Brown 運動の数学
確率過程・確率解析 (5)
経路積分

緒方　秀教

電気通信大学　大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻

2021 年 11 月 9 日（火）

はじめに

（一次元）Wiener 過程

- 自由 Brown 運動（酔歩）粒子の確率過程.
- $(t', x') \to (t, x \sim x + \mathrm{d}x)$ の遷移確率.

$$\mathscr{G}(t - t', x - x')\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t')}} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4D(t - t')} \right) \mathrm{d}x$$

$(\ D > 0\ :\ \text{const.}\ )$.

はじめに

（一次元）Wiener 過程

- 自由 Brown 運動（酔歩）粒子の確率過程.
- $(t', x') \to (t, x \sim x + \mathrm{d}x)$ の遷移確率.

$$\mathscr{G}(t - t', x - x')\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t')}} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4D(t - t')}\right) \mathrm{d}x$$

$$(D > 0 \ : \ \text{const.}).$$

$\mathscr{G}(t, x)$ は拡散方程式の Green 関数である.

$$\frac{\partial \mathscr{G}(t, x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \mathscr{G}(t, x)}{\partial x^2}, \quad \mathscr{G}(t = 0, x) = \delta(x).$$

$*$ 初期条件 $\psi(t = 0, x) = f(x)$ を満たす拡散方程式の解

$$\psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathscr{G}(t, x - x')f(x')\mathrm{d}x'.$$

今回の内容

1. 一般化した拡散型方程式.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)\psi,$$

$$V(t,x) \ : \ \text{given function}, \quad \lambda \ : \ \text{const.}$$

   Green 関数の経路積分表示（Feynman-Kac の公式）.

2. Feynman-Kac の公式の導出.
   Green 関数をある確率過程と結びつける.

3. Schrödinger 方程式（量子力学）.

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(t,x)\psi.$$

   伝搬関数（Green 関数）の経路積分表示.

動画に使用したスライドは下記 Web ページにアップロードしています.
http://www.uec-ogata-lab.jp/research/

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

拡散型方程式

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)u(t,x),$$

$V(t,x)$: given function (potential), $D > 0$, λ : parameter.

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

拡散型方程式

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)u(t,x),$$

$V(t,x)$: given function (potential), $D > 0$, λ : parameter.

拡散型方程式の Green 関数 $G(t,x)$

$$\frac{\partial G(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 G(t,x)}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)G(t,x),$$

$$G(t=0,x) = \delta(x).$$

初期条件 $u(t=0,x) = f(x)$ を満たす拡散型方程式の解.

$$u(t,x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(t,x-\xi)f(\xi)\mathrm{d}\xi.$$

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

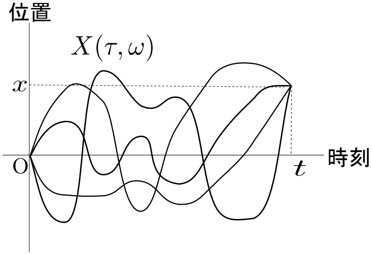
拡散型方程式の Green 関数は，確率過程の経路積分で表される．

Feynman-Kac の公式

拡散型方程式の Green 関数 $G(t,x)$ は次で与えられる．

$$G(t,x) = \int_{\Omega[t,x|0,0]} \exp\left[-\lambda \int_0^t V(\tau, X(\tau,\omega))\mathrm{d}\tau\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}[t,x|0,0]}(\omega),$$

- $\Omega[t,x|0,0]$: 2 点 $(0,0), (t,x)$ を結ぶ経路 $X(\tau,\omega)$ の集合．
- P_{W} : Wiener 過程の確率．



$*$ $\omega(\in \Omega[t,x|0,0])$: 経路を識別するためのラベル（と思えばよい）

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

拡散型方程式の Green 関数に対する Feynman-Kac の公式

$$G(t,x) = \int_{\Omega[t,x|0,0]} \exp\left[-\lambda \int_0^t V(\tau, X(\tau,\omega))\mathrm{d}\tau\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}[t,x|0,0]}(\omega),$$

Wiener 過程が経路 $X(\tau,\omega)$ を通る確率

$$\times\ \exp\left[-\lambda \int_0^t V(\tau, X(\tau,\omega))\mathrm{d}\tau\right]$$

これをすべての経路 $X(\tau,\omega)$ について足し合わせたものが拡散型方程式の Green 関数 $G(t,x)$ となる.

拡散型方程式の Green 関数に対する Feynman-Kac の公式

$$G(t,x)=\int_{\Omega[t,x|0,0]}\exp\left[-\lambda\int_0^t V(\tau,X(\tau,\omega))\mathrm{d}\tau\right]\mathrm{d}P_{\mathrm{W}[t,x|0,0]}(\omega),$$

Wiener 過程の確率 P_{W}.

$(t',x')\to(t,x\sim x+\Delta x)$ の遷移確率.

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t')}}\exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4D(t-t')}\right]\Delta x.$$

これを用いると，Feynman-Kac の公式は次のように書き直される.

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

Feynman-Kac 公式

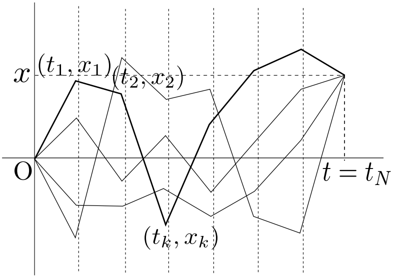
$$G(t,x) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{(4\pi D\Delta t)^{N/2}} \prod_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k$$
$$\times \exp\left[-\sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{1}{4D}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 + \lambda V(t_k, x_k)\right)\right],$$

- 時間間隔 $[0, t]$ を分割：$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N = t$,
$$t_k = k\Delta t \quad \left(k = 0, 1, 2, \ldots, N;\ \Delta t = \frac{t}{N} \right).$$
- $x_k = x(t_k) \quad (k = 0, 1, \ldots, N), \quad x_0 = 0, \quad x_N = x.$
- $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k \ (k = 0, 1, \ldots, N-1).$

(1/3) 拡散型方程式の Green 関数

Feynman-Kac 公式

$$G(t,x) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{(4\pi D\Delta t)^{N/2}} \prod_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k$$
$$\times \exp\left[-\sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{1}{4D}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 + \lambda V(t_k, x_k)\right)\right],$$



すべての経路について和（積分）を取る．

＝各時刻 t_k ($k = 1, \ldots, N-1$) で通る点 x_k の組み合わせについて和を取る．

Feynman-Kac 公式

$$G(t,x) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{(4\pi D\Delta t)^{N/2}} \prod_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k$$
$$\times \exp\left[-\sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{1}{4D}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 + \lambda V(t_k, x_k)\right)\right],$$

物理学で用いられる表記.

$$G(t,x) = \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(-\int_0^t \mathrm{d}\tau \left[\frac{1}{4D}\left(\frac{\mathrm{d}x(\tau)}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + \lambda V(\tau, x(\tau))\right]\right).$$

(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

これから Feynman-Kac の公式の導出を行う.

導出は 3 段に分けて行う.

1. ある確率過程を考えその確率分布を導出する.
2. 前段の確率過程を時間逆向き拡散方程式に結びつけ,
   その Green 関数を得る.
3. 時間の向きを反転して，もとの拡散型方程式の Green 関数を得る.

Step 1/3

次の確率微分方程式の初期値問題の解である確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})} = X^{(\mathrm{b})}(t, \omega)$ を考え，その確率分布を求める．

$$\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})} = \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})})\mathrm{d}t + \mathrm{d}B_t,$$
$$X^{(\mathrm{b})}(0, \omega) = y.$$

確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})}$ の粒子が

$$(t, X^{(\mathrm{b})}(t)) \to (t + \Delta t, X^{(\mathrm{b})}(t + \Delta t) \text{ 近傍（幅 } \Delta x))$$

と遷移する確率 $P_X(\Delta t)$ を求める．
確率微分方程式から

$$B(t + \Delta t) - B(t) = X^{(\mathrm{b})}(t + \Delta t) - X^{(\mathrm{b})}(t) - \alpha(t, X^{(\mathrm{b})}(t))\Delta t.$$

(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

$B(t+\Delta t)-B(t)$ は Wiener 過程の遷移確率に従うから，

$$P_X(\Delta t) = \frac{\Delta x}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} \exp\left(-\frac{1}{4D\Delta t}[B(t+\Delta t)-B(t)]^2\right).$$

$$B(t+\Delta t)-B(t) = X^{(\mathrm{b})}(t+\Delta t) - X^{(\mathrm{b})}(t) - \alpha(t, X^{(\mathrm{b})}(t))\Delta t$$

を代入して，

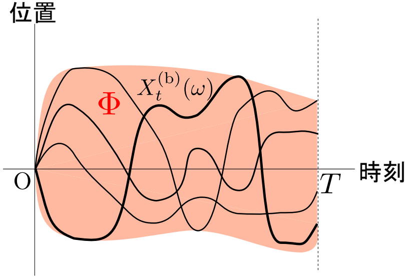
$$P_X(\Delta t) = \frac{\Delta x}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} \exp\left(-\frac{[X^{(\mathrm{b})}(t+\Delta t)-X^{(\mathrm{b})}(t)]^2}{4D\Delta t}\right)$$
$$\times \exp\left(\frac{1}{2D}\alpha(t, X^{(\mathrm{b})}(t))[X^{(\mathrm{b})}(t+\Delta t)-X^{(\mathrm{b})}(t)]^2 - \frac{1}{4D}\alpha(t, (X^{(\mathrm{b})}(t))^2\Delta t\right),$$

青字部分は Wiener 過程の微小遷移確率の式に一致するから，

$$P_X(\Delta t) = \exp\left(\frac{1}{2D}\alpha(t, X^{(\mathrm{b})}(t))\Delta X^{(\mathrm{b})}(t) - \frac{1}{4D}\alpha(t, X^{(\mathrm{b})}(t))^2\Delta t\right) P_{\mathrm{W}}(\Delta t).$$

確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})}$ の経路が下図のような経路の束 Φ に含まれる確率

$$P_X(\Phi) = \int_\Phi \exp\left[\frac{1}{2D}\int_0^T \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})}(\omega))\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})}(\omega) - \frac{1}{4D}\int_0^T \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})}(\omega))^2 \mathrm{d}t\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}}(\omega).$$



Φ：経路の束.

(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})}$ の経路が経路の束 Φ に含まれる確率

$$P_X(\Phi)$$
$$= \int_\Phi \exp\left[\frac{1}{2D}\int_0^T \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})}(\omega))\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})}(\omega) - \frac{1}{4D}\int_0^T \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})}(\omega))^2 \mathrm{d}t\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}}(\omega).$$

確率積分を書き直す．次のような関数 $A(t, x)$ を導入する．

$$A(t, x) \ : \ \frac{\partial A(t, x)}{\partial x} = \alpha(t, x) \quad \text{を満たす関数.}$$

伊藤の公式より，

$$\mathrm{d}A(t, X_t^{(\mathrm{b})}) = \frac{\partial A}{\partial t}\mathrm{d}t + \underbrace{\frac{\partial A}{\partial x}}_{\alpha} \mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\underbrace{(\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})})^2}_{2D\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial A}{\partial t} + D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\right)\mathrm{d}t + \alpha\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})}$$

であるから，

$$\int_0^T \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})}(t))\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})} = A(T, X^{(\mathrm{b})}(T)) - A(0, y) - \int_0^T \left(\frac{\partial A}{\partial t} + D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\right)\mathrm{d}t.$$

(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

（Step 1/3 結論）

確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})} = X^{(\mathrm{b})}(t,\omega)$：次の確率微分方程式の初期値問題の解

$$\mathrm{d}X_t^{(\mathrm{b})} = \alpha(t, X_t^{(\mathrm{b})})\mathrm{d}t + \mathrm{d}B_t,$$
$$X^{(\mathrm{b})}(0,\omega) = y.$$

$$\Downarrow$$

確率過程 $X_t^{(\mathrm{b})}$ の粒子が時間 $0 \le t \le T$ において経路の束 Φ を通る確率.

$$P_X(\Phi) = \int_\Phi \exp\left(\frac{1}{2D}[A(T, X^{(\mathrm{b})}(T)) - A(0,y)]\right)$$
$$\times \exp\left(-\frac{1}{2D}\int_0^T \left[\frac{\partial A}{\partial x} + D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)^2\right]\right)\mathrm{d}P_{\mathrm{W}}(\omega).$$

P_{W} ：Wiener 過程の確率分布,

$A(t,x)$ ：$\dfrac{\partial A(t,x)}{\partial x} = \alpha(t,x)$ なる関数.

（Step 1/3 終わり）

(2/3) Feynman-Kacの公式の導出

Step 2/3　確率過程 X_t を時間逆向き拡散型方程式に結びつける.

確率過程 X_t の粒子が経路の束 Φ を通る確率.

$$
\begin{aligned}
P_X(\Phi) = \int_\Phi & \exp\left(\frac{1}{2D}[A(T, X^{(\mathrm{b})}(T)) - A(0,y)]\right) \\
& \times \exp\left(-\frac{1}{2D}\int_0^T \left[\frac{\partial A}{\partial x} + D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)^2\right]\right) \mathrm{d}P_{\mathrm{W}}(\omega).
\end{aligned} \tag{1}
$$

ポテンシャル $\lambda V(t,x)$ に対し次を満たすように $A(t,x)$ をとることにする：

$$
\frac{\partial A}{\partial t} + D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)^2 = 2D\lambda V_{\mathrm{b}}(t,x) := 2D\lambda V(T-t, x).
$$

そして，次の関数を導入する：

$$
\psi_{\mathrm{b}}(t,x) := \exp\left[\frac{1}{2D}A(t,x)\right].
$$

単純計算より ψ_{b} は時間について逆向きの拡散型方程式を満たすことがわかる.
そして，(1) より ψ_{b} の経路積分表示が得られる，

(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

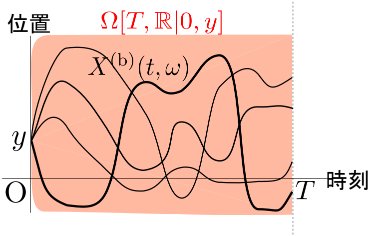
- 時間逆向き拡散型方程式

$$\frac{\partial \psi_{\mathrm{b}}(t,x)}{\partial t} = \left[-D\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda V_{\mathrm{b}}(t,x) \right] \psi_{\mathrm{b}}(t,x).$$

- ψ_{b} の経路積分表示.

$$\psi_{\mathrm{b}}(0,y) = \int_{\Omega[T,\mathbb{R}|0,y]} \psi_{\mathrm{b}}(T, X^{(\mathrm{b})}(T,\omega)) \times \exp\left[-\lambda \int_0^T V_{\mathrm{b}}(t, X^{(\mathrm{b})}(t,\omega))\mathrm{d}t \right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}[T,\mathbb{R}|0,y]}(\omega),$$

- $\Omega[T,\mathbb{R}|0,y]$: $t=0$ に点 y を出発する経路の集合.
- P_{W} : Wiener 過程の確率.



(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

- 次の「終期」条件を課す：$\psi_{\rm b}(T,x) = f(x)$.
- （時間シフト）時間始点を 0 から s ($0 < s < T$) にする.

$$\psi_{\rm b}({\color{blue}s},y) = \int_{\Omega[T,\mathbb{R}|{\color{blue}s},y]} f(X^{\rm (b)}(T,\omega)) \times \exp\left[-\lambda \int_{\color{blue}s}^{T} V_{\rm b}(t, X^{\rm (b)}(t,\omega)){\rm d}t\right] {\rm d}P_{{\rm W}[T,\mathbb{R}|{\color{blue}s},y]}(\omega)$$

時間を $s < t < T \to 0 < t < T - s$ とシフトする.

- 次の「終期」条件を課す：$\psi_{\mathrm{b}}(T,x)=f(x)$.
- （時間シフト）時間始点を 0 から s ($0<s<T$) にする.

$$\psi_{\mathrm{b}}(s,y)=\int_{\Omega[T-s,\mathbb{R}|0,y]} f(X^{(\mathrm{b})}(T-s,\omega)) \times \exp\left[-\lambda\int_0^{T-s} V_{\mathrm{b}}(t'+s,X^{(\mathrm{b})}(t'+s,\omega))\mathrm{d}t'\right]\mathrm{d}P_{\mathrm{W}[T-s,\mathbb{R}|0,y]}(\omega).$$

$\psi_{\mathrm{b}}(s,y)$ は次の時間逆向き拡散型方程式の終期値問題の解である.

$$\frac{\partial\psi_{\mathrm{b}}(s,y)}{\partial s}=\left[-D\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\lambda V_{\mathrm{b}}(s,y)\right]\psi_{\mathrm{b}}(s,y)\quad(0<s<T),$$

$$\psi_{\mathrm{b}}(T,y)=f(y).$$

とくに $f(x)=\delta(x)$ とすると，時間逆向き拡散型方程式の Green 関数を得る.

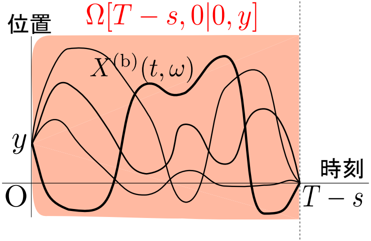
(2/3) Feynman-Kac の公式の導出

時間逆向き拡散型方程式の Green 関数 $G_{\rm b}(s,y)$.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial G_{\rm b}(s,y)}{\partial s} = \left[-D\dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \lambda V_{\rm b}(s,y) \right] G_{\rm b}(s,y), \\ G_{\rm b}(T,y) = \delta(y). \end{cases}$$

$$G_{\rm b}(s,y) := \int_{\Omega[T-s,0|0,y]} \exp\left[-\lambda V_{\rm b}(t'+s, X^{(\rm b)}(t'+s,\omega)) {\rm d}t' \right] {\rm d}P_{{\rm W}[T-s,0|0,y]}(\omega),$$

- $\Omega[T-s,0|0,y]$: 2 点 $(0,y),(T-s,0)$ を結ぶすべての経路の集合.
- $P_{\rm W}$: 2 点 $(0,y),(T-s,0)$ を結ぶ Wiener 過程の確率.



Step 2/3 終わり

(2/3) Feynman-Kacの公式の導出

Step 3/3　時間反転を行い，順方向拡散型方程式の Green 関数を得る．

2 点 $(0, y), (T - s, 0)$ を結ぶ Wiener 過程の確率分布 $P_{\mathrm{W}[t-s,0|0,y]}$ を規格化すれば（「補遺：ピン留め Wiener 過程」参照），時間反転不変性を得る．

$*$ 「補遺」→スライド PDF を下記 URL に置くので，それを参照してください．
http://www.uec-ogata-lab.jp/research

$t := T - s,\ y \to x$ とおく．

$$G(t,x) := G_{\mathrm{b}}(s,x) = G_{\mathrm{b}}(T-t,x),$$
$$X(t,\omega) := X^{(\mathrm{b})}(s,\omega) = X^{(\mathrm{b})}(T-t,\omega),$$
$$V(t,x) = V_{\mathrm{b}}(s,x) = V_{\mathrm{b}}(T-t,x).$$

$$G(t,x) = \int_{\Omega[t,0|0,x]} \exp\left[-\lambda \int_0^t V(t-t', X(t-t',\omega))\mathrm{d}t'\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}[t,0|0,x]}(\omega)$$

時間反転不変性を用いて

Step 3/3　時間反転を行い，順方向拡散型方程式の Green 関数を得る．

2 点 $(0, y), (T - s, 0)$ を結ぶ Wiener 過程の確率分布 $P_{\mathrm{W}[t-s,0|0,y]}$ を規格化すれば（「補遺：ピン留め Wiener 過程」参照），時間反転不変性を得る．

∗ 「補遺」→スライド PDF を下記 URL に置くので，それを参照してください．

http://www.uec-ogata-lab.jp/research

$t := T - s,\ y \to x$ とおく．

$$G(t,x) := G_{\mathrm{b}}(s,x) = G_{\mathrm{b}}(T-t,x),$$
$$X(t,\omega) := X^{(\mathrm{b})}(s,\omega) = X^{(\mathrm{b})}(T-t,\omega),$$
$$V(t,x) = V_{\mathrm{b}}(s,x) = V_{\mathrm{b}}(T-t,x).$$

$$G(t,x) = \int_{\Omega[t,x|0,0]} \exp\left[-\lambda \int_0^t V(t', X(t',\omega))\mathrm{d}t'\right] \mathrm{d}P_{\mathrm{W}[t,x|0,0]}(\omega).$$

$G(t,x)$ は順方向の拡散型方程式の Green 関数である：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial G(t,x)}{\partial t} = \left[D\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)\right] G(t,x), \\ G(0,x) = \delta(x). \end{cases}$$

Feynman-Kac の公式の証明終わり

(3/3) 量子力学における経路積分

量子力学：ミクロな世界（原子，分子，etc.）における物理学．

- すべてのモノは物質と波動の二側面をもっている．
- 波動関数 $\psi(t,x)$：モノの波動の側面を記述する．
  $|\psi(t,x)|^2 \mathrm{d}x$：モノが時刻 t に位置 $x \sim x + \mathrm{d}x$ にある確率．
- Schrödinger 方程式．

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi(t,x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(t,x)}{\partial x^2} + V(t,x)\psi(t,x).$$

Schrödinger 方程式の伝搬関数 $K(t_F, x_F; t_I, x_I)$．

$$\psi(t_F, x_F) = \int_{-\infty}^{\infty} K(t_F, x_F; t_I, x_I)\psi(t_I, x_I)\mathrm{d}x_I.$$

Schrödinger 方程式の伝搬関数の経路積分表示

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \right)^2 - V(t,x) \right] \right)$$

$$:= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t} \right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k$$

$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t} \right)^2 - V(t_k, x_k) \right] \right).$$

- 時間間隔 $[0, t]$ を分割：$t_I = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N = t_F$,

$$t_k = t_I + k\Delta t \quad \left(k = 0, 1, \ldots, N;\ \Delta t = \frac{t_F - t_I}{N} \right).$$

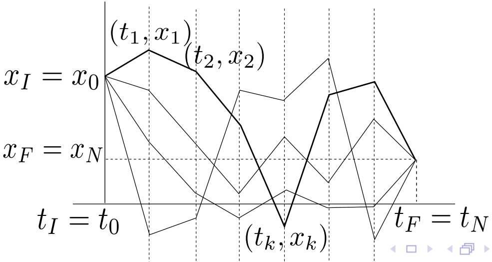
- $x_k = x(t_k) \quad (k = 0, 1, \ldots, N), \quad x_0 = x, \quad x_N = 0.$
- $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k \ (k = 0, 1, \ldots, N-1).$

Schrödinger 方程式の伝搬関数の経路積分表示

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(t,x)\right]\right)$$

$$:= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2}\prod_{k=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_k$$

$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\Delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(t_k, x_k)\right]\right).$$



(3/3) 量子力学における経路積分

Schrödinger 方程式の伝搬関数の経路積分表示

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(t,x)\right]\right)$$

$$:= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{N/2}\prod_{k=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_k$$

$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\Delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(t_k, x_k)\right]\right).$$

経路積分表示の導出は「補遺」に記した.

* 「補遺」はスライドを次の URL に載せるので，それを参照してください.

http://www.uec-ogata-lab.jp/research

量子力学の教科書.

- R. P. Feynman & A. R. Hibbs （訳：北原和夫）：
  量子力学と経路積分（新版），みすず書房，2017 年.
- 桂太郎：経路積分　例題と演習，裳華房，2015 年.

(3/3) 量子力学における経路積分

拡散型方程式との対応.

- 拡散型方程式

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)u(t,x),$$

$$G(t,x) = \int \mathscr{D}x(t)\exp\left(-\int_0^t \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{4D}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + \lambda V(\tau,x)\right]\right).$$

- Schrödinger 方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi(t,x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(t,x)}{\partial x^2} + V(t,x)\psi(t,x),$$

$$K(t_F,x_F;t_I,x_I) = \int \mathscr{D}x(t)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F}\mathrm{d}t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(t,x)\right]\right).$$

拡散型方程式→ Schrödinger 方程式：形式的に次の置き換えをする.

$$t \to \frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\ (\text{虚数時間}),\quad D \to \frac{\hbar^2}{2m}\quad (\lambda \to 1).$$

まとめ

1. 拡散型方程式.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \lambda V(t,x)\psi,$$

$$V(t,x)\ :\ \text{given function (potential)},\quad \lambda\ :\ \text{const.}$$

   Green 関数の経路積分表示（Feynman-Kac の公式）.

2. Feynman-Kac の公式の導出.
   Green 関数をある確率過程と結びつける.

3. Schrödinger 方程式（量子力学）.

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(t,x)\psi.$$

   伝搬関数（Green 関数）の経路積分表示.
   拡散型方程式との関連（形式的に「虚数時間」への置き換え）.

（補遺）ピン留め Wiener 過程

時間の両端における位置 $X(t=0,\omega), X(t=T,\omega)$ を固定した Wiener 過程を考える．

1. $Y(t=0,\omega)=Y(t=T,\omega)=0$ なる Wiener 過程 $Y(t,\omega)$.
   $Y(t)=x\sim x+\Delta x$ となる確率 $\mathscr{G}_{Y,\mathrm{pin}}(t,x)\Delta x$,

$$\mathscr{G}_{Y,\mathrm{pin}}(t,x)=\frac{\mathcal{G}(t,x)\mathcal{G}(T-t,-x)}{\mathcal{G}(T,0)},\quad \mathcal{G}(t,x):=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right).$$

簡単な計算により，

$$\mathscr{G}_{\mathrm{pin}}(t,x)=\sqrt{\frac{T}{4\pi Dt(T-t)}}\exp\left(-\frac{Tx^2}{4Dt(T-t)}\right).$$

（補遺）ピン留め Wiener 過程

2. $X(t=0,\omega)=x_0, X(t=T,\omega)=x_T$ なる Wiener 過程 $X(t,\omega)$.

$$Y(t,\omega) := X(t,\omega) - l(t), \quad l(t) := x_0 + (x_T - x_0)\frac{t}{T}$$

とおくと，$Y(t,\omega)$ は $Y(t=0)=Y(t=T)=0$ とピン留めされた Wiener 過程である．

$X(t,\omega)=x \sim x+\Delta x$ となる確率 $\mathscr{G}_{X,\mathrm{pin}}(t,x)\Delta x$,

$$\mathscr{G}_{X,\mathrm{pin}}(t,x) = \sqrt{\frac{T}{4\pi Dt(T-t)}}\exp\left(-\frac{T(x-l(t))^2}{4Dt(T-t)}\right).$$

Schrödinger 方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi, \quad \widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \text{Hamiltonian.}$$

伝搬関数

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) := \langle x_F | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t_F - t_I)\widehat{H}\right) | x_I \rangle,$$

$$\psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_I \, K(t, x; t_I, x_I)\psi(t_I, x_I).$$

これから伝搬関数 $K(t_F, x_F; t_I, x_I)$ の経路積分表示を求める．
時間 $t_I \le t \le t_F$ を分割する．

$$t_I = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N = t_I,$$
$$t_k = t_I + k\Delta t \quad \left(k = 0, 1, \ldots, N;\ \Delta t = \frac{t_F - t_I}{N} \right).$$

$$\begin{aligned}
&K(t_F, x_F; t_I, x_I)\\
&= \langle x_N | \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} \cdots \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} | x_0 \rangle\\
&\quad \left(\textstyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k = 1 \text{ を挿入して} \right)\\
&= \langle x_N | \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} | x_{N-1} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_{N-1} \langle x_{N-1} | \cdots | x_2 \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \langle x_2 | \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} | x_1 \rangle\\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \langle x_1 | \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H}} | x_0 \rangle\\
&\simeq \langle x_N | \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H} \right) | x_{N-1} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_{N-1} \langle x_{N-1} | \cdots | x_2 \rangle\\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \langle x_2 | \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H} \right) | x_1 \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \langle x_1 | \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \widehat{H} \right) | x_0 \rangle
\end{aligned}$$

（補遺）量子力学における経路積分

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \prod_{k=0}^{N-1} \langle x_{k+1}| \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta t \widehat{H}\right) |x_k\rangle, \quad \widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

$$\langle x_{k+1}|x_k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_k \langle x_{k+1}|p_k\rangle\langle p_k|x_k\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_k \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k(x_{k+1} - x_k)\right),$$

$$\begin{aligned}
\langle x_{k+1}|\widehat{H}|x_k\rangle &= \langle x_{k+1}| \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right) |x_k\rangle \\
&= \langle x_{k+1}| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_k |p_k\rangle\langle p_k| \frac{\hat{p}^2}{2m}|x_k\rangle + \langle x_{k+1}| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_k |p_k\rangle\langle p_k|V(\hat{x})|x_k\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_k}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k(x_{k+1} - x_k)\right)\left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k)\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_k}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k(x_{k+1} - x_k)\right) H(x_k, p_k),
\end{aligned}$$

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_k}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k(x_{k+1} - x_k)\right) \underbrace{\left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta t H(x_k, p_k)\right)}_{\simeq \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta t H(x_k, p_k))}.$$

Schrödinger 方程式の伝搬関数の経路積分表示

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_k}{2\pi\hbar}$$

$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[p_k \frac{\Delta x_k}{\Delta t} - H(x_k, p_k) \right] \right)$$

$$=: \int \mathscr{D}x \mathscr{D}p \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t [p(t)\dot{q}(t) - H(x(t), p(t))] \right).$$

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

により，p_k 積分を先に実行すると次を得る．

Schrödinger 方程式の伝搬関数の経路積分表示

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar \Delta t}\right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_k$$
$$\times \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)\right]\right)$$
$$=: \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x)\right]\right).$$

$$K(t_F, x_F; t_I, x_I) = \int \mathscr{D}x(t) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x]\right),$$

作用 $S[x] = \int_{t_I}^{t_F} \mathrm{d}t\, L(x, \dot{x})$, Lagrangian $L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$.