

Sistemas lineales de grandes dimensiones

Matrices dispersas

José Luis de la Fuente O'Connor
jldelafuente@etsii.upm.es
joseluis.delafuente@upm.es

Índice

- Matrices dispersas
- Almacenamiento en ordenador de matrices dispersas
- Operaciones algebraicas elementales con matrices dispersas
- Solución de grandes sistemas lineales de matriz dispersa
 - Matrices dispersas simétricas
 - Nociones básicas sobre grafos
 - Interpretación de la eliminación de Gauss mediante grafos
 - El algoritmo de grado mínimo
 - El algoritmo de Cuthill-McKee
 - Matrices dispersas no simétricas
- Mínimos cuadrados

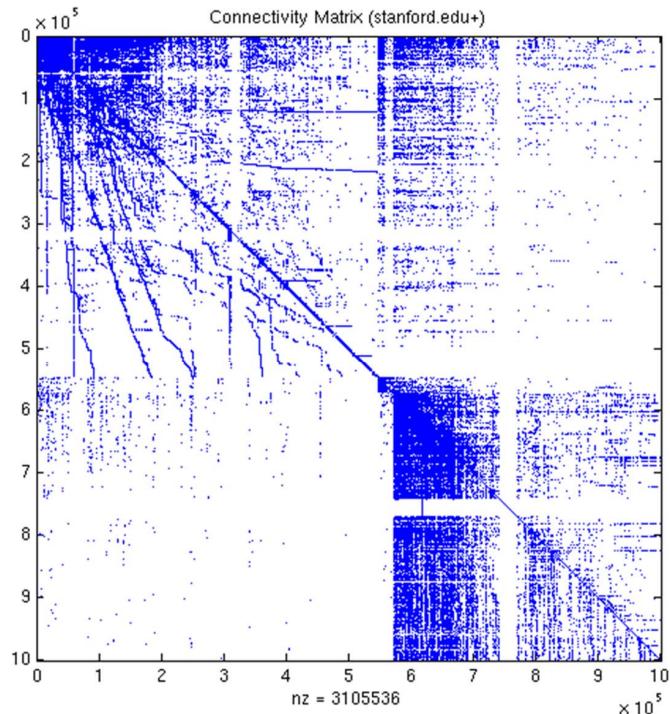
Matrices dispersas

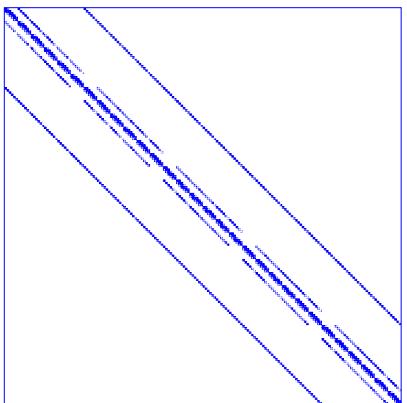
- Muchos de los modelos matemáticos que en la actualidad interpretan o simulan fenómenos reales de diversa complejidad dan lugar a sistemas de ecuaciones de gran tamaño —decenas, cientos de miles y millones de variables—.
- Las matrices de **gran tamaño** a que dan lugar esos modelos se denominan **dispersas** pues **muchos de los coeficientes** que las definen son **cero** y los que no están muy "**dispersos**" en su estructura.
- Nosotros **consideraremos dispersa** a una matriz que teniendo pocos coeficientes distintos de cero **merece la pena aplicarle procedimientos diseñados para ello**.¹

¹ Algunos autores definen una matriz $n \times n$ como dispersa si el número de coeficientes no nulos es $n^{\gamma+1}$, donde $\gamma < 1$. La **densidad** sería $\frac{n^{\gamma+1}}{n^2} = n^{\gamma-1}$. Valores típicos de ese parámetro suelen ser: $\gamma = 0,2$ para problemas de análisis de sistemas eléctricos de generación y transporte de energía; $\gamma = 0,5$ para matrices en banda asociadas a problemas de análisis de estructuras; etc.

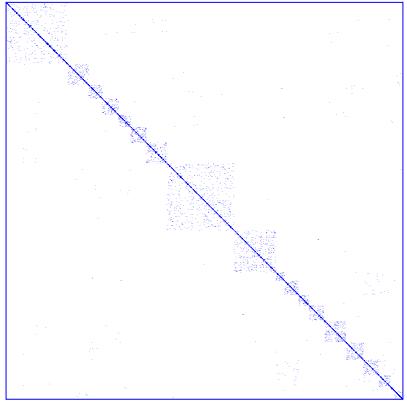
Ejemplos

- Sitio web de referencia: **The University of Florida Sparse Matrix Collection**
- Una que usamos continuamente (ahora $> 8 \times 10^9$).

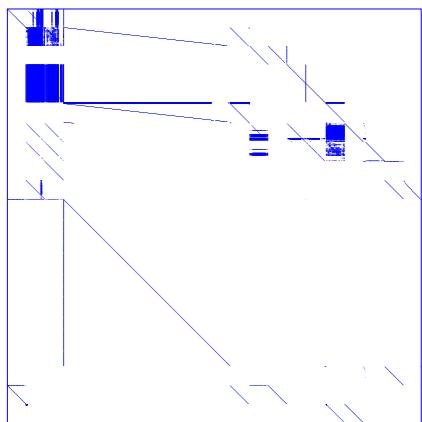
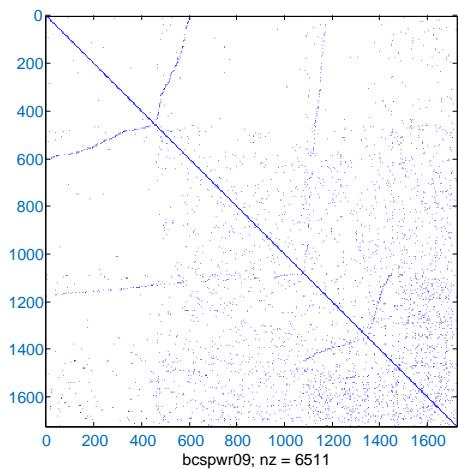




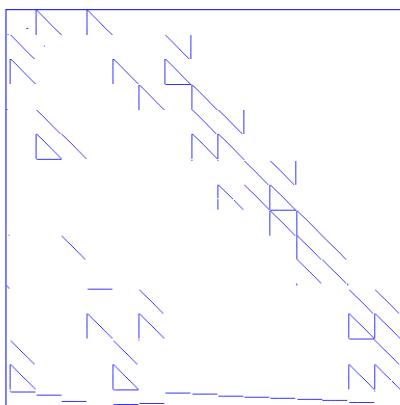
Thermal Simulation; SHERMAN



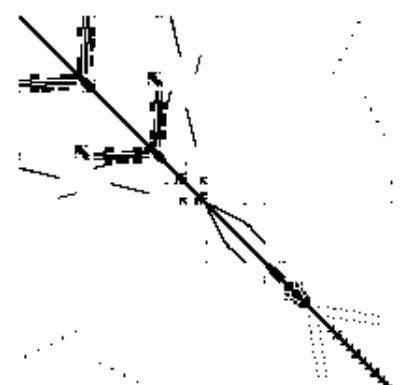
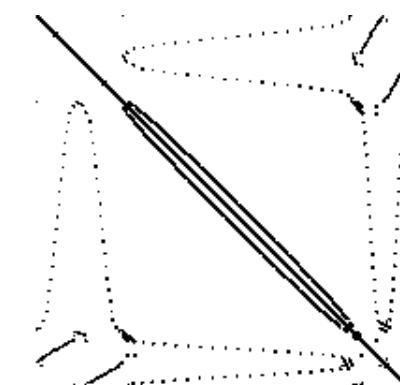
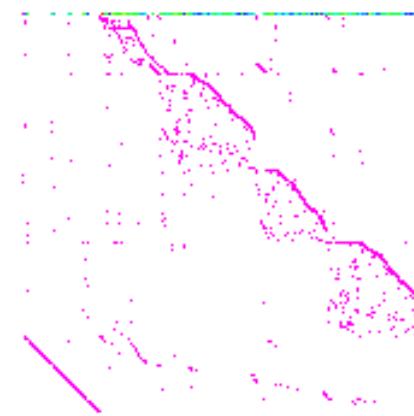
Power Systems; BCSPWR07

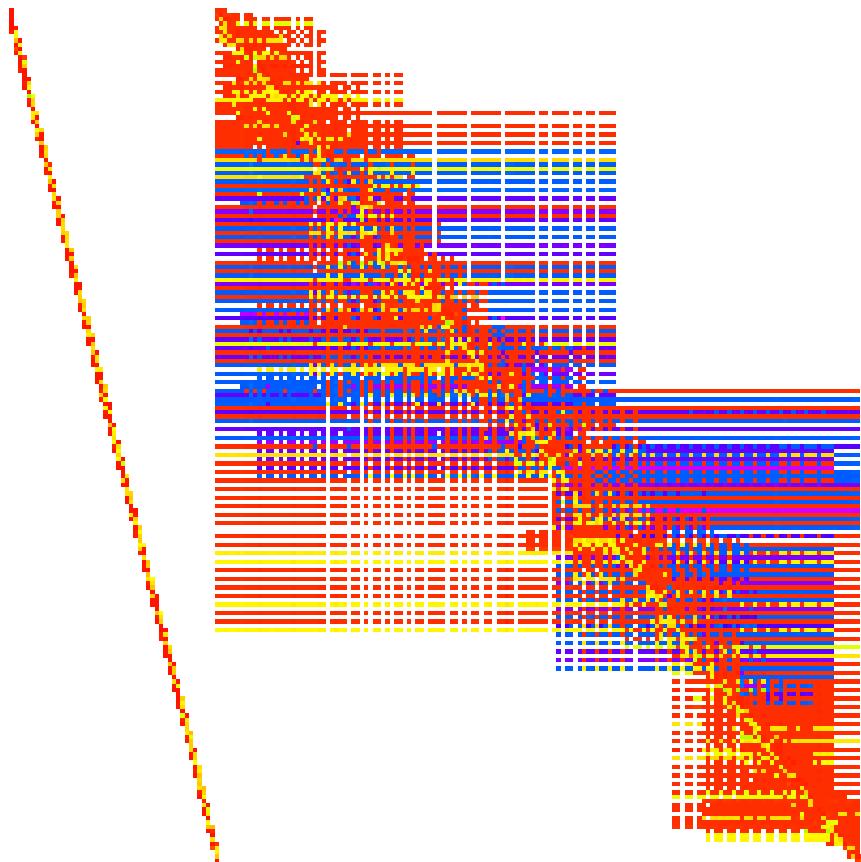


Economic Modelling; ORANI678



Chemical Engineering: WEST0381





- La **ingeniería**, estudio e investigación de los modelos matemáticos y sistemas de ecuaciones con matrices dispersas abarca **tres grandes áreas**:
 - **Almacenamiento** de las matrices en un ordenador.
 - **Ordenación** de las ecuaciones del sistema con el fin de **reducir el número de coeficientes nuevos** no nulos que se crean en la factorización de la matriz.
 - **Implementación óptima** para matrices de grandes dimensiones de los métodos numéricos generales más avanzados para resolver sistemas de ecuaciones tradicionales.

Almacenamiento en ordenador

Por coordenadas

- Mediante un conjunto de triples, (a_{ij}, i, j) , que definen las “coordenadas”, o información esencial, de cada coeficiente distinto de cero.
- Ejemplo** Se quiere almacenar según este esquema

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & -4 & 0 \\ 5 & 0 & -5 & 0 & 6 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{array}{c|cccccccccc} & & & & & \text{Coeficientes} & & & & & \\ \text{Vector} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ \text{ifi} & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 3 & 4 & 4 & 5 & 5 & 5 \\ \text{ico} & 1 & 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 2 & 4 & 1 & 3 & 5 \\ \text{val} & 1 & -1 & 2 & -2 & 3 & -3 & 4 & -4 & 5 & -5 & 6 \end{array}$$

se definirían los tres vectores, **ifi**, **ico** y **val**: los dos primeros basta que sean **integer**; **val** debe ser **real**.

Almacenamiento por filas o columnas

- Es el más extendido. En una matriz $m \times n$ define tres vectores:

val Debe contener todos los coeficientes distintos de cero de la matriz, fila a fila, enumerados consecutivamente;

ico De la misma dimensión de **val**, con los subíndices columna de los coeficientes de **val**;

ia De dimensión $m + 1$, con las posiciones en **val** y **ico** del primer coeficiente no nulo de cada fila de la matriz.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & -4 & 0 \\ 5 & 0 & -5 & 0 & 6 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & \text{Coeficientes} & & & & & & & & & & \\ \hline \text{Vector} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ \hline \text{ia} & 1 & 3 & 6 & 7 & 9 & 12 & & & & & \\ \hline \text{ic} & 1 & 4 & 1 & 3 & 5 & 2 & 2 & 4 & 1 & 3 & 5 \\ \hline \text{va} & 1 & -1 & 2 & -2 & 3 & -3 & 4 & -4 & 5 & -5 & 6 \\ \hline \end{array}$$

- La información de la fila r estará entre las posiciones $\text{ia}(r)$ y $\text{ia}(r + 1) - 1$ en **ico** y **val**, excepto si $\text{ia}(r + 1) = \text{ia}(r)$, en cuyo caso la fila r estaría vacía.

- La parte de un programa **Matlab** para recuperar en el vector **vec(.)** la fila i de una matriz podría ser:

```
vec = 0;
for ii=ia(i):ia(i+1)-1
    vec(ico(ii))=val(ii);
end
```

- Recuperar la columna k sería un poco más complicado:

```
vec=0;
for j=1:m
    for ii=ia(j):ia(j+1)-1
        if ico(ii)==k vec(j)=val(ii), break
        elseif ico(ii)>k break
    end
end
```

Almacenamiento por perfil o envolvente

Definición Si $f_i = \min\{j : a_{ij} \neq 0\}$ y $l_i = \max\{j : a_{ij} \neq 0\}$, una matriz $A^{m \times n}$ tiene un **ancho de banda** de filas w si

$$w = \max_{1 \leq i \leq m} w_i, \quad w_i = (l_i - f_i + 1),$$

donde w_i es el ancho de la fila i . La **envolvente** de A , $\text{Env}(A)$, es el conjunto $\text{Env}(A) = \{(i, j) : f_i \leq j \leq l_i, 1 \leq i \leq m\}$.

- Las **matrices en banda** son aquellas cuyos coeficientes están contenidos en una franja alrededor de su diagonal principal. Es de interés como dispersa, $w \ll n$.
- **Ejemplo** La envolvente de la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & \boxed{x \ x \ x \ x} & & & & & \\ 2 & \boxed{x \ x \ 0 \ x} & & & & & \\ 3 & & \boxed{x \ 0 \ x \ x \ x} & & & & \\ 4 & & \boxed{x \ 0 \ x \ \square \ \square} & & & & \\ 5 & & & \boxed{x \ x \ x \ x \ x} & & & \\ 6 & & & & \boxed{x \ 0 \ 0 \ x \ x} & & \\ 7 & & & & & \boxed{x} & \end{bmatrix}$$

es

$$\text{Env}(A) = \{(1, 1), (1, 2), (1, 3), (1, 4), (2, 1), (2, 2), (2, 3), (2, 4), (3, 3), (3, 4), (3, 5), (3, 6), (4, 2), (4, 3), (4, 4), (5, 4), (5, 5), (5, 6), (5, 7), (6, 2), (6, 3), (6, 4), (6, 5), (6, 6), (6, 7), (7, 7)\}.$$

- Este esquema guarda los coeficientes de la envolvente mediante tres vectores:

val Contiene todos los coeficientes de la envolvente;

ifa Con los índices f_i de cada fila i ;

ia De dimensión $m + 1$, si la matriz es $m \times n$, con las posiciones en **val** del primer coeficiente no nulo de las filas que se corresponden con el orden de los coeficientes de **ia**.

- Por ejemplo,

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

		Coeficientes											
Vector		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
ia		1	4	6	7	10	12	13					
ifa		1	1	3	2	4	5						
val		1	0	-2	2	3	6	-4	0	4	3	1	6

Para recuperar una fila en Matlab:

```
vec = 0;
j = 0;
for ii=ia(i):ia(i+1)-1
    vec(ifa(i)+j)=val(ii);
    j = j+1;
end
```

Definición El ancho de banda (o de semibanda) de una matriz simétrica $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, β , se define como

$$\beta = \max_{1 \leq i \leq n} \beta_i, \quad \beta_i = i - f_i,$$

donde β_i es el ancho de la fila i .

- Ojo. Esta definición sólo se refiere al número de diagonales por encima y debajo de la diagonal principal, sin considerar ésta.
- La envolvente de una matriz simétrica es $\text{Env}(\mathbf{B}) = \{(i, j) : f_i \leq j \leq i, 1 \leq i \leq n\}$.
- Para guardar una matriz simétrica no sería necesario **ifa**. Por ejemplo,

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 10 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 0 & 3 & 0 \\ 3 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 & 8 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & 3 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & \text{Coeficientes} \\ \hline \text{Vector} & 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ 9 \ 10 \\ \hline \text{ib} & 1 \ 4 \ 7 \ 8 \ 10 \\ \hline \text{val} & 10 \ 2 \ 3 \ 4 \ 0 \ 3 \ 6 \ 1 \ 8 \ 3 \\ \hline \end{array}$$

Obsérvese que la dimensión de **ib** es n .

- Si los anchos de banda son iguales, **ib** no sería necesario: sólo **val** y β_i .

Operaciones algebraicas de matrices dispersas

- El concepto **estructura simbólica** de una matriz expresa la disposición espacial de los coeficientes distintos de cero en la matriz.

Producto interior de dos vectores

- Calculemos el producto interior de dos vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} ,

$$h = \sum_{i=1}^n a_i b_i,$$

almacenados como dispersos según el esquema de filas.

- Lo más eficaz es definir un vector **ip**, de dimensión **n**, en el que se guardan los **punteros** de los coeficientes no nulos de **vala** o **valb**.

- Por ejemplo, si el vector **a** está definido por

Vector	Coeficientes			
	1	2	3	4
icoa	10	3	7	4
vala	0,2	0,3	0,4	-0,5

el vector **ip**, una vez almacenados los punteros, quedaría

Vector	Coeficientes											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...
ip	0	0	2	4	0	0	3	0	0	1	0	...

a₃ está en la posición 2 de **vala**, **a₄** en la posición 4, **a₇** en la 3, etc.

- Con los coeficientes no nulos de **b**, se usa **ip** y, si es necesario, se multiplican los coeficientes acumulando el resultado en **h**. Si **b** es

Vector	Coeficientes		
	1	2	3
icob	5	4	10
valb	0,6	0,7	0,5

el primer coeficiente no nulo de **b** es **b₅ = 0,6**.

- Ahora bien, **ip(5)=0**, por lo que **a₅b₅ = 0**, no siendo necesario efectuar esta última operación ...

- Estas ideas en **Matlab** darían lugar a:

```
ip = 0
for i=1:na
    ip((icoa(i)) = i;
end
h = 0.0;
for i=1:nb
    if ip(icob(i))~=0
        h=h+vala(ip(icob(i)))*valb(i);
    end
end
```

- Hacer $\text{ip}(\dots)=0$ es costoso numéricamente: es necesario realizar muchas operaciones, aunque triviales, si n es grande.
- Si un vector se multiplica por otros muchos (caso por ejemplo de productos de matrices), evidentemente, sólo es necesario inicializar ip a cero una vez.

Multiplicación de matrices por vectores

- Supondremos que el vector está almacenado en toda su extensión. Nos interesamos en primer lugar por la operación $\mathbf{c} = \mathbf{A}\mathbf{b}$, donde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ y $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$.
- Si \mathbf{c} se guarda en toda su extensión y \mathbf{A} según el esquema por filas, para realizar la operación basta saber qué coeficientes son no nulos en cada fila de la matriz \mathbf{A} , multiplicarlos por el correspondiente de \mathbf{b} y acumular el resultado.
- En Matlab esto se podría hacer como sigue.

```
for i=1:m
    iai=ia(i); iai1=ia(i+1)-1;
    s = val(iai:iai1)*b(ico(iai):ico(iai1));
    c(i) = s;
end
```

Multiplicación de un vector por una matriz

- Queremos efectuar la operación $\mathbf{c}^T = \mathbf{b}^T \mathbf{A}$, donde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ y $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$.
- Consideremos el siguiente ejemplo simbólico de este producto,

$$[c_1 \ c_2 \ c_3] = [b_1 \ b_2] \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{aligned} c_1 &= b_1 a_{11} + b_2 a_{21} \\ c_2 &= b_1 a_{12} + b_2 a_{22} \\ c_3 &= b_1 a_{13} + b_2 a_{23}. \end{aligned}$$

Si la matriz está almacenada por filas, reescribamos las ecuaciones así:

$$\begin{array}{ll} c_1 \leftarrow b_1 a_{11} & c_1 \leftarrow c_1 + b_2 a_{21} \\ c_2 \leftarrow b_1 a_{12} \quad \text{y} \quad c_2 \leftarrow c_2 + b_2 a_{22} \\ c_3 \leftarrow b_1 a_{13} & c_3 \leftarrow c_3 + b_2 a_{23} \end{array}$$

```
c = 0;
for i=1:n
    bi = b(i);
    for ii=ia(i):ia(i+1)-1
        j = ico(ii);
        c(j) = c(j)+val(ii)*bi;
    end
end
```

En este caso se puede acceder a los coeficientes secuencialmente por filas e ir acumulando los resultados de las operaciones en los propios coeficientes de \mathbf{c} .

Otras operaciones

- Operaciones como la suma de matrices, la multiplicación, la multiplicación $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, etc. se pueden llevar a cabo muy eficazmente, en general, mediante dos etapas: la **simbólica** y la **numérica**:
 - La **simbólica** determina, mediante vectores-puntero, esa estructura de coeficientes no nulos de la matriz que ha de resultar de la operación.
 - La **numérica**, los valores distintos de cero en las posiciones ya reservadas al efecto en la etapa anterior.

Solución de sistemas lineales de matriz dispersa

Algoritmo general para resolver grandes sistemas lineales

Paso 1 – Determinar la estructura simbólica de A .

Paso 2 – Obtener unas permutaciones P y Q tales que PAQ tenga una estructura de dispersidad óptima.

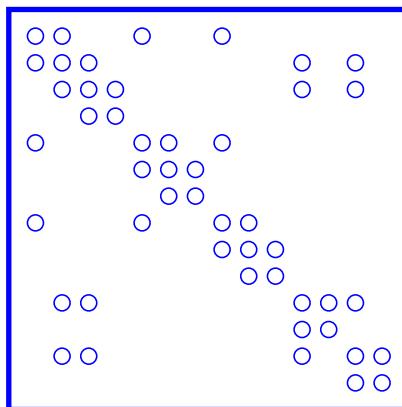
Paso 3 – Factorizar simbólicamente la matriz PAQ y generar las estructuras de datos y memoria necesarias para L y U .

Paso 4 – Calcular numéricamente $LU = PAQ$ y $c = Pb$.

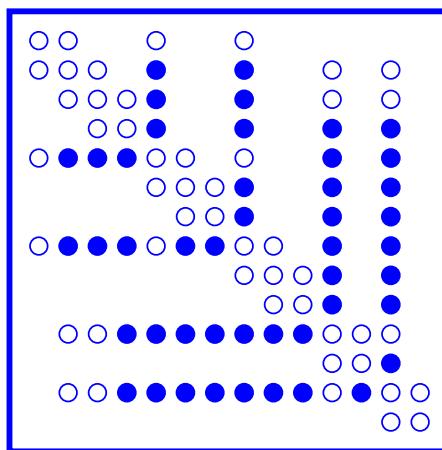
Paso 5 – Resolver $Lz = c$, $Uy = z$ y, por fin, $x = Qy$.

Ordenación de las ecuaciones

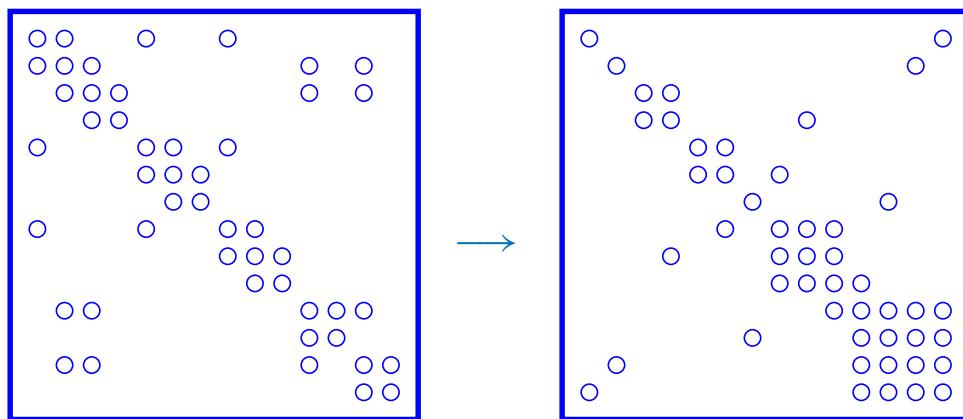
- Al resolver un sistema de ecuaciones lineales de matriz dispersa, **el orden** en que se disponen sus filas o columnas tiene una **importancia fundamental**.
- Consideraremos una matriz A , de estructura simbólica simétrica, cuyo patrón de coeficientes distintos de cero es el de la figura.



- Si se utiliza la eliminación de Gauss para resolver dicho sistema, en el transcurso de dicha factorización se harán distintos de cero 46 coeficientes —**coeficientes de relleno** (**fill-in** en la literatura anglosajona)—: los que en la figura aparecen sombreados.



- Si las filas y las columnas del mismo sistema se reordenan de acuerdo con el **algoritmo de grado mínimo** (que estudiaremos) se obtiene un patrón de coeficientes distintos de cero como este.



- Si esta matriz se factoriza también mediante eliminación de Gauss el número de nuevos coeficientes **distintos de cero** que se crean en el proceso es **cero**.

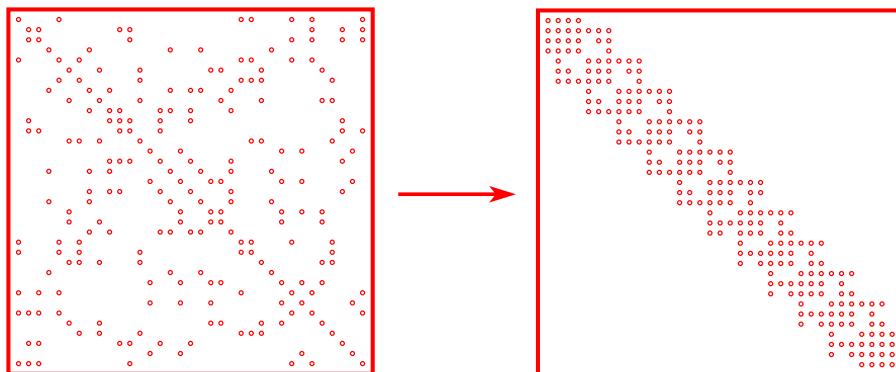
- **Reordenar** las matrices para reducir el número de coeficientes de relleno presenta tres **ventajas** fundamentales:
 - Una **disminución del número de posiciones de memoria** que se han de reservar para los nuevos coeficientes que se harán distintos de cero en un proceso de factorización.
 - Una **disminución del número de operaciones** a realizar y, por lo tanto, el tiempo total de cálculo para factorizar la matriz y resolver el correspondiente sistema.
 - Una **mejora de la estabilidad numérica** del proceso global de resolución del sistema al disminuir el número de coeficientes que habrá que considerar y por tanto disminuir la probabilidad de encontrar grandes diferencias entre ellos, errores de cancelación, etc.

- El número de operaciones que habría que realizar para factorizar la matriz del ejemplo mediante eliminación de Gauss y luego resolver el sistema correspondiente, si se operase con esta matriz como **densa**, como **dispersa** sin reordenar filas y columnas y como si fuese **dispersa reordenando filas y columnas**, sería el que sigue:

Operación	Matriz	Matriz	Matriz
	Matriz	Dispersa	Dispersa
Densa	sin Ordenar	Ordenada	
Factorización	1911	408	105
Sustitución Inversa	196	94	48

- Para lograr una ordenación óptima es necesario considerar la estructura de la matriz, cómo se almacena y el tipo de operaciones que se van a realizar.

- Si las matrices son de estructura simétrica y se almacenan según un esquema de perfil o envolvente, también interesa poder disponer de un algoritmo de ordenación que compacte los coeficientes cerca de la diagonal principal.
 - Uno para ese propósito es el **algoritmo de Cuthill-McKee** que veremos más adelante.
 - El resultado de aplicarlo a una matriz simétrica 35×35 es este.



- También existen diversas formas de ordenar matrices dispersas de **estructura simbólica no simétrica**. Entre las más usadas está la que ordenar la matriz A de tal forma que se consiga una **estructura triangular inferior en bloques** del tipo que se indica en la figura.

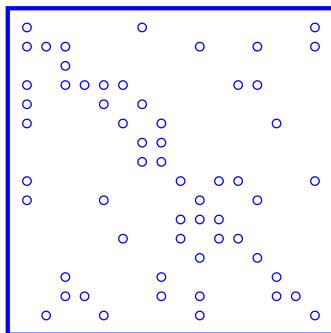
$$A = \begin{array}{|c|c|c|} \hline & A_{11} & \\ \hline A_{21} & A_{22} & \\ \hline A_{31} & A_{32} & A_{33} \\ \hline \end{array}$$

- Si se dividen los vectores x y b como A , el sistema se tratará mucho más eficazmente resolviendo² los subsistemas

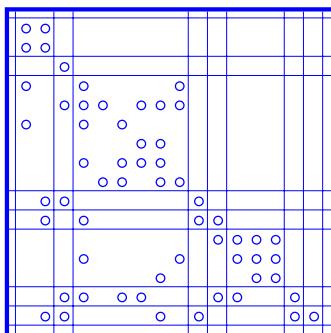
$$A_{ii}x_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}x_j, \quad i = 1, 2, 3.$$

²Sólo es necesario factorizar las submatrices A_{ii} pues los bloques o submatrices A_{ij} , $i > j$, sólo se han de multiplicar por los subvectores x_j . Los nuevos coeficientes distintos de cero sólo se podrán crear en esas submatrices en la diagonal principal.

- Si como ejemplo consideramos la matriz simétrica 16×16



la reordenación triangular inferior en bloques que de ella se puede obtener es:



Índice

- Matrices dispersas
- Almacenamiento en ordenador de matrices dispersas
- Operaciones algebraicas elementales con matrices dispersas
- Solución de grandes sistemas lineales de matriz dispersa
 - Matrices dispersas simétricas
 - Nociones básicas sobre grafos
 - Interpretación de la eliminación de Gauss mediante grafos
 - El algoritmo de grado mínimo
 - El algoritmo de Cuthill-McKee
 - Matrices dispersas no simétricas
- Mínimos cuadrados

Matrices dispersas simétricas

- La eliminación de Gauss, u otra factorización de matrices dispersas simétricas, puede crear coeficientes no nulos nuevos; para evitarlo lo más posible hay que reordenar las filas y las columnas.
- Si a la matriz de $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ se le aplican unas de permutaciones, representadas por \mathbf{P} , el sistema se puede reescribir,

$$\mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{P}^T \mathbf{P} \mathbf{x} = \mathbf{P} \mathbf{b},$$

pues $\mathbf{P}^T \mathbf{P} = \mathbf{I}$.

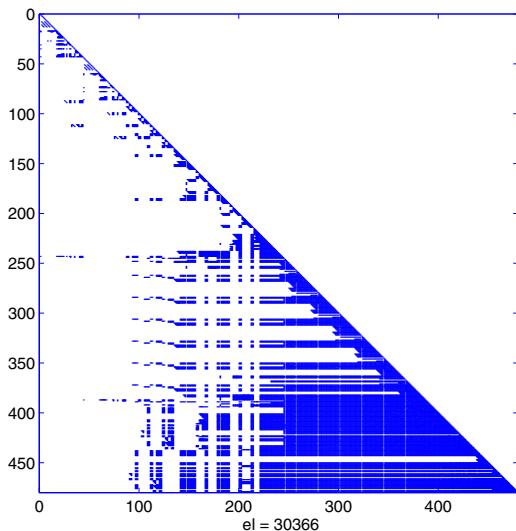
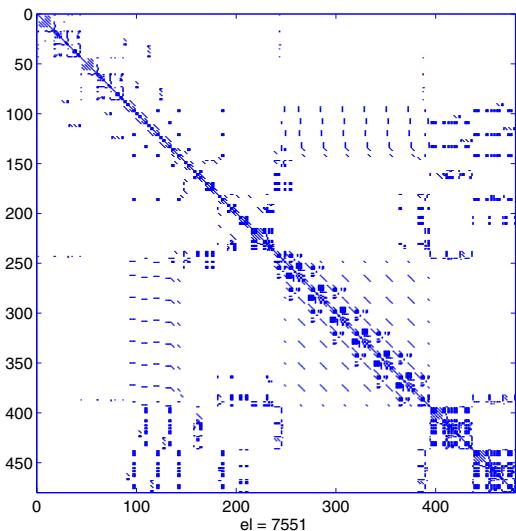
- Haciendo $\mathbf{y} = \mathbf{Px}$ y $\mathbf{c} = \mathbf{Pb}$, se tiene que

$$\mathbf{By} = \mathbf{c},$$

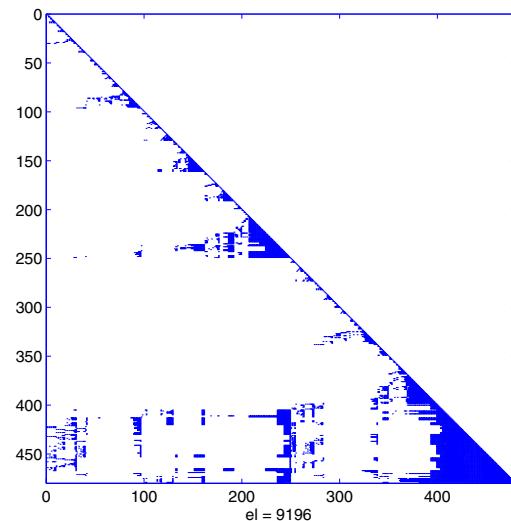
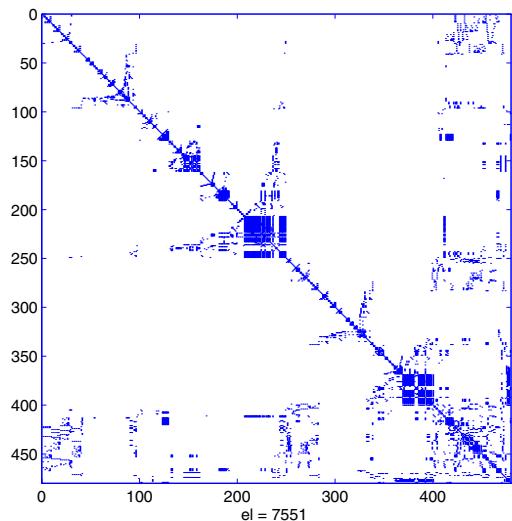
donde $\mathbf{B} = \mathbf{PAP}^T$ es la matriz \mathbf{A} reordenada.

- La matriz \mathbf{B} es también dispersa y simétrica.
- Si \mathbf{A} es definida positiva, lo mismo ocurre con \mathbf{B} , etc.
- Encontrar una \mathbf{P} que produzca el menor relleno posible al factorizar \mathbf{B} no es fácil:
 - Si \mathbf{A} es de orden n , el número posible de ordenaciones es $n!$. Imposible analizar todas si n es grande.
 - No existe ningún algoritmo que garantice la ordenación óptima.
 - Si existen algoritmos heurísticos para tratar de llegar a un resultado óptimo.

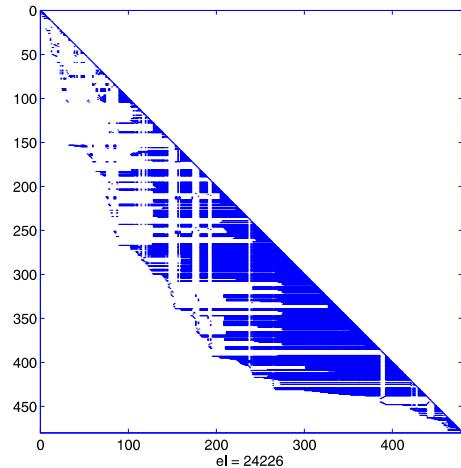
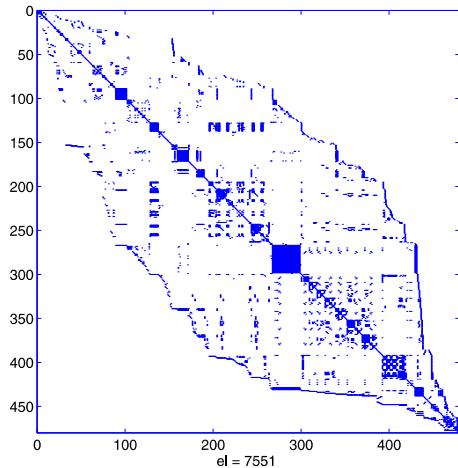
- En las figuras que siguen se representan los patrones de coeficientes distintos de cero de una matriz 480×480 antes y después de factorizarla.
- Las dos primeras representan la matriz sin reordenar y el resultado que produciría factorizarla de la forma LL^T .



- Estas dos, el mismo caso cuando se reordena la matriz original mediante el **algoritmo de grado mínimo**.



- Por último, estas dos figuras representan la matriz reordenada mediante el algoritmo de Cuthill-McKee y el factor L resultante.

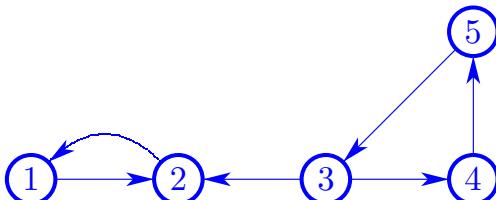
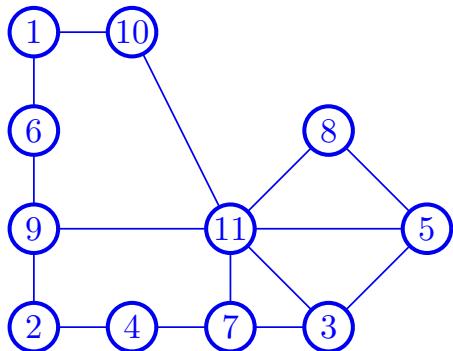


Obsérvese que L tiene en el primer caso 30.366 coeficientes distintos de cero, 9.196 en el segundo y 24.226 en el tercero.

Elegir un buen método de reordenación de la matriz es esencial

Nociones básicas sobre teoría de grafos

- Un **grafo**, $G = (V, E)$, es un par formado por un conjunto finito, V , de elementos denominados **nudos** del grafo, y por otro también finito, E , de **arcos**.



- Un **arco** es un par de nudos. Si los arcos de un grafo son ordenados, el grafo se denomina **digrafo** o **grafo dirigido**; si no, **grafo a secas** o **grafo no dirigido**.
- El **grado de un nudo** es el número de arcos que tienen uno de sus extremos en ese nudo; o el **número de nudos a él unidos**.

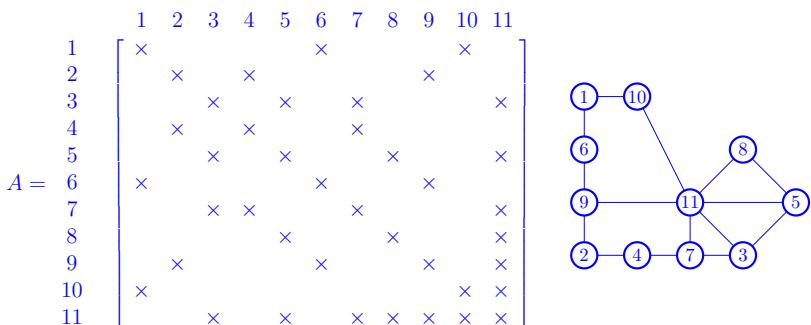
- Un grafo no dirigido se puede ver como un digrafo en el que si el arco $e = (u, v) \in E$, también $e' = (v, u) \in E$.
- Si $e = (i, j) \in E$, este arco une un nudo de **origen** o **cola** $i = t(e)$ con otro de **destino**, **final** o **cabeza** $j = h(e)$.
- El número de elementos, o cardinal de V o E , se designa $|V|$ o $|E|$.
- Un grafo $G = (V, E)$ se dice **numerado** si existe una biyección $\alpha : \{1, 2, \dots, |N|\} \rightarrow V$.
- En lo sucesivo **supondremos el grafo numerado**.
- A cualquier matriz cuadrada, A , se le puede asociar un grafo.

- Si A es cuadrada de orden n , de estructura simbólica simétrica, con todos sus coeficientes diagonales distintos de cero, se define el **grafo asociado** a A , $G^A = (V^A, E^A)$, como el **grafo no dirigido** numerado de n nudos $V^A = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ y arcos o aristas E^A definidas de tal forma que

$$(v_i, v_j) \in E^A \Leftrightarrow a_{ij} \neq 0, a_{ji} \neq 0.$$

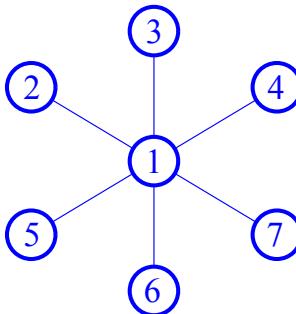
- El que los coeficientes diagonales sean distintos de cero hace que no sea necesario representar los bucles que unen cada nudo consigo mismo.

- En la figura se puede ver la estructura simbólica simétrica de una matriz 11×11 y su grafo asociado.



El grafo asociado a una matriz simétrica permanece invariable, **salvo la numeración de sus nudos**, al aplicarle a dicha matriz una permutación simétrica.

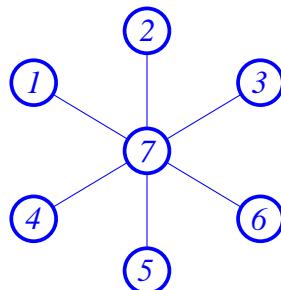
- Considérese el grafo siguiente:



- Con esta numeración, la matriz simbólica asociada es:

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[\begin{matrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & & & & & \\ \times & & \times & & & & \\ \times & & & \times & & & \\ \times & & & & \times & & \\ \times & & & & & \times & \\ \times & & & & & & \times \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

- Si en el grafo anterior la numeración fuese



la matriz simbólica asociada sería

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[\begin{matrix} \times & & & & & & \times \\ & \times & & & & & \times \\ & & \times & & & & \times \\ & & & \times & & & \times \\ & & & & \times & & \times \\ & & & & & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \end{matrix} \right] \end{matrix},$$

en la que no habría coeficientes de relleno al factorizarla.

- Simulemos con **Matlab** la manipulación de esta matriz (en `Demo_sparse_1.m`).

```
>> A=eye(7);
>> A(1,:) = A(1,:) + ones(1,7)
>> A(:,1) = A(:,1) + ones(7,1)
>> spy(A)
>> [L U P] = lu(A);
>> spy(L)
>> r=amd(A);           % Ordenación grado mínimo
>> spy(A(r,r))
>> [L U P] = lu(A(r,r));
>> spy(L)
```

```
% Demo_sparse_1.m
A=eye(7);
A(1,:) = A(1,:) + ones(1,7)
A(:,1) = A(:,1) + ones(7,1)
spy(A), pause
[L U P] = lu(A);
spy(L), pause
r=amd(A); % Ordenación grado mínimo
spy(A(r,r)), pause
[L U P] = lu(A(r,r));
spy(L)
```

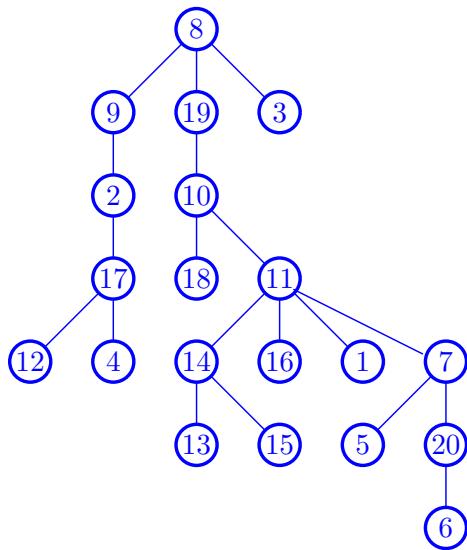
- Un **camino** de un nudo u_1 a otro u_{m+1} , es un conjunto ordenado de nudos $\{u_1, u_2, \dots, u_{m+1}\}$ tal que u_i y u_{i+1} son adyacentes para $i = 1, 2, \dots, m$.
 - La **longitud** de ese camino es m .
 - El nudo inicial de un camino se suele denominar de **partida**; el final, de **llegada**.
 - Un camino también se puede definir como un conjunto ordenado de m arcos $(u_1, u_2), (u_2, u_3), \dots, (u_m, u_{m+1})$.
 - Dos nudos dados, u y v , se dicen **unidos por un camino**, si existe un camino de u a v .
 - Un camino es un **ciclo** cuando $u_1 = u_{m+1}$.
 - La **distancia**, $d(u, v)$, entre dos nudos, u y v , es la longitud del camino más corto entre ambos nudos.
 - Dado un nudo u , a la mayor distancia entre ese nudo y cualquier otro del grafo se la denomina **excentricidad**, $e(u)$, del nudo u .
 - Un grafo se dice **conexo** si cada par de nudos distintos se puede unir por un camino; **inconexo** en cualquier otro caso.
- La **mayor excentricidad** de un grafo se denomina **diámetro**.
- Un **nudo periférico** es aquel cuya excentricidad es al diámetro.

- En esta matriz y su grafo, los nudos 1 y 3 están unidos por los caminos $\{1, 10, 11, 3\}$ y $\{1, 6, 9, 11, 3\}$, de longitudes 3 y 4.

$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ 9 \\ 10 \\ 11 \end{matrix} & \left[\begin{matrix} \times & & & & & & & & & & \\ & \times & \times & & & & & & & & \\ & & \times & \times & & & & & & & \\ & & & \times & \times & & & & & & \\ & & & & \times & \times & & & & & \\ & & & & & \times & \times & & & & \\ & & & & & & \times & \times & & & \\ & & & & & & & \times & \times & & \\ & & & & & & & & \times & \times & \\ & & & & & & & & & \times & \times \\ & & & & & & & & & & \times \end{matrix} \right] \end{matrix}$$

- La distancia entre los nudos 1 y 3 es 3.
- El camino $\{5, 8, 11, 3, 5\}$ es un ciclo.
- El diámetro de este grafo es 4. Los nudos periféricos: 1, 2, 4, 5 y 6. Su excentricidad es igual a 4.

- Un grafo conexo que no tiene ciclos se denomina **árbol**. En un árbol sólo existe un camino entre cualquier par de nudos.



- Una matriz cuyo grafo asociado es un árbol se puede reordenar de forma que al factorizarla mediante eliminación de Gauss no experimente **relleno alguno**.

Interpretación de la eliminación de Gauss mediante grafos

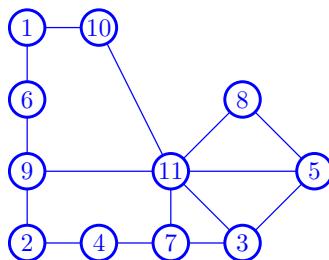
- Recordemos que:
 - Al comienzo de una etapa k del proceso de eliminación de Gauss todos los coeficientes distintos de cero debajo de la diagonal principal en las columnas $1, 2, \dots, k - 1$ son cero.
 - En esta etapa k se determinan unos multiplicadores y se restan, de las filas que tienen un elemento distinto de cero en la columna k debajo de la diagonal principal, la fila k multiplicada por el multiplicador correspondiente.
 - Este proceder puede crear nuevos coeficientes distintos de cero en la submatriz $k + 1, \dots, n$.
- Consideraremos la submatriz activa en la etapa k : la de coeficientes a_{ij}^k , donde $i, j \geq k$.

- Sea G^k el **grafo de eliminación** de esa submatriz activa:

Para obtener G^{k+1} a partir de G^k , borrar en éste el nudo k y añadir todos los nuevos arcos que sea posible entre nudos que sean adyacentes a ese nudo k .

- Los arcos que se añaden determinan qué coeficientes nuevos distintos de cero se producirán en la matriz en un proceso de eliminación de Gauss, o similar.

- Aplicaremos esta idea al grafo que sigue y a su matriz.



Etapa 1

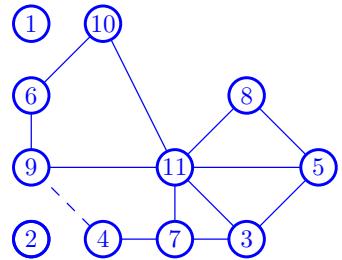
$$A^2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ 1 & \times & & & & & & & & & \\ 2 & & \times & & & & & & & & \\ 3 & & & \times & & & & & & & \\ 4 & & & & \times & & & & & & \\ 5 & & & & & \times & & & & & \\ 6 & & & & & & \times & & & & \\ 7 & & & & & & & \times & & & \\ 8 & & & & & & & & \times & & \\ 9 & & & & & & & & & \times & \\ 10 & & & & & & & & & & \times \\ 11 & & & & & & & & & & & \end{bmatrix}$$

G^2

Etapa 2

$$A^3 = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ 1 & \times & & & & & & & & & & \\ 2 & \times & & \times & & & & & & \times & & \\ 3 & & \times & \times & \times & & & & & & & \times \\ 4 & & & \times & \times & \times & & & & & \otimes & \\ 5 & & & & \times & \times & & & & & & \times \\ 6 & & & & & \times & \times & & & & \otimes & \\ 7 & & & & & & \times & \times & & & & \times \\ 8 & & & & & & & \times & & & & \times \\ 9 & & & & \otimes & & & & \times & & & \times \\ 10 & & & & \otimes & & & & & \times & & \times \\ 11 & & & & & & & & & & & \times \end{bmatrix}$$

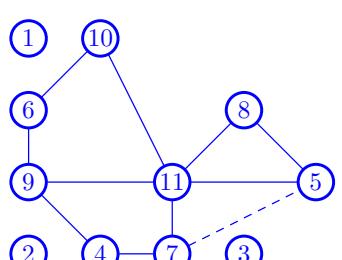
G^3



Etapa 3

$$A^4 = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ 1 & \times & & & & & & & & & & \\ 2 & \times & & \times & & & & & & \times & & \\ 3 & \times & & \times & \times & & & & & & & \times \\ 4 & & \times & & \times & \otimes & & & & & & \\ 5 & & & \times & \otimes & \times & & & & & & \times \\ 6 & & & & \times & & & & \times & \otimes & & \\ 7 & & & & \otimes & & \times & & & & & \times \\ 8 & & & & \times & & & \times & & & & \times \\ 9 & & & & \otimes & & & & \times & & & \times \\ 10 & & & & \otimes & & & & & \times & & \times \\ 11 & & & & & & & & & & & \times \end{bmatrix}$$

G^4



Etapa ...

- Al final del proceso la matriz será:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	x				x				x		
2		x	x						x		
3			x	x		x					x
4		x	x			x			⊗		
5			x	x		⊗	x			x	
6	x				x				x	⊗	
7		x	x	⊗		x	⊗	⊗		x	
8			x			⊗	x	⊗		x	
9		x		⊗		x	⊗	⊗	x	⊗	x
10	x				⊗				⊗	x	x
11		x	x		x	x	x	x	x	x	x

- Los grafos de eliminación permiten realizar, independientemente de los valores numéricos, una eliminación de Gauss simbólica y determinar qué nuevos coeficientes distintos de cero como máximo se van a crear.
 - Reservando posiciones de memoria para esos nuevos coeficientes, se puede realizar la eliminación o factorización numérica como es habitual.

El algoritmo de GRADO MÍNIMO

- Fue formulado por Tinney y Walker en 1967. Es el más **más extendido y sencillo** para reducir el número de rellenos que produce la eliminación de Gauss, u otra similar, en una matriz de estructura simétrica.
- La **idea** en que se basa es simple:
 - Si en la etapa k de la factorización **hay coeficientes no cero a la derecha de la diagonal principal** de la fila k , al sumar un múltiplo de esta fila a cualquiera de las filas $k + 1$ a n lo normal es que se produzcan nuevos coeficientes no nulos en esas filas.
 - Si se determina la fila ℓ de la submatriz activa con el menor número de coeficientes distintos de cero y se intercambia con la k , al igual que las columnas ℓ y k , el número de nuevos coeficientes distintos de cero en esa submatriz será mínimo.

- El nombre de **grado mínimo** viene de que en el grafo de eliminación G^k , el coeficiente de la diagonal principal en la fila k representará el nudo que está unido al menor número de nudos.

Paso 1 – Inicialización. Hacer $i \leftarrow 1$.

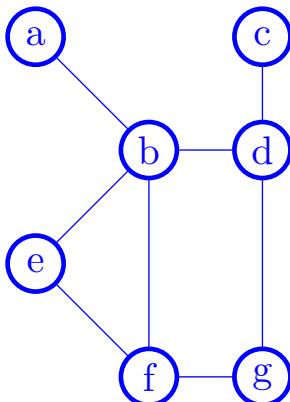
Paso 2 – Selección del nudo de grado mínimo. Seleccionar en el grafo de eliminación $G^{k-1} = (V^{k-1}, E^{k-1})$ aquel nudo v_k de grado mínimo.

Paso 3 – Transformación. Formar el nuevo grafo de eliminación $G^k = (V^k, E^k)$ eliminando v_k de G^{k-1} .

Paso 4 – Bucle. Hacer $i \leftarrow i + 1$. Si $i > |V|$, parar. Si no, ir al paso 2.

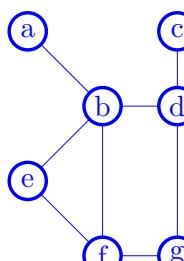
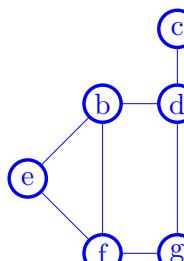
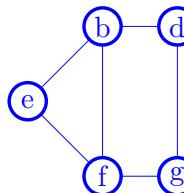
Algoritmo de Grado Mínimo

- Para ilustrar el proceso del algoritmo, consideremos el grafo de la figura asociado a una matriz simétrica 7×7 .

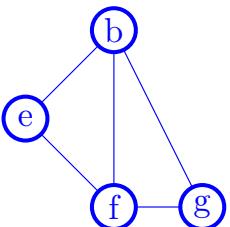
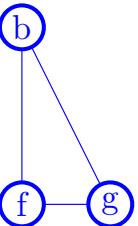
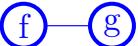


- En las dos tablas que siguen se describen las 7 etapas de que consta la aplicación del algoritmo de grado mínimo a este grafo.

Etapa 1 a 3

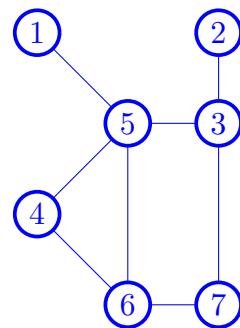
Etapa k	Grafo de Eliminación G^{k-1}	Nudo Seleccionado	Grado
1		a	1
2		c	1
3		d	2

Etapa 4 a 7

Etapa k	Grafo de Eliminación G^{k-1}	Nudo Seleccionado	Grado
4		e	2
5		b	2
6		f	1
7		g	0

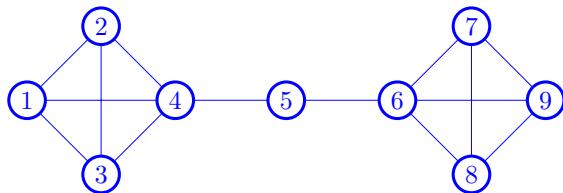
- Al final:

$$A = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & \times & & & & \times & & \\ 2 & & \times & \times & & & & \\ 3 & & \times & \times & & \times & & \times \\ 4 & & & \times & \times & \times & & \\ 5 & \times & & \times & \times & \times & \times & \otimes \\ 6 & & & \times & \times & \times & \times & \\ 7 & & \times & & \otimes & \times & \times & \end{bmatrix}$$



- El algoritmo de grado mínimo **produce muy buenos resultados prácticos**.
- Cuando el **grafo** a reordenar sea **un árbol**, el resultado **no producirá coeficientes de relleno** al efectuar la factorización ulterior.

- El algoritmo de grado mínimo **no siempre** da lugar a la ordenación óptima: aquella con el menor número de rellenos.



	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	x	x	x	x					
2	x	x	x	x					
3	x	x	x	x					
4	x	x	x	x	x				
5			x	x	x				
6			x	x	x	x	x	x	
7			x	x	x	x			
8			x	x	x	x			
9		x	x	x	x				

- Si se aplica al grafo de la figura, **el algoritmo elegirá el nudo número 5 como el inicial**, lo que traerá como consecuencia que se produzca un relleno posterior en las posiciones (4, 6) y (6, 4).
- Con **la numeración de la figura** no se producirían rellenos.

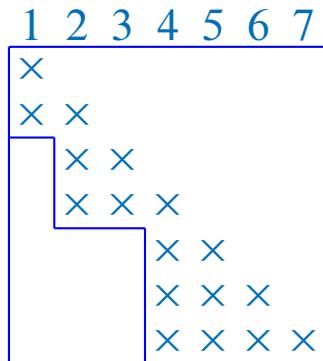
El algoritmo de Cuthill-McKee

- Fue formulado en 1969 por Elizabeth H. Cuthill y J. McKee. Su objetivo es que los coeficientes distintos de cero estén lo más cerca posible de la diagonal principal.
- Mecánica: Una vez numerado un nudo k , se numeran inmediatamente después los que están unidos a él, no numerados previamente: los coeficientes distintos de cero de la fila k estarán lo más cerca posible de la diagonal.

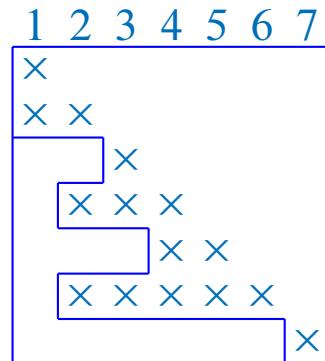
Paso 1 – Inicialización. Seleccionar un nudo inicial r . Hacer $v_1 \leftarrow r$.

Paso 2 – Bucle. Para $i = 1, \dots, n$, determinar todos los nudos adyacentes al v_i no numerados y numerarlos en orden creciente de grado a nudos no numerados.

Definición Se dice que una matriz simétrica tiene un **perfil monótono** si para todo k y ℓ , $k < \ell$, se cumple que $l_k \leq l_\ell$.



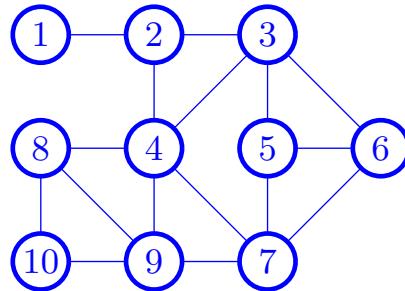
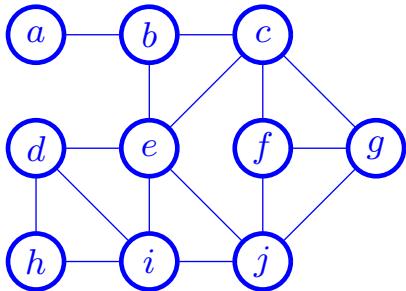
Perfil Monótono



Perfil No Monótono

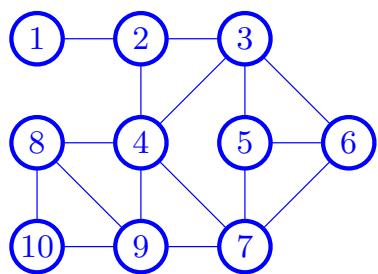
Teorema La numeración dada por el algoritmo de Cuthill-McKee conduce a un perfil monótono.

- **Ejemplo** Apliquemos el algoritmo de Cuthill-McKee al grafo de la figura.



- Empezando a numerar por el nudo *a*, en la figura de la derecha se puede ver la numeración final que se obtiene con el algoritmo.
- Los nudos **5** y **6** podrían invertir su numeración según el algoritmo. Se ha escogido ésta por estar el **5** antes en la pseudonumeración inicial.

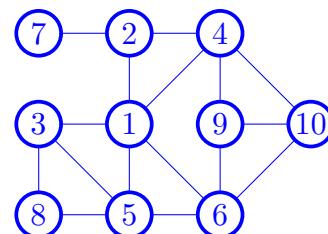
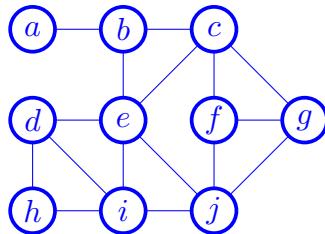
- Con la numeración obtenida, los coeficientes distintos de cero y ceros en la envolvente de la matriz asociada, considerando sólo su parte triangular inferior, serán los que siguen.



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	x									
2		x								
3			x	x						
4			x	x	x					
5				x	0	x				
6				x	0	x	x			
7				x	x	x	x			
8				x	0	0	0	x		
9				x	0	0	x	x	x	
10						x	x	x		

- El **ancho de banda** de esta matriz es 5. La envolvente tiene 33 coeficientes; 7 de ellos cero.

- Ahora bien, si se comienza a numerar el grafo por el nudo *e*, el resultado de aplicar el algoritmo de Cuthill-McKee es el de la figura.



- Los coeficientes distintos de cero y ceros son:

$$\begin{array}{r} 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 7 \quad 8 \quad 9 \quad 10 \\ \left[\begin{array}{ccccccccc} x & & & & & & & & & \\ x & x & & & & & & & & \\ x & 0 & x & & & & & & & \\ x & x & 0 & x & & & & & & \\ x & 0 & x & 0 & x & & & & & \\ x & 0 & 0 & 0 & x & x & & & & \\ x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & & & \\ x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & x & & & \\ x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & x & & & \\ x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & x & & & \end{array} \right] . \end{array}$$

El ancho de banda de esta matriz es 6. El número de coeficientes de la envolvente es 46; de ellos, 20 cero.

La elección del nudo inicial, una vez más, es una cuestión crítica.

Selección del nudo inicial

- Normalmente, el mejor nudo de partida es uno periférico. Obtengamos uno.

Paso 1 – Inicialización. Seleccionar un nudo arbitrario r .

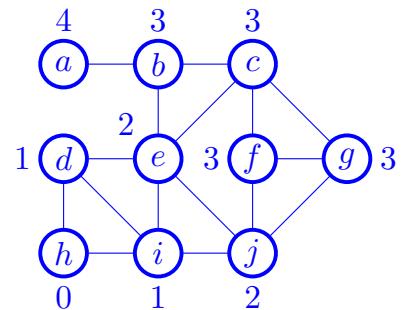
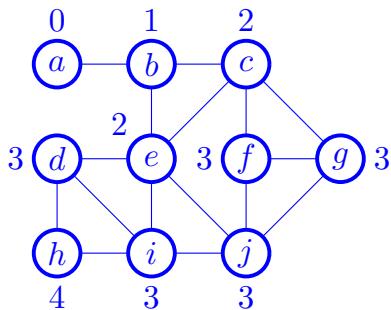
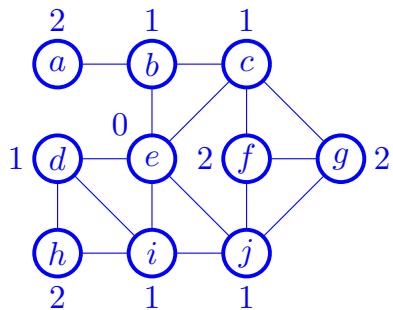
Paso 2 – Generar estructura de niveles. Construir la estructura de niveles del grafo tomando como nudo raíz el nudo r : $\mathcal{L}(r) = \{L_0(r), L_1(r), \dots, L_{\ell(r)}(r)\}$.

Paso 3 – Bucle. Escoger un nudo v en $L_{\ell(r)}(r)$ todavía no tratado de grado mínimo:

a) Si $e(v) > e(r)$, hacer $r \leftarrow v$ e ir al Paso 2.

b) Si $e(v) \leq e(r)$, escoger otro nudo de $L_{\ell(r)}(r)$ y volver al paso 3; si no hay más nudos, parar.

- Comenzando por cualquier nudo, por ejemplo *e*, apliquemos este procedimiento al ejemplo: las tres etapas de que consta están la figura.



- Los números al lado de los nudos del grafo indican su excentricidad tomando como raíz el que se indica como 0.
- Obsérvese que del resultado del algoritmo se desprende que tanto el nudo *a* como el *h* podrían utilizarse como nudos de partida pues tienen la misma excentricidad: 4.

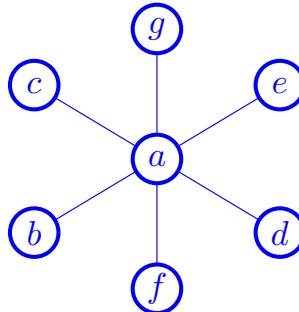
El algoritmo inverso de Cuthill-McKee

Reducción de la envolvente de una matriz dispersa simétrica

- En 1971 George descubrió que utilizando el algoritmo de Cuthill-McKee, pero **invirtiendo el orden de la numeración final**, se conseguía una matriz con el mismo ancho de banda pero con una envolvente con un número de coeficientes menor o igual.

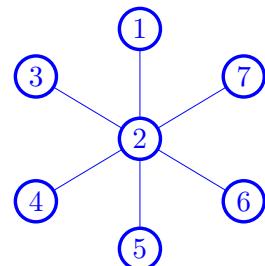
Teorema Sea A una matriz cuyo perfil es monótono. El número de coeficientes de $\text{Env}(A)$, numerando el grafo asociado a A de acuerdo con el resultado obtenido de aplicar el algoritmo inverso de Cuthill-McKee, es a lo sumo el mismo que el de la matriz asociada al grafo numerado de acuerdo con el resultado del algoritmo ordinario de Cuthill-McKee.

- **Ejemplo** Considérese el grafo que venimos manejando.

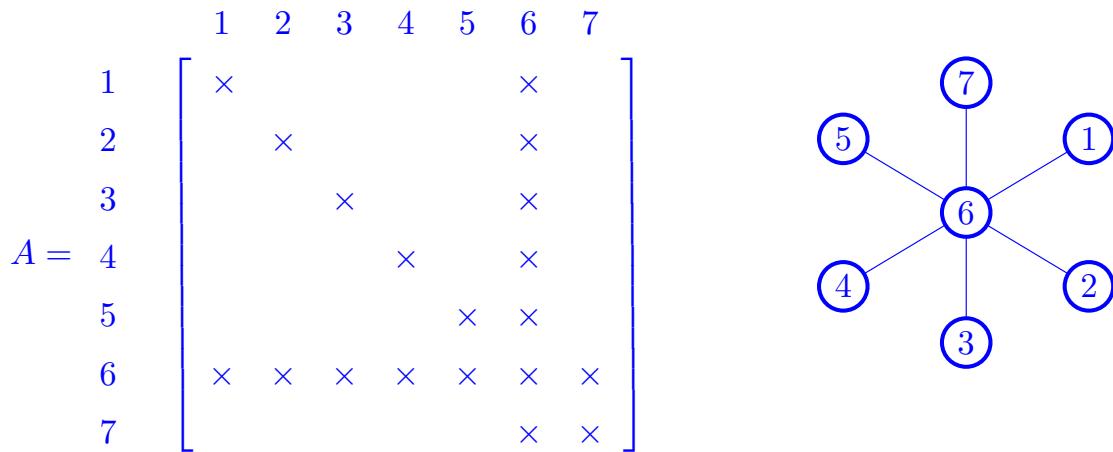


- Si se reordena con el algoritmo de Cuthill-McKee daría:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & \times & \times & & & & \\ 2 & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 3 & \times & \times & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & \times & 0 & \times & 0 & 0 & 0 \\ 5 & \times & 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\ 6 & \times & 0 & 0 & 0 & \times & 0 \\ 7 & \times & 0 & 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$



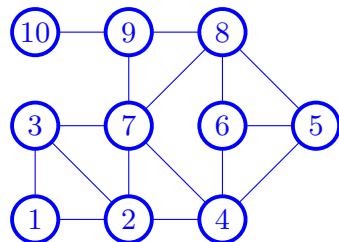
- Por el contrario, utilizando el algoritmo de Cuthill-McKee inverso, se conseguiría el efecto siguiente.



- Como se puede observar, desaparecen todos los ceros que aparecían antes, ahorrándose las correspondientes posiciones de memoria para guardarlos.

- Si al grafo que se utilizaba para introducir el algoritmo de Cuthill-McKee, se le aplicara el algoritmo inverso, el resultado que se obtiene es el que describe la figura.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	x									
2	x	x								
3	x	x	x							
4		x	0	x						
5			x	x						
6			x	x	x					
7		x	x	x	0	0	x			
8			x	x	x	x				
9				x	x	x				
10							x	x		



- En este caso el ancho de banda sigue siendo 5 y la $\text{Env}(\mathbf{A})$ pasa a ser 29, de los que sólo 3 son cero.

Matrices dispersas no simétricas

- También aquí, para evitar nuevos coeficientes de relleno, en un proceso similar al de eliminación de Gauss de la matriz \mathbf{A} , se efectúa una **reordenación de filas y columnas**.
 - Si al sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se le aplican unas permutaciones a la izquierda y a la derecha, representadas por las matrices de permutación \mathbf{P} y \mathbf{Q} , y el sistema original se reescribe

$$\mathbf{PAQ}^T \mathbf{x} = \mathbf{Pb},$$

donde $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$, haciendo $\mathbf{y} = \mathbf{Q}^T \mathbf{x}$ y $\mathbf{c} = \mathbf{Pb}$, se tiene que,

$$\mathbf{By} = \mathbf{c},$$

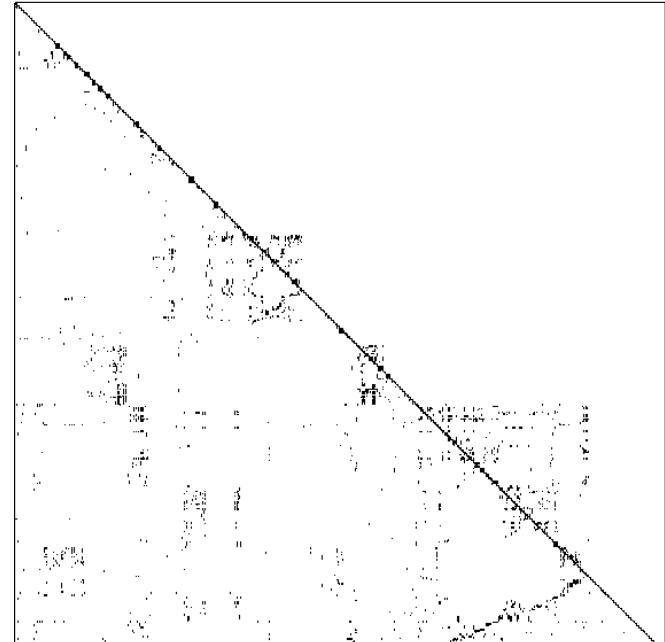
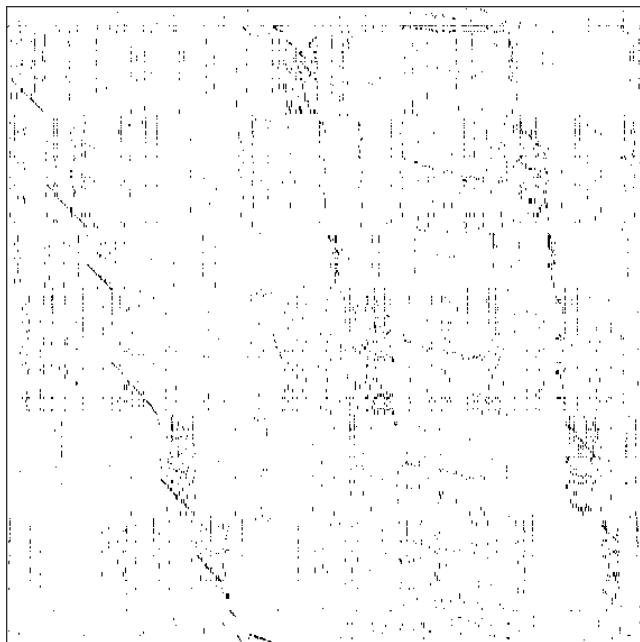
donde $\mathbf{B} = \mathbf{PAQ}$ es la matriz \mathbf{A} reordenada.

- El objetivo de estas manipulaciones es:
 - Que \mathbf{B} tenga una dispersidad mejor que la de \mathbf{A} ;
 - que su factorización sea numéricamente estable; y
 - que el número de coeficiente de rellenos introducidos por la factorización o eliminación de Gauss sea el menor posible.
- Si \mathbf{A} no tiene ninguna estructura especial, siempre se pude reordenar en forma triangular inferior en bloques,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & & & \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{A}_{n1} & \mathbf{A}_{n2} & \cdots & \mathbf{A}_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix},$$

donde los \mathbf{A}_{ij} son matrices, siendo las \mathbf{A}_{ii} cuadradas de orden n_i :
 $\sum_{i=1}^n n_i = n$.

- **Ejemplo** El sistema que se ilustra a continuación, sin ordenar y reordenado.



Nociones básicas sobre grafos dirigidos

- Un **grafo**, $G = (V, E)$, es un par formado por un conjunto finito de elementos, V , denominados **nudos** del grafo, y por otro también finito, E , de **arcos**. Un arco es un par de nudos. Si los arcos son ordenados, el grafo se denomina **dagrafo** o **grafo dirigido**.
- Si $e = (i, j) \in E$, este arco une un nudo de **origen** i con otro de **destino** o **final** j ; sale o parte de i y llega o entra en j .
- El número de elementos, o cardinal de V o E , se designa $|V|$ o $|E|$.
- Un grafo $G = (V, E)$ se dice **numerado** si existe una biyección $\alpha : \{1, 2, \dots, |N|\} \rightarrow V$. Siempre que hablemos de un grafo dirigido se supondrá numerado.

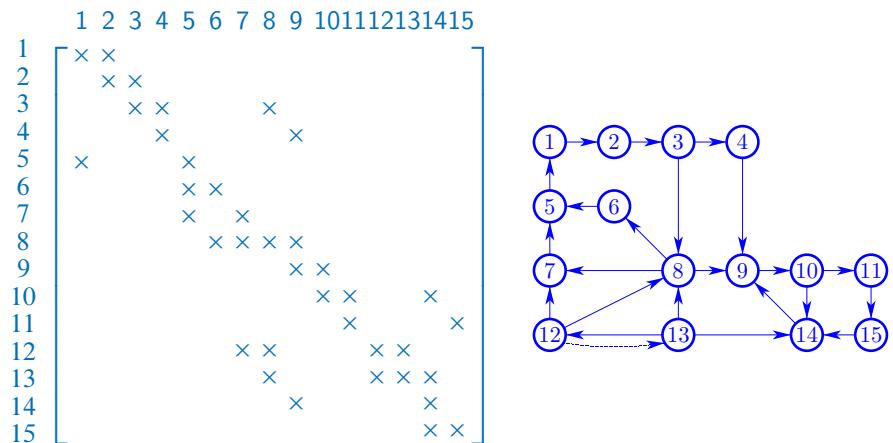
- El **grado de entrada** o **llegada** de un nudo es el número de nudos que a él llegan; el **grado de salida**, el número de nudos que salen.
- Si $(u \rightarrow v)$ es un arco, el nudo v se dice **adyacente** al u .
- Un **camino dirigido**, es un conjunto ordenado de nudos $\{u_1, u_2, \dots, u_{m+1}\}$ tal que u_{i+1} es adyacente a u_i , $i = 1, 2, \dots, m$. Su **longitud** es m .
- Un ciclo de un digrafo, o **ciclo dirigido**, es un camino, con al menos dos arcos, que sale y llega al mismo nudo.
- Si en un digrafo el nudo v es accesible desde u , la **distancia** desde u a v es la longitud del camino más corto de u a v (la distancia desde v a u puede ser distinta o incluso indefinida).
- Un digrafo se dice **conexo** si lo es el grafo no dirigido que se obtiene al suprimir las direcciones en los arcos del digrafo.

- A cualquier matriz general, A , $n \times n$, se le puede asociar un digrafo de n nudos

- En dicho digrafo $G^A = (V^A, E^A)$, los arcos E^A son tales que

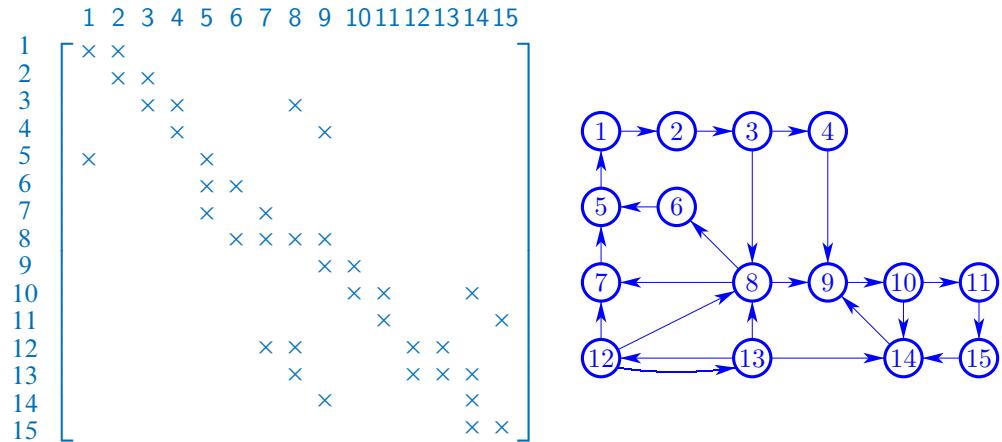
$$(v_i, v_j) \in E^A \Leftrightarrow a_{ij} \neq 0.$$

- A cualquier coeficiente diagonal $a_{ii} \neq 0$ también le corresponde un arco que parte y llega a v_i . Cuando todos son no nulos –transversal completo–, no se representan.



- En la figura se puede ver una matriz no simétrica 15×15 y su digrafo asociado.

- Los nudos 6, 7 y 9 son adyacentes al nudo 8; si $W = \{8, 13\}$, $\text{Adj}(W) = \{6, 7, 9, 12, 14\}$; el nudo 5 tiene un grado de entrada de 2 y de salida de 1; el nudo 4 es accesible desde el 8.

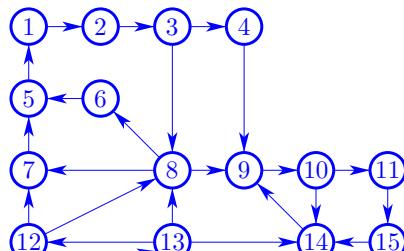


Si a una matriz se le efectúan permutaciones simétricas, en su digrafo asociado sólo se modifica la numeración de los nudos.

Eliminación de Gauss en matrices no simétricas

- Con **digrafos**. En una etapa k el **digrafo de eliminación** se forma eliminando del de la fase $k - 1$ el nudo v_k , todos los arcos que a él llegan o de él parten, y añadiendo un arco $(u \rightarrow w)$ cuando existe un camino dirigido $\{u, v, w\}$.
 - En la primera etapa en este digrafo, el grafo de eliminación se obtiene quitando el nudo 1 y añadiendo el arco $(5 \rightarrow 2)$, según se indica.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	x	x													
2		x	x												
3		x	x						x						
4			x							x					
5	x		x												
6			x	x											
7			x	x											
8				x	x	x	x	x							
9					x	x									
10						x	x						x		
11							x						x		
12				x	x			x	x						
13					x			x	x	x					
14						x				x					
15								x	x	x					



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	x	x													
2		x	x												
3			x	x					x						
4				x						x					
5	x	\otimes	\otimes	\otimes	x					\otimes	\otimes				
6					x	x				\otimes	\otimes				
7					x	x	\otimes	\otimes							
8						x	x	x	x						
9									x	x					
10										x	x				
11										x					x
12							x	x	\otimes	\otimes	\otimes	x	x	\otimes	\otimes
13							x	\otimes	\otimes	\otimes	\otimes	x	x	\otimes	\otimes
14								x	\otimes	\otimes			x	\otimes	\otimes
15												x	x		



Estructura triangular en bloques y transversal completo

- Para conseguir triangularizar por bloques una matriz A dispersa cualquiera se procede en dos fases:

Fase 1. – Encontrando un **transversal** completo de esa matriz.

Fase 2. – Reordenando el resultado de la fase 1 mediante permutaciones simétricas.

- Cualquier matriz **regular** A se puede reordenar mediante permutaciones no simétricas de tal forma que PAQ tenga un **transversal** completo.
 - Si la matriz es singular esto puede no cumplirse.

- Con transversal completo, puede reordenarse mediante permutaciones simétricas para conseguir una estructura triangular inferior en bloques:
 - Si esa estructura de bloques existe, se dice que A es una matriz reducible.
 - Si una matriz no tiene transversal completo pero puede reordenarse de tal forma que entonces sí lo tenga, y así reordenada es reducible, se dice birreducible.

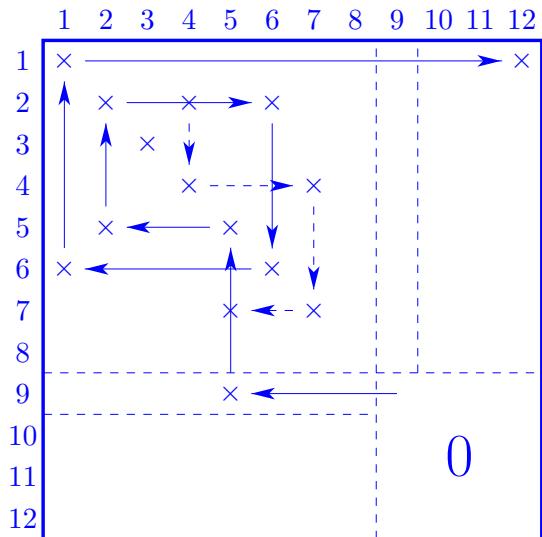
Algoritmo de Hall para obtener un transversal completo

- Este algoritmo, M. Hall (1956), requiere n etapas en cada una de las cuales se coloca un coeficiente distinto de cero –si no lo está ya– en la correspondiente posición de la diagonal principal.
- Supongamos que se han realizado k etapas y que los primeros k coeficientes de la diagonal principal son ya distintos de cero.

- En la etapa $k + 1$ podrá ocurrir:
 - a) Que $a_{k+1k+1} \neq 0$ con lo que se finaliza esta etapa.
 - b) Que $a_{k+1k+1} = 0$, pero que exista un coeficiente distinto de cero en la submatriz activa:
 - Realizando los intercambios de filas y columnas necesarios se puede llevar ese coeficiente a la posición $(k + 1, k + 1)$.
 - Los coeficientes de subíndices 1 a k no deben verse afectados por estos intercambios: los k primeros coeficientes de la diagonal principal seguirán siendo distintos de cero.
 - c) Que sólo existan coeficientes cero en la submatriz activa:
 - Mediante el trazado de un **camino creciente** se puede conseguir colocar un coeficiente distinto de cero en a_{k+1k+1} . Si no se encuentra ese camino, la matriz será singular.

- El trazado de un camino creciente comienza, en una etapa $k + 1$, en el coeficiente $(k + 1, k + 1)$:
 - Continúa por la fila $k + 1$ hasta que se encuentra con un coeficiente distinto de cero, en una columna ℓ (tal columna debe existir pues de lo contrario todos los coeficientes de la fila $k + 1$ serán cero y la matriz, por tanto, singular);
 - De aquí al coeficiente (ℓ, ℓ) a lo largo de la columna ℓ ;
 - A continuación, por la fila ℓ hasta hallar un coeficiente distinto de cero, por ejemplo en la columna m , etc.
- Este camino no puede atravesar una misma fila o columna más de una vez y, por tanto, tampoco un mismo coeficiente de la diagonal principal.
- Terminará en un coeficiente distinto de cero en la submatriz que definen las filas 1 a k y las columnas $k + 1$ a n .

- Para aclarar el procedimiento, consideremos una matriz simbólica 12×12 y el procedimiento descrito es su etapa 9.



- Esta etapa 9 comienza en la posición $(9, 9)$.
- La submatriz de coeficientes 9 a 12 son todos cero por lo que se trata de trazar un camino creciente.

- Éste comienza en la posición $(9, 9)$, sigue por la fila 9 hasta encontrar el coeficiente distinto de cero de la columna 5; continúa por la columna 5 hasta encontrar el correspondiente coeficiente distinto de cero de la diagonal principal; sigue por la fila 5 hasta encontrar el coeficiente distinto de cero de la columna 2; continúa por la columna 2 hasta encontrar el coeficiente distinto de cero de la diagonal principal en la fila 2; sigue por la fila 2 hasta encontrar el coeficiente distinto de cero de la columna 4; continúa por la columna 4 hasta alcanzar el coeficiente distinto de cero de la diagonal principal en la fila 4; sigue por la fila 4 hasta encontrar el coeficiente distinto de cero de la columna 7; continúa por la columna 7 hasta alcanzar el coeficiente distinto de cero de la diagonal principal en la fila 7; sigue por la fila 7 encontrándose que el único coeficiente distinto de cero de esta fila está en la columna 5 que ya se ha visitado; esto obliga a borrar las filas 7 y 4 del camino (no de la lista de posiciones ya visitadas) y reemprender la marcha allí donde se abandonó en la fila 2.
- Por la fila 2 se llega hasta la columna 6 donde está el siguiente coeficiente distinto de cero; continúa en la columna 6 hasta la diagonal principal en la fila 6; sigue por esa fila 6 hasta llegar al coeficiente distinto de cero de la columna 1; continúa por la columna 1 hasta alcanzar el coeficiente distinto de cero de la diagonal principal en la fila 1; sigue por la fila 1, parándose al llegar al primer coeficiente distinto de cero que encuentra en la columna 12 por estar en la submatriz que nos interesa.
- El camino es pues

$$\{9, 5, 2, 6, 1, 12\}.$$

- Encontrado el camino, se efectúan los siguientes intercambios de filas

la fila 9 con la 5;
 la fila 5 con la 2;
 la fila 2 con la 6;
 la fila 6 con la 1;
 la fila 1 con la 12 y
 la fila 12 con la 9.

que trasladan el coeficiente distinto de cero $(1, 12)$ a la posición $(9, 12)$.

- Por último se intercambian las columnas 9 y 12.
- Si el coeficiente $(6, 1)$ fuese cero, hubiésemos encontrado que las filas 9, 5, 2, 4, 7 y 6 tienen coeficientes distintos de cero sólo en las columnas 5, 2, 4, 7 y 6, lo que significaría que la matriz es singular.

Permutaciones simétricas para obtener una estructura triangular en bloques

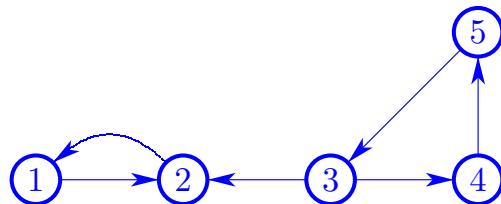
- Obtenido un transversal completo, la siguiente fase para llegar a una matriz triangular en bloques consiste en encontrar otra permutación que haga

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11} & & & \\ \mathbf{B}_{21} & \mathbf{B}_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{B}_{n1} & \mathbf{B}_{n2} & \cdots & \mathbf{B}_{nn} \end{bmatrix},$$

donde cada bloque diagonal, \mathbf{B}_{ii} , no se pueda reducir más.

- Los algoritmos para conseguir este propósito se basan en encontrar los ciclos “fuertemente conexos” en el digrafo asociado.

- Si existiesen dos de estos ciclos fuertes y se renumerasen los nudos de tal forma que los del primero fuesen los nudos 1 al k y los del segundo $k + 1$ al n , se obtendría una matriz triangular inferior en dos bloques, el primero con k columnas y el segundo con $n - k$.



- En el grafo dirigido de la figura existen dos ciclos fuertes, el formado por los nudos 1 y 2 y el que definen 3, 4 y 5. La estructura simbólica en 2 bloques de su matriz asociada es

\times	\times		
\times	\times		
		\times	\times
		\times	\times
		\times	\times

Matrices dispersas generales: eliminación de Gauss

- Si el sistema **no presenta una estructura de dispersidad especial y tampoco interesa triangularizarla por bloques**, la forma más general de abordar su resolución consiste en utilizar directamente la eliminación de Gauss teniendo en cuenta que esa matriz es dispersa.
- Para llevarla a cabo se usa el **criterio de Markowitz**, por Harry Max Markowitz, EE.UU. 1927-. Premio Nobel de economía de 1990.



- Lo formuló en 1957 y consiste³ en factorizar la matriz mediante eliminación de Gauss con pivotación, escogiendo como elemento pivote en una etapa k uno a_{ij}^k de \mathbf{A} que sea numéricamente aceptable y que minimice

$$(r_i^k - 1)(c_j^k - 1),$$

donde r_i^k es el número de coeficientes no cero en la fila i de la submatriz activa y c_j^k los no ceros en la columna j .

- En la figura se ilustra la situación para el caso en que $n = 7$ y $k = 3$.

	1	U
	1	r^T
L	1	$\times \times \times \times$
c		$\times \times \times \times$
		$\times \times \times \times$
		$\times \times \times \times$
		$\times \times \times \times$

Obsérvese que es más conveniente usar $(r_i^k - 1)(c_j^k - 1)$ que $r_i^k c_j^k$ pues de esta manera se fuerza a que se elija un coeficiente a_{ij}^k tal que en su fila o columna sólo exista él como coeficiente distinto de cero.

³La estrategia resultante es similar a la de grado mínimo.

Índice

- Matrices dispersas
- Almacenamiento en ordenador de matrices dispersas
- Operaciones algebraicas elementales con matrices dispersas
- Solución de grandes sistemas lineales de matriz dispersa
 - Matrices dispersas simétricas
 - Matrices dispersas no simétricas
- Mínimos cuadrados

Problemas de mínimos cuadrados de grandes dimensiones

- Son problemas de mínimos cuadrados lineales,

$$\begin{array}{c} \text{minimizar } \|Ax - b\|_2 \\ x \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

en los que la matriz A es de grandes dimensiones y dispersa.

Las ecuaciones normales

- De las ecuaciones normales

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 \iff \mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

si suponemos \mathbf{A} es de **rango completo**, $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ es **simétrica y definida positiva**.

Teorema Supóngase que no se producen errores numéricos de cancelación en el cálculo de $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$, entonces,

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})_{jk} \neq 0 \Leftrightarrow a_{ij} \neq 0 \quad y \quad a_{ik} \neq 0$$

para al menos una fila $i = 1, 2, \dots, m$.

- Este resultado permite saber dónde se producirán coeficientes de relleno al obtener $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$.

Paso 1 – Determinar la estructura simbólica de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$.

Paso 2 – Determinar una permutación de columnas \mathbf{Q} tal que el factor de Cholesky de $\mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{Q}$ tenga una estructura dispersa buena.

Paso 3 – Factorizar simbólicamente por Cholesky $\mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{Q}$ y generar las estructuras de datos y memoria necesarias para \mathbf{G} .

Paso 4 – Calcular numéricamente $\mathbf{B} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{Q}$ y $\mathbf{c} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{b}$; almacenar \mathbf{B} en la estructura de datos correspondiente a \mathbf{G} .

Paso 5 – Calcular numéricamente la factorización de Cholesky $\mathbf{G}^T \mathbf{G}$ de \mathbf{B} . Resolver $\mathbf{G}^T \mathbf{z} = \mathbf{c}$, $\mathbf{G} \mathbf{y} = \mathbf{z}$ y, por fin, $\mathbf{x} = \mathbf{Q} \mathbf{y}$.

Algoritmo básico para mínimos cuadrados de matriz dispersa

Transformaciones ortogonales _ Método de George-Heath

- Recordemos que:
 - Un conjunto de transformaciones ortogonales, representadas por $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$, puede reducir $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (que supondremos de rango n) y $b \in \mathbb{R}^m$ de la forma

$$QA = \begin{bmatrix} R_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad Qb = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix},$$

donde $R_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz triangular superior y $c \in \mathbb{R}^n$.

- La solución del problema de mínimos cuadrados se obtiene de $R_1x = c$; la suma de residuos al cuadrado es $\|d\|_2^2$.

- El algoritmo de George y Heath [1980] procesa las filas de \mathbf{A} secuencialmente con **esta mecánica**.

1. \mathbf{R}_{i-1} designa la matriz triangular superior que se obtiene después de procesar las filas $\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_{i-1}^T$.

Al procesar la fila $\mathbf{a}_i^T = [a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in}]$ se buscan de izquierda a derecha los coeficientes distintos de cero.

Para cada $a_{ij} \neq 0$, $i > j$, se define una transformación de Givens que involucre a la fila j de \mathbf{R}_{i-1} y anule a_{ij} .

- Procediendo así se pueden crear nuevos coeficientes distintos de cero en \mathbf{R}_{i-1} y en la fila \mathbf{a}_i^T .

2. Si al tratar la fila i , al llegar al coeficiente j ($j < i$) éste no es cero y $r_{jj} = 0$, la fila j en \mathbf{R}_{i-1} todavía no se ha visto afectada por ninguna rotación y debe ser toda cero:

- Lo que resulta de la fila i debe insertarse en la fila j .

- Un ejemplo de este proceso actuando sobre los coeficientes de la fila 9 de una matriz 9×8 es el que sigue.

$$\begin{array}{cccccccc}
 \times & 0 & \times & 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\
 \otimes & 0 & \oplus & \times & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \times & 0 & \times & 0 & 0 & 0 & \times & \\
 \otimes & \oplus & 0 & 0 & 0 & & & \\
 \otimes & \otimes & 0 & 0 & 0 & & & \\
 \oplus & 0 & \oplus & & & & & \\
 \times & 0 & & & & & & \\
 & & & & & & & \\
 0 & \times & 0 & \times & \oplus & \otimes & 0 & \otimes
 \end{array}$$

Los símbolos \otimes designan los coeficientes involucrados en la eliminación de \mathbf{a}_9^T . Los que se crean de relleno en \mathbf{R}_8 y \mathbf{a}_9^T durante la eliminación se designan mediante \oplus .

- Obsérvese que los tres últimos coeficientes de la fila 9, una vez anulados del 1 al 5, reemplazan a los de la fila 6, que eran 0.

Ordenación de filas

- El número de operaciones del proceso descrito depende también del orden de las filas. Por ejemplo, las matrices

$$A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & & & & \\ \vdots & & & & \\ \times & & & & \\ \hline \times & & & & \\ & \times & & & \\ & & \times & & \\ & & & \times & \\ & & & & \times \end{bmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} m \\ n \end{array} \right\} \quad y \quad PA = \begin{bmatrix} \times & & & & \\ \times & & & & \\ \vdots & & & & \\ \times & & & & \\ \hline \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & & & \\ & & \times & & \\ & & & \times & \\ & & & & \times \end{bmatrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} m \\ n \end{array} \right\}$$

requieren $O(mn^2)$ y $O(n^2)$ operaciones, respectivamente, para reducirlas.

- Para reordenar las filas se puede aplicar este algoritmo:

Si el índice de columna del último coeficiente distinto de cero de la fila \mathbf{a}_i^T es ℓ_i y el primero f_i , ordenar primero las filas cuyos índices f_i , $i = 1, 2, \dots$ cumplen que $f_i \leq f_k$ si $i < k$ y luego, para cada grupo de filas tales que $f_i = k$, $k = 1, \dots, \max_i f_i$, ordenar las filas según ℓ_i crecientes.

- Con las consideraciones anteriores, el algoritmo de ortogonalización de George y Heath para mínimos cuadrados queda así:

Paso 1 – Llevar a cabo los Pasos 1 a 3 del Algoritmo básico anterior.

Paso 2 – Determinar una permutación de filas \mathbf{P} tal que las filas de \mathbf{PAQ} tengan unos índices de columnas ℓ_i crecientes.

Paso 3 – Calcular numéricamente \mathbf{R}_1 y \mathbf{c} procesando las filas de $[\mathbf{PAQ}, \mathbf{Pb}]$ mediante transformaciones de Givens.

Paso 3 – Resolver $\mathbf{Ry} = \mathbf{c}$. Hacer $\mathbf{x} = \mathbf{Qy}$.