

что  $d = \|K^n\|^{1/n} < 1$ . Следовательно, для произвольного целого  $m > 0$  имеем

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

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

Предположим далее, что функция  $\varphi$  ограничена и  $p/q = \text{const}$ . 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  $C$ :

$$D[\varphi(x_0) - \varphi(x_1) + \dots \pm \varphi(x_m)] \leq D[\varphi(x_0)] + \dots + D[\varphi(x_m)] \leq C(m+1).$$

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

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  $\Gamma$  — граница полушария

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

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  $(\mu, \mathcal{K}_{x_0})$ , где  $\mu$  — решение интегрального уравнения разрыва потенциала двойного слоя  $\mu = -K\mu + \varphi$ ,  $K$  — оператор со стохастическим ядром  $\mathcal{K}(x, y)$ ;  $x, y \in \Gamma$ ;  $\mathcal{K}_{x_0}(y) = \mathcal{K}(x_0, y)$ ,  $y \in \Gamma$ , — вероятностная плотность на  $\Gamma$ .

Значения дисперсии  $D$  оценки для различных  $m$  при количестве траекторий  $N = 15000$  таковы:

$m$	3	4	5	6	7	8	9	10
$D \times 10^6$	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  $\Omega^{(k)}(T)$  (см. [1]). В случае, когда взаимодействие молекул газа описывается

потенциалом (6-12) Леннарда - Джонса,  $\Omega^{(l,s)}(T)$  определяются следующим образом:

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

где

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

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

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

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

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

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

В настоящее время известно несколько методов приближенного вычисления  $\Omega$ -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  $\Omega$ -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  $\Omega$ -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  $y \rightarrow 0$ ,  $y \in \mathbb{R}^+$ , а подынтегральная функция в (1.2) осциллирует, как  $\cos^l x$  при  $x \rightarrow \infty$ ,  $x \in \mathbb{R}$  (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

$$(2.1) \quad 0 < g < 2/5^{1/2},$$

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

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

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

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

$$(2.4) \quad r_3 = 5^{1/6}.$$

при этом

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

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  $y \rightarrow 0$ ,  $y \in R^+$ , в то время, как в бесконечно малой окрестности (2.4) будет  $\chi(b, g) \sim y^{-1/2}$ , где  $y \rightarrow 0$ . 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

$$(2.8') \quad q=2/q^2-2(5b^2/18)^3.$$

и ее производной, а также применение теоремы об оценке положительных корней алгебраического уравнения к (1.4) позволили выделить такие отрезки  $[c_r, d_r]$ ,  $r_1 \in [c_r, d_r]$ ,  $c_r, d_r \in R^+$ , 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:

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

$$(2.8) \quad b > 1;$$

здесь

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

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

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

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

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

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  $b < [54/(5\sqrt{5}g)]^{1/2}$ ), то

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

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

$$(2.8'') \quad q=2/q^2-2(5b^2/18)^3.$$

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

Если  $D < 0$  (или  $b > [54/(5\sqrt{5}g)]^{1/2}$ ), то

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

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

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

и

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

где

$$(2.9) \quad x_3 = [(q/2)^2 + |D|]^{1/6} \{ \sqrt{3} \operatorname{Im}[\exp(-2|D|^{1/2}i/(3q))] - \operatorname{Re}[\exp(-2|D|^{1/2}i/(3q))] \}; \\ b_0 = 0, \quad r_1 = 2^{1/6} [(1+q^2)^{1/2} - 1]^{1/6} q^{-1/6}.$$

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  $I_x$  из (1.3) замену  $z = r_0/r$ . Тогда

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

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

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

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  $I_x$  с заданной точностью  $R_N$ :

$$(3.3) \quad N \sim \{ \pi r_1^{1/6} [4R_N (6\epsilon/5^{1/6} - \epsilon^2)^{1/2}]^{-1/6} \}, \quad 0 < \epsilon \ll 1,$$

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  $\epsilon$  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  $Q_i(g^2)$  и  $\Omega^{(l, s)}(T)$  была использована квадратурная формула Кленшоу–Кертиса [8].

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

где

$$B_0 = B_n = (n^2 - 1)^{-1}, \\ B_p = \frac{2(-1)^p}{n^2 - 1} + \frac{4}{n} \sin(\pi p/n) \sum_{j=1}^{[n/2]} \frac{\sin[(2j-1)\pi p/n]}{2j-1}, \quad p=1, 2, \dots, n-1, \quad p \in \mathbb{Z}, \\ E_n = \frac{16n}{(n^2-9)(n^2-1)} \{ \max[|a_n|, 1/2|a_{n-2}|, 1/8|a_{n-4}|] \}, \\ a_{n-2k} = \frac{2}{n} \sum_{\rho=0}^n (-1)^\rho f(\cos(\pi \rho/n)) \cos(2\pi k \rho/n), \\ k=0, 1, 2,$$

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

$$(3.5) \quad I_n = \int_0^1 f(y) dy = \frac{1}{2} \sum_{p=0}^n B_p f(y(\cos(\pi p/n))) + E_n.$$

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:

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

где

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

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

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

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

где через  $I_i$ ,  $i=1, \dots, 4$ , 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  $\delta$ -окрестности кратного корня  $r_0$  (см. (2.3), (2.4)) уравнения (1.4),  $0 < \delta \leq 1$ . Из (2.3) и (2.2) следует, что если  $r \in [r_0 - \delta, r_0 + \delta]$ , то  $b \in [b_0 - \varepsilon, b_0 + \varepsilon]$ , где  $\varepsilon \approx 3\delta/5^{1/2}$ . На практике удобнее задавать величину  $\varepsilon$ , а  $\delta$  выражать через  $\varepsilon$ .

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

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

Теперь можно вычислить интегралы  $I_2$  и  $I_3$  аналитически:

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

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

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

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

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

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

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  $\varepsilon$  выбирается так, как описано выше.

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

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

$$(5.1) \quad I_\omega = \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} Q_l'(Tx) dx,$$

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

$$(5.2) \quad I_\omega = \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} Q_l(Tx) dx + \varepsilon_q \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} dx.$$

Обозначая через  $I_\omega^N$  первое слагаемое в правой части (5.2), вычисленное с помощью квадратурных формул Кленшоу — Кертиса с погрешностью  $\varepsilon_1$ , получаем

$$(5.3) \quad \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} Q_l(Tx) dx = I_\omega^N + \varepsilon_1 - \varepsilon_q (s+1)!$$

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

$$\Delta_q \equiv 2\pi \int_0^\infty b |\cos[\chi(b, g) + \varepsilon_3] - \cos \chi(b, g)| db.$$

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

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

где  $\varepsilon_2$  — умноженная на  $2\pi$  погрешность квадратур, использованных при вычислении интеграла в (1.2). Из (5.3) и (5.4) легко получить, что погрешность  $\varepsilon_0$  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

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

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

Выражение (5.5) для  $\varepsilon_\omega$  можно упростить:

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

Отсюда следует, что величина  $\varepsilon_\omega$  определяется прежде всего погрешностью  $\varepsilon_3$  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 ( $\Omega_1$ ), и наиболее распространенным в приложениях методом из [2] ( $\Omega_2$ ).

$\Omega^{(l, s)}$	$\Omega_1$	$\Omega_2$
$\Omega^{(1,1)}$	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., Канер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.
2. Hirschfelder 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. Commun.*, 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. *Longman 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  $\Gamma$  области  $G$  (например, [1], [2]). При этом одной из естественных характеристик трудоемкости метода оказывается величина

$$f(\varepsilon) = \sup_{x \in G} E_x v_\varepsilon, \quad \text{где} \quad v_\varepsilon = \min \{n : \xi_n \in \Gamma_\varepsilon\},$$

$\xi_1 = x$ ,  $\xi_2, \dots$  — 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  $P\{\xi_n \in dy | \xi_{n-1} = z\} = \mu_z(dy)$ , где  $\mu_z$  — равномерное распределение на границе шара максимального радиуса с центром в точке  $z$ , центром 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

$$(1.1) \quad f(\varepsilon) \leq B_1 |\ln \varepsilon| + B_2.$$

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