

УДК 519.6

MSC 15A06, 37M05, 65F05

A MODIFICATION OF THOMAS ALGORITHM FOR SOLVING SYSTEM OF LINEAR EQUATIONS ON GRAPH

V. A. KOLESNYKOV

Faculty of Computer Science and Cybernetics, Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Kyiv, Ukraine, E-mail: valerii.kolesnykov@knu.ua. ORCID: 0009-0004-7984-2995.

МОДИФІКАЦІЯ МЕТОДУ ТОМАСА ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМИ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ НА ГРАФІ

В. А. КОЛЕСНИКОВ

Факультет комп'ютерних наук та кібернетики, Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, Київ, Україна, E-mail: valerii.kolesnykov@knu.ua. ORCID: 0009-0004-
7984-2995.

ABSTRACT. *The aim of the article* is to construct and analyze a direct numerical method for solving systems of linear equations which are formed during numerical simulations of mass transfer process on graph.

Research methodology. Proposed modification of Thomas method is based on the recursive removal of paths and cycles from the graph using the Thomas method and the cyclic Thomas method, respectively. Analysis of obtained numerical method is based on proving the main characteristics of numerical methods, such as correctness, stability, and asymptotic estimation of evaluating time.

Results of the research. A direct numerical method for solving the system of linear equations on graph based on Thomas method and cyclic Thomas method is constructed. The correctness of the proposed modification is proven. A stability result for this numerical method is obtained. Asymptotic estimates of the execution time and the amount of additional memory depending on the number of graph vertices are obtained.

Practical significance. Computational experiments indicate the superiority of the proposed algorithm over iterative numerical methods, so its application will positively affect the efficiency of numerical modeling of the mass transfer process on graphs.

KEYWORDS: system of linear equations, Thomas method, mathematical modelling, graphs.

АНОТАЦІЯ. Метою статті є побудова та аналіз прямого чисельного методу для розв'язання СЛАР, які утворюються під час чисельного моделювання процесу масопереносу на графі.

Методика дослідження. Запропонована модифікація методу Томаса базується на рекурсивному видаленні простих ланцюгів та простих циклів з графу з використанням методу Томаса та циклічного методу Томаса відповідно. Аналіз отриманого чисельного методу базується на доведенні основних характеристик чисельних методів, таких як коректність, стійкість та асимптотична оцінка часу роботи.

Результати дослідження. Побудований прямий чисельний метод для розв'язання СЛАР на графі, який базується на звичайному та циклічному методах Томаса. Доведено коректність запропонованої модифікації. Отримано результат стосовно стійкості даного чисельного методу. Отримані асимптотичні оцінки часу виконання та об'єму додаткової пам'яті в залежності від кількості вершин графа.

Практична значимість. Обчислювальні експерименти свідчать про перевагу запропонованого алгоритму над ітеративними чисельними методами, тож його застосування позитивно вплине на ефективність чисельного моделювання процесу масопереносу на графах.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: СЛАР, метод Томаса, математичне моделювання, графи.

1. Вступ

Чисельні методи відіграють важливу роль в моделюванні процесів математичної фізики. Така ситуація обумовлена тим фактом, що відповідні рівняння можуть бути доволі складними для аналітичного розв'язання, проте для них відносно легко довести збіжність того чи іншого чисельного методу для знаходження розв'язку. Побудова швидкого чисельного методу є ключовою задачею для підвищення ефективності процесу моделювання.

Метод Томаса (або метод прогонки) призначений для розв'язання СЛАР з тридіагональною матрицею, для якої виконується умова діагональної переваги. Такі СЛАР часто виникають під час процесу моделювання одновимірних задач масопереносу. Перевагами даного методу є те, що він є прямим, стійким та швидким.

Проте для двовимірної задачі масопереносу метод Томаса вже не може бути застосованим. Те ж саме стосується і задачі масопереносу на графі. Хоча даний процес моделюється за допомогою комбінації одновимірних задач масопереносу, матриця СЛАР не є тридіагональною, хоча умова діагональної переваги зберігається. Для таких задач доводиться застосовувати інші чисельні методи, які часто є ітеративними.

Дана стаття містить модифікацію методу Томаса для розв'язання СЛАР, які утворюються під час процесу моделювання масопереносу на графі. Запропонований алгоритм базується на звичайному та циклічному методах

Томаса. Побудований алгоритм є прямим та зберігає такі властивості методу Томаса, як стійкість та лінійна складність. Проведені обчислювальні експерименти також показують, що запропонована модифікація є ефективною за ітеративні методи за умови, що потрібно багатократно розв'язувати СЛАР з однією і тією ж структурою матриці.

2. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Огляд чисельних методів для розв'язання СЛАР з симетричними та розрідженими матрицями можна знайти у роботах [1, 2]. Аналіз властивостей тридіагональних систем та чисельні методи для них описані у фундаментальній роботі [3]. Також можна звернутися до більш загальної роботи [4], яка стосується аналізу точності чисельних методів, серед яких є і метод Томаса, і інші прямі та ітеративні методи розв'язання СЛАР. Аналіз точності методу Томаса та його модифікації можна також знайти в [5]. Циклічний метод Томаса описаний в роботі [6]. В цій статті також наведені характеристики циклічного методу та описана стратегія його застосування для знаходження періодичних розв'язків диференціальних рівнянь. Стосовно саме задачі масопереносу в пористих середовищах, можна знайти комплексний огляд чисельних методів, починаючи з дискретизації самого рівняння математичної фізики, у роботах [7, 8]. Що стосується масопереносу на графі, то у роботі [9] поставлена така задача та проведений аналіз структури матриць СЛАР, які виникають під час чисельного моделювання.

2. МЕТА

Метою дослідження є побудова та аналіз прямого чисельного методу для розв'язання СЛАР, які утворюються під час чисельного моделювання процесу масопереносу на графі, за допомогою узагальнення прямого та циклічного методів Томаса.

3. МЕТОДИКА

Розглянемо граф G довільної структури без петель.

Також будемо розглядати пов'язаний з ним граф G' , який утворився з графа G шляхом додавання до кожного ребра графу нових вузлів так, як це показано на Рис. 1. Тоді всім вершинам графа G ставляться у відповідність деякі вершини графа G' , ребрам графа G — ланцюги графа G' , а циклам G ставляться у відповідність цикли G' . Також в подальшому для кожного ребра e графа G ми будемо називати внутрішніми вершинами або внутрішніми вузлами ребра e всі вершини ланцюга з графа G' , який відповідає даному ребру e , окрім тих вершин графа G' , які відповідають вершинам графа G (Рис. 1в).

Поставимо у відповідність кожній вершині i графа G' змінну x_i та утворимо СЛАР з цих змінних з комплексними коефіцієнтами, вважаючи, що кожній вершині графа G' також відповідає одне лінійне рівняння, причому коефіцієнт матриці СЛАР a_{ij} не дорівнює 0 тільки тоді, коли вершина j є інцидентною до вершини i . Утворена матриця СЛАР є квадратною,

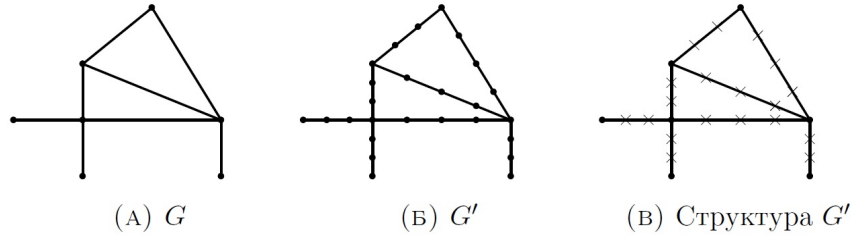


Рис. 1. Графи.

розрідженою та має симетричну структуру. Також в подальшому будемо вважати, що матриця має властивість діагональної переваги, тобто

$$|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}| \quad (1)$$

для всіх i від 1 до N , де N — загальна кількість вузлів у графі G' , а отже i кількість рівнянь у СЛАР.

Для завершення формування СЛАР додамо до розгляду довільний вектор $b \in \mathbb{C}^N$. Тоді поставимо задачу знаходження розв'язку СЛАР

$$Ax = b. \quad (2)$$

Окрім вищенаведених властивостей, матриця A також містить в собі тридіагональні блоки з пов'язаних між собою рівнянь, які відповідають внутрішнім вузлам для кожного з ребер графу G . СЛАР з такими властивостями матриць можуть бути отримані в результаті моделювання процесу масопереносу на графі, як це показано в [9]. В таких випадках матриця A також має властивість симетричності. Завдяки усім вищенаведеним властивостям матриці для знаходження розв'язку (2) часто використовують ітераційні методи, такі як метод Зейделя, метод Якобі або метод спряжених градієнтів. Проте якщо граф G' має структуру простого ланцюга або простого циклу, то насправді до цієї задачі можна застосувати метод Томаса, також відомий як метод прогонки. Причому для структури простого циклу застосовується циклічний варіант методу Томаса [6], який базується на звичайному методі. Перевагами цих методів є те, що вони обидва прямі, тобто дають точний результат, кількість обчислень в них легко передбачити та вона лінійно зростає зі збільшенням кількості вузлів, а також вони є стійкими за умови діагональної переваги матриці СЛАР [3, 4, 6]. Спробуємо узагальнити звичайний та циклічний методи Томаса на СЛАР, побудованій на графі, зі збереженням даних властивостей цих методів.

Припустимо, що у графі G є простий цикл, причому сам граф складається не тільки з цього циклу. Тоді на Рис. 2 зображений відповідний цикл у графі G' . Червоними ромбами позначені вершини циклу, через які даний цикл з'єднаний з іншими вершинами графа G' (далі — червоні вершини). Зеленими квадратами позначені вершини, які інцидентні до червоних та не є частиною циклу (далі — зелені вершини). Тоді, якщо зробити заміну змінних в СЛАР та сгрупувати рядки, що відповідають вершинам з циклу, то

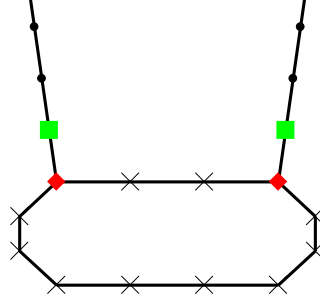


Рис. 2. Цикл в графі.

відповідні лінійні рівняння для цього циклу будуть виглядати наступним чином

$$\left[\begin{array}{cccccc|cccccc|c} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & d_{i_1} & a_{i_1} & \dots & 0 & c_{i_1} & b_{i_1} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & f_{i_2}^{jK} & \dots & 0 & c_{i_2} & d_{i_2} & \dots & 0 & 0 & b_{i_2} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & c_{i_3} & \dots & 0 & 0 & b_{i_3} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & b_{i_4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & f_{i_{M-1}}^{j1} & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & d_{i_{M-1}} & a_{i_{M-1}} & b_{i_{M-1}} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & a_{i_M} & 0 & \dots & c_{i_M} & d_{i_M} & b_{i_M} \end{array} \right]. \quad (3)$$

Права частина (3) відповідає за праву частину СЛАР (2). Центральна частина — коефіцієнти для вершин графу, що містяться в циклі та коефіцієнти для зв'язків між такими вершинами. Самі вершини перенумеровані таким чином, щоб центральна частина мала структуру, яка співпадає зі структурою матриці для застосування циклічного методу Томаса.

Ліва частина матриці відповідає за зв'язок циклу з іншими вершинами графа G' . Ненульові елементи містять лише ті рядки, які відповідають червоним вершинам на Рис. 2. Так само лише ті стовпчики можуть містити ненульові елементи, які відповідають вузлам, позначеним зеленим кольором на Рис. 2.

Для подальшого розгляду також позначимо за допомогою коефіцієнтів f ті нульові коефіцієнти, які знаходяться на перетині рядків, які відповідають червоним вершинам, та стовпчиків, які відповідають зеленим вершинам. Тоді матриця буде виглядати наступним чином

$$\left[\begin{array}{cccccc|cccccc|c} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & d_{i_1} & a_{i_1} & \dots & 0 & c_{i_1} & b_{i_1} \\ 0 & \dots & f_{i_2}^{j1} & \dots & f_{i_2}^{jK} & \dots & 0 & c_{i_2} & d_{i_2} & \dots & 0 & 0 & b_{i_2} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & c_{i_3} & \dots & 0 & 0 & b_{i_3} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & b_{i_4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & f_{i_{M-1}}^{j1} & \dots & f_{i_{M-1}}^{jK} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & d_{i_{M-1}} & a_{i_{M-1}} & b_{i_{M-1}} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & a_{i_M} & 0 & \dots & c_{i_M} & d_{i_M} & b_{i_M} \end{array} \right]. \quad (4)$$

В даній матриці за діагональні елементи відповідають коефіцієнти f , тобто умова діагональної переваги (1) для даних рівнянь записується наступним чином

$$|d_{i_m}| > |a_{i_m}| + |c_{i_m}| + \sum_{k=1}^K |f_{i_m}^{j_k}| \quad (5)$$

для всіх m від 1 до M .

Також варто зазначити, що в загальному випадку величина K ненульових стовпчиків в лівій частині не менша за кількість ненульових рядків в цій же лівій частині. Нерівність може бути строгою, оскільки одна червона вершина з циклу може мати декілька інцидентних вершин не з циклу.

Перш ніж застосовувати циклічний метод Томаса, перенесемо коефіцієнти f з лівої частини до правої, ввівши нові змінні x

$$\left[\begin{array}{cccccc|cccc} d_{i_1} & a_{i_1} & 0 & \dots & 0 & 0 & & & & & b_{i_1} \\ c_{i_2} & d_{i_2} & a_{i_2} & \dots & 0 & 0 & & & & & b_{i_2} - f_{i_2}^{j_1} x_{j_1} - \dots - f_{i_2}^{j_K} x_{j_K} \\ 0 & c_{i_3} & d_{i_3} & \dots & 0 & 0 & & & & & b_{i_3} \\ 0 & 0 & c_{i_4} & \dots & 0 & 0 & & & & & b_{i_4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & & & & & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_{i_{M-1}} & a_{i_{M-1}} & & & & & b_{i_{M-1}} - \dots - f_{i_{M-1}}^{j_K} x_{j_K} \\ a_{i_M} & 0 & 0 & \dots & c_{i_M} & d_{i_M} & & & & & b_{i_M} \end{array} \right]. \quad (6)$$

Тепер ми отримали СЛАР з константною матрицею та правою частиною з $\mathbb{C}[x_{j_1}, \dots, x_{j_K}]^M$, причому всі елементи правої частини є поліномами степені не вище за першу. Для такої СЛАР можна застосувати циклічний метод Томаса, який працює також і для такої правої частини, та отримати наступний результат

$$\left[\begin{array}{cccccc|cccc} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & & & h_{i_1} - g_{i_1}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_1}^{j_K} x_{j_K} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & & & h_{i_2} - g_{i_2}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_2}^{j_K} x_{j_K} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & & & & h_{i_3} - g_{i_3}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_3}^{j_K} x_{j_K} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & & & & h_{i_4} - g_{i_4}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_4}^{j_K} x_{j_K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & & & & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & & & & h_{i_{M-1}} - g_{i_{M-1}}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_{M-1}}^{j_K} x_{j_K} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & & & & h_{i_M} - g_{i_M}^{j_1} x_{j_1} - \dots - g_{i_M}^{j_K} x_{j_K} \end{array} \right]. \quad (7)$$

Тут коефіцієнти h та g — комплексні числа. Якщо повернутися до матриці з трьох блоків, то результат роботи циклічного методу Томаса буде наступним

$$\left[\begin{array}{cccccc|cccc|cccc} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_{i_1} \\ 0 & \dots & g_{i_2}^{j_1} & \dots & g_{i_2}^{j_K} & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_{i_2} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & h_{i_3} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_{i_4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & g_{i_{M-1}}^{j_1} & \dots & g_{i_{M-1}}^{j_K} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & h_{i_{M-1}} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & h_{i_M} \end{array} \right]. \quad (8)$$

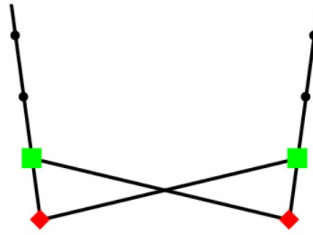


Рис. 3. Видалений цикл.

Знову в лівій частині ненульові коефіцієнти знаходяться на перетині рядків, які відповідають червоним вершинам, та стовпчиків, які відповідають зеленим вершинам. Тепер ми можемо виключити з нашого графу G' ті вершини з циклу, які не є червоними. Тоді даний цикл в графі зникне, а замість нього з'являться нові ребра, як це показано на Рис. 3. Ми отримуємо аналогічну задачу розв'язання СЛАР на графі, але цей граф буде мати меншу кількість вершин, ніж граф G' . Тим самим ми видаляємо одне або декілька ребер з графу G . Як тільки щойно утворена СЛАР на новому графі буде розв'язана, ми зможемо визначити значення змінних, які відповідали видаленим на поточному кроці вершинам. Для цього достатньо лише скористатися формулами з правої частини (7).

Також варто зазначити, що у випадку, коли ми розглядаємо до видалення не цикл, а ланцюг, процедура не змінюється, тільки у формулах (3)-(4) кутові коефіцієнти a_{i_M} та c_{i_1} дорівнюють 0. В цій процедурі видалення цикла або ланцюга з подальшим розв'язанням аналогічної задачі з меншою кількістю вузлів і полягає основна ідея запропонованого алгоритму.

4. РЕЗУЛЬТАТИ

Сформулюємо основні кроки запропонованого алгоритму для розв'язання СЛАР на графі, використовуючи ідею видалення циклів та ланцюгів, описану в попередньому пункті. По-перше, однією з основних процедур в даному методі є пошук циклів або ланцюгів в графі G' . Дану підзадачу можна розв'язувати будь-яким з відомих алгоритмів роботи на графах, який підходить для наших цілей: це може бути пошук в ширину або пошук в глибину. При цьому ми маємо певну свободу в плані вибору конкретного циклу або ланцюга з множини усіх циклів та ланцюгів, який буде оброблятися першим. Поки ми не будемо уточнювати, як саме проходить процедура вибору, але використовуємо цю можливість обирати в подальших міркуваннях.

В попередньому пункті ми сформулювали алгоритм рекурсивно, а це означає, що на кожному рівні рекурсії ми розв'язуємо дві задачі: пошук циклу або ланцюга та розв'язання СЛАР циклічним або звичайним методом Томаса відповідно. Тобто ми по черзі розв'язуємо підзадачу, яка пов'язана зі структурою графу, та задачу, яка пов'язана саме з обчисленнями та розв'язком СЛАР.

Повернімося до практичних застосувань даного алгоритму. Моделювання масопереносу на графі містить в собі велику кількість підзадач на розв'язання СЛАР, причому коефіцієнти СЛАР можуть змінюватися, а структура графу залишається незмінною. Також можна помітити, що при видаленні циклу або ланцюга з графу ми вже будемо знати структуру нового меншого графу і можемо шукати в ньому нові цикли, для цього нам не потрібно розв'язувати СЛАР методом Томаса на попередньому кроці. Таким чином, якщо в нашій задачі мається на увазі розв'язання великої кількості СЛАР з однаковою структурою, то доцільніше було б один раз обробити структуру графу на початку роботи. В такому випадку алгоритм можна переписати в ітеративному вигляді, оскільки, якщо ми знайшли послідовність циклів та ланцюгів на видалення з графу, то можемо і сформулювати послідовність СЛАР до розв'язання методами Томаса. Тоді структура алгоритму буде виглядати наступним чином.

Так виглядає алгоритм.

Алгоритм 1. Модифікація методу Томаса для СЛАР на графі.

Крок 1. Попередня обробка графу G' . Пошук послідовності циклів та ланцюгів, які містять ребра графа G , на послідовне видалення та формування послідовності СЛАР.

Крок 2. Прямий хід. Розв'язання послідовності СЛАР звичайним або циклічним методом Томаса так, як це описано в попередньому пункті.

Крок 3. Розв'язання системи, що залишилася.

Крок 4. Зворотній хід. Визначення всіх компонент розв'язку СЛАР у порядку, зворотньому до прямого ходу.

Кроки 1, 2 та 4 вже були обговорені раніше. Стосовно Кроку 3, то тут варто зазначити, на Кроці 1 ми формуємо послідовність СЛАР, поки у нас є необроблені ребра графа G , яким відповідають ланцюги графа G' . Коли вони обробляться, то після виконання Кроку 2 будуть видалені майже всі внутрішні вузли на ребрах, окрім, можливо, тих, які є інцидентними до вершин графу G' , яким відповідає вершина графу G . Або, якщо повертатися до термінів з попереднього пункту, будуть видалені всі вершини, окрім, можливо, тих, що були червоними або зеленими на якійсь ітерації виконання Кроку 2. Їхня кількість залежить тільки від характеристик графа G , і оскільки можна вважати, що кількість вершин в графі G' асимптотично визначається виключно кількістю внутрішніх вершин на ребрах, то кількість вершин, яка залишається на початку виконання Кроку 3, можна вважати константою, яка визначається графом G . Тобто, на Кроці 3 ми розв'язуємо СЛАР фіксованої розмірності. На жаль, про матрицю цієї СЛАР не можна сказати, що вона буде симетричною, і вона точно не буде розрідженою, але для розв'язання цієї СЛАР можна використовувати метод Гауса.

Проте є деякий клас графів, для яких за правильної побудови послідовності СЛАР Крок 3 може бути пропущений. Одним з таких графів є граф, зображений на Рис. 5 з пункту 5. Послідовність розв'язку СЛАР зображена

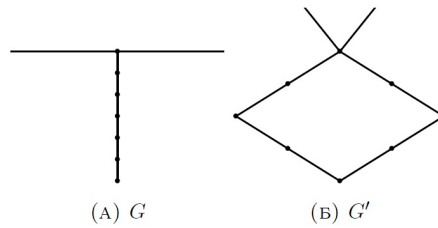


Рис. 4. Випадки доведення.

на Рис. 6. Інший клас графів, для яких Крок 3 можна пропустити, — це дерева, які часто є моделями іригаційних систем для задачі масопереносу. Якщо побудувати послідовність СЛАР, яка обробляє та відкидає по черзі всі листи дерева G , то Крок 2 буде повністю складатися з використання звичаного методу Томаса. Узагальненням наведених прикладів може служити наступна умова на граф G .

Умова 1: для будь-яких вершин v_1 та v_2 існує не більше двох простих шляхів, що з'єднують ці вершини та попарно не перетинаються між собою, за винятком початку та кінця.

Тоді ми можемо сформулювати та довести наступний результат.

Лема 1. *Якщо граф G задовольняє Умові 1, то Крок 1 Алгоритму 1 можна виконати таким чином, щоб Крок 3 не виконувався.*

Доведення. Зрозуміло, що якщо дана умова виконується для графа G , то вона буде виконуватися і для G' .

Розглянемо 2 випадки: граф G' є деревом та граф G' має цикл. Перший випадок був розібраний раніше в цьому пункті. В другому випадку також є два варіанти: граф є простим циклом або граф не є простим циклом. Перший варіант зводиться до однократного застосування циклічного методу Томаса. Тоді залишилося лише розібрати наступну ситуацію: граф має цикли, але сам не є простим циклом.

Припустимо, що в графі є вершина $v \in G'$, список інцидентності якої складається лише з 1 вершини. Така ситуація може бути лише тоді, коли вершина v відповідає вершині з графа G , тобто ми маємо ситуацію, зображену на Рис. 4а. Тоді ми можемо застосувати звичайний метод Томаса до внутрішніх вузлів даного ребра графа G та додати відповідну СЛАР до списку. Тоді ми виключимо дане ребро з розгляду і перейдемо до аналогічної задачі для нового графа G_1 , кількість вершин та ребер у якого менша за відповідні кількості вершин та ребер графа G .

Тепер припустимо, що всі вершини в графі з циклами мають принаймні дві інцидентні вершини.

Розглянемо множину всіх простих циклів даного графу. Доведемо, що серед цих циклів обов'язково знайдеться такий цикл, який з'єднаний з іншою частиною графа через рівно одну вершину (Рис. 4б).

Розглянемо довільний цикл C_1 . Якщо у цього циклу є більш ніж 1 вершина, яка інцидентна до вершини не з циклу, то позначимо їх як v_1, v_2, \dots, v_K . Розглянемо підграфи G_k графа G' , кількість яких дорівнює K та

кожен з яких складається з вершини v_k та інших вершин графа G' , до яких є маршрут від v_k , що не проходить через цикл C_1 . Дані множини не перетинаються, інакше, якщо $G_{k_1} \cap G_{k_2} \neq \emptyset$, то з вершини v_{k_1} до вершини v_{k_2} існує принаймні 3 простих шляхи: два через цикл C_1 та один через множини $G_{k_1} \cap G_{k_2}$, що суперечить умові. Також жоден з цих підграфів G_k не є деревом, оскільки тоді б граф G' мав вершину зі степінню інцидентності 1. Тобто кожен G_k має цикл. Розглянемо підграф G_1 . Після видалення усіх ребер, які ведуть до вершини зі степінню інцидентності 1 (починаючи з v_k), ми отримаємо граф з кількістю циклів, більшою за 0 та меншою за кількість циклів графа G' . Повторюючи дану процедуру, рано чи пізно ми знайдемо шуканий цикл.

Оскільки ми знайшли цикл, який з'єднаний з іншою частиною графа через рівно одну вершину, ми можемо застосувати циклічний метод Томаса до вершин цього циклу та додати відповідну СЛАР до списку. Знову ми виключаємо щонайменше одне ребро з графа G і переходимо до аналогічної задачі для меншого графа.

Рекурсивно повторюючи дану процедуру, ми обробимо весь граф G' , причому після останнього застосування звичайного або циклічного методу Томаса не залишиться вершин для виконання Кроку 3. \square

Перейдемо тепер до доведення наступних характеристик запропонованої модифікації методу Томаса: коректність, стійкість та лінійну складність.

Спочатку доведемо коректність методу. Оскільки запропонована модифікація полягає в багатократному застосуванні звичайного та циклічного методів Томаса, які є різновидом методу Гауса, а також самого методу Гауса в кінці, то коректність модифікованого методу буде доведена, якщо ми покажемо, що після кожного видалення циклу або ланцюга матриця СЛАР все ще має діагональну перевагу. Тоді всі застосування методів Томаса будуть коректними, а матриця СЛАР, що залишиться до розв'язання на Кроці 3, буде мати обернену згідно з властивостями матриць з діагональною перевагою.

Повернемося до розгляду підматриці, яка змінюється під час використання звичайного чи циклічного методу Томаса. Формули (4) та (8), як і раніше, зображують відповідні рядки до та після застосування методу Томаса. Тоді факт того, що діагональна перевага зберігається, можна записати наступним чином.

$$(5) \implies \sum_{k=1}^K |g_{i_m}^{j_k}| < 1, m = \overline{1, M}. \quad (9)$$

Доведемо це твердження від супротивного. Нехай $i_{m'}$ — номер рядка, для якого

$$\sum_{k=1}^K |g_{i_{m'}}^{j_k}| = \max_{m=\overline{1, M}} \sum_{k=1}^K |g_{i_m}^{j_k}| = \gamma \geq 1. \quad (10)$$

Нехай також $g_{i_m}^{j_k} = e^{I\phi_{j_k}} |g_{i_m}^{j_k}|$, $k = \overline{1, K}$, $d_{i_{m'}} = e^{I\phi} |d_{i_{m'}}|$.

Тоді, оскільки стовпчики в лівій частині (8) є розв'язками СЛАР з матрицею, що є центральною частиною (4), а правими частинами є стовпчиками лівій частини матриці (4), оцінимо $i_{m'}$ -ту компоненту добутку центральної матриці (4) та комбінації векторів з лівій частини (8)

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=1}^K |f_{i_{m'}}^{jk}| = \sum_{k=1}^K |e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} f_{i_{m'}}^{jk}| \geq \left| \sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} f_{i_{m'}}^{jk} \right| = \\
 & = \left| \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'-1}}^{jk} \right) c_{i_{m'}} + \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'}}^{jk} \right) d_{i_{m'}} + \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'+1}}^{jk} \right) a_{i_{m'}} \right| = \\
 & = \left| \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'-1}}^{jk} \right) c_{i_{m'}} + \left(\sum_{k=1}^K |g_{i_{m'}}^{jk}| \right) |d_{i_{m'}}| + \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'+1}}^{jk} \right) a_{i_{m'}} \right| \geq \\
 & \geq \gamma |d_{i_{m'}}| - \left| \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'-1}}^{jk} \right) c_{i_{m'}} + \left(\sum_{k=1}^K e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'+1}}^{jk} \right) a_{i_{m'}} \right| \geq \\
 & \geq \gamma |d_{i_{m'}}| - \left(\left(\sum_{k=1}^K |e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'-1}}^{jk}| \right) |c_{i_{m'}}| + \left(\sum_{k=1}^K |e^{-I(\phi_{j_k} + \phi)} g_{i_{m'+1}}^{jk}| \right) |a_{i_{m'}}| \right) = \\
 & = \gamma |d_{i_{m'}}| - \left(\left(\sum_{k=1}^K |g_{i_{m'-1}}^{jk}| \right) |c_{i_{m'}}| + \left(\sum_{k=1}^K |g_{i_{m'+1}}^{jk}| \right) |a_{i_{m'}}| \right) \geq \\
 & \geq \gamma \left(|d_{i_{m'}}| - (|c_{i_{m'}}| + |a_{i_{m'}}|) \right) \geq |d_{i_{m'}}| - (|c_{i_{m'}}| + |a_{i_{m'}}|) > \sum_{k=1}^K |f_{i_{m'}}^{jk}|.
 \end{aligned}$$

Остання строга нерівність завершує доведення від супротивного. Тобто, ми щойно довели наступний результат.

Теорема 1. *Алгоритм 1 є коректним.*

Звернімося до характеристики стійкості алгоритму. Стійкість звичаного методу Томаса забезпечується тим фактом, що коефіцієнт в оцінці зворотньої похибки (backward error) даного чисельного методу не залежить від розмірності матриці СЛАР [4,5]. Те ж саме стосується і циклічного методу Томаса [6]. Оскільки Крок 2 Алгоритму 1 складається зі скінченної кількості використань звичайного та циклічного методів Томаса, то Крок 2 сам по собі можна вважати стійким. Обрахунок значень у видалених вузлах під час виконання Кроку 4 для кожного з вузлів зводиться до скінченної кількості арифметичних дій, причому таких, де не присутнє ділення, та кількість яких оцінюється виключно з характеристик графа G . Для фіксованої кількості арифметичних дій коефіцієнт при зворотній похибці також фіксований, тому Крок 4 теж можна вважати стійким.

Для методу Гауса, яким пропонується розв'язувати СЛАР на Кроці 3, коефіцієнт зворотньої похибки залежить від розмірності матриці та доволі швидко зростає залежно від цього параметру [4]. Проте, як було вказано в пункті 3, розмірність даної СЛАР залежить тільки від характеристик графу G , тому цю величину можна вважати константою для фіксованого графу G .

Тоді введемо наступне означення стійкості запропонованої модифікації методу Томаса, яке буде узгоджене з поняттями стійкості для звичаного та циклічного варіантів цього методу.

Означення 1. Чисельний метод для розв'язання СЛАР, структура матриці якої визначається графом G' , називається стійким на графі G , якщо коефіцієнт при оцінці зворотної похибки не залежить від кількості внутрішніх вершин графу G' .

З урахування цього означення ми довели наступний результат.

Теорема 2. *Алгоритм 1 є стійким на графі G .*

Оцінимо асимптотичну складність запропонованого алгоритму. Крок 3 виконується за константний час. Звичайний та циклічний методи Томаса мають лінійну складність, проте вони дещо модифіковані, а саме права частина у відповідних СЛАР містить більше коефіцієнтів. Проте величину K з формул з пункту 2 також можна оцінити з характеристик графа G , оскільки вона також формується лише з червоних та зелених вершин. Тобто, права частина системи (6) має кількість коефіцієнтів, що лінійно залежить від розмірності відповідної матриці. Отже, методи Томаса залишаються лінійними. Кількість ітерацій в Кроці 2 не може бути більшою за кількість ребер в графі G , оскільки на кожній ітерації ми виключаємо з розгляду мінімум одне ребро. Тож загальна кількість ітерацій на Кроці 2 константна, а отже, асимптотична складність прямого ходу запропонованого алгоритму лінійна. З тих же самих міркувань ми робимо висновок про лінійну складність зворотнього ходу.

Залишилося розглянути час виконання Кроку 1. Під час обробки графа ми шукаємо цикл або ланцюг, що є задачею з лінійною складністю відносно кількості вершин в графі. Формування СЛАР та утворення нового графу також займає лінійний час. Кількість ітерацій на Кроці 1 співпадає з відповідною кількістю ітерацій на Кроці 2. Отже, час виконання Кроку 1 має лінійну асимптотику відносно кількості вершин в графі G' . Таким чином, ми довели наступний результат.

Теорема 3. *Час виконання Алгоритму 1 має асимптотику $O(n)$, де n - кількість вершин в графі G' . Коефіцієнт пропорційності залежить тільки від характеристик графу G .*

Аналогічно можна довести і наступний результат.

Теорема 4. *Алгоритм 1 потребує $O(n)$ додаткової пам'яті, де n - кількість вершин в графі G' . Коефіцієнт пропорційності залежить тільки від характеристик графу G .*

Для демонстрації ефективності запропонованої модифікації методу Томаса ми порівнюємо його з іншими методами для розв'язання СЛАР. Серед цих методів будуть: метод Зейделя, метод Якобі та метод спряженого градієнту. Для тестів вибрані матриці, які задовольняють умовам збіжності для всіх ітеративних методів. Також для всіх методів використовуються їхні модифікації для застосування до розріджених матриць, що також підвищує ефективність кожного з них.

Також ми окремо змодельуємо ситуацію, коли нам потрібно розв'язати СЛАР 1 раз, тобто обрахуємо час, який витрачається на виконання Кроків

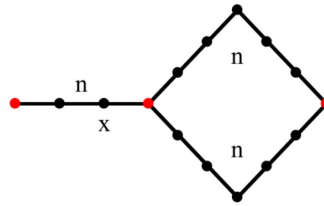


Рис. 5. Структура графу 1.

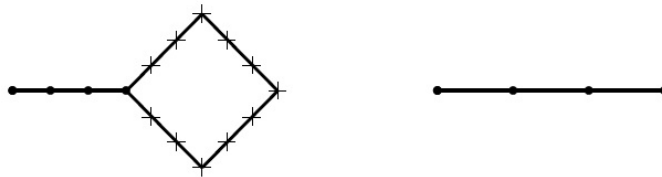


Рис. 6. Зміна структури графу під час виконання прямого ходу алгоритма.

1-4 Алгоритму 1 разом, а також ситуацію, коли СЛАР з незмінною структурою треба розв'язати багато разів, тобто у величину часу, витраченого на обчислення, будемо враховувати тільки час, витрачений на Кроки 2, 3 та 4 запропонованого методу, нехтуючи часом на обробку структури матриці та утворення послідовності дій.

Для першого обчислювального експерименту візьмемо граф зі структурою, зображеною на Рис. 5. Даний граф складається містить три ребра, два з яких формують цикл. Будемо ваажати, що кількість внутрішніх вузлів у всіх ребрах однакова і дорівнює n . Під час прямого ходу запропонованого алгоритму для даного графу спочатку буде вилучений цикл, після чого граф зведеться до ланцюга (див. Рис. 6). Тобто спочатку буде використовуватися циклічний метод Томаса, а після нього — звичаний, причому для циклічного методу Томаса права частина СЛАР буде складатися з елементів з кільця $\mathbb{C}[x]$, де x відповідає за вузол графу, позначений відповідною літерою на Рис. 5. Звичайний метод Томаса використовується для правої частини, яка складається зі звичаних чисел.

Таблиця 1 містить час виконання вищезгаданих методів для деяких значень параметра n . Другий стовпчик таблиці містить загальну кількість вершин в графі G' . Стовпчики Th, CG, S та J містять середнє значення часу в мс, витраченого на розв'язання СЛАР, запропонованим методом Томаса на графі, методом спряжених градієнтів, методом Зейделя та методом Якобі відповідно. При цьому для методу Томаса рахувався лише час виконання Кроків 2-4. Середнє значення обраховувалося з 500 спроб розв'язання СЛАР. Для ітеративних методів розв'язок шукався з точністю $1e-10$. Останній стовпчик містить приблизне значення часу в мс, потрібне

ТАБЛ. 1. Порівняння часу виконання для чисельних методів для графу 1.

n	N	Th	CG	S	J	Init
100	303	0.426	1.126	3.952	6.276	1
200	603	0.882	2.276	8.142	12.788	3
300	903	1.264	3.542	12.319	15.678	4
400	1203	1.720	4.712	13.922	21.645	6
500	1503	1.809	5.398	18.494	27.690	7
600	1803	2.120	5.956	21.828	33.548	8
700	2103	2.556	6.964	25.756	38.490	10
800	2403	2.844	8.298	29.738	43.642	11
900	2703	3.178	8.996	33.288	52.084	12
1000	3003	3.550	10.050	36.676	56.108	13

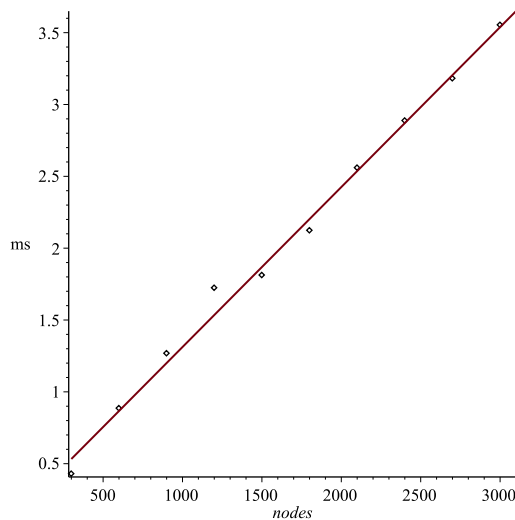


Рис. 7. Зростання часу обчислень для графу 1.

на виконання Кроку 1 Алгоритму 1. Обчислення проводилися за допомогою мови програмування C++ на процесорі Intel(R) Core(TM) i3-7100U CPU @ 2.40GHz 8GB RAM з операційною системою Windows 10 Pro.

На Рис. 7 зображена оцінка зростання часу обчислень в залежності від кількості вузлів графа G' , отримана за допомогою лінійної регресії зі стовпчика Th Табл. 1. Лінійна функція задається виразом $f(n) = 0.198714 + 0.001113n$.

Візьмемо інший граф, наприклад, такий, як показано на Рис. 8. Даний граф не задовольняє умовам леми 1 і для нього в Алгоритмі 1 Крок 3 буде виконуватися, у якій би послідовності ми не обробляли ребра. Будемо вважати, що кількість внутрішніх вузлів в кожному ребрі однакова та дорівнює n . Дані по часу виконання алгоритмів для цього графу наведені у Табл. 2. Структура Табл. 2 співпадає з Табл. 1.

Оцінка лінійної регресії для часу виконання тепер має наступний вигляд: $f(n) = 0.503724 + 0.002123n$ (Рис. 9).

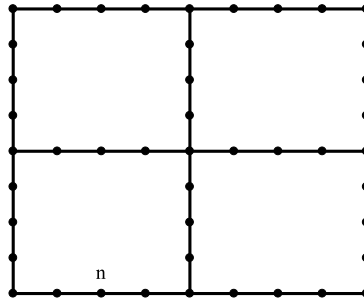


Рис. 8. Структура графу 2.

ТАБЛ. 2. Порівняння часу виконання для чисельних методів для графу 2.

n	N	Th	CG	S	J	Init
25	308	0.900	1.180	21.970	28.408	3
50	608	1.670	1.848	26.910	40.502	6
75	908	2.758	2.980	33.602	56.460	8
100	1208	3.620	4.106	35.076	66.196	8
125	1508	3.414	4.060	41.432	74.798	8
150	1808	4.212	4.970	46.106	88.500	9
175	2108	4.842	5.690	51.812	99.478	10
200	2408	5.686	6.614	56.950	105.548	11

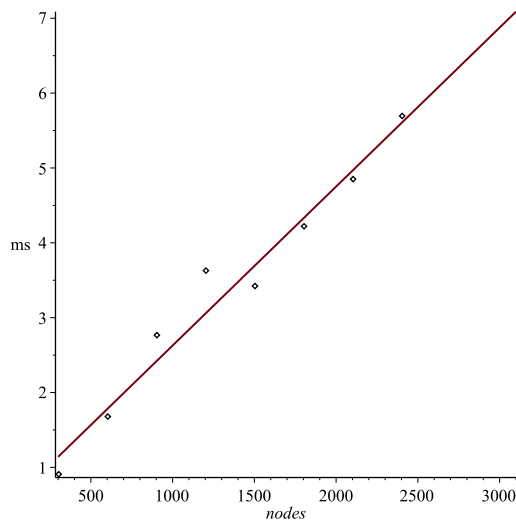


Рис. 9. Зростання часу обчислень для графу 2.

5. ОБГОВОРЕННЯ

З результатів обчислювального експерименту на графі з Рис. 5 видно, що запропонована модифікація методу Томаса показує найкращі результати, якщо брати в розрахунок тільки час виконання Кроків 2-4. Він показує результати майже в 3 рази кращі за метод спряженого градієнту. Тому у

випадку, коли треба розв'язати велику кількість СЛАР з однаковою структурою, доцільно використовувати саме Алгоритм 1 з винесенням Кроку 1 в попередню обробку.

Проте для одноразового розв'язання СЛАР все ще вигідніше використовувати метод спряжених градієнтів, хоч запропонована модифікація все ще показує кращі результати за методи Якобі та Зейделя.

У випадку графа з Рис. 8 запропонована модифікація все ще показує найкращі результати, хоча відрив від методу спряжених градієнтів вже не такий істотний. Але метод спряжених градієнтів потребує доволі сильних умов на матрицю, в той час як для коректного застосування запропонованої модифікації треба лише умова діагональної переваги.

Щодо порівняння з методами Зейделя та Якобі, то на даному графі запропонований алгоритм має суттєву перевагу.

Якщо порівнювати з попереднім прикладом, то можна помітити, що обидва коефіцієнти в лінійній функції в даному випадку мають більші значення. Для вільного члену це так, бо в даному випадку Крок 3 не пропускається і завжди викликається метод Гауса для розв'язання СЛАР сталої розмірності. Коефіцієнт при n в даному випадку більший, оскільки для даного графу СЛАР, які розв'язуються на Кроці 2, у правій частині містять більше змінних x_{j_1}, \dots, x_{j_k} , що впливає на швидкість кожного зі циклічних методів Томаса.

В обох випадках запропонована модифікація методу Томаса показує найкращі результати, тож її застосування до задач масопереносу на графі є доцільним.

До того ж, на відміну від усіх інших розглянутих тут методів, дана модифікація є прямим методом, а це означає, що при збільшенні бажаної точності обчислень методи спряженого градієнту, Якобі та Зейделя працювали б ще довше, в той час, як запропонований алгоритм має фіксовану кількість операцій та передбачуваний час роботи.

Разом з цим для запропонованого методу доведена його коректність, стійкість, отримані лінійні оцінки стосовно кількості операцій та об'єму додаткової пам'яті. З урахуванням того, що побудований чисельний метод є прямим, а також враховуючи доволі прості достатні умови його застосування, всі перераховані властивості роблять запропоновану модифікацію методу Томаса найоптимальнішим алгоритмом для багатократного розв'язання СЛАР для моделювання процесу масопереносу на графах.

Хоча запропонована модифікація методу Томаса вже показує конкурентноспроможність, ефективність алгоритму можна ще підвищити за допомогою застосування паралельних обчислень. Паралельні обчислення можуть бути застосовані наступним чином.

Розглянемо граф зі складною структурою, як, наприклад, на Рис. 10. Припустимо, що Крок 1 Алгоритму 1 у якості перших двох циклів на обробку визначив цикли A та B , як показано на рисунку. Дані цикли не мають спільних вузлів, і граф не має таких вузлів, які б знаходилися на відстані 1 до обох циклів. Це означає, що видалення одного з циклів та відповідні зміни у структурі графу та структурі матриці жодним чином не впливають

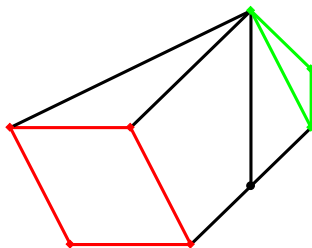


Рис. 10. Незалежні цикли у графі.

на ті обчислення, які будуть проводитися під час обробки другого циклу. А це в свою чергу означає, що обробка даних двох циклів може бути проведена в будь-якому порядку та навіть паралельно одна одній. Це і є основна ідея застосування паралельних обчислень в запропонованому алгоритмі.

Якщо проаналізувати Крок 1 Алгоритму 1, то можна зрозуміти, що список СЛАР, який формується під час виконання цього кроку, може бути зображений у вигляді дерева. Коренем дерева є СЛАР, яка розв'язується на Кроці 3, а для кожного вузла дерева його нащадками є ті СЛАР, без розв'язання яких не можна перейти до розв'язання СЛАР, яке відповідає даному вузлу. Ці СЛАР можуть відповідати як звичайним, так і циклічним методам Томаса. З попередніх міркувань ми можемо зробити висновок, що розподіл звичайних та циклічних методів може бути довільним у списку СЛАР, а отже, і в сформованому дереві. Листи дерева відповідають за ті СЛАР за за ті цикли або ланцюги відповідно, кожен з яких може оброблятися першим під час виконання Кроку 2 Алгоритму 1 без використання паралельних обчислень, або ж всі вони можуть оброблятися одночасно у випадку використання паралельних обчислень. Те ж саме стосується і процедури зворотнього ходу запропонованого алгоритму.

Для того, щоб зрозуміти, чи можуть дві СЛАР розв'язуватися паралельно, треба лише перевірити, чи знаходять два відповідні списки вузлів у графі на відстані більшій за 1.

Також варто зазначити, що дерево залежностей СЛАР для одного і того ж графу може бути сформоване по-різному в залежності від того, як саме обраний перший цикл або перший ланцюг. Це в свою чергу визначається порядком видалення ребер з графу, який може бути визначений користувачем наперед, або ж генеруватися випадковим чином. Тоді можна поставити задачу про оптимальний аналіз структури графу та утворення оптимального дерева залежностей СЛАР, за якого б максимальною мірою використовувалися б паралельні обчислення. Цю підзадачу можна повиністю розв'язати на Кроці 1 Алгоритму 1. Звісно, вона буде суттєво сповільнювати виконання цього кроку, проте за умови, що аналіз структури графу виконується 1 раз, а пошук розв'язку СЛАР з даною структурою відбувається багато разів, даним сповільненням можна буде знехтувати.

6. ВИСНОВКИ

В статті була запропонована модифікація методу Томаса для СЛАР, визначених на графі. Для запропонованого методу доведена його коректність, стійкість, отримані лінійні оцінки стосовно кількості операцій та об'єму додаткової пам'яті. Також для запропонованого алгоритму описана ідея попередньої обробки графу, яка суттєво підвищує ефективність за умови, що треба розв'язувати велику кількість різних СЛАР з однією і тією ж структурою.

Проведені обчислювальні експерименти показали, що запропонована модифікація має конкурентноспроможну швидкість порівняно з відомими ітеративними методами, серед яких був метод спряженого градієнта.

Автор заявляє про відсутність конфлікту інтересів щодо публікації цієї статті.

ЛІТЕРАТУРА

1. Hageman L.A., Young D.M. Applied Iterative Methods. Academic Press. 1981. 386 p.
2. Quarteroni A., Sacco R. Saleri F. Numerical Mathematics, second edition. Springer. 2007. 657 p. <https://doi.org/10.1007/b98885>.
3. Ilyin V.P., Kuznetsov Y.I. Tridiagonal Matrices and Their Applications. M: Nauka. 1985. 208 p. (in Russian)
4. Higham N.J. Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, second edition. SIAM. 2002. 680 p.
5. Amodio P., Mazzia F. Backward Error Analysis of Cyclic Reduction for the Solution of Tridiagonal Systems. *Mathematics of Computation*. 1994. Vol. 62. No. 206. P. 601-617. <https://doi.org/10.2307/2153526>.
6. Abramov A.A., Andreev V.B. On the Application of the Sweep Method to Finding Periodic Solutions of Differential and Difference Equations. *Journal of numerical mathematics and mathematical physics*. 1963. Vol. 3. No. 2. P. 377-381. (in Russian)
7. Farthing M.W., Ogden F.L. Numerical Solution of Richards' Equation: A Review of Advances and Challenges. *Soil Science Society of Amer. Journal*. 2017. Vol. 81. No. 6. pp. 1257-1269. <https://doi.org/10.2136/sssaj2017.02.0058>.
8. Zha Y., Yang J., Zeng J., Tso C.-H. M., Zeng W., Shi L. Review of numerical solution of Richardson-Richards equation for variably saturated flow in soils. *WIRES Water*. 2019. Vol. 6. P. e1364. <https://doi.org/10.1002/wat2.1364>.
9. Kolesnykov V.A. Development of a Software Complex for Modeling Mass Transfer Process in Porous Media. PhD Dissertation, Taras Shevchenko National University of Kyiv. 2024. 137 p. (in Ukrainian)

Надійшла: 13.01.2025 / Прийнята: 26.02.2025