

Член-корреспондент АН СССР В. И. ГОЛЬДАНСКИЙ, А. О. ТАТУР,  
А. В. ШИШКИН

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИМПУЛЬСНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АННИГИЛИРУЮЩИХ ( $e^+ - e^-$ )-ПАР ИЗ КРИВЫХ УГЛОВОЙ КОРРЕЛЯЦИИ

1. В ряде работ (см., например, <sup>(1, 2)</sup>) восстановление спектров импульсов аннигилирующих электронно-позитронных пар проводили путем графического дифференцирования корреляционных кривых, однако метод не получил широкого распространения из-за значительной трудоемкости и невысокой точности обработки. В настоящей работе предложен простой, статистически обоснованный метод восстановления импульсного распределения путем численного решения уравнения Фредгольма I-го рода на ЭВМ методом статистической регуляризации.

Задача восстановления импульсного распределения  $N(p)$  аннигилирующих пар из кривой угловой корреляции  $C(\theta)$  аннигиляционных квантов сводится, согласно <sup>(3)</sup>, к решению интегрального уравнения Вольтерра I-го рода

$$C(\theta) = A \int_0^\infty \frac{N(p)}{p} dp \quad (1)$$

при условии, что  $p_{\max}/m_{ec} \ll 2\Delta = l/d$ , где  $p_{\max}$  — максимальное значение импульса,  $d$  — расстояние от источников позитронов до счетчика  $\gamma$ -квантов, а  $l$  — длина коллимирующих щелей,  $A$  — константа, учитывающая геометрию опыта.

Реальный угловой спектр  $f(\theta)$ , однако, отличается от  $C(\theta)$  за счет «размытия»  $C(\theta)$  приборной функцией установки  $R(\theta' - \theta)$ :

$$f(\theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} R(\theta' - \theta) C(\theta') d\theta'. \quad (2)$$

Подставляя (1) в (2), получаем связь между экспериментальным спектром  $f(\theta)$  и импульсным распределением  $N(p)$  для положительных значений  $\theta$

$$f(\theta) = \int_0^\infty N(p) \left\{ \int_{-\theta}^{\theta} R(\theta' - \theta) \frac{d\theta'}{p} \right\} dp. \quad (3)$$

Таким образом, задача отыскания импульсного распределения сводится к решению интегрального уравнения (3).

2. Метод статистической регуляризации. Уравнение (3) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма I-го рода, общий вид которого

$$f(x) = \int K(x, x') \varphi(x') dx', \quad (4)$$

где  $f(x)$  — известная функция,  $\varphi(x')$  — искомая функция,  $K(x, x')$  — ядро интегрального уравнения.

При численном решении уравнения (4) его тем или иным способом сводят к системе линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^n K_{ji} \varphi_i = f_j, \quad j=1, \dots, n, \quad (5)$$

где  $\varphi_i$  и  $f_j$  — линейные функционалы от функций  $\varphi(x)$  и  $f(x)$ .

Прямое решение этой задачи представляет большую трудность из-за плохой обусловленности системы (5), т. е. чрезвычайно сильной зависимости решения  $\varphi$  от вариаций свободного члена  $f$ , ошибок коэффициентов и ошибок счета. Это есть следствие «некорректности» задачи (4). Для решения уравнений типа (4) авторами (4) разработан метод статистической регуляризации, который и использован нами для решения нашей задачи. Сущность метода заключается в том, что задача (4) рассматривается как задача математической статистики, а регуляризатор (априорная информация) вводится в виде того или иного распределения вероятности для  $\varphi$ .

Пусть величины  $f_j$  измеряются со среднеквадратичной ошибкой  $s_j$ , независимой при различных  $j$  и распределенной по нормальному закону. Тогда условная вероятность того, что при данном векторе  $\varphi$  в результате измерений будет получен вектор  $f$ , есть

$$P(f/\varphi) = \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi} s_j} \exp \left\{ -\frac{(f_j - \sum_{i=1}^n K_{ji} \varphi_i)^2}{2s_j^2} \right\}. \quad (6)$$

Вводя матрицу  $W$  с матричными элементами  $W_{ij} = \delta_{ij}/s_j^2$ ,  $i, j=1, \dots, n$ , получим

$$P(f/\varphi) = C_1 \exp \{ -1/2 (\varphi, B\varphi) + (a, \varphi) \}, \quad (7)$$

где  $B = K^+ W K$ ,  $a = K^+ W f$ ,  $C_1$  — константа, не зависящая от  $\varphi$ .

Поскольку единственной априорной информацией, которой мы располагаем относительно  $\varphi(N(p))$ , является то, что она изображает непрерывную гладкую функцию, выбираем в качестве регуляризирующего функционала норму второй производной функции  $\varphi(x)$ . Тогда, как показано в (5, 6), априорный статистический ансамбль запишется в виде

$$P_\alpha(\varphi) = C_2 \alpha^{n/2} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{2} (\varphi, \Omega \varphi) \right\}, \quad (8)$$

где  $\Omega$  — положительно определенная симметричная матрица такая, что функционал  $(\varphi, \Omega \varphi)$  дает конечно-разностное приближение к интегралу  $\int (d^2 \varphi / dx^2)^2 dx = \text{const}$ ,  $\alpha$  — параметр регуляризации,  $C_2$  — константа, не зависящая от  $\varphi$ .

Апостериорное распределение для  $\varphi$  получается по формуле Байеса (4)

$$P(\varphi/f, \alpha) = \frac{P(f/\varphi) P_\alpha(\varphi)}{\int P(f/\varphi) P_\alpha(\varphi) d\varphi}. \quad (9)$$

Подставляя в уравнение (9) выражения (6) и (8), получим

$$P(\varphi/f, \alpha) = C_3 \exp \{ -1/2 (\varphi, [B + \alpha \Omega] \varphi) + (a, \varphi) \}, \quad (10)$$

где  $C_3$  — константа, не зависящая от  $\varphi$ .

Полученное нормальное распределение для вероятности  $P(\varphi/f, \alpha)$  дает наиболее полное решение задачи при априори заданном  $\alpha$ . В качестве восстановленной функции берется математическое ожидание  $\varphi$  по распре-

делению (10)

$$\langle \varphi \rangle_\alpha = (B + \alpha \Omega)^{-1} a. \quad (11)$$

Ошибка восстановления определяется как корень из дисперсии  $\varphi$ :

$$\sigma_i = \sqrt{[B + \alpha \Omega]_{ii}^{-1}}, \quad i=1, \dots, n. \quad (12)$$

Формулы (11), (12) дают, таким образом, наиболее вероятное гладкое решение при данных векторах  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{s}$ , причем решение это получено с привлечением минимальной и разумной априорной информации о гладкости и непрерывности функции  $\varphi(x)$ .

3. Для решения уравнения (3) необходимо знать аналитический вид приборной функции установки  $R(\theta' - \theta)$ . Функция  $R(\theta' - \theta)$  была вычисле-

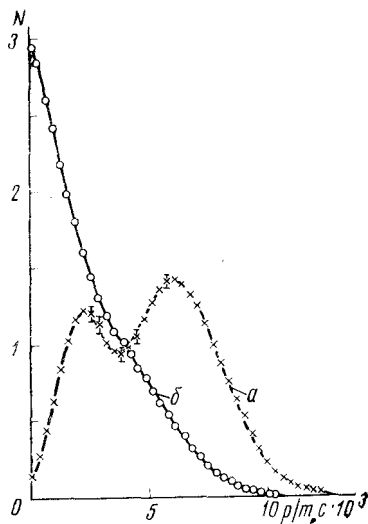


Рис. 1

Рис. 1. Модельное восстановление функции  $N(p)$ :  $a$  — исходная функция  $N(p)$ ,  $b$  — «размытая» функция  $f(\theta)$ ; крестиками показаны восстановленные значения  $N(p)$

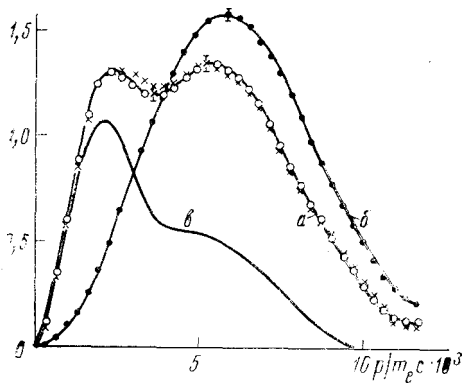


Рис. 2

Рис. 2. Импульсное распределение аннигилирующих ( $e^+e^-$ )-пар: в бензоле с учетом функции разрешения ( $a$ ), в бензоле без учета разрешения (показано крестиками), в двухмолярном растворе нитробензола в бензоле ( $b$ );  $c$  — импульсное распределение от аннигиляции позитрония в бензоле

на на основе методики, предложенной в (7) для равномерного распределения актов аннигиляции по ширине коллимирующей цели, поскольку образец устанавливался наклонно к плоскости, вырезаемой коллиматорами.

На основе описанного выше алгоритма и программы ОБР-18 (8) нами составлена программа для ЭВМ М-220 на языке АЛГОЛ для решения уравнения типа (3). Программа проверялась на серии модельных экспериментов; результаты одного из них приведены на рис. 1.

Задаваясь функцией  $N(p)$  (сумма двух гауссовских кривых), мы «размывали» ее ядром

$$K(\theta, p) = \int_{-\pi}^{\pi} R(\theta' - \theta) \frac{d\theta'}{p}, \quad (13)$$

и, прибавляя нормально распределенную ошибку, получали «экспериментальную» функцию  $f(\theta)$  по формуле

$$f_j = \sum_{i=1}^n K_{ji} \varphi_i + \left( \sum_{i=1}^n K_{ji} \varphi_i \right)^{1/2} \xi_j, \quad j=1, \dots, n, \quad (14)$$

где  $\xi_i$  — нормально распределенная величина с математическим ожиданием 0 и дисперсией 1.

Выполнив обратное восстановление по написанной программе, мы получили хорошее совпадение с задаваемой функцией в пределах ошибки восстановления (рис. 1).

В качестве объектов исследования нами взяты бензол и двухмолярный раствор нитробензола в бензоле. В бензоле значительна доля образования позитрония ( $\sim 48\%$  согласно <sup>(8)</sup>), следовательно, интенсивность узкой компоненты  $I_N \approx 12\%$ , в то время как для двухмолярного раствора нитробензола в бензоле компонента углового спектра, связанная с позитронием, полностью отсутствует <sup>(9)</sup>.

Измерения проводились на стандартной угловой установке с разрешением 0,78 мрад.

Результаты восстановления импульсных распределений из экспериментальных кривых угловой корреляции приводятся на рис. 2.

Кроме импульсных распределений, восстановленных с учетом функции разрешения (рис. 2, а, б), было восстановлено импульсное распределение аннигилирующих пар в бензоле без учета функции разрешения (на рис. 2 приведено крестиками), т. е. с ядром

$$K(\theta, p) = \begin{cases} 0, & p < \theta, \\ 1/p, & p \geq \theta. \end{cases} \quad (15)$$

Восстановление импульсного распределения, проведенное с учетом функции разрешения, более резко выделяет пик, соответствующий узкой компоненте углового распределения, что и следовало ожидать.

Из рис. 2 видно, что форма широкой компоненты для бензола сильно отличается от формы кривой для раствора нитробензола в бензоле. Если считать, что спектр для раствора нитробензола в бензоле соответствует только аннигиляции свободных позитронов, то, вычитая его из спектра импульсного распределения для бензола с коэффициентом 0,52 (соответствующим вкладу от аннигиляции свободных позитронов <sup>(8)</sup>), получим кривую  $\epsilon$  на рис. 2. Эта кривая соответствует импульсному распределению атомов парапозитрония в других органических жидкостях <sup>(1)</sup>, можно предполагать наличие дополнительной компоненты в корреляционном спектре, связанной с *pickoff* аннигиляцией атомов позитрония.

Аналогичный результат, т. е. различие в форме широкой компоненты для аннигиляции атомов позитрония и позитронов, наблюдали авторы работы <sup>(10)</sup> для воды.

Авторы благодарны Л. С. Туровцевой за полезные дискуссии и с чувством благодарности отмечают помощь ныне покойного А. П. Бучихина.

Институт химической физики  
Академии наук СССР  
Москва

Поступило  
3 II 1975

Московский инженерно-физический институт

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> S. Y. Chuang, B. G. Hogg, *Nuovo Cimento*, v. 58, 381 (1968). <sup>2</sup> А. П. Бучихин, В. И. Гольданский и др., *ЖЭТФ*, т. 60, 1136 (1971). <sup>3</sup> В. И. Гольданский, *Физическая химия позитрона и позитрония*, М., «Наука», 1968. <sup>4</sup> В. Ф. Турчин, В. П. Козлов, М. С. Малкевич, *УФН*, т. 102, 345 (1970). <sup>5</sup> В. Ф. Турчин, В. З. Нозик, *Изв. АН СССР, сер. физ. атм. и океана*, т. 5, 29 (1969). <sup>6</sup> Л. С. Туровцева, В. Ф. Турчин, *Препринт № 30, ИФМ АН СССР*, 1971. <sup>7</sup> L. C. Smedskjar, *Lithogr. Techn. Found. 11 Report № 1*, 1971. <sup>8</sup> De Blonde, S. Chuang et al., *Canad. J. Phys.*, v. 50, 1619 (1972). <sup>9</sup> V. P. Shantarovich, M. Eldrup et al., *Chem. Phys.*, in press. <sup>10</sup> O. G. Mogensen, V. P. Shantarovich, *Chem. Phys.*, v. 6, 400 (1974).