УДК 519.644.7

Поиск наилучших кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно группы вращений икосаэдра*

А.С. Попов

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

E-mail: popov@labchem.sscc.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 16, 2023.

Попов А.С. Поиск наилучших кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно группы вращений икосаэдра // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2023. — Т. 26, № 4. — С. 415–430.

Описывается процесс поиска наилучших (в некотором смысле) кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно преобразований группы вращений икосаэдра. Даются с 16-ю значащими цифрами параметры всех наилучших кубатурных формул данного вида симметрии до 30-го порядка точности. Приводится таблица, содержащая основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатурных формул группы вращений икосаэдра до 79-го порядка точности.

DOI: 10.15372/SJNM20230406
EDN: JSCJAT

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

Popov A.S. The search of the best cubature formulas on the sphere that are invariant under the icosahedral rotation group // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2023. — Vol. 26, № 4. — P. 415–430.

A process of searching on the sphere for the best (in a sense) cubature formulas that are invariant under the transformations of the icosahedral rotation group is described. The parameters of the best cubature formulas of this symmetry type up to the 30th order of accuracy are given to 16 significant digits. A table which contains the main characteristics of all the best to date cubature formulas of the icosahedral rotation group up to the 79th order of accuracy is given.

Keywords: *numerical integration, invariant cubature formulas, invariant polynomials, icosahedral rotation group.*

1. Введение

Кубатурные формулы на поверхности сферы имеют широкое применение на практике. Например, они находят приложение при решении задач квантовой динамики [1, 2], при вычислении молекулярных интегралов в квантовой химии [3, 4], при решении многомерных задач теории переноса частиц [5] и т. д. Также широко они применяются при выполнении интерполяции на сфере (см., например, [6] и имеющуюся там литературу).

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект № 0251-2022-0001).

Особенно важны такие дискретизации сферы, которые позволяют точно интегрировать все сферические гармоники до некоторого фиксированного порядка. Наиболее простой подход к построению такой дискретизации заключается в том, что используют равномерную сетку по азимутальному углу и узлы квадратуры Гаусса по полярному углу. Это ведёт к сильному сгущению узлов вблизи полюсов, что весьма нежелательно при решении многих задач.

Альтернативой данному подходу является использование кубатурных формул, инвариантных относительно конечных групп вращений. В таких конструкциях удаётся избежать чрезмерного сгущения узлов. Кроме того, число узлов здесь будет близко к оптимальному.

Общая теория кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно преобразований конечных групп вращений, была разработана С.Л. Соболевым [7, 8]. К настоящему времени наибольшее распространение получили кубатурные формулы, инвариантные относительно групп симметрии правильных многогранников (см. [6–28] и имеющуюся там литературу). Среди этих кубатурных формул особый интерес представляют кубатуры, имеющие положительные веса и содержащие при этом минимальное число узлов (кубатуры гауссова типа). В случае наличия для данного порядка точности n нескольких кубатур с положительными весами и одинаковым числом узлов в [22] был предложен новый критерий оптимальности, согласно которому наилучшей среди этих кубатур считается та, которая имеет наименьший главный член погрешности. В дальнейшем этот критерий был использован для поиска наилучших кубатур, инвариантных относительно различных групп симметрии [22–35].

В данной работе будет описан модифицированный (по сравнению с работами [24, 25]) алгоритм поиска наилучших кубатурных формул на сфере, инвариантных относительно одной из высших групп пространственной симметрии — группы вращений икосаэдра. Будут проведены расчёты по этому алгоритму с целью определить параметры всех наилучших кубатур данной группы симметрии для $n \le 79$. Будут даны с 16-ю значащими цифрами параметры всех наилучших кубатур для $n \le 30$.

2. Алгоритм поиска наилучших кубатур

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

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

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

Для численного нахождения интеграла (1) построим кубатурную формулу, инвариантную относительно преобразований группы вращений икосаэдра Y, в виде

$$V(f) = A_0 \sum_{j=1}^{12} f(a_{0j}) + B_0 \sum_{j=1}^{20} f(b_{0j}) + C_0 \sum_{j=1}^{30} f(c_{0j}) + \sum_{i=1}^{M} A_i \sum_{j=1}^{60} f(a_{ij}), \tag{2}$$

где 12 точек a_{0j} лежат в вершинах вписанного в сферу икосаэдра и имеют координаты:

$$(\pm a, \pm b, 0), \quad (0, \pm a, \pm b), \quad (\pm b, 0, \pm a),$$
$$a = \sqrt{(5+\sqrt{5})/10}, \quad b = \sqrt{(5-\sqrt{5})/10};$$

20 точек b_{0j} отвечают центрам граней икосаэдра при координатах:

$$
\begin{gathered}
(\pm c, \pm d, 0), \quad (0, \pm c, \pm d), \quad (\pm d, 0, \pm c), \quad (\pm e, \pm e, \pm e), \\
c = \sqrt{(3-\sqrt{5})/6}, \quad d = \sqrt{(3+\sqrt{5})/6}, \quad e = 1/\sqrt{3};
\end{gathered}
$$

30 точек c_{0j} отвечают серединам рёбер икосаэдра при координатах:

$$
\begin{gathered}
(\pm g, \pm h, \pm t), \quad (\pm t, \pm g, \pm h), \quad (\pm h, \pm t, \pm g), \\
(\pm 1, 0, 0), \quad (0, \pm 1, 0), \quad (0, 0, \pm 1), \\
g = (\sqrt{5}+1)/4, \quad h = (\sqrt{5}-1)/4, \quad t = 1/2; \qquad (3)
\end{gathered}
$$

60 точек a_{ij} отвечают точкам общего положения на гранях икосаэдра и порождены пятью точками общего положения группы вращений тетраэдра

$$
(p_{ik}, q_{ik}, r_{ik}), \quad k = 1, 2, \ldots, 5.
$$

Зная точку (p_{i1}, q_{i1}, r_{i1}), остальные четыре точки (p_{ik}, q_{ik}, r_{ik}) можно определить путём вращения этой точки вокруг какой-либо оси пятого порядка, проходящей через две противоположные вершины икосаэдра, например, по формулам:

$$
\begin{aligned}
p_{i,k+1} &= g p_{ik} + h q_{ik} - t r_{ik}, \\
q_{i,k+1} &= h p_{ik} + t q_{ik} + g r_{ik}, \\
r_{i,k+1} &= t p_{ik} - g q_{ik} + h r_{ik},
\end{aligned}
$$

где $k = 1, 2, 3, 4$, а величины g, h, t заданы формулой (3). Напомним (см., например, [19]), что каждая точка общего положения вида (a, b, c) группы вращений тетраэдра порождает 12 точек:

$$
\begin{array}{llll}
(a, b, c), & (a, -b, -c), & (-a, b, -c), & (-a, -b, c), \\
(c, a, b), & (c, -a, -b), & (-c, a, -b), & (-c, -a, b), \\
(b, c, a), & (b, -c, -a), & (-b, c, -a), & (-b, -c, a).
\end{array}
$$

Величины p_{ik}, q_{ik}, r_{ik} удовлетворяют уравнениям связи:

$$
p_{ik}^2 + q_{ik}^2 + r_{ik}^2 = 1. \qquad (4)
$$

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

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 $n+1$.

Пусть $\{Z_{kj}(x, y, z);\ k = 0, 1, \ldots, n;\ j = 1, 2, \ldots, 2k+1\}$ — 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; δ_{kl} — символ Кронекера. Отметим, что многочлены Z_{kj} связаны с обычными вещественными сферическими гармониками Y_{kj} соотношением $Z_{kj} = \sqrt{4\pi} Y_{kj}$.

Погрешностью кубатурной формулы (2) на многочленах степени k назовём величину [22]

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

Здесь величины $U(f)$ и $V(f)$ вычисляются по формулам (1) и (2), т. е. представляют собой точное и приближённое значения интеграла соответственно. При этом по определению $Z_{01} = U(Z_{01}) = 1$ и $U(Z_{kj}) = 0$ для всех $k \geq 1$.

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.

Целью данной работы является построение всех наилучших кубатурных формул вида (2) на сфере для $n \leq 79$. При этом наилучшей среди всех кубатурных формул этого вида, имеющих данный порядок n, мы будем считать ту, которая последовательно удовлетворяет четырём условиям (см. [22]):

1) узлы принадлежат области интегрирования,
2) веса положительны,
3) число узлов минимально,
4) главный член погрешности минимален.

Пусть строится кубатурная формула вида (2) для некоторого порядка n. Достаточно потребовать, чтобы эта формула была точна для всех многочленов вида $u^k v^l w^j$, где $k, l = 0, 1, \dots;$ $j = 0, 1;$ $6k + 10l + 15j \leq n;$

$$u = 5\big(Ax^2 - By^2\big)\big(Ay^2 - Bz^2\big)\big(Az^2 - Bx^2\big) + 1;$$

$$v = \Big(E(Cx^2 - Dy^2)(Cy^2 - Dz^2)(Cz^2 - Dx^2)\big(1 - 4(x^2y^2 + x^2z^2 + y^2z^2)\big) + 5u - 1\Big)/4;$$

$$w = E\big((Dx^2 + Cy^2 - z^2)^2 - 4x^2y^2\big)\big((Dy^2 + Cz^2 - x^2)^2 - 4y^2z^2\big)\big((Dz^2 + Cx^2 - y^2)^2 - 4x^2z^2\big)xyz;$$

$$A = (\sqrt{5} + 1)/2; \quad B = (\sqrt{5} - 1)/2; \quad C = B^2; \quad D = A^2; \quad E = 25\sqrt{5}.$$

Тогда для всех других многочленов степени не выше n наша формула будет точна автоматически [24]. Здесь базисные формы u, v и w являются многочленами степеней 6, 10 и 15 соответственно и связаны уравнением

$$w^2 = -16v^2 + 40u^2v - 25u^4 + 20uv^2 - 45u^3v + 27u^5 - v^3. \tag{5}$$

Параметрами кубатурной формулы (2) являются веса A_0, B_0, C_0, A_i и координаты p_{i1}, q_{i1}, r_{i1} узлов a_{ij}. С учётом уравнений связи (4) 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: 12 узлов a_{0j}, 20 узлов b_{0j} или a_{ij}, 30 узлов c_{0j}.

Обозначим общее число базисных многочленов степени не выше n через m. Поскольку общее число свободных параметров в кубатурной формуле 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} и a_{ij} и лишь в последнюю очередь — узлы c_{0j}.

Возможны три случая:

1) $m = 3M$, полагаем в (2) $A_0 = B_0 = C_0 = 0$, число узлов $N = 60M$;

2) $m = 3M + 1$, полагаем в (2) $B_0 = C_0 = 0$, $N = 60M + 12$;

3) $m = 3M + 2$, полагаем в (2) $C_0 = 0$, $N = 60M + 32$.

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 расчётов говорит о том, что в случаях 2) и 3) эта гипотеза всегда верна, а в случае 1) для $n = 11$, 17, 25, 29, 31, 34, 41 нужно положить $m = 3M + 3$ и $A_0, B_0, C_0 > 0$, получая при этом число узлов $N = 60M + 62$.

При выполнении практических расчётов с целью определения параметров конкретных кубатур удобнее использовать не параметры p_{i1}, q_{i1}, r_{i1}, а параметры u_i, v_i, w_i, которые равны соответственно значениям функций u, v, w в узлах a_{ij}. Уравнения связей (5), налагаемых на параметры каждой из M групп точек a_{ij}, не будем разрешать явно, а добавим их к исходной системе m уравнений, появляющихся после подстановки всех базисных функций на место f в формулу (2). Таким образом, получается система $m + M$ уравнений, определяющих параметры нашей кубатуры. Решив эту систему, получим M наборов параметров u_i, v_i, w_i. Для определения координат p_{i1}, q_{i1}, r_{i1} через найденные величины u_i, v_i, w_i можно использовать алгоритм из [24].

Заметим, что в узлах a_{0j} $u = v = w = 0$, в узлах b_{0j} $u = 32/27$, $v = 256/81$, $w = 0$, в узлах c_{0j} $u = v = 1$, $w = 0$.

Отметим также, что введённая выше величина E_k не зависит от конкретного выбора базисных многочленов Z_{kj}. В частности, если кубатурная формула инвариантна относительно некоторой группы симметрии, то в качестве базиса можно использовать многочлены, инвариантные относительно этой группы или любой её подгруппы. Например, в случае группы вращений икосаэдра Y и группы вращений икосаэдра с инверсией Y_h (обозначения групп взяты из [36]) первые ортонормированные базисные многочлены имеют вид:

$$
\begin{aligned}
f_1 &= 1, \\
f_2 &= \sqrt{143}(16 - 21u)/80, \\
f_3 &= \sqrt{1729}(128 - 440u + 187v)/3200, \\
f_4 &= 3\sqrt{595}(1024 - 4992u - 988v + 5681u^2)/25600.
\end{aligned}
$$

3. Построение конкретных кубатур

С целью полноты изложения приведём параметры всех наилучших на сегодняшний день кубатур группы Y до $n \leq 30$.

Кубатура $n = 5$, $m = 1$, $N = 12$, $M = 0$, $A_0 = 1/12$, $B_0 = C_0 = 0$.

Эта формула имеет симметрию группы Y_h и впервые была получена в [37], где она использовалась с целью построения минимальной кубатурной формулы пятого порядка точности для единичного шара. Главный член погрешности данной кубатуры находим с использованием функции f_2: $E_{n+1} = E_6 = |V(f_2)| = \sqrt{143}/5$.

Для сравнения, кубатура $n = 5$, $N = 20$, $B_0 = 1/20$, $A_0 = C_0 = 0$ имеет $E_{n+1} = \sqrt{143}/9$, а кубатура $n = 5$, $N = 30$, $C_0 = 1/30$, $A_0 = B_0 = 0$ имеет $E_{n+1} = \sqrt{143}/16$.

Кубатура $n = 9$, $m = 2$, $N = 32$, $M = 0$, $A_0 = 5/168$, $B_0 = 9/280$, $C_0 = 0$.

Формула имеет симметрию группы Y_h и впервые получена в [38]. Здесь $E_{n+1} = E_{10} = |V(f_3)| = 17\sqrt{1729}/315$.

Кубатура $n = 11$, $m = 3$, $N = 62$, $M = 0$, $A_0 = 125/5544$, $B_0 = 27/3080$, $C_0 = 64/3465$, группа Y_h [9]. Здесь $E_{n+1} = E_{12} = |V(f_4)| = 437\sqrt{595}/5544$.

Кубатура $n = 14$, $m = 4$, $N = 72$, $M = 1$, $B_0 = C_0 = 0$.

Поочерёдно подставляя в (2) четыре базисные функции, получим систему:

$$\begin{aligned} V(1) &= 12A_0 + 60A_1 = 1, \\ V(u) &= 60A_1u_1 = 16/21, \\ V(v) &= 60A_1v_1 = 256/231, \\ V(u^2) &= 60A_1u_1^2 = 2048/3003. \end{aligned}$$

Решая эту систему аналитически, находим

$$A_0 = 25/2016, \quad A_1 = 143/10080, \quad u_1 = 128/143, \quad v_1 = 2048/1573.$$

Вычисляя затем величину w_1^2 из уравнения связи (5) и полагая $w_1 > 0$, найдём с помощью алгоритма из [24] координаты узлов общего положения:

$$p_{11} = 0.7622217572862380, \quad q_{11} = 0.5015477117589746, \quad r_{11} = 0.4092284026663055.$$

Формула имеет симметрию группы Y и впервые была получена другим методом в [9].

Кубатура $n = 15$, $m = 5$, $N = 92$, $M = 1$, $C_0 = 0$.

Подставляя в (2) пять базисных функций и добавляя уравнение связи, получим систему:

$$\begin{aligned} V(1) &= 12A_0 + 20B_0 + 60A_1 = 1, \\ V(u) &= 20B_0u_0 + 60A_1u_1 = 16/21, \\ V(v) &= 20B_0v_0 + 60A_1v_1 = 256/231, \\ V(u^2) &= 20B_0u_0^2 + 60A_1u_1^2 = 2048/3003, \\ V(w) &= 60A_1w_1 = 0, \\ w_1^2 &= -16v_1^2 + 40u_1^2v_1 - 25u_1^4 + 20u_1v_1^2 - 45u_1^3v_1 + 27u_1^5 - v_1^3 = 0, \end{aligned}$$

где $u_0 = 32/27$, $v_0 = 256/81$. Решая эту систему аналитически, находим

$$\begin{gathered} A_0 = 25(35 - 2h)/72072, \quad B_0 = 243(2h - 9)/40040, \quad A_1 = (2923 - 352h)/90090, \\ u_1 = 16/(127 - 5h)/2197, \quad v_1 = 64(9437 - 1150h)/371293, \quad w_1 = 0, \quad h = \sqrt{30}. \end{gathered}$$

Далее находим

$$p_{11}^2 = \left(13 + \sqrt{101 + 8h}\right)/26, \quad q_{11}^2 = 1 - p_{11}^2, \quad r_{11} = 0.$$

Формула имеет симметрию группы Y_h и впервые была получена другим методом в [14].

Кубатура $n = 17$, $m = 6$, $N = 122$, $M = 1$.

Подставляя в (2) шесть базисных функций и добавляя уравнение связи, получим систему:

$$\begin{aligned}
V(1) &= 12A_0 + 20B_0 + 30C_0 + 60A_1 = 1,\\
V(u) &= 20B_0u_0 + 30C_0 + 60A_1u_1 = 16/21,\\
V(v) &= 20B_0v_0 + 30C_0 + 60A_1v_1 = 256/231,\\
V(u^2) &= 20B_0u_0^2 + 30C_0 + 60A_1u_1^2 = 2048/3003,\\
V(w) &= 60A_1w_1 = 0,\\
V(uv) &= 20B_0u_0v_0 + 30C_0 + 60A_1u_1v_1 = 18432/17017,
\end{aligned}$$
$$w_1^2 = -16v_1^2 + 40u_1^2v_1 - 25u_1^4 + 20u_1v_1^2 - 45u_1^3v_1 + 27u_1^5 - v_1^3 = 0,$$

где $u_0 = 32/27$, $v_0 = 256/81$. Решая эту систему аналитически, находим

$$A_0 = 25(31 - 2h)/72072, \quad B_0 = 729(69 - 2h)/5005000,$$
$$C_0 = 1024(10 - h)/495495, \quad A_1 = 4913(21 + 32h)/123873750,$$
$$u_1 = 16/(17 - h)/289, \quad v_1 = 64(85 - 6h)/4913, \quad w_1 = 0, \quad h = \sqrt{34}.$$

Далее находим

$$p_{11}^2 = \left(85 - \sqrt{85(49 - 8h)}\right)/170, \quad q_{11}^2 = 1 - p_{11}^2, \quad r_{11} = 0.$$

Эта формула также имеет симметрию группы Y_h и впервые была получена в [14].

Параметры наилучших кубатурных формул для $n = 19, 20, 21, 23, 24, 25$ были даны с 16-ю значащими цифрами в [24].

Кубатура $n = 26$, $m = 13$, $N = 252$, $M = 4$, $B_0 = C_0 = 0$.

Решая систему из $m + M = 17$ уравнений численно, находим

$$\begin{aligned}
A_0 &= 0.4063543170465065E-2, & & \\
A_1 &= 0.3204875410998668E-2, & p_{11} &= 0.6531475329764979E+0,\\
A_2 &= 0.3991452503256757E-2, & p_{21} &= 0.6747080226289221E+0,\\
A_3 &= 0.4166584203865203E-2, & p_{31} &= 0.7779669962029713E+0,\\
A_4 &= 0.4491045914453026E-2, & p_{41} &= 0.8251344913596405E+0,\\
q_{11} &= 0.5829361436113491E+0, & r_{11} &= 0.4833050306361844E+0,\\
q_{21} &= 0.3100630001143346E+0, & r_{21} &= 0.6697984922051319E+0,\\
q_{31} &= 0.4206827334614775E+0, & r_{31} &= 0.4666833943760004E+0,\\
q_{41} &= 0.5129136844968863E+0, & r_{41} &= 0.2367965865980673E+0.
\end{aligned}$$

Кубатура $n = 27$, $m = 14$, $N = 272$, $M = 4$, $C_0 = 0$.
Решая систему из $m + M = 18$ уравнений численно, находим

$$
\begin{aligned}
A_0 &= 0.2724879579393313E-2, & B_0 &= 0.3790219990490691E-2,\\
A_1 &= 0.3474505159641419E-2, & p_{11} &= 0.7274711516190413E+0,\\
A_2 &= 0.3764632847586404E-2, & p_{21} &= 0.5599497463803127E+0,\\
A_3 &= 0.3778376451469264E-2, & p_{31} &= 0.9811565098218946E+0,\\
A_4 &= 0.3840769628594019E-2, & p_{41} &= 0.1233646970486374E+0,\\
q_{11} &= 0.6861382685450986E+0, & r_{11} &= 0.0000000000000000E+0,\\
q_{21} &= 0.8285265726146769E+0, & r_{21} &= 0.0000000000000000E+0,\\
q_{31} &= 0.1932146558471132E+0, & r_{31} &= 0.0000000000000000E+0,\\
q_{41} &= 0.9923614016688164E+0, & r_{41} &= 0.0000000000000000E+0.
\end{aligned}
$$

Формула имеет симметрию группы Y_h и впервые была получена другим методом в [16].
Кубатура $n = 29$, $m = 15$, $N = 302$, $M = 4$.
Решая систему из 19 уравнений, находим

$$
\begin{aligned}
A_0 &= 0.2744849099832559E-2, & &\\
B_0 &= 0.3134137323853652E-3, & C_0 &= 0.3679832504446723E-2,\\
A_1 &= 0.3358621595462693E-2, & p_{11} &= 0.8264286120933069E+0,\\
A_2 &= 0.3587990054719393E-2, & p_{21} &= 0.6537920858861934E+0,\\
A_3 &= 0.3609544296218016E-2, & p_{31} &= 0.6823426734828434E+0,\\
A_4 &= 0.3617153403948236E-2, & p_{41} &= 0.7618129057020822E+0,\\
q_{11} &= 0.5266206912058633E+0, & r_{11} &= 0.1992144490427067E+0,\\
q_{21} &= 0.4648920050346428E+0, & r_{21} &= 0.5970187032978530E+0,\\
q_{31} &= 0.2632576743476313E+0, & r_{31} &= 0.6819852438589579E+0,\\
q_{41} &= 0.5062684114369065E+0, & r_{41} &= 0.4041452613688568E+0.
\end{aligned}
$$

Кубатура $n = 30$, $m = 17$, $N = 332$, $M = 5$, $C_0 = 0$.
Решая систему из 22 уравнений, находим

$$
\begin{aligned}
A_0 &= 0.2938859961036226E-2, & B_0 &= 0.2553716372125940E-2,\\
A_1 &= 0.2363206383508575E-2, & p_{11} &= 0.8046180280973212E+0,\\
A_2 &= 0.2997957261437185E-2, & p_{21} &= 0.6778528049435010E+0,\\
A_3 &= 0.3251754432496857E-2, & p_{31} &= 0.6913517856304390E+0,\\
A_4 &= 0.3303374960009372E-2, & p_{41} &= 0.7418103836031037E+0,\\
A_5 &= 0.3311362846298786E-2, & p_{51} &= 0.8211148564789479E+0,\\
q_{11} &= 0.3736640674189086E+0, & r_{11} &= 0.4614813036090798E+0,\\
q_{21} &= 0.4358650599719881E+0, & r_{21} &= 0.5920618416397422E+0,\\
q_{31} &= 0.2427268522483337E+0, & r_{31} &= 0.6805265488599391E+0,\\
q_{41} &= 0.5389902625461072E+0, & r_{41} &= 0.3990073328387519E+0,\\
q_{51} &= 0.5341123281539041E+0, & r_{51} &= 0.2012322374361847E+0.
\end{aligned}
$$

Поиск наилучших кубатурных формул проводился с использованием арифметики повышенной точности (более 30 десятичных знаков в мантиссе) на вычислительной технике Сибирского суперкомпьютерного центра.

Системы нелинейных алгебраических уравнений решались численным методом ньютоновского типа [39] с оценкой числа обусловленности матрицы Якоби по формуле $\mathrm{cond} = s_{\max}/s_{\min}$, где $s_{\max}$ и $s_{\min}$ — максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы Якоби. Конечно, расчёты с использованием сингулярного разложения являются довольно дорогими, однако здесь нам легче контролировать точность вычислений.

Заметим, что прямое применение описанного в п. 2 базового алгоритма приводит для больших порядков точности n к сильному росту величины cond. Это в значительной степени связано с тем, что используемый там полиномиальный базис вида $u^k v^l$ приводит к плохо обусловленным системам уравнений. Поэтому, когда число cond становилось величиной порядка 10^{10}, мы проводили частичную ортогонализацию и дополнительную нормировку системы базисных функций с использованием функций вида f_2, f_3 и f_4, представленных в конце п. 2. В результате такой модификации базового алгоритма удалось добиться, что все полученные нами наилучшие кубатурные формулы до $n \le 79$ имеют величину $\mathrm{cond} < 10^{10}$.

Отметим, что во всех случаях для каждого конкретного n было получено конечное число решений и не было выявлено ни одного факта вырождения системы уравнений, когда число решений было бы бесконечно большим. Поэтому наш поиск наилучшего для данных n, N решения сводился к нахождению конечного числа изолированных решений с положительными весами и выбору среди них наилучшего по величине E_{n+1}.

Приведём теперь сводную таблицу, содержащую основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатурных формул группы Y до 79-го порядка точности.

В таблице L — ссылка на первоисточник, $\eta = (n+1)^2/(3N)$ — так называемый коэффициент эффективности (см., например, [9, 10]). Для кубатур с минимальным числом узлов величина $\eta \to 1$ при $n \to \infty$ (см. [10]).

Заметим, что указанные в этой таблице наилучшие кубатуры группы Y для $n = 5$, 9, 11, 15, 17, 27 имеют симметрию группы Y_h. Все остальные наилучшие кубатуры группы Y содержат меньшее число узлов по сравнению с наилучшими кубатурами группы Y_h (см. [28], где приведена таблица наилучших кубатур группы Y_h до $n \le 79$).

Из таблицы видно, что величина $\eta \to 1$ с ростом n. Видно также, что, в целом, с ростом n величина E_{n+1} убывает. По определению величина E_{n+1} характеризует степень близости данной кубатуры порядка n к кубатуре порядка $n+1$. В общем, число решений для наших систем уравнений растёт с ростом n. Для больших n число решений исчисляется многими десятками и даже сотнями. При этом типичное значение величины E_{n+1} — это число порядка 1. Например, для $n = 58$ наряду с наилучшей кубатурой с $E_{n+1} = 0.001$ существует кубатура с положительными весами, имеющая $E_{n+1} = 1.529$. Этот пример является весомым аргументом в пользу поиска кубатур с наименьшим значением E_{n+1}.

Отметим, что указанные в нашей таблице кубатуры для $n = 5$, 9, 14, 44, 74 являются наилучшими не только для группы вращений икосаэдра, но и вообще для всех групп симметрии.

Таблица.

n	m	N	η	E_{n+1}	L	n	m	N	η	E_{n+1}	L
5	1	12	1.0000	2.3917	[37]	48	41	812	0.9856	0.0150	[25]
9	2	32	1.0417	2.2441	[38]	49	42	840	0.9921	0.4980	[25]
11	3	62	0.7742	1.9227	[9]	50	44	872	0.9943	0.3864	[25]
14	4	72	1.0417	1.7836	[9]	51	46	912	0.9883	0.3084	[25]
15	5	92	0.9275	1.0509	[14]	52	48	960	0.9753	0.0054	[25]
17	6	122	0.8852	0.2648	[14]	53	49	972	1.0000	0.0080	[25]
19	7	132	1.0101	1.0089	[24]	54	51	1020	0.9886	0.2952	[25]
20	8	152	0.9671	1.6145	[24]	55	53	1052	0.9937	0.0156	[25]
21	9	180	0.8963	1.2032	[24]	56	55	1092	0.9918	0.0186	[25]
23	10	192	1.0000	0.3349	[24]	57	57	1140	0.9836	0.0230	[25]
24	11	212	0.9827	0.5485	[24]	58	59	1172	0.9900	0.0010	[25]
25	12	242	0.9311	1.0967	[24]	59	60	1200	1.0000	0.5004	[25]
26	13	252	0.9643	1.5314	[24]	60	63	1260	0.9844	0.1180	[25]
27	14	272	0.9608	0.2190	[16]	61	65	1292	0.9917	0.0118	[25]
29	15	302	0.9934	1.1631	[24]	62	67	1332	0.9932	0.0134	[25]
30	17	332	0.9649	1.4269	[24]	63	69	1380	0.9894	0.0016	[25]
31	18	362	0.9429	0.4119	[24]	64	71	1412	0.9974	0.0391	[25]
32	19	372	0.9758	0.0957	[24]	65	73	1452	1.0000	0.2664	[25]
33	20	392	0.9830	0.0371	[24]	66	76	1512	0.9896	0.0090	
34	21	422	0.9676	0.7008	[24]	67	78	1560	0.9880	0.0206	
35	22	432	1.0000	1.2290	[24]	68	80	1592	0.9969	0.0055	
36	24	480	0.9507	0.4429	[25]	69	82	1632	1.0008	0.0504	
37	25	492	0.9783	0.0152	[25]	70	85	1692	0.9931	0.0290	
38	26	512	0.9902	0.1437	[25]	71	87	1740	0.9931	0.3144	
39	27	540	0.9877	1.4490	[25]	72	90	1800	0.9869	0.0100	
40	29	572	0.9796	0.2405	[25]	73	92	1832	0.9964	0.0016	
41	30	602	0.9767	1.2918	[25]	74	94	1872	1.0016	0.1293	
42	32	632	0.9752	0.0228	[25]	75	97	1932	0.9965	0.0430	
43	33	660	0.9778	0.4470	[25]	76	100	1992	0.9921	0.0095	
44	34	672	1.0045	0.2250	[25]	77	102	2040	0.9941	0.0285	
45	36	720	0.9796	0.6490	[25]	78	105	2100	0.9906	0.0147	
46	38	752	0.9792	0.2963	[25]	79	107	2132	1.0006	0.0229	
47	39	780	0.9846	0.2342	[25]						

4. Заключение

Целью данной работы являлось построение всех наилучших (по некоторому критерию) кубатурных формул на сфере до 79-го порядка точности, инвариантных относительно группы вращений икосаэдра. Для достижения этой цели была проведена модификация использованного ранее в работах [24, 25] базового алгоритма. В результате удалось избежать чрезмерного роста числа обусловленности матрицы Якоби для высоких порядков точности.

В работе даны параметры (значения весов и координаты узлов) всех наилучших кубатурных формул группы вращений икосаэдра до 30-го порядка точности. Кроме того, приведена таблица, содержащая основные характеристики всех наилучших на сегодняшний день кубатур данного вида симметрии до 79-го порядка точности.

Литература

1. **Haxton D.J.** Lebedev discrete variable representation // J. of Physics. Ser. B. — 2007. — Vol. 40, № 23. — P. 4443–4451.

2. **Shadmehri S., Saeidian S., Melezhik V.S.** 2D nondirect product discrete variable representation for Schrödinger equation with nonseparable angular variables // J. of Physics. Ser. B. — 2020. — Vol. 53, № 8. — P. 085001–085011.

3. **Becke A.D.** A multicenter numerical integration scheme for polyatomic molecules // J. of Chemical Physics. — 1988. — Vol. 88, № 4. — P. 2547–2553.

4. **Laikov D.N.** Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // Chemical Physics Letters. — 1997. — Vol. 281, № 2. — P. 151–156.

5. **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.

6. **Ahrens C., Beylkin G.** Rotationally invariant quadratures for the sphere // Proc. of the Royal Society. Ser. A. — 2009. — Vol. 465, № 2110. — P. 3103–3125.

7. **Соболев С.Л.** О кубатурных формулах на сфере, инвариантных при преобразованиях конечных групп вращений // Докл. АН СССР. — 1962. — Т. 146, № 2. — С. 310–313. Перевод: Sobolev S.L. Cubature formulas on the sphere invariant under finite groups of rotations // Soviet Mathematics Doklady. — 1962. — Vol. 3. — P. 1307–1310.

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

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

10. **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. Перевод: Lebedev V.I. Values of the nodes and weights of ninth to seventeenth order Gauss–Markov quadrature formulae invariant under the octahedron group with inversion // USSR Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1975. — Vol. 15, № 1. — P. 44–51.

11. **Лебедев В.И.** О квадратурах на сфере // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1976. — Т. 16, № 2. — С. 293–306. Перевод: Lebedev V.I. Quadratures on a sphere // USSR Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1976. — Vol. 16, № 2. — P. 10–24.

12. **Лебедев В.И.** Квадратурные формулы для сферы 25–29-го порядка точности // Сиб. мат. журнал. — 1977. — Т. 18, № 1. — С. 132–142. Перевод: Lebedev V.I. Spherical quadrature formulas exact to orders 25–29 // Siberian Mathematical Journal. — 1977. — Vol. 18, № 1. — P. 99–107.

13. **Лебедев В.И., Лайков Д.Н.** Квадратурная формула для сферы 131-го алгебраического порядка точности // Докл. РАН. — 1999. — Т. 366, № 6. — С. 741–745. Перевод: Lebedev V.I., Laikov D.N. A quadrature formula for the sphere of the 131st algebraic order of accuracy // Doklady Mathematics. — 1999. — Vol. 59, № 3. — P. 477–481.

14. **Коняев С.И.** Квадратурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы икосаэдра. — Москва, 1975. — (Препринт / Ин-т атомной энергии АН СССР; ИАЭ-2516).

15. **Коняев С.И.** Квадратуры типа Гаусса для сферы, инвариантные относительно группы икосаэдра с инверсией // Матем. заметки. — 1979. — Т. 25, № 4. — С. 629–634. Перевод: Konyaev S.I. Quadratures of Gaussian type for a sphere invariant under the icosahedral group with inversion // Mathematical notes of the Academy of Sciences of the USSR. — 1979. — Vol. 25. — P. 326–329.

16. **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.

17. **Коняев С.И.** Квадратурные формулы для сферы 23 и 27 порядков, инвариантные относительно группы икосаэдра с инверсией. — Москва, 1990. — (Препринт / Ин-т атомной энергии АН СССР; ИАЭ-5072/16).

18. **Мысовских И.П.** Интерполяционные кубатурные формулы. — М.: Наука, 1981.

19. **Попов А.С.** Кубатурные формулы для сферы, инвариантные относительно группы тетраэдра // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1995. — Т. 35, № 3. — С. 459–466. Перевод: Popov A.S. Cubature formulae for a sphere which are invariant with respect to the tetrahedral group // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1995. — Vol. 35, № 3. — P. 369–374.

20. **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. Перевод: Popov A.S. Cubature formulae of high orders of accuracy for a sphere which are invariant with respect to the tetrahedral group // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1996. — Vol. 36, № 4. — P. 417–421.

21. **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. Перевод: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to octahedron rotation groups // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1998. — Vol. 38, № 1. — P. 30–37.

22. **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.

23. **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.

24. **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. Перевод: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere invariant under the icosahedral rotation group // Numerical Analysis and Applications. — 2008. — Vol. 1, № 4. — P. 355–361.

25. **Попов А.С.** Новые кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений икосаэдра // Кубатурные формулы и их приложения / Материалы 10-го международного семинара-совещания. — Улан-Удэ, 2009. — С. 111–118.

26. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы тетраэдра с инверсией // Сибирские электронные математические известия. — 2014. — Т. 11. — С. 372–379.

27. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно групп симметрии правильных многогранников // Сибирские электронные математические известия. — 2017. — Т. 14. — С. 190–198.

28. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений икосаэдра с инверсией // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2017. — Т. 20, № 4. — С. 413–423. Перевод: Popov A.S. Cubature formulas invariant under the icosahedral group of rotations with inversion on a sphere // Numerical Analysis and Applications. — 2017. — Vol. 10, № 4. — P. 339–346.

29. **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. Перевод: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to a group of dihedron rotations with inversion D_{6h} // Numerical Analysis and Applications. — 2013. — Vol. 6, № 1. — P. 49–53.

30. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{4h} // Сибирские электронные математические известия. — 2015. — Т. 12. — С. 457–464.

31. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы диэдра D_{2h} // Сибирские электронные математические известия. — 2016. — Т. 13. — С. 252–259.

32. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно группы вращений диэдра с инверсией D_{5d} // Сибирские электронные математические известия. — 2018. — Т. 15. — С. 389–396.

33. **Попов А.С.** Кубатурные формулы на сфере, инвариантные относительно преобразований группы вращений диэдра с инверсией D_{3d} // Сибирские электронные математические известия. — 2019. — Т. 16. — С. 1196–1204.

34. **Popov A.S.** Cubature formulas on the sphere that are invariant under the transformations of the dihedral group of rotations D_4 // Siberian Electronic Mathematical Reports. — 2020. — Vol. 17. — P. 964–970.

35. **Popov A.S.** Cubature formulas on the sphere that are invariant under the transformations of the dihedral groups of rotations with inversion // Siberian Electronic Mathematical Reports. — 2021. — Vol. 18, № 1. — P. 703–709.

36. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: Наука, 1974. Перевод: Landau L.D., Lifshitz E.M. Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory). — Oxford, New York, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt: Pergamon Press, 1977.

37. **Диткин В.А.** О некоторых приближенных формулах для вычисления трехкратных интегралов // Докл. АН СССР. — 1948. — Т. 62, № 4. — С. 445–447.

38. **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.

39. **Дэннис Дж., Шнабель Р.** Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. — М.: Мир, 1988. Перевод: Dennis Jr. J.E., Schnabel R.B. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. — New Jersey, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1983.

Поступила в редакцию 12 мая 2023 г.
После исправления 06 июня 2023 г.
Принята к печати 05 сентября 2023 г.

Литература в транслитерации

1. **Haxton D.J.** Lebedev discrete variable representation // J. of Physics. Ser. B. — 2007. — Vol. 40, № 23. — P. 4443–4451.

2. **Shadmehri S., Saeidian S., Melezhik V.S.** 2D nondirect product discrete variable representation for Schrödinger equation with nonseparable angular variables // J. of Physics. Ser. B. — 2020. — Vol. 53, № 8. — P. 085001–085011.

3. **Becke A.D.** A multicenter numerical integration scheme for polyatomic molecules // J. of Chemical Physics. — 1988. — Vol. 88, № 4. — P. 2547–2553.

4. **Laikov D.N.** Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // Chemical Physics Letters. — 1997. — Vol. 281, № 2. — P. 151–156.

5. **Kazakov A.N., Lebedev V.I.** Kvadraturnye formuly tipa Gaussa dlya sfery, invariantnye otnositel'no gruppy diedra // Tr. MIRAN. — M.: Nauka, 1994. — T. 203. — S. 100–112.

6. **Ahrens C., Beylkin G.** Rotationally invariant quadratures for the sphere // Proc. of the Royal Society. Ser. A. — 2009. — Vol. 465, № 2110. — P. 3103–3125.

7. **Sobolev S.L.** O kubaturnykh formulakh na sfere, invariantnykh pri preobrazovaniyakh konechnykh grupp vraschenii // Dokl. AN SSSR. — 1962. — T. 146, № 2. — S. 310–313. Perevod: Sobolev S.L. Cubature formulas on the sphere invariant under finite groups of rotations // Soviet Mathematics Doklady. — 1962. — Vol. 3. — P. 1307–1310.

8. **Sobolev S.L.** O formulakh mekhanicheskikh kubatur na poverkhnosti sfery // Sib. mat. zhurnal. — 1962. — T. 3, № 5. — S. 769–796.
9. **McLaren A.D.** Optimal numerical integration on a sphere // Math. Comput. — 1963. — Vol. 17, № 83. — P. 361–383.
10. **Lebedev V.I.** Znacheniya uzlov i vesov kvadraturnykh formul tipa Gaussa–Markova dlya sfery ot 9-go do 17-go poryadka tochnosti, invariantnykh otnositel'no gruppy oktaedra s inversiei // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1975. — T. 15, № 1. — S. 48–54. Perevod: Lebedev V.I. Values of the nodes and weights of ninth to seventeenth order Gauss–Markov quadrature formulae invariant under the octahedron group with inversion // USSR Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1975. — Vol. 15, № 1. — P. 44–51.
11. **Lebedev V.I.** O kvadraturakh na sfere // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1976. — T. 16, № 2. — S. 293–306. Perevod: Lebedev V.I. Quadratures on a sphere // USSR Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1976. — Vol. 16, № 2. — P. 10–24.
12. **Lebedev V.I.** Kvadraturnye formuly dlya sfery 25–29-go poryadka tochnosti // Sib. mat. zhurnal. — 1977. — T. 18, № 1. — S. 132–142. Perevod: Lebedev V.I. Spherical quadrature formulas exact to orders 25–29 // Siberian Mathematical Journal. — 1977. — Vol. 18, № 1. — P. 99–107.
13. **Lebedev V.I., Laikov D.N.** Kvadraturnaya formula dlya sfery 131-go algebraicheskogo poryadka tochnosti // Dokl. RAH. — 1999. — T. 366, № 6. — S. 741–745. Perevod: Lebedev V.I., Laikov D.N. A quadrature formula for the sphere of the 131st algebraic order of accuracy // Doklady Mathematics. — 1999. — Vol. 59, № 3. — P. 477–481.
14. **Konyaev S.I.** Kvadraturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy ikosaedra. — Moskva, 1975. — (Preprint / In-t atomnoi energii AN SSSR; IAE-2516).
15. **Konyaev S.I.** Kvadratury tipa Gaussa dlya sfery, invariantnye otnositel'no gruppy ikosaedra s inversiei // Matem. zametki. — 1979. — T. 25, № 4. — S. 629–634. Perevod: Konyaev S.I. Quadratures of Gaussian type for a sphere invariant under the icosahedral group with inversion // Mathematical notes of the Academy of Sciences of the USSR. — 1979. — Vol. 25. — P. 326–329.
16. **Konyaev S.I.** Formuly chislennogo integrirovaniya na sfere // Teoremy vlozheniya i ikh prilozheniya / Tr. seminara akad. S.L. Soboleva. — Novosibirsk, 1982. — № 1. — S. 75–82.
17. **Konyaev S.I.** Kvadraturnye formuly dlya sfery 23 i 27 poryadkov, invariantnye otnositel'no gruppy ikosaedra s inversiei. — Moskva, 1990. — (Preprint / In-t atomnoi energii AN SSSR; IAE-5072/16).
18. **Mysovskikh I.P.** Interpolyatsionnye kubaturnye formuly. — M.: Nauka, 1981.
19. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly dlya sfery, invariantnye otnositel'no gruppy tetraedra // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1995. — T. 35, № 3. — S. 459–466. Perevod: Popov A.S. Cubature formulae for a sphere which are invariant with respect to the tetrahedral group // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1995. — Vol. 35, № 3. — P. 369–374.
20. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly vysokikh poryadkov tochnosti dlya sfery, invariantnye otnositel'no gruppy tetraedra // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1996. — T. 36, № 4. — S. 5–9. Perevod: Popov A.S. Cubature formulae of high orders of accuracy for a sphere which are invariant with respect to the tetrahedral group // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1996. — Vol. 36, № 4. — P. 417–421.
21. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii oktaedra // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1998. — T. 38, № 1. — S. 34–41. Perevod: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to octahedron rotation groups // Comput. Mathem. and Math. Physics. — 1998. — Vol. 38, № 1. — P. 30–37.
22. **Popov A.S.** Poisk nailuchshikh kubaturnykh formul dlya sfery, invariantnykh otnositel'no gruppy vraschenii oktaedra // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2002. — T. 5, № 4. — S. 367–372.

23. **Popov A.S.** Poisk nailuchshikh kubaturnykh formul dlya sfery, invariantnykh otnositel'no gruppy vraschenii oktaedra s inversiei // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2005.— T. 8, № 2.— S. 143–148.

24. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii ikosaedra // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2008.— T. 11, № 4.— S. 433–440. Perevod: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere invariant under the icosahedral rotation group // Numerical Analysis and Applications.— 2008.— Vol. 1, № 4.— P. 355–361.

25. **Popov A.S.** Novye kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii ikosaedra // Kubaturnye formuly i ikh prilozheniya / Materialy 10-go mezhdunarodnogo seminara-soveschaniya.— Ulan-Ude, 2009.— S. 111–118.

26. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy tetraedra s inversiei // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2014.— T. 11.— S. 372–379.

27. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no grupp simmetrii pravil'nykh mnogogrannikov // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2017.— T. 14.— S. 190–198.

28. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii ikosaedra s inversiei // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2017.— T. 20, № 4.— S. 413–423. Perevod: Popov A.S. Cubature formulas invariant under the icosahedral group of rotations with inversion on a sphere // Numerical Analysis and Applications.— 2017.— Vol. 10, № 4.— P. 339–346.

29. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii diedra s inversiei D_{6h} // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2013.— T. 16, № 1.— S. 57–62. Perevod: Popov A.S. Cubature formulas on a sphere that are invariant with respect to a group of dihedron rotations with inversion D_{6h} // Numerical Analysis and Applications.— 2013.— Vol. 6, № 1.— P. 49–53.

30. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii diedra s inversiei D_{4h} // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2015.— T. 12.— S. 457–464.

31. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy diedra D_{2h} // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2016.— T. 13.— S. 252–259.

32. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no gruppy vraschenii diedra s inversiei D_{5d} // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2018.— T. 15.— S. 389–396.

33. **Popov A.S.** Kubaturnye formuly na sfere, invariantnye otnositel'no preobrazovanii gruppy vraschenii diedra s inversiei D_{3d} // Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya.— 2019.— T. 16.— S. 1196–1204.

34. **Popov A.S.** Cubature formulas on the sphere that are invariant under the transformations of the dihedral group of rotations D_4 // Siberian Electronic Mathematical Reports.— 2020.— Vol. 17.— P. 964–970.

35. **Popov A.S.** Cubature formulas on the sphere that are invariant under the transformations of the dihedral groups of rotations with inversion // Siberian Electronic Mathematical Reports.— 2021.— Vol. 18, № 1.— P. 703–709.

36. **Landau L.D., Lifshits E.M.** Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya).— M.: Nauka, 1974. Perevod: Landau L.D., Lifshitz E.M. Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory).— Oxford, New York, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt: Pergamon Press, 1977.

37. **Ditkin V.A.** O nekotorykh priblizhennykh formulakh dlya vychisleniya trekhkratnykh integralov // Dokl. AN SSSR.— 1948.— T. 62, № 4.— S. 445–447.

38. **Ditkin V.A., Lyusternik L.A.** Ob odnom prieme prakticheskogo garmonicheskogo analiza na sfere // Vychisl. matematika i vychisl. tekhnika.— M.: Mashgiz, 1953.— № 1.— S. 3–13.

39. **Dennis Dzh., Shnabel' R.** Chislennye metody bezuslovnoi optimizatsii i resheniya nelineinykh uravnenii. — M.: Mir, 1988. Perevod: Dennis Jr. J.E., Schnabel R.B. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. — New Jersey, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1983.