

Paweł Skowroński, Stanisław Kiryk

Instytut Techniki Ciepłej

PRZEGLĄD METOD WYKORZYSTANIA TEORII GRAFÓW DO MODELOWANIA MATEMATYCZNEGO SYSTEMÓW ENERGOTECHNOLOGICZNYCH

W artykule dokonano przeglądu metod orientacji grafów dwudzielnych i podjęto próbę oceny możliwości i ograniczeń ich stosowania do automatyzacji procesu modelowania systemów energotechnologicznych. Omówiono algorytmy dekompozycji, przymusowej orientacji, metodę węgierską i algorytm Mankresa. Studium stanowi odniesienie do własnych prac autorów prowadzonych nad automatyzacją rozwiązywania zadań symulacji pracy systemów energotechnologicznych.

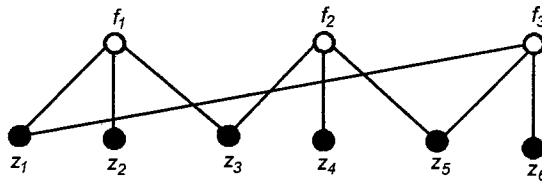
WSTĘP

Teoria grafów dwudzielnych Königa (grafów bichromatycznych) jest wykorzystywana do opisu modeli matematycznych systemów energotechnologicznych (SET). Umożliwia łatwe przedstawienie struktury układu zależności tworzących model matematyczny za pomocą odpowiednich wierzchołków grafu. Analiza grafu dwudzielnego może być pomocna do automatyzacji rozwiązywania takiego układu zależności [13]. Wiele prac nad teorią grafów dwudzielnych było publikowanych w latach siedemdziesiątych. Powszechność użytkowania mikrokomputerów jest przyczyną kontynuowania prac nad metodami automatyzacji zapisu modeli systemów i wykonywania obliczeń. W niniejszym artykule dokonano przeglądu znanych metod orientacji grafów dwudzielnych i podjęto próbę oceny możliwości i ograniczeń ich zastosowania do automatyzacji modelowania SET.

Graf jest to uporządkowana trójka zbiorów wierzchołków V , gałęzi U i relacji zachodzących pomiędzy nimi R . Grafami dwudzielnymi $G = (V, U, R)$, nazywane są grafy, w których zbiór wierzchołków V można podzielić na takie dwa rozłączne podzbiory wierzchołków F oraz Z , w których między wierz-

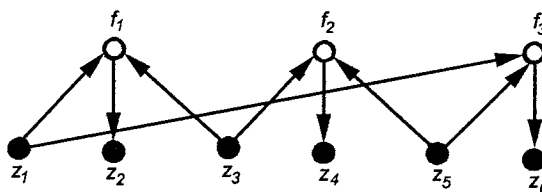
chofkami należącymi do tego samego podzbioru nie zachodzą bezpośrednie relacje $r_k \in R$ (R – zbiór relacji między wierzchołkami grafu), wyrażane istnieniem pewnej krawędzi grafu $u_l \in U$ łączącej te wierzchołki (U – zbiór krawędzi łączących odpowiednie wierzchołki grafu) [3]. W grafie istnieją zatem wyłącznie relacje $r_k = \langle f_i, u_l, z_j \rangle$ między wierzchołkami z dwóch rozłącznych podzbiorów $f_i \in F$ i $z_j \in Z$. W przypadku wykorzystania grafów dwudzielnych do celów modelowania matematycznego SET wierzchołki podzbioru F odpowiadają poszczególnym zależnościom modelu, natomiast wierzchołki podzbioru Z odnoszą się do odpowiednich zmiennych wchodzących w skład modelu (rys. 1). Krawędzie grafu określają jednoznacznie relacje między zależnościami a zmiennymi (określają relacje przypisania poszczególnych zmiennych do odpowiednich zależności i odwrotnie). Na rysunku 1 przedstawiono przykład grafu dwudzielnego, którego struktura odpowiada zapisowi przykładowego układu równań (1).

$$\begin{aligned}\varphi_1(x_1, x_2, x_3) &= b_1 \\ \varphi_2(x_3, x_4, x_5) &= b_2 \\ \varphi_3(x_1, x_5, x_6) &= b_3\end{aligned}\tag{1}$$



Rys. 1. Graf dwudzielny – ilustracja graficzna

Wyznaczenie sposobu rozwiązania układu równań jest możliwe przez określenie pewnej orientacji grafu, który układ ten opisuje. Orientacja grafu polega na przekształceniu wszystkich krawędzi grafu w łuki czyli krawędzie, których początek i koniec jest określony. Przykładową orientację grafu dla układu równań (1) przedstawiono na rys. 2.



Rys. 2. Zorientowany graf dwudzielny – ilustracja graficzna (wierzchołki: z_1, z_3, z_5 odpowiadają zmiennym niezależnym)

Istotnym problemem w procesie orientacji grafu opisującego układ zależności jest dobór zmiennych niezależnych (parametrów), których wartości są zakładane, a wprowadzenie których umożliwia dokonanie orientacji grafu, czyli określenie kolejności wyznaczania poszczególnych zmiennych z odpowiednich zależności modelu matematycznego.

Znane są różne metody modelowania matematycznego oparte na wykorzystaniu grafów dwudzielnych Königa. Są to między innymi:

- metoda *dekompozycji* modelu matematycznego,
- metoda *przymusowej orientacji* uzupełniana metodą *węgierską*,
- metoda oparta na *algorytmie Mankresa*.

1. DEKOMPOZYCJA

W pracy [5] przedstawiono sposób rozwiązywania układu równań metodą *dekompozycji*, czyli rozbicia wyjściowego zbioru zależności na mniejsze jednoznacznie określone i liniowo niezależne podukłady równań. Kryterium podziału stanowi przyjęty zbiór zmiennych niezależnych modelu matematycznego. Proces podziału na mniejsze jednoznacznie określone podukłady sprowadza się do orientacji grafu dwudzielnego utworzonego na podstawie początkowego układu równań. Jeśli wierzchołek z_i odpowiada zmiennej niezależnej, wtedy krawędź (f_i, z_i) orientowana jest od wierzchołka z_i w kierunku f_i , a łuk (f_i, z_i) wykluczany jest z grafu. Gdy suma wszystkich krawędzi związanych z wierzchołkiem f_i jest równa 1, wówczas krawędź (f_i, z_i) orientowana jest od f_i do z_i , a łuk (f_i, z_i) usuwany jest z grafu. Powyższy algorytm kończy działanie albo w momencie kiedy graf jest już pusty, albo w grafie pozostają krawędzie, których nie można zorientować w omawiany sposób. W przypadku złożonych układów zależności algebraicznych określenie zestawu zmiennych niezależnych, względem których należy przeprowadzić dekompozycję układu, jest zadaniem trudnym. Możliwe jest zastosowanie metody konwersacyjnej [14] polegającej na dialogu między modelującym a maszyną cyfrową realizującą obliczenia.

Zastosowanie tej metody do automatyzacji rozwiązywania układów zależności modeli matematycznych SET wiąże się z wieloma ograniczeniami. Trudno określić jasne kryteria, według których miałyby być dokonywana dekompozycja wyjściowego układu równań. W pracy [5] zwrócono także uwagę na fakt, iż metoda *dekompozycji* wymaga właściwego zdefiniowania zbioru zmiennych niezależnych modelu, w celu określenia strategii rozwiązania układu równań. W powyższej metodzie nie można przewidzieć, czy dany zbiór zmiennych niezależnych doprowadzi do wyznaczenia kompletnej ścieżki rozwiązania układu równań. W sytuacji, gdy jako zmienne niezależne zostaną określone zmienne modelu uniemożliwiające określenie rozwiązania, wtedy metoda po-

zwala jedynie na określenie, które zmienne i równania nie zostały wykorzystane. Przyczyną braku możliwości zorientowania niektórych krawędzi grafu może być taka konfiguracja układu równań, w której możliwe jest wyznaczenie danej zmiennej z więcej niż jednej zależności. W przypadku rozwiązywania modeli matematycznych SET często zdarza się tak, że w układzie równań systemu utworzonego z różnych elementów (różne typy urządzeń energetycznych lub technologicznych), występują równania, których zmienne zostały już wcześniej wyznaczone na podstawie innych zależności modelu. Wprowadzenie z kolei ograniczeń wykluczających takie przypadki wpłynęłoby na znaczne zmniejszenie uniwersalności metody modelowania SET, a nawet mogłoby spowodować błędy w wynikach obliczeń.

2. PRZYMUSOWA ORIENTACJA

W [8, 9, 10] opisano tzw. metodę *przymusowej orientacji* częściowo zorientowanego grafu dwudzielnego $G = (F, Z, U, R)$. Krawędziom nadawane są indeksy liczbowe w zależności od podziału na tzw. łuki, czyli krawędzie o określonej orientacji oraz ogniwa, czyli krawędzie niezorientowane łączące różne wierzchołki. Proces orientowania grafu polega na odpowiednim indeksowaniu (zaznaczaniu) wierzchołków grafu na podstawie analizy indeksów krawędzi incydentnych z tymi wierzchołkami (sprawdzone są kierunki orientacji incydentnych danemu wierzchołkowi krawędzi). Po wykonaniu wielu operacji arytmetycznych i logicznych na indeksach wierzchołków i incydentnych im krawędzi, otrzymany graf będzie albo całkowicie zorientowany albo pozostaną w nim nieoznaczone wierzchołki i krawędzie.

W metodzie *przymusowej orientacji* zakłada się, iż każdemu wierzchołkowi zbioru zależności grafu dwudzielnego może odpowiadać tylko jeden wierzchołek zbioru zmiennych. Przyjmuje się także założenie, że wierzchołki zbioru zmiennych mogą być albo zmiennymi niezależnymi albo zmiennymi wyznaczanymi z jednego, odpowiadającego danej zmiennej równania, reprezentowanego przez odpowiedni wierzchołek zbioru zależności. Właściwość ta znacznie ogranicza możliwość zastosowania algorytmu do obliczeń rozbudowanych modeli SET. Metoda bowiem nie uwzględnia faktu, że w wyniku przeprowadzania operacji na grafie w celu dokonania jego orientacji, mogą pojawić się równania tożsamościowo spełnione i będzie można określić daną zmienną za pomocą więcej niż jednej zależności.

W przypadku niepełnej orientacji grafu G określana jest pewna nieorientowalna jego część – graf $G^- = (F, Z, U^-, R)$, którą należy orientować innymi metodami niż metoda *przymusowej orientacji*.

W celu określenia orientacji grafu $G^- = (F, Z, U^-, R)$ wykorzystuje się następującą właściwość rozwiązywalności układu równań modelu matematycznego:

Każde równanie może posłużyć do wyznaczenia jednej wyjściowej zmiennej, a każda zmienna układu równań jest albo zmienną niezależną albo zmienną wyjściową wyznaczoną z dokładnie jednego równania.

3. METODA WĘGIERSKA

Dla orientacji grafu G^- można przyjąć tzw. metodę węgierską [15]. W metodzie tej zakłada się na wstępie istnienie rozwiązania, czyli zorientowanego zupełnie grafu $G_p = (F_p, Z_p, U_p, R_p)$, którego podzbiór krawędzi jest na początku pusty ($U_p = \{\emptyset\}$). Wprowadza się oznaczenia krawędzi podzbioru U_p oraz wierzchołków incydentnych tym krawędziom (na przykład krawędzie typu $k1$ incydentne wierzchołkom typu $w1$). Odpowiednie oznaczenia nadawane są również pozostałym krawędziom przynależnym do podzbioru U^-/U_p oraz wierzchołkom incydentnym tym krawędziom (na przykład krawędzie typu $k2$ incydentne wierzchołkom typu $w2$). Następnie układ krawędzi formowany jest w tzw. przeplatany łańcuch krawędzi, czyli ciąg krawędzi (f_i, z_i) o na przemian zmieniających się typach oznaczeń. Gdy w grafie G^- przeplatany łańcuch krawędzi prowadzi z wierzchołka typu $w2$ do wierzchołka tego samego typu, wówczas graf G_p można przekształcić w G'_p , który zawiera o jedną krawędź więcej niż graf G_p . W tym celu należy włączyć do grafu G'_p wszystkie krawędzie typu $k2$ wchodzące w skład przeplatane go łańcucha razem z incydentnymi tym krawędziom wierzchołkami. Ponadto należy włączyć do grafu G'_p krawędzie typu $k1$ nie należące do tworzonego łańcucha. Proces przekształcania grafu G_p jest kontynuowany do momentu, w którym w grafie G^- , któremu odpowiada rozwiązanie w postaci grafu G_p^* , nie ma już żadnych przeplatanych łańcuchów krawędzi. Jeśli przy tym okaże się, że $F_p^* = F$, to graf G^- jest zorientowany do końca (każdemu wierzchołkowi z podzbioru F przyporządkowany jest wzajemnie i jednoznacznie odpowiedni wierzchołek z podzbioru Z). W przeciwnym razie orientacji grafu G^- nie daje się wyznaczyć. Tworzenie przeplatane go łańcucha krawędzi w grafie G^- przebiega następująco. Z wierzchołków grafu G^- wybierany jest dowolny wierzchołek typu $w2$ taki, że $f_0 \in F \setminus F_p$. Następnie wybierana jest krawędź (f_0, z_0) typu $k2$, następnie krawędź (z_0, f_1) typu $k1$, w następnej kolejności krawędź (f_1, z_2) typu $k2$ itd. W rezultacie takich poszukiwań proces tworzenia przeplatane go łańcucha krawędzi zaniknie w wierzchołku $f_1 \in F \setminus F_p$ typu $w2$ lub doprowadzi do początkowego wierzchołka f_0 . W pierwszym przypadku zostanie

utworzony poszukiwany przeplatany łańcuch $(f_0, z_0), (z_0, f_1), \dots, (z_{l-1}, f_l), (f_l, z_l)$ gdzie $l \geq 0$. W przypadku drugim proces powinien być powtórzony przy założeniu innego początkowego wierzchołka $f'_0 \in F \setminus F_p$.

4. ALGORYTM MANKRESA

Metoda orientacji niezorientowanego grafu $G^- = (F, Z, U^-, R)$ oparta na *algorytmie Mankresa* została przedstawiona w [1, 2, 4]. Zastosowanie tego algorytmu dla celów automatyzacji modelowania SET zostało omówione szerzej w pracach [6, 7, 12]. W metodzie tej w podzbiorze Z (zmienne modelu matematycznego) wydziela się trzy rozłączne podzbiory wierzchołków:

- podzbiór zmiennych niezależnych,
- podzbiór zmiennych wyjściowych, których wartości określane są jako ostatnie oparte na z góry znanych zależnościach modelu,
- podzbiór pozostałych zmiennych – wyznaczanych z odpowiednich zależności układu równań.

Krawędziom incydentnym wierzchołkom przynależnym do utworzonych podzbiorów nadawane są odpowiednie indeksy, odpowiednio: k, l, m . Liczby k, l, m są liczbami całkowitymi, między którymi zachodzi następująca relacja: $k > m > l > 0$. Dzięki temu można stworzyć tablicę odwzorowującą graf $G^- = (F, Z, U^-, R)$. Jeśli z każdej kolumny tablicy wybierze się po jednym elemencie, tak żeby każdy z nich znajdował się w różnych wierszach, to tym samym zostaną określone wzajemnie jednoznaczne relacje między elementami zbioru wierzchołków Z (indeksami zmiennych modelu) oraz elementami zbioru wierzchołków F (numerami równań modelu) – całkowita orientacja grafu $G^- = (F, Z, U^-, R)$. Wybór odpowiednich elementów tablicy dokonywany jest poprzez wykonanie działań arytmetycznych (dodawania, odejmowania) na przypisanych odpowiednim elementom tablicy wartościach liczbowych, tak aby doprowadzić do wyzerowania jak największej liczby elementów związanych ze zmiennymi zależnymi układu równań, przy odpowiednim zaznaczeniu równań, z których te zmienne mają być wyznaczone.

Przewaga procedury *Mankresa* nad innymi metodami, na przykład metodą *węgierską*, polega na wyznaczaniu jednej z najlepszych możliwych ścieżek rozwiązania układu równań, ponieważ w jej skład wchodzi krawędzie dwudzielnego grafu o minimalnej sumie przypisanych im wartości liczbowych. Liczba niezbędnych do przeprowadzenia operacji liczbowych jest zatem minimalna, co wpływa na efektywność numeryczną metody. Jest to jednak czysto matematyczne kryterium optymalności. W przypadku rozwiązywania modeli matematycznych SET tego typu kryterium nie zawsze jest tożsame z najlepszym sposobem określania ścieżki rozwiązywania układu równań pod względem

eksploatacyjno-technologicznym. Szczególnie istotna jest kwestia doboru zestawu zmiennych niezależnych układu równań SET rozwiązywanego według algorytmu *Mankresa*. Jest to kluczowa kwestia warunkująca możliwość wykorzystania i skuteczność działania algorytmu *Mankresa*. W opracowaniu [11] problem ten pozostał w zasadzie nie rozwiązany. Należy również zwrócić uwagę na specyfikę modeli matematycznych opisujących pracę SET, dobierając zestaw parametrów układu równań. Dla każdego systemu opisującego procesy technologiczne istnieje bowiem zbiór wielkości, których wartość można stosunkowo łatwo określić na podstawie pomiarów lub prostych obliczeń opartych na innych znanych wielkościach. W innych miejscach struktury SET wartości parametrów mogą być trudne do oszacowania, z uwagi na złożone procesy zachodzące w poszczególnych urządzeniach, wymagające dla ich określenia przeprowadzenia skomplikowanych obliczeń. Przyczyną tego typu trudności może być także brak pomiarów. Jest zatem rzeczą zrozumiałą, iż łatwe do oszacowania parametry procesu są preferowane przy definiowaniu zbioru niezależnych zmiennych niezbędnych do uruchomienia algorytmu *Mankresa*.

Wadą metody *Mankresa* jest także niemożność znalezienia rozwiązania, w przypadku wystąpienia w modelu zależności tożsamościowo spełnionych. Algorytm wymaga podania liczby równań n oraz liczby zmiennych m występujących w modelu matematycznym SET ($m \geq n$), a następnie wprowadzenia zestawu zmiennych niezależnych – wielkości będących dalej parametrami (w ilości: $m - n$). Metoda sprawdza się, gdy zbiór niezależnych zmiennych dobrany jest tak, że w procesie rozwiązywania układu równań nie jest możliwe aby wartość danej zmiennej mogła być określona z więcej niż jednej zależności. Gdy zestaw parametrów układu równań dobrany jest inaczej, niemożliwe jest znalezienie pełnej ścieżki rozwiązywania układu. Można jedynie otrzymać informacje o sekwencji postępowania przy wyznaczaniu zmiennych do momentu wystąpienia równania, którego wszystkie zmienne zostały wyznaczone wcześniej oraz określić zbiór zmiennych jeszcze nie wyznaczonych.

5. PODSUMOWANIE

Analiza możliwości wykorzystania teorii grafów dwudzielnych do tworzenia algorytmów modelowania matematycznego SET, wydaje się potwierdzać dużą przydatność grafów do opisu struktury układów zależności modeli matematycznych i opracowywania zautomatyzowanych metod realizacji obliczeń symulacyjnych z wykorzystaniem tych modeli.

Istotnym problemem, we wszystkich omówionych metodach, jest dobór odpowiedniej liczby zmiennych niezależnych modelu matematycznego SET, wprowadzenie których determinuje możliwość określenia sposobu orientacji

grafu oraz wpływa na efektywność znajdowania rozwiązania postawionego zadania. Praktyczne zastosowanie techniki orientacji grafów dwudzielnych do automatyzacji procesu rozwiązywania układu zależności algebraicznych, składający się na model matematyczny systemu energotechnologicznego, będzie możliwe, jeśli znane obecnie metody orientacji grafu zostaną ulepszone tak, aby:

- gwarantowały ustalenie pełnej orientacji grafu i tym samym określenie pewnej ścieżki rozwiązania układu zależności algebraicznych,
- umożliwiały w miarę swobodny dobór zmiennych niezależnych dokonywany z uwzględnieniem dostępności informacji pomiarowych lub założeń projektowych.

Rozwój metodologii automatycznego rozwiązywania układów zależności modeli matematycznych SET i *wprowadzenie do tworzonych algorytmów* informacji o realizowanym w danym systemie procesie technologicznym może przyczynić się do szerszego wykorzystania praktycznego tych metod.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Bourgeois F., Lassale Y.-C.: An extension of the Mankres algorithm for the assignment problem to rectangular matrices. *Communs of ACM*, 1971, vol. 14, No 12, p. 802–804.
- [2] Bourgeois F., Lassale Y.-C.: Algorithm for the assignment problem (rectangular matrices). *Communs of ACM*, 1971, vol. 14, No 12, p. 805–806.
- [3] Deo N.: *Teoria grafów i jej zastosowania w technice i informatyce*. PWN, Warszawa 1980.
- [4] Jubin D.B., Golsztein E.T.: *Zadacz i mietody liniejnogo programirowanija*. 1964, s. 736.
- [5] Kafarow B.B., Pierow B.L., Mieszalkin W.P.: *Principy matiematyczeskogo modielirowanija chimiko-tiehnologiczeskich sistiem*. M.: Chimija, 1974, 344c.
- [6] Kafarow W.W.: *Metody cybernetyki w chemii i technologii chemicznej*. WNT, Warszawa 1979.
- [7] Karpow W.G., Epelsztejn W.W.: *Awtomaticzeskoje postojenije algoritmw raszenija odnogo klasa zadacz, opisannyh na jazykie sootnoszennoj. Mietody optimizacii i ich priłozienija*, Irkuck, 1974, s. 112–149.
- [8] Karpow W.G., Popyrin L.S., Epelsztejn W.W.: *Awtomatizacija postrojenija dlja rasczeta schiem tieploenergieticzeskich ustanowok*, 1973, 129–137c.
- [9] Liewental G.B., Popyrin L.S.: *Mietody matiematyczeskogo modielirowanija i optimalizacii tieploenergieticzeskich ustanowok*. Nauka, Moskwa 1972.
- [10] Mjelijentiew L.A., Bielajew L.C.: *Optimalizacija i uprawnjenje w bolszych sistiemach eniergietyki*, 1970, t. 1, 449c.
- [11] Popyrin L.S., Samusiew W.I., Epelsztejn W.W.: *Awtomatizacija matiematyczeskogo modielirowanija tieploenergieticzeskich ustanowok*. Nauka, Moskwa 1981.
- [12] Popyrin L.S. (red.): *Kompliksnaja optimizacija tiepośilowych sistiem*. Nauka, Nowosybirsk 1976, s. 318.

- [13] Radwański E., Skowroński P., Twarowski A.: Problemy modelowania systemów energo-technologicznych. ITC PW, Warszawa 1993.
- [14] Tygu E.: Rieszateli wyczystlielnych zadacz, 1971, t. 11, No 4, c. 992–1004.
- [15] Zykw A.A.: Teorija koniecznych grafow. Nowosybirsk: Nauka, 1969. t. 1, 543c.

AN OVERVIEW OF METHODS OF GRAPH THEORY IMPLEMENTATION IN MATHEMATICAL MODELLING OF ENERGY AND TECHNOLOGY SYSTEMS

Summary

The article is a review of biochromatic graph orientation methods. It is an attempt to evaluate the possibilities and limitations of using graph theory for the automatization of mathematical modelling of energy and technology systems. The following methods are discussed: algorithm of decomposition, forced orientation algorithm, Hungarian method, and Mankres algorithm. The study is the background for the authors' research into algorithms for the automatization process of simulation calculations for energy and technology systems.