Moritz Seppelt
194557

Computational Physics
vom 06.12.2021

Hausaufgabe 4

Für die Erzeugung von Zitronensäure ($C_6H_8O_7$). Also $a = 6$, $b = 8$, $c = 7$ und anfangs $n = 1$ erhält man $x = 2.25$, $y = 3.75$, $z = -0.5$. Jedoch sind gebrochene Stoffmengen nicht sinnvoll. Hier kommt das n ins Spiel. n beschreibt, wie viel Erzeugnis ich erreichen möchte. Also sind x, y, z direkt proportional zu n. Da wir aus dem Sachzusammenhang fordern müssen, dass $x, y, z \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}$, erhöre ich n solange bis auch $x, y, z \in \mathbb{Z}$ sind. Für Zitronensäure ergibt sich für ein $n = 4$: $x = 9$, $y = 15$, $z = -2$. Negative werte bedeuten hierbei, dass der der dazugehörige Stoff ($x \Leftrightarrow$ Methan, $y \Leftrightarrow$ Kohlendioxid, $z \Leftrightarrow$ Wasser) nicht hinzugefügt werden muss, sondern abgegeben wird. Hier alle Ergebnisse:

Stoffname	Summenformel	n	x	y	z
Fruktose	$C_6H_{12}O_6$	1	3	3	0
Ethanol	C_2H_6O	2	3	1	0
Weinsäure	$C_4H_6O_6$	4	5	11	2
Zitronensäure	$C_6H_8O_7$	4	9	15	-2

Zu bemerken ist schließlich, dass man das kleinste n gefunden hat, für das $x, y, z, \in \mathbb{Z}$ gilt, gdw. $\mathrm{ggT}(x, y, z) = 1$. Dies ist hier leicht zu überprüfen.

Für den Vorteil gegenüber des Gauß-Jordan-Algorithmus, muss man sich die Laufzeiten anschauen. Gauß benötigt $O(n^3)$ (zum Lösen eines Gleichungssystems mit n Unbekannten und Gleichungen) für jede Lösung. Das liegt daran, dass auch die Inhomogenität im Algorithmus verwendet und verändert wird. Die LU-Zerlegung dauert zwar auch $O(n^3)$, jedoch muss dies nur einmal gemacht werde, da in diesem Algorithmus die Inhomogenität keine Rolle spielen. Die Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstitution dauert dann nur $O(n^2)$. Somit kann man schlussfolgern, wenn häufig, wie hier der Fall, das selbe homogene Gleichungssystem unterschiedlicher Inhomogenitäten gelöst werden soll, dann bietet sich die LU-Zerlegung an.

Meine Behauptung, dass die LU-Zerlegung $O(n^3)$ dauert, kann man sehr schön anhand der Abbildung 1 verifizieren. Dort ist die Berechnungsdauer t von der LU-Zerlegung in Abhängigkeit von der Matrixgröße N (bedeutet, dass immer $N \times N$ - Matrizen zerlegt werden) abgezeichnet. Es zeigt sich, dass die gemessenen Zeiten sehr gut proportional zu N^3 ist. Der orangene Graph ist um genau zu sein

$$t(N) = 2,5 \cdot 10^{-7} \cdot N^3$$

Das $O(n^3)$ Verhalten kommt daher, dass für jede Spalte durch im Mittel durch die Hälfte aller Zeilen und dann nochmal im Mittel die Hälfte aller Spalten iteriert werden muss.

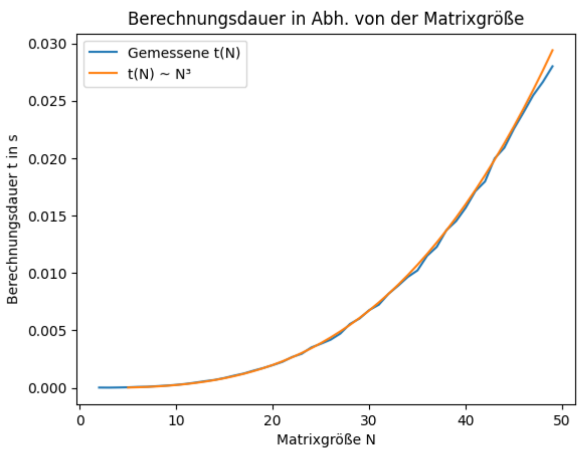

Abbildung 1: Berechnungsdauer t in Abhängigkeit von der Matrixgröße N