УДК 536,48;537.6

КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ ТИПА ГАУССА В ГАЗОДИНАМИКЕ КВАЗИЧАСТИЦ

В.Ф. Алексин,
Н.Р. Беляев,
В.Д. Ходусов

310077 Харьков, пл. Свободы, 4 *Физико-технический факультет Харьковского госуниверситета*

Получены квадратурные формулы типа Гаусса используемые в газодинамике квазичастиц: в фононной газодинамике, в магнонной газодинамике ферромагнетиков и антиферромагнетиков.

При вычислении определенных интегралов, возникающих в теоретических исследованиях, используются различные приближенные методы. Наиболее распространенными из них являются квадратурные формулы, позволяющие приближенно находить значения интегралов в виде линейной комбинации нескольких значений функции

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k), \tag{1}$$

где x_k — заданные узловые точки, A_k — соответствующие им весовые множители. Квадратурные формулы содержат $2n$ независимых параметров: n весовых множителей и n узловых точек. Специальным выбором этих параметров можно значительно повысить точность вычислений. Если использовать квадратурные формулы с фиксированными равноотстоящими точками типа метода трапеций и парабол, то при этом никак не учитываются особенности подинтегральной функции, что приводит к большой вычислительной работе.

В 1814 г. Гаусс нашел очень простой и точный метод вычисления определенных интегралов (1) на интервале $(-1,+1)$ [1], где специальным образом выбирались и узловые точки, и весовые множители. В качестве узловых точек в квадратурных формулах Гаусса используются нули полиномов Лежандра, ортогональных на промежутке $(-1,+1)$ с единичной весовой функцией. Таким образом, формула (1) с n узлами дает точный результат, если $f(x)$ является полиномом степени не выше, чем $(2n-1)$. Именно поэтому формулы называются формулами Гаусса наивысшей алгебраической точности.

Метод квадратур Гаусса превосходит обычные методы типа Симпсона в двояком отношении. Во-первых, эффективность n неравноотстоящих узловых точек такая же, как эффективность $2n$ равноотстоящих точек. Во-вторых, сходимость при интерполяции подинтегральной функции ортогональными полиномами лучше, чем при интерполяции по равноотстоящим точкам.

При рассмотрении различных вопросов физики полупроводников, металлов, низкотемпературной плазмы, газодинамики квазичастиц часто приходится расчитывать интегралы вида

$$\int_a^b w^{(\alpha)}(x) f(x)dx, \tag{2}$$

имеющие один и тот же промежуток интегрирования (a,b) и одну и ту же весовую функцию $w(x)$, которая обычно содержит основные особенности подинтегрального выражения

Метод Гаусса легко обобщается на случай знакопостоянной весовой функции. В качестве узловых точек используются нули ортогональных полиномов для заданных промежутка интегрирования и весовой функции.

Квадратурные формулы интенсивно разрабатывались [1-4]. Так были построены квадратурные формулы, например, для вычисления интегралов вида

$$1.\ \int_{-1}^{+1}(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}f(x)dx \quad 2.\ \int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}f(x)dx \quad 3.\ \int_{0}^{\infty}e^{-x}x^{\alpha}f(x)dx.$$

В первом случае в качестве узловых точек использовались нули полиномов Якоби с индексами α и β, во втором — нули полиномов Эрмита, в третьем — нули полиномов Лагерра с индексом α.

Квадратурные формулы типа Гаусса дают высокую точность, поскольку основная особенность подинтегрального выражения учитывается весовой функцией, от вида которой существенно зависят и узловые точки, и весовые множители. Формулы Гаусса особенно удобны для вычисления интегралов с бесконечными пределами.

В работе [4] получены квадратурные формулы Гаусса для вычисления интегралов содержащих весовую функцию характерную для статистики Ферми-Дирака и системы ортогональных полиномов, построенных на ее основе, приведены таблицы значений узловых точек и весовых коэффициентов. Полученные формулы применяются для расчета кинетических коэффициентов, решения уравнения Больцмана в полупроводниках, металлах и низкотемпературной плазме.

Целью данной работы является получение квадратурных формул типа Гаусса для вычисления определенных интегралов вида (2) на интервале $(0,\infty)$, которые возникают в газодинамике квазичастиц бозевского типа (фононы, магноны, плазмоны и т.д.) в области низких температур [8], с весовой функцией характерной для статистики Бозе-Эйнштейна. Будем вычислять их с помощью квадратурных формул [2]

$$\int_{0}^{\infty} w^{(\alpha)}(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_{n_i}^{(\alpha)} f\left(x_{n_i}^{(\alpha)}\right) + R_n(f) \qquad (3)$$

Здесь переменная $x=\varepsilon/T$, ε — энергия квазичастиц, T — температура, $A_{n_i}^{(\alpha)}\left(x_{n_i}^{(\alpha)}\right)$ — весовые множители; $x_{n_i}^{(\alpha)}$ — узловые точки, которые вычисляются для данной весовой функции $w^{(\alpha)}(x)$ и заданного промежутка $(0,\infty)$; $R_n(f)$ — остаточный член квадратурной формулы. Узловые точки и весовые множители квадратурных формул типа Гаусса выбираются так, чтобы формула (3) была точной, когда подинтегральная функция $f(x)$ — полином. Это позволяет значительно увеличить точность всего расчета. Так, если используется квадратурная формула с n узлами, то она дает точное значение интеграла для полинома степени, меньшей или равной $2n-1$. Можно показать [2,5], что это требование приводит к тому, что узловые точки будут совпадать с нулями полиномов $\Phi_n^{(\alpha)}(x)$, ортогональных на данном промежутке интегрирования $(0,\infty)$ и для данной весовой функции $w^{(\alpha)}(x)$. Чтобы найти узловые точки и весовые множители, построим вначале систему ортогональных полиномов с весовой функцией характерной для статистики Бозе-Эйнштейна.

Система ортогональных многочленов (полиномов) строится путем ортогонализации последовательности неотрицательных степеней x: $1, x, x^2, \ldots$. В качестве весовой функции $w^{(\alpha)}(x)$ выбирается положительная и ограниченная на вещественной полуоси $(0,\infty)$ функция, определяющая с точностью до постоянного множителя каждый многочлен, выбор которой для конкретных газов квазичастиц будет приведен ниже.

Соответствующие ей моменты имеют вид

$$C_n^{(\alpha)} = \int_0^\infty w^\alpha(x)x^n dx \qquad (4)$$

Зная их, ортогональные многочлены можно представить в виде определителя

$$\Phi_n^{(\alpha)}(x) = \frac{K_n^{(\alpha)}}{G_{n-1}^{(\alpha)}} \begin{vmatrix} C_0^{(\alpha)} C_1^{(\alpha)} \ldots C_n^{(\alpha)} \\ C_1^{(\alpha)} C_2^{(\alpha)} \ldots C_{n+1}^{(\alpha)} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ C_{n-1}^{(\alpha)} C_n^{(\alpha)} \ldots C_{2n-1}^{(\alpha)} \\ 1 \quad x \quad \ldots \quad x^n \end{vmatrix}; \quad G_n^{(\alpha)}(x) = \begin{vmatrix} C_0^{(\alpha)} C_1^{(\alpha)} \ldots C_n^{(\alpha)} \\ C_1^{(\alpha)} C_2^{(\alpha)} \ldots C_{n+1}^{(\alpha)} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ C_n^{(\alpha)} C_{n+1}^{(\alpha)} \ldots C_{2n}^{(\alpha)} \end{vmatrix} \qquad (5)$$

где $G_n^{(\alpha)}$ — определитель Грамма, $K_n^{(\alpha)}$ — коэффициент полинома при x^n, от выбора которого зависит стандартизация полинома. Мы будем пользоваться стандартизацией, положив $K_n^{(\alpha)} = (-1)^n$.

Полученная последовательность многочленов с выбранной нами весовой функцией будет единственной, замкнутой и ортогональной:

$$\int_0^\infty w^{(\alpha)}(x)\Phi_m^{(\alpha)}(x)\Phi_n^{(\alpha)}(x)dx = h_n^{(\alpha)}\delta_{nm},$$

где $h_n^{(\alpha)} = G_n^{(\alpha)} / G_{n-1}^{(\alpha)}$. Ортогональные многочлены $\Phi_n^{(\alpha)}(x)$ обладают рядом общих свойств, присущих ортогональным полиномам.

Узловые точки $x_{n_i}^{(\alpha)}$ в формуле (3) являются корнями построенных ортогональных полиномов $\Phi_n^{(\alpha)}\left(x_{n_i}^{(\alpha)}\right) = 0 \quad (i = 1,2,\ldots,n)$, а весовые множители $A_{n_i}^{(\alpha)}$ вычисляются по формулам

$$A_{n_i}^{(\alpha)} = \left(\frac{d\Phi_n^{(\alpha)}(x)}{dx}\right)^{-1}_{x=x_{n_i}^{(\alpha)}} \int_0^\infty w^{(\alpha)}(x)\Phi_n^{(\alpha)}(x)\frac{dx}{x - x_{n_i}^{(\alpha)}}. \qquad (6)$$

Нами разработаны программы расчетов на ЭВМ системы ортогональных полиномов $\Phi_n^{(\alpha)}(x, j)$ для различных (но характерных) весовых функций, зависящих от параметров, нахождения нулей этих полиномов $x_{n_i}^{(\alpha)}$, весовых множителей $A_{n_i}^{(\alpha)}$.

При вычислении кинетических коэффициентов в газе фононов в кристаллических диэлектриках [7] используется система ортогональных полиномов $\Phi_n^{(4)}(x)$ и $\Phi_n^{(5)}(x)$, которые строятся на основе весовой функции характерной для статистики Бозе-Эйнштейна

$$w^{(\alpha)}(x) = \frac{x^\alpha e^x}{\left(e^x - 1\right)^2} \qquad (\alpha = 4{,}5) \qquad (7)$$

с моментами $C_n^{(\alpha)} = \Gamma(1 + \alpha + n)\zeta(\alpha + n)$, $\Gamma(m)$ и $\zeta(m)$ — гамма и дзета функции.

Приведем таблицу узловых точек и весовых множителей для этих полиномов (табл. 1)

При вычислении кинетических коэффициентов в газе магнонов в изотропном ферродиэлектрике с квадратичным законом дисперсии используется разложение по полному набору ортогональных полиномов $\Phi_n^{(\alpha)}(x)$ [6] построенному на основе весовой функции

$$w^{(\alpha)}(x) = \frac{x^\alpha \exp(x + x_a)}{\left[\exp(x + x_a) - 1\right]^2} \qquad (\alpha \ge 1;\ x_a \ge 0) \qquad (8)$$

Таблица 1. **Узловые точки и весовые множители для полиномов $\Phi_n^{(4)}(x)$ и $\Phi_n^{(5)}(x)$**

n	i	$x_{n_i}^{(4)}$	$A_{n_i}^{(4)}$	$x_{n_i}^{(5)}$	$A_{n_i}^{(5)}$
1	1	4.79027	25.9758	5.88668	124.431
2	1	3.27507	49.4516	4.18906	84.899
	2	8.25673	3.13491	9.53255	39.532
3	1	2.48507	11.0724	3.27398	50.3243
	2	6.09293	13.5081	7.17945	68.062
	3	11.688	1.11443	13.0801	$6.047\cdot10^{-3}$
4	1	1.99072	6.90057	2.68326	29.5332
	2	4.8816	14.95199	5.83513	73.0059
	3	8.97817	4.01358	10.1991	21.2693
	4	15.1658	0.10969	16.6188	0.619023
5	1	1.64985	4.37723	2.28235	18.2284
	2	4.07064	13.80908	4.96613	65.4977
	3	7.41073	7.07941	8.50985	36.8307
	4	11.9325	0.701305	13.3963	3.8407
	5	18.6457	$7.249\cdot10^{-3}$	20.2004	$3.8119\cdot10^{-2}$
6	1	1.33311	2.44391	2.12082	14.9111
	2	3.35315	11.7264	4.61482	57.2767
	3	6.17456	9.25938	7.66829	44.7562
	4	9.42505	2.42915	12.4896	7.56745
	5	15.7096	0.12041	17.2636	$9.1991\cdot10^{-2}$
	6	21.0599	$4.978\cdot10^{-3}$	24.9863	$1.9351\cdot10^{-2}$

с моментами $C_n^{(\alpha)} = \Gamma(\alpha+n+1)F(x_a,\alpha+n)$, где $x_a = \frac{\varepsilon_a}{T}$, ε_a — энергия активации, функция $F(z;m) = \int_0^\infty \left(x^{m-1}/\Gamma(m)[\exp(x+z)-1]\right)dx = \sum_{n=1}^\infty \left(\exp(-mz)/n^\alpha\right)$ [6,8].

Приведем таблицу узловых точек и весовых множителей для полиномов $\Phi_m^{(3/2)}(x)$ и $\Phi_m^{(5/2)}(x)$ для ферродиэлектриков с энергией активации $x_a = 0{,}5$ (табл. **2**).

Таблица 2. **Узловые точки и весовые множители для полиномов $\Phi_m^{(3/2)}(x)$ и $\Phi_m^{(5/2)}(x)$**

m	i	$x_{n_i}^{(3/2)}$	$A_{n_i}^{(3/2)}$	$x_{n_i}^{(5/2)}$	$A_{n_i}^{(5/2)}$
1	1	2.1642	1.06324	3.262436	2.300782
2	1	1.367416	0.839056	2.13913	1.699825
	2	5.146255	0.224184	6.439728	0.600964
3	1	1.023529	0.635277	1.602448	1.160853
	2	3.608978	0.40532	4.62851	1.067037
	3	8.303741	0.022643	9.70108	0.072899
4	1	0.834198	0.494491	1.285431	0.807483
	2	2.818024	0.48622	3.653717	1.226881
	3	6.177521	0.080968	7.324799	0.260482
	4	11.582285	0.001575	13.046539	0.005954

m	i	$x_{n_i}^{(3/2)}$	$A_{n_i}^{(3/2)}$	$x_{n_i}^{(5/2)}$	$A_{n_i}^{(5/2)}$
5	1	0.716705	0.398342	1.076263	0.580333
	2	2.330048	0.505417	3.027557	1.208219
	3	4.99881	0.149289	5.970428	0.473476
	4	8.941742	0.010102	10.173981	0.038372
	5	14.953217	$8.717 \cdot 10^{-5}$	16.459747	0.000379
6	1	0.638947	0.33156	0.928253	0.430639
	2	2.001373	0.493964	2.588104	1.112818
	3	4.229523	0.209096	5.06365	0.648166
	4	7.410004	0.027683	8.47226	0.105053
	5	11.85257	0.000932	13.142426	0.004098
	6	18.394012	$2.0959 \cdot 10^{-6}$	19.926849	$2.439801 \cdot 10^{-5}$

Кинетические коэффициенты в газе магнонов в двухподрешеточном антиферромагнетике типа "легкая плоскость" находятся с использованием полиномов $\Phi_n^{(4)}\left(x^2, j\right)$, которые строятся на основе весовой функции

$$w^{(4)}(x, j) = \frac{x^4 \exp\left[\left(x^2 + x_j^2\right)^{1/2}\right]}{\left(x^2 + x_j^2\right)\left[\exp\left(x^2 + x_j^2\right)^{1/2} - 1\right]^2} \tag{9}$$

с моментами $C_n^{(4)}\left(x_j\right) = \dfrac{(2n+3)!}{2^{n+1}(n+1)!} x_j^{n+2} S\left(n+1; n+2; x_j\right)$,

где $S(n, m; x) = \sum_{p=1}^{\infty} K_m(px)/p^n$, $K_m(px)$ – модифицированные функции Бесселя [8]. Здесь $x_j = \dfrac{\varepsilon_k^j}{T}$, $\varepsilon_k^j = \left(\alpha k^2 + \Delta_j^2\right)^{1/2}$, где Δ_j – величина щели в спектре магнонов сорта j ($j = a, b$), α – обменный интеграл, k – волновой вектор. Для хорошо изученного экспериментального антиферромагнетика MnCO3 с $\Delta_a = 0$, $\Delta_b = 5{,}74°$ K при $T = 1{,}14°$K $\left(x_a = 0, x_b = 0{,}5\right)$. Приведем таблицу узловых точек и весовых множителей для полиномов $\Phi_n^{(4)}\left(x^2;0\right)$ и $\Phi_n^{(4)}\left(x^2;0{,}5\right)$ (табл **3**.).

Таблица 3. **Узловые точки и весовые множители для полиномов $\Phi_n^{(4)}\left(x^2;0\right)$ и $\Phi_n^{(4)}\left(x^2;0{,}5\right)$**.

n	i	$x_{n_i}^{(2)}(0)$	$A_{n_i}(0)$	$x_{n_i}^{(2)}(0.5)$	$A_{n_i}(0.5)$
1	1	17.25177	7.21265	18.49395	6.49807
2	1	11.05656	6.59107	12.079835	5.92283
	2	82.9448	0.621570	84.53587	5.523665

Продолжение таблицы 3

n	i	$x^{(2)}_{n_i}(0)$	$A_{n_i}(0)$	$x^{(2)}_{n_i}(0.5)$	$A_{n_i}(0.5)$
3	1	8.575787	5.968172	9.493861	5.344485
	2	57.02106	1.228898	58.3204	1.1389465
	3	203.8705	$1.55809 \cdot 10^{-2}$	205.7287	$1.46362 \cdot 10^{-2}$
4	1	7.20625	5.482107	8.05878	4.892238
	2	45.40899	1.66774	46.5538	1.546739
	3	145.602	$6.26003 \cdot 10^{-2}$	147.12687	$5.83251 \cdot 10^{-2}$
	4	384.918	$1.943199 \cdot 10^{-4}$	386.9495	$2.03908 \cdot 10^{-4}$
5	1	6.32639	5.103503	7.13065	4.538616
	2	38.6492	1.978063	39.67996	1.835806
	3	117.674	0.129487	118.96575	0.122046
	4	282.931	$1.61686 \cdot 10^{-3}$	284.5303	$1.70663 \cdot 10^{-3}$
	5	629.148	$5.7259 \cdot 10^{-6}$	631.1283	$1.0088 \cdot 10^{-4}$
6	1	5.71293	4.8042585	6.46782	4.25299
	2	34.1997	2.199198	35.06969	2.045897
	3	100.917	$2.04188 \cdot 10^{-1}$	101.8036	0.194325
	4	231.718	$4.99897 \cdot 10^{-3}$	232.4784	$4.8280 \cdot 10^{-3}$
	5	473.499	$3.00932 \cdot 10^{-5}$	473.966	$2.65114 \cdot 10^{-5}$
	6	939.124	$1.30777 \cdot 10^{-6}$	939.0329	$3.585 \cdot 10^{-8}$

ЛИТЕРАТУРА

[1] К. Ланцош. Практические методы прикладного анализа. М., Физматгиз, 1961.

[2] В.И. Крылов. Приближенное вычисление интегралов. М., "Наука", 1967.

[3] В.И. Крылов, Л.Т. Шульгина. Справочная книга по численному интегрированию. М., "Наука", 1966.

[4] О.С. Грязнов. Вычисление кинетических коэффициентов для полупроводников. М., "Наука", 1977.

[5] Г. Бейтман, А. Эрдейли. Высшие транцендентные функции. т. 2. М., Физматгиз, 1963.

[6] А.И. Ахиезер, В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов, в сб. Проблемы физической кинетики и физики твердого тела, Наукова думка, Киев, 1990, с, 15-29.

[7] В.Ф. Алексин, Н.Р. Беляев, В.Д. Ходусов, в сб. Проблемы теоретической физики, Киев, 1991, с. 16-31.

[8] А.И. Ахиезер, В.Ф. Алексин, В.Д. Ходусов. ФТТ, 1994, **20** (12), с. 1199, ФНТ, 1995, **21** (1), с. 3.