

Übung 4: Lösung von Gleichungssystemen

Computational Physics 1 - WS 2020/2021

04.01.2021

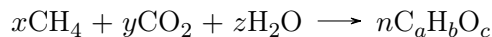
Aufgabe 1: LU-Zerlegung mit Crout's Algorithmus

Captain Kirk vom Raumschiff Enterprise hat die erste Version eines neuartigen Replikators erhalten, einem Gerät, das in der Lage ist, Atome vorgegebener Stoffe bequem zu beliebigen neuen Verbindungen zusammenzusetzen. Das Gerät ist dem späteren Replikator, der auf Quantenebene arbeitet, zwar unterlegen, aber immerhin ein Meilenstein gegenüber der klassischen Chemie und eine großartige Sache, um unliebsame Treibhausgase von der Erde zu schaffen.

An Bord der Enterprise wurden Container mit Methan (CH_4), Kohlendioxid (CO_2) und Wasser (H_2O) geladen, aus denen sich Kirk nun einen Glühwein synthetisieren möchte. Die dafür benötigten Substanzen Fructose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$), Ethanol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$), Weinsäure ($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$) und Zitronensäure ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$) müssen mit diesem unausgereiften Replikator noch einzeln hergestellt werden. Die benötigten Ausgangsstoffe müssen in den richtigen Mengen in den Apparat eingefüllt werden. Kirk stellt folgende Gleichung auf



welche sich zu der Netto-Gleichung



vereinfacht, welche übrig bleibende Ausgangsstoffe mit auf der linken Seite bilanziert ($x = x_1 - x_2$ usw.). Es ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\text{C: } x + y = n \cdot a$$

$$\text{H: } 4x + 2z = n \cdot b$$

$$\text{O: } 2y + z = n \cdot c$$

Kirk entschließt sich, die Lösung dieses Gleichungssystems für die verschiedenen Glühweinsubstanzen (a, b, c) an Sie zu delegieren. Lösen Sie das Problem unter Verwendung von Crout's Algorithmus der LU-Zerlegung sowie der Vorwärts- und Rückwärtselimination.

Programmieren Sie dazu mit Python eine Funktion `my_LU` die eine Matrix LU-zerlegt und eine weitere Funktion `elimination`, die mittels der erzeugten Matrizen L und U dann das Gleichungssystem löst (Vorwärts- und Rückwärtselimination). Bestimmen Sie nun die Stoffmengen x, y, z der Ausgangsstoffe für die einzelnen Zutaten des Glühweins. Legen Sie dar, welchen Vorteil die LU-Zerlegung für die Lösung des Problems (Herstellung einer Reihe verschiedener Glühweinzutaten) gegenüber der Gauss-Jordan-Elimination hat. Welche Bedeutung hat der Faktor n im Gleichungssystem?

Aufgabe 2: Zeitverhalten der Implementierung

Das Oberkommando der Sternenflotte strebt eine Weiterentwicklung des Replikators an, sodass noch viel mehr chemische Elemente (außer C, H und O) in die gewünschten Endprodukte eingebaut werden können. Hierbei fielen dann größere Matrizen an, die LU-zerlegt werden müssten. Das Oberkommando erteilt Ihnen den Auftrag, das Rechenzeitverhalten der von Ihnen programmierten LU-Zerlegung in Abhängigkeit der Matrixgröße N zu untersuchen. Verwenden Sie hierzu mit Zufallszahlen gefüllte Matrizen der Größe $N \times N$. Stellen Sie Ihre Ergebnisse grafisch dar. Wählen Sie dafür geeignete Größen N sowie eine geeignete Darstellungsform um das Zeitverhalten aussagekräftig beurteilen zu können. Begründen Sie die gefundene Abhängigkeit.

Hinweise

- `time.clock()` zeigt die Aktuelle Zeit in Sekunden (`import time`)
- `np.random.rand(n)` erzeugt einen Vektor mit n Zufallszahlen

Einreichung per E-mail

Die Lösungen sind als E-Mail-Anhang bis spätestens 18.01.2021, 04:00 Uhr morgens an teaching-nanooptics@uni-jena.de zu senden. Bitte unbedingt Name, Matrikelnummer und Nummer der Übungsserie in die Betreffzeile der E-Mail schreiben. Lösungen ohne Angabe von Name und Matrikelnummer, mit Funktionsdefinitionen die von den Vorgaben abweichen oder zu spät eingereichte Lösungen können nicht berücksichtigt werden.

Die Funktionen `my_lu` und `elimination` sollen nach den Schemata der Funktionen in `lu_crout_skeleton.py` aufgebaut sein und in einem externen Modul definiert werden. Als Hilfestellung für die Auswertung gibt es das Python-Skript `eval_skeleton.py`.

Einzusenden ist **eine zip-Datei (nicht 7-zip!)** mit `lu_crout.py`, `eval.py`, und eine 1-2 seitige Darstellung Ihrer Ergebnisse, welche die erzeugten Bilder und deren Beschreibung sowie Interpretation beinhaltet.