2.1 固体的热容量

在德拜近似下,固体的热容量由下式给出

$$C_V = 9Nk\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_d/T} \frac{\xi^4 e^\xi}{(e^\xi-1)^2} d\xi$$

式中 Θ_D 为德拜温度. 为了求得热容量, 需要计算上式中的积分, 这一积分只有当 $\Theta_d/T \ll 1$ 或 $\Theta_d/T \gg 1$ 时才能解析积出, 一般情况下只能进行数字计算. 考虑

$$f(x) = \int_0^x \frac{\xi^4 e^\xi}{(e^\xi-1)^2} d\xi$$

利用我们学到的方法, 可以对不同的 x 求出其值, 并做出 $f(x)$ 的表或图形. 为了计算积分, 注意到 $\xi = 0$ 是被积函数的可去奇点, 因此, 应在该点把被积函数展开为 ξ 的级数; 当 $\xi \to \infty$, 被积函数指数减小. 已知

$$f(\infty) = \int_0^\infty \frac{\xi^4 e^\xi}{(e^\xi-1)^2} d\xi = \frac{4}{15}\pi^4$$

我们可以根据 x 的值的大小分别用两种方法计算, 取一值 x_c, 当 $x < x_c$ 时, 用原式计算, 当 $x > x_c$ 时, 可以计算 $f(\infty) - f_1(x)$, 其中

$$f_1(x) = \int_x^\infty \frac{\xi^4 e^\xi}{(e^\xi-1)^2} d\xi$$

x_c 可以选择的大一点, 这样 $f_1(x)$ 的数值比较小, 计算精度要求可以低一些.

我们选择 $x_c = 10$, $x < x_c$ 时, 用辛普生方法计算 $f(x)$, 被积函数为

$$\begin{cases} \xi^2 - \frac{\xi^4}{12} + \frac{\xi^6}{240} & 0 \le \xi < 0.05 \\ \frac{\xi^4 e^\xi}{(e^x-1)^2} & 0.05 \le \xi \le x_c \end{cases}$$

当 $x > x_c$ 时, 计算 $f_1(x)$, 对积分作变量变换 $\xi = \eta + x$ 则

$$f_1(x) = e^{-x}\int_0^\infty \frac{(\eta+x)^4 e^{-\eta}}{(1-e^{-(\eta+x)})^2} d\eta$$

这一积分可用高斯 ---拉盖尔方法计算. 作为练习, 请同学完成余下的计算并作出 $f(x) \sim x$ 的图形

2.2 共轭梯度法

编制共轭梯度法的程序并求下面函数的极小值点及极小值,

$$F(x_1, \cdots, x_n) = 1 + \sum_{i=2}^{n} \left[100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_{i-1})^2\right] \tag{2.1}$$

取 $n = 10$, 选择初始点为 $x_i = i/10$, $i = 1, 2, \cdots, 10$.