

<p style="text-align: center;">4. Übungssektion: – Computerorientierte Theoretische Physik Optimierungsprobleme</p>
--

Erster Übungstermin dieser Sektion: ab 05.12.2019. Die Nachbereitungsaufgaben sind in der Übung, die diese Sektion abschließt, abzugeben/zu besprechen.

Vorbereitungsaufgabe 1 : *TAO, die Optimierungsbibliothek von Petsc*

1. In diesem Übungszettel widmen wir uns den Optimierungsproblemen. Das TAO Paket in Petsc bietet viele Standardalgorithmen in einem vereinheitlichten Interface an. Lesen Sie dazu das TAO-Manual durch, um sich mit dem Interface vertraut zu machen.
2. Wir werden wieder einen Beispielcode als Basis für die folgende Aufgabe nehmen und zwar wird der Code `tao/constrained/examples/tutorials/toy.c` empfohlen, dieser ist noch einigermaßen einfach, aber kann vermutlich mehr als wir brauchen. Achten Sie wieder darauf, dass die Version des Beispiels zur Petsc Version im PC-Pool passt.
3. Versuchen Sie den Beispielcode zu verstehen, um für die Aufgabe in der Übung gerüstet zu sein.
4. Informieren Sie sich bitte auch über Monitorfunktionen, es kann sinnvoll sein, später dem Algorithmus bei der Lösungsfindung zu zu schauen.

Aufgabe 2 : *Lösung eines physikalisch motivierten Optimierungsproblem*

1. Überlegen Sie sich eine physikalische Problemstellung, für das Sie ein Optimierungsproblem lösen wollen: Beispiele für Probleme enthalten: z.B. Optimierung von Atompositionen eines Moleküls/Kristall-ähnlichen Systems (z.B. mit Modell-Lennard-Jones Potential), Phononen, Imagedeconvolution, Bahnkurven in der Lagrangemechanik etc...
2. Leiten Sie vor der Übung die notwendigen Funktionen und Gradienten her und überlegen Sie, ob Randbedingungen berücksichtigt werden können.
3. Lösen Sie das Problem mit verschiedenen Methoden. (Um die Komplexität nicht zu groß werden zu lassen, können Sie sich auf Methoden beschränken, die keine Hess'sche Matrix benötigen).