Berekening van $\dfrac{1-\gamma x^2}{(\alpha-\beta x-\gamma x^2)^p}\,dx.$

1. Inleiding.

Bovenstaande bepaalde integraal, optredende in de theorie van de potentiaal aan oppervlakken van vloeistoffen, werd ons ter numerieke berekening opgegeven. De parameters α, β en γ hangen samen met twee andere parameters ψ en χ door de relaties:

$$\begin{aligned} \alpha &= 1+\psi\chi^2 \\ \beta &= 2\psi\chi \\ \gamma &= 1-\psi \end{aligned} \qquad (1.1)$$

De in aanmerking komende waarden van ψ en χ zijn:

ψ = 0,36; 0,49; 0,64; 0,81; 1,00. (1.2)
χ = -2 ; -1 ; -0,5; -0,25 ; -0,1 ;0 ; 0,1 ; 0,2 ; 0,25.

De parameter p heeft slechts twee waarden, nl. 3 en 6 .

2. Mogelijke methoden voor de berekening.

Het is duidelijk dat de integraal exact opgelost kan worden (zie 3). Het rekenwerk is echter zeer omvangrijk en slechts door duplicatie te controleren. Derhalve loont het de moeite numerieke methoden te hulp te roepen zolang tenminste de integrand geen singulariteiten in de nabijheid van het integratieinterval bezit. Deze singulariteiten zouden van twee zijden kunnen komen.
In de eerste plaats is $1-\gamma x^2 = 0$ voor $x = 1/\sqrt{\gamma}$
De hoogste waarde voor γ = 0,64 en de bijbehorende waarde van x = 1,25. Aangezien de wortel slechts een zwakke singulariteit verwekt is dit niet ernsig.
In de tweede plaats is $\alpha-\beta x-\gamma x^2 = 0$ voor $x_{1,2} = \dfrac{1}{\gamma}\left\{-\dfrac{\beta}{2} \pm \sqrt{\dfrac{\beta^2}{4}+\alpha\gamma}\right\}$. De eerste wortel x_1 is altijd > 1 en de tweede wortel x_2 is altijd < 0.
Speciaal de eerste echter kan dicht bij het integratie-

gebied komen. Voor = 0,36 en = 0,25 is x_1 = 1,13. De nu verwekte singulariteit is zeer ernstig, er is daar nu immers een pool van de derde of zesde orde aanwezig. Het is ook niet wel mogelijk de singuliere gedeelten van de integrand af te splitsen. Vandaar dat wij voor alle positieve waarden van de integraal langs exacte weg hebben berekend.

Voor = 1 en voor = 0 ontaardt de integrand zodanig, dat exacte integratie verreweg de eenvoudigste oplossing geeft, waar natuurlijk gebruik van is gemaakt.

3. Exacte berekeningswijze in het algemene geval.

Wij hebben een tweetal bruikbare methoden ontwikkeld om de exacte oplossing van de integraal te vinden, beide berustend op recursie. Wij bespreken hier slechts die, welke wij inderdaad hebben toegepast.

Te berekenen is:

$$I_p = {}_0^{1} \frac{1 - x^2 \, dx}{(- x - x)^p} \tag{3.1}$$

Stel = en x = y. Dan is:

$$I_p = \frac{1}{} \frac{1 - y^2 \, dy}{(- y - y^2)^p} \tag{3.2}$$

Stel $ - y - y^2 = (y_1 - y)(y + y_3)$

Dan is:

$$I_p = \frac{1}{} \frac{1 - y^2 \, dy}{(y_1 - y)(y + y_3)^p} \tag{3.3}$$

waarin:

$$y_{1,3} = \frac{1}{} \mp x + 1 - + x^2 \tag{3.4}$$

Wij passen hier nu breuksplitsing toe, door gebruik te maken van de volgende, niet triviale identiteit:

$$(x_1 - x)^{-p}(x_1 + x_3)^{-p} = \sum \frac{(p + j - 1)!}{(p - 1)!\; j!} (x_1 - x)^{-p+j} +$$

$$+ (x + x_3)^{-p+j} (x_1 + x_3)^{-p-j} \qquad (3.5)$$

Voor het bewijs verwijzen wij naar de Appendix.

Hierdoor gaat I_p over in een lineaire combinatie van integralen van het volgende type:

$$J_n = \int_0^{\delta} \frac{\sqrt{1 - y^2}\, dy}{(y_1 - y)^n} \qquad (3.6)$$

$$J_n^* = \int_0^{\delta} \frac{\sqrt{1 - y^2}\, dy}{(y + y_3)^n}$$

Voor de berekening hiervan voeren wij nog de volgende verwante integralen in:

$$K_n = \int_0^{\delta} \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}(y_1 - y)^n} \qquad (3.7)$$

$$K_n^* = \int_0^{\delta} \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}(y + y_3)^n}$$

Wij kunnen nu de volgende recursievergelijkingen afleiden:

$$J_n = \frac{1}{n - 1} \left\{ \sqrt{\psi}\, (y_1 - \delta)^{-n+1} - y_1^{-n+1} + y_1 K_{n-1} - K_{n-2} \right\}$$

$$K_n = \frac{1}{1 - y_1^2} \left\{ J_n - 2y_1 K_{n-1} + K_{n-2} \right\} \qquad (3.8)$$

$$J_n^* = \frac{1}{n - 1} \left\{ y_3^{-n+1} - \sqrt{\psi}\, (y_3 + \quad)^{-n+1} + y_3 K_{n-1}^* - K_{n-2}^* \right\}$$

$$K_n^* = \frac{1}{y_3^2 - 1} \left\{ 2y_3 K_{n-1}^* - K_{n-2}^* - J_n^* \right\}$$

Zodra wij K_o en K_1, resp. K_o^* en K_1^* kennen, kunnen wij met behulp van (3.8) de volgende integralen alle berekenen. Blijkbaar is:

$$K_o = K_o^* = \arcsin \delta$$

$$K_1 = \frac{1}{\sqrt{1 - y_1^2}} \quad \log_e \frac{\delta y_1 - (1 - \sqrt{\psi})(1 - \sqrt{1 - y_1^2})}{\delta y_1 - (1 + \sqrt{\psi})(1 + \sqrt{1 - y_1^2})} \qquad (3.9)$$

$$K_1^* = \frac{2}{\sqrt{y_3^2 - 1}} \left\{ \arctan \frac{1}{\sqrt{y_3^2 - 1}} - \arctan \frac{(1 - \sqrt{\psi})\, y_3 + \delta}{\delta \sqrt{y_3^2 - 1}} \right\}$$

Na berekening van alle integralen en op grond van (3.3), (3.5) en (3.6) geldt tenslotte:

$$I_3 = \frac{1}{\delta} (y_1 + y_3)^{-3} \left\{ (J_3 + J_3^*) + 3(y_1 + y_3)^{-1}(J_2 + J_2^*) + \right.$$
$$\left. + 6(y_1 + y_3)^{-2}(J_1 + J_1^*) \right\}$$

$$I_6 = \frac{1}{\delta} (y_1 + y_3)^{-6} \left\{ (J_6 + J_6^*) + 6(y_1 + y_3)^{-1}(J_5 + J_5^*) + \right.$$
$$+ 21(y_1 + y_3)^{-2}(J_4 + J_4^*)$$
$$+ 56(y_1 + y_3)^{-3}(J_2 + J_3^*) + 126(y_1 + y_3)^{-4}(J_2 + J_2^*) +$$
$$\left. + 252(y_1 + y_3)^{-5}(J_1 + J_1^*) \right\}$$

(3.10)

Bij de berekening blijkt, dat bij toenemende n zowel J_n als K_n sterk toenemen, maar dat een fout in de beginwaarden van K_o en K_1 met toenemende n tijdens het recursieproces snel verdwijnt. Bij J_n^* en K_n^* zien wij daarentegen snelle afval met toenemende n, maar nu neemt een fout in de beginwaarden opmerkelijk snel toe. Uiteindelijk vormen de J^*-termen slechts een kleine correctie op de J-termen in (3.10). De J-termen zijn nauwkeurig, dank zij hun stabiel recursiesysteem. Bij de J^*-termen zijn relatief grotere afwijkingen te verwachten. Omdat J^* zoveel kleiner is dan J is het aanhouden van een zelfde aantal decimalen (9 of 10) voldoende garantie voor het niet bederven van de nauwkeurigheid in J door toevoeging van J.

4. Exacte berekeningswijze voor het geval $\psi = 1$.

Als $\psi = 1$, dan is $\gamma = 0$ en bovendien $\alpha = 1 + \chi^2$ en $\beta = 2\chi$.

Dan is:

$$I_p = \int_0^1 (1 + \chi^2 - 2\chi x)^{-p}\, dx \tag{4.1}$$

Dit is natuurlijk direct te integreren tot:

$$I_p = \frac{1}{2(p-1)\chi} \left\{ (1-\chi)^{2(-p+1)} - (1+\chi^2)^{-p+1} \right\} \tag{4.2}$$

Als bovendien $\chi = 0$ is volgt na grensovergang het triviale resultaat $I_p = 1$.

5. Exacte berekeningswijze in het geval $\chi = 0$.

Als $\chi = 0$ is, is $\alpha = 1$ en $\beta = 0$. Dan is:

$$I_p = \int_0^1 (1 - \gamma x^2)^{-p+1/2}\, dx \tag{5.1}$$

Deze voldoet aan de recursiebetrekking:

$$I_{p+1} = \frac{2p-2}{2p-1} I_p - \frac{1}{2p-1} \psi^{-p+1/2} \tag{5.2}$$

Als we bedenken, dat

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \arcsin \sqrt{\gamma} \tag{5.3}$$

dan kunnen wij met (5.2) I_3 en I_6 berekenen. Het resultaat is:

$$I_3 = 1/3\, \psi^{-3/2}(1 + 2\psi)$$

$$I_6 = \frac{1}{315} \psi^{-9/2} (35 + 40\psi + 48\psi^2 + 64\psi^3 + 28\psi^4) \tag{5.4}$$

Voor $\psi = 1$ volgt nu zonder grensovergang $I_3 = I_6 = 1$.

6. Numerieke berekeningsmethoden.

Omdat de afgeleiden van de integrand niet eenvoudig te berekenen zijn, is toepassing van de Euler-Maclaurin formule niet geschikt. Wij moeten dus een methode gebruiken, waarbij wij een aantal waarden van de integrand voor al of niet equidistante waarden van x berekenen, wat met het oog op het eenvoudige karakter van de integrand niet moeilijk is.

Bij gebruik van equidistante ordinaten maken wij gebruik van de centrale differentieformule:

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{1}{n}\left\{\frac{1}{2} f_0 + f_{1/n} + f_{2/n} + \dots f_{1-1/n} + \frac{1}{2} f_1 - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{12}(\mu\delta_1 - \mu\delta_0) + \frac{11}{720}(\mu\delta^3_1 - \mu\delta^3_0) \dots \right\} \qquad (6.1)$$

waarbij n het aantal deelintervallen aangeeft, hetwelk wij als 10 kozen. Voor de berekening van de benodigde centrale differenties voor x = 0 en x = 1 moeten wij ook enkele waarden van de functie buiten het eigenlijke interval berekenen. Dit is de enige betrouwbare manier overigens. De berekening is zelfcontrolerend, met het oog op het gemaakte differentieschema. Uit de grootte van de correctietermen kunnen wij verder direct zien, hoe groot de nauwkeurigheid van het resultaat is.
Voor ψ = 0,64 en 0,81 levert deze methode in minstens 5 decimalen betrouwbare uitkomsten voor negatieve waarden van χ. Bij grotere χ en kleinere ψ is de nauwkeurigheid niet meer voor ons doel voldoende met het oog op de nabijheid van de polen van de integrand.

Een andere geslaagde methode is die van Gauss, waarbij wij speciale waarden (niet equidistant) van x kiezen en de daarbij behorende waarden van de ordinaten vermenigvuldigen met zekere gewichten. Deze methode levert de hoogst bereikbare precisie bij gegeven aantal ordinaten. Daarentegen is geen controle op de uitkomst aanwezig. Wij controleerden niet door duplicatie, wat immers alleen de berekening zou bevestigen, maar geen inzicht zou verschaffen over de bereikte nauwkeurigheid, maar door de berekening te herhalen met een wat groter aantal

aantal

aantal ordinaten, hetgeen zowel de berekening als de bereikte nauwkeurigheid controleert. Wij pasten verschillende aantallen ordinaten toe, varierende tussen 7 en 12 al naar gelang van de nabijheid van de polen en konden hiermee alle gevallen met negatieve λ dekken alsmede een aantal met positieve χ en grote ϑ.

7. Resultaten.

De op de in 3, 4, 5, en 6 beschreven wijzen berekende en gecontroleerde resultaten, zijn afgerond tot 5 decimalen, in tabel I weergegeven.

Appendix.

De functie:

$$f(z) = (a+z)^{-p}(b-z)^{-p}z^{-1} \tag{A.1}$$

($p \geqq 1$ en geheel, $a \neq 0$, $b \neq 0$, $a+b \neq 0$)

van de complexe variabele z heeft drie polen, n.l. in $z = 0$, $z = -a$ en $z = -b$. Verder is zij analytisch. Indien wij haar integreren langs een gesloten contour C, dat de drie punten éénmaal in positieve zin omloopt, dan is de uitkomst onafhankelijk van de vorm van C en wij kunnen voor C een cirkel met willekeurig grote straal om de oorsprong kiezen. Nu is $f(z)$ van de orde z^{-2p-1} en als en als $p \geqq 1$ dus hoogstens van de orde z^{-3}. De integraal is dus nul en dus moet ook de som van de residuen in de polen nul zijn.

Residu in $z = 0 = a^{-p}b^{-p}$

Residu in $z = -a$ = coefficient van $\frac{1}{z+a}$ in de ontwikkeling van $f(z)$ naar $z+a$.

$$\begin{aligned} f(z) &= (z+a)^{-p}\left\{a+b-(z+a)\right\}^{-p}(-a+z+a)^{-1} \\ &= (z+a)^{-p}(a+b)^{-p}\left\{1-\frac{z+a}{a+b}\right\}^{-p}(-a)^{-1}\left\{1-\frac{z+a}{a}\right\}^{-1} \\ &= (a+b)^{-p}(-a)^{-1}(z+a)^{-p}\sum_{j=0}^{\infty}(-1)^j\binom{-p}{j}\left(\frac{z+a}{a+b}\right)^j \\ &\quad \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{z+a}{a}\right)^k \end{aligned}$$

Coefficient van $(z+a)^{-1}$ =
$$\sum_{j+k=p-1} (a+b)^{-p}(-a)^{-1}(-1)^{j}\binom{-p}{j}(a+b)^{-j}a^{-k}$$

Residu in $z = -a = -\sum_{j=0}^{p-1} (-1)^{j}\binom{-p}{j}\, a^{j-p}(a+b)^{-p-j}$

Door a te vervangen door $-b$ en b door $-a$ vinden wij:

Residu in $z = -b = -\sum_{j=0}^{p-1} (-1)^{j}\binom{-p}{j}\, b^{j-p}(a+b)^{-p-j}$.

Wij weten, dat de som van de drie residuen nul moet zijn. Dus geldt:

$$a^{-p}b^{-p} = \sum_{j=0}^{p-1} \frac{(p+j-1)!}{(p-1)!\,j!}\,(a^{-p+j} + b^{-p+j})(a+b)^{-p-j} \qquad (A.2)$$

Door a te vervangen door x_1-x en b te vervangen door $x+x_3$ vinden wij (3.5)

Tafel I

χ	ϕ = 0.36	0.49	0.64	0.81	1.00
			I_3		
-2.00	0.03683	0.01886	0.01022	0.00581	0.00346
-1.00	0.25985	0.16234	0.10477	0.06934	0.04688
-0.50	0.75691	0.52928	0.38578	0.28923	0.22123
-0.25	1.35277	0.97744	0.74406	0.58746	0.47621
-0.10	1.99269	1.44820	1.11592	0.89671	0.74321
0	2.65432	1.92420	1.48438	1.19799	1.00000
0.10	3.65569	2.63070	2.02042	1.62781	1.35966
0.20	5.27126	3.74987	2.85309	2.28208	1.89606
0.25	6.47202	4.57196	3.45697	2.75025	2.27468
			I_6		
-2.00	0.00165	0.00044	0.00013	0.00004	0.00002
-1.00	0.07782	0.03105	0.01361	0.00630	0.00303
-0.50	0.71524	0.31190	0.16592	0.09848	0.06207
-0.25	2.92206	1.15234	0.59541	0.36725	0.25245
-0.10	8.38958	2.99209	1.40940	0.83318	0.56592
0	19.13914	6.37486	2.80314	1.54055	1.00000
0.10	49.12970	15.39975	6.26604	3.17313	1.91651
0.20	145.05760	43.26170	16.43258	7.66013	4.24566
0.25	265.07375	77.42856	28.55834	12.82009	6.80763