

Алгоритмы метода Монте-Карло для вычисления диффузионных характеристик электронной лавины в газе

Лотова Г.З. *

УДК 519.676

Аннотация

В работе рассматриваются задачи теории переноса электронов в газе под действием сильного внешнего электрического поля. На основе трехмерного алгоритма ELSHOW получены выборки состояний частиц в электронной лавине для заданного момента времени с целью вычисления соответствующих «диффузионных радиусов» и коэффициентов диффузии. С помощью группированных выборок строились рандомизированные проекционные и, для контроля, ядерные оценки плотности распределения частиц в лавине. Тестовые расчеты показали высокую эффективность проекционных оценок для вычисления диффузионных характеристик.

Ключевые слова: статистическое моделирование, метод Монте-Карло, электронная лавина, ядерная оценка, рандомизированная проекционная оценка, коэффициент диффузии.

Keywords: statistical modeling, Monte Carlo method, electron avalanche, nuclear estimate, randomized projection estimate, diffusion coefficient.

1 Введение

Рассматриваются задачи теории переноса электронов в газе под действием сильного внешнего электрического поля. Электроны, стартовавшие в нулевой момент времени с катода, двигаются с ускорением в направлении анода. Для

*Novosibirsk State University, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk 630090, Russia

простоты предполагается, что анод и катод плоско-параллельны. В своем движении электроны, сталкиваясь с молекулами газа, поглощаются, рассеиваются упруго или неупруго или ионизируют газ, «выбивая» вторичные электроны. Таким образом, число заряженных частиц экспоненциально растет (см., например, [1]), образуя ионизированные частицы газа и электронную лавину (или электронное облако).

Основными транспортными характеристиками лавины являются коэффициенты диффузии (продольный D_L и поперечный D_T), скорость дрейфа облака, подвижность электронов, частота ионизации, средняя кинетическая энергия, коэффициент ударной ионизации (см., например, [2]). Настоящая статья посвящена вычислению D_L и D_T методом Монте-Карло.

2 Алгоритм метода Монте-Карло

Математическая модель процесса переноса заряженных частиц во внешнем электрическом поле описывается с помощью уравнения переноса (см., например, [3]):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q\mathbf{E}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \nu_c \int_{\Omega'} [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] w(\omega, \omega') d\omega'. \quad (1)$$

Здесь $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ - плотность распределения электронов, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, t - время, \mathbf{v} - вектор скорости, q - заряд частицы, \mathbf{E} - вектор напряженности электрического поля, m - масса частицы, ν_c - частота столкновений частиц с элементами среды, $\omega = \mathbf{v}/V$, $\omega' = \mathbf{v}'/V'$ - вектора направления движения до столкновения и после, V - модуль скорости.

Для решения этого уравнения методом Монте-Карло строятся специальные алгоритмы статистического моделирования. Поскольку (1) допускает переход к интегральному уравнению, то построение траекторий движения частиц возможно обычным способом [4], который соответствует вероятностной физической модели процесса переноса электронов (см., например, [5, 6]).

Поскольку электрическое поле искривляет траекторию движения частицы между столкновениями, то моделирование траектории проводится с помощью кусочно-линейной аппроксимации. При этом каждый прямолинейный отрезок пути соответствует продвижению частицы за достаточно маленький шаг по времени Δt . В [6] на основе полуэмпирических соображений и контрольных

расчетов предложено использовать формулу:

$$\Delta t \approx \frac{\varepsilon}{\max_T(\sigma_{tot}(T)V)n_g}. \quad (2)$$

Здесь ε - относительная погрешность вычисления функционалов, σ_{tot} - полное микроскопическое сечение взаимодействия электронов с молекулами газа, максимум берется по всем возможным энергиям T и вычисляется по таблицам сечений σ_{tot} , n_g - концентрация газа. В конце каждого временного отрезка происходит проверка, состоится ли столкновение (соответственно вероятности $P(\Delta t)$) или нет. В случае столкновения «разыгрывается» тип взаимодействия и т.д. Более подробно алгоритм описан в [6, 7]. В работе [7] строго доказано соотношение $\varepsilon = O(\Delta t)$ и осуществлена оптимизация вероятности $P(\Delta t) = \sigma_{tot}\Delta t + O((\Delta t)^2)$ по критерию трудоемкости расчетов. В [7] также указан алгоритм вычисления оптимального значения Δt .

Пусть электроны начинают движение в точке с координатами $(x, y, z) = (0, 0, 0)$, напряженность поля равна $\mathbf{E} = (0, 0, -E_z)$, т.е. электронное облако движется вдоль оси OZ . Зная число частиц в нулевой момент времени n_0 и в момент времени t_i , можно определить частоту ионизации ν_{ion} , которая отражает зависимость от времени числа частиц

$$n(t_i) = n_0 \exp(\nu_{ion}t_i), \quad n_0 = n(0). \quad (3)$$

В ходе моделирования в определенные моменты времени t_i можно получить оценки следующих функционалов: число частиц $n(t_i)$, положение центра масс $\mathbf{r}_c(t_i) = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle)$, $\langle x \rangle = \frac{\sum_{k=1}^n x_k(t_i)/n(t_i)$, $\langle y \rangle = \frac{\sum_{k=1}^n y_k(t_i)/n(t_i)$, $\langle z \rangle = \frac{\sum_{k=1}^n z_k(t_i)/n(t_i)$, скорость центра масс $V_c(t_i) = \langle z \rangle / t_i$, среднюю скорость $\langle V_z \rangle = \frac{\sum_{k=1}^n V_{z,k}(t_i)/n(t_i)$, среднюю кинетическую энергию $\langle T \rangle = \frac{\sum_{k=1}^n T_k(t_i)/n(t_i)$. Здесь суммирование ведется по всем частицам. За скорость дрейфа электронного облака принимается V_c . Одновременно с функционалами вычисляются соответствующие среднеквадратические погрешности.

Наибольшую сложность представляет собой вычисление коэффициентов продольной D_L и поперечной диффузии D_T [8] (см. также далее пункт 3).

Все расчеты, которые приведены в этой статье, проводились для следующей физической модели. В качестве газа рассматривался молекулярный азот; напряженность поля $E_z = 1.35 \cdot 10^5$ В/см, давление газа $p = 300$ Торр, расчет велся до $t_{max} = 0.65$ нс. Необходимые для построения траекторий электронов

характеристики такой модели приведены в [6]. Шаг по времени брался равным $\Delta t = 10^{-16}c$, что согласно (2), соответствует относительной детерминированной погрешности $\varepsilon = 0.004$. Была использована формула

$$P(\Delta t) = \sigma_{tot}V\Delta t + 0.3(\sigma_{tot}V\Delta t)^2,$$

которая согласно [7] практически минимизирует детерминированную погрешность. Расчеты проводились программой ELSHOW в ССКЦ СО РАН (Siberian Supercomputer Center SB RAS) с применением пакета программ PARMONC [9, 10] для их распараллеливания.

3 Коэффициенты диффузии

Вычисление коэффициентов диффузии возможно несколькими способами. С одной стороны, в диффузионном приближении плотность частиц в облаке пропорциональна нормальному распределению (см., например, [1]):

$$\rho(x, y, z, t) = n_0 e^{\nu_{ion} t} \frac{e^{-(x^2+y^2)/(4D_T t)} e^{-(z-z_{max})^2/(4D_L t)}}{4\pi D_T t \sqrt{4\pi D_L t}}, \quad (4)$$

где $z_{max} = V_c t$. Следовательно, оценки коэффициентов диффузии пропорциональны выборочным дисперсиям $S_{x,y}^2$ и S_z^2 :

$$\hat{D}_T = S_{x,y}^2/(2t), \quad \hat{D}_L = S_z^2/(2t).$$

Следует отметить, что эти формулы можно применять только в тех случаях, когда диффузионное приближение достаточно хорошо описывает происходящие в лавине процессы, т.е. при малых значениях E_z/p .

Другой способ предложен в [1] в рамках диффузионного приближения, т.е. с целью гауссовской аппроксимации плотности, но использовать его можно и для более точных оценок искомых функционалов. В этом способе коэффициенты диффузии находятся с помощью «радиусов» поперечной и продольной диффузии $R_T = \sqrt{4D_T t}$ и $R_L = \sqrt{4D_L t}$. Из (4) имеем:

$$\begin{aligned} \rho(0, y, z, t)/\rho(R_T, y, z, t) &= e^{R_T^2/(4D_T t)} = e^1, \\ \rho(x, y, z_{max}, t)/\rho(x, y, z_{max} + R_L, t) &= e^{R_L^2/(4D_L t)} = e^1. \end{aligned}$$

Следовательно, для вычисления радиусов диффузии необходимо построить график плотности распределения частиц, найти точку его максимального значения (точку «вершины») и точку, в которой значение графика в e раз меньше вершины. Ясно, что для достаточно точного определения коэффициентов диффузии требуется построение достаточно точных глобальных оценок

плотности. Ранее для этого использовались гистограмма и полигон частот со специально подобранными шагами (см. [6, 7]). В настоящей работе строятся более точные оценки радиуса диффузии на основе сглаженных оценок плотности распределения частиц; ядерных оценок Парзена-Розенблатта [11] с использованием группированной выборки и рандомизированного проекционного метода с использованием полиномов Лагерра и Эрмита (см. пункт 4).

4 Ядерные и рандомизированные проекционные оценки

1. Поскольку число частиц N в электронном облаке растет экспоненциально по времени, то количество частиц в нём может быть большим. Для удобства работы с таким массивом данных предлагается использовать группированную выборку, которая по сути является гистограммой с достаточно маленьким шагом. Рассмотрим построение такой выборки по координате z ; это построение аналогичным образом переносится и на другие координаты. Обозначим через $z_{(1)}$ и $z_{(N)}$ минимальное и максимальное значение в выборке. Отрезок $[z_{(1)}, z_{(N)}]$ разделим на достаточно большое число N_0 одинаковых интервалов R_i с длиной на порядок меньшей минимума шагов $\{h_k\}$ в рассмотренной далее ядерной оценке. Группированной выборкой будем называть набор данных $\{\tilde{z}_i, \tilde{m}_i\}_{i=1}^{N_0}$, где \tilde{z}_i - середины интервалов разбиения R_i , а \tilde{m}_i - количество элементов исходной выборки, попавших в этот интервал. Использование результативных группированных выборок после моделирования «облака» на ЭВМ позволяет строить ядерные оценки при $N \rightarrow \infty$. Соответствующая группированной выборке функция имеет вид:

$$f_g(z) = \tilde{m}_i, \quad z \in R_i.$$

Ядерную оценку плотности распределения в произвольной точке z_k можно вычислить по формуле:

$$\hat{f}(z_k) = \frac{m_k}{Nh_k},$$

где m_k - число элементов исходной выборки, попавших в интервал Δ_k длины h_k с центром в точке z_k . При использовании группированной выборки:

$$\hat{f}(z_k) = (Nh_k)^{-1} \int_{\Delta_k} f_g(z) dz.$$

В отличие от полигона частот, где интервалы не пересекаются, а их количество определяется по критерию минимума погрешности [6, 7], ядерная оценка может быть вычислена на любом наборе точек z_k ; при этом интервалы Δ_k могут пересекаться. На рис. 1 изображена ядерная оценка для одной из выборок положений электронов в решаемой задаче и соответствующие ей плотности нормального и гамма-распределения, параметры которых были определены с помощью оценок метода моментов.

Остановимся теперь на вопросе выбора оптимальной длины интервала h_k для ядерной оценки по критерию минимума среднеквадратической погрешности. Рассмотрим одномерную выборку объема N с неизвестной плотностью $f(z)$. Согласно [12] для нахождения оптимального h_k целесообразно минимизировать среднеквадратическую погрешность:

$$\mathbb{E} \left(f(z_k) - \frac{m_k}{Nh_k} \right)^2 = \left(f(z_k) - \mathbb{E} \left(\frac{m_k}{Nh_k} \right) \right)^2 + \mathbb{D} \left(\frac{m_k}{Nh_k} \right).$$

В [6] показано, что оптимальное значение h_k близко к тому, которое получается уравниванием статистической и детерминированной погрешностей:

$$\left(f(z_k) - \mathbb{E} \left(\frac{m_k}{Nh_k} \right) \right)^2 = \mathbb{D} \left(\frac{m_k}{Nh_k} \right).$$

Отсюда получаем равенство (совпадающее по порядку с указанным в [12]):

$$h_k^5 = \frac{576 \tilde{f}_k}{N(f''(z_k))^2}, \quad (5)$$

где

$$\tilde{f}_k = h_k^{-1} \int_{\Delta_k} f(z) dz.$$

В формуле (5) в качестве неизвестной функции f берется ее приближение нормальным или гамма-распределением. Поскольку наиболее важно значение в точке максимума распределения, то целесообразно использовать постоянное значение интервала h_k для всей области, вычисленного по формуле (5) в вершине.

2. Далее рассматривается алгоритм, основанный на методе Н. Н. Ченцова для оценки неизвестной плотности вероятностей [13], причем используется модификация этого метода, сформулированная в [14]. Пусть $p_i(z)$ – система ортонормированных с весом $\psi(z)$ на $(0, \infty)$ полиномов, то есть

$$\int_0^\infty \psi(z) p_i(z) p_j(z) dz = \delta_{ij},$$

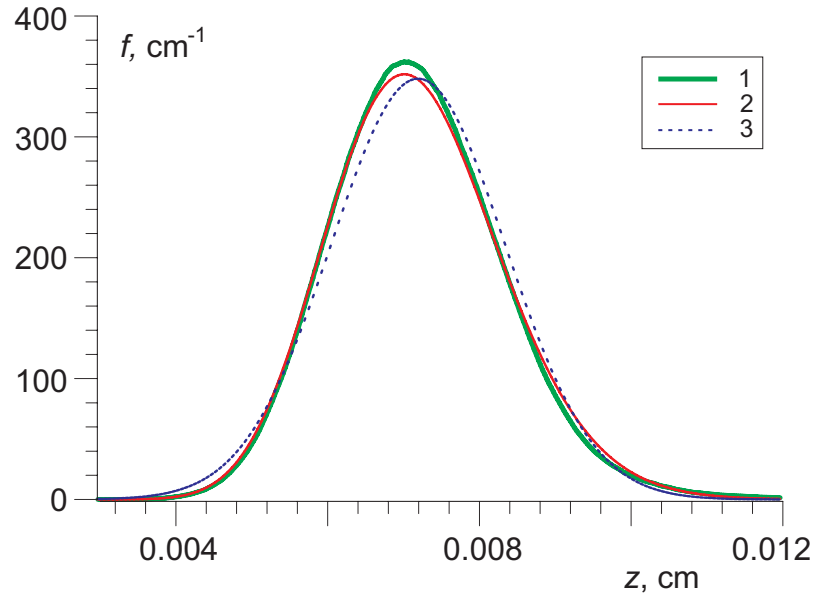


Рис. 1: Оценки плотности: 1 - ядерная оценка, 2 - гамма-распределение, 3 - гауссовское распределение

и для плотности вероятностей $\varphi(z)$ выполняется соотношение

$$\varphi(z) = \psi(z) \sum_{i=0}^{\infty} a_i p_i(z), \text{ где } a_i = \int_0^{\infty} \varphi(z) p_i(z) dz = \mathbb{E} p_i(\xi).$$

Здесь ξ - случайная величина, распределенная с плотностью $\varphi(z)$.

Случайная оценка функции $\tilde{\varphi}_K(z)$ строится по выборке $\{\xi_j\}_{j=1}^N$ следующим образом:

$$\tilde{\varphi}_K(z) = \psi(z) \sum_{i=0}^K \tilde{a}_i p_i(z), \text{ где } \tilde{a}_i = N^{-1} \sum_{j=1}^N p_i(\xi_j).$$

При этом

$$\mathbb{E} \tilde{\varphi}_K(z) = \psi(z) \sum_{i=0}^K a_i p_i(z), \quad \int_0^{\infty} \tilde{\varphi}_K(z) dz \equiv 1.$$

5 Тестовая задача

Поскольку построенные с использованием ядерных оценок графики плотности по координате z показывают близость к гамма-распределению $\Gamma_{\alpha, \lambda}$ (см. рис. 1), то с целью более гладкой аппроксимации предлагается использовать

разложение по полиномам Лагерра [15]:

$$\varphi(z) = \frac{\alpha^\lambda z^{\lambda-1}}{\Gamma(\lambda)} \exp(-\alpha z) \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i p_i(z) \right).$$

Здесь $\Gamma(\lambda)$ - гамма-функция, $p_i(z)$ - полиномы Лагерра:

$$p_i(z) = \left((-1)^i i! z^{\lambda-1} e^{-\alpha z} \right)^{-1} \left(\frac{\Gamma(\lambda) i!}{\Gamma(\lambda + i)} \right)^{1/2} \left(\frac{d}{dz} \right)^i (z^{i+\lambda-1} e^{-\alpha z}),$$

$$p_1(z) = (\alpha z - \lambda) / \sqrt{\lambda},$$

$$p_2(z) = \frac{(\alpha z - \lambda)^2 - 2(\alpha z - \lambda) - \lambda}{\sqrt{2\lambda(\lambda + 1)}},$$

$$p_3(z) = \frac{(\alpha z - \lambda)^3 - 6(\alpha z - \lambda)^2 + 6(\alpha z - \lambda)(1 - 3\lambda) + 4\lambda}{\sqrt{6\lambda(\lambda + 1)(\lambda + 2)}}.$$

Для того, чтобы оценить подходящее количество K коэффициентов разложения, были проведены расчеты для тестовой задачи. С этой целью моделировалась достаточно большая ($N = 1.7 \cdot 10^6$) выборка $\{\xi_j\}$ из распределения с плотностью

$$\varphi_{10}(z) = \left(1 + \sum_{i=1}^{10} a_i p_i(z) \right) \frac{\alpha^\lambda z^{\lambda-1}}{\Gamma(\lambda)} \exp(-\alpha z),$$

строилась группированная выборка и по ней вычислялись коэффициенты \tilde{a}_i . Для этого был использован алгоритм мажорантного метода исключения, сформулированный для гамма-распределения в [14]. Размер группированной выборки ($N_0 = 10^5$) выбирался таким образом, чтобы интервал осреднения для ядерной оценки ($h_k = 0.00018$) был на три порядка больше шага группирования ($0.128 \cdot 10^{-6}$). Кроме того, для оценок коэффициентов вычислялись и среднеквадратические погрешности. Результаты расчетов представлены в таблице 1. Их анализ показывает эффективность применения группированной выборки, а также целесообразность использования семи коэффициентов, т.е. оценки $\tilde{\varphi}_7(z)$. В [13] рекомендуется использовать только те коэффициенты, статистическая оценка которых существенно превосходит соответствующую среднеквадратическую погрешность. В частности, поэтому рассматриваются разложения до $K = 10$.

Отметим, что значение радиуса диффузии для исходного распределения равно $R_L = 0.001883$. Построение ядерной оценки плотности для группированной выборки дает $R_L = 0.001792$, а в гауссовском приближении $R_L = \sqrt{2S_z^2} = 0.001832$. Радиусы диффузии для предложенной выше проекционной

Таблица 1: Коэффициенты в тестовой задаче

	исходные значения	группир. выборка	усечен. группир. выборка
α	5643.9524	5653.1707	5653.8643
λ	53.5225	53.6095	53.6160
a_1	0.00000	0.00000 ± 0.00000	0.00000 ± 0.00000
a_2	0.00000	0.00000 ± 0.00075	0.00000 ± 0.00076
a_3	-0.05135	-0.05133 ± 0.00072	-0.05152 ± 0.00074
a_4	0.02005	0.01975 ± 0.00081	0.01914 ± 0.00074
a_5	-0.00830	-0.00977 ± 0.00116	-0.01063 ± 0.00077
a_6	0.00676	0.00630 ± 0.00177	0.00438 ± 0.00078
a_7	0.01113	0.01059 ± 0.00217	0.00917 ± 0.00073
a_8	-0.00169	-0.00351 ± 0.00176	-0.00566 ± 0.00069
a_9	-0.00182	-0.00376 ± 0.00114	-0.00311 ± 0.00069
a_{10}	0.00192	0.00179 ± 0.00164	0.00173 ± 0.00063

оценки представлены в таблице 2, где число K показывает, сколько полиномов Лагерра при этом использовалось. Значение $K = 0$ соответствует гамма-распределению. Из таблицы 2 видно, что для определения радиуса диффузии достаточно пяти полиномов, а ядерная оценка, гамма-распределение и гауссовское приближение дают относительную погрешность $2.7\% \div 5\%$.

Расчеты, проведенные также для первой половины выборки (т.е. для объема $N/2$), показали, что коэффициенты a_i , действительно, меняются соответственно указанной среднеквадратической погрешности. Отличие же диффузионных радиусов от приведенных в табл.2 составляет 0.2% . Этот факт показывает высокую эффективность проекционной оценки для функционалов типа диффузионного радиуса. Это связано с тем, что изменение объема выборки сдвигает график плотности в целом в отличие от оценок типа гистограммы.

6 Численный эксперимент

Рассмотрим теперь разложение по полиномам Лагерра для выборок, полученных при моделировании электронной лавины (см. пункт 2). Были проведены

Таблица 2: Радиусы диффузии в тестовой задаче

K	группир. выборка	усечен. выборка
0	0.001934	0.001934
3	0.001927	0.001927
4	0.001884	0.001885
5	0.001883	0.001884
6	0.001897	0.001894
7	0.001883	0.001880
8	0.001889	0.001891
9	0.001879	0.001883
10	0.001879	0.001884

зависимые испытания с шагами Δt и $\Delta t/2$ [7] и объемом выборки порядка $2.7 \cdot 10^6$. По полученным результатам построены группированные выборки и оценены коэффициенты разложения по полиномам Лагерра. Из таблицы 3 видно, что для группированной выборки коэффициенты a_i неограниченно растут и сходимости к искомой плотности нет. Это связано с тем, что такая выборка имеет более «тяжелые хвосты», чем в гамма-распределении. Поскольку целью является аппроксимация вершины распределения, то предлагается следующая методика «усечения» хвостов выборки.

Возьмем плотность гамма-распределения $g(z)$ в качестве первого приближения истинного распределения. Найдем такие точки A_1 и A_2 , что следующие интегралы будут давать значения равные единице:

$$N \int_0^{A_1} g(z) dz = 1, \quad N \int_{A_2}^{\infty} g(z) dz = 1.$$

Эти интегралы представляют собой математические ожидания числа точек выборки размера N , которые попадают в интервалы $[0, A_1]$ и $[A_2, +\infty)$. Поэтому исключение элементов исходной выборки, попавших в эти интервалы, приблизит ее к гамма-распределению и позволит лучше оценить вершину. В таблицах 1 и 4 представлены коэффициенты разложения, полученные по усеченным группированным выборкам. В тестовой задаче было при этом отброшено $\Delta N = 7$ элементов выборки, а в реальной задаче - $\Delta N = 360$. Для

Таблица 3: Коэффициенты разложения по полиномам Лагерра (группированная выборка)

	Δt	$\Delta t/2$
α	5118.9428	5085.2872
λ	39.6747	39.5552
a_1	0.00000 ± 0.00000	0.00000 ± 0.00000
a_2	0.00000 ± 0.00074	0.00000 ± 0.00073
a_3	0.06240 ± 0.00149	0.05632 ± 0.00147
a_4	0.13541 ± 0.00521	0.13521 ± 0.00482
a_5	0.16154 ± 0.02012	0.19157 ± 0.01765
a_6	0.49082 ± 0.07315	0.46038 ± 0.06320
a_7	1.16208 ± 0.24114	1.02466 ± 0.21176
a_8	2.97591 ± 0.71191	2.31531 ± 0.65035
a_9	6.61718 ± 1.87230	5.06106 ± 1.81102
a_{10}	14.54962 ± 4.36965	10.59922 ± 4.54438

тестовой задачи (таблица 1) видно, что пять коэффициентов ($a_1 \div a_5$) хорошо определяются, но можно использовать и семь. Это же подтверждается и значениями из таблицы 2, а именно, достаточно точное совпадение с искомым радиусом происходит при $K = 5$. При этом усечение существенно не влияет на вычисление радиусов. Хотя коэффициенты в таблице 4 для двух зависимых расчетов не совпадают, но достаточно согласованы их среднеквадратические погрешности, что показывает существенную коррелированность двух выборок. При этом радиусы диффузии (таблица 5) довольно близки.

Вычисление поперечного коэффициента диффузии отличается тем, что плотность распределения по координатам x и y симметрична. Поэтому на основе гауссовского распределения N_{a,σ^2} строится разложение по полиномам Эрмита H_i [15]:

$$\varphi(x) = \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} b_i H_i((x-a)/\sigma)\right) \frac{\exp\left(- (x-a)^2/(2\sigma^2)\right)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}},$$

$$H_i(x) = \frac{(-1)^i}{e^{-x^2/2}\sqrt{i!}} \left(\frac{d}{dx}\right)^i (e^{-x^2/2}),$$

Таблица 4: Коэффициенты разложения по полиномам Лагерра (усеченная выборка)

	Δt	$\Delta t/2$
α	5120.3687	5152.5187
λ	39.8225	39.9306
a_1	0.00000 ± 0.00000	0.00000 ± 0.00000
a_2	0.00000 ± 0.00068	0.00000 ± 0.00069
a_3	0.03790 ± 0.00090	0.04675 ± 0.00088
a_4	0.07717 ± 0.00129	0.07852 ± 0.00119
a_5	0.02548 ± 0.00167	0.00182 ± 0.00153
a_6	0.03052 ± 0.00172	0.01823 ± 0.00159
a_7	0.00055 ± 0.00126	-0.00258 ± 0.00120
a_8	-0.01588 ± 0.00096	-0.00009 ± 0.00092
a_9	-0.02057 ± 0.00132	-0.01623 ± 0.00126
a_{10}	0.00159 ± 0.00114	-0.00379 ± 0.00110

Таблица 5: Радиусы диффузии

K	$R_L, \Delta t/2$	$R_L, \Delta t$	$R_T, \Delta t/2$	$R_T, \Delta t$
0	0.001853	0.001845	0.001592	0.001585
3	0.001841	0.001827	0.001537	0.001518
4	0.001704	0.001690	0.001560	0.001541
5	0.001725	0.001693	0.001599	0.001543
6	0.001777	0.001720	0.001548	0.001513
7	0.001775	0.001725	0.001547	0.001513
8	0.001782	0.001724	0.001516	0.001513
9	0.001733	0.001687	0.001553	0.001544
10	0.001731	0.001692	0.001553	0.001544

Таблица 6: Коэффициенты разложения для полиномов Эрмита (группированная выборка)

	Δt	$\Delta t/2$
a	$-0.115 \cdot 10^{-5}$	$-0.191 \cdot 10^{-3}$
σ^2	$0.112 \cdot 10^{-5}$	$0.110 \cdot 10^{-5}$
b_1	0.00000 ± 0.00000	0.00000 ± 0.00000
b_2	0.00000 ± 0.00159	0.00000 ± 0.00064
b_3	-0.17856 ± 0.02243	-0.02154 ± 0.00071
b_4	2.33564 ± 0.31589	0.04149 ± 0.00085
b_5	-26.93170 ± 4.13859	0.00271 ± 0.00116
b_6	296.7218 ± 50.8330	0.01220 ± 0.00178
b_7	-3111.784 ± 589.047	0.01993 ± 0.00280
b_8	31247.67 ± 6472.69	0.00008 ± 0.00002

$$H_3(x) = \frac{x^3 - 3x}{\sqrt{6}}, \quad H_4(x) = \frac{x^4 - 6x^2 + 3}{2\sqrt{6}}, \quad H_5(x) = \frac{x^5 - 10x^3 + 15x}{2\sqrt{30}}.$$

По выборке $\{\zeta_j\}_{j=1}^N$ находятся коэффициенты разложения:

$$b_i = \mathbb{E}H_i((\zeta - a)/\sigma) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N H_i((\zeta_j - a)/\sigma).$$

Здесь в качестве величин a и σ берутся выборочные математическое ожидание и дисперсия.

Результаты расчетов представлены в таблицах 6 и 7. Видно, что по группированной выборке аппроксимировать плотность ортогональными разложениями в реальной задаче не целесообразно. Усеченная выборка всегда дает хороший результат. Оценки радиусов поперечной диффузии (таблица 5) достаточно близки для расчетов с шагами Δt и $\Delta t/2$. Различие составляет $1\% \div 3.5\%$; оно приближенно определяет относительную детерминированную погрешность полученной с шагом $\Delta t/2$ оценки. Указанной в конце пункта 2 погрешности $\varepsilon = 0.004$ здесь достигнуть не удалось, т.к. выражение (2) было получено для линейных функционалов.

Автор выражает большую благодарность чл.-корр. РАН Михайлову Г.А. за полезные советы.

Таблица 7: Коэффициенты разложения для полиномов Эрмита (усеченная выборка)

	Δt	$\Delta t/2$
a	$-0.178 \cdot 10^{-3}$	$-0.191 \cdot 10^{-3}$
σ^2	$0.110 \cdot 10^{-5}$	$0.110 \cdot 10^{-5}$
b_1	0.00000 ± 0.00000	0.00000 ± 0.00000
b_2	0.00000 ± 0.00062	0.00001 ± 0.00063
b_3	0.00859 ± 0.00065	-0.02206 ± 0.00069
b_4	0.01323 ± 0.00070	0.03892 ± 0.00076
b_5	-0.00070 ± 0.00076	-0.00054 ± 0.00083
b_6	0.00784 ± 0.00078	0.00267 ± 0.00086
b_7	-0.00091 ± 0.00073	0.00840 ± 0.00081
b_8	-0.00091 ± 0.00062	-0.00002 ± 0.00001

Работа проводилась при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН П.4П, грантов РФФИ 15-01-08988, 15-01-00894, 16-01-00530, 16-01-00145.

Список литературы

- [1] Korolev Yu.D., Mesyats G.A. Physics of pulsed discharge in gases, Moscow, Nauka, 1991, 224 p. (in russian)
- [2] Dutton J. A survey of electron swarm data// J. Phys. Chem. Ref. Data, vol. 4, № 3, 1975, pp.577-851.
- [3] Knyazev B.A. Low-temperature plasma and gas discharge: Tutorial/ Novosibirsk State University, Novosibirsk, 2003, 290 p. (in russian)
- [4] Ermakov S.M., Mikhailov G.A. Course of statistical modelling, Moscow, Nauka, 1976 (in russian).
- [5] Akkerman A.F. Modelling of trajectories of charged particles in matter, Moscow, Energoatomizdat, 1991, 200 p.(in russian)
- [6] Lotova, G.Z., Marchenko, M.A., Mikhailov, G.A., Rogazinskii, S.V., Ukhinov, S.A., Shklyayev, V.A.: Numerical statistical modelling algorithms for electron avalanches in gases // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. Vol. 29, Iss. 4, pp. 251–263 (2014)
- [7] G. Z. Lotova, G. A. Mikhailov Investigation and Improvement of Biased Monte Carlo Estimates // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2015, Vol. 55, No. 1, pp. 8–18
- [8] L.G.H.Huxley, R.W.Crompton The diffusion and drift of electrons in gases. New York: Wiley-Interscience, 1974, 704 p.
- [9] Marchenko M.A., Mikhailov G.A. Distributed computing by the Monte Carlo method // Automation and Remote Control. 2007. Vol. 68, Iss. 5, P. 888-900.
- [10] Marchenko M. PARMONC - A Software Library for Massively Parallel Stochastic Simulation // LNCS. 2011. Vol. 6873. P. 302-315.
- [11] Ibragimov, I.A., Has'minskii, R.Z. Statistical Estimation: Asymptotic Theory, Springer, 1981.
- [12] Borovkov A.A. Mathematical statistic. Novosibirsk: Nauka; Publishing house of Institute of Mathematics, 1997, 772 p. (in russian)

- [13] N. Chentsov, Statistical decision rules and optimal inference, Translation of Math. Monograph 53, AMS, Providence, 1982.
- [14] Mikhailov G.A. Some questions in the theory of Monte Carlo methods, Novosibirsk, 1974 (in russian)
- [15] Cramer H. Mathematical Methods of Statistics, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1946