Е. В. Ахматская, Л. А. Пожар, Вычисление транспортных интегралов столкновений для леннард-джонсовского газа, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1986, том 26, номер 4, 620–626 что $d=\|K^n\|^{1/n}<1$. Следовательно, для произвольного целого $m>0$ имеем

$$\|K_L^m\|=\|K^{n[m/n]+r}\|\leqslant C_1 d^m, \qquad \left\|\sum_{l=m+1}^{\infty} K_L{}^l\right\|\leqslant C_1\sum_{l=m+1}^{\infty} d^l = C_2 d^m.$$

Отсюда следует, что при вычислении (g, φ) обрыв траектории на m-м члене приводит к систематической ошибке порядка Cd^m.

Предположим далее, что функция φ ограничена и $p/q=\mathrm{const}$. При фиксированном числе N траекторий дисперсия статистической оценки отрезка ряда (4) растет не быстрее, чем Cm, так как дисперсии случайных величин $\varphi(x_n)$ равномерно ограничены некоторой константой C:

$$\mathbf{D}[\varphi(x_0)-\varphi(x_1)+\ldots\pm\varphi(x_m)]\leqslant\mathbf{D}[\varphi(x_0)]+\ldots+\mathbf{D}[\varphi(x_m)]\leqslant C(m+1).$$

С другой стороны, при фиксированном m дисперсия оценки отрезка ряда (4) убывает с ростом N, как const/N.

Для достижения заданной точности расчета необходимо сначала выбрать достаточно большое m (длину траектории), затем количество N траекторий.

Описанный метод применялся для решения внутренней задачи Дирихле $\Delta u=0$, $u|_\Gamma=\varphi$, где Γ – граница полушария

$$D=\{|x|\leqslant 1, x_3\geqslant 0\}, \qquad \varphi(x)=[x_1^2+x_2^2+(x_3+1)^2]^{-1}.$$

Решение ищется в точке $x_0=(0, 0, 0.5)\in D$ (точное значение $u(x_0)={}^2/_3$). Задача сводится к вычислению скалярного произведения $(\mu, \mathscr{K}_{x_0})$, где μ – решение интегрального уравнения разрыва потенциала двойного слоя $\mu=-K\mu+\varphi$, K – оператор со стохастическим ядром $\mathscr{K}(x, y)$; $x, y\in\Gamma$; $\mathscr{K}_{x_0}(y)=\mathscr{K}(x_0, y)$, $y\in\Gamma$,– вероятностная плотность на Γ.

Значения дисперсии $\mathbf{D}$ оценки для различных m при количестве траекторий $N=15\,000$ таковы:

m	3	4	5	6	7	8	9	10
$\mathbf{D}\times 10^6$	21	26	31	36	41	45	51	55

Видно, что с ростом m дисперсия растет линейно.

Литература

1. *Марчук Г. И. и др.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976.

Поступила в редакцию 1.VIII.1984
Переработанный вариант 18.VII.1985

УДК 519.6:517.589

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ИНТЕГРАЛОВ СТОЛКНОВЕНИЙ ДЛЯ ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОГО ГАЗА

АХМАТСКАЯ Е. В., ПОЖАР Л. А.

(Харьков)

Рассмотрены основные вопросы, возникающие при вычислении приведенных транспортных интегралов столкновений кинетической теории газов в тех случаях, когда взаимодействие между молекулами описывается потенциалом (6–12) Леннарда – Джонса. Предложен метод вычисления этих интегралов с заданной точностью.

§ 1. Введение

Коэффициенты переноса газов в классической кинетической теории могут быть получены посредством решения уравнения Больцмана методом Чепмена – Энскога. При этом они выражаются через приведенные транспортные интегралы столкновений $\Omega^{(l, s)}(T)$ (см. [1]). В случае, когда взаимодействие молекул газа описывается потенциалом (6–12) Леннарда – Джонса, $\Omega^{(l,s)}(T)$ определяются следующим образом:

$$\Omega^{(l,s)}(T)=\frac{2(l+1)}{\pi[1+2l-(-1)^l](s+1)!}\int_0^\infty e^{-x}x^{s+1}Q_l(Tx)\,dx, \tag{1.1}$$

где

$$Q_l(g^2)=2\pi\int_0^\infty b[1-\cos^l\chi(b,g)]\,db, \tag{1.2}$$

$$\chi(b,g)=\pi-2b\int_{r_0}^\infty\left\{r^2\left[1-\frac{b^2}{r^2}-\frac{4}{g^2}\left(\frac{1}{r^{12}}-\frac{1}{r^6}\right)\right]^{1/2}\right\}^{-1}dr, \tag{1.3}$$

$$l,s=1,2,\dots,n,\qquad n\in Z,\qquad x,T,g,b,r_0,r\in R,\qquad T,r_0>0.$$

Здесь T, g, b, r, r_0 – безразмерные величины, имеющие смысл приведенных температуры, абсолютной величины относительной скорости движения молекул, прицельного параметра, расстояния между молекулами и расстояния максимального сближения молекул соответственно.

Нижний предел интегрирования r_0 в (1.3) соответствует максимальному корню уравнения

$$1-b^2/r^2-4(r^{-12}-r^{-6})/g^2=0, \tag{1.4}$$

и, следовательно, $\chi(b, g)$ является несобственным интегралом, имеющим особенность на нижнем пределе.

В настоящее время известно несколько методов приближенного вычисления Ω-интегралов $\Omega^{(l,s)}(T)$ (см. [2]–[4]), однако ни один из них не позволяет достоверно оценить погрешность вычислений. Кроме того, методы, предложенные в [2], [3], по-видимому, не позволяют получить значения Ω-интегралов с точностью, превышающей 10^{-4}, что необходимо для вычисления коэффициентов переноса газов во втором и более высоких приближениях Чепмена – Энскога.

Существует несколько причин, по которым создание метода вычисления Ω-интегралов с заданной точностью является достаточно сложной задачей. Прежде всего это наличие особенности в интеграле из (1.3) при тех значениях параметров b и g, которые характеризуют так называемое явление «орбитирования» [1].

В этих случаях, как будет показано ниже, функция $\chi(b, g)$ ведет себя, как $y^{-1/2}$ или $\ln y$ при $y\to 0$, $y\in R^+$, а подынтегральная функция в (1.2) осциллирует, как $\cos^l x$ при $x\to\infty$, $x\in\bar{R}$ (см. [4]). Достаточно сложна и оценка погрешности вычислений при кратном интегрировании.

§ 2. Исследование функции $\chi(b, g)$

Вопрос о характере особенностей подынтегральной функции из (1.3) в точке r_0 сводится к выяснению кратности корня r_0 уравнения (1.4). Легко установить, что максимальный корень r_2 этого уравнения кратности 2 имеет место в тех случаях, когда

$$0<g<2/5^{1/2}, \tag{2.1}$$

$$b=\frac{2\sqrt{3}}{5^{1/3}g}\left[1-\left(1-\frac{5g^2}{4}\right)^{1/2}\right]^{1/3}\left[\frac{3}{5}+\frac{2}{5}\left(1-\frac{5g^2}{4}\right)^{1/2}\right]^{1/2}. \tag{2.2}$$

При каждом значении g из (2.1) и соответствующем ему b из (2.2) корень r_2 определяется выражением

$$r_2=5^{1/6}/[1-(1-5g^2/4)^{1/2}]^{1/6}. \tag{2.3}$$

Можно показать, что существует единственный корень r_3 кратности 3 уравнения (1.4):

$$r_3=5^{1/6}, \tag{2.4}$$

при этом

(2.5) $g=2/5^{1/2}, \quad b=3/5^{1/3}$.

Корней кратности выше третьей (1.4) не имеет.

Исследование поведения подынтегральной функции в (1.3) с помощью разложений в ряды Тейлора в окрестностях кратных максимальных корней (1.4) показало, что $\chi(b,g)$ вблизи корней (2.3) ведет себя как $\ln y$ при $y\to 0$, $y\in R^+$, в то время, как в бесконечно малой окрестности (2.4) будет $\chi(b,g)\sim y^{-1/2}$, где $y\to 0$. Параметры b и g, определяемые (2.1), (2.2), (2.5), будем называть параметрами орбитирования и обозначать через b_0 и g_0.

Простые корни r_1 уравнения (1.4) могут быть определены численно. Они не приводят к особенностям $\chi(b,g)$. Анализ поведения функции

(2.8′) $q=2/q^2-2(5b^2/18)^3$.

и ее производной, а также применение теоремы об оценке положительных корней алгебраического уравнения к (1.4) позволили выделить такие отрезки $[c_r, d_r]$, $r_1\in\in[c_r,d_r]$, $c_r, d_r\in R^+$, в пределах которых не будет находиться ни одного отличного от r_1 корня (1.4). В зависимости от значений параметров b и g, которые, конечно, отличны от (2.1), (2.2), (2.5), эти трудоемкие, но полезные при вычислениях оценки выглядят следующим образом:

(2.7) $b\leqslant 1, \quad \sqrt{2}[(1+g^2)^{1/2}-1]^{1/2}/g<r_1\leqslant 1$,

(2.8) $b>1$;

здесь

$$1<r_1<d_2, \quad F(d_1)F(d_2)\max\{\mathrm{sign}[F(d_1)],\ \mathrm{sign}[F(d_2)]\}\geqslant 0,$$

$$d_1<r_1<d, \quad F(d_1)F(d_2)\max\{\mathrm{sign}[F(d_1)],\mathrm{sign}[F(d_2)]\}<0,$$

$$d=\begin{cases}1+b, & b\geqslant 2/g,\\ 1+2/g, & b<2/g,\end{cases}$$

$$d_1=\max\left\{\left(d_3+\frac{5b^2}{18}\right)^{1/2}, \left(d_4+\frac{5b^2}{18}\right)^{1/2}\right\},$$

$$d_2=\min\left\{\left(d_3+\frac{5b^2}{18}\right)^{1/2}, \left(d_4+\frac{5b^2}{18}\right)^{1/2}\right\}.$$

Величины d_3 и d_4, в зависимости от знака параметра D, где $D=1/g^4-2(5b^2/18)^3/g^2$, определяются ниже.

Так, если $D>0$ (или $b<[54/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3}$), то

$$d_3=1-5b^2/18, \qquad d_4=\begin{cases}d_3, & |x_1|>5b^2/18,\\ x_1, & |x_1|\leqslant 5b^2/18,\end{cases}$$

где $x_1=(\sqrt{D}-q/2)^{1/3}+(-q/2-\sqrt{D})^{1/3}$,

(2.8′) $q=2/q^2-2(5b^2/18)^3$.

Если $D=0$ (или $b=[54/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3}$), то $d_3=1-5b^2/18$, $d_4=(q/2)^{1/3}$, где q удовлетворяет уравнению (2.8′).

Если $D<0$ (или $b>[54/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3}$), то

$$d_4=\begin{cases}x_2, & b\neq[54\sqrt{2}/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3},\\ \sqrt{3}|D|^{1/6}, & b=[54\sqrt{2}/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3},\end{cases}$$

где $x_2=2[(q/2)^2+|D|)^{1/6}\,\mathrm{Re}\,[\exp(-2|D|^{1/2}i/(3q))]$;

$$d_3=\begin{cases}d_5, & |d_5|\leqslant 5b^2/18,\\ 1-5b^2/18, & |d_5|>5b^2/18,\end{cases}$$

и

$$d_5=\begin{cases}x_3, & b\neq[54\sqrt{2}/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3},\\ 0, & b=[54\sqrt{2}/(5\sqrt{5}\,g)]^{1/3},\end{cases}$$

где

$$x_3=[(q/2)^2+|D|]^{1/6}\{\sqrt{3}\,\mathrm{Im}[\exp(-2|D|^{1/2}i/(3q))]-\mathrm{Re}[\exp(-2|D|^{1/2}i/(3q))]\};$$

$$b_0=0, \qquad r_1=2^{1/6}[(1+q^2)^{1/2}-1]^{1/6}q^{-1/3}. \tag{2.9}$$

Формулы (2.3), (2.4) и оценки (2.7)–(2.9) позволяют сократить время вычисления корней r_1 и значительно упростить процедуру численного решения уравнения (1.4) по сравнению с предложенными в [2]–[4].

§ 3. Процедура интегрирования

Произведем в интеграле I_χ из (1.3) замену $z=r_0/r$. Тогда

$$I_\chi=\int_0^1\frac{(1-z^2)^{-1/2}}{r_0}\left\{(1-z^2)\left[1-\frac{z^2b^2}{r_0^2}-\frac{4}{g^2}\left(\frac{z^{12}}{r_0^{12}}-\frac{z^6}{r_0^6}\right)\right]^{-1}\right\}^{1/2}dz. \tag{3.1}$$

Теперь для вычисления интеграла в первой части (3.1) в тех случаях, когда $r_0=r_1$, можно применить квадратурную формулу Гаусса – Чебышёва [5]; в результате получим

$$I_\chi=\frac{\pi}{2Nr_0}\sum_{j=1}^{N}\left\{(1-z_j^2)\left[1-\frac{z_j^2b^2}{r_0^2}-\frac{4}{g^2}\left(\frac{z_j^{12}}{r_0^{12}}-\frac{z_j^6}{r_0^6}\right)\right]^{-1}\right\}^{1/2}+R_N, \tag{3.2}$$

где $z_j=\cos[(2j-1)\pi/(2N)]$.

Исходя из вида z_j и поведения подынтегральной функции в (3.1) удалось оценить максимальное число узлов N в (3.2), необходимое для интегрирования I_χ с заданной точностью R_N:

$$N\sim\{\pi r_1^{1/2}[4R_N(6\varepsilon/5^{1/3}-\varepsilon^2)^{1/2}]^{-1/2}\}, \qquad 0<\varepsilon\ll1, \tag{3.3}$$

где квадратные скобки обозначают целую часть числа.

Вычисление $\chi(b,g)$ для параметров b_0 и g_0 (т. е. в тех случаях, когда $r_0=r_2, r_3$), а также выбор величины ε будут обсуждаться в § 4.

Возможность использования для численного интегрирования известных (см. [5]–[7]) квадратурных формул сильно ограничивается оценками погрешности вычислений. Для большинства упомянутых квадратурных формул эти оценки выражаются через производную подынтегральной функции n-го порядка, что обычно неудобно для практического использования. В последнее время получены асимптотические формулы для оценки погрешности квадратур E_n через подынтегральную функцию [8]–[12]. Для вычисления величин $Q_l(g^2)$ и $\Omega^{(l,s)}(T)$ была использована квадратурная формула Кленшоу – Кертиса [8].

$$I_n\equiv\int_{-1}^{1}f(x)\,dx=\sum_{p=0}^{n}B_pf(\cos(\pi p/n))+E_n, \tag{3.4}$$

где

$$B_0=B_n=(n^2-1)^{-1},$$

$$B_p=\frac{2(-1)^p}{n^2-1}+\frac{4}{n}\sin(\pi p/n)\sum_{j=1}^{[n/2]}\frac{\sin[(2j-1)\pi p/n]}{2j-1}, \qquad p=1,2,\ldots,n-1, \quad p\in Z,$$

$$E_n=\frac{16n}{(n^2-9)(n^2-1)}\{\max[|a_n|,\ {}^1/_2|a_{n-2}|,\ {}^1/_8|a_{n-4}|]\},$$

$$a_{n-2k}=\frac{2}{n}\sum_{\rho=0}^{n}{}''(-1)^\rho f(\cos(\pi\rho/n))\cos(2\pi k\rho/n),$$

$$k=0,1,2,$$

где n – число квадратурных узлов, а штрихи у знака суммы означают, что первый и последний ее члены берутся с коэффициентом $^1/_2$.

Интеграл (3.4) посредством замены $y=(x+1)/2$ приводится к виду

$$(3.5)\qquad I_n=\int\limits_0^1 f(y)\,dy=\frac{1}{2}\sum_{p=0}^{n} B_p f(y(\cos(\pi p/n)))+E_n.$$

Отметим, что если в точке 0 подынтегральная функция $f(y)$ в (3.5) имеет особенность, но при этом I_n сходится, то он может быть вычислен следующим образом:

$$(3.6)\qquad I_n=\frac{1}{2}\sum_{p=0}^{n-1} B_p f(y_p)+\varepsilon_n,$$

где

$$y_p=y(\cos(\pi p/n)),\quad \varepsilon_n\leqslant E_n+B_n|f(y_{n-1})-f(y_{n-2})|/2.$$

§ 4. Вычисление $Q_l(g^2)$ в случае орбитирования

В тех случаях, когда параметр g принимает значения (2.1), (2.5), имеем

$$(4.1)\qquad Q_l(g^2)=2\pi(I_1+I_2+I_3+I_4),$$

где через I_i, $i=1,\ldots,4$, обозначены интегралы по промежуткам $[0,b_0-\varepsilon]$, $[b_0-\varepsilon,b_0]$, $[b_0,b_0+\varepsilon]$, $[b_0+\varepsilon,\infty]$ соответственно, b_0 здесь – параметр орбитирования из (2.2), (2.5).

Интегралы I_1 и I_4 легко привести к виду (3.5) и вычислить с помощью квадратурной формулы (3.6). Для вычисления интегралов I_2 и I_3 используем разложение в ряд Тейлора подынтегральной функции в δ-окрестности кратного корня r_0 (см. (2.3), (2.4)) уравнения (1.4), $0<\delta\ll 1$. Из (2.3) и (2.2) следует, что если $r\in\in[r_0-\delta,r_0+\delta]$, то $b\in[b_0-\varepsilon,b_0+\varepsilon]$, где $\varepsilon\simeq 3\delta/5^{1/2}$. На практике удобнее задавать величину ε, а δ выражать через ε.

Оценивая остаточный член S_n в разложении подынтегральной функции в (1.3) в δ-окрестности точки r_0, а также вклад этого члена в интеграл (1.3) и выбирая δ таким образом, чтобы $S_n\equiv S_n(\delta)<\varepsilon_2$ (где ε_2 – требуемая погрешность вычисления интеграла (1.2) с помощью квадратурной формулы (3.4)), получаем следующую аппроксимацию функции $\chi(b,g)$ на отрезках $[b_0-\varepsilon,b_0]$, $[b_0,b_0+\varepsilon]$:

$$(4.2)\qquad \chi(b,g)=[c\,\mathrm{sign}\,(b-b_0)(b^2-b_0^2)^{-1}]^{1/2},\qquad c=\mathrm{const}.$$

Теперь можно вычислить интегралы I_2 и I_3 аналитически:

$$(4.3)\qquad I_\alpha=\mathrm{sign}\,(b_0-b_1)(b_0^2-b_1^2)\{1-\cos^l[\chi(b_1,g)]-(l/2^{(l-1)})\chi^2(b_1,g)J(S,l)\}/2,$$

где $\alpha=2,3$, $J(S,l)=S(l)$, $l=1,2$,

$$b_1=\begin{cases} b_0-\varepsilon, & \alpha=2,\\ b_0+\varepsilon, & \alpha=3,\end{cases}$$

$$(4.3')\qquad J(S,l)={\sum_{i=m}^{l-2}}{}' J(S,i)+J(S',l-1),\qquad l>2,$$

$$S(a)=-\sin[a\chi(b_1,g)]\chi^{-1}(b_1,g)+a\,\mathrm{Ci}\,[-a\chi(b_1,g)],\quad S'(a)=S(a+1),$$

$$a=\begin{cases} 2j+1, & 0\leqslant j\leqslant(l-2)/2,\quad l-1 \text{ нечетное},\\ 2j', & 1\leqslant j'\leqslant(l-1)/2,\quad l-1 \text{ четное}.\end{cases}$$

В (4.3′) штрих у знака суммы означает, что суммирование производится по четным i ($m=2$), если l четно, и по нечетным i ($m=1$), если l нечетно.

Таким образом можно контролировать погрешность вычисления $Q_l(g^2)$ в случае параметров орбитирования. Отметим, что в (3.3) величина ε выбирается так, как описано выше.

§ 5. Оценка погрешности вычисления $\Omega^{(l,s)}(T)$

Погрешность ε_ω вычисления $\Omega^{(l,s)}(T)$ определяется вкладами ошибок вычисления каждого из интегралов (1.1) – (1.3). Рассмотрим интеграл

$$(5.1)\qquad I_\omega\equiv\int\limits_0^\infty e^{-x}x^{s+1}Q_l'(Tx)\,dx,$$

где $Q_l'(Tx)=Q_l(Tx)+\varepsilon_q$, а ε_q – погрешность вычисления (1.2). Тогда (5.1) можно переписать в виде

$$(5.2)\qquad I_\omega=\int\limits_0^\infty e^{-x}x^{s+1}Q_l(Tx)\,dx+\varepsilon_q\int\limits_0^\infty e^{-x}x^{s+1}\,dx.$$

Обозначая через I_ω^N первое слагаемое в правой части (5.2), вычисленное с помощью квадратурных формул Кленшоу – Кертиса с погрешностью ε_1, получаем

$$(5.3)\qquad \int\limits_0^\infty e^{-x}x^{s+1}Q_l(Tx)\,dx=I_\omega^N+\varepsilon_1-\varepsilon_q(s+1)!$$

Из (1.2), (1.3) следует, что $\varepsilon_q=\varepsilon_q(\varepsilon_3)$, где ε_3 – погрешность вычисления интеграла в (1.3). Оценим далее разность Δ_q:

$$\Delta_q\equiv 2\pi\int\limits_0^\infty b\left|\cos^l[\chi(b,g)+\varepsilon_3]-\cos^l\chi(b,g)\right|db.$$

Учитывая, что $0<\varepsilon_3\ll 1$, в результате простых преобразований получаем оценку $\Delta_q\sim 3\pi l\varepsilon_3$. Тогда

$$(5.4)\qquad \varepsilon_q\sim 3\pi l\varepsilon_3+\varepsilon_2,$$

где ε_2 – умноженная на 2π погрешность квадратур, использованных при вычислении интеграла в (1.2). Из (5.3) и (5.4) легко получить, что погрешность ε_0 вычисления интеграла в (1.1) задается соотношением $\varepsilon_0\sim|\varepsilon_1+(3\pi l\varepsilon_3+\varepsilon_2)(s+1)!|$ и погрешность вычисления $\Omega^{(l,s)}(T)$ имеет вид

$$(5.5)\qquad \varepsilon_\omega\sim 2(l+1)\,|\varepsilon_1+(3\pi l\varepsilon_3+\varepsilon_2)(s+1)!|\,\{\pi[1+2l-(-1)^l](s+1)!\}^{-1}.$$

Оценка (5.5) остается справедливой и для точности вычисления $\Omega^{(l,s)}(T)$ методом, предложенным в [4].

Выражение (5.5) для ε_ω можно упростить:

$$\varepsilon_\omega<\varepsilon_1/(s+1)!+(3l+1)\varepsilon_3+\varepsilon_2.$$

Отсюда следует, что величина ε_ω определяется прежде всего погрешностью ε_3 вычисления $\chi(b,g)$ из (1.3), причем вклад последней пропорционален l.

В качестве примера в таблице приводятся результаты вычисления величин $\Omega^{(l,s)}(T)$ при $l=1$ и $s=1, 2, 3$ для $T=30$ методом, предложенным выше (Ω_1), и наиболее распространенным в приложениях методом из [2] (Ω_2).

$\Omega^{(l,s)}$	Ω_1	Ω_2
$\Omega^{(1,1)}$	0.623475	0.6232
$\Omega^{(1,2)}$	0.591255	0.5909
$\Omega^{(1,3)}$	0.568379	0.5680

Алгоритм расчета $\Omega^{(l,s)}(T)$, предложенный в [2], дает наиболее высокую точность вычислений при $T>10$. Тем не менее, как следует из таблицы, даже при $T=30$ его точность равна 10^{-3}. При уменьшении величины T вклад погрешностей вычисления $Q_l(g^2)$ вблизи точек орбитирования (2.1)–(2.5) в случае метода из [2] существенно возрастает, а при $T<1$ точность вычисления $\Omega^{(l,s)}(T)$ этим методом не превосходит 10^{-2}.

Литература

1. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.
2. *Hirshfelder J. O., Bird R. B., Spotz E.* The transport properties for non-polar gases.– J. Chem. Phys.. 1948, v. 16, № 10, p. 968–981.

3. *Smith F. J., Munn K. J.* Automatic calculation of the transport collision integrals with tables for the Morse potential. – J. Chem. Phys., 1964, v. 41, № 11, p. 3560–3568.
4. *O'Hara H., Smith F. J.* Transport collision integrals for a dilute gas. – Comput. Phys. Communs, 1971, v. 2, № 1, p. 47–54.
5. *Крылов В. И.* Приближенное вычисление интегралов. М.: Физматгиз, 1959.
6. *Sidi A.* Numerical quadrature rules for some infinite range integrals. – Math. Comput., 1982, v. 38, № 157, p. 127–142.
7. *Longmann I. M.* A method for the numerical evaluation of finite integrals of oscillatory functions. – Math. Comput., 1960, v. 14, № 69, p. 53–59.
8. *Clenshaw C. W., Curtiss A. R.* A method for numerical integration on a automatic computer. – Numer. Math., 1960, v. 2, № 2, p. 197–204.
9. *Chawla M. M., Jain M. K.* Asymptotic error estimates for the Gauss quadrature formulas. – Math. Comput., 1968, v. 22, № 1, p. 91–97.
10. *Chawla M. M., Jain M. K.* Error estimates of Gauss quadrature formulas for analytic functions. – Math. Comput., 1968, v. 22, № 1, p. 86–90.
11. *Charles Chen T. H.* Asymptotic error estimates for Gaussian quadrature formulas. – Math. Comput., 1982, v. 38, № 157, p. 143–151.
12. *Riess R., Johnson L. W.* Error estimates for Clenshaw-Curtiss quadrature. – Numer. Math., 1972, v. 12, № 3, p. 345–353.

Поступила в редакцию 17.IX.1984
Переработанный вариант 15.VIII.1985

УДК 519.676

О СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ К ГРАНИЦЕ НЕКОТОРЫХ ВАРИАНТОВ СФЕРИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

НЕКРУТКИН В. В., ПРИГАРО Н. Э.

(Ленинград)

Исследуется трудоемкость некоторых модификаций известных алгоритмов метода Монте-Карло для решения краевых задач математической физики.

§ 1. Введение

При решении методом Монте-Карло краевых задач математической физики в области $G\subset R^d$ часто используются различные марковские цепи, сходящиеся к границе Γ области G (например, [1], [2]). При этом одной из естественных характеристик трудоемкости метода оказывается величина

$$f(\varepsilon)=\sup_{x\in G}\mathbf{E}_x\nu_\varepsilon,\qquad \text{где}\qquad \nu_\varepsilon=\min\{n:\xi_n\in\Gamma_\varepsilon\},$$

$\xi_1=x,\ \xi_2,\ldots$ – рассматриваемая марковская цепь и $\Gamma_\varepsilon=\{x\in G:\rho(x,\Gamma)<\varepsilon\}$. Наиболее распространенным и исследованным является так называемый сферический процесс (процесс блуждания по сферам), возникающий при решении внутренней задачи Дирихле для оператора Лапласа и ряда других задач. Переходная функция этого процесса определяется равенством $\mathbf{P}\{\xi_n\in dy\,|\,\xi_{n-1}=z\}=\mu_z(dy)$, где μ_z – равномерное распределение на границе шара максимального радиуса с центром в точке z, целиком лежащего в $\bar{G}$, $\xi_1=x\in G$. Известно, что для сферического процесса и широкого класса областей имеет место логарифмическая оценка величины $f(\varepsilon)$, а именно: $f(\varepsilon)$ удовлетворяет при некоторых положительных константах B_1 и B_2, зависящих только от области G, неравенству

$$f(\varepsilon)\leqslant B_1|\ln\varepsilon|+B_2. \tag{1.1}$$

Впервые оценка (1.1) была получена для выпуклых областей в [3]. Затем с использованием теории восстановления она была доказана для весьма широкого класса областей в R^2 и для областей, в некотором смысле близких к выпуклым или цилиндрическим, в R^3 (например, в [1]). Для ограниченных областей в R^3 с границей класса