# II.6 Partielle Tridiagonalisierung symmetrischer Matrizen mit den Lanczos-Algorithmus

Bisher: vollständige (Tri)-Diagonalisierung großer Matrizen $A$ ($M$-dimensionale Basis)

Probleme: Speicherplatzbedarf ($2\,M^2$)
Rechenzeit ($\propto M^3$)

Alternativansatz: extrahiere nur „relevanteste Teile" der Matrix, behandle diese weiter

(analog zu Symmetrien ⇝ Blockdiagonalform bzw. Eigenräumen der Lösung)

Wie? – Finde „relevante" Vektoren $V_i$, berechne
$(\tilde{A})_{ij} = \langle V_i | A | V_j \rangle \quad \rightsquigarrow \quad \dim \tilde{A} = \dim \underbrace{\{V_i\}}_{\mathcal{V}} \ll M$

Falls (i) $AV_i \in \mathcal{V}\ \forall i$ und (ii) $\{V_i\}$ linear unabhängig,

dann sind alle EW von $\tilde{A}$ auch EW von $A$, die den EV von $\tilde{A}$ entsprechenden Linearkombinationen der $V_i$ sind EV von $A$.

**Krylov-Raum:** $\quad K(A,V) = \{V, AV, A^2V, \dots\}$

Jede Folge von Krylov-Vektoren zu einer Matrix $A$ mit EV $\{\lambda_i\}_{i=1}^{p}$ wird nach spätestens $p+1$ Schritten linear abhängig, da

$$(A-\lambda_1)(A-\lambda_2)\dots(A-\lambda_p) = 0$$

(bekannter: $p(A)=0$ für char. Polynom $p(\lambda)$ von $A$).

Beweis: es existiert unitäre Matrix $U$ mit

$$U^T A U = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m) \equiv D$$

$$\Rightarrow \quad A^n V = U^T D^n U V$$

$p$ verschiedene Elemente

Korrolar: für zwei orthogonale EV $V_1, V_2$ zum selben EW $\lambda$ von $A$ gilt:

$$V_1 \notin K(A, V_2)$$

$$V_2 \notin K(A, V_1)$$

Ein Krylov-Raum enthält also zu jedem EW von $A$ höchstens einen EV.

## Lanczos - Tridiagonalisierung

(i) Wähle Startvektor $\vec{v}_1$ (zufällig oder z.B. orthogonal zu bestimmten Vektoren).

(ii) Konstruiere Folge im Krylov-Raum $K(A, \vec{v}_1)$:

$$\vec{v}_2 = C_2 (A\vec{v}_1 - \tilde{A}_{11} \vec{v}_1)$$

$$\vec{v}_{n+1} = C_{n+1} (A\vec{v}_n - \tilde{A}_{nn}\vec{v}_n - \tilde{A}_{nn-1}\vec{v}_{n-1}) \quad \text{für } n>1$$

mit $C_n = \frac{1}{|\vec{v}_n|}$ und $\tilde{A}_{ij} = \vec{v}_i \cdot A\vec{v}_j$

Falls $\tilde{A}_{ij} \neq 0 \Rightarrow \vec{v}_j$ hat Überlapp mit $A\vec{v}_i$

aber: $A\vec{v}_1 \in \langle \vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle$

folglich: falls $\vec{v}_n \perp \vec{v}_1$, $\vec{v}_n \perp v_2$ für $n>2$

dann ist $\tilde{A}_{1n} = 0$ " "

Tatsächlich sind die Lanzos-Vektoren orthogonal:

$$\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 = C_2 \big( \underbrace{\vec{v}_1 \cdot A\vec{v}_1}_{=\tilde{A}_{11}} - \tilde{A}_{11} \underbrace{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_1}_{=1} \big) \overset{\checkmark}{=} 0$$

$$\vec{v}_n \cdot \vec{v}_{n+1} = C_{n+1} \big( \vec{v}_n \cdot A\vec{v}_n - \tilde{A}_{nn} \underbrace{\vec{v}_n \cdot \vec{v}_n}_{=1} - \tilde{A}_{nn-1} \underbrace{\vec{v}_n \cdot \vec{v}_{n-1}}_{\overset{\shortparallel}{0 \text{ n.V.}}} \big)$$

$$= 0$$

$$\vec{v}_{n-1} \cdot \vec{v}_{n+1} = C_{n+1} \big( \vec{v}_{n-1} \cdot A\vec{v}_n - \tilde{A}_{nn-1} \vec{v}_{n-1} \vec{v}_n - \tilde{A}_{nn-1} \underbrace{|\vec{v}_{n-1}|^2}_{=1} \big) = 0$$

$$\vec{v}_{n-2} \cdot \vec{v}_n = C_{n+1} \quad \vec{v}_{n-2} \underbrace{A\vec{v}_n}_{\in K(A, \vec{v}_n)} \overset{\checkmark}{=} 0$$

## Praktische Implementierung

(i) Formulierung mit allen Basisvektoren $\vec{v}_j$ (nach Iteration $j$):

Initialisierung: $\vec{v}_1 \leftarrow$ Zufallsvektor, normiert

$\vec{v}_0 \leftarrow \vec{0}$

$\beta_1 \leftarrow 0$

Schleife:

$$\vec{w}_j \leftarrow A\vec{v}_j - \beta_j \vec{v}_{j-1}$$

Multiplikation mit vorgegebener Matrix

$$\alpha_j \leftarrow \vec{w}_j \cdot \vec{v}_j$$

$\leadsto \alpha_j = \vec{v}_j \cdot A \vec{v}_j$

$$\vec{w}_j \leftarrow \vec{w}_j - \alpha_j \vec{v}_j$$

$$\beta_{j+1} \leftarrow |\vec{w}_j|$$

$$\vec{v}_{j+1} \leftarrow \vec{w}_j / \beta_{j+1}$$

$\leftarrow$ Normierung

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}$$

## 2. Speichersparende Implementierung:

Initialisierung: $\vec{v}$ Zufallsvektor, normiert

$$\vec{v}\,' = \vec{0}$$

$$\beta_1 = 0$$

$$j = 0$$

Schleife:

$$j \leftarrow j+1$$

$$\vec{w} \leftarrow A\vec{v} - \beta_j \vec{v}\,'$$

$$\alpha_j \leftarrow \vec{w} \cdot \vec{v}$$

$$\vec{w} \leftarrow \vec{w} - \alpha_j \cdot \vec{v}$$

$$\beta_{j+1} \leftarrow |\vec{w}|$$

$$\vec{v}\,' \leftarrow \vec{v}$$

$$\vec{v} \leftarrow \vec{w} / \beta_{j+1}$$