

УДК 519

## КВАДРАТУРНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ СФЕРЫ 131-го АЛГЕБРАИЧЕСКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

© 1999 г. В. И. Лебедев, Д. Н. Лайков

Представлено академиком Г.И. Марчуком 26.02.98 г.

Поступило 27.02.98 г.

В настоящей работе приведены координаты узлов и веса квадратурной формулы гауссового типа 131-го порядка для единичной трехмерной сферы, инвариантной относительно группы октаэдра с инверсией. Теория и способы построения квадратур указанного типа описаны в [1–3].

Пусть в трехмерном евклидовом пространстве  $R^3(x, y, z)$  задана сфера  $S: x^2 + y^2 + z^2 = 1$  и пусть

$$I(f) = \frac{1}{4\pi} \int_S f(\omega) d\omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi f(\theta, \phi) \sin \theta d\theta, \quad (1)$$

где  $\omega \in S$ . Инвариантные относительно группы октаэдра с инверсией квадратуры гауссового типа, правильно интегрирующие первые  $(n + 1)^2$  многочлена на сфере, представим в виде

$$I_n(f) = A_1 \sum_{i=1}^6 f(a_i^1) + A_2 \sum_{i=1}^{12} f(a_i^2) + A_3 \sum_{i=1}^8 f(a_i^3) + \\ + \sum_{k=1}^{N_B} B_k \sum_{i=1}^{24} f(b_i^k) + \sum_{k=1}^{N_C} C_k \sum_{i=1}^{24} f(c_i^k) + \\ + \sum_{k=1}^{N_D} D_k \sum_{i=1}^{48} f(d_i^k), \quad (2)$$

где узлы, соответствующие весам  $A_1, A_2, A_3, B_k, C_k, D_k$ , имеют координаты

$$A_1: (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1);$$

$$A_2: (\pm 2^{-1/2}, \pm 2^{-1/2}, 0), (\pm 2^{-1/2}, 0, \pm 2^{-1/2}), (0, \pm 2^{-1/2}, \pm 2^{-1/2});$$

$$A_3: (\pm 3^{-1/2}, \pm 3^{-1/2}, \pm 3^{-1/2});$$

$$B_k: (\pm l_k^{-1/2}, \pm l_k^{-1/2}, \pm m_k^{-1/2}), (\pm l_k^{-1/2}, \pm m_k^{-1/2}, \pm l_k^{-1/2}), (\pm m_k^{-1/2}, \pm l_k^{-1/2}, \pm l_k^{-1/2}), 2l_k^2 + m_k^2 = 1;$$

$$C_k: (\pm q_k^{-1/2}, \pm r_k^{-1/2}, 0), (\pm q_k^{-1/2}, 0, \pm r_k^{-1/2}), (0, \pm q_k^{-1/2}, \pm r_k^{-1/2}), (\pm r_k^{-1/2}, \pm q_k^{-1/2}, 0), (\pm r_k^{-1/2}, 0, \pm q_k^{-1/2}), (0, \pm r_k^{-1/2}, \pm q_k^{-1/2}), q_k^2 + r_k^2 = 1;$$

$$D_k: (\pm u_k^{-1/2}, \pm v_k^{-1/2}, \pm w_k^{-1/2}), (\pm v_k^{-1/2}, \pm w_k^{-1/2}, \pm u_k^{-1/2}), (\pm w_k^{-1/2}, \pm u_k^{-1/2}, \pm v_k^{-1/2}), (\pm v_k^{-1/2}, \pm u_k^{-1/2}, \pm w_k^{-1/2}), (\pm u_k^{-1/2}, \pm w_k^{-1/2}, \pm v_k^{-1/2}), (\pm w_k^{-1/2}, \pm v_k^{-1/2}, \pm u_k^{-1/2}), u_k^2 + v_k^2 + w_k^2 = 1.$$

До настоящего времени были получены квадратурные формулы (2) для  $n = 6m + 5, m = 0, 1, \dots, 9$ , а также для некоторых других  $n < 29$  (см. [4, 5]). Трудности построения квадратур высоких порядков связаны с необходимостью численного решения больших, плохо обусловленных систем нелинейных уравнений. Используя написанную Д.Н. Лайковым программу на языке Си, позволяющую вести вычисления с необходимой длиной мантиссы (до 100 десятичных разрядов), удалось возможным получить квадратуры (2) для  $n = 6m + 5, m = 10, 11, \dots, 21$ . Подробное описание применяемого алгоритма, а также параметры квадратур для  $m = 10, 11, \dots, 20$  будут опубликованы.

Параметры квадратуры 131-го порядка ( $N_B = 31, N_C = 10, N_D = 100$ ) приведены с шестнадцатью значащими цифрами в табл. 1. Эта квадратурная формула содержит  $N = 5810$  узлов и правильно интегрирует 17424 сферических гармоник до 131-го порядка включительно; ее коэффициент эф-

фективности [1]  $\eta = \frac{(n+1)^2}{3N}$  равен 0.99966. При ра-

боте с обычной двойной точностью (15–16 десятичных разрядов), приведенные в настоящей работе коэффициенты обеспечивают вычисление интегралов от всех многочленов  $x^k y^l z^m, k + l + m \leq 131$  с относительной точностью порядка  $2 \cdot 10^{-14}$ .

Российский научный центр  
"Курчатовский институт", Москва  
Институт вычислительной математики  
Российской Академии наук, Москва  
Московский государственный университет  
им. М.В. Ломоносова

Таблица 1

	$A_1 \cdot 10^5$	$A_2 \cdot 10^3$	$A_3 \cdot 10^3$
	0.9735347946175486	0.1907581241803167	0.1901059546737578
$k$	$l_k$	$m_k$	$B_k \cdot 10^3$
1	0.0118236166240028	0.9998601923168344	0.0392642453891921
2	0.0306214500913896	0.9990618867660806	0.0666790546729438
3	0.0532979403683424	0.9971552833460720	0.0886889131501914
4	0.0784816553286222	0.9938215431121216	0.1066306000958872
5	0.1054038157636201	0.9888276246368412	0.1214506743336128
6	0.1335577797766211	0.9820003253167888	0.1338054681640871
7	0.1625769955502252	0.9732098648471070	0.1441677023628504
8	0.1921787193412792	0.9623589141607676	0.1528880200826557
9	0.2221340534690548	0.9493750178821930	0.1602330623773609
10	0.2522504912791132	0.9342052126266968	0.1664102653445244
11	0.2823610860679697	0.9168121040589686	0.1715845854011323
12	0.3123173966267560	0.8971709355126096	0.1758901000133069
13	0.3419847036953789	0.8752673448020141	0.1794382485256736
14	0.3712386456999758	0.8510956091284314	0.1823238106757407
15	0.3999627649876828	0.8246572459190639	0.1846293252959976
16	0.4280466458648093	0.7959598846221919	0.1864284079323098
17	0.4553844360185711	0.7650163598669611	0.1877882694626914
18	0.4818736094437834	0.7318440059488363	0.1887716321852025
19	0.5074138709260629	0.6964641607316614	0.1894381638175673
20	0.5319061304570707	0.6589019174083282	0.1898454899533629
21	0.5552514978677286	0.6191861983533608	0.1900497929577815
22	0.5981009025246183	0.5334328643779589	0.1900671501924092
23	0.6173990192228116	0.4874801556221757	0.1899837555533510
24	0.6351365239411131	0.4395488504273442	0.1899014113156229
25	0.6512010228227200	0.3897107334283811	0.1898581257705106
26	0.6654758363948120	0.3380589036680602	0.1898804756095753
27	0.6778410414853370	0.2847157265697618	0.1899793610426402
28	0.6881760887484110	0.2298419930079757	0.1901464554844117
29	0.6963645267094598	0.1736458806923450	0.1903533246259542
30	0.7023010617153579	0.1163891637007593	0.1905556158463228
31	0.7059004636628753	0.0583872486171024	0.1907037155663528
$k$	$q_k$	$r_k$	$C_k \cdot 10^3$
1	0.0355247031247258	0.9993687985262998	0.0599299784424997
2	0.0915117662084128	0.9958039950941234	0.0974905938245698
3	0.1566197930068980	0.9876589697048654	0.1241680804599158
4	0.2265467599271907	0.9740002903318314	0.1437626154299360
5	0.2988242318581361	0.9543081674461322	0.1584200054793902
6	0.3717482419703886	0.9283335847592316	0.1694436550982744
7	0.4440094491758889	0.8960221029877130	0.1776617014018108
8	0.5145337096756643	0.8574701520212813	0.1836132434440077
9	0.5824053672860230	0.8128985103667202	0.1876494727075983
10	0.6468283961043370	0.7626355787616330	0.1899906535336482

Таблица 1. Продолжение

$k$	$u_k$	$v_k$	$w_k$	$D_k \cdot 10^3$
1	0.0609596425910437	0.0178782827534293	0.9979801045015680	0.0814325282076735
2	0.0881196227095939	0.0395388874079210	0.9953248758450994	0.0999885989088773
3	0.1165936722428831	0.0637812179772299	0.9911295938605910	0.1156199403068359
4	0.1460232857031785	0.0898589081374504	0.9851916446361048	0.1287632092635513
5	0.1761197110181755	0.1172606510576162	0.9773595996890900	0.1398378643365139
6	0.2066471190463718	0.1456102876970995	0.9675198252783260	0.1491876468417391
7	0.2374076026328152	0.1746153823011775	0.9555873055226052	0.1570855679175456
8	0.2682305474337051	0.2040383070295584	0.9414991995152872	0.1637483948103775
9	0.2989653312142369	0.2336788634003698	0.9252102028900638	0.1693500566632843
10	0.3294762752772209	0.2633632752654219	0.9066891249325308	0.1740322769393633
11	0.3596390887276086	0.2929369098051600	0.8859163012006150	0.1779126637278296
12	0.3893383046398812	0.3222592785275512	0.8628815920756713	0.1810908108835412
13	0.4184653789358347	0.3512004791195743	0.8375828019355877	0.1836529132600190
14	0.4469172319076166	0.3796385677684538	0.8100244105499234	0.1856752841777379
15	0.4745950813276976	0.4074575378263879	0.7802165492015750	0.1872270566606832
16	0.5014034601410262	0.4345456906027828	0.7481741862274833	0.1883722645591307
17	0.5272493404551239	0.4607942515205134	0.7139165152560114	0.1891714324525297
18	0.5520413051846366	0.4860961284181720	0.6774665684053399	0.1896827480450146
19	0.5756887237503077	0.5103447395342789	0.6388511095524769	0.1899628417059528
20	0.1225039430588352	0.0213645592265579	0.9922380458055882	0.1123301829001669
21	0.1539113217321372	0.0452092616613719	0.9870498607986832	0.1253698826711277
22	0.1856213098637712	0.0708646817786482	0.9800627154426746	0.1366266117678531
23	0.2174998728035131	0.0978523948877292	0.9711429936652952	0.1462736856106918
24	0.2494128336938330	0.1258106396267210	0.9601900443899258	0.1545076466685412
25	0.2812321562143480	0.1544529125047001	0.9471286988207272	0.1615096280814007
26	0.3128372276456111	0.1835433512202753	0.9319038079232420	0.1674366639741759
27	0.3441145160177973	0.2128813258619585	0.9144762112625412	0.1724225002437900
28	0.3749567714853510	0.2422913734880829	0.8948197080141567	0.1765810822987288
29	0.4052621732015610	0.2716163748391453	0.8729187338413519	0.1800104126010751
30	0.4349335453522385	0.3007127671240280	0.8487665419984122	0.1827960437331284
31	0.4638776641524965	0.3294470677216479	0.8223637530132463	0.1850140300716308
32	0.4920046410462687	0.3576932543699155	0.7937171844978482	0.1867333507394938
33	0.5192273554861704	0.3853307059757764	0.7628389085167639	0.1880178688638289
34	0.5454609081136522	0.4122425044452694	0.7297455140311051	0.1889278925654758
35	0.5706220661424140	0.4383139587781027	0.6944575805415550	0.1895213832507346
36	0.5946286755181518	0.4634312536300553	0.6569993998554366	0.1898548277397420
37	0.1905370790924295	0.0237131153778198	0.9813935549258532	0.1349105935937341
38	0.2242518717748009	0.0491787805925481	0.9732895486672650	0.1444060068369326
39	0.2577190808025936	0.0759549896049514	0.9632298349534124	0.1526797390930008
40	0.2908724534927186	0.1036991083191100	0.9511254968367464	0.1598208771406474
41	0.3236354020056219	0.1321348584450234	0.9369100841342104	0.1659354368615331
42	0.3559267359304543	0.1610316571314789	0.9205351509048322	0.1711279910946440
43	0.3876637123676956	0.1901912080395707	0.9019668233908304	0.1754952725601440
44	0.4187636705218842	0.2194384950137950	0.8811831450709435	0.1791247850802529
45	0.4491449019883107	0.2486155334763858	0.8581719953087277	0.1820954300877716
46	0.4787270932425445	0.2775768931812335	0.8329294319252971	0.1844788524548449
47	0.5074315153055574	0.3061863786591120	0.8054583532364195	0.1863409481706220
48	0.5351810507738336	0.3343144718152556	0.7757674115529100	0.1877433008795068
49	0.5619001025975381	0.3618362729028427	0.7438701407588932	0.1887444543705232
50	0.5875144035268046	0.3886297583620408	0.7097842887553970	0.1894009829375006

Таблица 1. Окончание

$k$	$u_k$	$v_k$	$w_k$	$D_k \cdot 10^3$
51	0.6119507308734495	0.4145742277792031	0.6735313746550552	0.1897683345035198
52	0.2619733870119463	0.0254004718638935	0.9647407737452484	0.1517327037467653
53	0.2968149743237949	0.0520810701854399	0.9535137299197660	0.1587740557483543
54	0.3310451504860488	0.0797182847088560	0.9402415133478988	0.1649093382274097
55	0.3646215567376676	0.1080465999177927	0.9248659646718568	0.1701915216193265
56	0.3974916785279360	0.1368413849366629	0.9073449183577654	0.1746847753144065
57	0.4295967403772029	0.1659073184763559	0.8876493690265695	0.1784555512007570
58	0.4608742854473447	0.1950703730454614	0.8657611925775514	0.1815687562112174
59	0.4912598858949903	0.2241721144376724	0.8416713061635072	0.1840864370663302
60	0.5206882758945558	0.2530655255406488	0.8153781693967469	0.1860676785390006
61	0.5490940914019820	0.2816118409731066	0.7868865546005788	0.1875690583743703
62	0.5764123302025542	0.3096780504593238	0.7562065396795865	0.1886453236347225
63	0.6025786004213506	0.3371348366394988	0.7233527025167632	0.1893501123329645
64	0.6275291964794956	0.3638547827694396	0.6883435222485954	0.1897366184519868
65	0.3348189479861771	0.0266484193553744	0.9419055864656976	0.1643908815152736
66	0.3699515545855294	0.054240006684350	0.9274663711354920	0.1696300350907768
67	0.4042003071474669	0.0825199271543086	0.9109404883549424	0.1741553103844483
68	0.4375320100182624	0.1112695182483710	0.8922918998389230	0.1780015282386092
69	0.4699054490335947	0.1402964116467816	0.8714962913561781	0.1812116787077125
70	0.5012739879431952	0.1694275117584291	0.8485391607173312	0.1838323158085421
71	0.5315874883754966	0.1985038235312689	0.8234142179037827	0.1859113119837737
72	0.5607937109622116	0.2273765660020893	0.7961220452784415	0.1874969220221698
73	0.5888393223495521	0.2559041492849764	0.7666689760474548	0.1886375612681076
74	0.6156705979160163	0.2839497251976899	0.7350661660162923	0.1893819575809276
75	0.6412338809078123	0.3113791060500690	0.7013288545977311	0.1897794748256767
76	0.4076051259257167	0.0275779229085846	0.9127417594736908	0.1738963926584846
77	0.4423788125791520	0.0558413683498429	0.8950881117308378	0.1777442359873466
78	0.4760480917328258	0.0845777208772714	0.8753426891730698	0.1810010815068719
79	0.5085838725946297	0.1135975846359248	0.8534858131811760	0.1836920318248129
80	0.5399513637391218	0.1427286904765053	0.8295065073350085	0.1858489473214328
81	0.5701118433636380	0.1718112740057635	0.8034011278191182	0.1875079342496592
82	0.5990240530606021	0.2006944855985351	0.7751721791351830	0.1887080239102310
83	0.6266452685139695	0.2292335090598907	0.7448272992936981	0.1894905752176822
84	0.6529320971415942	0.2572871512353714	0.7123784095068203	0.1898991061200695
85	0.4791583834610126	0.0282609419773593	0.8772733682938184	0.1809065016458791
86	0.5130373952796941	0.0569987135968365	0.8564717027975487	0.1836297121596799
87	0.5456252429628476	0.0860271252855440	0.8336020801058733	0.1858426916241869
88	0.5768956329682385	0.1151748137221281	0.8086570292443197	0.1875654101134641
89	0.6068186944699046	0.1442811654136362	0.7816354760044630	0.1888240751833503
90	0.6353622248024907	0.1731930321657680	0.7525417044279051	0.1896497383866979
91	0.6624927035731797	0.2017619958756061	0.7213844430902229	0.1900775530219121
92	0.5484933508028488	0.0287421975590739	0.8356607745996807	0.1858525041478814
93	0.5810207682142106	0.0577831212371370	0.8118349449265306	0.1876248690077947
94	0.6120955197181353	0.0869526237143953	0.7859887505366528	0.1889404439064607
95	0.6416944284294319	0.1160893767057166	0.7581236819534810	0.1898168539265290
96	0.6697926391731260	0.1450378826743251	0.7282457230213215	0.1902779940661772
97	0.6147594390585488	0.0290495762234146	0.7881795190244787	0.1890125641731815
98	0.6455390026356783	0.0582380915261720	0.7615035920936440	0.1899434637795751
99	0.6747258588365477	0.0874038489988471	0.7328748751304481	0.1904520856831751
100	0.6772135750395347	0.0291994613580811	0.7352068860113937	0.1905534498734563

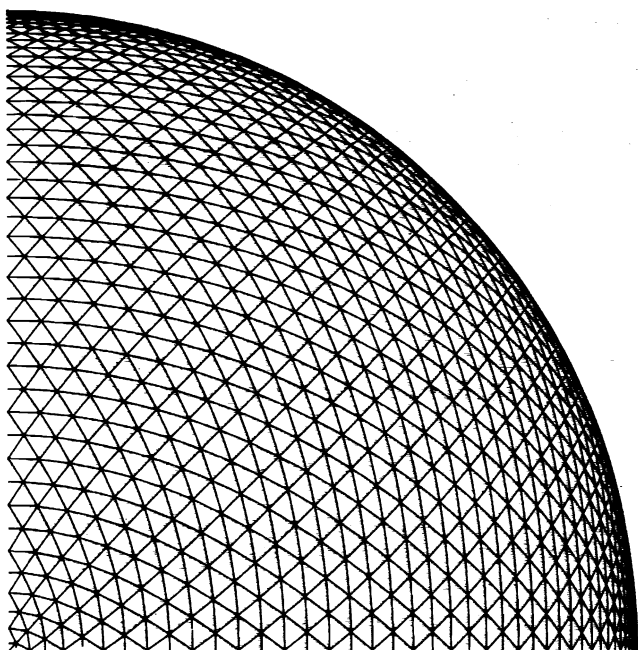


Рис. 1.

На рис. 1 изображена сетка на сфере, проведенная через узлы квадратуры 131-го порядка. Как и для других полученных квадратурных формул порядков  $n = 6m + 5$ , узлы данной квадратуры почти равномерно триангулируют поверхность сферы и все веса положительны и близки по величине. Это свойство квадратур указанного типа

весьма полезно для многих задач математической физики, в частности для трехмерного численного интегрирования в задачах квантовой химии, где квадратуры указанного типа находят широкое применение [6]. Кроме того, сетку, образованную узлами данной квадратуры, можно использовать для построения конечно-разностных схем и схем метода конечных элементов для аппроксимации дифференциальных уравнений в частных производных на поверхности сферы, что в силу равномерности распределения ее узлов имеет определенные преимущества по сравнению с использованием прямоугольных сеток в сферических координатах  $(\theta, \phi)$ .

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 96-01-01481, 06-01-00163).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лебедев В.И. // ЖВМиМФ. 1976. Т. 16. № 2. С. 293–306.
2. Лебедев В.И. // Сиб. мат. журн. 1977. Т. 18. № 1. С. 132–142.
3. Лебедев В.И. Тр. конф. по дифференциальным уравнениям и вычислительной математике. Новосибирск, 1978. С. 110–114.
4. Лебедев В.И., Скороходов А.Л. // ДАН. 1992. Т. 324. № 3. С. 519–524.
5. Лебедев В.И. // ДАН. 1994. Т. 338. № 4. С. 454–456.
6. Laikov D.N. // Chem. Phys. Lett. 1997. Т. 281. № 2. С. 151–156.