ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 15 Январь 1975 Февраль № 1

УДК 518:517.392

ЗНАЧЕНИЯ УЗЛОВ И ВЕСОВ КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ ТИПА ГАУССА — МАРКОВА ДЛЯ СФЕРЫ ОТ 9-ГО ДО 17-ГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ, ИНВАРИАНТНЫХ ОТНОСИТЕЛЬНО ГРУППЫ ОКТАЭДРА С ИНВЕРСИЕЙ

В. И. ЛЕБЕДЕВ

(Москва)

Даны таблицы значений узлов и весов квадратурных формул типа Гаусса — Маркова интегрирования по поверхности трехмерной сферы от 9-го до 17-го порядка включительно, инвариантных относительно группы октаэдра.

Пусть в трехмерном евклидовом пространстве $R_3(x, y, z)$ задана единичная сфера S, а Ω — вписанный в нее октаэдр, вершины которого лежат на осях координат. В работе приведены таблицы узлов и весов квадратурных формул типа Гаусса — Маркова, имеющих вид

$$J(f) \equiv \frac{1}{4\pi}\int\limits_S f(s)\,ds = A_1\sum_{i=1}^{6} f(a_i^1) + A_2\sum_{i=1}^{12} f(a_i^2) + \tag{1}$$
$$+ A_3\sum_{i=1}^{8} f(a_i^3) + \sum_{k=1}^{N_1} B_k \sum_{i=1}^{24} f(b_i^k) + C_1\sum_{i=1}^{24} f(c_i^1),$$

точно интегрирующих все линейные комбинации сферических функций Y_{ik} до порядка n включительно, где $9\leqslant n\leqslant 17$. В квадратуре (1) имеем $s\in S$, ds — элемент площади поверхности S, $N_1\leqslant 3$. Узлы a_i^k, b_i^k, $c_i^1\in S$ имеют следующие координаты:

a_i^1: $(0, 0, \pm 1)$ $(0, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, 0)$ (a_i^1 — вершины Ω);

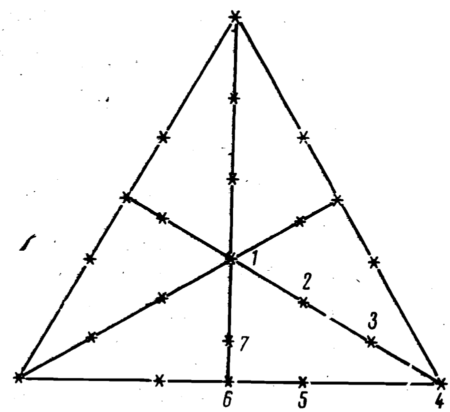
a_i^2: $(\pm 2^{-1/2}, \pm 2^{-1/2}, 0)$, $(\pm 2^{-1/2}, 0, \pm 2^{-1/2})$, $(0, \pm 2^{-1/2}, \pm 2^{-1/2})$, где $2^{-1/2}=0.707106781187$ (центральные проекции a_i^2 на Ω совпадают с серединами ребер Ω);

a_i^3: $(\pm 3^{-1/2}, \pm 3^{-1/2}, \pm 3^{-1/2})$, где $3^{-1/2}=0.577350269190$ (центральные проекции a_i^3 на Ω совпадают с центрами граней Ω);

b_i^k: $(\pm l_k, \pm l_k, \pm m_k)$, $(\pm l_k, \pm m_k, \pm l_k)$, $(\pm m_k, \pm l_k, \pm l_k)$, где $l_k=2^{-1/2}(1-m_k^2)^{1/2}$ (центральные проекции b_i^k на Ω лежат на высотах граней Ω);

c_i^1: $(\pm p_1, \pm q_1, 0)$, $(\pm p_1, 0, \pm q_1)$, $(0, \pm p_1, \pm q_1)$, $(\pm q_1, \pm p_1, 0)$, $(\pm q_1, 0, \pm p_1)$, $(0, \pm q_1, \pm p_1)$, где $q_1=(1-p_1^2)^{1/2}$ (центральные проекции c_1^1 на Ω лежат на ребрах Ω).

Число слагаемых в (1) выбрано таким, чтобы обеспечить получение квадратур до 17-го алгебраического порядка точности, инвариантных относительно группы октаэдра с инверсией G_8^*. Качество квадратур можно оценивать величиной $\eta=(n+1)^2/(3N)$, где $(n+1)^2$ — общее число правильно интегрируемых сферических функций Y_{ik} до порядка n включительно, а N — число узлов в квадратуре с ненулевыми весами. Для квадратур с минимальным числом узлов $\eta\to1$ при $n\to\infty$. Квадратуры для сферы содержатся в работах [1–5]: в [1] приведена квадратура, инвариантная относительно группы икосаэдра при $n=9$ с $\eta=25/24$, в [2] — аналогичная квадратура для $n=15$ с $\eta=128/183$ и изложен метод получения квадратур с асимптотикой $\eta\to{}^1/_3$ при $n\to\infty$, в [3] квадратуры имеют асимптотику $\eta\to{}^2/_3$ при $n\to\infty$, в [4, 5] содержится изложение метода получения квадратур с одной плавающей точкой. Автору неизвестны квадратуры типа Гаусса — Маркова группы G_8^* для $n\geqslant9$, вычисленные с большой точностью.



На фигуре изображена одна из граней Ω; звездочки обозначают центральные проекции на Ω узлов (1). Каждую квадратуру мы снабдим указанием, узлы какого типа в ней рассматриваются. Веса и узлы даны с 12 значащими цифрами и в виде формул, позволяющих вычислить их с любой точностью. Последняя цифра в весах скорректирована. Для упрощения вида формул введены дополнительные переменные, значения которых приводятся; в частности, положим: $t_k=m_k^2$ и

(2) $$v=-p_1^2(p_1^2-1)=-q_1^2(q_1^2-1),\qquad \varphi(t)=t(t-1)^2(t-{}^1/_3)^2.$$

Первая строка каждой таблицы содержит априорно налагаемые требования на тип квадратуры.

$n=9$

9.1: $N_1=0$, $A_2=0$, $N=38$, $\eta=0.877$, узлы *1*, *4*, *5*
$v=1/6$, $p_1=0.888073833977$, $q_1=0.459700843381$,
$A_1=1/105=0.00952380952387$, $A_3=9/280=0.0321428571429$,
$C_1=1/35=0.0285714285714$.

9.2: $N_1=1$, $A_3=C_1=0$, $N=42$, $\eta=0.794$, узлы *2*, *4*, *6*
$m_1={}^1/_3(1+9\sqrt{7})^{1/2}=0.836095596749$, $l_1=0.387907304067$,
$A_1=(11-\sqrt{7})/315=0.0265214244093$,
$A_2=8(5-\sqrt{7})/945=0.0199301476313$,
$B_1=(38\sqrt{7}+89)/7560=0.0250712367487$

9.3: $N_1=1$, $A_1=C_1=0$, $N=44$, $\eta=0.756$, узлы *1*, *3*, *6*
$m_1=\sqrt{(13/15)}=0.930949336251$, $l_1=0.816496580928$,

$A_2=32/1365=0.0234432234432$, $A_3=57/2240=0.0254464285715$,
$B_1=125/5824=0.0214629120879$

9.4: $N_1=0$, $A_1=0$, $N=44$, $\eta=0.756$, узлы *1, 5, 6*
$v=2/15$, $p_1=0.917368533105$, $q_1=0.398038910746$,
$A_3=9/280=0.0321428571429$, $C_1=5/196=0.0255102040816$,
$A_2=8/735=0.0108843537415$

$$n=11$$

11.1: $N_1=1$, $C_1=0$, $N=50$, $\eta=0.96$, узлы *1, 2, 4, 6*
$m_1=3/\sqrt{11}=0.904534033733$, $l_1=0.301511344578$,
$A_1=4/315=0.0126984126985$, $A_2=64/2835=0.0225749559083$,
$A_3=27/1280=0.02109375$, $B_1=11^4/725760=0.0201733355379$.

11.2: $N_1=1$, $A_2=A_3=0$, $N=54$, $\eta=0.889$, узлы *2, 4, 5*
$v={}^1/_3(1-\sqrt{(2/11)})$, $m_1=0.785875915868$, $l_1=0.437263676092$,
$p_1=0.861677490591$, $q_1=0.507456305714$,
$A_1=2(41-22\sqrt{(2/11)})/2835=0.0223062916970$,
$B_1=121/(5-4\sqrt{(2/11)})/22680=0.0175759129880$,
$C_1=11(4+13\sqrt{(2/11)})/5670=0.0185141807544$.

11.3: $N_1=1$, $A_1=A_3=0$, $N=60$, $\eta=0.8$ узлы *2, 5, 6*
$v=(40-13\sqrt{(2/11)})/411$, m_1, l_1, B_1 те же, что в 11.2,
$p_1=0.952697031544$, $q_1=0.303921644650$,
$A_2=16(1859\sqrt{(2/11)}-190)/526995=0.0182978666107$,
$C_1=11(15415-5933\sqrt{(2/11)})/9485910=0.0149418203733$.

В квадратурах 13.2, 13.3

$$\tau_2=\frac{260\tau_1^2-688\tau_1+317}{13(77\tau_1-149)},\qquad v=\frac{8(\tau_2-\tau_1+1)}{143\tau_2-117\tau_1+103},\tag{3}$$

$$A_1=\frac{-409\tau_1^2/2-913\tau_2^2/2+627\tau_1\tau_2+3735\tau_1/13-465\tau_2-2461/26}{6930(\tau_2-\tau_1+1)^2},\tag{4}$$

а τ_1 — корень уравнения

$$276991\tau_1^4-1546688\tau_1^3+3026808\tau_1^2-24201606\tau_1+666544=0.$$

В квадратурах 13.2, 13.3 и для $n=15$ величины t_1, t_2, $t_1>t_2>0$ суть корни уравнения

$$t^2-\tau_1 t+\tau_2=0,\tag{5}$$

$$B_1=\frac{-4(t_2-{}^7/_{13})}{31185\varphi(t_1)(t_1-t_2)},\qquad B_2=\frac{4(t_1-{}^7/_{13})}{31185\varphi(t_2)(t_1-t_2)},$$
$$C_1=\frac{1}{45045v^2(-v+{}^1/_4)}.\tag{6}$$

$n=13$

13.1: $N_1=1$, $N=74$, $\eta=0.928$, узлы *1, 2, 4, 5, 6*

Квадратура имеет отрицательный вес A_3, $m_1=\sqrt{(7/13)}$,
$p_1=\{[1+\sqrt{(41/65)}]/2\}^{1/2}$, $A_1=2^4/31185$, $A_2=43\cdot 2^7/331485$,
$A_3=-729/24640$, $B_1=13^5/13970880$, $C_1=65^2/255717$.

13.2: $N_1=2$, $A_2=A_3=0$, $N=78$, $\eta=0.838$, узлы *2, 4, 5, 7*
$\tau_1=0.964725630101$, $m_1=0.914152532416$, $l_1=0.286640146767$,
$m_2=0.359236381200$, $l_2=0.659905001656$, $p_1=0.841991943785$,
$q_1=0.539490098706$, $A_1=0.0138665921047$, $C_1=0.0119426635549$,
$B_1=0.0130509318626$, $B_2=0.0132064232231$.

13.3: $N_1=2$, $A_2=A_3=0$, $N=78$, $\eta=0.838$, узлы *2, 4, 5, 7*
$\tau_1=0.630427091519$, $m_1=0.783395117222$, $l_1=0.439483839471$,
$m_2=0.129302675268$, $l_2=0.701170741749$, $p_1=0.942679134666$,
$q_1=0.333700538005$, $A_1=0.00443392791927$, $C_1=0.0150095052979$,
$B_1=0.0155716127499$, $B_2=0.00997706663905$.

В квадратурах 15.1, 15.2

$$v=\frac{2(3\tau_1-4)}{13(5\tau_1-6)},\qquad \tau_2=\frac{7\tau_1-5}{13},\tag{7}$$

$$A_1=\frac{16(\tau_1^2-20\tau_1+22)}{3465(3\tau_1-4)^2},\qquad A_2=\frac{128(43\tau_1^2-80\tau_1+36)}{1155(7\tau_1-5)(41\tau_1-46)},\tag{8}$$

$$A_3=\frac{-243(27\tau_1^2-20\tau_1-4)}{24640(3\tau_1-4)^2}.$$

Веса квадратуры 15.1 хорошо выравнены, а η близка к единице.

$n=15$

15.1: $A_2=0$, $N=86$, $N_1=2$, $\eta=0.992$, узлы *1, 2, 4, 5, 7*
$m_1=0.852518311701$, $l_1=0.369602846454$, $m_2=0.189063552885$,
$l_2=0.694354006603$, $p_1=0.927330657151$, $q_1=0.374243039090$,
$A_1=0.0115440115441$, $A_3=0.0119439090859$, $C_1=0.0118123037469$,
$B_1=0.0111105557106$, $B_2=0.0118765012945$, $\tau_1=2(20-\sqrt{13})/43$.

15.2: $A_3=0$, $N=90$, $N_1=2$, $\eta=0.948$, узлы *2, 4, 5, 6, 7*
$\tau_1=2(5+2\sqrt{13})/27$, $m_1=0.878522265967$, $l_1=0.337785899794$,
$m_2=0.364314072036$, $l_2=0.658511676782$, $p_1=0.916866318264$,
$q_1=0.399194381765$, $A_1=0.0131915228737$, $A_2=0.0110240708453$,
$C_1=0.0106608186964$, $B_1=0.0105389711138$, $B_2=0.0116569607154$

В квадратурах 17.1, 17.2 $v=3/17$, т. е. $p_1=0.878158910604$, $q_1=$ $=0.478369028812$, а $C_1=4\cdot 17^3/2027025=0.00969499636166$, и

$$A_1=\frac{8(11509\tau_1-19685)}{405405(17\tau_1-31)},\qquad A_2=\frac{8(1472\tau_1/31-1787/17)}{75075(17\tau_1/31-14/17)},\tag{9}$$

$$A_3=\frac{-27(51\tau_1^2/31^2-104\tau_1/527+50/17^2)}{20020(\tau_1/31-1/51)^2};$$

$t_1>t_2>t_3>0$ — корни уравнения

$$t^3-\tau_1 t^2+\tau_2 t-\tau_3=0, \tag{10}$$

где $\tau_3=(17\tau_1/31-14/17)/3$, $\tau_2=(986\tau_1/31-53/17)/3$, а

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{4(13t_2t_3-7(t_2+t_3)+5)}{405405(t_1-t_2)(t_3-t_1)\varphi(t_1)}, \\ B_2 &= \frac{4(13t_1t_3-7(t_1+t_3)+5)}{405405(t_1-t_2)(t_2-t_3)\varphi(t_2)}, \\ B_3 &= \frac{4(13t_1t_2-7(t_1+t_2)+5)}{405405(t_2-t_3)(t_3-t_1)\varphi(t_3)}. \end{aligned} \tag{11}$$

Отметим, что узлы квадратуры 17.1 образуют на S решетку правильной структуры (см. фигуру).

$n=17$

17.1: $A_2=0$, $N=110$, $N_1=3$, $\eta=0.982$, узлы *1, 2, 3, 4, 5, 7*
$\tau_1=651/391$, $m_1=0.965124035087$, $l_1=0.185115635345$,
$m_2=0.840255982384$, $l_2=0.383386152638$, $m_3=0.238807866929$,
$l_3=0.690421048382$, $A_1=0.00382827049494$,
$A_3=0.00988550016044$, $B_1=0.00844068048232$,
$B_2=0.00959547133607$, $B_3=0.00994281489118$.

17.2: $A_1=0$, $N=116$, $N_1=3$, $\eta=0.931$, узлы *1, 2, 3, 5, 6, 7*
$\tau_1=19685/11509$, $m_1=0.973314565209$, $l_1=0.162263300152$,
$m_2=0.840255982384$, $l_2=0.383386152638$, $m_3=0.238807866929$,
$l_3=0.686647945709$, $A_2=0.00200918797730$,
$A_3=0.00988550016044$, $B_1=0.00844068048232$,
$B_2=0.00987390742389$, $B_3=0.00935732169000$.

Заметим, что если $f(s)$ инвариантна относительно одной из групп преобразований S в себя — циклической по mod 2^k; тетраэдра, октаэдра или G_8^*, то число узлов у приведенных квадратур существенно уменьшится; например, для группы G_8^* квадратура 17.1 будет содержать лишь шесть узлов.

Метод получения для сферы квадратур типа Гаусса — Маркова любого порядка точности будет опубликован отдельно. Он основан на использовании теоремы 1 из [2], согласно которой от квадратуры достаточно потребовать, чтобы она была точна лишь для инвариантных относительно группы G_8^* многочленов степени, не превышающей n, и следующей леммы.

Лемма. *Любой многочлен, инвариантный относительно группы G_8^*, представим на S в виде многочлена от $\sigma_2=x^2y^2+x^2z^2+y^2z^2$ и $\sigma_3=x^2y^2z^2$.*

Этот метод справедлив и для более общего случая: когда $J(f)$ в (1) имеет вид

$$J(f)=\frac{1}{4\pi}\int\limits_S f(s)\,p(s)\,ds, \tag{12}$$

где $p(s)\geqslant 0$ — интегрируемая весовая функция, инвариантная относительно группы G_8^*. В предположении (12) разберем его для квадратур типа (1).

Образующие базис многочлены в пространстве инвариантных относительно группы G_8^* многочленов до 17-й степени удобно выписать в виде $a_1=9\sigma_3-4\sigma_2+1$, $a_2=\sigma_2-9\sigma_3$, $a_3=\sigma_3$, $a_4={}^4/_3(\sigma_3+{}^1/_3\sigma_2(1-4\sigma_2))$, $a_5={}^{16}/_3\sigma_3({}^1/_3-\sigma_2)$, $a_6={}^{16}/_9\sigma_3(9\sigma_3-3\sigma_2+{}^2/_3)$, $a_7=\sigma_2^2(1-4\sigma_2)-\sigma_3(4+27\sigma_3-18\sigma_2)$, $a_8={}^4/_3({}^1/_3-\sigma_2)a_5$, $a_9={}^4/_3({}^1/_3-\sigma_2)a_6$, $a_{10}=\sigma_2a_7$.

Пусть $\alpha_i=J(a_i)$. Подставляя функции a_i в (1), получаем уравнения для определения весов и узлов квадратуры:

$$
\begin{gathered}
6A_1+54\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(t_k-{}^1/_3)^2+24C_1(1-4v)=\alpha_1,\\
3A_2+54\sum_{k=1}^{N_1}B_k(1-t_k)(t_k-{}^1/_3)^2+24C_1v=\alpha_2,\\
{}^8/_{27}A_3+6\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)^2=\alpha_3,\\
24\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)(t_k-{}^1/_3)^2+{}^{34}/_3C_1v(1-4v)=\alpha_4,\\
24\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)^2(t_k-{}^1/_3)^2=\alpha_5,\quad 24\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)^2(t_k-{}^1/_3)^3=\alpha_6,\\
24C_1v^2(1-4v)=\alpha_7,\qquad 24\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)^2(t_k-{}^1/_3)^4=\alpha_8,\\
24\sum_{k=1}^{N_1}B_kt_k(1-t_k)^2(t_k-{}^1/_3)^5=\alpha_9,\qquad 24C_1v^3(1-4v)=\alpha_{10}.
\end{gathered}
\tag{13}
$$

Для каждого $9\leqslant n\leqslant 17$ задача по определению весов и узлов сводится к решению соответствующей алгебраической системы уравнений, составленной из уравнений (13). Из структуры уравнений (13) видно, что задача по решению алгебраической системы уравнений сводится после некоторых замен переменных, понижающих общий алгебраический порядок системы, к задаче по решению моментных систем уравнений, а последняя, как известно, сводится к решению системы линейных уравнений относительно основных симметрических многочленов от t_k и нахождению затем всех корней алгебраического уравнения порядка N_1.

Рассмотрим методы решения систем алгебраических уравнений для некоторых из приведенных квадратур; в остальных случаях способы решения будут аналогичными.

Квадратура типа 9.1: определяем C_1 и v из 2, 4-го уравнений (13), затем A_1, A_3 — из 1,3-го уравнений.

Квадратура типа 11.1: определяем B_1 и t_1 из 4, 5-го уравнений, A_1, A_2, A_3 — из 1,2,3-го уравнений.

Квадратура типа 13.1: определяем B_1 и t_1 из 5, 6-го уравнений, C_1, v — из 4,7-го уравнений, A_1, A_2, A_3 — из 1,2,3-го уравнений.

Квадратура типа 15.1: исключая B_1 и B_2 из 8-го уравнения (13) с помощью 5, 6-го уравнений (13), получаем линейное уравнение относительно симметрических функций $\tau_1=t_1+t_2$, $\tau_2=t_1t_2$. Аналогично, исключая B_1, B_2 из 2 и 4-го уравнений и учитывая 7-е уравнение, получаем уравнение второй степени относительно τ_1, τ_2 и формулы для C_1 и v через τ_1, τ_2. Таким образом, найдя τ_1 или τ_2 из решения квадратного уравнения, определяем C_1, v, а затем t_1, t_2 — из (5); B_1, B_2 определяются из 5, 6-го уравнений, а A_1, A_3 — из 1 и 3-го уравнений.

Квадратура типа 17.1: из 7, 10-го уравнений (13) определяем C_1 и v, из 6, 8, 9-го уравнений получаем, исключая из них B_1, B_2, B_3 с помощью 2, 4, 5-го уравнений, линейную систему 3-го порядка для определения $\tau_1=t_1+t_2+t_3$, $\tau_2=t_1t_2+t_1t_3+t_2t_3$, $\tau_3=t_1t_2t_3$. Решая уравнение (10), находим t_1, t_2, t_3, из 2, 4, 5-го уравнений (13) находим B_1, B_2, B_3 из 1, 3-го уравнений определяем A_1, A_3.

Поскольку для $p(s)\equiv 1$ имеем $\alpha_1=2/7$, $\alpha_2=4/35$, $\alpha_3=1/105$, $\alpha_4=16/945$, $\alpha_5=2^5/10395$, $\alpha_6=2^8/405405$, $\alpha_7=2^5/15015$, $\alpha_8=2^9/1216215$, $\alpha_9=2^{13}/62026965$, $\alpha_{10}=2^5/85085$, то, следуя изложенным методам решения систем уравнений, получаем для определения величин A_i, B_i, C_1, τ_i, v формулы (6)—(11). Поскольку существует многочлен 18-го порядка $\sigma_3 a_7$ такой, что $J(\sigma_3 a_7)>0$, а правая часть (1) при $f=\sigma_3 a_7$ тождественно равна нулю, то не существует квадратур типа (1), точных для многочленов выше 17-й степени (автором получена квадратура с точками общего положения для $n=29$ с $N=302$). Аналогичный метод позволяет получить квадратуры типа (1), точные для 29-го порядка и инвариантные относительно группы икосаэдра с инверсией; по сравнению с полученными такие квадратуры содержат большее число узлов. Изложенным методом можно получать и квадратуры типа Гаусса — Маркова для m-мерных сфер и областей, инвариантных относительно группы октаэдра.

Примечание при корректуре. Автору стала известна монография *A. N. Stroud.* Approximate calculation of multiple integrals. New Jersey, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971. В ней есть квадратуры для сферы.

Поступила в редакцию 22.03.1973
Переработанный вариант 10.10.1973

Цитированная литература

1. *В. А. Диткин, Л. А. Люстерник.* Об одном приеме практического гармонического анализа на сфере. В сб. «Вычисл. матем. и вычисл. техн.» № 1. М., Изд-во АН СССР, 1953, 3–13.
2. *С. Л. Соболев.* О формулах механических кубатур на поверхности сферы. Сибирский матем. ж., 1962, 3, № 5, 769–796.
3. *И. П. Мысовских.* О кубатурных формулах для вычисления интегралов по поверхности сферы. Сибирский матем. ж., 1964, 5, № 3, 721–723.
4. *McLaren.* Optimal numerical integration on a sphere. Math. Comput., 1963, 17, № 83, 361–383.
5. *Г. Н. Салихов.* Об одном способе повышения эффективности кубатурных формул С. Л. Соболева на сфере. В сб. «Вопр. вычисл. и прикл. матем.» Вып. 8. Ташкент, ИК АН УзССР, 1971, 3–9.