

Асимптотика матричных элементов интеграла столкновений в изотропном случае

© Э.А. Тропп,¹ Л.А. Бакалейников,¹ А.Я. Эндер,¹ И.А. Эндер²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
e-mail: bakal@ammp.ioffe.rssi.ru

(Поступило в Редакцию 20 февраля 2003 г.)

Использование нелинейного моментного метода для решения уравнения Больцмана приводит к необходимости вычисления матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений. Численное определение МЭ представляет значительные трудности, особенно в области больших значений индексов. Построены асимптотики МЭ интеграла столкновений. В случае модели „псевдостепенного“ взаимодействия частиц получена формула для линейных МЭ, не содержащая суммирования. Это в свою очередь позволило найти асимптотическое поведение линейных и нелинейных элементов при большом значении двух индексов. Для произвольных сечений взаимодействия получены асимптотические разложения линейных и нелинейных МЭ по одному индексу. В случае максвелловских молекул получены асимптотические формулы для ситуации, когда все три индекса имеют большое значение.

Введение

Нелинейный моментный метод для решения уравнения Больцмана основан на представлении функции распределения в виде ряда по базисным функциям и переходе к системе дифференциальных уравнений для коэффициентов разложения. Одной из главных трудностей при использовании такого подхода является расчет матрицы, соответствующей моментам от нелинейного интеграла столкновений. При больших значениях индексов формулы оказываются исключительно громоздкими, что не позволяет выполнить расчеты матричных элементов (МЭ) даже на современных ЭВМ. Так, в [1] для изотропного по скоростям уравнения Больцмана в предположении о независимости сечения рассеяния от углов были получены формулы, содержащие шестикратное суммирование. В [2] при произвольной угловой зависимости сечения рассеяния были получены формулы с четырехкратным суммированием. При расчетах по формулам [1,2] машинное время быстро возрастает, а точность падает с ростом индексов матричных элементов.

В работе [3] для изотропного по скоростям уравнения Больцмана на основе инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций были получены рекуррентные соотношения, связывающие матричные элементы. При этом оказалось, что нелинейные матричные элементы могут быть определены через линейные. В [4] показано, что аналогичная ситуация имеет место и для осесимметричного по скоростям уравнения Больцмана, когда функция распределения зависит от двух скоростных переменных. Авторами [4] была исследована структура столкновительного оператора и свойства МЭ для сферически сим-

метричного потенциала взаимодействия. Это позволило определить тот набор индексов, для которых только и могут встречаться ненулевые нелинейные матричные элементы. Более того, было обнаружено, что обнуление некоторых нелинейных МЭ приводит к возникновению дополнительных связей между линейными изотропными и нелинейными элементами и в конечном счете к возможности определения вторых через первые. Это в свою очередь означает, что все нелинейные осесимметричные матричные элементы могут быть определены через линейные изотропные. В связи с этим исследование МЭ для изотропного случая приобретает особую важность.

Развитый в [3,4] подход к расчету МЭ на основе рекуррентных соотношений существенно сократил время счета и позволил провести вычисления МЭ до значений индексов, равных 128. Вычисление МЭ с еще большими значениями индексов может быть осуществлено с помощью асимптотического подхода. Этот подход позволяет также определить поведение МЭ при стремлении индексов к бесконечности и исследовать зависимость МЭ от сечения рассеяния сталкивающихся частиц.

В настоящей работе построены асимптотики линейных и нелинейных МЭ в изотропном случае. В случае модели „псевдостепенного“ взаимодействия частиц, т.е. взаимодействия, которому соответствует сечение с той же зависимостью от скорости, как и в случае степенных потенциалов, но в предположении изотропного перераспределения по углам, получена формула для линейных МЭ, не содержащая суммирования. Это в свою очередь позволило найти асимптотику линейных и нелинейных элементов при большем значении двух индексов. Для случая максвелловских молекул получена асимптотика МЭ по трем индексам.

Основные соотношения

При применении моментного метода к решению уравнения Больцмана функция распределения раскладывается по базисным функциям и уравнение сводится к системе уравнений для коэффициентов разложения. В том случае, когда функция распределения изотропна, в качестве базисных функций выбирают полиномы Сонина

$$S_{1/2}^r(x) = \sum_{p=0}^r \frac{\Gamma(r+3/2)x^{2p}}{p!(r-p)!\Gamma(p+3/2)}. \quad (1)$$

Эти полиномы ортогональны с максвелловской весовой функцией $M(v, T_0)$

$$\int M(v, T_0) S_{1/2}^r(mv^2/2kT_0) S_{1/2}^s(mv^2/2kT_0) v^2 dv = v_r \delta_{r,s},$$

$$M(v, T_0) = (m/2kT_0\pi)^{3/2} \exp(-mv^2/2kT_0),$$

$$v_r = (2r+1)!!/(2r)!! \quad (2)$$

Здесь m — масса частицы, T_0 — температура газа, k — постоянная Больцмана, v_r — квадрат нормы полинома Сонина. Разложение функции распределения в изотропном случае имеет вид

$$f(v, t) = n_0 M(v, T_0) \sum_{r=0}^{\infty} C_r(t) S_{1/2}^r(mv^2/2kT_0), \quad (3)$$

где n_0 — числовая плотность частиц.

Подстановка этого разложения в уравнение Больцмана с последующим умножением обеих частей уравнения на $S_{1/2}^r(mv^2/2kT_0)$ и интегрированием по скоростям дает

$$dC_r/dt = \sum_{r_1, r_2} K_{r_1, r_2}^r C_{r_1} C_{r_2}. \quad (4)$$

Матричные элементы K_{r_1, r_2}^r определяются через интеграл столкновений $I(f, f)$ следующим образом:

$$K_{r_1, r_2}^r = 4\pi \left(\int_0^{\infty} S_{1/2}^r I(M S_{1/2}^{r_1}, M S_{1/2}^{r_2}) v^2 dv \right) / v_r. \quad (5)$$

Интеграл столкновений $I(f, f)$ представляет собой нелинейный интегральный оператор вида

$$I(f, f) = \int (f(v_1) f(v_2) - f(v) f(v')) g \sigma(g, \Theta) dv' dk. \quad (6)$$

Здесь v, v', v_1, v_2 — скорости сталкивающихся частиц до и после взаимодействия; $g = |\mathbf{g}| = |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|$ — относительная скорость частиц; \mathbf{k} — единичный вектор, направленный вдоль вектора относительной скорости частиц после столкновения; $\sigma(g, \Theta)$ — дифференциальное сечение рассеяния. Угол рассеяния Θ определяется соотношением $\cos \Theta = \mathbf{kg}/|\mathbf{g}|$.

В том случае, когда один из индексов r_1 или r_2 МЭ K_{r_1, r_2}^r равен нулю, интеграл столкновений превращается в линейный оператор.

В работе [3] приведены выражения для линейных и нелинейных МЭ для произвольных степенных потенциалов взаимодействия. Линейные матричные элементы $K_{0, n}^r$ и $K_{n, 0}^r$ содержат однократные суммы, число слагаемых в которых определяется минимальным значением индексов n и r . Выражения для нелинейных МЭ в случае степенных потенциалов взаимодействия содержат четырехкратные суммы; при больших значениях индексов их вычисление оказывается чрезвычайно громоздким. В связи с этим для расчета K_{r_1, r_2}^r в [3] было предложено использовать основное соотношение, связывающее матричные элементы и являющееся следствием инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций. Это соотношение имеет вид

$$K_{p, n}^r = \frac{1}{p} \left[(n+p-r-1-\mu) K_{p-1, n}^r + r K_{p-1, n}^{r-1} - (n+1) K_{p-1, n+1}^r \right] \quad (7)$$

и дает возможность последовательно отыскивать матричные элементы с увеличивающимся первым нижним индексом. Аналогичное соотношение может быть записано для отыскания МЭ с увеличивающимся вторым нижним индексом

$$K_{n, p}^r = \frac{1}{p} \left[(n+p-r-1-\mu) K_{n, p-1}^r + r K_{n, p-1}^{r-1} - (n+1) K_{n+1, p-1}^r \right]. \quad (8)$$

Ясно, что соотношения (7), (8) позволяют найти нелинейные матричные элементы с произвольными индексами из линейных элементов $K_{0, n}^r, K_{n, 0}^r$.

Изложенная вычислительная схема была применена в [3] для расчета нелинейных МЭ. Это позволило увеличить максимальное количество N_0 членов в разложении функции распределения до значения $N_0 = 128$. Оказалось, что для вычисления нелинейных МЭ с большими значениями индексов необходимо иметь значения линейных элементов с очень малой погрешностью. При расчете МЭ в [3] для преодоления этой трудности использовались процедуры точной арифметики, обеспечивающие проведение точных расчетов с большим количеством десятичных разрядов. В результате погрешность расчетов всех МЭ до $N_0 = 128$ не превышала 10^{-8} . Это открывает возможности для прямой проверки сходимости асимптотических формул. Построение асимптотики МЭ позволяет естественным образом распространить процедуру их вычисления на область очень больших значений индексов.

Асимптотика линейных матричных элементов

Полученные в работе [3] выражения для линейных МЭ имеют вид

$$K_{0,n}^r = \left(\frac{4kT_0}{m}\right)^\mu \frac{r!}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n}} \times \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q+\mu+3/2) J_q/q!, \quad (9)$$

$$K_{n,0}^r = \left(\frac{4kT_0}{m}\right)^\mu \frac{r!}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n}} \times \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q+\mu+3/2) \tilde{J}_q/q! \quad (10)$$

Здесь

$$W_{r,q}^n = \frac{-\mu(-\mu+1)\dots(-\mu+n+r-2q-1)}{(n-q)!(r-q)!} = \frac{\Gamma(-\mu+n+r-2q)}{\Gamma(-\mu)(n-q)!(r-q)!}. \quad (11)$$

Эти выражения были получены для степенных потенциалов взаимодействия, когда зависимость дифференциального сечения от угла рассеяния и от относительной скорости частиц может быть разделена, т.е.

$$\sigma(g, \Theta) = \frac{1}{4\pi} g^{\gamma-1} F_\gamma((\sin \Theta/2)^2). \quad (12)$$

При этом параметр μ в формулах (9), (10) связан с γ соотношением $\mu = \gamma/2$, а коэффициенты J_q и \tilde{J}_q представляют собой интегралы от угловой части сечения $F_\gamma(z)$ с весами z^q и $((1-z)^q - 1)$ соответственно

$$J_q = 4\pi \int_0^1 F_\gamma(z) z^q dz,$$

$$\tilde{J}_q = 4\pi \int_0^1 F_\gamma(z) ((1-z)^q - 1) dz. \quad (13)$$

В работах по кинетической теории газов часто используется модель „псевдостепенного“ взаимодействия частиц, которой соответствует дифференциальное сечение (10) с $F(z) = 1/4\pi$, т.е. рассеяние частиц при взаимодействии предполагается изотропным. При этом

$$J_q = \frac{1}{q+1}, \quad \tilde{J}_q = \frac{1}{q+1} - 1. \quad (13a)$$

В этом случае выражение (9) для линейных МЭ может быть преобразовано к виду, значительно более удобному для построения асимптотики и численного расчета.

Для реализации такого преобразования заметим, что сумма, входящая в (9), с учетом (13a) приобретает вид

$$S = \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q+\mu+3/2) J_q/q! = \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} \frac{\Gamma(q+\mu+3/2) \Gamma(-\mu+n+r-2q)}{(n-q)!(r-q)! \Gamma(-\mu)(q+1)!}. \quad (14)$$

Факториалы, входящие в знаменатель членов суммы, преобразуем следующим образом:

$$(r-q)! = \frac{r!}{(r-q+1)\dots(r-1)r} = \frac{r!}{(-1)^q (-r)(-r+1)\dots(-r+q-1)} = \frac{(-1)^q r!}{(-r)_q}, \quad (15)$$

$$(n-q)! = \frac{(-1)^q n!}{(-n)_q}. \quad (16)$$

Здесь через $(a)_q$ обозначены символы Похгаммера

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_q = a(a+1)\dots(a+q-1); \quad q = 1, 2, 3, \dots, \quad (17)$$

Γ — функция, входящая в числитель членов суммы в (14), может быть записана в виде

$$\Gamma(-\mu+n+r-2q) = \frac{\pi}{\sin(\pi\mu)(-1)^{n+r+1} \Gamma(1+\mu-n-r+2q)} = \frac{\pi^{3/2}}{\sin(\pi\mu)(-1)^{n+r+1} 2^{\mu-n-r+2q} \Gamma(q+(\mu+1-n-r)/2) \times \Gamma(q+(\mu+1-n-r)/2+1/2)}. \quad (18)$$

Подставляя (15), (16), (18) в (14) и учитывая, что $(a)_p = \Gamma(a+p)/\Gamma(a)$, найдем

$$S = \frac{\pi \Gamma(\mu+1/2) (-1)^{r+n+1}}{4\Gamma(-\mu)(n+1)!(r+1)! \sin(\pi\mu) \Gamma(\mu-1-r-n)} \times \sum_{p=2}^{\min(n,r)+1} \frac{(\mu+1/2)_p (-n-1)_p (-r-1)_p}{((\mu-1-r-n)/2)_p ((\mu-1-r-n)/2+1/2)_p p!}. \quad (19)$$

Заметим теперь, что

$$\sum_{p=0}^{\infty} \frac{(a)_p (b)_p (c)_p}{(d)_p (e)_p p!} z^p = {}_3F_2 \left(\begin{matrix} a, b, c \\ d, e \end{matrix} \middle| z \right). \quad (20)$$

В том случае, когда один из верхних индексов представляет собой отрицательное целое число, ряд содержит конечное число членов и сумма в (19) может быть

представлена в виде

$$s = \sum_{p=2}^{\min(n,r)+1} \frac{(\mu+1/2)_p(-n-1)_p(-r-1)_p}{((\mu-1-r-n)/2)_p \times ((\mu-1-r-n)/2+1/2)_p p!}$$

$$= {}_3F_2 \left(\begin{matrix} \mu+1/2-n-1-r-1 \\ (\mu-1-n-r)/2, (\mu-1-n-r)/2+1/2 \end{matrix} \middle| z=1 \right) - 1 - \frac{4(\mu+1/2)(-n-1)(-r-1)}{(\mu-1-r-n)(\mu-r-n)}. \quad (21)$$

Согласно теореме Заальшютца [5], при выполнении условий $c = -m$ (m — целое), $e + d = a + b + c + 1$ значение гипергеометрической функции ${}_3F_2 \left(\begin{matrix} a, b, c \\ d, e \end{matrix} \middle| z=1 \right)$ дается формулой

$${}_3F_2 \left(\begin{matrix} a, b, -m \\ d, 1+a+b-d-m \end{matrix} \middle| z=1 \right) = \frac{(d-a)_m(d-b)_m}{(d)_m(d-a-b)_m}. \quad (22)$$

В рассматриваемом случае требуемое соотношение индексов выполняется и

$$s = \frac{(-\mu/2-1-n/2-r/2)_{R_1+1} \times (\mu/2-1/2-n/2-r/2+R_1+1)_{R_1+1}}{(\mu/2-1/2-n/2-r/2)_{R_1+1} \times (-\mu/2-n/2-r/2+R_1)_{R_1+1}} - 1 - \frac{4(\mu+1/2)(-n-1)(-r-1)}{(\mu-n-r)(\mu-n-r-1)}. \quad (23)$$

Здесь $R = \min(n, r)$, $R_1 = \max(n, r)$. Учитывая (23), (19), найдем, что линейный МЭ $K_{0,n}^r$ представляется в виде

$$K_{0,n}^r = \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r!n_0^2}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n+2}}$$

$$\times \frac{\Gamma(\mu+1/2)\Gamma(r+n+2-\mu)}{\Gamma(-\mu)(n+1)!(r+1)!}$$

$$\times \left[\frac{((-\mu-n-r)/2-1)_{R_1+1}((\mu-n-r)/2+R_1+1/2)_{R_1+1}}{((\mu-1-n-r)/2)_{R_1+1}((-\mu-n-r)/2+R_1)_{R_1+1}} - 1 - \frac{4(\mu+1/2)(n+1)(r+1)}{(\mu-n-r)(\mu-n-r-1)} \right]. \quad (24)$$

Выражение (24) и является искомым представлением для линейного МЭ.

Численные расчеты показывают, что наибольшие значения имеют линейные матричные элементы с незначительно различающимися индексами r и n , и, следовательно, именно в этом случае асимптотика представляет наибольший интерес. Полученное выражение (24) дает возможность построить такую асимптотику. Будем считать, что $r \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, так что разность между значениями индексов остается фиксированной, т. е. $R \rightarrow \infty$, $R_1 \rightarrow \infty$

и $\Delta = R_1 - R$ фиксировано. Найдем вначале асимптотику дроби Z_1 , содержащей похгаммеровские символы в квадратных скобках в выражении (24). Учитывая, что $r + n = 2R + \Delta$, и используя соотношение

$$(\alpha - (R + 1))_{R+1} = (\alpha - (R + 1))(\alpha - (R + 1) + 1) \dots$$

$$\dots (\alpha - (R + 1) + R) = (-1)^{R+1}(-\alpha + 1)(-\alpha + 2) \dots$$

$$\dots (-\alpha + (R + 1)) = (-1)^{R+1}(-\alpha + 1)_{R+1}, \quad (25)$$

преобразуем Z_1 следующим образом:

$$Z_1 = \frac{((-\mu-n-r)/2-1)_{R_1+1} \times ((\mu-n-r)/2+R_1+1/2)_{R_1+1}}{((\mu-1-n-r)/2)_{R_1+1}((-\mu-n-r)/2+R_1)_{R_1+1}}$$

$$= \frac{((\mu+\Delta)/2+1)_{R_1+1}((\mu+\Delta+1)/2)_{R_1+1}}{((-\mu+\Delta)/2)_{R_1+1}((-\mu+\Delta+1)/2)_{R_1+1}}. \quad (26)$$

Переходя от похгаммеровских символов к отношению Г-функций и используя асимптотику отношения Г-функций с большими аргументами (см., например, [5])

$$\frac{\Gamma(z+\alpha)}{\Gamma(z+\beta)} = z^{\alpha-\beta} \left(1 + \frac{1}{2z}(\alpha-\beta)(\alpha+\beta-1) + O(z^{-2}) \right),$$

$$z \rightarrow \infty, \quad (27)$$

найдем

$$Z_1 = 2^{2\mu+1} \frac{\Gamma(-\mu+\Delta)}{\Gamma(\mu+\Delta+1)} \cdot (R+1)^{2\mu+1}$$

$$\times \left[1 + \frac{1}{2(R+1)}(2\mu+1)\Delta + O((R+1)^{-2}) \right],$$

$$R \rightarrow \infty. \quad (28)$$

Асимптотика второй дроби Z_2 в квадратных скобках выражения (24) очевидна:

$$Z_2 = \frac{4(\mu+1/2)(n+1)(r+1)}{(\mu-n-r)(\mu-n-r-1)}$$

$$= \frac{(\mu+1/2)(R+1)(R+\Delta+1)}{((\mu-\Delta)/2-R)((\mu-\Delta)/2-R-1/2)}$$

$$= (\mu+1/2) \left[1 + \frac{\mu+3/2}{R+1} + O((R+1)^{-2}) \right], \quad R \rightarrow \infty. \quad (29)$$

Асимптотику коэффициента перед квадратной скобкой в (25) легко найти, применяя формулу удвоения для Г-функции в числителе и формулу (27) для отношения Г-функций

$$U = \frac{r!\Gamma(r+n+2-\mu)}{\Gamma(r+3/2)2^{r+n+2}(n+1)!(r+1)!} = 2^{-\mu-1}$$

$$\times (R+1)^{-\mu-2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[1 + \frac{B}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right],$$

$$R \rightarrow \infty,$$

$$B = ((-\mu + \Delta) - 2)(-\mu + \Delta)/4 + (-\mu - \Delta - 1)(-\mu + 3\Delta + 1)/4 - (\Delta_1 - 1/4),$$

$$\Delta_1 = \begin{cases} 0 & r \leq n, \\ \Delta & r > n. \end{cases} \quad (30)$$

Собирая (28)–(30), окончательно получим выражение для асимптотики линейного элемента

$$K_{0,n}^r = P(\mu) \left\{ 2^\mu \frac{\Gamma(-\mu + \Delta)}{\Gamma(\mu + \Delta + 1)} (R + 1)^{\mu-1} \times \left[1 + \frac{A}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right] - 2^{-\mu-1}(\mu + 3/2) \times (R+1)^{-\mu-2} \left[1 + \frac{B + 2\mu + 1}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right] \right\},$$

$$R \rightarrow \infty,$$

$$P(\mu) = \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{\Gamma(\mu + 1/2)n_0^2}{\Gamma(-\mu)\sqrt{\pi}},$$

$$A = B + \Delta(2\mu + 1). \quad (31)$$

Из (31) видно, что асимптотика $K_{0,n}^r$ состоит из двух частей, главные члены которых ведут себя как $(R+1)^{\mu-1}$, $(R+1)^{-\mu-2}$ соответственно. Основной вклад в асимптотику определяется той или иной частью в зависимости от значения параметра μ : при $\mu > -1/2$ основной вклад дает первый член, при $\mu < -1/2$ — второй. Отметим, что при $\mu = 0$ найденные члены асимптотики обращаются в нуль, если $\Delta \neq 0$. При $\Delta = 0$ имеем

$$K_{0,r}^r = n_0^2(r+1)^{-1} \left(1 + O((r+1)^{-2}) \right). \quad (32)$$

Этот результат соответствует известной формуле для линейного элемента в случае псевдомаксвелловских молекул

$$K_{0,n}^r = \frac{n_0^2}{r+1} \delta_{r,n}. \quad (33)$$

Перейдем теперь к отысканию асимптотики линейных МЭ по индексам n и r в общем случае, когда дифференциальное сечение взаимодействия частиц (12) неизотропно. Рассмотрим прежде всего асимптотику $K_{0,n}^r$ при $r \rightarrow \infty$ и фиксированном значении n . Используя формулу для отношения Γ -функций с большими аргументами (27), из (11) найдем

$$W_{r,q}^n = \frac{1}{\Gamma(-\mu)(n-q)!} r^{n-q-\mu-1} \times \left[1 + \frac{1}{2r}(n-q-\mu-1)(n-3q-\mu) + O(r^{-2}) \right],$$

$$r \rightarrow \infty. \quad (34)$$

Из (32) видно, что сумма, входящая в выражение для $K_{0,n}^r$, представляет собой асимптотическое разложение

и главный вклад определяется членом суммы с $q = 1$. Подставляя (34) в (9) и учитывая (27), для первых членов разложения $K_{0,n}^r$ имеем

$$K_{0,n}^r = \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{n_0^2}{2^{n-2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu + 5/2)}{\Gamma(-\mu)(n-1)!} 2^{-r} r^{n-\mu-5/2} \times \left\{ J_1 + \frac{1}{r} \left[J_1 \left(\frac{(n-\mu-2)(n-\mu-3)}{2} - \frac{3}{8} \right) + 2J_2(\mu + 5/2)(n-1) \right] + O(r^{-2}) \right\}, \quad r \rightarrow \infty \quad (35)$$

Асимптотика по второму индексу может быть найдена аналогично. При этом получаем

$$W_{r,q}^n = \frac{\Gamma(-\mu + n + r - 2q)}{\Gamma(-\mu)(r-q)! \Gamma(n-q+1)} = \frac{1}{\Gamma(-\mu)(r-q)!} \times n^{-\mu+r-q-1} \left[1 + \frac{1}{2n}(r-\mu-q-1)(r-\mu-3q) + O(n^{-2}) \right],$$

$$n \rightarrow \infty, \quad (36)$$

что в свою очередь дает

$$K_{0,n}^r = \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r!n_0^2}{\Gamma(r+3/2)2^{r-2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu + 5/2)}{\Gamma(-\mu)(r-1)!} \times 2^{-n} n^{r-\mu-2} \left\{ J_1 + \frac{1}{n} \left[J_1 \frac{(r-\mu-2)(r-\mu-3)}{2} + 2J_2(\mu + 5/2)(r-1) \right] + O(n^{-2}) \right\}, \quad n \rightarrow \infty. \quad (37)$$

Асимптотика линейных МЭ с другим порядком нижних индексов может быть получена из формул (35), (37) заменой коэффициентов J_q на \tilde{J}_q . Это следует из сравнения выражений (9) и (10).

Асимптотика нелинейных матричных элементов

Полученные в предыдущем разделе результаты совместно с рекуррентными соотношениями (7), (8) позволяют построить асимптотику нелинейных элементов $K_{p,n}^r$. Для модели псевдостепенного взаимодействия можно определить поведение $K_{p,n}^r$ при фиксированном p и больших значениях индексов r, n , подставляя асимптотику (31) в рекуррентное соотношение (7). При этом, однако, необходимо учесть, что $R = \min(r, n)$, и для вычисления результата подстановки следует рассмотреть два случая. В первом случае $r > n$, что дает $R = n$, $\Delta = |r - n| = r - n \geq 1$. Во втором случае $r \leq n$, при этом $R = r$, $\Delta = n - r \geq 0$. Переходя в рекуррентном соотношении от переменных r, n к переменным R, Δ , для

указанных случаев найдем

$$K_{1,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta - 1)}{\Gamma(\mu + \Delta)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r > n, \quad (38a)$$

$$K_{1,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta + 1)}{\Gamma(\mu + \Delta + 2)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r \leq n. \quad (38b)$$

Для отыскания асимптотики элемента $K_{2,n}^r$ придется рассматривать уже три случая: $r > n + 1$, $r = n + 1$, $r < n + 1$, поскольку для $K_{1,m}^q$, входящих в рекуррентное соотношение (7) при $p = 2$, необходимо будет использовать (38a) или (38b) в зависимости от соотношения между q и m . Это дает

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta - 2)}{\Gamma(\mu + \Delta - 1)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r > n + 1, \quad (39a)$$

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + 1)}{\Gamma(\mu + 2)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r = n + 1, \quad (39b)$$

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta + 2)}{\Gamma(\mu + \Delta + 3)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r < n + 1. \quad (39c)$$

Заметим теперь, что формулы (31), (38), (39) для асимптотики элементов $K_{p,n}^r$ при $p = 0, 1, 2$ могут быть представлены в виде

$$K_{p,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + |r - n - p|)}{\Gamma(\mu + |r - n - p| + 1)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - (\mu + 3/2) 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}. \quad (40)$$

По индукции можно показать, что эта формула справедлива и при $p > 2$. При доказательстве этого факта необходимо рассмотреть три случая: $r \geq n + p + 1$, $n < r < n + p + 1$, $r \leq n$. Такой выбор границ диапазонов индексов диктуется необходимостью раскрытия знака модуля в аргументах Γ -функций и связью переменных r, n с R . Полученная формула (40) представляет асимптотику МЭ при фиксированных p и $\Delta = |r - n|$ и больших значениях r, n для случая псевдостепенного взаимодействия частиц.

Отыскание асимптотики нелинейных МЭ по одному индексу при фиксированных остальных осуществляется таким же приемом. Запишем асимптотику МЭ $K_{0,n}^r$ при фиксированном n и $r \rightarrow \infty$ в виде

$$K_{0,n}^r = \tilde{P}(\mu) \frac{r^{n-\mu-5/2}}{2^{n+r-2}(n-1)!} \left\{ J_1 + \frac{1}{r} C_0(n, \mu) + O(r^{-2}) \right\}, \quad (41)$$

где

$$\tilde{P}(\mu) = \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{\Gamma(\mu + 5/2)n_0^2}{\Gamma(-\mu)}, \quad (41a)$$

$$C_0(n, \mu) = J_1 \left(\frac{(n - \mu - 2)(n - \mu - 3)}{2} - \frac{3}{8} \right) + 2J_2(\mu + 5/2)(n - 1). \quad (42)$$

Подставляя это выражение в рекуррентное соотношение (7) и выделяя главные члены по r , найдем асимптотику $K_{1,n}^r$. Асимптотика элементов $K_{p,n}^r$ при любом конечном значении r находится повторным применением той же процедуры. Методом индукции можно показать, что

$$K_{p,n}^r = \tilde{P}(\mu) \left\{ (n - p) \frac{r^{n-\mu+p-5/2}}{2^{n+r+p-2}n!p!} J_1 + \frac{r^{n-\mu+p-7/2}}{2^{n+r+p-2}(n-1)!} C_p(n, \mu) + O\left(\frac{r^{n-\mu+p-9/2}}{2^r}\right) \right\}. \quad (43)$$

Коэффициенты $C_p(n, \mu)$ связаны соотношением

$$C_p(n, \mu) = \frac{2}{p} \left(C_{p-1}(n, \mu) - \frac{n+1}{2n} C_{p-1}(n+1, \mu) \right) - \frac{2}{np!} (n - \mu + p - 6)(n - p + 1)J_1. \quad (44)$$

Для отыскания $C_p(n, \mu)$ в явном виде заметим, что $C_0(n, \mu)$ как функция от n является линейной комбинацией степеней n^i ($i = 0, 1, 2$), а оператор

$$L(F(n)) = F(n) - \frac{n+1}{2n} F(n+1)$$

переводит n^i при $i \geq 0$ в линейную комбинацию вида

$$\sum_{j=-1}^i T_j^i \cdot n^j.$$

Учитывая, что $L(n^{-1}) = (1/2)n^{-1}$ и что свободный член в (44) является комбинацией тех же степеней индекса n , найдем

$$\begin{aligned} C_p(n, \mu) &= \frac{A_2}{p!} F_2(n) + \frac{1}{p!} F_1(n) [A_1 - 3pA_2 - 2pJ_1] \\ &+ \frac{1}{p!} F_0(n) [A_0 - 2pA_1 + 3p(p-2)A_2 + 2J_1p(p+\mu+4)] \\ &- \frac{1}{(p-1)!} F_{-1}(n) [A_0 + A_2 - A_1(p-2) \\ &+ A_2(p-1)(p-5) + 2J_1(p-1)(\mu+4)], \end{aligned} \quad (45)$$

где

$$\begin{aligned} A_2 &= J_1/2, \quad A_1 = (\mu + 5/2)(2J_2 - J_1), \\ A_0 &= \frac{J_1}{2} \left((\mu + 2)(\mu + 3) - \frac{3}{4} \right) - 2J_2(\mu + 5/2). \end{aligned} \quad (46)$$

Заметим, что формула (43) верна лишь для значений индексов $p \leq n$. При $p = n$ порядок главного члена меняется и общая закономерность построения $K_{n+1,n}^r$ по рекуррентному соотношению (7) нарушается. Асимптотика элементов с другим порядком нижних индексов может быть легко получена из асимптотики (43), (45) заменой J_q на \tilde{J}_q . Действительно, для линейных элементов $K_{0,n}^r$ и $K_{n,0}^r$ это справедливо, а рекуррентные соотношения для определения $K_{n,p}^r$ через $K_{n,p-1}^r$, $K_{n,p-1}^{r-1}$, $K_{n+1,p-1}^r$ совпадают с рекуррентными соотношениями для определения $K_{p,n}^r$ через $K_{p-1,n}^r$, $K_{p-1,n}^{r-1}$, $K_{p-1,n+1}^r$. Поэтому

$$\begin{aligned} K_{p,n}^r &= \tilde{P}(\mu) \left\{ (n-p) \frac{r^{n-\mu+p-5/2}}{2^{n+r+p-2} n! p!} \tilde{J}_1 \right. \\ &+ \left. \frac{r^{n-\mu+p-7/2}}{2^{n+r+p-2} (n-1)!} \tilde{C}_p(n, \mu) + O\left(\frac{r^{n-\mu+p-9/2}}{2^r}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \tilde{C}_p(n, \mu) &= \frac{\tilde{A}_2}{p!} F_2(n) + \frac{1}{p!} F_1(n) [\tilde{A}_1 - 3p\tilde{A}_2 - 2p\tilde{J}_1] \\ &+ \frac{1}{p!} F_0(n) [\tilde{A}_0 - 2p\tilde{A}_1 + 3p(p-2)\tilde{A}_2 + 2\tilde{J}_1p(p+\mu+4)] \\ &- \frac{1}{(p-1)!} F_{-1}(n) [\tilde{A}_0 + \tilde{A}_2 - \tilde{A}_1(p-2) \\ &+ \tilde{A}_2(p-1)(p-5) + 2\tilde{J}_1(p-1)(\mu+4)], \end{aligned} \quad (48)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}_2 &= \tilde{J}_1/2, \quad \tilde{A}_1 = (\mu + 5/2)(2\tilde{J}_2 - \tilde{J}_1), \\ A_0 &= \frac{\tilde{J}_1}{2} \left((\mu + 2)(\mu + 3) - \frac{3}{4} \right) - 2\tilde{J}_2(\mu + 5/2). \end{aligned} \quad (49)$$

Эта асимптотика также справедлива для $p \leq n$. В том случае, когда $p = n$, выражения для $C_n(n, \mu)$, $\tilde{C}_n(n, \mu)$ могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} C_n(n, \mu) &= \frac{4(\mu + 5/2)}{n!} (J_2 - J_1), \\ \tilde{C}_n(n, \mu) &= \frac{4(\mu + 5/2)}{n!} (\tilde{J}_2 - \tilde{J}_1), \end{aligned} \quad (50)$$

что с учетом соотношений $\tilde{J}_1 = -J_1$, $\tilde{J}_2 = J_2 - 2J_1$ дает $\tilde{C}_n(n, \mu) = C_n(n, \mu)$. Это в свою очередь означает, что асимптотика элемента $K_{n,n}^r$ может рассчитываться по любой из формул (43), (47).

Асимптотика нелинейных элементов $K_{p,n}^r$ при больших n находится так же. Записывая формулу (37) в виде

$$\begin{aligned} K_{0,n}^r &= \tilde{P}(\mu) \frac{r}{\Gamma(r+3/2)} \\ &\times \frac{n^{r-\mu-2}}{2^{n+r-2}} \left\{ J_1 + \frac{1}{n} D_0(r, \mu) + O(n^{-2}) \right\}, \end{aligned} \quad (51)$$

где

$$\begin{aligned} D_0(r, \mu) &= J_1 \frac{(-\mu+r-2)(-\mu+r-3)}{2} \\ &+ 2J_2(\mu+5/2)(r-1), \end{aligned} \quad (52)$$

и последовательно используя рекуррентное соотношение (7), получим

$$\begin{aligned} K_{p,n}^r &= \tilde{P}(\mu) \frac{r}{\Gamma(r+3/2)} \left\{ \frac{n^{r+p-\mu-2}}{2^{n+r+p-2}} \frac{1}{p!} J_1 \right. \\ &+ \left. \frac{n^{r+p-\mu-3}}{2^{n+r+p-2}} \frac{1}{p!} D_p(r, \mu) + O(n^{r-\mu+p-4}) \right\}, \end{aligned} \quad (53)$$

$$D_p(r, \mu) = D_{p-1}(r, \mu) + (-\mu - 3r + p)J_1. \quad (54)$$

Замечая, что $D_1(r, \mu) = (-\mu - 3r)J_1 + 1 \cdot J_1 + D_0(r, \mu)$, легко найти явный вид коэффициента $D_p(r, \mu)$:

$$\begin{aligned} D_p(r, \mu) &= p(-\mu - 3r)J_1 + \sum_{i=1}^p iJ_1 + D_0(r, \mu) \\ &= p(-\mu - 3r)J_1 + \frac{(p+1)p}{2} J_1 + D_0(r, \mu). \end{aligned} \quad (55)$$

Необходимо отметить, что найденные асимптотики МЭ по одному индексу справедливы для произвольной зависимости дифференциального сечения от угла рассеяния.

Сравнение асимптотики матричных элементов с их точными значениями

Полученные в предыдущих разделах выражения для асимптотик МЭ были сопоставлены с результатами численных расчетов. Прежде всего было проведено сравнение вычисленных значений $K_{0,n}^r$ с аналитическим выражением (24) для линейного МЭ в случае псевдо-степенного взаимодействия частиц. Численно найденные величины $K_{0,n}^r$ совпадают с результатом расчета по формуле (24) с высокой степенью точности при $\mu \in [-1.5, 1]$ и значениях индексов $0 \leq r \leq 100$, $0 \leq n \leq 100$. Это подтверждает надежность разработанного для численного определения $K_{0,n}^r$ алгоритма.

Для оценки качества асимптотических приближений в случае псевдостепенных потенциалов были найдены отношения $\eta(r; n; \mu) = \tilde{K}_{0,n}^r / K_{0,n}^r$, где через $\tilde{K}_{0,n}^r$ обозначена сумма явно выделенных членов асимптотики в выражениях (35) или (37). Величина $K_{0,n}^r$ при этом вычислялась по формуле (24). Расчеты показали, что рост параметра μ приводит к некоторому замедлению выхода $K_{0,n}^r$ на асимптотическое значение, однако влияние это не очень сильное. Так, отношение $\eta(5; n; -1.5)$ достигает значения 0.9 при $n = 18$, а $\eta(5; n; 1)$ — при $n = 43$. В то же время величина индекса r существенно влияет на границу области близости асимптотических и точных значений $K_{0,n}^r$. Так, при $r = 3$ отношение $\eta(r; n; \mu)$ достигает значения 0.9 для $n = 13$, а при $r = 10$ — для $n = 100$. Причиной сильной чувствительности $\eta(r; n; \mu)$ к величине индекса r , как легко видеть, является неравномерность асимптотического разложения (37). Аналогичная ситуация имеет место и для асимптотики $K_{0,n}^r$ по индексу r , задаваемой формулой (35). В этом случае скорость выхода на асимптотическое значение сильно зависит от параметра n .

Большой интерес представляет сравнение точного выражения для МЭ $K_{0,n}^r$ и его асимптотического поведения при одновременном росте индексов r, n . Особая важность этого случая связана с тем, что именно в окрестности диагонали линейные матричные элементы приобретают максимальные значения. На рис. 1 приведены зависимости отношения $\tau(r; \Delta; \mu) = \tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$ от r при различных μ и $\Delta = 5$, где, как и раньше, через $\tilde{K}_{0,\Delta+r}^r$ обозначена сумма явно выделенных членов асимптотики в формуле (31). Влияние параметра μ на поведение $\tau(r; \Delta; \mu)$ вдали от значения $\mu = -1.5$ достаточно мало, и с ростом μ выход на асимптотику осуществляется несколько быстрее. При приближении к значению $\mu = -1.5$ выход на асимптотику существенно замедляется. Так, для $\mu = -1.4999$ и $\Delta = 5$ отно-

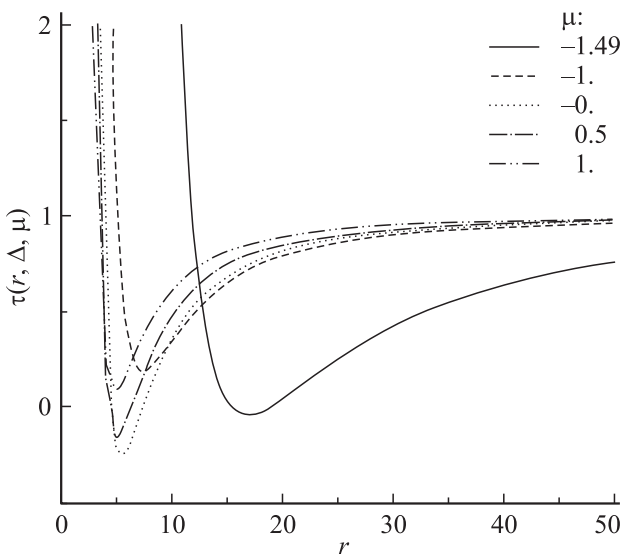


Рис. 1. Зависимость $\tau(r; \Delta; \mu) = \tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$ от индекса r при различных значениях μ и $\Delta = 5$.

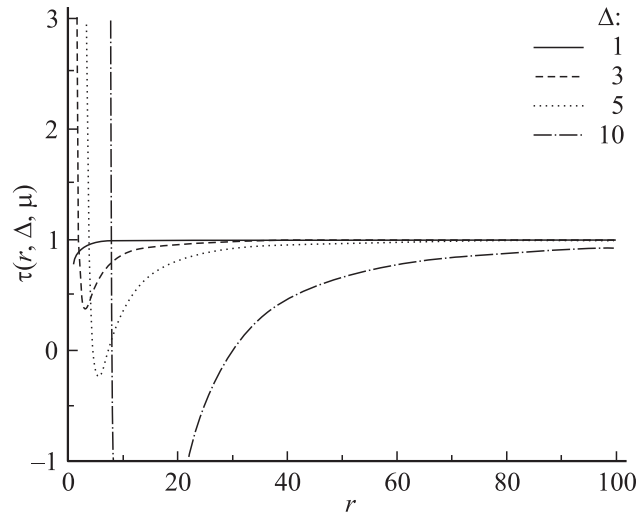


Рис. 2. Зависимость $\tau(r; \Delta; \mu) = \tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$ от индекса r при различных значениях Δ и $\mu = 0$.

шение $\tau(r; \Delta; \mu)$ достигает значения 0.9 при $r \approx 800$. Зависимость $\tau(r; \Delta; \mu)$ от Δ демонстрируется на рис. 2. Как видно, индекс Δ существенно влияет на поведение отношения $\tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$. С ростом Δ граница области близости асимптотических и точных значений линейных МЭ сдвигается в область больших r .

Асимптотические формулы (35), (37) сравнивались со значениями линейных МЭ и для потенциалов, включающих угловую зависимость. В этом случае формула (24) уже неприменима и для отыскания МЭ необходимо использовать численный алгоритм. Нами были рассчитаны $K_{0,n}^r$ некоторой гибридной модели, когда зависимость сечения от скорости выбиралась такой же, как для модели твердых шаров ($\mu = 0.5$), а угловая часть — как для истинно максвелловских молекул. Угловая часть сечения рассеяния для максвелловских молекул имеет вид [6]

$$F_M^{FU}(\Theta) = \frac{(\cos 2\varphi)^{1/2}}{4 \sin \Theta \sin 2\varphi (\cos^2 \varphi \cdot \mathbf{K}(\sin \varphi) - \cos 2\varphi \cdot \mathbf{E}(\sin \varphi))}, \quad (56)$$

где величины Θ, φ связаны соотношением

$$\frac{\pi - \Theta}{2} = (\cos 2\varphi)^{1/2} \cdot \mathbf{K}(\sin \varphi),$$

а $\mathbf{K}(k), \mathbf{E}(k)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно.

Зависимость (56) имеет особенность в окрестности точки $\Theta = 0$. При расчетах J_q, \tilde{J}_q по формуле (13) использовалась аппроксимация

$$F_M^{FU}(\Theta) \approx F_M(z) = \frac{\sqrt{1.5 \cdot \pi}}{64z^{5/4}} (1.00005 + 0.927579\sqrt{z} + 0.216338z), \quad z = \sin^2 \Theta / 2. \quad (57)$$

При такой аппроксимации погрешность в определении $F_M^{FU}(\Theta)$ не превышает 10^{-4} . Основные черты зависимости отношения $\eta(r; n; \mu) = \tilde{K}_{0,n}^r / K_{0,n}^r$ от параметра $n(r)$ при $r \rightarrow \infty (n \rightarrow \infty)$ остаются теми же, что и в случае псевдомолекул.

Сравнение асимптотики нелинейных МЭ $K_{p,n}^r$, задаваемой формулами (43), (47), (53), с численно найденными значениями для псевдостепенного потенциала при $\mu = 0.5$ приведено на рис. 3, 4. На рис. 3 представлена зависимость отношения $\eta(r, p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ от n при фиксированных r, p . Видно, что, как и для линейных элементов, граница выхода на асимптотику по индексу n существенно зависит от значений двух других индексов. Аналогичная ситуация имеет место и для асимптотики по индексу r , что иллюстрирует рис. 4. Такое поведение

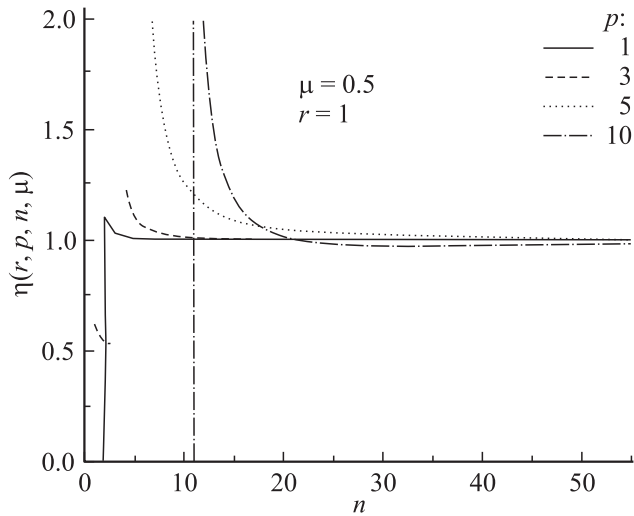


Рис. 3. Зависимость отношения $\eta(r, p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ для нелинейных элементов от индекса n при различных значениях p .

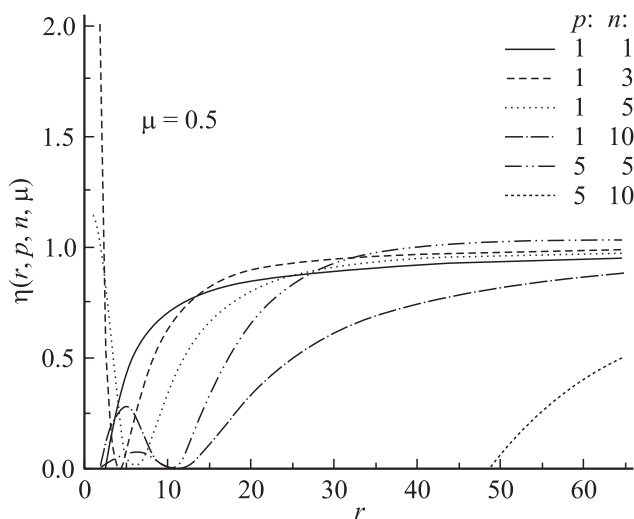


Рис. 4. Зависимость отношения $\eta(r, p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ для нелинейных элементов от индекса r при различных значениях p, n .

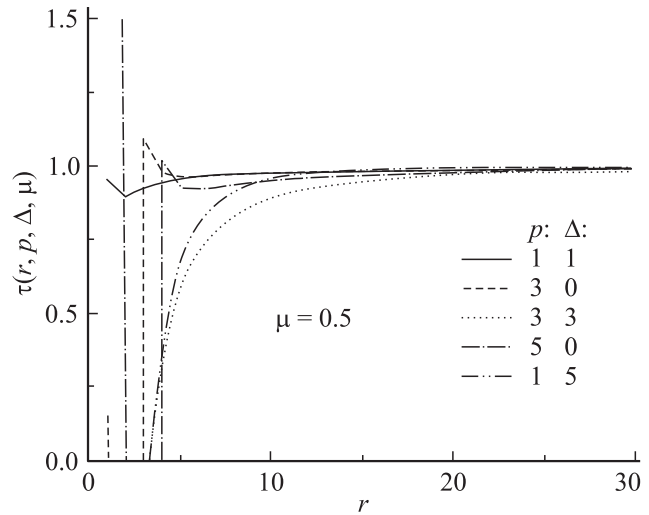


Рис. 5. Зависимость отношения $\tau(r, p, \Delta; \mu) = \tilde{K}_{p,\Delta+r}^r / K_{p,\Delta+r}^r$ для нелинейных элементов от индекса r при различных значениях p, Δ .

объясняется неравномерностью асимптотических разложений (43), (47), (53). Рис. 5 демонстрирует поведение отношения $\tau(r, p, \Delta; \mu) = \tilde{K}_{p,\Delta+r}^r / K_{p,\Delta+r}^r$ при росте r и фиксированных индексах p, Δ . Выход на асимптотику в этом случае происходит быстрее, чем для асимптотик по r и по n .

Асимптотика матричных элементов для максвелловских молекул

Полученные в предыдущих разделах асимптотические формулы охватывают случаи, когда один или два индекса МЭ стремятся к бесконечности. В то же время большой интерес представляет асимптотика при большом значении всех трех индексов. Покажем, как такие асимптотические формулы в общем случае можно получить для максвелловских молекул. Точнее говоря, будем рассматривать молекулы типа максвелловских, когда сечение рассеяния изменяется обратно пропорционально g , а угловая зависимость $F(z)$, через которую определяются коэффициенты J_q и \tilde{J}_q в (13), произвольна. Для таких молекул ситуация оказывается наиболее простой, поскольку матричные элементы отличны от нуля, только если сумма нижних индексов равна верхнему.

Для дальнейших выкладок удобно выбрать другую нормировку для угловой части сечения рассеяния

$$F^*(z) = 4\pi F(z). \quad (58)$$

Отметим, что для истинных максвелловских молекул угловая часть сечения $F^*(z)$ имеет неинтегрируемую особенность и задается определенной выше функцией $F_M(z)$.

В работе [4] получена формула, выражающая нелинейные матричные элементы через линейные в случае

максвелловских молекул,

$$K_{n,p}^r = \frac{r!}{p!n!} \cdot \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} K_{k+n,0}^{k+n}, \quad (59)$$

где $K_{p,0}^r$ определяются формулами (10), (11), (13).

В случае максвелловских молекул выражение под знаком суммы в (10) всегда равно нулю, за исключением случая, когда $n + r = 2q$. Учитывая, что $q \leq \min(n, r)$, можно заключить, что такое равенство оказывается возможным лишь при $q = r = n$. В результате имеем

$$K_{r,0}^r = \int_0^1 F^*(z) ((1-z)^r - 1) dz. \quad (60)$$

Подставляя (60) в (59) и меняя порядок интегрирования и суммирования, найдем

$$K_{n,p}^r = \frac{r!}{n!p!} \int_0^1 F^*(z) (1-z)^n \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} (1-z)^k dz. \quad (61)$$

Сумма в (61) легко вычисляется, что приводит к

$$K_{n,p}^r = \frac{r!}{n!p!} \int_0^1 F^*(z) z^p ((1-z)^{r-p} - \delta_{p,0} \delta_{r,n}) dz. \quad (62)$$

Поскольку в дальнейшем нас будут интересовать лишь нелинейные матричные элементы, то последний член в скобках в подынтегральной функции можно отбросить. В (62) удобно перейти к интегрированию по симметричному промежутку, заменяя переменную интегрирования $z = (1-x)/2$,

$$K_{n,p}^r = \frac{r!}{2 \cdot n!p!} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{2}\right)^n \left(\frac{1-x}{2}\right)^p dx. \quad (63)$$

Здесь $\chi(x) = F^*((1-x)/2)$, а $x = \cos \Theta$.

Рассмотрим нормированную на промежутке $(-1, 1)$ функцию

$$S_{n,N}(x) = \frac{1}{P} \left(\frac{1+x}{2}\right)^n \left(\frac{1-x}{2}\right)^{N-n}, \quad N = n + p, \quad (64)$$

$$P = 2 \frac{n!(N-n)!}{(N+1)!}.$$

Подставляя (64) в (63) и учитывая, что для максвелловских молекул $r = N$, имеем

$$K_{n,p}^N = \frac{1}{N+1} \int_{-1}^1 \chi(x) S_{n,N}(x) dx. \quad (65)$$

Легко показать, что функция $S_{n,N}(x)$ имеет единственный максимум, который находится в точке $x_0 = 2n/N - 1$. Существенно, что положение максимума определяется отношением n/N . Подчеркнем, что до сих

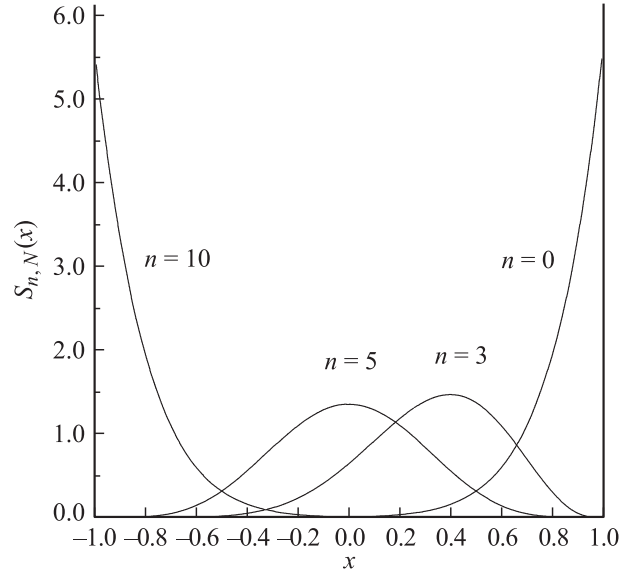


Рис. 6. Функция $S_{n,N}(x)$ при $N = 10$ и разных значениях n .

пор нелинейные МЭ выражались через коэффициенты J_q, \tilde{J}_q , т.е. через моменты от угловой части сечения рассеяния с функциями $S_{0,N}(x), S_{n,N}(x)$, имеющими максимум на краю промежутка. Это и создавало сложности при вычислении нелинейных МЭ с большими индексами. Переход к моментам с функцией $S_{n,N}(x)$, положение максимума которой зависит от индекса n , устраняет эти трудности.

На рис. 6 представлена функция $S_{n,N}(x)$ при $N = 10$ и $n = 0, 2, 5, 10$. Видно, что она имеет довольно широкий максимум, причем при $n/N = 0.5$ функция симметрична, а по мере приближения значения $2n/N - 1$ к краям промежутка она становится все более асимметричной.

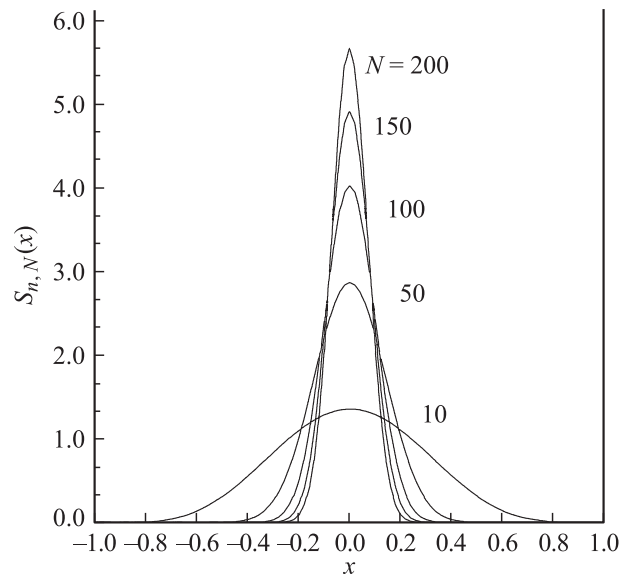


Рис. 7. Функция $S_{n,N}(x)$ при разных N и $n/N = 0.5$.

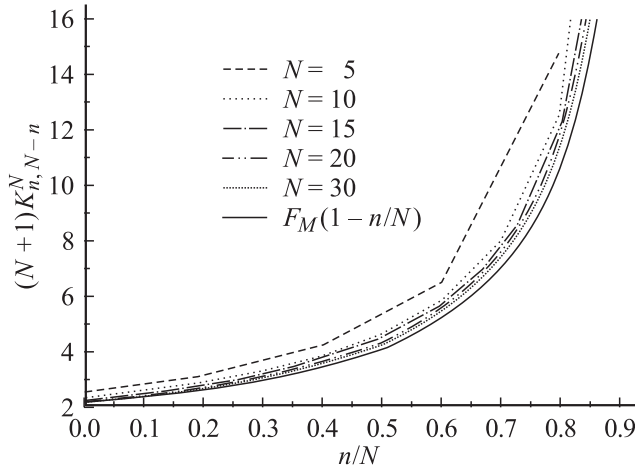


Рис. 8. Зависимости $(N+1)K_{n,N-n}^N$ от n/N при различных N . Для сравнения представлена функция $F_M(1-n/N)$.

На рис. 7 представлена функция $S_{n,N}(x)$ при различных значениях N и отношении $n/N = 0.5$. Видно, что с ростом N величина максимума растет, а сам он становится уже. В пределе при $N \rightarrow \infty$ зависимость $S_{N/2,N}(x)$ стремится к $\delta(x)$. При произвольном отношении n/N в пределе $N \rightarrow \infty$ функция $S_{n,N}(x)$ переходит в $\delta(x-x_0)$. Из формулы (65) теперь очевидно, что асимптотически при больших N

$$K_{n,N-n}^N = \frac{1}{N+1} \chi(x_0) = \frac{1}{N+1} F^*(1-n/N). \quad (66)$$

На рис. 8 приведено сравнение величин $(N+1)K_{n,N-n}^N$ с функцией $F^*(1-n/N)$ при различных N . Видно, что уже для $N = 30$ нулевое приближение аппроксимирует матричные элементы с неплохой точностью. Более точный результат может быть получен из асимптотического разложения интеграла (65) при больших значениях параметра N .

Рассмотрим интеграл

$$I_{p,n}(N) = \int_{-1}^1 \chi(x) S_{n,N}(x) dx = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \omega_{p,n}(x) dx. \quad (67)$$

Будем считать, что отношения $\alpha = p/N$, $\beta = n/N$ остаются постоянными при $N \rightarrow \infty$. Представим ядро $\omega_{p,n}(x)$ в виде

$$\omega_{p,n}(x) = \left(\frac{1+x}{2}\right)^n \left(\frac{1-x}{2}\right)^p = \exp\left(n \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) + p \ln\left(\frac{1-x}{2}\right)\right) = \exp(g(x)). \quad (68)$$

Функция $g(x)$ имеет максимум в точке $x_0 = \beta - \alpha$, которая, естественно, совпадает с точкой максимума $\omega_{p,n}(x)$. Ширина пика в максимуме определяется

величиной

$$|g''(x_0)|^{-1/2} = \frac{(4np)^{1/2}}{N^{3/2}} = \left(\frac{4\alpha\beta}{N}\right)^{1/2}.$$

Выделяя параметр N в показателе экспоненты в (68), для интеграла (67) найдем

$$I_{p,n}(N) = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \exp(N \cdot f(x)) dx. \quad (69)$$

Здесь функция

$$f(x) = \beta \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) + \alpha \ln\left(\frac{1-x}{2}\right)$$

не зависит от N и сам интеграл можно оценить по методу Лапласа. При $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$ точка максимума находится внутри промежутка $[-1, 1]$ и асимптотика может быть получена заменой переменной $x = \psi(\tau)$, где функция $\psi(\tau)$ неявно определяется соотношением $f(x_0) - f(x) = \tau^2$ и разложением функции нагрузки $\chi(\psi(\tau))\psi'(\tau)$ в ряд $\sum_{k=0}^{\infty} c_k \tau^k$ в окрестности точки $\tau = 0$ (см., например, [7]). Это дает

$$\begin{aligned} I_{p,n}(N) &= \frac{1}{P} e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \sum_{kk=0}^{\infty} \frac{c_{2k}}{N^k} \frac{(2k)!}{k^k k!} \\ &= \frac{1}{P} e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \cdot \left(c_0 + \frac{1}{2} \frac{c_2}{N} + O(N^{-2})\right). \end{aligned} \quad (70)$$

Величина P представляет собой интеграл от ядра $\omega_{p,n}(x)$ и также может быть рассмотрена как интеграл Лапласовского типа. Асимптотическая оценка этого интеграла имеет вид

$$\begin{aligned} P &= \int_{-1}^1 1 \cdot \omega_{p,n}(x) dx = \int_{-1}^1 1 \cdot e^{N f(x)} dx \\ &= e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \sum_{kk=0}^{\infty} \frac{d_{2k}}{N^k} \frac{(2k)!}{4^k k!} \\ &= e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \left(d_0 + \frac{1}{2} \frac{d_2}{N} + O(N^{-2})\right), \end{aligned} \quad (71)$$

где коэффициенты d_k определяются разложением в ряд функции $\psi'(\tau)$.

Подставляя (71) в (70) и вычисляя коэффициенты c_k , d_k , найдем

$$\begin{aligned} I_{p,n} &= \chi(x_0) + 2 \cdot [(\alpha - \beta)\chi'(x_0) + \alpha\beta \cdot \chi''(x_0)] \frac{1}{N} \\ &+ \frac{2}{3} \cdot (6(\beta - \alpha)\chi'(x_0) + 3(2 - 11\alpha\beta)\chi''(x_0) \\ &- 10(\beta - \alpha)\alpha\beta\chi'''(x_0) + 3\chi''''(x_0)(\alpha\beta)^2) \cdot \frac{1}{N^2} + O(N^{-3}). \end{aligned} \quad (72)$$

Заметим, что полученное асимптотическое разложение (72) не теряет смысла и в случае, когда отношение

$\alpha = p/N$ или $\beta = n/N$ обращается в нуль. Однако в этом случае точка максимума оказывается на краю промежутка и метод получения асимптотической оценки является не вполне обоснованным. Для получения асимптотики интеграла (67) при малых значениях β представим его в виде

$$I_{p,n}(N) = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{1-x}\right)^n \left(\frac{1-x}{2}\right)^N dx$$

$$= \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{1-x}\right)^n \exp\left(N \ln\left(\frac{1-x}{2}\right)\right) dx. \quad (73)$$

После замены переменной и разложения функции нагрузки в окрестности $x = -1$ найдем

$$I_{p,n}(N) = \chi(-1) + 2(n+1)\chi'(-1)\frac{1}{N} + (-4\chi'(-1) + 2(n+2)\chi''(-1))\frac{(n+1)}{N^2} + O(N^{-3}). \quad (74)$$

Отметим, что разложение (74) совпадает с (72) при $\beta = 0$. Следовательно, формула (72) пригодна для асимптотической оценки МЭ $K_{n,N-n}^N$ при всех значениях индекса n .

В табл. 1 приведены значения нулевого (A0), первого (A1) и второго (A2) приближений для величины $(N+1)K_{\beta N, \alpha N}^N$, а также ее точное значение (C), полученное численным расчетом в случае максвелловских

Таблица 1. Значения нулевого (A0), первого (A1) и второго (A2) приближений для $(N+1)K_{(1-\alpha)N, \alpha N}^N$, рассчитанные по асимптотической формуле (72) и найденные численным расчетом (C) для истинно максвелловских молекул при фиксированных значениях отношения $\alpha = p/N$

		$\alpha = 1/5$	$\alpha = 2/5$	$\alpha = 3/5$	$\alpha = 4/5$
N = 5	A0	2.647092	3.500223	5.259962	10.902165
	A1	3.157573	4.209428	6.423971	13.930613
	A2	3.166976	4.233389	6.503574	14.523547
	C	3.169085	4.238322	6.522939	14.790084
N = 10	A0	2.647092	3.500223	5.259962	10.902165
	A1	2.902332	3.854825	5.841966	12.416389
	A2	2.904683	3.860815	5.861867	12.564622
	C	2.904944	3.861414	5.864154	12.594127
N = 20	A0	2.647092	3.500223	5.259962	10.902165
	A1	2.774712	3.677524	5.550964	11.659277
	A2	2.775300	3.679021	5.555939	11.696335
	C	2.775333	3.679095	5.556218	11.699827
N = 30	A0	2.647092	3.500223	5.259962	10.902165
	A1	2.732172	3.618423	5.453963	11.406906
	A2	2.732433	3.619089	5.456175	11.423377
	C	2.732443	3.619112	5.455556	11.424028

Таблица 2. Значения нулевого (A0), первого (A1) и второго (A2) приближений для $(N+1)K_{n,N-n}^N$, рассчитанные по асимптотической формуле (72) и найденные численным расчетом (C) при n , близких к N , для истинно максвелловских молекул

		$n = N - 3$	$n = N - 2$	$n = N - 1$
N = 5	A0	3.500222	5.259962	10.902165
	A1	4.209428	6.423971	13.930612
	A2	4.233389	6.503574	14.523547
	C	4.238322	6.522939	14.790084
N = 10	A0	7.084825	10.902165	23.384551
	A1	7.934548	12.416389	28.036598
	A2	7.980223	12.564622	29.206591
	C	7.986631	12.594127	29.682732
N = 20	A0	14.908958	23.384551	51.526962
	A1	16.089988	25.710575	59.961619
	A2	16.176542	26.003073	62.438814
	C	16.187143	26.056194	63.389937
N = 30	A0	23.384551	37.017069	82.610505
	A1	24.935234	40.252079	95.319350
	A2	25.065233	40.702318	99.258378
	C	25.080483	40.781345	100.736674

молекул. Видно, что уже первое приближение аппроксимирует значение МЭ с хорошей точностью даже для $N = 5$, а второе приближение определяет величину $(N+1)K_{\beta N, \alpha N}^N$ с точностью до долей процента.

Угловая зависимость $\chi(x)$ в случае максвелловских молекул стремится к бесконечности при $x \rightarrow 1$, причем значения производных растут с увеличением их порядка. Поэтому в этой области значения $(N+1)K_{n,N-n}^N$ растут при n , близких к N и $N \rightarrow \infty$, и асимптотическая оценка осуществляется в очень „жестких“ условиях. Однако качество приближения, даваемого формулой (72), и в этом случае остается достаточно высоким, что демонстрируется табл. 2.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 01-02-17903).

Список литературы

- [1] Turchetti G, Paolilli M. // Phys. Lett. 1982. Vol. 90A. N 3. P. 123–126.
- [2] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 10. С. 38–53.
- [3] Ender A.Ya, Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 9. P. 2720–2730.
- [4] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 15. С. 1–9.
- [5] Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1965. 294 с.
- [6] Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965. 307 с.
- [7] Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1973. 736 с.