

# NUMERISCHE METHODEN IN DER PHYSIK

## Erste Übung WS 2010/2011 [C]

### Numerische Auswertung wichtiger Integrale aus der Thermodynamik kristalliner Festkörper mittels Gauss-Integration und kubischen Splines

**Das Problem: die folgende numerische Integration:**

Wenn Sie  $c_v$  als *molare* Wärmekapazität in Einheiten [J/mol/K] nehmen, das Volumen  $\Omega_0$  der Einheitszelle in [Bohr<sup>3</sup>], die Energie  $\epsilon$  in [eV], die Zustandsdichte  $N$  in [1/eV], und die Temperatur  $T$  in [K], lautet die Formel

$$c_v(T) = 1.2545786 \cdot 10^{13} \frac{m}{\rho} \frac{1}{\Omega_0 T^2} \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} d\epsilon \epsilon^2 N(\epsilon) \frac{\exp(x)}{[\exp(x) + 1]^2}$$

mit

$$x = 1.1604155 \cdot 10^4 \frac{\epsilon}{T}.$$

In diesen Gleichungen bedeutet  $m$  die Atommasse des Materials (in Gramm) und  $\rho$  ist die Dichte in Einheiten [kg/m<sup>3</sup>].

Die numerische Integration soll mittels der C-Programme *gauint.c* und *gauleg.c* durchgeführt werden:

```
// Definition der absoluten Temperatur in Kelvin:
T= ... ;

fcalls=0; //globale Variable, misst die Zahl der Funktions-Aufrufe
itest=0;
gauint(emin,emax,irel,gen,manf,minkr,mmax,&RESULT,&acc,&fehler,itest);
if(fehler==1) printf("Fehler in GAUINT !!!\n");
.
.
```

#### INPUT-Parameter:

emin, emax	Integrationsbereich (in eV), gegeben durch die DOS-Kurven
irel = 0/1	absolute/relative Fehler-Toleranz
gen	Fehler-Toleranz
manf	Ordnung der Gauss-Quadratur am Rechenbeginn
minkr	Steigerung der Gauss-Ordnung pro jedem weiteren Durchlauf
mmax	maximale Gauss-Ordnung
itest=1/0	gauint gibt Diagnosewerte aus / keine Diagnosewerte

## Erster Test für Platin:

```
irel      0      (absoluter Fehler, obwohl relativer meist vorzuziehen)
gen      0.0001

manf    5      minkr    5      mmax    5000

itest    0
```

## Ergebnis (Rechenzeit = 64 s)

PLATINUM

abs. Genauigkeit = 1.0000e-04

Die maximalen Integralgrenzen lauten -10.1812 bis 8.5948

T[K]	spec heat	Sommerfeld	required number of points
100.00	4.22802e-35	4.77558e-01	15 PROBLEM
200.00	1.02734e-15	9.55115e-01	15 PROBLEM
300.00	2.09932e-09	1.43267e+00	15 PROBLEM
400.00	1.68532e+00	1.91023e+00	80550
500.00	2.01692e+00	2.38779e+00	112890
600.00	2.31350e+00	2.86535e+00	29430
700.00	2.57755e+00	3.34290e+00	93605
800.00	2.81195e+00	3.82046e+00	34515
900.00	3.02053e+00	4.29802e+00	95550
1000.00	3.20675e+00	4.77558e+00	109725
1100.00	3.37431e+00	5.25313e+00	86025
1200.00	3.52658e+00	5.73069e+00	116100
1300.00	3.66666e+00	6.20825e+00	112890
1400.00	3.79727e+00	6.68581e+00	85100
1500.00	3.92076e+00	7.16336e+00	111830
1600.00	4.03916e+00	7.64092e+00	83265
1700.00	4.15421e+00	8.11848e+00	99500
1800.00	4.26728e+00	8.59604e+00	109725
1900.00	4.37954e+00	9.07360e+00	109725
2000.00	4.49197e+00	9.55115e+00	91680
.			
3000.00	5.73399e+00	1.43267e+01	109725
.			
4000.00	7.27499e+00	1.91023e+01	95550

- Die drei ersten Ergebnisse fuer *spec heat* sind offensichtlich falsch.
- Die Rechenzeit ist erschreckend gross!

## Ursache für das Fehlverhalten bei kleinen Temperaturen:

In der folgenden Tabelle finden Sie eine Detail-Analyse der obigen Rechnung. Sie enthält (für jede Temperatur) die Entwicklung und die Fehlerdiagnose des numerischen Integrationswertes.

Dabei bedeutet  $m$  den Grad der Gauss-Integration,  $s$  ist die entsprechende Näherung,  $diff$  ist der Betrag der Differenz zwischen den beiden letzten Näherungswerten, und  $gen$  ist die zu unterschreitende Fehlertoleranz:

```

T= 100 *****
m s          :      5    4.650823e-33
m s diff gen:     10    1.158410e-24    1.158410e-24    1.000000e-04
  100.00      4.22802e-35  4.77558e-01      15

```

```

T0 200 *****
m s          :      5    1.130078e-13
m s diff gen:     10    4.918644e-10    4.917514e-10    1.000000e-04
  200.00      1.02734e-15  9.55115e-01      15

```

```

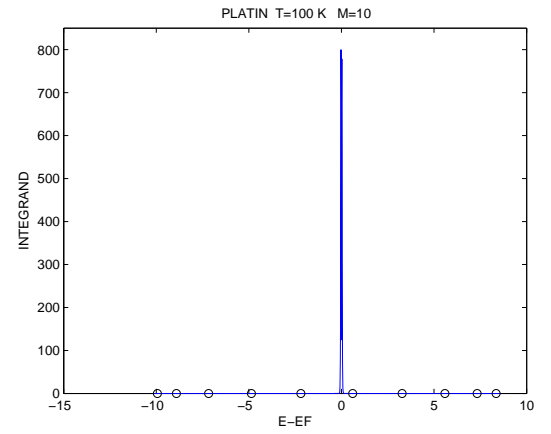
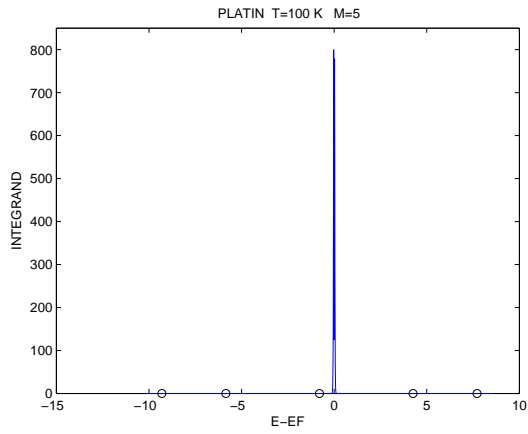
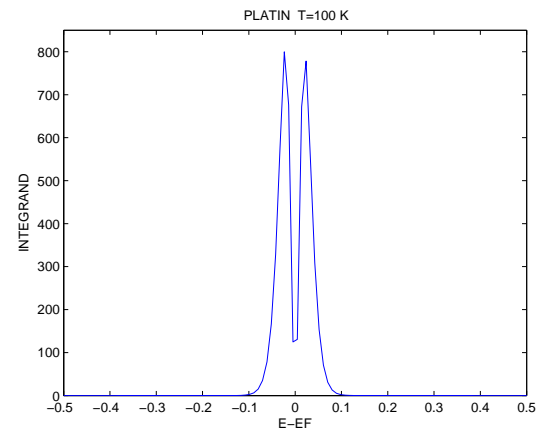
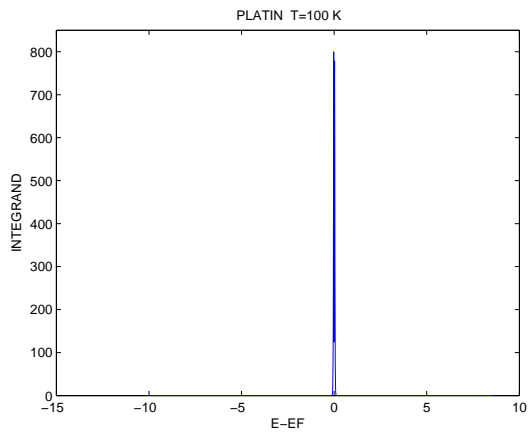
T= 300 *****
m s          :      5    2.309257e-07
m s diff gen:     10    2.608218e-05    2.585125e-05    1.000000e-04
  300.00      2.09932e-09  1.43267e+00      15

```

```

T= 400 *****
m s          :      5    2.785274e-04
m s diff gen:     10    5.067652e-03    4.789125e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     15    9.918921e-05    4.968463e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     20    1.141647e+03    1.141647e+03    1.000000e-04
m s diff gen:     25    3.021847e+00    1.138625e+03    1.000000e-04
m s diff gen:     30    1.327530e+01    1.025346e+01    1.000000e-04
m s diff gen:     35    3.152901e+02    3.020148e+02    1.000000e-04
m s diff gen:     40    9.067270e+00    3.062229e+02    1.000000e-04
.
.
m s diff gen:     855    1.853798e+02    7.170288e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     860    1.853859e+02    6.122150e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     865    1.853851e+02    8.653310e-04    1.000000e-04
m s diff gen:     870    1.853811e+02    3.914379e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     875    1.853855e+02    4.318118e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     880    1.853849e+02    5.574347e-04    1.000000e-04
m s diff gen:     885    1.853816e+02    3.284160e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     890    1.853851e+02    3.516438e-03    1.000000e-04
m s diff gen:     895    1.853851e+02    6.562048e-05    1.000000e-04
  400.00      1.68532e+00  1.91023e+00      80550

```



- Das Problem liegt offenbar darin, dass die Anfangs-Punktdichten (*manf* und *minkr*) viel zu klein gewaehlt wurden.
- In beiden Fällen ( $m=5$  und  $m=10$ ) wird die extrem schmale Inegralenfunktion verfehlt.
- Da die Integrandenfunktion mit steigendem  $T$  immer breiter wird, tritt dieses Problem nur bei kleinen Temperaturen auf.

## Zweiter Test für Platin:

```
irel      0      (absoluter Fehler)
gen       0.0001

manf  20   minkr  20   mmax  5000

itest    0
```

## Ergebnis (Rechenzeit = 38 s)

T[K]	spec heat	Sommerfeld	required number of points
100.00	4.71581e-01	4.77558e-01	223500
200.00	9.13405e-01	9.55115e-01	52560
300.00	1.31759e+00	1.43267e+00	61620
400.00	1.68531e+00	1.91023e+00	25500
500.00	2.01693e+00	2.38779e+00	27560
600.00	2.31356e+00	2.86535e+00	64800
700.00	2.57754e+00	3.34290e+00	27560
800.00	2.81202e+00	3.82046e+00	28620
900.00	3.02053e+00	4.29802e+00	23520
1000.00	3.20676e+00	4.77558e+00	22560
1100.00	3.37431e+00	5.25313e+00	26520
1200.00	3.52659e+00	5.73069e+00	34220
1300.00	3.66665e+00	6.20825e+00	74820
1400.00	3.79726e+00	6.68581e+00	74820
1500.00	3.92076e+00	7.16336e+00	31920
1600.00	4.03918e+00	7.64092e+00	74820
1700.00	4.15421e+00	8.11848e+00	28620
1800.00	4.26728e+00	8.59604e+00	28620
1900.00	4.37954e+00	9.07360e+00	28620
2000.00	4.49196e+00	9.55115e+00	28620
.			
.			
3000.00	5.73399e+00	1.43267e+01	29700
.			
.			
4000.00	7.27498e+00	1.91023e+01	28620

- Mit diesen erhöhten Werten von *manf* und *minkr* sind die erhaltenen Werte der spezifischen Wärme zufriedenstellend.
- Die Rechenzeit ist immer noch beträchtlich!

### Dritter Test für Platin:

emin -10.18122  
emax 8.59478

irel 0 (absoluter Fehler)  
gen 0.0001

manf 100 minkr 100 mmax 5000

itest 0

### Ergebnis (Rechenzeit = 22 s)

PLATINUM

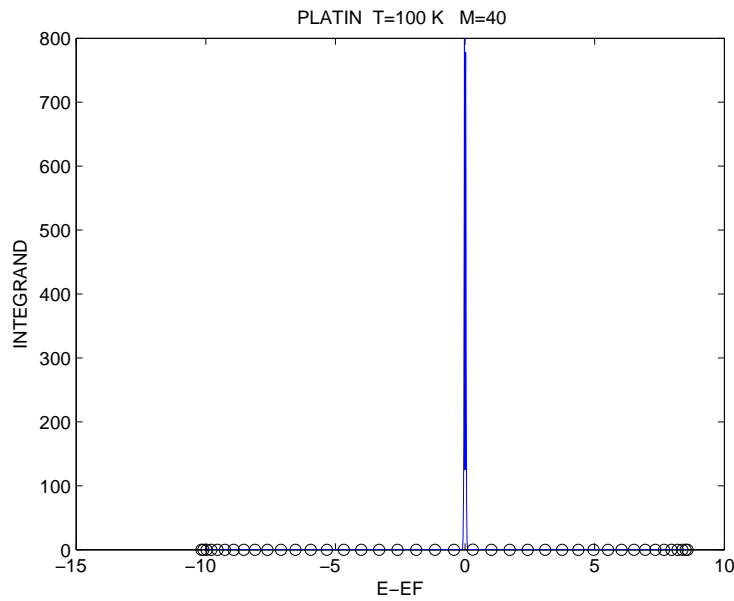
abs. Genauigkeit = 1.0000e-04

Die maximalen Integralgrenzen lauten -10.1812 bis 8.5948

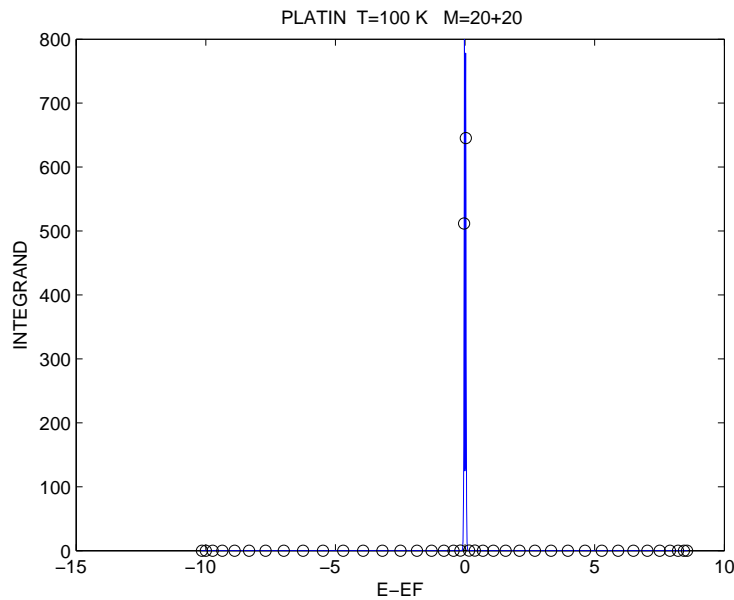
T[K]	spec heat	Sommerfeld	required number of points
100.00	4.71582e-01	4.77558e-01	56100
200.00	9.13397e-01	9.55115e-01	12000
300.00	1.31759e+00	1.43267e+00	12000
400.00	1.68531e+00	1.91023e+00	9100
500.00	2.01693e+00	2.38779e+00	9100
600.00	2.31356e+00	2.86535e+00	15300
700.00	2.57754e+00	3.34290e+00	15300
800.00	2.81202e+00	3.82046e+00	23100
900.00	3.02053e+00	4.29802e+00	23100
1000.00	3.20675e+00	4.77558e+00	7800
1100.00	3.37431e+00	5.25313e+00	7800
1200.00	3.52658e+00	5.73069e+00	23100
1300.00	3.66666e+00	6.20825e+00	23100
1400.00	3.79726e+00	6.68581e+00	21000
1500.00	3.92076e+00	7.16336e+00	21000
1600.00	4.03918e+00	7.64092e+00	6600
1700.00	4.15421e+00	8.11848e+00	21000
1800.00	4.26728e+00	8.59604e+00	21000
1900.00	4.37954e+00	9.07360e+00	21000
2000.00	4.49196e+00	9.55115e+00	21000
.			
.			
3000.00	5.73399e+00	1.43267e+01	13600
.			
.			
4000.00	7.27497e+00	1.91023e+01	13600

- Die Rechenzeit hat deutlich abgenommen, was offensichtlich darauf zurückzuführen ist, dass die Zahl der erforderlichen Funktionswerte (bei gleicher Genauigkeit!) massiv kleiner geworden ist.

- Dennoch sind wir mit der Rechenzeit noch keineswegs zufrieden!
- Wo man noch sinnvoll eingreifen könnte, ist die Gauss'sche Stützpunktverteilung (das folgende Bild zeigt 40 Stützpunkte):



- Es ist bekanntlich eine Eigenschaft der Gauss-Quadratur, dass die Stützpunktdichte in der Mitte des Integrationsbereiches ein Minimum ist, also gerade dort, wo unsere Integrandenfunktion am stärksten variiert.
- Eine einfache Korrekturmöglichkeit: Aufspaltung der Gauss-Quadratur in zwei Teile:



#### Vierter Test für Platin:

emin -10.18122  
emax 8.59478

irel 0 (absoluter Fehler)  
gen 0.0001

manf 100 minkr 100 mmax 5000

itest 0

PLUS AUFSPALTUNG DES INTEGRATIONS-BEREICHES:

=====

Anstelle von

```
gauint(emin,emax,irel,gen,manf,minkr,mmax,&RESULT,&acc,&fehler,itest);
```

kommen die Befehle:

```
gauint(emin,0.0,irel,gen,manf,minkr,mmax,&LINKS,&acc,&fehler,itest);  
gauint(0.0,emax,irel,gen,manf,minkr,mmax,&RECHTS,&acc,&fehler,itest);  
RESULT=LINKS+RECHTS;
```

#### Ergebnis (Rechenzeit = 1.6 s)

PLATINUM

abs. Genauigkeit = 1.0000e-04

Die maximalen Integralgrenzen lauten -10.1812 bis 8.5948

T[K]	spec heat	Sommerfeld	required number of points
100.00	4.71581e-01	4.77558e-01	1200
200.00	9.13404e-01	9.55115e-01	900
300.00	1.31759e+00	1.43267e+00	1200
400.00	1.68531e+00	1.91023e+00	1200
500.00	2.01693e+00	2.38779e+00	2500
600.00	2.31356e+00	2.86535e+00	2500
700.00	2.57755e+00	3.34290e+00	2500
800.00	2.81202e+00	3.82046e+00	2500
900.00	3.02053e+00	4.29802e+00	3100
1000.00	3.20675e+00	4.77558e+00	3100
1100.00	3.37431e+00	5.25313e+00	3100
1200.00	3.52658e+00	5.73069e+00	3100
1300.00	3.66666e+00	6.20825e+00	3100
1400.00	3.79726e+00	6.68581e+00	2700



1500.00	3.92076e+00	7.16336e+00	2700
1600.00	4.03918e+00	7.64092e+00	2700
1700.00	4.15421e+00	8.11848e+00	3600
1800.00	4.26728e+00	8.59604e+00	3600
1900.00	4.37954e+00	9.07360e+00	3600
2000.00	4.49196e+00	9.55115e+00	3600
.			
.			
3000.00	5.73399e+00	1.43267e+01	3600
.			
.			
4000.00	7.27498e+00	1.91023e+01	7000

- Die Rechenzeit ist extrem zurückgegangen.