

# 采用厚靶法测量4~9 keV正电子碰撞Al的K壳层电离截面的神经网络反演方法

黄楚君

华北电力大学核科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年4月9日; 录用日期: 2026年4月20日; 发布日期: 2026年7月6日

## 摘要

低能正负电子致原子内壳层电离截面数据对于探究阈能附近正负电子与原子的相互作用机制具有重要意义。由厚靶产额求解原子内壳层电离截面的问题是一类不适定的反问题, 常见的正则化方法、微分产额法求解结果精度和稳定性不佳。本文构建了卷积神经网络模型, 基于已有文献测量的4~9 keV正电子致厚Al靶K壳层特征X射线实验产额, 利用蒙特卡洛程序PENELOPE模拟构建产额-截面数据集并进行训练, 反演得到与实验特征X射线产额对应的实验电离截面, 以解决该类问题的不适定。将反演得到的截面结果与DWBA理论模型及已发表文献采用产额微分法得到的实验截面进行比较, 同时结合神经网络结构对神经网络算法的可靠性进行评估, 验证神经网络算法在处理正电子碰撞原子内壳层电离数据的适用性。结果表明, MC-神经网络方法处理得到的实验截面与DWBA理论模型一致性较好。研究结果表明, MC-神经网络法在Al的K壳层电离截面反问题求解中具有良好的准确性和稳定性; 该方法提供了与DWBA理论高度自洽的实验截面数据, 并验证了该MC-神经网络反演框架的有效性, 但其反演性能与DWBA理论模型高度相关, 存在一定的局限性。

## 关键词

神经网络, 厚靶法, 电离截面, 特征X射线产额

## Neural Network Inversion Approaches for Measuring the K-Shell Ionization Cross Sections of Al in the Energy Range of 4~9 keV Using the Thick Target Method

Chujun Huang

School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

## Abstract

The cross-section data of inner-shell ionization of atoms by low-energy positrons and electrons is of great significance for exploring the interaction mechanism between positrons and electrons and atoms near the threshold energy. The problem of solving the inner-shell ionization cross-section of atoms from the thick-target yield is an ill-posed inverse problem. The common regularization methods and differential yield method have poor accuracy and stability in the solution. In this paper, a convolutional neural network model is constructed. Based on the experimental yields of K-shell characteristic X-rays of thick Al targets induced by positrons of 4~9 keV measured in a published literature, a yield-cross-section dataset is constructed and trained by the Monte Carlo program PE-NELOPE. The experimental ionization cross-section corresponding to the experimental characteristic X-ray yield is obtained by inversion to solve the ill-posedness of this type of problem. The obtained cross-section results are compared with the DWBA theoretical model and the experimental cross-sections obtained by the yield differential method in the published literature. At the same time, the reliability of the neural network algorithm is evaluated by combining the neural network structure, and the applicability of the neural network algorithm in processing positron collision with atomic inner-shell ionization data is verified. The results show that the experimental cross-sections obtained by the MC-neural network method are in good agreement with the DWBA theoretical model. The research results show that the MC-neural network method has good accuracy and stability in solving the inverse problem of the K-shell ionization cross-section of Al. This method provides experimental cross-section data highly consistent with the DWBA theory and validates the effectiveness of the MC-neural network inversion framework, but its inversion performance is highly dependent on the DWBA theoretical model, which implies certain limitations.

## Keywords

Neural Network, Thick Target, Ionization Cross Sections, Characteristic X-Ray Yield

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

对正负电子与物质作用机制的研究是原子碰撞物理中的基本问题，获得准确的正负电子碰撞原子内壳层电离截面实验数据为深入理解电子与原子相互作用的机制提供了实验依据，有助于提高物理模型的准确性，并推动 X 射线分析、材料科学及医学成像等领域的发展，提高了相关技术的应用精度和效率。常见模型有 Gryzinski 理论模型[1] [2]，PWBA 理论模型[3]和 DWBA 理论模型[4]。在已有实验数据验证的基础上，DWBA 理论模型是各理论模型中相对更受认可的[5]。但理论模型的准确性还需要更多可靠的实验数据进行验证。

在测量正负电子致电离截面实验中，根据靶材料的厚度主要分为薄靶法和厚靶法。其中，厚靶的判断标准是靶的厚度大于入射电子的最大射程，薄靶的判断标准是入射电子穿过靶膜的能损比低于 1%。电离截面可通过多种实验观测量反演或换算得到，包括测量实验中收集到的交叉束离子产额[6]、测量电子能量损失、测量俄歇电子产额和测量特征 X 射线产额，其中测量特征 X 射线产额法应用最为广泛。

在正电子致原子内壳层电离截面的测量中, 由于正电子的湮灭效应, 正电子束流通常较弱, 使用薄靶方法可能难以收集到足够满足统计性要求的特征 X 射线, 会影响实验结果的可靠性, 因此在开展正电子致电离截面的实验研究中常采用厚靶方法。厚靶方法能够解决某些化学性质活泼元素难以制备薄靶的问题, 且厚靶法求解实验电离截面值不涉及靶膜质量厚度的测量, 避免了膜厚测量不确定度的引入。由厚靶特征 X 射线产额反演原子内壳层电离截面是一类典型的不适定反问题[7]。这类问题的核心特征在于不满足解的稳定性, 部分情况下还存在解的非唯一性, 具体体现为: 产额的微小误差, 可能导致反演得到的特征 X 射线产生截面与真实值显著偏离, 甚至存在不同截面对应相同产额的情况。由厚靶产额求解原子内壳层电离截面的方法主要有: 比值法[8]、产额微分法[9]-[11]和 Tikhonov 正则化方法[9][12], 但使用这几种常用传统方法处理厚靶产额反演截面这一不适定反问题在精度和稳定性方面存在局限。其中产额微分法计算过程简单直观, 但微分操作会放大产额的噪声, 不仅对数据的平滑度有较高要求, 还容易导致反演结果稳定性较差, 不能从根本上解决逆问题求解。神经网络具有较强的特征学习能力和非线性拟合能力, 可以通过多层的神经元网络提取输入数据的复杂特征, 模拟其中映射关系并进行预测。神经网络的非线性建模能力能更有效地实现不适定性反问题的精准求解, 因此本文使用神经网络方法[13], 基于文献[14][15]测得并处理得到的 4~9 keV 厚 Al 靶实验产额, 以及文献[16]使用 PENELOPE 程序模拟得到的蒙卡产额 - 截面数据集, 构建并训练神经网络模型, 进而反演得到实验产额对应的电离截面, 将结果与 DWBA 理论模型和文献[14]微分产额法电离截面进行比较与分析。

本文结构如下: 第二部分介绍实验和实验产额的获取与修正, 第三部分介绍神经网络处理方法, 第四部分对神经网络训练结果进行展示和分析, 最后在第五部分中得出结论。

## 2. 实验

4~9 keV 正电子碰撞厚 Al 靶的实验在中科院高能物理研究所的慢正电子束流装置上完成, 实验示意图如图 1 所示。下面简要概述实验装置及流程[12][17]。正电子由活度为 50 mCi 的  $^{22}\text{Na}$  源产生, 经过固态氦慢化后形成低能正电子, 再在负高压的电场中加速至所需能量, 并与相对于束流方向呈  $45^\circ$  放置的厚 Al 靶发生碰撞, 靶室内施加 0.02T 的磁场以聚焦正电子束流。碰撞产生的 X 射线由放置在靶材正上方的硅漂移(SDD) X 射线能谱仪收集。HPGe 探测器置于靶室外, 垂直于靶材法线方向放置, 用于收集伴随产生的湮灭光子, 以在线检测与靶碰撞的入射正电子数。

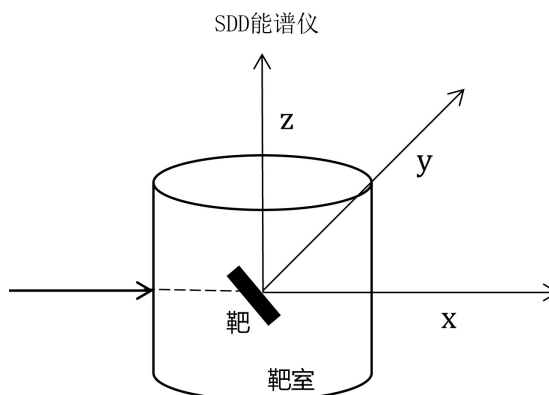


Figure 1. Experimental setup schematic  
图 1. 实验装置示意图

实验测得的特征 X 射线产额可由式(1)计算:

$$Y_e + (E_0) = \frac{N_x(E_0)}{N_e + (E_0)\varepsilon(E)} \quad (1)$$

公式(1)中  $E_0$  表示入射正电子初始能量,  $E$  表示 Al 的 K 壳层特征 X 射线能量,  $N_x(E_0)$  表示探测器收集到的特征 X 射线净计数,  $N_e + (E_0)$  表示入射正电子数,  $\varepsilon(E)$  表示 SDD 能谱仪在 Al 的 K 壳层特征 X 射线能量处的绝对探测效率。

其中特征峰净计数的读取借助谱平滑程序[14], 该程序可以减小本底对于特征峰净计数提取的影响, 提高读数精度。SDD 能谱仪的效率刻度的工作由文献[18]通过实验能谱与模拟能谱的比值并结合标准放射源的全能峰探测效率完成。

在实验中, 靶室内施加负高压电磁场, 入射正电子可能被反射并再次与靶发生碰撞, 产生额外的特征 X 射线, 因此需要对特征 X 射线的产额进行修正, 靶室的电磁场校正因子 K 的计算基于 Geant4 对实验过程的逼真模拟, 通过计算有无电磁场作用下特征 X 射线产额来获得, 具体方法详见参考文献[15], 我们注意到, 文献[14]的 4~9 keV 正电子碰撞厚 Al 靶实验产额忽略了靶室电磁场的修正, 本文对文献[14]的实验产额做考虑电磁场影响修正后, 得到的实验产额见表 1。

**Table 1.** Experimental yield correction

**表 1.** 实验产额修正

入射能量 E (keV)	未修正产额	K 因子	修正后实验产额
4	1.27E-04	0.08	1.17E-04
4.5	2.12E-04	0.07	1.97E-04
5	3.07E-04	0.07	2.86E-04
6	5.74E-04	0.08	5.29E-04
7	8.74E-04	0.09	7.95E-04
8	1.24E-03	0.10	1.11E-03
9	1.61E-03	0.06	1.52E-03

### 3. 神经网络处理方法

#### 3.1. 蒙特卡洛方法

##### 3.1.1. PENELOPE 软件

蒙特卡洛方法(Monte Carlo, MC)是一种基于概率统计理论的数值计算方法, 在处理正负电子——原子碰撞过程模拟时具有明显优势。基于蒙特卡洛方法设计出的 PENELOPE 程序由 F.Salvat 等人开发, 可用于模拟从 eV 到 GeV 级别的电子、正电子和光子的输运过程, 包含电子-正电子散射、光子相互作用、二次电子的产生等物理过程, 广泛应用于辐射物理、医学成像、材料分析和高能物理等领域。在电子和正电子的输运过程中, 它们会经历大量的散射事件, 包括弹性散射和非弹性散射。PENELOPE 采用了详细模拟和压缩模拟相结合的混合模拟方法, 在不同能量范围和散射角度条件下选择不同的模拟策略。当模拟粒子与物质发生相互作用发生大角度散射时, 采用详细模拟法, 进行逐步跟踪, 精准计算碰撞过程; 当发生小角度散射时, 采用压缩 MC 模拟法, 把粒子在给定步长内与物质发生的各种相互作用看作整体效应, 进行近似模拟。该混合模拟方法的优势在于: 对大角度散射进行详细模拟保证了计算结果的精确性, 对小角度散射的压缩模拟能提高计算效率。此外, PENELOPE 程序所用的数据库几乎是最新的, 材料数据的电离截面是基于 DWBA 理论模型得到的。本工作选择 PENELOPE 软件(2008 版)模拟来搭建正

电子碰撞厚 Al 靶 K 壳层的 MC-神经网络的数据集。

### 3.1.2. 蒙特卡洛数据集的构建

构建 MC 数据集及求解截面的具体步骤可见文献[11]。首先完成 DWBA 库电离截面计算与替换，得到具有所需的不同能量点下正电子致 Al 原子电离截面数据的靶材料文件。由于材料数据库中每种元素的任意能量点下的正电子致原子内壳层理论电离截面值是固定的，模拟得到的产额也是固定的，导致数据集中只存在一组具有映射关系的 MC 模拟产额和电离截面值，训练集的数据量过小，神经网络训练难以进行。为扩充训练样本，本文在 PENELOPE 材料文件中对正电子致电离截面数据引入独立随机扰动，乘以(0, 1)区间内任意值，随机生成 100 组互不相同的正电子致原子内壳层理论电离截面材料文件，扩大训练集的同时保证模拟所用库截面数据具有充分的随机性。在 PENELOPE 输入文件中设置靶的入射电子能量、入射粒子数量和种类等相关参数，为保证模拟数据具有好的统计性，将入射粒子数均设置在  $4E8$  以上，模拟得到该能量点下 100 组材料文件对应的 100 组特征 X 射线净计数，根据公式计算产额，得到 MC 模拟产额数据集，再编写程序读取该能量点下的电离截面值作为截面数据集，得到该能量点下具有映射关系的 100 组 MC 产额 - 截面数据集。在相同随机扰动下多次改变入射能量进行模拟，即可得到由具有映射关系的产额数据集和截面数据集共同组成的正电子碰撞厚 Al 靶的 MC-神经网络法数据集。

### 3.2. 神经网络的模型与参数

鉴于神经网络较强的非线性拟合能力，本文选择搭建神经网络完成对厚靶实验数据的处理。常见的神经网络模型有全连接神经网络(Fully Connected Neural Network, FCNN)，循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)，卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)等。本文的数据集是由“MC 产额 - 截面”搭建的一维序列，全连接神经网络忽略序列局部相关性且易过拟合，循环神经网络训练效率低且容易梯度消失，卷积神经网络能够有效捕捉截面数据的局部相关性，通过权值共享减少参数量、抑制过拟合，并以分层方式自动提取产额与截面的物理关联特征，在训练速度、拟合精度与泛化能力上均表现最优，所以本文采用卷积神经网络构建 MC 产额 - 截面映射模型，将模拟得到的 MC 产额 - 截面作为数据集，用神经网络进行训练，拟合其中的映射关系，得到实验产额对应的截面数据，并将实验截面与基于 DWBA 库的 PENELOPE 理论截面值及微分产额法电离截面[14]相比较。由于数据集中产额和理论截面值都是一维序列的形式，所以本文采用一维卷积神经网络进行建模，对数据集进行训练。在卷积过程中设置适当的填充可以避免边缘区域数据信息的损失，并保持卷积操作的输入和输出维度大小一致，当卷积步长(Stride)设定为 1 时，为保持特征维度一致，填充宽度(Padding)与卷积核尺寸(Kernel\_size)需满足式(2)：

$$Padding = (Kernel\_size - 1) / 2 \quad (2)$$

激活层引入非线性因素，将卷积层加权求和的线性输出，通过某种非线性激活函数转换，生成输出信号。本工作选择目前最常用的 ReLU 激活函数，它简单且计算效率高，能够有效抑制梯度消失，在提高训练效率的同时加速模型收敛，并缓解过拟合现象。ReLU 函数的定义如下式(3)：

$$ReLU(x) = \max(0, x) \quad (3)$$

在神经网络的训练过程中，为了确保模型具有良好的泛化能力和准确性，将 100 组数据集随机划分为训练集、验证集和测试集，划分比例为 85:10:5。神经网络将训练集喂给模型学习，调整网络参数；验证集负责训练中调优超参数，监控过拟合；测试集用于训练结束后一次性评估最终效果。MC-神经网络的神经网络结构及相关参数见表 2。本文的数据集较小，BN 层的 momentum 均设置为 0.5，较大的 momentum 有助于训练稳定性。全连接层先将 7 维输入升维到 32 维，再映射到 11 维，为卷积层提供更

丰富的特征。卷积核大小设置为 3，既能捕捉局部相邻关系，又不会像  $\text{kernel} = 5$  或 7 那样感受野过大、参数利用率低。

**Table 2.** Architecture and parameters of the MC-neural network

**表 2.** MC-神经网络的结构及参数

层类型	输入通道	输出通道	卷积核大小	卷积步长	填充
全连接层	输入神经元: 7	输出神经元: 11			
批归一化(BN 层)	1	1	-	-	-
卷积层 1	1	8	3	1	1
批归一化(BN 层)	8	8	-	-	-
卷积层 2	8	16	3	1	1
批归一化(BN 层)	16	16	-	-	-
卷积层 3	16	1	3	1	1

神经网络的超参数设置见表 3，该神经网络使用 Adam 自适应优化器，相比 SDG 随机梯度下降优化器，Adam 自适应优化器融合动量法与 RMSprop 优势，为每个参数自适应调整学习率，收敛速度远快于 SGD 且无需精细手动调参。同时兼具一阶矩梯度平滑特性，训练稳定性高，对本工作中小样本场景的鲁棒性更强。每 10 轮打印一次训练和验证损失、学习率，用于监控训练过程，避免日志冗余。最大迭代次数设置为 1000，设置得足够大，让早停机制( $\text{patience} = 50$ )来决定真正的训练终点，达到最好的泛化能力并防止过拟合。早停最小轮数设置为 80 保证模型先完成基础训练，避免初始阶段波动导致误停。本工作中学习率设置为  $\text{lr} = 0.005$ ，步长适中偏小，保证模型训练过程平稳收敛，避免梯度震荡。同时采用  $\text{weight\_decay} = 1\text{E}-3$  的轻量级权重衰减，有效约束模型参数规模，提升泛化能力并防止过拟合。训练和验证批次均设置为 20，兼顾训练效率与梯度稳定性，测试批次大小设置为 1，逐样本预测，可视化对比真实值与预测值。训练完成的神经网络得到了数据集中模拟产额和理论截面的映射关系，再将各能量点对应的实验产额依次输入训练完成的网络中，通过映射关系可以得到对应的神经网络实验截面值。

**Table 3.** Neural network hyperparameter settings

**表 3.** 神经网络超参数设置

超参数名	设置
log_interval	10
n_epochs	1000
min_epoch	80
patience	50
learning_rate	0.005
weight_decay	1E-3
batch_size_train	20
batch_size_test	1

### 3.3. 神经网络算法评估

本文通过展示并分析神经网络算法的 `train_loss`，测试集结果和训练数据集规模的敏感性对神经网络算法进行评估，以证明神经网络算法的可靠性。

本次神经网络模型训练损失曲线共涵盖 188 轮迭代，整体呈快速下降 - 平缓收敛 - 稳定波动的理想趋势，无震荡、回升等异常，收敛效果优异。曲线从初始 103.089455 逐步下降至最终 0.883676，损失降幅达 99.14%，最小损失 0.867461 出现在第 174 轮，与最终损失差值仅 0.016215，证明模型拟合能力强且无过拟合。前 18 轮快速下降，模型高效捕捉核心特征；19~174 轮平缓收敛，损失以微小步长精细调参，下降斜率逐渐趋近于 0；175~188 轮进入稳定波动阶段，损失在 0.8~1.0 区间内小幅震荡，变异系数低，梯度变化平稳。整体曲线拐点清晰、过渡自然，训练过程高效稳定，模型参数适用优秀。

本文通过平均相对误差 MRE (Mean Relative Error) 以分析测试集结果及评估神经网络性能。MRE 直观反映预测值与真实值的平均相对偏差，可以消除原始数据量纲和数值范围影响，使误差具有可比性，MRE 的计算见式(4)。本文展示 MC-神经网络 5 组测试集中随机 1 组具体对比数据与 5 组测试集的 MRE 于表 4。

$$\text{MRE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| / y_i \quad (4)$$

其中， $n$  为测试集样本数量； $y_i$  为第  $i$  个样本的真实值； $\hat{y}_i$  为第  $i$  个样本的神经网络预测值。

**Table 4.** Test results comparison and display

**表 4.** 测试集数据对比与展示

入射能量 E(keV)	真实电离截面(barn)	预测电离截面(barn)	相对偏差	总 MRE
4	7035.92	7815.04	11.07%	7.6%
4.5	10225.80	9409.06	7.99%	8.5%
5	11342.00	10870.32	4.16%	4.7%
6	12895.90	12699.21	1.53%	5.5%
7	13273.30	13572.39	2.25%	4.7%
8	12880.40	12634.79	1.91%	7.9%
9	10861.30	12247.29	12.76%	11.7%

由表可知，实验能量点下 MRE 在 4%至 13%，分布均匀且均在 13%内，说明数据精度优秀且无极端偏差。平均 MRE 为 7.26%，说明神经网络模型相对误差控制较好，预测精度可靠，泛化能力优秀。MRE 变化趋势高度一致，说明误差分布均匀，网络模型对不同入射能量的电离截面预测结果均衡。结果表明，该神经网络模型不仅平均相对误差控制优异，且标准化波动偏差小，泛化能力与稳定性较好，可以通过 MC-神经网络得到 4~9 keV 正电子致厚靶 Al 的 K 壳层特征 X 射线实验产额对应的可靠的电离截面。

为验证模型对训练数据规模的敏感程度，保持网络结构与超参数不变，验证集与测试集固定，以不同比例划分训练集，对比模型在不同训练规模下的预测精度。分别采用 20 组、30 组、50 组和 80 组训练样本进行对比实验，结果见表 5。

**Table 5.** Comparison of indicators under different training dataset sizes**表 5.** 不同训练集规模下指标对比

训练集规模	训练轮次	初始损失	最终损失	训练后期损失标准差
20	245	107.11	0.57	0.0088
30	133	101.70	0.71	0.0399
50	248	99.92	0.72	0.0392
80	280	98.56	0.91	0.0197

由实验结果可知，模型对训练集规模的敏感性呈现阶段性差异：在训练集规模为 20~30 组的小样本区间，模型敏感性显著，表现为训练轮次从 245 轮骤降至 133 轮，降幅达到 45.7%，且最终损失升幅达到 25.3%，反映出少量样本下改变模型收敛慢且波动偏大；当训练集规模增至 50 条后，敏感性显著降低，模型已初步具备稳定学习能力；当规模达到 80 条全量样本时，模型敏感性进一步减弱，尽管最终损失略有上升，但训练后期损失标准差降至 0.0197，证明充足样本量可有效抑制训练波动，提升模型泛化稳定性。综合而言，该卷积神经网络模型对训练集规模的敏感性随样本量增加呈递减趋势，在训练集规模达到 50 条后敏感性显著降低，80 条全量样本时可实现稳定收敛，性能提升不再显著。

#### 4. 结果展示与分析

实验产额不确定度主要来源于峰净计数误差(约 2%)、X 能谱仪的探测效率误差(约 8%) [12]以及入射电子计数误差(约 5%) [12]，将这些实验误差的平方根之和开根号后得到实验产额误差(约 10%)。实验截面误差由实验产额误差和神经网络算法误差的平方和开根号得到。

本文采用 MC-神经网络方法处理 4~9 keV 正电子致厚靶 Al 的 K 壳层特征 X 射线实验产额数据得到对应的实验电离截面结果见表 6。

**Table 6.** Prediction of ionization cross sections using neural networks**表 6.** 神经网络预测实验电离截面

入射能量(keV)	实验电离截面(barn)	截面总误差
4	7772.69 ± 1042	13.41%
4.5	9121.12 ± 1079	11.83%
5	10344.30 ± 1242	12.01%
6	11673.22 ± 1295	11.10%
7	12699.81 ± 1364	10.74%
8	12184.43 ± 1536	11.13%
9	12191.11 ± 1392	11.42%

在图 2 中，将截面结果与 DWBA 理论模型和文献微分产额法电离截面[14]相比较。由表 6 和图 2 可知，MC-神经网络法得到的截面误差在 11%左右，在 4~9 keV 能量区间内，反演得到的截面随能量增加呈现先快速上升后趋于平缓的趋势，这与 DWBA 理论预测值特征高度契合。图 3 中同时列出了文献微分产额法[14]电离截面，可见在实验选取的能量范围内，MC-神经网络方法得到的截面结果具有更好的稳定性和准确性。图 2 中同时对比了 DWBA 理论电离截面曲线，由图可知，神经网络法得到的截面结果与

DWBA 预测截面在实验误差允许范围内符合较好, 表明 MC-神经网络反演框架能够得到与 DWBA 理论高度自洽的实验截面数据, 并验证了该 MC-神经网络反演框架的有效性。但由于神经网络数据集的搭建基于 PENELOPE 模拟, 其反演性能与 DWBA 理论模型高度相关, 所以本 MC-神经网络反演框架是一种模型驱动、泛化稳定的数据反演工具, 不具备独立发现新物理规律的能力, 具有一定的局限性。

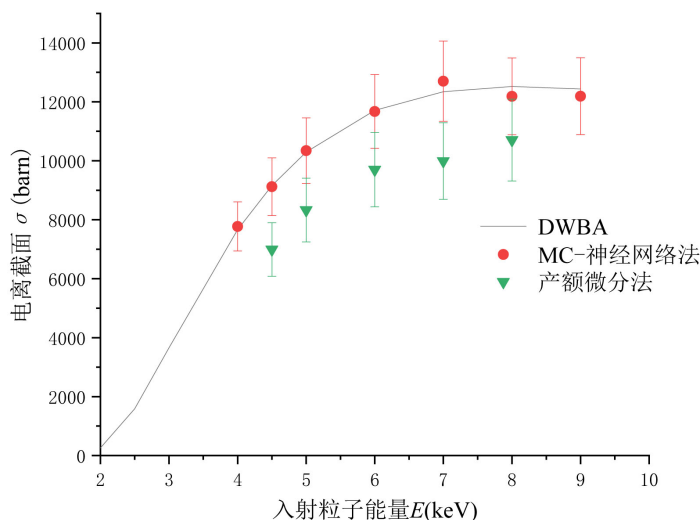


Figure 2. Results of the neural network  
图 2. 神经网络算法结果

## 5. 结论

本文使用神经网络算法对由蒙卡模拟得到的 9 keV 内正电子致 Al 的 K 壳层产额 - 电离截面进行处理, 得到各个能量点下实验产额对应的反演电离截面值, 并分析神经网络结构以证明神经网络算法的可靠性。将结果与 DWBA 模型与文献中微分产额法电离截面进行比较, 发现在实验误差允许范围内, 神经网络法得到的实验截面具有很好的稳定性和准确性, 并与 DWBA 理论结果进行了比较, 结果表明两者在实验误差范围内一致性较好。研究表明, 神经网络方法能够有效学习特征 X 射线产额与电离截面之间的映射关系, 提供与 DWBA 理论高度符合的实验截面数据, 验证了该 MC-神经网络反演框架的有效性。但由于神经网络反演性能与 DWBA 理论模型高度相关, 所以本 MC-神经网络反演框架只能作为数据反演工具, 存在一定的局限性。

## 参考文献

- [1] Gryziński, M. (1965) Two-Particle Collisions. II. Coulomb Collisions in the Laboratory System of Coordinates. *Physical Review*, **138**, A322. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A322>
- [2] Gryziński, M. (1965) Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions. *Physical Review*, **138**, A336. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A336>
- [3] Hippler, R. (1990) Plane Wave Born Calculations of K-Shell Ionization at Low Velocities. *Physics Letters A*, **144**, 81-85. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90828-C](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90828-C)
- [4] Bote, D. and Salvat, F. (2008) Calculations of Inner-Shell Ionization by Electron Impact with the Distorted-Wave and Plane-Wave Born Approximations. *Physical Review A*, **77**, Article 042701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.042701>
- [5] Llovet, X., Powell, C.J., Salvat, F., et al. (2014) Cross Sections for Inner-Shell Ionization by Electron Impact. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **43**, Article 013102. <https://doi.org/10.1063/1.4832851>
- [6] Schram, B.L., Boerboom, A.J.H. and Kistemaker, J. (1966) Partial Ionization Cross Sections of Noble Gases for Electrons

- with Energy 0.5-16 keV. I. Helium and Neon. *Physica*, **32**, 185-196.  
[https://doi.org/10.1016/0031-8914\(66\)90115-7](https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90115-7)
- [7] Arridge, S., Maass, P., Öktem, O., *et al.* (2019) Solving Inverse Problems Using Data-Driven Models. *Acta Numerica*, **28**, 1-174. <https://doi.org/10.1017/S0962492919000059>
- [8] Li, Y.H., An, Z., Zhu, J.J., *et al.* (2020) Characteristic X-Ray Yields and Cross Sections of Thick Targets of Al, Ti, Zr, W and Au Induced by keV-Electron Impact. *Acta Physica Sinica*, **69**, Article 133401.  
<https://doi.org/10.7498/aps.69.20200264>
- [9] An, Z. and Hou, Q. (2008) Inverse Problem in the Thick-Target Method of Measurements of Inner-Shell Ionization Cross Sections by Electron or Positron Impact. *Physical Review A*, **77**, Article 042702.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.042702>
- [10] An, Z., Wu, Y., Liu, M.T., *et al.* (2006) Thick-Target Method in the Measurement of Inner-Shell Ionization Cross-Sections by Low-Energy Electron Impact. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **246**, 281-287.  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.12.051>
- [11] Li, Y.D., Wu, Y., Huang, C.J., *et al.* (2023) Neural Network-Based Algorithm for the Inverse Problem of Measuring K-Shell Ionization Cross-Sections of Si Induced by 3-25 keV Electrons and 4.5-9 keV Positrons Using the Thick-Target Method. *Europhysics Letters*, **143**, Article 65003. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/acf60b>
- [12] Wu, Y., Liang, Y., Xu, M.X., *et al.* (2018) Thick-Target-Method Study of  $\text{Ma}\beta$  x-Ray Production Cross Sections of Pb and Bi Impacted by Positrons up to 9 keV. *Physical Review A*, **97**, Article 032702.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.032702>
- [13] Wu, J.L., Wu, Y., Sheng, X.G., *et al.* (2025) Investigation of the Ill-Posed Inverse Problem in Measuring Near-Threshold Electron and Positron-Induced Atomic Inner-Shell Ionization Cross-Sections Based on Neural Network Approaches. *Radiation Physics and Chemistry*, **235**, Article 112818. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2025.112818>
- [14] Liang, S., Wu, Y., Zhao, Z., *et al.* (2021) Measurement of K-Shell Ionization Cross Sections of Al by 4-9 keV Positron Impact. *Radiation Physics and Chemistry*, **180**, Article 109321. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.109321>
- [15] 柯子璇. 低能正电子碰撞纯厚靶特征 X 射线产额成分分析[D]: [硕士学位论文]. 北京: 华北电力大学, 2021.
- [16] 李宇丹. 基于蒙特卡洛模拟与神经网络算法开展厚靶法测量正负电子致原子内壳层电离截面的不适定问题研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 华北电力大学, 2024.
- [17] Zhang, Z.Y., Wu, Y., Liang, S., *et al.* (2020) Online Measurement of the Intensity of keV Positron Beam. *Radiation Physics and Chemistry*, **171**, Article 108698. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.108698>
- [18] Qian, Y.R., Wu, Y., Yang, X.T., *et al.* (2018) Experimental Study on Ti K Shell Ionization Cross Sections Induced by 8-9.5 keV Positrons. *Acta Physica Sinica*, **67**, Article 192101. <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180666>