

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2012	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

Aufgabenblatt 4

4.1 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?

Merke: Verwenden Sie einfach niemals `float`.

4.2 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? Tipp: Beachten Sie, dass thermodynamische Größen wie in Gleichung (4) Brüche aus e -Funktionen sind.

- 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

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

4.3 Zusatzaufgabe: exaktes Rechnen

Zum exakten Rechnen, d.h. mit allen Stellen bei ganzen Zahlen, gibt es selbstverständlich schon fertige Lösungen, z.B. Mathematica. Stellen Sie sich jetzt aber vor, Sie wollten Fakultäten genau berechnen. Wie würden Sie das tun?

Ich habe als Schüler alle Fakultäten bis $1000!$ programmiert und ausgedruckt; letzteres war ein Fehler. Das Programm ist leider auch verloren gegangen. Jetzt sind Sie dran.