Algebraiczne metody rozwiązywania równania Schrödingera

Włodzimierz Salejda, Michał H. Tyc, Marcin Just: *Algebraiczne metody rozwiązywania równania Schrödingera*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002, s. 190.

Mechanika kwantowa, której symbolem jest równanie Schrödingera, dostarcza teoretycznego aparatu pozwalającego wyjaśniać podstawowe własności materii. Do połowy XX w. teoria ta mogła być jedynie wykorzystywana do analizy najprostszych układów, gdyż złożoność obliczeniowa bardziej skomplikowanych problemów mechaniki kwantowej przekraczała istniejące wówczas możliwości rachunkowe. To samo ograniczenie dotyczyło badania zjawisk opisywanych klasycznymi równaniami ruchu, a także rozwiązywania złożonych zagadnień technicznych. Radykalne zmiany nastąpiły wraz z upowszechnieniem się dostępu do elektronicznych maszyn liczących. Rozwój komputerów i superkomputerów, któremu towarzyszył stały postęp w tworzeniu numerycznych algorytmów pozwalający na efektywne wykorzystanie dostępnych mocy obliczeniowych sprawił, że możliwa stała się teoretyczna analiza złożonych układów atomowych i molekularnych oraz modelowanie zagadnień mechanicznych. Dość powiedzieć, że dzisiaj użytkownik przeciętnego komputera przenośnego dysponuje mocą obliczeniową porównywalną z tą, jaką około 10 lat temu miał ostatni z listy 500 najszybszych superkomputerów na świecie (www.top500.org).

Jeszcze do niedawna rozwój i utrzymywanie arsenałów broni jądrowej wymagały przeprowadzania próbnych wybuchów. Teraz specjalne programy i największe instalacje superkomputerowe umożliwiają ich symulowanie i wirtualną analizę procesów starzenia się broni jądrowej. Poprawa bezpieczeństwa samochodów w dalszym ciągu wymaga testów zderzeniowych, ale wiele prób można już przeprowadzać na samym komputerze. Kształt karoserii można optymalizować, wykorzystując wyniki prób wykonywanych w wirtualnych tunelach aerodynamicznych. Najnowszy model samolotu Boeinga (777) powstawał całkowicie w wirtualnej rzeczywistości. To tylko kilka najbardziej spektakularnych przykładów świadczących zarówno o wspaniałych możliwościach współczesnych systemów komputerowych, jak i stopniu zaawansowania metod obliczeniowych fizyki oraz techniki.

Jest zatem rzeczą niezmiernie istotną, żeby studenci fizyki (w szczególności fizyki komputerowej), kierunków politechnicznych, a może też i informatyki byli zaznajamiani z praktycznymi sposobami rozwiązywania równań opisujących zjawiska fizyczne, czyli odpowiednimi algorytmami służącymi do numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych, oraz z konkretnymi realizacjami tych algorytmów. Chodziłoby o dokładne zrozumienie sposobów rozwiązywania tego typu zagadnień, umiejętność dobrania odpowiedniego algorytmu, ocenę uzyskiwanej dokładności i zależności jakości otrzymywanych wyników od stosowanego sprzętu (procesorów), wybranej precyzji obliczeń, zastosowanych kompilatorów oraz poziomu optymalizacji kodów. Ta wiedza może się okazać niezbędna nie tylko w przypadku konieczności napisania własnego programu do rozwiązywania konkretnego równania, ale także wówczas, kiedy trzeba będzie skorzystać z gotowego pakietu i ocenić przydatność dostępnych w nim algorytmów.

Dobrze zatem się stało, że dzięki wydawnictwu PWN w księgarniach dostępna jest omawiana książka Salejdy, Tyca i Justa, stanowiąca cenne uzupełnienie podręczników poświęconych metodom numerycznym. Powstała ona na podstawie wykładów z metod komputerowych fizyki oraz fizyki komputerowej wygłaszanych przez jej pierwszego autora na Politechnice Wrocławskiej w ostatnich latach. Ponieważ mam uwagi dotyczące układu książki, dalej nie będę omawiał jej zawartości w porządku kolejności rozdziałów.

Równanie Schrödingera, podobnie jak wiele innych równań różniczkowych fizyki klasycznej i kwantowej, daje się rozwiązać ściśle (analitycznie) tylko w bardzo nielicznych, prostych przypadkach. W praktyce zmuszeni jesteśmy rozwiązywać takie równania w sposób przybliżony, np. zastępując pochodne występujące w równaniu przez różnice skończone, co oznacza zamianę ścisłego rozwiązania na jego przybliżenie w postaci szeregu wartości wyznaczonych na wybranej siatce punktów (w najprostszym przypadku pierwszą pochodną można przybliżać przez iloraz różnicowy). W rozdziale 5 podręcznika przedstawiono zagadnienie dyskretyzacji ogólną metodą Guardioli–Rosa, a także omówiono szczególne przypadki, m.in. metodę pięciopunktową oraz metodę Lindberga.

Dyskretyzacja równania Schrödingera prowadzi do algebraicznego zagadnienia wartości i wektorów własnych. Najpierw w rozdziale 3 przedstawiono algorytm Martina–Deana wyznaczania wartości własnych macierzy symetrycznych trójdiagonalnych oraz rekurencyjną metodę Dy, Wu, Spratlina i Zhenga wyznaczania wektorów własnych. Natomiast rozdział 6 został poświęcony omówieniu metod wyznaczania wartości i wektorów własnych dla pełnych macierzy symetrycznych. Zostały w nim przedyskutowane metody: QR i QL, diagonalizacji Jacobiego, potęgowa, iteracji odwrotnych oraz mniej znana metoda „dziel i rządź".

Rozdział 9 poświęcono przedstawieniu i omówieniu wyników testów obliczeniowych, które zostały wykonane przy użyciu niektórych z omawianych w książce metod. Testy przeprowadzono dla kilku wybranych funkcji energii potencjalnej, dla których znane są ścisłe, analityczne rozwiązania równania Schrödingera (potencjały: oscylatora harmonicznego, Morse'a, Konwenta i kulombowski). Takie podejście umożliwia ocenę bezwzględnej jakości zastosowanej metody dyskretyzacji w zależności od liczby punktów siatki, dokładności warunków brzegowych i dokładności operacji zmiennopozycyjnych, pozwala także na analizę efektywności zastosowanych algorytmów rozwiązywania zagadnienia własnego.

Osobny rozdział (rozdz. 7) zawiera krótkie przedstawienie zagadnień fizyki ciała stałego i fizyki atomowej, które można sprowadzić do rozwiązania równań typu stacjonarnego równania Schrödingera lub algebraicznego zagadnienia własnego. Autorzy omawiają m.in. drgania jednowymiarowego łańcucha atomów, ruch cząstki w sferycznie symetrycznym potencjale wiążącym, atom wodoru w zewnętrznym stałym polu elektrycznym, kropkę kwantową i supersieć w polu magnetycznym. Teoretyczny charakter tego rozdziału został zrównoważony przez zamieszczenie zestawu ok. 30 zadań, które zachęcają czytelnika do wyznaczania i analizowania numerycznych rozwiązań konkretnych problemów. Również inne rozdziały (szczególnie 3, 5 i 6) zawierają zadania pomagające w zrozumieniu omawianych w nich zagadnień algorytmicznych i numerycznych.

Lekturę omawianego podręcznika ułatwiają dodatki zawierające wybrane elementy algebry liniowej, sposoby przybliżania pochodnych przez różnice skończone i zasady klasycznej aproksymacji Padégo. Sądzę jednak, że książka powinna zostać uzupełniona o dodatek poświęcony omówieniu zagadnień związanych z reprezentacją liczb zmiennopozycyjnych oraz ich arytmetyką (w standardzie IEEE 754), a także problemowi dokładności obliczeń.

Do książki dołączona jest płyta CD zawierająca pliki źródłowe procedur w języku Fortran 77, które są częścią programów służących do badania dokładności i szybkości działania poszczególnych algorytmów, wyznaczania funkcji falowych oscylatora harmonicznego, a także program MARRS (Metody Algebraiczne Rozwiązywania Równania Schrödingera) w wersji dla systemu Windows. Program MARRS (omawiany szczegółowo w jednym z rozdziałów książki) pozwala rozwiązywać stacjonarne równanie Schrödingera dla dowolnego kształtu jednowymiarowych studni potencjału. Według Autorów program ten jest „przyjaznym użytkownikowi instrumentem badawczo-dydaktycznym w dziedzinie mechaniki kwantowej i fizyki struktur niskowymiarowych, przydatnym zarówno dla pracowników naukowych, jak i studentów". W tym kontekście brakuje mi wyraźnego określenia zasad jego wykorzystywania; dotyczy to także innych programów fortranowskich dołączonych do książki. Program MARRS powstał jako praca magisterska jednego z autorów książki, a wydanie recenzowanej książki było możliwe przy udziale finansowym Komitetu Badań Naukowych i Politechniki Wrocławskiej. Uważam, że są to dostateczne powody, aby ten program był dostępny w postaci źródłowej (wraz z dokumentacją), a byłoby jeszcze lepiej, gdyby był rozpowszechniany na zasadach powszechnej licencji publicznej GNU (GNU General Public License) lub podobnej (patrz www.gnu.org/home.pl.html). Sądzę bowiem, że tego typu prace finansowane z budżetu państwa powinny być udostępniane bez zbędnych ograniczeń[1]. Obecna wersja programu zawiera usterki (patrz Dodatek w internetowej wersji recenzji, www.fuw.edu.pl/~postepy/dodatki), które dałoby się stosunkowo łatwo usunąć pod warunkiem dostępu do plików źródłowych programu.

Pobieżny rzut oka na spis treści książki ujawnia, że rozdziały mają bardzo nierówną objętość i nieco zaskakujący układ. Oto po rozdziale 2 definiującym zagadnienia do rozwiązywania następuje rozdz. 3 o metodach wyznaczania wartości i wektorów własnych macierzy trójdiagonalnych, a za nim bardzo krótki (zaledwie trzystronicowy) rozdział o równaniu masy efektywnej, tematycznie pasujący raczej do rozdz. 2. Sądzę zatem, że Autorzy powinni rozważyć włączenie rozdz. 4 do rozdz. 2, zmieniając odpowiednio jego tytuł, np. na „Wybrane równania mechaniki kwantowej jako algebraiczne zagadnienia własne", a bezpośrednio za nim umieścić rozdz. 5.

Sądzę także, że powinno nastąpić scalenie rozdz. 3 z rozdz. 6. Za takim podejściem przemawia kilka argumentów. Przede wszystkim, przeniesienie wstępu rozdz. 6 na początek rozdz. 3 uczyniłoby lekturę tego drugiego łatwiejszą dla czytelnika mniej zorientowanego w tej problematyce. Z owego wstępu wynika, że zagadnienie algebraiczne o macierzy gęstej i symetrycznej warto upraszczać do postaci trójdiagonalnej, więc byłoby rzeczą naturalną, gdyby pierwszy podrozdział został poświęcony omówieniu przekształceń przez podobieństwo wykorzystywanych w procesie redukcji (pp. 6.1.1 i 6.1.2) oraz samej metodzie Householdera (jej obecność w środku rozdz. 6, jako p. 6.5, jest mało uzasadniona). Dalej powinny następować osobne podrozdziały poświęcone wyznaczaniu wartości i wektorów własnych trójdiagonalnych (obecny rozdz. 3) i pełnych (rozdz. 6) macierzy symetrycznych. Poza tym krótki rozdz. 10 powinien być uzupełnieniem rozdziału poświęconego rozwiązywaniu stacjonarnego równania Schrödingera.

Mam nadzieję, że dołączona do recenzji lista szczegółowych uwag o zawartości i formie książki, a także załączonych programach, ułatwi przygotowanie Autorom jej poprawionego wydania (dalsze uwagi można znaleźć w internetowej wersji recenzji).

Oto kilka uwag ogólniejszej natury.

— W przedmowie Autorzy piszą, że współczesną technikę komputerową charakteryzuje wykładniczy wzrost wydajności mikroprocesorów mierzony częstością taktowania tych układów. W rzeczywistości wzrost wydajności, o którym mowa, jest wypadkową wzrostu częstości oraz zmian w architekturze procesorów i mierzony jest liczbą operacji zmiennopozycyjnych, które procesor jest w stanie wykonać w ciągu sekundy.

— Opis metody elementów skończonych (s. 17) jest niezwykle skromny. Brakuje także odnośników do pozycji

[1] Warto w tym miejscu wspomnieć, że prace prowadzone w USA pod koniec lat 60. ubiegłego stulecia na specjalne zamówienie Departamentu Obrony doprowadziły do powstania otwartych protokołów komunikacyjnych, dzięki czemu możliwe stało się powstanie Internetu, a idea dostępu do rozproszonych danych w postaci stron WWW z aktywnymi odsyłaczami zrodziła się w CERN-ie.

poświęconych tym bardzo popularnym i szeroko stosowanym metodom. Moim zdaniem zaliczenie metody macierzy przejścia do metod typu elementów skończonych jest niewłaściwe. Idea rozbicia przedziału całkowania na podprzedziały i zszywania rozwiązań jest podobna, ale w metodach elementów skończonych rozwiązanie jest przybliżane przez wielomiany, natomiast w metodzie macierzy przejścia zagadnienie jest rozwiązywane analitycznie i liczba przedziałów jest mała, bo wynika z fizyki zagadnienia, a nie ze względów numerycznych.

— Dlaczego nie zawsze daje się wyznaczać wektory własne prostą metodą rekurencyjną (p. 3.3.1)? Czy argumenty Wilkinsona, na które powołują się Autorzy, nie są wystarczająco zwarte, by można było je przytoczyć w całości, zamiast odsyłać czytelnika do podręcznika, który zwykle nie jest łatwo dostępny? Na s. 61 Autorzy odwołują się do metody przesuwania widma wartości własnych zaproponowanej przez Wilkinsona, ale nie podają (nawet w zarysie), na czym ona polega.

— Podrozdział 6.7 powinien nazywać się „Metoda diagonalizacji Jacobiego", a nie „Metoda Jacobiego", aby odróżnić ją od iteracyjnej metody Jacobiego rozwiązywania dużych układów równań liniowych.

— W algorytmie Grama–Schmidta (algorytm 6-18, s. 91) zdefiniowano warunek przerwania przez $r = 0$. Wydaje się, że ten warunek liniowej zależności powinien być uzależniony od dokładności maszynowej.

— Należałoby się spodziewać, że wszystkie wyniki zamieszczone i dyskutowane w rozdz. 9 („Dokładność i szybkość algorytmów") będzie można łatwo odtworzyć za pomocą dołączonych do książki programów fortranowskich. Niestety, pojawiają się pewne drobne rozbieżności, które chyba wynikają stąd, że część danych zamieszczonych w tabelach otrzymano w ramach arytmetyki zmiennopozycyjnej określonej przez standard IEEE 754, a część w ramach rozszerzenia tego standardu (dostępnego w procesorach z rodziny x86). Zabrakło mi na płycie CD zestawu danych wejściowych do odtworzenia wspomnianych wyników testów, a także prostego pliku Makefile, który pozwoliłby skompilować potrzebne procedury i utworzyć programy testowe. Takie podejście ułatwiłoby korzystanie z tych programów, a także umożliwiałoby łatwą analizę zastosowanych metod numerycznych pod względem optymalizacji, użycia różnych kompilatorów itp.

— Nie wydaje się właściwe odejście od powszechnie stosowanej definicji liczby cyfr znaczących (s. 135). W rezultacie w tabelach rozdz. 9 liczby cyfr znaczących przyjmują wartości ułamkowe. Sądzę, że do śledzenia zmian dokładności kolejnych wartości własnych lepiej byłoby posługiwać się pojęciem błędu względnego zamiast logarytmu wartości bezwzględnej tego błędu. Jeśli już przyjąć zmienioną definicję, to w tabelach powinny być podawane wartości własne z wszystkimi 16 (a nie 14) cyframi, gdyż wówczas trudno zrozumieć, dlaczego wyniki numeryczne, które są identyczne z wynikami analitycznymi (w ramach podanej dokładności) mają różną liczbę cyfr znaczących.

— Dodatek C powinien zawierać wzory określające wielomiany interpolacyjne Newtona–Gregory'ego (oparte o progresywne i wsteczne różnice skończone) i Stirlinga (oparte o różnice centralne). Ułatwiłoby to uzasadnienie podanych wzorów na pochodne, a także rozwiązywanie załączonych zadań.

Recenzowana książka jest starannie opracowana od strony graficznej, ale, niestety, nie można tego powiedzieć o jej redakcji. Występują w niej liczne językowe niezręczności, anglicyzmy i błędy interpunkcyjne. Oto garść przykładów.

— Autorzy używają terminu „macierz rozrzedzona" w miejsce stosowanego w popularnych podręcznikach terminu „macierz rzadka" (patrz podręcznik *Metody numeryczne* G. Dahlquista i A. Björka). Wydawnictwo PWN powinno dbać o zachowanie jednolitości terminologicznej w wydawanych przez siebie pozycjach, a tylko w ostateczności przyjmować inny (być może lepszy) termin, przywołując jednak termin zastępowany.

— Zamiast „formuła" powinno być „wzór", zamiast „aproksymacja" – „przybliżenie" (np. na s. 23 mamy „posługiwać się pojęciami wartości własnej i funkcji własnej, mając na myśli ich aproksymacje"). W programie MARRS pojawiają się wręcz „hinty"!

— Skróty mogą być pomocne, ale nie należy ich nadużywać. Zamiast RS powinno się pisać „równanie Schrödingera". Jeżeli już skróty mają być używane, to powinny być definiowane przed pierwszym użyciem (zatem informacja o autorach algorytmu, która pojawia się na początku p. 3.3, powinna znaleźć się na początku rozdz. 3).

— Na s. 61 pojawia się pojęcie „epsilona maszynowego", które zostało wcześniej zdefiniowane (przypis 4 na s. 25), ale chyba prościej i przejrzyściej byłoby napisać, że chodzi o dokładność maszynową (w najgorszym razie należy odesłać czytelnika do wspomnianego przypisu). W skorowidzu brak hasła „dokładność maszynowa".

— Na s. 69 użyto oznaczenia $\Theta^{\pm}$, które zostało zdefiniowane w innym rozdziale, więc warto byłoby czytelnikowi pomóc w znalezieniu stosownego miejsca przez dodanie odsyłacza.

W podsumowaniu chciałbym podkreślić, że recenzowana książka stanowi wartościową pozycję i może być z pożytkiem wykorzystana przez wszystkich pragnących zapoznać się ze sposobami dyskretyzacji i algorytmami rozwiązywania algebraicznego zagadnienia własnego. Dziwi mnie jedynie, że tak doświadczone i zasłużone wydawnictwo jak PWN wykazało się sporym brakiem staranności i nie poddało książki właściwemu procesowi edytorskiemu.

Jacek Kobus
Instytut Fizyki UMK
Toruń

Dodatek

Oto pozostałe, bardziej szczegółowe uwagi, które nasunęły mi się podczas lektury recenzowanej książki.

— Nazewnictwo zastosowane w dodatku C budzić musi zastrzeżenia. Zamiast „formuła różniczkowania do przodu rzędu $O(s)$" (wzór C.2) należałoby raczej pisać „wzór rzędu $O(s)$ oparty o skończone różnice progresywne". Zamiast „różnica centralna rzędu $O(s^2)$" (wzór C.3) powinno być „wzór rzędu $O(s^2)$ oparty o centralne różnice skończone". Podobnie powinny zostać poprawione opisy pozostałych wzorów, gdyż nie ma czegoś takiego jak różniczkowanie do przodu i różnice centralne jakiegoś określonego rzędu dokładności.

— Czy nie lepiej zamiast „aproksymacja »do przodu«, »do tyłu«" pisać „aproksymacja »w przód« i »w tył«" (s. 165)?

— Czy (skończony) zbiór wartości może stanowić przybliżenie funkcji (s. 16)? Czy nie lepiej byłoby powiedzieć, że te wartości przybliżają ścisłe rozwiązanie w zadanych punktach?

— Na s. 57 mamy zdanie: „Zanim zajmiemy się bliżej wspomnianymi algorytmami, opiszemy przekształcenia ortogonalnego podobieństwa, którymi będziemy się posługiwać", które łączy niepoprawną polszczyznę z anglicyzmem (similarity orthogonal transformation). Tytuł p. 6.1 także wymaga zmiany.

— Na s. 156 przed definicją B-9 pisze się: „zdefiniujmy transformację macierzy przez podobieństwo", ale potem w definicji (B-9) i w innych miejscach Autorzy posługują się mniej zgrabnym terminem „przekształcenie podobieństwa". Dalej, na s. 160, mamy „zdiagonalizować za pomocą przekształcenia unitarnego podobieństwa".

— Na s. 23 mamy „wejściowego równania" zamiast „wyjściowego równania", a na s. 62 – „Ortogonalno-trójkątnej dekompozycji wejściowej macierzy do postaci macierzy trójkątnej", a powinno chyba być „Rozkładu wyjściowej macierzy trójdiagonalnej do górnej postaci trójkątnej za pomocą macierzy ortogonalnej". Sądzę, że należy raczej w tym kontekście pisać o macierzy „wyjściowej" zamiast „wejściowej", przez analogię do określenia „punkt wyjścia", na oznaczenie miejsca, od którego coś rozpoczynamy. Termin „macierz wejściowa" sugeruje raczej macierz zawierającą dane początkowe (wejściowe) do programu komputerowego.

— Na s. 23. mamy: „Stajemy zatem przed koniecznością rozwiązania metodami numerycznymi AZW dla macierzy trójdiagonalnej dużych rozmiarów". Czy nie lepiej byłoby napisać: „Stajemy zatem przed koniecznością rozwiązania algebraicznego zagadnienia własnego metodami numerycznymi dla macierzy trójdiagonalnej dużych rozmiarów"?

— Na s. 101 jest: „Rozpatrzmy dynamikę elektronu w jednowymiarowym układzie, poruszającego się w potencjale"; poprawniejsze byłoby: „Rozpatrzmy układ jednowymiarowy, w którym elektron porusza się w polu potencjału".

— Nieporadnie zredagowane są akapity: czwarty na s. 138 i pierwszy na s. 141 oraz przedostatnie zdanie dodatku A.8 (mamy np. „Zweryfikować numerycznie ortogonalność obliczonych wektorów własnych w obu przypadkach").

— Dlaczego przeprowadzane jest zerowanie pozadiagonalnego elementu $T_{i+1,i}$ za pomocą obrotów Givensa, skoro obroty te służą do sprowadzania macierzy symetrycznej do postaci trójdiagonalnej (s. 58, wzór 6.5)? Trzeba chyba wyraźnie odróżnić obroty Givensa od transformacji Givensa, która służy do przeprowadzania redukcji macierzy. Czy nie lepiej stosować ogólnie przyjętą terminologię (np. używaną w cytowanym już podręczniku *Metody numeryczne*) i mówić o obrotach płaskich, metodzie Jacobiego, metodzie Givensa, a nie o obrotach Jacobiego i Givensa?

— Ostatnie zdanie na s. 61 jest niezrozumiałe. Dlaczego koszt redukcji macierzy pełnej do postaci trójdiagonalnej ma zależeć od tego, czy później będziemy wyznaczać wartości i wektory własne, czy tylko wartości własne? (Przy okazji trzeba zwrócić uwagę na przyjęcie nieco mylących oznaczeń. Mianowicie, na początku rozdziału (s. 56) przez $\mathbf{A}$ oznaczono macierz pełną, na s. 60 macierz trójdiagonalną, aby u dołu strony 61 znowu oznaczać tym symbolem macierz pełną).

— Na s. 17 niepotrzebnie sugeruje się czytelnikowi, że baza $\{\Phi^{(l)}\}$ jest ortogonalna, ale przedstawione wyprowadzenie z tego założenia nie korzysta. Zamieszczony na tej samej stronie wzór określający warunki ekstremum funkcjonału jest niekompletny.

— Wydaje się, że równania umieszczone w podpisie pod rysunkiem 6.2 (s. 59) powinny zostać przeniesione do tekstu podrozdziału, aby poprawić czytelność tego fragmentu książki.

— Przy okazji omawiania metody diagonalizacji Jacobiego autorzy piszą, że „obroty są pomijane, jeśli zachodzą nierówności $|A_{k,l}| \ll |A_{k,k}|$ $(\ldots)$ w takich przypadkach od razu przyjmowane jest $A'_{k,l} = 0$", nie precyzując, co oznacza symbol $\ll$.

— Przy okazji dyskusji twierdzenia B-23 (s. 161) powinien być podany odnośnik do odpowiedniej pozycji literatury ([50]). Ten odnośnik jest podany na s. 78 przy okazji odwoływania się do twierdzenia Löwnera, ale dla wygody czytelnika powinien zostać powtórzony.

— Twierdzenie B-24 wraz z dowodem powinno pojawić się przed dowodem twierdzenia B-23, a nie po nim.

— Przy okazji trzeba wspomnieć o pewnym drobnym utrudnieniu, na jakie natyka się użytkownik programów fortranowskich. Pliki na dysku CD zapisane są dużymi literami. Po skopiowaniu ich na twardy dysk program `prec.f` nie daje się uruchomić z przykładowymi danymi, bo program żąda pliku `prec.ini`, a jest dostępny tylko plik `PREC.INI` (problem ten występuje, gdyż systemy Unix/Linux, w odróżnieniu od systemu Windows, rozróżniają wielkie i małe litery). Poza tym próba uruchomienia programu `prec.f` (system GNU/Linux, kompilator g77) kończy się komunikatem „Segmentation fault", tj. naruszeniem ochrony pamięci. Jak się okazuje, jest to spowodowane sposobem wywoływania przez ten program podprogramu `compna`, gdzie wśród parametrów aktualnych znajdują się dwie stałe w podwójnej precyzji (±1e38). Próba ich modyfikacji w podprogramie `eigvl1` (wiersze 40 i 41)

```
if (emin.le.-1e+37) emin=vmin
if (emax.ge.+1e+37) emax=vmax
```

powoduje wystąpienie błędu naruszenia pamięci. Zastąpienie ich zmiennymi o odpowiednich wartościach usuwa problem.
— Procedury napisane w Fortranie powinny zostać poddane oczyszczeniu, aby ujednolicić stosowanie nazw funkcji matematycznych. W obecnej wersji można spotkać odwołania do funkcji `sqrt` i `dsqrt`, `sin` oraz `dsin`. Ponieważ obliczenia zmiennopozycyjne są wykonywane w podwójnej precyzji, lepiej jest zastosować ogólne odwołanie, gdyż program konsolidujący pobierze z biblioteki funkcje zwracające wartości właściwego typu. Dokonanie tych kosmetycznych zmian może ułatwić wykorzystanie tych procedur w rachunkach z zastosowaniem poczwórnej precyzji, jeśli dysponujemy kompilatorem, który pozwala na automatyczne przekształcenie wszystkich zmiennych podwójnej precyzji w zmienne poczwórnej precyzji.

⋆ ⋆ ⋆

Osobnego, dłuższego omówienia wymaga program MARRS. Jest to program napisany w środowisku Delphi (obiektowy Pascal), który umożliwia rozwiązywanie równania Schrödingera dla wybranego lub zadanego potencjału[a] (program jest wyposażony w edytor wyrażeń algebraicznych).

Uważam, że system pomocy dostępny w programie jest nieporozumieniem. Format oferowany przez ten system jest niedostateczny z uwagi na złożoność tekstu, który zawiera wiele wzorów matematycznych. Lepiej byłoby albo pozostać przy plikach w przenośnym formacie PDF (Portable Data Format), albo robić odwołania do odpowiednich fragmentów książki lub osobnego pliku z dokumentacją w formacie PDF[b].

Pliki pomocy wymagają przejrzenia, wygładzenia i usunięcia błędów interpunkcyjnych oraz literówek. Np. w „Podstawach obsługi programu MARRS" jest „Ostatnia sekcja umożliwia podgląd otrzymanych wartości własnych, oraz ...".). W „Testowym arkuszu kalkulacyjnym MARRSTST.xls" jest „prostrzych".

Poza tym przy przeglądaniu plików pomocy nie działa właściwie przycisk „Wstecz".

Oto lista innych usterek, na które się natknąłem, korzystając z programu MARRS.
— Rozwiązania równania Schrödingera (funkcje falowe) pokazywane są na tle wykresu energii potencjalnej. Można rysować funkcje falowe albo kwadraty ich modułów, które są w programie niepoprawnie określone jako moduły funkcji falowej.
— Zmiana wykresu funkcji falowej na wykres kwadratu jej modułu (przycisk „Opcje") jest nieintuicyjna, gdyż zamiast naciskać na odpowiednio opisany przycisk trzeba kliknąć na obrazek strzałki.
— Próba użycia którejś z kilku przykładowych kart roboczych dołączonych do programu MARRS nie zawsze kończy się sukcesem. Po pobraniu karty okno wykresu nie jest właściwie odświeżane. Problemy z odświeżaniem występują przy przechodzeniu z jednej karty na drugą.
— Wyprowadzanie na zewnątrz programu (eksportowanie) wartości własnej oraz funkcji własnej konkretnego stanu oznacza przekazanie wszystkich policzonych wartości własnych, ale tylko jednej wybranej funkcji własnej. Dlaczego nie można za jednym zamachem przenieść do arkusza kalkulacyjnego wszystkich rozwiązań albo jakiejś ich grupy? (Notabene, przycisk powinien być opisany jako „Eksport", a nie „Export").
— Użytkownik spodziewa się, że jeśli wybrał oglądanie wykresów kwadratów modułów funkcji falowych, to odpowiednie wartości będą eksportowane. Tymczasem program daje możliwość wyprowadzenia z programu tylko wartości funkcji falowych.
— Przy eksportowaniu wartości własnych i wybranej funkcji własnej do pliku wśród dostępnych formatów nie ma formatu tekstowego (można go jednak wymusić, nadając plikowi rozszerzenie txt, jeśli się akurat zna to szczególne zachowanie systemu Windows).
— Powinna istnieć możliwość zmiany jednostek, w szczególności możliwość wybrania jednostek atomowych.
— Sposób ustalania zakresu energii własnych, które są pokazywane na rysunku, jest niewygodny. Jeśli ktoś lubi, to może mozolnie wyklikać odpowiednie zmiany, w przeciwnym razie jest zmuszony edytować bardzo starannie pole mantysy i wykładnika, gdyż z niewiadomych powodów nie jest aktywne pierwsze pole, więc trzeba kursorem najechać na drugie, żeby dokonać zmian.
— Jeśli dolna krawędź rysunku jest określona jako ujemna, to naciskanie dolnego przycisku powinno powodować dalsze zmniejszanie tej wartości, a nie zmniejszanie jej bezwzględnej wartości, bo to nie jest oczekiwane zachowanie.
— Próba wybrania trójpunktowej metody klasycznej zakończyła się „wystąpieniem nieznanego wyjątku programowego".
— Dlaczego po podaniu potencjału $-\exp(-x^2)$ zakres energii jest wybierany jako 6.24e+18 (góra i dół)? To samo dzieje się przy wpisaniu wzoru określającego inny potencjał.
— Po uruchomieniu pojawia się winietka programu, która powinna po chwili znikać, aby można było korzystać

[a] Funkcję energii potencjalnej można także zadać przez zaznaczenie myszką punktów, które łączone są liniami prostymi. W razie omyłkowego naniesienia punktu nie można go usunąć, lecz zaznaczanie punktów trzeba zacząć od początku. Moim zdaniem podważa to sensowność takiego trybu wprowadzania danych.

[b] Dla użytkowników, którzy nie mają czytnika plików w tym formacie, można na płycie CD umieścić dodatkowo program Adobe Acrobat Reader.

z właściwego programu. Konieczność naciśnięcia „Enter" jest irytująca.
— Do programu został wprowadzony potencjał Gaussa (dodatek A.1, przykład 12: $V_c = 1.0$, $C = 1.0$). Przy próbie wykonania obliczeń pojawia się komunikat „W programie wystąpił nieznany wyjątek programowy".
— Po wprowadzeniu do programu potencjału x^2 narysowana została tylko część dla $x > 0$. Nie można zmienić zakresu, tj. zacząć od wartości ujemnych.
— Po zmianie parametrów i naciśnięciu przycisku „Licz" nie następuje właściwe odświeżenie ekranu (dopiero wybranie którejś z wartości własnych powoduje narysowanie poprawnej funkcji własnej).
— W głównym menu jest przycisk nazwany „Co pragniesz exportować".