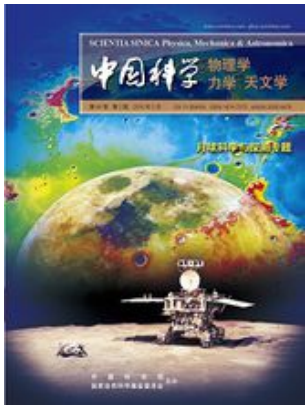


基于高斯过程的贝叶斯推断研究原子核的α衰变

Bayesian Inference Based on Gaussian Process for Studying the α-Decay Half-Life of Atomic Nuclei

期刊：	中国科学: 物理学 力学 天文学
稿件ID：	SSPMA-2025-0666.R3
稿件栏目：	论文
作者提交日期：	2026-04-02
参与作者列表：	陈海军, 黄文豪, 盛浩文, 赵天亮, 包小军
关键词：	贝叶斯推断, 新普适衰变定律, 微观壳效应, 高斯过程
英文关键词：	Bayesian Inference, Novel Universal Decay Law (NUDL), Microscopic Shell Effect, Gaussian Process
学科领域：	原子核物理学
专题：	
注意：以下文件由作者提交以供同行评审, 但不能转换为PDF. 您必须在线查看这些文件.	
图片压缩包.zip	

For Review Only

基于高斯过程的贝叶斯推断研究原子核的α衰变

陈海军[①], 黄文豪[①], 盛浩文[①], 赵天亮[②*], 包小军[②*]

① 湖南工商大学数字媒体工程与人文学院, 长沙 410205;
② 湖南师范大学物理与电子科学学院，长沙 410081;
*联系人, E-mail: zhaotl@hunnu.edu.cn, baoxiaojun@hunnu.edu.cn

国家自然科学基金(编号:12447111)资助项目

摘要 α衰变是重核与超重核素的关键衰变模式之一，已有的基于最小二乘法拟合参数的α衰变公式常将模型误差简化为随机扰动，且无法量化模型参数不确定性。本研究针对上述局限，融合贝叶斯推断与高斯过程构建了一个新型分析框架，最终实现了新普适衰变定律公式（NUDL）参数的不确定性量化，并揭示了公式未涵盖的微观壳效应是主导性系统误差。此外，通过敏感性分析与特征重要性分析，进一步量化了参数敏感性与特征贡献，势垒穿透几率标度因子 a 对半衰期预测最为敏感，且核质量数是微观效应的核心影响特征，电荷数为次要影响特征，该效应在偶偶核半衰期预测误差中贡献最为显著。模型总体的均方根误差（RMSE）为 0.375，偶偶核最优仅为 0.186，奇 A 核与奇奇核精度稍低，并对近 5 年新观测核素α衰变数据验证了模型的泛化能力。该融合模型显著改善了 NUDL 公式在参数不确定性量化与系统误差刻画方面的局限，既为新核素鉴定提供了优化的预测工具与参考，也为物理模型与数据驱动方法的融合应用提供了可借鉴的方法论思路。

关键词 贝叶斯推断, 高斯过程, 新普适衰变定律, 微观壳效应

PACS: 21.10.Tg,02.50.Cw,02.70.Bf

For Review Only

1 引言

α衰变是重核与超重核素的关键衰变模式，不仅为核结构与核动力学研究提供了丰富的物理信息[1-4]，同时对重核与超重核区新核素的实验鉴别亦至关重要[5,6]。为精准量化α衰变半衰期，目前已发展出多种理论方法，涵盖唯象模型与微观模型，例如推广的液滴模型（GLDM）[7-9]、库仑亲近势模型（CPPM）[10]、双势方法（TPA）[3,11]、统一裂变模型（UFM）[12]、密度依赖集团模型（DDCM）[13]等。上述理论模型关于α衰变的半衰期的计算主要与衰变宽度直接相关，而关于衰变宽度的定义，目前主要有两种假设，一种是衰变宽度分解为两因子的乘积，即碰撞频率 v_0 和势垒穿透几率 P 的乘积；另外一种是假设为三因子的乘积，即α粒子预形成几率 P_0，碰撞频率 v_0 和势垒穿透几率 P 的乘积。无论是包含三个因子的模型，还是两因子模型，都能较好的再现α衰变的半衰期，因此预形成因子 P_0、碰撞频率 v_0 和穿透几率 P 的数值大小都具有模型依赖性。穿透几率的差异主要源于核势的不同以及是否考虑形变效应等因素，而原子核-原子核相互作用势则与核子-核子相互作用密切相关。尽管目前的很多理论模型都能较好的描述α衰变的半衰期，但α衰变过程仍受诸多不确定的因素影响，如奇核子阻塞效应的处理，微观上准确的计算预形成因子等，其中预形成因子与单粒子谱中的连续态效应紧密相关，且具有很强的核结构的模型依赖性。此外，α衰变能也具有显著的模型依赖性。这些

因素共同导致实验中未知衰变能核素的半衰期计算存在较大的不确定性。

此外，还有多种经验公式用于计算α衰变半衰期，如 Viola-Seaborg 公式[14]、改进的 Geiger-Nuttall 定律（GN）[15]、Brown 公式[16]、Royer 公式[7]、普适衰变定律（UDL）[17]等，此外，为进一步优化公式性能，研究者还通过引入不对称项或角动量效应，提出了系列改进公式[18-27]。为进一步提升解析公式的普适性与预测精度，Zhao 等人[28]以 UDL 公式为基础，通过“参考核拟合 + 测试核验证”的策略，发展出与传统物理模型的精度相当甚至更优的新普适衰变定律公式，即 NUDL 公式：

$$\log_{10}(T_{1/2}) = aZ_\alpha Z_\mathrm{d}\sqrt{\frac{A_\alpha A_d}{(A_\alpha + A_d)Q_\alpha}} + b\sqrt{\frac{A_\alpha A_d}{(A_\alpha + A_d)}Z_\alpha Z_d(A_\mathrm{d}^{1/3} + A_\alpha^{1/3})} + c + nh \quad (1)$$

其中 $\log_{10}(T_{1/2})$ 为半衰期对数，Z_d、A_d 为α衰变子核质子数和质量数，Z_α、A_α 为α粒子质子数和质量数，α衰变能量变化 Q_α，以及核素类型标识量 n，其中偶偶核、奇偶核、奇奇核标识值分别为 0,1,2，以区分不同类型核素的分类变量，a、b、c、h 为 NUDL 公式的拟合参数。公式(1)可以通过量子力学势垒隧穿方法或者 R 矩阵的方法来近似推导[30,31]。原子核结构效应对于半衰期的影响是通过α衰变来体现，该解析公式无法考虑形变效应的影响，没有被包含的物理效应可以看作全部被参数所吸收。因此，仔细分析参数的不确定性具有重要的价值。

尽管解析公式显著推进了α衰变半衰期的预测，但该方法仍存在两点关键局限，制约了其在未知核素预测与不确定性量化中的应用：其一，参数估计为点估计：比如 NUDL 采用最小二乘法拟合参数（a、b、c、h），仅能给出单个最优值，无法量化参数本身的不确定性 —— 而在超重核等数据稀疏区域，参数的微小波动可能导致预测结果偏差显著，这一缺陷直接影响模型外推的可靠性；其二，仅将误差简化为随机扰动，未充分考虑模型自身的缺陷，即由未显式建模的微观核结构等效应引发的非线性、结构化误差，如核壳层修正、核形变差异，这些会导致系统性的预测偏差，而非简单的随机噪声。

针对上述局限，本研究以 NUDL 公式为例，引入贝叶斯推断框架与高斯过程（Gaussian Process, GP）：前者通过概率分布量化 NUDL 参数的不确定性及协变结构，改善点估计的局限；后者则用于捕捉微观壳效应引发的部分非线性系统误差，进一步提升模型对核素半衰期预测的稳定性与不确定性量化能力。

2 贝叶斯推断框架与高斯过程

贝叶斯推断是一种基于概率理论的统计推断框架，其核心思想是通过观测数据不断更新对未知参数的概率分布，从而实现对参数不确定性的量化与建模。贝叶斯推断其核心公式为贝叶斯公式：

$$P(\theta \mid data) = \frac{L(data \mid \theta) * \mathrm{Prior}(\theta)}{P(data)} \quad (2)$$

其中 data 表示实际观测数据，θ为待估参数，Prior(θ)是参数的先验分布，它刻画了在进行模型推断前研究者基于领域知识或历史信息，对参数不确定性的先验认知；L(data|θ)为似然函数，衡量数据与参数之间的关联强度，是连接先验信息与后验推断的关键桥梁；分母 P(data)为归一化常数；P(θ|data)是参数的后验密度函数，反映了在考虑观测数据后对参数θ认知的更新，包含了参数估计的不确定性信息，如后验均值、标准差和可信区间等。

为使用贝叶斯方法来估计公式(1)中目标参数 a,b,c,h 及其后验分布，我们需要首先对各参数设定合理的先验分布和构建似然函数。模型参数先验分布遵循融合先验知识与模型灵活性的原则，结合 NUDL 公式参数物理本质与α衰变规律，参考已有参数点估计值 0.411、-0.431、-21.374、0.453[28]设定弱信息先验：势垒穿透几率的标度因子 a 与α粒子与衰变子核之间接触半径的标度因子 b 均设为-2 到 2 的均匀分布，全面覆盖轻核至超重核衰变能与半衰期的耦合系数合理范围；反映半衰期全局偏移量与量子隧穿基准值的参数 c，设定为[-40,-10]的均匀分布，匹配重核α衰变半衰期的对数尺度变化范围；参数 h 为原子核中未配对核子对α粒子预形成因子的标定，设定为 [0,1]的均匀分布，契合阻塞效应的概率化物理本质与取值约束。后续马尔可夫链蒙特卡洛（MCMC）采样验证了该先验设定的合理性，核心参数后验标准差小、置信区间窄，既未过度约束估计，又引导后验分布聚焦合理区间。

似然函数的构建则围绕 NUDL 解析公式的预测误差特性展开，即既要考虑观测过程中的随机噪声，也要兼顾公式本身未捕捉到的其他核结构效应的影响误差。设第 i 个核素 NUDL 解析公式的半衰期对数预测值为 $\mu_\mathrm{i}(x_i,\theta)$，实际观测值为 y_i，总误差为 σ_i，

则有：

$$y_i = \mu_i(x_i,\theta) + \sigma_i \quad (3)$$

总误差 σ_i 可进一步分解为两类具有不同物理意义的误差分量：一是源于实验测量过程中的随机扰动如检测仪器精度、数据记录偏差等造成的随机观测误差项 σ_{0i}；二是源于 NUDL 公式未充分涵盖的微观壳效应如幻数附近的壳层修正、核形变等，其大小与核素的结构特征子核质子数 Z_{d}、质量数 A_{d}、衰变能 Q_α、核素类型 n 强相关，表现为一种结构化的非线性函数 $\delta(x_i)$。因此得到框架的基础方程：

$$y_i = \mu_i(x_i,\theta) + \delta(x_i) + \sigma_{0i} \quad (4)$$

故构建的似然函数的形式为：

$$L(y_i|\theta,\sigma_{0i},\delta)=\prod_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{0i}}\exp\left(\frac{1}{2\sigma_{0i}^2}(y_i-\mu_i(x_i,\theta)-\delta(x_i))^2\right)\right] \quad (5)$$

由于后验分布 P(θ|data)无解析解，且待估参数包含 NUDL 的 4 个物理参数、随机误差及后续 GP 的超参数，本研究采用 No-U-Turn Sampler（NUTS）算法进行 MCMC 数值采样，该算法无需手动调整步长，可自适应探索高维参数空间，采样效率远高于传统 Metropolis-Hastings 算法且支持多链并行采样，其输出的后验样本集合可直接用于参数不确定性量化与参数关联性分析。

针对上述模型偏差 $\delta(x_i)$ 的函数形式未知、难以通过物理理论直接推导，为了精准刻画这一非线性偏差，我们引入高斯过程（GP）进行建模。GP 具备强大的函数逼近与非线性误差刻画能力，能够灵活拟合未知函数，还可以量化预测的不确定性，且基于本研究 461 个核素的样本规模，可直接用全量数据完成精确推断。高斯过程设定 $\delta(x_i)$ 分布为：

$$P(f \mid X) = N(f \mid 0, K_{XX} + \varepsilon I) \quad (6)$$

其中 $f = \{\delta(x_i)\}$ 为全量数据偏差值，K_{XX} 为全量输入特征的协方差矩阵，ϵ为防止矩阵奇异的小量，本研究取 10^{-6}，I 为与样本数维度一致的单位矩阵，作用是确保协方差矩阵可逆，保障后续计算的数值稳定性。结合观测数据的似然，可直接推导得到精确的后验分布。

从物理本质来看，核素的微观壳效应的强弱，本质上随核素质量数、电荷数等特征呈连续渐变趋势，即便幻数附近衰变能等物理量出现数值突变，邻近核素的壳效应对半衰期的影响趋势仍是连贯的，不会发生断层式跳变。高斯过程的协方差函数直接决定了对非线性偏差的刻画能力，本研究采用径向基函数（RBF）核，其平滑性恰好契合壳效应的渐变规律；同时结合贝叶斯推断框架，当模型遇到幻数附近的物理量突变时，会自然拓宽预测的 95%最高密度区间（HDP），将这类局部波动合理纳入不确定性范围，而非强行抹平真实的物理差异。RBF 核的形式为：

$$K(x_i,x_j,l,\sigma_{gp}) = \sigma_{gp}^2 \exp\left(-\frac{\| x_i - x_j \|^2}{2l^2}\right) \quad (7)$$

式中，$l = \{l_1,l_2,l_3,l_4\}$ 为长度尺度（对应 4 个输入特征），控制特征对偏差的敏感程度，l 值越小，说明该特征对非线性偏差的影响越显著，这为后续分析何种核物理量主导微观效应提供了直接依据；σ_{gp} 为 GP 方差，刻画非线性偏差的整体波动幅度。RBF 核的平滑性符合微观壳效应随核素特征的渐变规律，局部性则确保特征相似的核素其偏差具有一致性，避免跨区域干扰，同时通过长度尺度可直接分析各特征对偏差的贡献。高斯过程采用的 RBF 核包含 5 个超参数：4 个长度尺度与 1 个输出方差，共同刻画微观壳效应引发的非线性波动规律。

在计算优化层面，结合观测模型的似然分布，高斯过程的后验分布为：

$$P(f \mid X,y) \sim N(f \mid K_{XX}(K_{XX}+\sigma^2 I)^{-1} y,\ K_{XX} - K_{XX}(K_{XX}+\sigma^2 I)^{-1} K_{XX}) \quad (8)$$

其中 K_{XX} 为输入特征的协方差矩阵，反映先验中样本间的关联程度，y 是观测到的模型偏差向量，前半项为后验均值项，表示先验信息经过观测数据修正后得到的偏差函数平均估计；后半项为后验协方差项，反映了修正后的不确定性，最终得到的协方差矩阵将直接给出偏差函数在不同样本点上的预测波动范围。本研究 461 个核素的样本规模，上述计算在现代硬件下可高效完成。

3 计算结果与讨论

本研究采用的数据集包含 461 个原子核的α衰变半衰期数据，涵盖 172 个偶偶核、231 个奇 A 核及 58 个奇奇核。其中，实验测得的α衰变半衰期数据来源于 NUBASE2020 数据库[31]，α衰变能量 Q_α 数据则取自 AME2020 数据库[32]，实验采用 JAX 64 位精度计算，以避免核素半衰期对数预测中的数值溢出问

题，随机种子固定为 42 以保证 MCMC 采样等所有随机过程可复现，下面系统验证贝叶斯- GP 融合模型的可靠性、预测精度、内在机制及泛化能力。

MCMC 采样的收敛性是贝叶斯推断结果可靠的前提，本研究采用 4 条独立链并行采样（3000 步预热+5000 步采样），所有核心参数的潜在缩放因子（R-hat，小于 1.01 表明采样链收敛）均小于 1.01，有效样本量（ESS）充足，表明采样链已收敛至平稳分布，后验样本能够充分反映参数不确定性。

表 1 参数估计结果及 MCMC 采样收敛特征
Table 1 Parameter Estimation Results and Convergence Characteristics of MCMC Sampling

参数	后验均值	标准差	95%置信区间下限	95%置信区间上限	ESS	R-hat
a	0.418	0.004	0.411	0.425	3734.881	1.001
b	-0.406	0.010	-0.426	-0.387	4421.059	1.004
c	-24.051	0.867	-25.707	-22.437	3677.589	1.003
h	0.526	0.074	0.382	0.662	3014.241	1.003
σ_0	0.086	0.061	0	0.193	7687.288	1.000
σ_{GP}^2	0.172	0.017	0.140	0.204	2618.028	1.005

从表 1 的后验参数估计结果来看，模型对多数核心参数的约束能力较强，估计标准差相对较小，整体稳定性良好。其中，势垒穿透几率标度因子 a、接触半径标度因子 b、反映半衰期全局偏移量与量子隧穿基准值的参数 c 与未配对核子阻滞因子 h 估计的标准差均较小，且相对于各自的后验均值而言，其相对变异程度也较低，估计的稳定性较佳，这表明模型对这些刻画α衰变关键物理过程的核心参数，实现了较为精准、稳定的后验估计。这些参数对应的势垒穿透、核子阻滞等物理机制本身具有确定性，贝叶斯后验约束也让这种确定性在参数估计结果中得到了印证。误差项的估计上，随机噪声项 σ_0 后验均值为 0.086，反映实验测量过程中的随机误差（如仪器精度、数据记录偏差）；σ_{GP}^2 为高斯过程的方差，后验置信区间为 [0.140,0.204]，反映 NUDL 公式未涵盖的微观物理效应，代表理论模型的系统性物理遗漏误差。模型总误差是由测量随机扰动与传统理论未涵盖的微观物理效应引发的系统误差共同构成，后者占主导地位。本研究构建的贝叶斯-GP 融合模型，在实现对宏观物理过程核心参数较为精准估计的基础上，通过高斯过程初步有效捕捉了上述微观效应，改善了传统纯物理公式和模型的固有局限。

为了更清晰的展现参数的分布特征，探究参数之间的内在依赖关系与协变结构，本文基于贝叶斯后验样本结合一维核密度估计（KDE）方法构建了核心参数的联合分布图，如下图图 1 所示。

For Review Only

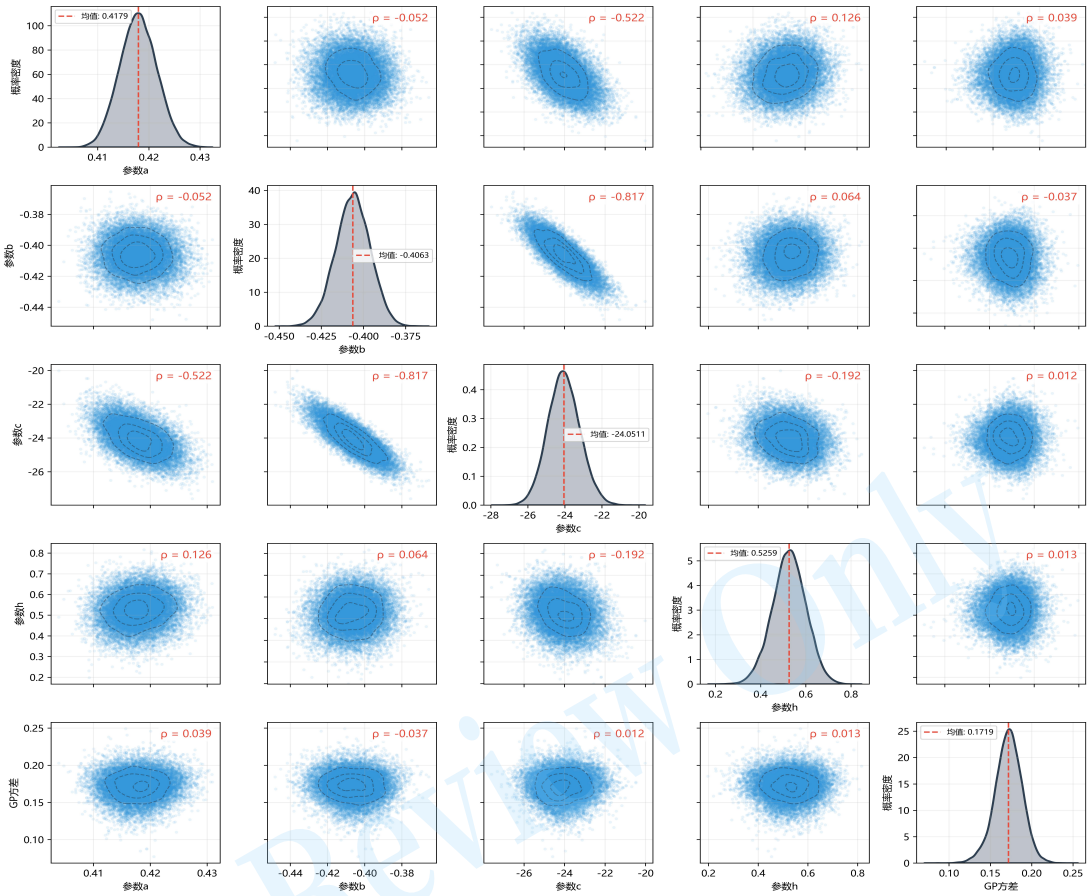


图 1 基于 4 条 MCMC 独立链的后验样本，采用 KDE 方法构建。图中展示了模型核心参数的分布特征，以及参数间的两两协变关系。

Figure 1 Constructed using the posterior samples from 4 independent Markov Chain Monte Carlo (MCMC) chains via the Kernel Density Estimation (KDE) method. This figure presents the distribution characteristics of the model’s core parameters, as well as the pairwise covariance relationships between these parameters.

图中清晰呈现了核心参数的分布特征及两两协变关系。从关联性特征来看，不同参数与全局偏移参数 c 的相关强度呈现明确的层级差异：最显著的是α粒子与衰变子核之间接触半径的标度参数 b 与常数 c 的 Pearson 相关系数达-0.817，呈现较强负相关，这是由于参数 b 表征核表面相互作用强度，b 值增大核表面耦合作用增强，α粒子预形成概率上升，进而延长半衰期；而常数 c 项则会反向减小，以平衡核表面作用增强对α衰变半衰期预测的影响，二者通过这种补偿机制实现拟合优化。其次，势垒穿透几率标度因子 a 与 c 呈中等程度负相关，其中 a 主导的是α粒子的隧穿过程，属于衰变的局部核心机制，需要和 c 代表的全局基准轻微制衡，防止单一效应过强造成预测偏差。未配对核子阻滞因子 h 与 c 的相关性最弱，源于 h 描述的是未配对核子对预形成因子的局域微观阻碍作用，作用本身带有随机性和局域性，而 b、a、c 调控的是衰变过程的宏观全局规律，所以 h 在参数协变结构里的贡献权重明显低于前三者。

从贝叶斯模型的参数后验分布特性来看，a、b、c、h 之间的协变关系，本质上是α衰变核表面作用、势垒隧穿等宏观物理过程的内在制衡，其相关性源于物理机制本身，而非拟合过程中的参数交互伪影。与此同时，NUDL 公式的固有局限在于，仅通过宏观参数组合刻画α衰变的整体规律，并未显式纳入微观壳

For Review Only

效应，而这些效应是影响α衰变半衰期的客观物理因素。而 GP 方差参数 σ_{GP}^2 与上述核心参数的 Pearson 相关系数均较小，无显著相关性，进一步说明高斯过程捕获的动态误差，其来源是 NUDL 公式未涵盖的微观壳效应，而非参数间的交互作用。

参数层面的可靠性与关联性分析为模型预测提供了坚实基础，接下来需进一步验证模型的整体性能——通过后验预测值与实验观测值的直接对比，以及与主流模型的横向对标，全面评估融合模型在不同核素类型上的预测精度与稳定性。

我们利用估计得到的参数后验分布即后验预测样本，代入 NUDL 公式中得到模型的模拟观测值，并与真实观测数据进行多维度对比，判断模型是否捕捉到了数据的关键特征。我们统计了后验样本的均值、标准差、偏差和 95% 最高密度区间（HDP）区间等信息，以及模型对的各项核心指标，如模型的后验标准差、平均绝对误差 MAE、均方根误差 RMSE 等，如下图 2 所示。

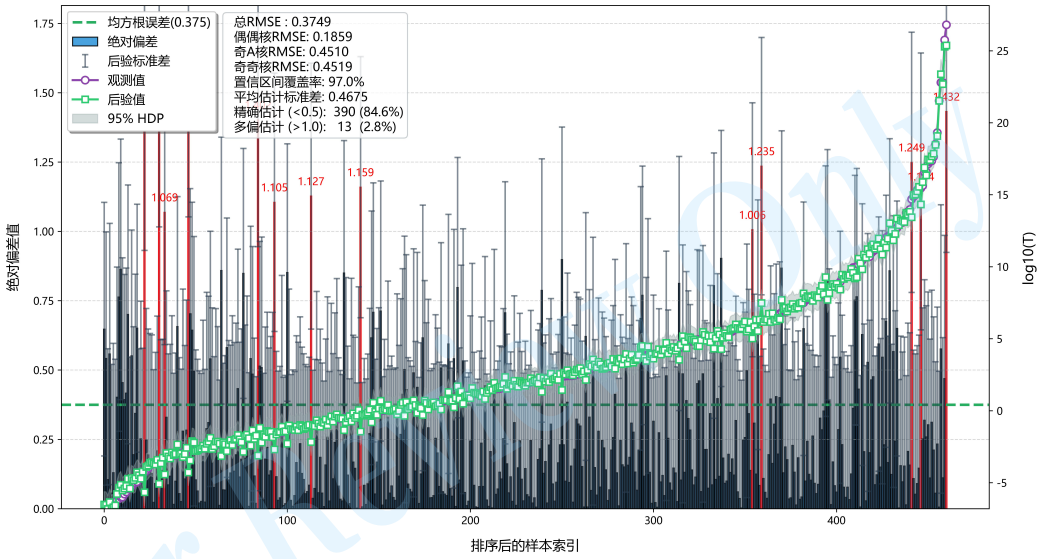


图 2 数据集包含 461 个核素，红色标记为预测偏差高的样本分布。图中展示了按半衰期长短排序后融合模型的各项指标、对各类核素的精度，以及详细展示了对每个样本估计的不确定性大小，偶偶核精度降低至 0.186。

Figure 2 The dataset comprises 461 nuclides, with red markers representing the distribution of samples with high prediction deviations. This figure displays the various metrics of the fusion model (sorted by half-life), the precision for different types of nuclides, and the detailed estimation uncertainty for each sample; the precision of even-even nuclides is reduced to 0.186.

在后验预测检验图中，多数预测值与实验观测值高度吻合，95%HDP 区间覆盖率达 97.0%，既较好的捕捉了核素半衰期的系统变化规律，又实现了估计其的不确定性的合理量化。模型在后验样本上的总体 RMSE 为 0.375，近 84.6%的样本预测偏差低于 0.5，模型已具备较好的预测精度与不确定性校准能力。

从不同的核素类型的表现来看，融合模型对三类核素的 RMSE 尤其是偶偶核的精度降低至 0.186，显著优于奇 A 核与奇奇核，这是源于偶偶核存在显著的质子-中子对关联效应，基态组态更为稳定，而且不存在未配对核子引发的阻塞效应，且基态到基态衰变中角动量变化为零，因此衰变道选择单一，半衰期行为规律性强。上述核结构特性使偶偶核的微观壳效应呈现出更具规律性的非线性变化特征，而模型引入的高斯过程恰好具备精准捕捉结构化非线性残差的能力，能够高效拟合 NUDL 公式未涵盖的壳效应偏差，最终进一步压低了偶偶核的预测误差。相比之下，奇 A 核与奇奇核因未配对核子的局域扰动，微观壳效应的波动更复杂且无明显规律，高斯过程对这类强随机性残差的拟合难度显著提升，这一点也得到了样本数据的印证 ——13 个高偏差样本中 10 个为奇 A 核、3 个为奇奇核。这提示后续模型优化需引入核子

对关联效应、壳层修正项及奇核子阻塞效应的显式建模，以强化对含未配对核子核素半衰期行为的描述能力，降低高斯过程对强随机性残差的拟合难度。

为更客观地评估本融合模型的性能优势，我们将其与近年来主流的α衰变半衰期预测模型及经验公式进行横向对比，重点关注不同核素类型下的 RMSE 差异，以明确融合模型在精度与参数简洁性上的平衡效果，对比结果如表 2 所示。

表 2 α衰变半衰期预测模型及经验公式 RMSE 对比
Table 2 RMSE Comparison of Predictive Models and Empirical Formulas for α-Decay Half-Life

	偶偶核	奇 A 核	奇奇核	整体 RMSE
Royer 公式（2010）[9]	0.376	0.668 /0.653	0.634	0.589
NUDL 公式（2018）[28]	0.323	0.670	0.697	—
Deng 公式（2020）[18]	0.375	0.457 /0.425	0.475	0.428
未考虑形变（2025）[33]	0.406	0.475 /0.469	0.472	0.456
WS4 形变（2025）[33]	0.363	0.445 /0.412	0.432	0.413
FRDM 形变（2025）[33]	0.368	0.445 /0.409	0.439	0.415
本融合模型	0.186	0.451	0.452	0.375

在偶偶核半衰期预测中，融合模型的 RMSE 低至 0.188，较 Royer 公式、NUDL 公式及其他形变模型均实现了近 50%的精度提升，展现出更优的预测性能。本融合模型在无额外引入形变效应、核子对关联、角动量修正等复杂物理因子的前提下，坚持参数体系的物理可解释性与简洁性，仅通过 4 个核心物理参数构建基础框架，便实现了偶偶核、奇 A 核、奇奇核 RMSE 分别降至 0.186、0.451、0.452 的较好的预测表现，三类核素的预测精度均得到同步优化。而其他主流模型往往需要通过增加拟合参数数量，或依赖特定核结构的复杂计算输入来提升精度，不可避免地增加了模型的复杂度与过拟合风险。即便如此，本模型仍依托 GP 过程构建了 NUDL 公式未涵盖非线性残差的针对性捕捉机制，既保障了各类型核素预测精度的稳定性，又保留了模型的计算效率与拓展灵活性，为后续针对性引入核子对关联、形变修正等物理效应预留了清晰的优化路径。

上述后验预测检验已证实模型的整体预测能力，但核心修正模块 —— GP 的物理意义与作用机制仍需进一步量化验证。我们需要确认其是否真正捕捉了 NUDL 公式未涵盖的动态非线性残差，另一方面需明确哪些核结构特征主导了这些残差的变化，这是深化对误差来源的核物理机制理解、证明 GP 并非冗余的关键环节。

为直接验证 GP 的误差捕捉能力，我们将α衰变半衰期对数实验观测值与 NUDL 公式后验均值差值作为物理模型动态误差，其本质上反映了 NUDL 公式因未考虑微观壳等效应产生的系统性偏差，通过对比 GP 的后验均值与 95%HDP 区间与该物理模型残差的匹配程度，以此判断 GP 是否有效还原了动态误差的变化规律；同时采用两种互补的特征重要性量化方法：一是“长度尺度逆序法”—— 基于 GP 的 RBF 核长度尺度，l 越小表明特征微小变化即会引发误差显著波动，故以 $1/l$ 表征特征重要性；二是“置换重要性法”—— 通过随机置换单个特征后计算模型 RMSE 的增量，以增量大小表征特征对整体模型，增量越大则表明该特征对误差的贡献越关键，即重要性越高，以此来解析核素特征对该动态误差的贡献程度，结果分别如图 3 和表 3 所示。

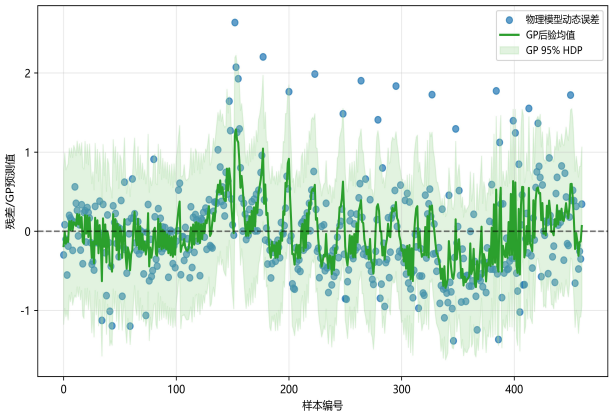


图 3 以α衰变半衰期对数的实验观测值与 NUDL 公式后验均值的差值作为动态残差，验证 GP 对非线性残差的捕捉能力。

Figure 3 Takes the difference between the experimental logarithmic value of the alpha decay half-life and the posterior mean of the NUDL formula as the dynamic residual, validating the GP's ability to capture nonlinear residuals.

表 3 高斯过程特征重要性对比
Table 3 Feature Importance Comparison of Gaussian Processes

	电荷数Z_{d}	质量数A_{d}	衰变能Q_{α}	核素类型n
特征重要性	2.947	7.272	0.593	0.621
置换重要性	7.371	0.520	10.919	0.243

由图 3 可见，物理模型动态误差并非随机分布，而是呈现出具有一定规律的波动趋势，大部分均落在 GP 的后验均值曲线附近，且与该波动趋势高度重合，与残差点位的局部聚集特征相一致，且 GP 的 95%HDP 区间覆盖了约 90%的物理模型残差样本，仅少数样本点因残差波动超出 GP 的预测范围而落在区间外。这一结果直接证实，GP 并非冗余的噪声拟合模块，而是能够有效捕捉 NUDL 公式未涵盖的动态非线性误差，识别微观壳效应导致的系统性偏差。而在特征重要性分析中，两种方法呈现出不同的层级差异：在长度尺度逆序法中，质量数 A_{d} 的数值最高为 7.272，远高于其他特征，是对微观壳效应相关非线性残差贡献度最为显著的核素特征，电荷数 Z_{d} 为 2.947，贡献度次之，衰变能与核素类型的贡献度则显著偏低。核质量数直接关联原子核的核子密度分布、壳层结构以及形变程度等核心微观特征，这些正是 NUDL 公式中未显式建模的主要残差来源，如幻数核的壳层修正和非球形核的形变效应，因此在高斯过程对残差的拟合过程中，质量数的主导作用突出；而电荷数与原子核质子壳层结构、库仑相互作用相关，是影响微观壳效应的次要因素，故也表现出一定的残差贡献度。在置换重要性法中，衰变能 Q_{α} 与电荷数 Z_{d} 的 RMSE 增量分别为 10.919、7.371，而质量数 A_{d} 和核素类型 n 的 RMSE 增量却接近于 0，这表明衰变能对 NUDL 物理模型本身的半衰期宏观预测结果影响权重最大，电荷数次之，二者作为 NUDL 公式的核心输入特征，对模型整体预测结果的支撑作用最为关键，其特征信息的扰动会直接导致模型预测误差的显著上升。

这种差异并非矛盾，而是从残差微观机制与整体预测贡献两个维度揭示了特征的作用边界。衰变能与电荷数是 NUDL 公式的“骨架性特征”，公式已对二者的宏观物理效应进行了显式建模，其是决定α衰变半衰期宏观变化趋势的核心因素；质量数则是对微观壳效应起主导作用的修正特征，电荷数为次要修正特征，二者未被 NUDL 公式显式纳入建模，共同构成了 GP 所捕捉的核壳层修正、核形变等精细微观效应的核心来源。核素类型 n 在两种方法中重要性均较低，反映其对α衰变的宏观预测趋势与微观壳效应相关残差的影响均较弱。本部分针对核素物理特征的贡献度与影响权重分析，为后续模型的分层优化提供了明确的特征优先级依据。

在重核与超重核素的新核素鉴定、核素存在极限探索等核心应用场景中，实验数据往往极为稀疏，模型预测的可靠性高度依赖参数的稳健性，若某一核心参数对半衰期预测极具敏感性，其在后验分布中即使微小的不确定性，都可能被放大为预测结果的显著偏差，进而误导新核素的衰变特性判断，故进行参数的敏感性分析是必要的。为量化核心参数微小变化对α衰变半衰期预测结果的影响，我们采用局部敏感性分析结合贝叶斯后验样本实现，即选取模型的核结构关联参数 a、b、c、h，对每个参数施加±1%的微小扰动，基于中心差分法计算弹性系数（半衰期对数变化百分比与参数变化百分比的比值），以反映参数对半衰期对数的影响强度与方向；同时通过弹性系数变异系数（弹性系数标准差与弹性系数均值的百分比比值）量化参数的相对敏感性波动的稳定性，兼顾贝叶斯模型中参数的后验不确定性，结果如下表 4 所示。

表 4 核心参数敏感性分析
Table 4 Sensitivity Analysis of Core Parameters.

参数	后验基准值	弹性系数均值	弹性系数95%置信区间	弹性系数变异系数(%)
a	0.418	18.758	[17.377,20.140]	118.598
b	-0.406	-9.408	[-10.143,-8.673]	-125.890
c	-24.051	-7.928	[-8.632,-7.223]	-143.107
h	0.526	0.323	[-0.402,1.048]	3610.762

结果显示，不同核结构关联参数对半衰期对数的敏感性显著依赖于其物理本质与数学约束特性：势垒穿透几率的尺度因子 a 的弹性系数均值达 18.758，95%置信区间[17.377,20.140]窄且远离零点，绝对值最大，表明尺度因子 a 每微小变化 1%，半衰期对数

值将平均变化 18.758%，是对半衰期影响最显著、敏感性最强的参数，其直接关联α粒子隧穿势垒的核心过程 —— a 值的增大将显著提升势垒穿透几率，加速α粒子发射，进而缩短半衰期。表征核表面相互作用与α粒子预形成概率、半衰期全局偏移基的参数 b 与 c 的弹性系数分别为-9.408 和-7.928，敏感性次之且呈显著负相关，负弹性系数结合之前二者强后验负相关性（ρ=−0.817），进一步揭示二者通过补偿机制调节衰变过程，即参数 b 增大，表面作用增强、预形成概率提升，本应延长半衰期，但通过 c 的同步下调抵消部分效应，体现核表面作用与全局隧穿基准的拮抗关系。值得特别关注的是，参数 h 的弹性系数均值为 0.323，但其 95%置信区间[-0.402,1.048]明显包含零点，且其的变异系数 3610.762%显著高于其他参数，表明其在后验估计稳定的区间内，参数的微小变化对半衰期的影响极其微弱，且影响强度的波动没有明显的规律可循，在 NUDL 公式中 h 其作为未配对核子的阻滞因子，物理效应属于局域微观相互作用，其影响已被 GP 捕捉的核壳层修正、核形变等宏观微观壳效应覆盖，且未配对核子作用的随机性使其对全局半衰期的贡献占比远低于库仑作用、核表面作用等宏观效应，故敏感性无统计显著性。

α衰变理论研究的核心价值不仅在于拟合已知核素的衰变规律，更在于为新核素鉴定、核素存在极限探索等前沿领域提供可靠的理论支撑，这类场景中，新合成重核与超重核的实验数据极度稀缺，且往往伴随高α衰变能的特征，模型的外推泛化能力直接决定其对未知核素衰变特性预测的可信度，这也是检验物理模型是否真正捕捉核心衰变机制的关键标尺。为此，我们搜集了近 5 年来著名核物理实验室发布的α衰变半衰期新观测数据[34-43]，构建独立预测验证集如表 5 所示。

表 5 近 5 年著名核物理实验室发表的α衰变半衰期数据与模型预测结果

Table 5 α-Decay Half-Life Data from Famous Nuclear Physics Laboratories in the Past 5 Years vs. Model Prediction Results

核素	衰变能 Q_α	奇核子数 n	观测半衰期对数 $\log_{10}(T_{obs})$	模型预测半衰期对数 $\log_{10}(T_{\mathrm{mod}})$	预测偏差	参考文献
^{172}Os	5.223	0	3.982	3.284	0.698	文献[34]
^{176}Pt	5.885	0	1.199	1.258	0.058	文献[34]
^{179}Au	5.982	1	0.857	1.546	0.689	文献[35]
^{180}Hg	6.259	0	0.732	0.641	0.091	文献[34]
^{190}At	7.917	2	-3.000	-2.122	0.878	文献[36]
^{196}Rn	7.620	0	-2.330	-2.179	0.151	文献[37]
^{198}Rn	7.350	0	-1.180	-1.217	0.037	文献[37]
^{200}Rn	7.040	0	0.070	-0.029	0.041	文献[37]
^{203}Ac	8.217	1	-4.252	-2.360	1.892	文献[38]
^{204}Ac	7.957	2	-1.936	-1.341	0.595	文献[38]
^{204}Ra	7.640	0	-1.220	-1.355	0.135	文献[37]
^{206}Ra	7.420	0	-0.620	-0.567	0.053	文献[37]
^{207}Th	7.790	1	-2.010	-0.837	1.173	文献[39]
^{208}Ra	7.270	0	0.100	-0.015	0.155	文献[37]

For Review Only

^{210}Pa	8.284	2	-2.222	-1.504	0.718	文献[40]
^{210}Th	8.070	0	-1.800	-1.937	0.137	文献[37]
^{212}Th	7.960	0	-1.500	-1.492	0.008	文献[37]
^{214}Ra	7.266	0	0.281	0.195	0.086	文献[41]
^{214}U	8.533	0	-3.284	-2.463	0.821	文献[42]
^{218}Th	9.878	0	-6.810	-6.851	0.041	文献[41]
^{219}Th	9.339	1	-5.979	-4.853	1.126	文献[41]
^{220}Pa	9.542	2	-6.081	-5.037	1.044	文献[41]
^{222}U	9.416	0	-5.398	-5.168	0.230	文献[41]
^{227}Pu	8.338	1	-0.108	-1.113	1.005	文献[43]
^{246}Cf	6.860	0	5.110	5.190	0.080	文献[37]
^{248}Cf	6.360	0	7.560	7.529	0.031	文献[37]
^{248}Fm	7.990	0	1.660	1.735	0.075	文献[37]
^{250}Fm	7.560	0	3.380	3.412	0.032	文献[37]
^{254}No	8.230	0	1.820	1.913	0.093	文献[37]
^{256}No	8.580	0	0.530	0.645	0.115	文献[37]
^{260}Sg	9.900	0	-2.040	-1.892	0.148	文献[37]
^{266}Hs	10.350	0	-2.410	-2.357	0.053	文献[37]

从预测偏差来看，模型表现出显著的核素类型依赖性，与我们之前的训练集后验预测规律一致：偶偶核预测精度最优，除去 ^{172}Os 与 ^{214}U 核预测偏差为 0.698、0.821，其他的半衰期预测偏差最大也仅 0.23，接近实验测量精度，即使对于高衰变能的 Sg 或 Hs 核，预测偏差仍控制在 0.2 以内，表明模型对稳定结构的偶偶核，具备较好的外推预测能力。而我们发现，奇 A 核与奇奇核预测偏差显著高于偶偶核，预测偏差在 0.5 甚至 1.0 以上，尤其是核素 ^{203}Ac 半衰期预测偏差达 1.892。该结果进一步验证了我们之前的结论——模型对含未配对核子的核素刻画仍存在不足，NUDL 公式未涵盖的微观壳效应在新观测数据中依然是误差的重要来源，GP 虽能捕捉部分非线性残差，但对奇核子核素的精细物理机制表征仍需强化。此外，验证集中高衰变能核素的预测偏差未出现明显增大，模型在高能衰变区间的稳定性良好，这对核素存在极限探索中高衰变能新核素的半衰期估算具有重要物理意义。

4 结论

本研究将贝叶斯推断框架与高斯过程相结合，有效地改善了传统基于最小二乘法拟合的 NUDL 公式在α衰变半衰期预测中的局限性。这一新型分析框架，通过贝叶斯推断方法不仅实现了对参数较为精准的估计与不确定性的量化，也为模型稳健性提供了概率化依据；同时引入基于径向基函数 RBF 核的 GP 过程，有效捕捉了 NUDL 公式未显式建模的核壳层修

For Review Only

正、核形变等微观壳效应主导的系统性误差，使得公式自身的误差具有了更清晰的物理内涵。实验结果表明，该融合模型对α衰变半衰期的预测精度较好，尤其是对偶偶核的预测；基于近五年新观测核素的独立验证也证实了模型良好的稳定性，同时提示模型对奇A核与奇奇核的描述仍有进一步优化的空间。本研究为α衰变半衰期的预测及新核素鉴定提供了新的分析视角与参考，也为核物理研究中物理模型与数据驱动方法的融合积累了实践基础。

参考文献

1 B. Buck, A. C. Merchant, and S. M. Perez, Phys. Rev. C 45, 2247 (1992).
2 L. L. Li, S. G. Zhou, E. G. Zhao et al. Int. J. Mod. Phys. E 19, 359 (2010).
3 J. G. Deng, J. C. Zhao, D. Xiang et al. Phys. Rev. C 96, 024318 (2017).
4 X. D. Sun, J. G. Deng, D. Xiang et al. Phys. Rev. C 95, 044303 (2017).
5 A. M. Nurmukhamedov, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 81, 162 (2018).
6 Y. Qian and Z. Ren, Phys. Lett. B 738, 87 (2014).
7 G. Royer, J. Phys. G 26, 1149 (2000).
8 G. Royer and B. Remaud, Nucl. Phys. A 444, 477 (1985).
9 G. Royer, Nucl. Phys. A 848, 279 (2010).
10 D. M. Joseph, N. Ashok, and A. Joseph, Eur. Phys. J. A 54, 8 (2018).
11 X. D. Sun, P. Guo, and X. H. Li, Phys. Rev. C 93, 034316 (2016).
12 J. M. Dong, W. Zuo, J. Z. Gu et al. Phys. Rev. C 81, 064309 (2010).
13 C. Xu and Z. Z. Ren, Phys. Rev. C 74, 014304 (2006).
14 V. E. Viola and G. T. Seaborg, J. Inorg. Nucl. Chem. 28, 741 (1966).
15 Y. J. Ren and Z. Z. Ren, Phys. Rev. C 85, 044608 (2012).
16 B. A. Brown, Phys. Rev. C 46, 811 (1992).
17 C. Qi, F. R. Xu, R. J. Liotta et al. Phys. Rev. Lett. 103, 072501 (2009).
18 J. G. Deng, H. F. Zhang, G. Royer, Phys. Rev. C 101, 034307 (2020).
19 V. Y. Denisov, A. A. Khudenko, Phys. Rev. C 79, 054614 (2009).
20 D. N. Poenaru, D. T. Akrawy, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 44, 105105 (2017).
21 D. T. Akrawy, A. H. Ahmed, Int. J. Mod. Phys. E 27, 1850068 (2018).
22 E. Shin, Y. Lim, C. H. Hyun et al. Phys. Rev. C 94, 024320 (2016).
23 J. M. Dong, H. F. Zhang, Y. Z. Wang et al. Nucl. Phys. A 832, 198 (2010).
24 Z. Y. Wang, Z. M. Niu, Q. Liu et al. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 42, 055112 (2015).
25 D. T. Akrawy, H. Hassanabadi, Y. Qian et al. Nucl. Phys. A 983, 310 (2019).
26 D. T. Akrawy, A. H. Ahmed, Phys. Rev. C 100, 044618 (2019).
27 Y. B. Qian, Z. Z. Ren, Phys. Rev. C 85, 027306 (2012).
28 T. L. Zhao et al. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 45, 025106 (2018).
29 C. Qi, F. R. Xu, R. J. Liotta et al. Phys. Rev. Lett. 103, 072501 (2009).
30 D. D. Ni, Z. Z. Ren, T. K. Dong et al. Phys. Rev. C 78, 044301 (2008).
31 F. G. Kondev, M. Wang, W. J. Huang, Chin. Phys. C 45, 030001 (2021).
32 W. J. Huang et al. Chin. Phys. C 45, 030002 (2021).
33 H. Q. You, X. T. He, R. H. Wu et al. Nucl. Sci. Tech. 36, 191 (2025).
34 J. G. Cubiss, R. D. Harding, A. N. Andreyev et al. Phys. Rev. C 101, 014314 (2020).
35 R. D. Harding, A. N. Andreyev, A. E. Barzakh et al. Phys. Rev. C 104, 024326 (2021).
36 H. Kokkonen, K. Auranen, J. Uusitalo et al. Phys. Rev. C 107, 064312 (2023).
37 M. Li, C. Chen, L. Xiao et al. Nucl. Sci. Tech. 36, 166 (2025).
38 J. G. Wang, Z. G. Gan, Z. Y. Zhang et al. Phys. Lett. B 850, 138503 (2024).

For Review Only

39 P. Rajeev, K. Prathapan, T. P. Suresh, Proc. DAE Symp. Nucl. Phys. 68, 489 (2024).
40 M. M. Zhang, J. G. Wang, L. Ma et al. Nat. Commun. 16, 5003 (2025).
41 H. Y. Lu, Z. Liu, Z. H. Li et al. Phys. Rev. C 108, 014302 (2023).
42 T. M. Oshua, N. Jain, R. Kumar et al. Foundations 2, 85 (2022).
43 H. B. Yang, Z. G. Gan, Z. Y. Zhang et al. Phys. Rev. C 110, 044302 (2024).

Bayesian Inference Based on Gaussian Process for Studying the α-Decay Half-Life of Atomic Nuclei

Haijun Chen[1], Wenhao Huang[1], Haowen Sheng[1], Tianliang Zhao[2*], Xiaojun Bao[2*]

1.School of Digital Media Engineering and Humanities, Hunan University of Technology and Business, Changsha 410205, China;

2.College of Physics and Electronic Sciences, Hunan Normal University, Changsha 410081, China;

Alpha decay is one of the key decay modes of heavy and superheavy nuclides. Existing α-decay formulas with parameters fitted by the least squares method usually simplify model errors to random perturbations and fail to quantify the uncertainty of model parameters. Aiming at addressing the aforementioned limitations, this study integrates Bayesian inference with Gaussian processes to construct a novel analytical framework, which ultimately achieves the uncertainty quantification of parameters in the Novel Universal Decay Law (NUDL) formula and reveals that the microscopic shell effect not incorporated in the formula constitutes the dominant systematic error. In addition, through sensitivity analysis and feature importance analysis, we further quantify the parameter sensitivity and feature contribution: the scaling factor a for the barrier penetration probability is the most sensitive to the half-life prediction; the nuclear mass number is the core characteristic influencing the microscopic effect, with the nuclear charge number being the secondary one, and this effect exerts the most prominent contribution to the half-life prediction errors of even-even nuclei. The overall root mean square error (RMSE) of the model is 0.375, with the minimum RMSE of merely 0.186 for even-even nuclei, while the prediction accuracy for odd-A and odd-odd nuclei is slightly lower. Moreover, the generalization capability of the model is verified using the α-decay data of newly observed nuclides over the past five years. This integrated model significantly mitigates the limitations of the NUDL formula in the quantification of parameter uncertainty and the characterization of systematic errors. It not only provides an optimized prediction tool and reference for the identification of new nuclides, but also offers a referential methodological approach for the integrated application of physical models and data-driven methods.

Bayesian Inference, Gaussian Process, Novel Universal Decay Law (NUDL), Microscopic Shell Effect

PACS: 21.10.Tg,02.50.Cw,02.70.Bf

For Review Only