

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2009	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

Aufgabenblatt 7

7.1 Minimumssuche

Erweitern Sie das in der Vorlesung vorgestellte und auf meiner Webseite verlinkte Mathematica-Notebook `Vorlesung-15.nb` um die folgenden Funktionen.

- Programmieren Sie ein Gradientenverfahren. Nutzen Sie die analytische Ableitung, die Mathematica bereitstellt. Beginnen Sie mit verschiedenen Startwerten und untersuchen Sie, in welches Minimum die Suche hineinläuft.
- Berechnen Sie mit Mathematica die Matrix G der zweiten Ableitungen am Ort des Minimums und bestimmen Sie die Eigenwerte.
- Schauen Sie sich zur Wiederholung das Mathematica-Notebook zur Grundzustandsuche bei Argonclustern an.

7.2 Lineare Gleichungssysteme und hermitesche Eigenwertprobleme

In der Vorlesung wurden zwei Programme zum Einlesen von Matrizen und Lösen von linearen Gleichungssystemen sowie dem Bestimmen der Eigenwerte hermitescher Matrizen vorgestellt.

- Laden Sie diese Programme (in FORTRAN) sowie die zugehörigen Beispielmatrizen. Konvertieren Sie die beiden Programme nach C/C++.
- Informieren Sie sich, wie Sie die LAPACK-Routinen auf Ihrem System einbinden können. Es gibt zwei Möglichkeiten. Auf Ihrem Linux-System ist bestimmt irgendwo eine Lapack-Bibliothek versteckt. Diese brauchen Sie nur dazulinken. Informieren Sie sich, wie das geht. Alternativ können Sie die Routinen mit allen Abhängigkeiten herunterladen, compilieren und dazulinken.
- Lassen Sie die Programme laufen. Probieren Sie selbst andere Matrizen aus.