Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений тетраэдра

Попов А. С.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск; popov@labchem.sscc.ru

Дается определение наилучшей кубатурной формулы для сферы, инвариантной относительно группы вращений тетраэдра. Описывается алгоритм поиска наилучших кубатурных формул данного типа симметрии. Приводится таблица, содержащая основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатурных формул группы вращений тетраэдра до 29-го порядка точности. Даются с 16 значащими цифрами параметры новых кубатурных формул 10-го и 13-го порядков точности.

1. Введение. Пусть S – единичная сфера, т. е. множество точек $(x, y, z) \in \mathbf{R_3}$, для которых $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Рассмотрим на S интеграл

$$U(f) = \frac{1}{4\pi} \int_S f(s)\, ds, \tag{1}$$

где $s \in S$, ds – элемент поверхности сферы, $U(1) = 1$.

Для численного нахождения интеграла (1) построим кубатурную формулу

$$V(f) = \sum_{i=1}^{N} w_i f(s_i), \tag{2}$$

где N – число узлов, w_i – веса, s_i – узлы.

Будем говорить, что данная кубатурная формула имеет алгебраический порядок точности n (или просто порядок n), если она точна на всех многочленах степени не выше n и не точна хотя бы на одном многочлене степени $n+1$.

В работах [1,2] был описан алгоритм построения кубатур на сфере, инвариантных относительно группы вращений тетраэдра T и имеющих минимальное для данного порядка n число узлов N. В работе [3] предложен новый критерий оптимальности кубатурной формулы на сфере, инвариантной относительно любой заданной группы симметрии.

В п. 2 настоящей работы дается краткое описание алгоритма поиска наилучших (в некотором смысле) кубатур на сфере, инвариантных относительно группы T, а в п. 3 этот алгоритм применяется для поиска всех наилучших кубатур группы T до 29-го порядка точности.

2. Алгоритм построения наилучших кубатур группы *T*. Будем строить эти кубатуры в виде

$$V(f) = A_0 \sum_{j=1}^{4} f(a_{0j}) + B_0 \sum_{j=1}^{4} f(b_{0j}) + C_0 \sum_{j=1}^{6} f(c_{0j}) + \sum_{i=1}^{M} A_i \sum_{j=1}^{12} f(a_{ij}), \tag{3}$$

где 4 точки a_{0j} лежат в вершинах вписанного в сферу правильного тетраэдра и имеют координаты (p, p, p), $(p, -p, -p)$, $(-p, p, -p)$, $(-p, -p, p)$ при $p = 1/\sqrt{3}$. Координаты 4 точек b_{0j}, 6 точек c_{0j} и 12 точек a_{ij}, отвечающих, соответственно, центрам граней, серединам ребер и точкам общего положения на гранях тетраэдра, приведены в [1].

В работах [1,2] показано, что для того чтобы кубатура (3) имела порядок n, необходимо и достаточно, чтобы она была точна на всех многочленах вида $u^i v^j w^k$, где $3i + 4j + 6k \leq n$; $i, j = 0, 1, 2, \ldots$; $k = 0, 1$; а u, v и w представляют собой базисные инвариантные многочлены группы T третьей, четвертой и шестой степени соответственно.

Параметрами кубатуры (3) являются веса A_0, B_0, C_0, A_i и координаты (a_i, b_i, c_i) узлов a_{ij}. С учетом уравнений связи $a_i^2 + b_i^2 + c_i^2 = 1$ легко видеть, что узлы a_{0j}, b_{0j} и c_{0j} имеют по одному свободному параметру, а узлы a_{ij} – по три свободных параметра. В итоге на один свободный параметр приходится: 4 узла a_{0j}, b_{0j} или a_{ij}, 6 узлов c_{0j}.

Обозначим общее число базисных многочленов степени не выше n через m. Поскольку общее число свободных параметров в кубатуре порядка n должно быть равно m, то для получения формулы с минимальным для данного n числом узлов N выгоднее всего использовать в первую очередь узлы a_{0j}, b_{0j}, a_{ij} и лишь в последнюю очередь – узлы c_{0j}.

Возможны три случая: 1) $m = 3M$, полагаем в (3) $A_0 = B_0 = C_0 = 0$; 2) $m = 3M + 1$, полагаем $B_0 = C_0 = 0$; 3) $m = 3M + 2$, полагаем $C_0 = 0$.

При рассмотрении этих случаев мы исходили из гипотезы о том, что такие параметризации приводят к разрешимым системам нелинейных уравнений и дают в итоге кубатуры с положительными весами и с узлами, лежащими на сфере. Накопленный нами опыт конкретных расчетов говорит о том, что действительно эта гипотеза всегда верна, кроме случая $n = 6$, $m = 5$, когда кубатура с $N = 20$ имеет отрицательные веса (см. [4]).

При построении конкретных кубатур вида (3) мы будем стремиться получить наилучшие в некотором смысле кубатуры для каждого n. В соответствии с определением из [3], наилучшая среди всех кубатурных формул вида (3) порядка n должна последовательно удовлетворять четырем условиям: 1) узлы лежат на сфере; 2) веса положительны; 3) число узлов минимально; 4) главный член погрешности минимален.

3. Поиск наилучших кубатур группы *T*. Поиск наилучших кубатур проводился в соответствии с алгоритмом из п. 2. Расчет параметров новых кубатур выполнялся численным методом, аналогичным работе [3]. Приведем теперь сводную таблицу, содержащую основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатур группы T для сферы до 29-го порядка точности.

n	N	E	G	L	n	N	E	G	L	n	N	E	G	L
2	4	1.9720	T_d	[5]	12	60	1.1835	T	[1]	21	162	1.6219	T_h	–
3	6	2.2913	O_h	[5]	13	68	1.6080	T	–	22	180	0.6933	T	–
5	12	2.3917	Y_h	[5]	14	72	1.7836	Y	[6]	23	192	0.3349	Y	[9]
6	22	0.5454	T_d	[4]	15	84	2.0117	T_h	[1]	24	212	0.5485	Y	[9]
7	24	1.4662	O	[6]	16	100	0.8130	T	–	25	228	0.6104	T	–
8	28	1.8137	T	[1]	17	108	1.4797	T	–	26	244	0.8682	T	–
9	32	2.2441	Y_h	[7]	18	124	1.1990	T	–	27	260	1.5409	T_h	–
10	44	1.4291	T_d	–	19	132	1.0089	Y	[9]	28	284	0.3722	T	–
11	48	1.6928	O	[8]	20	148	0.8569	T	–	29	296	1.7440	T_h	–

Здесь $E = E_{n+1}$ – главный член погрешности [3], G – группа симметрии данной кубатуры (обозначения групп взяты из [10]), L – ссылка на первоисточник.

Приведем в заключение параметры новых наилучших кубатур 10-го и 13-го порядков точности.

$$n = 10,\ N = 44,\ M = 3,\ A_0 = 27/2240 = 0.1205357142857143E-1,$$
$$B_0 = 27/1120 = 0.2410714285714286E-1,\ C_0 = 0$$

i	A_i	a_i
1	$0.2297654193618004E-1$	$0.3582552239079283E+0$
2	$0.2329028505394338E-1$	$0.7056713815166245E+0$
3	$0.2501293491463849E-1$	$0.2076116168580279E+0$
i	b_i	c_i
1	$0.3582552239079283E+0$	$0.8621521844114067E+0$
2	$0.7056713815166245E+0$	$-0.6368518365237941E-1$
3	$0.2076116168580279E+0$	$-0.9559261650834707E+0$

$$n = 13,\ N = 68,\ M = 5,\ A_0 = 0.1352485457725067E-1,$$
$$B_0 = 0.1517251300680149E-1,\ C_0 = 0$$

i	A_i	a_i
1	$0.1363347665056839E-1$	$0.7859194339703887E+0$
2	$0.1485580566128947E-1$	$0.7646854720239241E+0$
3	$0.1499281604183833E-1$	$0.8840280162756681E+0$
4	$0.1500767347471316E-1$	$0.9777182068662691E+0$
5	$0.1527777231023993E-1$	$0.8708280759039422E+0$
i	b_i	c_i
1	$0.5730053540474418E+0$	$0.2323693343378805E+0$
2	$0.6207214909924342E+0$	$-0.1730923438389977E+0$
3	$0.2408287218543596E+0$	$-0.4006195117186663E+0$
4	$0.2086707415825803E+0$	$0.2288295369010155E-1$
5	$0.1824962549309805E+0$	$0.4564576422337614E+0$

Работа поддержана грантом РФФИ № 10-01-00427-а.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Попов А. С.* Кубатурные формулы для сферы, инвариантные относительно группы тетраэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физ. — 1995, Т. 35, № 3, С. 459–466.
2. *Попов А. С.* Кубатурные формулы высоких порядков точности для сферы, инвариантные относительно группы тетраэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физ. — 1996, Т. 36, № 4, С. 5–9.
3. *Попов А. С.* Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2002, Т. 5, № 4, С. 367–372.
4. *Konyaev S. I.* On invariant quadrature formulae for a sphere // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1995, Vol. 10, № 1, P. 41– 47.
5. *Диткин В. А.* О некоторых приближенных формулах для вычисления трехкратных интегралов // Докл. АН СССР, 1948, Т. 62, № 4, С. 445–447.
6. *McLaren A. D.* Optimal numerical integration on a sphere // Math. Comput. — 1963, Vol. 17, № 83, P. 361–383.
7. *Диткин В. А., Люстерник Л. А.* Об одном приеме практического гармонического анализа на сфере // Вычисл. математика и вычисл. техника. — М.: Машгиз, 1953, № 1, С. 3–13.

8. *Попов А. С.* Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений октаэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физ. — 1998, Т. 38, № 1, С. 34–41.
9. *Попов А. С.* Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений икосаэдра // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2008, Т. 11, № 4, С. 433–440.
10. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика (неретятивистская теория). — М.: Наука, 1989, гл. 12.