

# Матричные элементы и ядра интеграла столкновений уравнения Больцмана

© А.Я. Эндер,<sup>1</sup> И.А. Эндер,<sup>2</sup> Л.А. Бакалейников,<sup>1</sup> Е.Ю. Флегонтова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 16 сентября 2010 г.)

Статья является продолжением нашей работы, в которой получены некоторые новые общие свойства матричных элементов и ядер как для приходной (gain term), так и для уходной (loss term) части интеграла столкновений. В данной статье мы сосредоточили свое внимание на уходной части интеграла столкновений, что обосновано простотой аналитических выражений в этом случае. Получены аналитические формулы для расчета матричных элементов. Для степенных потенциалов взаимодействия проведено полное исследование ядер. Построение ядер выполнено с использованием как аналитического, так и численного подхода.

## Введение

Как показано в [1], при разложении функции распределения (ФР) по сферическим гармоникам нелинейное уравнение Больцмана переходит в систему интегродифференциальных уравнений для коэффициентов разложения, содержащих в интегральной части изотропные ядра. С помощью представления таких ядер через матричные элементы интеграла столкновений (МЭ) был установлен ряд их общих свойств. В частности, для степенных (и квазистепенных) потенциалов выполнены соотношения подобия, что существенно упрощает вычисление как самих нелинейных ядер, так и линейных ядер, которые получаются из них путем интегрирования с максвелловским распределением.

Для уходной части интеграла столкновений было показано, как нелинейные ядра выражаются через некоторые линейные ядра  $L_G^l$ . В случае произвольных законов взаимодействия эти ядра легко выражаются через линейные изотропные МЭ второго типа.

В данной статье получены простые аналитические формулы как для изотропных, так и для неизотропных уходных МЭ, с помощью этих формул и соотношений подобия изучены особенности поведения уходных ядер.

Асимптотический подход, аналогичный разработанному ранее для линейных приходных ядер в [2] и [3], был применен к представлению ядер через МЭ. Сравнение с аналитическими формулами показало, что при такой асимптотике достаточно учитывать небольшое число членов в конечной сумме. При этом получается прекрасное совпадение с аналитическими результатами.

## 1. Матричные элементы уходной части интеграла столкновений

В [1] показано, что самое общее нелинейное ядро уходной части интеграла столкновений выражается через линейные ядра  $L_G^l(c, c_1)$ . Последние определяются

через линейные МЭ второго типа следующим образом:

$$L_G^l(c, c_1) = \sum_{r, r_1} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) K_{0,0,r_1,l}^{-,r,l} \frac{c_1^l S_{l+1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1,l}}, \quad (1)$$

$$\sigma_{r,l} = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{2\pi^{3/2}r!}, \quad (2)$$

где  $S_{l+1/2}^r(c^2)$  — полиномы Сонина,  $\sigma_{r,l}$  — нормировочные множители, а матричные элементы  $K_{r_1,l_1,r_2,l_2}^{-,r,l}$  определены в [1, (54)]. Более подробно о МЭ и о связях линейных МЭ с интегральными скобками см. [4].

Показано также, что в случае степенных потенциалов ( $V \sim 1/r^\kappa$ ,  $\mu = (\kappa - 4)/2\kappa$ ) эти ядра обладают подобием, т.е. для любого положительного вещественного числа  $s$

$$L_G^l(sc, sc_1) = s^{2\mu} L_G^l(c, c_1), \quad (3)$$

что, естественно, приводит к существенным упрощениям при вычислении таких ядер через МЭ.

### 1.1. Формулы для изотропных уходных линейных МЭ

Как и в [4], введем обозначения для линейных и линейных изотропных МЭ следующим образом:

$$K_{r_1,l,0,0}^{r,l} = \Lambda_{r,r_1,l}^{(1)}, \quad K_{0,0,r_2,l}^{r,l} = \Lambda_{r,r_2,l}^{(2)}, \quad (4)$$

$$K_{r_1,0}^r = \lambda_{r,r_1}^{(1)}, \quad K_{0,r_2}^r = \lambda_{r,r_2}^{(2)}. \quad (5)$$

Из свойств симметрии интеграла столкновений и определения МЭ [1] между линейными МЭ каждого типа должны выполняться следующие соотношения:

$$\frac{\Lambda_{r,r_1,l}^{(i)}}{\Lambda_{r_1,r,l}^{(i)}} = \frac{\sigma_{r_1,l}}{\sigma_{r,l}}, \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

В [4] и [5] выведены рекуррентные соотношения для нелинейных МЭ. С помощью таких рекуррентов по

заданным линейным изотропным МЭ  $\lambda_{r,r_1}^{(i)}$  одного типа строятся любые МЭ (в том числе как линейные неизотропные  $\Lambda^{(i)}$  обоих типов, так и линейные изотропные  $\lambda$  другого типа).

Как было отмечено в [1], в ряде случаев (изотропное сечение рассеяния, обрезанные потенциалы взаимодействия) матричные элементы и ядра могут быть определены отдельно для приходной (gain term) и уходной (loss term) частей интеграла столкновений. При этом для МЭ каждой из этих частей выполняются рекуррентные соотношения. Также по отдельности сохраняются условия симметрии (6), а для степенных потенциалов — соотношения подобия (3).

В случае степенных потенциалов в [4] были получены простые аналитические формулы для  $\lambda_{r,r_1}$ . Как отмечалось в [1], присутствующий в них коэффициент  $J_0(2kT/m)^\mu$  пропорционален частоте столкновений и исчезает при обезразмеривании уравнения Больцмана. Если эти МЭ выписать отдельно для ухода, то получим

$$\lambda_{r,r_1}^{(1)-} = \frac{Q_\mu r!}{\Gamma(r+3/2)2^{r+r_1}} \times \sum_{q=0}^{\min(r_1,r)} \frac{2^{2q}\Gamma(q+\mu+3/2)\Gamma(-\mu+r_1+r-2q)}{q!\Gamma(\mu+3/2)(r_1-q)!(r-q)!}, \quad (7)$$

$$\lambda_{r,r_1}^{(2)-} = Q_\mu \frac{\Gamma(r+r_1-\mu)}{\Gamma(r+3/2)2^{r+r_1}r_1!}, \quad (8)$$

где

$$Q_\mu = \frac{2^\mu \Gamma(\mu+3/2)}{\Gamma(-\mu)}. \quad (9)$$

Как видно, формулы для МЭ второго типа значительно проще. Все МЭ в (8) легко выражаются через  $\lambda_{0,0}^{(2)-}$ . Действительно, при  $r_1 = 0$  имеем

$$\lambda_{r+1,0}^{(2)-} = \frac{\lambda_{r,0}^{(2)-}(r-\mu)}{2(r+3/2)},$$

а при  $r = \text{const}$ :

$$\lambda_{r,r_1+1}^{(2)-} = \frac{\lambda_{r,r_1}^{(2)-}(-\mu+r_1+r)}{2(r_1+1)}.$$

## 1.2. Формулы для неизотропных линейных МЭ второго типа

Как было показано в [4], в случае степенных потенциалов линейные неизотропные МЭ связаны с линейными изотропными МЭ следующим соотношением:

$$\Lambda_{i,p,l} = \frac{i!}{p!} \sum_{n=0}^{[l/2]} (-1)^n \frac{(2l-2n-1)!!}{n!(i+l-n)!} \times \sum_{k=n}^{l-n} \frac{(p+k)!(\mu+i-p+1)_{l-n-k}}{(k-n)!2^{l-k}(l-n-k)!} \lambda_{l+i-n,p+k}. \quad (10)$$

Здесь через  $(a)_q$  обозначены символы Похгаммера

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_q = (a)(a+1)\dots(a+q-1);$$

$$q = 1, 2, 3, \dots$$

Используем эту формулу для уходных МЭ. В Приложении 1 показано, что подстановка в (10) выражения (8) для  $\lambda_{r,r_1}^{(2)-}$  приводит к

$$\Lambda_{i,p,l}^{(2)-} = Q_\mu \frac{\Gamma(l+i+p-\mu)}{2^{l+i+p}p!\Gamma(l+i+3/2)}. \quad (11)$$

Отсюда видно, что между линейными уходными МЭ второго типа имеется очень простая связь

$$\Lambda_{i,p,l}^{(2)-} = \lambda_{i+l,p}^{(2)-}. \quad (12)$$

Поскольку в эту связь не входит  $\mu$ , то формула (12) справедлива для произвольных сечений взаимодействия. Отметим, что отношение  $\Lambda_{i,p,l}^{(2)-}/\Lambda_{p,i,l}^{(2)-}$ , найденное из (11), равно обратному отношению нормировок (2)

$$\frac{\Lambda_{i,p,l}^{(2)-}}{\Lambda_{p,i,l}^{(2)-}} = \frac{i!\Gamma(l+p+3/2)}{p!\Gamma(l+i+3/2)} = \frac{\sigma_{p,l}}{\sigma_{i,l}}, \quad (13)$$

что согласуется с (6).

## 1.3. Дополнительные связи для уходных МЭ и вычисление обобщенных коэффициентов Вигнера

Если известны линейные изотропные МЭ второго типа, то, как показано в [4], с помощью рекуррентных процедур может быть построен произвольный нелинейный МЭ, как изотропный, так и неизотропный. Точнее, в качестве стартовых достаточно знать только диагональные изотропные МЭ.

В [1] получено выражение произвольного уходного МЭ через линейные неизотропные МЭ второго типа, справедливое для произвольных сечений взаимодействия

$$K_{r_1,l_1,r_2,l_2}^{-,r,l} = \sum_{r'} B_{r',l_2,r_1,l_1}^{r,l} \Lambda_{r',r_2,l_2}^{(2)-}. \quad (14)$$

Коэффициенты  $B_{r',l_2,r_1,l_1}^{r,l}$  определяются следующим образом:

$$B_{r',l_2,r_1,l_1}^{r,l} = C_{l_1,l_2}^l b_{r',l_2,r_1,l_1}^{r,l}, \quad (15)$$

$$C_{l_1,l_2}^l = \int_{-1}^1 P_l(x) P_{l_1}(x) P_{l_2}(x) dx / \pi_l^0, \quad (16)$$

$$b_{r',l_2,r_1,l_1}^{r,l} = \int_0^\infty M_T(c') c'^l S_{l+1/2}^r(c'^2) c'^{l_2} S_{l_2+1/2}^{r'}(c'^2) c'^{l_1} \times S_{l_1+1/2}^{r_1}(c'^2) v'^2 dv' / \sigma_{r,l_1}. \quad (17)$$

Здесь  $P_n(x)$  — полиномы Лежандра,  $M_T(c) = (\frac{m}{2kT\pi})^{3/2} e^{-c^2}$ , а  $\pi_l^0$  — нормировочные множители

(см. (10)–(12) из [1]). Отметим, что коэффициенты  $C_{l_1, l_2}^l$  выражаются через  $3j$ -символы Вигнера, которые широко используются в квантовой теории (см. (107.15) в [6])

$$C_{l_1, l_2}^l = \frac{2}{\pi_l^0} \begin{pmatrix} l & l_1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \quad (18)$$

Коэффициенты  $B_{r', l_2, r_1, l_1}^{r, l}$  можно назвать обобщенными коэффициентами Вигнера. С учетом того, что каждый МЭ  $K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{-, r, l}$  может быть выражен через линейные изотропные МЭ второго типа как с помощью рекуррентных соотношений из [4], так и из связей (14), возникает вопрос, что можно получить из дополнительных связей (14) и не может ли это привести к противоречиям.

В Приложении 2 рассмотрены эти вопросы для изотропного случая, когда коэффициенты  $B_{r', 0, r_1, 0}^{r, 0}$  переходят в  $b_{r', r_1}^r$  и показано, что соотношения (14) не приводят к каким-либо противоречиям и могут быть использованы для нахождения коэффициентов  $b_{r', r_1}^r$ , т.е. для вычисления интегралов (17). Для этого можно положить  $r_2 = 0$  и использовать известные величины линейных МЭ первого (7) и второго (8) типов при целых значениях  $\mu = |r - r_1|, |r - r_1| + 1, |r - r_1| + 2, \dots, r + r_1$ .

Аналогичным образом можно найти и коэффициенты  $B_{r', l_2, r_1, l_1}^{r, l}$ . Для этого необходимо вычислить осесимметричные МЭ уходящей части интеграла столкновений при  $r_2 = 0$  для ряда целых неотрицательных значений  $\mu$ . Затем можно по сравнительно простым формулам находить  $B_{r', l_2, r_1, l_1}^{r, l}$ .

## 2. Ядра уходящей части интеграла столкновений

Уходящий интеграл столкновений можно представить в форме [1]:

$$\hat{I}^-(f, f) = f(\mathbf{c}) \hat{I}_0^-(f),$$

где линейный оператор  $\hat{I}_0^-(f)$  имеет вид

$$\hat{I}_0^-(f) = \int f(\mathbf{c}') g \Sigma(g) d\mathbf{c}', \quad g = |\mathbf{c} - \mathbf{c}'|. \quad (19)$$

Здесь  $\Sigma(g)$  — полное сечение рассеяния. Используя определение ядра  $L_G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1)$  и его связь с ядрами  $L_G^l(c, c_1)$  (см. [1], формулы (66), (67)), а также формулу (19), можно показать, что

$$L_G^l(c, c_1) = 2\pi \int_{-1}^1 g \Sigma(g) P_l(x) dx, \quad (20)$$

$$g = \sqrt{c^2 + c_1^2 - 2cc_1x}.$$

Для степенных потенциалов  $g \Sigma(g) = g^{2\mu}$  и

$$L_G^l(c, c_1) = 2\pi \int_{-1}^1 g^{2\mu} P_l(x) dx. \quad (21)$$

Таким образом, ядра  $L_G^l(c, c_1)$  выражаются в квадратурах. Для степенных потенциалов интегралы в (21) берутся для любых целых значений  $\mu$ , а также для  $\mu = 0.5$  (совпадает с результатом из [8]) и для  $\mu = -0.5$ . В последнем случае он равен

$$L_G^l(c, c_1) = \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(\min(c, c_1))^l}{(\max(c, c_1))^{l+1}}. \quad (22)$$

Итак, построение уходящих ядер не представляет труда. Ниже мы продолжим изучение представления этих ядер через МЭ и покажем, какие дополнительные результаты можно получить при этом.

### 2.1. Приведенные ядра $\Psi_\mu^l(\omega)$

Как уже отмечалось, для степенных потенциалов ядра  $L_G^l$  обладают свойством подобия (3). Если по аналогии с тем, как это делалось для нелинейного ядра в [1], ввести переменную  $Al = \sqrt{c^2 + c_1^2}$  и угол  $\omega$  так, что  $\sin \omega = c_1/Al$  ( $\cos \omega = c/Al$ ), то можно определить приведенные ядра по формуле

$$\Psi_\mu^l(\omega) = \frac{L_G^l(c, c_1)}{4\pi Al^{2\mu}}. \quad (23)$$

Существенно, что такие ядра зависят только от одной переменной  $\omega$ , а индекс  $\mu$  введен только для того, чтобы подчеркнуть, что эти зависимости разные для различных потенциалов взаимодействия, которые в данном случае однозначно определяются параметром  $\mu$ .

Воспользуемся выражением  $L_G^l(c, c_1)$  через МЭ (1), тогда получим  $\Psi_\mu^l(\omega)$  в виде

$$\Psi_\mu^l(\omega) = \frac{1}{4\pi Al^{2\mu}} \sum_{r, r_1} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \Lambda_{r, r_1, l}^{(2)-}(\mu) \frac{c_1^l S_{l+1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1, l}}. \quad (24)$$

Из выражения ядер через МЭ (1) и свойства симметрии МЭ (13) видно, что ядра  $L_G^l(c, c_1)$  симметричны, т.е.

$$L_G^l(c, c_1) = L_G^l(c_1, c). \quad (25)$$

Это, в свою очередь, означает, что приведенное ядро  $\Psi_\mu^l(\omega)$ , заданное на промежутке  $(0 \leq \omega \leq \pi/2)$ , можно рассматривать только на одном из промежутков  $(0 \leq \omega \leq \pi/4)$  или  $(\pi/4 \leq \omega \leq \pi/2)$ , поскольку

$$\Psi_\mu^l(\omega) = \Psi_\mu^l(\pi/2 - \omega). \quad (26)$$

В [1] для модели твердых шаров с использованием результатов [7,8] были получены формулы для  $L_G^l(c, c_1)$ . Перепишем их в переменных  $Al, \omega$ .

При  $c_1 \leq c$  ( $0 \leq \omega \leq \pi/4$ ) имеем

$$L_G^l(c, c_1) = 4\pi Al \left[ \frac{\text{tg}^{l+1} \omega \sin \omega}{(2l+1)(2l+3)} - \frac{\text{tg}^{l-1} \omega \sin \omega}{(2l+1)(2l-1)} \right], \quad (27)$$

а при  $c_1 \geq c$  ( $\pi/4 \leq \omega \leq \pi/2$ )

$$L_G^l(c, c_1) = 4\pi Al \left[ \frac{\text{ctg}^{l+1} \omega \cos \omega}{(2l+1)(2l+3)} - \frac{\text{ctg}^{l-1} \omega \cos \omega}{(2l+1)(2l-1)} \right]. \quad (28)$$

Сравнив с (23), получим приведенное ядро на промежутке  $0 \leq \omega \leq \pi/4$  для модели твердых шаров в виде

$$\Psi_{0.5}^l(\omega) = \frac{\text{tg}^{l-1} \omega \sin \omega}{2l+1} \left[ \frac{\text{tg}^2 \omega}{2l+3} - \frac{1}{2l-1} \right]. \quad (29)$$

Изучим поведение приведенных ядер в окрестности точки  $\omega = 0$ . Из определения  $Al$  и  $\omega$  следует, что (24) можно представить в виде

$$4\pi Al^{2\mu-2l} \Psi_{\mu}^l(\omega) = \sin^l \omega \cos^l \omega \times \sum_{r,r_1} S_{l+1/2}^r(c^2) \Lambda_{r,r_1,l}^{(2)-} S_{l+1/2}^{r_1}(c_1^2) / \sigma_{r_1,l}. \quad (30)$$

Из свойства симметрии (26) поведение ядер на краях промежутка можно определить, изучив их поведение в окрестности точки  $\omega = 0$  ( $c_1 = 0$ ). Из (30) следует, что при  $\omega \rightarrow 0$  и  $l \neq 0$  ядра убывают по крайней мере как  $\sin^l \omega$ . Обозначим

$$\Phi_{\mu}^l(\omega) = \Psi_{\mu}^l(\omega) / \sin^l \omega. \quad (31)$$

Теперь устремим  $c_1$  к нулю. Из определения полиномов Сонина и нормировочных коэффициентов следует, что

$$S_{l+1/2}^{r_1}(0) / \sigma_{r_1,l} = 2\pi^{3/2} / \Gamma(l+3/2) \quad (32)$$

и не зависит от  $r_1$ . В результате из двойной суммы справа в (30) выделяется сумма МЭ

$$D_{rl} = \sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1,l}^{(2)-}. \quad (33)$$

В этих обозначениях с учетом того, что  $Al|_{\omega=0} = c$ , из (30) получаем

$$\sum_r S_{l+1/2}^r(c^2) D_{rl} = \Phi_{\mu}^l(0) \frac{2\Gamma(l+3/2)}{\pi^{1/2}} c^{2\mu-2l}. \quad (34)$$

Отсюда можно найти зависимость сумм МЭ  $D_{rl}$  от индекса  $r$ . В силу полноты и ортогональности системы полиномов Сонина для этого надо обе части этого уравнения умножить на  $c^{2l+2} M(c) S_{l+1/2}^r / \sigma_{rl}$  ( $M(c) = 1/\pi^{3/2} e^{-c^2}$ ) и проинтегрировать по  $c$

$$D_{rl} = \Phi_{\mu}^l(0) \frac{\Gamma(l+3/2)}{\pi^2 \sigma_{r,l}} J, \quad J = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\mu+1/2} S_{l+1/2}^r(x) dx. \quad (35)$$

Здесь осуществлен переход к переменной интегрирования  $x = c^2$ . Входящий сюда интеграл можно взять аналитически. В [9] имеется формула (7.414.11), из которой следует, что при  $\mu > -3/2$

$$J = \frac{\Gamma(\mu+3/2)\Gamma(l+r-\mu)}{r!\Gamma(l-\mu)}. \quad (36)$$

Используя (2), (35) и (36), получим

$$D_{rl} = \Phi_{\mu}^l(0) \frac{2\Gamma(l+3/2)\Gamma(\mu+3/2)\Gamma(l+r-\mu)}{\sqrt{\pi}\Gamma(r+l+3/2)\Gamma(l-\mu)}. \quad (37)$$

Таким образом, получено выражение для бесконечной суммы МЭ по  $r_1$  без использования явного вида МЭ. Эта сумма известна с точностью до коэффициента  $\Phi_{\mu}^l(0)$ . Это и понятно, поскольку в основе вывода лежит соотношение подобия, которое выполнено для любых единиц измерения, т.е. при произвольной нормировке интеграла столкновений.

Сумма МЭ, т.е. функция  $D_{rl}$ , может быть вычислена с использованием явного вида МЭ (11) при выбранной нами нормировке

$$D_{rl} = Q_{\mu} \sum_{r_1} \frac{\Gamma(r+l+r_1-\mu)}{\Gamma(r+l+3/2)2^{l+r+r_1}r_1!}. \quad (38)$$

Для вычисления суммы используем формулу (5.211(16)) из [10] при  $x = 0.5$ :

$$\sum_k \frac{\Gamma(a+k)}{2^k k!} = 2^a \Gamma(a). \quad (39)$$

Если в (38) подставить (39) при  $a = r+l-\mu$  и вспомнить определение  $Q_{\mu}$  (9), то получим

$$D_{rl} = Q_{\mu} 2^{-\mu} \frac{\Gamma(r+l-\mu)}{\Gamma(r+l+3/2)} = \frac{\Gamma(\mu+3/2)\Gamma(r+l-\mu)}{\Gamma(-\mu)\Gamma(r+l+3/2)}. \quad (40)$$

Заметим, что из сравнения этого выражения с (11) можно, учитывая (33) и (12), получить следующие связи между МЭ:

$$\sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1,l}^{(2)-} = \Lambda_{r,0,l}^{(2)-} 2^{r+l-\mu} = \lambda_{r+l,0}^{(2)-} 2^{r+l-\mu}.$$

Зависимость  $D_{rl}$  от  $r$  в (40) оказалась такой же, как и в полученной из подобия ядра формуле (37). Теперь, когда получено точное выражение для  $D_{rl}$ , из (37) и (40) легко находится  $\Phi_{\mu}^l(0)$

$$\Phi_{\mu}^l(0) = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(l-\mu)}{2\Gamma(l+3/2)\Gamma(-\mu)}. \quad (41)$$

Из этой формулы видно, что при  $l = 0$   $\Phi_{\mu}^0(0) = 1$  и не зависит от  $\mu$ . Следовательно, на краях промежутка ( $\omega = 0$  и  $\omega = \pi/2$ ) приведенное ядро  $\Psi_{\mu}^0 = 1$ . Соответственно для ядра имеем  $L_G^0(Al, 0) = L_G^0(0, Al) = 4\pi Al^{2\mu}$ .

Для модели твердых шаров ( $\mu = 1/2$ ) из (41) легко показать с учетом (31), что

$$\Phi_{0.5}^l(0) = -\frac{1}{(2l+1)(2l-1)},$$

$$\Psi_{0.5}^l(\omega) = -\frac{\sin^l \omega}{(2l+1)(2l-1)} (1 + o(\omega)). \quad (42)$$

Такую же зависимость приведенного ядра  $\Psi_{0.5}^l(\omega)$  в окрестности  $\omega = 0$  можно получить из точной формулы (29) [8].

При  $l \neq 0$  и  $\omega \rightarrow 0$  ядра  $\Psi_{\mu}^l(\omega) \sim \sin^l \omega$ , а коэффициент пропорциональности  $\Phi_{\mu}^l(0)$  на интервале  $-1 < \mu < 1$  везде отличен от нуля кроме точки  $\mu = 0$ , где он обращается в нуль. После перехода через нуль коэффициент  $\Phi_{\mu}^l(0)$  меняет знак. Так, например, в отличие от (42) при  $\mu = -0.5$  из (41) имеем  $\Phi_{-0.5}^l(0) = 1/(2l+1)$ .

Особая точка  $\mu = 0$  соответствует максвелловским молекулам. В этом случае, как следует из (11) и (24), МЭ  $\Lambda_{r,r_1,l}^{(2)-} = \delta_{r_0} \delta_{r_1} \delta_{l_0}$  и при всех  $\omega$  функция  $\Phi_{\mu}^l(\omega) = \delta_{l_0}$ .

## 2.2. Асимптотический подход к расчету уходного ядра

Формулы (1), (11) позволяют рассчитывать ядра для различных  $l$  и  $\mu$  путем суммирования бесконечных рядов. В реальных расчетах суммирование производится до конечных значений индексов  $r$  и  $r_1$ . Для учета остатка сумм (1) можно воспользоваться асимптотикой матричных элементов и полиномов Сонина при больших индексах. Такой подход был подробно описан нами в работах, посвященных расчету линейных приходных ядер для псевдомакселловских молекул [2] и твердых шаров [3].

Как и в [3], введем понятие обобщенного матричного элемента (ОМЭ):

$$\Lambda_{r,l}^G(c, \mu) = \frac{\sigma_{r,l}}{S_{l+1/2}^r(c^2)} \sum_{\Delta=-r}^{\infty} \frac{\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(2)-}(\mu) S_{l+1/2}^{r+\Delta}(c^2)}{\sigma_{r+\Delta,l}}, \quad (43)$$

где  $\Delta = r_1 - r$ . Тогда ядро принимает вид

$$L_G^l(c, c_1) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{c_1^l S_{l+1/2}^r(c_1^2) \Lambda_{r,l}^G(c_1, \mu) c^l S_{l+1/2}^r(c^2)}{\sigma_{r,l}}, \quad (44)$$

формально совпадающий с выражением для ядра в случае псевдомакселловских молекул. Из (43) с учетом (32) видно, что ОМЭ при  $c \rightarrow 0$  переходит в  $D_{rl}$  (33).

Рассмотрим сумму, входящую в выражение для ОМЭ,

$$Z_r(c) = \sum_{\Delta=-r}^{\infty} \frac{\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(2)-}(\mu) S_{l+1/2}^{r+\Delta}(c^2)}{\sigma_{r+\Delta,l}}. \quad (45)$$

Напомним асимптотическое выражение для полиномов Сонина  $S_{l+1/2}^r(x)$  при больших  $r$  [2]

$$S_{l+1/2}^r(x) = \frac{e^{x/2} R^{l/2}}{x^{(l+1)/2} \sqrt{\pi}} [\cos(\gamma(x, R)) + O(1/R)], \quad (46)$$

где

$$R = r + 3/4 + l/2 + l(l+1)/(4x) - x/12,$$

$$\gamma(x, R) = 2\sqrt{xR} - (l+1)\pi/2.$$

Для оценки асимптотического поведения ОМЭ при больших значениях  $r$  выделим область  $|\Delta| < r^{1/2+\varepsilon}$ , где  $\varepsilon \in (0, 1/6)$ . Асимптотическое выражение для МЭ (11) в этой области можно получить, оценив отношение Г-функций (см. [3]):

$$\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(2)-}(\mu) = \frac{\Gamma(\mu+3/2)}{\Gamma(-\mu)2\sqrt{\pi}} \frac{1}{R^{2+\mu}} e^{-\frac{\Delta^2}{4R}} \times \left[ 1 + \frac{(2(l-\mu)-3)\Delta}{4R} + \frac{\Delta^3}{8R^2} + o\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) \right]. \quad (47)$$

Покажем, что для асимптотической оценки суммы (45) можно ограничиться суммированием по интервалу  $-N < \Delta < N$ , где  $N = r^{1/2+\varepsilon}$ . Для этого рассмотрим  $Z_{r,N}(c)$  — остаток суммы (45) по области  $N \leq \Delta < \infty$ . Асимптотику  $\sigma_{r,l}$  при больших  $r$  легко получить в виде

$$\sigma_{r,l} = [R^{l+1/2}/2\pi^{3/2}](1 + O(R^{-1})). \quad (48)$$

Из (46), (48) получаем оценку

$$\left| \frac{S_{l+1/2}^{r+\Delta}(c^2)}{\sigma_{r+\Delta,l}} \right| \leq \frac{\text{const}}{R^{(l+1)/2}}.$$

Из явного вида уходных МЭ второго рода (11) имеем

$$\frac{\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(2)-}(\mu)}{\Lambda_{r,r+N,l}^{(2)-}(\mu)} \leq q^{\Delta-N}, \quad q = \frac{(r+N/2+l/2-\mu/2)}{(r+N+1)}.$$

Отсюда следует, что остаток  $Z_{r,N}(c)$  может быть оценен сверху суммой геометрической прогрессии, и с учетом (47)

$$|Z_{r,N}(c)| < \frac{\text{const}}{R^{(l+1)/2}} \frac{1}{1-q} \Lambda_{r,r+N,l}^{(2)-}(\mu) < \frac{\text{const}_1 e^{-N^2/4R}}{NR^{2+\mu}(R+N)^{(l-1)/2}}. \quad (49)$$

Видно, что при больших  $R$  и  $N = O(R^{1/2+\varepsilon})$  остаток (49) экспоненциально убывает, и им можно пренебречь. Аналогичным образом оценивается сумма по области  $-r < \Delta \leq -N$ . Следовательно, основной вклад в сумму  $Z_r$  вносит конечная, но расширяющаяся с ростом  $r$  область значений  $\Delta$ :

$$Z_r(c) \simeq \sum_{\Delta=-(N-1)}^{N-1} \frac{\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(i)}(\mu) S_{l+1/2}^{r+\Delta}(c^2)}{\sigma_{r+\Delta,l}}. \quad (50)$$

Для асимптотической оценки суммы (50) воспользуемся (47), (46), (48) и перейдем от суммирования к интегрированию по формуле Эйлера–Маклорена [3]. В результате получим следующую оценку ОМЭ (43) при больших  $r$ :

$$\Lambda_{r,l}^G(c, \mu) = \frac{\Gamma(\mu+3/2)}{\Gamma(-\mu)} \frac{e^{-c^2}}{R^{3/2+\mu}} \times \left\{ 1 + c \left( \mu + \frac{3}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{R}} \text{tg}(\gamma(c^2, R)) \right\} + o(R^{-2-\mu}). \quad (51)$$

Подчеркнем, что рассматриваемый ОМЭ экспоненциально убывает с увеличением  $c^2$ , что принципиально отличается от поведения ОМЭ, используемого при расчете линейного приходного ядра [3], который возрастает с увеличением безразмерной скорости. Это отличие связано с различным асимптотическим поведением  $\Lambda_{r,r+\Delta,l}^{(2)-}$  и  $\Lambda_{r,r+\Delta,l}^+$  при больших  $r$  и  $\Delta = O(r^{1/2+\varepsilon})$ .

При небольших (порядка единиц) значениях индекса  $r$  асимптотические оценки неприменимы. Наши расчеты показали, что в этом случае для правильного вычисления  $\Lambda_{r,l}^G$  и суммы (45) достаточно учитывать несколько десятков членов.

Перейдем к вычислению ядра (44). Зная (51) и асимптотику полиномов Сонина (46), получим для общего члена суммы (44), который будем обозначать  $W_r^l(c, c_1)$ , асимптотическую оценку

$$\begin{aligned} W_r^l(c, c_1) &= \frac{c_1^l S_{l+1/2}^r(c_1^2) \Lambda_{r,l}^G(c_1, \mu) c^l S_{l+1/2}^r(c^2)}{\sigma_{r,l}} \\ &= \frac{\Gamma(\mu + 3/2)}{\Gamma(-\mu)} \frac{2\sqrt{\pi} e^{(c^2 - c_1^2)/2}}{c c_1} \frac{1}{R^{2+\mu}} \left\{ \cos(\gamma(c^2, R)) \right. \\ &\times \cos(\gamma(c_1^2, R)) + c_1 \left( \mu + \frac{3}{2} \right) \\ &\times \left. \frac{\cos(\gamma(c^2, R)) \sin(\gamma(c_1^2, R))}{\sqrt{R}} \right\} + o(R^{-5/2-\mu}). \end{aligned} \quad (52)$$

Для оценки остатка суммы (44) при больших значениях индекса  $r$  вновь воспользуемся формулой Эйлера–Маклорена, которая в данном случае принимает вид

$$\begin{aligned} \sum_{r=m}^{\infty} W_r^l(c, c_1) &= \frac{1}{2} W_m^l(c, c_1) + \int_m^{\infty} h(u) du + o(W_m^l(c, c_1)) \\ &= \frac{1}{2} W_m^l(c, c_1) + U_m^l(c, c_1) + o(W_m^l(c, c_1)), \end{aligned} \quad (53)$$

где функция  $h(r)$  совпадает с  $W_r^l(c, c_1)$  при целых  $r$ , а

$$\begin{aligned} U_m^l(c, c_1) &= \frac{\Gamma(\mu + 3/2)}{\Gamma(-\mu)} \frac{2\sqrt{\pi} e^{(c^2 - c_1^2)/2}}{c c_1} \\ &\times \left\{ \frac{1}{2} [I_{11}(m, c, c_1) + I_{12}(m, c, c_1)] + c_1 \left( \mu + \frac{3}{2} \right) \right. \\ &\times \left. \frac{1}{2} [I_{21}(m, c, c_1) - I_{22}(m, c, c_1)] \right\} + o(m^{-2-\mu}). \end{aligned} \quad (54)$$

Здесь использованы обозначения

$$I_{11}(m, c, c_1) = \int_m^{\infty} \frac{1}{R^{\mu+2}} \cos(2c\sqrt{R} - 2c_1\sqrt{R}) dr, \quad (55)$$

$$I_{12}(m, c, c_1) = \int_m^{\infty} \frac{1}{R^{\mu+2}} \cos(2c\sqrt{R} + 2c_1\sqrt{R} - (l+1)\pi) dr, \quad (56)$$

$$I_{21}(m, c, c_1) = \int_m^{\infty} \frac{1}{R^{\mu+5/2}} \sin(2c\sqrt{R} + 2c_1\sqrt{R} - (l+1)\pi) dr, \quad (57)$$

$$I_{22}(m, c, c_1) = \int_m^{\infty} \frac{1}{R^{\mu+5/2}} \sin(2c\sqrt{R} - 2c_1\sqrt{R}) dr. \quad (58)$$

Интегралы (55)–(58) аналитически не берутся, но их можно рассчитать с приемлемой точностью без каких-либо затруднений.

В соответствии с (53) приближенное выражение для ядра можно записать в виде

$$L_G^{(m)l}(c, c_1) = B_{m-1}^l(c, c_1) + \frac{1}{2} W_m^l(c, c_1) + U_m^l(c, c_1), \quad (59)$$

где

$$B_m^l(c, c_1) = \sum_{r=0}^m \sum_{r_1=0}^{\infty} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \Lambda_{r,r_1,l}(\mu) c_1^l S_{l+1/2}^{r_1}(c_1^2) / \sigma_{r_1,l}. \quad (60)$$

Сумма  $B_m^l(c, c_1)$  учитывает вклад в ядро от конечного интервала индекса  $r$ . При ее расчете (60) для полиномов Сонина и МЭ используются точные, а не асимптотические выражения. Верхний предел внутренней суммы оценивается по внутренней сходимости.

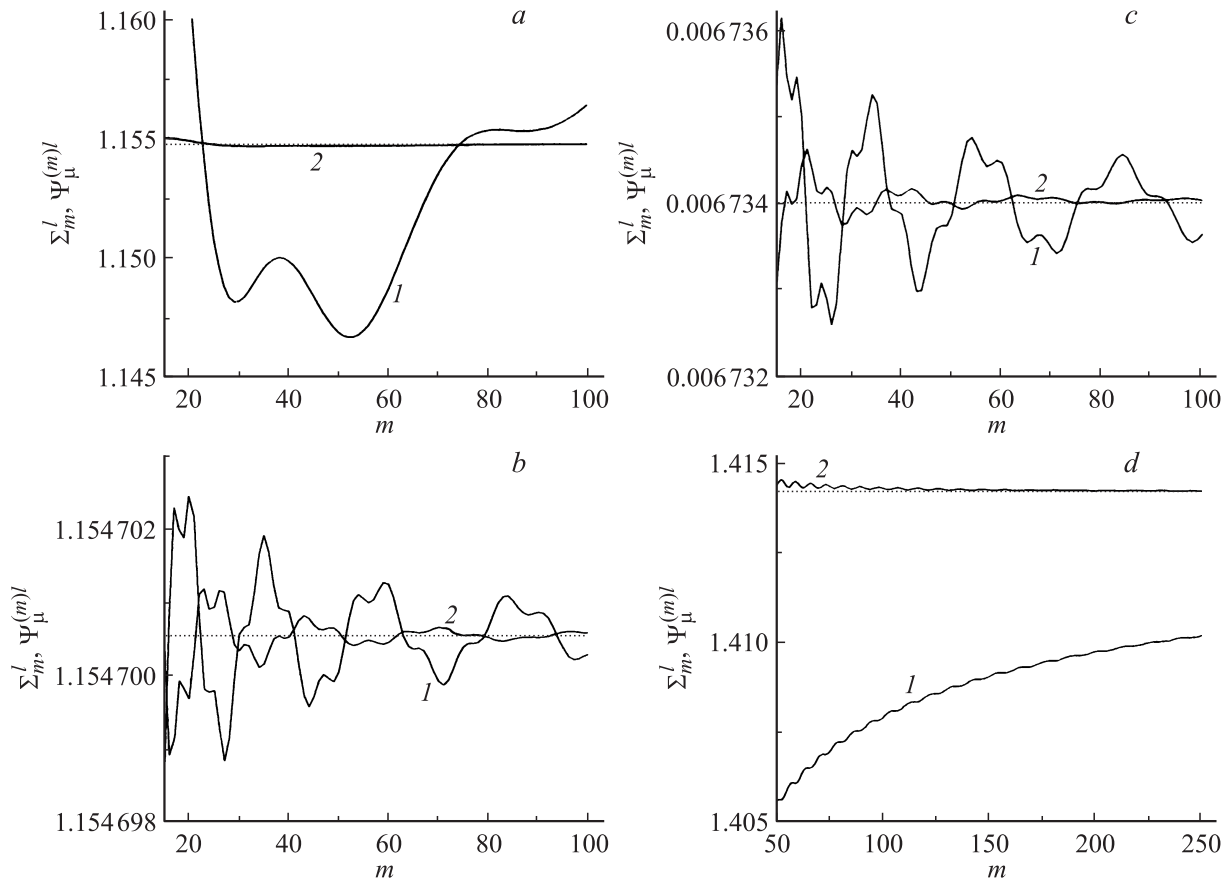
Учет остатка  $U_m^l(c, c_1)$  позволяет существенно улучшить сходимость и уменьшить число членов конечной суммы, которые необходимо вычислять при расчете ядра. Из вида асимптотики уходящих МЭ (47) следует, что скорость сходимости конечной суммы  $B_m^l(c, c_1)$  зависит от  $\mu$ . В кинетической теории обычно рассматриваются степенные потенциалы, с  $\mu$  в интервале от 0 до 0.5, или комбинации таких потенциалов (например, потенциал Леннарда–Джонса). Авторы провели рассмотрение в более широком интервале  $\mu$  от  $-0.5$  до 0.5. Как видно из (54), неучтенные члены имеют порядок величины  $o(r^{-2-\mu})$ . Таким образом, в рассматриваемом интервале лучше всего сходятся конечные суммы при  $\mu = 0.5$  (твердые шары), а хуже всего — при  $\mu = -0.5$ . При  $\mu = -0.5$  остаток убывает с ростом  $r$  как  $1/r$ , т.е. так же, как для линейных приходных ядер в случае  $\mu = 0.5$  [3]. Приведенные ниже результаты, иллюстрирующие сходимость конечных сумм и ядер  $L_G^{(m)l}$  (59) к точному значению (22), соответствуют именно наихудшему случаю ( $\mu = -0.5$ ).

Для уходящих ядер  $L_G^l$  выполняются соотношения подобия (3), поэтому можно осуществлять расчет при оптимальных с точки зрения сходимости значениях  $Al = \sqrt{c^2 + c_1^2}$ . Переходя к переменным  $Al$  и  $\omega$ , запишем конечные приведенные суммы и ядра в виде

$$\Sigma_m^l(\omega) = B_m^l / (4\pi Al^{2\mu}), \quad \Psi_\mu^{(m)l}(\omega) = L_G^{(m)l} / (4\pi Al^{2\mu}),$$

связанные с (60), (59) соотношениями, аналогичными (23).

На рис. 1 построены  $\Sigma_m^l(\omega)$  и  $\Psi_\mu^{(m)l}(\omega)$  в зависимости от  $m$  при  $\mu = -0.5$ . Для кривых на рис. 1, *a, d* при



**Рис. 1.** Сходимость приведенных ядер без учета асимптотики  $\Sigma_m^l(\omega)$  (1) и ядер, рассчитанных с учетом асимптотики остатка  $\Psi_\mu^{(m)l}(\omega)$  (2), к точному значению  $\Psi_\mu^l(\omega)$  (пунктир) при  $\mu = -0.5$ : а —  $l = 0$ ,  $\omega = \pi/3$ ,  $Al = 1$ ; б —  $l = 0$ ,  $\omega = \pi/3$ ,  $Al = 5$ ; в —  $l = 5$ ,  $\omega = \pi/3$ ,  $Al = 5$ ; д —  $l = 0$ ,  $\omega = \pi/4$ ,  $Al = 5$ .

добавлении остатка амплитуда осцилляций уменьшается более чем на два порядка. Эти результаты аналогичны полученным в [2] и [3] для линейных приходных ядер.

Однако существует качественное различие между рассматриваемым случаем и вычислением линейных приходных ядер. Оно связано с отмеченной выше разницей в поведении ОМЭ с ростом безразмерной скорости, а следовательно и в поведении конечных сумм и асимптотики остатков. В случае линейных приходных ядер асимптотика остатка растет с ростом  $c$ ,  $c_1$  как  $\exp((c^2 + c_1^2)/2)$  [3]. Соотношения подобия не выполняются, поэтому невозможно свести задачу к расчету ядер при меньших значениях аргументов.

При выборе оптимального  $Al$  воспользуемся полученными выше асимптотическими оценками. Выражения (54) для  $U_m^l(c, c_1)$  включают ограниченный осциллирующий множитель в фигурных скобках, а также множитель перед скобками вида

$$F(c, c_1) = \frac{e^{(c^2 - c_1^2)/2}}{cc_1}. \quad (61)$$

Легко заметить, что в переменных  $Al$  и  $\omega$  остаток при  $\omega > \pi/4$  ( $c_1 > c$ ) экспоненциально убывает с ростом  $Al$ . При  $\omega = \pi/4$  ( $c_1 = c$ ) остаток убывает с ростом  $Al$

как  $Al^{-2}$ . Наконец, при  $\omega < \pi/4$  ( $c_1 < c$ ) функция  $F(c, c_1)$  имеет минимум при  $Al = \sqrt{2/(1 - 2\sin^2 \omega)}$ . Что касается осциллирующего множителя в фигурных скобках, он убывает с ростом  $Al$  из-за увеличения частоты осцилляций подынтегральной функции в (55)–(58), однако эта зависимость слабее чем (61).

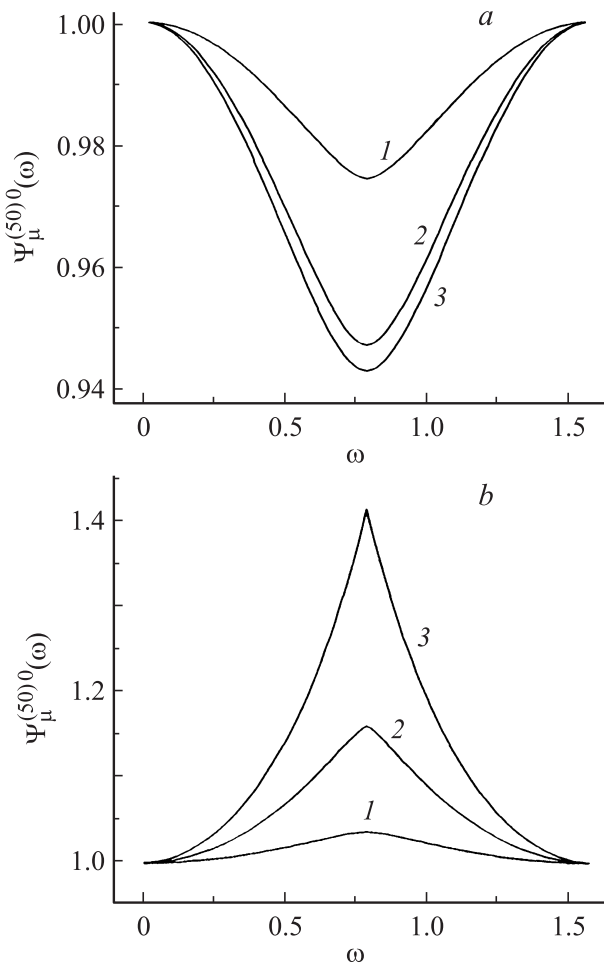
Свойство симметрии ядра (25) позволяет ограничиться вычислениями на промежутке  $\pi/4 \leq \omega \leq \pi/2$ . Рис. 1, б, в иллюстрирует сходимость  $B_m^l$  и  $L_G^{(m)l}$  при  $Al = 5$  ( $\omega = \pi/3$ ). При нескольких десятках членов конечной суммы относительная ошибка порядка  $10^{-6}$  для  $l = 0$  и  $10^{-4}$  для  $l = 5$ , даже без учета асимптотики остатка. При учете остатка ошибка уменьшается еще в несколько раз, это более заметно при  $l = 5$  (рис. 1, в). При дальнейшем увеличении  $Al$  сходимость ухудшается, по-видимому, из-за потери точности в процессе вычислений.

При  $c = c_1$  ( $\omega = \pi/4$ ) функция  $F(c, c_1)$  слабее зависит от  $Al$ , и учет асимптотики остатка оказывается весьма существенным даже при  $Al = 5$  (рис. 1, д).

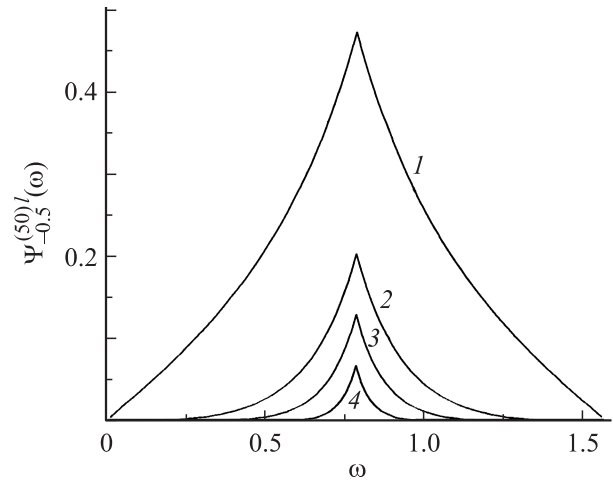
Асимметрия выражений  $B_m^l$  и  $U_m^l(c, c_1)$  относительно перестановки  $c$  и  $c_1$ , которая может, на первый взгляд, показаться противоречащей симметрии ядра, объясняется тем, что внутренняя сумма вычисляется полностью

(верхний предел оценивается по внутренней сходимости), а во внешней сумме суммирование прекращается при  $r = m$ . Если поменять порядок суммирования, асимптотика остатка совпадает с полученным выше выражением (53) с точностью до перестановки аргументов. Конечные суммы при изменении порядка суммирования и перестановке аргументов также совпадают, как легко видеть из свойства уходящих МЭ (13). Следовательно, для улучшения сходимости важно, чтобы внутреннее суммирование выполнялось по индексу полинома Сонина от большего аргумента.

На рис. 2, 3 представлены ядра  $\Psi_{\mu}^{(m)l}(\omega)$  при различных значениях  $\mu$  и  $l$ . Расчет производился при  $Al = 5$ , что позволило повысить точность и ограничиться числом членов в конечных суммах  $m = 50$ . Рис. 2 иллюстрирует изменение формы ядер в зависимости от  $\mu$  при  $l = 0$ , а рис. 3 — в зависимости от  $l$  при  $\mu = -0.5$ . На рис. 3 не приведено ядро для  $l = 0$ , которое везде  $> 1$  (см. рис. 2, *b*). На концах интервала изменения  $\omega$  функции  $\Psi_{\mu}^{(m)l}(\omega)$  быстро стремятся к нулю с увеличением  $l$ .



**Рис. 2.** Ядра  $\Psi_{\mu}^{(m)l}(\omega)$ , найденные численно с учетом асимптотики остатка, при  $m = 50, l = 0$ : *a* —  $\mu = 0.1$  (1),  $\mu = 0.3$  (2),  $\mu = 0.5$  (3); *b* —  $\mu = -0.1$  (1),  $\mu = -0.3$  (2),  $\mu = -0.5$  (3).



**Рис. 3.** Ядра  $\Psi_{\mu}^{(m)l}(\omega)$ , найденные численно с учетом асимптотики остатка при  $\mu = -0.5, m = 50$ ;  $l = 1$  (1),  $l = 3$  (2),  $l = 5$  (3),  $l = 10$  (4).

### 2.3. Вычисление $k(c)$ для разных $\mu$

При линеаризации интеграла столкновений функцию распределения представляют в виде  $f(\mathbf{c}) = M(c)(1 + \varphi(\mathbf{c}))$ , где  $\varphi(\mathbf{c})$  — малая добавка. При этом, как показано в [1], проекция уходящей части интеграла столкновений на полином Лежандра  $P_l(x)$  принимает вид

$$I^{-l} = k_H(c)\varphi^l(c) + \int A^{-l}(c, c_1)\varphi^l(c_1)c_1^2 dc_1, \quad (62)$$

где  $\varphi^l(c)$  — это коэффициент в разложении ФР  $\varphi(\mathbf{c})$  по полиномам Лежандра, а

$$A^{-l}(c, c_1) = M(c)M(c_1)L_G^l(c, c_1), \quad k_H(c) = k(c)M(c).$$

При этом  $k(c)$  может представляться либо в виде интеграла от ядра  $L_G^0(c, c_1)$  с максвеллианом

$$k(c) = \int_0^{\infty} L_G^0(c, c_1)M(c_1)c_1^2 dc_1, \quad (63)$$

либо в виде ряда

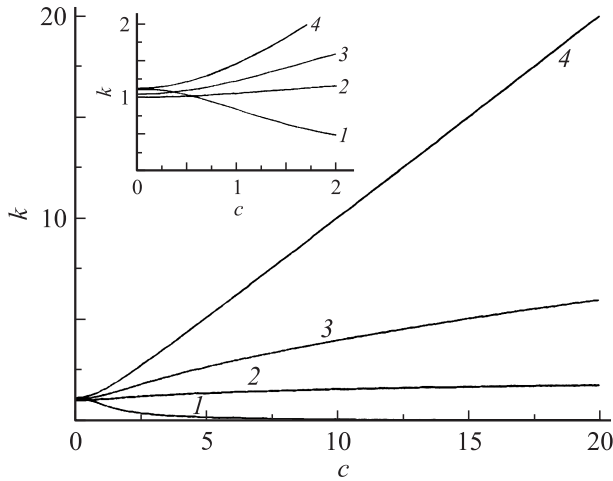
$$k(c) = \sum_{r=0}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2)K_{0,0,0,0}^{-,r,0}. \quad (64)$$

Отсюда следует, что  $k(c)$  зависит только от скалярной величины — модуля скорости  $c$  — и определяется простейшими линейными изотропными МЭ.

Для модели твердых шаров аналитическая формула для  $k(c)$  была получена еще Гильбертом в [7] и хорошо известна в кинетической теории.

Интересно отметить, что численный расчет  $k(c)$  с помощью разложения по полиномам Сонина (64) показал, что даже при сохранении в разложении пятисот





**Рис. 4.** Зависимости  $k(c)$  при  $\mu = -0.5$  (1),  $\mu = 0.1$  (2),  $\mu = 0.3$  (3),  $\mu = 0.5$  (4). На вставке — начальные участки зависимостей.

полиномов Сонина удастся вычислить  $k(c)$  только в диапазоне  $0 \leq c < 9.85$ . Численное интегрирование ядра с максвеллианом (63) позволило сосчитать эту функцию до  $c = 100$  и более.

Были вычислены  $k(c)$  для ряда псевдостепенных потенциалов по формуле (63). На рис. 4 приведены зависимости  $k(c)$  для различных  $\mu$ , полученные численным интегрированием (63). При расчете использовались соотношения подобия, ядра вычислялись при  $Al = 5$  и  $m = 50$ . Из рисунка видно, что при положительных  $\mu$  функции  $k(c)$  возрастают, а при отрицательных — убывают. Интересно отметить, что значения  $k(0)$  при  $\mu = 0.5$  и  $-0.5$  совпадают и равны  $2\sqrt{\pi}$ .

### 3. Заключение

Сформулируем основные выводы. На примере исследования уходного члена интеграла столкновений показано, что использование общих свойств ядер [1] позволяет существенно упростить их вычисление. При этом широко используются новый метод расчета матричных элементов интеграла столкновений [4], свойства МЭ и, в частности, их асимптотическое поведение.

В случае степенных потенциалов для нелинейных ядер, как уходных, так и приходных, выполнено соотношение подобия. Линейные приходные ядра таким свойством не обладают [1]. В свою очередь нелинейные уходные ядра выражаются через линейные ядра  $L_G^l(c, c_1)$ , которые также обладают свойством подобия.

В последнем разделе показано, что функция  $k(c)$  находится путем интегрирования ядра  $L_G^0(c, c_1)$  с максвелловским распределением (63). Это вычисление легко выполняется и обеспечивает высокую точность именно благодаря соотношению подобия. Отсюда можно сделать вывод, что и линейные приходные ядра проще строить с помощью интегрирования с максвеллианом нелинейных

ядер. Таким образом, на повестку дня ставится вопрос о построении нелинейных ядер.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-08-01017.

### Приложение 1

Перепишем (10), обозначив  $l + i - n = r$ ,  $p + k = r_1$  и сделав замену  $k' = k - n$ ,

$$\Lambda_{i,p,l} = \frac{i!}{p!} \sum_{n=0}^{[l/2]} \frac{a_{nl}}{r!} \sum_{k'=0}^{l-2n} \binom{l-2n}{k'} \times \frac{(r_1)!(\mu + i - p + 1)_{l-2n-k'}}{2^{l-k'-2n}} \lambda_{r,r_1}. \quad (65)$$

Здесь  $a_{nl} = (-1)^n (2l - 2n - 1)! / (n!(l - 2n)!2^n)$  — коэффициенты полинома Лежандра. Подставим сюда (8)

$$\Lambda_{i,p,l}^{(2)-} = Q_\mu \frac{i!}{p!} \sum_{n=0}^{[l/2]} \frac{2^n a_{nl}}{2^{r+l+p} r!} \sum_{k'=0}^{l-2n} \binom{l-2n}{k'} \times \frac{(\mu + i - p + 1)_{l-2n-k'} \Gamma(r + r_1 - \mu)}{\Gamma(r + 3/2)}. \quad (66)$$

Обозначим  $l - 2n = s$ ,  $\mu + i - p + 1 = a$ ,  $l + i + p - \mu = b$ . Числитель из второй суммы в (66) перепишем в виде

$$(\mu + i - p + 1)_{l-2n-k'} \Gamma(r + r_1 - \mu) = (a)_{s-k'} \Gamma(b + k') = \frac{\Gamma(a + s - k') \Gamma(b + k')}{\Gamma(a)}.$$

Тогда вторая сумма в (66) запишется так:

$$S_2 = \frac{1}{\Gamma(a) \Gamma(r + 3/2)} \sum_{k'=0}^s \binom{s}{k'} \Gamma(a + s - k') \Gamma(b + k'). \quad (67)$$

Используя метод индукции либо интегральное представление  $B$ -функции, можно показать, что

$$\sum_{k'=0}^s \binom{s}{k'} \Gamma(a + s - k') \Gamma(b + k') = \Gamma(a + s + b) \frac{\Gamma(a) \Gamma(b)}{\Gamma(a + b)}. \quad (68)$$

Подставим это выражение в (67), а затем (67) в (66) и вспомним, что  $s = l - 2n$ ,  $a = \mu + i - p + 1$ ,  $b = l + i + p - \mu$ , и  $r = l + i - n$ , тогда

$$\Lambda_{i,p,l}^{(2)-} = Q_\mu \frac{i! \Gamma(b)}{2^{l+p} p!} \sum_{n=0}^{[l/2]} 2^n a_{nl} \frac{(2r - 1)!}{\Gamma(r + 3/2) (2r - s)!}. \quad (69)$$

Поскольку  $\Gamma(r + 3/2) = \sqrt{\pi} (2r + 1)! / 2^{r+1}$ , то

$$\Lambda_{i,p,l}^{(2)-} = Q_\mu \frac{2i!}{2^{l+p} p!} \frac{2^{l+i} \Gamma(b)}{\sqrt{\pi} (2r - s)!} \sum_{n=0}^{[l/2]} \frac{a_{nl}}{2r + 1}. \quad (70)$$

Рассмотрим сумму

$$S_l = \sum_{n=0}^{[l/2]} \frac{a_{nl}}{2l + 2i - 2n + 1}. \quad (71)$$

Используя интегралы от полиномов Лежандра со степенной функцией (формулы 7.231 из [9]), получим (сначала для четных  $l$ )

$$\begin{aligned} S_l &= \frac{(-1)^{l/2} \Gamma(l/2 - (l + 2i)/2) \Gamma(1/2 + (l + 2i)/2)}{2\Gamma(-(l + 2i)/2) \Gamma(l/2 + 3/2 + (l + 2i)/2)} \\ &= \frac{(-1)^{l/2} \Gamma(-i) \Gamma(l/2 + 1/2 + i)}{2\Gamma(-(l/2 + i)) \Gamma(l + i + 3/2)}. \end{aligned}$$

Заметим, что  $\Gamma(i + l/2 + 1/2) = \sqrt{\pi} (2i + l - 1)!! / 2^{i+l/2}$  и

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma(-i)}{\Gamma(-(l/2 + i))} &= (-i - l/2)_{l/2} = \frac{(-1)^{l/2} (i + l/2)!}{i!} \\ &= \frac{(-1)^{l/2} (2i + l)!!}{2^{i+l/2} i!}. \end{aligned}$$

Это дает

$$S_l = \frac{\sqrt{\pi} (2i + l)!}{i! 2^{2i+l+1} \Gamma(l + i + 3/2)}. \quad (72)$$

Подстановка (72) в (70) приводит к искомому соотношению

$$\begin{aligned} \Lambda_{i,p,l} &= Q_\mu \frac{2i!}{2^{l+p} p!} \frac{2^{l+i} \Gamma(b)}{\sqrt{\pi} (2r - s)!} \frac{\sqrt{\pi} (2i + l)!}{i! 2^{2i+l+1} \Gamma(l + i + 3/2)} \\ &= Q_\mu \frac{\Gamma(l + i + p - \mu)}{2^{l+i+p} p! \Gamma(l + i + 3/2)}. \end{aligned} \quad (73)$$

Проводя аналогичные выкладки для нечетных  $l$ , легко убедиться, что формула (73) при этом не изменится.

## Приложение 2

Для уходящих МЭ в изотропном случае из (14) имеем следующие дополнительные связи между нелинейными МЭ и линейными МЭ второго типа, справедливые для произвольного сечения взаимодействия:

$$K_{r_1, r_2}^{-,r} = \sum_{r'=|r-r_1|}^{r+r_1} b_{r,r_1}^{r'} \lambda_{r',r_2}^{(2)-}, \quad (74)$$

где

$$b_{r,r_1}^{r'} = \int_0^\infty M(c) S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^{r'}(c^2) S_{1/2}^{r_1}(c^2) c^2 dc / \sigma_r. \quad (75)$$

В случае степенных потенциалов  $\lambda_{r',r_2}^{(2)-}$  определяются по формулам (8) и (9).

Пределы суммирования в (74) находятся исходя из определения коэффициентов  $b_{r,r_1}^{r'}$  (75). Рассмотрим произведение  $S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^{r_1}(c^2)$ , входящее под знак интеграла

в (75). Это произведение есть полином по  $c^2$  степени  $r + r_1$  и может быть представлено в виде суммы полиномов Сонина порядка  $0, 1, \dots, r + r_1$ . Следовательно интеграл в (75) будет обращаться в нуль при  $r' > r + r_1$  и коэффициент  $b_{r,r_1}^{r'}$  будет не равен нулю только при условии  $r' \leq r + r_1$ . Если начать рассмотрение с произведения  $S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^{r_1}(c^2)$  или  $S_{1/2}^{r_1}(c^2) S_{1/2}^r(c^2)$ , то получим  $r_1 \leq r + r'$  и  $r \leq r_1 + r'$  соответственно. Последние два условия дают:  $r' \geq |r - r_1|$ .

При  $r_1 = 0$  из (74) получаем  $K_{0,r_2}^{-,r} = b_{r,0}^r K_{0,r_2}^{-,r}$ , т.е.  $b_{r,0}^r = 1$ , что не противоречит определению (75), из которого следует  $b_{r,0}^{r'} = \delta_{r'r}$ .

При  $r = 0$ , с одной стороны, из (75) получаем

$$b_{0,r_1}^{r'} = \frac{\sigma_{r_1}}{\sigma_0} \delta_{r'r_1}, \quad (76)$$

а с другой — из (74) получаем

$$K_{r_1, r_2}^{-,0} = b_{0,r_1}^{r_1} K_{0,r_2}^{-,r_1}. \quad (77)$$

В частном случае при  $r_2 = 0$  отсюда с учетом (76) имеем

$$K_{r_1, 0}^{-,0} = \frac{\sigma_{r_1}}{\sigma_0} K_{0,0}^{-,r_1}, \quad (78)$$

что совпадает с условием симметрии линейных МЭ (6).

Напомним, что все МЭ связаны рекуррентными соотношениями, которые имеют для МЭ уходящего члена такой же вид, как и для МЭ полного интеграла столкновений [1]. Для степенных потенциалов в изотропном по скоростям случае с использованием этих соотношений все МЭ находятся однозначно, если известны линейные МЭ одного из типов. Возникает вопрос, что нового дают связи (74)?

На (74) можно смотреть, как на систему для определения коэффициентов  $b_{r,r_1}^{r'}$ . Рассмотрим для простоты случай  $r = r_1 = 1$ . Из (74) получаем

$$b_{1,1}^0 K_{0,r_2}^{-,0} + b_{1,1}^1 K_{0,r_2}^{-,1} + b_{1,1}^2 K_{0,r_2}^{-,2} = K_{1,r_2}^{-,1}. \quad (79)$$

Перебрав все значения  $r_2$  от 0 до  $\infty$ , получим бесконечную систему уравнений. Коэффициенты  $b_{1,1}^0, b_{1,1}^1$  и  $b_{1,1}^2$  находятся из любых трех уравнений с ненулевым определителем. Все остальные уравнения являются их линейной комбинацией.

Продемонстрируем сказанное на модели твердых шаров. Значения матричных элементов были независимо найдены с помощью рекуррентных процедур [4]. В таблице выписаны эти коэффициенты для первых пяти

Значения матричных элементов для модели твердых шаров, входящие в уравнение (79)

$r_2$	$r' = 0$	$r' = 1$	$r' = 2$	RHS
0	1.59577	-0.26596	-0.2660	2.06120
1	-0.39894	-0.06649	-0.01995	-0.31583
2	-0.04987	-0.03493	-0.01247	-0.03117
3	-0.01247	-0.01039	-0.00727	-0.00987
4	-0.00390	-0.00455	-0.00409	-0.00503

значений  $r_2$ . В последней колонке МЭ, соответствующие правой части уравнений. Определитель первых трех уравнений не равен нулю, и их решение имеет вид

$$b_{1,1}^0 = 1, \quad b_{1,1}^1 = -2, \quad b_{1,1}^2 = 2.5.$$

Эти же значения получаются и при непосредственном интегрировании из определения  $b_{r,r_1}^{r'}$  (75). Подставив эти значения  $b_{r,r_1}^{r'}$  в уравнения (79) при  $r_2 = 3, 4$ , находим, что они удовлетворяются. Таким образом, никаких дополнительных соотношений, которые можно использовать при построении МЭ, уравнения (79) не дают. Однако они дают возможность найти  $b_{r,r_1}^{r'}$  путем решения алгебраической системы уравнений.

Поскольку  $b_{r,r_1}^{r'}$  не зависят от  $r_2$ , то все эти коэффициенты могут быть определены из (74) при  $r_2 = 0$ . В силу симметрии МЭ можно рассматривать систему (74) только при  $r \geq r_1$ . Если, кроме того, воспользоваться тем обстоятельством, что  $b_{r,r_1}^{r'}$  не зависят от параметра  $\mu$ , и положить  $\mu = m$ , где  $m$  — целое неотрицательное число, то для каждой фиксированной пары индексов  $r, r_1$  система (74) запишется в виде

$$\sum_{n=r-r_1}^{r+r_1} x_n a_{nm} = c_m, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (80)$$

где

$$x_n = b_{r,r_1}^n, \quad a_{nm} = \frac{2^{m-n} \Gamma(m+3/2)}{\Gamma(n+3/2)} (-m)_n, \\ c_m = \lambda_{r,r_1}^{(1)-}(m). \quad (81)$$

Символ Похгаммера  $(-m)_n = -m(-m+1)\dots(-m+n-1)$  равен нулю при всех  $n > m$ . Учитывая, что  $n \leq m$ , и переходя к переменным  $j, k$  по формулам  $m = r - r_1 + j$ ,  $n = r - r_1 + k$ , получим конечную систему уравнений

$$\sum_{k=0}^j \tilde{x}_k \tilde{a}_{k,j} = \tilde{c}_j, \quad j = 0, 1, \dots, 2r_1,$$

$$\tilde{x}_k = b_{r,r_1}^{r-r_1+k},$$

$$\tilde{a}_{kj} = 2^{j-k} (r - r_1 + k + 3/2)_{j-k} \frac{(-1)^{r-r_1+k} (r - r_1 + j)!}{(j-k)!},$$

$$\tilde{c}_j = \lambda_{r,r_1}^{(1)-}(r - r_1 + j). \quad (82)$$

Эта система имеет треугольный вид. Из нее при фиксированных  $r$  и  $r_1$  ( $r \leq r_1$ ) последовательно находятся все коэффициенты  $b_{r,r_1}^{r'}$  из интервала  $r - r_1 \leq r' \leq r + r_1$ .

## Список литературы

- [1] Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 10. С. 12–21.
- [2] Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 9. С. 6–15.
- [3] Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 2. С. 22–35.
- [4] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: СПбГУ, 2003. 224 с.
- [5] Ender A.Ya., Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. P. 2720–2730.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: ФМ, 1963. 702 с.
- [7] Hilbert D. // Math. Ann. 1912. Bd 72. S. 562–577.
- [8] Hecke E. // Math. Zs. 1922. Bd 12. S. 274–286.
- [9] Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: ФМ, 1962. 1079 с.
- [10] Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. М.: ФМ, 1981. 1798 с.