DOI: 10.5862/JPM.230.4
УДК 539.18

А.А. Митюрева, В.В. Смирнов
Санкт-Петербургский государственный университет

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОДХОДА К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ СОВОКУПНОЙ ИНФОРМАЦИИ ПО СЕЧЕНИЯМ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ

В настоящей работе описан подход к представлению совокупной информации по сечениям элементарных процессов и дается его обоснование в рамках математической статистики. Это вызвано необходимостью совместного учета результатов разных работ, полученных в разное время, в разных группах, на основе экспериментальных и теоретических исследований, в разных энергетических диапазонах. Основное внимание уделяется процессу электронно-атомного рассеяния. В качестве примера применения представлен полученный таким способом совокупный результат по интегральным сечениям возбуждения электронным ударом переходов в атоме водорода.

СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ, ЭЛЕКТРОННОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ, ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИСТОЧНИК, РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ.

Введение

Изучение процессов рассеяния заряженных и нейтральных частиц разной природы является одной из важных задач атомной физики. Это относится, в частности, к процессу рассеяния электронов на атомах и определению соответствующих сечений рассеяния [1 – 3].

Известно, что в области физики столкновений многие процессы и объекты исследованы в разной мере, разными методами, с разной степенью достоверности. Вместе с тем, известно также, что нет метода, который давал бы заведомо лучшие результаты по сравнению со всеми остальными, мог бы быть использован для разных переходов и для широкой области энергий взаимодействия. Каждый из методов имеет свои достоинства, свою область применимости и свои особенности; но только в совокупности они могут и должны приводить к повышению надежности и качества получаемого результата.

Среди возникающих здесь проблем целесообразно выделить следующие:

вопросы выбора, т. е. каким результатам и какой именно работы следует отдать предпочтение;

экспертной оценки качества всех полученных результатов (да и не всегда ясно, как ее можно осуществить). Хотя сам факт публикации работы в реферируемом журнале уже является гарантом ее высокого качества, но результаты, приведенные в разных статьях, могут существенно различаться;

вопросы согласования («стыковки») результатов, полученных разными авторами.

В рассматриваемом нами случае часто возникает необходимость в «стыковке» данных, полученных в разных ограниченных энергетических диапазонах. Например, при расчете констант скоростей процессов, протекающих в плазме различных объектов, нужно знать сечение в широкой области энергий возбуждающих электронов.

Таким образом, возникает необходимость совместно учесть достижения по определению сечений электронного рассеяния всеми способами, развитыми в разное время, в разных группах (экспериментальных и теоретических) и в разных энергетических диапазонах.

Рассмотрению указанной проблемы были посвящены наши работы [4 – 10], где был предложен способ представления совокупной информации по исследуемому вопросу. Подход был апробирован на представлении сечений электронного возбуждения таких объектов, как атомы гелия [4 – 7] и аргона [8] из нормального и метастабильных состояний, а также водорода [9] и криптона [10] – из нормального состояния.

Целесообразно остановиться подробнее на обосновании упомянутого подхода.

Теоретические основы представления

Все излагаемое ниже, вообще говоря, относится к представлению совокупной информации в широком диапазоне проблем физики. Однако мы ограничимся рассмотрением процесса рассеяния электронов на атомах.

Хотя решение задачи представления совокупной информации по исследуемому вопросу допускает множество подходов, но мы применяем подход, основанный на математической статистике.

Совокупность всех работ, из которых мы можем извлечь пары величин $v = (S, E)$, где $S = Q$ есть сечение (или некоторая функция сечения, например $S = \ln Q$, что не имеет значения с точки зрения рассматриваемого ниже, но полезно при анализе величин, меняющихся в широком диапазоне), а E есть энергия, мы рассматриваем как некий совокупный источник информации W. Отметим, что такой источник является абстракцией и содержит данные всех возможных работ, причем как уже опубликованных, так и будущих. Здесь имеется в виду, что предлагаемый метод обобщения позволяет легко вводить в рассмотрение и все вновь появляющиеся в литературе данные.

Имеющиеся на настоящий момент и доступные нам данные публикаций рассматриваются как некоторая выборка из совокупного источника. Нашей задачей является установление зависимости

$$S = \sigma(E) \qquad (1)$$

на основе извлекаемой информации.

Поскольку для реальных систем расчет и измерения имеют некоторую погрешность, то при статистическом подходе имеет смысл рассматривать v как случайную величину, связанную с некоторой функцией распределения $dF(v) = f(v)dv$, описывающей совокупный источник информации по рассматриваемой проблеме.

Естественно предположить, что в совокупности все информационные источники должны воспроизводить истинную связь (1). Это приводит нас к тому, что связь случайных величин (1), т. е. так называемая регрессия S на E, должна соответствовать математическому ожиданию S при условии E:

$$\sigma(E) = M(S \mid E) = \int S\, f(S \mid E)dS, \qquad (2)$$

где

$$f(S \mid E) = \frac{f(S, E)}{f(E)}$$

– плотность условного распределения вероятности.

Этот вывод и составляет теоретическую основу статистического подхода.

Рассмотрим отклонение (невязку) δ для регрессии (1) при произвольной функции σ:

$$\delta(v, \sigma) = S - \sigma(E). \qquad (3)$$

Условное математическое ожидание отклонения (3) при регрессии вида (2) при каждом значении E для совокупного источника информации равно нулю:

$$M(\delta \mid E) = \int \delta(S, E, \sigma) f(S \mid E)dS = 0.$$

Следовательно, полное математическое ожидание отклонения при регрессии вида (2) для совокупного источника информации также равно нулю:

$$M(\delta) = \int \delta(v, \sigma) f(v)dv = 0. \qquad (4)$$

Равенство нулю условного (и полного) математического ожидания отклонения соответствует физическому смыслу задачи, а его отрицание соответствовало бы утверждению о недостижимости истинного (точного) результата.

Величина математического ожидания квадрата отклонения (3), а именно

$$M(\delta^2) = \int \delta(v,\sigma)^2 f(v)dv, \qquad (5)$$

при регрессии вида (2) в силу (4) равна квадрату дисперсии отклонения (3):

$$M(\delta^2) = D(\delta)^2. \qquad (6)$$

Как известно, регрессия вида (2) характеризуется тем, что минимум величины математического ожидания квадрата отклонения (5) среди всевозможных функций σ достигается на функции (2) [11, 12], т. е.

$$\min_{\sigma} M(\delta^2) \Rightarrow \sigma(E) = M(S \mid E) = \\ = \int Sf(S \mid E)dS. \qquad (7)$$

В результате мы приходим к вариационному принципу, который позволяет находить наилучшее приближение к искомой зависимости (1) в выбранном классе функций.

Рассмотрим теперь совокупный информационный источник как составной. Допустим, что каждый отдельный информационный источник $w \in W$ описывается своей функцией распределения величин v, и обозначим их совместное распределение как

$$dF(v,w) = f(v,w)dv\,dw.$$

Совокупный источник информации описывается маргинальным распределением

$$f(v) = \int_W f(v,w)dw.$$

При этом с каждым информационным источником связано соответствующее условное распределение величины v:

$$f(v \mid w) = \frac{f(v,w)}{f(w)}, \qquad (8)$$

где $f(w) = \int f(v,w)dv$ – маргинальная плотность распределения источников информации с распределением

$$dF(w) = f(w)\,dw.$$

Если считать (как мы и будем делать в дальнейшем), что информационные источники $w \in W$ образуют дискретный (счетный или конечный) набор, то под интегралом следует иметь в виду сумму

$$\int_W \bullet\, dF(w) \to \sum_{w\in W} \bullet\, dF(w).$$

Величину условного математического ожидания отклонения для регрессии (2) при заданных энергии и источнике, а именно

$$M(\delta \mid E,w) = \int \delta(S,E,\sigma)f(S \mid E,w)dS, \qquad (9)$$

естественно связать с систематической ошибкой источника, например методической ошибкой способа получения сечения при каждой энергии. При этом величина условного математического ожидания отклонения для регрессии (2) по всем энергиям при заданном источнике, которая имеет вид

$$M(\delta \mid w) = \int \delta(v,\sigma)f(v \mid w)dv,$$

может оказаться равной нулю и при наличии ненулевых систематических ошибок (9), поскольку ошибки для разных энергий могут иметь разные знаки. Поэтому для характеристики полной методической ошибки лучше использовать величину условного математического ожидания квадрата отклонения регрессии для заданного источника информации:

$$M(\delta^2 \mid w) = \int \delta(v,\sigma)^2 f(v \mid w)dv. \qquad (10)$$

Для явного представления вкладов отдельных информационных источников запишем, пользуясь распределением (8), величину математического ожидания (5) квадрата отклонения в форме

$$M(\delta^2) = \int \delta(v,\sigma)^2 f(v,w)dv\,dw = \\ = \int \delta(v,\sigma)^2 f(v \mid w)dv\; f(w)dw,$$

и через условное математическое ожидание (10) – в форме

$$M(\delta^2) = \int M(\delta^2 \mid w)\; dF(w). \qquad (11)$$

Это выражение имеет вид взвешенного среднего условных математических ожиданий (10) с весами, которые приписываются информационным источникам $dF(w)$. Отметим, что выполняется условие нормировки

$$\int_W dF(w) = 1.$$

В наших работах выбрано наиболее часто используемое параметрическое задание варьируемого класса функций:

$$S = \sigma(E, p),$$

где p — набор параметров.

О выборе конкретной параметризации будет сказано ниже. Имея в виду параметризацию, далее будем писать в формулах в качестве варьируемой величины параметры p функции σ вместо символа самой функции. Таким образом, задача сводится к поиску минимума (7) величины (5) в зависимости от параметров p, где $\delta(v, p) = S - \sigma(E, p)$.

Выше нами изложена общая схема применения статистического подхода к широкому классу проблем, включая ту, что мы рассматриваем. При этом не имеет значения кем, каким методом, теоретически или экспериментально был получен результат. С точки зрения статистики важно только, каково распределение случайной величины $v = (S, E)$. О ней мы судим только на основе выборок.

Для нахождения величины (5) следует воспользоваться выборкой величин $\{v_i\}$, построенной на основе имеющихся данных по рассматриваемой проблеме:

$$M(\delta^2) = \int \delta(v, p)^2 f(v) dv \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \delta(v_i, p)^2. \quad (12)$$

Как известно, выборочное среднее, стоящее в правой части равенства (12), сходится по вероятности к математическому ожиданию при увеличении объема выборки, что выражает одну из форм закона больших чисел [11, 12]. Последнее имеет место при условии, что выборка генерируется с плотностью распределения $f(v)$. В качестве простейшей модели следует предположить, что это условие обеспечивается природой совокупного источника информации. В пользу этого может служить то соображение, что на самом деле выборка не зависит от потребителей, а есть результат коллективного действия всех производителей информации. При выполнении указанного условия замечательно то, что для оценки (12) нет необходимости знать вид неизвестной нам функции распределения f. Отметим попутно, что такую оценку можно рассматривать как оценку интеграла методом Монте-Карло. Ее точность, как следует из центральной предельной теоремы [11, 12], имеет порядок $D / \sqrt{n}$, где D — дисперсия величины δ^2, n — объем выборки.

Более строгой моделью может служить предположение, что выборка величин $\{v_i\}$ генерируется с плотностью условного распределения (8) для каждого информационного источника в отдельности. В этом случае формула (12) требует дополнительного обоснования. Для этого воспользуемся представлением дисперсии отклонения в форме (11). С учетом структуры выражения (11) можно разбить выборку на группы по источникам информации.

Пусть $\{w_i\}$ есть выборка объема I из информационных источников. Для каждого выбранного источника с индексом i обозначим случайную величину пар сечений и энергий с плотностью условного распределения (8) как v_i, а соответствующую выборку как

$$\{v_{ij}\},\ j = 1, 2, ..., n_i.$$

Полный объем совокупной выборки равен $n = \sum_{i=1}^{I} n_i$. Для величины (11) имеем следующую оценку:

$$M(\delta^2) = \int M(\delta^2 \mid w)\, dF(w) \approx$$

$$\approx \sum_{i=1}^{I} \frac{dF(w_i)}{n_i} \sum_{j=1}^{n_j} \delta(v_{ij}, p)^2.$$

Предполагается, что каждая выборка $\{v_{ij}\}$, $j = 1, 2, ..., n_i$ генерируется источником w_i с неизвестной нам явно плотностью условного распределения (8). Величину $dF(w)$ представим в следующем виде:

$$dF(w) = g(w)\frac{N(w)}{N},$$

где $N(w)$ — емкость источника информации w; $N = \sum_{w \in W} N(w)$ — суммарная емкость всех источников информации; $g(w)$ — вес, учитывающий остальные факторы (выбор веса будет описан ниже).

Если учесть, что относительную информационную емкость источника можно оценить как $\dfrac{N(w_i)}{N} \cong \dfrac{n_i}{n}$, то получим следующую оценку для величины (11):

$$M(\delta^2) = \int M(\delta^2 \mid w)\, dF(w) \approx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{I} g_i \sum_{j=1}^{n_j} \delta(v_{ij}, p)^2. \quad (13)$$

Если выбрать единичные веса $g(w) = 1$, то формула (13) сводится к средней величине квадрата отклонения регрессии по всей объединенной выборке $\{v_{ij}\}$, и мы приходим к выражению, совпадающему с (12).

Рассмотренная здесь схема с разбиением совокупной выборки на группы характерна для так называемого дисперсионного анализа, разработанного Фишером [13] для учета влияния «систематической» ошибки группы и «случайной» ошибки внутри группы. Эта схема удобна для описания ситуации с разнородными источниками информации, основанными на разных методах получения сечений как теоретических, так и экспериментальных. В рамках этой схемы удобны формулировка и проверка статистических гипотез, учитывающих разбиение на группы.

Для приложений, в частности для рассматриваемого нами случая электронно-атомного возбуждения, определенный интерес представляет, например, проверка условия выхода систематической ошибки парциального источника из определенных границ. Предположим, что параметры аппроксимации сечения определены из условия минимизации математического ожидания квадрата отклонения (13). Сформулируем для выбранного источника информации w_i следующую гипотезу относительно величины условного математического ожидания (10) квадрата отклонения регрессии:

$$M(\delta^2 \mid w_i) \ \geq \ M(\delta^2). \quad (14)$$

Известно [11 – 13], что для проверки этой гипотезы можно воспользоваться статистикой

$$y = \frac{\left\langle \delta_i^{\,2} \right\rangle - M(\delta^2)}{S_i \sqrt{n_i}}, \quad (15)$$

где

$$\left\langle \delta_i^{\,2} \right\rangle = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_j} \delta_{ij}^{\,2}$$

– выборочное среднее случайной величины квадрата отклонения регрессии $\delta_i = \delta(v_i, p)$ информационного источника w_i;

$$S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_j} (\delta_{ij}^{\,2} - \left\langle \delta_i^{\,2} \right\rangle)^2$$

– квадрат соответствующей выборочной дисперсии.

В модели Неймана – Пирсона критерий отбрасывания гипотезы (14) на уровне значимости α основан на критической области

$$\Omega = \{y \mid y \leq Y\}$$

для статистики (15).

При попадании этой статистики в критическую область гипотеза отбрасывается. При этом вероятность ошибки отбрасывания верной гипотезы (ошибки первого рода) не превосходит величину

$$\alpha = \int_{\Omega} \varphi(y) dy, \quad (16)$$

где $\varphi(y)$ – распределение статистики (15).

Остановимся на вопросе о распределении статистики (15).

Ее можно в принципе получить из распределений условных отклонений

$$F(\delta \mid w) = \int_{\{v \mid \delta(v,p) < \delta\}} \delta(v, p) f(v \mid w) dv, \quad (17)$$

которые, как утверждалось выше, нам не известны.

Иногда полагают, что отклонения имеют нормальные распределения с неизвестными параметрами. Справедливость предположения о нормальности распределения может быть обоснована с помощью центральной предельной теоремы математической статистики в том случае, если отклонения являются суммой вкладов большого числа составляющих с неизвестным распределением. Однако, даже если такое предположение верно для сечения, то оно может оказаться несправедливым для функции от сечения. Так например, отклонения логарифма сечения могут не иметь нормального распределения.

Задачу можно существенно упростить, если рассмотреть случай, когда объем выборки достаточно велик. Тогда, согласно центральной предельной теореме, распределение числителя выражения (15) можно аппроксимировать нормальным распределением независимо от распределения (17). Квадрат выборочной дисперсии в знаменателе выражения (15) стремится к дисперсии. Таким образом, распределение (15) можно аппроксимировать стандартным нормальным распределением с плотностью

$$\varphi(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right).$$

Заметим, что в случае нормального распределения величин квадратов отклонений δ_i^2 статистика (15) имеет t-распределение Стьюдента с $m = n_i - 1$ степенями свободы t_m, которое при большом значении m стремится к нормальному распределению. Однако, как и для отклонений логарифмов, предположение о нормальности распределения величин квадратов отклонений может оказаться неоправданным.

В связи с рассмотренным выше статистическим подходом, следует сделать следующее важное замечание. Как известно, любые утверждения об истинности или ложности гипотез в рамках статистического подхода носят не абсолютный, а вероятностный характер и зависят от выбора уровня значимости, что вносит большую степень субъективизма. К проблеме субъективизма примыкает также вопрос выбора весов парциальных информационных источников, к обсуждению которого мы и переходим.

В наших работах указанный выбор делается по следующему принципу. Данные, взятые из реферируемых журналов, берутся с единичным весом $g_i = 1$. Остальные источники берутся с нулевым весом $g_i = 0$, т. е. не учитываются. Такая модель оправдана тем, что соответствующие результаты прошли экспертную проверку. Попытка проведения более дифференцированного различения неизбежно вносит большой элемент субъективизма. По указанным выше соображениям применение статистических методов не устраняет этот субъективизм.

В этой связи можно указать также на опыт использования подобного подхода в работе [14]. В этой статье представлен совокупный результат по одной проблеме из области физики столкновений, полученный на основе совокупности различных работ; рассмотрены разные варианты оценки использованных публикаций. В результате авторы приходят к выводу, что любые оценки вносят слишком большую степень субъективизма. С другой стороны, оценка на уровне экспертизы в реферируемых изданиях представляется вполне надежной. Образно говоря, при взвешивании информационных источников получается результат, верный (с учетом погрешности его получения) по мнению автора, проводившего взвешивание; тогда как при нашем подходе получается результат, учитывающий мнение большого коллектива экспертов.

Теперь рассмотрим вопрос о выборе аппроксимации для сечения.

Проблема здесь состоит в следующем. С одной стороны, чем полнее набор варьируемых функций, тем точнее он может передать искомую зависимость. Для этого он должен содержать большой набор параметров (например, констант разложения по полному функциональному базису). С другой стороны, при большом числе параметров задача их восстановления становится неустойчивой.

Для оптимального выбора числа параметров следует учесть информацию об особенностях предполагаемой зависимости. Из общих соображений известно, что функция возбуждения (т. е. зависимость величины сечения возбуждения от энергии возбуждающих электронов $Q(E)$, взятая в относительной мере) имеет порог, проходит через максимум при некоторой энергии (в некоторых случаях со структурой) и спадает при больших энергиях. Пороговая зависимость сечения в ряде моделей имеет вид $Q \sim v$, где $v \sim \sqrt{E}$ – скорость сталкивающихся частиц [3, 15].

Известно [3, 15, 16], что при больших энергиях для переходов, идущих при обмене налетающего электрона на валентный, сечение спадает по закону E^{-3}, а для безобменных переходов – по закону E^{-1} (или $\ln E / E$).

Мы ставим задачу представления сглаженного сечения, обладающего четырьмя характерными признаками:

характером пороговой зависимости;

величиной в максимуме;

положением максимума;

характером спада при больших энергиях.

Соответственно, для передачи этих особенностей рассматриваем четырехпараметрическую аппроксимацию сечения возбуждения $\sigma(E, p) = Q(E)$ электронным ударом в виде

$$Q(E) = p_0 \left(\frac{u}{u+1}\right)^{p_1} (u + p_2)^{-p_3}, u = \frac{E}{\Delta E} - 1, \quad (18)$$

где E – энергия электронов, ΔE – порог возбуждения, $p = (p_0, p_1, p_2, p_3)$ – искомые параметры.

Очень приближенно можно считать, что p_0 задает величину сечения, параметр p_2 влияет на форму кривой $Q(E)$ вблизи максимума и на его местоположение, параметр p_1 отвечает за ход сечения у порога возбуждения, а параметр p_3 учитывает разную асимптотику поведения сечения при больших энергиях налетающего электрона E. Следует, однако, иметь в виду, что параметры сильно взаимосвязаны.

Заметим также, что процедура регрессионного анализа гарантирует качество результата только в том диапазоне энергий, в котором имеются исходные данные. Экстраполяция на больший диапазон энергий может быть необоснованной. В частности, определяемый параметр p_3 может не соответствовать реальной асимптотике сечения (например, $p_3 = 1, 3$) при $E \to \infty$.

Наш опыт показывает, что конкретный вид самой аппроксимационной формулы не имеет особого значения. В связи с этим перечислим коротко некоторые фигурирующие в литературе аппроксимации. Следует сказать, что они используются авторами для других задач. Одна группа задач связана с представлением своих результатов для передачи особенностей поведения сечений, другая – с построением эмпирических формул для сечений, содержащих в качестве параметров атомные параметры. Функция $g(x)$, $x = E / \Delta E$ (в записи по Грину) имеет в различных приближениях разный вид, что представлено ниже.

Заметим, что в области электронно-атомного рассеяния некоторые формулы для аппроксимации иногда принято называть по фамилии автора (авторов), т. е. приводимые в статье фамилии авторов скорее относятся именно к формуле, а не к ссылке на работу, в которой она была использована. Таким образом, в литературе используются следующие формулы (приведены далее).

Бете [3, 15]:

$$g(x) = f\,\frac{\lg x}{x};$$

Томсона [3]:

$$g(x) = \frac{1}{x}\left(1 - \frac{1}{x}\right);$$

Грижинского [17]:

$$g(x) = \frac{1}{x}\left[\frac{x-1}{x+1}\right]^{3/2} \left\{1 + \frac{2}{3}\left(1 - \frac{1}{2x}\right) \times \right.$$

$$\left. \times \ln[2,7 + (x-1)^{1/2}]\right\};$$

Дравина [18]:

$$g(x) = 0,66 \cdot f_1 \frac{1}{x}\left[\frac{x-1}{x^2}\right] \cdot \ln(1,25 \cdot f_2 \cdot x),$$

$$f_1 = f_2 = 1.$$

Формула Стаблера [19] зависимости сечения возбуждения k-го уровня атома от энергии электронов для безобменных переходов имеет вид

$$Q_{mk} = \pi e^4 \frac{1}{E_1 + E_2 + U_m}\left[\frac{1}{E_k} - \frac{1}{E_{k+1}} + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{3}E_2\left(\frac{1}{E_k^{\,2}} - \frac{1}{E_{k+1}^{\,2}}\right)\right], E_1 \geq E_{k+1},$$

а при обмене электронами –

$$Q_{mk} = \pi e^4 \frac{1}{E_1 + E_2 + U_m} \times$$

$$\times \left\{\frac{1}{E_1 + U_{k+1}} - \frac{1}{E_1 + U_k} + \frac{2}{3}E_2 \times \right.$$

$$\times\left[\frac{1}{(E_1+U_{k+1})^2}-\frac{1}{(E_1+U_k)^2}\right]\Bigg\},$$

$$E_1 \ge U_m - U_{k+1},$$

где E_1, E_2 – соответственно кинетические энергии налетающего и атомного электронов до столкновения, U_m – потенциал ионизации атома в состоянии m.

Формула Берка и Кингстона [20] представлена в виде

$$Q(E)=\frac{A\log E}{E}+\frac{B}{E}+\frac{C}{E^2}+\cdots$$

с таблицами параметров A, B, C, ... для разных уровней и серий. При этом зависимость в серии Q от n имеет вид

$$A\approx\frac{1096}{n^3}+\frac{616{,}1}{n^4}+\cdots,$$

$$B\approx-\frac{1424}{n^3}-\frac{851{,}0}{n^4}+\cdots.$$

Для полных сечений рассеяния электронов на атомах всех инертных газов для энергий выше 100 эВ предложена обобщенная эмпирическая «жесткая» формула:

$$Q(E)=100(\sqrt{\alpha}-\sqrt{\alpha_0})\left(\frac{1}{\sqrt{E}}-\frac{1}{\sqrt{E_0}}\right),$$

где $\alpha_0=0{,}11$, $E_0=20$ кэВ, α – статическая поляризуемость мишени.

Зависимость сечения возбуждения возбуждения от энергии электронов у Вайнштейна, Собельмана, Юкова [15] представлена как

$$Q(E)=\pi a_0^2\left(\frac{1}{\Delta E}\right)^2\left(\frac{E_1}{E_0}\right)^{3/2}\frac{Q_{\kappa_m}}{2l_0+1}\Phi(u),$$

где для оптически разрешенных переходов $(l_1=l_0\pm 1,\ \Delta S=0)$ функция $\Phi(u)$ имеет вид

$$\Phi(u)=C\left(\frac{u}{u+1}\right)^{1/2}\frac{\ln(16+u)}{u+\phi},$$

или в записи по Грину –

$$g(x)=\sqrt{\frac{x-1}{x}\cdot\frac{15+x}{x+\phi}};$$

а для оптически запрещенных переходов $(l_1\ne l_0\pm 1,\ \Delta S=0)$ –

$$\Phi(u)=C\left(\frac{u}{u+1}\right)^{1/2}\frac{1}{u+\phi}. \qquad (19)$$

Здесь E_0, E_1 – энергии начального и конечного уровней атома при переходе $0\to 1$; Q_{km} – Q-фактор, зависящий только от квантовых чисел угловых моментов.

Таков весьма обширный перечень видов представления функции возбуждения.

Используемая нами зависимость (18) близка к аппроксимации Вайнштейна (19) и строилась на основе ее модификации.

В конце этого раздела рассмотрим вопрос об использовании логарифма сечения. Логарифм имеет смысл использовать в том случае, когда рассматриваемая величина сечения меняется в большом диапазоне порядков величин.

Пусть имеется отклонение регрессии (3) для сечений

$$\delta=Q-\sigma(E,p). \qquad (20)$$

Рассмотрим отклонение регрессии для логарифмов величин

$$\delta'=\ln(Q)-\ln(\sigma(E,p)). \qquad (21)$$

Из представления его в виде

$$\delta'=-\ln\left(1-\frac{\delta}{Q}\right)$$

следует, что при малых отклонениях величины δ (см. формулу (20)) отклонение логарифмов δ' (формула (21)) приближается к относительному отклонению

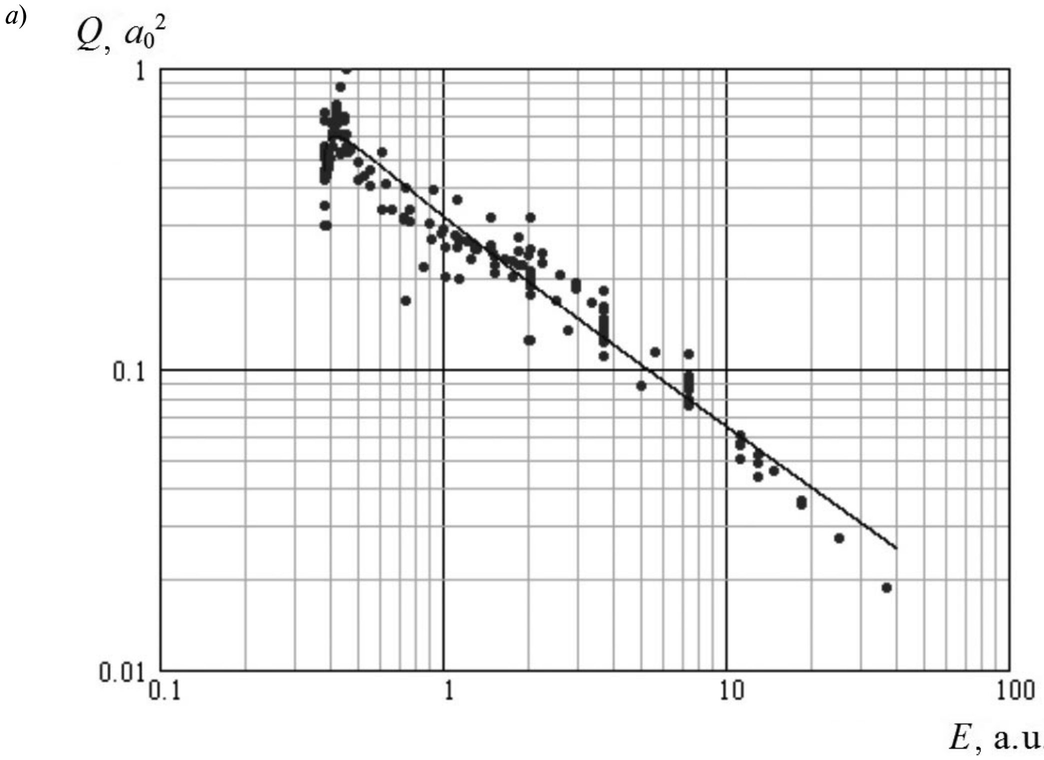
$$\delta'\approx\frac{\delta}{Q}.$$

В связи с этим дисперсию (6) отклонений логарифмов мы называем относительной дисперсией (для краткости).

Результаты исследований для атома водорода

В этом разделе приводятся данные по электронному возбуждению в атоме водорода, полученные на основе описанного выше подхода, по данным из имеющихся источников информации [9].

Задача о рассеянии электронов на атомах водорода и определение сечений такого рассеяния, в частности сечений электрон-



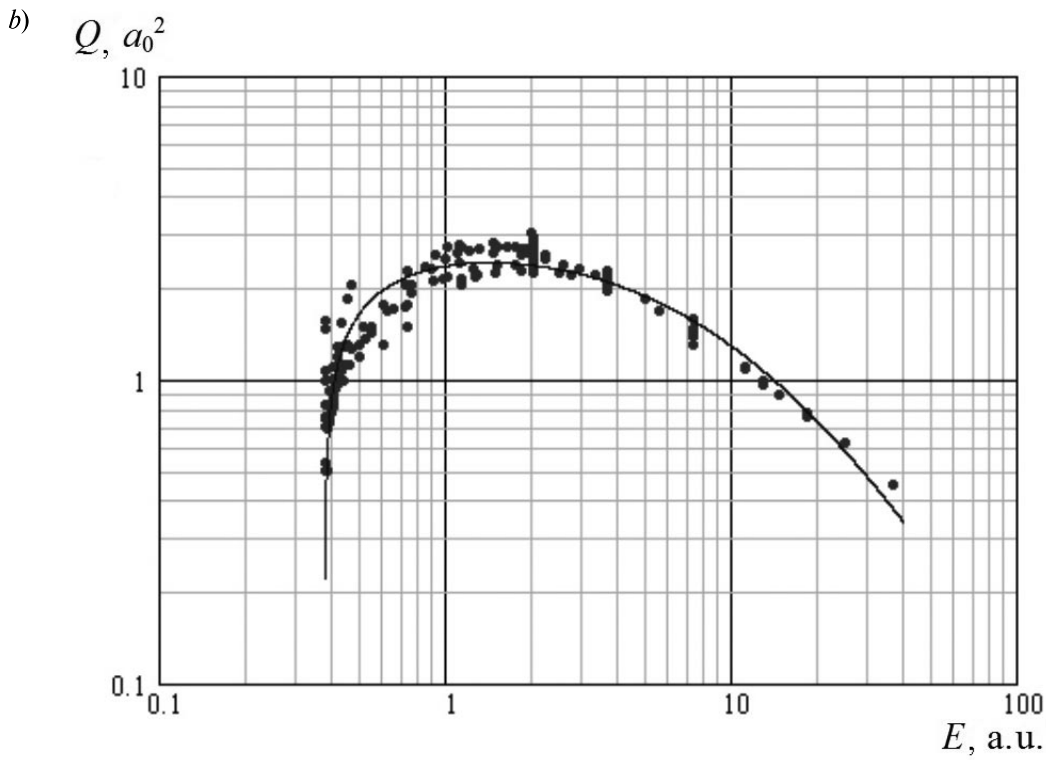


Рис. 1. Сечения электронного возбуждения переходов $1s \rightarrow 2s$ (*a*) и $1s \rightarrow 2p$ (*b*) в атоме водорода в зависимости от энергии возбуждающих электронов. Точки – данные из различных источников, линии – регрессионные кривые. Все величины приводятся в атомной системе единиц.

Таблица

Совокупные результаты по сечениям электронного возбуждения переходов 1$s \to$ 2s, 2p в атоме водорода

Верхний уровень	p_0, a_0^2	p_1	p_2	p_3	D	E_{max}, a.u.	Q_{max}, a_0^2
2s	0,572	0,103	0,554	0,67	0,25	0,41	0,59
2p	982	0,448	35,4	1,61	0,26	1,43	2,43

Обозначения: p_0, p_1, p_2, p_3 – параметры аппроксимации; D – величина выборочной относительной дисперсии; E_{max} , Q_{max} – энергия и величина сечения в максимуме функции возбуждения.

ного возбуждения различных уровней атома водорода, относится к одной из наиболее часто и давно исследуемых задач атомной физики столкновений вследствие сравнительной простоты объекта исследования. Однако, как оказалось при более подробном ознакомлении с литературными источниками, решение этого вопроса еще далеко до полного завершения, и проведенные исследования разными методами дают неодинаковые результаты. По приведенным данным можно судить, насколько они различаются.

Наибольшее количество работ по электронному возбуждению атома водорода приходится на исследование переходов 1$s \to$ 2s, 2p. Для других переходов опубликовано заметно меньше данных.

Для анализа имеющихся результатов нами был использован подход, описанный выше. Применялась четырехпараметрическая аппроксимация зависимости сечений возбуждения от энергии электронов (18). Отклонение регрессии (3) строилось для логарифмов величин сечений, т. е. имело вид (21). Были найдены соответствующие параметры аппроксимации и величины выборочной совокупной относительной дисперсии (13). Информационные источники брались с одинаковым весом $g_i = 1$.

Для переходов 1$s \to$ 2s, 2p в атоме водорода в таблице представлены полученные параметры аппроксимации p_0, $p_1 - p_3$, величина выборочной относительной дисперсии D, энергия и величина сечения в максимуме функции возбуждения E_{max}, Q_{max}. Рис. 1 иллюстрирует исходные данные из различных информационных источников и аппроксимационные кривые, определенные описанным образом. Хорошо виден разброс данных по информационным источникам (все величины приводятся в атомной системе единиц).

Для парциальных источников информации с данными, наиболее сильно отличающимися от регрессионной кривой, проверялась гипотеза (14) о превышении систематической ошибки источника величины выборочной совокупной дисперсии (13). Во всех случаях наименьшее значение вероятности ошибки отбрасывания верной гипотезы (ошибки первого рода) (16) составляет величину, близкую к $\alpha = 0{,}5$.

Заключение

В статье рассмотрен подход к представлению совокупной информации по сечениям электронно-атомного рассеяния в рамках математической статистики на основе регрессионного анализа. Такой подход позволяет учитывать весь набор доступных значений сечения, полученных независимо разными авторами с использованием разных теоретических и экспериментальных методов, а также в разных условиях. Примечательно, что обсуждаемый подход позволяет также объединить в одной кривой, описывающей взаимосвязь величин Q и E, результаты различных методов, полученных в ограниченном узком диапазоне энергий электронов, и распространить его на соответствующий широкий диапазон энергий. При этом широкий диапазон таков, что в нем данные конкретных методик нельзя экстраполировать в области энергий, лежащие за пределами своих определенных интервалов значений. Этот вывод очень важен для плазменных приложений, которые требуют знания констант скоростей в широком диапазоне энергий электронов.

Из общих принципов статистики следует, что результаты, полученные на основе описанного подхода, представляются более надежными, чем данные любого конкретного информационного источника.

Стоит отметить, что подход может быть применен не только к рассматриваемой проблеме, но и к представлению агрегированной информации в других областях исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Сунакава С.** Квантовая теория рассеяния. М.: Мир, 1979.

[2] **Фриш С.Э.** Оптические спектры атомов. Спб.: Изд-во «Лань», 2010.

[3] **Друкарев Г.Ф.** Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.

[4] **Митюрева А.А., Смирнов В.В.** Аппроксимация энергетических зависимостей сечений электронного возбуждения атома гелия // Оптика и спектроскопия. 1993. Т. 74, Вып. 1. С. 6–11.

[5] **Митюрева А.А., Смирнов В.В.** Аппроксимация энергетических зависимостей сечений электронного возбуждения атомных уровней гелия из метастабильных состояний // Оптика и спектроскопия. 1999. Т. 86. Вып. 6. С. 933–938.

[6] **Митюрева А.А., Смирнов В.В., Пономаренко Г.А.** Аппроксимация сечений электронного возбуждения триплетных уровней гелия из метастабильного состояния 2^3S_1 // Оптика и спектроскопия. 2002. Т. 92. Вып. 3. С. 368–374.

[7] **Mityureva A.A., Smirnov V.V.** Electron impact excitation cross sections of helium atom levels from the 2^3S_1 metastable state according to experiment and theory // Russian Journal of Physical Chemistry. 2002. Vol. 76. No. 1. Pp. S109–S114.

[8] **Митюрева А.А., Смирнов В.В.** Электронное возбуждение атомов аргона в метастабильные состояния и из метастабильных в вышележащие // Оптика и спектроскопия. 2004. Т. 97. Вып. 4. С. 544–558.

[9] **Митюрева А.А., Смирнов В.В.** Интегральные сечения электронного возбуждения уровней атома водорода // Оптика и спектроскопия. 2006. Т. 101. Вып. 3. С. 360–365.

[10] **Mityureva A.A.** Electron-impact excitation of Kr 5s, 5p levels // World Academy of Science. Engineering and Technology. 2011. No. 59. Pp. 949–952.

[11] **Корн Г.А., Корн Т.М.** Справочник по математике. М.: Наука, 1973.

[12] **Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф.** Справочник по теории вероятностей и математической статистике. М.: Наука, 1985.

[13] **Шеффе Г.** Дисперсионный анализ. Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1963.

[14] **Rudd M.E., Kim Y.K., Madison D.H., Gallagher J.W.** Electron production in proton collisions: total cross sections // Rev. Mod. Phys. 1985. Vol. 57. No. 4. Pp. 965–994.

[15] **Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.** Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М., Наука, 1973.

[16] **Очкур В.И.** О методе Борна – Оппенгеймера в теории атомных столкновений // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 3(9). С. 734–741.

[17] **Grizinski M.** Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions // Phys. Rev. 1965. Vol. 138, No. 2. Pp. 336–358.

[18] **Dravin H.W.** Zur formelmassigen Darstellung der Ionisierungsquerschnitte gegenuber Electronenstoss // Zs. Phys. 1961. Vol. 164. Pp. 513–521.

[19] **Stabler R.C.** Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions // Phys. Rev. A. 1964. Vol. 133. No. 5. Pp. 1268–1274.

[20] **Fon W.C., Berrington K.A., Burke P.J., Kingston A.E.** Total cross sections for electron excitation transitions between the 1^1S, 2^3S, 2^1S, 2^3P and 2^1P states of atomic helium // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. No. 16. Pp. 2921–2934.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИТЮРЕВА Алла Александровна – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики Санкт-Петербургского государственного университета.*

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7 – 9
mitalal@mail.ru

СМИРНОВ Валерий Владимирович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики Санкт-Петербургского государственного университета.*
199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7 – 9
valery_smirnov@mail.ru

Mityureva A.A., Smirnov V.V. THEORETICAL BASE OF THE APPROACH TO THE REPRESENTATION OF AGGREGATE INFORMATION ON THE CROSS SECTIONS OF THE SCATTERING PROCESSES.

In the present paper, the approach to the representation of aggregate information on the cross sections of elementary processes is described and its justification within mathematical statistics is given. It is caused by necessity of integrated account of the results obtained by different works at different times, in different groups, based on experimental and theoretical studies in various energy ranges. The main attention is paid to the process of electron-atom scattering. As an example of the proposed approach application, the aggregate result on thus obtained integral cross sections of electron impact excitation of the transitions in the hydrogen atom is presented.

SCATTERING CROSS SECTION, ELECTRON EXCITATION, INFORMATION SOURCE, REGRESSION ANALYSIS.

REFERENCES

[1] **S. Sunakava,** Quantum theory of scattering, Moscow, Mir, 1979.

[2] **S.E. Frish,** Optical spectra of atoms, Publ. "Lan", 2010.

[3] **G.F. Drukarev,** Collisions of electrons with atoms and molecules. Moscow, Nauka, 1978.

[4] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov,** Electron excitation cross section energy behaviour approximation for helium atom, Opt & Spectr. 74(1) (1993) 6–11.

[5] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov,** Approximation of energy dependences of the cross sections for electron excitation of atomic levels of helium from metastable states, Optics & Spectroscopy. 86(6) (1999) 833–837.

[6] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov, G.A. Ponomarenko,** Approximation of the electron excitation cross sections for triplet states excited from the 2^3S_1 Metastable State in Helium, Optics & Spectroscopy. 92(3) (2002) 325–331.

[7] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov,** Electron impact excitation cross sections of helium atom levels from the 2^3S_1 metastable state according to experiment and theory, Russian Journal of Physical Chemistry, 76(1) (2002) S109–S114.

[8] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov,** Electronic excitation of Ar atoms to metastable states and from metastable to higher states, Optics & Spectroscopy. 97(4) (2004) 508–521.

[9] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov,** Integral electronic excitation cross sections of hydrogen atom levels, Optics & Spectroscopy. 101 (3) (2006) 338–343.

[10] **A.A. Mityureva,** Electron-impact excitation of Kr 5s, 5p levels, World Academy of Science, Engineering and Technology. Iss. 59 (2011) 949–952.

[11] **G.A. Korn, T.M. Korn,** Handbook of mathematics, Moscow, Nauka, 1973.

[12] **V.S. Koroljuk, N.I. Portenko, A.V. Skorokhod, A.F. Turbin,** Handbook of the theory of probability and mathematical statistics. Nauka, Moscow, 1985.

[13] **H. Scheffe,** The analysis of variance, John Wiley & Sons Inc., USA, 1999.

[14] **M.E. Rudd, Y.K. Kim, D.H. Madison, J.W. Gallagher,** Electron production in proton collisions: total cross sections, Rev. Mod. Phys. 57 (4) (1985) 965–994.

[15] **L.A. Vainshtein, I.I. Sobelman, E.A. Yukov,** The cross sections for the excitation of atoms and ions by electrons, Oxford, Pergamon Press, 1973.

[16] **V.I. Ochkur**, On the Born-Oppenheimer method in the theory of atom collisions, JETF. 45(3(9)) (1963) 734–741.

[17] **M. Grizinski,** Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions, Phys. Rev. 138(2) (1965) 336–358.

[18] **H.W. Dravin,** Zur formelmassigen Darstellung der Ionisierungsquerschnitte gegenuber Electronenstoss, Zs. Phys. 164 (1961) 513–521.

[19] **R.C. Stabler,** Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions, Phys. Rev. A. 133(5) (1964) 1268–1274.

[20] **W.C. Fon, K.A. Berrington, P.J. Burke, A.E. Kingston,** Total cross sections for electron excitation transitions between the 1^1S, 2^3S, 2^1S, 2^3P and 2^1P states of atomic helium, J. Phys. B. 14(16) (1981) 2921–2934.

THE AUTHORS

MITYUREVA Alla A.
St. Petersburg State University
Universitetskaya emb., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation
mitalal@mail.ru

SMIRNOV Valeriy V.
St. Petersburg State University
Universitetskaya emb., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation
valery_smirnov@mail.ru