

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ  
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том 16, стр. 1196–1204 (2019)

УДК 519.644

DOI 10.33048/semi.2019.16.081

MSC 65D32

КУБАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ НА СФЕРЕ, ИНВАРИАНТНЫЕ  
ОТНОСИТЕЛЬНО ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ  
ДИЭДРА С ИНВЕРСИЕЙ  $D_{3d}$ 

А.С. ПОПОВ

ABSTRACT. An algorithm of searching for the best (in a sense) cubature formulas on a sphere that are invariant under the transformations of the dihedral group of rotations with inversion  $D_{3d}$  is described. This algorithm is applied to find the parameters of all the best cubature formulas of this symmetry type up to the 35th order of accuracy.

**Keywords:** numerical integration, invariant cubature formulas, invariant polynomials, dihedral group of rotations.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно преобразований различных диэдральных групп симметрии, рассматривались в работах [1–6]. В частности, в [3] был предложен алгоритм построения наилучших (в некотором смысле) кубатур на сфере, инвариантных относительно группы вращений диэдра с инверсией  $D_{6h}$ , в [4] – относительно группы  $D_{4h}$ , в [5] – относительно группы  $D_{2h}$ , а в [6] – относительно группы  $D_{5d}$ . Все кубатуры, инвариантные относительно этих групп, обладают центральной симметрией и поэтому автоматически точны для всех нечётных функций.

В данной работе будет описан аналогичный алгоритм построения наилучших кубатур, инвариантных относительно группы вращений диэдра с инверсией  $D_{3d}$ . Будут проведены расчёты по этому алгоритму с целью определить параметры всех наилучших кубатур данной группы симметрии до 35-го порядка точности  $n$ . При этом для  $n \leq 11$  будут найдены точные значения параметров

---

POPOV, A.S., CUBATURE FORMULAS ON A SPHERE THAT ARE INVARIANT UNDER THE TRANSFORMATIONS OF THE DIHEDRAL GROUP OF ROTATIONS WITH INVERSION  $D_{3d}$ .

© 2019 Попов А.С.

Работа выполнена в рамках бюджетного проекта № 0315-2019-0008.

Поступила 21 февраля 2019 г., опубликована 2 сентября 2019 г.

соответствующих кубатур, а для остальных  $n$  – приближённые, полученные путём численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений методом Ньютоновского типа.

## 2. АЛГОРИТМ ПОИСКА НАИЛУЧШИХ КУБАТУР ГРУППЫ $D_{3d}$

Пусть  $S$  – единичная сфера с центром в начале координат, т. е. множество точек  $(x, y, z) \in R_3$ , для которых  $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ . Рассмотрим на  $S$  интеграл

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

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

Для численного нахождения интеграла (1) построим кубатурную формулу, инвариантную относительно преобразований группы  $D_{3d}$ , в виде

$$V(f) = A_0 \sum_{j=1}^2 f(a_{0j}) + B_0 \sum_{j=1}^6 f(b_{0j}) + \sum_{i=1}^L A_i \sum_{j=1}^6 f(a_{ij}) + \sum_{i=1}^M B_i \sum_{j=1}^{12} f(b_{ij}), \quad (2)$$

где 2 точки  $a_{0j}$  лежат в полюсах вписанного в сферу диэдра (бипирамиды) и имеют координаты  $(0, 0, \pm 1)$ ; 6 точек  $b_{0j}$  отвечают вершинам и серединам рёбер основания диэдра и порождены точками  $(\pm 1, 0, 0)$  циклической группы  $C_3$ ; 6 точек  $a_{ij}$  лежат в трёх проходящих через ось  $z$  вертикальных плоскостях симметрии (одна из этих плоскостей совпадает с плоскостью  $x = 0$ ) и порождены точками  $(0, a_i, b_i)$  и  $(0, -a_i, -b_i)$  группы  $C_3$ ; 12 точек  $b_{ij}$  отвечают точкам общего положения на боковых гранях диэдра и порождены точками  $(\pm c_i, d_i, e_i)$  и  $(\pm c_i, -d_i, -e_i)$  группы  $C_3$ .

Напомним, что одна точка  $(a, b, c)$  группы  $C_3$  порождает три точки:

$$(x_1 = a, y_1 = b, z_1 = c), \quad (x_{k+1} = ux_k - vy_k, y_{k+1} = vx_k + uy_k, z_{k+1} = c),$$

где  $u = \cos(2\pi/3) = -1/2$ ,  $v = \sin(2\pi/3) = \sqrt{3}/2$ ,  $k = 1, 2$ .

Заметим, что мы ассоциируем наш диэдр со вписанной в сферу прямой бипирамидой, полюса которой лежат на оси  $z$ , а общие основания, представляющие собой правильные треугольники, лежат в плоскости экватора  $z = 0$  (см., например, [7]). Наш диэдр переходит в себя при вращениях на угол, кратный  $2\pi/3$ , вокруг оси третьего порядка  $z$ . Эти вращения образуют циклическую группу симметрии  $C_3$ . Кроме того, диэдр переходит в себя при вращении на угол  $\pi$  вокруг любой из трёх осей второго порядка, лежащих в плоскости  $z = 0$  и соединяющих вершины основания диэдра с серединами противоположных рёбер [7]. Совокупность всех указанных преобразований образует группу симметрии, называемую группой вращений диэдра  $D_3$  (см. [8, гл. 12]). Эта группа содержит 6 элементов: 3 поворота вокруг оси третьего порядка  $z$  и 3 поворота вокруг горизонтальных осей второго порядка. В формуле (2) одна из осей второго порядка совпадает с осью  $x$ , поэтому кубатура инвариантна относительно замены точки  $(x, y, z)$  на точку  $(x, -y, -z)$ . Дополняя группу  $D_3$  операцией симметрии относительно плоскости  $x = 0$ , получим нашу группу  $D_{3d}$ , содержащую 12 элементов (см. [8]). Таким образом, кубатуры группы  $D_{3d}$  инвариантны относительно операции инверсии, при которой точка  $(x, y, z)$  переходит в точку  $(-x, -y, -z)$ . Следовательно, эти кубатуры обладают центральной симметрией и автоматически точны для всех нечётных функций.

Общее число узлов в кубатурной формуле (2) обозначим через  $N$ .

Пусть  $\{Z_{kj}(x, y, z); k = 0, 1, \dots, n; j = 1, 2, \dots, 2k + 1\}$  – ортонормированная система многочленов степени не выше  $n$ , для которых  $U(Z_{kj}Z_{lm}) = \delta_{kl}\delta_{jm}$ . Здесь индекс  $k$  нумерует степени базисных многочленов, а индекс  $j$  – многочлены при данном  $k$ ;  $\delta_{kl}$  – символ Кронекера.

Будем говорить, что данная кубатурная формула имеет алгебраический порядок точности  $n$  (или просто порядок  $n$ ), если она точна для всех многочленов степени не выше  $n$  и не точна хотя бы для одного многочлена степени  $n + 1$ . Погрешностью кубатурной формулы (2) на многочленах степени  $k$  назовём величину [9]

$$E_k = \left( \sum_{j=1}^{2k+1} (U(Z_{kj}) - V(Z_{kj}))^2 \right)^{1/2}.$$

Для кубатурной формулы порядка  $n$  все величины  $E_k = 0$  при  $k \leq n$ , а  $E_{n+1} > 0$ . Величину  $E_{n+1}$  назовём главным членом погрешности кубатурной формулы.

В данной работе будет сделана попытка построить все наилучшие кубатурные формулы вида (2) на сфере для  $n \leq 35$ . При этом наилучшей среди всех кубатурных формул этого вида, имеющих данный порядок  $n$ , мы будем считать ту, которая последовательно удовлетворяет четырём условиям [9]: 1) узлы принадлежат области интегрирования, 2) веса положительны, 3) число узлов минимально, 4) главный член погрешности минимален.

Применительно к нашему случаю теорема 1 из [10] будет звучать так.

**Теорема 1.** *Для того, чтобы кубатура (2) имела порядок  $n$ , необходимо и достаточно, чтобы она была точна для всех инвариантных относительно группы  $D_{3d}$  многочленов степени не выше  $n$ .*

Известно (см., например, [2]), что любой инвариантный относительно группы  $D_{3d}$  многочлен можно представить на единичной сфере в виде многочлена от базисных инвариантных форм

$$u = \sin^2 \theta = x^2 + y^2, \quad v = \sin^6 \theta \cos^2 3\varphi = (x^2 - 3y^2)^2 x^2, \\ w = -\cos \theta \sin^3 \theta \sin 3\varphi = (y^2 - 3x^2)yz,$$

представляющих собой многочлены второй, шестой и четвёртой степени соответственно. Здесь  $x = \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = \cos \theta$ ,  $\theta$  и  $\varphi$  – угловые координаты сферической системы координат.

Заметим, что в узлах  $a_{0j}$   $u = v = w = 0$ ; в узлах  $b_{0j}$   $u = v = 1$ ,  $w = 0$ ; в узлах  $a_{ij}$   $v = 0$ .

Выпишем все многочлены, образующие базис в пространстве инвариантных относительно группы  $D_{3d}$  многочленов до 12-й степени включительно:

$$1, u, u^2, w, u^3, uw, v, u^4, u^2w, uv, u^5, u^3w, u^2v, vw, u^6, u^4w, u^3v, uvw, v^2.$$

Поскольку  $w^2 = (1 - u)(u^3 - v)$ , то многочлены  $w$  входят в базис не более чем в первой степени.

Параметрами кубатуры (2) являются веса  $A_0, B_0, A_i, B_i$  и координаты узлов  $a_{ij}, b_{ij}$ . С учётом уравнений связи

$$a_i^2 + b_i^2 = 1, \quad c_i^2 + d_i^2 + e_i^2 = 1$$

легко видеть, что узлы  $a_{0j}$  и  $b_{0j}$  имеют по одному свободному параметру (это их веса  $A_0$  и  $B_0$ ), узлы  $a_{ij}$  – по два свободных параметра, а узлы  $b_{ij}$  – по три

свободных параметра. В итоге на один свободный параметр приходится: 2 узла  $a_{0j}$ , 3 узла  $a_{ij}$ , 4 узла  $b_{ij}$ , 6 узлов  $b_{0j}$ .

Обозначим полное 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  $a_{0j}$ , затем –  $a_{ij}$ , далее –  $b_{ij}$  и лишь в последнюю очередь – узлы  $b_{0j}$ .

Однако здесь имеется одно существенное ограничение. Дело в том, что среди базисных многочленов степени  $n \geq 6$  содержатся многочлены вида  $u^k v^l w^j$  с  $l \geq 1$ . Эти многочлены обращаются в нуль в узлах  $a_{0j}$  и  $a_{ij}$ . В то же время интеграл  $U(u^k v^l) > 0$ . Поэтому правильное интегрирование этих многочленов возможно лишь с привлечением узлов  $b_{0j}$  и  $b_{ij}$ . Для кубатуры порядка  $n$  число базисных функций, требующих привлечения узлов  $b_{0j}$  и  $b_{ij}$ , есть величина  $m_0$ , которая равна полному числу базисных функций  $m$  для кубатуры степени  $n-6$  (в самом деле, умножая произвольную базисную функцию любой степени  $n$  вида  $u^k v^l w^j$  на  $v$ , мы получим базисную функцию степени  $n+6$ , требующую привлечения узлов  $b_{0j}$  и  $b_{ij}$ ). Таким образом, величина  $M$  в (2) должна быть такой, чтобы выполнялось условие  $3M \geq m_0$  при  $B_0 = 0$  или  $3M + 1 \geq m_0$  при  $B_0 > 0$ .

Далее задаём величину  $L$  в (2) так, чтобы общее число свободных параметров кубатуры было равно  $m$ . При этом, если нужно, можно положить  $A_0 = 0$  или  $B_0 = 0$ .

Затем подставляем  $m$  базисных функций на место  $f$  в формулу (2) и решаем систему  $m$  нелинейных алгебраических уравнений с  $m$  неизвестными свободными параметрами кубатуры. В отличие, например, от случая группы вращений октаэдра [9], здесь мы не можем заранее быть уверены, что возникающая система нелинейных уравнений будет разрешима. Тем более мы не можем заранее гарантировать, что все веса кубатуры будут положительны. Поэтому, как правило, нужно выполнить несколько попыток с разным набором параметров кубатуры, чтобы получить для данного  $n$  формулу с минимальным  $N$  и с положительными весами. Как говорилось выше, в случае наличия нескольких таких формул с одинаковым  $N$  наилучшей среди них считается та, которая имеет наименьшую величину главного члена погрешности  $E_{n+1}$ .

Так как группа  $D_{3d}$  является подгруппой ранее изученной группы вращений диэдра с инверсией  $D_{6h}$  [3], а также подгруппой группы вращений октаэдра с инверсией  $O_h$  [11] и группы вращений икосаэдра с инверсией  $Y_h$  [12], то для некоторых  $n$  наилучшие кубатуры группы  $D_{3d}$  могут совпадать с наилучшими кубатурами групп  $D_{6h}$ ,  $O_h$  или  $Y_h$ .

Заметим, что группа  $D_{3d}$ , как и группа  $D_{5d}$  (см. [6]), устроена несколько сложнее ранее изученных групп  $D_{2h}$ ,  $D_{4h}$  и  $D_{6h}$  (см. [3–5]). Все эти группы включают в себя операцию инверсии, поэтому систематическое построение кубатур, инвариантных относительно данных групп симметрии, очень важно в плане поиска наилучших кубатур, обладающих центральной симметрией.

### 3. ПОСТРОЕНИЕ КОНКРЕТНЫХ КУБАТУР ГРУППЫ $D_{3d}$

С целью полноты изложения, приведём параметры всех наилучших кубатур группы  $D_{3d}$  для  $n \leq 11$ .

Кубатура  $n = 1$ ,  $N = 2$ ,  $L = M = 0$ ,  $A_0 = 1/2$ ,  $B_0 = 0$ .

Эта формула тривиальна и имеет симметрию группы  $D_{\infty h}$  (в этой группе ось  $z$  служит осью симметрии бесконечного порядка [8]).

Кубатура  $n = 3$ ,  $N = 6$ ,  $L = 1$ ,  $M = 0$ ,  $A_0 = B_0 = 0$ ,  $A_1 = 1/6$ ,  $a_1 = \sqrt{2/3}$ ,  $b_1 = \sqrt{1/3}$ .

Эта формула хорошо известна и имеет симметрию группы  $O_h$  [13].

Кубатура  $n = 5$ ,  $N = 12$ ,  $L = 2$ ,  $M = 0$ ,  $A_0 = B_0 = 0$ ,  $A_1 = A_2 = 1/12$ ,  $a_1 = \sqrt{u_1}$ ,  $a_2 = \sqrt{u_2}$ ,  $b_1 = \sqrt{1-u_1}$ ,  $b_2 = -\sqrt{1-u_2}$ , где  $u_1 = 2(5 + \sqrt{5})/15$ ,  $u_2 = 2(5 - \sqrt{5})/15$ .

Эта формула хорошо известна и имеет симметрию группы  $Y_h$  [13].

Кубатура  $n = 7$ ,  $N = 24$ ,  $L = 3$ ,  $M = 0$ ,  $A_0 = 0$ ,  $B_0 = 4/105$ ,

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{81u_2u_3 - 46(u_2 + u_3) + 32}{630(u_2 - u_1)(u_3 - u_1)}, & u_1 &= (19 + 2hv)/33, \\ A_2 &= \frac{81u_1u_3 - 46(u_1 + u_3) + 32}{630(u_1 - u_2)(u_3 - u_2)}, & u_2 &= (19 - hv - hw)/33, \\ A_3 &= \frac{81u_1u_2 - 46(u_1 + u_2) + 32}{630(u_1 - u_3)(u_2 - u_3)}, & u_3 &= (19 - hv + hw)/33, \\ a_1 &= \sqrt{u_1}, & a_2 &= \sqrt{u_2}, & a_3 &= \sqrt{u_3}, \\ b_1 &= \sqrt{1-u_1}, & b_2 &= \sqrt{1-u_2}, & b_3 &= -\sqrt{1-u_3}. \end{aligned}$$

Здесь величины  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $u_3$  упорядочены так, чтобы отвечающие им веса  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  были расположены по возрастанию, а параметры

$$h = \sqrt{283/7}, \quad v = \cos(\arccos(-1421/(283h))/3), \quad w = \sqrt{3-3v^2}.$$

Заметим, что существует кубатура  $n = 7$ ,  $N = 24$ ,  $L = 2$ ,  $M = 1$ ,  $A_0 = B_0 = 0$ , которая также имеет положительные веса, но немного уступает данной кубатуре по величине  $E_{n+1}$ .

Кубатура  $n = 9$ ,  $N = 32$ ,  $L = 3$ ,  $M = 1$ ,  $B_0 = 0$ ,  $A_0 = A_3 = B_1 = 9/280$ ,  $A_1 = A_2 = 5/168$ ,  $a_1 = \sqrt{u_1}$ ,  $a_2 = \sqrt{u_2}$ ,  $a_3 = 2/3$ ,  $b_1 = \sqrt{1-u_1}$ ,  $b_2 = -\sqrt{1-u_2}$ ,  $b_3 = \sqrt{5}/3$ ,  $c_1 = (2\sqrt{2}/3) \sin(\arcsin(3\sqrt{6}/8)/3)$ ,  $d_1 = (2\sqrt{2}/3) \cos(\arcsin(3\sqrt{6}/8)/3)$ ,  $e_1 = -1/3$ , где  $u_1 = 2(5 + \sqrt{5})/15$ ,  $u_2 = 2(5 - \sqrt{5})/15$ .

Эта формула хорошо известна и имеет симметрию группы  $Y_h$  [14].

Кубатура  $n = 11$ ,  $N = 48$ ,  $L = 5$ ,  $M = 1$ ,  $A_0 = 0$ .

Поочередно подставляя в (2) 14 базисных функций и добавляя 6 уравнений связи  $w^2 = (1 - u)(u^3 - v)$ , получим следующую систему:

$$\begin{aligned}
 V(1) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i + 12B_1 = 1, \\
 V(u) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i u_i + 12B_1 u_6 = 2/3, \\
 V(u^2) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^2 + 12B_1 u_6^2 = 8/15, \\
 V(w) &= \sum_{i=1}^5 6A_i w_i + 12B_1 w_6 = 0, \\
 V(u^3) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^3 + 12B_1 u_6^3 = 16/35, \\
 V(uw) &= \sum_{i=1}^5 6A_i u_i w_i + 12B_1 u_6 w_6 = 0, \\
 V(v) &= 6B_0 + 12B_1 v_6 = 8/35, \\
 V(u^4) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^4 + 12B_1 u_6^4 = 128/315, \\
 V(u^2 w) &= \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^2 w_i + 12B_1 u_6^2 w_6 = 0, \\
 V(uw) &= 6B_0 + 12B_1 u_6 v_6 = 64/315, \\
 V(u^5) &= 6B_0 + \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^5 + 12B_1 u_6^5 = 256/693, \\
 V(u^3 w) &= \sum_{i=1}^5 6A_i u_i^3 w_i + 12B_1 u_6^3 w_6 = 0, \\
 V(u^2 v) &= 6B_0 + 12B_1 u_6^2 v_6 = 128/693, \\
 V(vw) &= 12B_1 v_6 w_6 = 0, \\
 w_i^2 &= (1 - u_i)u_i^3, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, \\
 w_6^2 &= (1 - u_6)(u_6^3 - v_6).
 \end{aligned}$$

Решая эту систему аналитически, находим:

$$\begin{aligned}
 B_0 &= 64/2835, & B_1 &= 14641/725760, & A_1 &= (40429 - rs - rt)/1935360, \\
 A_2 &= 11(2409 - 7\sqrt{737})/1290240, & A_3 &= 11(2409 + 7\sqrt{737})/1290240, \\
 A_4 &= (40429 - rs + rt)/1935360, & A_5 &= (40429 + 2rs)/1935360, \\
 u_1 &= 32(20 - \sqrt{37}p + \sqrt{37}q)/1089, & u_2 &= (33 - \sqrt{737})/66, & u_3 &= (33 + \sqrt{737})/66, \\
 u_4 &= 64(10 + \sqrt{37}p)/1089, & u_5 &= 32(20 - \sqrt{37}p - \sqrt{37}q)/1089, \\
 u_6 &= 8/11, & v_6 &= u_6^3 = 512/1331, & w_1, w_2, w_4 &> 0, & w_3, w_5 &< 0, & w_6 &= 0, \\
 a_1 &= \sqrt{u_1}, & a_2 &= \sqrt{u_2}, & a_3 &= \sqrt{u_3}, & a_4 &= \sqrt{u_4}, & a_5 &= \sqrt{u_5}, \\
 b_1 &= \sqrt{1 - u_1}, & b_2 &= \sqrt{1 - u_2}, & b_3 &= -\sqrt{1 - u_3}, & b_4 &= \sqrt{1 - u_4}, & b_5 &= -\sqrt{1 - u_5}, \\
 c_1 &= \sqrt{u_6}, & d_1 &= 0, & e_1 &= \sqrt{1 - u_6}.
 \end{aligned}$$

Здесь веса  $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5$  упорядочены по возрастанию, а параметры

$$\begin{aligned}
 r &= \sqrt{7021897}, & s &= \cos(\arccos(-18580645691/r^3)/3), & t &= \sqrt{3 - 3s^2}, \\
 p &= \cos(\arccos(25387/(4736\sqrt{37}))/3), & q &= \sqrt{3 - 3p^2}.
 \end{aligned}$$

Узлы  $b_{ij}$  этой кубатуры имеют симметрию группы  $D_{6h}$ .

Заметим, что существует кубатура  $n = 11, N = 48, L = 4, M = 2, A_0 = B_0 = 0$ , которая также имеет положительные веса, но немного уступает данной кубатуре по величине  $E_{n+1}$ .

Расчёт параметров новых кубатур для  $n \geq 13$  проводился с использованием арифметики повышенной точности (более 30 десятичных знаков в мантиссе) на вычислительной технике Сибирского суперкомпьютерного центра. Системы нелинейных уравнений решались методом ньютоновского типа с оценкой числа обусловленности матрицы Якоби  $cond$  по формуле  $cond = s_{max}/s_{min}$ , где  $s_{max}$  и  $s_{min}$  – максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы Якоби. Заметим, что для всех полученных автором наилучших кубатур величина  $cond < 10^{10}$ . Такое сравнительно небольшое (для указанной выше точности вычислений) число обусловленности было достигнуто путём частичной ортогонализации и нормирования системы базисных функций.

Приведём теперь сводную таблицу, содержащую основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатур группы  $D_{3d}$  до 35-го порядка точности.

$n$	$N$	$\eta$	$E_{n+1}$	$n$	$N$	$\eta$	$E_{n+1}$	$n$	$N$	$\eta$	$E_{n+1}$
1	2	0.6667	2.2361	13	66	0.9899	1.8419	25	224	1.0060	1.4973
3	6	0.8889	2.2913	15	86	0.9922	1.6695	27	258	1.0129	1.5206
5	12	1.0000	2.3917	17	104	1.0385	1.9269	29	296	1.0135	1.5715
7	24	0.8889	1.8788	19	134	0.9950	1.7809	31	338	1.0099	1.4060
9	32	1.0417	2.2441	21	158	1.0211	1.7500	33	380	1.0140	1.3583
11	48	1.0000	2.0209	23	192	1.0000	1.6129	35	426	1.0141	1.1619

Здесь  $\eta = (n + 1)^2/(3N)$  – так называемый коэффициент эффективности (см., например, [15, 16]). Для кубатур с минимальным числом узлов величина  $\eta \rightarrow 1$  при  $n \rightarrow \infty$  (см. [16]).

Как говорилось выше, для  $n = 1$  наилучшая кубатура группы  $D_{3d}$  имеет симметрию группы  $D_{\infty h}$ , для  $n = 3$  – симметрию группы  $O_h$ , а для  $n = 5, 9$  –

симметрию группы  $Y_h$ . Все остальные наилучшие на сегодняшний день кубатуры группы  $D_{3d}$  не являются представителями каких-либо групп более высокой симметрии.

Заметим, что указанные в этой таблице кубатуры для  $n = 1, 3, 5, 9, 17, 21, 27, 33$  являются наилучшими на сегодняшний день не только для группы  $D_{3d}$ , но и вообще для всех групп симметрии.

Из таблицы видно, что, в целом, с ростом  $n$  величина  $E_{n+1}$  для наилучших кубатур слабо убывает, оставаясь величиной порядка 1. Заметим в этой связи, что нашей целью является построение для заданного порядка точности  $n$  кубатур с положительными весами и содержащими при этом минимально возможное число узлов. Величина  $E_{n+1}$ , характеризующая степень близости данной кубатуры порядка  $n$  к кубатуре порядка  $n + 1$  (см. раздел 2, а также работу [9]), играет вспомогательную роль для выбора наилучшей кубатуры в случае наличия нескольких кубатур с одинаковым числом узлов. Эта величина вычисляется при разных  $n$  на разных наборах функций и поэтому вовсе не должна убывать с ростом  $n$ . Информативность приведённых в таблице величин  $E_{n+1}$  заключается в том, что эти величины (разумеется, наряду с порядком  $n$ ) являются характеристиками точности наилучших на сегодняшний день кубатур данной группы симметрии и могут быть ориентиром на пути возможного улучшения этих характеристик как в рамках данной группы симметрии, так и в рамках других групп симметрии.

Укажем также, что в работах [3–6] приведены аналогичные таблицы, содержащие основные характеристики наилучших кубатур групп вращений диэдра с инверсией  $D_{2h}$ ,  $D_{4h}$ ,  $D_{6h}$  и  $D_{5d}$ . Сравнение этих таблиц показывает, что асимптотически наилучшие кубатуры всех этих групп равноценны, поскольку для всех наилучших кубатур  $\eta \rightarrow 1$  при  $n \rightarrow \infty$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] A.N. Kazakov, V.I. Lebedev, *Gauss type quadrature formulas for a sphere that are invariant with respect to the group of dihedron*, Tr. Mat. Inst. Steklova, **203** (1994), 100–112 (in Russian). Zbl 1126.41302
- [2] A.S. Popov, *Cubature formulae for a sphere invariant under cyclic rotation groups*, Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, **9**:6 (1994), 535–546. Zbl 0818.41025
- [3] A.S. Popov, *Cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to a group of dihedron rotations with inversion  $D_{6h}$* , Numerical Analysis and Applications, **6**:1 (2013), 49–53. Zbl 1299.65037
- [4] A.S. Popov, *Cubature formulas on a sphere invariant under the dihedral group of rotations with inversion  $D_{4h}$* , Siberian Electronic Mathematical Reports, **12** (2015), 457–464 (in Russian). Zbl 1342.65101
- [5] A.S. Popov, *Cubature formulas on a sphere invariant under the dihedral group  $D_{2h}$* , Siberian Electronic Mathematical Reports, **13** (2016), 252–259 (in Russian). Zbl 1342.65100
- [6] A.S. Popov, *Cubature formulas on a sphere invariant under the dihedral group of rotations with inversion  $D_{5d}$* , Siberian Electronic Mathematical Reports, **15** (2018), 389–396 (in Russian).
- [7] F. Klein, *Lectures on the Icosahedron and the Solution of Equations of the Fifth Degree*, New York: Dover, 1956. Zbl 0072.25901
- [8] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Moscow: Nauka, 1989 (in Russian). Zbl 0714.70004
- [9] A.S. Popov, *The search for the sphere of the best cubature formulae invariant under octahedral group of rotations*, Siberian J. Num. Math., **5**:4 (2002), 367–372 (in Russian).



- [10] S.L. Sobolev, *On mechanical cubature formulas for the surface of a sphere*, Sibirskii Mat. Zh., **3**:5 (1962), 769–796 (in Russian). Zbl 0202.44501
- [11] A.S. Popov, *The search for the best cubature formulae invariant under the octahedral group of rotations with inversion for a sphere*, Siberian J. of Numer. Mathematics, **8**:2 (2005), 143–148 (in Russian). Zbl 1112.65310
- [12] A.S. Popov, *Cubature formulas invariant under the icosahedral group of rotations with inversion on a sphere*, Numerical Analysis and Applications, **10**:4 (2017), 339–346.
- [13] V.A. Ditkin, *On some approximate formulas for calculating triple integrals*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, **62**:4 (1948), 445–447 (in Russian). Zbl 0032.36202
- [14] V.A. Ditkin, L.A. Lyusternik, *On a method of practical harmonic analysis on a sphere*, Vychisl. Matematika i Vychisl. Tekhnika, **1** (1953), 3–13 (in Russian). Zbl 0052.35601
- [15] A.D. McLaren, *Optimal numerical integration on a sphere*, Math. Comput., **17**:83 (1963), 361–383. Zbl 0233.65016
- [16] V.I. Lebedev, *Nodes and weights of Gauss-Markov type quadrature formulas from 9th to 17th accuracy orders for a sphere which are invariant under the octahedral group with inversion*, Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz., **15**:1 (1975), 48–54 (in Russian). Zbl 0326.65021

ANATOLII STEPANOVICH POPOV  
INSTITUTE OF COMPUTATIONAL MATHEMATICS AND MATHEMATICAL GEOPHYSICS SB RAS,  
6, AKAD. LAVRENT'eva AVE.,  
NOVOSIBIRSK, 630090, RUSSIA  
*E-mail address:* `popov@labchem.sbcc.ru`