ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 151 за 2019 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Астафуров Г.О., Маничкин Д.А.

Построение кубатурных формул на сфере, согласованных с правильной гексагональной решеткой

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Астафуров Г.О., Маничкин Д.А. Построение кубатурных формул на сфере, согласованных с правильной гексагональной решеткой // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 151. 16 с. http://doi.org/10.20948/prepr-2019-151
URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-151

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

Г.О. Астафуров, Д.А. Маничкин

Построение кубатурных формул на сфере, согласованных с правильной гексагональной решеткой

Москва — 2019

Астафуров Г.О., Маничкин Д.А.

Построение кубатурных формул на сфере, согласованных с правильной гексагональной решеткой

В задачах переноса излучения и нейтронов требуется вычислять угловые моменты функции распределения частиц. Построены оптимизированные кубатурные формулы для вычисления интегралов по сфере угловых направлений в центрах граней и в центре правильной гексагональной призмы. Построенные формулы могут быть использованы в разработке программ численного решения уравнения переноса частиц Sn-методом Карлсона и методом длинных характеристик. Найдено оптимальное соотношение характерных линейных размеров призматической ячейки для достижения минимальной ошибки кубатурных формул.

Ключевые слова: сферические кубатурные формулы, гексагональная сетка

Astafurov Gleb Olegovich, Manichkin Denis Anatolevich

Construction of cubature formulas on a sphere consistent with a regular hexagonal lattice

In the problems of radiation and neutron transport it is required to calculate the angular moments of the particle distribution function. Optimized cubature formulas for calculating integrals over the sphere of angular directions in the centers of faces and in the center of a regular hexagonal prism are constructed. The constructed formulas can be used in the development of programs for the numerical solution of the particle transport equation by the Carlson method and the long characteristics method. The optimal ratio of the characteristic linear dimensions of the prismatic cell to achieve the minimum error of cubature formulas is found.

Key words: spherical cubature formulas, hexagonal lattice

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-01-00857-а.

Оглавление

Введение

В ряде прикладных задач возникает необходимость вычисления интегралов от функций многих переменных по единичной сфере. Например, в задачах переноса излучений и нейтронов к вычислению подобных интегралов сводятся расчеты угловых моментов функции распределения частиц и расчеты источника, входящего в кинетическое уравнение переноса частиц.

Если геометрия расчетной области обладает некоторой симметрией, то она естественным образом используется при построении пространственно-угловой сетки для численного решения транспортной задачи. Так, при моделировании активной зоны ядерного реактора часто используется регулярная сетка, состоящая из одинаковых ячеек, имеющих аналогично ТВЭЛам форму правильных гексагональных призм [1-3]. Согласованность пространственных и угловых сеток является неотъемлемой составляющей метода длинных характеристик.

Дискретным аналогом интегрирования по сфере являются кубатурные формулы. Свойства пространственно-угловой симметрии и некоторые известные заранее свойства интегрируемой функции (например, ее непрерывность) позволяют строить оптимизированные кубатурные формулы, обладающие при малом числе узлов сетки повышенной точностью [4].

В работе построены оптимизированные кубатурные формулы для вычисления угловых интегралов на правильной гексагональной сетке. Формулы могут использоваться в разработке программ численного решения уравнения переноса частиц (нейтронов и фотонов) методом длинных характеристик. В отличие от работ [5,6], направления длинных характеристик задаются геометрией пространственной сетки, и в этом случае задача построения кубатурной формулы сводится к поиску весов.

Рассмотрим правильную гексагональную сетку. Через центры ячеек и центры боковых граней проходят два набора характеристик.

- **Первый набор характеристик, ассоциированный с центрами ячеек.** Это направления из центра призматической ячейки в центры ее боковых граней (Рис. 1). Рассматриваются также аналогичные направления в сдвинутые на один слой вверх и вниз пункты назначения, а также вертикальное направление (Рис. 2).
- **Второй набор характеристик, ассоциированный с центрами боковых граней.** Это направления из центра вертикальной грани в центры вертикальных граней ячеек смежных по данной грани (Рис. 3). Рассматриваются также аналогичные направления в сдвинутые на один слой вверх и вниз пункты назначения (Рис. 4).

Целью работы является построение двух кубатурных формул, соответствующих этим наборам.

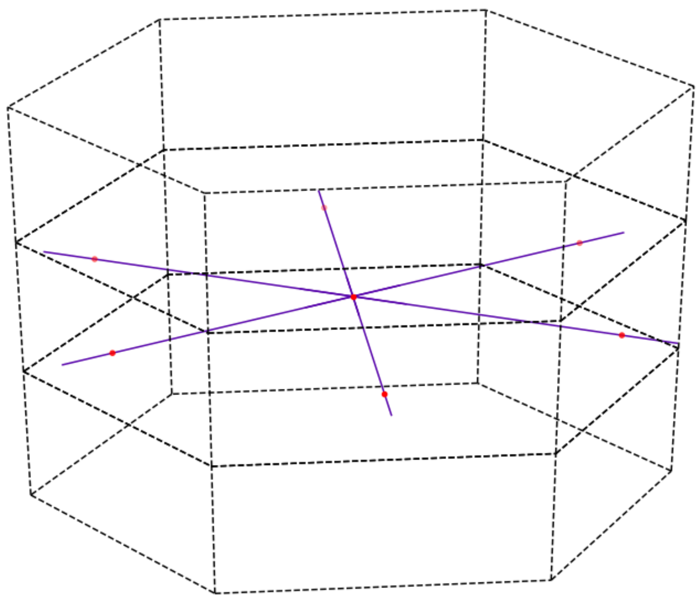

Рис. 1. Первый набор характеристик (горизонтальные направления)

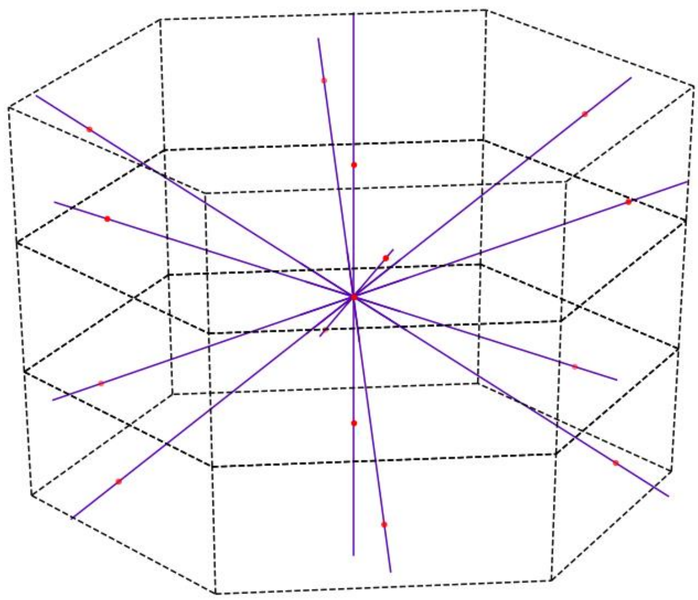

Рис. 2. Первый набор характеристик (остальные направления)

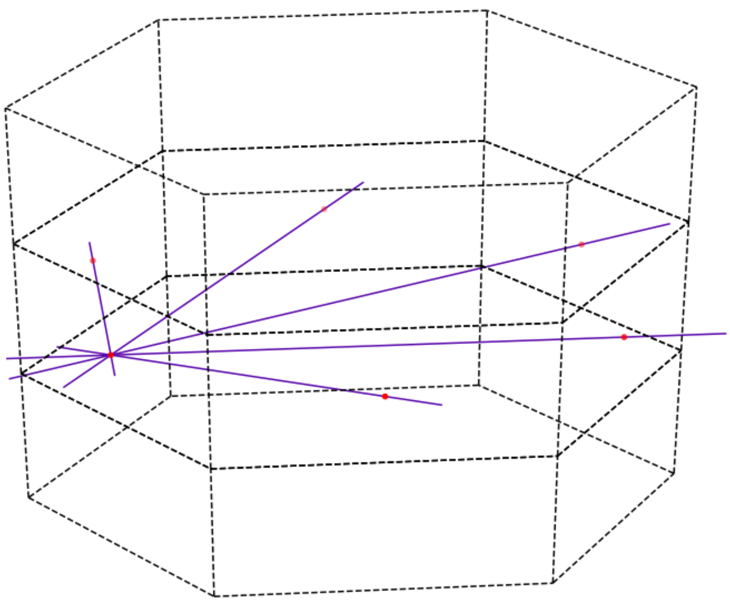

Рис. 3. Второй набор характеристик (горизонтальные направления)

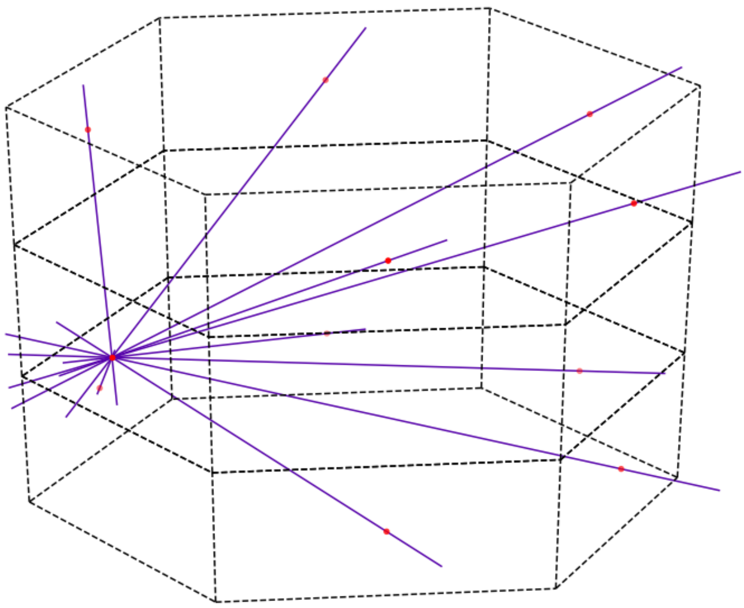

Рис. 4. Второй набор характеристик (остальные направления)

Кубатурная формула в центрах пространственных ячеек

Задание узлов. Рассмотрим угловые направления из центра элементарной ячейки. Эти прямые пересекут единичную сферу, центр которой совпадает с центром ячейки, в следующих точках (называемых в дальнейшем узлами)

$$
\begin{aligned}
&Orb_1 : \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \\
&Orb_2 : \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \pm 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \mp 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
&Orb_3 : \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ t \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \pm 1/2 \\ t \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \mp 1/2 \\ t \end{pmatrix}, \\
&\frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ -t \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \pm 1/2 \\ -t \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \mp 1/2 \\ -t \end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Через t обозначено отношение высоты призмы h к длине ребра a шестиугольника в основании. Величина $t = h/a$ является параметром пространственной сетки. Полученные узлы на сфере расположены симметрично. Соответствующая группа симметрий G порождается отражениями относительно координатных плоскостей $x = 0,\ \ y = 0,\ \ z = 0$, а также поворотом на угол $\pi/3$ в плоскости Oxy. Узлы в (1) сгруппированы по орбитам действия G.

Кубатурные формулы. Пусть для заданных узлов $w_1, w_2, ..., w_n$ на сфере ставится задача построения кубатурной формулы, приближающей интеграл произвольной функции f:

$$\frac{1}{4\pi} \int\limits_{4\pi} f dw \simeq \sum_1^n \omega_i f\left(w_i\right).$$

На весовые коэффициенты $\omega_1, \omega_2, ..., \omega_n$ дополнительно налагается требование неотрицательности: $\omega_j \geq 0$. Одним из способов нахождения весов кубатурной формулы является требование её точности на любых многочленах до некоторой степени m. То есть для всех многочленов $f \in \mathbb{R}[x, y, z]$, таких что $\deg(f) \leq m$, должно выполняться точное равенство $\frac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} f dw = \sum_1^n \omega_i f\left(w_i\right)$. Выберем базис $p_1, p_2, ..., p_d$ в пространстве таких многочленов. В силу линейности кубатурной формулы и интеграла достаточно проверять условия точности на базисе: $\frac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} p_j dw = \sum_1^n \omega_i p_j\left(w_i\right),\quad 1 \le j \le d$. Задача сводится к решению системы линейных уравнений.

Кубатурная формула называется симметричной относительно группы преобразований G, если конфигурация узлов инвариантна под действием G и веса, соответствующие узлам из одной G-орбиты, совпадают. Для симметричных кубатурных формул имеет место теорема [7], облегчающая проверку точности на многочленах:

Теорема 1. Если симметричная кубатурная формула точна на инвариантных многочленах до степени m, то она точна на всех многочленах до степени m.

Вычисление весов. Используя теорему 1, для нашей конфигурации узлов (1) мы сводим задачу к поиску весовых коэффициентов $\omega_1, \omega_2, \omega_3$, количество которых совпадает с количеством орбит. Размерность пространства ограничений G-инвариантных многочленов степени не выше 5 на сферу $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ равна 3. Поэтому для базиса q_1, q_2, q_3 в этом пространстве необходимо решить систему линейных уравнений.

$$\begin{cases} \omega_1 \sum\limits_{w \in Orb_1} q_1(w) + \omega_2 \sum\limits_{w \in Orb_2} q_1(w) + \omega_3 \sum\limits_{w \in Orb_3} q_1(w) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} q_1 dw; \\ \omega_1 \sum\limits_{w \in Orb_1} q_2(w) + \omega_2 \sum\limits_{w \in Orb_2} q_2(w) + \omega_3 \sum\limits_{w \in Orb_3} q_2(w) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} q_2 dw; \\ \omega_1 \sum\limits_{w \in Orb_1} q_3(w) + \omega_2 \sum\limits_{w \in Orb_2} q_3(w) + \omega_3 \sum\limits_{w \in Orb_3} q_3(w) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} q_3 dw. \end{cases} \tag{2}$$

Предъявим базисные функции q_1, q_2, q_3. Для этого заметим, что G-инвариантными не могут быть мономы, в которые некоторые переменные x, y, z входят в нечетной степени. Можно сразу выбрать $q_1 = 1$. Для определения q_2 и q_3 воспользуемся тем, что группа G содержит поворот вокруг оси Oz на угол $\pi/3$. Матрица поворота в координатах x, y имеет вид

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Представим q_2 в виде $q_2 = ax^2 + bxy + cy^2$. С помощью (3) найдем представление q_2 в переменных x' и y'. Из инвариантности имеем: $q_2 = ax'^2 + bx'y' + cy'^2$. Откуда $q_2 = x^2 + y^2 = 1 - z^2$ или в силу выбора q_1 можно считать $q_2 = z^2$. Аналогично получаем $q_3 = z^4$. Запишем систему уравнений (2) в выбранном базисе

$$\begin{cases} 2\omega_1 + 6\omega_2 + 12\omega_3 = 1; \\ 2\omega_1 + 0 + \dfrac{12t^2}{1+t^2}\omega_3 = 1/3; \\ 2\omega_1 + 0 + \dfrac{12t^4}{\left(1+t^2\right)^2}\omega_3 = 1/5. \end{cases} \tag{4}$$

Получим решение

$$\begin{cases} \omega_1 = \dfrac{1}{30}\left(3 - 2t^2\right); \\ \omega_2 = \dfrac{1}{45t^2}\left(4t^2 - 1\right); \\ \omega_3 = \dfrac{1}{90t^2}\left(1+t^2\right)^2. \end{cases} \tag{5}$$

Условия неотрицательности весов накладывают следующее ограничение на параметр t:

$$\frac{1}{2} \le t \le \sqrt{\frac{3}{2}}. \tag{6}$$

Таким образом, для первого набора характеристик получена кубатурная формула с алгебраическим порядком точности 5.

Кубатурная формула в центрах вертикальных граней

Задание узлов. Пусть, как и раньше, отношение высоты призмы к длине ребра в основании равно t. Проведём сферу единичного радиуса, центр которой совпадает с центром вертикальной грани. Будем считать, что плоскость вертикальной грани задается уравнением $y=0$. Кубатурные формулы для двух других вариантов $x+y=0,\quad x-y=0$ получаются поворотами. Из центра сферы проведем прямые, соответствующие длинным характеристикам из второго набора. Эти прямые пересекут единичную сферу в следующих узлах, которые мы, как и раньше, подразделяем на орбиты действия группы симметрий.

$$
\begin{aligned}
&Orb_1:\begin{pmatrix}\pm1/2\\ \pm\sqrt{3}/2\\ 0\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}\pm1/2\\ \mp\sqrt{3}/2\\ 0\end{pmatrix},\ Orb_2:\begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \pm1/2\\ 0\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \mp1/2\\ 0\end{pmatrix},\ Orb_3:\begin{pmatrix}\pm1\\ 0\\ 0\end{pmatrix},\\
&Orb_4:\frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1/2\\ \pm\sqrt{3}/2\\ t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1/2\\ \mp\sqrt{3}/2\\ t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1/2\\ \pm\sqrt{3}/2\\ -t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1/2\\ \mp\sqrt{3}/2\\ -t\end{pmatrix},\\
&Orb_5:\frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \pm1/2\\ t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \mp1/2\\ t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \pm1/2\\ -t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{3}/2\\ \mp1/2\\ -t\end{pmatrix},\\
&Orb_6:\frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1\\ 0\\ \pm t\end{pmatrix},\ \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}\begin{pmatrix}\pm1\\ 0\\ \mp t\end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{7}
$$

Группа симметрий G второго набора характеристик является группой замены знаков и порождается тремя отражениями относительно координатных плоскостей $x=0,\quad y=0,\quad z=0$.

Вычисление весов. Заметим, что размерность пространства G-инвариантных многочленов на сфере степени не выше 5 имеет размерность 6. Предъявим базис в этом пространстве.

$$q_1=1,\ \ q_2=x^2,\ \ q_3=y^2,\ \ q_4=x^4,\ \ q_5=y^4,\ \ q_6=x^2y^2. \tag{8}$$

Количество G-орбит системы узлов, как видно из (7), также равно 6. Поэтому в соответствии с теоремой 1 составим систему линейных уравнений

$$\begin{cases} \omega_1 \sum\limits_{w\in Orb_1} q_1(w) + \omega_2 \sum\limits_{w\in Orb_2} q_1(w) + \ldots + \omega_6 \sum\limits_{w\in Orb_6} q_1(w) = \dfrac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} q_1 dw; \\ \vdots \\ \omega_1 \sum\limits_{w\in Orb_1} q_6(w) + \omega_2 \sum\limits_{w\in Orb_2} q_6(w) + \ldots + \omega_6 \sum\limits_{w\in Orb_6} q_6(w) = \dfrac{1}{4\pi}\int\limits_{4\pi} q_6 dw. \end{cases} \tag{9}$$

Из явного вида матрицы системы (9) видно, что ее ранг равен 5 и он не совпадает с рангом матрицы расширенной системы ни при каких значениях t.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1/4 & 3/4 & 1 & \dfrac{1/4}{1+t^2} & \dfrac{3/4}{1+t^2} & \dfrac{1}{1+t^2} \\ 3/4 & 1/4 & 0 & \dfrac{3/4}{1+t^2} & \dfrac{1/4}{1+t^2} & 0 \\ 3/16 & 3/16 & 0 & \dfrac{3/16}{\left(1+t^2\right)^2} & \dfrac{3/16}{\left(1+t^2\right)^2} & 0 \\ 1/16 & 9/16 & 1 & \dfrac{1/16}{\left(1+t^2\right)^2} & \dfrac{9/16}{\left(1+t^2\right)^2} & \dfrac{1}{\left(1+t^2\right)^2} \\ 9/16 & 1/16 & 0 & \dfrac{9/16}{\left(1+t^2\right)^2} & \dfrac{1/16}{\left(1+t^2\right)^2} & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Все дело в том, что узлы (7) кубатурной формулы расположены на алгебраической гиперповерхности степени 4, что является препятствием [8] к построению кубатурной формулы с алгебраической степенью точности 5. Действительно, заметим, что все узлы (7) удовлетворяют уравнению четвертой степени $z^4 - t^2 z^2 \big/ \left(1+t^2\right) = 0$. Если предположить, что существует кубатурная формула порядка точности 5, то многочлен $z^4 - t^2 z^2 \big/ \left(1+t^2\right) = 0$ должен интегрироваться по ней точно. Получаем в качестве следствия условие на параметр t:

$$\int_{4\pi}\left(z^4-\frac{t^2z^2}{1+t^2}\right)dw=0 \;\Leftrightarrow\; t=\sqrt{\frac{3}{2}}\,. \tag{11}$$

Выполнение (11) не повышает возможный порядок точности кубатурной формулы на узлах (7), однако расширяет ядро функционала ошибки. Как будет видно в дальнейшем, условие (11) соответствует оптимальному выбору параметра для минимизации нормы функционала ошибки кубатурной формулы.

Построение оптимальной кубатурной формулы. Обозначим через W векторное пространство многочленов с базисом 1, x^2, y^2, а через V – пространство с базисом 1, x^2, y^2, x^2y^2, y^4, x^4. Пространство V разлагается в прямую сумму ортогональных подпространств $V=W\oplus W^{\perp}$ относительно стандартного скалярного произведения $\left(a,b\right)=\frac{1}{4\pi}\int a(w)b(w)dw$. Будем искать базис в ортогональном дополнении $W^{\perp}$ методом неопределенных коэффициентов в виде

$$\begin{aligned} f &= x^4 + ax^2 + by^2 + c;\\ g &= x^2y^2 + \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma;\\ h &= y^4 + px^2 + qy^2 + r. \end{aligned} \tag{12}$$

Получаем

$$\begin{aligned} f &= x^4 - \tfrac{6}{7}x^2 + \tfrac{3}{35};\\ g &= x^2y^2 - \tfrac{1}{7}x^2 - \tfrac{1}{7}y^2 + \tfrac{1}{35};\\ h &= y^4 - \tfrac{6}{7}y^2 + \tfrac{3}{35}. \end{aligned} \tag{13}$$

Матрица Грама скалярного произведения на $W^{\perp}$ в базисе f,g,h имеет вид

$$\Gamma=\frac{4}{11025}\begin{pmatrix}16 & -8 & -6\\ -8 & 9 & -8\\ -6 & -8 & 16\end{pmatrix}.$$

Зафиксируем параметр t. Рассмотрим линейный функционал ошибок $\mathrm{Er}\in \mathrm{Ann}W\subset V^{*}$ кубатурной формулы, удовлетворяющей условию точности на многочленах $F\in W$:

$$\mathrm{Er}F=\sum_i \omega_i \sum_{w\in Orb_i} F(w)-\tfrac{1}{4\pi}\int_{4\pi} F(w)\,dw\,.$$

Для всякого многочлена $F\in V$ имеет место ортогональное разложение $F=\mathrm{Pr}_W\,F+\mathrm{Pr}_{W^\perp}\,F$. В силу точности на подпространстве W имеем $\mathrm{Er}\,\mathrm{Pr}_W\,F=0$. Поскольку $1\perp W^\perp$, то имеем $\int \mathrm{Pr}_{W^\perp}\,F(w)\,dw=0$. Следовательно,

$$\mathrm{Er}F=\mathrm{Er}\,\mathrm{Pr}_{W^\perp}\,F=\sum_i \omega_i \sum_{w\in Orb_i} \mathrm{Pr}_{W^\perp}\,F(w).$$

Сохраним обозначение Er для ограничения функционала ошибок на подпространство $W^\perp$. Для каждой орбиты Orb_i рассмотрим линейный функционал $\varepsilon_i\in\left(W^\perp\right)^*$:

$$\varepsilon_i F=\sum_{w\in Orb_i} F(w).$$

Заметим, что $\mathrm{Er}=\sum_i \omega_i\varepsilon_i$. Получим выражения функционалов $\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_6$ через скалярное произведение: $\varepsilon_i F=(F,\theta_i)$ для некоторых $\theta_i\in W^\perp$ и всех $F\in W^\perp$. В базисе f,g,h имеем $\theta_i=\xi_i f+\eta_i g+\varsigma_i h$, откуда находим

$$\begin{pmatrix}\xi_i\\ \eta_i\\ \varsigma_i\end{pmatrix}=\Gamma^{-1}\begin{pmatrix}\varepsilon_i f\\ \varepsilon_i g\\ \varepsilon_i h\end{pmatrix}.$$

Для функционала ошибок Er получим выражение $\mathrm{Er}F=\left(F,\sum\omega_i\theta_i\right)$, которое остается верным не только на $W^\perp$, но и на всем V. Выпишем квадрат нормы функционала ошибки на V:

$$\|\mathrm{Er}\|^2=\left(\sum\omega_i\theta_i,\sum\omega_j\theta_j\right)=\sum\omega_i\omega_j\left(\theta_i,\theta_j\right).$$

Правая часть выражения задает положительно определенную квадратичную форму на пространстве весов. Рассмотрим выпуклый полиэдр Π в шестимерном аффинном пространстве весов, заданный системой линейных уравнений и неравенств

$$\begin{cases}\omega_1+\omega_2+\omega_3+\omega_4+\omega_5+\omega_6=1,\\ \frac{1}{4}\omega_1+\frac{3}{4}\omega_2+\omega_3+\frac{1/4}{1+t^2}\omega_4+\frac{3/4}{1+t^2}\omega_5+\frac{1}{1+t^2}\omega_6=\frac{1}{3},\\ \frac{3}{4}\omega_1+\frac{1}{4}\omega_2+0+\frac{3/4}{1+t^2}\omega_4+\frac{1/4}{1+t^2}\omega_5+0=\frac{1}{3},\\ \omega_1\ge 0,\ldots,\omega_6\ge 0.\end{cases}\qquad(14)$$

Принадлежность Π обеспечивает неотрицательность весов и точность на многочленах до 3 степени включительно. Из (14) можно получить оценку на параметр t: $t \geq 1/\sqrt{2}$.

Рассмотрим задачу минимизации положительно определенной квадратичной формы $\sum \omega_i \omega_j \left(\theta_i, \theta_j\right)$ на выпуклом полиэдре Π. Решение такой задачи квадратичного программирования существует и единственно. Оно соответствует оптимальному выбору кубатурной формулы с неотрицательными весами, точной для многочленов степени не выше трех и имеющей минимальную ошибку в смысле L_2 нормы на пространстве многочленов степени не выше пяти.

Для решения задачи квадратичного программирования используются программные библиотеки quadpy и quadprog для Python. Приведены графики (Рис. 5) оптимальных значений весов $\omega_1(t),\ldots,\omega_6(t)$ в зависимости от параметра t. Шаг по t равен 0.001 в промежутке от $1/\sqrt{2}$ до 5. Из графика (Рис. 6) зависимости от t квадрата нормы функционала ошибки при оптимальном выборе весов видно, что минимум достигается при $t = 1.2247 \approx \sqrt{3/2}$ и равен примерно 10^{-4}. Этот результат хорошо согласуется с (11). Таким образом, нами получено оптимальное соотношение линейных размеров призматической ячейки $t = \sqrt{3/2}$ для достижения минимальной ошибки кубатурной формулы. Из графика (Рис. 6) также видно, что параметры сеток t, пригодных для использования в реальных расчетах, находятся в интервале $[0.8; 3.5]$. Вне этого интервала происходит сильный рост ошибки кубатурной формулы.

Заключение

Построены оптимальные кубатурные формулы для вычисления интегралов по сфере угловых направлений в центрах граней и в центрах ячеек правильной гексагональной сетки.

Найдено оптимальное соотношение характерных линейных размеров призматической ячейки для достижения минимальной ошибки кубатурных формул в пространстве многочленов степени не выше пяти.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-01-00857-а.

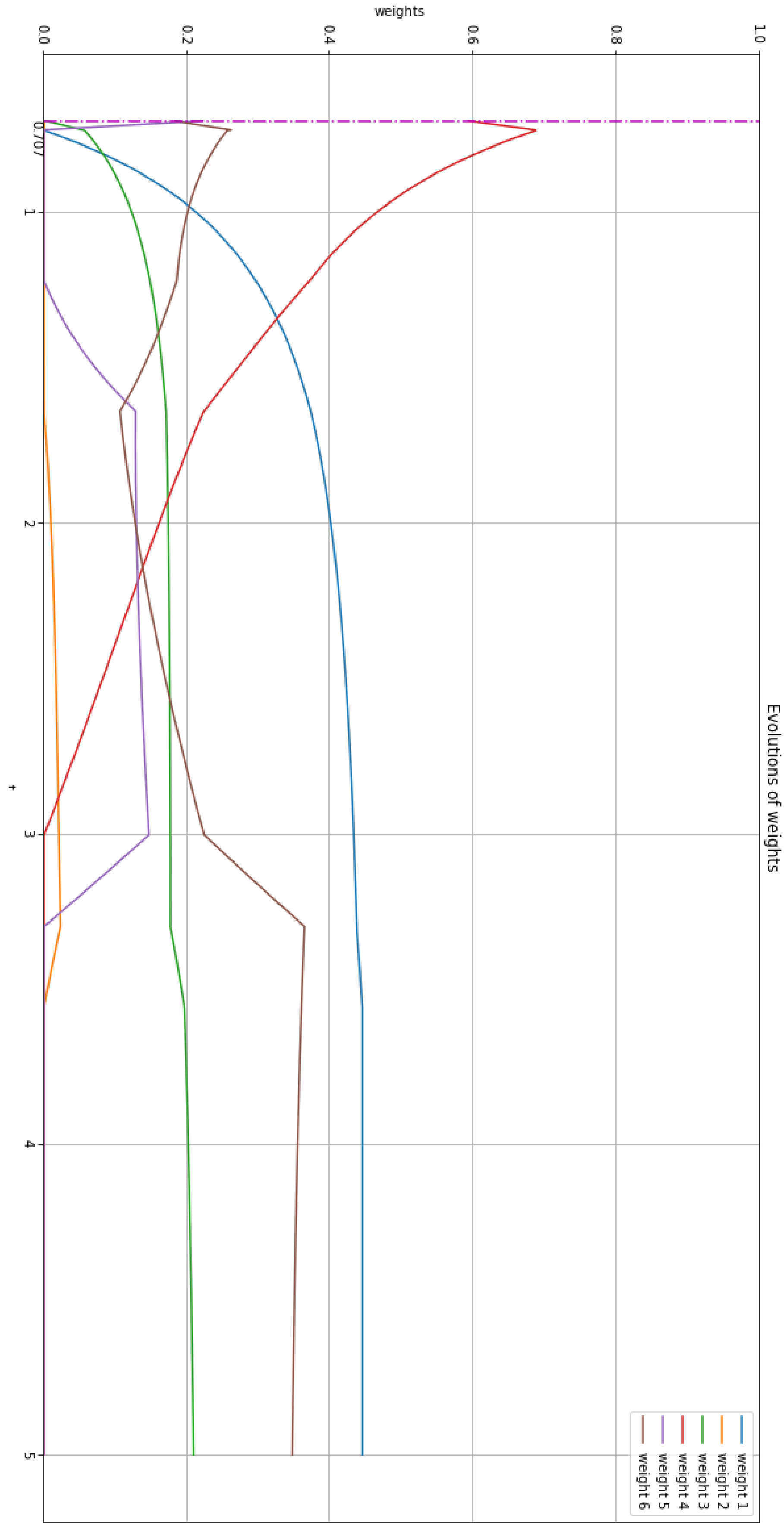

Рис. 5. Оптимальные веса $\omega_1(t),\ldots,\omega_6(t)$ в зависимости от t

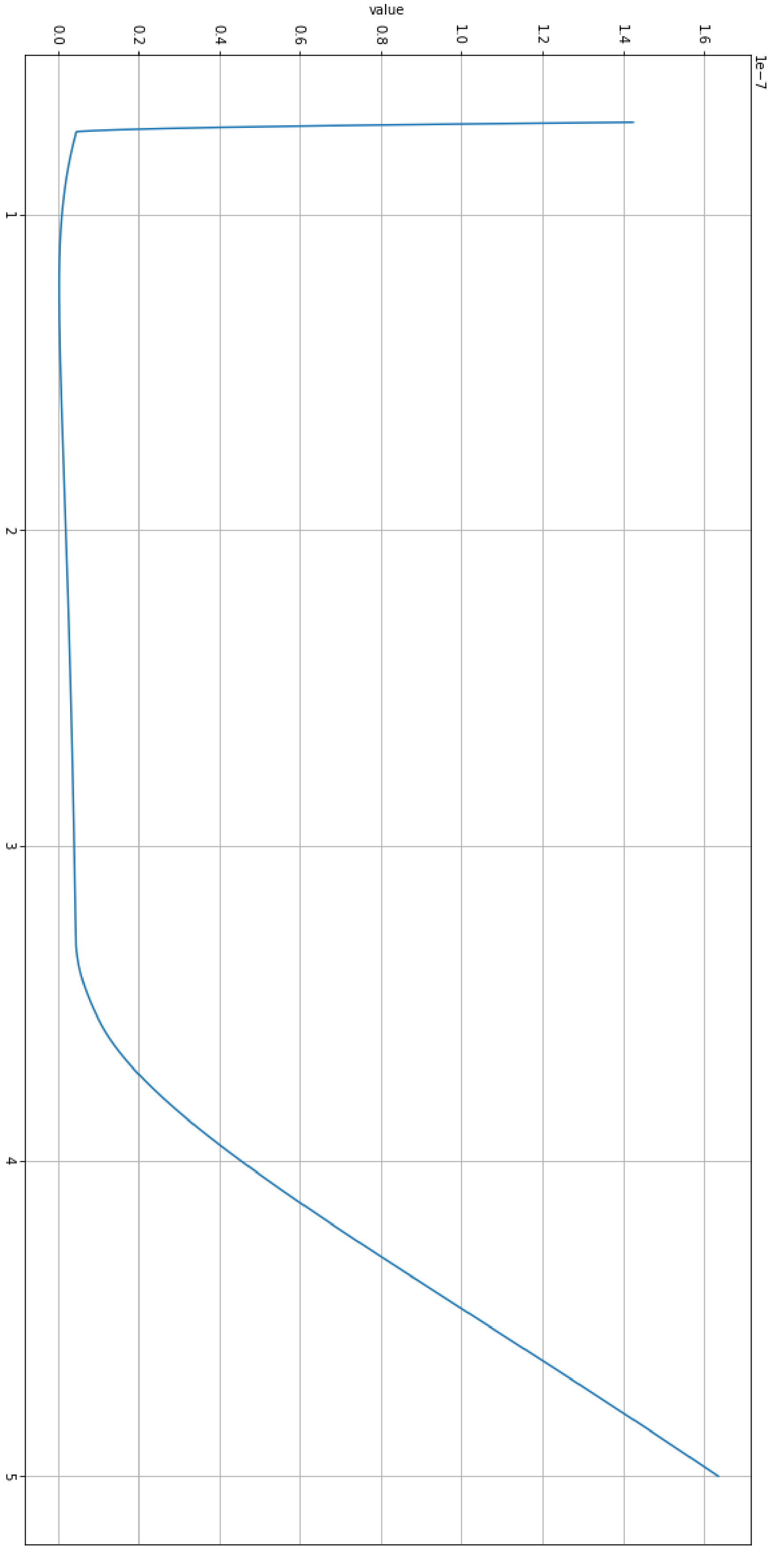

Рис. 6. Величина $\|\mathrm{Er}\|^2$ при оптимальном выборе весов в зависимости от t

Список литературы

[1] *Е. Н. Аристова, Д. Ф. Байдин*, Экономичный метод решения уравнения переноса в 2D цилиндрической и 3D гексагональной геометриях для метода квазидиффузии // Компьютерные исследования и моделирование, 3:3 (2011), 279–286
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=crm&paperid=667&option_lang=rus

[2] *Е. Н. Аристова, Д. Ф. Байдин*, Реализация метода квазидиффузии для расчета критических параметров реактора на быстрых нейтронах в трехмерной гексагональной геометрии // Матем. моделирование, 24:8 (2012), 65–80; Math. Models Comput. Simul., 5:2 (2013), 145–155
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=3301&option_lang=rus

[3] *Д. Ф. Байдин, Е. Н. Аристова*, Параллельный код QuDiff для расчета критических параметров реактора на быстрых нейтронах в трехмерной гексагональной геометрии // Матем. моделирование, 28:1 (2016), 107–116; Math. Models Comput. Simul., 8:4 (2016), 446–452
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=3693&option_lang=rus

[4] *С.Л. Соболев, В.Л. Васкевич*, Кубатурные формулы – Новосибирск: Издательство Института математики, 1996. – 484 с.

[5] *Е. Н. Аристова, Г. О. Астафуров*, О влиянии точности кубатурных формул на интегральные характеристики решения уравнения переноса // Матем. моделирование, 32:1 (2020), 15–30
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=4145&option_lang=rus

[6] *Е. Н. Аристова, Г. О. Астафуров*, О влиянии точности кубатурных формул на интегральные характеристики решения уравнения переноса с условиями отражения / Сборник материалов международной конференции КРОМШ-2019: ПОЛИПРИНТ, 2019. – 328 с.
https://drive.google.com/file/d/1UDjhfixTBtm56LDz5YgjfqVx30KKAXsy/view

[7] *Feng Dai, Yuan Xu*, Approximation Theory and Harmonic Analysis on Spheres and Balls, Springer Monographs in Mathematics, 2013, 440 p.

[8] *И.П. Мысовских*, Интерполяционные кубатурные формулы – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. – 336 с.