

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

Aufgabenblatt 6

6.1 Interpolation der Kotangens-Funktion

- a. Erzeugen Sie sich Funktionswerte von

$$f(x) = \cot(x) \quad (1)$$

an den Stützstellen 0.5° , 1° , 2° und 3° . Beachten Sie dabei, dass Sie erst Grad in Rad umwandeln müssen.

- b. Interpolieren Sie diese Daten mit einem Polynomverfahren Ihrer Wahl und extrapolieren Sie die Daten zu $x \rightarrow 0$.
- c. Interpolieren Sie diese Daten nun mit verschiedenen rationalen Funktionen bis zur Ordnung R_{0123} . Gehen Sie dabei von dem in der Vorlesung vorgestellten Mathematica-Notebook aus und implementieren Sie die Rekursionsrelation in Ihrem Programm.
- d. Stellen Sie die Approximationen zusammen mit der Ausgangsfunktion im Intervall $[0.1^\circ, 3.0^\circ]$ graphisch dar.
- e. Vergleichen Sie die Genauigkeit der Verfahren zwischen den einzelnen Stützstellen und insbesondere zu kleineren x hin. Welche Ursachen könnte Ihre Beobachtung haben?

6.2 Taylor-Reihe versus Padé-Approximation

- a. **Wiederholen Sie zu Hause, wie Padé-Approximationen über eine gegebene Reihenentwicklung einer Funktion berechnet werden können. Schauen Sie sich insbesondere an, wie man Padé-Approximationen in beliebiger Ordnung über Determinanten bestimmen kann.**
- b. Berechnen Sie für die Taylor-Reihe

$$f(x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \quad (2)$$

die zugehörigen Padé-Approximationen $[M, N](x)$ mit $M, N = 0, 1, 2$. Sie können die benötigten Determinanten z.B. mit Mathematica ermitteln.

- c. Stellen Sie die Padé-Approximationen zusammen mit der Taylor-Entwicklung in verschiedenen Ordnungen und der Funktion $f(x)$ für $x \in [-1, 5]$ graphisch dar.
- d. Vergleichen und diskutieren Sie die Ergebnisse.
- e. **Zusatzaufgabe:** Schreiben Sie ein Mathematica-Notebook, das für eine vorgegebene Reihenentwicklung einer Funktion Padé-Approximationen in beliebiger Ordnung berechnen kann.

6.3 ϵ -Algorithmus

- a. Wiederholen Sie, wie der ϵ -Algorithmus funktioniert. Schauen Sie sich vor allem noch einmal die Rekursionsvorschrift an.
- b. Für die Verwendung des ϵ -Algorithmus steht das Hauptprogramm `epsilon.c` zur Verfügung. Dieses liest die zu extrapolierenden Datenpunkte mit Hilfe der bekannten Funktion `readin.h` in die Feldkomponenten `Epsilon[p=0][k]` ein.

Schreiben Sie die noch fehlende Unterfunktion `epsilon.h` für den ϵ -Algorithmus und verwenden Sie dabei den folgenden Prototyp:

```
void epsilon(int N, double Epsilon[NMAX][NMAX], double *bestApproximation);
```

`N` gibt hier die Anzahl der zur Verfügung stehenden Datenpunkte an, die im Feld `Epsilon[p=0][k]` mit $k = 0, 1, \dots, N - 1$ stehen. `NMAX` ist ein im Hauptprogramm definiertes Makro, das die maximale Anzahl von Datenpunkten festlegt. Die beste Approximation, die über den ϵ -Algorithmus berechnet werden kann, wird über den Pointer `bestApproximation` in `*bestApproximation` geschrieben. Beachten Sie beim Schreiben der Funktion, dass im ϵ -Algorithmus auch der Index $p = -1$ auftritt und behandeln Sie diesen Fall richtig. (Eigentlich sollte in C vermieden werden, mehrdimensionale Felder an Funktionen zu übergeben; mehr dazu im Tutorium.)

Was ist hier mit „bester“ Approximation gemeint? Welche Einschränkung gibt es beim ϵ -Algorithmus?

- c. Das Problem der Extrapolation der Grundzustandsenergie für Spin-1/2-Ringe mit antiferromagnetischer Nächster-Nachbar-Kopplung im Heisenberg-Modell ist in der Vorlesung angesprochen worden. Untersuchen Sie die Folge der Grundzustandsenergien $E_0(N)/N$ für Ringe der Länge N mit dem Programm `epsilon.c`. Die Wertepaare $(N, E_0(N))$ finden Sie in der Datei `energien.dat`. Erzeugen Sie die benötigten Datenpaare $(N, E_0(N)/N)$, extrapolieren Sie diese mit dem ϵ -Algorithmus und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem bekannten Grenzwert für $N \rightarrow \infty$.
- d. Für die Anregungsenergien (Singlett-Triplett-Energielücke) von Spin-1-Ringen mit antiferromagnetischer Nächster-Nachbar-Kopplung gibt es bisher keinen analytisch bekannten Grenzwert. Es existiert nur die Vermutung, dass der Grenzwert echt größer Null ist (Haldane-Vermutung [1, 2, 3]). Generieren Sie mit dem Programm `epsilon.c` eine Abschätzung für das „Haldane gap“, d.h. den Grenzfall $\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta E(N)$. Die Anregungsenergien $(N, \Delta E(N))$ stehen ebenfalls in `energien.dat`.

Literatur

- [1] F. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983).
- [2] F. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [3] J. Schnack, Phys. Rev. B **62**, 14855 (2000).