

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2010	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

Aufgabenblatt 4

4.1 Interne Darstellung von numerischen Größen

Schreiben Sie ein kurzes Programm, mit dem Sie die interne bitweise Darstellung von numerischen Größen (`int`, `long int`, `float`, `double`) ausgeben können. **Erklären Sie dem Tutor die internen Darstellungen.**

4.2 Numerische Genauigkeit I

- a. Schreiben Sie ein C-Programm, das die folgenden Summen berechnet:

$$S_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sqrt{2}. \quad (1)$$

Verwenden Sie einmal `float` und einmal `double` und vergleichen Sie die Ergebnisse mit $\sqrt{2}$.

- b. **Zusatzaufgabe:** Kann man hier mittels Compileroptionen die Genauigkeit verbessern?
- c. Ein ähnliches Problem tritt auf, wenn man ein Tankstellenabrechnungsprogramm schreibt, das den Gesamtpreis für 100 Liter Benzin zu 1.49 Euro/Liter in einer Schleife als `float` aufsummiert. Machen Sie das mal und fragen Sie mit `if` ab, ob die Werte gleich sind. Hier tritt neben dem Genauigkeitsproblem noch das Problem des Vergleichens reeller Zahlen auf. Diskutieren Sie dies und suchen Sie nach Lösungen.
- d. **Merke: Verwenden Sie einfach niemals float.**
- e. **Zusatzaufgabe:** Schreiben Sie in C++ eine Zahldarstellung und Funktionen für die vier Grundrechenarten, die exakt arbeiten. Bei Fragen wenden Sie sich bitte vertrauensvoll an Marcel Müller oder lesen Sie <http://www.willemer.de/informatik/cpp/cppovrld.htm>.

4.3 Numerische Genauigkeit II

In der Quantenstatistik müssen thermische Mittelwerte berechnet werden. Diese enthalten e-Funktionen, die eine erhöhte Aufmerksamkeit des Programmierers erfordern.

- a. Schreiben Sie ein C-Programm, das folgendes ausführt:

$$e^x \quad \text{für } x = 1.0, 10.0, 100.0, 1000.0, \dots \quad (2)$$

$$\text{für } x = -1.0, -10.0, -100.0, -1000.0, \dots \quad (3)$$

Geben Sie die Ergebnisse aus und diskutieren Sie im Team.

- b. Innere Energien werden analog zu folgender Formel ausgerechnet:

$$U(T) = \frac{\sum_i E_i e^{-E_i/T}}{\sum_j e^{-E_j/T}}. \quad (4)$$

Nehmen Sie an, dass $T = 0.01$ und $E_i = -200, -180, -150, -110$. Wie groß ist die innere Energie?

- c. Diskutieren Sie die Probleme bei der Berechnung der inneren Energie.
d. Wie kann man das Problem lösen?
e. **Zusatzaufgabe:** Stellen Sie $U(T)$ graphisch dar für $0 < T < 300$.
f. **Zusatzaufgabe:** Berechnen Sie die Wärmekapazität $C(T) = \partial U(T)/\partial T$ näherungsweise als Differenzenquotient, d.h. zum Beispiel wie folgt

$$C(T) \approx \frac{U(T + \Delta T/2) - U(T - \Delta T/2)}{\Delta T}. \quad (5)$$

Erzeugen Sie eine Tabelle von Wertepaaren $(T, C(T))$ und stellen Sie diese graphisch dar. Vergleichen Sie mit der exakten Lösung

$$C(T) = \frac{1}{T^2} \left\{ \frac{\sum_i E_i^2 e^{-E_i/T}}{\sum_j e^{-E_j/T}} - \left(\frac{\sum_i E_i e^{-E_i/T}}{\sum_j e^{-E_j/T}} \right)^2 \right\}. \quad (6)$$