

Computational Physics 1: Übung 5:

Lösung von Gleichungssystemen

Jakob Hollweck

Abgabe 15.12.17

LU-Zerlegung mit Crout's Algorithmus

Das Gleichungssystem $x\text{CH}_4 + y\text{CO}_2 + z\text{H}_2\text{O} \rightarrow n\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c$ konnte mithilfe der LU-Zerlegung gelöst werden. Der Faktor n , der die Skalierung des Inhomogenitätsvektors angibt, ist konstant und das Gleichungssystem linear. So skaliert auch das Ergebnis linear mit n . Die Ergebnisse für $n = 1$ sind in untenstehender Tabelle gegeben, wobei ein negativer Wert ein Produkt des Prozesses bedeutet.

	x : Methan (CH_4)	x : Kohlendioxid (CO_2)	z : Wasser (H_2O)
Fructose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$)	3	3	0
Ethanol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$)	1.5	0.5	0
Weinsäure ($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$)	1.25	2.75	0.5
Zitronensäure ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$)	2.25	3.75	-0.5

Die LU-Zerlegung hat einen Laufzeitvorteil gegenüber dem Gauß-Jordan Verfahren, da bei letzterem nach jedem Schritt ein neues Gleichungssystem gelöst werden muss und so die Rechenzeit mit N^3 skaliert. Dagegen skaliert die Vorwärts-/Rückwärtselimination nur mit N^2 . Die LU-Zerlegung skaliert zwar auch mit N^3 , siehe Abbildung 1, muss aber nur einmal durchgeführt werden.

Zeitverhalten der Implementierung

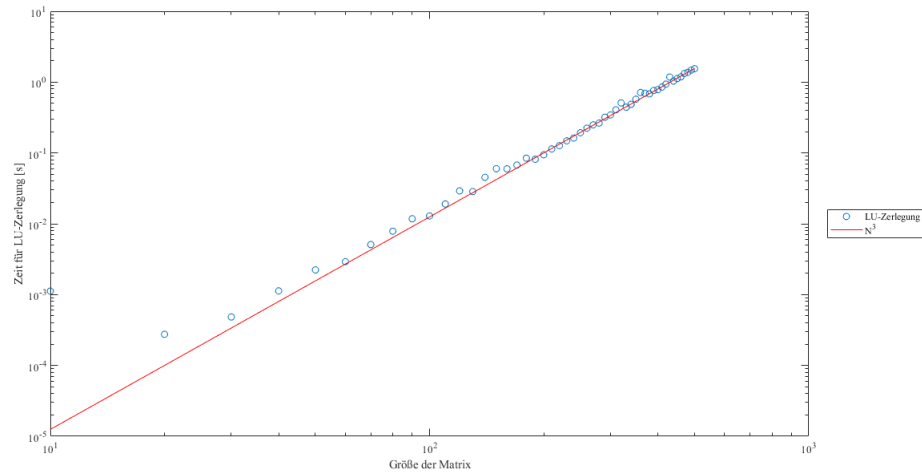


Abbildung 1: Rechenzeit für die LU-Zerlegung einer $N \times N$ -Matrix in Abhängigkeit der Matrixgröße N im Vergleich zu einer Geraden mit Anstieg N^3

Die in Abbildung 1 zu erkennende Kurve zeigt durch den Vergleich mit der Vergleichsgeraden N^3 und der logarithmischen Darstellung eindeutig ebenfalls einen solchen Anstieg für höhere N . Dieser Anstieg kommt zustande, da die LU-Zerlegung durch eine dreifach ineinander verschachtelte Schleife implementiert wurde, wobei jeder dieser Schleifen N Operationen durchführen muss. Bei Annahme eines linearen Zusammenhangs zwischen Rechenoperationen und Rechenzeit ergibt sich so ein Zusammenhang von N^3 . Der Grund für den schwächeren Zusammenhang für kleine N ist, dass in diesem Bereich die Rechenzeit viel mehr von z.B. Fluktuationen in der momentanen Leistung des Rechners abhängt als bei höheren N .