Kapitola 1

Grafy, stromy

[TODO nejaky hezky obrazky?] V této kapitole definujeme graf jakožto matematickou strukturu, popíšeme základní pojmy týkající se grafů a nastíníme možné vztahy mezi grafem a maticí. Dále definujeme strom, jakožto speciální případ grafu. Terminologie je převzata z [1]

1.1 Základní grafová terminologie

Definice 1. Mějme množinu V a množinu $E = \{\{u, v\} \,|u, v \in V\}$. Uspořádanou dvojici $G := (V, E)$, nazveme neorientovaný graf. Množinu V nazýváme množinou vrcholů grafu G, jejím prvkům říkáme vrcholy, množinu E nazýváme množinou hran grafu G, jejím prvkům říkáme hrany. Prvky hrany e označujeme jako vrcholy incidentní hraně e nebo koncové body hrany e. Říkáme, že hrana $e = \{v, w\}$ spojuje vrcholy v a w.

Pokud neuvažujeme hrany jako nejvýše dvouprvkové množiny vrcholů, ale jako uspořádané dvojice (u, v), nazýváme odpovídající graf **orientovaný**. Obvykle uvažujeme orientované a neorientované grafy zvlášť, ale je možné uvažovat i jejich kombinaci. Graf, v němž se vyskytují jak orientované tak neorientované hrany, nazýváme **smíšený**. Řekneme, že neorientovaný graf G je **úplný**, pokud $\forall u, v \in V \ (\{u, v\} \in E)$.

Povšimněme si, že v definici grafu není vyloučen případ, kdy jsou oba koncové body hrany shodné. Hrana je pak jednoprvkovou množinou a nazýváme ji **smyčkou** v grafu.

Poznámka 1. V neorientovaném grafu $G = (V, E)$ platí, že jeho množina hran E je podmnožinou $\binom{V}{2} \cup V$, kde $\binom{V}{2}$ značí množinu všech dvouprvkových podmnožin množiny V. V orientovaném grafu $H = (W, F)$ je F podmnožinou množiny $W \times W$, tj. všech uspořádaných dvojic vrcholů z W.

Stupněm vrcholu $v \in V$ rozumíme počet vrcholů spojených s vrcholem v, značíme $d(v)$. Množinu všech vrcholů, které jsou v grafu G spojeny s vrcholem v značíme $\mathrm{adj}_G(v)$.

Definice 2. **Podgrafem** grafu G nazveme libovolný graf $H = (W, F)$ který splňuje: $W \subseteq V$, $F \subseteq E$ a všechny vrcholy incidentní hranám z F náleží do W. Úplný podgraf grafu G nazýváme **klikou** v grafu G. Podgrafem grafu G **indukovaným** množinou vrcholů W

nazveme takový podgraf G, který obsahuje všechny hrany grafu G, jejichž oba koncové body náleží do W, značíme $G(W)$.

[TODO Potrebuju ohodnoceny, vazeny?]

Definice 3. Mějme graf $G = (V, E)$ a zobrazení $\omega : V \to \mathbb{R}$, resp. $c : E \to \mathbb{R}$. Přidáním zobrazení ω, resp. c ke grafu G dostaneme graf, který nazýváme **ohodnocený**, resp. **vážený** reálným ohodnocením.

Definice 4 (TODO doplnit definici cesty bez cyklu!, cyklu, delka cesty)**.**

Existuje-li mezi libovolnými dvěma vrcholy grafu cesta, řekneme, že graf je **souvislý**. **Vzdáleností** dvou vrcholů v souvislém grafu $G = (V, E)$ nazveme minimální délku cesty mezi těmito dvěma vrcholy. Vzdáleností vrcholu $v \in V$ od množiny vrcholů $W \subset V$ nazveme minimální vzdálenost mezi vrcholem v a libovolným vrcholem náležícím do W.

[TODO potrebuju bipartitni?] [TODO potrebuju ctvercovou sit?]

1.2 Strom

Nyní zaveďme základní pojmy týkající speciální třídy grafů nazývané stromy [1]

Definice 5. Stromem $T = (V, E)$ nazveme konečný souvislý neorientovaný graf bez cyklů. Pokud navíc v grafu T vyznačíme bod $r \in V$, nazýváme uspořádanou dvojici (T, r) **kořenovým stromem** a bod r nazveme kořenem tohoto stromu.

Z definice stromu je patrné, že každý vrchol v kořenového stromu (T, r) spojuje s kořenem tohoto stromu právě jedna cesta. Vrcholy ležící na této cestě nazveme **předchůdci** vrcholu v. Předchůdce vrcholu v různé od v nazýváme **vlastními předchůdci** vrcholu v. Vrcholy, jejichž předchůdcem je vrchol v, nazýváme **následníky** vrcholu v. Vrcholy bez následníků nazýváme **listy stromu** T, vrcholy alespoň s jedním následníkem nazýváme **vnitřní vrcholy** stromu.

Definice 6. Podstromem stromu T určeným vrcholem v nazveme indukovaný podgraf stromu T tvořený vrcholem v a a všemi jeho následníky.

1.3 Vztah grafu a matice

Grafy a matice spolu úzce souvisí, což nám umožňuje převádět problémy na maticích na problémy na grafech a naopak. Nezanedbatelným praktickým důsledkem jejich vzájemného vztahu je i možnost používat grafové algoritmy při řešení některých maticových úloh, především může být tento přístup výhodný pro řídké matice. Dělení grafů může posloužit například při snaze o paralelizaci rozkladu matice.

Neorientovaný graf $G = (V, E)$ s vrcholy $V = v_1, \ldots, v_m$ a hranami $E = e_1, \ldots, e_n$ Tento graf lze reprezentovat pomocí matice dvěma základními způsoby. **Maticí sousednosti**, neboli adjacenční matici, nazveme matici A_G o rozměrech $m \times m$, jejíž prvek na pozici (i, j) je definován jako:

$$(A_G)_{i,j} := \begin{cases} 1 & \text{existuje-li hrana spojující vrcholy } v_i, v_j \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

Maticí incidence grafu G nazveme matici o rozměrech $m \times n$ definovanou následovně:

$$(\bar{A}_G)_{i,j} := \begin{cases} 1 & \text{je-li } v_i \text{ koncovým vrcholem hrany } e_j \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

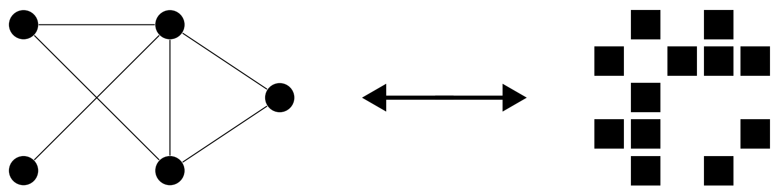
V kapitole refspektral [TODO bude ref spektral?] budeme potřebovat Laplaceovu matici Q grafu G, která je definována následovně:

$$Q_{ij} := \begin{cases} -1 & \text{pro } i \neq j, (v_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{pro } i \neq j, (v_i, v_j) \notin E \\ d(i) & \text{pro } i = j \end{cases}$$

Laplaceovu matici Q lze tedy vyjádřit jako $Q = D - A_G$, kde D značí diagonální matici se stupni jednotlivých vrcholů na diagonále.

Pokud chceme reprezentovat matici pomocí grafu, většinou nám stačí zachytit její strukturu. V takovém případě můžeme pro popis obecně nesymetrické matice A o rozměrech $n \times n$ použít orientovaný graf s množinou vrcholů $V = v_1, \ldots, v_n$ a množinou hran $E = \{(v_i, v_j) | a_{ij} \neq 0\}$. V případě, že je matice A symetrická, můžeme ji analogickým způsobem reprezentovat pomocí neorientovaného grafu. Pokud bychom chtěli do grafu zanést i numerické hodnoty jednotlivých prvků matice, museli bychom použít ohodnocený graf.

[TODO rozhodnout, jestli tam tohle davat] Pro reprezentaci ne nutně čtvercové matice B o rozměrech $m \times n$ můžeme také použít bipartitní graf $G = (R, B, E)$ pro nějž platí $|R| = m$, $|B| = n$ a $E = \{(i, j') \mid i \in R, j' \in B, a_{ij} \neq 0\}$. [end TODO]



Obrázek 1.1: Příklad grafu a jemu odpovídající struktury matice

Kapitola 2

Různé

2.1 Číslování

2.1.1 Číslování vrcholů grafu v závislosti na vzdálenosti od separátoru

V této podkapitole popíšeme nejjednodušší metodu číslování vrcholů podgrafu, který vznikl rozdělením původního grafu na n částí. Tuto metodu lze používat samostatně, ale vzhledem k její povaze ji lze využít i pro vylepšení ostatních metod očíslování grafu, například ji lze kombinovat s metodou minimálního stupně.

Mějme graf $G = (V, E)$ a jeho vrcholový separátor [TODO znaceni], jehož odebráním se graf rozpadne na n podgrafů $G_1, \ldots, G_n$. Popišme číslování vrcholů podgrafu G_i:

1. Položme `j := 1`.
2. Nalezneme neočíslovaný vrchol v grafu G_i takový, že jeho vzdálenost od vrcholového separátoru v grafu G je maximální.
3. Tomuto vrcholu dáme číslo `j`, položíme `j := j + 1`.
4. Pokud jsou všechny vrcholy očíslovány, skončíme, jinak se vrátíme na krok 2

Z algoritmu je vidět, že výsledné očíslování vrcholů grafu nemusí být jednoznačné, protože pokud nalezneme dva nebo více vrcholů, jejichž vzdálenost od separátoru je shodná, můžeme je očíslovat v libovolném pořadí.

2.1.2 Číslování vrcholů pomocí metody minimálního stupně

Metoda minimálního stupně je jednoduchým algoritmem pro nalezení očíslování grafu. Algoritmus pro hledání očíslování grafu pomocí této metody je následující:

1. Mějme graf $G = (V, E)$ a položme $j := 1$.
2. Nalezneme neočíslovaný vrchol v grafu G s nejmenším stupněm a přiřadíme mu číslo j.

3. Přidáme hrany mezi vrcholy z $\mathrm{adj}_G(v)$ tak, aby $\mathrm{adj}_G(v)$ byla klika v grafu G.

4. Pokud nejsou všechny vrcholy očíslované, zvětšíme j o 1 a vrátíme se na krok 2.

Očíslování vrcholů grafu G pomocí tohoto algoritmu není jednoznačné, protože vrcholů s minimálním stupněm může být více.

Pokud máme rozdělení $G_1, \ldots, G_n$ grafu G s vrcholovým separátorem [TODO znaceni], můžeme pro očíslování části G_i použít číslování vrcholů pomocí metody minimálního stupně, kde při výběru vrcholu ve 2. kroku přidáme kritérium vzdálenosti od separátoru popsané v 2.1.1. Nejprve tedy nalezneme množinu všech vrcholů grafu G, které mají minimální stupeň a poté mezi nimi zvolíme ten, který má nejmenší stupeň.

2.1.3 Topologické číslování vrcholů stromu

Definice 7. Mějme graf $G = (V, E)$, který je stromem. Očíslování jeho vrcholů nazveme topologickým právě tehdy, když pro každý vrchol $v \in V$ platí, že libovolný následník vrcholu v ve stromu G má nižší číslo než vrchol v.

Kapitola 3

Eliminační stromy

V této kapitole se budeme zabývat eliminačními stromy a jejich významem pro rozklady řídkých matic. Eliminační stromy při rozkladu matic hrají důležitou roli, protože nám dávají informaci o zaplnění v Choleského faktoru matice bez toho, abychom museli počítat jednotlivé numerické hodnoty. Lze tedy díky nim jednoduše porovnávat vhodnost zvoleného uspořádání řádků a sloupců matice pro Choleského rozklad.

V této kapitole bez újmy na obecnosti předpokládáme, že matice, jejíž Choleského rozklad chceme napočítávat, je ireducibilní, a tedy přidružený graf této matice je souvislý.

3.1 Definice eliminačního stromu matice

Nejprve se omezme na ireducibilní, pozitivně definitní, symetrickou matici A_T o rozměrech $n \times n$, jejíž přidružený graf $G(A_T)$ je strom. V tomto případě je A_T tzv. perfektní eliminační matice, tj. existuje permutační matice P taková, že Choleského rozklad matice PA_TP^T nebude obsahovat žádné zaplnění [2] (Matici PA_TP^T můžeme vnímat pouze jako přečíslování řádků a sloupců matice A_T). Aby při choleského rozkladu matice A_T nedošlo k žádnému zaplnění, stačí když pomocí topologického číslování očíslujeme vrcholy jí přidruženého grafu (z předpokladu se jedná o strom) a řádky a sloupce matice A_T seřadíme odpovídajícím způsobem. Pak zjevně platí, že matice A_T má, s výjimkou posledního řádku, pod diagonálou vždy právě jeden nenulový prvek. Díky tomu můžeme definovat pro matici A_T funkci $\texttt{PARENT} : \{1, \ldots, n\} \to 1, \ldots, n$ následovně:

$$\begin{aligned} \forall j \in \{1, \ldots, n-1\} \quad & \texttt{PARENT}[j] := p \quad \Leftrightarrow \quad a_{p,j} \neq 0 \wedge p > j \\ \text{a speciálně:} \quad & \texttt{PARENT}[n] := 0. \end{aligned}$$

Zřejmě ve stromu přidruženém k matici A_T platí, že předchůdcem vrcholu x_j je vrchol $x_{\texttt{PARENT}[j]}$.

Většinou však nepracujeme s maticemi, jejichž přidružený graf by byl stromem. Zavedeme tedy konstrukci pro libovolnou řídkou, ireducibilní, pozitivně definitní, symetrickou matici A o rozměrech $n \times n$. Předpokládejme, že známe Choleského rozklad této matice, tj. $A = LL^T$. Maticí se zaplněním nazveme matici F definovanou jako $F = L + L^T$. Dále zavedeme matice L_t a F_t následovně. L_t je matice vzniklá z L tím, že v každém sloupci vynulujeme všechny prvky pod diagonálou kromě prvku s nejnižším řádkovým indexem a $F_t = L_t L_t^T$.

Z definice F_t vidíme, že se jedná o matici, jejíž přidružený graf $G(F_t)$ je strom.

Definice 8. Eliminačním stromem matice A nazveme graf $G(F_t)$ popsaný výše, značíme $T(A)$. Podstrom $T(A)$ s kořenem x_j značíme $T[x_j]$. Množinu vrcholů tohoto stromu značíme také $T[x_j]$.

Díky této definici můžeme definici funkce `PARENT` přirozeně rozšířit na matici A následovně:

$$\texttt{PARENT}[j] := \min\{i > j | l_{i,j} \neq 0\},$$

kde $l_{i,j}$ označuje i, j-tý prvek matice L.

Pozorování 1. Přímo z definice plyne, že $T(A)$ a $T(F)$ jsou identické.

Pozorování 2. Pokud x_i je vlastním předchůdcem x_j v eliminačním stromu, pak $i > j$.

Tvrzení 1. *Pro $i > j$ závisí numerické hodnoty sloupce $L_{\bullet i}$ na sloupci $L_{\bullet j}$ právě tehdy, když $l_{i,j} \neq 0$.*

Důkaz. Tvrzení plyne přímo ze sloupcového algoritmu [???] $\square$

Literatura

[1] A. Koubková and V. Koubek. *Datové struktury 1.* Praha: Matfyzpress, 1 edition, 2011.

[2] D. J. Rose. A graph-theoretic study of the numerical solution of sparse positive definite systems of linear equations. pages 183–217, 1972.