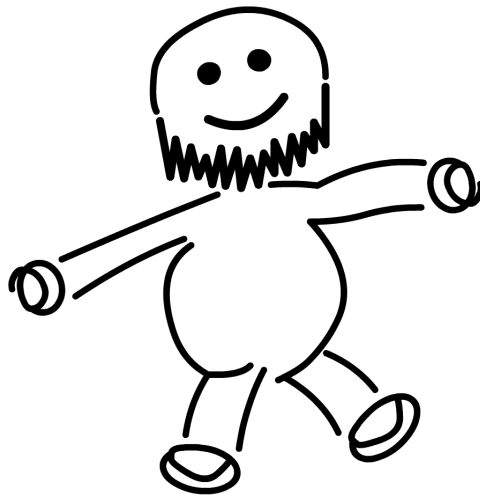


Die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe und das Zassenhaus Produkt



Daniel Scholz im September und Oktober 2005

Überarbeitete Version vom 14. Oktober 2005.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Baker-Campbell-Hausdorff Reihe	5
2.1	Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder	5
2.2	Behauptung und Beweis	8
2.3	Beispiele	12
2.4	Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder	13
2.5	Symmetrie der Koeffizienten	14
2.6	Kommutatorschreibweise nach Dynkin	15
2.7	Vermutete Kommutatorschreibweise	16
2.8	Kommutatoridentitäten	17
3	Zassenhaus Produkt	19
3.1	Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder	19
3.2	Behauptung und Beweis	22
3.3	Beispiele	24
3.4	Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder	26
3.5	Vermutete Kommutatorschreibweise	27
4	Zassenhaus Produkt der q-Exponentialfunktion	29
4.1	Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder	29
4.2	Behauptung und Beweis	30
4.3	Beispiele	32
4.4	Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder	34
5	Diskussion	35
6	Anhang	37
6.1	Implementierung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe	37
6.2	Implementierung des Zassenhaus Produktes	37
6.3	Implementierung des q -Zassenhaus Produktes	38
L	Literaturverzeichnis	40

1 Einleitung

Im Körper \mathbb{R} der reellen und im Körper \mathbb{C} der komplexen Zahlen gilt die allgemein bekannte Funktionalgleichung der Exponentialfunktion

$$e^x \cdot e^y = e^{x+y}.$$

Diese Gleichung ist jedoch nur in kommutativen Ringen gültig. Für nicht kommutierende Variablen x und y gilt

$$e^x \cdot e^y = e^{x+y+z_2+z_3+z_4+\dots}$$

oder umgekehrt auch

$$e^{x+y} = e^x \cdot e^y \cdot e^{c_2} \cdot e^{c_3} \cdot e^{c_4} \cdot \dots$$

Sind die Variablen x und y kommutativ, so folgt nach der bekannten Funktionalgleichung $z_n = c_n = 0$ für $n \geq 2$. Sind umgekehrt x und y nun aber nicht kommutativ, so müssen die Folgenglieder z_n und c_n für $n \geq 2$ den **Kommutator**

$$[x, y] := xy - yx \neq 0$$

enthalten.

Es beschreibt nun

$$\log(e^x e^y) = x + y + \sum_{i=2}^{\infty} z_i \quad (1.1)$$

die **Baker-Campbell-Hausdorff Reihe** und umgekehrt beschreibt

$$e^{x+y} = e^x \cdot e^y \cdot \prod_{i=2}^{\infty} e^{c_i} \quad (1.2)$$

das **Zassenhaus Produkt**.

Das Baker-Campbell-Hausdorff Theorem besagt nun, dass $\sum z_i$ eine unendliche Summe ist und dass jedes z_n für $n \geq 2$ aus einer Linearkombination von Produkten mit n Faktoren besteht. Jeder Faktor dieser Produkte ist entweder x oder y . Man schreibt dafür

$$z_n = \sum_W C(W) \cdot \Pi(W),$$

dabei ist $\Pi(W)$ ein Produkt mit n Faktoren, die x oder y sind, und $C(W)$ ist der Koeffizient zu diesem Produkt. Diese Darstellung von z_n nennen wir **Wörterdarstellung**.

Eine Folgerung aus dem Baker-Campbell-Hausdorff Theorem ist die Existenz des unendlichen Zassenhaus Produktes. Zassenhaus wiederum zeigte, dass auch c_n für $n \geq 2$ eine Linearkombination von Produkten mit n Faktoren ist. Jeder Faktor der Produkte ist auch hier x oder y . Man schreibt dafür wieder

$$c_n = \sum_W C(W) \cdot \Pi(W),$$

dabei ist $\Pi(W)$ ein Produkt mit n Faktoren, die x oder y sind, und $C(W)$ ist der Koeffizient zu diesem Produkt.

Die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe und das Zassenhaus Produkt spielen in der Physik und dort vor allem in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle, daher wurden in der Vergangenheit schon mehrere Methoden entwickelt, mit denen sich die Folgeglieder berechnen lassen.

Einige dieser Methoden zur Berechnung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe sind zum Beispiel von GOLDBERG in [1], von MAGNUS in [2] oder auch von WILCOX in [3] zu finden. Diese Methoden sind jedoch recht mühsam und es müssen jeweils für z_n alle vorherigen Glieder berechnet werden. Daher soll zunächst in Kapitel 2 eine vergleichsweise einfache und moderne Berechnung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe nach REINSCH aus [4] vorgestellt werden. Diese Methode lässt sich sehr einfach durch einen Algorithmus beschreiben und liefert jeweils eine Wörterschreibweise der Folgeglieder. Unsere Ergebnisse sollen daher anschließend in eine Kommutatorschreibweise umgewandelt werden. Dazu kann zum Teil auf die Ergebnisse von DYNKIN aus [5] und von OTEO aus [6] zurückgegriffen werden.

Aufbauend auf den grundlegenden Ideen aus Kapitel 2 wird dann in Kapitel 3 eine effiziente Berechnung des Zassenhaus Produktes vorgestellt und die Gültigkeit der beschriebenen Methode bewiesen. Auch hier wird wieder ein Algorithmus vorgestellt und es soll eine zur Wörterschreibweise äquivalente Kommutatordarstellung erzielt werden.

Es wurde in [7] von CIGLER, in [8] von SRIDHAR und JAGANNATHAN und in [9] von QUESNE gezeigt, dass das Zassenhaus Produkt auch auf die allgemeine q -Exponentialfunktion $e_q(x)$ übertragen werden kann. In Kapitel 4 wird daher ein leicht abgewandeltes Verfahren unsere Methode aus Kapitel 3 auch auf die q -Exponentialfunktion angewendet.

Nach der Diskussion in Kapitel 5 sind im Anhang unter Kapitel 6 schließlich mögliche *Mathematica* Implementierungen der vorgestellten Algorithmen zu finden.

2 Baker-Campbell-Hausdorff Reihe

Es soll nun die 2000 von REINSCH in [4] vorgestellte Methode zur Berechnung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe wiederholt werden. Jedes z_n der Reihe

$$z := \sum_{n=1}^{\infty} z_n = \log(e^x e^y) \quad (2.1)$$

wird dabei unabhängig von seinen Vorgängern effizient berechnet.

2.1 Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder

2.1.1 Potenzreihen

Die Exponentialfunktion wird durch die Potenzreihe

$$\exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots$$

gegeben. Nun gilt diese Potenzreihe nicht nur für reelle oder komplexe Zahlen x , sondern nach Definition auch für Matrizen. Sei also A eine $n \times n$ Matrix, dann gilt

$$\exp(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = I + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{6}A^3 + \dots, \quad (2.2)$$

dabei ist I die $n \times n$ Einheitsmatrix.

Auch der natürliche Logarithmus lässt sich durch eine Potenzreihe darstellen:

$$\log(1+x) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} x^k = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \dots$$

Diese Potenzreihe konvergiert für reelle und komplexe x mit $|x| < 1$. Für eine $n \times n$ Matrix A gilt dann analog zur Exponentialfunktion

$$\log(I+A) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} A^k = A - \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{3}A^3 - \dots \quad (2.3)$$

2.1.2 Weitere Definitionen

Es seien $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ gewöhnliche kommutierende Variablen. Weiter werden zwei $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen F und G durch

$$F_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \quad \text{und} \quad G_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_k$$

für $1 \leq i, j \leq n+1$ definiert. Es gilt also ausgeschrieben

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \cdots & \frac{1}{n!} \\ 0 & 1 & 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{(n-1)!} \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & \frac{1}{(n-2)!} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & \frac{1}{(n-3)!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} 1 & \sigma_1 & \frac{1}{2}\sigma_1\sigma_2 & \frac{1}{6}\sigma_1\sigma_2\sigma_3 & \cdots \\ 0 & 1 & \sigma_2 & \frac{1}{2}\sigma_2\sigma_3 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \sigma_3 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Zwei weitere $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen M und N seien gegeben durch

$$M_{ij} = \delta_{i+1,j} \quad \text{und} \quad N_{ij} = \delta_{i+1,j} \sigma_i,$$

dabei ist δ das Kroneckersymbol. Ausgeschrieben gilt somit

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

$$N = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Nach Kapitel 2.1.1 gilt gerade

$$F = \exp M \quad \text{und} \quad G = \exp N, \quad (2.6)$$

dies wird später noch genutzt werden.

2.1.3 Berechnung von $\log FG$

Es sei $I = \delta_{ij}$ die $(n+1) \times (n+1)$ Einheitsmatrix. Dann ist die Matrix $FG - I$ eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix, die ausschließlich oberhalb der Superdiagonalen Einträge hat, die nicht Null sind. Es folgt somit

$$(FG - I)^k = 0$$

für alle $k > n$. Demnach und nach (2.3) folgt nun

$$\log FG = \log(I + (FG - I)) = - \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{k} (FG - I)^k. \quad (2.7)$$

Es sei noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die Berechnung von $\log FG$ durch eine endliche Summe in n Schritten erfolgt. Diese Tatsache ist in keinsten Weise selbstverständlich, sondern eine große Ausnahme. Nur dadurch sind die Folgeglieder der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe so einfach und effizient zu berechnen.

2.1.4 Der Operator T

Es sei

$$W = \sigma_1^{\mu_1} \sigma_2^{\mu_2} \sigma_3^{\mu_3} \dots \sigma_n^{\mu_n}$$

ein **Wort** mit $\mu_i \in \{0, 1\}$ für $i = 1, \dots, n$.

Der Operator T "übersetzt" das Wort W nun in eine Sequenz von x und y . Ist $\mu_i = 0$, so wird $\sigma_i^{\mu_i}$ durch ein x ersetzt, und bei $\mu_i = 1$ wird $\sigma_i^{\mu_i}$ durch ein y ersetzt.

Für $n = 6$ und das Wort

$$W = \sigma_1^0 \sigma_2^1 \sigma_3^0 \sigma_4^1 \sigma_5^1 \sigma_6^0 = \sigma_2 \sigma_4 \sigma_5$$

gilt somit

$$T(W) = T(\sigma_1^0 \sigma_2^1 \sigma_3^0 \sigma_4^1 \sigma_5^1 \sigma_6^0) = T(\sigma_2 \sigma_4 \sigma_5) = xyxyyx.$$

Sei X der Vektorraum aller Polynome über den σ Variablen mit $\mu_i \in \{0, 1\}$ und sei Y der Vektorraum aller Linearkombinationen von Produkten mit n Faktoren, die entweder x oder y sind. Dann ist der Operator T ein Isomorphismus zwischen den Räumen X und Y .

2.1.5 Die Idee zur Berechnung

Die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe wird durch $z = \log e^x e^y$ gegeben, dabei sind x und y im Allgemeinen nicht kommutierende Variablen. Die Idee zur Berechnung des n ten Folgegliedes besteht nun darin, dass zunächst x und

y durch die nicht kommutierenden Matrizen M und N ersetzt werden. Die spezielle Baker-Campbell-Hausdorff Reihe mit den Matrizen M und N ist dann gegeben durch

$$Z = \log e^M e^N = \log FG,$$

dabei soll das große Z verdeutlichen, dass es sich um die spezielle Reihe zu den speziellen Matrizen M und N handelt. Die Größe der Matrizen ist dabei für alle $n \in \mathbb{N}$ unterschiedlich.

Es gibt nun zwei Besonderheiten, die die Berechnung ermöglichen und auch noch sehr einfach halten. Zum Ersten lassen sich durch die recht einfachen Strukturen der Matrizen M und N für alle $n \in \mathbb{N}$ Aussagen über die Gestalt von Z_n treffen. Zum Zweiten lässt sich wie in 2.1.3 schon beschrieben die Matrix $\log FG$ in endlich vielen Schritten berechnen. Durch diese beiden Besonderheiten kann nun jeweils Z_n gerechnet werden, wenn die Matrizen M und N die Größe $(n+1) \times (n+1)$ haben.

Um nun später von Matrizen wieder zu den allgemeinen Variablen x und y zurückzukehren, wird der Operator T verwendet.

Gerade im Beweis sollte diese Idee noch sehr viel klarer werden.

2.2 Behauptung und Beweis

2.2.1 Satz

Sei $n \geq 1$, seien $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ beliebige kommutative Variablen und seien F und G die zwei $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen aus 2.1.2, die durch

$$F_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \quad \text{und} \quad G_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_k$$

gegeben werden. Weiter sei T der in 2.1.4 definierte Operator.

Dann ist

$$z_n = T((\log FG)_{1,n+1}) \tag{2.8}$$

das n te Folgenglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe, wobei der Index $1, n+1$ das obere rechte Element der Matrix $\log FG$ bedeutet.

2.2.2 Beweis

Es seien M und N die zwei $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen wie in 2.1.2. Der Beweis gliedert sich nun in fünf Teile.

Teil 1: Produkte der Matrizen M und N

Die beiden Matrizen M und N haben nur in der ersten Superdiagonalen Elemente, die nicht Null sind. Das heißt, dass ein Produkt aus m Faktoren, die entweder M oder N sind, eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix ist, die nur in der m ten Superdiagonalen Elemente hat, die nicht Null sind.

Für $n = 4$ gilt zum Beispiel

$$M \cdot N \cdot N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \sigma_2 \sigma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_3 \sigma_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Insbesondere hat ein Matrixprodukt aus n Faktoren, die M oder N sind, nur oben rechts einen Eintrag, der ungleich Null ist.

Teil 2: Zusammenhang zum Baker-Campbell-Hausdorff Theorem

An dieser Stelle wird nun das Baker-Campbell-Hausdorff Theorem [ohne Beweis] vorausgesetzt. Demnach ist bekannt, dass das n te Folgeglied z_n für alle $n \in \mathbb{N}$ existiert und aus einer Linearkombination von Wörtern besteht, die alle die Länge n haben.

Betrachtet man das n te Folgeglied Z_n der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe mit den nicht kommutierenden Matrizen M und N , so besteht Z_n aus einer Linearkombination, bei der jedes Wort ein Produkt von n Matrizen ist, deren Faktoren M und N sind.

Für $n = 2$ gilt zum Beispiel

$$\begin{aligned} Z_2 &= \frac{1}{2} \cdot MN - \frac{1}{2} \cdot NM \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2}\sigma_2 - \frac{1}{2}\sigma_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dies ist die richtige Darstellung von Z_2 , welche an dieser Stelle aber eigentlich noch nicht bekannt ist.

Allgemein folgt nun aus Teil 1, dass Z_n [mit den nicht kommutierenden Matrizen M und N] eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix ist, die nur oben rechts einen einzigen Eintrag hat, der ungleich Null ist.

Da die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe durch

$$Z = \log(e^M e^N)$$

definiert ist, ist für alle $n \in \mathbb{N}$ das obere rechte Element der Matrix Z_n gleich dem oberen rechten Element der Matrix $\log(e^M e^N)$. Anders geschrieben gilt also

$$(Z_n)_{1,n+1} = (\log(e^M e^N))_{1,n+1}.$$

Dies zeigt, dass auch $(\log(e^M e^N))_{1,n+1}$ berechnet werden kann, um das n te Folgenglied Z_n der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe zu erhalten.

Teil 3: Neue Schreibweise

Wiederum durch das Baker-Campbell-Hausdorff Theorem kann die Situation nun durch

$$\log(e^M e^N)_{1,n+1} = \sum_{W \in \mathcal{W}} C(W) \cdot (\Pi(W))_{1,n+1}$$

ausgedrückt werden, dabei ist \mathcal{W} die Menge aller Wörter der Länge n , die aus den "Buchstaben" M und N bestehen, $C(W)$ ist der Koeffizient zum Wort W in dem Term n ter Ordnung in der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe und $\Pi(W)$ beschreibt das Produkt von den Matrizen M und N , welches durch das Wort W gegeben wird.

Für $n = 4$ ist zum Beispiel $W = NMNM \in \mathcal{W}$, es ist wie immer $C(W)$ eine reelle Zahl und es gilt $\Pi(W) = N \cdot M \cdot N \cdot M$.

Teil 4: Von M und N zu x und y

Es soll nun gezeigt werden, dass das obere rechte Element von $\Pi(W)$, also $(\Pi(W))_{1,n+1}$, ein Produkt aus den σ Variablen ist, deren Indizes die Positionen der N 's im Wort W angeben.

Sei $v = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$ ein Spaltenvektor aus $n+1$ Elementen. Es soll nun $\Pi(W)$ auf v angewendet werden. Da M und N nur auf der ersten Superdiagonalen Einträge haben, die nicht Null sind, verschiebt sich das Element aus v , welches nicht Null ist, um eine Position nach oben. Wird nun N mit dem Spaltenvektor multipliziert, so wird das Element vom Spaltenvektor, das nicht Null ist, mit σ_i multipliziert. Der Index i gibt dabei die Position von diesem N in dem Wort W an.

Nachdem alle n Matrizen mit dem Spaltenvektor multipliziert wurden, steht nur noch ganz oben ein Element, das nicht Null ist, sondern ein Produkt

aus den σ Variablen.

Diese Situation wird klar, wenn man sich die Strukturen der Matrizen M und N und das folgende Beispiel ansieht:

Für $n = 3$ und das Wort $W = MNN$ gilt

$$\begin{aligned}
 & M \cdot N \cdot N \cdot v \\
 = & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 = & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_3 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 = & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_2 \sigma_3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_2 \sigma_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Nun gibt $\sigma_2 \sigma_3$ an, dass im Wort W an den Positionen 2 und 3 ein N vorkommt.

Da die Matrixmultiplikation assoziativ ist, können erst die Matrixmultiplikationen durchgeführt werden, bevor der Spaltenvektor v mit dem Produkt der Matrizen multipliziert wird. Dies zeigt, dass das Element, das nach den n Multiplikationen im Spaltenvektor ganz oben steht, gleich dem oberen rechten Element in der Matrix $\Pi(W)$ ist.

Somit ist $(\Pi(W))_{1,n+1}$, ein Produkt aus den σ Variablen, deren Indizes die Positionen der N 's im Wort W angeben.

Dies zeigt, dass das Anwenden des Operators T auf das rechte obere Element der Matrix $\log FG$ die gleiche Linearkombination aus x und y Variablen liefert, wie zuvor aus den M und N Matrizen.

Teil 5: Beweisabschluss

Teil 4 zusammen mit der Erkenntnis (2.6), dass nämlich

$$F = \exp M \quad \text{und} \quad G = \exp N$$

gilt, beweist die Behauptung 2.2.1. \square

Es soll an dieser Stelle noch einmal festgehalten werden, dass es vergleichsweise sehr einfach ist, die Matrix

$$\log FG$$

zu berechnen. Wie in 2.1.3 beschrieben, sind nur endlich viele Rechenschritte notwendig. Dies liegt hier an der außergewöhnlich einfachen Berechnung des Logarithmus.

2.3 Beispiele

Es soll nun verdeutlicht werden, wie die Folgenglieder der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe z berechnet werden können. Alle Ergebnisse wurden mit anderen Literaturwerten wie zum Beispiel mit denen aus [9] verglichen und stimmen überein.

2.3.1 Berechnung von z_1

Für $n = 1$ gilt

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad G = \begin{pmatrix} 1 & \sigma_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Demnach folgt

$$FG = \begin{pmatrix} 1 & 1 + \sigma_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \log FG = \begin{pmatrix} 0 & 1 + \sigma_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es ergibt sich somit

$$z_1 = T(\log FG)_{1,1+n} = T(1 + \sigma_1) = T(\sigma_1^0 + \sigma_1^1) = x + y.$$

2.3.2 Berechnung von z_2

Für $n = 2$ gilt

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad G = \begin{pmatrix} 1 & \sigma_1 & \frac{1}{2}\sigma_1\sigma_2 \\ 0 & 1 & \sigma_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Demnach folgt

$$(FG - I) = \begin{pmatrix} 0 & 1 + \sigma_1 & \frac{1}{2} + \sigma_2 + \frac{1}{2}\sigma_1\sigma_2 \\ 0 & 0 & 1 + \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(FG - I)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_1\sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

sowie

$$\log FG = \begin{pmatrix} 0 & 1 + \sigma_1 & \frac{1}{2}\sigma_2 - \frac{1}{2}\sigma_1 \\ 0 & 0 & 1 + \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es ergibt sich somit

$$\begin{aligned} z_2 &= T(\log FG)_{1,1+n} = T\left(\frac{1}{2}\sigma_2 - \frac{1}{2}\sigma_1\right) \\ &= \frac{1}{2}T(\sigma_1^0\sigma_2^1 - \sigma_1^1\sigma_2^0) = \frac{1}{2}(xy - yx). \end{aligned}$$

2.3.3 Berechnung von z_3

Für $n = 3$ erhält man ganz analog

$$\begin{aligned} z_3 &= T\left(\frac{1}{12}\sigma_1 - \frac{1}{6}\sigma_2 + \frac{1}{12}\sigma_3 + \frac{1}{12}\sigma_1\sigma_2 - \frac{1}{6}\sigma_1\sigma_3 + \frac{1}{12}\sigma_2\sigma_3\right) \\ &= \frac{1}{12}yxx - \frac{1}{6}xyx + \frac{1}{12}xxy + \frac{1}{12}yyx - \frac{1}{6}yxy + \frac{1}{12}xyy. \end{aligned}$$

2.3.4 Berechnung von z_4

Für $n = 4$ berechnet sich

$$\begin{aligned} z_4 &= T\left(-\frac{1}{24}\sigma_1\sigma_2 + \frac{1}{12}\sigma_1\sigma_3 - \frac{1}{12}\sigma_2\sigma_4 + \frac{1}{24}\sigma_3\sigma_4\right) \\ &= -\frac{1}{24}yyxx + \frac{1}{12}yxyx - \frac{1}{12}xyxy + \frac{1}{24}xxyy. \end{aligned}$$

2.4 Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder

Der folgende Algorithmus soll noch einmal die Schritte verdeutlichen, die bei der Berechnung des n ten Folgegliedes der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe nötig sind.

(Input) Ein $n \geq 2$.

(1) Berechnung der $(n+1) \times (n+1)$ Matrix F durch

$$F_{ij} = \frac{1}{(j-i)!}.$$

(2) Berechnung der $(n+1) \times (n+1)$ Matrix G durch

$$G_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} \sigma_k.$$

(3) Berechnung von $\log FG$ durch

$$\log FG = - \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{k} (FG - I)^k.$$

(4) Anwenden des Operators T auf das Element $(\log FG)_{1,n+1}$.

(Output) Das n te Folgeliel in Wörtlerschreibweise.

Eine mögliche *Mathematica* Implementierung ist im Anhang unter 6.1 zu finden.

2.5 Symmetrie der Koeffizienten

Wie schon in den Beispielen gesehen, gibt es eine gewisse Symmetrie der Koeffizienten in den Folgegliedern der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe. Sind Symmetrien bekannt, so kann jedes Folgeglied durch eigene Algorithmen noch schneller berechnet werden. Zwei Symmetrien werden in [4] bewiesen, diese sollen hier nun vorgestellt werden:

2.5.1 Tauschen der Variablen

Die Beziehung $e^z = e^x e^y$ impliziert durch links- bzw. rechtsseitiger Multiplikation mit den inversen Elementen $(e^z)^{-1} = e^{-z}$ und analog e^{-x} und e^{-y} gerade $e^{-z} = e^{-x} e^{-y}$, somit gilt

$$z = \log e^x e^y = - \log e^{-y} e^{-x}.$$

Dies zeigt, dass das Tauschen der x 's und der y 's in dem n ten Folgeglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe z_n das gleiche Ergebnis liefert, indem man z_n mit $(-1)^{n-1}$ multipliziert.

Es gelte nun $\sigma_i^2 = 1$ für $i = 1, \dots, n$. Dann wird diese Symmetrie gerade durch

$$(\log FG)_{1,n+1} \cdot \prod_{i=1}^n \sigma_i = (-1)^{n-1} \cdot (\log FG)_{1,n+1} \quad (2.9)$$

ausgedrückt, da die Multiplikation mit $\prod_{i=1}^n \sigma_i$ ein Tauschen der x und y Variablen bewirkt.

Beispiel

Betrachtet man nur einzelne Terme aus einem Folgeglied, so kann man eine Aussage über einen weiteren Term treffen.

Das sechste Folgeglied z_6 der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe beinhaltet den Term

$$\frac{1}{240} xy y x x,$$

durch das Tauschen der Variablen und einer Multiplikation mit (-1) kommt also auch der Term

$$-\frac{1}{240} x y x x y y$$

in z_6 vor.

2.5.2 Verdrehen der Variablen

Eine weitere Symmetrie nach [4] ist das Verdrehen der Variablen:

$$(\log FG)_{1,n+1}(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = (-1)^{n-1} \cdot (\log FG)_{1,n+1}(\sigma_n, \dots, \sigma_1), \quad (2.10)$$

hierbei drückt $(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ aus, dass $(\log FG)_{1,n+1}$ eine Funktion mit den n Variablen $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ ist. Auf der rechten Seite der Gleichung wird durch $(\sigma_n, \dots, \sigma_1)$ die Reihenfolge der Variablen gerade vertauscht.

Beispiel

Das sechste Folgeglied z_6 der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe beinhaltet den Term

$$\frac{1}{240} xy y x x,$$

durch das Verdrehen der Variablen und einer Multiplikation mit (-1) kommt also auch der Term

$$-\frac{1}{240} x y y x x$$

in z_6 vor.

2.6 Kommutatorschreibweise nach Dynkin

Soll ein Folgeglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe mit Kommutatoren dargestellt werden, so lässt sich das Verfahren von DYNKIN aus [5] anwenden, welches auch in [6] vorgestellt wird:

Es sei

$$z_n = \sum_{W(s_1, \dots, s_n)} C(W) \cdot W(s_1, \dots, s_n)$$

ein Folgeglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe in der bislang beschriebenen Darstellung, dabei ist $W(s_1, \dots, s_n)$ ein Wort aus den x 's und y 's und $C(W)$ ist der Koeffizient zu diesem Wort. Es gilt weiter $s_i = x$, wenn an der i ten Stelle im Wort W ein x steht, sonst $s_i = y$.

In Kommutatorschreibweise gilt dann

$$z_n = \sum_{\substack{W(s_1, \dots, s_n) \\ s_1 \neq s_2}} \frac{(-1)^{n-1}}{n} \cdot C(W) \cdot [s_n, [\dots, [s_3, [s_2, s_1]] \dots]]. \quad (2.11)$$

Es ist dabei zu beachten, dass diese Summe nur Wörter addiert, bei denen $s_1 \neq s_2$ gilt. Sind die ersten beiden Buchstaben aus einem Wort also xx oder yy , so muss dieses Wort nicht in einem Kommutator umgewandelt werden, da er durch den inneren Kommutator $[s_2, s_1] = 0$ sowieso verwirren würde.

Beispiel

Für $n = 3$ und

$$z_3 = \frac{1}{12}yxx - \frac{1}{6}xyx + \frac{1}{12}xyx + \frac{1}{12}yyx - \frac{1}{6}yxy + \frac{1}{12}xyy$$

ergibt sich nach diesem Verfahren also

$$z_3 = \frac{1}{36}[x, [x, y]] - \frac{1}{18}[x, [y, x]] - \frac{1}{18}[y, [x, y]] + \frac{1}{36}[y, [y, x]].$$

Man erzielt im Allgemeinen keine sehr kompakte oder kurze Darstellung in der Kommutatorschreibweise. Das dritte Folgeglied kann nach einfachen Umformungen auch durch

$$z_3 = \frac{1}{12}[x, [x, y]] - \frac{1}{12}[y, [x, y]]$$

beschrieben werden. Dies ist auch genau das Ergebnis, was unsere vermutete Kommutatorschreibweise aus Kapitel 2.7 liefert. Ansonsten lassen sich die Ausdrücke teilweise durch Kommutatoridentitäten [siehe Kapitel 2.8] weiter vereinfachen, aber auch dies kann schnell sehr mühsam werden und es lässt sich hierzu kein Algorithmus finden.

2.7 Vermutete Kommutatorschreibweise

Eine weitaus kompaktere Kommutatorschreibweise als nach dem Verfahren von DYNKIN erhält man durch die folgende Vermutung:

Es sei wieder

$$z_n = \sum_{W(s_1, \dots, s_n)} C(W) \cdot W(s_1, \dots, s_n)$$

ein Folgeglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe, dabei ist $W(s_1, \dots, s_n)$ ein Wort aus den x 's und y 's und $C(W)$ ist der Koeffizient zu diesem Wort. Es gilt $s_i = x$, wenn an der i ten Stelle im Wort W ein x steht, sonst $s_i = y$. Weiter sei $n_x(W)$ die Anzahl der x 's und analog $n_y(W)$ die Anzahl der y 's

im Wort W .

In Kommutatorschreibweise gilt dann

$$z_n = \sum_{\substack{W(s_1, \dots, s_n) \\ s_1=x, s_2=y}} \frac{(-1)^{n-1}}{n_x(W)} \cdot C(W) \cdot [s_n, [\dots, [s_3, [s_2, s_1]] \dots]] \quad (2.12)$$

und analog auch

$$z_n = \sum_{\substack{W(s_1, \dots, s_n) \\ s_1=y, s_2=x}} \frac{(-1)^{n-1}}{n_y(W)} \cdot C(W) \cdot [s_n, [\dots, [s_3, [s_2, s_1]] \dots]]. \quad (2.13)$$

Es wird also nur über die Wörter summiert, die mit xy bzw. die mit yx anfangen.

Diese Vermutung stammt auch von DYNKIN und wurde von OTEO in [6] bis zum zehnten und von uns bis zum 18ten Folglied überprüft und mit bekannten Ergebnissen verglichen.

Beispiele

Für $n = 3$ und

$$z_3 = \frac{1}{12}yxx - \frac{1}{6}xyx + \frac{1}{12}xyx + \frac{1}{12}yyx - \frac{1}{6}xyx + \frac{1}{12}xyy$$

erhält man somit

$$z_3 = \frac{1}{12}[y, [y, x]] - \frac{1}{12}[x, [y, x]] = \frac{1}{12}[x, [x, y]] - \frac{1}{12}[y, [x, y]].$$

Für $n = 4$ und

$$z_4 = -\frac{1}{24}yyxx + \frac{1}{12}xyyx - \frac{1}{12}xyxy + \frac{1}{24}xyxy$$

erhält man analog sofort

$$z_4 = \frac{1}{24}[y, [x, [y, x]]] = -\frac{1}{24}[x, [y, [x, y]]].$$

2.8 Kommutatoridentitäten

Durch die folgenden Kommutatoridentitäten, welche alle in [6] vorgestellt werden, lassen sich die erzielten Ergebnisse weiter vereinfachen.

Am bekanntesten ist die **Jacobi-Identität**

$$[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$$

mit den drei Variablen x , y und z . Mit nur zwei Variablen und vier Operatoren ist die folgende Identität bekannt:

$$[x, [y, [x, y]]] = [y, [x, [x, y]]] = -[x, [y, [y, x]]].$$

Zwei weitere Identitäten mit sechs Operatoren sind

$$[x, [y, [y, [y, [y, x]]]] + [y, [y, [x, [y, [y, x]]]] = 2[y, [x, [y, [y, [y, x]]]]$$

und

$$\begin{aligned} [x, [x, [y, [y, [y, x]]]] + 3[y, [x, [x, [y, [y, x]]]] \\ = [y, [y, [x, [x, [y, x]]]] + 3[x, [y, [x, [y, [y, x]]]]. \end{aligned}$$

Diese und auch noch weitere Beziehungen können also genutzt werden, um eine möglichst kompakte Kommutatordarstellung der Baker-Campbell-Hausdorff Folgeglieder zu erhalten.

3 Zassenhaus Produkt

Aufbauend auf der Berechnung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe aus Kapitel 2 soll nun die Berechnung der Folgeglieder des Zassenhaus Produktes erfolgen. Es wird zu erkennen sein, dass auch dies in endliche vielen Rechenschritten möglich sein wird und es wird auch wieder ein Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder vorgestellt.

Um den Unterschied zur Baker-Campbell-Hausdorff Reihe zu verdeutlichen, werden nun die im Allgemeinen nicht kommutierenden Variablen a und b statt x und y verwenden. Die grundlegende Gleichung ist somit

$$e^{a+b} = e^a \cdot e^b \cdot e^{c_2} \cdot e^{c_3} \cdot e^{c_4} \cdot \dots \quad (3.1)$$

und auch die Folgeglieder c_n bestehen aus Produkten, deren Faktoren a oder b sind.

3.1 Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder

3.1.1 Weitere Definitionen

Es seien τ_1, \dots, τ_n gewöhnliche kommutierende Variablen. Weiter werden drei $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen J , K und L durch

$$J_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} (1 + \tau_k), \quad K_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{(j-i)!} \quad \text{und}$$

$$L_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} \tau_k$$

für $1 \leq i, j \leq n+1$ definiert. Es gilt also ausgeschrieben

$$J = \begin{pmatrix} 1 & (1 + \tau_1) & \frac{1}{2}(1 + \tau_1)(1 + \tau_2) & \frac{1}{6}(1 + \tau_1)(1 + \tau_2)(1 + \tau_3) & \dots \\ 0 & 1 & (1 + \tau_2) & \frac{1}{2}(1 + \tau_2)(1 + \tau_3) & \dots \\ 0 & 0 & 1 & (1 + \tau_3) & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

$$K = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \dots & \pm \frac{1}{n!} \\ 0 & 1 & -1 & \frac{1}{2} & \dots & \mp \frac{1}{(n-1)!} \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \dots & \pm \frac{1}{(n-2)!} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & \mp \frac{1}{(n-3)!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & \frac{1}{2}\tau_1\tau_2 & -\frac{1}{6}\tau_1\tau_2\tau_3 & \dots \\ 0 & 1 & -\tau_2 & \frac{1}{2}\tau_2\tau_3 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -\tau_3 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Zwei weitere $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen P und Q seien gegeben durch

$$P_{ij} = \delta_{i+1,j} \quad \text{und} \quad Q_{ij} = \delta_{i+1,j} \tau_i,$$

dabei ist δ das Kroneckersymbol. Ausgeschrieben gilt somit

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & \tau_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \tau_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \tau_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Die Matrizen P und Q werden also ganz analog zu den beiden Matrizen M und N aus Kapitel 2 definiert.

Durch die Potenzreihendarstellung der Exponentialfunktion für Matrizen aus 2.1.1 und anhand der ausgeschriebenen Matrizen J , K und L erkennt man, dass gerade

$$J = \exp(P + Q), \quad K = \exp(-P) \quad \text{und} \quad L = \exp(-Q) \quad (3.4)$$

gilt. Dies ist eine Vereinfachung, die später genutzt werden wird.

3.1.2 Berechnung von $\exp D$ für spezielle Matrizen D

Es sei D eine $n \times n$ Matrix mit $n \geq 2$, die nur oben rechts einen Eintrag besitzt, der ungleich Null ist. Es gelte also

$$D_{ij} = \begin{cases} d \neq 0 & \text{wenn } i = 1 \text{ und } j = n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Dann ist nach 2.1.1 wieder sofort klar, dass

$$\exp D = I + D$$

gilt. Dies zeigt nun gerade, dass das obere rechte Element von $\exp D$ gleich dem oberen rechten Element von D ist. Auch diese Erkenntnis wird später genutzt werden.

3.1.3 Der Operator U

Ganz analog zum Operator T aus Kapitel 2 soll nun der Operator U definiert werden.

Es sei

$$W = \tau_1^{\mu_1} \tau_2^{\mu_2} \tau_3^{\mu_3} \dots \tau_n^{\mu_n}$$

ein Wort mit $\mu_i \in \{0, 1\}$ für $i = 1, \dots, n$.

Der Operator U “übersetzt” das Wort W nun in eine Sequenz von a und b . Ist $\mu_i = 0$, so wird $\tau_i^{\mu_i}$ durch ein a ersetzt, und bei $\mu_i = 1$ wird $\tau_i^{\mu_i}$ durch ein b ersetzt.

Für $n = 6$ und das Wort

$$W = \tau_1^1 \tau_2^0 \tau_3^1 \tau_4^1 \tau_5^0 \tau_6^0 = \tau_1 \tau_3 \tau_4$$

gilt somit

$$U(W) = U(\tau_1^1 \tau_2^0 \tau_3^1 \tau_4^1 \tau_5^0 \tau_6^0) = U(\tau_1 \tau_3 \tau_4) = babbaa.$$

Auch U ist ein Vektorraumisomorphismus.

3.1.4 Die Idee zur Berechnung

Die Folgenglieder c_n des Zassenhaus Produktes werden durch

$$e^{a+b} = e^a \cdot e^b \cdot e^{c_2} \cdot e^{c_3} \cdot e^{c_4} \dots$$

gegeben. Es wird nun auch hier damit begonnen, die allgemeinen Variablen a und b durch die speziellen nicht kommutierenden Matrizen P und Q zu ersetzen. Dadurch lässt sich das spezielle n te Folgenglied C_n berechnen, wobei

das große C wieder verdeutlicht, dass es sich um ein spezielles Produkte handelt. Später lässt sich das Ergebnis dann wieder durch den Operator U in beliebige Variablen a und b übersetzen.

Benutzt man nun P und Q , so ist nach Zassenhaus wieder bekannt, dass C_k jeweils aus Produkten besteht, deren k Faktoren P und Q sind. Somit wird C_k für $k > n$ die $(n+1) \times (n+1)$ Nullmatrix sein und demnach wird dann auch $e^{C_k} = I$ gelten. Man erkennt schon jetzt, dass für die Berechnung von C_n alle Folgenglieder C_k mit $k > n$ nicht relevant sein werden.

Die Situation sollte im folgenden Beweis wieder sehr viel klarer werden.

3.2 Behauptung und Beweis

3.2.1 Satz

Sei $n \geq 2$, seien τ_1, \dots, τ_n beliebige kommutative Variablen und seien J, K und L sowie P und Q die in 3.1.1 definierten $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen. Weiter sei U der in 3.1.3 beschriebene Operator.

Dann ist

$$c_n = U \left((e^{-C_{n-1}} \cdot e^{-C_{n-2}} \cdot \dots \cdot e^{-C_2} \cdot L \cdot K \cdot J)_{1,n+1} \right) \quad (3.5)$$

das n te Folgenglied des Zassenhaus Produktes, dabei ist C_m für $m < n$ jeweils das spezielle m te Folgenglied aus den nicht kommutierenden Matrizen P und Q .

3.2.2 Beweis

Der Beweis gliedert sich wieder in fünf Teile.

Teil 1: Produkte der Matrizen P und Q

Ganz analog zu den Matrizen M und N aus Beweis 2.2.2 haben die beiden Matrizen P und Q nur in der ersten Superdiagonalen Elemente, die nicht Null sind. Das heißt, dass ein Produkt aus m Faktoren, die entweder P oder Q sind, eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix ist, die nur in der m ten Superdiagonalen Elemente hat, die nicht Null sind.

Für $n = 4$ hat PQP zum Beispiel nur in der dritten Superdiagonalen Einträge, die ungleich Null sind.

Insbesondere hat ein Matrixprodukt aus n Faktoren, die P oder Q sind, nur oben rechts einen Eintrag, der ungleich Null ist. Ein Produkt aus k Faktoren mit $k > n$ ist also sofort die $(n+1) \times (n+1)$ Nullmatrix.

Teil 2: Zusammenhang zu Zassenhaus

Es wird nun wieder das in der Einleitung angesprochene Theorem von Zassenhaus [ohne Beweis] vorausgesetzt. Demnach ist bekannt, dass das n te Folgeglied c_n für alle $n \in \mathbb{N}$ existiert und aus einer Linearkombination von Wörtern besteht, die alle die Länge n haben.

Betrachtet man das n te Folgeglied C_n des Zassenhaus Produktes mit den nicht kommutierenden Matrizen P und Q , so besteht C_n aus einer Linearkombination, bei der jedes Wort ein Produkt von n Matrizen ist, deren Faktoren P und Q sind.

Allgemein folgt nun aus Teil 1, dass C_n [mit den nicht kommutierenden Matrizen P und Q] eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix ist, die nur oben rechts einen einzigen Eintrag hat, der ungleich Null ist.

Die grundlegenden Gleichung

$$e^{P+Q} = e^P \cdot e^Q \cdot e^{C_2} \cdot e^{C_3} \cdot e^{C_4} \cdot \dots$$

kann nun für alle $n \in \mathbb{N}$ durch das endliche Produkt

$$e^{P+Q} = e^P \cdot e^Q \cdot e^{C_2} \cdot e^{C_3} \cdot \dots \cdot e^{C_n} \quad (3.6)$$

beschrieben werden, da nach Teil 1 und nach Zassenhaus C_k für $k > n$ die $(n+1) \times (n+1)$ Nullmatrix ist und somit $e^{C_k} = I$ gilt. Durch linksseitiges anmultiplizieren der inversen Elementen an die Gleichung (3.6) erhält man nun

$$\begin{aligned} e^{C_n} &= (e^{C_{n-1}})^{-1} \cdot \dots \cdot (e^{C_2})^{-1} \cdot (e^Q)^{-1} \cdot (e^P)^{-1} \cdot e^{P+Q} \\ &= e^{-C_{n-1}} \cdot \dots \cdot e^{-C_2} \cdot e^{-Q} \cdot e^{-P} \cdot e^{P+Q}. \end{aligned}$$

Die Matrizen C_m für $m = 2, \dots, n-1$ habe jeweils nur auf der m ten Superdiagonalen Einträge, die ungleich Null sind. Somit kann jede Matrix e^{-C_m} in wenigen Schritten berechnet werden.

Dies zeigt, dass e^{C_n} genau dann in endlich vielen Rechenoperationen berechnet werden kann, wenn die Folgeglieder C_2 bis C_{n+1} bekannt sind.

Teil 3: Das obere rechte Element von e^{C_n}

Es ist bekannt, dass C_n nur oben rechts einen einzigen Eintrag hat, der ungleich Null ist. Somit gilt nach Kapitel 3.1.2 also gerade $e^{C_n} = I + C_n$. Das obere rechte Element von C_n ist also gerade dem oberen rechten Element von e^{C_n} . Anders geschrieben gilt demnach

$$\begin{aligned} (C_n)_{1,n+1} &= (e^{C_n})_{1,n+1} \\ &= (e^{-C_{n-1}} \cdot \dots \cdot e^{-Q} \cdot e^{-P} \cdot e^{P+Q})_{1,n+1}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Nach Zassenhaus kann die Situation nun durch

$$(C_n)_{1,n+1} = \sum_{W \in \mathcal{W}} C(W) \cdot (\Pi(W))_{1,n+1}$$

ausgedrückt werden, dabei ist \mathcal{W} die Menge aller Wörter der Länge n , die aus den “Buchstaben” P und Q bestehen, $C(W)$ ist der Koeffizient zum Wort W in dem Term n ter Ordnung des Zassenhaus Produktes und $\Pi(W)$ beschreibt das Produkt von den Matrizen P und Q , welches durch das Wort W gegeben wird.

Teil 4: Von P und Q zu a und b

Der nächste Schritt ist nun zu zeigen, dass das obere rechte Element von $\Pi(W)$, also $(\Pi(W))_{1,n+1}$, ein Produkt aus den τ Variablen ist, deren Indizes die Positionen der Q ’s im Wort W angeben.

Dieser Teil des Beweises verläuft aber ganz analog zu Teil 4 aus Beweis 2.2.2 und wird daher als bekannt angenommen.

Somit erhält man durch Anwenden des Operators U auf das rechte obere Element der Matrix e^{C_n} die gleiche Linearkombination aus a und b Variablen, wie zuvor aus den P und Q Matrizen.

Teil 5: Beweisabschluss

Teil 4 zusammen mit Gleichung (3.7) und der Erkenntnis (3.4), dass nämlich

$$J = \exp(P + Q), \quad K = \exp(-P) \quad \text{und} \quad L = \exp(-Q)$$

gilt, beweist die Behauptung 3.2.1. □

Es ist nochmals festzuhalten, dass die besonderen Strukturen der Matrizen P und Q dafür sorgen, dass jeweils auch $\exp P$ und $\exp Q$ in endlich vielen Schritten berechnet werden kann. Alle Matrizen, mit denen irgendwelche Operationen durchzuführen sind, haben nur oberhalb und evtl. auf der Hauptdiagonalen Einträge, die ungleich Null sind. Nur dadurch sind alle Operationen in endlich vielen Schritten durchzuführen.

Das Zassenhaus Produkt lässt sich somit iterativ und effizient berechnen.

3.3 Beispiele

Es werden nun die ersten Folgenglieder des Zassenhaus Produktes von Hand berechnet. Diese und weitere Folgenglieder stimmen auch mit den Ergebnissen aus [9] überein.

3.3.1 Berechnung von c_2

Für $n = 2$ gilt

$$L = \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & \frac{1}{2}\tau_1\tau_2 \\ 0 & 1 & -\tau_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$J = \begin{pmatrix} 1 & (1+\tau_1) & \frac{1}{2}(1+\tau_1)(1+\tau_2) \\ 0 & 1 & (1+\tau_2) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Damit folgt

$$L \cdot K \cdot J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2}\tau_1 - \frac{1}{2}\tau_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

somit erhält man

$$\begin{aligned} c_2 &= U(L \cdot K \cdot J)_{1,n+1} = U\left(\frac{1}{2}\tau_1 - \frac{1}{2}\tau_2\right) \\ &= \frac{1}{2}U(\tau_1^1\tau_2^0 - \tau_1^0\tau_2^1) = \frac{1}{2}(ba - ab). \end{aligned}$$

3.3.2 Berechnung von c_3

Für $n = 3$ ergibt sich

$$L = \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & \frac{1}{2}\tau_1\tau_2 & -\frac{1}{6}\tau_1\tau_2\tau_3 \\ 0 & 1 & -\tau_2 & \frac{1}{2}\tau_2\tau_3 \\ 0 & 0 & 1 & -\tau_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} \\ 0 & 1 & -1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$J = \begin{pmatrix} 1 & (1+\tau_1) & \frac{1}{2}(1+\tau_1)(1+\tau_2) & \frac{1}{6}(1+\tau_1)(1+\tau_2)(1+\tau_3) \\ 0 & 1 & (1+\tau_2) & \frac{1}{2}(1+\tau_2)(1+\tau_3) \\ 0 & 0 & 1 & (1+\tau_3) \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Für die Matrizen

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & \tau_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

folgt nun nach 3.3.1 gerade

$$e^{-C_2} = \exp\left(-\frac{1}{2}(Q \cdot P - P \cdot Q)\right)$$

$$\begin{aligned}
&= \exp \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2}(\tau_2 - \tau_1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(\tau_3 - \tau_2) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2}(\tau_2 - \tau_1) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2}(\tau_3 - \tau_2) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Damit lässt sich nun leicht c_3 berechnen:

$$\begin{aligned}
c_3 &= U(e^{-C_2} \cdot L \cdot K \cdot J)_{1,n+1} \\
&= U \left(\frac{2}{3}\tau_1\tau_3 - \frac{1}{3}\tau_2 - \frac{1}{3}\tau_2\tau_3 - \frac{1}{3}\tau_1\tau_2 + \frac{1}{6}\tau_1 + \frac{1}{6}\tau_3 \right) \\
&= \frac{2}{3}bab - \frac{1}{3}aba - \frac{1}{3}abb - \frac{1}{3}bba + \frac{1}{6}baa + \frac{1}{6}aab.
\end{aligned}$$

3.3.3 Berechnung von c_4

Analog erhält man für $n = 4$ gerade

$$\begin{aligned}
c_4 &= -\frac{1}{24}aaab + \frac{1}{8}aaba + \frac{1}{8}aabb - \frac{1}{8}abaa - \frac{1}{4}abab - \frac{1}{8}abbb \\
&\quad + \frac{1}{24}baaa + \frac{1}{4}baba + \frac{3}{8}babb - \frac{1}{8}bbaa - \frac{3}{8}bbab + \frac{1}{8}bbba.
\end{aligned}$$

3.4 Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder

Der folgende Algorithmus zeigt die notwendigen Berechnungen, um das n te Folgeglied des Zassenhaus Produktes zu erhalten.

(Input) Ein $n \geq 2$ und $m = 2$.

(1) Berechnung der $(m+1) \times (m+1)$ Matrix J durch

$$J_{ij} = \frac{1}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} (1 + \tau_k).$$

(2) Berechnung der $(m+1) \times (m+1)$ Matrix K durch

$$K_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{(j-i)!}.$$

(3) Berechnung der $(m+1) \times (m+1)$ Matrix L durch

$$L_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{(j-i)!} \cdot \prod_{k=i}^{j-1} \tau_k.$$

(4) Berechnung von

$$C_m = e^{-C_{m-1}} \cdot e^{-C_{m-2}} \cdot \dots \cdot e^{-C_2} \cdot L \cdot K \cdot J,$$

dabei ist C_k für $k < m$ das spezielle k te Folgenglied des Zassenhaus Produktes, welches durch die speziellen $(m+1) \times (m+1)$ Matrizen P und Q mit $P_{ij} = \delta_{i+1,j}$ und $Q_{ij} = \delta_{i+1,j} \tau_i$ gegeben wird.

(5) Wenn $m < n$, dann $m = m+1$ und gehe zu (1), sonst weiter zu (6).

(6) Anwenden des Operators U auf das Element $(C_n)_{1,n+1}$.

(Output) Das n te Folgenglied in Wörterschreibweise.

Eine mögliche *Mathematica* Implementierung ist im Anhang unter 6.2 zu finden.

3.5 Vermutete Kommutatorschreibweise

Analog zur vermuteten Kommutatorschreibweise bei der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe kann auch zum Zassenhaus Produkt eine Vermutung formuliert werden:

Es sei

$$c_n = \sum_{W(t_1, \dots, t_n)} C(W) \cdot W(t_1, \dots, t_n)$$

ein Folgenglied des Zassenhaus Produktes, dabei ist $W(t_1, \dots, t_n)$ ein Wort aus den a 's und b 's und $C(W)$ ist der Koeffizient zu diesem Wort. Es gilt $t_i = a$, wenn an der i ten Stelle im Wort W ein a steht, sonst $t_i = b$. Weiter sei $n_a(W)$ die Anzahl der a 's und $n_b(W)$ die Anzahl der b 's im Wort W .

In Kommutatorschreibweise gilt dann

$$c_n = \sum_{\substack{W(t_1, \dots, t_n) \\ t_1=b, t_2=a}} \frac{1}{n_b(W)} \cdot C(W) \cdot [[\dots[[t_1, t_2], t_3], \dots], t_n] \quad (3.8)$$

und analog auch

$$c_n = \sum_{\substack{W(t_1, \dots, t_n) \\ t_1=a, t_2=b}} \frac{1}{n_a(W)} \cdot C(W) \cdot [[\dots[[t_1, t_2], t_3], \dots], t_n]. \quad (3.9)$$

Es wird also nur über die Wörter summiert, die mit ab bzw. die mit ba anfangen.

Diese aufgestellte Vermutung wurde mit der Anwendung von *Mathematica* bis zum 17ten Folgenglied überprüft und bis zum sechsten Folgenglied auch wieder mit den bekannten Ergebnissen aus [9] verglichen.

Beispiel

Für $n = 4$ und

$$\begin{aligned} c_4 = & -\frac{1}{24}aaab + \frac{1}{8}aaba + \frac{1}{8}aabb - \frac{1}{8}abaa - \frac{1}{4}abab - \frac{1}{8}abbb \\ & + \frac{1}{24}baaa + \frac{1}{4}baba + \frac{3}{8}babb - \frac{1}{8}bbaa - \frac{3}{8}bbab + \frac{1}{8}bbba. \end{aligned}$$

erhält man also

$$\begin{aligned} c_4 = & \frac{1}{24}[[[b, a], a], a] + \frac{1}{8}[[[b, a], b], a] + \frac{1}{8}[[[b, a], b], b] \\ = & -\frac{1}{24}[[[a, b], a], a] - \frac{1}{8}[[[a, b], a], b] - \frac{1}{8}[[[a, b], b], b]. \end{aligned}$$

4 Zassenhaus Produkt der q -Exponentialfunktion

Analog zur üblichen Exponentialfunktion $\exp(x) = e^x$ lässt sich auch eine q -Exponentialfunktion $e_q(x)$ über Potenzreihen definieren [siehe Kapitel 4.1.1].

Das Zassenhaus Produkt der q -Exponentialfunktion wurde schon von CIGLER in [7] untersucht und nach den Ergebnissen von QUESNE in [9] schreiben wir

$$e_q(a+b) = e_{q^{\alpha_0}}(a) \cdot e_{q^{\alpha_1}}(b) \cdot e_{q^{\alpha_2}}(c_2) \cdot e_{q^{\alpha_3}}(c_3) \cdot e_{q^{\alpha_4}}(c_4) \cdot \dots, \quad (4.1)$$

dabei sind $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots$ reelle Zahlen. Konventionell setzt man $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$. Durch eine unterschiedliche Wahl der Zahlen α_i für $i \geq 2$ erhält man dann auch unterschiedliche Funktionen $e_{q^{\alpha_i}}(x)$.

Die Folgeglieder c_i für $i \geq 2$ sollen nun mit der gleichen Methode berechnet werden, wie auch schon die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe und das Zassenhaus Produkt zuvor.

4.1 Grundlagen zur Berechnung der Folgeglieder

4.1.1 Die q -Exponentialfunktion

Es sei

$$[k]_q := \frac{1-q^k}{1-q} = \sum_{i=0}^{k-1} q^i = 1 + q + q^2 + \dots + q^{k-1}$$

und dazu sei die Fakultät

$$[k]_q! := [1]_q \cdot [2]_q \cdot \dots \cdot [k]_q \quad \text{mit} \quad [0]! := 1.$$

Die q -**Exponentialfunktion** e_q wird nun definiert durch

$$\begin{aligned} e_q(x) &:= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{[k]_q!} = 1 + x + \frac{1}{[2]_q} x^2 + \frac{1}{[2]_q [3]_q} x^3 + \dots \\ &= 1 + x + \frac{x^2}{(1+q)} + \frac{x^3}{(1+q)(1+q+q^2)} + \dots \end{aligned} \quad (4.2)$$

Diese Definition gilt auch wieder für $n \times n$ Matrizen A :

$$\begin{aligned} e_q(A) &:= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{[k]_q!} = I + A + \frac{1}{[2]_q} A^2 + \frac{1}{[2]_q [3]_q} A^3 + \dots \\ &= I + A + \frac{A^2}{(1+q)} + \frac{A^3}{(1+q)(1+q+q^2)} + \dots, \end{aligned} \quad (4.3)$$

dabei ist I wie üblich die $n \times n$ Einheitsmatrix.

Für den Konvergenzradius r dieser q -Exponentialfunktion gilt nach [9]

$$r = \begin{cases} [\infty]_q & \text{für } 0 < q < 1 \\ \infty & \text{für } q > 1 \end{cases}.$$

Es ist klar, dass für $q \rightarrow 1$ gerade $[n]_q = n$ gilt. Somit folgt sofort

$$\lim_{q \rightarrow 1} e_q(x) = e^x = \exp(x).$$

4.1.2 Weitere Definitionen

Es werden wieder die $(n+1) \times (n+1)$ Matrizen

$$P_{ij} = \delta_{i+1,j} \quad \text{und} \quad Q_{ij} = \delta_{i+1,j} \tau_i,$$

benötigt, welche schon in Kapitel 3.1.1 eingeführt wurden. Dabei sind also τ_1, \dots, τ_n gewöhnliche kommutierende Variablen und δ ist das Kroneckersymbol.

Außerdem wird auch der Operator U verwendet [siehe 3.1.3].

4.1.3 Die Idee zur Berechnung

Die Idee zur Berechnung der Folgeglieder ist nun ganz analog zur Idee bei dem üblichen Zassenhaus Produkt:

Die Folgeglieder c_n mit der q -Exponentialfunktion werden durch

$$e_q(a+b) = e_q(a) \cdot e_q(b) \cdot e_{q^{\alpha_2}}(c_2) \cdot e_{q^{\alpha_3}}(c_3) \cdot e_{q^{\alpha_4}}(c_4) \cdot \dots$$

gegeben, dabei sind $\alpha_2, \alpha_3, \dots$ reelle Zahlen. Dieses Produkt wird wieder für die speziellen nicht kommutierenden Matrizen P und Q berechnet und später durch den Operator U in beliebige Variablen a und b übersetzen.

4.2 Behauptung und Beweis

4.2.1 Satz

Sei $n \geq 2$, seien τ_1, \dots, τ_n beliebige kommutative Variablen, seien $\alpha_2, \alpha_3, \dots$ reelle Zahlen und seien P und Q die in 3.1.1 definierten $(n+1) \times (n+1)$

Matrizen. Weiter sei U der in 3.1.3 beschriebene Operator.

Dann ist

$$c_n = U \left((e_q^{\alpha_{n-1}}(C_{n-1}))^{-1} \dots e_q(Q)^{-1} \cdot e_q(P)^{-1} \cdot e_q(P+Q) \right)_{1,n+1} \quad (4.4)$$

das n te Folgenglied des Zassenhaus Produktes mit der in 4.1.1 eingeführten q -Exponentialfunktion, dabei ist C_m für $m < n$ jeweils das spezielle m te Folgenglied aus den nicht kommutierenden Matrizen P und Q .

4.2.2 Beweis

Der Beweis orientiert sich sehr stark am Beweis 3.2.2, daher sollen hier vor allem die wesentlichen unterschiede vorgestellt werden, die sich durch die q -Exponentialfunktion ergeben.

Teil 1: Produkte der Matrizen P und Q

Es ist bekannt, dass ein Produkt aus m Faktoren, die entweder P oder Q sind, eine $(n+1) \times (n+1)$ Matrix ist, die nur in der m ten Superdiagonalen Elemente hat, die nicht Null sind. Ein Produkt aus n Faktoren hat also nur oben rechts einen einzigen Eintrag, der ungleich Null ist. Ein Produkt aus k Faktoren mit $k > n$ ist also sofort die $(n+1) \times (n+1)$ Nullmatrix.

Teil 2: Zusammenhang zum Theorem von Quesne

In [9] wurde von QUESNE gezeigt, dass für eine ganz beliebige Wahl von $\alpha_2, \alpha_3, \dots$ [der so genannten **Basis**] das n te Folgenglied c_n des Zassenhaus Produktes mit der q -Exponentialfunktion eine Linearkombination von Wörtern der Länge n ist. Dieses Theorem ist also eine Analogie zu den Theoremen von Baker-Campbell-Hausdorff und Zassenhaus. Besonders interessant ist hier nun, dass die Wahl der reellen Zahlen $\alpha_2, \alpha_3, \dots$ wirklich ganz beliebig ist und man somit auch unterschiedliche Funktionen $e_q^{\alpha_i}$ erhält.

Es wird nun das n te Folgenglied C_n des Zassenhaus Produktes mit der q -Exponentialfunktion und den Matrizen P und Q betrachtet. Für dieses feste n gilt nach Teil 1 wieder

$$e_q^{\alpha}(C_k) = I$$

für $k > n$, da C_k eine Linearkombination aus Produkten mit $k > n$ Faktoren ist und diese Faktoren aus den Matrizen P und Q bestehen. Man erhält somit die grundlegende Gleichung

$$e_q(P+Q) = e_q(P) \cdot e_q(Q) \cdot e_q^{\alpha_2}(C_2) \cdot e_q^{\alpha_3}(C_3) \cdot \dots \cdot e_q^{\alpha_n}(C_n).$$

Durch linksseitiges anmultiplizieren der inversen Elementen ergibt sich

$$e_q^{\alpha_n}(C_n) = e_q^{\alpha_{n-1}}(C_{n-1})^{-1} \cdot \dots \cdot e_q(Q)^{-1} \cdot e_q(P)^{-1} \cdot e_q(P+Q).$$

Teil 3: Das obere rechte Element von $e_{q^{\alpha_n}}(C_n)$

Nach QUESNE ist also wieder bekannt, dass C_n nur oben rechts einen einzigen Eintrag hat, der ungleich Null ist. Damit und nach der Definition der q -Exponentialfunktion gilt also

$$e_{q^{\alpha_n}}(C_n) = I + C_n.$$

Somit folgt für das obere rechte Element wieder

$$\begin{aligned} (C_n)_{1,n+1} &= (e_{q^{\alpha_n}}(C_n))_{1,n+1} \\ &= (e_{q^{\alpha_{n-1}}}(C_{n-1})^{-1} \cdot \dots \cdot e_q(P+Q))_{1,n+1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Teil 4: Beweisabschluss

Betrachtet man nun Teil 4 aus Beweis 3.2.2 zusammen mit Gleichung (4.5), so erhält man die Behauptung 4.2.1. \square

4.3 Beispiele

Nach diesem Satz sollen nun die ersten beiden Folgeglieder berechnet werden.

4.3.1 Berechnung von c_2

Für $n = 2$ gilt

$$\begin{aligned} e_q(P)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 - \frac{1}{[2]_q} \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 - \frac{1}{(1+q)} \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ e_q(Q)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & 1 - \frac{\tau_1 \tau_2}{[2]_q} \\ 0 & 1 & -\tau_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & 1 - \frac{\tau_1 \tau_2}{(1+q)} \\ 0 & 1 & -\tau_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ e_q(P+Q) &= \begin{pmatrix} 1 & (1+\tau_1) & \frac{(1+\tau_1)(1+\tau_2)}{[2]_q} \\ 0 & 1 & (1+\tau_2) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & (1+\tau_1) & \frac{(1+\tau_1)(1+\tau_2)}{(1+q)} \\ 0 & 1 & (1+\tau_2) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Es folgt

$$e_q(Q)^{-1} e_q(P)^{-1} e_q(P+Q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\tau_1 - q\tau_2}{[2]_q} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\tau_1 - q\tau_2}{(1+q)} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und somit ergibt sich

$$c_2 = U \left(\frac{\tau_1 - q\tau_2}{[2]_q} \right) = \frac{1}{[2]_q} (ba - qab) = \frac{1}{(1+q)} (ba - qab).$$

4.3.2 Berechnung von c_3

Für $n = 3$ gilt

$$\begin{aligned} e_q(P)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 - \frac{1}{(1+q)} & -1 + \frac{2}{(1+q)} - \frac{1}{(1+q)(1+q+q^2)} \\ 0 & 1 & -1 & 1 - \frac{1}{(1+q)} \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ e_q(Q)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -\tau_1 & \tau_1\tau_2 - \frac{\tau_1\tau_2}{(1+q)} & -\tau_1\tau_2\tau_3 + \frac{2\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+q)} \\ 0 & 1 & -\tau_2 & -\frac{\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+q)(1+q+q^2)} \\ 0 & 0 & 1 & \tau_2\tau_3 - \frac{\tau_2\tau_3}{(1+q)} \\ 0 & 0 & 0 & -\tau_2 \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \\ e_q(P+Q) &= \begin{pmatrix} 1 & (1+\tau_1) & \frac{(1+\tau_1)(1+\tau_2)}{(1+q)} & \frac{(1+\tau_1)(1+\tau_2)(1+\tau_3)}{(1+q)(1+q+q^2)} \\ 0 & 1 & (1+\tau_2) & \frac{(1+\tau_2)(1+\tau_3)}{(1+q)} \\ 0 & 0 & 1 & (1+\tau_3) \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ e_{q^{\alpha_2}}(C_2)^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{\tau_1}{(1+q)} + \frac{q\tau_2}{(1+q)} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{\tau_2}{(1+q)} + \frac{q\tau_3}{(1+q)} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Es ist auffällig, dass α_2 in der Matrix $e_{q^{\alpha_2}}(C_2)^{-1}$ gar nicht vorkommt. Dies ergibt sich durch die q -Exponentialfunktion und ist auch bei Matrizen in höheren Ordnungen zu beobachten.

Es ergibt sich nun

$$\begin{aligned} c_3 &= U \left(e_{q^{\alpha_2}}(C_2)^{-1} \cdot e_q(Q)^{-1} \cdot e_q(P)^{-1} \cdot e_q(P+Q) \right)_{1,n+1} \\ &= \frac{1}{(1+q)(1+q+q^2)} \cdot \left(baa + bab - qaba - qabb + qbab - qbba - \right. \\ &\quad \left. q^2aba - q^2abb + q^2bab - q^2bba + q^3aab + q^3bab \right) \\ &= \frac{1}{(1+q+q^2)} \cdot \left(bab - qabb - qbba + q^2bab \right) + \\ &\quad \frac{1}{(1+q)(1+q+q^2)} \cdot \left(baa - qaba - q^2aba + q^3aab \right). \end{aligned}$$

Für $q \rightarrow 1$ erhält man

$$\begin{aligned} c_3 &= \frac{1}{3} \cdot (2bab - abb - bba) + \frac{1}{6} \cdot (baa - 2aba + aab) \\ &= \frac{2}{3}bab - \frac{1}{3}aba - \frac{1}{3}abb - \frac{1}{3}bba + \frac{1}{6}baa + \frac{1}{6}aab, \end{aligned}$$

was wieder mit dem Ergebnis der üblichen Exponentialfunktion übereinstimmt.

4.4 Algorithmus zur Berechnung der Folgeglieder

Der folgende Algorithmus berechnet das n te Folgeglied des Zassenhaus Produktes mit der q -Exponentialfunktion.

(Input) Ein $n \geq 2$ und $m = 2$.

(1) Berechnung der $(m+1) \times (m+1)$ Matrix P durch

$$P_{ij} = \delta_{i+1,j}.$$

(2) Berechnung der $(m+1) \times (m+1)$ Matrix Q durch

$$Q_{ij} = \delta_{i+1,j} \tau_i.$$

(3) Berechnung von

$$C_m = e_{q^{\alpha_{m-1}}}(C_{m-1})^{-1} \cdot \dots \cdot e_{q^{\alpha_2}}(C_2)^{-1} \cdot e_q(Q)^{-1} \cdot e_q(P)^{-1} \cdot e_q(P+Q),$$

dabei ist C_k für $k < m$ das spezielle k te Folgenglied des Zassenhaus Produktes, welches durch die $(m+1) \times (m+1)$ Matrizen P und Q gegeben wird.

(4) Wenn $m < n$, dann $m = m+1$ und gehe zu **(1)**, sonst weiter zu **(5)**.

(5) Anwenden des Operators U auf das Element $(C_n)_{1,n+1}$.

(Output) Das n te Folgeglied in Wörterschreibweise.

Eine mögliche *Mathematica* Implementierung ist im Anhang unter 6.3 zu finden.

5 Diskussion

Die Baker-Campbell-Hausdorff Reihe

Es wurde die einfache Methode von REINSCH aus [4] zur Berechnung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe untersucht und ausführlich dargestellt.

Die hierdurch erzielten Ergebnisse in Wörterscheibweise wurden anschließend in eine Kommutatordarstellung gebracht. Dazu kann entweder das Verfahren von DYNKIN verwendet werden, oder man benutzt die aufgestellte Vermutung, welche eine einheitliche und zufriedenstellende Kommutatorschreibweise liefert.

Zur Berechnung der Folgeglieder und zur Umwandlung der Wörterscheibweise in Kommutatordarstellung konnte ein effizientes *Mathematica* Programm geschrieben werden. Damit waren wir auch in der Lage, die vermutete Kommutatorschreibweise bis zum 18ten Folgeglied z_{18} auf ihre Gültigkeit zu überprüfen.

Das Zassenhaus Produkt

Ausgehend von der Methode von REINSCH konnten wir auf gleiche Art und Weise auch das Zassenhaus Produkt berechnen. Es war uns dadurch auch wieder möglich, eine effiziente *Mathematica* Implementierung unserer Methode zur Berechnung der Folgeglieder zu schreiben. In allen Literaturquellen wurde das Zassenhaus Produkt maximal bis zur sechsten Ordnung c_6 berechnet und angegeben, wir konnten nun Folgeglieder bis c_{15} und noch mehr berechnen.

Analog zur Baker-Campbell-Hausdorff Reihe stellten wir auch hier eine Vermutung auf, wie sich die Wörterscheibweise in Kommutatordarstellung umschreiben lässt. Auch damit erzielten wir eine zufriedenstellende Kommutatorschreibweise des Zassenhaus Produktes. Die Vermutung haben wir bis zum 17ten Folgeglied c_{17} auf ihre Gültigkeit hin untersucht.

Das q -Zassenhaus Produkt

Wir haben unsere grundlegende Methode auch auf die verallgemeinerte q -Exponentialfunktion übertragen können und dazu einen Algorithmus formu-

liert. Es ist zu bemerken, dass die Wahl der α_i für $i \geq 2$ ganz beliebig sein darf, jedoch erhalten wir nur recht unschöne Lösungen in Wörterschreibweise.

Es konnte im Allgemeinen auch keine Kommutatordarstellung erzielt werden, daher kann diesbezüglich auch keine Vermutung geäußert werden.

Der vorgestellte Algorithmus und die dazugehörige Implementierung ist also nur dann [aber auch gerade dann] sinnvoll, wenn eine Lösung in Wörterschreibweise für ein vorgegebenes q und für vorgegebene α_i für $i \geq 2$ berechnet werden soll.

6 Anhang

6.1 Implementierung der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe

Der in 2.4 vorgestellte Algorithmus kann nun auch einfach implementiert werden. Das folgende Beispiel zeigt ein *Mathematica* Programm, welches das n te Folgeglied der Baker-Campbell-Hausdorff Reihe für ein $n \geq 2$ berechnet.

Das Ergebnis wird hier in Wörterschreibweise wiedergegeben und es sind auch effizientere Implementierungen denkbar. Trotzdem sollte klar werden, wie einfach und kurz ein derartige Programm aussehen kann.

```
BCH[n_,x_,y_] := Module[{F,G,B,A,T,s,r,i,j,k},
  F = Table[1/(j-i)!, {i,n+1},{j,n+1}];
  G = Table[1/(j-i)!*Product[s[k],{k,i,j-1}], {i,n+1},{j,n+1}];
  B = IdentityMatrix[n+1];
  A = F.G-B;

  T = Expand[-Sum[B=-B.A; B/k, {k,n}][[1,n+1]]*Product[s[k],{k,n}]];

  Sum[
    r = (List @@ T[[k]]) /.
      {s[i_] -> ToString[x], s[i_]^2 -> ToString[y]};
    r[[1]]*(StringJoin @@ Take[r,-n]),
    {k,Length[T]}
  ]
];
```

Alle mit diesem Programm erzielten Ergebnisse wurden gründlich mit den Literaturwerten aus [9] und [6] verglichen und überprüft. Es wurde kein Fehler gefunden.

6.2 Implementierung des Zassenhaus Produktes

Das folgende Beispiel zeigt ein *Mathematica* Programm, welches sich an dem Algorithmus aus 3.4 orientiert und das n te Folgeglied des Zassenhaus Produktes für ein $n \geq 2$ berechnet.

```

ZH[n_,a_,b_] := Module[{C,L,K,J,P,Q,m,t,r,i,j,k,u,z},
  m = 2;
  NestList[(m++;
    L = Table[(-1)^(i+j)/(j-i)!*Product[t[k],{k,i,j-1}],
      {i,m+1},{j,m+1}];
    K = Table[(-1)^(i+j)/(j-i)!, {i,m+1},{j,m+1}];
    J = Table[1/(j-i)!*Product[(1+t[k]),{k,i,j-1}],{i,m+1},{j,m+1}];
    P = Table[KroneckerDelta[i+1,j], {i,m+1},{j,m+1}];
    Q = Table[KroneckerDelta[i+1,j]*t[i], {i,m+1},{j,m+1}];

    C[m] = Expand[
      ((Dot @@ Table[MatrixExp[-Sum[
        r = (List @@ C[m-u][[z]]) /. {t[i_] -> P, t[i_]^2 -> Q};
        r[[1]]*(Dot @@ Take[r,-Length[r]+1]), {z,Length[C[m-u]]}],
        {u,1,m-2})).L.K.J)[[1, m+1]]*Product[t[j],{j,m}
      ])&,
    C[2] = (t[1]^2*t[2])/2-(t[1]*t[2]^2)/2, n-2
  ];

  Sum[
    r = (List @@ C[n][[k]]) /.
      {t[i_] -> ToString[a], t[i_]^2 -> ToString[b]};
    r[[1]]*(StringJoin @@ Take[r,-n]),
    {k, Length[C[n]]}
  ]
];

```

Auch hier wurden wieder alle Ergebnisse gründlich mit den Literaturwerten aus [9] verglichen und überprüft. Es wurde wieder kein Fehler gefunden.

6.3 Implementierung des q -Zassenhaus Produktes

Das folgende *Mathematica* Programm orientiert sich am Algorithmus 4.4 und berechnet das n te Folgenglied des Zassenhaus Produktes mit der q -Exponentialfunktion für ein $n \geq 2$.

```

k[n_,q_] := Module[{i}, Sum[q^i, {i,0,n-1}]];

kf[n_,q_] := Module[{i}, Product[k[i,q], {i,n}]];

Eq[n_,X_,q_] := Module[{A,i},
  A = X;
  IdentityMatrix[n+1] + X + Sum[A=A.X; A/kf[i,q], {i,2,n}]
];

ZHq[n_,a_,b_,q_,List_] := Module[{C,L,K,J,P,Q,m,t,r,i,j,k,u,z},
  m = 2;
  NestList[(m++;

```

```

P = Table[KroneckerDelta[i+1,j], {i,m+1}, {j,m+1}];
Q = Table[KroneckerDelta[i+1,j]*t[i], {i,m+1}, {j,m+1}];

C[m] = Expand[(Dot @@ Table[Inverse[Eq[m,
  Sum[r = (List @@ C[m-u][[z]]) /. {t[i_] -> P, t[i_]^2 -> Q};
  Product[r[[i]], {i, Length[r]-(m-u)}]*(Dot @@ Take[r, -(m-u)]),
  {z, Length[C[m - u]]}], q^(List[[m-u-1]])]],
  {u, m-2})).(Inverse[Eq[m,Q,q]].Inverse[Eq[m,P,q]].
  Eq[m,P+Q,q]))[[1,m+1]]*Product[t[j],{j,m}]]&,
C[2] = (t[1]^2*t[2])/(1+q)-(q*t[1]*t[2]^2)/(1+q), n-2];

Sum[
  r = (List @@ C[n][[k]]) /.
    {t[i_] -> ToString[a], t[i_]^2 -> ToString[b]};
  Product[r[[i]], {i, Length[r]-n}]*(StringJoin @@ Take[r, -n]),
  {k, Length[C[n]]}
];

```

Die Liste `List` steht für die Werte der α_i . Mit `List={a[2],a[3],a[4]}` gilt zum Beispiel $\alpha_2 = a[2]$, $\alpha_3 = a[3]$ und $\alpha_4 = a[4]$.

Literaturverzeichnis

- [1] GOLDBERG, K.: The formal power series for $\log e^x e^y$. In: *Duke Mathematical Journal* 23 (1956), S. 13–21
- [2] MAGNUS, W.: On the Exponential Solution of Differential Equations for a Linear Operator. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics* VII (1954), S. 649–673
- [3] WILCOX, R.M.: Exponential Operators and Parameter Differentiation in Quantum Physics. In: *Journal of Mathematical Physics* 8 (1966), S. 962–982
- [4] REINSCH, M.W.: A simple expression for the terms in the Baker-Campbell-Hausdorff series. In: *Journal of Mathematical Physics* 41 (2000), 2434–2442. <http://arxiv.org/abs/math-ph/9905012/>
- [5] DYNKIN, E.B.: On the representation by means of commutators of the series $\log e^x e^y$ for noncommuting x, y . In: *Mathematic Mathematicheskii* 67 (1949), S. 155–162. – [in russisch]
- [6] OTEO, J.A.: The Baker-Campbell-Hausdorff formula and nested commutator identities. In: *Journal of Mathematical Physics* 32 (1991), S. 419–424
- [7] CIGLER, J.: Elementare q -Identitäten. In: *Séminaire Lotharingien de Combinatoire* 182 (1982), 261–267. <http://homepage.univie.ac.at/johann.cigler/s05cigler.pdf>
- [8] SRIDHAR, R. ; JAGANNATHAN, R.: On the q -analogues of the Zassenhaus formula for disentangling exponential operators. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 160 (2002), 297–305. http://arxiv.org/PS_cache/math-ph/pdf/0212/0212068.pdf
- [9] QUESNE, C.: Disentangling q -Exponentials: A General Approach. In: *International Journal of Theoretical Physics* 43 (2004), 545–559. <http://arxiv.org/abs/math-ph/0310038>