

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2016	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
----------------------------------------------	---------------------------	-------------------------------------------------------

Aufgabenblatt 4

4.1 Numerische Genauigkeit I (Hausaufgabe + Email, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung am 10./11./13. 5. 2016)

- 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 für $N = 10, 100, 1000, 10000, \dots$ mit $\sqrt{2}$.

- b. Kann man hier mittels Compileroptionen die Genauigkeit verbessern?

Merke: Verwenden Sie einfach niemals `float`.

4.2 Exaktes Rechnen (Hausaufgabe + Vorstellen des Programms in der Übung)

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.

4.3 Interne Darstellung von Zahlen (Hausaufgabe + Email an jschnack@uni-bielefeld.de)

Schreiben Sie ein zu `darstellung.f` äquivalentes C-Programm, mit dem Sie in die Hall of Fame kommen und das Eingang in das Computerphysik-Skript findet.

4.4 Numerische Genauigkeit II (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

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. Stellen Sie $U(T)$ graphisch dar für $0 < T < 300$.
- f. 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

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