

Расчет линейного ядра интеграла столкновений для потенциала твердых шаров

© Л.А. Бакалейников,¹ Е.Ю. Флегонтова,¹ А.Я. Эндер,¹ И.А. Эндер²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: bakal.ammp@mail.ioffe.ru

² Санкт-Петербургский государственный университет,
199164 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 5 марта 2008 г.)

При разложении функции распределения по сферическим гармоникам уравнение Больцмана переходит в систему интегродифференциальных уравнений с ядрами, зависящими только от модулей скоростей. Ядра выражаются через суммы, включающие матричные элементы (МЭ) интеграла столкновений. При построении ядер используются новые результаты по расчету МЭ, а для анализа точности — аналитические выражения для ядер, полученные Гильбертом и Гекке для модели твердых шаров. Вводится понятие обобщенных матричных элементов и строится их асимптотическое представление при больших значениях индексов. Строятся аналитические выражения для вклада в ядра от МЭ с большими индексами. Продемонстрирована высокая точность построения ядра с использованием МЭ.

PACS: 02.70.Ns

Введение

В основе предлагаемого метода построения ядер положены новые результаты в моментном методе решения уравнения Больцмана [1–3].

В моментном методе функция распределения (ФР) разлагается по сферическим полиномам Эрмита $H_j(c)$ (см. [4]), представляющим собой произведения полиномов Сонина на сферические гармоники. Большую трудность в реализации моментального метода, которая сдерживала его развитие, представлял расчет матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений. В [1] получены новые соотношения между МЭ и разработана рекуррентная процедура их расчета, что позволяет строить МЭ с большими значениями индексов и учитывать достаточно большое число членов в разложение ФР по базисным функциям. Это, в свою очередь, позволило с очень высокой точностью провести ряд расчетов релаксации изотропной ФР для нескольких моделей взаимодействия до 8–10 тепловых скоростей [1,2]. Таким образом, можно утверждать, что трудности построения МЭ преодолены.

Другая трудность в реализации моментного метода — сходимость разложения ФР. Хорошо известно, что это разложение сходится лишь при условии выполнения критерия Греда

$$\int_0^{\infty} f^2(c) \exp(c^2) d^3c < \infty. \quad (1)$$

Ограничения, связанные с критерием Греда, возникают при разложении ФР по полиномам Сонина, поскольку именно эти полиномы ортогональны с максвеллов-

ским весом. Избавиться от этой трудности можно, если проводить разложение только по сферическим гармоникам с коэффициентами разложения $f_j(c)$, зависящими только от модуля скорости. Уравнение Больцмана переходит в систему интегродифференциальных уравнений с ядрами, зависящими от модулей скоростей.

Для модели твердых шаров и для линейного случая явный вид этих ядер получен Гекке [5] с использованием ядра Гильберта [6]. В [1,7] показано, что ядра могут быть представлены в виде рядов по произведениям МЭ и полиномов Сонина. Преимуществом такого подхода является возможность построения ядра в самом общем нелинейном случае и для произвольного потенциала взаимодействия. Однако здесь возникает другая проблема, связанная с обрезанием ряда. Ранее эта проблема исследовалась нами применительно к ядру в модели псевдомаксвелловских молекул [8]. При некоторых значениях аргументов оказалось необходимым учитывать очень большое число членов в сумме, т.е. невозможно было пренебречь „хвостом“ ряда. Расчет „хвоста“ ряда был осуществлен с использованием асимптотики матричных элементов и полиномов Сонина при больших индексах и переходе от суммирования по индексу к интегрированию. Такой подход позволил с высокой точностью рассчитывать ядро при сравнительно небольшом количестве численно найденных МЭ.

Задача настоящей статьи — исследование сходимости и оптимизация суммирования при построении линейного ядра для модели твердых шаров. В этом случае результаты удастся контролировать путем сравнения с аналитическими результатами для ядра Гильберта–Гекке [5,6].

1. Ядро интеграла столкновений уравнения Больцмана и его разложение по сферическим гармоникам

Ядро интеграла столкновений Гильберта

В работе [6] Гильберт предложил метод решения уравнения Больцмана, представляющий собой метод последовательных приближений. В нулевом приближении решение есть максвелловское распределение

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = n(\mathbf{r})M(\mathbf{v}), \quad M(\mathbf{v}) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\alpha(\mathbf{v}-\mathbf{u})^2},$$

$$\alpha = \frac{m}{2kT}. \quad (2)$$

Здесь и далее нами используются другие, более компактные, чем в [6], обозначения. В (2) $n(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ — концентрация, температура и средняя скорость газа соответственно; m — масса частиц, k — постоянная Больцмана.

В первом приближении решение представляется в виде:

$$f_1 = nM(1 + \varphi). \quad (3)$$

Интеграл столкновений зависит только от функции φ . Обозначив его J , Гильберт в первом приближении получает уравнение:

$$J(\varphi) = \frac{1}{2} [f_0], \quad (4)$$

где $[f_0]$ с точностью до константы соответствует левой (дифференциальной) части уравнения Больцмана и при построении первого приближения представляет собой известную функцию. Дальнейшие исследования в [6] проводятся для модели твердых шаров. Показано, что интеграл столкновений J состоит из четырех частей. Для дальнейшего нам удобно представить его в виде:

$$J = J^{(+,1)} + J^{(+,2)} - J^{(-,1)} - J^{(-,2)}. \quad (5)$$

Здесь индексы „+“, „-“ соответствуют приходному и уходному членам, „1“ — интегралу столкновений первого рода, когда рассматривается рассеяние φ на максвелловском распределении и „2“ — интегралу столкновений второго рода, когда рассматривается рассеяние максвеллиана на φ . В [6] показано, что $J^{(-,1)}$ является произведением $\varphi(\mathbf{v})$ на функцию $k_H(v)$, которая зависит от модуля скорости. Решающее значение для основ кинетической теории газов имеет тот факт, что выражение J может быть представлено в виде

$$J = -k_H(v)\varphi(\mathbf{v}) + \int A(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)\varphi(\mathbf{v}_1)d\mathbf{v}_1 \quad (6)$$

и уравнение (4) представляет собой линейное интегральное уравнение второго рода.

В [6] для модели твердых шаров получены выражения для k_H и ядра A интегрального уравнения. Показано, что две части ядра $A^{(+,1)}$ и $A^{(+,2)}$ равны между собой; обозначим их A^+ , тогда

$$A = 2A^+ - A^{(-,2)}. \quad (7)$$

Если отклонение от равновесия невелико, то уравнение Больцмана можно линеаризовать, и ядро интеграла столкновений этого уравнения совпадает с ядром Гильберта. В [6] показано также, что ядро A является ортогонально инвариантным. Это позволило Гекке [5] построить разложение этого ядра по сферическим гармоникам.

Ядро линейного интеграла столкновений

Пусть имеется небольшая примесь с функцией распределения f на фоне основного газа, имеющего максвелловское распределение. В этом случае в интеграле столкновений присутствуют только члены первого рода. Функция $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ может быть сильно неравновесной. Будем использовать безразмерные переменные. В качестве единицы скорости выберем среднюю тепловую скорость $v_T = \sqrt{\alpha}$, а единицу времени τ выразим через среднюю частоту столкновений

$$\frac{1}{\tau} = \nu = n\Sigma v_T = \frac{n\Sigma}{\sqrt{\alpha}}, \quad (8)$$

где n и T — концентрация и температура фонового газа, а Σ — полное сечение рассеяния. Безразмерную скорость обозначим \mathbf{c} , а для безразмерного времени сохраним обозначение t .

Уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{D_B f(\mathbf{c})}{D_B t} = -k(c)f(\mathbf{c}) + \int L^+(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1)f(\mathbf{c}_1)d\mathbf{c}_1. \quad (9)$$

Здесь для краткости опущены аргументы \mathbf{r} и t у функции f и введено обозначение $D_B f/D_B t$ для левой части уравнения Больцмана.

В случае равных масс частиц примеси и фонового газа, сравнив (3), (4), (6), (7) и (9), имеем

$$k_H(c) = M(c)k(c), \quad A^{(+)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1) = M(c_1)L^{(+)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1). \quad (10)$$

Для модели твердых шаров из результатов [6] получаем

$$k(c) = \frac{e^{-c^2}}{\pi^{1/2}} + (1/2c + c)\Phi(c), \quad (11)$$

где $\Phi(c)$ — интеграл вероятности.

Разложение по сферическим гармоникам

При переходе к моментальному представлению уравнения Больцмана при разложении по сферическим полиномам Эрмита можно остановиться на этапе разложения по сферическим гармоникам, не проводя разложения по

полиномам Сонина. При таком разложении не возникает ограничений, связанных с критерием Грэда.

Функцию распределения представим в виде

$$f(\mathbf{c}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 f_{l,m}^i(c) Y_{l,m}^i(\Theta, \varphi). \quad (12)$$

Здесь c, Θ, φ — сферические координаты, вектора \mathbf{c} , а

$$\begin{aligned} Y_{l,m}^0(\Theta, \varphi) &= P_l^m(\cos \Theta) \cos m\varphi, \\ Y_{l,m}^1(\Theta, \varphi) &= P_l^m(\cos \Theta) \sin m\varphi. \end{aligned} \quad (13)$$

В [1,7] было показано, что в самом общем, нелинейном, случае интеграл столкновений можно представить в виде

$$I(\mathbf{c}) = \sum_{l,m,i} Y_{l,m}^i(\Theta, \varphi) I_{l,m}^i(c) \quad (14)$$

и

$$\begin{aligned} I_{l,m}^i(c) &= \sum_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}(c, c_1, c_2) \\ &\times f_{l_1, m_1}^{i_1}(c_1) f_{l_2, m_2}^{i_2}(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2. \end{aligned} \quad (15)$$

Нелинейные ядра $G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}$ могут отличаться от нуля, только если $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, $l + l_1 + l_2$ — четное число (обобщенная теорема Гекке), $m = |m_1 \pm m_2|$ и $i + i_1 + i_2$ — четное число. Показано также, что

$$\begin{aligned} G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}(c, c_1, c_2) &= \check{Z}_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i}(l, l_1, l_2) \\ &\times G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2), \end{aligned} \quad (16)$$

где $\check{Z}_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i}(l, l_1, l_2)$ — числовые коэффициенты, которые легко выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана (см. [1]).

Каждое ядро $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ представляется в виде

$$G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) = G_{l_1, l_2}^{(+l)}(c, c_1, c_2) - G_{l_1, l_2}^{(-l)}(c, c_1, c_2). \quad (17)$$

Если в (15) положить функцию, на которой происходит рассеяние, равной максвелловскому распределению, то перейдем к линейному ядру. В этом случае имеем $l_2 = m_2 = i_2 = 0$, обобщенная теорема Гекке переходит в обычную ($l_1 = l$, $m_1 = m$, $i_1 = i$), числовые коэффициенты $\check{Z}_{m, i, 0, 0}^{m, i}(l, l, 0) = 1$ и из (15), (16) получаем

$$I_{l,m}^i(c) = \int_0^{\infty} L_l(c, c_1) f_{l,m}^i(c_1) c_1^2 dc_1, \quad (18)$$

где

$$L_l(c, c_1) = \int_0^{\infty} G_{l,0}^l(c, c_1, c_2) M(c_2) c_2^2 dc_2. \quad (19)$$

Используя (9) и (14), можно (18) записать в виде

$$I_{l,m}^i(c) = -k(c) f_{l,m}^i(c) + \int_0^{\infty} L_l^{(+)}(c, c_1) f_{l,m}^i(c_1) c_1^2 dc_1. \quad (20)$$

Гекке построил разложение по сферическим гармоникам ядра Гильберта A для модели твердых шаров и получил формулы для $A_l(c, c_1)$. В соответствии с (7), (10) построенные им ядра выражаются через линейные ядра первого и второго рода

$$A_l(c, c_1) = M(c_1) (2L_l^+(c, c_1) - L_l^{(-,2)}(c, c_1)). \quad (21)$$

Используя результаты [5], легко получить формулы для $L_l^+(c, c_1)$ и $L_l^{(-,2)}(c, c_1)$. В нашей нормировке они имеют вид

$$L_l^+(c, c_1) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} e^{-c^2} 4\pi,$$

$$\begin{aligned} &\left[\frac{1}{2l+1} \frac{mi^{2l+1}}{(cc_1)^{l+1}} \right. \\ &\left. + \frac{1}{cc_1} \int_{|u| < mi} ue^{u^2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi(u) P_l(u/c) P_l(u/c_1) du \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_l^{(-,2)} &= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} e^{-c^2} 4\pi \left[\frac{mi^{2l-1}}{(2l+1)(2l-1)(cc_1)^{l-1}} \right. \\ &\left. - \frac{mi^{2l+3}}{(2l+1)(2l+3)(cc_1)^{l+1}} \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь

$$mi = \min(c, c_1). \quad (23)$$

В частном случае $l = 0$ ядро $L_l^+(c, c_1)$ может быть преобразовано и представлено в виде

$$L_0^+(c, c_1) = 2e^{(-c^2)} \frac{1}{cc_1} e^{mi^2} \Phi(mi). \quad (24)$$

Представление ядер через матричные элементы интеграла столкновений

Нелинейные матричные элементы от интеграла столкновений определяются следующим образом:

$$K_{j_1, j_2}^j = \int H_j \hat{I}(M H_{j_1}, M H_{j_2}) d^3c/g_j, \quad (25)$$

где \hat{I} — больцмановский столкновительный оператор, H_j — сферические полиномы Эрмита

$$H_j = H_{r,l,m}^i(\mathbf{c}) = S_{l+1/2}^r(c^2) c^l Y_{lm}^i(\theta, \varphi), \quad (26)$$

$S_{l+1/2}^r(x)$ — полиномы Сонина (Лагерра), индекс j соответствует четырем индексам i, r, l, m и g_j — квадрат нормы полинома Эрмита.

Линейные МЭ первого и второго рода выражаются через нелинейные МЭ

$$\Lambda_{r,r_1,l}^{(1)} = K_{r_1,l,0,0}^{r,l}, \quad \Lambda_{r,r_2,l}^{(2)} = K_{0,0,r_2,l}^{r,l}. \quad (27)$$

В [1,7] показано, что ядра $G_{l_1,l_2}^l(c, c_1, c_2)$ в (16) выражаются через МЭ следующим образом:

$$G_{l_1,l_2}^l(c, c_1, c_2) = M(c) \sum_r \sum_{r_1} \sum_{r_2} \frac{1}{\sigma_{r_1 l_1} \sigma_{r_2 l_2}} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \times K_{r_1 l_1, r_2 l_2}^{r l} c_1^{l_1} S_{l_1+1/2}^{r_1}(c_1^2) c_2^{l_2} S_{l_2+1/2}^{r_2}(c_2^2). \quad (28)$$

Здесь

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

Формулы (28) позволяют рассчитать ядра $G_{l_1,l_2}^l(c, c_1, c_2)$ для произвольного закона взаимодействия в линейном ($l_2 = 0, l_1 = l$ или $l_1 = 0, l_2 = l$) и нелинейном случаях, конечно, если известны МЭ с большими индексами. Отметим, что рекуррентные соотношения, с помощью которых строятся МЭ, справедливы как для МЭ полного интеграла столкновений, так и по отдельности для приходного и уходного членов.

Для псевдостепенных потенциалов в случае равных масс имеем

$$\Lambda_{r,r_1,l}^{(+,1)} = \Lambda_{r,r_2,l}^{(+,2)} = \Lambda_{r,r_1,l}^+, \quad (29)$$

и линейное приходное ядро представляется в виде

$$L_l^+(c, c_1) = M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{r_1=0}^{\infty} \frac{1}{\sigma_{r_1 l}} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \times \Lambda_{r,r_1,l}^+ c_1^{l_1} S_{l_1+1/2}^{r_1}(c_1^2). \quad (30)$$

В дальнейшем будем рассматривать линейное приходное ядро для частного случая $l = 0$. Будем проводить сравнение расчетов $L_0^+(c, c_1)$ по (30) и (24). Иногда вместо $L_0^+(c, c_1)$ будем строить $L_0^+(c, c_1)/M(c)$, которое, как и ядро Гильберта $A_0^+(c, c_1)$, обладает симметрией относительно перестановки c и c_1 .

2. Обобщенные матричные элементы

В случае модели псевдомаксвелловских молекул линейные МЭ $\Lambda_{r,r_1,l}^+$ отличны от нуля только на главной диагонали $r_1 = r$, и их асимптотика есть $1/r$ и вычисление ядра сводится к однократному суммированию (30).

В случае твердых шаров линейные МЭ, не лежащие на главной диагонали, отличны от нуля. Обозначим расстояние от главной диагонали через Δ

$$\Delta = r_1 - r. \quad (31)$$

В [9] исследовалась асимптотика МЭ для любых псевдостепенных потенциалов. В частности, для модели

твердых шаров асимптотика МЭ при фиксированном значении Δ имеет вид

$$\Lambda_{r,r_1}^+ = \Lambda_{r,r_1,0}^+ \sim 1/\sqrt{r}. \quad (32)$$

Одним из возможных способов вычисления двойной суммы в (30) является вычисление сумм по различным диагоналям с последующим суммированием по Δ . При этом в силу того, что МЭ достаточно быстро убывает при удалении от главной диагонали, можно было предположить, что основной вклад в сумму дают члены с небольшими значениями Δ , и остальными членами можно пренебречь. Знание асимптотики по r при фиксированном Δ (32) позволяет использовать развитый в [8] подход для оценки „хвостов“ рядов по r .

Как показало сопоставление полученных результатов с расчетами ядра по (24), такой подход не обеспечивал необходимой точности. Во-первых, из-за более слабого асимптотического убывания МЭ, чем в случае псевдомаксвелловских молекул, сходимость при суммировании по r оказалась весьма медленной. Во-вторых, не удается ограничиться суммированием по небольшому числу Δ . В результате исчезают преимущества предварительного суммирования по r . Необходимость учета больших Δ означает, что при больших r МЭ убывают с ростом Δ совсем не так быстро, как при малых. Следовательно, целесообразно поменять порядок суммирования, выполняя первым суммирование по Δ . При этом можно ввести обобщенный матричный элемент (ОМЭ)

$$\Lambda_r^G(c_1) = \left(\sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1}^+ \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1}} \right) / \left(\frac{S_{1/2}^r(c_1^2)}{\sigma_r} \right). \quad (33)$$

Здесь суммирование по r_1 распространяется по всем допустимым значениям и соответствует суммированию по Δ от $-r$ до ∞ . Тогда ядро будет иметь вид, формально совпадающий с формулой для ядра в случае максвелловских молекул

$$L^+(c, c_1) = M(c) \sum_r S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_r^G(c_1) \frac{S_{1/2}^r(c_1^2)}{\sigma_r}. \quad (34)$$

В (34) положено $l = 0$ и опущен индекс 0 у ядра и у $\sigma_{r,0}$. Каждый ОМЭ, будучи зависимым от скорости c_1 , обращается в бесконечность в нулях полинома Сонина $S_{1/2}^r(c_1^2)$. Однако, как видно из (34), эта особенность компенсируется при вычислении ядра.

Нетрудно показать, что при $c_1 = 0$ отношение $S_{1/2}^r(c_1^2)/\sigma_r$ не зависит от r и, следовательно, $\Lambda_r^G(0) = \sum_{r_1} \Lambda_{r,r_1}^+$. Было замечено, что диагональные приходные МЭ положительны, а недиагональные — отрицательны. Поэтому $\Lambda_r^G(0)$ представим в виде суммы двух членов: $A = \Lambda_{r,r}^+$ и $B = \sum_{r_1 \neq r} \Lambda_{r,r_1}^+$. Были проведены расчеты, результаты которых для нескольких значений r представлены в таблице.

Из таблицы видно, что сумма недиагональных членов $|B|$ по абсолютной величине очень близка и немного меньше диагонального A . По мере увеличения r

Положительная (A) и отрицательная (B) составляющие $\Lambda_r^G(0)$ и отношение $C = \Lambda_r^G(0)/\Lambda_{r,r}^+ = (A+B)/A$

| r | A | B | C |
|-----|---------|----------|--------|
| 10 | 0.39060 | -0.33687 | 0.1376 |
| 100 | 0.12693 | -0.12131 | 0.0442 |
| 150 | 0.10374 | -0.09995 | 0.0361 |
| 200 | 0.08989 | -0.08708 | 0.0313 |
| 250 | 0.08043 | -0.07817 | 0.0280 |
| 300 | 0.07343 | -0.07156 | 0.0256 |
| 350 | 0.06800 | -0.06639 | 0.0237 |
| 390 | 0.06442 | -0.06298 | 0.0224 |

относительный вклад недиагональных членов растет. С ростом r для корректного расчета C необходимо учитывать все большее число членов в сумме по r_1 .

В результате расчетов выяснилось, что произведение $\Lambda_r^G(0)r$ стремится к константе с ростом r , т.е. $\Lambda_r^G(0)$ убывает гораздо быстрее, чем МЭ для твердых шаров при $\Delta = \text{const}$. Этот вывод подтверждается асимптотическим анализом поведения ОМЭ, проводимым ниже для произвольных c_1 . Для проведения этого анализа нам потребуется асимптотика МЭ и полиномов Сонина для расширяющейся области Δ .

Асимптотика матричных элементов

В работе [9] с использованием [2] была получена формула для линейных МЭ при $l = 0$. Из этой формулы для модели твердых шаров ($\mu = 1/2$) получим выражение для безразмерных линейных приходных МЭ

$$\Lambda_{r,r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \times \frac{\Gamma(r + \Delta/2 + 3/4)\Gamma(r + \Delta/2 + 5/4)}{\Gamma(r + 3/2)\Gamma(r + \Delta + 1)}. \quad (35)$$

В [9] была получена асимптотика (35) для $r \rightarrow \infty$ только при $\Delta = \text{const}$. Для вычисления ОМЭ требуется асимптотика МЭ при больших значениях r , вообще говоря, при произвольных соотношениях между Δ и r . Поэтому для получения асимптотического разложения $\Lambda_{r,r+\Delta}^+$ необходимо заново рассмотреть отношение Γ -функций. Воспользуемся формулой Стирлинга

$$\Gamma(z) = \sqrt{\frac{2\pi}{z}} \exp(-z) z^z H(z),$$

$$H(z) = 1 + \frac{1}{12z} + O(z^{-2}).$$

Отношение Γ -функций тогда запишется

$$\frac{\Gamma(z + \alpha)}{\Gamma(z + \beta)} = z^{\alpha-\beta} \frac{H(z + \alpha)}{H(z + \beta)} \exp(F(z, \alpha, \beta)), \quad (36)$$

где

$$F(z, \alpha, \beta) = -(\alpha - \beta) + (z - 1/2) [\ln(1 + \alpha/z) - \ln(1 + \beta/z)] + [\alpha \ln(1 + \alpha/z) - \beta \ln(1 + \beta/z)]. \quad (37)$$

Как видно из (35), параметры z, α и β при расчете асимптотики МЭ принимают значения $z = r + 1$, $\alpha = \Delta/2 - 1/4$, $\beta = 1/2$ и $\alpha = \Delta/2 + 1/4$, $\beta = \Delta$. Ниже, в Приложении, показано, что вклад в ОМЭ от членов суммы (33) с $|\Delta| > r^{1/2+\epsilon}$ (где ϵ — произвольное малое положительное число) экспоненциально убывает с ростом r . Поэтому при дальнейшем рассмотрении асимптотики линейных МЭ ограничимся интервалом $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\epsilon})$.

Поскольку отношения $\alpha/z, \beta/z$ малы, логарифмы в (37) могут быть разложены в ряд по степеням $\alpha/z, \beta/z$. Для функции $F(z, \alpha, \beta)$ это дает

$$F(z, \alpha, \beta) = -(\alpha - \beta) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z - 1/2}{kz^k} (\alpha^k - \beta^k) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{1}{kz^k} (\alpha^{k+1} - \beta^{k+1}). \quad (38)$$

Выделим в $F(z, \alpha, \beta)$ часть, убывающую с ростом r , т.е. представим $F(z, \alpha, \beta)$ в виде

$$F(z, \alpha, \beta) = F_0(z, \alpha, \beta) + F_1(z, \alpha, \beta),$$

где $F_1(z, \alpha, \beta)/z = o(1)$ при $r \rightarrow \infty$.

В дальнейшем будем считать, что $\epsilon \in (0, 1/6)$. Проанализировав (38) при $\Delta = O(r^{1/2+\epsilon})$, легко найти

$$F_0(z, \alpha, \beta) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2z},$$

$$F_1(z, \alpha, \beta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{1}{z^{k+1}} \frac{(\alpha^{k+2} - \beta^{k+2})}{(k+1)(k+2)} + \frac{1}{2kz^k} (\alpha^k - \beta^k) \right]. \quad (39)$$

Разложив $\exp(F_1(z, \alpha, \beta))$ в ряд по F_1 , а отношение $H(z + \alpha)/H(z + \beta)$ — в ряд по $\alpha/z, \beta/z$ и подставив полученные разложения в (36), а затем в (35), получим

$$\Lambda_{r,r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \frac{1}{\sqrt{r+1}} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{4(r+1)} - \frac{1}{16(r+1)}\right) \left(1 + \frac{\Delta^3}{8(r+1)^2} + \frac{B(\Delta, r)}{(r+1)^4} (1 + o(1))\right),$$

$$B(\Delta, r) = \frac{\Delta^6}{128} - \frac{7\Delta^4(r+1)}{96} - \frac{\Delta^2(r+1)^2}{8} + \frac{(r+1)^3}{4}. \quad (40)$$

Формула (40) представляет собой искомую асимптотику матричного элемента $\Lambda_{r,r+\Delta}^+$ на интервале $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\epsilon})$ при $r \rightarrow \infty$.

Отметим, что использование описанной выше процедуры для $\Delta = \text{const}$ дает

$$F_0(z, \alpha, \beta) = 0,$$

$$F_1(z, \alpha, \beta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{1}{kz^k} \left[\frac{(\alpha^{k+1} - \beta^{k+1})}{k+1} - \frac{1}{2}(\alpha^k - \beta^k) \right],$$

а разложение в ряд $\exp(F_1(z, \alpha, \beta))$ приводит к той же асимптотике, что и в [9],

$$\Lambda_{r,r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \frac{1}{\sqrt{r+1}} \times \left(1 - \frac{\Delta^2 - 3/4}{4(r+1)} + O(\Delta^4/r^2) \right). \quad (41)$$

Тот же результат можно получить непосредственно разложением в ряд экспоненты в выражении (40).

Асимптотика обобщенных матричных элементов

При вычислении ОМЭ по (33) при больших индексах r не только МЭ $\Lambda_{r,r+\Delta}^+$, но и величина $S_{1/2}^{r+\Delta}(x)/\sigma_{r+\Delta}$ должны быть представлены в виде асимптотического разложения на интервале $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\varepsilon})$. Асимптотические разложения для полиномов Сонина и величин $S_{1/2}^r(x)/\sigma_r$ при больших r и фиксированных x были получены в [8]:

$$\frac{S_{1/2}^r(x)}{\sigma_r} = 2\pi \exp(x/2) \left(\frac{1}{\sqrt{(r+3/4)x}} \sin(2\sqrt{(r+3/4)x}) - \frac{x}{12(r+3/4)} \cos(2\sqrt{(r+3/4)x}) \right) + O(r^{-3/2}). \quad (42)$$

Асимптотику $S_{1/2}^{r+\Delta}(x)/\sigma_{r+\Delta}$ в той же области легко получить, разложив амплитуды и аргументы тригонометрических функций в (42) по малому параметру $\Delta/(r+3/4)$ и пользуясь формулами для синуса и косинуса от суммы аргументов:

$$\begin{aligned} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x)}{\sigma_{r+\Delta}} &= 2\pi \exp\left(\frac{x}{2}\right) \frac{\sin(2\sqrt{Nx})}{\sqrt{Nx}} \\ &\times \left\{ \left[1 - \frac{\Delta}{2N} - \text{ctg}(2\sqrt{Nx}) \frac{\Delta^2\sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] \cos\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \right. \\ &+ \left[\frac{\Delta^2\sqrt{x}}{4N^{3/2}} + \text{ctg}(2\sqrt{Nx}) \left(1 - \frac{\Delta}{2N}\right) \right] \sin\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \\ &- \frac{x^{3/2}}{12\sqrt{N}} \left[\text{ctg}(2\sqrt{Nx}) \cos\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) - \sin\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \right] \\ &\left. + o(r^{-1/2}) \right\}, \quad (43) \end{aligned}$$

где $N = r + 3/4$.

Рассмотрим отдельный член суммы в выражении (33) для обобщенного матричного элемента. Он имеет вид $(S_{1/2}^{r+\Delta}(x)\Lambda_{r,r+\Delta})/\sigma_{r+\Delta}$, и асимптотическое выражение для него может быть получено перемножением (40) и (43). Однако очевидно, что при суммировании по симметричному интервалу изменения Δ слагаемые, нечетные по Δ , сокращаются и не дают вклада в сумму. Поэтому их можно не рассматривать уже в исходном выражении.

Введем значение $s_{r,\Delta}(x)$, четное по Δ

$$s_{r,\Delta}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x)\Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}} + \frac{S_{1/2}^{r-\Delta}(x)\Lambda_{r,r-\Delta}}{\sigma_{r-\Delta}} \right) \frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)}. \quad (44)$$

Подставив в (44) асимптотические разложения (40) и (43), найдем

$$\begin{aligned} s_{r,\Delta}(x) &= -\frac{1}{\pi\sqrt{N}} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{4N}\right) \left\{ \cos\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \right. \\ &+ A(\sqrt{x}, N) \left[\sin\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \left(\frac{\Delta^3}{8N^2} - \frac{\Delta}{2N}\right) \right. \\ &\left. \left. - \cos\left(\frac{\Delta\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \frac{\Delta^2\sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] \right\} (1 + O(r^{-1})), \quad (45) \end{aligned}$$

где

$$A(\sqrt{x}, N) = \frac{\cos(2\sqrt{Nx})}{\sin(2\sqrt{Nx}) - x^{3/2} \cos(2\sqrt{Nx})/12\sqrt{N}}.$$

Можно показать (см. Приложение), что вклад в сумму (33) при $|\Delta| > M_2$, где $M_2 = N^{1/2+\varepsilon}$, является экспоненциально малым. Вычисление вклада от оставшегося интервала можно было бы провести с помощью формулы Эйлера–Маклорена [10], сводящей вычисление суммы к вычислению интеграла. Однако подынтегральная функция (45) имеет особенность при $\Delta = 1/2$, поэтому замена суммирования интегрированием на всем интервале $[-M_2, M_2]$ оказывается невозможной. В связи с этим разобьем интервал суммирования по Δ в (33) на области $[-r, -M_2 - 1]$, $[-M_2, -M_1 - 1]$, $[-M_1, M_1]$, $[M_1 + 1, M_2]$, $[M_2 + 1, \infty]$. Здесь $M_1 = N^{1/2-\varepsilon}$ выбирается так, чтобы аргументы тригонометрических функций в (45) имели порядок $o(1)$ и $s_{r,\Delta}(x)$ раскладывалась в ряд по степеням Δ/\sqrt{N} . При этом конечные суммы от каждого члена ряда могут быть аналитически вычислены. Вклады от интервалов $[-r, -M_2 - 1]$, $[M_2 + 1, \infty]$ пренебрежимо малы. Вклад в ОМЭ от интервалов $[-M_2, -M_1 - 1]$ и $[M_1 + 1, M_2]$, который оказывается единственно значимым, оценим с помощью формулы Эйлера–Маклорена;

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta=M_1+1}^{M_2} z_{\Delta} &= \frac{1}{2} (h(M_1 + 1) - h(M_2)) + \int_{M_1+1}^{M_2} h(t) dt \\ &+ \sum_{s=1}^{k-1} (-1)^s \omega_{s+1}(0) (h^{(s)}(M_1 + 1) - h^{(s)}(M_2)) \\ &+ (-1)^{k+1} \int_{M_1+1}^{M_2} \omega_k(t) h^{(k)}(t) dt. \quad (46) \end{aligned}$$

Здесь $h(t)$ — гладкая функция, такая что $h(\Delta) = z_\Delta$ при целых значениях Δ

$$\omega_1(t) = t - |t| - \frac{1}{2}, \quad \omega_s(t) = \int \omega_{s-1}(t) dt, \quad \int_0^1 \omega_s(t) dt = 0.$$

В силу четности по Δ функции $s_{r,\Delta}(x)$, вклады в ОМЭ от интервалов $[-M_2, -M_1 - 1]$ и $[M_1 + 1, M_2]$ равны и могут быть вычислены с помощью (46). Можно показать, что все члены, кроме первых двух в (46), для рассматриваемого случая оказываются величинами порядка $o(r^{-3/2})$, и вклад в ОМЭ от интервала $[M_1 + 1, M_2]$ есть

$$\sum_{\Delta=M_1+1}^{M_2} s_{r,\Delta} = \frac{1}{2} s_{r,M_1+1} - \frac{1}{2} s_{r,M_2} + \int_{M_1+1}^{M_2} h(t) dt + o(1/r^{3/2}). \quad (47)$$

Для вычисления интеграла, входящего в (47), перейдем к новой переменной $u = t/\sqrt{N}$. При этом интеграл от первого слагаемого (главного члена) в (45) приобретает вид

$$I_1 = -\frac{1}{\pi N} \int_{(M_1+1)/\sqrt{N}}^{M_2/\sqrt{N}} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \cos(u\sqrt{x}) du = -\frac{1}{\pi N} J_1, \quad (48)$$

а интеграл от второго слагаемого (поправки первого порядка) записываются как

$$I_2 = -\frac{A(\sqrt{x}, N)}{\pi N} \int_{(M_1+1)/\sqrt{N}}^{M_2/\sqrt{N}} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \times \left[\sin\left(\frac{t\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \left(\frac{t^3}{8N^2} - \frac{t}{2N}\right) - \cos\left(\frac{t\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \frac{t^2\sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] du. \quad (49)$$

Заметим, что верхний предел $u_2 = M_2/\sqrt{N}$ интегралов (48), (49) есть величина порядка $O(r^\varepsilon)$ и, следовательно, стремится к бесконечности при $r \rightarrow \infty$, в то время как нижний предел $u_1 = (M_1 + 1)/\sqrt{N} = O(r^{-\varepsilon}) \rightarrow 0$.

Можно показать, что вклад в асимптотику ОМЭ области $-M_1 \leq \Delta \leq M_1$ компенсируется значением интегралов (48), (49) на нижнем пределе и внеинтегральным членом $s_{r,M_1+1}/2$ в (47). Значения интегралов (48), (49), как легко показать, отличаются от их значений при интегрировании до бесконечности на величину, экспоненциально убывающую с ростом r . Внеинтегральный член $s_{r,M_2+2}/2$ в (47) также экспоненциально убывает с ростом r . Таким образом, выбор величины ε не влияет

на результат. Более подробно вычисление вклада в ОМЭ области $[-M_2, M_2]$ рассмотрено в Приложении.

Для завершения вычисления ОМЭ необходимо оценить еще суммы

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M_2+1}^{\infty} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}},$$

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=-r}^{-M_2-1} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}.$$

Можно показать, что и эти суммы также экспоненциально убывают с ростом индекса r (см. Приложение). Окончательно асимптотика ОМЭ имеет вид

$$\Lambda_r^G(c_1) = \frac{1}{(r+3/4)} F(c_1) + A(c_1, r+3/4) \times \frac{1}{2(r+3/4)^{3/2}} \Phi(c_1) + o(r^{-3/2}), \quad (50)$$

где

$$F(c_1) = \left(c_1 \Phi(c_1) + \frac{\exp(-c_1^2)}{\sqrt{\pi}} \right). \quad (51)$$

Еще раз отметим, что вид асимптотики ОМЭ определяется найденным нами в области $[M_1, M_2]$ асимптотическим разложением МЭ (40). Именно интегрирование асимптотики (45), полученной на основе этого разложения, приводит к формуле (50). При этом главный член в (50) определяется интегралом (48), а следующий член — интегралом (49).

Из (50) видно, что в отличие от МЭ, убывающего как $1/\sqrt{r}$ при $r \rightarrow \infty$ и фиксированном значении Δ , обобщенный матричный элемент убывает как $1/r$ при любом c_1 . Такое поведение совпадает с закономерностью, найденной выше при численном исследовании ОМЭ для $c_1 = 0$ (см. таблицу).

Для оценки области применимости (50) нами было сделано сравнение значений $\Lambda_r^G(c_1)$, рассчитанных численно по формуле (33), с полученным асимптотическим разложением. Результаты сравнения численно найденных $\Lambda_r^G(c_1)$ с их асимптотикой в нулевом и первом приближении приведены на рис. 1. Оказалось, что асимптотика в первом приближении

$$\Lambda_r^{(1)G}(c_1) = A(c_1, r+3/4) \frac{1}{2(r+3/4)^{3/2}} \Phi(c_1)$$

в точности совпадает с численно найденными ОМЭ везде, за исключением окрестностей нулей знаменателя в выражении для $A(c_1, N)$, и неотличима от них на графике.

Асимптотика в нулевом приближении

$$\Lambda_r^{(0)G}(c_1) = \frac{1}{(r+3/4)} F_{c_1}$$

точно передает общее поведение $\Lambda_r^G(c_1)$.

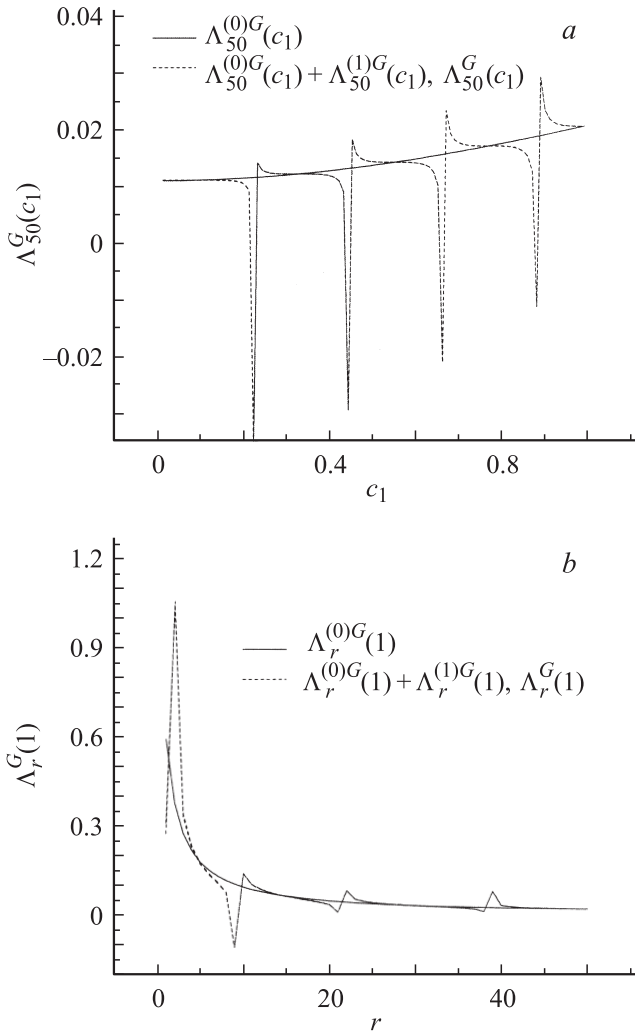


Рис. 1. Сравнение нулевого и первого порядков асимптотики ОМЭ с численным расчетом: в зависимости от c_1 при $r = 50$ (a) и в зависимости от r при $c_1 = 1$ (b).

Таким образом, проведенное исследование асимптотики ОМЭ привело к удивительному результату, во-первых, зависимость от r при любом c_1 совпадает с зависимостью от r МЭ для максвелловских молекул, и во-вторых, в качестве зависящего от c_1 коэффициента выделяется довольно простая функция (51), отличающаяся от $k(c_1)$ (11) только слагаемым $\Phi(c_1)/2c_1$.

3. Расчет ядра с использованием ОМЭ

Применим найденную асимптотику ОМЭ к расчету ядра интеграла столкновений. Первые члены конечной суммы (34) суммируются непосредственно, а остаток суммы при больших значениях индексов r заменяется асимптотической оценкой. Поскольку асимптотическое поведение ОМЭ совпадает с асимптотикой МЭ в случае псевдомакселловских молекул, многие выкладки совпадают с выкладками из [8]. Воспользовавшись формулой

Эйлера–Маклорена (46), получим

$$(M(c))^{-1}L^+(c, c_1) = B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1) + o(B_m^1(c, c_1)). \quad (52)$$

Здесь

$$B_m^f(c, c_1) = \sum_{r=0}^{m-1} S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r,$$

$$B_m^0(c, c_1) = \int_m^\infty a^0(c, c_1; r) dr,$$

$$B_m^1(c, c_1) = \int_m^\infty a^1(c, c_1; r) dr + \frac{1}{2} a^0(c, c_1; m),$$

$a^0(c, c_1; r)$, $a^1(c, c_1; r)$ — соответственно нулевой и первый члены асимптотического разложения $S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r$ при больших индексах r , полученные с помощью (42), (50):

$$S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r = a^2(c, c_1; r) + a^1(c, c_1; r) + o(a^1(c, c_1; r)),$$

$$a^0(c, c_1; r) = \frac{1}{(r + 3/4)^{3/2}} [d^-(r) - d^+(r)] F(c_1), \quad (53)$$

$$a^1(c, c_1; r) = \frac{E(c, c_1)}{(r + 3/4)^2} \left\{ [h^-(r) - h^+(r)] F(c_1) + [g^-(r) + g^+(r)] \frac{\Phi(c_1)}{2} \right\}, \quad (54)$$

где

$$E(c, c_1) = \sqrt{\pi} \frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{c_1 c},$$

$$d^\pm(r) = \cos(2(c \pm c_1)\sqrt{r + 3/4}),$$

$$g^\pm(r) = \sin(2(c \pm c_1)\sqrt{r + 3/4}),$$

$$h^\pm(r) = \frac{c^3 \pm c_1^3}{12} g^\pm(r).$$

Можно показать, что величины $a_{c,c_1}^0(r)$, $a_{c,c_1}^1(r)$ имеют порядки соответственно $O(1/r^{3/2})$, $O(1/r^2)$ при $c \neq 0$, $c_1 \neq 0$ и $O(1/r)$, $O(1/r^{3/2})$ при $c = 0$ или $c_1 = 0$.

Проинтегрировав (53), (54) и введя обозначения

$$D^\pm(m) = \frac{2 \cos(2(c \pm c_1)\sqrt{m + 3/4})}{\sqrt{m + 3/4}} + 4(c \pm c_1) \text{si}(2(c \pm c_1)\sqrt{m + 3/4}),$$

$$G^\pm(m) = \frac{\sin(2(c \pm c_1)\sqrt{m + 3/4})}{m + 3/4} + \frac{2(c \pm c_1) \cos(2(c \pm c_1)\sqrt{m + 3/4})}{\sqrt{m + 3/4}} + 4(c \pm c_1)^2 \text{si}(2(c \pm c_1)\sqrt{m + 3/4}),$$

$$H^\pm(m) = \frac{c^3 \pm c_1^3}{12} G^\pm(m),$$

где si — интегральный синус [11], выпишем окончательный результат для остатка суммы ряда (34):

$$\begin{aligned} B_m^0(c, c_1) &= E(c, c_1) [D^-(m) - D^+(m)] F(c_1), \\ B_m^1(c, c_1) &= E(c, c_1) \left\{ [H^-(m) - H^+(m)] F(c_1) \right. \\ &\quad \left. + [G^-(m) + G^+(m)] \frac{\Phi(c_1)}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (55)$$

Отметим, что определение ядра для псевдомаквелловских молекул, рассмотренное в [8], отличается от определения (30) коэффициентом 4π в знаменателе. Учитывая это и сравнив полученный результат с [8], можно заметить, что главный (нулевой) член в (55) отличается от главного члена из [8] только множителем

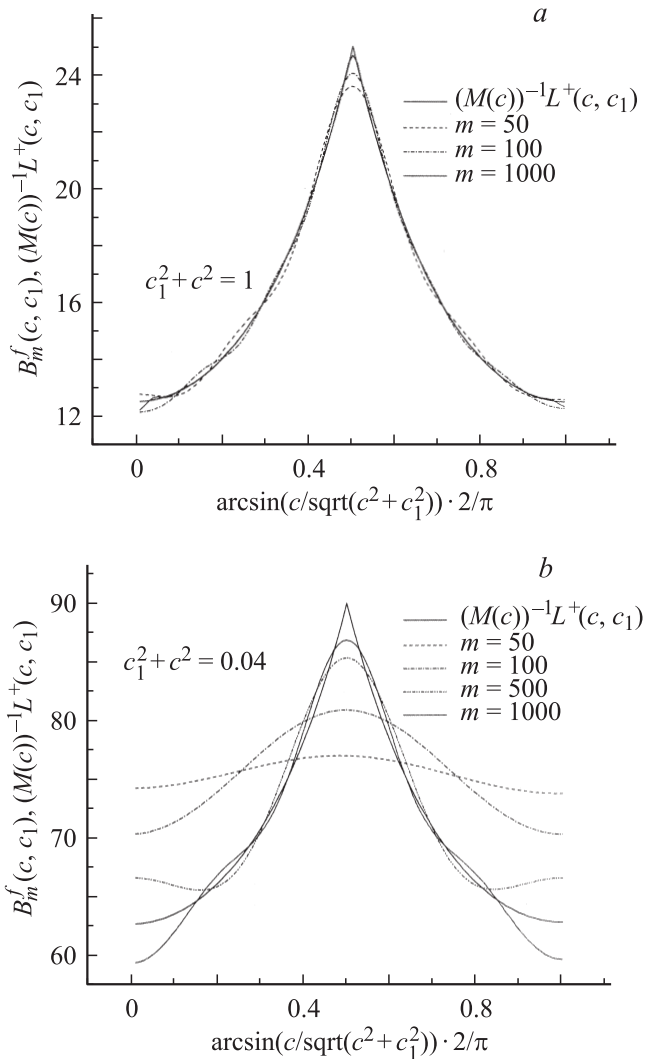


Рис. 2. Ядро, рассчитанное с помощью суммы конечного числа членов $B_m^f(c, c_1)$ при различных значениях m в сечениях $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 1$ (a), 0.2 (b) и ядро Гекке (24), умноженное на $(M(c))^{-1}$.

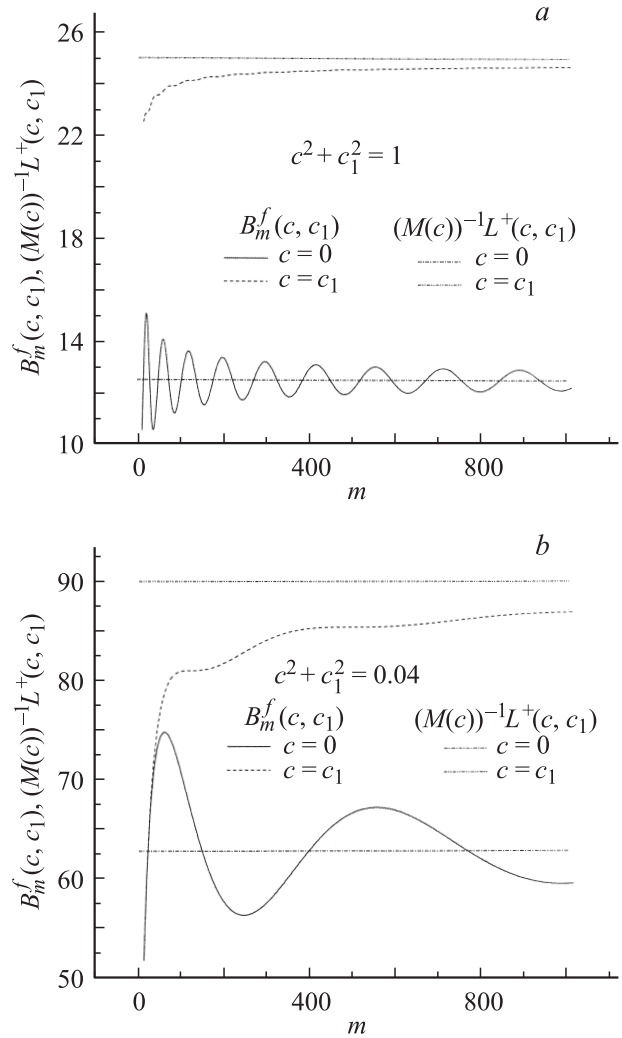


Рис. 3. Зависимость суммы $B_m^f(c, c_1)$ от числа членов в сумме m в точках $c = c_1, c = 0$ при $A = 1$ (a, b) и 0.2 (c, d).

$F(c_1)$. В первом члене (55) в первом слагаемом появляется тот же множитель и добавляется второе слагаемое, которое появляется в результате перемножения первого члена асимптотики ОМЭ и главного члена асимптотики полиномов Сонина.

Проведенные оценки показывают, что нулевой и первый члены асимптотики $B_m^0(c, c_1), B_m^1(c, c_1)$ остатка ряда $\sum_{r=m}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r$ имеют порядки соответственно $O(1/m), O(1/m^{3/2})$ при $c \neq 0, c_1 \neq 0$ и $O(1/\sqrt{m}), O(1/m)$ при $c = 0$ или $c_1 = 0$.

Аналитическое выражение (24) для ядра $L^+(c, c_1)$ позволяет оценить сходимость описанной выше процедуры.

На рис. 2 сравниваются результаты расчета ядра с помощью конечных сумм $B_m^f(c, c_1)$ и с использованием формулы (24). Рассматривались аргументы, связанные соотношением $\sqrt{c^2 + c_1^2} = A$, при различных значениях параметра A . Видно, что конечные суммы наиболее мед-

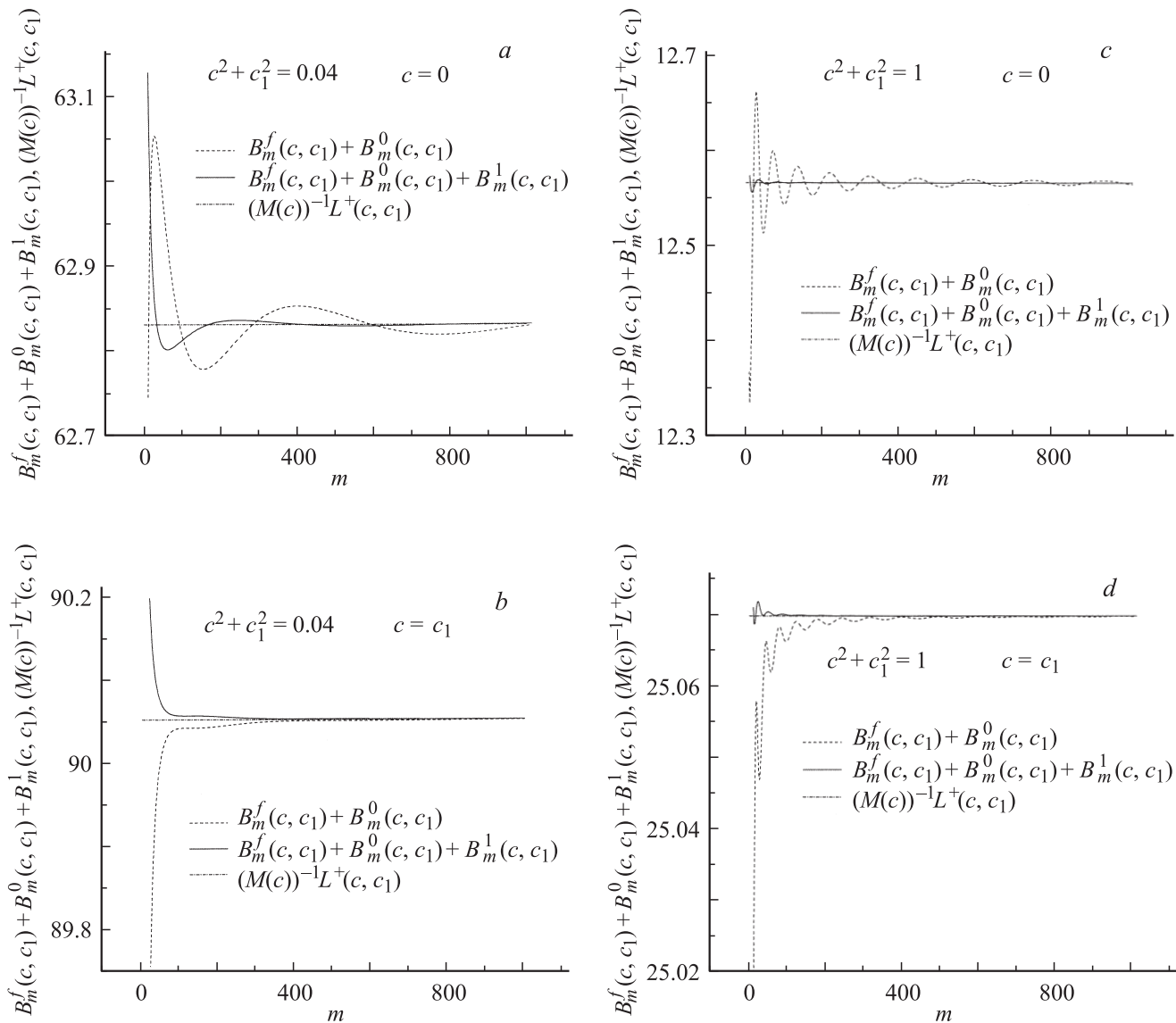


Рис. 4. Зависимость значения ядра $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ от числа членов в конечной сумме с учетом одного и двух членов асимптотики остатка в точках $c = 0$, $c = c_1$ при $A = 0.2$ (a, b) и 1 (c, d).

ленно сходятся к точному значению ядра в окрестности точек $c = 0$ или $c_1 = 0$ и $c = c_1$. Переход от $A = 1$ к $A = 0.2$ существенно ухудшает сходимость, и аналитическое ядро плохо аппроксимируется суммой даже при $m = 1000$.

Поведение конечных сумм с ростом числа слагаемых более детально прослежено на рис. 3. При $A = 1$ в точке $c = 0$ значение суммы осциллирует и имеет амплитуду приблизительно 3% при $m = 1000$, а в точке $c = c_1$ — монотонно приближается к значению $(M(c))^{-1}L^+(c, c_1)$, отличаясь от него при $m = 1000$ на 1.2%. При $A = 0.2$ и $m = 1000$ эти отличия составляют 5.6 и 3.5% соответственно.

Расчеты показали, что при учете асимптотического остатка ряда $B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$, даже при $A = 0.2$, погрешность практически исчезает при $m \approx 30$.

В увеличенном масштабе выход ядер на точные значения с учетом одного и двух членов асимптотики продемонстрирован на рис. 4. Видно, что быстрое уменьшение погрешности с ростом m происходит уже при учете нулевого члена асимптотики. Добавление первого члена асимптотики уменьшает погрешность в некоторых случаях еще примерно на порядок. Для $A = 0.2$, $c = 0$ это видно из рис. 4, a, здесь расчет ядра с помощью (52) при $m > 30$ приводит к ошибке менее 0.05%. В точке $c = c_1$ (рис. 4, b) общая ошибка не превышает 0.1% при $m > 30$ и 0.02% при $m > 60$. Для $A = 1$ при $m > 30$ ошибка не превышает 0.025% для $c = 0$ и 0.01 — для $c = c_1$.

На рис. 5 приведены относительные ошибки аппроксимации $(M(c))^{-1}L^+(c, c_1)$ зависимостями, рассчитанными по формуле (52) при $m = 30$, $A = 0.2$ и 1. Величи-

на относительных ошибок не превосходит 0.025% для $A = 1$ и 0.08% — для $A = 0.2$. Для больших значений параметра A приходится увеличивать число членов в конечной сумме, однако даже при $A = 4$ ошибка аппроксимации, отнесенная к значению ядра в максимуме, при $m = 100$ не превосходит 0.003. Зависимость ядра от

$$\arcsin(c/\sqrt{c^2 + c_1^2})2/\pi$$

при $A = 4$, $m = 100$, приведенная на рис. 6, неотличима от зависимости, даваемой аналитическим выражением (52).

Таким образом, продемонстрирована высокая точность расчета линейного ядра столкновительного оператора уравнения Больцмана с использованием его разложения по матричным элементам и добавлением аналитических формул, учитывающих поведение „хвоста“ ряда.

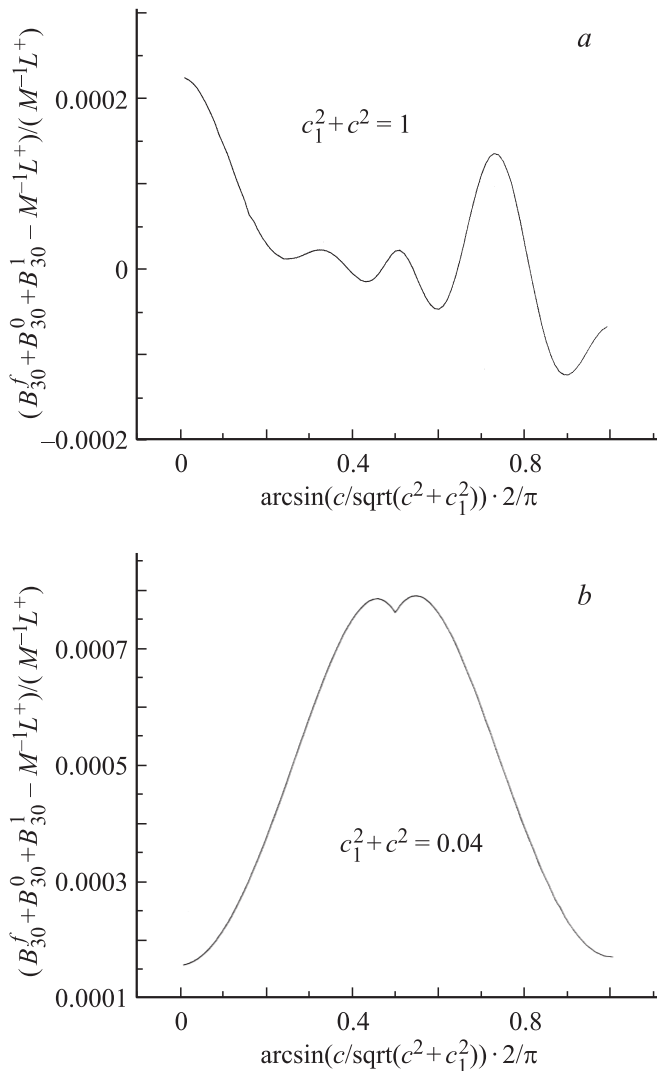


Рис. 5. Относительная ошибка аппроксимации ядра, рассчитанного по формуле Гекке (24) (умноженного на $(M(c))^{-1}$), ядром $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ при $m = 30$ в сечениях $A = 1$ (a), 0.2 (b).

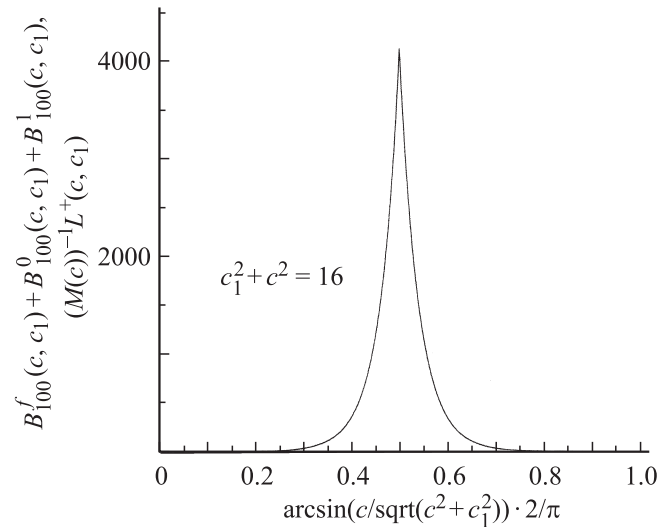


Рис. 6. Ядро $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ при $M = 4$, $m = 100$ и ядро Гекке (24), умноженное на $(M(c))^{-1}$ (на графике совпадают).

Заключение

В работе развивается метод расчета ядра интеграла столкновений через его матричные элементы. Рассмотрение проводится на примере модели твердых шаров. Показано, что введение понятия обобщенных матричных элементов позволило преодолеть трудности, связанные с расчетом двойной суммы, входящей в выражение для этого ядра.

Существенно, что асимптотическое поведение ОМЭ оказалось идентичным поведению МЭ при больших значениях r в случае псевдомаксвелловских молекул, т. е. обратно пропорционально r .

Использование формулы Эйлера–Маклорена для вычисления „хвоста“ ряда в выражении для ядра позволило вычислить ядро с высокой точностью и добиться совпадения с известной аналитической формулой Гекке [5] при суммировании сравнительно небольшого количества численно найденных ОМЭ. В большинстве случаев это количество не превышает 30. Предложенный метод представляется перспективным для расчета ядра интеграла столкновений и в случае других потенциалов взаимодействия, а главное — для расчета нелинейных ядер.

Следует отметить, что линейные ядра для модели твердых шаров все чаще используются для решения граничных задач динамики разреженных газов [12,13]. Имеются также формулы для непосредственного вычисления линейных ядер при различных моделях взаимодействия [14,15]. Однако никаких результатов по расчету нелинейных ядер в литературе нет.

Использование метода [1,2] позволяет рассчитывать нелинейные МЭ до столь же больших индексов, как и линейные ($r = 130$ и более). С помощью формул (28) по этим МЭ могут быть построены нелинейные ядра.

Авторы статьи выражают благодарность Э.А. Троппу за полезные обсуждения.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 06-08-01104) и Научной программы СПбНЦ РАН на 2007 г.

Приложение

III Рассмотрим более подробно получение выражения (50) для ОМЭ.

Асимптотическое представление $s_{r,\Delta}(x)$ в области $[-M_1, M_1]$, где $M_1 = r^{1/2-\varepsilon}$, может быть получено разложением в ряд выражения (45) по степеням малого параметра Δ/\sqrt{N} :

$$s_{r,\Delta}(x) = -\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}(\Delta^2 - 1/4)} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) \Delta^{2k}}{N^{k+3/2}} + A(\sqrt{x}, N) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) \Delta^{2k}}{2N^{k+2}} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) \Delta^{2k+2}}{2N^{k+3}} \right) + o(r^{-2}) \right\},$$

где

$$C_k(x) = \sum_{m=0}^{k+1} \frac{x^m}{4^{k-m+1} (k-m+1)! (2m)!},$$

$$U_k(x) = \sum_{m=0}^k \frac{x^{m+1/2} 2(2m+3)}{4^{k-m+1} (k-m)! (2m+1)!},$$

$$V_k(x) = \sum_{m=0}^k \frac{x^{m+1/2}}{4^{k-m+1} (k-m)! (2m+1)!}.$$

Выполним суммирование $s_{r,\Delta}(x)$ в области $[-M_1, M_1]$. Сумма по Δ от первого члена легко вычисляется:

$$\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} = \sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} 2 \left(\frac{1}{2\Delta - 1} - \frac{1}{2\Delta + 1} \right) = \sum_{\Delta=-M_1-1}^{M_1-1} \frac{2}{2\Delta + 1} - \sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} \frac{2}{2\Delta + 1} = -\frac{4}{2M_1 + 1}.$$

При суммировании остальных членов вследствие конечности пределов суммирования по Δ порядок суммирования по Δ и по k в сумме

$$\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} s_{r,\Delta}(x)$$

может быть изменен и использован известный (см., например, [11]) результат для конечной суммы степеней натуральных чисел

$$\sum_{\Delta=1}^{M_1} \Delta^q = \frac{M_1^{q+1}}{q+1} + \frac{M_1^q}{2} + O(M_1^{q-1}).$$

Таким образом, вклад в ОМЭ области $[-M_1, M_1]$ дается выражением

$$\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} s_{r,\Delta}(x) = -\frac{1}{\pi} \left\{ -\frac{4}{\sqrt{N}(2M_1 + 1)} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) M_1^{2k}}{N^{k+3/2}} \left(\frac{2M_1}{2k+1} + 1 \right) + A(\sqrt{x}, N) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) M_1^{2k+1}}{N^{k+2}(2k+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) M_1^{2k+3}}{N^{k+3}(2k+3)} \right) + o(r^{-2}) \right\}.$$

Перейдем к оценке вклада в ОМЭ областей $[-M_2, -M_1 - 1]$ и $[M_2, M_1 + 1]$.

Для этого рассмотрим более подробно интеграл (48). Подынтегральная функция имеет особенность в нуле, поэтому для вычисления интеграла J_1 удобно представить его в виде

$$J_1 = \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \cos(u\sqrt{x}) du = \int_0^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du - \int_0^{u_1} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du - \int_{u_2}^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du + \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) du.$$

Для вычисления первого интеграла заметим, что его вторая производная по параметру $c = \sqrt{x}$ имеет вид

$$-\int_0^{\infty} \exp(-u^2/4) \cos(uc) du,$$

и следовательно, есть $-\sqrt{\pi} e^{-c^2}$. Проинтегрировав это выражение дважды, найдем

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du = -\frac{\pi}{2} \left(\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right).$$

Верхний предел во втором интеграле есть $O(r^{-\varepsilon})$, поэтому можно почленно проинтегрировать разложение подынтегральной функции в ряд в окрестности нуля. Третий интеграл можно оценить с помощью неравенства

$$\left| \int_{u_2}^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du \right| \leq 2 \int_{M_2/\sqrt{N}}^{\infty} \exp(-u^2/4) du = O(r^{-\varepsilon} \exp(-r^{2\varepsilon})).$$

Последний интеграл может быть легко вычислен

$$\int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) du = \frac{\sqrt{N}}{M_1+1} \exp(-(M_1+1)^2/4N) - \frac{\sqrt{N}}{M_2} \exp(-M_2^2/4N) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi\left(\frac{M_1+1}{2\sqrt{N}}\right) - \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(1 - \Phi\left(\frac{M_2}{2\sqrt{N}}\right)\right).$$

Здесь второе и последнее слагаемые имеют порядок

$$O(\exp(-M_2^2/4N)/(M_2/\sqrt{N})),$$

т.е. экспоненциально убывают с ростом r . Оставшиеся слагаемые могут быть разложены в ряд по степеням M_1/\sqrt{N} .

В результате для интеграла (48) получаем

$$I_1 = \frac{1}{2N} \left[\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x} \right] + \left(-\frac{1}{\pi} \right) \left\{ \frac{1}{N^{1/2}(M_1+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) (M_1+1)^{2k+1}}{(2k+1)N^{k+3/2}} + o(r^{-3/2}) \right\}.$$

Аналогичные выкладки для интеграла (49) дают

$$I_2 = \frac{A(\sqrt{x}, N)}{4N^{3/2}} \Phi(\sqrt{x}) - \left(-\frac{1}{\pi} \right) A(\sqrt{x}, N) \times \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) M_1^{2k+1}}{2N^{k+2}(2k+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) M_1^{2k+3}}{2N^{k+3}(2k+3)} + o(r^{-3/2}) \right\}.$$

Учитывая, что внеинтегральный член в (47)

$$\frac{1}{2} (h(M_1+1) - h(M_2)) = -\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{2N^{1/2}M_1^2} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) M_1^{2k}}{N^{k+3/2}} + o(r^{-3/2}) \right\},$$

найдем вклад суммы

$$\sum_{\Delta=-M_2}^{M_2} s_{r,\Delta}(x)$$

в ОМЭ:

$$\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} s_{r,\Delta}(x) + (h(M_1+1) - h(M_2)) + 2I_1 + 2I_2 = \frac{1}{N} \left(\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{\exp(-x)}{\sqrt{\pi}} \right) + A(\sqrt{x}, N) \frac{1}{2N^{3/2}} \Phi(\sqrt{x}) + o(r^{-3/2}).$$

П2 Обратимся к асимптотической оценке суммы

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}},$$

где $M = M_2 + 1 = O(r^{(1/2+\varepsilon)})$, и покажем, что она экспоненциально убывает с ростом r .

Используя асимптотику полиномов Сонина (42) и учитывая, что МЭ является положительными при $\Delta \neq 0$, можно получить

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \left| \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}} \right| \leq \text{const} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \Lambda_{r,r+\Delta}.$$

Оценим

$$\sum_{\Delta=M}^{\infty} \Lambda_{r,r+\Delta}.$$

Покажем, что этот ряд сходится и что его мажорантой является геометрическая прогрессия. Для этого рассмотрим отношение $\Lambda_{r,r+\Delta+1}/\Lambda_{r,r+\Delta}$. Используя (35), найдем

$$R(r, \Delta) = \frac{\Lambda_{r,r+\Delta+1}}{\Lambda_{r,r+\Delta}} = \frac{\Delta^2 - 1/4}{(\Delta+1)^2 - 1/4} \frac{(r+3/4+\Delta/2)}{(r+\Delta+1)}.$$

Это отношение всегда меньше единицы и убывает с ростом Δ , поэтому $R(r, \Delta) < R(r, M) = q$. Тогда для $\Lambda_{r,r+\Delta}$ имеет место оценка $\Lambda_{r,r+\Delta} < q^{\Delta-M} \Lambda_{r,r+M}$ и ряд

$$\sum_{\Delta=M}^{\infty} \Lambda_{r,r+\Delta}$$

сходится. Просуммировав геометрическую прогрессию со знаменателем q , получим

$$\sum_{\Delta=M}^{\infty} \Lambda_{r,r+\Delta} < \frac{\Lambda_{r,r+M}}{1-q} = \frac{2r}{M} \Lambda_{r,r+M} (1+o(1)).$$

Подставив сюда асимптотическое выражение (40) для матричного элемента $\Lambda_{r,r+M}$, легко получить

$$\frac{2r}{M} \Lambda_{r,r+M} = -\frac{1}{\pi} \frac{2r^{1/2}}{M^3} \exp\left(-\frac{M^2}{4r}\right) (1+o(1)),$$

что и завершает доказательство экспоненциальной оценки суммы. Аналогичная оценка может быть сделана и для

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=-r}^{-M_2-1} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \Lambda_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}.$$

Список литературы

- [1] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 2003. 223 с.
- [2] Ender A.Yu., Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. N 9. P. 2720–2730.
- [3] Ender A.Yu., Ender L.A. // Transport Theory and Statistical Physics. 2007. Vol. 36. P. 563–588.
- [4] Burnett D. // Proc. London. Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382–435.
- [5] Hecke E. // Math. Zs. 1922. Bd 12. S. 274–286.
- [6] Hilbert D. // Math. Ann. 1912. Bd 72. S. 562–577.
- [7] Эндер А.Я., Эндер И.А. // Сиб. журнал. инд. мат. 2003. Т. 6. Вып. 2 (14). С. 156–164.
- [8] Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 9. С. 6–15.
- [9] Тропп Э.А., Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 9. С. 12–23.
- [10] Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990. 528 с.
- [11] Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: ФМ, 1962. 1097 с.
- [12] Loyalka S.K. // Phys. Fluids A. 1989. Vol. 1 (2). P. 403–408.
- [13] Ivchenko I.N., Loyalka S.K., Tompson R.V. // J. Appl. Phys. (ZAMP). 2002. Vol. 53. P. 58–72.
- [14] Williams M.M.R. // J. Phys. A: Math. Gen. 1976. Vol. 9 (5). P. 771.
- [15] Ivchenko I.N., Loyalka S.K., Tompson R.V. // Ann. Nucl. Energy. 1996. Vol. 23 (18). P. 1489–1495.