УДК 519.644.7

Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{6h}*

А.С. Попов

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mail: popov@labchem.sscc.ru

Попов А.С. Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{6h} // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2013. — Т. 16, № 1. — С. 57–62.

Разработан алгоритм поиска наилучших (в некотором смысле) кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{6h}. Проведены расчёты по этому алгоритму с целью определить параметры всех наилучших кубатурных формул данной группы симметрии до 23-го порядка точности n. При этом для $n \le 11$ найдены точные значения параметров соответствующих кубатурных формул, а для остальных n — приближённые, полученные путём численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений методом ньютоновского типа. В данной работе впервые систематически исследованы способы получения наилучших кубатур для сферы в случае группы, не являющейся подгруппой групп симметрии правильных многогранников.

Ключевые слова: *численное интегрирование, инвариантные кубатурные формулы, инвариантные многочлены, группа вращений диэдра.*

Popov A.S. The cubature formulas on a sphere invariant with respect to a dihedral group of rotations with inversion D_{6h} // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2013. — Vol. 16, № 1. — P. 57–62.

An algorithm of searching for the best (in a sense) cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to a dihedral group of rotations with inversion D_{6h} has been developed. This algorithm was applied to find parameters of all the best cubature formulas of this group of symmetry up to the 23rd order of accuracy n. In the course of the study carried out, the exact values of parameters of the corresponding cubature formulas were found for $n \le 11$, and the approximate ones were obtained by the numerical solution of systems of nonlinear algebraic equations by a Newton-type method for the other n. For the first time, the ways of obtaining the best cubature formulas for the sphere were systematically investigated for the case of the group which is not a subgroup of the groups of symmetry of the regular polyhedrons.

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

1. Введение

Пусть S — единичная сфера, т. е. множество точек $(x, y, z) \in \boldsymbol{R}_3$, для которых $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Рассмотрим на S интеграл

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

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

*Работа поддержана РФФИ (проект № 10-01-00427-а).

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 $n+1$.

Общая теория кубатур на сфере, инвариантных относительно конечных групп вращений, была разработана С.Л. Соболевым (см. [1]). К настоящему времени наибольшее распространение получили кубатуры, инвариантные относительно групп симметрии правильных многогранников (см. [2–15] и имеющуюся там литературу). Кубатурные формулы, инвариантные относительно различных диэдральных групп симметрии, рассматривались в работах [16, 17].

Заметим, однако, что до сих пор задача систематического построения наилучших в каком-либо смысле кубатур разных порядков точности для диэдральных групп симметрии не ставилась. В данной работе впервые систематически исследованы способы получения наилучших (в некотором смысле) кубатур для сферы, инвариантных относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{6h}, не являющейся подгруппой групп симметрии правильных многогранников.

2. Алгоритм построения кубатур группы D_{6h}

Будем строить эти кубатуры в виде

$$V(f) = A_0 \sum_{j=1}^{2} f(a_{0j}) + B_0 \sum_{j=1}^{6} f(b_{0j}) + C_0 \sum_{j=1}^{6} f(c_{0j}) +$$
$$\sum_{i=1}^{J} A_i \sum_{j=1}^{12} f(a_{ij}) + \sum_{i=1}^{K} B_i \sum_{j=1}^{12} f(b_{ij}) + \sum_{i=1}^{L} C_i \sum_{j=1}^{12} f(c_{ij}) + \sum_{i=1}^{M} D_i \sum_{j=1}^{24} f(d_{ij}), \tag{3}$$

где 2 точки a_{0j} лежат в полюсах вписанного в сферу диэдра (бипирамиды) и имеют координаты $(0,0,\pm1)$; 6 точек b_{0j} лежат в вершинах основания диэдра и порождены точкой $(1,0,0)$ циклической группы C_6; 6 точек c_{0j} отвечают серединам рёбер основания диэдра и порождены точкой $(0,1,0)$ группы C_6; 12 точек a_{ij} отвечают рёбрам основания диэдра и порождены точками $(a_i, \pm b_i, 0)$ группы C_6; 12 точек b_{ij} отвечают рёбрам боковых граней диэдра и порождены точками $(c_i, 0, \pm d_i)$ группы C_6; 12 точек c_{ij} отвечают медианам боковых граней диэдра и порождены точками $(0, g_i, \pm h_i)$ группы C_6; 24 точки d_{ij} отвечают точкам общего положения на боковых гранях диэдра и порождены точками $(p_i, \pm q_i, \pm r_i)$ группы C_6.

Напомним, что одна точка (a,b,c) группы C_6 порождает шесть точек:

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

где $u = \cos(\pi/3) = 1/2$, $v = \sin(\pi/3) = \sqrt{3}/2$, $k = 1, 2, \ldots, 5$.

Заметим, что мы ассоциируем наш диэдр со вписанной в сферу прямой бипирамидой, полюса которой лежат на оси z, а общие основания, представляющие собой правильные шестиугольники, лежат в плоскости экватора $z = 0$ (см., например, [18]).

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

Теорема 1. *Для того чтобы кубатура* (3) *имела порядок* n, *необходимо и достаточно, чтобы она была точна для всех инвариантных относительно группы* D_{6h} *многочленов степени не выше* n.

Известно (см., например, [17]), что любой инвариантный относительно группы D_{6h} многочлен можно представить на единичной сфере в виде многочлена от базисных инвариантных форм $u = x^2 + y^2$ и $v = u^3 \cos 6\varphi = 32x^6 - 48ux^4 + 18u^2x^2 - u^3 = x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6$, представляющих собой многочлены второй и шестой степени соответственно.

Заметим, что в узлах a_{0j} $u = v = 0$; в узлах b_{0j} $u = v = 1$; в узлах c_{0j} $u = 1$, $v = -1$; в узлах a_{ij} $u = 1$, $v = \cos 6\varphi$; в узлах b_{ij} $v = u^3$; в узлах c_{ij} $v = -u^3$.

Выпишем все многочлены, образующие базис в пространстве инвариантных относительно группы D_{6h} многочленов до 16-й степени включительно:

$$1, u, u^2, u^3, v, u^4, uv, u^5, u^2v, u^6, u^3v, v^2, u^7, u^4v, uv^2, u^8, u^5v, u^2v^2.$$

Параметрами кубатуры (3) являются веса A_0, B_0, C_0, A_i, B_i, C_i, D_i и координаты узлов a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, d_{ij}. С учётом уравнений связи

$$a_i^2 + b_i^2 = 1, \quad c_i^2 + d_i^2 = 1, \quad g_i^2 + h_i^2 = 1, \quad p_i^2 + q_i^2 + r_i^2 = 1$$

легко видеть, что узлы a_{0j}, b_{0j} и c_{0j} имеют по одному свободному параметру (это их вес A_0, B_0 и C_0), узлы a_{ij}, b_{ij} и c_{ij} — по два свободных параметра, а узлы d_{ij} — по три свободных параметра. В итоге на один свободный параметр приходится: 2 узла a_{0j}, 6 узлов b_{0j}, c_{0j}, a_{ij}, b_{ij} или c_{ij}, 8 узлов d_{ij}.

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}, затем — b_{0j}, c_{0j}, a_{ij}, b_{ij}, c_{ij} и лишь в последнюю очередь — узлы d_{ij}.

Однако здесь имеется одно существенное ограничение. Дело в том, что среди базисных многочленов степени $n \geq 14$ содержатся многочлены вида $u^k v^l w$, где $k, l = 0, 1, \ldots$; $w = z^2 u^6 \sin^2 6\varphi = (1-u)(u^6 - v^2)$. Эти многочлены обращаются в нуль в узлах a_{0j}, b_{0j}, c_{0j}, a_{ij}, b_{ij} и c_{ij}. В то же время интеграл $U(u^k v^l w) > 0$ при четном l. Поэтому правильное интегрирование этих многочленов возможно лишь с привлечением узлов d_{ij}. Для кубатуры порядка n число базисных функций, требующих привлечения узлов d_{ij}, есть величина m_0, которая равна полному числу базисных функций m для кубатуры степени $n - 14$ (в самом деле, умножая произвольную базисную функцию любой степени n вида $u^k v^l$ на w, мы получим базисную функцию степени $n + 14$, требующую привлечения узлов d_{ij}). Таким образом, величина M в (3) должна быть такой, чтобы выполнялось условие $3M \geq m_0$ (опыт практического построения кубатур говорит о том, что должно выполняться условие $3M > m_0$).

Далее задаём величины J, K, L в (3) так, чтобы общее число свободных параметров кубатуры было равно m. При этом, если нужно, можно положить $A_0 = 0$, $B_0 = 0$ или $C_0 = 0$.

Затем подставляем m базисных функций на место f в формулу (3) и решаем систему m нелинейных алгебраических уравнений с m неизвестными свободными параметрами кубатуры. В отличие, например, от случая группы вращений октаэдра [13], 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. Аналогично [13], в случае наличия нескольких таких формул с одинаковым N наилучшей среди них считается та, которая имеет наименьшую величину главного члена погрешности E_{n+1}. Если же случится так, что какие-то конкурирующие формулы имеют одинаковую величину E_{n+1}, то будем учитывать величину E_{n+2} и т. д.

3. Построение конкретных кубатур группы D_{6h}

Кубатура $n = 1$, $N = 2$, $J = K = L = M = 0$, $A_0 = 1/2$, $B_0 = C_0 = 0$.

Эта формула тривиальна и имеет симметрию группы $D_{\infty h}$.

Кубатура $n = 3$, $N = 8$, $J = K = L = M = 0$, $A_0 = 1/6$, $B_0 = 1/9$, $C_0 = 0$.

Кубатура $n = 5$, $N = 14$, $J = 0$, $K = 1$, $L = M = 0$, $A_0 = 1/12$, $B_0 = C_0 = 0$, $B_1 = 5/72$, $c_1 = 2/\sqrt{5}$, $d_1 = 1/\sqrt{5}$.

Эти кубатуры также тривиальны и представляют собой кубатуры-произведения одномерных квадратур.

Кубатура $n = 7$, $N = 26$, $J = K = 1$, $L = M = 0$, $B_0 = C_0 = 0$.

Поочерёдно подставляя в (3) пять базисных функций, получим следующую систему:

$$
\begin{aligned}
V(1) &= 2A_0 + 12A_1 + 12B_1 = 1,\\
V(u) &= 12A_1 + 12B_1u_1 = 2/3,\\
V(u^2) &= 12A_1 + 12B_1u_1^2 = 8/15,\\
V(u^3) &= 12A_1 + 12B_1u_1^3 = 16/35,\\
V(v) &= 12A_1v_1 + 12B_1u_1^3 = 0.
\end{aligned}
$$

Здесь через u_1 обозначено значение величины u в узлах b_{1j}, а через v_1 — значение величины v в узлах a_{1j}. Решая эту систему аналитически, находим:

$$A_0 = 1/20, \quad A_1 = 4/135, \quad B_1 = 49/1080, \quad u_1 = 4/7, \quad v_1 = -2/7.$$

Далее находим координаты узлов a_{1j} и b_{1j} по формулам:

$$a_1 = \cos(\arccos(v_1)/6), \quad b_1 = \sin(\arccos(v_1)/6), \quad c_1 = \sqrt{u_1}, \quad d_1 = \sqrt{1-u_1}.$$

Кубатура $n = 7$, $N = 26$, $J = 0$, $K = 1$, $L = M = 0$.

Эта формула отличается от предыдущей тем, что здесь вместо 12 узлов a_{1j} взяты 6 узлов b_{0j} и 6 узлов c_{0j}. Решая новую систему уравнений, получаем, что величины A_0, B_1, u_1, c_1 и d_1 будут те же, что и выше, а веса $B_0 = 4/189$ и $C_0 = 4/105$.

Мы видим, что эти формулы содержат одинаковое число узлов, лежащих на сфере и имеющих положительные веса. Значит, лучшая среди них должна определяться по величине $E_{n+1} = E_8$ (см. п. 2). Однако оказывается, что эти формулы имеют одинаковые величины не только E_8, но и E_{10} ($E_9 = E_{11} = 0$ по определению). Лишь величина E_{12} для первой формулы оказывается несколько меньше чем для второй (0.847 и 1.106 соответственно).

Других кубатур для $n = 7$, $N = 26$ не существует (если, разумеется, не считать другими кубатуры, полученные из данных вращением на угол $\pi/6$, при котором узлы b_{0j} и b_{ij} меняются местами с узлами c_{0j} и c_{ij}).

Далее будем приводить только параметры наилучших кубатур.

Кубатура $n = 9$, $N = 38$, $J = 0$, $K = 2$, $L = 1$, $M = 0$, $B_0 = C_0 = 0$.

Решая систему из 7 уравнений, находим:

$$
\begin{aligned}
&A_0 = 221/6720, && \\
&B_1 = (126821 - 4969\sqrt{31})/4999680, && u_1 = 8(14+\sqrt{31})/165, \\
&B_2 = (126821 + 4969\sqrt{31})/4999680, && u_2 = 8(14-\sqrt{31})/165, \\
&C_1 = 243/8960, && u_3 = 8/9.
\end{aligned}
$$

Здесь через u_1, u_2 и u_3 обозначены значения величины u в узлах b_{1j}, b_{2j} и c_{1j} соответственно. Далее находим координаты узлов b_{ij} и c_{1j} по формулам:

$$
c_i = \sqrt{u_i}, \quad d_i = \sqrt{1-u_i}, \quad i = 1,2; \quad g_1 = \sqrt{u_3}, \quad h_1 = \sqrt{1-u_3}.
$$

Кубатура $n = 11$, $N = 50$, $J = 1$, $K = 2$, $L = 1$, $M = 0$, $B_0 = C_0 = 0$.

Решая систему из 9 уравнений, находим:

$$
\begin{aligned}
&A_0 = 67/2880, && \\
&A_1 = 320/16443, && v_1 = -4/25, \\
&B_1 = (19835625 - 275639\sqrt{71})/996226560, && u_1 = 8(18+\sqrt{71})/253, \\
&B_2 = (19835625 + 275639\sqrt{71})/996226560, && u_1 = 8(18-\sqrt{71})/253, \\
&C_1 = 14641/725760, && u_3 = 8/11.
\end{aligned}
$$

Здесь через v_1 обозначено значение величины v в узлах a_{1j}, а через u_1, u_2 и u_3 — значения величины u в узлах b_{1j}, b_{2j} и c_{1j} соответственно. Координаты узлов a_{1j}, b_{ij} и c_{1j} находятся из известных величин v_1 и u_i по тем же формулам, как в случаях $n = 7$ и $n = 9$.

Расчёт параметров новых кубатур для $n \geq 13$ проводился численным методом ньютоновского типа, аналогичным работам [13, 14]. Приведём теперь сводную таблицу, содержащую основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатур группы D_{6h} до 23-го порядка точности.

Таблица.

n	N	E	n	N	E	n	N	E	n	N	E
1	2	2.2361	7	26	1.9445	13	72	1.8554	19	140	1.6207
3	8	1.7500	9	38	1.8410	15	92	1.6511	21	168	1.6452
5	14	1.8933	11	50	1.7814	17	116	1.6563	23	194	1.4099

Здесь $E = E_{n+1}$ — главный член погрешности [13].

Литература

1. **Соболев С.Л.** О формулах механических кубатур на поверхности сферы // Сиб. мат. журнал. — 1962. — Т. 3, № 5. — С. 769–796.

2. **McLaren A.D.** Optimal numerical integration on a sphere // Math. Comput. — 1963. — Vol. 17, № 83. — P. 361–383.

3. **Лебедев В.И.** 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 // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1975. — Т. 15, № 1. — С. 48–54.

4. **Лебедев В.И.** О квадратурах на сфере // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1976. — Т. 16, № 2. — С. 293–306.

5. **Лебедев В.И.** Квадратурные формулы для сферы 25–29-го порядка точности // Сиб. мат. журнал. — 1977. — Т. 18, № 1. — С. 132–142.
6. **Лебедев В.И., Лайков Д.Н.** Квадратурная формула для сферы 131-го алгебраического порядка точности // Докл. РАН. — 1999. — Т. 366, № 6. — С. 741–745.
7. **Коняев С.И.** Квадратуры типа Гаусса для сферы, инвариантные относительно группы икосаэдра с инверсией // Мат. заметки. — 1979. — Т. 25, № 4. — С. 629–634.
8. **Коняев С.И.** Формулы численного интегрирования на сфере // Теоремы вложения и их приложения / Тр. семинара акад. С.Л. Соболева. — Новосибирск, 1982. — № 1. — С. 75–82.
9. **Мысовских И.П.** Интерполяционные кубатурные формулы. — М.: Наука, 1981.
10. **Попов А.С.** Кубатурные формулы для сферы, инвариантные относительно группы тетраэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1995. — Т. 35, № 3. — С. 459–466.
11. **Попов А.С.** Кубатурные формулы высоких порядков точности для сферы, инвариантные относительно группы тетраэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1996. — Т. 36, № 4. — С. 5–9.
12. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений октаэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1998. — Т. 38, № 1. — С. 34–41.
13. **Попов А.С.** Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2002. — Т. 5, № 4. — С. 367–372.
14. **Попов А.С.** Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра с инверсией // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2005. — Т. 8, № 2. — С. 143–148.
15. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений икосаэдра // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2008. — Т. 11, № 4. — С. 433–440.
16. **Popov A.S.** Cubature formulae for a sphere invariant under cyclic rotation groups // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1994. — Vol. 9, № 6. — P. 535–546.
17. **Казаков А.Н., Лебедев В.И.** Квадратурные формулы типа Гаусса для сферы, инвариантные относительно группы диэдра // Тр. МИРАН. — М.: Наука, 1994. — Т. 203. — С. 100–112.
18. **Клейн Ф.** Лекции об икосаэдре и решении уравнений пятой степени. — М.: Едиториал УРСС, 2004.

Поступила в редакцию 1 сентября 2011 г.