Вычисление функции Амбарцумяна

Общие формулы

1. *Явная формула.* Напишем расчетные формулы вычисления функции $\varphi(\eta, \lambda)$ при произвольных положительных аргументах z. Воспользуемся явной формулой, полученной В.А. Фоком:

$$\ln \varphi(z, \lambda) = -\frac{z}{\pi} \int_0^\infty \ln\left[1 - \lambda V(u)\right] \frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2 u^2}, \quad V(u) = \frac{\operatorname{arctg}(u)}{u}. \tag{1}$$

При преобразованиях интеграла используются асимптотические разложения функции

$$V(u) = \frac{\operatorname{arctg} u}{u} = \frac{\pi}{2}\frac{1}{u} - \frac{1}{u}\operatorname{arctg}\frac{1}{u} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{u^{2n}}{2n+1} & \text{при} \quad u \le 1, \\ \displaystyle\frac{\pi}{2}\frac{1}{u} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)u^{2n+2}} & \text{при} \quad u \ge 1. \end{cases} \tag{2}$$

2. *Уравнение.* Для проверки расчета, а также и для независимого вычисления можно употребить нелинейное уравнение Амбарцумяна

$$\varphi(z) = 1 + \frac{\lambda}{2} z \varphi(z) \int_0^1 \frac{\varphi(y)\mathrm{d}y}{z + y}. \tag{3}$$

Как и формула (1), уравнение справедливо при всех положительных z и $0 < \lambda \le 1$. Уравнение может быть также распространено на все комплексные значения z, кроме расположенных на промежутке $[-1, 0]$.

Вычисление при аргументах, меньших единицы

1. *Характер особенности при малых аруметах.* Если $z = 0$, то при всех λ значение функции $\varphi(0, \lambda) = 1$, но производная по z обращается в бесконечность. При малых значениях z две особенности осложняют вычисление интеграла. Первая — функция при $z = 0$ имеет логарифмическую особенность. Выделим сначала ее.

Из формулы (1) видно, что при $z = 0$ логарифм функции обращается в нуль за счет множителя z, но интеграл расходится. Поэтому преобразуем его следующим образом:

$$\ln \varphi(z, \lambda) = -\frac{z}{\pi} \int_0^{u_\mathrm{m}} \ln\left(1 - \lambda \frac{\operatorname{arctg} u}{u}\right) \frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2 u^2} - \frac{z}{\pi} \int_{u_\mathrm{m}}^\infty \left[\ln\left(1 - \lambda \frac{\operatorname{arctg} u}{u}\right) + \lambda \frac{\pi}{2}\frac{1}{u}\right] \frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2 u^2} + \frac{\lambda z}{2} \int_{u_\mathrm{m}}^\infty \frac{du}{u(1 + z^2 u^2)}. \tag{4}$$

В результате такого преобразования два первых интеграла сходятся, а последний вычисляется и выявляет особенность функции:

$$\int_{u_\mathrm{m}}^\infty \frac{\mathrm{d}u}{u(1 + z^2 u^2)} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + z^2 u_\mathrm{m}^2}{z^2 u_\mathrm{m}^2} = -\ln z + \frac{1}{2} \ln \frac{1 + z^2 u_\mathrm{m}^2}{u_\mathrm{m}^2}. \tag{5}$$

В последующих формулах это выделение особенности будет осуществлено как первое, самое сингулярное слагаемое в процессе выделения первых четырех слагаемых разложения логарифма при больших u.

При $u_\mathrm{m} \to \infty$ интеграл стремится к нулю, а производная по u_m дает правильный результат. Величину u_m следует подобрать, единственное априорное требование: она не должна быть меньше 1. Значение $u_\mathrm{m} = 1$ сильно упростит программу.

Первый интеграл в (4) целесообразно разбить на два по промежуткам $[0, u_\mathrm{l}]$ и $[u_\mathrm{l}, u_\mathrm{m}]$. В первом промежутке можно сделать замену $u = u_\mathrm{l} e^{-t}$ и применить формулу Гаусса–Лагерра, а во втором промежутке можно использовать формулу Гаусса–Лежандра:

$$\int_0^{u_\mathrm{m}} \ln\left(1 - \lambda \frac{\operatorname{arctg} u}{u}\right) \frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2 u^2} = \int_0^{u_\mathrm{m}} \ln\left(1 - \lambda V(u)\right) \frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2 u^2} =$$

$$= u_\mathrm{l} \int_0^\infty \ln\left(1 - \lambda V(u_\mathrm{l} e^{-t})\right) \frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{1 + z^2 u_\mathrm{l}^2 e^{-2t}} + (u_\mathrm{m} - u_\mathrm{l}) \int_0^1 \ln(1 - \lambda V(u_\mathrm{l} + (u_\mathrm{m} - u_\mathrm{l})x) \frac{\mathrm{d}x}{1 + z^2[u_\mathrm{l} + (u_\mathrm{m} - u_\mathrm{l})x]^2}. \tag{6}$$

Второй интеграл вычисляется по тем же формулам, но влияние малого z в знаменателе под дифференциалом необходимо учесть более тщательно, чем в (4). Это можно сделать двумя путями. Во-первых, добьемся, чтобы функция, стоящая множителем при последней дифференциальной дроби, убывала быстрее, а во-вторых, для учета влияние самой дроби придется разбить промежуток интегрирования.

2. *Разложение логарифма.* Выделим в подинтегральной функции слагаемые, убывающие, как $1/u^4$. Для этого сначала разложим логарифм по степеням добавки к единице:

$$\ln(1-\lambda V(u)) = -\lambda V(u) - \frac{[\lambda V(u)]^2}{2} - \frac{[\lambda V(u)]^3}{3} - \frac{[\lambda V(u)]^4}{4} - \frac{G(u)}{u^5}, \tag{7}$$

$$G(u) = -u^5\left\{\ln(1-\lambda V(u)) + \lambda V(u) + \frac{[\lambda V(u)]^2}{2} + \frac{[\lambda V(u)]^3}{3} + \frac{[\lambda V(u)]^4}{4}\right\}. \tag{8}$$

Функцию $G(u)$ вычисляем по приведенной формуле при небольших значениях u, когда $V(u)$ не мало. При $u > 2.5$ (тогда $V(u) \sim \pi/(2u)$) эту функцию вычисляем по ряду:

$$G(u) = u^5 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\lambda V(u)]^{n+5}}{n+5}. \tag{9}$$

3. *Порядки убывания.* Пронумеруем величины в соответствии с порядком их убывания:

$$A_1(u) = \operatorname{arctg}\frac{1}{u} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)u^{2n+1}},\ A_3(u) = A_1(u) - \frac{1}{u} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{(2n+3)u^{2n+3}}, \tag{10}$$

$$A_5(u) = A_3(u) + \frac{1}{3u^3} = A_1(u) - \frac{1}{u} + \frac{1}{3u^3} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+5)u^{2n+5}}, \quad V(u) = \frac{1}{u}\left(\frac{\pi}{2} - A_1(u)\right). \tag{11}$$

Теперь в каждой скобке также выделим слагаемые, дающие порядок убывания $1/u^4$ (аргумент u у функций $A_1(u), A_3(u)$ и $A_5(u)$ опускаем):

$$\begin{gathered}
\ln(1-\lambda V(u)) + \frac{G(u)}{u^5} = -\frac{\lambda}{u}\left(\frac{\pi}{2}-A_1\right) - \frac{\lambda^2}{2u^2}\left(\frac{\pi}{2}-A_1\right)^2 - \frac{\lambda^3}{3u^3}\left(\frac{\pi}{2}-A_1\right)^3 - \frac{\lambda^4}{4u^4}\left(\frac{\pi}{2}-A_1\right)^4 = \\
= -\frac{\lambda}{u}\left(\frac{\pi}{2}-A_1\right) - \frac{\lambda^2}{2u^2}\left(\frac{\pi^2}{4} - \pi A_1 + A_1^2\right) - \frac{\lambda^3}{3u^3}\left(\frac{\pi^3}{8} - \frac{3\pi^2}{4}A_1 + \frac{3\pi}{2}A_1^2 - A_1^3\right) - \\
- \frac{\lambda^4}{4u^4}\left(\frac{\pi^4}{16} - \frac{\pi^3}{2}A_1 + \frac{3\pi^2}{2}A_1^2 - 2\pi A_1^3 + A_1^4\right) = -\frac{\lambda}{u}\left(\frac{\pi}{2} - \frac{1}{u} + \frac{1}{3u^3} - A_5\right) - \frac{\lambda^2}{2u^2}\left(\frac{\pi^2}{4} - \frac{\pi}{u} + \frac{1}{u^2} - \pi A_3 + 2\frac{A_3}{u} + A_3^2\right) - \\
- \frac{\lambda^3}{3u^3}\left(\frac{\pi^3}{8} - \frac{3\pi^2}{4}\frac{1}{u} + \frac{3\pi}{2}A_1^2 - \frac{3\pi^2}{4}A_3 - A_1^3\right) - \frac{\lambda^4}{4u^4}\left(\frac{\pi^4}{16} - \frac{\pi^3}{2}A_1 + \frac{3\pi^2}{2}A_1^2 - 2\pi A_1^3 + A_1^4\right) = \\
= -\frac{\lambda\pi}{2}\frac{1}{u} + \frac{\lambda}{u^2} - \frac{\lambda}{3u^4} + \frac{\lambda}{u}A_5 - \frac{\lambda^2}{2u^2}\left(\frac{\pi^2}{4} - \frac{\pi}{u} + \frac{1}{u^2} - \pi A_3 + \frac{2}{u}A_3 + A_3^2\right) - \frac{\lambda^3}{3u^3}\left(\frac{\pi^3}{8} - \frac{3\pi^2}{4}\frac{1}{u} - \frac{3\pi^2}{4}A_3 + \frac{3\pi}{2}A_1^2 - A_1^3\right) - \\
- \frac{\lambda^4}{4u^4}\left(\frac{\pi^4}{16} - \frac{\pi^3}{2}A_1 + \frac{3\pi^2}{2}A_1^2 - 2\pi A_1^3 + A_1^4\right) = \frac{b_1}{u} + \frac{b_2}{u^2} + \frac{b_3}{u^3} + \frac{b_4}{u^4} + \frac{F(u)}{u^5}.
\end{gathered} \tag{12}$$

Здесь

$$b_1 = -\frac{\lambda\pi}{2}, \quad b_2 = \lambda\left(1 - \frac{\lambda\pi^2}{8}\right), \quad b_3 = \frac{\lambda^2\pi}{2}\left(1 - \frac{\lambda\pi^2}{12}\right), \quad b_4 = -\lambda\left(\frac{1}{3} + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2\pi^2}{4} + \frac{\lambda^3\pi^4}{64}\right), \tag{13}$$

а через $F(u)$ обозначена сумма слагаемых, которая при $u \to \infty$ остается конечной:

$$F(u) = \frac{\lambda^2\pi}{2}u^3A_3 - \frac{\lambda^3\pi}{2}u^2A_1^2 + \frac{\lambda^4\pi^3}{8}uA_1 + \lambda u^4A_5 - \left(\lambda^2 - \frac{\lambda^3\pi^2}{4}\right)u^2A_3 + \frac{\lambda^3}{3}u^2A_1^3 - \frac{3\lambda^4\pi^2}{8}uA_1^2 + \frac{\lambda^4\pi}{2}uA_1^3 - \frac{\lambda^2}{2}u^3A_3^2 - \frac{\lambda^4}{4}uA_1^4. \tag{14}$$

Первые три слагаемых стремятся к конечным пределам, следующие пять убывают как $1/u$, одно — как $1/u^2$, а последние два — как $1/u^3$.

4. *Функция $F(u)$.* Введем дополнительные обозначения (верхние индексы 0 и 1 у величин A это, конечно, не степени, впрочем, такие степени, как известно, никогда не указываются, так что спутать невозможно)

$$A_1^0 = uA_1, \quad A_3^0 = u^3A_3, \quad A_5^0 = u^5A_5, \quad A_3^1 = u^2A_3, \quad A_5^1 = u^4A_5, \tag{15}$$

а также

$$a_2 = \frac{\lambda^2}{2},\ a_3 = \frac{\lambda^3}{3},\ a_4 = \frac{\lambda^4}{4},\ a_{2\mathrm{ps}} = \frac{\lambda^2\pi}{2},\ a_{3\mathrm{ps}} = \frac{\lambda^3\pi}{2},\ a_{4\mathrm{p3h}} = \frac{\lambda^4\pi^3}{8},\ a_{3\mathrm{p2f}} = \frac{\lambda^3\pi^2}{4},\ a_{4\mathrm{p2h}} = \frac{3\lambda^4\pi^2}{8},\ a_{4\mathrm{ps}} = \frac{\lambda^4\pi}{2}. \quad (16)$$

Через них $F(u)$ запишется в виде

$$F(u) = a_{2\mathrm{ps}}A_3^0 - a_{3\mathrm{ps}}(A_1^0)^2 + a_{4\mathrm{p3h}}A_1^0 + \lambda A_5^1 - (\lambda^2 - a_{3\mathrm{p2f}})A_3^1 + a_3 A_1 (A_1^0)^2 - a_{4\mathrm{p2h}} A_1 A_1^0 + a_{4\mathrm{ps}} A_1^0 (A_1)^2 - a_2 A_3 A_3^0 - a_4 (A_1)^3 A_1^0, \quad (17)$$

а логарифм (верно при всех $u > 0$, но требуется лишь при $u > u_\mathrm{m}$) в виде

$$\ln\left(1 - \lambda V(u)\right) = \frac{b_1}{u} + \frac{b_2}{u^2} + \frac{b_3}{u^3} + \frac{b_4}{u^4} + \frac{F(u) - G(u)}{u^5}. \quad (18)$$

Функции $F(u)$ и $G(u)$, как уже отмечалось, при $u \to \infty$ имеют конечные пределы:

$$F(\infty) = -\frac{\lambda^2\pi}{6} - \frac{\lambda^3\pi}{2} + \frac{\lambda^4\pi^3}{8}, \quad G(\infty) = \frac{\lambda^5}{5}\left(\frac{\pi}{2}\right)^5. \quad (19)$$

Они быстро растут при увеличении u от нуля примерно до 20, а затем тоже быстро выходят на предельную постоянную.

5. *Интегралы от слагаемых четырех порядков.* Выделим явно зависимость от u у слагаемых функции $F(u)$:

$$F(u) = \frac{\lambda^2\pi}{2}\left(A_3^0 - \lambda(A_1^0)^2 + \frac{\lambda^2\pi^2}{4}A_1^0\right) + \frac{\lambda}{u}\left[A_5^0 - \lambda\left(1 - \frac{\lambda\pi^2}{4}\right)A_3^0 + \frac{\lambda^2}{3}\left(A_1^0 - \frac{9}{8}\lambda\pi^2\right)(A_1^0)^2\right] + \\ + \frac{\lambda^4\pi}{2u^2}(A_1^0)^3 - \frac{\lambda^2}{2u^3}\left((A_3^0)^2 + \frac{\lambda^2}{2}(A_1^0)^4\right). \quad (20)$$

Интегралы от четырех первых слагаемых в (18) вычисляются аналитически. Для семейства таких интегралов справедливо рекуррентное соотношение

$$f_n(a,z) = \int\limits_a^\infty \frac{\mathrm{d}u}{u^n}\frac{1}{1+z^2u^2} = \frac{1}{(n-1)a^{n-1}} - z^2 f_{n-2}(a),\ f_0(a,z) = \frac{1}{z}\left(\frac{\pi}{2} - \mathrm{arctg}(za)\right),\ f_1(a,z) = \frac{1}{2}\ln\frac{1+z^2a^2}{z^2a^2}. \quad (21)$$

Последовательно находим (f_0 для вычисления интеграла не нужна)

$$f_2(a,z) = \frac{1}{a} - z\left(\frac{\pi}{2} - \mathrm{arctg}(za)\right),\ f_3(a,z) = \frac{1}{2a^2} - \frac{z^2}{2}\ln\frac{1+z^2a^2}{z^2a^2},\ f_4(a,z) = \frac{1}{3a^3} - \frac{z^2}{a} + z^3\left(\frac{\pi}{2} - \mathrm{arctg}(za)\right). \quad (22)$$

6. *Окончательная формула для немалых z.* Интеграл от оставшихся слагаемых придется вычислять поразному при очень и не очень малых z. При не очень малых $z_\mathrm{l} \le z \le 1$ интеграл по $u \ge U_\mathrm{m}$ представляется суммой

$$\int\limits_{u_\mathrm{m}}^\infty \ln(1-\lambda V(u))\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = b_1 f_1(u_\mathrm{m},z) + b_2 f_2(u_\mathrm{m},z) + b_3 f_3(u_\mathrm{m},z) + b_4 f_4(u_\mathrm{m},z) + \int\limits_{u_\mathrm{m}}^\infty \frac{F(u)-G(u)}{u^5}\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}, \quad (23)$$

причем в оставшемся интеграле делаем подстановку $u = u_\mathrm{m}e^{t/6}$:

$$\int\limits_{u_\mathrm{m}}^\infty \frac{F(u)-G(u)}{u^5}\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \frac{1}{6u_\mathrm{m}^4}\int\limits_0^\infty \frac{F(u_\mathrm{m}e^{t/6}) - G(u_\mathrm{m}e^{t/6})}{z^2u_\mathrm{m}^2 + e^{-t/3}}e^{-t}\mathrm{d}t. \quad (24)$$

Вычисление этого интеграла при очень малых $z \le z_\mathrm{l}$ требует бо́льших усилий.

7. *Малые z.* При малых значениях аргумента z очень сильно меняется поведение дроби со знаменателем $1 + z^2u^2$. Действительно, при $u \le 1/z$ произведение z^2u^2 не превосходит единицы, но как бы ни было z мало, начиная с $u > 1/z$, это произведение растет и при достаточно больших u сильно превосходит единицу, так что дробь оказывается малой. Это изменение поведения частично ослабляется произведенным выделением убывающих множителей, но не полностью.

Разобьем интеграл (24) точкой $u = 1/z$ на две части и в первой сделаем замену

$$u = \frac{1}{z + \left(\frac{1}{u_\mathrm{m}} - z\right)x}, \quad \mathrm{d}u = -\frac{\frac{1}{u_\mathrm{m}} - z}{\left[z + \left(\frac{1}{u_\mathrm{m}} - z\right)x\right]^2}\mathrm{d}x. \tag{25}$$

Получится

$$\int\limits_{u_\mathrm{m}}^{1/z} \frac{F(u) - G(u)}{u^5}\frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2u^2} = \left(\frac{1}{u_\mathrm{m}} - z\right)\int\limits_0^1 [F(u) - G(u)]\left[z + \left(\frac{1}{u_\mathrm{m}} - z\right)x\right]^3 \frac{\mathrm{d}x}{1 + z^2u^2}. \tag{26}$$

В функции и в знаменатель надо подставить замененную переменную. После этого можно применить формулу Лежандра.

Вторую часть вычисляем по формуле Гаусса—Лагерра после замены $u = \dfrac{e^{t/6}}{z}$:

$$\int\limits_{1/z}^{\infty} \frac{F(u) - G(u)}{u^5}\frac{du}{1 + z^2u^2} = \frac{1}{6z}\int\limits_0^{\infty} \frac{F(u) - G(u)}{(1/z^5)e^{5t/6}}\frac{e^{t/6}\mathrm{d}t}{1 + e^{t/3}} = \frac{z^4}{6}\int\limits_0^{\infty} [F(u) - G(u)]\frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{1 + e^{-t/3}}. \tag{27}$$

Вычислять по приведенной формуле, в принципе, можно при любых значениях $\lambda \le 1$. При $\lambda = 1$ под знаком логарифма оказывается выражение, которое обращается в бесконечность при $t = \infty$. Однако это обращение имеет вид $\ln(u_\mathrm{l}e^{-t}) = \ln u_\mathrm{l} - t$ и не препятствует применению формулы Лагерра. Все же, случаи малых и нулевых значений разности $1 - \lambda$ рассмотрим ниже подробнее.

Сложнее обстоит дело при больших z, что рассматривается отдельно дальше.

8. *Возможно более простой способ для средних значений аргумента.* Если z порядка единицы, то ухищрения с выделением расходящихся слагаемых, как может показаться, излишни. При таких аргументах просто разобьем интеграл точкой $u = 1$ на два и сделаем подстановки $u = e^{-t}$ и e^t. Получится (λ не близко к единице)

$$\int\limits_0^{\infty} \ln(1 - \lambda V(u))\frac{\mathrm{d}u}{1 + z^2u^2} = \int\limits_0^{\infty} \ln\left(1 - \lambda e^t \operatorname{arctg}(e^{-t})\right)\frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{1 + z^2e^{-2t}} + \int\limits_0^{\infty} \ln\left(1 - \lambda e^{-t} \operatorname{arctg}(e^{t})\right)\frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{z^2 + e^{-2t}}. \tag{28}$$

При близких к единице λ в первом интеграле полезно сделать следующее очевидное преобразование:

$$1 - \lambda\frac{\operatorname{arctg}(u)}{u} = 1 - \lambda + \lambda\left(1 - \frac{\operatorname{arctg}(u)}{u}\right). \tag{29}$$

При малых u разность в скобках надо вычислять по ряду. Пробные расчеты показали неэффективность такого подхода, так как экспонента быстро убывает и только малая часть функции дает вклад в интеграл. В принципе применять подход можно было бы, но только с неимоверным числом узлов формулы Лагерра.

9. *Случаи консервативного и почти консервативного рассеяния.* Если λ очень близко к единице, то и функция близка к функции, соответствующей $\lambda = 1$.

Особенность заключает в себе первый интеграл во втрой строчке (6). Рассмотрим этот интеграл без экспоненциальной подстановки.

Под знаком логарифма разность сильно различается при $\lambda < 1$ и $\lambda = 1$. В первом случае при $u = 0$ получается конечное число, а во втором чистый нуль. Для разрешения этой проблемы преобразуем указанную разность следующим образом (для краткости используем обозначение $V(u)$):

$$1 - \lambda V(u) = 1 - \lambda + \lambda[1 - V(u)] = 1 - \lambda + \lambda\frac{u^2}{3}[1 - V(u)]\frac{3}{u^2} =$$
$$= 1 - \lambda + \lambda\frac{u^2}{3} + \lambda\frac{u^2}{3}\left([1 - V(u)]\frac{3}{u^2} - 1\right) = \left(1 - \lambda + \lambda\frac{u^2}{3}\right)\left(1 + \lambda\frac{u^2}{3}\frac{[1 - V(u)]\frac{3}{u^2} - 1}{1 - \lambda + \lambda\frac{u^2}{3}}\right). \tag{30}$$

При чистом рассеянии выделяем два интеграла

$$\int_0^{u_1} \ln(1-V(u))\,\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \int_0^{u_1} \ln\frac{u^2}{3}\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} + \int_0^{u_1} \ln\left([1-V(u)]\frac{3}{u^2}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}. \tag{31}$$

В первом интеграле интегрируем по частям, взяв

$$\mathcal{U} = \ln\frac{u^2}{3},\ \mathrm{d}\mathcal{V} = \frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}, \quad \mathrm{d}\mathcal{U} = \frac{2}{u}\mathrm{d}u,\ \mathcal{V} = \frac{\mathrm{arctg}(zu)}{z}. \tag{32}$$

Получается

$$\int_0^{u_1} \ln\frac{u^2}{3}\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \ln\frac{u^2}{3}\frac{\mathrm{arctg}(zu)}{z}\bigg|_0^{u_1} - \frac{2}{z}\int_0^{u_1}\frac{\mathrm{arctg}(zu)}{u}\mathrm{d}u = \ln\frac{u_1^2}{3}\frac{\mathrm{arctg}(zu_1)}{z} - \frac{2}{z}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{(zu_1)^{2n+1}}{(2n+1)^2}. \tag{33}$$

Во втором интеграле под знаком логарифма

$$3\frac{1-V(u)}{u^2} = \frac{3}{u^2}\left(1-\frac{\mathrm{arctg}(u)}{u}\right) \sim \frac{3}{u^2}\left(1-1+\frac{u^2}{3}-\frac{u^4}{5}+\frac{u^6}{7}\right) = 1-\frac{3}{5}u^2+\frac{3}{7}u^4, \quad 1-3\frac{1-V(u)}{u^2} \sim \frac{3}{5}u^2-\frac{3}{7}u^4. \tag{34}$$

Поэтому его вычисляем по формуле Гаусса–Лагерра с подстановкой $u = u_1 e^{-t/3}$:

$$\int_0^{u_1} \ln\left([1-V(u)]\frac{3}{u^2}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \int_0^{u_1} \frac{\ln\left(1-\left[1-3\dfrac{1-V(u)}{u^2}\right]\right)}{1-3\dfrac{1-V(u)}{u^2}}\left[1-3\frac{1-V(u)}{u^2}\right]\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}. \tag{35}$$

Отношение логарифма к разности в знаменателе при $t \to \infty$ стремится к -1, а сама эта разность вместе в дифференциалом $\mathrm{d}u$, дает множитель перед интегралом $\frac{3}{5}u_1^2\frac{u_1}{3}$.

Опыт численных расчетов показал неэффективность проделанных преобразований для чистого рассеяния.

При почти консервативном рассеянии, то есть при $1-\lambda \ll 1$ определим величину $u_\lambda = \sqrt{\dfrac{1-\lambda}{\lambda/3}}$. Интеграл от множителя в первых скобках после выноса множителя из-под знака логарифма разбиваем на два точкой u_λ:

$$\int_0^{u_1} \ln\left(1-\lambda+\lambda\frac{u^2}{3}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \frac{\ln(1-\lambda)}{z}\,\mathrm{arctg}(zu_1) + \int_0^{u_\lambda}\ln\left(1+\frac{u^2}{u_\lambda^2}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} + \int_{u_\lambda}^{u_1}\ln\left(1+\frac{u^2}{u_\lambda^2}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}. \tag{36}$$

В первом интеграле можно раскладывать в ряд по степеням u, а можно сделать подстановку $u = u_\lambda e^{-t}$. Во втором интеграле целесообразно заменить переменную $u = u_\lambda + (u_1 - u_\lambda)x$. Упомянутый ряд

$$\int_0^{u_\lambda}\ln\left(1+\frac{u^2}{u_\lambda^2}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2} = \int_0^{u_\lambda}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{u^{2(k+1)}\mathrm{d}u}{(2k+1)u_\lambda^{2(k+1)}}\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m z^{2m}u^{2m} =$$

$$= \int_0^{u_\lambda}\mathrm{d}u\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n u^{2(n+1)}\sum_{m=0}^{n}\frac{z^{2m}}{(2n-2m+1)u_\lambda^{2(n-m+1)}} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{u_\lambda^{2(n+1)+1}}{2n+3}\sum_{m=0}^{n}\frac{z^{2m}}{(2n-2m+1)u_\lambda^{2(n-m+1)}} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2n+3}\sum_{m=0}^{n}\frac{z^{2m}u_\lambda^{2m+1}}{2n-2m+1} = \sum_{m=0}^{\infty}z^{2m}u_\lambda^{2m+1}\sum_{n=m}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+3)(2n-2m+1)}. \tag{37}$$

Вычисление при аргументах, больших единицы

1. *Особенности вычисления при больших z.* Если аргумент z имеет порядок единицы, то ничто не мешает вычислять функцию по тем же формулам, которые применимы для z, близких к единице, но меньших ее. Особого рассмотрения требуют значения $z \gg 1$.

Приходится выделять случаи, когда λ не очень близко к единице, когда оно точно равно единице и когда очень близко к ней. В первом случае сначала делаем такое преобразование интеграла:

$$\ln\varphi(z,\lambda)=-\frac{z}{\pi}\ln(1-\lambda)\int\limits_0^\infty\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}-\frac{z}{\pi}\int\limits_0^\infty\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}[1-V(u)]\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}. \tag{38}$$

Первое слагаемое справа просто равно $-\ln(1-\lambda)/2$. Второй интеграл разбиваем на два точкой $u=1/z$, в них делаем замены $u=e^{-t}/z$ и $u=e^t/z$. В результате находим

$$\ln\varphi(z,\lambda)=-\frac{\ln(1-\lambda)}{2}-\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty\left[\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}[1-V(e^{-t}/z)]\right)+\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}[1-V(e^t/z)]\right)\right]\frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{1+e^{-2t}}. \tag{39}$$

В двух других случаях действуем более аккуратно.

2. *Чистое и почти чистое рассеяние.* Приведем интеграл к виду

$$\ln\varphi(z,\lambda)=-\frac{\ln(1-\lambda)}{2}-\frac{z}{\pi}\int\limits_0^\infty\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}\frac{u^2}{3}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}-\frac{z}{\pi}\int\limits_0^\infty\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}\frac{u^2}{3}\frac{\left(1-\dfrac{\mathrm{arctg}(u)}{u}\right)\dfrac{3}{u^2}-1}{1+\dfrac{\lambda}{1-\lambda}\dfrac{u^2}{3}}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}. \tag{40}$$

Интеграл во втором слагаемом вычисляется дифференцированием под знаком интеграла. Обозначим его

$$z\int\limits_0^\infty\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}\frac{u^2}{3}\right)\frac{\mathrm{d}u}{1+z^2u^2}=\int\limits_0^\infty\ln\left(1+\frac{\lambda}{1-\lambda}\frac{z^2}{3}v^2\right)\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2},\quad G(y)=\int\limits_0^\infty\ln(1+yv^2)\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2},\ G(0)=0. \tag{41}$$

Тогда производная

$$G'(y)=\int\limits_0^\infty\frac{v^2}{1+yv^2}\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2}=\frac{1}{1-y}\int\limits_0^\infty\left(\frac{1}{1+yv^2}-\frac{1}{1+v^2}\right)\mathrm{d}v=\frac{\pi}{2}\frac{1}{1-y}\left(\frac{1}{\sqrt{y}}-1\right)=\frac{\pi}{2}\frac{1}{\sqrt{y}(1+\sqrt{y})}. \tag{42}$$

Интегрируя с учетом значения в нуле, находим

$$G(y)=\frac{\pi}{2}\int\limits_0^y\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{y}(1+\sqrt{y})}=\pi\int\limits_0^{\sqrt{y}}\frac{\mathrm{d}x}{1+x}=\pi\ln(1+\sqrt{y}). \tag{43}$$

Вспомним обозначение длины термализации

$$\Lambda=\sqrt{\frac{\lambda}{3(1-\lambda)}}, \tag{44}$$

которая растет с приближением λ к единице. Если принять $\lambda\sim 1-\dfrac{k^2}{3}$, то $\Lambda\sim\dfrac{1}{k}$ и называется длиной диффузии. Через Λ выражается параметр $y=\dfrac{\Lambda^2}{z^2}$ и интеграл записывается так:

$$-\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty\ln\left[1+\frac{\lambda}{1-\lambda}\frac{v^2}{3z^2}\right]\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2}=-\ln\left(1+\frac{\Lambda}{z}\right), \tag{45}$$

а сумма вычисленных интегралов

$$-\frac{1}{2}\ln(1-\lambda)-\ln\left(1+\frac{\Lambda}{z}\right)=-\ln\left(\sqrt{1-\lambda}+\sqrt{\frac{\lambda}{3}}\frac{1}{z}\right). \tag{46}$$

Сделав замену $u = v/z$, приведем все выражение (40) к виду

$$\ln\varphi(z,\lambda) = -\ln\left(\sqrt{1-\lambda}\left(1+\frac{\Lambda}{z}\right)\right) - \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \ln\left(1+\frac{\Lambda^2}{z^2}v^2\frac{\left(1-\dfrac{\operatorname{arctg}(v/z)}{v/z}\right)\dfrac{3z^2}{v^2}-1}{1+\dfrac{\Lambda^2}{z^2}v^2}\right)\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2}. \tag{47}$$

Альтернативная запись этого выражения с обратным отношением в знаменателе у логарифма

$$\ln\varphi(z,\lambda) = -\ln\left(\sqrt{1-\lambda}+\sqrt{\frac{\lambda}{3}}\frac{1}{z}\right) - \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \ln\left(\frac{\dfrac{z^2}{\Lambda^2 v^2}+\left(1-\dfrac{\operatorname{arctg}(v/z)}{v/z}\right)\dfrac{3z^2}{v^2}}{1+\dfrac{z^2}{\Lambda^2 v^2}}\right)\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2}. \tag{48}$$

Эта формула пригодна для расчетов, если $z/\Lambda > 1$. Тогда промежуток интегрирования по v разбиваем на два: $[0, z/\Lambda]$ и $[z/\Lambda, \infty]$. Первый еще разбиваем на n частей, выбрав $n = [z]+1$, но не больше $n_0 \sim 20$, и в каждой части используем формулу Гаусса–Лежандра. Во второй части применяем замену $v =$ с послежующим использованием формулы Гаусса–Лагерра.

При $\lambda \to 1$ из (47) предельным переходом (тогда $\Lambda \to \infty$) получаем очевидное выражение

$$\ln\varphi(z,1) = \ln(\sqrt{3}z) - \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \ln\left(\left[1-\frac{\operatorname{arctg}(v/z)}{v/z}\right]\frac{3z^2}{v^2}\right)\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2}. \tag{49}$$

И здесь интеграл разбиваем точкой $v = z$ на две части. При меньших значениях переменной интегрирования делим интеграл еще n на частей и в каждой применяем формулу Гаусса–Лежандра, а при больших значениях — формулу Гаусса–Лагерра:

$$\int\limits_0^\infty \ln\left[\left(1-\frac{\operatorname{arctg}(v/z)}{v/z}\right)\frac{3z^2}{v^2}\right]\frac{\mathrm{d}v}{1+v^2} = \frac{z}{n}\sum_{k=1}^{n}\int\limits_0^1 \ln\left(\left[1-V\left(\frac{x+k-1}{n}\right)\right]\frac{3n^2}{(x+k-1)^2}\right)\frac{\mathrm{d}x}{1+z^2\left(\dfrac{x+k-1}{n}\right)^2}+$$

$$+\,z\int\limits_0^\infty \ln([1-V(e^t)]3e^{-2t})\frac{e^{-t}\mathrm{d}t}{z^2+e^{-2t}}. \tag{50}$$

n

3. *Проверка вычисления при* $z > 1$. Для проверки вычисленных значений функции при $z > 1$ по ее значениях при $z < 1$ можно, например, использовав соотношения $\displaystyle\int\limits_1^\infty \frac{1}{\varphi(z,\lambda)}\frac{\mathrm{d}z}{z(z+y)} =$

$$= \frac{\ln(1+y)}{y} - \frac{\lambda}{2}\int\limits_0^1 \varphi(z,\lambda)\frac{\mathrm{d}z}{y-z}\ln\frac{1+y}{1+z} = \sqrt{1-\lambda}\frac{\ln(1+y)}{y} + \frac{\lambda}{2}\int\limits_0^1 \varphi(z,\lambda)\frac{z\mathrm{d}z}{y-z}\left(\frac{\ln(1+z)}{z}-\frac{\ln(1+y)}{y}\right). \tag{51}$$

Интегральной проверкой вычисленных значений $\varphi(z,\lambda)$ при $z > 1$ могут служить равенства, получающиеся из предыдущих при $y \to 0$:

$$\int\limits_1^\infty \frac{1}{\varphi(z,\lambda)}\frac{\mathrm{d}z}{z^2} = 1 - \frac{\lambda}{2}\int\limits_0^1 \varphi(z,\lambda)\mathrm{d}z\frac{\ln(1+z)}{z} = \sqrt{1-\lambda} + \frac{\lambda}{2}\int\limits_0^1 \varphi(z,\lambda)\mathrm{d}z\left(1-\frac{\ln(1+z}{z}\right). \tag{52}$$

В обеих парах равенств одно из другого получается с учетом нулевого момента функции