

Spektraldichte großer Matrizen

Eine numerische Annäherung

Carina Seidel

Universität Potsdam

9. Juni 2024



Inhaltsverzeichnis



Motivation

- Eigenwerte einer Matrix sind in vielen Bereichen der Mathematik und Physik interessant
- Oftmals sind Matrizen zu groß um diese effizient zu berechnen
- Stattdessen berechnen wir die Spektraldichte (Density of States)



Delta Distribution

Sei $\mathcal{E} = \mathcal{C}^\infty(\Omega)$ mit $0 \in \Omega \subset \mathbb{K}^n$

Dann ist $\delta : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{K}, f \mapsto f(0)$ mit $\delta(f) = \langle \delta, f \rangle = f(0)$

Wichtige Eigenschaft:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(a - x) \, dx = f(a) \implies \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) \, dx = 1$$

Spektraldichte

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A^T = A$ und A spärlich besetzt.

Dann ist die Spektraldichte (engl. Density of States (DOS)) definiert als

$$\phi(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \delta(t - \lambda_j) \quad (1)$$

wobei δ die Dirac Verteilung und λ_j die Eigenwerte von A in nicht-absteigender Reihenfolge sind.

Die Anzahl der Eigenwert in einem Intervall $[a, b]$ kann dann wie folgt ausgedrückt werden:

$$\nu_{[a,b]} = \int_a^b \sum \delta(t - \lambda_j) dt \equiv \int_a^b n\phi(t) dt \quad (2)$$



Problemstellung

- Spektraldichte trivial wenn Eigenwerte von A bekannt
- Unpraktisch wenn A sehr groß, da Berechnung teuer
- Wir brauchen effiziente Alternativen um $\phi(t)$ abzuschätzen
- Allerdings: $\phi(t)$ keine "Funktion" im eigentlichen Sinne



- Sei $I \subseteq \mathbb{R}$ das Intervall, dass das Spektrum von A beinhaltet.
- Teile nun I in kleinere Teilintervalle $[t_i, t_{i+1}]$
- Benutze den Silvestreschen Trägheitssatz um die Eigenwerte in jedem Teilintervall zu zählen.
- Berechne den Durchschnittswert von $\phi(t)$ in jedem dieser Intervalle mithilfe von
- Für $(t_{i+1} - t_i) \rightarrow 0$ nähern sich die Histogramme der Spektraldichte.
- Problem: Berechnung der Zerlegung $A - t_i I = LDL^T$ für alle t_i ist zu zeitaufwendig.
- Besser: A nur mit Vektoren multiplizieren.

Annahmen

- Wir betrachten zwei Methoden zur Annäherung der Spektraldichte
- Der Einfachheit halber sei im Folgenden immer $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A^T = A$
- Die Verallgemeinerung auf hermitesche Matrizen ist im Nachhinein unkompliziert
- Zunächst die Kernel-Polynom-Methode (KPM)
- Danach das klassische Lanczos-Verfahren zur teilweisen Diagonalisierung von A
- Schwierig zu beurteilen welche Methode die beste ist



Kernel-Polynom-Methode (KPM)

- Formelle polynomiale Erweiterung der Spektraldichte.
- Macht von der Moment Matching Methode gebrauch.
- Wir zeigen, wie das Lanczos-Spektroskopieverfahren mit der KPM zusammenhängt
- Eine weitere Variante ist die Delta-Gauss-Legendre Methode



Problemstellung

- Sei im Folgenden $\tilde{\phi}(t)$ eine reguläre Funktion die die Spektraldichte schätzt
- Alle Annäherungen sind stetige Funktionen
- $\phi(t)$ ist keine Funktion im eigentlichen Sinne
- Wir können nicht die L^p -Norm benutzen, um $\phi(t) - \tilde{\phi}(t)$ abzuschätzen
- Zwei Möglichkeiten, dies zu umgehen



Schwartz-Raum über \mathbb{R}

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) := \left\{ f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}) \mid \forall p, k \in \mathbb{N}_0 : \sup_{x \in \mathbb{R}} |x^p f^{(k)}(x)| < \infty \right\}$$



Erste Methode

Wir benutzen die Tatsache, dass $\delta(t)$ eine Verteilung ist:

Sei $g \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$ eine Testfunktion aus dem Schwartz-Raum \mathcal{S} , dann

$$\langle \delta(\cdot - \lambda), g \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - \lambda) g(t) \, dt \equiv g(\lambda)$$

und für alle $p, k \in \mathbb{N}_0$

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} |t^p g^{(k)}(t)| < \infty$$

Dann wird der Fehler wie folgt gemessen:

$$\epsilon_1 = \sup_{g \in \mathcal{S}} \left| \langle \phi, g \rangle - \langle \tilde{\phi}, g \rangle \right|$$



Zweite Methode

Wir "regularisieren" die $\delta(t)$ -Funktionen

Dazu ersetzen wir sie durch stetige und glatte Funktionen

Zum Beispiel die Gaussche Normalverteilung mit einer angemessene Standardabweichung σ

Die daraus entstandene Funktion $\phi_\sigma(t)$ ist wohldefiniert

Für $p = 1, 2$ und ∞ können wir folgenden Fehler berechnen:

$$\epsilon_2 = \left\| \phi_\sigma(t) - \tilde{\phi}(t) \right\|_p \quad (3)$$

Diese beiden Methoden sind eng verwandt!



Der Begriff der Auflösung

Selten ist eine exakte Annäherung aller Eigenwerte von A gewünscht. Oftmals genügt es, die Anzahl der Eigenwerte in einem beliebigen Teilintervall $[a, b]$ des Spektrums zu wissen.

Die Größe $b - a$ dieses Teilintervalls bezeichnet man als Auflösung der Schätzung:

Je kleiner das Teilintervall, desto höher die Auflösung.

Die Genauigkeit der Annäherung ist nur bis zur gewünschten Auflösung aussagekräftig.

Für $\epsilon_2 = \left\| \phi_\sigma(t) - \tilde{\phi}(t) \right\|_p$ aus (??) gilt:

Je kleiner das σ , desto höher die Auflösung.



Noch mehr Probleme mit Dirac

Betrachte

$$\nu_{[a,b]} = \int_a^b n\phi(t) \, dt$$

aus (??). Definiere entsprechend

$$\tilde{\nu}_{[a,b]} = \int_a^b n\tilde{\phi}(t) \, dt$$

mit $\tilde{\phi}(t) \in \mathcal{C}^\infty$

Noch mehr Probleme mit Dirac (2)

Angenommen, $n = 1$ und $\phi(t) = \delta(t)$.

Unendliche Auflösung bedeutet $|\nu_{[a,b]} - \tilde{\nu}_{[a,b]}|$ soll für $[a,b]$ beliebig klein ebenfalls klein sein.

Sei also $a = -\varepsilon, b = \varepsilon$. Aus der Definition der δ -Funktion folgt dann, dass

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \nu_{[-\varepsilon, \varepsilon]} = 1$$

während für glatte Funktionen $\tilde{\phi}$ selbstverständlich gilt, dass

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \tilde{\nu}_{[-\varepsilon, \varepsilon]} = 0$$

Fazit: Keine glatte Funktion konvergiert zur Spektraldichte unter stetiger Erhöhung der Auflösung



Einschränkung des Schwartz-Raums

Eine endliche Auflösung ist oftmals genug.

Wir können den Schwartz-Raum \mathcal{S} also einschränken.

Beispiel: Betrachte nur Gaussche Verteilungsfunktionen der Form

$$g_\sigma(t) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}}$$

und schränke \mathcal{S} auf den Unterraum

$$\mathcal{S}(\sigma; [\lambda_{lb}, \lambda_{ub}]) = \{g \mid g(t) \equiv g_\sigma(t - \lambda), \lambda \in [\lambda_{lb}, \lambda_{ub}]\}$$

Hierbei sind λ_{lb} und λ_{ub} jeweils das Infimum und Supremum der Eigenwerte von A und der Parameter σ die *Zielauflösung*.

Wir können nun die folgende Metrik zur Qualitätsbewertung nutzen:

$$E \left[\tilde{\phi}; \mathcal{S}(\sigma; [\lambda_{lb}, \lambda_{ub}]) \right] = \sup_{g \in \mathcal{S}(\sigma; [\lambda_{lb}, \lambda_{ub}])} \left| \langle \phi, g \rangle - \langle \tilde{\phi}, g \rangle \right|$$

(4)



Regularisierung der Spektraldichte

Wir konstruieren zunächst eine glatte Darstellung der δ -Funktion. Dies muss verhältnismäßig zur gewünschten Auflösung sein. Der Fehler kann dann direkt berechnet werden



Beispiel: Regularisierung der Spektraldichte

Sei

$$\phi_{\sigma}(t) = \langle \rangle$$

Dies muss verhältnismäßig zur gewünschten Auflösung sein. Der Fehler kann dann direkt berechnet werden



Schluss

Zusammenfassung und Schlussbemerkungen.

