

КВАДРАТУРНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ СФЕРЫ 131-ГО АЛГЕБРАИЧЕСКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

©1998 г. В.И. Лебедев, Д.Н. Лайков

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, 2, 3].

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

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

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

$$\begin{aligned} A_1 : & (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1); \\ A_2 : & (\pm 2^{-\frac{1}{2}}, \pm 2^{-\frac{1}{2}}, 0), (\pm 2^{-\frac{1}{2}}, 0, \pm 2^{-\frac{1}{2}}), (0, \pm 2^{-\frac{1}{2}}, \pm 2^{-\frac{1}{2}}); \\ A_3 : & (\pm 3^{-\frac{1}{2}}, \pm 3^{-\frac{1}{2}}, \pm 3^{-\frac{1}{2}}); \\ B_k : & (\pm l_k, \pm l_k, \pm m_k), (\pm l_k, \pm m_k, \pm l_k), (\pm m_k, \pm l_k, \pm l_k), 2l_k^2 + m_k^2 = 1; \\ C_k : & (\pm q_k, \pm r_k, 0), (\pm q_k, 0, \pm r_k), (0, \pm q_k, \pm r_k), \\ & (\pm r_k, \pm q_k, 0), (\pm r_k, 0, \pm q_k), (0, \pm r_k, \pm q_k), q_k^2 + r_k^2 = 1; \\ D_k : & (\pm u_k, \pm v_k, \pm w_k), (\pm v_k, \pm w_k, \pm u_k), (\pm w_k, \pm u_k, \pm v_k), \\ & (\pm v_k, \pm u_k, \pm w_k), (\pm u_k, \pm w_k, \pm v_k), (\pm w_k, \pm v_k, \pm u_k), u_k^2 + v_k^2 + w_k^2 = 1. \end{aligned} \quad (3)$$

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), оказалось возможным получить квадратуры (2) для $n = 6m + 5$, $m = 10, 11, \dots, 21$. Подробное описание применяемого алгоритма, а также параметры квадратур для $m = 10, \dots, 20$ будут опубликованы в ближайшее время.

Параметры квадратуры 131-го порядка ($N_B = 31$, $N_C = 10$, $N_D = 100$) приведены с шестнадцатью значащими цифрами в табл. 1, 2, 3. Эта квадратурная формула содержит $N = 5810$ узлов и правильно интегрирует 17424 сферических гармоник до 131-го порядка включительно; ее коэффициент эффективности [1] $\eta = (n+1)^2/3N$ равен 0.99966. При работе 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 $2 \cdot 10^{-15}$.

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.

Рис. 1: Сетка, построенная по узлам квадратуры

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 конечноразностных 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 (θ, ϕ) .

Данная работа была выполнена при поддержке РФФИ проектов 96-01-01481, 06-01-00163.

*Российский научный центр "Курчатовский институт",
Институт вычислительной математики РАН, Москва;
Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва*

ЛИТЕРАТУРА

- [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.* Теория кубатурных формул и вычислительная математика. 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.

Таблица 1: Параметры квадратуры 131-го порядка

	A_1	A_2	A_3
	.9735347946175486e-5	.1907581241803167e-3	.1901059546737578e-3
k	l_k	m_k	B_k
1	.1182361662400277e-1	.9998601923168344e+0	.3926424538919212e-4
2	.3062145009138958e-1	.9990618867660806e+0	.6667905467294382e-4
3	.5329794036834243e-1	.9971552833460720e+0	.8868891315019135e-4
4	.7848165532862219e-1	.9938215431121216e+0	.1066306000958872e-3
5	.1054038157636201e+0	.9888276246368412e+0	.1214506743336128e-3
6	.1335577797766211e+0	.9820003253167888e+0	.1338054681640871e-3
7	.1625769955502252e+0	.9732098648471070e+0	.1441677023628504e-3
8	.1921787193412792e+0	.9623589141607676e+0	.1528880200826557e-3
9	.2221340534690548e+0	.9493750178821930e+0	.1602330623773609e-3
10	.2522504912791132e+0	.9342052126266968e+0	.1664102653445244e-3
11	.2823610860679697e+0	.9168121040589686e+0	.1715845854011323e-3
12	.3123173966267560e+0	.8971709355126096e+0	.1758901000133069e-3
13	.3419847036953789e+0	.8752673448020141e+0	.1794382485256736e-3
14	.3712386456999758e+0	.8510956091284314e+0	.1823238106757407e-3
15	.3999627649876828e+0	.8246572459190639e+0	.1846293252959976e-3
16	.4280466458648093e+0	.7959598846221919e+0	.1864284079323098e-3
17	.4553844360185711e+0	.7650163598669611e+0	.1877882694626914e-3
18	.4818736094437834e+0	.7318440059488363e+0	.1887716321852025e-3
19	.5074138709260629e+0	.6964641607316614e+0	.1894381638175673e-3
20	.5319061304570707e+0	.6589019174083282e+0	.1898454899533629e-3
21	.5552514978677286e+0	.6191861983533608e+0	.1900497929577815e-3
22	.5981009025246183e+0	.5334328643779589e+0	.1900671501924092e-3
23	.6173990192228116e+0	.4874801556221757e+0	.1899837555533510e-3
24	.6351365239411131e+0	.4395488504273442e+0	.1899014113156229e-3
25	.6512010228227200e+0	.3897107334283811e+0	.1898581257705106e-3
26	.6654758363948120e+0	.3380589036680602e+0	.1898804756095753e-3
27	.6778410414853370e+0	.2847157265697618e+0	.1899793610426402e-3
28	.6881760887484110e+0	.2298419930079757e+0	.1901464554844117e-3
29	.6963645267094598e+0	.1736458806923450e+0	.1903533246259542e-3
30	.7023010617153579e+0	.1163891637007593e+0	.1905556158463228e-3
31	.7059004636628753e+0	.5838724861710244e-1	.1907037155663528e-3
k	q_k	r_k	C_k
1	.3552470312472575e-1	.9993687985262998e+0	.5992997844249968e-4
2	.9151176620841284e-1	.9958039950941234e+0	.9749059382456978e-4
3	.1566197930068980e+0	.9876589697048654e+0	.1241680804599158e-3
4	.2265467599271907e+0	.9740002903318314e+0	.1437626154299360e-3
5	.2988242318581361e+0	.9543081674461322e+0	.1584200054793902e-3
6	.3717482419703886e+0	.9283335847592316e+0	.1694436550982744e-3
7	.4440094491758889e+0	.8960221029877130e+0	.1776617014018108e-3
8	.5145337096756643e+0	.8574701520212813e+0	.1836132434440077e-3
9	.5824053672860230e+0	.8128985103667202e+0	.1876494727075983e-3
10	.6468283961043370e+0	.7626355787616330e+0	.1899906535336482e-3

Таблица 2: Параметры квадратуры 131-го порядка (продолжение)

k	u_k	v_k	w_k	D_k
1	.6095964259104373e-1	.1787828275342931e-1	.9979801045015680e+0	.8143252820767349e-4
2	.8811962270959388e-1	.3953888740792096e-1	.9953248758450994e+0	.9998859890887728e-4
3	.1165936722428831e+0	.6378121797722990e-1	.9911295938605910e+0	.1156199403068359e-3
4	.1460232857031785e+0	.8985890813745037e-1	.9851916446361048e+0	.1287632092635513e-3
5	.1761197110181755e+0	.1172606510576162e+0	.9773595996890900e+0	.1398378643365139e-3
6	.2066471190463718e+0	.1456102876970995e+0	.9675198252783260e+0	.1491876468417391e-3
7	.2374076026328152e+0	.1746153823011775e+0	.9555873055226052e+0	.1570855679175456e-3
8	.2682305474337051e+0	.2040383070295584e+0	.9414991995152872e+0	.1637483948103775e-3
9	.2989653312142369e+0	.2336788634003698e+0	.9252102028900638e+0	.1693500566632843e-3
10	.3294762752772209e+0	.2633632752654219e+0	.9066891249325308e+0	.1740322769393633e-3
11	.3596390887276086e+0	.2929369098051600e+0	.8859163012006150e+0	.1779126637278296e-3
12	.3893383046398812e+0	.3222592785275512e+0	.8628815920756713e+0	.1810908108835412e-3
13	.4184653789358347e+0	.3512004791195743e+0	.8375828019355877e+0	.1836529132600190e-3
14	.4469172319076166e+0	.3796385677684538e+0	.8100244105499234e+0	.1856752841777379e-3
15	.4745950813276976e+0	.4074575378263879e+0	.7802165492015750e+0	.1872270566606832e-3
16	.5014034601410262e+0	.4345456906027828e+0	.7481741862274833e+0	.1883722645591307e-3
17	.5272493404551239e+0	.4607942515205134e+0	.7139165152560114e+0	.1891714324525297e-3
18	.5520413051846366e+0	.4860961284181720e+0	.6774665684053399e+0	.1896827480450146e-3
19	.5756887237503077e+0	.5103447395342789e+0	.6388511095524769e+0	.1899628417059528e-3
20	.1225039430588352e+0	.2136455922655793e-1	.9922380458055882e+0	.1123301829001669e-3
21	.1539113217321372e+0	.4520926166137188e-1	.9870498607986832e+0	.1253698826711277e-3
22	.1856213098637712e+0	.7086468177864819e-1	.9800627154426746e+0	.1366266117678531e-3
23	.2174998728035131e+0	.9785239488772918e-1	.9711429936652952e+0	.1462736856106918e-3
24	.2494128336938330e+0	.1258106396267210e+0	.9601900443899258e+0	.1545076466685412e-3
25	.2812321562143480e+0	.1544529125047001e+0	.9471286988207272e+0	.1615096280814007e-3
26	.3128372276456111e+0	.1835433512202753e+0	.9319038079232420e+0	.1674366639741759e-3
27	.3441145160177973e+0	.2128813258619585e+0	.9144762112625412e+0	.1724225002437900e-3
28	.3749567714853510e+0	.2422913734880829e+0	.8948197080141567e+0	.1765810822987288e-3
29	.4052621732015610e+0	.2716163748391453e+0	.8729187338413519e+0	.1800104126010751e-3
30	.4349335453522385e+0	.3007127671240280e+0	.8487665419984122e+0	.1827960437331284e-3
31	.4638776641524965e+0	.3294470677216479e+0	.8223637530132463e+0	.1850140300716308e-3
32	.4920046410462687e+0	.3576932543699155e+0	.7937171844978482e+0	.1867333507394938e-3
33	.5192273554861704e+0	.3853307059757764e+0	.7628389085167639e+0	.1880178688638289e-3
34	.5454609081136522e+0	.4122425044452694e+0	.7297455140311051e+0	.1889278925654758e-3
35	.5706220661424140e+0	.4383139587781027e+0	.6944575805415550e+0	.1895213832507346e-3
36	.5946286755181518e+0	.4634312536300553e+0	.6569993998554366e+0	.1898548277397420e-3
37	.1905370790924295e+0	.2371311537781979e-1	.9813935549258532e+0	.1349105935937341e-3
38	.2242518717748009e+0	.4917878059254805e-1	.9732895486672650e+0	.1444060068369326e-3
39	.2577190808025936e+0	.7595498960495142e-1	.9632298349534124e+0	.1526797390930008e-3
40	.2908724534927186e+0	.1036991083191100e+0	.9511254968367464e+0	.1598208771406474e-3
41	.3236354020056219e+0	.1321348584450234e+0	.9369100841342104e+0	.1659354368615331e-3
42	.3559267359304543e+0	.1610316571314789e+0	.9205351509048322e+0	.1711279910946440e-3
43	.3876637123676956e+0	.1901912080395707e+0	.9019668233908304e+0	.1754952725601440e-3
44	.4187636705218842e+0	.2194384950137950e+0	.8811831450709435e+0	.1791247850802529e-3
45	.4491449019883107e+0	.2486155334763858e+0	.8581719953087277e+0	.1820954300877716e-3
46	.4787270932425445e+0	.2775768931812335e+0	.8329294319252971e+0	.1844788524548449e-3
47	.5074315153055574e+0	.3061863786591120e+0	.8054583532364195e+0	.1863409481706220e-3
48	.5351810507738336e+0	.3343144718152556e+0	.7757674115529100e+0	.1877433008795068e-3
49	.5619001025975381e+0	.3618362729028427e+0	.7438701407588932e+0	.1887444543705232e-3
50	.5875144035268046e+0	.3886297583620408e+0	.7097842887553970e+0	.1894009829375006e-3

Таблица 3: Параметры квадратуры 131-го порядка (продолжение)

k	u_k	v_k	w_k	D_k
51	.6119507308734495e+0	.4145742277792031e+0	.6735313746550552e+0	.1897683345035198e-3
52	.2619733870119463e+0	.2540047186389353e-1	.9647407737452484e+0	.1517327037467653e-3
53	.2968149743237949e+0	.5208107018543989e-1	.9535137299197660e+0	.1587740557483543e-3
54	.3310451504860488e+0	.7971828470885599e-1	.9402415133478988e+0	.1649093382274097e-3
55	.3646215567376676e+0	.1080465999177927e+0	.9248659646718568e+0	.1701915216193265e-3
56	.3974916785279360e+0	.1368413849366629e+0	.9073449183577654e+0	.1746847753144065e-3
57	.4295967403772029e+0	.1659073184763559e+0	.8876493690265695e+0	.1784555512007570e-3
58	.4608742854473447e+0	.1950703730454614e+0	.8657611925775514e+0	.1815687562112174e-3
59	.4912598858949903e+0	.2241721144376724e+0	.8416713061635072e+0	.1840864370663302e-3
60	.5206882758945558e+0	.2530655255406488e+0	.8153781693967469e+0	.1860676785390006e-3
61	.5490940914019820e+0	.2816118409731066e+0	.7868865546005788e+0	.1875690583743703e-3
62	.5764123302025542e+0	.3096780504593238e+0	.7562065396795865e+0	.1886453236347225e-3
63	.6025786004213506e+0	.3371348366394988e+0	.7233527025167632e+0	.1893501123329645e-3
64	.6275291964794956e+0	.3638547827694396e+0	.6883435222485954e+0	.1897366184519868e-3
65	.3348189479861771e+0	.2664841935537443e-1	.9419055864656976e+0	.1643908815152736e-3
66	.3699515545855294e+0	.5424000066843495e-1	.9274663711354920e+0	.1696300350907768e-3
67	.4042003071474669e+0	.8251992715430855e-1	.9109404883549424e+0	.1741553103844483e-3
68	.4375320100182624e+0	.1112695182483710e+0	.8922918998389230e+0	.1780015282386092e-3
69	.4699054490335947e+0	.1402964116467816e+0	.8714962913561781e+0	.1812116787077125e-3
70	.5012739879431952e+0	.1694275117584291e+0	.8485391607173312e+0	.1838323158085421e-3
71	.5315874883754966e+0	.1985038235312689e+0	.8234142179037827e+0	.1859113119837737e-3
72	.5607937109622116e+0	.2273765660020893e+0	.7961220452784415e+0	.1874969220221698e-3
73	.5888393223495521e+0	.2559041492849764e+0	.7666689760474548e+0	.1886375612681076e-3
74	.6156705979160163e+0	.2839497251976899e+0	.7350661660162923e+0	.1893819575809276e-3
75	.6412338809078123e+0	.3113791060500690e+0	.7013288545977311e+0	.1897794748256767e-3
76	.4076051259257167e+0	.2757792290858463e-1	.9127417594736908e+0	.1738963926584846e-3
77	.4423788125791520e+0	.5584136834984292e-1	.8950881117308378e+0	.1777442359873466e-3
78	.4760480917328258e+0	.8457772087727143e-1	.8753426891730698e+0	.1810010815068719e-3
79	.5085838725946297e+0	.1135975846359248e+0	.8534858131811760e+0	.1836920318248129e-3
80	.5399513637391218e+0	.1427286904765053e+0	.8295065073350085e+0	.1858489473214328e-3
81	.5701118433636380e+0	.1718112740057635e+0	.8034011278191182e+0	.1875079342496592e-3
82	.5990240530606021e+0	.2006944855985351e+0	.7751721791351830e+0	.1887080239102310e-3
83	.6266452685139695e+0	.2292335090598907e+0	.7448272992936981e+0	.1894905752176822e-3
84	.6529320971415942e+0	.2572871512353714e+0	.7123784095068203e+0	.1898991061200695e-3
85	.4791583834610126e+0	.2826094197735932e-1	.8772733682938184e+0	.1809065016458791e-3
86	.5130373952796941e+0	.5699871359683649e-1	.8564717027975487e+0	.1836297121596799e-3
87	.5456252429628476e+0	.8602712528554395e-1	.8336020801058733e+0	.1858426916241869e-3
88	.5768956329682385e+0	.1151748137221281e+0	.8086570292443197e+0	.1875654101134641e-3
89	.6068186944699046e+0	.1442811654136362e+0	.7816354760044630e+0	.1888240751833503e-3
90	.6353622248024907e+0	.1731930321657680e+0	.7525417044279051e+0	.1896497383866979e-3
91	.6624927035731797e+0	.2017619958756061e+0	.7213844430902229e+0	.1900775530219121e-3
92	.5484933508028488e+0	.2874219755907391e-1	.8356607745996807e+0	.1858525041478814e-3
93	.5810207682142106e+0	.5778312123713695e-1	.8118349449265306e+0	.1876248690077947e-3
94	.6120955197181353e+0	.8695262371439526e-1	.7859887505366528e+0	.1889404439064607e-3
95	.6416944284294319e+0	.1160893767057166e+0	.7581236819534810e+0	.1898168539265290e-3
96	.6697926391731260e+0	.1450378826743251e+0	.7282457230213215e+0	.1902779940661772e-3
97	.6147594390585488e+0	.2904957622341456e-1	.7881795190244787e+0	.1890125641731815e-3
98	.6455390026356783e+0	.5823809152617198e-1	.7615035920936440e+0	.1899434637795751e-3
99	.6747258588365477e+0	.8740384899884714e-1	.7328748751304481e+0	.1904520856831751e-3
100	.6772135750395347e+0	.2919946135808105e-1	.7352068860113937e+0	.1905534498734563e-3