

## Построение ядра интеграла столкновений нелинейного уравнения Больцмана по его матричным элементам

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

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

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
198504 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 28 октября 2013 г.)

Исследованы способы построения ядер интеграла столкновений, возникающих при разложении нелинейного кинетического уравнения Больцмана по сферическим гармоникам. Разработаны методы вычисления ядра по известным матричным элементам интеграла столкновений с использованием усреднения по ряду параметров расчета, что дает возможность существенно повысить точность предложенного алгоритма. Для модели максвелловских молекул при расчете ядра был использован асимптотический подход. Это позволило с высокой точностью приблизить известное в этом случае аналитическое выражение для ядра.

### Введение

Изучение физико-химических процессов в газах и плазме часто требует знания функции распределения (ФР) для частиц, скорости которых значительно превышают тепловую. Прямое численное решение уравнения Больцмана в этом случае сопряжено с большими трудностями. Основную проблему представляет вычисление интеграла столкновений. Численное решение кинетических задач развивается в рамках двух основных подходов — метода Монте-Карло [1,2] и метода дискретных ординат [3,4]. Кроме того, часто вместо расчета интеграла столкновений используются некоторые упрощающие модели (см., например, БГК-модель [5]). Однако все перечисленные подходы не дают возможности построить ФР в области больших скоростей, и решение уравнения Больцмана в широком диапазоне скоростей по-прежнему остается актуальной задачей.

В последние годы значительный импульс получил моментный метод решения уравнения Больцмана. В этом методе ФР разлагается по сферическим полиномам Эрмита, представляющим собой произведение полиномов Сонина на сферические гармоники. Интеграл столкновений определяется при этом набором матричных элементов (МЭ), которые являются коэффициентами разложения интеграла столкновений по базисным функциям. Основную трудность в реализации моментного метода в нелинейном случае как раз и представляет расчет МЭ. В работе [6] были получены новые соотношения между МЭ и разработана рекуррентная процедура их расчета. Это позволило строить МЭ с большими значениями индексов и тем самым учитывать большое число членов в разложении ФР по базисным функциям. Следовательно, трудности построения МЭ можно считать преодоленными.

Моментный метод был использован для исследования эволюции ФР примеси ионов в газе после включения сильного электрического поля [7–9]. Было показано, что

ФР в этом случае оказывается сильно неравновесной, и тем не менее ее удается построить этим методом в диапазоне до  $\approx 10$  тепловых скоростей.

Дальнейшим развитием этого направления является разложение ФР только по сферическим гармоникам. При этом не возникает ограничений на ФР, связанных с требованием сходимости при разложении по полиномам Сонина. Использование такого метода приводит к замене интеграла столкновений набором существенно более простых интегральных операторов. Ядра этих операторов, зависящие только от модулей скоростей, играют ту же роль, что и МЭ в обычном моментном методе. Переход к ядрам сильно упрощает процесс решения кинетического уравнения. С их помощью была решена, например, задача о взаимодействии газа со стенкой [10]. Похожий подход для модели твердых шаров в случае смеси газов предложен в [11]. До сих пор ядра использовались исключительно в линейных задачах.

При сильном отклонении ФР от термодинамического равновесия возникает необходимость в решении нелинейного уравнения Больцмана и соответственно в использовании ядер нелинейного интеграла столкновений. Нами было показано [6,12], что без ограничения общности можно свести разложение нелинейного интеграла столкновений по сферическим гармоникам к разложению по полиномам Лежандра. Такому разложению соответствуют ядра с тремя индексами  $G_{l_1, l_2}^l$ . Эти ядра введены в [6] и там же дано их представление через МЭ. В линейном случае разложению интеграла столкновений по полиномам Лежандра соответствуют линейные ядра с одним индексом  $L_l$ . Ядра линейного интеграла столкновений рассматривались еще Гильбертом и Гекке [13,14], построившими  $L_l$  для модели твердых шаров. Недавно [15] было получено также аналитическое выражение для ядра  $L_l$  в случае максвелловских молекул.

Было показано [16], что нелинейное ядро  $G_{l,0}^l$  может быть найдено путем обратного преобразования Лапласа линейного ядра  $L_l$ . С использованием известных линей-

ных ядер в [16] были найдены аналитические выражения для нелинейного ядра  $G_{l,0}^l$  в случае псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров.

В [17,18] доказано, что между нелинейными ядрами существуют связи. На основе этих связей оказалось возможным разработать рекуррентную процедуру последовательного определения наборов ядер с фиксированной суммой индексов. В качестве стартового ядра при этом используется ядро  $G_{0,0}^0$ . Эта процедура основана на тех же принципах, на которых была создана рекуррентная процедура для МЭ [6].

Понятно, что для других моделей взаимодействия трудно надеяться на получение аналитических формул как для нелинейных, так и для линейных ядер. Поэтому актуальной остается задача вычисления нелинейных ядер по известным МЭ. Ранее [19,20] аналогичная задача решалась применительно к линейным ядрам. Было установлено, что в некоторых областях сходимость ряда, которым представляются ядра, очень медленная и необходимо использовать асимптотический подход для вычисления остатка ряда.

Выяснилось, что в случае линейных ядер сходимость рядов в зависимости от значений аргументов и структура самих ядер имеют одинаковый характер для моделей псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров. Нелинейные ядра в случае псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров, которые нам удалось найти в аналитическом виде, также имеют одинаковую структуру.

В настоящей работе статье асимптотические методы, разработанные при построении линейных ядер, применены для расчета нелинейных ядер. Проверка применимости такого подхода проведена на примере псевдомаксвелловских молекул, когда точное выражение для ядра известно; показано совпадение результатов расчета с аналитическим выражением.

## 1. Постановка задачи

В моментном методе рассматривается разложение ФР по сферическим полиномам Эрмита

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = \alpha^{3/2} n(\mathbf{r}, t) M(c) \sum_j C_j(\mathbf{r}, \mathbf{t}) H_j(\mathbf{c}). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{v}$  — координаты и скорости частиц,  $t$  — время,  $n(\mathbf{r}, t)$  — концентрация,  $\mathbf{c} = \sqrt{\alpha}(\mathbf{v} - \mathbf{u})$  — безразмерная скорость,  $\alpha = m/(2kT)$ ,  $m$  — масса частиц,  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  и  $T(\mathbf{r}, t)$  — средняя скорость и температура газа,  $M(c) = \pi^{-3/2} \exp(-c^2)$  — равновесное максвелловское распределение. Сферические полиномы Эрмита определяются выражением

$$H_j(\mathbf{c}) = S_{l+1/2}^r(c^2) c^l Y_{lm}^i(\theta, \varphi), \quad (2)$$

где  $S_\alpha^n(x)$  — полиномы Сонина,  $Y_{lm}^i(\theta, \varphi)$  — сферические гармоники,  $c, \theta, \varphi$  — координаты скорости  $\mathbf{c}$  в сферической системе координат, индекс  $i$  принимает

значения 1, 2, индекс  $j$  включает в себя четыре индекса  $r, l, i, m$ .

Уравнение Больцмана при этом переходит в систему уравнений для коэффициентов разложения  $C_j(\mathbf{r}, t)$ :

$$\frac{D^j C_j}{Dt} = \sum_0^\infty K_{j_1, j_2}^j C_{j_1} C_{j_2}, \quad (3)$$

где  $D^j/Dt$  — дифференциальный оператор, представляющий левую часть моментных уравнений [21,22]. Его явный вид можно найти также в [23]. Матричные элементы интеграла столкновений  $K_{j_1, j_2}^j$  определяются выражением

$$K_{j_1, j_2}^j = \int H_j \hat{I}(MH_{j_1}, MH_{j_2}) d^3c / g_j. \quad (4)$$

Здесь  $\hat{I}(f_1, f_2)$  — интеграл столкновений, описывающий рассеяние частиц с функцией распределения  $f_1$  на частицах с ФР  $f_2, g_j$  — квадрат нормы полинома Эрмита.

Как упоминалось выше, другой возможный подход к вычислению интеграла столкновений — разложение кинетического уравнения только по сферическим гармоникам. При этом функция распределения представляется в виде

$$f(\mathbf{c}) = \sum_{l,m,i} f_{l,m,i}(c) Y_{lm}^i(\theta, \varphi). \quad (5)$$

Уравнение Больцмана переходит в систему интегродифференциальных уравнений для коэффициентов  $f_{l,m,i}$ :

$$\begin{aligned} \frac{D^l f_{l,m,i}(c)}{Dt} &= \sum_{m_1, i_1, m_2, i_2} \sum_{l_1, l_2} Z_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i}(l, l_1, l_2) \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) f_{l_1, m_1, i_1}(c_1) f_{l_2, m_2, i_2}(c_2) c_1^2 dc_1 c_2^2 dc_2. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $D^l/Dt$  — дифференциальный оператор, возникающий при преобразовании левой части уравнения Больцмана,  $Z_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i}(l, l_1, l_2)$  — числовые коэффициенты, которые легко выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана (см. [6]). Суммирование ведется по комбинациям индексов, которые удовлетворяют соотношениям  $|l_1 - l_2| < l < l_1 + l_2, m = |m_1 \pm m_2|$ , а  $l + l_1 + l_2$  и  $i + i_1 + i_2$  — четные.

Ядра  $G_{l_1, l_2}^l$  оказываются связанными с МЭ интеграла столкновений соотношениями (более подробно см. в [12])

$$\begin{aligned} G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) &= M(c) \sum_r c^l c_1^{l_1} c_2^{l_2} S_{l+1/2}^r(c^2) \\ &\times \sum_{r_1} \sum_{r_2} \frac{K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}}{\sigma_{r_1, l_1} \sigma_{r_2, l_2}} S_{l_1+1/2}^{r_1}(c_1^2) S_{l_2+1/2}^{r_2}(c_2^2), \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\sigma_{r, l} = \frac{\Gamma(r + l + 3/2)}{2\pi^{3/2} r!} \quad (8)$$

— норма полиномов Сонина,  $\Gamma(x)$  — гамма-функция.

Часто интеграл столкновений можно представить в виде суммы интегралов обратных и прямых столкновений с ядрами  $G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2)$  и  $G_{l_1, l_2}^{l-}(c, c_1, c_2)$  соответственно [12]. Свойства ядер интеграла прямых столкновений подробно рассмотрены в нашей работе [24]. Показано, что они выражаются через одну квадратуру, и их расчет не представляет сложности. Наиболее трудной задачей является расчет ядер интеграла обратных столкновений,  $G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2)$ , на котором и сосредоточим наше внимание.

В [12] было показано, что в случае степенных потенциалов каждое ядро  $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$  удовлетворяет соотношению подобия, т.е. является однородной функцией своих аргументов. Этому же соотношению удовлетворяют по отдельности ядра интеграла прямых и обратных столкновений. Это означает, что интересующие нас ядра можно представить в виде

$$G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2) = s^{3-2\mu} G_{l_1, l_2}^{l+}(sc, sc_1, sc_2). \quad (9)$$

Здесь параметр  $\mu$  связан с показателем степени  $\kappa$  в степенном потенциале ( $V \sim 1/r^\kappa$ ) соотношением  $\mu = (\kappa - 4)/2\kappa$ . В результате вычисление ядра  $G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2)$  сводится к вычислению функции двух аргументов  $\Psi_{l_1, l_2}^l(x, y)$  [16, 18], которую будем называть приведенным ядром:

$$G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2) = \frac{1}{d^{3-2\mu}} \Psi_{l_1, l_2}^l(x, y). \quad (10)$$

Здесь  $d = \sqrt{c^2 + c_1^2 + c_2^2}$ ,  $x = c/d$ ,  $y = c_1/d$ , а  $c_2/d = \sqrt{1 - x^2 - y^2}$ .

Отметим, что в случае псевдомаксвелловских молекул сечение предполагается независящим от углов и, как и в случае максвелловских молекул,  $\kappa = 4$  и  $\mu = 0$ . Нам удалось найти  $\Psi_{0,0}^0(x, y)$  в аналитическом виде для псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров [16]. В случае псевдомаксвелловских молекул приведенное ядро имеет вид

$$\Psi_{0,0}^0(x, y) = \frac{8\pi}{xy\sqrt{1-x^2-y^2}} \times \begin{cases} 0, & 1/\sqrt{2} < x, \\ \arctg\left(\frac{\sqrt{1-2x^2}}{x}\right), & x < 1/\sqrt{2}, y < x, \sqrt{1-2x^2} < y, \\ \arctg\left(\frac{y}{\sqrt{1-x^2-y^2}}\right), & x < 1/\sqrt{2}, y < x, y < \sqrt{1-2x^2}, \\ \arctg\left(\frac{\sqrt{1-x^2-y^2}}{y}\right), & x < 1/\sqrt{2}, x < y, \sqrt{1-2x^2} < y, \\ \arctg\left(\frac{x}{\sqrt{1-2x^2}}\right), & x < 1/\sqrt{2}, x < y, y < \sqrt{1-2x^2}. \end{cases} \quad (11)$$

Для твердых шаров ( $\mu = 1/2$ ) приведенное ядро можно записать в виде

$$\Psi_{0,0}^0(x, y) = \begin{cases} 0, & x > 1/\sqrt{2}, \\ \frac{8\pi\sqrt{1-2x^2}}{xy(\sqrt{1-x^2-y^2})}, & x < 1/\sqrt{2}, y < x, y > \sqrt{1-2x^2}, \\ \frac{8\pi}{x\sqrt{1-x^2-y^2}}, & x < 1/\sqrt{2}, y < x, \sqrt{1-2x^2} > y, \\ \frac{8\pi}{xy}, & x < 1/\sqrt{2}, x < y, y > \sqrt{1-2x^2}, \\ \frac{8\pi}{y\sqrt{1-x^2-y^2}}, & x < 1/\sqrt{2}, x < y, \sqrt{1-2x^2} > y. \end{cases} \quad (12)$$

В обоих случаях область изменения  $x, y$  разбивается на 5 подобластей. На границах подобластей ядро непрерывно, а его частные производные по  $x, y$  имеют разрыв. В области  $x > 1/\sqrt{2}$  (что соответствует соотношению скоростей  $c_1^2 + c_2^2 < c^2$ ) ядро равно нулю. Это отражает тот факт, что столкновение двух частиц с энергиями  $c_1^2$  и  $c_2^2$  не может привести к появлению частицы с энергией  $c^2 > c_1^2 + c_2^2$ .

Теперь, когда получены аналитические выражения для ядер, можно провести подробное исследование представления ядер через матричные элементы (7).

Для исследования сходимости сумм (7) мы выбрали модель псевдомаксвелловских молекул, так как для нее расчет ядра через МЭ реализуется наиболее просто. Будет рассмотрено изотропное ядро, когда  $l = l_1 = l_2 = 0$ . В этом случае отличны от нуля только те МЭ, для которых выполнено соотношение  $r_1 = r - r_2$ . Они имеют вид

$$K_{r-r_2, r_2}^{r+} = \frac{1}{r+1}. \quad (13)$$

В этом случае тройная сумма в формуле (7) сводится к двойной

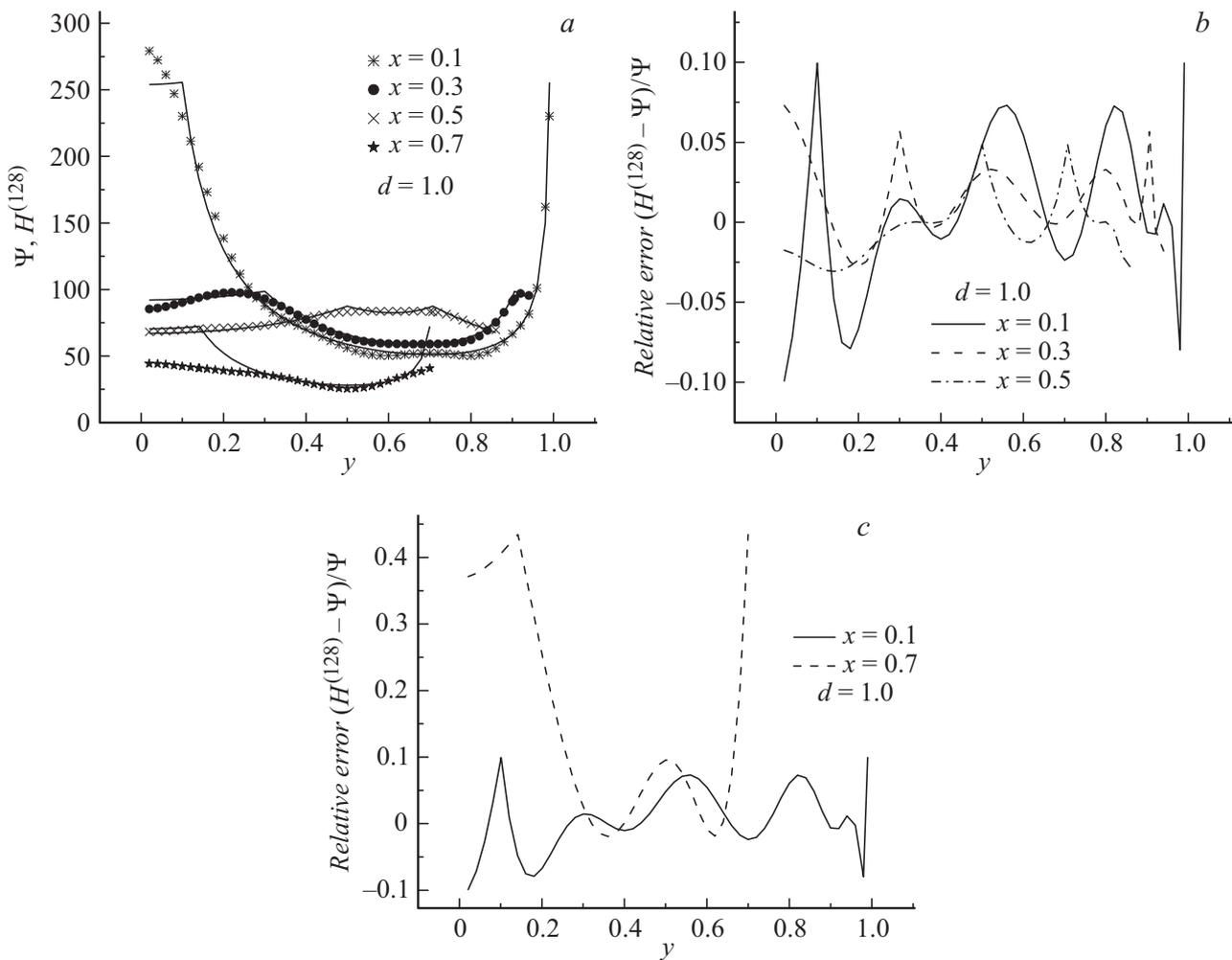
$$G^+(c, c_1, c_2) = M(c)$$

$$\times \sum_r \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} \sum_{r_2=0}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_2}(c_1^2) S_{1/2}^{r_2}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_2} \sigma_{r_2}}. \quad (14)$$

Здесь и ниже в обозначениях ядра опущены индексы  $l, l_1, l_2$ .

## 2. Способы улучшения сходимости при приближении ядра суммой МЭ

На практике ряд (7) вычисляется до некоторого верхнего предела  $m$ . Наличие аналитических выражений для ядер дает возможность определить ошибку, возникающую при отбрасывании остатка ряда.



**Рис. 1.** Вычисление приведенных ядер  $\Psi$  (сплошные линии) с помощью сумм  $H^{(m)}$  (символы) в сечениях  $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  (a), а также относительные ошибки расчета  $\delta H^{(m)} = (\Psi - H^{(m)})/\Psi$  (b), (c) при  $m = 128$ .

Пользуясь свойством подобия, можно перейти к рассмотрению приведенного ядра.  $\Psi(x, y) = d^3 G^+(c, c_1, c_2)$ . Введем обозначение для соответствующих конечных сумм

$$H^{(m)}(x, y; d) = d^3 \frac{e^{-d^2 x^2}}{\pi^{3/2}} \sum_{r=0}^{m-1} \frac{S_{1/2}(d^2 x^2)}{r+1} \times \sum_{r_2=0}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_2}(d^2 y^2) S_{1/2}^{r_2}(d^2(1-x^2-y^2))}{\sigma_{r-r_2} \sigma_{r_2}}. \quad (15)$$

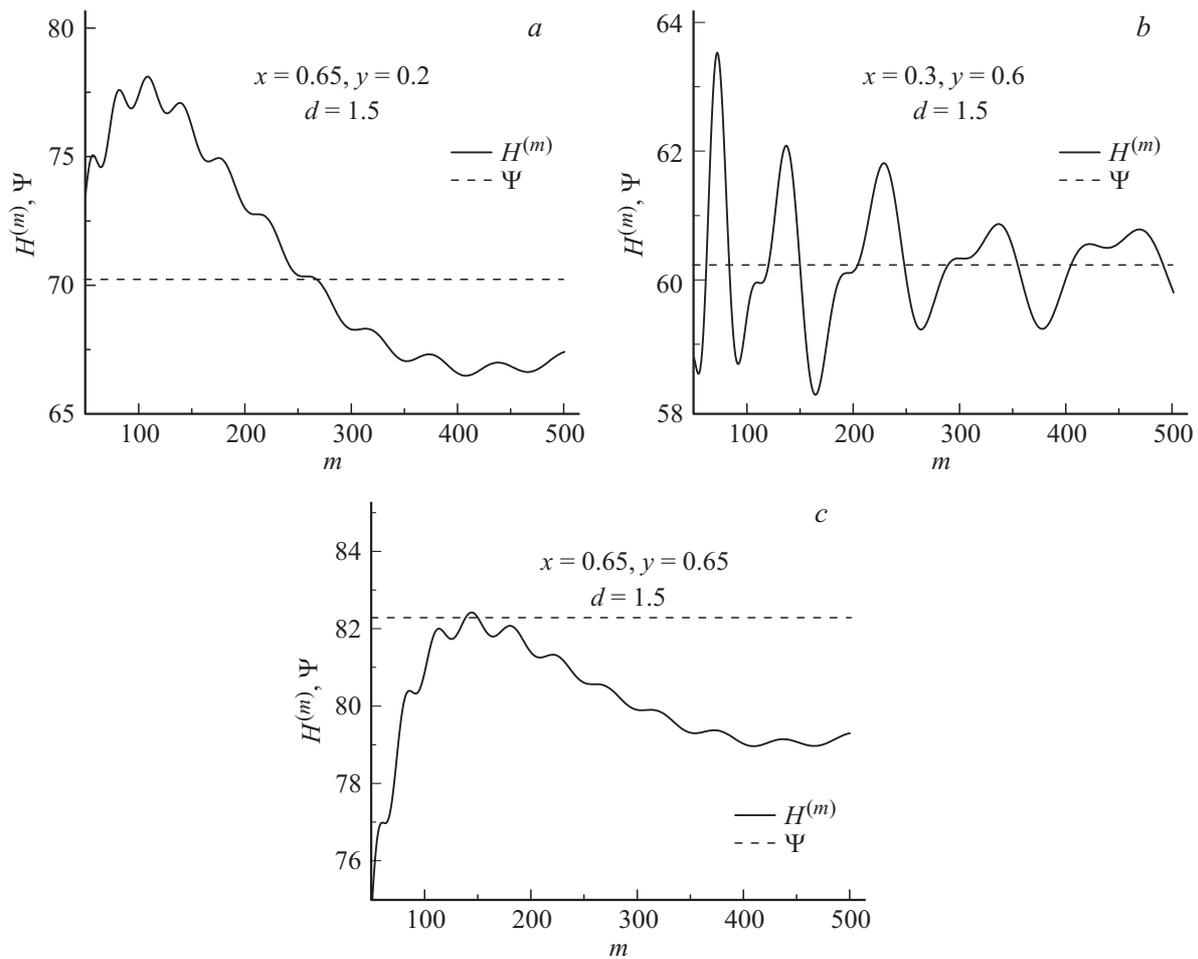
При  $m \rightarrow \infty$  сумма  $H^{(m)}(x, y; d) \rightarrow \Psi(x, y)$  и перестает зависеть от  $d$ . Однако при конечном значении  $m$  она зависит от  $d$ . Наши предыдущие расчеты показали, что наилучшая сходимость наблюдается при  $d \sim 1$ .

Подчеркнем, что если для псевдомаксвелловских молекул существует аналитическая формула для МЭ, то для других законов взаимодействия таких формул нет. МЭ в этих случаях строятся с помощью рекуррентных процедур [6]. Обычно мы ограничивались значениями

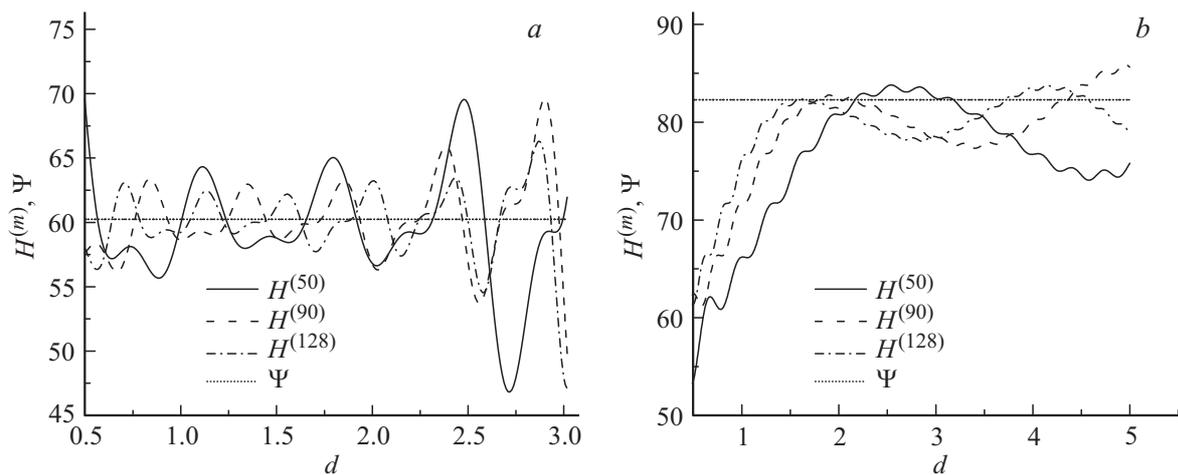
индексов, не превышающих 128. Поэтому при анализе численной сходимости будем выбирать  $m \leq 128$ .

На рис. 1 представлены результаты расчета ядра с помощью ряда (15) при  $d = 1, m = 128$  в сравнении с точными значениями ядра в сечениях  $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ . Видно, что точность расчета возрастает при увеличении  $x$  от 0.1 до 0.5 и вновь резко падает при приближении к границе области определения  $\Psi$  (расположенной при  $x = 1/\sqrt{2}$ ). Отметим, что в окрестности  $y = x$  и  $y = \sqrt{1-2x^2}$  (линий разрыва частных производных  $\Psi$ , см. (11)) погрешность также возрастает. При  $x = 0.7$  (вблизи границы области определения  $\Psi$ ) наблюдаются большие ошибки расчета при  $y < 0.2, y > 0.65$ . В этих областях относительная погрешность расчета достигает  $\sim 0.4$ .

Для улучшения сходимости необходимо прежде всего изучить зависимости функции  $H^{(m)}(x, y; d)$  от  $m$  и  $d$  при различных  $x$  и  $y$ . На рис. 2 приведены конечные суммы  $H^{(m)}(x, y; d)$  как зависимости от  $m$  при нескольких значениях  $x, y$ . Они представляют собой сложным



**Рис. 2.** Вычисление  $\Psi$  с помощью сумм  $H^{(m)}$  в точках  $x = 0.65, y = 0.2$  (a),  $x = 0.3, y = 0.6$  (b),  $x = 0.65, y = 0.65$  (c).

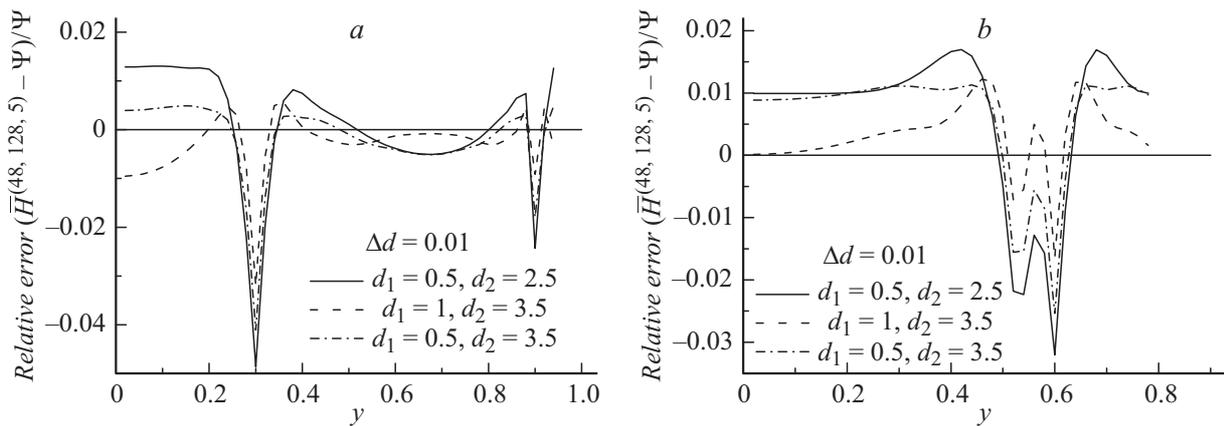


**Рис. 3.** Зависимости  $H^{(m)}$  от  $d$  при  $m = 50$  (сплошная линия), 90 (штриховая линия) и 128 (штрихпунктирная линия) в точках  $x = 0.3, y = 0.6$  (a) и  $x = 0.65, y = 0.65$  (b).

образом осциллирующие функции. На рис. 2, a, b представлены  $H^{(m)}(x, y; d)$  вдали от линий разрыва частных производных, а на рис. 2, c — на линии  $y = x$ . Видно, что на 2, a, b  $H^{(m)}(x, y; d)$  осциллируют вокруг точного

значения  $\Psi$ , а на рис. 2, c  $H^{(m)}(x, y; d)$  расположены ниже  $\Psi$  почти при всех  $m$ .

Характер осцилляций  $H^{(m)}(x, y; d)$  определяется осцилляциями полиномов Сонина и зависит от значений



**Рис. 4.** Относительная ошибка вычисления  $\Psi$  с помощью сумм  $\bar{H}^{(m_1, m_2, \Delta m)}(x, y; d_1, d_2, \Delta d)$  в сечениях  $x = 0.3$  (a) и  $x = 0.6$  (b) при  $m_1 = 48, m_2 = 128, \Delta m = 5$ .

аргументов. Изменение параметра  $d$  приводит к изменению периода и формы осцилляций конечных сумм. Зависимости от  $d$  функций  $H^{(m)}(x, y; d)$  также характеризуются осцилляциями, имеющими сложную форму (рис. 3).

Зависимости, представленные на рис. 3, a, рассчитаны вдали от линий разрыва, а зависимости на рис. 3, b — на линии разрыва  $x = y$ . Как и в предыдущем случае, на рис. 3, a видны осцилляции вокруг точного значения ядра, а на рис. 3, b — систематическая недооценка значения ядра.

Расчет ядра при различных значениях  $m$  и  $d$  приводит к различным значениям погрешности. Это дает возможность произвести статистическое накопление результатов и уменьшить погрешность расчета путем усреднения по значениям  $m$  и  $d$ .

Эта идея была нами реализована. Ядро приближалось функциями

$$\begin{aligned} \bar{H}^{(m_1, m_2, \Delta m)}(x, y; d_1, d_2, \Delta d) &= \frac{1}{((m_2 - m_1)/\Delta m + 1)((d_2 - d_1)/\Delta d + 1)} \\ &\times \sum_{i=m_1/\Delta m}^{m_2/\Delta m} \sum_{j=d_1/\Delta d}^{d_2/\Delta d} H^{(i\Delta m)}(x, y; j\Delta d). \end{aligned}$$

Усреднение по  $m$  проводилось при  $m_1 = 48, m_2 = 128, \Delta m = 5$ . Как показали пробные расчеты, уменьшение  $\Delta m$  не влияет на результат. Увеличение  $m_2$  улучшает сходимость, но, как уже отмечалось, верхний предел  $m_2$  не должен превышать 128.

При расширении области усреднения по  $d$  амплитуда осцилляций конечных сумм возрастает, что приводит к резкому ухудшению точности расчета при  $d_2 > 5$ . Поэтому усреднение нужно проводить при  $d$  порядка единиц, однако достаточно очевидных критериев выбора границ области усреднения нет. Положение границ, как

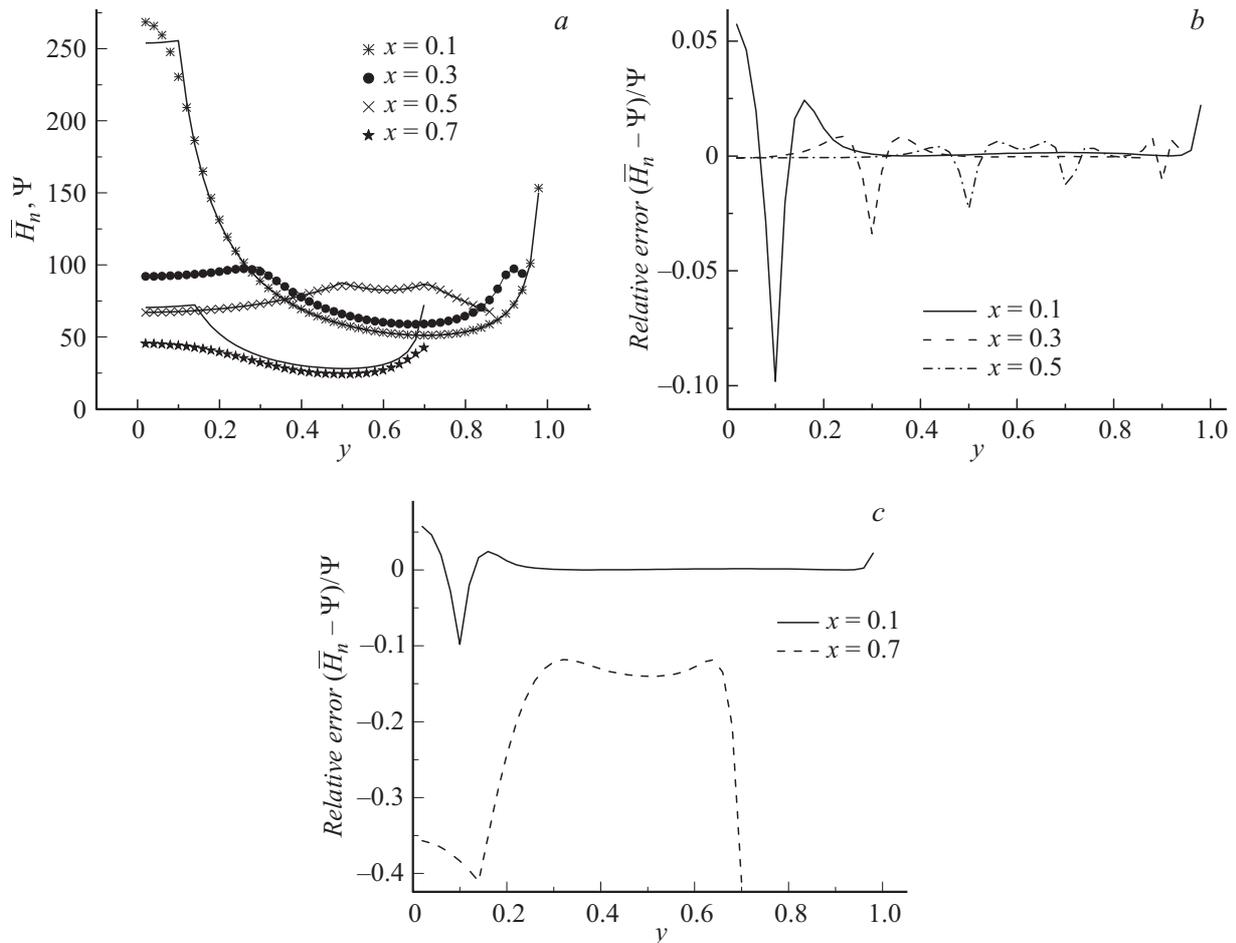
показали расчеты, может существенно влиять на результаты. В качестве примера на рис. 4 приведены результаты приближения ядра суммами  $\bar{H}^{(m_1, m_2, \Delta m)}(x, y; d_1, d_2, \Delta d)$  в сечениях  $x = 0.3$  (a) и  $x = 0.6$  (b) при  $m_1 = 48, m_2 = 128, \Delta m = 5$ . Усреднение проводилось по интервалам  $0.5 \leq d \leq 2.5, 1 \leq d \leq 3.5$  и  $0.5 \leq d \leq 3.5$  с шагом  $\Delta d = 0.01$ .

Мы решили провести еще одно усреднение, по значениям параметров  $d_1, d_2$ . В этом случае ядро приближалось выражением

$$\begin{aligned} \bar{H}_n(x, y) &= \frac{1}{n + 1} \\ &\times \sum_{s=0}^n \bar{H}^{(48, 128, 5)}(x, y; 0.5 + 0.01s, 2.5 + 0.01s, 0.01). \end{aligned}$$

При этом левая и правая границы интервала, по которому проводилось усреднение, при изменении  $s$  смещались на 0.01. В наших расчетах выбиралось  $n = 100$  и  $d_1, d_2$  изменялись от 0.5, 2.5 до 1.5, 3.5. Интервал усреднения был выбран на основании пробных расчетов. Результаты расчета ядра в сечениях  $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  приведены на рис. 5.

Выяснилось также, что существуют узкие области значений  $x, y$ , где ядро плохо приближается конечными суммами даже после усреднения. Эти области расположены вблизи линий разрыва частных производных  $x = y$  и  $x = \sqrt{1 - 2x^2}$ . Относительная погрешность расчета ядра в этих областях имеет острый пик величиной несколько сотых с характерной шириной  $\sim 0.05$ . Ухудшение сходимости можно заметить на расстоянии  $\sim 0.1$  от линий разрыва. Сходимость также заметно ухудшается вблизи внешних границ области определения  $\Psi$ , с этим связана большая погрешность расчета в сечении  $x = 0.7$  (граница области соответствует  $x \approx 0.707$ ). Тем не менее в большей части области определения  $\Psi$  после усреднения относительная погрешность оказалась порядка  $10^{-3}$ .



**Рис. 5.** Вычисление приведенных ядер  $\Psi$  (сплошные линии) с помощью статистически обработанных сумм  $\bar{H}_n$  (символы) в сечениях  $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  (a), а также относительные ошибки  $\delta\bar{H}_n = (\Psi - \bar{H}_n)/\Psi$  (b), (c). Параметры статистической обработки:  $m_1 = 48, m_2 = 128, \Delta m = 5, d_1 = 0.5, d_2 = 2.5, \Delta d = 0.01, n = 100$ .

Таким образом, разработанный метод вычисления частичных сумм ряда с последующей статистической обработкой может быть предложен для расчета ядер при произвольных сечениях взаимодействия.

### 3. Асимптотический подход к вычислению ядер

В случае псевдомаксвелловских молекул для улучшения сходимости можно применить подход, использованный нами ранее [19, 20] при расчете линейных ядер. Он заключается в использовании асимптотического разложения для оценки остатка ряда. Для реализации этой идеи была найдена асимптотика отдельных членов ряда при больших значениях индексов. После этого использовалась формула Эйлера–Маклорена [25,19], т.е. при расчете остатка ряда суммирование заменялось интегрированием.

В рассматриваемом случае остаток ряда (14) можно записать в виде

$$g_m(c, c_1, c_2) = M(c) \sum_{r=m}^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} D_{0,r}, \quad (16)$$

где

$$D_{k_1, k_2} = \sum_{r_2=k_1}^{k_2} \frac{S_{1/2}^{r-r_2}(c_1^2) S_{1/2}^{r_2}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_2} \sigma_{r_2}}. \quad (17)$$

Асимптотическое разложение нормированных полиномов Сонина  $S_{1/2}^r(c^2)/\sigma_r$  при больших значениях индекса  $r$  получено в [19]:

$$S_{1/2}^r(c^2)/\sigma_r = 2\pi \exp(c^2/2) \left[ (Rc^2)^{-1/2} \sin(2\sqrt{Rc^2}) + o(R^{-1/2}) \right], \quad R = r + 3/4. \quad (18)$$

Необходимо также найти асимптотику внутренней суммы  $D_{0,r}$ . Выберем некоторое число  $q$  и разобьем  $D_{0,r}$  на три суммы: по промежутку  $0 \leq r_2 < q$ , по промежутку  $q \leq r_2 \leq r - q$  и по промежутку  $r - q < r_2 \leq r$ .

В средней сумме  $D_{q,r-q}$  будем использовать асимптотику (18) для обоих сомножителей, а в суммах  $D_{0,q-1}$  и  $D_{r-q+1,r}$  — для  $S_{1/2}^{r-r^2}(c_1^2)$  и  $S_{1/2}^{r^2}(c_2^2)$  соответственно. Рассматривая  $q = O(r^\varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  — малое положительное число, можно показать, что  $D_{q,r-q}$  является величиной порядка  $O(r^{-1/4})$  и дает главный вклад в  $D_{0,r}$ , а  $D_{0,q-1}$  и  $D_{r-q+1,r}$  стремятся к нулю с ростом  $r$  как  $O(r^{-1/2+\varepsilon})$ .

Сумму  $D_{q,r-q}$  можно вычислять по формуле Эйлера–Маклорена, заменяя нормированные полиномы Сонина их асимптотическим разложением. При таком рассмотрении оказывается, что главный вклад в  $D_{0,r}$  дается интегралом от произведения главных членов разложения полиномов Сонина (18) по интервалу  $(0, r)$ . Однако численные расчеты показывают, что аппроксимация остатка ряда главным членом асимптотического разложения является недостаточно точной. Поэтому были учтены некоторые члены следующего порядка.

При этом  $D_{0,r}$  представлялась в виде

$$D_{0,r} = D_{1,r-1} + \frac{2\pi}{\sigma_0} \left( S_{1/2}^0(c_2^2) \exp\left(\frac{c_1^2}{2}\right) \times \frac{\sin(2c_1\sqrt{r+3/4})}{c_1\sqrt{r+3/4}} + S_{1/2}^0(c_1^2) \exp\left(\frac{c_2^2}{2}\right) \frac{\sin(2c_2\sqrt{r+3/4})}{c_2\sqrt{r+3/4}} \right). \quad (19)$$

Сумма  $D_{1,r-1}$ , вносящая главный вклад в  $D_{0,r}$ , приближалась выражением

$$D_{1,r-1} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{\sigma_1} S_{1/2}^1(c_2^2) \exp\left(\frac{c_1^2}{2}\right) \frac{\sin(2c_1\sqrt{r-1/4})}{c_1\sqrt{r-1/4}} + \frac{2\pi}{\sigma_1} S_{1/2}^1(c_1^2) \exp\left(\frac{c_2^2}{2}\right) \frac{\sin(2c_2\sqrt{r-1/4})}{c_2\sqrt{r-1/4}} \right) + 4\pi^2 \exp\left(\frac{c_1^2 + c_2^2}{2}\right) \times \int_1^{r-1} \frac{\sin(2c_1\sqrt{r+3/2-(s+3/4)}) \sin(2c_2\sqrt{s+3/4})}{c_1 c_2 \sqrt{r+3/2-(s+3/4)} \sqrt{s+3/4}} ds. \quad (20)$$

Численные оценки показали, что такой способ расчета обеспечивает хорошую точность вычисления  $D_{0,r}$ .

При  $c_1\sqrt{r} \gg 1$  в подынтегральную функцию в (20) входит быстро осциллирующий множитель, и интеграл может быть вычислен методом стационарной фазы [26]. При малых значениях  $c_1$ , когда  $c_1\sqrt{r}$  — небольшая величина, можно применить интегрирование по частям и представить интеграл в виде ряда по степеням малого параметра  $(c_2\sqrt{r+3/2})^{-1}$ .

При вычислении внешней суммы в (16) снова воспользуемся формулой Эйлера–Маклорена и асимптотикой полиномов Сонина. В результате остаток ряда

представляется в виде

$$g_m(c, c_1, c_2) = \frac{\exp(-c^2/2)}{c\pi^2} \left( \frac{\sin(2c\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+1}\sqrt{m+3/4}} \frac{D_{0,m}}{2} + \int_m^\infty \frac{\sin(2c\sqrt{r+3/4})}{\sqrt{r+1}\sqrt{r+3/4}} D_{0,r} dr \right). \quad (21)$$

Интеграл в (21) выражается через интегральные синусы и косинусы и через квадратуры  $\int_m^\infty (\sin x/x^{3/2})dx$ ,  $\int_m^\infty (\cos x/x^{3/2})dx$ , вычисление которых не представляет трудности.

В случае  $c_1 = 0$  (или  $c_2 = 0$ ) внутренняя сумма в (16) имеет более простой вид

$$D_{0,r} = 4\pi \sum_{r_2=0}^r \frac{S_{1/2}^{r_2}(c_2^2)}{\sigma_{r_2}}, \quad (22)$$

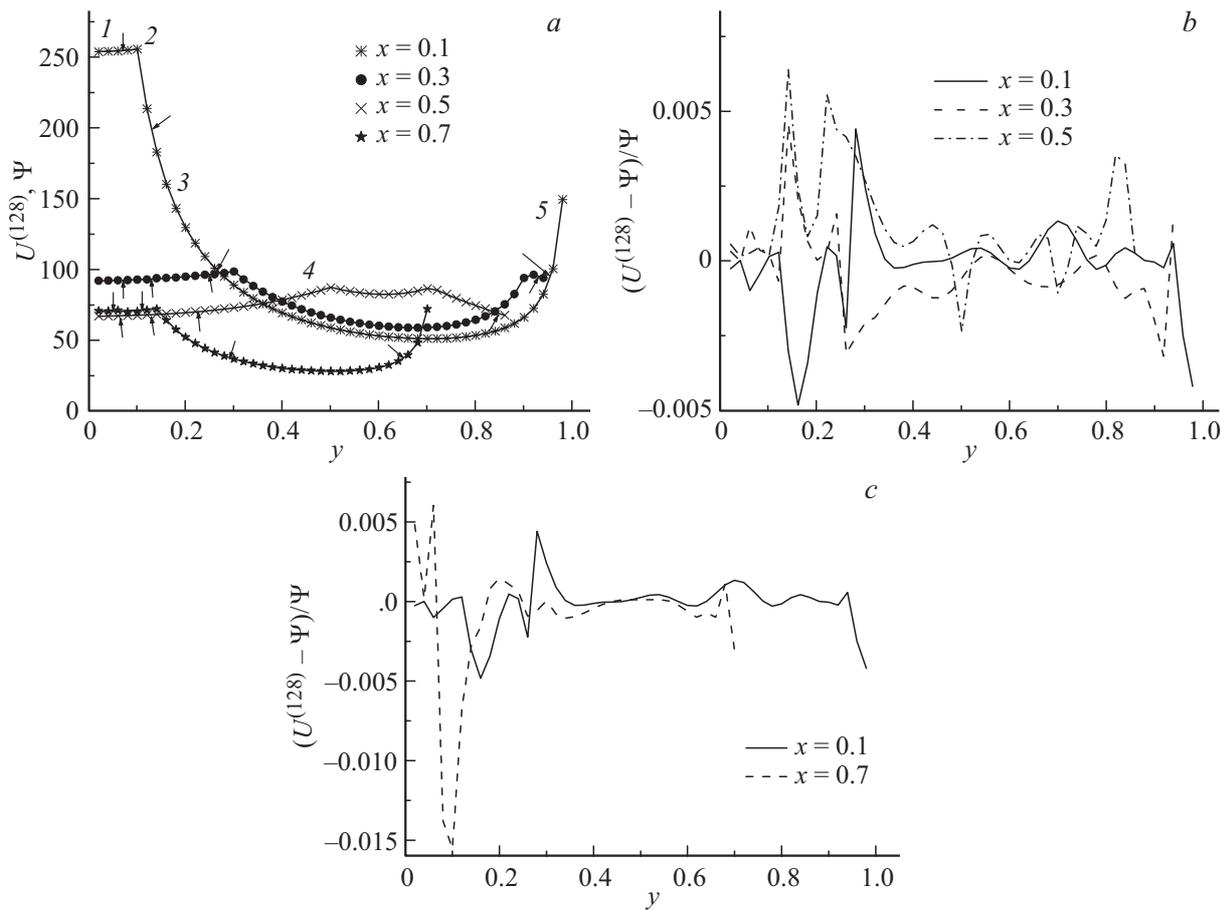
что сильно облегчает расчет.

#### 4. Результаты расчета ядра с использованием асимптотического подхода

Точность расчета  $\Psi$  с использованием асимптотического подхода определяется точностью асимптотики полиномов Сонина (18) и точностью вычисления интеграла в выражении (20). При увеличении аргумента полинома Сонина точность представления (18) уменьшается, а при малых аргументах — возрастает. При стремлении аргумента к нулю полином Сонина в пределе стремится к (18). Таким образом, погрешность, связанная с использованием приближения (18), уменьшается при уменьшении  $d$ . Однако при малых  $d$  увеличивается погрешность оценки интеграла в (20) методом стационарной фазы, так как множители под интегралом перестают быть быстро осциллирующими функциями.

Наши оценки показали, что при значениях скоростей порядка десятых и  $c_1/c_2 \sim 1$  интеграл в (20) хорошо приближается методом стационарной фазы. При уменьшении  $c_1/c_2$  необходимо использовать обе аппроксимации интеграла: методом стационарной фазы и разложением по малому параметру. Переход с одной аппроксимации на другую должен происходить при значении индекса  $r = r_b$ , зависящем от  $c_1, c_2$ .

Таким образом, оптимальные параметры расчета ( $d$  и  $r_b$ ) зависят от  $x, y$ . На рис. 6 приведены результаты расчета  $\Psi$  с учетом 128 членов в конечной сумме и добавлением асимптотики остатка. Каждая кривая разбивалась на несколько участков, на разных участках выбирались разные значения  $d$  и  $r_b$ . Границы участков на



**Рис. 6.** Приведенные ядра, вычисленные с использованием асимптотического подхода,  $U^{(128)}$  (символы) в сравнении с точными значениями  $\Psi$  (сплошные линии) в сечениях  $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  (a), а также относительные ошибки  $\delta U^{(128)} = (\Psi - U^{(128)})/\Psi$  (b), (c). Параметры расчета приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Параметры расчета на разных участках кривых, приведенных на рис. 6

x	1		2		3		4		5	
	d	r <sub>b</sub>	d	r <sub>b</sub>	d	r <sub>b</sub>	d	r <sub>b</sub>	d	r <sub>b</sub>
0.1									1.5*	450*
0.3					1.5	450				
0.5	0.05	4.5 · 10 <sup>8</sup>	0.2	4.5 · 10 <sup>5</sup>			1.5	0	0.2*	4.5 · 10 <sup>5</sup> *
0.7					5	0			5	0

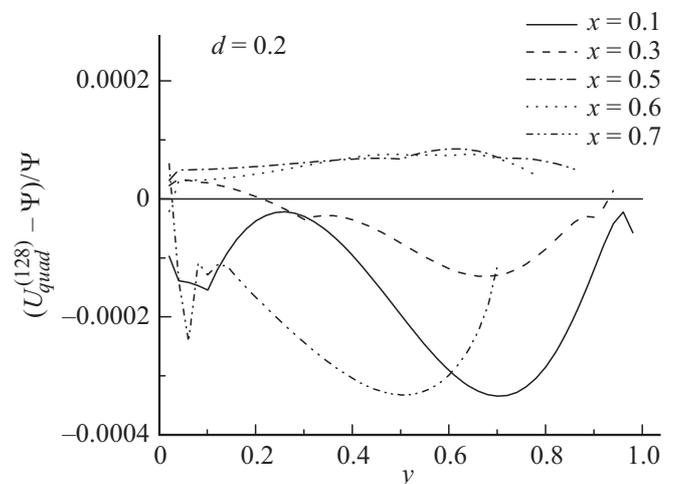
Примечание.  $r_b$  — граница перехода с аппроксимации интеграла методом стационарной фазы на разложение по малому параметру, звездочка означает расчет с использованием симметрии (в точках  $(x, \sqrt{1-x^2-y^2})$ ).

рисунке показаны стрелками. Параметры расчета приведены в табл. 1. Относительная погрешность расчета оказывается порядка  $10^{-3}$  везде, кроме узкого интервала на кривой  $x = 0.7$  при  $y \sim 0.1$ , где она достигает  $\sim 0.016$ .

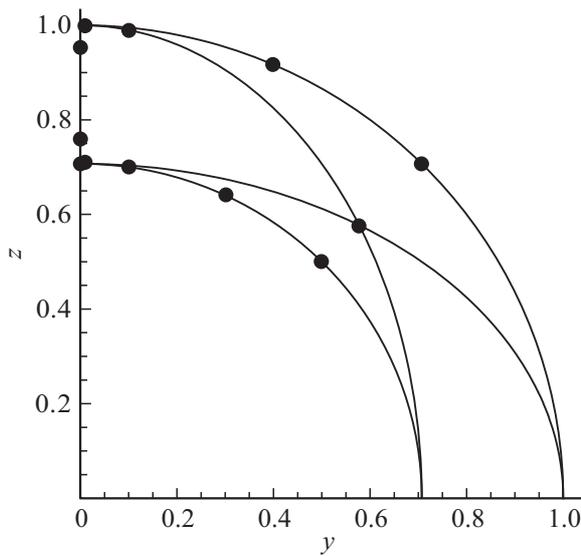
Отметим, что при расчете использовалась симметрия приведенных ядер относительно перестановки  $y$  и  $z = \sqrt{1-x^2-y^2}$ . Эта симметрия соответствует сим-

метрии нелинейных ядер относительно перестановки переменных  $c_1, c_2$ .

При некоторых значениях аргументов существенно повысить точность позволяет численный расчет интегра-



**Рис. 7.** Относительная погрешность расчета с учетом асимптотики остатка: интеграл в (20) находится численно.



**Рис. 8.** Точки, в которых приведенное ядро вычислялось с использованием асимптотического подхода (результаты расчета приведены в табл. 2).

ла в (20). При этом значение  $d$  может быть уменьшено, что увеличивает точность приближения полиномов Сонина. Однако при дальнейшем уменьшении  $d$  растет верхний предел интеграла, и численное интегрирование медленно убывающих осциллирующих функций становится отдельной проблемой.

На рис. 7 приведена относительная погрешность расчета  $\Psi$  с использованием численного расчета интеграла в (20). Видно, что она по абсолютному значению не превышает 0.004.

**Таблица 2.** Относительные погрешности вычисления приведенных ядер  $\Psi$  через МЭ с учетом асимптотики остатка; внешний и внутренний интегралы оцениваются с помощью асимптотического разложения ( $\delta U^{(128)}$ ) или находятся численно ( $\delta U_{quad}^{(128)}$ )

$x$	$y$	$\Psi$	$\min(\delta U^{(128)}, \delta U_{quad}^{(128)})$
$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	102.57	$7.8 \cdot 10^{-5}$
0.01	0.01	2513.4	$-7.5 \cdot 10^{-6}$
0.01	0.4	68.564	$-1.0 \cdot 10^{-4}$
0.01	0.707	50.274	$-3.6 \cdot 10^{-4}$
0.707	0.01	71.085	-0.011
0.705	0.01	71.085	$-4.6 \cdot 10^{-4}$
0.707	0.03	41.213	$-1.0 \cdot 10^{-3}$
0.707	0.1	12.468	$-8.2 \cdot 10^{-4}$
0.707	0.3	4.547	$-9.0 \cdot 10^{-4}$
0.707	0.5	3.493	$-3.5 \cdot 10^{-4}$
0.01	0	253.87	$2.9 \cdot 10^{-13}$
0.3	0	92.071	$2.0 \cdot 10^{-13}$
0.65	0	66.965	$2.3 \cdot 10^{-13}$
0.707	0	71.085	$1.5 \cdot 10^{-9}$

При  $y = 0$  (т.е.  $c_1 = 0$ ) аналитическая оценка интеграла, приближающего сумму (22), остается достаточно точной при малых значениях  $c_2$ , поэтому относительная погрешность расчета уменьшается с уменьшением  $d$ , насколько удалось проследить (при  $d = 10^{-6}$  она оказалась порядка  $10^{-13}$ ).

Как указано выше, наибольшую трудность представляет расчет ядра на линиях разрыва частных производных и вблизи границ области определения  $x = 0$ ,  $x = 1/\sqrt{2}$ . Как видно из рис. 6, 7, при использовании асимптотического подхода точность расчета на линиях разрыва частных производных не хуже, чем вдали от них. Примеры расчета ядра с использованием асимптотического подхода вблизи границ  $x = 0$ ,  $x = 1/\sqrt{2}$  представлены в табл. 2. На рис. 8 показано положение точек, в которых рассчитывалось ядро, на плоскости  $(y, z)$ , где  $z = \sqrt{1 - x^2 - y^2}$ . Такой выбор координат связан с симметрией ядра, благодаря которой достаточно проводить расчет в области  $y < z$  (чему соответствует  $y < \sqrt{(1 - x^2)/2}$ ).

### Заключение

Основная задача проведенного исследования состояла в выяснении возможности построения ядра нелинейного интеграла столкновений по его матричным элементам. Рассматривались псевдомаксвелловские молекулы. В этом случае в нашем распоряжении были аналитические выражения как для ядра интеграла обратных столкновений, так и для его матричных элементов [16,19]. Рассматривалось ядро  $G_{0,0}^{+0}$ .

Показано, что в основной области задания ядра его с высокой точностью можно построить по известным МЭ путем непосредственного суммирования по формуле (7), если проводить статистическую обработку с помощью усреднения результатов, полученных при различных значениях ряда параметров. С очень высокой точностью можно построить ядро по МЭ, если провести асимптотическую оценку остатка ряда. Особенно важно, что в этом случае высокая точность сохраняется при переходе из основной области в особые области, сосредоточенные около линий, на которых испытывают разрыв производные от ядра по скоростям.

В настоящее время аналитически удалось построить  $G_{0,0}^{+0}$  только для двух сечений рассеяния — твердые шары и псевдомаксвелловские молекулы. Проверенный в настоящей работе метод численного построения ядер может быть применен для других сечений взаимодействия частиц. При использовании метода асимптотической оценки остатка ряда здесь понадобится обобщение на случай, когда не выполнено характерное для максвелловских молекул условие  $r = r_1 + r_2$ .

При статистической обработке точность может быть повышена за счет увеличения числа известных МЭ. Кроме того, для уточнения могут быть использованы некоторые свойства ядер, например закон сохранения числа частиц.

Что касается МЭ, то они находятся с помощью рекуррентной процедуры [6]. Особенно просто это делается для сечений взаимодействия, степенным образом зависящих от относительной скорости при произвольной угловой зависимости. Для других сечений взаимодействия в [6] показано, что любые нелинейные МЭ можно представить в виде разложения по  $\Omega$ -интегралам, и получены рекуррентные соотношения для коэффициентов разложения. Исходным для этой процедуры является разложение по  $\Omega$ -интегралам линейных изотропных МЭ.

## Список литературы

- [1] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
- [2] Иванов М.С. // ЖВМ и МФ. 2005. Т. 45. Вып. 10. С. 1860–1870.
- [3] Черемисин Ф.Г. // ДАН. 1997. Т. 357. Вып. 1. С. 53–57.
- [4] Ohwada T. // Phys. Fluids. A. 1993. Vol. 5. N 1. P. 217–234.
- [5] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M. // Phys. Rev. 1954. Vol. 94. P. 511–525.
- [6] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: СПбГУ, 2003. 224 с.
- [7] Ender A.Y., Ender I.A., Gerasimenko A.B. // The Open Plasma Phys. J. 2009. Vol. 2. P. 24–62.
- [8] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 8–17.
- [9] Эндер А.Я., Эндер И.А., Герасименко А.Б. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 18–28.
- [10] Loyalka S.K. // Phys. Fluids. A. 1989. Vol. 1. P. 403–408.
- [11] Garsia M., Siewert C.E. // Europ. J. Mech. B–Fluid. 2007. Vol. 26. P. 749–778.
- [12] Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 10. С. 12–21.
- [13] Hilbert D. // Math. Ann. 1912. Vol. 72. P. 562–577.
- [14] Hecke E. // Math. Z. 1922. Vol. 12. P. 274–286.
- [15] Эндер А.Я., Эндер И.А. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. Вып. 5. С. 9–14.
- [16] Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю. // ЖТФ. 2012. Т. 82. Вып. 6. С. 1–8.
- [17] Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А. // ДАН. 2011. Т. 437. Вып. 5. С. 1–3.
- [18] Ender A.Ya., Ender I.A., Bakaleinikov L.A., Flegontova E.Yu. // Europ. J. Mech. B–Fluid. 2012. Vol. 36. P. 17–24.
- [19] Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 9. С. 6–15.
- [20] Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 2. С. 22–35.
- [21] Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382–435.
- [22] Sirovich L. // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N 1. P. 10–20.
- [23] Эндер А.Я., Эндер И.А. Аэродинамика / Под ред. Р.Н. Мирошина. СПб.: НИИХ. СПбГУ, 2003. С. 179–203.
- [24] Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю. // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 4. С. 24–34.
- [25] Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990. 528 с.
- [26] Эрдейи А. Асимптотические разложения. М.: Физматгиз, 1962. 128 с.