

# Spektraldichte großer Matrizen

Eine numerische Annäherung

Carina Seidel

Universität Potsdam

9. Juni 2024



# Inhaltsverzeichnis

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden zur Schätzung der Spektraldichte
- 3 Qualitätsanalyse der Annäherungen
- 4 Schluss



# 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  $\delta$  die Dirac Verteilung und  $\lambda_j$  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



- Zwei Klassen, KPM und Lanczos-Spektroskopieverfahren
- Zwei Methoden sind äquivalent zur KPM
- Die andere Klasse basiert auf der partiellen Tridiagonalisierung
- Zwei Methoden, Gaußscher und Lorentzscher Weichzeichnung (Regularisierung)
- Alle Methoden benutzen eine stochastische Sampling-Methode, die auf folgendem Resultat basiert:

# Theorem

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit Spektralzerlegung  $A = \sum_{j=1}^n \lambda_j u_j u_j^T$  wobei  $u_i u_j^T = \delta_{ij}$ .

Sei außerdem  $v \in \mathbb{R}^n$  mit  $v = \sum_{j=1}^n \beta_j u_j$

Gilt  $v_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$  i.i.d. für die Komponenten  $\{v_i\}_{i=1}^n$  von  $v$ , also  $\mathbb{E}[v] = 0$  und  $\mathbb{E}[vv^T] = \mathbb{1}_n$ , dann

$$\mathbb{E}[\beta_i \beta_j] = \delta_{ij}, \quad i, j \in \mathbb{N}_1^n$$



# 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 $\mathbb{R}$

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



# 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  $\sigma$

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

Für  $p = 1, 2$  und  $\infty$  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 (3) gilt:

Je kleiner das  $\sigma$ , desto höher die Auflösung.





# Noch mehr Probleme mit Dirac

Betrachte

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

aus (2). 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  $\delta$ -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  $\lambda_{lb}$  und  $\lambda_{ub}$  jeweils das Infimum und Supremum der Eigenwerte von  $A$  und der Parameter  $\sigma$  die *Zielauflösung*.

Wir können nun die folgende Metrik zur Qualitätsbewertung nutzen:

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



# Regularisierung der Spektraldichte

- Konstruiere zunächst eine glatte Darstellung der  $\delta$ -Funktion.
- Dies muss verhältnismäßig zur gewünschten Auflösung sein.
- Der Fehler kann dann direkt berechnet werden
- Wahl des  $\sigma$ : so groß wie möglich für leichte Annäherung, so klein wie möglich für Genauigkeit



# Regularisierung der Spektraldichte mit Gauss

Sei

$$\phi_\sigma(t) = \langle \phi(\cdot), g_\sigma(\cdot - t) \rangle = \sum_{j=1}^n g_\sigma(t - \lambda_j)$$

Dies ist dann nicht anderes als die "Weichzeichnung" der Spektraldichte durch Gauß-Funktionen der Breite  $\sigma$

Genauso sei

$$\tilde{\phi}_\sigma(t) = \langle \tilde{\phi}(\cdot), g_\sigma(\cdot - t) \rangle$$

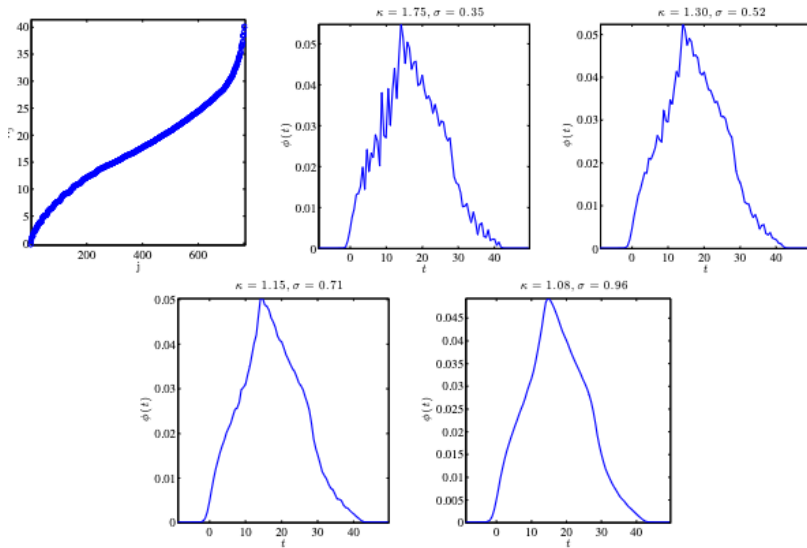
Dann ist

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

der  $L^\infty$ -Fehler zwischen zwei wohldefinierten Funktionen



# Schöne Bilder



# Regularisierung der Spektraldichte mit Lorentz

Die Lorentz-Funktion ist definiert durch

$$\frac{\eta}{(t - \lambda)^2 + \eta^2} = -\operatorname{Im} \left( \frac{1}{t - \lambda + i\eta} \right),$$

wobei  $\eta$  eine kleine Regularisierungskonstante ist.

Für  $\eta \rightarrow 0$  nähert sich die Lorentz-Funktion der Dirac-Funktion um den Eigenwert  $\lambda$  an

Dies ist später für die Haydock-Methode relevant.

# Die Bedingung der Nicht-Negativität

- Die Spektraldichte ist als Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht-negativ, also

$$\forall g \in \mathcal{S}, g \geq 0 : \langle \phi, g \rangle \geq 0$$

- Einige numerische Annäherungen brechen mit dieser Eigenschaft
- Das führt zu großen Fehlern





# Schluss

Zusammenfassung und Schlussbemerkungen.

