

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра Компьютерной алгебры и теории чисел

**Симметрическая проблема собственных значений и сингулярное  
разложение**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 421 группы

направление 02.03.01 — Прикладная информатика

механико-математического факультета

Дубяги Максима Павловича

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н.

Е. В. Коробченко

Зав. кафедрой

зав. каф., к.ф.-м.н., доцент

А. М. Водолазов

Саратов 2020

**Введение.** Предметом исследования является симметрическая проблема собственных значений и сингулярное разложение.

Задачи на собственное значения- это краевые задачи для системы ОДУ, в которой правые части зависят от одного или нескольких параметров. Сами эти параметры неизвестны; к тому же, решение краевой задачи существует только при определенных их значениях, которые называются собственными значениями краевой задачи. Решения, соответствующие этим собственным значениям, называются собственными функциями задачи.

Сингулярное разложение (Singular Values Decomposition, *SVD*) является удобным методом при работе с матрицами. Сингулярное разложение показывает геометрическую структуру матрицы и позволяет наглядно представить имеющиеся данные. Сингулярное разложение используется при решении самых разных задач- от приближения методом наименьших квадратов и решения систем уравнений до сжатия и распознавания изображений. Используются разные свойства сингулярного разложения, например, способность показывать ранг матрицы и приближать матрицы данного ранга. Так как вычисления ранга матрицы- задача, которая встречается очень часто, то сингулярное разложение является довольно популярным методом.

Симметричные задачи на собственные значения часто возникают при анализе систем на механические колебания. Для несимметричной проблемы единственным алгоритмом, позволяющим найти все собственные значения и при необходимости собственные вектора, является *QR*-итерация. Для симметричной проблемы собственных значений разработаны специальные алгоритмы, которые повышают эффективность вычисления. Одним из таких алгоритмов является метод Якоби, который является самым старейшим для проблемы собственных значений. Обычно он намного медленнее других методов, но в то же время подчас он дает гораздо более точные результаты, чем его более современные последователи.

Для начала проиллюстрируем задачи на собственные значения на примере анализа механических колебаний, затем рассмотрим сингулярное разложение и теорию возмущений. Закончим описанием метода Якоби для симметричной проблемы собственных значений и вычисления сингулярного разложения.

**Основное содержание работы.** Изучим основные понятия, рассмотрим симметрическую задачу на собственные значения и понятие сингулярного разложения.

Пусть  $k$  — основное поле и  $k[\lambda]$  — кольцо многочленов от неизвестного  $\lambda$ .

**Определение 1.**  $\lambda$  — матрицей (многочленной матрицей) над полем  $k$  называется матрица, элементами которой являются элементы кольца  $k[\lambda]$ , то есть многочлены от  $\lambda$  с коэффициентами из поля  $k$ .

**Определение 2.** Характеристической матрицей для квадратной скалярной матрицы  $A$  называется  $\lambda$  — матрица вида  $\lambda I - A$ , то есть

$$\lambda I - A = \begin{pmatrix} \lambda - \alpha_{11} & -\alpha_{12} & \dots & -\alpha_{1n} \\ -\alpha_{21} & \lambda - \alpha_{22} & \dots & -\alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\alpha_{n1} & -\alpha_{n2} & \dots & \lambda - \alpha_{nn} \end{pmatrix}.$$

**Определение 3.** Характеристическим многочленом для скалярной матрицы  $A$  называется определитель, порожденный характеристической матрицей для матрицы  $A$ .

Характеристический многочлен матрицы будем обозначать через  $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$ . Корни уравнения  $p(\lambda) = 0$  называются собственными значениями этой матрицы.

**Определение 4.** Характеристическими корнями (числами) матрицы называются все  $n$  — количество корней ее характеристического многочлена, лежащие, вообще говоря, в алгебраическом замыкании основного поля  $k$ .

**Определение 5.** Пусть  $A$  — квадратная числовая матрица, сопряженно транспонированной для матрицы  $A$  называется матрица  $A^* = \overline{A^T}$ , где  $A^T$  означает транспонирование, а  $\overline{A}$  замену матрицы комплексно сопряженными.

**Определение 6.** Ненулевой вектор  $x$ , удовлетворяющий условию  $Ax = \lambda x$ , называется правым собственным вектором, соответствующим собственному значению  $\lambda$ . Ненулевой вектор  $y$ , такой, что  $y^* A = \lambda y^*$ , называется левым собственным вектором.

**Теорема 1.** Для того, чтобы скаляр  $\lambda$  был собственным значением матрицы необходимо и достаточно, чтобы  $\lambda$  был характеристическим корнем матрицы, лежащим в основном поле.

В работе рассматривается ряд вспомогательных, но в то же время важных понятий.

**Определение 7.**  $\text{Span}(x)$ — множество всех скаляров кратных векторов вектора  $x$ .

**Определение 8.** Действительная (комплексная) квадратная матрица называется ортогональной (унитарной) если она взаимнообратна со своей сопряженно транспонированной матрицей  $A^*$ , то есть  $A^{-1} = A^*$ .

**Определение 9.** Симметричная матрица— это матрица, элементы которой симметричны относительно главной диагонали. Это означает, что она равна её транспонированной матрице:  $A = A^T$ .

**Определение 10.** Норма  $\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^*A)}$ . Символ  $\lambda_{\max}$  обозначает наибольшее собственное значение.

**Определение 11.** Два вектора  $a$  и  $b$  евклидова (унитарного) пространства называются ортогональными, если их скалярное произведение равно нулю, то есть  $(a; b) = 0$ .

**Определение 12.** Система векторов  $a_1, a_2, \dots, a_s$  евклидова (унитарного) пространства называется ортогональной, если векторы этой системы попарно ортогональны, то есть  $(\forall 1 \leq i, j \leq s, i \neq j) (a_i, a_j) = 0$ .

**Определение 13.** Система векторов  $e_1, e_2, \dots, e_s$  евклидова (унитарного) пространства называется ортонормированной, если эта система ортогональна и все векторы этой системы являются единичными.

**Определение 14.** Функция  $\|\cdot\|$  называется матричной нормой на множестве  $m \times n$ — матриц, если она является векторной нормой на соответствующем  $mn$ — мерном пространстве, то есть:

- 1)  $\|A\| \geq 0$  и  $\|A\| = 0$  тогда и только тогда, когда  $A = 0$ ,
- 2)  $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$ ,
- 3)  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ .

**Определение 15.** Пусть  $A$ —матрица размера  $m \times n$ , а  $\|\cdot\|_{\hat{m}}$  и  $\|\cdot\|_{\hat{n}}$ — векторные нормы на пространствах соответственно  $\mathbb{R}^m$  и  $\mathbb{R}^n$ . Тогда функция

$$\|A\|_{\hat{m}\hat{n}} = \max_{x \neq 0, x \in \mathbb{R}^n} \frac{\|Ax\|_{\hat{m}}}{\|x\|_{\hat{n}}}$$

называется операторной (или индуцированной, или подчиненной) нормой.

В работе изучается сингулярное разложение матрицы, как родственная задаче отыскания собственных значений.

**Определение 16.** Пусть  $A$  — матрица  $m \times n$ . Сингулярным разложением или  $SVD$  называется представление  $A = U \Sigma V^T$ , где матрица  $U$  имеет размер  $m \times n$  и удовлетворяет соотношению  $U^T U = I$ , матрица  $V$  — квадратная порядка  $n$  и удовлетворяет соотношению  $V^T V = I$ , а  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$  где  $\sigma_1 \leq \dots \leq \sigma_n \leq 0$ . Столбцы  $v_1, \dots, v_n$  матрицы  $V$  называются правыми сингулярными векторами, а величина  $\sigma_i$  называются сингулярными числами.

**Определение 17.** Спектральным разложением матрицы  $A$  называется представление  $A = U \Lambda U^T$ , здесь  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , где  $U = [u_1, \dots, u_n]$  и  $U U^T = I$ .

**Предложение 1.** В случае спектрального разложения матрицы  $SVD$  принимает вид  $A = U \Sigma V^T$ , где  $\sigma_i = |\lambda_i|$  и  $v_i = \text{sgn}(\lambda_i) u_i$ , причем  $\text{sgn}(0) = 1$ . Перейдем непосредственно к рассмотрению симметрической задачи на собственные значения.

В работе задача на отыскание собственных значений проиллюстрирована на примере анализа механических колебаний системы материальных точек без демпфирования. Также на этом примере рассматривается связь сингулярных чисел матрицы и ее собственных значений.

Рассмотрим рисунок 1, где изображена связанная система материальных точек без демпфирования.

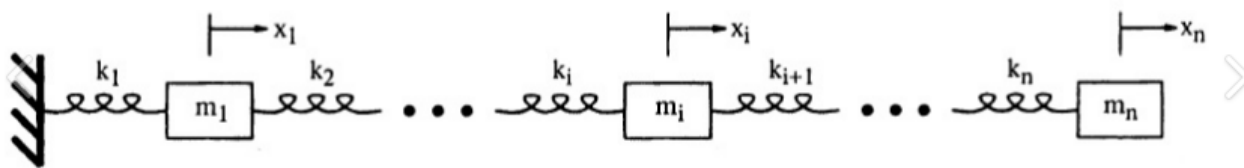


Рисунок 1 — Связная система материальных точек без демпфирования.

Тогда дифференциальное уравнение движения связанной системы принимает вид  $M \ddot{x}(t) = -K x(t)$ , где  $M = \text{diag}(m_1, \dots, m_n)$  и

$$K = \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 & & & & \\ -k_2 & k_2 + k_3 & -k_3 & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ & & -k_{n-1} & k_{n-1} + k_n & -k_n & \\ & & & -k_n & k_n & \end{bmatrix}.$$

Поскольку  $M$  – невырожденная матрица, уравнение можно переписать как  $\ddot{x}(t) = -M^{-1}Kx(t)$ . Разыскивая решения вида  $x(t) = e^{\gamma t}x(0)$ , получается  $e^{\gamma t}\gamma^2 x(0) = -M^{-1}Ke^{\gamma t}x(0)$ , или  $M^{-1}Kx(0) = -\gamma^2 x(0)$ . Иначе говоря,  $-\gamma^2$  есть собственное значение матрицы  $M^{-1}K$ , а  $x(0)$  – соответствующий собственный вектор.

В общем случае, матрица  $M^{-1}K$  не симметрична, однако можно симметризовать ее. Положим  $M^{1/2} = \text{diag}(m_1^{1/2}, \dots, m_n^{1/2})$  и умножим обе части соотношения  $M^{-1}Kx(0) = -\gamma^2 x(0)$  на  $M^{1/2}$ , таким образом, получаем:

$$M^{-1}Kx(0) = M^{-1}K(M^{-1/2}M^{1/2})x(0) = -\gamma^2 M^{1/2}x(0)$$

или  $\widehat{K}\hat{x} = -\gamma^2\hat{x}$ , где  $\hat{x} = M^{1/2}x(0)$  и  $\widehat{K} = M^{-1/2}KM^{-1/2}$ . Таким образом, матрица

$$\widehat{K} = \begin{bmatrix} \frac{k_1+k_2}{m_1} & \frac{-k_2}{\sqrt{m_1m_2}} & & & & \\ \frac{-k_2}{\sqrt{m_1m_2}} & \frac{k_2+k_3}{m_2} & \frac{-k_3}{\sqrt{m_2m_3}} & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ & & \frac{-k_{n-1}}{\sqrt{m_{n-2}m_{n-1}}} & \frac{k_{n-1}+k_n}{m_{n-1}} & \frac{-k_n}{\sqrt{m_{n-1}m_n}} & \\ & & & \frac{-k_n}{\sqrt{m_{n-1}m_n}} & \frac{k_n}{m_n} & \end{bmatrix}$$

симметрична, поэтому каждое ее собственное значение  $-\gamma^2$  вещественно. Матрица  $\widehat{K}$  – трехдиагональная. Заметим, что к ней можно привести любую симметричную матрицу.

Чтобы продолжить рассуждения, необходимо разобраться в сингулярном разложении матрицы

**Лемма 1.** Всякая операторная норма является матричной нормой.

**Лемма 2.** 1)  $\|A\|_2 \equiv \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\lambda_{\max}(A \cdot A)}$ . Здесь символ  $\lambda_{\max}$  обозначает наибольшее собственное значение.

2)  $\|A\|_2 = \max_i |\lambda_i(A)|$ , если  $A$  — нормальная матрица, то есть  $AA^* = A^*A$ .  
 Далее рассмотрим теорему о сингулярном разложении

**Теорема 2.** Для любой произвольной матрицы  $A$  размерности  $m \times n$ , причем  $M \leq n$  существует сингулярное разложение

$$A = \left( U \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \Sigma_1 \end{bmatrix} \left( V \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_1 \end{bmatrix} \right)^T,$$

допускающее геометрическую интерпретацию.

Будем рассматривать  $m \times m$  — матрицу  $A$  как линейный оператор, отображающий вектор  $x \in \mathbb{R}^m$  в вектор  $y = Ax \in \mathbb{R}^m$ . Тогда можно выбрать ортогональную координатную систему для  $\mathbb{R}^n$  (где ортами осей являются столбцы матрицы  $V$ ) и другую ортогональную координатную систему для  $\mathbb{R}^m$  (со столбцами матрицы  $U$  в качестве ортов осей) таким образом, чтобы  $A$  приобрела диагональный вид  $(\Sigma)$ , т.е. вектор  $x = \sum_{i=1}^n \beta_i v_i$  отображался бы в  $y = Ax = \sum_{i=1}^n \sigma_i \beta_i u_i$ . Иначе говоря, всякая матрица станет диагональной, если выбрать подходящие ортогональные координатные системы в ее области определения и области значений.

Перейдем к рассмотрению теории возмущений.

Пусть  $A$  — симметричная матрица с собственными значениями  $\alpha_1 \geq \dots \geq \alpha_n$  и соответствующими нормированными векторами  $q_1, \dots, q_n$ .

Пусть  $E$  — также симметричная матрица, а  $\hat{A} = A + E$  имеет возмущенные собственные значения  $\hat{\alpha}_1 \geq \dots \geq \hat{\alpha}_n$  и соответствующие возмущенные собственные векторы  $\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n$ . Теория возмущений позволяет проводить оценивание разностей между собственными значениями  $\alpha_i$  и  $\hat{\alpha}_i$  и собственными векторами  $q_i$  и  $\hat{q}_i$  через величину матрицы  $E$ . Большая часть оценок будет принимать за меру величины норму  $\|E\|_2$ .

Одной из основных теорем теории возмущений является теорема Вейля.

**Теорема 3.** (Вейль). Пусть  $A$  и  $E$  — симметричные  $n \times n$  — матрицы. Пусть  $\alpha_1 \geq \dots \geq \alpha_n$  — собственные значения матрицы  $A$ , а  $\hat{\alpha}_1 \geq \dots \geq \hat{\alpha}_n$  — собственные значения матрицы  $\hat{A} = A + E$ . Тогда  $|\alpha_i - \hat{\alpha}_i| \leq \|E\|_2$ .

**Следствие 1.** Пусть  $G$  и  $P$  – произвольные матрицы одинакового размера, причем  $G$  имеет сингулярные числа  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n$ , а  $G + F$  – сингулярные числа  $\sigma'_1 \geq \dots \geq \sigma'_n$ . Тогда  $|\sigma'_i - \hat{\sigma}_i| \leq \|F\|_2$ .

С помощью этой теоремы можно получить оценки ошибок для приближенных собственных значений. Такие алгоритмы вычисляют приближения  $\hat{\alpha}_i$ , которые являются точными собственными значениями для матрицы  $\hat{A} = A + E$ , где  $\|E\|_2 = O(\epsilon)\|A\|_2$ .

В работе излагается теория относительных возмущений для симметричной проблемы собственных значений. Она содержит более точные оценки для собственных значений и собственных векторов.

**Теорема 4.** («относительная» теорема Вейля). Пусть матрица  $A$  имеет собственные значения  $\alpha_i$ , а матрица  $\hat{A} = X^T A X$  – собственные значения  $\hat{\alpha}_i$ .

Положим  $\epsilon = \|X^T X - I\|_2$ . Тогда  $|\hat{\alpha}_i - \alpha_i| \leq |\alpha_i|\epsilon$ . Если  $\alpha_i \neq 0$ , то эти оценки можно записать в виде

$$\frac{|\hat{\alpha}_i - \alpha_i|}{|\alpha_i|} \leq \epsilon.$$

На основе изложенной теории возмущений в работе проводится анализ влияния возможных ошибок вычисления сингулярных чисел и собственных значений (векторов) симметричной матрицы на примере рассмотренной ранее задачи о механических колебаниях.

Далее рассмотрим алгоритм вычисления собственных значений и собственных векторов симметричной матрицы, основанный на вращениях Якоби. Назван в честь Карла Густава Якоба Якоби, предложившего этот метод в 1846 году, хотя использоваться метод начал только в 1950-х годах с появлением компьютеров. Данный метод позволяет вычислять малые собственные значения и соответствующие им собственные вектора с высокой точностью.

По заданной симметричной матрице  $A = A_0$  в методе Якоби строится последовательность ортогонально подобных матриц  $A_1, A_2, \dots$ . В конечном счете, она сходится к диагональной матрице, на диагонали которой стоят собственные значения. Матрица  $A_{i+1}$  получается из  $A_i$  по формуле  $A_{i+1} = J_i^T A_i J_i$ , где  $J_i$  – ортогональная матрица, называемая вращением Якоби. Таким образом,





$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{jj}c^2 + a_{kk}s^2 + 2sca_{jk} & sc(a_{kk} - a_{jj}) + a_{jk}(c^2 - s^2) \\ sc(a_{kk} - a_{jj}) + a_{jk}(c^2 - s^2) & a_{jj}s^2 + a_{kk}c^2 + 2sca_{jk} \end{bmatrix}.$$

Приравнивая внедиагональный элемент нулю, имеем

$$\frac{a_{jj} - a_{kk}}{2a_{jk}} = \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{\cos 2\theta}{\sin 2\theta} = \operatorname{ctg} 2\theta = \tau.$$

Положим  $t = \frac{s}{c} = \operatorname{tg} \theta$  и заметим, что  $t^2 - 2\tau t - 1 = 0$ . Решая квадратное уравнение, находим  $t = \frac{\operatorname{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$ ,  $c = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2}}$  и  $s = t \cdot c$ . Суммируем этот вывод в виде следующего алгоритма:

**Алгоритм 1.** Вычислить вращение Якоби в координатной плоскости  $j, k$  и применить его к матрице  $A$  :

*proc* *Jacoby-Rotation* ( $A, j, k$ )

*if*  $|a_{jk}|$  не слишком мал

$$\tau = (a_{jj} - a_{kk}) / (2 \cdot a_{jk})$$

$$t = \operatorname{sign}(\tau) / (|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2})$$

$$c = 1 / \sqrt{1 + t^2}$$

$$s = c \cdot t$$

$$A = R^T(j, k, \theta) \cdot A \cdot R(j, k, \theta) \dots \text{ где } c = \cos \theta \text{ и } s = \sin \theta$$

*if* нужны собственные векторы

$$J = J \cdot R(j, k, \theta)$$

*end if*

*end if*

Стоимость применения вращения  $R(j, k, \theta)$  к матрице  $A$  (или  $J$ ) составляет лишь  $O(n)$  флопов, так как в  $A$  изменяются только строки и столбцы с номерами  $j$  и  $k$ . Алгоритм Якоби в целом можно описать так:

**Алгоритм 2.** Метод Якоби для вычисления собственных значений симметричной матрицы:

*repeat*

*выбрать пару индексов  $j, k$*

*обратиться к процедуре *Jacoby-Rotation*( $A, j, k$ )*

*пока  $A$  не станет достаточно близка к диагональной матрице*

Для описания пары  $j, k$  и в качестве меры продвижения к пределу определим величину, являющейся нормой наддиагональной части матрицы

$$\text{off}(A) = \sqrt{\sum_{1 \leq j < k \leq n} a_{jk}^2}.$$

Опишем исходную версию алгоритма, указанную самим Якоби в 1846 г.

**Алгоритм 3.** Классический алгоритм Якоби:

```

while off(A) > tol (здесь tol — параметр останова,
    задаваемый пользователем)
    выбрать j и k так, чтобы  $a_{jk}$  был наибольшим
    по абсолютной величине внедиагональным элементом
    обратиться к процедуре Jacoby-Rotation(A, j, k)
end while

```

Классический алгоритм не используется в практических вычислениях, потому что поиск наибольшего элемента слишком замедляет процесс. Поэтому вместо классического выбора пар  $j, k$  используется построчный циклический обход внедиагональных элементов матрицы  $A$ .

**Алгоритм 4.** Строчный циклический метод Якоби.

```

repeat
    for j = 1 to n - 1
        for k = j + 1 to n
            обратиться к процедуре Jacoby-Rotation(A, j, k)
        end for
    end for.

```

пока  $A$  не станет достаточно близка к диагональной матрице

Если в течение всего внутреннего цикла процедура *Jacoby-Rotation* дает лишь значения  $c = 1$  и  $s = 0$ , то матрица  $A$  уже более не изменяется.

Метод Якоби является одним из самых точных методов нахождения сингулярных чисел и сингулярных векторов. Для этого необходимо применить метод Якоби к матрице  $GG^T$  (или  $G^TG$ ) неявно, то есть так, что ни одна из названных матриц в явном виде не формируется, чем избегается потеря численной устойчивости, связанная с этим формированием.

На каждом шаге неявного алгоритма вычисляется вращение Якоби  $J$ , с помощью которого матрица  $G^T G$  неявно пересчитывается в  $J^T G^T G J$ ; вращение выбрано так, чтобы пара внедиагональных элементов из  $G^T G$  обратилась в нули в матрице  $J^T G^T G J$ . Однако ни  $G^T G$ , ни  $J^T G^T G J$  не вычисляются в явном виде; вместо них вычисляется матрица  $G J$ . По этой причине мы называем алгоритм методом односторонних вращений.

**Алгоритм 5.** Вычислить вращение Якоби в координатной плоскости  $j, k$ :  
*proc One-Sided-Jacobi-Rotation*( $G, j, k$ )

*Вычислить*  $a_{jj} = (G^T G)_{jj}$ ,  $a_{jk} = (G^T G)_{jk}$  и  $a_{kk} = (G^T G)_{kk}$

*if*  $|a_{jk}|$  не слишком мал

$$\tau = (a_{jj} - a_{kk}) / (2 \cdot a_{jk})$$

$$t = \text{sign}(\tau) / (|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2})$$

$$c = 1 / \sqrt{1 + t^2}$$

$$s = c \cdot t$$

$$G = G \cdot R(j, k, \theta) \dots \text{ где } c = \cos \theta \text{ и } s = \sin \theta$$

*if* нужны правые сингулярные векторы

$$J = J \cdot R(j, k, \theta)$$

*end if*

*end if*

**Заключение.** В представленной работе был рассмотрен ряд основных определений, относящихся к симметрической проблеме собственных значений, рассмотрены леммы и теорема о сингулярном разложении ( $SVD$ ).

Изложена теория возмущений при вычислении собственных значений и собственных векторов симметрической матрицы, а также ее исключение в виде теории относительных возмущений, позволяющей получать более точные оценки.

Также были рассмотрены вариации алгоритма Якоби для нахождения собственных значений матрицы и вычисления сингулярного разложения.

Данная тема является достаточно актуальной, с такой вычислительной проблемой приходится сталкиваться, например, при исследовании собственных колебаний различных механических систем, колебательных и электронных спектров молекул и кристаллов.

Совершенно принципиальное значение эта проблема приобрела после создания в тридцатых годах прошлого века квантовой механики, которая стала базовой дисциплиной исследования микромира.