Gauss 過程に対する経路積分－時間分割近似法による経路空間上の解析として

熊ノ郷　直人（工学院大学）[1]

1　序

1948 年，R. P. Feynman は Schrödinger 方程式

$$\left(i\hbar\partial_T+\frac{\hbar^2}{2}\triangle-V(T,x)\right)u(T,x)=0\,,\quad T>0\,,\quad x\in\mathbf{R}^d$$

の基本解の積分核 $K(T,x,x_0)$ を経路積分を用いて

$$K(T,x,x_0)=\int e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^T\frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2dt}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T V(t,\gamma)dt}\mathcal{D}[\gamma]$$

と表現した．ここで $\gamma:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ は $\gamma(0)=x_0,\,\gamma(T)=x$ となる経路である．Feynman は経路積分 $\displaystyle\int\sim\mathcal{D}[\gamma]$ を“ すべての経路に関する新しい和 ”であると主張し，有限次元積分の極限として説明した．この方法は現在，時間分割近似法と呼ばれている．さらに Feynman は一般の汎関数 $F[\gamma]$ を被積分汎関数とする経路積分を考え，経路積分と汎関数微分 $(DF)[\gamma][\eta]$ からなる経路空間上の新しい解析学を提案した．

しかし 1960 年，R. H. Cameron は経路積分の測度 $e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^T\frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2dt}\mathcal{D}[\gamma]$ が数学的に存在しないことを証明した．こうした不備にもかかわらず，経路積分は，Hamilton 形式で定式化されていた量子力学に Lagrange 形式という別の視点を与え，その発展に貢献してきた．

さて熱方程式

$$\left(\partial_T-\frac{1}{2}\triangle+V(T,x)\right)u(T,x)=0\,,\quad T>0\,,\quad x\in\mathbf{R}^d$$

の場合は Wiener 測度 $e^{-\int_0^T\frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2dt}\mathcal{D}[\gamma]$ が存在する．P. Malliavin や T. Hida は Wiener 測度を用いて，経路空間上の解析学の構成に成功している．

今回の講演（論文 [1]）では，Wiener 測度とは別のアプローチとして，時間分割近似法をガウス過程に適用し，一般の汎関数 $F[\gamma]$ を被積分汎関数とする経路積分

$$\int e^{-S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]$$

の存在を証明する．ここで，今後何度も用いるため，

$$S[\gamma]=\int_0^T\frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2dt$$

とおく．正確に言えば，時間分割近似法が始点 $x\in\mathbf{R}^d$ と終点 $x_0\in\mathbf{R}^d$ に関して広義一様収束する汎関数 $F[\gamma]$ の一般的なクラス $\mathcal{F}$ を与える．さらに，この経路積分において，微分積分学の基本定理，Riemann(-Stieltjes) 積分や lim との順序交換定理，平行移動 $\gamma+\eta$ や直交変換 $Q\gamma$ のもとでの自然な性質，汎関数微分 $(DF)[\gamma][\eta]$ に関する部分積分やテイラー展開が成立することを証明する．

[1]科学研究費補助金基盤 (C)21540196 の援助を受けています

2　ガウス過程に対する経路積分の定義と存在

経路積分が定義できる汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ を構成した点が本質であるため，まず例を挙げよう．汎関数のクラス $\mathcal{F}$ は以下の基本的な汎関数 $F[\gamma]$ を含む.

例 1 (汎関数の例)

(1) $\kappa \geq 0$ とする．$B : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対して $\partial_x^\alpha B(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在して $|\partial_x^\alpha B(t,x)| \leq C_\alpha e^{\kappa|x|}$ をみたすとする．このとき，時刻 t での値

$$F[\gamma] = B(t, \gamma(t)) \in \mathcal{F}\,.$$

特に，$F[\gamma] \equiv 1 \in \mathcal{F}$ である．また，*Riemann(-Stieltjes)* 積分

$$F[\gamma] = \int_{T'}^{T''} B(t, \gamma(t))dt \in \mathcal{F}\,.$$

(2) $B : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対して $\partial_x^\alpha B(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在して $|\partial_x^\alpha B(t,x)| \leq C_\alpha$ をみたすとする．このとき，

$$F[\gamma] = e^{\int_{T'}^{T''} B(t,\gamma(t))dt} \in \mathcal{F}\,.$$

(3) $V : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}$ は非負整数 m と正の定数 c が存在し $V(t,x) \geq c(1+|x|)^m$ をみたし，任意の多重指数 α に対し $\partial_x^\alpha V(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し $|\partial_x^\alpha V(t,x)| \leq C_\alpha (1+|x|)^m$ をみたすとする．このとき，$0 \leq T' \leq T'' \leq T$ に対し，

$$F[\gamma] = e^{-\int_{T'}^{T''} V(t,\gamma(t))dt} \in \mathcal{F}\,.$$

(4) $\kappa \geq 0$ とする．${}^t(\partial_x Z) = (\partial_x Z)$ となる $Z : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{C}^d$ は $\partial_x^\alpha Z(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在して $|\partial_x^\alpha Z(t,x)| + |\partial_x^\alpha \partial_t Z(t,x)| \leq C_\alpha e^{\kappa|x|}$ をみたすとする．このとき，経路に沿った線積分

$$F[\gamma] = \int_{T'}^{T''} Z(t, \gamma(t)) \cdot d\gamma(t) \in \mathcal{F}\,.$$

注意 1 例 1 (3) の経路積分

$$K(T,x,x_0) = \int e^{-S[\gamma]} F[\gamma] \mathcal{D}[\gamma] = \int e^{-\int_0^T \frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2 dt - \int_0^T V(t,\gamma)dt} \mathcal{D}[\gamma]$$

は熱方程式

$$\left(\partial_T - \frac{1}{2}\triangle + V(T,x)\right) u(T,x) = 0\,, \quad T > 0\,, \quad x \in \mathbf{R}^d$$

の基本解の積分核となり，確率論における *Feynman-Kac* の公式に相当する．

汎関数のクラス $\mathcal{F}$ の定義は後の節 § 4 で述べる．次の定理 1 を例 1 に適用すれば，経路積分可能な多くの汎関数 $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ を創ることができるからである．

定理 1 任意の $F[\gamma]$, $G[\gamma] \in \mathcal{F}$, 任意の折れ線経路 $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$, 任意の $d \times d$ 型実行列 P に対し，

(1) $F[\gamma] + G[\gamma] \in \mathcal{F}$, $F[\gamma]G[\gamma] \in \mathcal{F}$.

(2) $F[\gamma + \eta] \in \mathcal{F}$, $F[P\gamma] \in \mathcal{F}$.

(3) $(DF)[\gamma][\eta] \in \mathcal{F}$.

注意 2 (汎関数微分) 折れ線経路 $\gamma : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ と $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ に対し，η 方向の汎関数微分 $(DF)[\gamma][\eta]$ を

$$(DF)[\gamma][\eta] = \frac{d}{d\theta} F[\gamma + \theta\eta]\bigg|_{\theta=0}$$

とする．

さて時間分割近似法で Gauss 過程に対する経路積分を定義する．

$\Delta_{T,0} : T = T_{J+1} > T_J > \cdots > T_1 > T_0 = 0$ を区間 $[0,T]$ の任意の分割とし，$t_j = T_j - T_{j-1}$, $|\Delta_{T,0}| = \max_{1 \le j \le J+1} t_j$ とする．$x = x_{J+1}$ とおき，$x_J, \ldots, x_1 \in \mathbf{R}^d$ とし，$\gamma_{\Delta_{T,0}}$ を (T_j, x_j) と (T_{j-1}, x_{j-1}) を線分で結ぶ折れ線経路とする（図 1）．

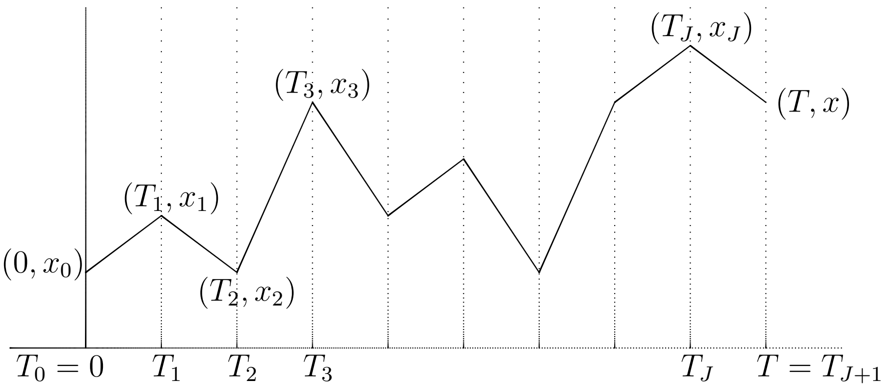

図 1:

汎関数 $S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$ と $F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$ は x_{J+1}, x_J, $\cdots$, x_1, x_0 の関数 $S_{\Delta_{T,0}}$, $F_{\Delta_{T,0}}$ となる．

$$\begin{aligned} S[\gamma_{\Delta_{T,0}}] &= S_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0) = \int_0^T \frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma_{\Delta_{T,0}}}{dt}\right|^2 dt = \sum_{j=1}^{J+1} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2t_j}, \\ F[\gamma_{\Delta_{T,0}}] &= F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0). \end{aligned}$$

定理 2 (経路積分の定義と存在) 任意の $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ に対し，

$$\int e^{-S[\gamma]} F[\gamma] \mathcal{D}[\gamma] \equiv \lim_{|\Delta_{T,0}| \to 0} \prod_{j=1}^{J+1} \left(\frac{1}{2\pi t_j}\right)^{d/2} \int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{-S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]} F[\gamma_{\Delta_{T,0}}] \prod_{j=1}^{J} dx_j$$

は始点と終点 $(x, x_0) \in \mathbf{R}^{2d}$ に関して広義一様収束する．つまり *well-defined* である．

3　積分としての性質

定理 3 (微分積分学の基本定理) $\kappa \geq 0,\ 0 \leq T' \leq T'' \leq T$ とする．
$f(t,x) : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対して $\partial_x^\alpha f(t,x),\ \partial_x^\alpha \partial_t f(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在して $|\partial_x^\alpha f(t,x)| + |\partial_x^\alpha \partial_t f(t,x)| \leq C_\alpha e^{\kappa|x|}$ をみたす．このとき

$$\int e^{-S[\gamma]}\Big(f\left(T'', \gamma(T'')\right) - f\left(T', \gamma(T')\right)\Big)\mathcal{D}[\gamma]$$
$$= \int e^{-S[\gamma]}\Big(\int_{T'}^{T''} (\partial_x f)(t,\gamma(t)) \cdot d\gamma(t) + \int_{T'}^{T''} (\partial_t f)(t,\gamma(t))dt\Big)\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

定理 4 (積分との順序交換) $\kappa \geq 0,\ 0 \leq T' \leq T'' \leq T$ とする．
$B(t,x) : [0,T] \times \mathbf{R}^d \to \mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対して $\partial_x^\alpha B(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在して $|\partial_x^\alpha B(t,x)| \leq C_\alpha e^{\kappa|x|}$ とする．このとき

$$\int_{T'}^{T''}\left(\int e^{-S[\gamma]} B(t,\gamma(t))\mathcal{D}[\gamma]\right)dt = \int e^{-S[\gamma]}\left(\int_{T'}^{T''} B(t,\gamma(t))dt\right)\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

定理 5 (平行移動) 任意の $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ と任意の折れ線経路 $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ に対し，

$$\int_{\gamma(0)=x_0,\gamma(T)=x} e^{-S[\gamma+\eta]} F[\gamma+\eta]\mathcal{D}[\gamma] = \int_{\gamma(0)=x_0+\eta(0),\gamma(T)=x+\eta(T)} e^{-S[\gamma]} F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

定理 6 (直交変換) 任意の $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ と任意の $d \times d$ 型直交行列 Q に対し，

$$\int_{\gamma(0)=x_0,\gamma(T)=x} e^{-S[Q\gamma]} F[Q\gamma]\mathcal{D}[\gamma] = \int_{\gamma(0)=Qx_0,\gamma(T)=Qx} e^{-S[\gamma]} F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

定理 7 (汎関数微分に関する部分積分) 任意の $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ と $\eta(0) = \eta(T) = 0$ となる任意の折れ線経路 $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ に対し

$$\int e^{-S[\gamma]}(DF)[\gamma][\eta]\mathcal{D}[\gamma] = \int e^{-S[\gamma]}(DS)[\gamma][\eta]F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

定理 8 (汎関数微分に関するテイラー展開) 任意の $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ と任意の折れ線経路 $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ に対し，

$$\int e^{-S[\gamma]} F[\gamma+\eta]\mathcal{D}[\gamma] = \sum_{l=0}^{L} \frac{1}{l!}\int e^{-S[\gamma]}(D^l F)[\gamma][\eta]\cdots[\eta]\mathcal{D}[\gamma]$$
$$+ \int_0^1 \frac{(1-\theta)^L}{L!}\int e^{-S[\gamma]}(D^{L+1}F)[\gamma+\theta\eta][\eta]\cdots[\eta]\mathcal{D}[\gamma]d\theta\,.$$

4　汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ の仮定

定義 1 (高階の汎関数微分) 任意の分割 $\Delta_{T,0}$ に対し，

$$F[\gamma_{\Delta_{T,0}}] = F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0) \in C^\infty(\mathbf{R}^{d(J+2)})$$

とする．任意の折れ線経路 $\gamma : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ と $\eta_l : [0,T] \to \mathbf{R}^d$, $l = 1, 2, \ldots, L$ に対して，高階の汎関数微分 $(D^L F)[\gamma] \prod_{l=1}^{L} [\eta_l]$ を以下で定義する．

$$(D^L F)[\gamma] \prod_{l=1}^{L} [\eta_l] = (\prod_{l=1}^{L} \frac{\partial}{\partial \theta_l}) F[\gamma + \sum_{l=1}^{L} \theta_l \eta_l] \Big|_{\theta_1 = \cdots = \theta_L = 0}.$$

定義 2 (汎関数のクラス) 汎関数 $F[\gamma]$ が仮定 1 をみたすとき， $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ とする．

仮定 1 $\kappa \geq 0$, $\rho(t)$ は有界変動関数, $|\rho|(t)$ は全変動とする．任意の非負整数 M に対し，正の定数 A_M, X_M が存在し，

$$|(D^{\sum_{j=0}^{J+1} L_j} F)[\gamma] \prod_{j=0}^{J+1} \prod_{l_j=1}^{L_j} [\eta_{j,l_j}]| \leq A_M (X_M)^{J+1} e^{\kappa ||\gamma||} \prod_{j=0}^{J+1} \prod_{l_j=1}^{L_j} ||\eta_{j,l_j}||,$$

$$|(D^{1+\sum_{j=0}^{J+1} L_j} F)[\gamma][\eta] \prod_{j=0}^{J+1} \prod_{l_j=1}^{L_j} [\eta_{j,l_j}]| \leq A_M (X_M)^{J+1} e^{\kappa ||\gamma||} \int_0^T |\eta(t)| d|\rho|(t) \prod_{j=0}^{J+1} \prod_{l_j=1}^{L_j} ||\eta_{j,l_j}||$$

が，任意の分割 $\Delta_{T,0}$, 任意の折れ線経路 $\gamma : [0,T] \to \mathbf{R}^d$, $\eta : [0,T] \to \mathbf{R}^d$，任意の $L_j = 0, 1, \ldots, M$, $[T_{j-1}, T_{j+1}]$ に台をもつ任意の折れ線経路 $\eta_{j,l_j} : [0,T] \to \mathbf{R}^d$, $l_j = 1, 2, \ldots, L_j$（図 2）で成立する．$||\gamma|| = \max_{0 \leq t \leq T} |\gamma(t)|$ とする．

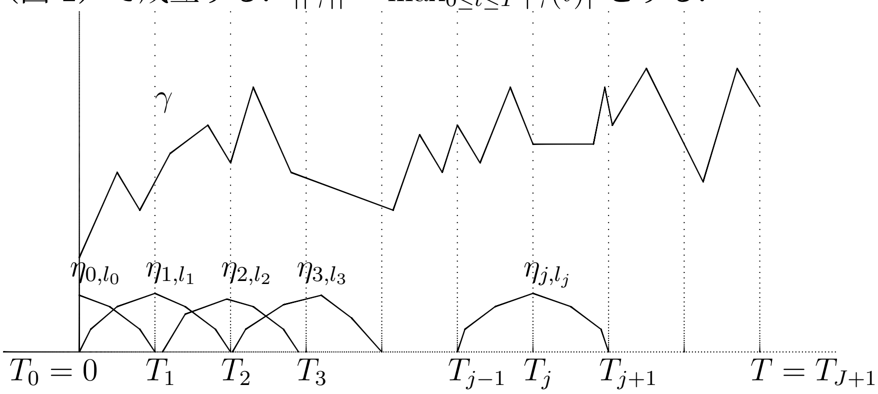

図 2:

参考文献

[1] N. Kumano-go, Path integrals for Gaussian processes as analsis on path space by time slicing approximation, *Integration: Mathematical Theory and Applications.* **1** No.3 (2010), 253–278. 以下のサイトから無料ダウンロード可能

https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=20199