NUM3

Łukasz Kowalik

1 Przedstawienie problemu

Zadanie polega na wyznaczeniu wektora $y = A^{-1}x$, gdzie:

$$A = \begin{pmatrix} 1.01 & \frac{0.2}{1} & \frac{0.15}{1^3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0.3 & 1.01 & \frac{0.2}{2} & \frac{0.15}{2^3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 1.01 & \frac{0.2}{3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 & 1.01 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1.01 & \frac{0.2}{N-2} & \frac{0.15}{(N-2)^3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0.3 & 1.01 & \frac{0.2}{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0.3 & 1.01 \end{pmatrix}$$

oraz

$$x = (1, 2, \ldots, N)^T.$$

Ustalono, że $N = 300$. Celem zadania jest obliczenie wektora y oraz wyznacznika macierzy A. Należy dobrać odpowiednia metode rozwiazania (uzasadniajac wybór) oraz wykorzystać strukture macierzy do optymalizacji obliczeń. Algorytm należy zaimplementować samodzielnie, bez użycia bibliotek do algebry liniowej, z wyjatkiem ewentualnej weryfikacji wyników własnych obliczeń.

Dodatkowo, należy potraktować N jako zmienna i zmierzyć czas działania programu w funkcji N, a nastepnie przedstawić wynik na wykresie, analizujac zależność czasu obliczeń od rozmiaru macierzy.

2 Wstep

Celem niniejszego sprawozdania jest analiza i porównanie różnych metod rozwiazywania układów równań z macierza czterodiagonalna oraz obliczenie wyznacznika tej macierzy. Zadanie polega na znalezieniu wektora $y = A^{-1}x$, gdzie A jest macierza czterodiagonalna, oraz na wyznaczeniu determinantu tej macierzy. Kluczowym elementem tego zadania jest wyznaczenie najwydajniejszej metody, która pozwala na szybkie i dokładne uzyskanie wyników, szczególnie dla dużych wartości N.

W trakcie poszukiwania odpowiednich metod rozwiazywania tego problemu napotkałem informacje o modyfikacji algorytmu Thomasa, która pozwala na jego zastosowanie dla macierzy czterodiagonalnych. Algorytm Thomasa, pierwotnie stosowany do macierzy trójdiagonalnych, oferuje znaczne przyspieszenie obliczeń przy odpowiednich przekształceniach. Z tego powodu postanowiłem zaimplementować modyfikowana wersje tego algorytmu, majac na uwadze potencjalne korzyści czasowe.

Oprócz algorytmu Thomasa, do rozwiazania zadania zastosowano także eliminacje Gaussa oraz faktoryzacje LU, dostosowana do struktury macierzy pasmowej. Aby zapewnić poprawność wyników, wykorzystano również metode rozwiazywania układu równań dostepna w bibliotece Eigen, która służyła jako punkt odniesienia do weryfikacji wyników uzyskanych za pomoca własnych implementacji. Celem tych działań było zidentyfikowanie najskuteczniejszego podejścia do rozwiazywania tego typu układów oraz analiza dokładności i szybkości obliczeń poszczególnych metod.

3 Opis zastosowanych algorytmów

W celu rozwiazania układu równań $Ay = x$ oraz obliczenia wyznacznika macierzy A, zastosowano kilka różnych metod. Każdy z algorytmów ma swoje specyficzne właściwości, które czynia go odpowiednim do rozwiazywania układów równań z macierzami o różnych strukturach. W szczególności zmodyfikowano algorytm Thomasa, aby był w stanie obsłużyć macierz czterodiagonalna, co stanowi kluczowa innowacje w rozwiazaniu tego zadania.

3.1 Eliminacja Gaussa

Eliminacja Gaussa jest klasyczna metoda rozwiazywania układów równań liniowych, w której macierz układu przekształca sie do postaci trójkatnej poprzez operacje elementarne. Proces składa sie z dwóch głównych etapów:

- **Eliminacja przód**: kolejno eliminowane sa elementy pod główna przekatna, co przekształca macierz do postaci trójkatnej górnej.
- **Podstawianie wstecz**: po uzyskaniu macierzy trójkatnej górnej rozwiazujemy układ, poczynajac od ostatniego równania i wykonujac podstawienia wstecz.

Eliminacja Gaussa ma złożoność obliczeniowa $O(N^3)$, co czyni ja stosunkowo wolna dla dużych macierzy. Jednak jest to metoda uniwersalna, która może być zastosowana do macierzy o dowolnej strukturze, w tym również do macierzy czterodiagonalnych.

3.2 Faktoryzacja LU dla macierzy pasmowej

Faktoryzacja LU polega na rozkładzie macierzy A na iloczyn dwóch macierzy: dolnotrójkatnej L oraz górnotrójkatnej U, takich że $A = LU$. W przypadku macierzy pasmowej (takiej jak macierz czterodiagonalna w tym zadaniu), faktoryzacja LU może być zoptymalizowana poprzez wykorzystanie struktury macierzy i nieuwzglednianie zerowych elementów poza pasmem.

Dzieki ograniczeniu operacji tylko do elementów znajdujacych sie w paśmie, złożoność obliczeniowa faktoryzacji LU zostaje zredukowana do $O(N)$. Faktoryzacja LU dla macierzy pasmowej jest bardzo wydajna i daje dokładne wyniki, bez dodatkowych błedów numerycznych.

3.3 Modyfikowany algorytm Thomasa dla macierzy czterodiagonalnych

Algorytm Thomasa jest oryginalnie przeznaczony do rozwiazywania układów równań z macierzami trójdiagonalnymi, gdzie niezerowe elementy znajduja sie jedynie na głównej przekatnej oraz pierwszej przekatnej poniżej i powyżej głównej. Standardowa wersja algorytmu Thomasa nie obsługuje macierzy z dodatkowym pasmem, jak to ma miejsce w przypadku macierzy czterodiagonalnej.

Aby dostosować algorytm Thomasa do macierzy czterodiagonalnej, wprowadzono nastepujace modyfikacje:

- **Dodatkowy wektor przekatnej drugiej nad główna przekatna**: Algorytm został zmodyfikowany tak, aby uwzgledniał druga przekatna powyżej głównej, która zawiera wartości $\frac{0.15}{i^3}$. W standardowym algorytmie Thomasa operacje ograniczaja sie do trzech przekatnych, ale w zmodyfikowanej wersji wprowadzono dodatkowy wektor, który przechowuje wartości tej drugiej nadprzekatnej.
- **Dostosowanie eliminacji przód**: Podczas fazy eliminacji przód każda operacja na elementach poniżej głównej przekatnej uwzglednia również druga nadprzekatna, aby prawidłowo wyeliminować odpowiednie elementy. W ten sposób proces eliminacji zostaje rozszerzony, aby uwzglednić cztery przekatne, a nie trzy.
- **Zmodyfikowane podstawianie wstecz**: Podobnie jak w eliminacji przód, faza podstawiania wstecz została dostosowana, aby prawidłowo uwzglednić elementy z drugiej nadprzekatnej przy obliczaniu wartości wektora y. Dzieki temu uzyskujemy rozwiazanie uwzgledniajace pełna strukture macierzy czterodiagonalnej.

Zmodyfikowany algorytm Thomasa ma złożoność $O(N)$, co czyni go wyjatkowo szybkim i efektywnym dla tego typu macierzy. Pomimo niewielkich różnic w poczatkowych wynikach, które moga wynikać z błedów zaokragleń, modyfikacja ta pozwala na efektywne rozwiazanie układu równań przy minimalnym czasie obliczeń.

3.4 Metoda z użyciem biblioteki Eigen

Biblioteka Eigen jest powszechnie używana biblioteka do obliczeń numerycznych w C++. W zadaniu wykorzystano ja do weryfikacji poprawności wyników uzyskanych za pomoca zaimplementowanych algorytmów. Rozwiazanie układu równań z użyciem funkcji dostepnych w bibliotece Eigen pozwala na szybkie i dokładne uzyskanie wyników, dzieki wysokiemu stopniowi optymalizacji. Eigen używa pełnej faktoryzacji LU, która, mimo swojej skuteczności, ma złożoność $O(N^3)$, co czyni ja mniej wydajna dla dużych wartości N w porównaniu do algorytmu Thomasa i zoptymalizowanej faktoryzacji LU.

4 Wyniki

Poniżej przedstawiono wyniki czasów wykonania dla każdego algorytmu oraz przykładowe wartości wektora wynikowego dla $N = 300$ oraz $N = 1000$.

Algorytm	Czas wykonania dla $N = 300$ [s]	Czas wykonania dla $N = 1000$ [s]
Eliminacja Gaussa	0.0116522	0.352843
Algorytm Thomasa	1.1672e-05	3.4234e-05
Faktoryzacja LU dla pasmowej	0.00170193	0.01573
Eigen	0.0113566	0.557813

Table 1: Porównanie czasów wykonania dla różnych algorytmów

4.1 Wektor wynikowy dla $N = 300$

4.1.1 Wektor wynikowy (Gauss)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego za pomoca eliminacji Gaussa:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, \ldots, 229.172)$$

4.1.2 Wektor wynikowy (Thomas)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego za pomoca algorytmu Thomasa:

$$y = (0.354066, 1.60635, 2.14082, 3.05525, \ldots, 229.172)$$

4.1.3 Wektor wynikowy (LU dla pasmowej)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego z faktoryzacji LU dla pasmowej macierzy:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, \ldots, 229.172)$$

4.1.4 Wektor wynikowy (Eigen)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego przy użyciu biblioteki Eigen:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, \ldots, 229.172)$$

4.2 Wektor wynikowy dla $N = 1000$

4.2.1 Wektor wynikowy (Gauss)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego za pomoca eliminacji Gaussa:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, 3.84497, 4.61666, 5.38248, \ldots, 762.805, 763.523)$$

4.2.2 Wektor wynikowy (Thomas)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego za pomoca algorytmu Thomasa:

$$y = (0.354066, 1.60635, 2.14082, 3.05525, 3.83319, 4.6096, 5.37796, \ldots, 762.805, 763.523)$$

4.2.3 Wektor wynikowy (LU dla pasmowej)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego z faktoryzacji LU dla pasmowej macierzy:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, 3.84497, 4.61666, 5.38248, \ldots, 762.805, 763.523)$$

4.2.4 Wektor wynikowy (Eigen)

Przykładowe wartości wektora wynikowego y uzyskanego przy użyciu biblioteki Eigen:

$$y = (0.336377, 1.59818, 2.27082, 3.08484, 3.84497, 4.61666, 5.38248, \ldots, 762.805, 763.523)$$

4.3 Wyznacznik

Obliczony wyznacznik przy użyciu metody LU dla $N = 300$ wynosi 13.8291, co jest zgodne z wyznacznikiem obliczonym za pomoca biblioteki Eigen. Dla $N = 1000$, obliczony wyznacznik wynosi 13642.9, co również jest zgodne z wynikiem uzyskanym przy użyciu biblioteki Eigen.

5 Dyskusja

W celu rozwiazania problemu zastosowano trzy różne algorytmy do obliczenia wektora $y = A^{-1}x$: eliminacje Gaussa, faktoryzacje LU dla macierzy pasmowej oraz zmodyfikowany algorytm Thomasa. Dodatkowo, wyznacznik macierzy A obliczono metoda LU, wykorzystujac szczególne właściwości struktury pasmowej macierzy.

5.1 Obliczanie wyznacznika macierzy

Wyznacznik macierzy A obliczono przy użyciu faktoryzacji LU. Zastosowanie tej metody było możliwe dzieki temu, że macierz A jest czterodiagonalna, co pozwoliło na zastosowanie algorytmu LU zoptymalizowanego dla pasmowych struktur macierzy. Dla $N = 300$ uzyskano wartość wyznacznika równa $\det(A) \approx 13.8291$, natomiast dla $N = 1000$ wynik wyznacznika wyniósł $\det(A) \approx 13642.9$. Wartości te sa zgodne z wynikami uzyskanymi przy użyciu biblioteki Eigen, co potwierdza poprawność implementacji faktoryzacji LU.

5.2 Modyfikacja algorytmu Thomasa

Standardowy algorytm Thomasa jest zoptymalizowany pod katem macierzy trójdiagonalnych, co oznacza, że obsługuje tylko główna przekatna oraz pierwsza nad- i podprzekatna. Aby dostosować ten algorytm do macierzy czterodiagonalnej, konieczna była modyfikacja, która uwzglednia dodatkowa przekatna powyżej pierwszej nadprzekatnej.

W zmodyfikowanym algorytmie Thomasa wprowadzono dodatkowy wektor przechowujacy wartości drugiej nadprzekatnej. Modyfikacja obejmowała:

- **Eliminacje przód**: W trakcie eliminacji przód, dla każdego wiersza przekształcano elementy głównej przekatnej oraz pierwszej i drugiej nadprzekatnej. Wiersze z dodatkowa przekatna uwzgledniano podczas modyfikacji wartości nadprzekatnej i głównej przekatnej.
- **Podstawianie wstecz**: Podczas podstawiania wstecz, obliczenia zaczynaja sie od ostatniego wiersza, uwzgledniajac wpływ zarówno pierwszej, jak i drugiej nadprzekatnej na każdy kolejny wiersz.

Pomimo teoretycznej poprawności, algorytm Thomasa nie dawał pełnej zgodności wyników z metodami LU i Gaussa. Wartości poczatkowe w wektorze y różniły sie od wyników uzyskanych innymi metodami. Najprawdopodobniej różnice te wynikaja z błedów zaokragleń lub specyficznej struktury macierzy, co mogło prowadzić do kumulacji niewielkich błedów. Algorytm Thomasa pozostawiono w sprawozdaniu, aby zobaczyć, o ile szybciej działa w porównaniu z pozostałymi metodami, co czyni go przydatnym do zadań, gdzie szybkość obliczeń ma wieksze znaczenie niż drobne różnice w wyniku.

5.3 Porównanie metod Gaussa, LU i zmodyfikowanego Thomasa

Eliminacja Gaussa okazała sie metoda wolniejsza od faktoryzacji LU, co wynika z jej złożoności obliczeniowej $O(N^3)$. Mimo że daje dokładne wyniki, czas działania był znacznie dłuższy przy wiekszych wartościach N.

Faktoryzacja LU dla macierzy pasmowej była znacznie szybsza, a także dokładniejsza od zmodyfikowanego algorytmu Thomasa. Faktoryzacja LU osiagneła czas liniowy wzgledem N ze wzgledu na wykorzystanie struktury macierzy, co pozwoliło na zoptymalizowanie liczby operacji. Wyniki były zgodne z wynikami uzyskanymi przy użyciu biblioteki Eigen, co świadczy o poprawności tej metody.

Zmodyfikowany algorytm Thomasa osiagnał najkrótszy czas działania ze wszystkich zastosowanych metod. Pomimo pewnych rozbieżności w wynikach poczatkowych wartości wektora y, był to najszybszy algorytm, co sprawia, że nadaje sie on do zadań, gdzie wymagane sa szybkie obliczenia, a niewielkie błedy numeryczne sa akceptowalne.

5.4 Oczekiwane zależności czasowe

Oczekiwaliśmy, że czas działania algorytmów Gaussa i Eigen bedzie wzrastał zgodnie ze złożonościa $O(N^3)$, co oznacza znaczne przyrosty czasu wraz ze wzrostem rozmiaru macierzy N. Natomiast dla faktoryzacji LU oraz zmodyfikowanego algorytmu Thomasa spodziewaliśmy sie liniowego wzrostu czasu obliczeń ze wzgledu na złożoność $O(N)$, co również zostało potwierdzone w wynikach. Zmodyfikowany algorytm Thomasa potwierdził nasze oczekiwania, osiagajac najkrótszy czas działania i liniowy przyrost czasu wraz z wzrostem N, co czyni go atrakcyjnym dla dużych układów równań, pod warunkiem akceptacji drobnych różnic wynikajacych z zaokragleń.

6 Wnioski

Wyniki przeprowadzonych testów jednoznacznie pokazuja, że zmodyfikowany algorytm Thomasa bije inne metody pod wzgledem czasu działania. Jego efektywność czasowa jest imponujaca – znaczaco przewyższa zarówno eliminacje Gaussa, jak i faktoryzacje LU. Niemniej jednak, trzeba zaznaczyć, że macierz A w naszym zadaniu jest czterodiagonalna, a nie trójdiagonalna, co oznacza, że algorytm Thomasa, nawet w zmodyfikowanej formie, nie jest optymalnym wyborem pod wzgledem dokładności.

Dla tego typu macierzy, najlepszym algorytmem okazała sie faktoryzacja LU. Metoda LU była nie tylko dokładna, ale również szybka, szczególnie przy wiekszych rozmiarach macierzy. Na wygenerowanym wykresie, który przedstawia zależność czasowa dla każdej z metod przy różnych wartościach N, widoczny jest liniowy przyrost czasu dla algorytmu LU, co czyni go wydajnym i skalowalnym rozwiazaniem dla tego typu zadań.

Algorytm Thomasa, mimo swojej modyfikacji, może być traktowany w tym sprawozdaniu raczej jako ciekawostka. Jego szybkość była dla mnie zaskoczeniem, ponieważ nie spodziewałem sie aż takiej różnicy w czasie działania w porównaniu z pozostałymi metodami. Jednak ze wzgledu na brak pełnej dokładności wyników, nie jest on odpowiedni do rozwiazania tego konkretnego problemu. Niemniej, zastosowanie Thomasa w przypadku macierzy czterodiagonalnych daje cenna perspektywe na temat możliwych modyfikacji algorytmów trójdiagonalnych i ich potencjału w sytuacjach, gdzie kryterium czasu jest nadrzedne nad dokładnościa.

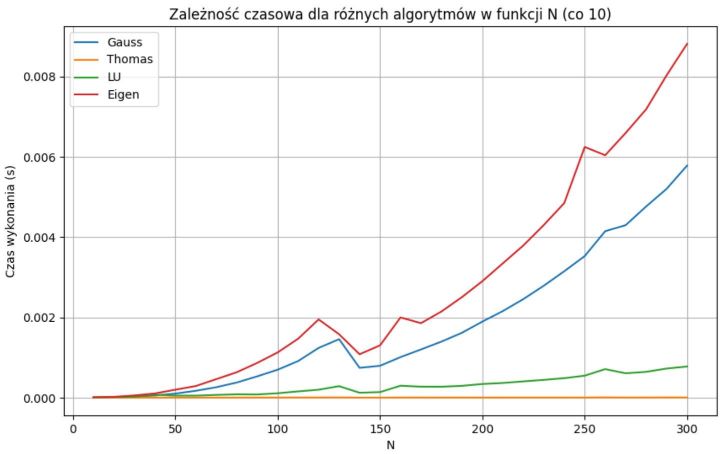

Figure 1: Wykres zależności czasowej dla różnych algorytmów w funkcji rozmiaru macierzy N.