## 01

## Расчет линейного ядра интеграла столкновений в изотропном случае для псевдомаксвелловских молекул

© Л.А. Бакалейников,<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
 e-mail: bakal@ammp.ioffe.rssi.ru
 <sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, 199164 Санкт-Петербург, Россия

## (Поступило в Редакцию 8 февраля 2006 г.)

Использование нелинейного моментного метода для решения уравнения Больцмана приводит к необходимости суммирования ряда, представляющего разложение функции распределения (ФР) по базисным функциям. Сходимость этого ряда гарантируется лишь при выполнении критерия Грэда. Избавиться от такого ограничения возможно, если просуммировать разложение ФР по индексу, связанному только с разложением по модулю скорости. В этом случае ФР и интеграл столкновений оказываются разложенными только по сферическим гармоникам, а коэффициенты разложения удовлетворяют интегро-дифференциальным уравнениям. Ядра этих уравнений представляют собой сумму произведений полиномов Сонина от скоростей сталкивающихся и уходящих частиц и матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений. При непосредственном расчете ядер для некоторых значений аргументов необходимо учитывать очень большое число членов в сумме. В связи с этим перспективным представляется подход, основанный на использовании асимптотики МЭ и полиномов Сонина при больших индексах и замене суммирования по индексу интегрированием. В работе такой подход реализован для линейного ядра в изотропном случае при "псевдостепенном" взаимодействии частиц. Разработанный метод позволяет рассчитывать ядро интеграла столкновений с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков членов ряда и асимптотической оценки остатка.

PACS: 02.70.Ns

Разложения по полиномам широко используются в кинетической теории газов. Для линеаризованного уравнения Больцмана такое разложение лежит в основе известного метода Чепмена–Энскога [1]. В нелинейном случае этот метод получил развитие в работах Барнетта [2,3] и Греда [4]. Вслед за Барнеттом мы будем использовать в качестве базисных функций вещественные сферические ненормированные полиномы Эрмита

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

где  $S_{l+1/2}^r(x)$  — полиномы Сонина (Лагерра), а вещественные сферические гармоники  $Y_{lm}^i(\theta, \varphi)$  определяются следующим образом:

$$Y_{lm}^{0}(\theta,\varphi) = P_{l}^{m}(\cos\theta)\cos m\varphi,$$
  
$$Y_{lm}^{1}(\theta,\varphi) = P_{l}^{m}(\cos\theta)\sin m\varphi.$$
 (2)

Здесь  $P_l^m(x)$  — присоединенные полиномы Лежандра, а *c*,  $\theta$ ,  $\varphi$  — сферические координаты вектора **c**. Представим функцию распределения ( $\Phi$ P) в виде

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = M(\alpha, c) \sum_{j} C_{j}(\mathbf{r}, t) H_{j}(\mathbf{c}), \qquad (3)$$

где  $c = \sqrt{\alpha}(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \ \alpha = m/2kT$ , а  $M(\alpha, c)$  — максвеллиан. Индекс *j* соответствует четырем индексам *i*, *r*, *l*, *m*. При таком разложении ФР нелинейное уравнение Больцмана заменяется системой моментных уравнений для коэффициентов разложения *C*<sub>*i*</sub>

$$\frac{DC_j}{Dt} = \sum_0^\infty K_{j_1, j_2}^j C_{j_1} C_{j_2}.$$
 (4)

Дифференциальный оператор *D/Dt* представляет собой левые части моментных уравнений (см. например, [3,5]).

Матричные элементы (МЭ) от интеграла столкновений  $K_{i_1,i_2}^j$  определяются следующим образом:

$$K_{j_1,j_2}^j = \int H_j \hat{I}(MH_{j_1}, MH_{j_2}) d^3 v / g_j, \qquad (5)$$

где  $\hat{I}$  — больцмановский столкновительный оператор, а  $g_j$  — нормировочный коэффициент. Сложность расчета интеграла столкновений приводит к серьезным проблемам при вычислении МЭ  $K_{j_1,j_2}^j$ . Если в последнем равенстве выполнить все интегрирования, то получаются формулы с таким огромным числом суммирований, что их, как было показано в [6], практически невозможно использовать даже в изотропном случае. В то же время в этой же работе выведены рекуррентные формулы, с помощью которых впервые вычислены МЭ при очень больших значениях индексов [7]. В результате удалось с почти аналитической точностью провести ряд расчетов релаксации изотропной ФР для нескольких моделей взаимодействия до 8-10 тепловых скоростей.

Другой трудностью в реализации моментного метода является вопрос о сходимости разложения (3). Хорошо известно, что это разложение сходится лишь при условии выполнения критерия Греда

$$\int_{0}^{\infty} f^2 \exp(c^2) d^3 v.$$
 (6)

Например, для ударной волны этот критерий нарушается, если число Маха превышает значение 1.85. Ограничения, связанные с критерием Греда, возникают при разложении ФР по полиномам Сонина, поскольку именно эти полиномы ортогональны с максвелловским весом. Избавиться от этой трудности возможно, если просуммировать ряд (3) по индексу r, связанному только с разложением по модулю скорости. Выполнить такое суммирование возможно, если известны МЭ при больших значениях индексов. В этом случае ФР и интеграл столкновений оказываются разложенными только по сферическим гармоникам.

Такой подход был предложен в [7,8]. Для его реализации рассмотрим разложение ФР по сферическим гармоникам

$$f(v) = \sum_{l,m,i} Y_{lm}^i(\theta, \varphi) f_{l,m,i}(v).$$
(7)

Формально коэффициенты  $C_j$  моментной системы (4) выражаются через функции  $f_{l,m,i}$  так:

$$C_{j} = \frac{1}{\sigma_{r,l}} \int_{0}^{\infty} f_{l,m,i}(v) c^{l} S_{l+1/2}^{r}(c^{2}) v^{2} dv.$$
(8)

Подставим (8) в правую часть моментной системы (4), умножим обе ее части на функцию  $M(c)c^l S_{l+1/2}^r(c^2)$  и просуммируем по *r*. Получаем систему уравнений для коэффициентов разложения ФР по сферическим гармоникам в виде [8]:

$$\frac{Df_{l,m,i}(v)}{Dt} = \sum_{m_1,i_1,m_2,i_2} \sum_{l_1,l_2} \hat{Z}_{m_i,i_1,m_2,i_2}^{m,i}(l,l_1,l_2) \\
\times \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} G_{l_1,l_2}^l(v,v_1,v_2) f_{l_1,m_1,i_1}(v_1) f_{l_2,m_2,i_2}(v_2) v_1^2 dv_1 v_2^2 dv_2,$$
(0)

где ядра  $G_{l_1,l_2}^l(v, v_1, v_2)$  есть разложения по полиномам Сонина

$$G_{l_1,l_2}^l(v,v_1,v_2) = M(\alpha,c) \sum_r \sum_{r_1} \sum_{r_2} \frac{1}{\sigma_{r_1 l_1} \sigma_{r_2 l_2}} \\ \times S_{l+1/2}^r(c) K_{r_1 l_1,r_2 l_2}^{r_1} S_{l_1+1/2}^{r_1}(c_1) S_{l_2+1/2}^{r_2}(c_2).$$
(10)

В (10) суммирование ведется только по таким комбинациям индексов, которые удовлетворяют обобщенной теореме Геке для нелинейных МЭ  $(|l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2)$ 

и  $(-1)^l = (-1)^{l_1+l_2})$  и условию  $m = |m_1 \pm m_2|$ , а численные коэффициенты  $\hat{Z}_{m_1,i_1,m_2,i_2}^{m,i}(l, l_1, l_2)$  выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана. Величины  $\sigma_{rl}$  — это нормировочные коэффициенты полиномов Сонина. Следует подчеркнуть, что (7) и (9) теперь могут быть использованы для решения более неравновесных задач чем те, для которых применима система моментных уравнений (2), поскольку здесь нет ограничений, связанных с критерием Греда.

Формулы (10) дают возможность рассчитать ядра  $G_{l_1 l_2}^{l}(v, v_1, v_2)$  для произвольного закона взаимодействия как в линейном, так и нелинейном случаях. Заметим, что в работах [9-11] были получены аналитические выражения для линейных ядер в случае твердых шаров. Выполненный нами непосредственный расчет таких ядер по формулам (10) показал, что сумма действительно сходится к результату работы [11], однако при некоторых значениях аргументов необходимо учитывать очень большое число членов в сумме. В связи с этим представляется перспективным подход к расчету "хвоста" ряда (10), основанный на использовании асимптотики матричных элементов и полиномов Сонина при больших индексах и замене суммирования по индексу интегрированием. Для ряда сечений взаимодействия асимптотика матричных элементов была получена в [12].

В настоящей работе такой подход исследуется применительно к простому случаю линейного ядра для модели псевдомаксвелловских молекул при  $l = l_2 = 0$ . В этой модели сечение предполагается обратно пропорциональным модулю относительной скорости, а угловое распределение — изотропным. При этом матричные элементы известны аналитически при любых значениях индексов, и для приходного члена они имеют вид  $K_{0n}^r = K_{n0}^r = \frac{1}{(r+1)} \delta_n^r$ .

Итак, задача построения линейного ядра, соответствующего приходному члену интеграла столкновений, сводится к вычислению суммы ряда

$$G(c, c_1) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^r(c_1^2)}{(r+1)\nu_r}.$$
 (11)

где  $v_r = \frac{(2r+1)!!}{(2r)!!}$ . Здесь индексы  $l = l_1 = l_2 = 0$  у ядра  $G_{0,0}^0$  опущены. Для отыскания функции  $G(c, c_1)$  разобьем ряд (11) на две части — сумму конечного числа элементов  $G_{m-1}^f(c, c_1)$  с  $r = 0, \ldots, m-1$  и остаток

$$G_m(c, c_1) = \sum_{r=m}^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^r(c_1^2)}{(r+1)\nu_r}.$$
 (12)

Конечная сумма вычисляется непосредственно, а остаток (12) может быть оценен с помощью формулы Эйлера–Маклорена. Как известно [13], эта формула сводит вычисление суммы к расчету интеграла и используется в том случае, когда зависимость членов  $z_r$  ряда  $Z_m = \sum_{r=m}^{\infty} z_r$  от индекса может быть интерполирована

гладким образом во всех точках вещественной оси. Таким образом, если h(t) — гладкая функция, такая, что  $h(r) = z_r$ , то, как показано в [13],

$$Z_{m} = \frac{1}{2}h(m) + \int_{m}^{\infty} h(t)dt + \sum_{s=1}^{k-1} (-1)^{s} \omega_{s+1}(0)h^{(s)}(m) + (-1)^{k+1} \int_{m}^{\infty} \omega_{k}(t)h^{(k)}(t)dt.$$
 (13)

Здесь

$$\omega_1(x) = x - [x] - \frac{1}{2}, \qquad \omega_s(x) = \int \omega_{s-1}(x) dx,$$
$$\int_0^1 \omega_s(x) dx = 0.$$

Непосредственное использование (13) для получения остатка  $G_m(c, c_1)$  весьма затруднительно. Поэтому необходимо, во-первых, исследовать асимптотическое поведение членов ряда (12) при больших значениях r и, во-вторых, воспользоваться (13) для отыскания асимптотики  $G_m(c, c_1)$  по m. Заметим, что аналогичная задача возникает при расчете ядер и в неизотропном случае, однако для расчета остатка ряда необходимо использовать асимптотику полиномов Сонина  $S_{l+1/2}^r(x)$  при произвольных значениях l.

Метод получения асимптотики полиномов Сонина  $S_{l+1/2}^r(x)$  по индексу *r* был предложен в [14], где с его помощью найден первый член асимптотического разложения. Для вывода формул заметим, что функция  $V_r(x) = e^{-x/2}S_{l+1/2}^r(x)$  представляет собой интеграл дифференциального уравнения

$$xV_r^n + (\alpha + 1)V_r' + (r + (\alpha + 1)/2)V_r = \frac{xV_r}{4}, \quad (14)$$

где  $\alpha = l + 1/2$ , регулярна в x = 0 и

$$V_r(0) = S_{l+1/2}^r(0) = \Gamma(r+\alpha+1) / r! \Gamma(\alpha+1).$$
(15)

Считая, что правая часть уравнения (14) известна, и применяя метод Лагранжа, перейдем от (14) к интегральному уравнению

$$V_{r}(x) = A_{1}U_{r}^{1}(x) + A_{2}U_{r}^{2}(x) + \frac{\pi}{4R_{0}} \int_{0}^{x} (Ry)^{\alpha+1}V_{r}(y) \\ \times \left[U_{r}^{1}(y)U_{r}^{2}(x) - U_{r}^{1}(x)U_{r}^{2}(y)\right] dy.$$
(16)

Здесь

$$U_r^1(x) = (Rx)^{-\alpha/2} J_\alpha(2\sqrt{Rx}),$$
 (17)

$$U_r^2(x) = (Rx)^{-\alpha/2} Y_\alpha(2\sqrt{Rx}),$$
 (18)

$$R = r + (\alpha + 1)/2,$$
 (19)

а  $J_{\alpha}(y)$ ,  $Y_{\alpha}(y)$  — функции Бесселя первого и второго рода. Принимая во внимание ограниченность  $V_r(x)$  в

окрестности нуля и (17), (18), найдем, что при  $x \to 0$  интегральный член в (16) есть  $O(x^2)$ . Поэтому, согласно (15), значения постоянных интегрирования будут

$$A_1 = \frac{\Gamma(r+\alpha+1)}{r!}, \quad A_2 = 0.$$
 (20)

Это, в свою очередь, дает

$$V_{r}(x) = \frac{\Gamma(r+\alpha+1)}{r!} ((Rx)^{-\alpha/2} J_{\alpha}(2\sqrt{Rx}) + q_{r}(x)),$$
(21)

где

$$q_r(x) = \frac{\pi}{4RA_1} \int_0^x (Ry)^{\alpha+1} V_r(y) \\ \times \left[ U_r^1(y) U_r^2(x) - U_r^1(x) U_r^2(y) \right] dy = \frac{1}{A_1} \hat{P}(V_r).$$
(22)

В [14] приведена оценка порядков функций  $q_r(x)$  и  $U_r^1(x)$  в интервалах  $0 \le x \le R^{-1}$ ,  $x > R^{-1}$ . При этом

$$U_r^1(x) = O(1), \quad q_r(x) = O(R^{-2}), \quad 0 \le x \le R^{-1}, \quad (23)$$
$$U_r^1(x) = O((Rx)^{-(\alpha+1/2)/2}),$$
$$q_r(x) = O(R^{-1/4}x^{3/2})O((Rx)^{-1/2}), \quad x > R^{-1}.$$

Таким образом, при фиксированном x и  $r \to \infty$  функция  $q_r(x)$  имеет более высокий порядок малости, чем  $U_r^1(x)$ , и формула (21) представляет собой асимптотическое разложение.

Вычислим теперь следующий член асимптотики. Для этого необходимо подставить (21) в правую часть (16). Оценка вклада функций  $U_r^1(x)$  и  $q_r(x)$  в интегральный член, проведенная с использованием (23), позволяет утверждать, что

$$\hat{P}(U_r^1) = O(R^{-2}), \quad \hat{P}(q_r) = O(R^{-4}), \quad 0 \le x \le R^{-1};$$

$$\hat{P}(U_r^1) = O(R_x^{-1}), \quad \hat{P}(q_r) = O(R^{-5/4}x^{5/2}), \quad x > R^{-1},$$
(24)

т.е. основной вклад в асимптотику этого члена дает  $\hat{P}(U_r^1(x))$ . Подстановка первого члена (21) в (16) и вычисление интегралов дает выражение для следующего члена асимптотического разложения функции  $V_r(x)$ , а следовательно, и полинома Сонина

$$S_{l+1/2}^{r}(x) = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r!} \exp(x/2) \Big\{ (Rx)^{(-l+1/2)/2} \\ \times J_{l+1/2} \Big( 2\sqrt{Rx} \Big) + \frac{x^{3/2}}{12R^{1/2}} (Rx)^{-(l+1/2)/2} Y_{l+1/2} \Big( 2\sqrt{Rx} \Big) \\ + o \Big( R^{-(l+3/2)/2} Y_{l+1/2} \Big( 2\sqrt{Rx} \Big) \Big) \Big\}, \quad R \to \infty.$$
(25)

На рис. 1, a-d приведена зависимость значения полинома Сонина от индекса r при значении аргумента x = 1и l = 0, 1, 5, 20, a на рис. 1, e-h — разность между  $S_{l+1/2}^{r}(x)$  и первыми двумя членами асимптотики (25).



**Рис. 1.** *a*-*d*: Зависимость полинома Сонина  $|S_{l+1/2}^r(x)|$  от *r* при x = 1; l = 0 (*a*), 1 (*b*), 5 (*c*), 20 (*d*). *e*-*h*: Зависимость разности между значением полинома Сонина  $|S_{l+1/2}^r(x)|$  и его асимптотической оценкой (25) от *r* при x = 1, l = 0 (*e*), 1 (*f*), 5 (*g*), 20 (*h*).

Видно, что рост индекса *l* сопровождается значительным ростом величины  $S_{l+1/2}^r(x)$ . Несмотря на это относительная погрешность асимптотического представления (25) при r = 1000 не превосходит  $3 \cdot 10^{-4}$  при всех значениях *l*. Отметим, что дальнейшие члены асимптотического разложения  $S_{l+1/2}^r(x)$  могут быть получены последовательным применением того же приема — подстановкой уже имеющегося разложения в формулу (16).

Использование разложения (25) для отыскания асимптотики  $G_m(c, c_1)$  по *m* не вполне удобно, поскольку входящие в асимптотику интегралы не удается вычислить в аналитическом виде. Для перехода к элементарным функциям в (25) заметим, что для функций Бесселя с полуцелым индексом имеют место соотношения

$$J_{l+1/2}(x) = (-1)^{l} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} x^{l+1/2} \left(\frac{d}{xdx}\right)^{l} \frac{\sin x}{x},$$
  

$$l = 0, 1, 2 \dots,$$
  

$$Y_{l+1/2}(x) = (-1)^{l+1} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} x^{l+1/2} \left(\frac{d}{xdx}\right)^{l} \frac{\cos x}{x},$$
  

$$l = 0, 1, 2, \dots$$
(26)

Выполнив дифференцирование в (26), найдем

$$J_{l+1/2}(x) = \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \left[\cos\left(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4\right) - \frac{4(l+1/2)^2 - 1}{8x}\sin\left(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4\right) + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right],$$
(27)

$$\begin{aligned} Y_{l+1/2}(x) &= \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \bigg[ \sin \big( x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4 \big) \\ &+ \frac{4(l+1/2)^2 - 1}{8x} \cos \big( x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4 \big) \\ &+ O\Big(\frac{1}{x^2}\Big) \bigg]. \end{aligned}$$

Выражения (27) представляют собой асимптотические разложения функций Бесселя при больших значениях



Рис. 1 (продолжение).

аргумента. Их подстановка в (25) приводит к

$$S_{l+1/2}^{r}(x) = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r!\sqrt{\pi}} \exp(x/2) \left\{ \frac{1}{(Rx)^{(l+1)/2}} \times \cos\left(2\sqrt{Rx} - (l+1)\pi/2\right) + \left(-\frac{4(l+1/2)^2 - 1}{16(Rx)^{(l+2)/2}} + \frac{x^2}{12(Rx)^{(l+2)/2}}\right) \times \sin\left(2\sqrt{Rx} - (l+1)\pi/2\right) + O\left((Rx)^{-(l+3)/2}\right) \right\}.$$
 (28)

Как показывают расчеты, использование (28) вместо (25) ухудшает оценку  $S_{l+1/2}^r(x)$ , особенно для больших значений l. Причина этого заключается в том, что область применимости асимптотики функций Бесселя с ростом l сдвигается в область больших значений аргумента. Это демонстрирует рис. 2, a, где приведены значения  $S_{l+1/2}^r(x)$  и асимптотическая оценка (28) для l = 20. Видно, что значения асимптотической оценки сдвинуты по отношению к значениям  $S_{l+1/2}^r(x)$  и отличаются от них, по крайней мере, на порядок. Для компенсации этого различия введем "фазовый сдвиг"

в аргумент (28), т.е. будем искать асимптотическую оценку  $S_{l+1/2}^r(x)$  в виде

$$S_{l+1/2}^{r}(x) = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r!\sqrt{\pi}(Rx)^{(l+1)/2}} \exp(x/2) \\ \times \left[ \cos\left(2\sqrt{(R+\Delta)x} - (l+1)\pi/2\right) + O\left((Rx)^{-1}\right) \right].$$
(29)

Считая  $\Delta$  малым, разложим (29) в ряд и сопоставим первые члены разложения с (28). Это дает

$$\Delta = \left(\frac{4(l+1/2)^2 - 1}{16} - \frac{x^2}{12}\right)\frac{1}{x}.$$
 (30)

Сравнение  $S_{l+1/2}^r(x)$  с асимптотической оценкой (29), (30) при l = 20 приведено на рис. 2, *b*. Как видно из рисунка, введение "фазового сдвига" в аргумент оценки (28) значительно улучшает соответствие между точными и приближенными значениями  $S_{l+1/2}^r(x)$ .

В заключение отметим, что при l = 0 асимптотические оценки (25) и (28) совпадают, и согласно рис. 1, погрешность при их использовании оказывается величиной порядка  $10^{-4}$  при x = 1 и r = 1000.



**Рис. 2.** Зависимость полинома Сонина  $|S_{l+1/2}^r(x)|$  (1) и асимптотической оценки (28) и (29) от r при l = 20, x = 1.

Перейдем теперь к расчету остатка  $G_m(c, c_1)$  (12), используя найденную асимптотику. Асимптотика членов ряда (12) с учетом (28) имеет вид

$$a_{r} = \frac{S_{1/2}^{r}(c^{2})S_{1/2}^{r}(c_{1}^{2})(2r)!!}{(r+1)(2r+1)!!} = \exp\left((c^{2}+c_{1}^{2})/2\right)$$

$$\times \frac{(\Gamma(r+3/2))^{2}(2r)!!}{(r!)^{2}(r+1)(2r+1)!!} \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\sin(2c\sqrt{R})\sin(2c_{1}\sqrt{R})}{Rcc_{1}} - \frac{c^{3}\cos(2c\sqrt{R})\sin(2c_{1}\sqrt{R}) + c_{1}^{3}\cos(2c_{1}\sqrt{R})\sin(2c\sqrt{R})}{12R^{3/2}cc_{1}} + o(R^{-3/2}) \right\} = a_{r}^{0} + a_{r}^{1} + o(a_{r}^{1}).$$
(31)

Принимая во внимание, что

$$\frac{(\Gamma(r+3/2))^2 (2r)!!}{(r!)^2 (r+1)(2r+1)!!} = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(r+3/2)}{2\Gamma(r+2)},$$
 (32)

и заменив произведение синусов разностью косинусов, представим первый член разложения (31) в виде

$$a_r^0 = \frac{exp\left(c^2 + c_1^2\right)/2}{4\sqrt{\pi}cc_1}\left(b_r^- - b_r^+\right),\tag{33}$$

$$b_r^{\pm} = \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} \frac{\cos\left(2\sqrt{R}(c\pm c_1)\right)}{R}.$$
 (34)

Вклад от первого члена разложения (31) в интеграл в формуле Эйлера-Маклорена запишется тогда

$$G_m^0(c, c_1) = \frac{\exp\left((c^2 + c_1^2)/2\right)}{4\sqrt{\pi}cc_1} \Big(B_m(2(c - c_1)) - B_m(2(c + c_1))\Big),$$
(35)

где

$$B_{m}(\beta) = \int_{m}^{\infty} h(t)dt,$$
$$h(t) = \frac{\cos(\beta\sqrt{t+3/4})}{t+3/4} \frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)}.$$
(36)

Для вычисления интеграла  $B_m(\beta)$  получим асимптотическое представление h(t) при  $t \to \infty$ . Используя формулу Стирлинга для отношения Г-функций и раскладывая получившийся результат в ряд по t + 3/4, найдем

$$\frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)} = \frac{e^{1/2}}{(t+2)^{1/2}} \left(\frac{t+3/2}{t+2}\right)^{t+1} (1+O(t^{-2}))$$
$$= \frac{1}{(t+3/4)^{1/2}} \left(1 + \frac{3}{8} \frac{1}{t+3/4} + O\left((t+3/4)^{-2}\right)\right)$$
$$\times \left(1 - \frac{5}{8} \frac{1}{t+3/4} + O\left((t+3/4)^{-2}\right)\right), \quad t \to \infty.$$
(37)

Это дает

$$h(t) = \frac{\cos(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^{3/2}} \left(1 - \frac{1}{4(t+3/4)} + O\left((t+3/4)^{-2}\right)\right), \quad t \to \infty.$$
(38)

Подстановка (38) в (36) приводит к

$$B_{m}(\beta) = 2\left\{ \left[ \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} - \beta\left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4})\right) \right] - \frac{1}{4} \left[ \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{3(m+3/4)^{3/2}} - \beta\frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{6(m+3/4)} - \beta^{2}\frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{6\sqrt{m+3/4}} + \beta^{3}\frac{1}{6}\left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4})\right) \right] \right\} + O(m^{-5/2}).$$
(39)

Заметим, что члены в квадратных скобках вычисляются при любых значениях  $\beta$  и имеют порядки  $O(\frac{1}{m})$ ,  $O(\frac{1}{m^2})$  при  $\beta \neq 0$  и  $O(\frac{1}{\sqrt{m}})$ ,  $O(\frac{1}{m^{3/2}})$  при  $\beta = 0$  соответственно.

Журнал технической физики, 2006, том 76, вып. 9

Второй член разложения (31) представим в виде

$$a_{r}^{1} = -\frac{\exp\left((c^{2} + c_{1}^{2})/2\right)}{48\sqrt{\pi}cc_{1}} \left(d_{r}(c, c_{1}) + d_{r}(c_{1}, c)\right), \quad (40)$$
$$d_{r}(c, c_{1}) = c^{3}(f_{r}^{+} - f_{r}^{-}),$$
$$f_{r}^{\pm} = \frac{\Gamma(r + 3/2)}{\Gamma(r + 2)} \frac{\sin\left(2\sqrt{R}(c \pm c_{1})\right)}{R^{3/2}}.$$

Вклад от этого члена в интеграл будет

$$G_m^1(c, c_1) = -\frac{\exp\left((c^2 + c_1^2)/2\right)}{48\sqrt{\pi}cc_1}$$

$$\times \left(c^3\left(F_m(2(c+c_1)) + F_m(2(c_1-c))\right)\right)$$

$$+ c_1^3\left(F(2(c_1+c)) + F_m(2(c-c_1))\right)\right), \quad (41)$$

где

$$F_m(\beta) = \int_m^\infty f(t)dt,$$
  
$$f(t) = \frac{\sin(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^{3/2}} \frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)}.$$
 (42)

Использование асимптотики (37) для отношения Г-функций дает

$$f(t) = \frac{\sin(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^2} \left(1 - \frac{1}{4(t+3/4)} + O\left((t+3/4)^{-2}\right)\right), \quad t \to \infty.$$
(43)

При этом для интегралов  $F_m(\beta)$  имеем

$$F_{m}(\beta) = \left\{ \left[ \frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{m+3/4} + \beta \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} \right] - \beta^{2} \left( \frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) - \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{4(m+3/4)^{2}} + \frac{\beta}{12} \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{(m+3/4)^{3/2}} - \frac{\beta^{2}}{24} \frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{m+3/4} - \frac{\beta^{3}}{24} \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} + \frac{\beta^{3}}{24} \left( \frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) \right\} + O(m^{-7/2}).$$

$$(44)$$

Члены в квадратных скобках имеют порядок  $O(\frac{1}{m^{3/2}})$ ,  $O(\frac{1}{m^{5/2}})$  соответственно при  $\beta \neq 0$  и обращаются в нуль при  $\beta = 0$ .

Для того чтобы убедиться, что представление  $G_m(c, c_1)$  в виде суммы

$$G_m(c, c_1) = G_m^0(c, c_1) + G_m^1(c, c_1) + \frac{1}{2}(a_m^0 + a_m^1) \quad (45)$$

дает главный вклад, необходимо оценить остаток в формуле Эйлера-Маклорена (13). Он включает в себя производные от  $a_r = \frac{S_{1/2}^r(c^2)S_{1/2}^r(c_1^2)(2r)!!}{(r+1)(2r+1)!!}$  по переменной *r*. Исследуем порядки этих производных при большом значении индекса. Прежде всего запишем  $a_r$  в виде

$$a_{r} = \exp\left(\frac{c^{2} + c_{1}^{2}}{2}\right) \frac{(\Gamma(r+3/2))^{2}(2r)!!}{(\Gamma(r+1))^{2}(r+1)(2r+1)!!} U_{r}(c^{2}) U_{r}(c_{1}^{2})$$
$$= \exp\left(\frac{c^{2} + c_{1}^{2}}{2}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} U_{r}(c^{2}) U_{r}(c_{1}^{2}), \quad (46)$$

где  $U_r(x) = \exp(-x/2) \frac{S_{1/2}^r(x)\Gamma(r+1)}{\Gamma(r+3/2)}$ . Вычисление производной дает

$$\frac{\partial a_r}{\partial r} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} \bigg\{ \big(\psi(r+3/2) - \psi(r+2)\big) U_r(c^2) U_r(c_1^2) \bigg\}$$

$$+\left(\frac{\partial U_r(c^2)}{\partial r}U_r(c_1^2)+\frac{\partial U_r(c_1^2)}{\partial r}U_r(c^2)\right)\bigg\},\qquad(47)$$

где  $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ . Для оценки  $\frac{\partial U_r(x)}{\partial r}$  заметим, что  $U_r(x)$  удовлетворяет интегральному уравнению

$$U_{r}(x) = U_{r}^{1}(x)$$

$$+ \frac{\pi}{4R} \int_{0}^{x} (Ry)^{3/2} U_{r}(y) \left[ U_{r}^{1}(y) U_{r}^{2}(x) - U_{r}^{1}(x) U_{r}^{2}(y) \right] dy$$

$$= U_{r}^{1}(x) + \int_{0}^{x} P_{r}(x, y) U_{r}(y) dy.$$
(48)

Продифференцировав его по параметру r, найдем, что производная  $\frac{\partial U_r(x)}{\partial r}$  удовлетворяет уравнению Вольтера, решение которого представляется рядом

$$\frac{\partial U_r(x)}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x;r),$$

$$\varphi_0(x;r) = \frac{\partial U_r^1(x)}{\partial r} + \int_0^x \frac{\partial P_r(x,y)}{\partial r} U_r(y) dy, \qquad (49)$$

$$\varphi_n(x;r) = \int_0^x P_r(x,y) \varphi_{n-1}(y;r) dy.$$

Можно показать, что этот ряд является асимптотическим по r, и, таким образом, порядок производной  $\frac{\partial U_r(c^2)}{\partial r}$  определяется первым членом  $\varphi_0(x;r)$  и равен  $O(R^{-1})$ . Асимптотику  $\frac{\partial a_r}{\partial r}$  теперь легко найти, учитывая (23), (37) и асимптотику функции  $\psi(r) = \ln(r) - \frac{1}{2r} - \frac{1}{12r^2} + O\left(\frac{1}{r^4}\right)$ :

$$\frac{\partial a_r}{\partial r} = O(R^{-2}). \tag{50}$$

Журнал технической физики, 2006, том 76, вып. 9



**Рис. 3.** Вид ядра в сечении  $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 1$ , рассчитанного с помощью суммы конечного числа членов  $G_m^f(c, c_1)$  при различных значениях *m*.



Рис. 4. То же, что для рис. 3,  $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 0.2$ .

Оценку следующих производных функции  $a_r$  можно получить, последовательно дифференцируя соотношение (47). Уравнения для  $\frac{\partial^2 U_r(c^2)}{\partial r^2}$ ,  $\frac{\partial^3 U_r(c^2)}{\partial r^3}$ , ... будут отличаться от (49) только свободным членом, и их асимптотика может быть найдена по тому же алгоритму. Несложные, но громоздкие выкладки дают

$$\frac{\partial^2 U_r(c^2)}{\partial r^2} = O(R^{-3/2}),$$
$$\frac{\partial^3 U_r(c^2)}{\partial r^3} = O(R^{-2}),$$
(51)

при этом

$$\frac{\partial^2 a_r}{\partial r^2} = O(R^{-5/2}), \qquad \frac{\partial^3 a_r}{\partial r^3} = O(R^{-3}). \tag{52}$$

Журнал технической физики, 2006, том 76, вып. 9

Используя теперь оценку остатка в формуле (13) с k = 3, окончательно получим

$$G_m(c, c_1) = G_m^0(c, c_1) + G_m^1(c, c_1) + \frac{1}{2}a_m^0 + O(m^{-2}).$$
(53)

На рис. 3, 4 представлены результаты расчетов ядра с помощью суммы конечного числа членов  $G_m^f(c, c_1)$ при различных значениях  $A = \sqrt{c^2 + c_1^2}$ . Видно, что при A = 1 значения ядра неплохо аппроксимируются суммой ряда уже начиная с m = 50 почти для всех скоростей за исключением окрестности точек  $c = c_1$ ,  $c = 0, c_1 = 0$ . В случае A = 0.2 сходимость к предельному значению не наблюдается даже при m = 1000. На рис. 5,6 детально прослежено поведение суммы  $G_m^f(c, c_1)$  в точках  $c = c_1, c = 0$  для A = 1, A = 0.2. При A = 1 в точке c = 0 значение суммы осциллируст и имеет амплитуду порядка 7% для m = 10000, а в точке  $c = c_1$  значение монотонно растет с ро-



**Рис. 5.** Зависимость суммы  $G_m^f(c, c_1)$  в точках  $c = c_1, c = 0$  при A = 1 от числа членов в сумме *m*.



**Рис. 6.** То же, что для рис. 5, A = 0.2.

стом *m*. Те же особенности имеет поведение  $G_m^f(c, c_1)$ при A = 0.2. На рис. 7 приведена зависимость суммы ряда (11), рассчитанного как сумма конечного числа членов и остатка,  $G(c, c_1) = G_{m-1}^f(c, c_1) + G_m(c, c_1)$ , от числа членов для A = 0.2. Видно, что так оцененная сумма ряда становится постоянной уже при  $m \approx 30$ . Следующие рисунки (рис. 8–11) иллюстрируют выход на предельные значения для A = 0.2, A = 1 более детально. На них отражено различие результатов при учете одного и двух членов асимптотики. Видно, что для A = 0.2это различие незначительно, в то время как для A = 1использование второго члена асимптотики существенно улучшает сходимость. Заметим, что использование оценки остатка при расчете суммы ряда дает три правильных знака уже при m = 15 во всех рассмотренных случаях.



**Рис. 7.** Зависимость значения ядра, рассчитанного как сумма конечного числа членов и остатка,  $G(c, c_1) = G_{m-1}^f(c, c_1) + G_m(c, c_1)$ , от числа членов в конечной сумме в точках  $c = c_1, c = 0$  при A = 0.2.



**Рис. 8.** Зависимость значения ядра  $G(c, c_1) = G_{m-1}^f(c, c_1) + G_m(c, c_1)$  от числа членов в конечной сумме в точке c = 0 при A = 0.2 с учетом одного и двух членов асимптотики остатка.



**Рис. 9.** То же, что для рис. 8,  $c = c_1$ .









На рис. 12, 13 приведены зависимости  $G(c, c_1)$ , рассчитанные по формуле  $G(c, c_1) = G_{m-1}^f(c, c_1) + G_m(c, c_1)$  при m = 30, и ядра  $G_m^f(c, c_1)$  при m = 1000. Как следует из этих рисунков, сумма  $G_{1000}^f(c, c_1)$  хорошо аппрок-



**Рис. 12.** Сравнение ядра  $G(c, c_1)$ , рассчитанного по формуле  $G(c, c_1) = G_{m-1}^f(c, c_1) + G_m(c, c_1)$  при m = 30, с конечной суммой  $G_m^f(c, c_1)$  при m = 1000 в сечении A = 1.



**Рис. 13.** То же, что для рис. 12, *A* = 0.2.

симирует предельную зависимость для A = 1 и весьма далека от предела при A = 0.2.

Таким образом, разработанный метод позволяет рассчитывать ядро интеграла столкновений с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков членов в формуле (12) и асимптотической оценки остатка ряда (53). При непосредственном суммировании для обеспечения той же точности необходимо использовать десятки тысяч членов ряда. Полученные результаты открывают перспективы использования асимптотического подхода для построения ядер интеграла столкновений по формуле (10).

Авторы благодарят Air Force Office of Scientific Research, Air Force Material Command, USAF (грант FA8655-03-D-0001) за поддержку работы.

## Список литературы

- [1] Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960. 510 с.
- [2] Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 39. P. 385– 430.
- [3] Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382– 435.
- [4] Grad H. // Comm. Pure Appl. Math. 1949. Vol. 2. P. 311.
- [5] Эндер А.Я., Эндер И.А. // Аэродинамика. Спб.: Изд-во СПбГУ, 2003. С. 179–203.
- [6] Ender A.Ya., Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. P. 2720–2730.
- [7] Эндер А.Я., Эндер И.А. Структура интеграла столкновений в уравнении Больцмана и моментный метод. СПб: Изд-во СПбГУ, 2002. 224 с.
- [8] Эндер А.Я., Эндер И.А. // Сиб. ж. инд. мат. 2003. Т. 6. № 2 (14). С. 156–164.
- [9] Hilbert D. // Math. Ann. 1912. Bd 72. S. 562-577.
- [10] Hecke E. // Math. Ann. 1917. Vol. 78. P. 398-404.
- [11] Hecke E. // Math. Zs. 1922. Bd 12. S. 274–286.
- [12] Тропп Э.А., Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 9. С. 12–23.
- [13] Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990. 528 с.
- [14] Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. Л.: Гос. изд-во физ. мат.-лит., 1963. 358 с.