УДК 519.634

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ АЛГЕБРЫ К РАСЧЕТУ СКОБОЧНЫХ ИНТЕГРАЛОВ[1)]

© 2011 г. Ю. А. Выжол*, А. Н. Жорова*, И. А. Муленко*, А. Л. Хомкин**

*(*54030 Николаев, ул. Никольская, 24, Николаевский гос. ун.-т., Украина;*
***125412 Москва, ул. Ижорская, 13/19, ОИВТ РАН, Россия)*
e-mail: ivan_mulenko@mail.ru, alhomkin@mail.ru.

Поступила в редакцию 26.07.2010 г.

Методами компьютерной алгебры разработана система аналитических вычислений скобочных интегралов с применением ЭВМ. Результаты вычислений в рамках данной системы могут быть использованы для расчетов кинетических коэффициентов неидеальной плазмы на основе решения кинетического уравнения Больцмана. Библ. 17. Фиг. 1. Табл. 1.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, интеграл столкновений, скобочный интеграл, методы компьютерной алгебры, система аналитических вычислений на ЭВМ.

1. ВВЕДЕНИЕ

Явления переноса в неидеальной плазме определяются преимущественно значениями ее электронных кинетических коэффициентов, которые в силу этого становятся основными кинетическими и электрофизическими характеристиками плазмы (см. [1]). Регулярный метод вычисления электронных кинетических коэффициентов основан на решении кинетических уравнений для функции распределения электронов (см. [2], [3]). В общем случае кинетическое уравнение является нелинейным интегродифференциальным уравнением относительно неизвестной функции распределения. Его точное решение может быть получено только в случае равновесного состояния термодинамической системы. Этим решением является максвеловская функция распределения по скоростям. Во всех остальных случаях можно получить лишь приближенное решение кинетического уравнения.

Существуют разнообразные численные методы расчета электронных кинетических коэффициентов: одночастичное приближение (см. [4]), метод молекулярной динамики (см. [5]), метод Монте-Карло (см. [4]), кинетическое описание (см. [4]), метод крупных частиц (см. [6]), магнитогидродинамическое описание (см. [7]). Наиболее полным является кинетическое описание плазмы, которое чаще всего используется для моделирования именно коллективных явлений, таких как колебания в плазме, неустойчивости и т.п. При этом следят не за отдельными частицами плазмы, а за изменением во времени функции распределения. Для этого решается уравнение Больцмана для функции распределения.

Приближенное аналитическое решение кинетического уравнения может быть получено в рамках теории возмущений (см. [8]). Как правило, ограничиваются учетом лишь первой неравновесной (асимметричной по полю) поправки к максвелловской функции распределения электронов. Поэтому фактически и приближенное решение может быть получено лишь для слабо неравновесной плазмы. Решение полученного линеаризованного уравнения для указанной поправки ищется в виде разложения по полной системе нормированных и взаимно ортогональных многочленов (см. [2], [9]).

Как численное, так и аналитическое решение кинетического уравнения, за исключением простейшего приближения времени столкновений (так называемое τ-приближение), когда интеграл столкновений заменяется выражением вида $\mathrm{St} f_e = (f_e - f_e^0)/\tau$, представляет собой очень трудоемкую задачу. С одной стороны, при численном решении кинетического уравнения мы неизбежно сталкиваемся с решением многомерной задачи для функции многих переменных, зави-

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (государственно-бюджетная научно-исследовательская тема “Теоретические исследования и математическое моделирование термодинамических и кинетических процессов в неидеальной плазме и твердом теле”).

сящей к тому же от нескольких макроскопических параметров (температура плазмы, состав и т.д.). С другой стороны, приближенный аналитический расчет функции распределения сопряжен с необходимостью выполнения колоссальных объемов рутинных аналитических преобразований арифметических выражений, которые содержат десятки и сотни тысяч членов. В первую очередь это относится к вычислению скобочных интегралов.

Последнюю трудность, однако, можно преодолеть путем разработки соответствующих компьютерных алгоритмов и программ, способных выполнять указанные аналитические преобразования. Четкая структура интеграла столкновений, например в кинетическом уравнении Больцмана, поддается строгой алгоритмизации всего процесса его аналитического вычисления вплоть до сведения скобочного интеграла к выражению, которое может быть в дальнейшем вычислено лишь путем численного интегрирования. Этот процесс позволяет многократно снизить размерность конфигурационного пространства, по которому в дальнейшем выполняется численное интегрирование, и свести кратность интегралов во всех аналитических выражениях к двум. Численное интегрирование таких выражений при помощи современных компьютеров уже не представляет сложности.

Разработка систем аналитических вычислений с применением ЭВМ и методов преобразования числовой, символьной и графической информации (на наш взгляд, их можно назвать методами компьютерной алгебры) с помощью компьютера ведется уже достаточно длительное время (приблизительно с 50-х годов прошлого века). Необходимость в их развитии возникла в связи с потребностями решения громоздких математических задач в различных областях науки и техники. Прежде всего это задачи небесной механики, квантовой механики, статической физики, квантовой химии и других разделов науки. К настоящему времени существует достаточно большое количество таких систем аналитических вычислений. Их подробная классификация, относящаяся к концу 70-х годов, представлена в обзоре [10]. В последующие годы разработка систем аналитических вычислений и методов компьютерной алгебры получила существенное развитие.

В данной работе мы не стремимся дать подробный обзор существующих систем аналитических вычислений. Отметим лишь, что условно их можно разделить на три группы (см. [10]): специализированные системы, системы общего назначения и универсальные системы. К последним можно отнести широко использующиеся в настоящее время системы MathCad, MathLab, Maple и др. К сожалению, универсальность системы, способной выполнять широкий круг сравнительно простых задач, относящихся к различным областям науки, ограничивает в то же время ее по быстродействию и объему обрабатываемой информации. Универсальные системы, как правило, непригодны для решения сложных специальных задач. Поэтому в подавляющем большинстве случаев требуется разработка специализированных систем аналитических вычислений, ориентированных на вполне определенную область знаний (чаще всего даже на определенную задачу или класс задач) и способных выполнять длительные и громоздкие процедуры аналитических преобразований (приведение подобных членов, интегрирование и дифференцирование с использованием таблиц интегралов и производных и т.д.).

Таким образом, целью настоящей работы является разработка с применением методов компьютерной алгебры системы аналитических вычислений на ЭВМ, способной выполнять аналитическое вычисление скобочных интегралов, возникающих в процессе решения кинетического уравнения Больцмана методом Чепмена–Энскога.

2. АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СКОБОЧНЫХ ИНТЕГРАЛОВ

Строгий газокинетический расчет электронных кинетических коэффициентов неидеальной плазмы основан на решении кинетического уравнения Больцмана (см. [2])

$$\mathbf{v}_k \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e_k \mathbf{E}}{m_k} \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{v}_k} = \sum_j \iiint \left[f_k(\mathbf{v}'_k) f_j(\mathbf{v}'_j) - f_k(\mathbf{v}_k) f_j(\mathbf{v}'_j) \right] g_{kj} b\, db\, d\varphi\, d\mathbf{v}_j, \quad (1)$$

где e_k, m_k, $\mathbf{v}_k$, $f(\mathbf{v}_k)$ – электрический заряд, масса, скорость и функция распределения частиц сорта k, g_{kj} – относительная скорость сталкивающихся частиц сортов k и j, b – прицельный параметр,

Таблица

Значение коэффициента K_k^i в полиноме	Y	D	Mist	Значение коэффициента K_k^i в полиноме	Y	D	Mist
			L_{81}^{ee}				
2.6429557800E-01	4	2	3.4E-13	−5.28591156006E-01	6	2	9.2E-14
3.523941040039E-01	8	2	1.6E-14	−1.067860921224E-01	10	2	1.6E-15
1.6428629557292E-02	12	2	1.0E-16	−1.3142903645833E-03	14	2	3.7E-18
5.1540798611111E-05	16	2	7.1E-20	−7.75049603174603E-07	18	2	5.4E-22
			L_{82}^{ee}				
2.31258630753E+00	4	2	1.3E-12	−4.228729248047E+00	6	2	3.9E-13
2.642955780029E+00	8	2	7.4E-14	−7.902170817057E-01	10	2	9.3E-15
1.3142903645833E-01	12	2	8.2E-16	−1.3142903645833E-02	14	2	4.9E-17
7.9888237847222E-04	16	2	1.7E-18	−2.7126736111111E-05	18	2	3.3E-20
3.87524801587302E-07	20	20	2.5E-22				
			L_{83}^{ee}				
8.84564262629E+00	4	2	4.2E-12	−1.560995757580E+01	6	2	1.4E-12
9.867034912109E+00	8	2	2.8E-13	−3.155529022217E+00	10	2	4.0E-14
5.9081459045410E-01	12	2	4.1E-15	−6.9246673583985E-02	14	2	2.9E-16
5.2185058593750E-03	16	2	1.4E-17	−2.5227864583333E-04	18	2	4.6E-19
7.3145306299603E-06	20	2	8.4E-21	−9.68812003968254E-08	22	2	6.3E-23
1.1746470133E-01	8	4	2.1E-13	−1.06786092122E-01	10	4	3.3E-14
3.28572591146E-02	12	4	3.4E-15	−4.380967881944E-03	14	4	2.2E-16
2.577039930556E-04	16	4	9.5E-18	−5.425347222222E-06	18	4	2.3E-19
			L_{84}^{ee}				
2.22730968744E+01	4	2	1.3E-11	−3.93552634120E+01	6	2	4.6E-12
2.601384288073E+01	8	2	9.8E-13	−9.019420305888E+00	10	2	1.5E-13
1.8815401395162E+00	12	2	1.6E-14	−2.5271339416504E-01	14	2	1.3E-15
2.2609498765734E-02	16	2	8.0E-17	−1.3593885633681E-03	18	2	3.3E-18
5.4096040271577E-05	20	2	8.9E-20	−1.3401899388228E-06	22	2	1.5E-21
1.61468667328042E-08	24	2	1.1E-23	7.63520558675E-01	8	4	7.1E-13
−6.72752380371E-01	10	4	1.3E-13	2.176793416341E-01	12	4	1.4E-14
−3.504774305556E-02	14	4	1.1E-15	3.092447916667E-03	16	4	6.0E-17
−1.437717013889E-04	18	4	2.0E-18	2.712673611111E-06	20	4	4.2E-20
			L_{85}^{ee}				
4.31125709089E+01	4	2	3.7E-11	−7.83179549742E+01	6	2	1.4E-11
5.492960302904E+01	8	2	3.1E-12	−2.063433706512E+01	10	2	5.0E-13
4.747209737698E+00	12	2	5.9E-14	−7.1734712521235E-01	14	2	5.2E-15
7.3916098806593E-02	16	2	3.5E-16	−5.2802668677436E-03	18	2	1.7E-17
2.6129692319840E-04	20	2	6.0E-19	−8.7581614337901E-06	22	2	1.4E-20
1.8669814659805E-07	24	2	2.0E-22	−2.01835834160053E-09	26	2	1.4E-24
2.54384493828E+00	8	4	2.2E-12	−2.28989426295E+00	10	4	4.3E-13
8.094180425008E-01	12	4	5.4E-14	−1.517594655355E-01	14	4	4.8E-15
1.667828030056E-02	16	4	2.9E-16	−1.097446017795E-03	18	4	1.2E-17
4.1029188368056E-05	20	4	3.5E-19	−6.7816840277778E-07	22	4	5.9E-21
3.2857259115E-03	12	6	1.1E-14	−1.31429036458E-03	14	6	1.0E-15
1.54622395833E-04	16	6	5.9E-17	−5.42534722222E-06	18	6	2.1E-18

Окончание

Значение коэффициента K_k^i в полиноме	Y	D	Mist	Значение коэффициента K_k^i в полиноме	Y	D	Mist
			L_{86}^{ee}				
6.9421627735E+01	4	2	9.9E-11	−1.32053582082E+02	6	2	3.9E-11
9.885962329805E+01	8	2	9.4E-12	−4.012362271547E+01	10	2	1.6E-12
1.009562348947E+01	12	2	1.9E-13	−1.691700907548E+00	14	2	1.8E-14
1.9659799734751E-01	16	2	1.3E-15	−1.6189352671305E-02	18	2	7.4E-17
9.5102427497743E-04	20	2	3.1E-18	−3.9562346443297E-05	22	2	9.0E-20
1.1347210596478E-06	24	2	1.8E-21	−2.0990926752646E-08	26	2	2.2E-23
2.01835834160053E-10	28	2	1.4E-25	5.9099427859E+00	8	4	6.6E-12
−5.61794956525E+00	10	4	1.4E-12	2.187189658483E+00	12	4	1.9E-13
−4.660254584418E-01	14	4	1.8E-14	6.042151980930E-02	16	4	1.2E-15
−4.968855116102E-03	18	4	6.1E-17	2.5784527813947E-04	20	4	2.1E-18
−7.9119646990741E-06	22	4	4.9E-20	1.1302806712963E-07	24	4	6.9E-22
1.8892923991E-02	12	6	3.9E-14	−8.32383897570E-03	14	6	4.1E-15
1.34006076389E-03	16	6	2.7E-16	−9.76562500000E-05	18	6	1.2E-17
2.71267361111E-06	20	6	3.4E-19				
			L_{87}^{ee}				
9.7441552397E+01	4	2	2.5E-10	−1.96435825183E+02	6	2	1.0E-10
1.57318834838E+02	8	2	2.7E-11	−6.879205482935E+01	10	2	4.7E-12
1.880224139507E+01	12	2	6.1E-13	−3.456197108763E+00	14	2	6.1E-14
4.460984562834E-01	16	2	4.7E-15	−4.1451101501783E-02	18	2	2.8E-16
2.8057760899029E-03	20	2	1.3E-17	−1.3841625559267E-04	22	2	4.6E-19
4.9179193204042E-06	24	2	1.1E-20	−1.2213590914610E-07	26	2	2.0E-22
1.9763092094839E-09	28	2	2.1E-24	−1.68196528466711E-11	30	2	1.2E-26
1.0850285583E+01	8	4	1.8E-11	−1.11063271388E+01	10	4	4.1E-12
4.75814183553E+00	12	4	6.0E-13	−1.135534895791E+00	14	4	6.3E-14
1.687535842260E-01	16	4	4.8E-15	−1.642510626051E-02	18	4	2.6E-16
1.0630996138961E-03	20	4	1.1E-17	−4.4928656684028E-05	22	4	3.0E-19
1.1514734338831E-06	24	4	5.8E-21	1.4128508391204E-08	26	4	6.9E-23
5.8218955994E-02	12	6	1.3E-13	−2.91745079888E-02	14	6	1.5E-14
5.85310194227E-03	16	6	1.1E-15	−5.930582682292E-04	18	6	5.8E-17
3.085666232639E-05	20	6	2.0E-18	−6.781684027778E-07	22	6	4.5E-20
7.3629712302E-06	16	8	6.2E-17	−7.7504960317E-07	18	8	2.9E-18
			L_{88}^{ee}				
1.2289134916E+02	4	2	6.2E-10	−2.6448421365E+02	6	2	2.7E-10
2.26743090634E+02	8	2	7.4E-11	−1.06547578307E+02	10	2	1.4E-11
3.146199258491E+01	12	2	1.9E-12	−6.292074865258E+00	14	2	1.9E-13
8.916647038423E-01	16	2	1.6E-14	−9.204494151331E-02	18	2	1.0E-15
7.0290436169931E-03	20	2	5.1E-17	−3.9930891580683E-04	22	2	2.0E-18
1.6809634115330E-05	24	2	5.9E-20	−5.1651051435521E-07	26	2	1.3E-21
1.1212401078912E-08	28	2	1.9E-23	−1.5978670204338E-10	30	2	1.7E-25
1.20140377476222E-12	32	2	9.0E-28	1.6829485511E+01	8	4	4.9E-11
−1.87414023715E+01	10	4	1.2E-11	8.81034794574E+00	12	4	1.8E-12
−2.331812938054E+00	14	4	2.1E-13	3.899524476793E-01	16	4	1.7E-14
−4.359138541751E-02	18	4	1.0E-15	3.341211213006E-03	20	4	4.7E-17
−1.7582928692853E-04	22	4	1.6E-18	6.1847545482494E-06	24	4	3.7E-20
−1.3422082971644E-07	26	4	5.9E-22	1.4128508391204E-09	28	4	6.1E-24
1.2811764081E-01	12	6	3.9E-13	−7.37440109253E-02	14	6	4.9E-14
1.76056120131E-02	16	6	4.2E-15	−2.23880343967E-03	18	6	2.5E-16
1.621670193142E-04	20	6	1.0E-17	−6.442599826389E-06	22	6	2.8E-19
1.130280671296E-07	24	6	5.0E-21	3.9575970362E-05	16	8	2.4E-16
−7.3629712302E-06	18	8	1.3E-17	3.8752480159E-07	20	8	4.8E-19

φ – полярный угол, $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля. Штрих у буквы указывает, что это значения скоростей после столкновения.

Метод Чепмена–Энскога позволяет свести нелинейное интегродифференциальное уравнение (1) к бесконечной системе линейных неоднородных алгебраических уравнений относительно неизвестных векторов $\mathbf{P}_r^e$ (см. [8]):

$$3\delta_{n0}\left[\frac{\partial\ln(n_eT)}{\partial\mathbf{r}} - \frac{e\mathbf{E}}{T}\right] - \frac{15}{2}\delta_{n1}\frac{\partial\ln T}{\partial\mathbf{r}} = -\sum_{r=0}^{\infty}L_{rn}^e\mathbf{P}_r^{(e)}, \tag{2}$$

где T – температура плазмы, n_e – концентрация электронов, δ_{kn} – символ Кронекера. Приближенное решение этой системы может быть получено путем ее редукции. Наиболее трудоемкой задачей при этом является расчет скобочных интегралов

$$\begin{gathered}L_{rn}^e = -\frac{2}{n_e}\frac{m_e}{2T}\sum_j\iiiint f_e^0f_j^0\mathbf{v}_eS_n^{3/2}\left(\frac{m_e v_e^2}{2T}\right)g_{ej}b\left|\frac{db}{d\chi}\right|d\chi d\varphi d\mathbf{v}_e d\mathbf{v}_j\times\\ \times\left[\mathbf{v}_e'S_r^{3/2}\left(\frac{m_e v_e'^2}{2T}\right) - \mathbf{v}_eS_r^{3/2}\left(\frac{m_e v_e^2}{2T}\right) + \mathbf{v}_j'S_r^{3/2}\left(\frac{m_j v_j'^2}{2T}\right) - \mathbf{v}_jS_r^{3/2}\left(\frac{m_j v_j^2}{2T}\right)\right].\end{gathered} \tag{3}$$

Для выполнения интегрирования по углам в (3) удобно перейти от лабораторной системы координат к системе центра масс сталкивающихся частиц, в результате чего скобочный интеграл примет вид

$$\begin{gathered}L_{rn}^{ej} = -\frac{16}{\pi}n_j\left(\frac{m_e}{2T}\right)^{5/2}\left(\frac{m_j}{2T}\right)^{3/2}\int_0^\infty g^3dg\int_0^\infty G^2dG\exp\left[-\frac{1}{2T}\left((m_e+m_j)G^2 + \frac{m_em_j}{m_e+m_j}g^2\right)\right]\times\\ \times\int_0^\pi b\left|\frac{db}{d\chi}\right|d\chi\int_0^\pi\sin\theta'd\theta'\int_0^{2\pi}d\varphi(\mathbf{G}-M_j\mathbf{g})S_n^{3/2}\left(\frac{m_e}{2T}(\mathbf{G}-M_j\mathbf{g})^2\right)\times\\ \times\left[(\mathbf{G}-M_j\mathbf{g}')S_r^{3/2}\left(\frac{m_e}{2T}(\mathbf{G}-M_j\mathbf{g}')^2\right) - (\mathbf{G}-M_j\mathbf{g})S_r^{3/2}\left(\frac{m_e}{2T}(\mathbf{G}-M_j\mathbf{g})^2\right)+\right.\\ \left.+(\mathbf{G}+M_e\mathbf{g}')S_r^{3/2}\left(\frac{m_j}{2T}(\mathbf{G}+M_e\mathbf{g}')^2\right) - (\mathbf{G}+M_e\mathbf{g})S_r^{3/2}\left(\frac{m_j}{2T}(\mathbf{G}+M_e\mathbf{g})^2\right)\right].\end{gathered} \tag{4}$$

где $\mathbf{G}$, $\mathbf{g}$ – скорость центра масс и относительная скорость сталкивающихся частиц, $S_n^{3/2}(x)$ – полином Сонина степени n и порядка 3/2.

Дальнейшее вычисление интегралов (4) в общем виде в случае произвольного отношения масс сталкивающихся частиц является весьма громоздкой задачей. Поэтому проведем вначале расчет для предельных случаев: сталкивающиеся частицы сильно отличаются по массам, сталкивающиеся частицы имеют одинаковые массы, а затем обобщим результаты на случай произвольного отношения масс.

2.1. Расчет интеграла столкновения легких и тяжелых частиц

Для конкретных случаев электрон-атомных и электрон-ионных (e-a и e-i) столкновений расчет существенно упрощается ввиду малости отношений масс $m_e/m_i \sim m_e/m_a \ll 1$. Принимая во внимание также тот факт, что слабое внешнее возмущение не нарушает максвелловского распределения ионной и атомарной компонент, из (4) после интегрирования по углам θ', φ и абсолютным значениям скорости центра масс G для некоторых первых скобочных интегралов получим следующие выражения:

$$L_{00}^{ej} = a_j \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 \left(y^2\right) dy,$$

$$L_{01}^{ej} = a_j \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 \left(y^2\right) \left(\frac{5}{2} - y^2\right) dy,$$

$$L_{11}^{ej} = a_j \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 \left(y^2\right) \left(\frac{25}{4} - 5y^2 + y^4\right) dy,$$

....

$$L_{32}^{ej} = L_{23}^{ej} = a_j \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 (y^2) \left(\frac{3675}{128} - \frac{3675}{64} y^2 + \frac{651}{16} y^4 - \frac{301}{24} y^6 + \frac{41}{24} y^8 - \frac{y^{10}}{12}\right) y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 (y^2) dy,$$

где $a_j = 16 n_j \sqrt{\dfrac{T}{2\pi m_e}}$, $\sigma_{ej}^1\left(y^2\right)$ — транспортное сечение рассеяния электронов на частицах сорта j 1-го порядка. Рассуждая по индукции, можно показать, что в общем виде скобочный интеграл для столкновений легких и тяжелых частиц выглядит следующим образом:

$$L_{rn}^{ej} = 16 n_j \sqrt{\frac{T}{2\pi m_e}} \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{ej}^1 \left(y^2\right) S_r^{3/2} \left(y^2\right) S_n^{3/2} \left(y^2\right) dy. \tag{5}$$

Полином Сонина $S_r^{3/2}\left(y^2\right)$ определяется выражением (см. [11])

$$S_s^r (x) = \frac{1}{s!} e^x x^{-r} \frac{d^s}{dx^s} e^{-x} x^{r+s}, \tag{6}$$

где r — вещественное число, s — целое неотрицательное число. Так,

$$S_r^0 = 1, \quad S_r^1 (x) = r + 1 - x. \tag{7}$$

Условие ортогональности этих полиномов при заданном индексе r и различных индексах имеет вид

$$\int_0^\infty e^{-x} x^r S_r^s (x) S_r^{s'} (x) dx = \frac{\Gamma(r + s + 1)}{s!} \delta_{ss'}. \tag{8}$$

Как видно из (5), коэффициенты L_{rn}^{ej} образуют симметричную матрицу, т.е. $L_{rn}^{ej} = L_{nr}^{ej}$. В общем случае интегралы в (5) зависят от температуры и концентраций частиц как от параметров.

2.2. Расчет интегралов столкновений для частиц одинаковой массы

Рассмотрим скобочные интегралы в случае столкновения частиц одинаковой массы на примере вычисления электрон-электронных столкновений. Так как средняя величина передачи импульса между ними равна нулю, то члены в интеграле столкновений, содержащие сечения нечетных порядков $2k - 1$, также равны нулю. Скобочный интеграл, характеризующий столкновение одинаковых частиц других сортов записывается в точности так же с заменой массы электрона и транспортных сечений электрон-электронного рассеяния различных порядков на массу и соответствующие транспортные сечения рассеяния частиц рассматриваемого сорта. Коэффициенты L_{rn}^{ee} также образуют симметричную матрицу: кроме того, $L_{0n}^{ee} = L_{n0}^{ee} = 0$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, что характерно и для скобочных интегралов любых двух частиц одинаковой массы, поскольку они получены в общем виде без конкретизации вида потенциала взаимодействия. Вычисление коэффициентов L_{rn}^{ee} проведем на примере расчета L_{11}^{ee}. Подставляя в выражение (4) соотношение для полинома

Сонина 1-го порядка $S_1^{3/2}(x) = 5/2 - x$ и выражения для сечения при электрон-электронных столкновениях (см. [12]), учитывая равенство масс сталкивающихся частиц, получаем

$$
\begin{gathered}
L_{11}^{ee} = -\frac{16n_e}{\pi}\left(\frac{m_e}{2T}\right)^4 \int\limits_0^\infty g^3 dg \int\limits_0^\infty G^2 dG \exp\left[-\frac{m_e G^2}{T} - \frac{m_e g^2}{4T}\right] \int\limits_0^\pi b\left|\frac{db}{d\chi}\right| d\chi \int\limits_0^\pi \sin\theta' d\theta' \times \\
\times \int\limits_0^{2\pi} d\varphi (\mathbf{G} - \mathbf{g}/2)\left[\frac{5}{2} - \frac{m_e}{2T}(\mathbf{G} - \mathbf{g}/2)^2\right]\left\{(\mathbf{G} - \mathbf{g}'/2)\left[\frac{5}{2} - \frac{m_e}{2T}(\mathbf{G} - \mathbf{g}'/2)^2\right] - \right. \\
- (\mathbf{G} - \mathbf{g}/2)\left[\frac{5}{2} - \frac{m_e}{2T}(\mathbf{G} - \mathbf{g}/2)^2\right] + (\mathbf{G} + \mathbf{g}'/2)\left[\frac{5}{2} - \frac{m_e}{2T}(\mathbf{G} + \mathbf{g}/2)^2\right] - \\
\left. - (\mathbf{G} + \mathbf{g}/2)\left[\frac{5}{2} - \frac{m_e}{2T}(\mathbf{G} + \mathbf{g}/2)^2\right]\right\}.
\end{gathered} \tag{9}
$$

Делая в интеграле (9) замену переменных и выполняя элементарные алгебраические преобразования подынтегрального выражения, получаем

$$
\begin{gathered}
L_{11}^{ee} = \frac{32}{\pi} n_e \sqrt{\frac{T}{m_e}} \int\limits_0^\infty y^3 e^{-y^2} dy \int\limits_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx \int\limits_0^\pi b\left|\frac{db}{d\chi}\right| d\chi \int\limits_0^\pi \sin\theta' d\theta' \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \left[\frac{5}{2} - \frac{x^2 + y^2}{2} + xy\cos\theta'\right] \times \\
\times \left\{x^2 y^2 \left(\cos^2\theta' - \cos^2\eta\right) - xy^3\left(\cos\theta' - \cos\chi\cos\eta\right)\right\}.
\end{gathered} \tag{10}
$$

здесь η – угол между векторами скоростей $\mathbf{g}'$ и $\mathbf{G}$, $\mathbf{g}'$ – относительная скорость сталкивающихся частиц после столкновения, $\mathbf{G}$ – скорость центра масс системы двух частиц. Так как столкновения упругие, то $|\mathbf{g}'| = |\mathbf{g}|$, где $\mathbf{g}$ – относительная скорость частиц до столкновения. Для скалярного произведения имеем $\mathbf{g}'\mathbf{G} = g\mathbf{G}\cos\eta$, где $\cos\eta = \cos\chi\cos\theta + \sin\chi\sin\theta\cos\varphi$.

Выполняя интегрирование по φ и θ, а также преобразовывая подынтегрально выражения, записывая соотношение

$$
L_{11}^{ee} = \frac{128}{3\pi} n_e \sqrt{\frac{T}{m_e}} \int\limits_0^\infty y^7 e^{-y^2} dy \int\limits_0^\pi b\left|\frac{db}{d\chi}\right| \left(1 - \cos^2\chi\right) d\chi \int\limits_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx. \tag{11}
$$

Последний интеграл в (11) легко вычисляется, в результате окончательно получим

$$
L_{11}^{ee} = 8n_e \sqrt{\frac{T}{\pi m_e}} \int\limits_0^\infty y^7 e^{-y^2} \sigma_{t_{ee}}^2\left(y^2\right) dy, \tag{12}
$$

где $\sigma_{t_{ee}}^2\left(y^2\right)$ – транспортное сечение электрон-электронного рассеяния 2-го порядка. Таким образом, на примере вычисления коэффициента L_{11}^{ee} видно, что интегралы электрон-электронных столкновений также удается свести к двукратному интегралу.

Для электрон-электронных столкновений общую формулу вида (5) получить не удается, поэтому требуется рассчитывать каждый скобочный интеграл в отдельности. С ростом индексов r, n в скобочном интеграле L_{rn}^{ee} количество необходимых аналитических преобразований факториально растет. Для $r, n \le 4$ результаты расчетов приведены в [13]. При $r, n > 4$ выполнение этих преобразований "вручную" становится бессмысленным. Для этой цели нами разработана система аналитических вычислений, основные характеристики которой обсуждаются в следующем разделе.

2.3. Расчет интегралов столкновений при произвольном отношении масс сталкивающихся частиц

Рассмотрим случай, когда отношение масс сталкивающихся частиц является произвольным. Пусть имеет место столкновение частиц сорт k и j с массами m_k и m_j соответственно. Введем величину $\mu = m_j/m_k$. Тогда из выражений $M_j = m_j/(m_e + m_j)$, $M_e = m_e/(m_e + m_j)$ получим

$$
M_j = \mu^2 \big/ \left(1 + \mu^2\right), \quad M_k = 1 \big/ \left(1 + \mu^2\right) \tag{13}
$$

Величина μ изменяется в пределах $[1, \infty)$, нижний предел соответствует столкновению частиц одинаковой массы, верхний – столкновению легких частиц с тяжелыми. Для полиномов Сонина нулевой степени $S_0^{3/2}(x) = 1$, для L_{00}^{kj} получим

$$L_{00}^{kj} = 16n_j \frac{\mu^2 - 1}{\mu\sqrt{1+\mu^2}} \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 \sigma_{t_{kj}}^1 \left(y^2\right) e^{-y^2} dy. \tag{14}$$

Рассматривая предельные случаи при $\mu \longrightarrow 1$ и $\mu \longrightarrow \infty$ соответственно, имеем

$$L_{00}^{kj} = 0, \tag{15}$$

$$L_{00}^{kj} = 16n_j \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 \sigma_{t_{kj}}^1 \left(y^2\right) e^{-y^2} dy. \tag{16}$$

Эти выражения совпадают с соответствующими формулами для скобочных интегралов при рассмотрении столкновений частиц одинаковой массы (15) и столкновении легкой и массивной частицы (16).

Аналогично, имея в виду, что $S_1^{3/2}(x) = 5/2 - x$, для $L_{10}^{kj} = L_{01}^{kj}$ получаем

$$L_{10}^{kj} = 16n_j \frac{\mu^2 - 1}{\mu\sqrt{1+\mu^2}} \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 \sigma_{t_{kj}}^1 \left(y^2\right) e^{-y^2} \left\{\frac{5}{2}\left(1 - \frac{1}{1+\mu^2}\right) - \frac{\mu^2}{1+\mu^2} y^2\right\} dy, \tag{17}$$

предельные случаи при $\mu \longrightarrow 1$ и $\mu \longrightarrow \infty$ имеют вид

$$L_{10}^{kj} = 0, \tag{18}$$

$$L_{10}^{kj} = 16n_j \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 \sigma_{t_{kj}}^1 \left(y^2\right) e^{-y^2} \left\{\frac{5}{2} - y^2\right\} dy. \tag{19}$$

Здесь также имеет место совпадение с рассмотренными выше случаями рассеяния двух одинаковых частиц и легкой частицы на тяжелой. Далее, для величины L_{11}^{kj} получим

$$L_{11}^{kj} = 16n_j \frac{\mu}{\left(1+\mu^2\right)^{3/2}} \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \left\{\left(\mu^2 - 1\right)\sigma_{t_{kj}}^1\left(y^2\right)\left(\frac{25}{4} - \frac{5}{2}y^2 + y^4\right) + 2y^2\sigma_{t_{kj}}^2\left(y^2\right)\right\} dy. \tag{20}$$

Соответствующие предельные случаи при $\mu \longrightarrow 1$ и $\mu \longrightarrow \infty$ также совпадают с результатами предыдущих разделов:

$$L_{11}^{kj}(\mu = 1) = 8n_j \sqrt{\frac{T}{\pi m_k}} \int_0^\infty y^7 \sigma_{t_{kj}}^2 \left(y^2\right) e^{-y^2} dy, \tag{21}$$

$$L_{11}^{kj}(\mu = \infty) = 16n_j \sqrt{\frac{T}{2\pi m_k}} \int_0^\infty y^5 e^{-y^2} \sigma_{t_{kj}}^1 \left(y^2\right)\left(\frac{25}{4} - \frac{5}{2}y^2 + y^4\right) dy. \tag{22}$$

Продолжая эти рассуждения далее, находим по индукции общее выражение для скобочного интеграла произвольного порядка L_{rn}^{kj}, расчет которого сводится к рассмотренным в предыдущих разделах случаям

$$L_{rn}^{kj}(\mu) = \frac{\mu^{2r-1}\left(\mu^2 - 1\right)}{\left(\mu^2 + 1\right)^{(2r+1)/2}} L_{rn}^{kj}(\mu = \infty) + \frac{\mu^{2r-1}}{\left(\mu^2 + 1\right)^{(2r+1)/2}} L_{rn}^{kj}(\mu = 1). \tag{23}$$

3. АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СКОБОЧНЫХ ИНТЕГРАЛОВ НА ЭВМ

Перейдем теперь к реализации системы аналитических вычислений на ЭВМ скобочных интегралов для сталкивающихся частиц одинаковой массы. Для расчета скобочных интегралов необходимо вычислить выражения

$$
\begin{gathered}
L_{rn}^{ee} = -\frac{16}{\pi} n_e \sqrt{\frac{T}{m_e}} \int_0^{\infty} x^2 \exp\left(-x^2\right) dx \int_0^{\infty} y^3 \exp\left(-y^2\right) dy \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\pi} b \left|\frac{db}{d\chi}\right| d\chi \times \\
\times \int_0^{2\pi} d\varphi S_n^{3/2}\left(\frac{x^2}{2} - xy\cos\theta + \frac{y^2}{2}\right)\left\{S_r^{3/2}\left(\frac{x^2}{2} - xy\cos\eta + \frac{y^2}{2}\right)\times\right. \\
\times [x^2 - xy(\cos\eta + \cos\theta) + y^2\cos\chi] - \\
- S_r^{3/2}\left(\frac{x^2}{2} - xy\cos\theta + \frac{y^2}{2}\right)[x^2 - xy\cos\theta + y^2] + S_r^{3/2}\left(\frac{x^2}{2} + xy\cos\eta + \frac{y^2}{2}\right)\times \\
\left.\times [x^2 + xy(\cos\eta - \cos\theta) + y^2\cos\chi] - S_r^{3/2}\left(\frac{x^2}{2} + xy\cos\theta + \frac{y^2}{2}\right)[x^2 + y^2]\right\}.
\end{gathered} \tag{24}
$$

Из (24) видно, что начальные, промежуточные и конечные результаты можно записать с помощью полиномов вида

$$
A = \sum_i A_i = \sum_i K_i^a \sqrt{\pi}^{\alpha_{i0}^a} x^{\alpha_{i1}^a} y^{\alpha_{i2}^a} \sin^{\alpha_{i3}^a}\chi \cos^{\alpha_{i4}^a}\chi \sin^{\alpha_{i5}^a}\theta \cos^{\alpha_{i6}^a}\theta \cos^{\alpha_{i7}^a}\varphi\left(1 - \cos^{\alpha_{i8}^a}\chi\right), \tag{25}
$$

где K_i^a — постоянный коэффициент, α_{ij}^a — показатель степени определенного множителя i — члена полинома с именем A, a — степень для данного полинома.

Программа реализована на языке Visual Basic 6.0. Для хранения в памяти ЭВМ каждого члена необходимо было выделить 8 байт для коэффициента K и 9 байт для показателей степеней. Кроме того, для ускорения поиска подобных членов для каждого члена вычислялась и хранилась в памяти контрольная сумма (4 байта):

$$
\alpha_i^a = \sum_{j=0}^{8} \alpha_{ij}^a d^j, \quad \text{где} \quad d \geq \alpha_{ij}^a \quad \forall i, j.
$$

В ходе промежуточных преобразований количество членов полиномов достигало несколько сотен тысяч. Решение данной задачи с использованием целочисленного представления в памяти ЭВМ для числителей и знаменателей коэффициентов в полиноме (25) и проведение расчетов с помощью рациональных дробей позволяет получить абсолютно точные результаты для элементов до L_{77}^{ee} включительно. Данный алгоритм был реализован нами в [14] и применен для расчета электронных кинетических коэффициентов неидеальной плазмы в [12], [15]–[17]. В этом алгоритме основная часть машинного времени тратится на поиск наибольшего общего делителя при сокращении дробей. Вычисление скобочных интегралов более высокого порядка, чем L_{77}^{ee}, требуется ввиду неравномерной сходимости процесса Чепмейа–Энскога для различных типов потенциалов (транспортных сечений) взаимодействия сталкивающихся частиц.

Переход к представлению коэффициентов в виде действительного числа существенно (на несколько порядков) сокращает время расчетов, но приводит к накоплению ошибки округления, которая снижает точность коэффициента на 4–5 порядков (по сравнению с машинной). После проведения интегрирования по каждой из переменных появлялись подобные члены, которые взаимно уничтожались. При представлении в памяти ЭВМ коэффициентов действительного типа накапливалась значительная ошибка округления. Поэтому для оценки вероятности равенства этого коэффициента нулю, проводилось параллельная оценка ошибки вычисления. Если эта ошибка становилась порядка значения коэффициента, то этот коэффициент полинома исключался.

Для оценки точности вычислений в памяти хранилась абсолютная ошибка коэффициента члена ΔK (4 байта), которая вычислялась по общеизвестным формулам:

$$
Z = A + B, \quad Z = A - B, \quad \Delta Z = \Delta A + \Delta B,
$$

$$Z = AB, \quad Z = A/B, \quad \left(\frac{\Delta Z}{Z}\right)^2 = \left(\frac{\Delta A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\Delta B}{B}\right)^2.$$

Полиномы хранились в динамических массивах, каждый элемент массива занимал в памяти 25 байт.

3.1. Реализация элементарных операций в программе

Для выполнения необходимых преобразований были определены следующие элементарные операции над полиномами: сложение, умножение и интегрирование по переменным φ, θ, x. Для уменьшения длины полиномов и, соответственно, требуемых объемов памяти после каждой элементарной операции следовала операция приведения подобных слагаемых.

Ниже приведены использованные алгоритмы, записанные с помощью псевдокода, который напоминает популярные языки программирования (С, Паскаль, Алгол). Величина карниза определяет уровень вложенности оператора. Каждая строка содержит после знака ▷ необходимые пояснения. Иногда действие алгоритма описывается “своими словами”, если так получается яснее. Кроме того, опущены технологические подробности (например, обработка ошибок, операции ввода–вывода), которые необходимы в реальной программе, но могут заслонить существо дела (см. [12]).

Сложение полиномов (C = A + B) выполнялось по алгоритму, который включает операции приведения подобных членов:

```
C ⟵ A          ▷ полином A целиком перебрасывается в полином C
for i ⟵ 1 to Lb      ▷ Lb – длина полинома B
  find ⟵ false        ▷ find – флаг наличия подобного члена в результате
     for j ⟵ 1 to Lc ▷ Lc – длина полинома C
     if α^b[i] = α^c[j]         ▷ если контрольные суммы членов равны
  then find ⟵ true ▷, то подобный член в результате существует
  K^c[j] = K^c[j] + K^b[j]    ▷ наращивание коэффициента полинома
  Вычисление абсолютной ошибки ΔC[j]
  break                        ▷ завершение цикла по полиному C
  if not find                  ▷ если подобный член не найден
  Добавление нового члена в полином C
  Lc ⟵ Lc + 1        ▷ наращивание счетчика длины полинома C
  C[Lc] ⟵ B[i]       ▷ переброска B[i] члена в последний член полинома C
```

В результате реализации этих действий на ЭВМ получаем значения полинома вида

$$U = A - B + C - D = \ldots - 3.038194444444449E\text{-}04x^{14}y^2\cos^2\theta\cos^2\chi -$$
$$- 6.076388888888889E\text{-}04x^{14}y^2\sin\theta\cos\theta\sin\chi\cos\chi\cos\varphi +$$
$$+ 4.340277777777778E\text{-}05x^{13}y^3\cos\theta\cos^2\chi -$$
$$- 3.03819444444444E\text{-}04x^{14}y^2\sin^2\theta\sin^2\chi\cos^2\varphi +$$
$$+ 4.340277777777778E\text{-}05x^{13}y^3\sin\theta\sin\chi\cos\chi\cos\varphi -$$
$$- 4.340277777777778E\text{-}05x^{13}y^3\cos\theta +$$
$$+ 2.604166666666667E\text{-}04x^{13}y^3\cos^3\theta\cos^2\chi +$$
$$+ 5.208333333333333E\text{-}04x^{13}y^3\sin\theta\cos^2\theta\sin\chi\cos\chi\cos\varphi -$$
$$- 1.562500000000000E\text{-}03x^{12}y^4\cos^2\theta\cos^2\chi -$$
$$- 3.125000000000000E\text{-}03x^{12}y^4\sin\theta\cos\theta\sin\chi\cos\chi\cos\varphi + \ldots.$$

Этот результат представляет собой списанную с экрана компьютера часть выражения, получающегося на промежуточном этапе вычислений, связанных с приведением подобных членов (символы “многоточие” означают совокупности всех предыдущих и последующих членов выражения). В зависимости от порядка скобочных интегралов такие промежуточные выражения занимают от нескольких десятков до нескольких тысяч страниц экрана.

Умножение полиномов ($C = AB$) выполнялось по алгоритму, который включает операции приведения подобных членов:

for $i \longleftarrow 1$ **to** La ▷ La – длина полинома A
  for $j \longleftarrow 1$ **to** Lb ▷ Lb – длина полинома B
    $M \longleftarrow a[i]B[j]$ ▷ M – промежуточный член
Вычисление контрольной суммы α^m
Вычисление абсолютной ошибки ΔM
Поиск подобного члена и добавление M в полином C

Вычисление коэффициентов полинома Сонина выполнялось по формуле

$$S_n^{3/2}(x) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_{nj} = \sum_{j=0}^{n} \frac{(-1)^j (2n+3)!!!}{2^{n-j} j!(n-j)!(2j+3)!!!} x^j,$$

где m!!! – произведение всех натуральных нечетных чисел, меньших m.

Вычисление полиномов Сонина ($C = S_n^{3/2}(A)$) от полинома A и формирование полинома C выполнялось по следующему алгоритму:

$C \longleftarrow \alpha\,[n, n]\,E$ ▷ E – единичный полином
for $j \longleftarrow n-1$ **down to** 0
$B \longleftarrow CA$ ▷ B – промежуточный полином
$C \longleftarrow B + \alpha\,[n, j]\,E$

Интегрирование по φ выполнялось по формулам

$$\int_0^{2\pi} \cos^m \varphi d\varphi = \frac{2\pi(m-1)!!!}{m!!}, \quad m \text{ – четное},$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^m \varphi d\varphi = 0, \quad m \text{ – нечетное},$$

где m!! – произведение всех натуральных четных чисел, меньших m. Для выполнения интегрирования полинома A и формирования полинома C использовался следующий алгоритм:

for $i \longleftarrow 1$ **to** La ▷ для каждого члена полинома A
  if $\alpha^m[i, 7] \bmod 2 \neq 0$ ▷ если степень $\cos\varphi$ нечетная
  then continue ▷ то завершить итерацию
  else ▷ если степень, $\cos\varphi$ четная
    $M \longleftarrow A[i]$ ▷ M – промежуточный член

$$K^m \longleftarrow \frac{2K^m\left(\alpha^m[7]-1\right)!!!}{\left(\alpha^m[7]\right)!!}$$

$\alpha^m[i, 7] \longleftarrow 0$ ▷ обнуление степени $\cos\varphi$
$\alpha^m[i, 0] \longleftarrow \alpha^m[i, 0] + 2$ ▷ умножение на π
Вычисление контрольной суммы α^m
Вычисление абсолютной ошибки ΔM
Поиск подобного члена и добавление члена M в полином C

Интегрирование по x выполнялось для четных степеней (члены, содержащие нечетные степени x, взаимно уничтожались) по формуле

$$\int_0^\infty x^m e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}(m-1)!!!}{2^{m/2}-1}.$$

Интегрирование по θ выполнялось по формулам

$$\int_0^\pi \cos^m\theta \sin^n\theta d\theta = 0, \quad m \text{ — нечетное},$$

$$\int_0^\pi \cos^m\theta \sin^n\theta d\theta = \frac{(n-1)!!!(m-1)!!!}{(m+n)!!}, \quad n \text{ — четное},$$

$$\int_0^\pi \cos^m\theta \sin^n\theta d\theta = \frac{2(n-1)!!(m-1)!!!}{(m+n)!!!}, \quad n \text{ — нечетное}.$$

Алгоритм интегрирования по x и θ аналогичен алгоритму интегрирования по φ. Результаты вычисления интеграла с помощью ЭВМ имеют вид

$$G_{rn}(y, \chi) = \sum_i \sum_j \int_0^\infty \exp(-x^2) dx \int_0^\pi \int_0^{2\pi} V_i U_j d\varphi =$$

$$= \ldots + 1.640625E+00\sqrt{\pi^3}y^2\cos^2\chi +$$

$$+ 1.640625E+00\sqrt{\pi^3}y^2\sin^2\chi +$$

$$+ 3.2259375E+00\sqrt{\pi^3}y^4 -$$

$$- 3.2259375E+00\sqrt{\pi^3}y^4\cos^2\chi -$$

$$- 9.296875E-01\sqrt{\pi^3}y^4\sin^2\chi +$$

$$+ 1.09375E+00\sqrt{\pi^3}y^6 -$$

$$- 1.09375E+00\sqrt{\pi^3}y^6\cos^2\chi +$$

$$+ 2.18775E-01\sqrt{\pi^3}y^6\sin^2\chi + \ldots.$$

В данном примере символы “многоточие” также обозначают совокупности всех предыдущих и последующих членов выражения.

Исключение $\sin^m\chi$ из полиномов выполнялось по формуле (нечетные степени $\sin\chi$ в расчетах не встречались) $\sin^m\chi\cos^n\chi = \sin^{m-2}\chi\cos^n\chi - \sin^{m-2}\chi\cos^{n+2}\chi$. Для формирования полинома C из полинома A использовался следующий алгоритм:

Repeat
FlagSin ⟵ False ▷ FlagSin – флаг наличия членов с сомножителем $\sin\chi$
for i ⟵ 1 **to** La ▷ La – длина полинома A
if $\alpha^a[i, 3] > 0$ **then** ▷ если степень, $\sin\chi$ больше 0
FlagSin ⟵ True ▷ член с сомножителем $\sin\chi$ в полиноме существует
$M \longleftarrow A[i]$ ▷ M – промежуточный член
$\alpha^m[3] \longleftarrow \alpha^m[3] - 2$ ▷ вычисление члена, содержащего $\sin^{m-2}\chi\cos^n\chi$
вычисление контрольной суммы α^m
поиск подобного и добавление члена M в полином C $K^m \longleftarrow -K^m$
$\alpha^m[3] \longleftarrow \alpha^m[4] + 2$ вычисление члена, содержащего $-\sin^{m-2}\chi\cos^{n+2}\chi$
вычисление контрольной суммы α^m
поиск подобного и добавление члена M в полином C
$A \longleftarrow C$ ▷ полином C целиком перебрасывается в полином A

Until FlagSin $\quad\triangleright$ завершение процедуры, если полином не содержит членов с сомножителем $\sin\chi$

Выделение $1-\cos^m\chi$ из полиномов выполнялось по формуле $\cos^m\chi = (1-\cos^m\chi)+1$, при этом использовался алгоритм, аналогичный алгоритму исключения $\sin^m\chi$.

Удаление нулевых членов. В ходе расчетов многие члены взаимно уничтожались и результат содержал при малых значениях индексов (r, $n<3$) члены с нулевыми коэффициентами. Такие члены из результата удалялись. При больших значениях индексов r и n результат содержал члены с коэффициентами $\approx 10^{-15}$, которые не содержали сомножителей вида $1-\cos^m\chi$. Эти признаки говорили о том, что такие члены появляются в результате ошибок округления.

Малая величина коэффициента члена не может служить критерием удаления члена из результата, поскольку коэффициенты полиномов Сонина высоких порядков могут иметь малые значения. Поэтому в ходе расчетов при каждой элементарной операции со значением коэффициентов членов полиномов проводилась оценка абсолютной ошибки и член из результата удалялся только тогда, когда относительная ошибка была ≈ 1.

Кроме того, оценка ошибки показала, что в ходе расчетов точность вычисления коэффициента может значительно снизиться (до 5 порядков по сравнению с машинной точностью). Поэтому в настоящей работе приведены только правильные значащие цифры в результатах (с учетом ошибок округления).

3.2. Алгоритм программы

Алгоритм вычисления выражения

$$
\begin{aligned}
U_r = {} & S_r^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\eta + y^2/2)[x^2 - xy(\cos\eta + \cos\theta) + y^2\cos\chi] - \\
& - S_r^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta + y^2/2)(x^2 - xy\cos\theta + y^2) + \\
& + S_r^{3/2}(x^2/2 + xy\cos\eta + y^2/2)[x^2 + xy(\cos\eta - \cos\theta) + y^2\cos\chi] - \\
& - S_r^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta + y^2/2)[x^2 + y^2], \\
V_n = {} & -S_n^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta + y^2/2)x^2\sin\theta, \\
W_{rn} = {} & U_rV_n, \\
F_{rn}(y,\chi) = {} & \int_0^\infty \exp(-x^2)dx\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi} W_{rn}d\varphi, \\
L_{rn}^{ee} = {} & \frac{16}{\pi}n_e\sqrt{\frac{T}{m_e}}\int_0^\infty y^3\exp(-y^2)dy\int_0^\pi b\left|\frac{db}{d\chi}\right|F_{rn}(y,\chi)d\chi
\end{aligned}
\tag{26}
$$

можно записать в следующем виде:

Вычисление полинома U
Вычисление полинома V
Вычисление полинома W
Интегрирование по φ
Интегрирование θ
Интегрирование по x (27)
Исключение $\sin^m\chi$
Выделение $1-\cos^m\chi$
Удаление нулевых членов
Интегрирование по θ

Нетрудно убедиться, что выражение (26) можно представить в виде

$$F_{rn}(y,\chi) = \sum_i\sum_j\int_0^{\infty}\exp(-x^2)dx\int_0^{\pi}d\theta\int_0^{2\pi}V_iU_jd\varphi. \tag{28}$$

Проведение расчетов по формуле (28) не требует формирования полинома W и значительных затрат на поиск подобных членов в результирующем полиноме, поскольку полином $F_{rn}(y, \chi)$ является достаточно коротким. Но при этом необходимо выполнять умножение, интегрирование по трем переменным и приведение подобных членов в одной подпрограмме, которая заменит блок подпрограмм, выделенных в алгоритме (27) в рамку. Алгоритм этой подпрограммы имеет вид

for $i \longleftarrow 1$ **to** Lv ▷ Lv – длина полинома V
for $j \longleftarrow 1$ **to** Lu ▷ Lu – длина полинома U
$M \longleftarrow A[i]B[j]$ ▷ M – промежуточный член
Интегрирование члена M по φ
Интегрирование члена M по θ
Интегрирование члена M по x
Вычисление контрольной суммы α^m
Вычисление абсолютной ошибки ΔM
Поиск подобного члена и добавление M в полином $F_{rn}(y, \chi)$.

3.3. Контроль правильности выполнения операций

Контроль правильности выполнения операций проводился путем сравнения результатов численного и аналитического расчетов. Результаты интегрирования для коэффициентов до четвертого порядка сравнивались с коэффициентами, рассчитанными в [13], а для пятого-седьмого порядков – с коэффициентами, рассчитанными нами в [12], [14]–[17]. Сравнение осуществлялось с помощью графического отображения формул в общепринятом виде.

На схеме (см. фигуру) представлен макет стартовой страницы программы. В зависимости от введенного значения степени и порядка для интеграла столкновении, мы получаем общий результат данного программного продукта или его отдельные слагаемые.

3.4. Результаты расчетов

При помощи данной программы удалось рассчитать скобочные интегралы вплоть до 20-го порядка. Конечный результат аналитических преобразований был получен в виде

$$L_{rn}^{ee} = 8n_e\sqrt{\frac{T}{\pi m_e}}\int_0^{\infty}y^3\exp(-y^2)\left[\sum_k\sum_i K_k^i y^{2i}\sigma^{(2k)}(y^2)\right]dy, \tag{29}$$

где

$$\sigma^{(2k)}\left(y^2\right) = 2\pi\int_0^{\pi}b\left|\frac{db}{d\chi}\right|\left(1-\cos^{2k}\chi\right)d\chi$$

является транспортным сечением электрон-электронного рассеяния порядка $2k$. Двукратный интеграл (29) может быть использован при численном интегрировании по y и χ для расчета электронных кинетических коэффициентов плазмы.

В результате проведенных расчетов получен массив числовых данных по коэффициентам K_k^i в подынтегральном выражении (29) до 20-го порядка включительно. Ввиду его огромной величины приводятся для примера в таблице лишь коэффициенты 8-го приближения (здесь Mist – погрешность, y – степень, D – степень при $\cos\chi$).

Коэффициенты интеграла столкновений	
Параметры	Справка
$r = 7$	$n = 7$
$H = S_r^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta\cos\chi - xy\sin\theta\sin\chi\cos\varphi + y^2/2)$	
$A = H[x^2 - xy\cos\theta\cos\chi - xy\sin\theta\sin\chi\cos\varphi - xy\cos\theta + y^2\cos\chi]$	
$L_r = S_r^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta + y^2/2)$	$B = L_r(x^2 - 2xy\cos\theta + y^2)$
$E = S_r^{3/2}(x^2/2 + xy\cos\theta\cos\chi + xy\sin\theta\sin\chi\cos\varphi + y^2/2)$	
$C = E[x^2 + xy\cos\theta\cos\chi + xy\sin\theta\sin\chi\cos\varphi - xy\cos\theta + y^2\cos\chi]$	
$Z = S_r^{3/2}(x^2/2 + xy\cos\theta + y^2/2)$	$D = Z[x^2 + y^2]$
$U = A - B + C - D$	
$L_n = S_n^{3/2}(x^2/2 - xy\cos\theta + y^2/2)$	$V = -L_n x^2/(2\sin\theta)$
$G_{rn}(y, x) = \sum_i\sum_j \int_0^\infty \exp(-x^2)dx \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} V_i U_j d\varphi$	$W = UV$
$F_{rn}(y, x) = \mathrm{Convert}(G_{rn}(y, x))$	
Выход	

Фигура

ВЫВОДЫ

В данной работе создана система аналитических вычислений на ЭВМ скобочных интегралов для сталкивающихся частиц одинаковых масс. Описана реализация программы аналитических преобразований, с помощью которой удалось вычислить матричные коэффициенты высших порядков до 20 включительно. Полученный массив числовых коэффициентов в скобочных интегралах будет использован в дальнейшем для расчета электронных кинетических коэффициентов неидеальной плазмы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортов В.Е., Якубов И.Т.* Неидеальная плазма. М.: Энергоатомиздат, 1994.
2. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд.-во иностр. лит. 1960.
3. *Климонтович Ю.Л.* Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. М.: Наука, 1975.
4. *Цветков И.В.* Применение численных методов для моделирования процессов в плазме: учебное пособие. М.: МИФИ, 2007.
5. *Лагарьков А.Н., Сергеев В.М.* Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физ. наук. 1978. Т. 125. Вып. 3. С. 409–448.
6. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
7. *Кочарян А.Э.* Магнитная гидродинамика плазмы сложного химического состава: Дис. ... канд. физ.-матем. наук. Долгопрудный: МФТИ. 2007. 140 с.
8. Очерки физики и химии низкотемпературной плазмы / Под ред. Л.С. Полака. М.: Наука, 1971.
9. *Ferziger J.H., Kaper H.G.* Mathematical theory of transport processes in gases. Amsterdam – London: N-H PC, LTD, 1972.
10. *Гердт В.П., Тарасов О.В., Ширков Д.В.* Аналитические вычисления на ЭВМ в приложении к физике и математике // Успехи физ. наук. 1980. Т. 130. Вып. 1. С. 113–147.

11. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2007.
12. *Выжол Ю.А., Муленко И.А., Федосеева Е.В., Хомкин А.Л.* Определение вклада электрон-электронных столкновений в проводимость полностью ионизированной плазмы для различных моделей расчета транспортных сечений // Український фіз. журнал. 1997. Т. 42. № 9. С. 1083–1090.
13. Движущаяся плазма / Под ред. Е.В. Кудрявцева, В.П. Ионова. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
14. *Выжол Ю.А., Федосеева Е.В.* Расчет матричных элементов в интеграле столкновений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1998. Т. 3. № 11. С. 1884–1890.
15. *Заика Е.В., Муленко И.А., Хомкин А.Л.* Электропроводность полностью ионизованной неидеальной плазмы с экранированным взаимодействием между зарядами // Теплофиз. высоких т-р. 2000. Т. 3. № 1. С. 5–11.
16. *Заика Е.В., Муленко И.А., Хомкин А.Л.* Электропроводность полностью ионизованной магнитоактивной плазмы с экранированным взаимодействием между зарядами // Теплофиз. высоких т-р. 2000. Т. 38. № 6. С. 853–861.
17. *Выжол Ю.А., Муленко И.А., Хомкин А.Л.* Равновесные и кинетические свойства атомарно-молекулярной плазмы // Инж.-физ. журнал. 1999. Т. 72. № 3. С. 1587–591.