Verfahren zur Berechnung der Exponentialmatrix

Konrad Waldherr

- In einem Quantensystem ist folgendes Produkt von besonderer Bedeutung:

$$e^{-it_M H_M} \cdot \ldots e^{-it_k H_k} \cdot \ldots e^{-it_1 H_1}$$

Motivation

- In einem Quantensystem ist folgendes Produkt von besonderer Bedeutung:

$$e^{-it_M H_M} \cdot \ldots e^{-it_k H_k} \cdot \ldots e^{-it_1 H_1}$$

- Zur Berechnung dieses Produkts muss jeweils die Exponentialfunktion einer Matrix berechnet werden:

$$e^{-it_M H_M} \cdot \ldots \mathbf{e}^{-\mathbf{i}\mathbf{t}_\mathbf{k} \mathbf{H}_\mathbf{k}} \cdot \ldots e^{-it_1 H_1}$$

Motivation

- In einem Quantensystem ist folgendes Produkt von besonderer Bedeutung:

$$e^{-it_M H_M} \cdot \ldots e^{-it_k H_k} \cdot \ldots e^{-it_1 H_1}$$

- Zur Berechnung dieses Produkts muss jeweils die Exponentialfunktion einer Matrix berechnet werden:

$$e^{-it_M H_M} \cdot \ldots \mathbf{e^{-it_k H_k}} \cdot \ldots e^{-it_1 H_1}$$

- Frage: Wie berechnet man

$$e^{-it_k H_k}$$

Definition der Exponentialmatrix

- Ausgangspunkt: Taylorreihe der e-Funktion

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Definition der Exponentialmatrix

- Ausgangspunkt: Taylorreihe der e-Funktion

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

- Definition der Exponentialfunktion einer Matrix A

$$\exp(A) := e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$$

Definition der Exponentialmatrix

- Ausgangspunkt: Taylorreihe der e-Funktion

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

- Definition der Exponentialfunktion einer Matrix A

$$\exp(A) := e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$$

- Für eine Diagonalmatrix $D = diag(d_1, \ldots, d_n)$ gilt

$$e^D = diag(e^{d_1}, \ldots, e^{d_n})$$

Berechnung der Exponentialmatrix

- Naheliegend: Berechnung durch “abgeschnittene“ Taylor-Reihe:

$$\exp(A) \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!}$$

Berechnung der Exponentialmatrix

- Naheliegend: Berechnung durch “abgeschnittene“ Taylor-Reihe:

$$\exp(A) \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!}$$

- Diese Reihe konvergiert allerdings sehr langsam:

$$\| e^A - \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!} \| \leq \left(\frac{\| A \|^{n+1}}{(n+1)!} \right) \left(\frac{1}{1 - \| A \| / (n+2)} \right) \leq \delta$$

Berechnung der Exponentialmatrix

- Naheliegend: Berechnung durch “abgeschnittene“ Taylor-Reihe:

$$\exp(A) \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!}$$

- Diese Reihe konvergiert allerdings sehr langsam:

$$\| e^A - \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!} \| \leq \left(\frac{\| A \|^{n+1}}{(n+1)!} \right) \left(\frac{1}{1 - \| A \| / (n+2)} \right) \leq \delta$$

- Beispiel: $\| A \| = 100$ und $\delta = 10^{-6}$ liefert $n = 284$.

Berechnung der Exponentialmatrix

- Naheliegend: Berechnung durch “abgeschnittene“ Taylor-Reihe:

$$\exp(A) \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!}$$

- Diese Reihe konvergiert allerdings sehr langsam:

$$\| e^A - \sum_{k=0}^{n} \frac{A^k}{k!} \| \leq \left(\frac{\| A \|^{n+1}}{(n+1)!} \right) \left(\frac{1}{1- \| A \| /(n+2)} \right) \leq \delta$$

- Beispiel: $\| A \| = 100$ und $\delta = 10^{-6}$ liefert $n = 284$.
- Weiteres Problem: Numerische Instabilität

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Scaling and Squaring

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\| A \| /m \leq 1$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\| A \| /m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\| A \| /m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$
  - $\left(e^{A/m}\right)^m$ durch wiederholtes Quadrieren

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\| A \| /m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$
  - $\left(e^{A/m}\right)^m$ durch wiederholtes Quadrieren
- Padé-Approximation:

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\| A \| / m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$
  - $\left(e^{A/m}\right)^m$ durch wiederholtes Quadrieren
- Padé-Approximation:
  - reelle Padé-Approximation: $e^x \approx \frac{p(x)}{q(x)}$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\parallel A \parallel /m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$
  - $\left(e^{A/m}\right)^m$ durch wiederholtes Quadrieren
- Padé-Approximation:
  - reelle Padé-Approximation: $e^x \approx \frac{p(x)}{q(x)}$
  - $e^A \approx (q(A))^{-1} p(A)$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Scaling and Squaring
  - $e^A = \left(e^{A/m}\right)^m$
  - Wähle m, so dass $\parallel A \parallel /m \leq 1$
  - Wähle m als Zweierpotenz: $m = 2^k$
  - $\left(e^{A/m}\right)^m$ durch wiederholtes Quadrieren
- Padé-Approximation:
  - reelle Padé-Approximation: $e^x \approx \frac{p(x)}{q(x)}$
  - $e^A \approx (q(A))^{-1} p(A)$
  - Kombination mit Scaling and Squaring

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Chebyshev-Approximation

- Chebyshev-Approximation
  – Für $-1 \leq x \leq 1$ gilt die Entwicklung

$$e^{-\alpha x} = 2I_0(\alpha)T_0(\alpha x) + 2\sum_{j=1}^{\infty} T_j(\alpha x)I_j(\alpha)(-1)^j$$

- Chebyshev-Approximation
  - Für $-1 \leq x \leq 1$ gilt die Entwicklung

$$e^{-\alpha x} = 2I_0(\alpha)T_0(\alpha x) + 2\sum_{j=1}^{\infty} T_j(\alpha x)I_j(\alpha)(-1)^j$$

  - T_j: Chebyshev-Polynom 1. Art der Ordnung j

- Chebyshev-Approximation
  - Für $-1 \leq x \leq 1$ gilt die Entwicklung

$$e^{-\alpha x} = 2I_0(\alpha)T_0(\alpha x) + 2\sum_{j=1}^{\infty} T_j(\alpha x)I_j(\alpha)(-1)^j$$

  - T_j: Chebyshev-Polynom 1. Art der Ordnung j
  - I_j: Besselfunktion der Ordnung j

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Chebyshev-Approximation
  - Für $-1 \leq x \leq 1$ gilt die Entwicklung

$$e^{-\alpha x} = 2I_0(\alpha)T_0(\alpha x) + 2\sum_{j=1}^{\infty} T_j(\alpha x)I_j(\alpha)(-1)^j$$

  - T_j: Chebyshev-Polynom 1. Art der Ordnung j
  - I_j: Besselfunktion der Ordnung j
  - Transfer auf Matrizen: $r_0 = \| A \|$, $A_0 = A/r_0$

$$e^A = e^{r_0 A_0} = 2I_0(-r_0)T_0(-A) + 2\sum_{j=1}^{\infty} T_j(-A)I_j(-r_0)(-1)^j$$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über gewöhnliche Differentialgleichung:

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über gewöhnliche Differentialgleichung:
  - Gegeben ist das AWP

$$y' = Ay, \quad y(t_0) = y_0$$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über gewöhnliche Differentialgleichung:
  - Gegeben ist das AWP

$$y' = Ay, \quad y(t_0) = y_0$$

  - Die analytische Lösung lautet

$$y(t) = e^{(t-t_0)A} y_0$$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über gewöhnliche Differentialgleichung:
  - Gegeben ist das AWP

$$y' = Ay, \quad y(t_0) = y_0$$

  - Die analytische Lösung lautet

$$y(t) = e^{(t-t_0)A} y_0$$

  - e^A aus n Differentialgleichungen

$$y'_{(i)} = Ay_{(i)}, \quad y_{(i)}(0) = e_i$$

- Damit ergibt sich

$$e^A = \left(\begin{array}{c|c|c} y_1(1) & \ldots & y_n(1) \end{array} \right)$$

- Damit ergibt sich

$$e^A = \left(\; y_1(1) \; \middle| \; \ldots \; \middle| \; y_n(1) \; \right)$$

- Lösung der Differentialgleichungen:

- Damit ergibt sich

$$e^A = \left(\; y_1(1) \; \middle| \; \ldots \; \middle| \; y_n(1) \; \right)$$

- Lösung der Differentialgleichungen:
  - Einschrittverfahren (z.B. Runge-Kutta-Verfahren mit fester Schrittweite)

- Damit ergibt sich

$$e^A = \left(\; y_1(1) \,\Big|\, \ldots \,\Big|\, y_n(1) \; \right)$$

- Lösung der Differentialgleichungen:
  - Einschrittverfahren (z.B. Runge-Kutta-Verfahren mit fester Schrittweite)
  - Mehrschrittverfahren

- Damit ergibt sich

$$e^A = \left(\begin{array}{c|c|c} y_1(1) & \ldots & y_n(1) \end{array} \right)$$

- Lösung der Differentialgleichungen:
  - Einschrittverfahren (z.B. Runge-Kutta-Verfahren mit fester Schrittweite)
  - Mehrschrittverfahren
  - allgemeiner ODE-Solver

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über Eigenwert-Zerlegung

- Zugang über Eigenwert-Zerlegung
  - Seien $v_1, \ldots, v_n$ die Eigenvektoren von A zu den Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über Eigenwert-Zerlegung
  - Seien $v_1, \dots, v_n$ die Eigenvektoren von A zu den Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$
  - Dann gilt $A = V diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n) V^{-1}$

- Zugang über Eigenwert-Zerlegung
  - Seien $v_1, \dots, v_n$ die Eigenvektoren von A zu den Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$
  - Dann gilt $A = V diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n) V^{-1}$
  - Es folgt $e^A = e^{V diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n) V^{-1}} = V e^{diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n)} V^{-1}$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Zugang über Eigenwert-Zerlegung
  - Seien $v_1, \ldots, v_n$ die Eigenvektoren von A zu den Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$
  - Dann gilt $A = V diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) V^{-1}$
  - Es folgt $e^A = e^{V diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) V^{-1}} = V e^{diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)} V^{-1}$
  - Es ergibt sich $e^A = V diag(e^{\lambda_1}, \ldots, e^{\lambda_n}) V^{-1}$

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Splitting Methode

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Splitting Methode
  - Ausgangspunkt: Zerlegung $A = B + C$

- Splitting Methode
  - Ausgangspunkt: Zerlegung $A = B + C$
  - Die Funktionalgleichung $e^{x+y} = e^x e^y$ gilt für Matrizen im Allgemeinen nicht.

Weitere Verfahren zur Berechnung von e^A

- Splitting Methode
  - Ausgangspunkt: Zerlegung $A = B + C$
  - Die Funktionalgleichung $e^{x+y} = e^x e^y$ gilt für Matrizen im Allgemeinen nicht.
  - Es gilt legiglich die folgende Äquivalenz:

$$e^{B+C} = e^B e^C \iff BC = CB$$

- Splitting Methode
  - Ausgangspunkt: Zerlegung $A = B + C$
  - Die Funktionalgleichung $e^{x+y} = e^x e^y$ gilt für Matrizen im Allgemeinen nicht.
  - Es gilt legiglich die folgende Äquivalenz:

$$e^{B+C} = e^B e^C \iff BC = CB$$

  - Es gilt jedoch die Trotter-(Produkt-)Formel:

$$e^{B+C} = \lim_{m \to \infty} \left(e^{B/m} e^{C/m} \right)^m$$

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$
- Folgende Aspekte sind zu berücksichtigen:

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$
- Folgende Aspekte sind zu berücksichtigen:
  - Effizienz

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$
- Folgende Aspekte sind zu berücksichtigen:
  - Effizienz
  - Numerische Stabilität

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$
- Folgende Aspekte sind zu berücksichtigen:
  - Effizienz
  - Numerische Stabilität
  - Parallelisierbarkeit

Ziele der Diplomarbeit:

- Untersuchung und Implementierung der verschiedenen Verfahren zur Berechnung von e^{-itH} mit jeweils fester Matrix $H \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$
- Folgende Aspekte sind zu berücksichtigen:
  - Effizienz
  - Numerische Stabilität
  - Parallelisierbarkeit
  - Ausnutzen der speziellen Struktur von H

$$H = D + C = diag(d_1, \ldots, d_N) + C_1 \otimes \cdots \otimes C_n$$

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$
- Anwendung der Splitting-Methode

$$e^{-iHt} = e^{-it(D+C)} \approx \left(e^{-itD/m} e^{-itC/m}\right)^m$$

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$
- Anwendung der Splitting-Methode

$$e^{-iHt} = e^{-it(D+C)} \approx \left(e^{-itD/m} e^{-itC/m}\right)^m$$

- Direkte Berechnung von $e^{-itD/m}$ und $e^{-itC/m}$

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$
- Anwendung der Splitting-Methode

$$e^{-iHt} = e^{-it(D+C)} \approx \left(e^{-itD/m} e^{-itC/m}\right)^m$$

- Direkte Berechnung von $e^{-itD/m}$ und $e^{-itC/m}$
  – D ist Diagonalmatrix

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$
- Anwendung der Splitting-Methode

$$e^{-iHt} = e^{-it(D+C)} \approx \left(e^{-itD/m} e^{-itC/m}\right)^m$$

- Direkte Berechnung von $e^{-itD/m}$ und $e^{-itC/m}$
  - D ist Diagonalmatrix
  - Die Eigenvektoren von C sind gerade die Spalten von $F_2 \otimes \cdots \otimes F_2$

Wie kann man die Struktur von H ausnutzen?

- $H = D + C$
- Anwendung der Splitting-Methode

$$e^{-iHt} = e^{-it(D+C)} \approx \left(e^{-itD/m} e^{-itC/m}\right)^m$$

- Direkte Berechnung von $e^{-itD/m}$ und $e^{-itC/m}$
  - D ist Diagonalmatrix
  - Die Eigenvektoren von C sind gerade die Spalten von $F_2 \otimes \cdots \otimes F_2$
- Wiederholtes Quadrieren für $m = 2^k$

- Ausnutzung der Persymmetrie

- Ausnutzung der Persymmetrie
- Transformation von H auf reelle Matrix $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} A_1 & rE \\ rE & A_2 \end{pmatrix}$$

- Ausnutzung der Persymmetrie
- Transformation von H auf reelle Matrix $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} A_1 & rE \\ rE & A_2 \end{pmatrix}$$

- $\tilde{H}$ ist ähnlich zur Matrix

$$\begin{pmatrix} A_1 + A_2 + 2rE & 0 \\ 0 & A_1 + A_2 - 2rE \end{pmatrix}$$

- Ausnutzung der Persymmetrie
- Transformation von H auf reelle Matrix $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} A_1 & rE \\ rE & A_2 \end{pmatrix}$$

- $\tilde{H}$ ist ähnlich zur Matrix

$$\begin{pmatrix} A_1 + A_2 + 2rE & 0 \\ 0 & A_1 + A_2 - 2rE \end{pmatrix}$$

- Reduktion des Problems der EW/EV-Zerlegung auf zwei Matrizen halber Größe

Offene Fragen

- Kann die Struktur von H auch bei weiteren Verfahren (ODE,Padé,...) ausgenutzt werden?

Offene Fragen

- Kann die Struktur von H auch bei weiteren Verfahren (ODE,Padé,...) ausgenutzt werden?
- Wie pessimistisch sind die Konvergenzabschätzungen in unserem Fall?

Offene Fragen

- Kann die Struktur von H auch bei weiteren Verfahren (ODE,Padé,...) ausgenutzt werden?
- Wie pessimistisch sind die Konvergenzabschätzungen in unserem Fall?
- Wie lässt sich die Matrix-Matrix Multiplikation möglichst schnell berechnen?