EK 2-2- Thomas yöntemi

Hesaplamalı akışkanlar dinamiğinde ve Hesaplamalı mühendisliğin bazı problemlerinde zaman zaman üç-diyagonalli katsayılar matrisine sahip lineer denklem takımlarıyla karşılaşılır. Üç-diyagonalli katsayılar matrisine sahip böyle bir lineer denklem takımı matris biçiminde normal olarak aşağıdaki gibi gösterilebilir.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{i,i-1} & a_{i,i} & a_{i,i+1} & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{N,N-1} & a_{NN} \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_i \\ \cdots \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \cdots \\ b_i \\ \cdots \\ b_N \end{Bmatrix}$$

Ancak katsayılar matrisinin çoğu sıfır olan elemanları için bilgisayar hafızasında gereksiz yer işgal etmemek ve gereksiz işlemlerden kaçınmak amacıyla ($N \times N$) boyutlarında bir katsayılar matrisi yerine ($N \times 3$) boyutlarında bir katsayılar matrisi kullanacak biçimde bir düzenleme ve buna uygun bir çözüm algoritması kullanılması tercih edilir.

Çözüm için çok tercih edilen bir yöntem Thomas algoritmasıdır. Thomas algoritması aslında Gauss eliminasyon yönteminin üç kolonlu bir dikdörtgensel matris kullanılarak yapılan özel bir uygulamasıdır.

Yukarıdaki denklem sistemi

$$a_{i,i-1} \rightarrow l_i \; ; \qquad a_{ii} \rightarrow d_i \; ; \qquad a_{i,i+1} \rightarrow u_i \; ; \qquad b_i \rightarrow r_i$$

olmak üzere düzenlenirse:

$$\begin{bmatrix} d_1 & u_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ l_2 & d_2 & u_2 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & l_3 & d_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & l_i & d_i & u_i & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & l_N & d_N \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_i \\ \cdots \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \cdots \\ r_i \\ \cdots \\ r_N \end{Bmatrix}$$

Gauss eliminasyon yönteminin esasının diyagonal altında kalan bütün elemanların sıfır olmasını sağlayacak işlemler olduğu hatırlanırsa bu denklem sistemindeki ilk denklem l_2 ile ve ikinci denklem de d_1 ile çarpılıp birinci denklem ikincisinden çıkarıldıktan sonra her iki taraf d_1 ile bölünerek

$$\begin{aligned} & l_2 d_1 x_1 + l_2 u_1 x_2 = l_2 r_1 \\ & d_1 l_2 x_1 + d_1 d_2 x_2 + d_1 u_2 x_3 = d_1 r_2 \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \left(d_2 - \frac{l_2 u_1}{d_1} \right) x_2 + u_2 x_3 = r_2 - \frac{r_1 l_2}{d_1}$$

elde edilir. Böylece ikinci denklemdeki x_1 bilinmeyeni yok edilmiş veya diğer bir deyişle katsayılar matrisinde diyagonal elemanının altındaki katsayı sıfırlanmış olmaktadır. Bu eşitlik

$$\boxed{d_2' = d_2 - \frac{l_2 u_1}{d_1} \quad ; \quad r_2' = r_2 - \frac{r_1 l_2}{d_1}} \qquad \text{olmak üzere} \qquad \boxed{d_2' x_2 + u_2 x_3 = r_2'}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece denklem sistemi

$$\begin{bmatrix} d_1 & u_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & d_2' & u_2 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & l_3 & d_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & l_i & d_i & u_i & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & l_N & d_N \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_i \\ \cdots \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} r_1 \\ r_2' \\ r_3 \\ \cdots \\ r_i \\ \cdots \\ r_N \end{Bmatrix}$$

şekline gelir. Yukarıda yapılan eliminasyon işlemi denklem sistemindeki ikinci ve üçüncü denklem arasında tekrarlanırsa, yani ikinci denklem l_3 ile ve üçüncü denklem de d_2' ile çarpılıp yine birinci denklem ikincisinden çıkarılıp, karşılıklı d_2' ile bölünerek

$$\begin{aligned} l_3 d_2' x_2 + l_3 u_2 x_3 &= l_3 r_2' \\ d_2' l_3 x_2 + d_2' d_3 x_3 + d_2' u_3 x_4 &= d_2' r_3 \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \left(d_3 - \frac{l_3 u_2}{d_2'} \right) x_3 + u_3 x_4 = r_3 - \frac{l_3 r_2'}{d_2'}$$

veya yine

$$\boxed{d_3' = d_3 - \frac{l_3 u_2}{d_2'} \quad ; \quad r_3' = r_3 - \frac{l_2 r_2'}{d_2'}} \qquad \text{olmak üzere} \qquad \boxed{d_3' x_3 + u_3 x_4 = r_3'}$$

elde edilir. Bu denklemde de x_2 bilinmeyeninin ortadan kalktığı ve katsayılar matrisinde üçüncü satırda diyagonal altındaki elemanın sıfır yapıldığı görülmektedir.

Benzeri işlemler daha sonraki denklemler için de tekrarlanabilir. Bunun için yukarıda çıkartılan bağıntılar karşılaştırılarak bir genelleştirme yapılırsa

$$\boxed{d_i' = d_i - \frac{l_i u_{i-1}}{d_{i-1}'} \quad ; \quad r_i' = r_i - \frac{l_i r_{i-1}'}{d_{i-1}'} \qquad (i = 2,3,\ldots.N)}$$

elde edilir. Bu durumda denklem sistemi de

$$\begin{bmatrix} d_1 & u_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & d_2' & u_2 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & d_3' & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_i' & u_i & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_N' \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_i \\ \cdots \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} r_1 \\ r_2' \\ r_3' \\ \cdots \\ r_i' \\ \cdots \\ r_N' \end{Bmatrix}$$

şekline gelir. Bu denklem sisteminde en sonuncu denklemden x_N bilinmeyeninin kolaylıkla çözülebileceği görülmektedir:

$$x_N = \frac{r_N'}{d_N'}$$

Bulunan bu büyüklük bir üstteki denklemde kullanılarak

$$x_{N-1} = \frac{r'_{N-1} - u_{N-1} x_N}{d'_{N-1}}$$

bulunur. Benzeri işlem herhangi bir x_i bilinmeyeni için

$$\boxed{x_i = \frac{r'_i - u_i x_{i+1}}{d'_i}}$$

şeklinde gerçekleştirilir.