基于能量密度泛函理论的 β 衰变计算

我们的 β 衰变计算采用了参考文献 [35, 36] 中发展的框架。在核能量密度泛函理论中，发生 β 衰变的原子核基态通过 Hartree–Fock–Bogoliubov (HFB) 计算获得，计算采用 HFBTHO [44] 求解器，并假设核形状为轴向变形且具有反射对称性。获得基态后，进行质子-中子有限振幅方法 (pnFAM) [33] 计算，以得到 Gamow–Teller (GT) 强度函数和 β 衰变半衰期。本研究采用含 18 个壳层的变形谐振子基。GT 强度函数在实能量轴上以 0.15 兆电子伏特为步长计算，展宽半宽为 0.25 兆电子伏特，收敛精度为 10^{-5}。对于半衰期，圆形 FAM 轮廓离散为 200 个 Gauss–Legendre 点，计算的收敛精度为 10^{-9}。

核能量密度泛函的标定通常依据偶偶核的基态性质进行，而这些性质只需要能量密度泛函的时间偶分量。然而，β衰变计算还需要时间奇项。对于 Skyrme 能量密度泛函，这些项为

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{\rm odd}_{tt_3}(\boldsymbol{r}) \equiv & C^s_t[\rho_{00}]\,\boldsymbol{s}^2_{tt_3} + C^{\Delta s}_t\,\boldsymbol{s}_{tt_3}\cdot\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{s}_{tt_3} + C^j_t\,\boldsymbol{j}^2_{tt_3} \\ & + C^T_t\,\boldsymbol{s}_{tt_3}\cdot\boldsymbol{T}_{tt_3} + C^{s\boldsymbol{\nabla}j}_t\,\boldsymbol{s}_{tt_3}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{j}_{tt_3} \\ & + C^F_t\,\boldsymbol{s}_{tt_3}\cdot\boldsymbol{F}_{tt_3} + C^{\boldsymbol{\nabla}s}_t\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{s}_{tt_3})^2, \qquad (1)\end{aligned}$$

其中，t 和 t_3 分别表示同位旋及其第三分量；$\boldsymbol{s}_{tt_3}$、$\boldsymbol{j}_{tt_3}$、$\boldsymbol{T}_{tt_3}$和 $\boldsymbol{F}_{tt_3}$分别表示自旋密度、流密度、自旋动能密度和张量动能密度；C表示耦合常数。在 β衰变计算中，我们关注的这组耦合常数为 $\{C^s_1, C^T_1, C^F_1\}$，它们与Landau–Migdal 参数 [45]相关。此外，等标量配对强度 V_0 会影响电荷变化响应，但无法通过偶偶核的基态加以约束。根据参考文献 [35], , 该研究仅改变$\{C^s_1, V_0\}$便获得了最稳健的拟合结果；我们也改变这两个参数，并固定其余的时间反演奇耦合常数。

在参考文献 [36], 中进行的全局 β衰变半衰期计算采用了 Skyrme 能量密度泛函 SkO′ [46] 。为更系统地研究β衰变性质对能量密度泛函的依赖性，我们还考虑了 Skyrme 能量密度泛函 SLy4 [47] 和 UNEDF1-HFB [48]。

对于每个泛函，C^s_1的密度依赖部分和耦合常数 $C^{\Delta s}_1$均设为零。耦合常数 C^T_1和 C^F_1由局域规范不变性确定，该不变性将它们与时间偶 $\boldsymbol{J}^2$ 项的耦合常数 C^J_1联系起来，其中$\boldsymbol{J}$ 为自旋流密度；详情见参考文献 [45, 49] 。因此，对于 SLy4 和 UNEDF1-HFB，由于二者均未包含 $\boldsymbol{J}^2$ 项，$C^T_1 = 0$；而 SkO′ 则保留了该项，且$C^T_1 = -9.2$ 兆电子伏特 飞米^5。由于这三个泛函均不包含张量项，耦合常数 C^F_1对它们均为零。

B. Qβ值的微调

在本研究中，我们遵循参考文献 [36] ，使用 HFB输入近似计算 Q_β值。具体而言，Q_β 值计算如下：

$$Q^{\rm HFB}_\beta \simeq \Delta M_{n-{\rm H}} + \lambda_n - \lambda_p - (E_{n,\min} + E_{p,\min}), \quad (2)$$

其中，$\Delta M_{n-{\rm H}}$ 是中子与氢原子之间的质量差，λ_n 和 λ_p 分别是中子和质子的化学势，而$E_{n,\ \min}$ 和$E_{p,\ \min}$ 分别是中子和质子的最低准粒子能量。

现有采用 Skyrme 能量密度泛函进行的全局 β衰变计算使用了 SkO′，部分原因是与其他 Skyrme 能量密度泛函 [35]相比，它预测 Q_β 值的相对准确性较高。由于 β 衰变率大致正比于 Q^5_β，计算得到的 Q_β 值若存在系统偏差，就会导致半衰期出现系统偏差。由于偶偶核的 Q_β 值不依赖于 V_0 和C^s_1，标定这些参数无法消除这种偏差。因此，在本研究中，我们对每种泛函计算得到的 Q_β值施加线性修正，并将其与均值之间的差异视为统计误差。

通过 HFB计算 得到 $Q^{\rm HFB}_\beta$，适用于具有 $18 \le Z \le 96$ 的偶偶核，以及 AME2020 [50] 中列出的 β^- 衰变中 $Q^{\rm exp}_\beta$ 为正值的情况。修正后的理论 Q_β 值定义如下：

$$Q^{\rm corr}_\beta = Q^{\rm HFB}_\beta - [a_0 + a_T(N-Z) + a_A A], \qquad (3)$$

其中，系数 a_0、a_T 和 a_A 是通过对 $Q^{\rm HFB}_\beta - Q^{\rm exp}_\beta$ 与具有实测 Q_β 的154个原子核进行无权最小二乘拟合得到的。AME2020中根据系统学得到的 Q_β 数值未用于拟合。图1展示了采用UNEDF1-HFB泛函计算的理论 Q_β 值与实验值之间的偏差，以及修正前后的对比，

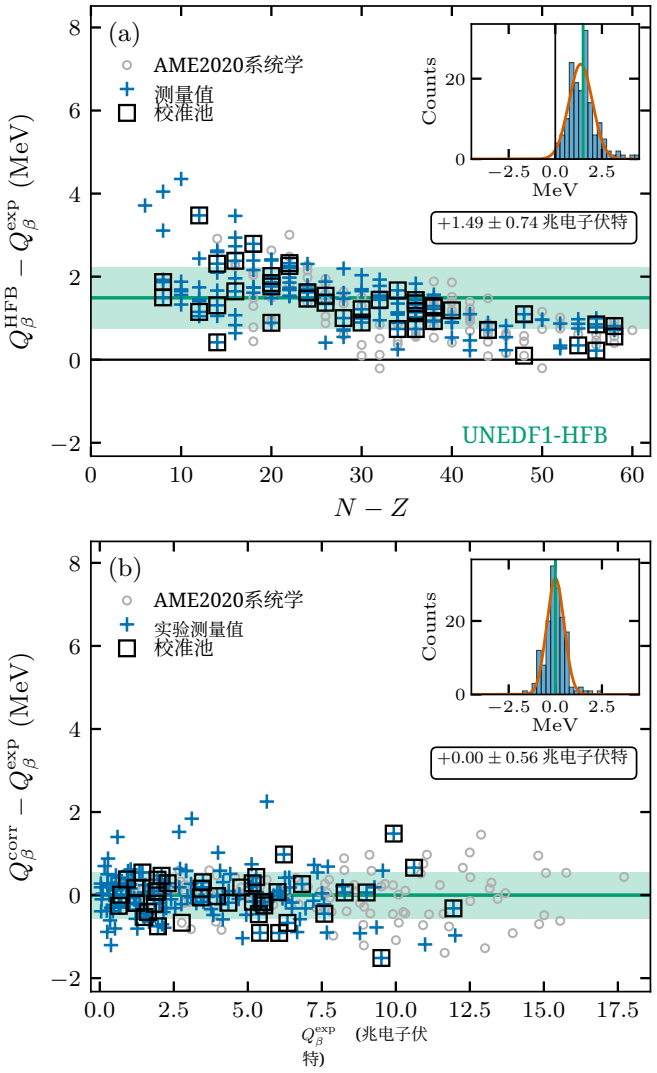

图 1. UNEDF1-HFB 计算的 Q_β 值与实验值的偏差：(a) 修正前随 $N-Z$ 的变化；(b) 修正后随 $Q_\beta^{\rm exp}$ 的变化。十字标记表示拟合中使用的具有实验测量 Q_β 值的原子核，灰色圆圈表示其质量数基于 AME2020 中系统学数据的原子核（未用于拟合），方块表示表 IV 中的原子核。水平线和阴影带分别表示均值和统计偏差。插图显示了残差的分布及其正态拟合。

拟合结果汇总于表I中。我们发现，沿同位旋和 A 方向进行线性修正，可得到近似服从正态分布的残差。修正后，在少数区域内，残差的绝对值超过 $2\sigma_Q$ 。^{42,44,46}Ar同位素被高估了2–4σ_Q ，而富中子Ti、铬和铁同位素在三个泛函下均被低估，最大幅度达 $3\sigma_Q$ 。处于壳层闭合处或其附近的原子核，例如 ^{48}Ca、 ^{68}镍、 ^{80}锌、 ^{80}Ge和 ^{126,132}Sn，在至少一个泛函下的偏差也超过 $2\sigma_Q$ 。这表明，在幻数附近对质量数和壳层结构的描述误差具有局部特征

表 I. 对每个泛函计算的 Q_β 值进行线性修正（式（3））的汇总：在 154 个具有 AME2020 [50] 中实验测量 Q_β 值的偶偶核上，给出修正前 $Q_\beta^{\rm HFB} - Q_\beta^{\rm exp}$ 的均值和标准差、拟合系数，以及修正后 σ_Q 的残差标准差。修正后的均值为零。所有数值均以兆电子伏特为单位。

泛函	之前	a_0	a_T	a_A	σ_Q
SkO′	$+0.22 \pm 0.69$	$+0.789$	-0.0752	$+0.0122$	0.58
SLy4	$+0.17 \pm 0.63$	$+0.080$	-0.0376	$+0.0091$	0.62
UNEDF1-HFB	$+1.49 \pm 0.74$	$+2.427$	-0.0590	$+0.0057$	0.56

平滑修正无法处理的情况。

修正后的 $Q_\beta^{\rm corr}$值随后用于 pn-FAM 半衰期计算，并将积分轮廓和相空间因子也调整为与修正后的值一致。这意味着，积分轮廓的上限——最大 QRPA 能量 $E_{\rm max}^{\rm QRPA}$——定义为$E_{\rm max}^{\rm QRPA} = Q_\beta^{\rm corr} + E_{n,\ \rm min} + E_{p,\ \rm min}$，而进入相空间因子的电子端点能量则偏移 $Q_\beta^{\rm corr} - Q_\beta^{\rm HFB}$，强度本身保持不变。修正后的残差标准差 σ_Q （表 I）按照第 II F 节所述传播至 β衰变半衰期。

C. 校准参数和可观测量

本研究标定的两个参数为$\boldsymbol{\theta} = (V_0,\ C_1^s)$，即等标量质子-中子配对强度 V_0 和等矢量自旋密度耦合常数 C_1^s。两者的单位均为兆电子伏特·飞米^3。初始样本在区间 $V_0 \in [-500, 0]$兆电子伏特·飞米^3 和$C_1^s \in [0, 250]$兆电子伏特·飞米^3 内生成（第 II E 节）；本文还使用无量纲参数

$$v = \frac{V_0 + 250}{250},$$
$$c = \frac{C_1^s - 125}{125},$$
$$\boldsymbol{z} \equiv (v, c) \in [-1, 1]^2, \tag{4}$$

将范围映射到 $[-1, 1]$。

不过，我们注意到，已知当等标量配对足够强时，会发生质子-中子配对相变 [51]。在本研究中，参数的有效范围限定在这样一个区域内：标定中的所有原子核（见表 IV 和第II G节）均不会发生相变， $V_0 \geq V_{\rm min}$ with$V_{\rm min} = -371$ MeV fm^3 for SkO′、 -450 MeV fm^3 for SLy4，以及 -360 MeV fm^3 for UNEDF1-HFB。我们还要求$C_1^s \geq 50$ MeV fm^3, , 因为低于此值时，半衰期计算会变得不稳定。我们将此区域称为稳定域。

第一个可观测量是总 β^-衰变半衰期，包括允许的 GT 和 FF 跃迁，计算方法见参考文献 [36]。由于计算得到的半衰期跨越

所采样参数空间中的许多个数量级，因此我们改为考虑 $\log_{10}(T_{1/2}/\mathrm{s})$。

第二个可观测量是GT共振能量。GT强度函数根据QRPA能量 E^{QRPA} 计算，随后将其转换为子核的激发能 $E_x = E^{\mathrm{QRPA}} - (E_{n,\ \min} + E_{p,\ \min})$，并按照第II B节 [5] 中的方法，用最低双准粒子态近似子核基态。

对于GT共振，我们关注实验共振能量附近的强度。根据文献中的GT共振谱（表 V），我们在观测到的共振峰周围定义一个6 MeV窗口，并在该窗口内计算所得到的GT强度的质心。对于 ^{48}Ca，该窗口为 $[4.5, 14.5]$ 兆电子伏特，依据参考文献 [52]确定。

为避免在窗口内计算质心时能量处出现尖锐截断，我们采用平滑的窗口函数。对于窗口 $[E_{\mathrm{lo}}, E_{\mathrm{hi}}]$，赋予激发能 E_x 处强度的权重为

$$w(E_x) = \left[1 + e^{-(E_x - E_{\mathrm{lo}})/\tau}\right]^{-1} \left[1 + e^{-(E_{\mathrm{hi}} - E_x)/\tau}\right]^{-1}, \tag{5}$$

其中 τ 控制平滑宽度。本工作中我们使用 $\tau = 0.5$ 兆电子伏特。在 $\tau \to 0$的极限下，平滑窗口趋近于锐利窗口。此时，强度质心的计算方式为

$$\bar{E} = \frac{\int dE_x\, E_x\, w(E_x) S(E_x)}{\int dE_x\, w(E_x) S(E_x)}. \tag{6}$$

在标定中，将 $\bar{E}$ 与测得的峰能量 E^{exp} GT进行比较。平滑截断使质心随预测的 GT强度分布变化而连续变化，从而提高了模拟器训练和贝叶斯校准过程中的数值稳定性。我们使用质心而非最高峰的位置，因为在碎裂的强度分布中，最高峰可能会随着参数变化而从一个态跳到另一个态。

D. 模拟器架构

本研究使用的模拟器基于参考文献 [43] 中提出的降阶模型。该模型通过对一个小矩阵进行特征分解，来描述感兴趣的量对校准参数的依赖关系。每个仿真器预测一个可观测量，即半衰期或 GT共振质心；并且针对每个原子核、每种可观测量和每个泛函，分别训练一个仿真器。

1. *Trainable matrix*

仿真器以缩放参数 $\boldsymbol{z} = (v,\ c)$ 所对应的可训练矩阵为起点，其定义如下：

$$\hat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{z}) = \mathcal{M}_0 + (v - v_0)\,\mathcal{M}_1 + (c - c_0)\,\mathcal{M}_2, \tag{7}$$

其中 $\mathcal{M}_0$ 是实值对角 $n \times n$矩阵，$\mathcal{M}_1$ 和$\mathcal{M}_2$ 是实对称 $n \times n$ 矩阵，而 $\boldsymbol{z}_0 = (v_0, c_0)$是最接近均值的一个训练数据点。$\mathcal{M}_0$、$\mathcal{M}_1$和 $\mathcal{M}_2$ 中的元素是 $n + n(n+1)$个可训练参数。在参数点 $\boldsymbol{z}$ 处评估仿真器预测，相当于构建 $\mathcal{M}(\boldsymbol{z})$并对其进行对角化，

$$\hat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{z})\,\boldsymbol{u}^{(i)}(\boldsymbol{z}) = \hat{m}^{(i)}(\boldsymbol{z})\,\boldsymbol{u}^{(i)}(\boldsymbol{z}), \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{8}$$

其中特征值按 $\hat{m}^{(1)} \le \hat{m}^{(2)} \le \cdots \le \hat{m}^{(n)}$ 的顺序排列。由于矩阵对参数呈线性依赖，其特征值和特征向量是 $\boldsymbol{z}$ 的光滑函数，但在特征值交叉处除外；训练则确定这些函数如何依赖于参数。

2. *Scalar observable emulator*

标量仿真器直接将可观测量预测为式（7） [43]的中间特征值。我们使用维度为 $n = 5$的矩阵，因此可观测量由第三个特征值仿真得到，

$$\hat{y}(\boldsymbol{z}) = \hat{m}^{(3)}(\boldsymbol{z}), \tag{9}$$

其中，$\hat{y}$ 是 $\log_{10}(T_{1/2}/\mathrm{s})$ 或 E。每个标量仿真器有 $n + n(n+1) = 35$ 个可训练参数。

E. 仿真器的训练

对于每个泛函，从二维 Sobol 准随机序列 [53]中抽取了 100 个参数集 $\boldsymbol{\theta} = (V_0, C_1^s)$。在每个点进行 pnFAM 计算，以获得 β衰变半衰期和最高至 30 兆电子伏特 QRPA能量的 GT 强度函数。将稳定域以外的样本从半衰期训练数据中剔除，同时剔除未能收敛的样本，以及衰变率低于 10^{-9} s^{-1}的样本，因为这些样本受数值噪声主导。

仿真器通过最小化预测值的均方误差来进行训练，该误差是相对于训练样本中的原始 pnFAM 计算而言的，预测值为 $\log_{10}(T_{1/2}/\mathrm{s})$ 或 E。

所有仿真器均使用 TensorFlow [55] 中的 Adam 梯度下降优化器进行训练，迭代 30000 次，初始学习率为 0.01；训练时采用四个不同的随机种子，并保留最佳结果。

通过五折交叉验证评估仿真器的准确性。每个训练目标的样本被分成五部分，每一折使用不同的 80%

样本进行训练，并留出其余 20% 用于验证。对于半衰期，样本的划分方式确保每一折大致覆盖半衰期的完整取值范围。对于每个训练目标，标定中使用的仿真器取自验证损失最低的一折，该仿真器使用 80% 的样本进行训练。式（11）中的仿真器误差 σ_{em} 通过汇集五折中留出样本预测的残差进行估计。此估计用于第 III D 节所述的初步贝叶斯校准。对于半衰期，最终的 σ_{em} 值根据初步校准后验分布区域内单独进行的测试计算估计（第 III D 节）。对于 GT共振质心，则保留交叉验证估计值。

F. 贝叶斯推断

校准目标是 NUBASE2020 [56] 中实验测得的半衰期，以及一组原子核的 GT共振峰能量。我们关注的量是两个参数 $\boldsymbol{\theta}$。理论误差的尺度 $\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}$和 $\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}}$也同时进行推断。后验分布表示为

$$p(\boldsymbol{\theta}, \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}, \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}} \mid \mathcal{D}) \propto \pi(\boldsymbol{\theta})\, \pi(\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}})\, \pi(\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}}) \prod_{k \in \mathcal{C}_{\mathrm{HL}}} \mathcal{L}_k \prod_{k \in \mathcal{C}_{\mathrm{GT}}} \mathcal{L}_k, \tag{10}$$

其中， $\mathcal{D}$ 是校准数据集， $\mathcal{C}_{\mathrm{HL}}$ 和 $\mathcal{C}_{\mathrm{GT}}$ 分别是校准中纳入的、具有实测半衰期和 GT共振峰能量的原子核集合， π 表示先验分布，而 $\mathcal{L}_k$ 表示校准集中原子核 k的似然。

将每个实测校准目标与相应的仿真器预测 $\hat{}y_k(\boldsymbol{\theta})$通过似然 $\mathcal{L}_k$进行比较。我们采用正态似然和自由度为 $\nu = 4$ 的 Student-t似然；后者是稳健推断中的常见选择 [57, 58], ，用于检验结果对离群值的灵敏度。由于具有更厚的尾部，Student-t 似然会降低少数原子核的权重，这些原子核的半衰期预测误差达数个数量级；主结果采用这种似然。对于两种似然，方差分解为

$$\sigma_{\mathrm{tot},k}^2 = \sigma_{\mathrm{th}}^2 + \sigma_{\mathrm{exp},k}^2 + \sigma_{\mathrm{em},k}^2 + \sigma_{Q_\beta,k}^2, \tag{11}$$

其中， $\sigma_{\mathrm{th}} = \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}$用于半衰期， $\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}}$用于GT共振质心。式（11）中的四个分量分别为理论误差、实验不确定度、仿真器误差，以及由修正后 Q_β 值的不确定度传播而来的误差。对于Student-t 似然，尺度参数设为$\sigma_{\mathrm{tot},\,k}\sqrt{(\nu-2)/\nu}$，使其方差等于$\sigma_{\mathrm{tot},\,k}^2$，因此两种似然仅在尾部形状上有所不同。报告的半衰期 $\Delta T_{1/2}$ 的实验不确定度被换算为$\sigma_{\exp} = \Delta T_{1/2}/(T_{1/2} \ln 10)$。$\sigma_{Q_\beta,\,k}^2$项仅计入半衰期方差；对于GT共振质心，该项为零。传播Q_β值标准差时，假设 β衰变率与 Q_β^5成正比，从而得到以$\log_{10} T_{1/2}$为单位的$\sigma_{Q_\beta,\,k} = 5\sigma_Q/(Q_{\beta\,k}^{\mathrm{corr}} \ln 10)$，其中$Q_{\beta\,k}^{\mathrm{corr}}$，是原子核 k 的修正后 Q_β 值， σ_Q 是在第IIB节中得到的拟合残差标准差。对于GT共振质心， $\sigma_{\exp}$ 是测得的共振能量的不确定度，单位为兆电子伏特。按照第II E节所述，仿真器误差按每个原子核固定。

共享理论误差 σ_{th}，而不是核素依赖误差，是自然的选择。对于一个原子核的每个可观测量——半衰期或GT共振能量——都只有一个测量值，因此核素依赖误差只会简单地吸收理论预测的残差，而共享误差则代表校准集上残差的离散程度。 σ_{th} 衡量的是，采用最优参数值时，泛函对整个校准集的描述偏离程度。在参考文献 [35] 中，相应 χ^2 分布的宽度是人为设定的，而在本工作中则由数据推断得到。先验分布定义为：

$$V_0 \sim \mathcal{N}_{[V_{\min},\,0]}(V_1,\, 200)\ (\mathrm{in\,MeV\,fm^3}), \tag{12}$$

$$C_1^s \sim \mathcal{U}(50,\, 250)\ (\mathrm{in\,MeV\,fm^3}), \tag{13}$$

$$\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}},\ \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}} \sim \text{Half-}t_{\nu=4}(0,\, 1), \tag{14}$$

其中， $\mathcal{N}_{[a,b]}(\mu, s)$表示均值为 μ、标准差为 s的正态分布，并截断于 $[a, b]$。在 $V_{\min}$ 处的截断通过平滑渐变 $\tanh^2[(V_0 - V_{\min})/w]$实现，其中 $w = 10$ 兆电子伏特·飞米^3, ，因此先验密度会在该极限处连续趋于零。V_1 表示同类粒子同位旋矢量配对强度：SkO为-264.2 兆电子伏特·飞米^3，SLy4为 -332.7 兆电子伏特·飞米^3，UNEDF1-HFB为 -247.4 兆电子伏特·飞米^3 。 $\mathcal{U}(50,\, 250)$是一个均匀分布，其范围覆盖50到250之间的区间。关于 $\boldsymbol{\theta}$ 的先验分布的支撑集，是模拟器经过训练的区域（第II E节）；在该区域之外，模拟器未定义。 C_1^s的采样范围 $[0, 250]$ 兆电子伏特·飞米^3, 是根据参考文献 [35], 128中SkO的报告值′ 选择的。279兆电子伏特·飞米^3, 大致位于其中心，而先验的下界是第II C节中的稳定性极限。这些先验被设计为弱信息先验，在 $V_0 = V_1$处密度最大。理论误差大小的半-t 先验被设定为非负且具有重尾，从而允许取远高于其尺度1的值。

使用 PyMC 的序贯蒙特卡洛（SMC）采样器对后验分布进行抽样 [59], ，共运行四条独立链，每条链抽样 2000 次。

某个原子核的半衰期的后验预测分布 k 为

$$p(y_k \mid \mathcal{D}) = \int p\big(y_k \mid \boldsymbol{\theta}, \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}\big)\ p\big(\boldsymbol{\theta}, \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}, \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}} \mid \mathcal{D}\big)\ d\boldsymbol{\theta}\, d\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}}\, d\sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{GT}}, \tag{15}$$

其中， $p(y_k \mid \boldsymbol{\theta},\ \sigma_{\mathrm{th}}^{\mathrm{HL}})$ 是方差为 $\sigma_{\mathrm{th}}^2 + \sigma_{Q_\beta,\,k}^2$ 的半衰期似然，其中心位于模型半衰期 $\hat{}y_k(\boldsymbol{\theta})$。

注意， y_k 表示预测变量，而 $\hat{y}_k(\boldsymbol{\theta})$ 是给定 $\boldsymbol{\theta}$ 时的模型半衰期。对于没有测量值或模拟器的预测，公式（11）中的实验项和模拟器项不存在。对于校准池中的原子核，我们采用相同的程序，将模拟器作为 $\hat{y}_k(\boldsymbol{\theta})$，并使用公式（11）中的完整方差。

在这项工作中，我们通过 $N = 126$ 同中子素展示不确定性量化。使用 pnFAM 对每个后验样本计算 $\hat{y}_k(\boldsymbol{\theta})$，代价高昂且不切实际。作为替代，对于每个原子核，我们使用从后验分布中抽取的参数值，对 20 次 pnFAM 计算结果在 $(V_0,\ C_1^s)$ 上拟合一个二次曲面，并将其用作 $\hat{y}_k(\boldsymbol{\theta})$。我们采用这一方法，因为它明显比针对每个可观测量训练并验证仿真器简单；后者还需要更多样本。如第 III E 节所述，这只会引入可忽略不计的误差。随后，通过为每个后验样本抽取一个 y_k 值来计算该积分。

G. 标定可观测量与原子核的选择

虽然 GT 共振数据主要约束自旋密度耦合常数 C_1^s，但要约束同标量配对强度 V_0，则需要半衰期。作为标定的候选实验数据池，我们考虑了参考文献 [35] 和 [60] 中列出的半衰期与 GT 共振测量数据的并集。此外，我们还纳入了 ^{56}铬、^{208}汞（$N = 126$ 区域）和 ^{234}镭（一个形变原子核，位于 $N = 126$ 之外）的半衰期，以覆盖核素图中 Q_β 值相对较低的区域；并纳入 ^{132}镉，因为其 Q_β 值较大，且与第二个 r 过程峰相关。总共将 42 个实测半衰期和 8 个 GT 共振能量作为候选数据。候选原子核列于表 IV 和 V 中。

选择用于标定的实验数据时，重要的是选取其对应理论计算对参数变化高度敏感的数据。为了量化理论模型对参数变化的灵敏度，我们引入信息矩阵和 E 最优实验设计。

1. *Information matrix*

对于校准集 $\mathcal{C}$，信息矩阵定义为

$$\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{z}_t) = \sum_{x\in\mathcal{C}} \frac{\boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{z}_t)\boldsymbol{f}^T(x,\boldsymbol{z}_t)}{\sigma^2(x)} \equiv \sum_{x\in\mathcal{C}} \boldsymbol{\mu}(x,\boldsymbol{z}_t), \quad (16)$$

其中，x 是原子核及其可观测量类型的标签，$\boldsymbol{f}(x,\ \boldsymbol{z}_t)$ 是在参考点 $\boldsymbol{z}_t$处可观测量对缩放参数 $\boldsymbol{z} = (v,\ c)$的灵敏度，而$\sigma^2(x)$是残差方差。 $\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}$的逆矩阵近似于缩放参数空间中参数的协方差矩阵（附录 A）。我们取 $\sigma^2(x) = \sigma^2_{\rm exp}(x) + \sigma^2_{\rm em}(x) + \sigma^2_{\rm th} + \sigma^2_{Q_\beta}(x)$ 表示半衰期，$\sigma^2(x) = \sigma^2_{\rm exp}(x) + \sigma^2_{\rm em}(x) + \sigma^2_{\rm th}$ 表示 GT 共振能量，见式 (11)。

计算公式（16）需要两个在进行任何标定之前都无法获得的输入：理论误差 $\sigma_{\rm th}$（根据数据推断得出）以及参考点 $\boldsymbol{z}_t$（应位于数据所支持的参数空间区域内）。由于我们正在选择校准集，这些输入必须来自一个独立于选择过程而选定的校准集。我们采用参考文献 [35], 中的集合，其标定结果随后用于参考文献 [36], 的全局计算，以下将其称为集合 A（表 II）。仿真器误差来自交叉验证，而理论误差和参考点则来自集合 A 标定的后验分布（第 III B 节）。因此，所选集合通过 $\sigma_{\rm th}$ 和 $\boldsymbol{z}_t$ 依赖于集合 A。如下文所述，我们还通过在整个参数域而非集合 A 所支持的区域内拟合 $\boldsymbol{f}(x,\ \boldsymbol{z}_t)$来检验对 $\boldsymbol{z}_t$ 的依赖性。

尽管 $\boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{z}_t)$ 在公式（A4）中定义为逐点导数，但在数值实现中，我们使用普通最小二乘法进行线性拟合来近似该导数。也就是说，对于每个原子核及其可观测量 x，函数

$$\eta(x,\boldsymbol{z}) \simeq \alpha(x) + b_V(x)v + b_C(x)c, \quad (17)$$

在参数空间的某个区域内拟合 x 的 pnFAM 计算，其中 $\eta(x,\boldsymbol{z})$ 是在 $\boldsymbol{z}$ （附录 A）处计算得到的可观测量（$\log_{10} T_{1/2}$ 或 GT 共振质心能量）。随后，信息矩阵中使用的灵敏度向量为

$$\boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{z}_t) \simeq \big(b_V(x), b_C(x)\big)^T. \quad (18)$$

因此，这些系数表示拟合所含样本的平均灵敏度，并近似逐点导数。

我们考虑两种估计半衰期灵敏度的方法：“全局”估计和“局部”估计。全局估计中，公式（17）中的斜率是在有效的参数采样区域内估计的。局部估计中，拟合斜率时仅使用 V_0 位于采用正态似然的集合 A 标定（表 III）后验区间的 16–84% 范围内的样本，而不论 C_1^s 的取值如何。该区域取代了公式（A3）中的参考点 $\boldsymbol{z}_t$ 。

对于 GT 共振质心能量，目前仅考虑八个原子核的数据，且每个数据点都对 C_1^s高度敏感。因此，所有数据点均纳入标定。它们的斜率是在整个采样参数区域内估算的。

2. *E-optimality*

信息矩阵 $\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}$ 衡量校准集 $\mathcal{C}$ 对参数的约束程度，因此为选择 $\mathcal{C}$提供依据。一般而言，

无法直接找到一个使 $M_{\mathcal{C}}$达到全局最优的校准集。相反，需要采用标量判据，在特定情境下寻找最优校准集。本文采用 E-最优性，它能够避免使任何参数组合受到较弱的约束 [61]。在实践中，这意味着选择能够使信息矩阵 $M_{\mathcal{C}}$ [62]的最小特征值达到最大的校准集 $\mathcal{C}$ 。

由于GT共振核的集合是固定的，它对

$$M_{\mathrm{GT}} = \sum_{x\in\mathcal{C}_{\mathrm{GT}}} \boldsymbol{\mu}(x), \tag{19}$$

为常数，其中 $\boldsymbol{\mu}(x)$ 的定义见公式（16）。因此，半衰期的 E-最优集合为

$$\mathcal{C}^{*}_{\mathrm{HL},m} = \underset{\substack{\mathcal{C}_{\mathrm{HL}}\subseteq\mathcal{P}_{\mathrm{HL}}\\ |\mathcal{C}_{\mathrm{HL}}|=m}}{\arg\max}\ \lambda_{\min}\left[M_{\mathrm{GT}} + \sum_{x\in\mathcal{C}_{\mathrm{HL}}} \boldsymbol{\mu}(x)\right], \tag{20}$$

其中 $\mathcal{C}^{*}_{\mathrm{HL},\ m}$ 是从候选池 $\mathcal{P}_{\mathrm{HL}}$ 中选取的一组原子核，$\lambda_{\min}[M]$ 是矩阵 M 的最小特征值。对于半衰期数据，我们设定 $m = 10$ 。由于 GT 共振能量主要约束 C_1^s，E-最优性会增强沿 V_0 方向的约束。

半衰期的 E 最优集通常通过以下方式确定：对候选池（表 IV）中半衰期原子核的每个 $m = 10$ 子集，计算公式（20）中的 $\lambda_{\min}$，并要求不同质量数、 Q_β 值、壳闭合、形变及 FF衰变贡献的原子核均有代表。

H. 校准程序

校准需要经过多个贝叶斯推断步骤，以构建 E-最优集合、估计用于评估仿真器性能的参数感兴趣区域，并执行最终的贝叶斯校准。完整程序如下：

1. 使用集合 A，对 $\boldsymbol{\theta}$ =(V_0, C_1^s) 进行贝叶斯推断，并根据其后验分布构建全局和局部 E-最优集合（第 II G 节）；2. 对局部和全局 E-最优集合以及包含所有候选原子核的完整集合，使用交叉验证估算的 σ_{em} 对 $\boldsymbol{\theta}$ 进行贝叶斯推断；3. 定义 $\boldsymbol{\theta}$ 的矩形区域以覆盖所得后验分布，并抽取样本，利用 pnFAM 生成测试数据；4. 使用测试数据对半衰期仿真器进行最终误差评估，以获得更新后的 σ_{em}；5. 使用更新后的（测试）仿真器误差 σ_{em} 再次进行贝叶斯推断。

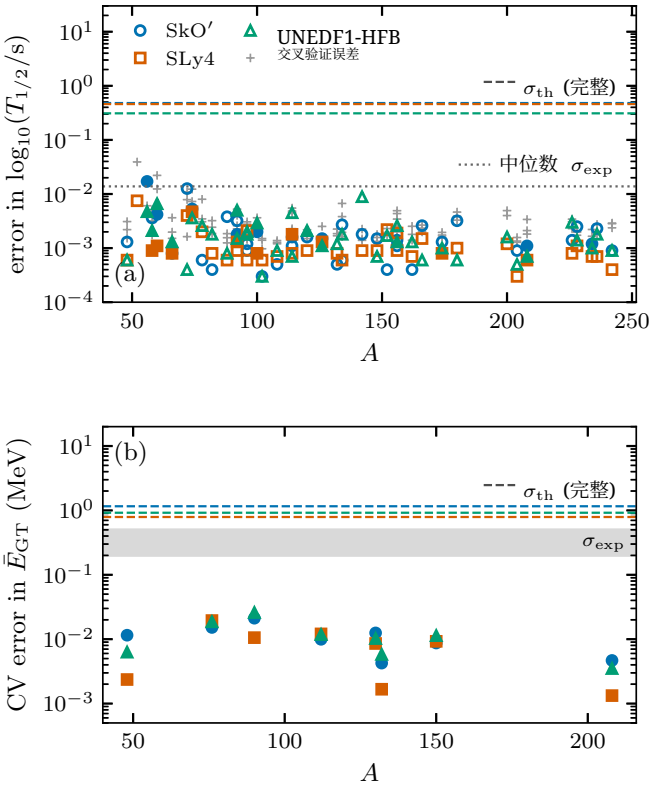

图 2. 本研究所考虑的各能量密度泛函的仿真器误差估计。(a) 半衰期；测试误差以彩色符号标出，交叉验证误差以叉号标出；(b) GT 共振质心能量；交叉验证误差以彩色符号表示，并在最终推断中保留。实心符号表示 L10 集合中的成员（对于 UNEDF1-HFB，这与 G10 集合相同）。虚线表示通过全数据集校准推断出的理论误差（第 IIID 节）；点线和灰色带表示实验不确定度。

III. 结果与讨论

A. 模拟器的性能

对于每个泛函，模拟器均使用符合第II E节所述标准的样本进行训练。因此，可用样本的数量因核素而异。半衰期和GT共振质心模拟器即第II D节所述的模拟器，使用参考文献 [63]的本地修改版本实现。

图 2 展示了各原子核的仿真器误差。对于 GT 共振质心，交叉验证误差比实验不确定度小一到两个数量级。相比之下，半衰期仿真器的准确度较低，因为半衰期取决于 Q_β 值以下的低能强度，而低能强度不一定会随标定参数平滑变化。其测试误差仍大多低于实验不确定度，至多与之处于同一数量级。对于 SLy4，我们为 ^{52}Ti 额外计算了 100 个样本，以达到所需的准确度。

表 II。由 β 衰变半衰期（HL）核和伽莫夫–泰勒共振（GT）核素组成的校准集。集合 A 是参考文献 [35], 中适用于所有泛函的文献基线。最优集合 G10（在完整参数域上的灵敏度）和 L10（在 V_0 的集合 A 后验区间内评估的灵敏度）针对每个泛函独立选取。完整集合包含该泛函候选池中的每个候选核素。

泛函	Set	半衰期核	GT 共振核素
SkO′	A	^{48}Ar, ^{60}Cr, ^{72}Ni, ^{82}Zn, ^{92}Kr, ^{102}锶, ^{114}钌, ^{126}镉, ^{134}锡, ^{148}钡	^{48}Ca, ^{76}Ge, ^{90}Zr, ^{112}锡, ^{130}碲, ^{208}铅
	G10	^{56}铬, ^{60}铬, ^{66}铁, ^{74}锌, ^{92}锶, ^{100}锆, ^{114}钯, ^{126}Cd, ^{156}钐, ^{208}汞	表 V 中的全部八个原子核
	L10	^{56}Cr, ^{60}Cr, ^{66}Fe, ^{74}Zn, ^{92}Sr, ^{100}锆, ^{114}钯, ^{126}镉, ^{208}汞, ^{234}镭	与 G10 相同
	Full	表 IV 中未标记此项的全部 40 个原子核	与 G10 相同
SLy4	A	与 SkO′ 相同	与 SkO′ 相同
	G10	^{52}钛, ^{58}钛, ^{60}铬, ^{74}锌, ^{92}锶, ^{100}锆, ^{114}钯, ^{126}Cd, ^{174}Er, ^{208}Hg	表 V 中的全部八个原子核
	L10	^{58}Ti, ^{60}Cr, ^{66}Fe, ^{74}Zn, ^{92}Sr, ^{100}Zr, ^{114}Pd, ^{126}Cd, ^{174}Er, ^{208}Hg	与 G10 相同
	Full	表 IV 中所有未标注为此项的 40 个原子核	与 G10 相同
UNEDF1-HFB	A	与 SkO′ 相同	与 SkO 相同′
	G10	^{56}铬、 ^{58}Ti、 ^{60}铬、 ^{66}铁、 ^{92}Sr、 ^{100}Zr、 ^{120}Pd, ^{126}Cd, ^{156}Sm、 ^{208}Hg	表 V 中的全部八个原子核
	L10	与 G10 相同	与 G10 相同
	Full	表 IV 中未对此作标记的全部 40 个原子核	与 G10 相同

B. 使用文献集合进行基线标定

为建立一个基准标定，我们采用参考文献 [35], 中使用的数据集，并将其称为集合 A（见表 II）。在此，我们使用第 II F 节的正态似然，基于集合 A 进行贝叶斯推断；这种做法最接近参考文献 [35] 的 χ^2 拟合。采用 Student-t似然得到的结果列于表 III。进入似然函数的半衰期方差还包括 Q_β 修正的贡献 $\sigma^2_{Q_\beta}$。

参数 C_1^s 和 V_0 的后验分布如图 3 所示，汇总统计量见表 III。参考文献 [35] 中给出的 SkO′（V_0）报告值（C_1^s, V_0）=（128.279, −346.352）列于表中，当前约定下该值需乘以 2；该值落在图 3 所示后验分布的 68% 区间内。请注意，参考文献 [35], 中用于 χ^2 的权重是人为选定的，且计算得到的 Q_β 值未经修正，这可能是造成差异的原因。

SLy4 的 C_1^s 后验中位数比另外两者低约 20 兆电子伏特飞米^3 。Landau– Migdal 参数 g_0' 与 C_1^s呈线性关系，对于给定的单粒子谱，较大的 g_0' 会导致较高的 GT 共振能量 [45]。在我们的测试中， C_1^s 几乎被关闭时，SLy4 的 pnFAM GT 共振质心高于 SkO′ 和 UNEDF1-HFB 的结果，但仍低于测量值。因此，与其他泛函相比，SLy4 无需采用那么大的 C_1^s 即可匹配实验结果。理论误差的后验中位数与正态似然（表 III）用于构建 E-最优集合的信息矩阵。

C. E-最优校准集合

在确定 E-最优集合之前，从候选池中为每种泛函剔除了两个原子核，因为在参数域的大部分范围内，它们计算得到的衰变率低于第 II E 节的 10^{-9} s^{-1} 阈值，导致可用于仿真器的训练样本过少。每种泛函均纳入了 40 个原子核的半衰期。表 IV 和表 V 列出了纳入校准的全部原子核。所有八个具有已测量 GT 共振的原子核均被纳入，并计入信息矩阵。

使用正态似然（第II G节和表 III），在训练区域内对半衰期的灵敏度进行了全局评估，并在集合 A 标定的 V_0 区间内进行了局部评估。我们分别将根据全局和局部灵敏度确定的原子核集合称为 G10 集和 L10 集，其中 G（L）分别表示全局（局部），10 表示半衰期核的数量，与集合 A 中的数量相同。图 4 展示了式 (20) 的 $\lambda_{\min}$ 如何随半衰期核的数量 m 增长。L10 集保留了完整样本池中 40 个半衰期约 80% 的信息。这表明，不同观测量对参数的约束程度不同，而该方法提供了一种实用的方式来选择信息量最大的观测量。我们将这些 E-最优集合与使用全部 40 个半衰期核进行的标定进行比较，

表 III. 校准后验分布汇总：中位数，括号内为 16% 和 84% 分位数。 V_0 和 C_1^s 的单位为兆电子伏特·飞米^3， $\sigma_{\rm th}^{\rm HL}$的单位为 $\log_{10}(T_{1/2}/\mathrm{s})$， $\sigma_{\rm th}^{\rm GT}$的单位为兆电子伏特。所有校准均纳入测试仿真器误差和 Q_β 误差。集合 A 行使用集合 A 中的六个 GT 原子核，其余各行使用表 V 中的八个 GT 原子核。

泛函	Set	似然	V_0	C_1^s	$\sigma_{\rm th}^{\rm HL}$	$\sigma_{\rm th}^{\rm GT}$
SkO′	A	Student-t	−290 (−326, −225)	116.7 (99.0, 128.7)	0.49 (0.32, 0.71)	1.34 (0.91, 1.95)
		正态分布	−277 (−325, −199)	108.2 (91.1, 122.4)	0。46 (0。34，0。63)	1.20 (0.86, 1.69)
	G10	学生-t	−287 (−323, −226)	118.3 (109.9, 125.9)	1.00 (0.64,1.47)	1。11 (0。76，1。57)
		正态分布	−286 (−330, −208)	115.7 (106.2, 124.9)	1.15 (0.87, 1.53)	0.98 (0.72,1.34)
	L10	Student-t	−290(−324, −235)	118.5 (109.9,125.9)	0.91 (0.58,1.35)	1。10 (0。76，1。57)
		正态分布	−290 (−332, −217)	115.4 (105.6, 124.6)	1。09 (0。82，1。44)	0.98 (0.72,1.34)
	Full	学生-t	−306 (−326, −278)	115.0 (104.5, 122.7)	0.48 (0.38, 0.62)	1.16 (0.80, 1.67)
		正态分布	−314 (−336, −284)	109.4 (97.4，119.3)	0.50 (0.41，0.62)	1.04 (0.76, 1.45)
SLy4	A	学生-t	−317 (−375, −224)	93.8 (78.2, 105.6)	0.51 (0.34, 0.75)	0.98 (0.61, 1.46)
		正态分布	−299 (−370, −197)	88.1 (73.3, 100.2)	0.47 (0.35, 0.65)	0.82 (0.54, 1.21)
	G10	Student-t	−397(−423, −279)	100.7 (93.1, 106.5)	1.08 (0.69,1.59)	0.70 (0.37,1.10)
		正态分布	−407 (−426, −385)	97.9 (89.5, 105.6)	1.16 (0.87, 1.57)	0.64 (0.40, 0.95)
	L10	学生-t	−265 (−322, −197)	97.9 (89.3,104.4)	0.56 (0.30,0.90)	0.74 (0.42,1.14)
		正态分布	−335 (−386, −263)	96.7 (88.0, 104.5)	1.05 (0.76, 1.41)	0.63 (0.39，0.94)
	Full	学生-t	−278 (−332, −215)	95.2 (84.1,103.0)	0.46 (0.34, 0.59)	0.79 (0.45, 1.21)
		正态分布	−403 (−417, −390)	98。6（90。8，105。7）	0。61 (0。51，0。73)	0.63 (0.40, 0.93)
UNEDF1-HFB	A	学生-t	−280(−328, −180)	109。0（95。8，118。5）	0.49 (0.32, 0.70)	0.93 (0.55,1.42)
		正态分布	−258 (−322, −143)	107.5 (95.0,117.6)	0.41 (0.29，0.56)	0.74 (0.46, 1.16)
	G10	学生-t	−263(−294, −221)	112.5 (106.9, 117.3)	0.28 (0.11,0.52)	0.66 (0.37,1.03)
		正态分布	−256 (−286, −214)	111.5 (104.9, 117.3)	0.18 (0.06, 0.36)	0.57 (0.37,0.86)
	L10		与 G10 相同的集合			
	Full	Student-t	−271 (−305, −208)	105.6 (79.2,113.5)	0.31 (0.22, 0.41)	0.92 (0.51, 1.83)
		正态分布	−257 (−291, −197)	101.1 (76.3, 111.2)	0.25 (0.18, 0.32)	0.83 (0.49, 1.56)

后者称为完整集合。所得集合汇总于表 II 中。如图 4 所示，L10 集的信息矩阵最小特征值是集合 A 的两到三倍。与集合 A 不同，按照构造，每个 E-最优集合都至少包含一个具有 $A \geq 200$的原子核。

D. 使用 E 最优集进行校准

已使用 G10、L10 和完整集合对 $\boldsymbol{\theta}$ 进行了初步贝叶斯推断。根据后验分布，我们生成测试样本，以评估将纳入贝叶斯推断的 $\sigma_{\rm em}$ 的最终（测试）误差估计。对于每个泛函，从一个二维拉丁超立方体 [64]中抽取 40 个测试样本，其范围为 (V_0, C_1^s)，边界由后验中位数 $\pm$ 的三个 68% 半宽和先验支持集确定。对于 G10、L10 和完整集合（表 II）以及两种似然函数，这些边界至少包含 97% 的后验分布。随后将这些样本用于 pnFAM，以计算各个可观测量，供仿真器误差评估使用。所得测试误差如图 2 所示，并在第三节 A 中讨论。

使用测试 $\sigma_{\rm em}$，我们再次进行贝叶斯推断，以获得最终的后验分布。最终后验分布的摘要见表 III。聚焦于 SLy4 泛函，采用 Student-t 似然时，L10 集得到的后验分布比 G10 集得到的更接近完整集合。对于 UNEDF1-HFB，这两个集合相同；对于 SkO′，二者得到的后验分布都与完整集合一致。因此，在后续讨论中，我们主要关注 L10 集。在似然函数的选择上，对于两类可观测量，我们主要关注 Student-t似然，因为它对离群值更稳健。我们也列出采用正态似然得到的结果，以供比较。对于采用完整集合的 SLy4，两个似然给出的 V_0 值不同。这是因为在正态似然下，后验分布会移动以减小 ^{52}Ti 和 ^{74}Zn 的大残差，而 Student-t似然则会降低这些残差的权重。

图 5 展示了使用 L10 集和完整集合得到的最终后验分布。与集合 A 相比，对于全部三种泛函，E 最优集给出的 C_1^s 区间窄了约一半；而对于 UNEDF1-HFB， V_0 区间仅窄了一半，对于 SkO′ 和 SLy4 则窄了 10% 到 20%（表 III）。这表明，更大的信息量并不能保证更紧的后验分布，部分原因在于不同原子核倾向于不同的参数值。这种张力会被推断的理论误差吸收，从而使后验分布变宽；UNEDF1-HFB 的情况就体现了这一点，其中完整集合给出的区间比 L10 集更宽。

使用完整集合得到的后验分布显示，所有泛函中 V_0 与 C_1^s 之间的相关性都更强。原因如下。对于几乎所有原子核，更强的 V_0 和更弱的 C_1^s 都会使半衰期朝同一方向变化（缩短半衰期）。完整集合包含的半衰期数量是 L10 集合的四倍，因此

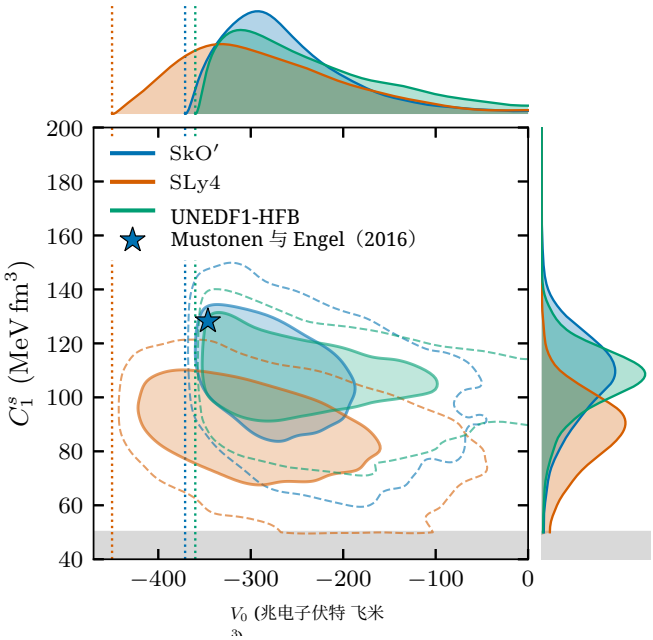

图 3. 正态似然下集合 A 的 V_0 和 C_1^s 后验分布，分别对应 SkO′（蓝色）、SLy4（橙色）和 UNEDF1-HFB（绿色）。实线（虚线）等高线分别圈定了 68%（95%）的后验概率，边缘分布显示在面板的上方和右侧。星号标出参考文献 [35] 中 SkO′ 的取值。点状竖线标出各个泛函的 $V_{\min}$。阴影区域 $C_1^s < 50$ 兆电子伏特·飞米^3，位于稳定域之外。

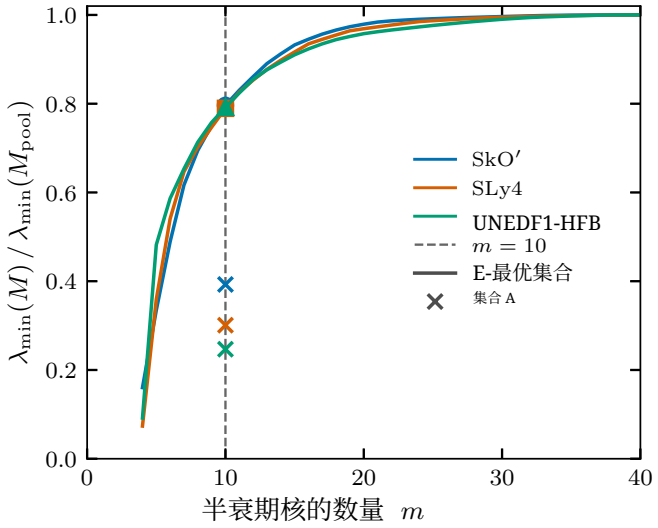

图 4. 含 m 个半衰期核的局部 E-最优集的信息矩阵最小特征值，见公式（16）；其灵敏度在 V_0 的集合 A 后验区间内计算，见公式（20），并以全部 40 个半衰期核对应的数值归一化。每个 m 均纳入全部八个 GT 共振能量。实心符号标出表 II 中的 L10 集合，叉号标出包含相同八个 GT 共振能量的集合 A。

半衰期对似然的贡献更大。对于 SkO′和 SLy4，由于完整集合的半衰期理论误差 $\sigma_{\text{th}}^{\text{HL}}$较小（表 III），这一效应会进一步增强，因为少数残差较大的原子核的影响（见图 6）被稀释了。这揭示了由半衰期导致的 V_0 和 C_1^s 之间的相关结构。对于 UNEDF1-HFB，半衰期还会将 C_1^s 拉低至 GT共振质心能量所偏好的数值以下，从而增大 $\sigma_{\text{th}}^{\text{GT}}$，并使后验分布延伸至较低的 C_1^s。

图 6 显示，使用 L10 和完整集合标定的半衰期总体上具有一致性。这种一致性支持校准集的 E-最优构造。由于 L10 校准对未包含在集合中的半衰期的预测几乎与完整集合校准一样好，因此预计当前校准具有良好的泛化能力。与 SkO′ 和 SLy4（图中未显示，但与 SkO′ 相似）相比，采用 UNEDF1-HFB 得到的残差在校准候选池中的各个原子核上始终较小。GT 共振质心能量也得到了较为合理的标定（图 7）。然而，由于图中所示的每个原子核都被用于校准，因此无法从该图推断这种性能如何推广到其他原子核。

E. $N = 126$同中子素链半衰期的预测

为展示我们的贝叶斯校准和不确定性量化方法的影响，我们计算了沿 $N = 126$ 等中子链的偶偶核的β衰变半衰期。线性修正前后的计算 Q_β 值列于表 VI 中。如第 IIF 节所述，每个 $N = 126$ 等中子素的半衰期预测 $\hat{y}_k(\boldsymbol{\theta})$ 通过在 (V_0, C_1^s) 中的二次曲面进行近似；该二次曲面拟合于从采用 Student-t 似然的 Full 集后验分布中抽取的参数值所对应的 20 次 pnFAM 计算结果。

图 8 展示了预测的半衰期及其 68% 可信区间，并将其与其他全局计算结果进行比较 [10, 11, 30, 36]。两个同中子素有实验数据：^{204}Pt（属于标定数据）和 ^{206}Hg（不属于标定数据）。虽然测得的 ^{206}Hg 半衰期落在 68% 区间内，但对这两个原子核的预测半衰期都长于测量值。过高估计由两个因素造成。首先，这些原子核经修正后的 Q_β 值（表 VI）比实验值低 0.3 至 0.8 兆电子伏特，因此预测的半衰期更长。其次，低 Q_β 原子核的半衰期取决于狭窄 Q_β 窗口内 β^- 强度的低能尾部。参考文献 [10] 中的相对论计算报告称，准粒子与振动的耦合会使强度移向较低能量，从而缩短 ^{204}Pt 和 ^{206}Hg 的半衰期；本研究框架未纳入此类关联。

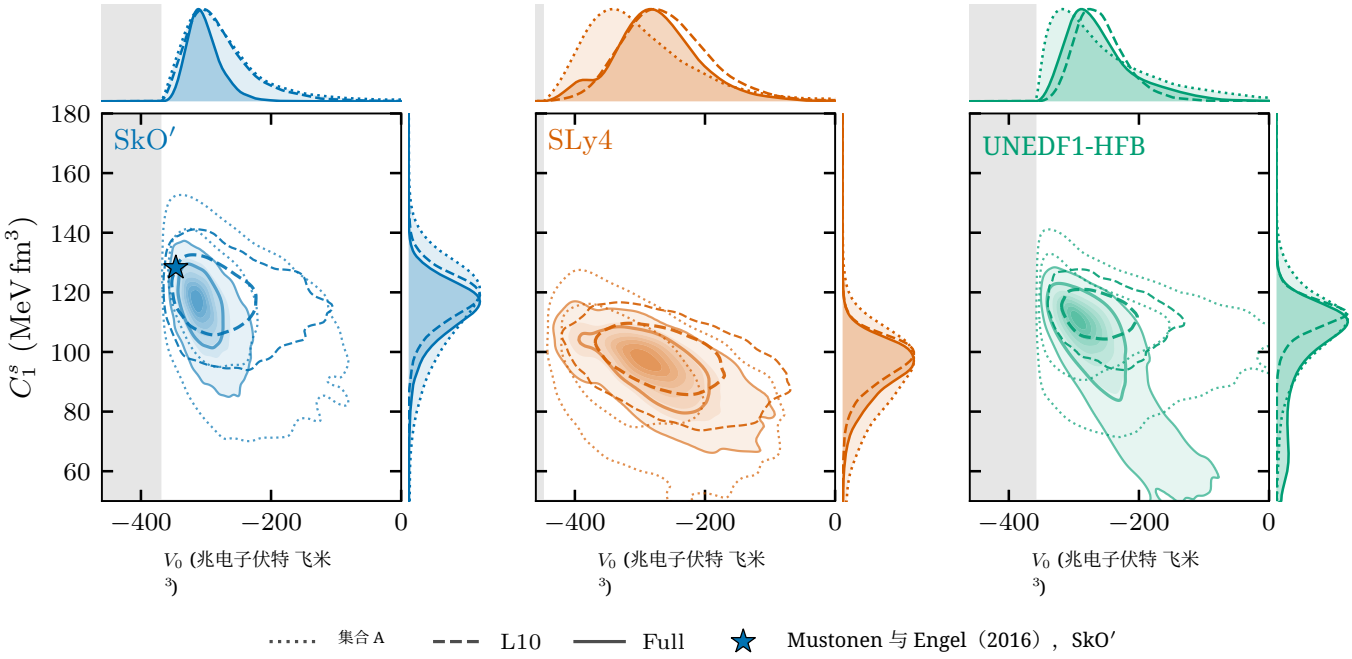

图5. 对每种泛函，采用 Student-t 似然得到的 V_0 和 C_1^s 的最终后验分布。填充等高线表示完整集合，虚线等高线表示 L10 集（对于 UNEDF1-HFB，与 G10 相同），点线等高线表示集合 A。内、外等高线分别包含 68% 和 95% 的后验概率。星号标示参考文献 [35] 中 SkO′的数值，阴影区域位于稳定域之外。

图9显示，对于不超过 $Z = 76$ （UNEDF1-HFB 对应 $Z = 74$ ）的情况，推断的理论误差主导不确定度预算；而对于较大的 Z， Q_β 不确定性则占主导。参数不确定性比理论误差小 3 至 20 倍，二次拟合引入的误差可以忽略不计。

考虑到推断出的理论误差和 Q_β 不确定性所产生的主导贡献，无法通过收紧对 V_0 和C_1^s的约束来降低 $N = 126$ 同中子素预测的不确定性。准粒子随机相位近似将子核的激发限制为双准粒子组态。可能的改进包括通过准粒子-振动耦合 [10,66, 67] 或四准粒子组态 [68], 引入更高阶组态；这两种方法都会使强度碎裂，并将其移至更低能量。

对于 SkO′，我们的预测给出的半衰期始终短于参考文献 [36], 的结果；该文使用了参考文献 [35] 中的参数和未经校正的 Q_β 值。采用参考文献 [35], 中的参数进行评估后，沿着整个同中子素链，我们的 SkO′ 半衰期仍短 2–3 倍。因此，剩余差异主要归因于 Q_β 校正。其他基于EDF的结果在 $Z = 70$ 以下彼此一致，并且在参数中位值处预测的半衰期始终长于我们的结果（图8(b)）。

如图10所示，相较于非相对论框架（SkO′、SLy4 和 UNEDF1-，相对论EDF框架（DD-PC1 [11, 69]）中的 FF 衰变对总衰变率的贡献差异显著。

HFB）而言，这一点也如参考文献 [11] 所述。量化的不确定度仅包括参数不确定性的贡献，因为我们没有理论误差或来自 Q_β 值的贡献的估计。除了 DD-PC1 与参考文献 [36], 中 SkO′ 的结果存在显著差异外，我们的结果还预测 $Z \leq 72$ 的 FF 衰变贡献更小，其中 UNEDF1-HFB 的贡献最小。在 $Z = 74$ 以上，我们的计算预测几乎为纯 FF 衰变，这与参考文献 [36] 中 SkO′ 的汇编结果不同。目前，校准并未直接纳入有关 FF 衰变的信息。因此，通过全吸收能谱学等方法获得的 FF 衰变实验约束，或可进一步检验并约束 EDF 预测。

参考文献 [11], 指出，基于能量密度泛函（EDF）方法并考虑轴向形变所预测的富中子原子核在 $N = 126$ 之后的半衰期，长于参考文献 [8]中的 FRDM 和 RHB-1(D3C*) 的预测值。研究表明，在富中子条件下（例如双中子星并合产生的盘状喷出物），较长的半衰期会减缓中子诱发裂变流，并阻碍磁旋转超新星中第三 r-过程峰元素的生成。未来值得研究的是，在不同天体物理条件下，我们对 $N = 126$ 原子核及更重原子核所建立的、具有量化不确定度的模型，将如何影响中子诱发裂变流以及第三-r-过程峰原子核（$A \sim 195$）和锕系元素的合成。

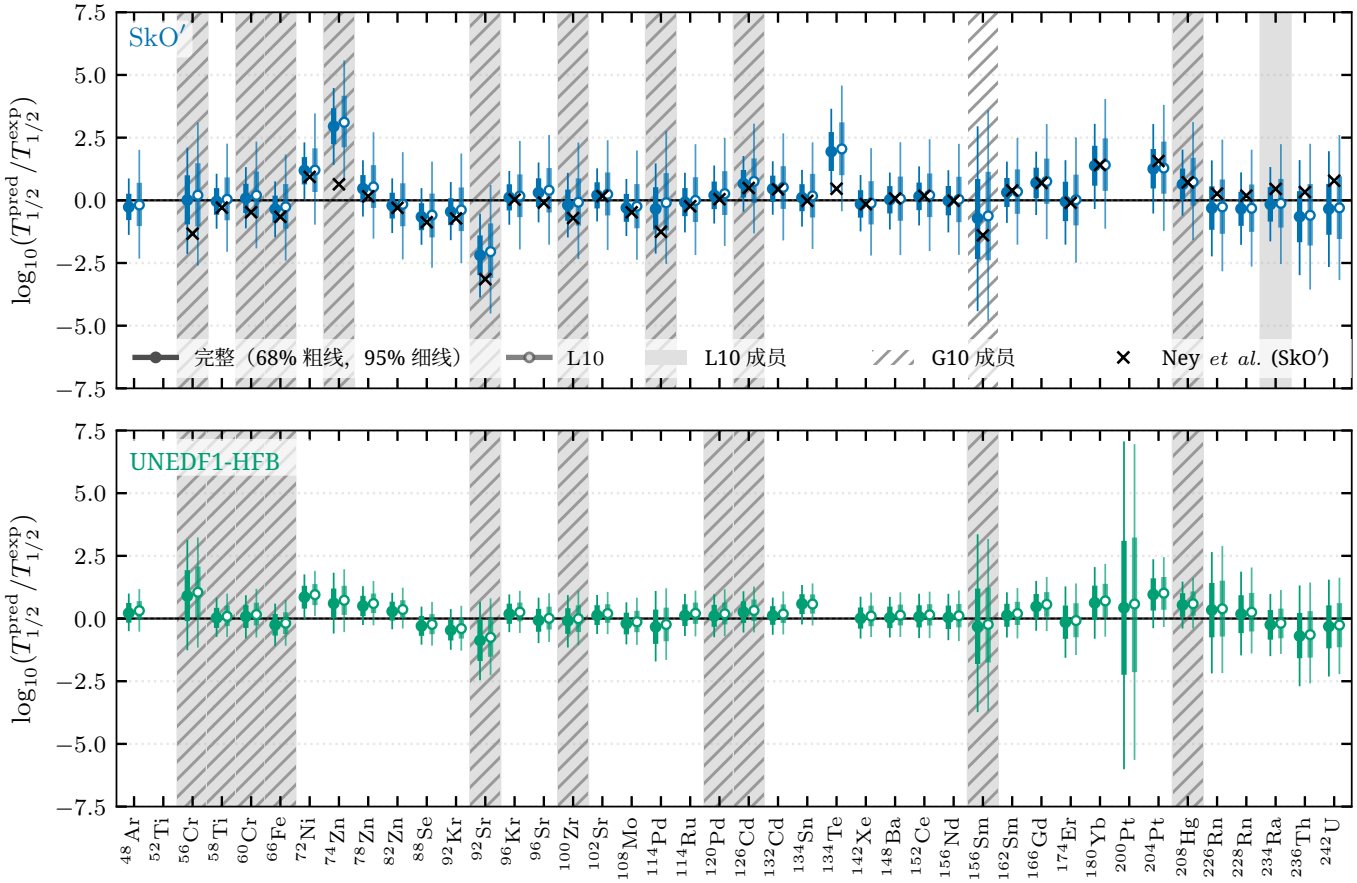

图 6. 使用 Student-t 似然得到的校准池中半衰期的 SkO′和 UNEDF1-HFB 后验预测残差，$\log_{10}(T^{\rm calc}_{1/2}/T_{\rm exp\,1/2})$。SLy4 的结果与 SkO′相似，故未列出，但可见参考文献 [65]。实心符号表示来自完整数据集校准的结果，空心符号表示来自 L10 集的结果。粗线和细线分别表示 68% 和 95% 的预测区间。灰色（斜线）柱标示 L10（G10）集合的成员，叉号表示参考文献 [36]的结果。没有符号的原子核不在 EDF 校准集（表 IV）中。

IV. 结论

本研究利用近期开发的线性响应模拟器，对采用三种能量密度泛函——SkO′、SLy4 和 UNEDF1-HFB——的质子-中子 FAM 计算中的等标量配对强度 V_0 和自旋密度耦合常数 C^s_1 进行了贝叶斯标定。我们对理论 Q_β值进行了微调，使其与实验值相符，从而提高半衰期预测的准确性。在贝叶斯框架中，我们综合考虑了多种不确定度来源：理论误差、 Q_β值、参数不确定性和模拟器误差。基于这些校准，我们还量化了 β衰变半衰期的不确定度，涉及 $N = 126$ 同中异位素。

我们提出了一种 E 最优实验设计，用于选择校准目标，从而避免任何参数组合受到约束不足。由十个半衰期组成的 E 最优集合与全部八个 GT 共振能量相结合，保留了完整样本池中 40 个半衰期约 80% 的信息，这一比例由信息矩阵的最小特征值衡量。E 最优 L10 集合的预测结果与完整集合的预测结果吻合良好，这表明这些校准具有较好的泛化能力。在三个泛函中，UNEDF1-HFB 对质量数从 $A = 48$ 到 242 的实测半衰期给出了最吻合的结果，而对于完整集合，SLy4 在 GT 共振质心能量方面的理论误差最小。

为量化不确定性，我们计算了与天体物理r过程相关的偶质子数 $N = 126$ 同中子素的 β衰变半衰期及可信区间。在 $N = 126$ 链的大部分区域，预测不确定性主要由理论误差决定；而在靠近稳定线处，由 Q_β 值引起的不确定性则占主导。标定参数带来的不确定性小了好几个数量级，这表明改进预测应着眼于对β 衰变和 Q_β 值的建模。在本研究中，我们将 V_0 视为常数；未来可以探索更灵活的处理方式，例如采用依赖密度的 V_0。此外，扩大标定范围，将时间

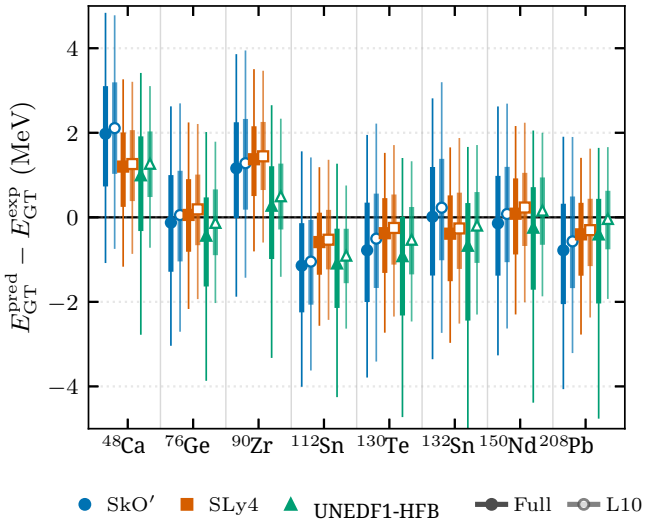

图 7. 采用Student-t 似然得到的八个GT共振能量的后验预测残差。实心（空心）符号来自完整（L10）集合。粗线和细线分别表示68%和95%的预测区间。两种校准均包含全部八个原子核。

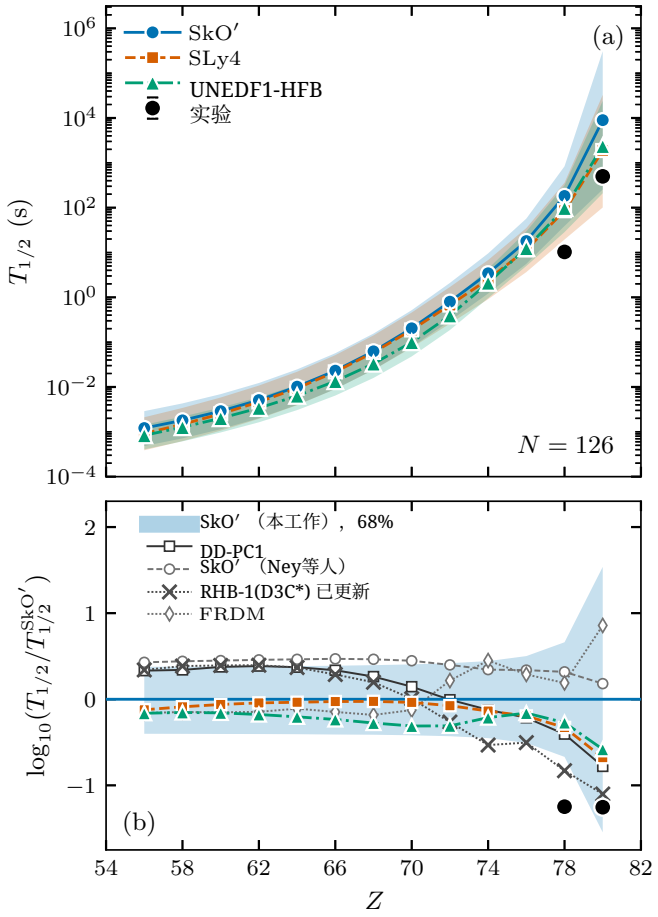

图 8. (a) 使用 Student-t 似然函数，通过 Full 集合校准预测的偶偶 $N = 126$ 同中子素半衰期。带符号的曲线表示采用后验分布中位数参数时的半衰期，色带表示 68% 可信区间。黑色圆点表示 ^{204}Pt 和 ^{206}Hg [56] 的实测半衰期。(b) 在后验分布中位数参数下，相对于我们的 SkO′ 结果的半衰期：我们的 SLy4 和 UNEDF1-HFB 结果、参考文献 [36]，中的 SkO′ 结果、DD-PC1 预测 [11]，、参考文献 [10]，报告的更新版 RHB-1(D3C*) 半衰期、FRDM 结果 [30]，以及实测值。阴影带为 SkO′ 68% 可信区间。

偶数项纳入其中，或可提高 Q_β 预测的准确性。

在同中子数 $N = 126$链的富中子端，我们预测的半衰期短于以往基于EDF的计算结果。一级禁戒衰变的贡献在相对论框架与非相对论框架之间，以及本研究考察的非相对论EDF之间，都存在显著差异。有关一级禁戒衰变贡献的实验数据，或可进一步检验并约束理论预测。大规模计算留待未来开展；不过，若这一预测趋势在 $N = 126$以上仍然持续，对第三 r过程峰元素（$A \sim 195$）生成机制的理解，以及对 β延迟裂变和中子诱发裂变作用的认识，都将受到影响。

致谢

我们感谢 J. Engel（北卡罗来纳大学教堂山分校）提供 pnFAM 和 pyn-FAM 代码的使用权限，并与我们进行了有益的讨论。我们还感谢 K. Godbey（稀有同位素束流装置、密歇根州立大学）与我们进行了有益的讨论。本研究获得了美国国家科学基金会资助（项目编号 26-23480（NP3M））、美国能源部资助（项目编号 DE-NA0004245（NNSA，科学保障学术联盟计划））以及能源部科学办公室资助（项目编号 DE-SC0013365 和 DE-SC0023175（先进科学计算研究办公室和核物理办公室的“通过先进计算实现科学发现”计划））。部分计算资源由密歇根州立大学网络赋能研究所提供。

度。作者使用 Claude Code（Anthropic）这一人工智能编程助手，协助开发和运行用于模拟器训练、贝叶斯校准、数据分析以及绘制图表和制作表格的脚本，并检查和改进稿件文本。作者审阅了结果和文本，并对本文内容承担全部责任。

数据可用性

训练好的模拟器、所有校准的后验样本，以及生成本文每幅图和每个表格的脚本，均可在代码仓库 [65] 中公开获取。用于提取模拟器

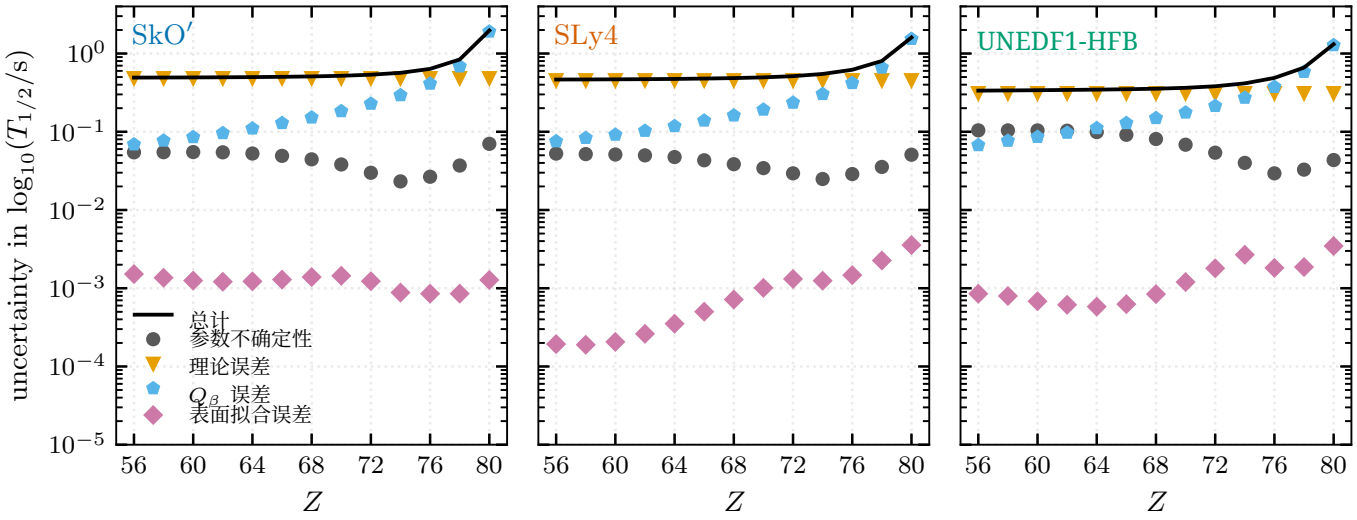

图9. 使用完整集合和 Student-t 似然时，各泛函对计算得到的 $N = 126$ 半衰期不确定性的贡献（标准差）：参数不确定性、推断的理论误差、传播的 Q_β 误差，以及拟合 20 次 pnFAM 计算结果所得二次曲面的误差；后者根据未用于拟合的 pnFAM 计算结果估算。

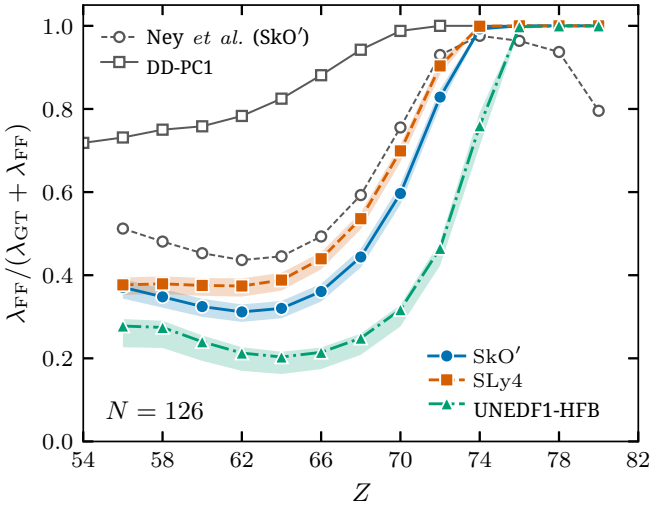

图10. 使用完整集合校准和 Student-t 似然得到的偶偶 $N = 126$ 同中子素的一级禁戒衰变率与总 β衰变率之比，$\lambda_{\mathrm{FF}}/(\lambda_{\mathrm{GT}}+\lambda_{\mathrm{FF}})$，并与参考文献 [36] 中的 SkO′ 结果及参考文献 [11]中的 DD-PC1 结果进行比较。标记表示后验中位数处的值，色带表示仅考虑参数不确定性时的 16–84% 范围。

训练数据的 pnFAM 输出可在配套数据记录 [70] 中获取。

附录 A：信息矩阵

理论预测对参数 $\boldsymbol{\theta} = (V_0,\ C_1^s)$ 的依赖通常是非线性的。因此，测量数据可以表示为

$$y(x) = \eta(x, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon(x), \tag{A1}$$

其中，x 表示原子核及可观测量类型的标签，y 是所关注的 x可观测量的实验值，η 是模型预测（β衰变对数半衰期 $\log_{10} T_{1/2}$ 或 Gamow–Teller 共振质心能量），ε 是残差，包含实验、理论、Q_β以及仿真器贡献。下文中，y 和 ε 分别是$y(x)$和 $\varepsilon(x)$的简写。为了构建最优设计，假设

$$\begin{aligned} \mathrm{E}[\varepsilon(x)] &= 0, \\ \mathrm{Var}[\varepsilon(x)] &= \sigma^2(x), \\ \mathrm{Cov}[\varepsilon(x), \varepsilon(x')] &= 0 \quad (x \neq x'), \end{aligned} \tag{A2}$$

其中，$\sigma^2(x)$见第II G节。

对于式（4）中的缩放参数 $\boldsymbol{z} = (v,\ c)$，在参考点 $\boldsymbol{z}_t$ 附近作一阶泰勒展开，得到

$$\eta(x, \boldsymbol{z}) \simeq \eta(x, \boldsymbol{z}_t) + (\boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}_t)^T \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z}_t), \tag{A3}$$

其中

$$\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z}_t) = \left.\frac{\partial \eta(x, \boldsymbol{z})}{\partial \boldsymbol{z}}\right|_{\boldsymbol{z}=\boldsymbol{z}_t}, \tag{A4}$$

是局部灵敏度向量。注意，$\boldsymbol{z}_t$ 不必是全局最优点。结合式（A1），

$$y(x) - \eta(x, \boldsymbol{z}_t) \simeq (\boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}_t)^T \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z}_t) + \varepsilon(x), \tag{A5}$$

因此，非线性校准通过局部线性回归进行近似。最小化目标函数

$$\sum_{x \in \mathcal{C}} \frac{[y - \eta(x, \boldsymbol{z}_t) - (\boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}_t)^T \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z}_t)]^2}{\sigma^2(x)}, \tag{A6}$$

对于校准集 $\mathcal{C}$，可得到 [61, 第 1.4.2 节，公式 (1.72)–(1.76)]

$$\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{z}_t)(\hat{\boldsymbol{z}}_{\mathcal{C}} - \boldsymbol{z}_t) \simeq \mathcal{Y}_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{z}_t), \tag{A7}$$

其中 $\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}$ 是公式（16）中的信息矩阵，且

$$\mathcal{Y}_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{z}_t) = \sum_{x \in \mathcal{C}} \frac{[y - \eta(x, \boldsymbol{z}_t)]\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{z}_t)}{\sigma^2(x)}. \tag{A8}$$

$\boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}$ 的逆矩阵近似于缩放参数空间中的方差矩阵：

$$\mathrm{Var}[\hat{\boldsymbol{z}}_{\mathcal{C}}] \simeq \boldsymbol{M}_{\mathcal{C}}^{-1}. \tag{A9}$$

对于正态分布观测值， $\boldsymbol{\mu}(x,\ \boldsymbol{z}_t)$称为费 Fisher 信息矩阵 [61, 第 1.1.2 节和第 1.5] 节。

附录B：核数据和基态性质

表 IV 和表 V 列出了用于校准的候选原子核，表 VI 则显示了这些原子核的 Q_β 值

[1] E. M. Burbidge、G. R. Burbidge、W. A. Fowler 和 F. Hoyle，《恒星中的元素合成》，《现代物理学评论》29，547（1957）。[2] A. G. W. Cameron，*Stellar evolution, nuclear astro-physics, and nucleogenesis*，《技术报告 CRL-41》（加拿大原子能有限公司，1957）。[3] K. Langanke 和 G. Mart´ınez-Pinedo，《恒星中的核弱相互作用过程》，《现代物理学评论》75，819（2003）。[4] J. J. Cowan、C. Sneden、J. E. Lawler、A. Aprahamian、M. Wiescher、K. Langanke、G. Mart´ınez-Pinedo 和 F.-K. Thielemann，《最重元素的起源：快速中子俘获过程》，《现代物理学评论》93，015002（2021）。[5] J. Engel、M. Bender、J. Dobaczewski、W. Nazarewicz 和 R. Surman，β 自洽方法下r过程等待点原子核的衰变率，《物理评论C》60，014302（1999）。[6] T. Suzuki、T. Yoshida、T. Kajino 和 T. Otsuka，β 中子幻数为 $N = 126$ 的同中子素的衰变以及 r过程核合成，《物理评论C》85，015802（2012）。[7] D.-L. Fang、B. A. Brown 和 T. Suzuki，研究沿可能的r过程路径的球形原子核的β衰变性质，《物理评论C》88，034304（2013）。[8] T. Marketin、L. Huther 和 G. Mart´ınez-Pinedo，在纳入第一禁戒跃迁的情况下大规模评估 r过程原子的 β衰变率，《物理评论C》93，025805（2016）。[9] C. J. Horowitz、A. Arcones、B. Cˆot´e、I. Dillmann、W. Nazarewicz、I. U. Roederer、H. Schatz、A. Apra-hamian、D. Atanasov、A. Bauswein、*et al.*，《r过程核合成：连接稀有同位素束流设施与宇宙》，《物理学杂志G辑》46，083001（2019）。[10] C. E. P. Robin 和 G. Mart´ınez-Pinedo，相对论性超越平均场方法下 r过程等待点原子核中允许跃迁与第一禁戒 β 衰变之间的竞争，《物理评论C》110，065803（2024）。[11] A. Ravli´c、Y. Saito 和 W. Nazarewicz，大规模计算 β过程的衰变率及其对 r过程核合成的影响，《物理评论C》113，045802（2026）。[12] R. Surman、J. Engel、J. R. Bennett 和 B. S. Meyer，r过程核合成中稀土元素峰的来源，《物理评论快报》79，1809（1997）。[13] M. R. Mumpower、G. C. McLaughlin 和 R. Surman，稀土峰的形成：深入了解晚期 r过程动力学，《物理评论C》85，045801（2012）。[14] M. R. Mumpower、G. C. McLaughlin 和 R. Surman，稀土峰：一个被忽视的r过程诊断指标，《天体物理学杂志》752，117（2012）。[15] A. Arcones 和 G. Mart´ınez-Pinedo，中微子驱动风情景中的动态r过程研究及其对核物理输入的灵敏度，《物理评论C》83, 045809 (2011). [16] M. Eichler, A. Arcones, A. Kelic, O. Korobkin, K. Lan- ganke, T. Marketin, G. Martinez-Pinedo, I. Panov, T. Rauscher, S. Rosswog, *et al.*，裂变在中子星并合中的作用及其对r过程峰的影响，《天体物理学杂志》808, 30 (2015). [17] S. Goriely, J.-L. Sida, J.-F. Lemaˆıtre, S. Panebianco, N. Dubray, S. Hilaire, A. Bauswein, and H.-T. Janka，新的裂变碎片分布及稀土元素的 r过程起源，《物理评论快报》111, 242502 (2013). [18] I. Panov and F.-K. Thielemann，最终r过程产额及裂变的影响：中子诱发裂变与 β延迟裂变之间的竞争，《核物理A》718, 647 (2003). [19] G. Mart´ınez-Pinedo, D. Mocelj, N. Zinner, A. Keli´c, K. Langanke, I. Panov, B. Pfeiffer, T. Rauscher, K.-H. Schmidt, and F.-K. Thielemann，裂变在r过程中的作用，《粒子与核物理进展》59, 199 (2007). [20] Panov, I. V., Korneev, I. Yu., Rauscher, T., Mart´ınez- Pinedo, G., Keli´c-Heil, A., Zinner, N. T., and Thiele- mann, F.-K.，超铅核的中子诱发天体物理反应率，《天文学与天体物理学》513, A61 (2010). [21] S. A. Giuliani, G. Mart´ınez-Pinedo, and L. M. Robledo，r过程 r计算所需的超重核裂变性质，《物理评论C》97, 034323 (2018). [22] M. R. Mumpower, T. Kawano, T. M. Sprouse, N. Vassh, E. M. Holmbeck, R. Surman, and P. M¨oller，r过程核合成中的 β延迟裂变，《天体物理学杂志》869, 14 2018( ). [23] N. Vassh, R. Vogt, R. Surman, J. Randrup, T. M. Sprouse, M. R. Mumpower, P. Jaffke, D. Shaw, E. M. Holmbeck, Y. Zhu, *et al.*，利用依赖于激发能的裂变产额识别r过程核合成中的关键裂变核素，《物理学杂志G：核与粒子物理》46, 065202 (2019). [24] S. A. Giuliani, G. Mart´ınez-Pinedo, M.-R. Wu, and L. M. Robledo，中子星并合中超铅核的裂变与 r过程核合成，《物理评论C》102, 045804 (2020). [25] K. Takahashi and M. Yamada，核β衰变巨观理论，《理论物理进展》41, 1470 (1969). [26] K. Takahashi, M. Yamada, and T. Kondoh，基于巨观理论计算的β衰变半衰期，《原子数据与核数据表》12, 101 (1973). [27] H. Nakata, T. Tachibana, and M. Yamada，核β衰变半巨观理论，《核物理A》625, 521 (1997). [28] P. M¨oller, J. Nix, and K.-L. Kratz，面向天体物理与放射性离子束应用的核性质，《原子数据与核数据表》66, 131 (1997). [29] P. M¨oller, B. Pfeiffer, and K.-L. Kratz，面向天体物理应用的新型β衰变巨观性质计算：加速经典r过程，《物理评论C》67,

表 IV. β 衰变半衰期属于校准池的原子核，以及参考文献 [56]，中给出的实验半衰期及其不确定度，还有采用各泛函计算得到的 HFB 基态的预测四极形变 β_2（I=SkO’，II=SLy4，III=UNEDF1-HFB）。匕首符号标记出每种泛函的两个原子核；由于其衰变率低于计算的分辨率（第 III C 节），这些原子核被排除在相应泛函的候选池之外。

原子核	Z	N	A	$T_{1/2}^{\mathrm{exp}}$ (s)	β_2(I)	β_2(II)	β_2(III)
^{48}Ar	18	30	48	0.415 ± 0.015	-0.16	-0.12	-0.16
^{52}Ti	22	30	52	102 ± 6	0.00†	0.00	0.00†
^{58}Ti	22	36	58	0.055 ± 0.006	0.00	0.00	0.00
^{56}Cr	24	32	56	356 ± 6	+0.18	0.00†	+0.16
^{60}Cr	24	36	60	0.490 ± 0.010	0.00	0.00	-0.09
^{66}Fe	26	40	66	0.47 ± 0.03	0.00	0.00	0.00
^{72}Ni	28	44	72	1.57 ± 0.05	0.00	0.00	0.00
^{74}Zn	30	44	74	95.6 ± 1.2	0.00	0.00	+0.16
^{78}Zn	30	48	78	1.47 ± 0.15	+0.17	0.00	+0.14
^{82}Zn	30	52	82	0.178 ± 0.003	+0.19	+0.12	+0.13
^{88}Se	34	54	88	1.53 ± 0.06	-0.19	+0.16	+0.17
^{92}Kr	36	56	92	1.840 ± 0.008	-0.21	-0.16	-0.15
^{96}Kr	36	60	96	0.080 ± 0.008	-0.25	-0.23	-0.27
^{92}Sr	38	54	92	9400 ± 61	-0.13	-0.08	-0.06
^{96}Sr	38	58	96	1.059 ± 0.008	-0.22	-0.17	-0.13
^{102}锶	38	64	102	0.069 ± 0.006	+0.39	+0.39	+0.40
^{100}锆	40	60	100	7.1 ± 0.4	-0.20	-0.19	-0.19
^{108}Mo	42	66	108	1.105 ± 0.010	-0.20	-0.20	-0.21
^{114}Ru	44	70	114	0.54 ± 0.03	0.00	0.00	-0.21
^{114}Pd	46	68	114	145 ± 4	0.00	+0.09	+0.20
^{120}Pd	46	74	120	0.49 ± 0.03	0.00	0.00	0.00
^{126}镉	48	78	126	0.512 ± 0.005	0.00	0.00	0.00
^{132}镉	48	84	132	0.084 ± 0.005	0.00	0.00	0.00
^{134}锡	50	84	134	0.93 ± 0.08	0.00	0.00	0.00
^{134}碲	52	82	134	2508 ± 48	0.00	0.00†	0.00†
^{142}氙	54	88	142	1.23 ± 0.02	+0.17	+0.15	+0.16
^{148}钡	56	92	148	0.620 ± 0.005	+0.23	+0.22	+0.22
^{152}Ce	58	94	152	1.42 ± 0.02	+0.30	+0.29	+0.30
^{156}钕	60	96	156	5.06 ± 0.13	+0.34	+0.33	+0.34
^{156}钐	62	94	156	$(3.38 \pm 0.07) \times 10^4$	+0.33	+0.32	+0.32
^{162}Sm	62	100	162	2.7 ± 0.3	+0.34	+0.34	+0.33
^{166}Gd	64	102	166	5.1 ± 0.8	+0.34	+0.33	+0.33
^{174}Er	68	106	174	192 ± 12	+0.31	+0.30	+0.31
^{180}Yb	70	110	180	144 ± 30	+0.29	+0.28	+0.29
^{200}Pt	78	122	200	$(4.54 \pm 0.11) \times 10^4$	0.00†	-0.08	-0.08
^{204}Pt	78	126	204	10.3 ± 1.4	0.00	0.00	0.00
^{208}Hg	80	128	208	135 ± 10	0.00	0.00	0.00
^{226}Rn	86	140	226	444 ± 6	+0.16	+0.17	0.00
^{228}Rn	86	142	228	65 ± 2	+0.19	+0.19	0.00
^{234}Ra	88	146	234	30 ± 10	+0.24	+0.24	+0.24
^{236}Th	90	146	236	2238 ± 90	+0.26	+0.25	+0.25
^{242}U	92	150	242	1008 ± 30	+0.27	+0.26	+0.26

055802（2003年）。[30] P. M¨oller、M. Mumpower、T. Kawano 和 W. Myers，《用于天体物理学和放射性离子束应用的核性质（II）》，《原子数据与核数据表》**125**，1 2019年（）。[31] Z. Niu、Y. Niu、H. Liang、W. Long、T. Nikˇsi´c、D. Vrete- nar 和 J. Meng，富中子原子核的 β衰变半衰期及其在r过程中的物质流，《物理评论快报B》**723**，172（2013年）。[32] I. N. Borzov，基于Fayans泛函的β衰变性质全局计算，《原子核物理》**83**，700 (2020). [33] M. T. Mustonen, T. Shafer, Z. Zenginerler, and J. En- gel，轴向形变原子核中电荷交换跃迁的有限振幅方法，《物理评论C》**90**, 024308 (2014). [34] A. Ravli´c, T. Nikˇsi´c, Y. F. Niu, P. Ring, and N. Paar，基于点耦合相互作用的轴向形变相对论准粒子随机相位近似，《物理评论C》**110**, 024323 (2024). [35] M. T. Mustonen and J. Engel，利用轴向形变方法对偶偶核中的β^- 衰变进行全局描述

表 V. 纳入标定的 Gamow–特勒强度分布所对应的原子核，以及实验 Gamow–特勒共振峰能量、其不确定度和来源。预测值 β_2 同表 IV。

原子核	Z	N	A	$E^{\mathrm{exp}}{}_{\mathrm{GT}}$ (兆电子伏特)	Ref.	β_2(I)	β_2(II)	β_2(III)
^{48}Ca	20	28	48	10.0 ± 0.5	[52]	0.00	0.00	0.00
^{76}Ge	32	44	76	11.1 ± 0.5	[71]	+0.14	0.00	+0.16
^{90}Zr	40	50	90	9.0 ± 0.5	[72]	0.00	0.00	0.00
^{112}Sn	50	62	112	8.9 ± 0.25	[73]	0.00	0.00	0.00
^{132}Sn	50	82	132	16.3 ± 0.5	[74]	0.00	0.00	0.00
^{130}Te	52	78	130	13.6 ± 0.5	[71]	0.00	0.00	0.00
^{150}Nd	60	90	150	15.2 ± 0.5	[75]	+0.31	+0.24	+0.26
^{208}铅	82	126	208	15.6 ± 0.2	[76]	0.00	0.00	0.00

表 VI. 使用各个泛函得到的偶偶 $N = 126$ 同中子素的 HFB 基态性质：第 IIB 节修正前（Q_β^{HFB}）和修正后（Q_β^{corr}）的 β衰变 Q 值，单位为兆电子伏特。 ^{202}Os 和 ^{206}Hg 的实验值来自 AME2020 [50] （# 表示由系统学得到的值）， ^{204}Pt 的实验值来自参考文献 [77]。预测所有基态均为球形。

		SkO′		SLy4		UNEDF1-HFB		Exp.
原子核	Z	Q_β^{HFB}	Q_β^{corr}	Q_β^{HFB}	Q_β^{corr}	Q_β^{HFB}	Q_β^{corr}	Q_β^{exp}
^{182}Ba	56	16.02	18.27	16.92	17.81	17.52	18.18	–
^{184}Ce	58	14.27	16.35	15.33	16.14	15.44	15.97	–
^{186}Nd	60	12.87	14.77	13.97	14.68	13.85	14.25	–
^{188}Sm	62	11.39	13.12	12.46	13.08	12.34	12.61	–
^{190}Gd	64	9.89	11.44	10.87	11.39	10.87	11.01	–
^{192}Dy	66	8.38	9.76	9.24	9.67	9.48	9.49	–
^{194}Er	68	7.09	8.29	7.98	8.32	8.31	8.19	–
^{196}Yb	70	5.84	6.87	6.77	7.02	7.21	6.96	–
^{198}Hf	72	4.67	5.52	5.57	5.72	6.11	5.74	–
^{200}W	74	3.62	4.30	4.37	4.43	5.01	4.51	–
^{202}Os	76	2.55	3.06	3.24	3.21	3.91	3.27	4.11 ± 0.50#
^{204}铂	78	1.51	1.84	2.16	2.03	2.87	2.10	2.60 ± 0.01
^{206}汞	80	0.51	0.66	1.10	0.88	1.85	0.96	1.31 ± 0.02

Skyrme有限振幅方法，《物理评论C》**93**，014304（2016）。[36] E. M. Ney、J. Engel、T. Li 和 N. Schunck，使用轴对称形变Skyrme有限振幅方法对 β^- 衰变进行全局描述：扩展至奇质量数核和奇奇核，《物理评论C》**102**，034326（2020）。[37] M. Mumpower、J. Cass、G. Passucci、R. Surman 和 A. Aprahamian，主r过程的灵敏度研究： β衰变率，《AIP Advances》**4**，041009（2014）。[38] K. A. Lund、J. Engel、G. C. McLaughlin、M. R. Mumpower、E. M. Ney 和 R. Surman， β衰变率对r过程可观测量的影响，《天体物理学杂志》**944**，144（2023）。[39] I. Kullmann、S. Goriely、O. Just、A. Bauswein 和 H.- T. Janka，核不确定性对致密双星并合中动力学抛射物和盘抛射物的组成及衰变热的系统性影响，《皇家天文学会月报》**523**，2551（2023）。[40] Y.-W. Hao、Y.-F. Niu 和 Z.-M. Niu，核β衰变率对 r过程稀土峰丰度的影响，《物理评论C》**108**，L062802（2023）。[41] I. Panov、E. Kolbe、B. Pfeiffer、T. Rauscher、K.-L. Kratz 和 F.-K. Thielemann，用于r过程核合成的裂变率计算，《核物理A》**747**，633（2005）。[42] I. Petermann、K. Langanke、G. Mart´ınez-Pinedo、I. V. Panov、P. G. Reinhard 和 F. K. Thielemann，是否已经

超重元素是否在自然界中产生过？，《欧洲物理学杂志A辑》**48**, 122 (2012). [43] L. Jin, A. Ravli´c, P. Giuliani, K. Godbey, and W. Nazarewicz，线性响应的代理模型，《物理评论研究》**7**, 043347 (2025). [44] R. N. Perez, N. Schunck, R.-D. Lasseri, C. Zhang, and J. Sarich，使用变换谐振子基组求解 Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov方程的轴对称形变解（III）hfbtho（v3.00）：程序的新版本，《计算物理通讯》**220**, 363 (2017). [45] M. Bender, J. Dobaczewski, J. Engel, and W. Nazarewicz，Skyrme能量泛函的Gamow-Teller强度与自旋-同位旋耦合常数，《物理评论C》**65**, 054322 (2002). [46] P.-G. Reinhard, D. J. Dean, W. Nazarewicz, J. Dobaczewski, J. A. Maruhn, and M. R. Strayer，形状共存与有效核子-核子相互作用，《物理评论C》**60**, 014316 (1999). [47] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer，从亚核密度到中子星密度的Skyrme参数化。第二部分：远离稳定线的原子核，《核物理A》**635**, 231 (1998)， [勘误：《核物理A》643, 441–441 (1998)]. [48] N. Schunck, J. D. McDonnell, J. Sarich, S. M. Wild, and D. Higdon，核密度泛函中的误差分析

理论，《物理学杂志G：核与粒子物理》**42**, 034024 (2015). [49] E. Perli´nska, S. G. Rohozi´nski, J. Dobaczewski, and W. Nazarewicz，质子-中子配对关联的局域密度近似：形式体系，《物理评论C》**69**, 014316 (2004). [50] M. Wang, W. Huang, F. Kondev, G. Audi, and S. Naimi，AME 2020原子质量评估（II）：表格、图表和参考文献，《中国物理C辑》**45**, 030003 (2021). [51] J. Engel, S. Pittel, M. Stoitsov, P. Vogel, and J. Dukelsky，精确可解模型中的中子-质子关联，《物理评论C》**55**, 1781 (1997). [52] B. D. Anderson, T. Chittrakarn, A. R. Baldwin, C. Lebo, R. Madey, P. C. Tandy, J. W. Watson, B. A. Brown, and C. C. Foster，在134和160 MeV能量下Ca(p,n)Sc反应激发的粒子-空穴强度：Gamow-Teller强度，《物理评论C》**31**, 1161 (1985). [53] I. M. Sobol，具有附加均匀性特征的均匀分布序列，《苏联计算数学与数学物理》**16**, 236 (1976). [54] D. P. Kingma and J. Ba，Adam：一种随机优化方法（2017），arXiv:1412.6980 [cs.LG]. [55] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, *et al.*，TensorFlow：异构系统上的大规模机器学习（2015），软件可从tensorflow.org获取。[56] F. Kondev, M. Wang, W. Huang, S. Naimi, and G. Audi，NUBASE2020核物理性质评估，《中国物理C辑》**45**, 030001 (2021). [57] K. L. Lange, R. J. A. Little, and J. M. G. Taylor，使用t分布进行稳健统计建模，《美国统计学会杂志》**84**, 881 (1989). [58] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin，贝叶斯数据分析（Chapman & Hall/CRC，2013 448, 3 17, 435 ）第3版，第–页。[59] O. Abril-Pla, V. Andreani, C. Carroll, L. Dong, C. J. Fonnesbeck, M. Kochurov, R. Kumar, J. Lao, C. C. Luhmann, O. A. Martin, *et al.*，PyMC：Python中的现代综合概率编程框架，《PeerJ计算机科学》**9**, 10.7717/peerj-cs.1516 (2023). [60] A. Ravli´c and W. Nazarewicz，超重核中的弱衰变，《物理评论C》**111**, L051305 (2025). [61] V. Fedorov and S. Leonov, *Optimal Design for Nonlin-ear Response Models*，《Chapman & Hall/CRC生物统计丛书》（CRC Press，2013）。[62] D. J. Laky, S. Lilonfe, S. B. Martin, K. A. Klise, B. L. Nicholson, J. D. Siirola, and A. W. Dowling，使用Pyomo.DoE和基于特征值的判据进行最优实验设计，《数字发现》**5**, 3780 (2026). [63] L. Jin, A. Ravli´c, P. Giuliani, K. Godbey, and W. Nazarewicz，SMLR：线性响应的代理模型，https://github.com/ascsn/SMLR (2025). [64] M. D. McKay, R. J. Beckman, and W. J. Conover，比较三种方法以选择计算机程序输出分析中的输入变量值，《计量经济学》**21**, 239 (1979). [65] Y. Saito、A. Ravli´c 和 W. Nazarewicz，pnfam-模拟器校准：β衰变计算的模拟器辅助贝叶斯校准，https://github.com/YukiyaSaito/ pnfam-emulator-calibration（2026年），版本 1.0.0。[66] Y. F. Niu、Z. M. Niu、G. Col`o 和 E. Vigezzi，粒子-振动耦合对幻核 β 衰变的影响，《物理评论快报》114，142501（2015年）。[67] Q. Liu、J. Engel、N. Hinohara 和 M. Kortelainen，准粒子-振动耦合对 Gamow-Teller强度以及采用 Skyrme 质子-中子有限振幅方法的 β 衰变的影响，《物理评论C》109，044308 2024( )。[68] D. Gambacurta、M. Grasso 和 J. Engel，利用电荷交换减去的第二随机相位近似研究 ^{48}Ca 和 ^{78}Ni 中的 Gamow-Teller强度，《物理评论快报》125，212501（2020年）。[69] T. Nik˘si´c、D. Vretenar 和 P. Ring，相对论性核能量密度泛函：根据结合能调节参数，《物理评论C》78，034318（2008年）。[70] Y. Saito、A. Ravli´c 和 W. Nazarewicz，“能量密度泛函理论中 β衰变计算的模拟器辅助校准与不确定性量化”的原始数据，https://zenodo.org/records/ 24089930（2026年）。[71] R. Madey、B. S. Flanders、B. D. Anderson、A. R. Baldwin、J. W. Watson、S. M. Austin、C. C. Foster、H. V. Klapdor 和 K. Grotz，双贝塔衰变原子核 ^{76}Ge、 ^{82}Se、 ^{128}Te 和 ^{130}Te 的 Gamow-Teller强度函数中的低激发结构，《物理评论C》40, 540（1989年）。[72] T. Wakasa、H. Sakai、H. Okamura、H. Otsu、S. Fujita、S. Ishida、N. Sakamoto、T. Uesaka、Y. Satou、M. B. Greenfield、 *et al.*，通过对 ^{90}Zr($p\ n$ 295 **55**, ,)反应 2909 1997 在兆电子伏特处进行多极分解分析，研究连续谱中的 ^{90}Nb 的 Gamow-Teller强度，《物理评论C》（ ）。[73] K. Pham、J. J¨anecke、D. A. Roberts、M. N. Harakeh、G. P. A. Berg、S. Chang、J. Liu、E. J. Stephenson、B. F. Davis、H. Akimune、 *et al.*，Sn(^{3}He,t)Sb 电荷交换反应中 Gamow-Teller共振的碎裂与分裂，A=112–124，《物理评论C》51，526（1995年）。[74] J. Yasuda *et al.*，从 ^{132}Sn 中的 Gamow-Teller巨共振提取 Landau-Migdal 参数，《物理评论快报》121，132501（2018年）。[75] C. J. Guess、T. Adachi、H. Akimune、A. Algora、S. M. Austin、D. Bazin、B. A. Brown、C. Caesar、J. M. Deaven、H. Ejiri、 *et al.*， ^{150}Nd(^{3}He,*t*) 和 ^{150}Sm(*t*,^{3}He)反应及其在 $\beta\beta$ Nd 的 ^{150}衰变研究中的应用，《物理评论C》83，064318（2011年）。[76] H. Akimune、I. Daito、Y. Fujita、M. Fujiwara、M. B. Greenfield、M. N. Harakeh、T. Inomata、J. J¨anecke、K. Katori、S. Nakayama、 *et al.*， ^{208}Bi 中 Gamow-Teller共振的直接质子衰变，《物理评论C》52，604 1995( )。[77] D. Freire-Fern´andez *et al.*，富中子铂和金原子的精确质量揭示了双幻 ^{208}Pb 以下增强的 N =126壳层强度（2026年），arXiv:2607.10894 [nucl-ex]。