

偏微積分方程式と経路積分と確率過程との関係

横田 紀男

(1956年5月受付)

Partial Integro-Differential Equations, Path Integrals and Stochastic Processes

By Toshio YOKOTA

In chapter I, the algebraic properties of the "ordered exponentials" which are called the formal solutions of an integro-differential equation $\partial f/\partial t = Af$ are stated. We can see that the ordered exponentials have Markoffian character.

In chapter II, the explicit representations of the ordered exponentials and the method how to make the so-called "path integral" are shown. In the realization of the path integral, its normalization factor is uniquely determined. The method suggested by Feynman is found it inadequate to make the path integrals from more general integro-differential equations than those of Schroedinger type. When the calculation of the path integral is so cumbersome to carry it out rigorously, we adopt the so-called "classical approximation" which is equivalent to the methods of the steepest descents. The formula of this approximation are also stated.

In chapter III, we apply the path integral method to solve the Langevin equations. The method suggested by Onsager & Machlup and Hashizume is not correct unless the solution of the Langevin equation belongs to the Markoffian process. The O.M.H.s method is equivalent to solving the Langevin equation under the assumption that the solution is Markoffian.

The non-Markoffian process can not be represented by the previous integro-differential equation. If we try to represent non-Markoffian process by the integro-differential equations, we have some boundary conditions. However, the solution of the integro-differential equation under the boundary conditions is not always the non-Markoffian process. If the functional space, which satisfies the boundary conditions, are invariant under the integro-differential operator A and if we can construct the δ function in the functional space, the solution of the integro-differential equation under the above boundary conditions can be represented by Markoffian process namely path integral. Various examples are shown and detail notes are given for each example.

The Institute of Statistical Mathematics

事の起り及び概要

Schrödinger eq. を解くに、普通固有値固有函数を求める方法で行われているが、Feynman は Schrödinger eq. が導き出された基本的な運動性との対応関係から——確率振幅に対する Huygens の定理に相当する関係から——微小時間の遷移確率を求め、量子力学の問題を経路積分 (path integral) で求める方法を導いた。Schrödinger eq. なら、この微小時間の遷移確率は Lagrangian から求められる。然し一般の偏微分方程式では、 $\hbar\partial/\partial x$ に対応してこれが運動量で

あるからと云つて、経路積分で $m(x_{i+1} - x_i)/(t_{i+1} - t_i)$ としてよいわけではない。ここで述べる目的の一つはその対応を明らかにすることであり、経路積分についての公式を精密に作ることである。これは第二章で述べられる、経路積分については、数学的には或る特殊な型に対して、Wiener 積分と呼ばれるものがあり、また位相解析で屢々研究されている。ここで述べることは数学的に勿論厳密でなく、また或る程度常識であるかも知れないが、実際に使う上で広く使用できるために、形式的な且つ explicite な表現を用いた。一般に parameter について一階の偏微積分方程式は markoff process で表わされ、経路積分に直すことができる。経路積分は複雑であり、これを遂行することが不可能の場合もある。この場合 steepest descents の方法を用いて近似計算する仕方も述べた。一般に固有値が求めにくいときは擾動計算をするが擾動の収斂しないとき等、この近似で求めることは意味があろう。また経路積分をモンテカルロの方法で計算することもできるわけである。

第一章では、この偏微積分方程式の形式的な解を与える ordered exponential の代数的性質を述べることにする。ordered exponential は物理学者の間ではよく使われるものであるが、余りまとまつた解説がないので専門外の人にも分るように系統立てて述べることにする。この表現で偏微積分方程式の形式的な解が、Markoff process の性質を持つていることが容易に明らかとなろう。

Onsager & Machlup は不可逆現象を表わす方程式—Langevin eq.—から path integral に表わし、不可逆過程での状態変化を表わす遷移確率を与える法則を導き出した。また橋爪氏は確率変数が Gaussian process に従うとき経路積分で遷移確率を出す方法を述べている。一般に linear な Langevin eq. で random force が Gaussian ならば適当に変数を増せば Doob の定理を満し、Markoff process であることが分り、Fokker-Planck eq. (Kolmogoroff eq.) が導出され、これを path integral に直すことができる。Onsager & Machlup や橋爪氏の path integral は normalization を含めて正確に算出できる。これは第三章で述べられる。Onsager & Machlup や橋爪氏の主張は Langevin eq. の random force が Gaussian であつても、linear でなければ成立しない。linear でない式に適用することは、更に Markoff process であるという仮定の下に解いたことに相当するようと思われる。これについて例示した。微分方程式で表わせる process で non-Markoff process は微分方程式でどう表わせるであろうか。境界値問題の微分方程式の解法を考えて見れば、境界条件で時間の過去または未来の影響が入ることが分る。実際に non-Markoff process の遷移確率を満す微分方程式を作つて見れば境界条件が付加する。然し境界値問題はすべて non-Markoff とは限らない。一般に境界条件を満す L^2 の中の函数空間が作れて、第一章で述べる線型作用素 A に対し invariant で、その函数空間で δ 函数が作られるならば、Markoff process で表わせる。そうでないときは non-Markoff process である。これについても例示した。その他色々細かいことは各例題で注意を加えた。

第1章 Ordered Exponentials

定義 1 parameter s (例えば時間) の各値で函数 $\psi(x)$ に作用する operator (例えば $\partial/\partial x$ 或いは $\int K(x', x) dx$ のような微分積分演算) として定義された線形作用素 $A(s)$ から作られた、次のような線形作用素が意味を持つとき、

$$\begin{aligned} \exp_+(\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right)) &= 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 \int_{\lambda_0}^{s_1} ds_2 A(s_1) A(s_2) + \dots \quad (\text{イ}) \\ &= 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_2 \int_{\lambda_0}^{s_2} ds_1 A(s_1) A(s_2) + \dots \quad (\text{ロ}) \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ s_1 \geq s_2 \geq s_3 \dots \dots \dots \end{array} \right\} \quad (1.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 \int_{s_1}^{\lambda} ds_2 A(s_1) A(s_2) \dots \dots \text{(イ)} \\ &= 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_2 \int_{\lambda_0}^{s_2} ds_1 A(s_1) A(s_2) \dots \dots \text{(ロ)} \\ &\quad s_1 \leq s_2 \leq \lambda \dots \dots \end{aligned} \right\} \dots \dots (1 \cdot 2)$$

を ordered exponential という。ここで 1 は恒等演算 $1 \psi(x) = \psi(x)$ である。上のような定義の代りに無限級数をまとめて、次のような積分方程式の形式的な解と定義してもよい。

定義 1'

$$(1 \cdot 1) \text{ の (イ) は } X(\lambda) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 A(s_1) X(s_1) \dots \dots \text{(イ)} \left. \right\} \dots \dots (1 \cdot 1')$$

$$(1 \cdot 1) \text{ の (ロ) は } X(\lambda_0) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 X(s_1) A(s_1) \dots \dots \text{(ロ)} \left. \right\} \dots \dots (1 \cdot 1')$$

$$(1 \cdot 2) \text{ の (イ) は } X(\lambda_0) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 A(s_1) X(s_1) \dots \dots \text{(イ)} \left. \right\} \dots \dots (1 \cdot 2')$$

$$(1 \cdot 2) \text{ の (ロ) は } X(\lambda) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 X(s_1) A(s_1) \dots \dots \text{(ロ)} \left. \right\} \dots \dots (1 \cdot 2')$$

これは X の値を右辺に次々に代入すれば (1・1), (1・2) を得るからである。普通の exponential

$$\exp \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds + \frac{1}{2!} \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) A(s_2) ds_1 ds_2 + \dots \dots \dots \dots (1 \cdot 3)$$

との違いは、(1・1) では parameter s の大きい演算がいつも左にあり、(1・2) ではいつも右にある点である。(1・1), (1・2) で (イ) (ロ) はただ積分変数 s_1, s_2, \dots の交替をしただけである。このように parameter の順序に演算を整列したため、parameter $\{s\}$ での積分域が $1/n!$ になっているから、exponential の展開で表われる $1/n!$ の factor を落してある。

(1・1) (1・2) は parameter の値が異なる所では必ずしも可換ではない。一般に

$$A(s) A(s') - A(s') A(s) = [A(s) A(s')] \neq 0$$

である。特に $[A(s) A(s')] = 0$ なら parameter の異なる operator の順序を交換し加え合せて、積分域をすべて λ_0 から λ へ拡張し、順列の数 $n!$ で割れば (1・3) を得る。従つて

定理 1. $[A(s) A(s')] = 0$ ならば

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = \exp \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \dots \dots \dots \dots (1 \cdot 4)$$

(1・1) (1・2) ですべての積分項が消えれば 1 に等しくなることより

定理 2.

$$\begin{aligned} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) - A(s')) ds \right) &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) - A(s')) ds \right) \\ &= \lim_{|\lambda - \lambda_0| \rightarrow 0} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = \lim_{|\lambda - \lambda_0| \rightarrow 0} \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = 1 \dots \dots \dots \dots (1 \cdot 5) \end{aligned}$$

何故このような演算を考えるか。(1・1) (1・2) または (1・1') (1・2') の (イ) を λ で、(ロ) を λ_0 で微分して見れば、偏微積分方程式が得られ、ordered exponential がその形式的な解であることが分り、後で明かになるようにこれが普通考えられている stochastic process の主役を演ずるからである。

定理 3. (1・1) (1・2) を parameter で微分して

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= A(\lambda) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \dots \dots \text{(イ)} \\ \frac{d}{d\lambda_0} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= - \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) A(\lambda_0) \dots \dots \text{(ロ)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots \dots (1 \cdot 6)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \exp_{-} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= \exp_{-} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) A(\lambda) \quad \dots \dots (1) \\ \frac{d}{d\lambda_0} \exp_{-} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= -A(\lambda_0) \exp_{-} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \dots \dots (2) \end{aligned} \right\} \quad \dots \dots \quad (1.7)$$

例えば(1・6)(イ)は $\exp_+(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s)ds)$ を $\psi(\lambda_0)$ に作用して見れば $\psi(\lambda) = \exp_+(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s)ds)\psi(\lambda_0)$ は

$$\frac{d}{d\lambda} \psi(\lambda) = A(\lambda) \psi(\lambda)$$

なる偏微積分方程式の $\lambda = \lambda_0$ で $\psi(\lambda_0)$ なる初期条件を満す形式的な解を与える.

ordered exponential は $[A(s)A(s')] \neq 0$ のために可換な量の演算とは全く異なつた演算法則に従う。これから ordered exponential の性質を明かにするために、代数的性質——演算法を述べよう。

定義 2.

$$\begin{aligned} 1 &= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}_{\text{右}} = \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}_{\text{左}} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \left[\exp_- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}_{\text{右}} = \left[\exp_- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}_{\text{左}} \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \end{aligned} \quad (1 \cdot 8)$$

$$\text{従つて} \quad \dots \dots \quad \left[\begin{array}{cc} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{array} \right]_{\text{右}}^{-1} = \left[\begin{array}{cc} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{array} \right]_{\text{左}}^{-1}$$

である逆が存在するとする.

逆を求めるために先ず

定理 4. 分解則

$$\left. \begin{aligned} & \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ & \quad \times \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right]^{-1} B(s) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right) \right) \dots \dots \dots \text{(イ)} \\ & = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) B(s) \left[\exp_+ \int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right]^{-1} \right) \\ & \quad \times \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) \dots \dots \dots \text{(ウ)} \end{aligned} \right\} \quad (1.9)$$

證明

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda}^{\lambda} A(s) ds \right) X(\lambda)$$

とすれば (1・5) より λ で形式的に微分し (1・6) (イ) より

$$(A(\lambda) + B(\lambda)) \exp_+ \left(\int_{\gamma}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right)$$

$$= A(\lambda) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) + \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \frac{d}{d\lambda} X(\lambda)$$

左より $\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right)$ の逆を掛ければ

$$\frac{d}{d\lambda} X(\lambda) = \left[\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \right]^{-1} B(\lambda) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) X(\lambda)$$

形式的に λ で λ_0 より λ まで積分すれば $X(\lambda_0) = 1$ を考慮して

$$X(\lambda) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \left\{ \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right]^{-1} B(s) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right) X(s) \right\}$$

この解は (1・1') (イ) より

$$X(\lambda) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \left\{ \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right]^{-1} B(s) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right) \right\} \right)$$

なることが分り (1・9) (イ) が証明された。

同様に

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) = -X(\lambda_0) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right), \quad X(\lambda) = 1$$

とおけば (1・6) (ロ) より

$$\frac{d}{d\lambda_0} X(\lambda_0) = -X(\lambda_0) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) B(\lambda_0) \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}$$

これを形式的に積分して

$$X(\lambda_0) = 1 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds X(s) \left\{ \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) B(s) \left[\exp_+ \int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right]^{-1} \right\}$$

(1・1') (ロ) より

$$X(\lambda_0) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \left\{ \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) B(s) \left[\exp_+ \int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right]^{-1} \right\} \right)$$

であり (1・9) (ロ) が証明された。

$$(1 \cdot 10) \text{ (イ) } \text{ は } \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) as \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) X(\lambda_0), \quad X(\lambda) = 1$$

$$(1 \cdot 10) \text{ (ロ) } \text{ は } \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ((A(s) + B(s)) ds \right) = X(\lambda) \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right), \quad X(\lambda_0) = 1$$

と置けば (1・7) (1・2) を用いて、同様に証明される。さてこの定理を用いて逆を求めよう。

定理 5. ordered exponential の逆

$$\left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1} = \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \quad (1 \cdot 11)$$

$$\left[\exp_- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1} = \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \quad (1 \cdot 11)$$

$$\text{証明 } (1 \cdot 5) \quad 1 = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) - A(s)) ds \right)$$

を (1・9) (イ) を用いて分解すると

$$1 = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right]^{-1} A(s) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right) \right)$$

今 $\left[\exp_+ \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1} = X(\lambda)$ とすると (1・5) より $X(\lambda_0) = [1]^{-1} = 1$ であつて、これを左より掛けば

$$X(\lambda) = \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds X(s) A(s) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^s A(s_1) ds_1 \right) \right)$$

(1・6) (イ) より $X(\lambda)$ は

$$\frac{d}{d\lambda} X(\lambda) = -X(\lambda) A(\lambda) \exp\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) ds_1\right) X(\lambda) = -X(\lambda) A(\lambda)$$

を満す, これを積分すれば $X(\lambda) = 1 - \int_{\lambda_0}^{\lambda} X(s) A(s) ds$

(1・2') (ロ) より $X(\lambda) = \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right)$ であり (1・11) が証明された.

同様に (1・11') を証明することができるが, そうしなくとも (1・11) より直ちに分る. (1・11) より $\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) = \left[\exp_{+}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right)\right]^{-1}$ であるから その逆をとれば (1・11') が得られる.

定理 4. は定理 5. の逆の値を代入して完結する. 次に定理 4 の中に出て来る.

$\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) B \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right)$ 等の計算公式を与える. その前に式を簡単にするため, commutator に対する演算記号を導入する.

定義 3. $A^{[1]} B = AB - BA = [AB]$ (1・12)

この意味は, $A^{[1]}$ の右に来るすべてのものに A を左から掛け, 右から掛けたものを引く操作である. 従つて $A^{[1]} B^{[1]} C$ の積は $A^{[1]} B^{[1]} C = [A[B]C]$ である.

定理 6. 変換に関する公式

$$\begin{aligned} \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) B \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) &= B = \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s)^{[1]}\right) B \quad (\text{a}) \\ &= \exp_{+}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s)^{[1]}\right) B \quad (\text{b}) \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (1 \cdot 13)$$

$$\begin{aligned} \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) B \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) &= B = \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s)^{[1]}\right) B \quad (\text{a}) \\ &= \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s)^{[1]}\right) B \quad (\text{b}) \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (1 \cdot 13')$$

ここで

$$\begin{aligned} X &= \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) ds_1\right) X \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) ds_1\right) = \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 A(s_1)^{[1]}\right) X \quad (\text{a}) \\ X &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) ds_1\right) X \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s_1) ds_1\right) = \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 A(s_1)^{[1]}\right) X \quad (\text{b}) \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (1 \cdot 13c)$$

である.

証明 $M(\lambda_0) = \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) B \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right)$ とおくと $M(\lambda) = B$, λ_0 で微分すれば

(1・6) (1・7) より

$$\frac{dM(\lambda_0)}{d\lambda_0} = A(\lambda_0) M(\lambda_0) - M(\lambda_0) A(\lambda_0) = A(\lambda_0)^{[1]} M(\lambda_0)$$

これを形式的に積分すれば

$$M(\lambda_0) = B - \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s)^{[1]} M(s)$$

(1・2') (イ) より, (1・2) (イ) を得る方法と同じようにして $M(s)$ を次々に代入して行けば

$$= \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 A(s_1)^{[1]}\right) B$$

これが (1・13) (a) の証明である. explicit に書けば

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 \int_{\lambda_0}^{s_1} ds_2 \cdots \int_{\lambda_0}^{s_{n-1}} ds_n [A(s_n) [A(s_{n-1}) \cdots [A(s_1) B] \cdots]] \quad (1 \cdot 13 \text{ a})$$

ここで $n=0$ の積分の定義されない所は積分の部が 1 と考えて $n=0$ の項は B を表わすものとする. commutator の性質, $[AB] = -[BA]$ を用いれば

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds_1 \int_{\lambda_0}^{s_1} ds_2 \cdots \int_{\lambda_0}^{s_{n-1}} ds_n [\cdots [BA(s_1)] A(s_2)] \cdots A(s_n)] \quad (1 \cdot 13 \text{ a}')$$

とも書ける.

(1・13) (b) を証明するには

$$M(\lambda) = \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) B \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \quad \text{とおくと} \quad M(\lambda_0) = B$$

前と同様, λ で微分すれば

$$\begin{aligned} \frac{dM(\lambda)}{d\lambda} &= \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) (BA(\lambda) - A(\lambda)B) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ &= M(\lambda) \frac{d\lambda}{A(\lambda) - A(\lambda)} M(\lambda) = -[\frac{d\lambda}{A(\lambda)}, M(\lambda)] \end{aligned}$$

λ で積分すれば

$$M(\lambda) = B - \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{As}{A(s)} C M(s)$$

(1・1') (イ) より (1・1) (イ) を得る方法と同じようにして

$$M(\lambda) = \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{As}{A(s)} C \right) B$$

(1・13') の証明も (a) では $M(\lambda) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) B \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right)$, $M(\lambda_0) = B$

(b) ではこれを $M(\lambda_0)$, $M(\lambda) = B$ とおいて, (1・13) 同じ方法で行えばよい. (1・13) 及び (1・13') の (a) (b) より

$$\exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s) \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{-As}{A(s)} \right), \quad \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds A(s) \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{As}{A(s)} \right)$$

であることが推測されよう. 実際 ordering を変える公式として後で系 8・1 で述べるものである.

系 8・1 を用いれば

$$\exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) B \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{-As}{A(s)} \right) B \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{-As}{A(s)} \right)$$

であり, これは (1・13) (b) より $\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{-As}{A(s)} \right) B$ に等しい故, $\frac{-As}{A(s)}$ を改めて $A(s)$ とおけば (1・13') (a) が得られる. 一方,

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) B \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{A(s)}{As} ds \right) B \exp_+ \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{A(s)}{As} ds \right)$$

として (1・13') (a) を用いれば (1・13') (b) が得られる.

系 6・1

$$\exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) C \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) = \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{As}{B(s)} ds \right) C \quad (1 \cdot 14)$$

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) C \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^{\lambda} (A(s) + B(s)) ds \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{B}{As} \right) C \quad (1 \cdot 14')$$

証明 (1・10) (口), (1・9) (イ) を用いて

$$\begin{aligned} & \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right)C\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right) \\ &= \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{A(s)}{B(s)}\right)\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)C\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{A(s)}{B(s)}\right) \\ &= \exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{A(s)}{B(s)}\right)C\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{A(s)}{B(s)}\right) \end{aligned}$$

(1・13) (a) を用いれば (1・14) が証明される。

同様にして (1・9) (口), (1・10) (イ), (1・13) (a) を用いて

$$\begin{aligned} & \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right)C\exp_{+}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right) \\ &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{B(s)}{A(s)}\right)C\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{B(s)}{A(s)}\right)=\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\frac{B(s)}{A(s)}\right)C \end{aligned}$$

(1・14') が証明される。 (1・14) 式は久保, 富田により磁気共鳴吸収に用いられた公式の一般化である。

次に二つの ordered exponential の積を一つの exponential にまとめる公式を考える。先ず同種の積について、

定理 7. 合成則 1

$$\begin{aligned} & \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right) \\ &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\left(\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^sds_1A(s_1)^{-1}\right)-1\right)B(s)\right) \quad (1 \cdot 15) \end{aligned}$$

$$= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\left(\exp_{-}\left(-\int_s^{\lambda}ds_1B(s_1)^{-1}\right)-1\right)A(s)\right) \quad (1 \cdot 15')$$

$$\begin{aligned} & \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right) \\ &= \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\left(\exp_{-}\left(\int_s^{\lambda}ds_1A(s_1)^{-1}\right)-1\right)B(s)\right) \quad (1 \cdot 16) \end{aligned}$$

$$= \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds\left(\exp_{+}\left(-\int_{\lambda_0}^sds_1B(s_1)^{-1}\right)-1\right)A(s)\right) \quad (1 \cdot 16')$$

証明

$$\begin{aligned} & \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)=\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B'(s))ds\right) \\ &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A'(s)+B(s))ds\right) \end{aligned}$$

とおいて λ で微分すれば

$$\begin{aligned} & A(\lambda)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)+\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)B(\lambda)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right) \\ &= (A(\lambda)+B'(\lambda))\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B'(s))ds\right) \end{aligned}$$

(1・13) (a) を用いて

$$B'(\lambda)=\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)B(\lambda)\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)=\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds_1A(s_1)^{-1}\right)B(\lambda)$$

λ_0 で微分して、(1・13) (b) を用いて

$$A'(\lambda_0)=\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)A(\lambda_0)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)=\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^{\lambda}ds_1B(s_1)^{-1}\right)A(\lambda_0)$$

(1・16), (1・16') も同様に証明される。

系 7・1

$$\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right)=\lim_{n \rightarrow \infty}\left\{\exp_{+}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\right\}^n \quad (1 \cdot 17)$$

$$\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right)=\lim_{n \rightarrow \infty}\left\{\exp_{-}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{-}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\right\}^n \quad (1 \cdot 17')$$

証明 (1・15), (1・16) より二つの積を合成した時 $\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds$ に対する補正項は

A, B の二次の order である。従つて

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty}\left\{\exp_{\pm}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{\pm}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\right\}^n \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty}\left\{\exp_{\pm}\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right\}^n \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty}\exp_{\pm}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds+O\left(\frac{1}{n}\right)\right)=\exp_{\pm}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s))ds\right) \end{aligned} \quad (1 \cdot 18)$$

(1・17) は S. T. Butler & M. H. Friedmann が Bose Einstein condensation の計算に用いた公式の一般化である。上式を反覆用いれば二つ以上の積でも容易に求まる。

系 7・2

$$\begin{aligned} & \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}C(s)ds\right) \\ &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}\left\{B(s)+\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^s ds_1 B(s_1)^{-1}\right)C(s)\right\}ds\right) \\ &= \exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}\left\{A(s)+\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^s ds_1 A(s_1)^{-1}\right)\left(B(s)+\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^s ds_2 B(s_2)^{-1}\right)C(s)\right)\right\}ds\right) \end{aligned} \quad (1 \cdot 19)$$

或いは

$$=\exp_{+}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}\left\{C(s)+\exp_{-}\left(-\int_s^{\lambda} ds_2 C(s_2)^{-1}\right)\left(B(s)+\exp_{-}\left(-\int_s^{\lambda} ds_1 B(s_1)^{-1}\right)A(s)\right)\right\}ds\right) \quad (1 \cdot 19')$$

$$\begin{aligned} & \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}C(s)ds\right) \\ &= \exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}\left\{A(s)+\exp_{-}\left(\int_s^{\lambda} ds_1 A(s_1)^{-1}\right)\left(B(s)+\exp_{-}\left(\int_s^{\lambda} ds_2 B(s_2)^{-1}\right)C(s)\right)\right\}ds\right) \end{aligned} \quad (1 \cdot 20)$$

$$=\exp_{-}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}\left\{C(s)+\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^s ds_1 C(s_1)^{-1}\right)\left(B(s)+\exp_{-}\left(-\int_{\lambda_0}^s ds_2 B(s_2)^{-1}\right)A(s)\right)\right\}ds\right) \quad (1 \cdot 20')$$

等、多數の積があつても合成することができる。系 7・1 も多數の積の場合に拡張される。

系 7・1'

$$\begin{aligned} & \exp_{\pm}\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda}(A(s)+B(s)+\dots+Z(s))ds\right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty}\left\{\exp_{\pm}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}A(s)ds\right)\exp_{\pm}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}B(s)ds\right)\dots\exp_{\pm}\left(\frac{1}{n}\int_{\lambda_0}^{\lambda}Z(s)ds\right)\right\}^n \end{aligned} \quad (1 \cdot 21)$$

次に異種の ordered exponential の積に対する公式を導入しよう。

定理 8. 合成則 2.

$$\begin{aligned} & \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} B(s) ds \right) \\ &= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_+ \left(- \int_s^{\lambda} ds_1 B(s_1) \right) \{A(s) + B(s)\} \right) \quad (1 \cdot 22) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} ds_1 A(s_1) \right) \{A(s) + B(s)\} \right) \quad (1 \cdot 22') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} B(s) ds \right) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^s ds_1 B(s_1) \right) \{A(s) + B(s)\} \right) \quad (1 \cdot 23) \\ &= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^s ds_1 A(s_1) \right) \{A(s) + B(s)\} \right) \quad (1 \cdot 23') \end{aligned}$$

証明

$$\exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} B(s) ds \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \{A(s) + B(s) - B(s)\} \right) \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} B(s) ds \right)$$

とし、 $\exp_- \int_{\lambda_0}^{\lambda} B(s) ds$ の逆に相当する項を (1・9) (口) を用いて、くくり出せば、

$$= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} \exp_+ \left(- \int_s^{\lambda} ds_1 B(s_1) \right) \{A(s) + B(s)\} \exp_- \left(\int_s^{\lambda} ds_1 B(s_1) \right) ds \right)$$

(1・22)を得る。

同様に (1・10) (イ) より

$$\begin{aligned} & \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} \{-A(s) + A(s) + B(s)\} ds \right) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) \{A(s) + B(s)\} \exp_+ \left(- \int_s^{\lambda} A(s_1) ds_1 \right) ds \right) \end{aligned}$$

(1・23)は(1・10) (口), (1・23')は(1・9) (イ)を用いて証明される。

さて、定理 8 で $A = -B$ とすれば逆公式定理 5 が得られる。 $A=0$ または $B=0$ とすれば ordering の逆公式を得る。

系 8・1 ordering の逆公式

$$\begin{aligned} & \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_+ \left(\int_s^{\lambda} ds_1 A(s_1) \right) A(s) \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{A(s)}{As} \right) \quad (1 \cdot 24) \\ &= \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_- \left(- \int_{\lambda_0}^s ds_1 A(s_1) \right) A(s) \right) = \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{As}{A(s)} \right) \quad (1 \cdot 24') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ &= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^s ds_1 A(s_1) \right) A(s) \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{-As}{A(s)} \right) \quad (1 \cdot 25) \\ &= \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \exp_+ \left(- \int_s^{\lambda} ds_1 A(s_1) \right) A(s) \right) = \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} ds \frac{A(s)}{-As} \right) \quad (1 \cdot 25') \end{aligned}$$

(1・24)は(1・22)で $B=0$, (1・24')は(1・23)で $A=0$ とおき改めて $B=A$ とし, (1・25)は(1・23')で $B=0$, (1・25')は(1・22)で $A=0$ とし改めて $B=A$ とすれば得られる。これらの基本公式を用いればすべての ordered exponential の演算は遂行できよう。

今まで parameter に関する定理を述べてなかつた。これからこの演算について行う。

定理 9. parameterer に関する加法定理。

今 parameter の大きさが $a \leq b \leq c$ の順序であるとすれば

$$\exp_+ \left(\int_a^c A(s) ds \right) = \exp_+ \left(\int_b^c A(s) ds \right) \exp_+ \left(\int_a^b A(s) ds \right) \quad (1 \cdot 26)$$

$$\exp_- \left(\int_a^c A(s) ds \right) = \exp_- \left(\int_a^b A(s) ds \right) \exp_- \left(\int_b^c A(s) ds \right) \quad (1 \cdot 26')$$

証明 ordered exponential の定義 (1・1) に戻る。 (1・1) (イ) は

$$\exp_+ \left(\int_a^c A(s) ds \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_a^{s_1} ds_1 \int_a^{s_2} ds_2 \cdots \int_a^{s_{n-1}} ds_n A(s_1) A(s_2) \cdots A(s_n), \quad s_1 \geq s_2 \geq \cdots \geq s_n$$

今、一般項を $I_{n,a}^{+c} = \int_a^c ds_1 \int_a^{s_1} ds_2 \cdots \int_a^{s_{n-1}} A(s_1) A(s_2) \cdots A(s_n)$ とおく。

積分変数 s_1, \dots, s_n が一つも bc 区間に属しないか、 s_1 まで属するか、 s_1, s_n まで属するかによつて、 $I_{n,a}^{+c}$ を分ける。

$$\begin{aligned} I_{n,a}^{+c} &= \left\{ \int_a^b ds_1 \int_a^{s_1} ds_2 \cdots \int_a^{s_{n-1}} ds_n + \int_b^c ds_1 \int_a^{s_1} ds_2 \int_a^{s_2} ds_3 \cdots \int_a^{s_{n-1}} ds_n + \int_b^c ds_1 \int_b^{s_1} ds_2 \int_b^{s_2} ds_3 \cdots \int_a^{s_{n-1}} ds_n \right. \\ &\quad \left. + \cdots + \int_b^c ds_1 \int_b^{s_1} ds_2 \cdots \int_b^{s_{n-1}} ds_n \right\} A(s_1) A(s_2) \cdots A(s_n) \\ &= \sum_{i=0}^n I_{i,a}^{+c} I_{n-i,a}^{+b} \end{aligned}$$

これを n で加え合せ、 i と n の和の順序を交換すれば

$$\begin{aligned} \exp_- \left(\int_a^c A(s) ds \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} I_{n,a}^{+c} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=0}^n I_{i,a}^{+c} I_{n-i,a}^{+b} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n-i}^{\infty} I_{i,a}^{+c} I_{n-i,a}^{+b} \\ &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} I_{i,a}^{+c} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} I_{n-i,a}^{+b} \right) = \exp_+ \left(\int_b^c A(s) ds \right) \exp_+ \left(\int_a^b A(s) ds \right) \end{aligned}$$

(1・26) が証明される。

$$\text{同様に } \exp_- \left(\int_a^c A(s) ds \right) = \sum_{n=0}^{\infty} I_{n,a}^{-c} \quad \text{とし} \quad I_{n,a}^{-c} = \sum_{i=0}^n I_{i,a}^{-b} I_{n-i,a}^{-c}$$

より (1・26') が証明される。

(1・26), (1・26') の右または左より逆を掛ければ次の系が得られる、

系 9・1 parameter に関する減法定理、 $a \leq b \leq c$ とする。

$$\left. \begin{aligned} \exp_+ \left(\int_b^c A(s) ds \right) &= \exp_+ \left(\int_a^c A(s) ds \right) \exp_- \left(- \int_a^b A(s) ds \right) \\ \exp_+ \left(\int_a^b A(s) ds \right) &= \exp_- \left(- \int_b^c A(s) ds \right) \exp_+ \left(\int_a^c A(s) ds \right) \\ \exp_- \left(\int_a^b A(s) ds \right) &= \exp_- \left(\int_a^c A(s) ds \right) \exp_+ \left(- \int_b^c A(s) ds \right) \\ \exp_- \left(\int_b^c A(s) ds \right) &= \exp_+ \left(- \int_a^b A(s) ds \right) \exp_- \left(\int_a^c A(s) ds \right) \end{aligned} \right\} \cdots \cdots (1 \cdot 27)$$

定理 9 は、 parameter につきいくらでも分割できることを示している。よつて次の系を得る。

系 9・2 stochastic process との関係を現わす定理。

区間 $\lambda_0 \lambda$ を n 個に区分する。その区分点を $\lambda_0 = s_0, t_1, t_2, \dots, s_n = \lambda$ とする。

$$\begin{aligned} \exp_+ \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= \lim_{\max |t_i - t_{i-1}| \rightarrow 0} \exp((t_n - t_{n-1})A(t'_{n-1})) \exp(t_{n-1} - t_{n-2})A(t'_{n-2}) \\ &\quad \cdots \exp((t_2 - t_1)A(t'_1)) \exp((t_1 - t_0)A(t'_0)) \end{aligned} \quad (1 \cdot 28)$$

$$\begin{aligned} \exp_- \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) &= \lim_{\max |t_i - t_{i-1}| \rightarrow 0} \exp((t_1 - t_0)A(t'_0)) \exp((t_2 - t_1)A(t'_1)) \\ &\quad \cdots \exp((t_n - t_{n-1})A(t'_{n-1})) \end{aligned} \quad (1 \cdot 28')$$

ここで

$$t_n \geq t'_{n-1} \geq t_{n-1} \geq \cdots \geq t'_1 \geq t_1 \geq t'_0 \geq t_0$$

普通の exponential ならば

$$\exp\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) = \lim_{\max|t_{i+1}-t_i| \rightarrow 0} \exp\left(\sum_{i=0}^{n-1} (t_{i+1}-t_i) A(t_i)\right)$$

と書けるが ordered exponential は parameter の順序が問題であり、このように書けない。定理9より。

$$\exp_+\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) = \exp_+\left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} A(s) ds\right) \exp_+\left(\int_{t_{n-1}}^{t_{n-1}} A(s) ds\right) \cdots \exp_+\left(\int_{t_0}^{t_1} A(s) ds\right)$$

ここで

$$\exp_+\left(\int_{t_i}^{t_{i+1}} A(s) ds\right) = 1 + \int_{t_i}^{t_{i+1}} A(s) ds + \int_{t_i}^{t_{i+1}} ds_1 \int_{t_i}^{s_1} ds_2 A(s_1) A(s_2) + \cdots$$

$t_{i+1}-t_i$ が充分小さければ、その範囲内で $A(s)$ は s によらぬ一定の operator と見てよい。

$$\begin{aligned} &= 1 + (t_{i+1}-t_i) A(t_i) + \frac{1}{2!} A^2(t_i) (t_{i+1}-t_i)^2 + \cdots + O(t_{i+1}-t_i) \delta \\ &= \exp((t_{i+1}-t_i) A(t_i)) + O(t_{i+1}-t_i) \delta \end{aligned}$$

δ は integrand を一定としたための誤差であり、 $|t_{i+1}-t_i| \rightarrow 0$ で $\delta \rightarrow 0$ となる。 $O(t_{i+1}-t_i) \delta$ は $(t_{i+1}-t_i)$ の一次より高い order で $(t_{i+1}-t_i)$ の一次の項を取れば (1・28) の右辺になる。

証明

$$\begin{aligned} \prod_{i=0}^{n-1} \exp_+((t_{i+1}-t_i) A(t_i)) &= \prod_{i=0}^{n-1} (1 + (t_{i+1}-t_i) A(t_i) + \cdots) \\ &= 1 + \sum_{i=0}^{n-1} (t_{i+1}-t_i) A(t_i) + \sum_{j \geq i=0}^{n-1} (t_{j+1}-t_j) (t_{i+1}-t_i) A(t_j) A(t_i) + \cdots \\ &\quad + \sum_{i_1 \geq i_2 \geq \cdots \geq i_n} (t_{i_1}-t_{i_2}) (t_{i_2}-t_{i_3}) \cdots (t_{i_{n-1}}-t_{i_n}) A(t_{i_1}) A(t_{i_2}) \cdots A(t_{i_n}) + O(t_{i+1}-t_i) \end{aligned}$$

上式では高々 n 重積分までしか近似されないが、分割を細かくして $\max(t_{i+1}-t_i) \rightarrow 0$ とすれば (1・1) (イ) が存在するならこれと一致する。(1・28) も同様に証明される。

次に parameter に関して置換積分ができるることを述べよう。

定理 10. $s=g(\theta)$ が θ について λ_0 の区間で単調函数ならば

$$\left. \begin{aligned} \exp_+\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) &= \exp_+\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(g(\theta)) dg(\theta)\right) \\ \exp_-\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) &= \exp_-\left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(g(\theta)) dg(\theta)\right) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots \quad (1 \cdot 29)$$

parameter の順序が変わらぬからである。

定理 11. transpose に関する定理

もし $A(s)$ が Hermite $\overline{A(s)} = A(s)^*$ ならば

$$\exp_+\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) \quad \exp_-\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) \quad \text{は unitary である。}$$

証明

$$\exp_+\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) = \exp_-\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} \overline{A(s)} ds\right) \quad \exp_-\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds\right) = \exp_+\left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} \overline{A(s)} ds\right)$$

が成立することは定義 (1・1) (イ) より明らか。complex conjugate をとれば

$$\begin{aligned} \left(\exp_+ i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right)^* &= \exp_- \left(-i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s)^* ds \right) = \exp_- \left(-i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \\ &= \left[\exp_+ \left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \right]^{-1} \end{aligned}$$

従つて unitary である。 $\exp_- \left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right)$ に対しても

$$\left(\exp_{-} \left(i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \right)^* = \exp_{+} \left(-i \int_{\lambda_0}^{\lambda} \overline{A(s)}^* ds \right) = \left[\exp_{-} i \int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right]^{-1}$$

Schrödinger eq. に対応する ordered exponential は unitary であるが, Fokker-Planck eq. の ordered exponential は unitary であるとは限らない。

第 II 章 Path Integrals

§1. path integrals の定義及びこれに関する注意

Iで, 偏微積分方程式の形式的な解が ordered exponential で表わされその代数的性質が調べられた。ここでは ordered exponential を δ 関数に operate して表示を作り。これに確率過程的な解釈を与えて偏微分積分方程式と確率過程との対応を明らかにし、近似計算する方法を述べよう。

線形作用素 $A(s)$, $\exp_{+} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right)$ の operand $\psi(x)$ の空間が, Hilbert 空間を作り、その base として完全正規直交系 $\{\psi_k(x)\}$ があるものとする。 δ 関数は

$$\delta(x-x_0) = \sum_k \psi_k(x) \psi_k^*(x_0)$$

で表わされる。二つの線形作用素 A, B に operate すれば

$$\sum_k AB \psi_k(x) \psi_k^*(x_0) = \sum_{kj} A \psi_j(x) B_{jk} \psi_k^*(x_0)$$

但し $B_{jk} = \int \psi_j^*(x) B \psi_k(x) dx$ であるから、

$$AB \delta(x-x_0) = \sum_{kj} \int dx_1 A \psi_j(x) \psi_j^*(x_1) B \psi_k(x_1) \psi_k^*(x_0) = \int A \delta(x-x_1) B \delta(x_1-x_0) dx_1$$

これを順次繰返せば、一般に任意個の線形作用素の積に対しても形式的に

$$AB \cdots Z \delta(x-x_0) = \int \cdots \int A \delta(x-x_1) B \delta(x_1-x_2) C \cdots Z \delta(x_{n_z}-x_0) dx_1 dx_2 \cdots dx_{n_z} \quad (2 \cdot 1)$$

が成立する。

$$\exp_{+} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \delta(x-x_0) = \rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0), \quad \exp_{-} \left(\int_{\lambda_0}^{\lambda} A(s) ds \right) \delta(x_0-x) = \rho_{-}(x_0\lambda_0|x\lambda) \quad (2 \cdot 2)$$

とし、(1・6), (1・7) 式の意味を再考しよう。 $\delta(x-x_0)$ へすべて operate (但し、すべて $\delta(x-x_0) = \sum_k \psi_k(x) \psi_k^*(x_0)$ の $\psi_k(x)$ に operate するものとする) する。今、 $A(\lambda)$ は微分、積分演算をすべて右へ持つてくように排列された (well-order された) operator とする。

$$A(\lambda) = A \left(x, \frac{d}{idx}, \int K(x|) d(), \lambda \right)$$

(1・6) (イ) は

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0) &= \int A \left(x, \frac{d}{idx}, \int K(x|) d(), \lambda \right) \delta(x-x') \rho_{+}(x'\lambda|x_0\lambda_0) dx' \\ &= A \left(x, \frac{d}{idx}, \int K(x|) d(), \lambda \right) \rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0) \end{aligned} \quad (2 \cdot 3)$$

一方、(1・6) (ロ) は

$$\frac{d}{d\lambda_0} \rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0) = - \int \rho_{+}(x\lambda|x'\lambda_0) A \left(x', \frac{d}{idx'}, \int K(x'|) d(), \lambda_0 \right) \delta(x'-x_0) dx'$$

部分積分を行い、 $\rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0)$ は x, x_0 の boundary で消えるとする

$$= - A^* \left(- \frac{d}{idx_0}, \int d() K(|x_0), x_0, \lambda_0 \right) \rho_{+}(x\lambda|x_0\lambda_0) \quad (2 \cdot 4)$$

ここで A^* は $\delta(x-x_0) = \sum_k \psi_k(x) \psi_k^*(x_0)$ で $\psi_k^*(x_0)$ が operate する。 A の共轭な operator で例えば

$$A\left(x, \frac{d}{idx}, \int K(x|\cdot)d(\cdot), \lambda\right) = f(x\lambda) \frac{d}{idx} + \int K_\lambda(x|\cdot)d(\cdot)$$

とすると

$$\begin{aligned} & A\left(x, \frac{d}{idx}, \int K(x|\cdot)d(\cdot), \lambda\right) \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) \\ &= f(x\lambda) \frac{d}{idx} \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) + \int K_\lambda(x|\xi)d\xi \rho_+(\xi\lambda|x_0\lambda_0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{であり, } & A^*\left(-\frac{d}{idx_0}, \int K(\cdot|x_0)d(\cdot), x_0, \lambda_0\right) \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) \\ &= -\frac{d}{idx_0} \{f(x_0\lambda_0)\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)\} + \int \rho_+(x\lambda|\xi\lambda_0)d\xi K_{\lambda_0}(\xi|x_0) \end{aligned}$$

を意味する。

(2・2) で $\lambda \rightarrow \lambda_0$ とすれば $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) = \delta(x-x_0)$ であり, $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)$ は (2・3) の微積分方程式を $\lambda=\lambda_0$ で $\delta(x-x_0)$ であるような初期条件で解いた解である. (1・6) (ロ) 即ち (2・4) は (2・3) の共軛な方程式に他ならぬ.

今, 次の積分を考える.

$$\int \rho_+(x\lambda|\xi\tau) \rho_+(\xi\tau|x_0\lambda_0) d\xi$$

これは ρ_+ の定義 (2・2), δ 関数の演算 (2・1) 及び parameter に関する加法定理 (1・26) より

$$\begin{aligned} &= \int \exp_+\left(\int_s^\lambda A(s)ds\right) \delta(x-\xi) \exp_+\left(\int_{\lambda_0}^\tau A(s)ds\right) \delta(\xi-x_0) d\xi \\ &= \exp_+\left(\int_\tau^\lambda A(s)ds\right) \exp_+\left(\int_{\lambda_0}^\tau A(s)ds\right) \delta(x-x_0) = \exp_+\left(\int_{\lambda_0}^\lambda A(s)ds\right) \delta(x-x_0) \\ &= \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) \end{aligned} \quad (2 \cdot 5)$$

に等しい. 之は $\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) = \delta(x-x_0)$ であるから, $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)$ を $t=\lambda_0$ で x_0 から $t=\lambda$ で x に移る遷移確率と考えると, 見掛け上 Smoluchowski equation (または Chapman-Kolmogoroff eq. と呼ばれる) と同じである. 然し, ここで $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)$ は real positive とは限らず, 一般に imaginary であり得る. また, $\lambda-\lambda_0$ の函数とは限らない. 且, $\int \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) dx$ は 1 とは限らない.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) &= \int \left\{ \left(\frac{d}{d\tau} \rho_+(x\lambda|\xi\tau) \right) \rho_+(\xi\tau|x_0\lambda_0) + \rho_+(x\lambda|\xi\tau) \left(\frac{d}{d\tau} \rho_+(\xi\tau|x_0\lambda_0) \right) \right\} d\xi \\ &= \int \left\{ -A^*\left(-\frac{d}{id\xi}, \int K(\cdot|\xi)d(\cdot), \xi, \tau\right) \rho_+(x\lambda|\xi\tau) \rho_+(\xi\tau|x_0\lambda_0) \right. \\ &\quad \left. + \rho_+(x\lambda|\xi\tau) A\left(\frac{d}{id\xi}, \int K(\xi|\cdot)d(\cdot), \tau\right) \rho_+(\xi\tau|x_0\lambda_0) \right\} d\xi \end{aligned} \quad (2 \cdot 6)$$

部分積分を行えば

$$= 0$$

従つて $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)$ は λ_0, λ のみに depend する.

同様なことは $\rho_-(x_0\lambda_0|x\lambda)$ に対しても言えるが, これは $\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0)$ の parameter を反転しただけで stochastic problem としては新しい意味がないから, ふれぬこととする.

(1・28) 式に $\delta(x-x_0)$ を operate すると

$$\rho_+(x\lambda|x_0\lambda_0) = \lim_{\max|t_{i+1}-t_i| \rightarrow 0} \int \cdots \int K(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}) \cdots K(x_2 t_2 | x_1 t_1) K(x_1 t_1 | x_0 t_0) \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \quad (2 \cdot 7)$$

ここで

$$K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t) = \exp((t_{t+1} - t_t) A(t_t))$$

さて K の explicit な表現を求める試みを試みよう、(2・7) で t'_t は $t_{t+1} \geq t'_t \geq t_t$ のどの値でもよいが簡単のため $t'_t = t_{t+1}$ とする、(1・28) 式の証明で $K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t)$ の値は $(t_{t+1} - t_t)$ の一次の項まで正確に計算すればよいから

$$\begin{aligned} & \exp(t_{t+1} - t_t) A(t_t) \delta(x_{t+1} - x_t) \\ &= \sum_k \left(1 + (t_{t+1} - t_t) A \left(x_{t+1}, \frac{d}{dx_{t+1}}, \int K(x_{t+1} | \quad) d(\quad), t_{t+1} \right) \dots \right) \psi_k(x_{t+1}) \psi_k^*(x_t) \end{aligned}$$

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx} \quad \text{と取れば}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_k \psi_k(x_{t+1}) \left(1 + (t_{t+1} - t_t) A \left(x_{t+1}, k, \int K(x_{t+1} | x') e^{ik(x' - x_{t+1})} dx', t_{t+1} \right) \dots \right) \psi_k^*(x_t) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^f} \int dk \exp \left((t_{t+1} - t_t) \left\{ A \left(x_{t+1}, k, \int K(x_{t+1} | x') \exp(ik(x' - x_{t+1})) dx', t_{t+1} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{ik(x_{t+1} - x_t)}{t_{t+1} - t_t} \right\} \right) \end{aligned}$$

ここで f は x の次元数である。但し、積分 operator の核 $K(x_{t+1} | x)$ が相対座標 $(x_{t+1} - x)$ の函数であるとしている。 $\int K(x_{t+1} | x') \exp(ik(x' - x_{t+1})) dx' = \kappa(k)$ は k のみの函数であるから

$$K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t) = \frac{1}{(2\pi)^f} \int dk \exp \left((t_{t+1} - t_t) \left\{ A(x_{t+1}, k, \kappa(k), t_{t+1}) + \frac{ik(x_{t+1} - x_t)}{t_{t+1} - t_t} \right\} \right) \quad (2 \cdot 8)$$

一方、 A に固有函数 ψ_a^* 、固有值 a 、 $A\psi_a(x) = a\psi_a(x)$ 、 $A^*\psi_a^*(x) = a\psi_a^*(x)$ が存在し、完全性 $\sum_a \psi_a(x)\psi_a^*(x) = \delta(x - x')$ が判れば

$$K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t) = \sum_a \exp((t_{t+1} - t_t)a) \psi_a(x_{t+1}) \psi_a^*(x_t) \quad (2 \cdot 9)$$

と書ける。然し、 A に固有函数があるか判らず、またこれから微分方程式との関係を主に調べるので(2・8)で議論する。

(2・7) の意味は、 K を小さな時間間隔の遷移確率と考えこれに対応する偶然事象を考えるならば微積分方程式の解 $\rho_+(x\lambda | x_0 \lambda_0)$ が、偶然事象の無限和として表わされることである。勿論 K は刻々に変化して行つてもよく、また当然なことであるが、巨視的な量 $\rho_+(x\lambda | x_0 \lambda_0)$ を決める微視的な偶然事象は一義的には決まらぬ。 $(t_{t+1} - t_t)$ の一次の order まで正確に(2・8)を与えるものはすべて同じ微分方程式にしたがい同じ $\rho_+(x\lambda | x_0 \lambda_0)$ を与えるのである。これは無限に多くの確率事象の和として表わされているためで、一種の中心極限定理によるものである。普通の中心極限定理と異にするのは、加え合わさるべき確率事象が同一でなく、刻々にその性格を異にしてもよい点である。

(2・7) は path integral と呼ばれている。以下 path integral を例で示めそう。

例 1.

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \rho \quad A = -\frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} \quad (2 \cdot 10)$$

なる微分方程式があるとき、(2・8) は

$$\begin{aligned} K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t) &= \left(\frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \exp \left((t_{t+1} - t_t) \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x_{t+1}) \right) + \frac{ik(x_{t+1} - x_t)}{t_{t+1} - t_t} \right\} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(t_{t+1} - t_t) 2\pi \hbar i}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \frac{(x_{t+1} - x_t)^2}{(t_{t+1} - t_t)^2} - V(x_{t+1}) \right\} (t_{t+1} - t_t) \right) \quad (2 \cdot 11) \end{aligned}$$

(2・10) は Schrödinger eq. とし知られているものであり、 $-\hbar^2\Delta/2m + V(x) = T + V$ は Hamiltonian, $T = -\hbar^2\Delta/2m = p^2/2m$ は kinetic energy であり, classical mechanics では $T = mv^2/2$, として知られている。(2・11) の { } の中は $\frac{m}{2} \frac{(x_{t+1}-x_t)^2}{(t_{t+1}-t_t)^2} = \frac{m}{2} v^2 = T$ で, $T - V = mv^2/2 - V(x) = L$ は Lagrangian である。従つて $K(x_{t+1}, t_{t+1} | x_t, t_t)$ の e の肩に来るものは L を時間積分したもの

$$\int_{t_t}^{t_{t+1}} L dt = \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{t+1}-x_t}{t_{t+1}-t_t} \right)^2 - V(x_{t+1}) \right\} (t_{t+1}-t_t)$$

(これを action という) を \hbar の単位で測つただけ位相が変ることを意味する。

Feynman は上式を導き出すのに、物質波が時刻 t_i , 場所 x_i から t_{i+1} , x_{i+1} に伝わるに位相が action/\hbar だけ変るとし、時刻 t_i , 場所 x_i における確率振幅 $\psi(x_i, t_i)$ から、 t_{i+1} の x_{i+1} における確率振幅 $\psi(x_{i+1}, t_{i+1})$ を求めるのに波動の伝導における Huygens の定理を用いて

$$\psi(x_{i+1}, t_{i+1}) = \int \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1}-x_i}{t_{i+1}-t_i} \right)^2 - V(x_{i+1}) \right\} \right) \psi(x_i, t_i) \frac{dx_i}{A_i} \quad (2 \cdot 12)$$

で与えられるとした。ここで A_i は波動の振幅が不変なるための normalization factor であり Feynman は ψ の満す微分方程式が Schrödinger eq. と一致するように決めたのである。もともと Schrödinger eq. も $H = T + V = (mv^2/2) + V = p^2/(2m) + V$ で $p \rightarrow \hbar\partial/\partial x$ と対応させて得られたものであり、量子力学の根本原理として (2・10) を取るか、更に直観に従つて (2・12) を取るかは別問題として両者が偶然に一致したことは今まで述べたことから明らかである。微分方程式に三階微分 d^3/dx^3 以上ある時は勿論 $p = mv$ が $\hbar\partial/\partial x$ に対応するからと言つて \exp の中にすぐそのまま $\frac{m^3}{\hbar^3} \left(\frac{x_{i+1}-x_i}{t_{i+1}-t_i} \right)^3$ を持つてくれればよいといふわけではない。Feynman の論文には、 $mv^2/2$ に対し $x_{i+1}-x_i$ の対応の仕方が色々述べられているが、我々の導出によると、その導き方は明らかであり、normalization も一義的に決まつている。Feynman は寧ろ、量子力学の physical な解釈を明らかにしたものであると言えよう。

(2・11) を (2・7) へ代入して、 V で展開して見る。

$$\rho_+(xt|x_0, t_0) = \sum_{m=0}^{\infty} Q_m(xt|x_0, t_0) \quad (2 \cdot 13)$$

$$Q_0(xt|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar i(t-t_0)}{m}} \exp\left(\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right)$$

$$Q_m(xt|x_0, t_0) = \int_{t_0}^t dt_m \int_{t_0}^{t_{m-1}} dt_{m-1} \cdots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} \cdots$$

$$\cdots \int \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x-x_m)^2}{t-t_m}\right) \left(-\frac{i}{\hbar} V(x_m, t_m)\right) \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_m-x_{m-1})^2}{t_m-t_{m-1}}\right) \left(-\frac{i}{\hbar} V(x_{m-1}, t_{m-1})\right) \cdots$$

$$\cdots \left(-\frac{i}{\hbar} V(x_1, t_1)\right) \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_1-x_0)^2}{t_1-t_0}\right) \prod_{i=1}^m \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_{i+1}-t_i)}} dx_i\right) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_1-t_0)}}$$

$$= \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-\tau)}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x-\xi)^2}{t-\tau}\right) \left(-\frac{i}{\hbar} V(\xi, \tau)\right) Q_{m-1}(\xi, \tau|x_0, t_0) d\xi d\tau$$

証明は (1・28) と同様に行われる。(2・7) ～ (2・11) を代入して $-iV/\hbar$ で展開し、 m 個の V のある項をまとめて考えると、 $m \leq n-1$ (n は時間の分割点の数) なら $A(xt)$ の中に含まれる変数以外で先ず積分すると Gaussian process であるから (2・14) の V の両側に相当する項が出て V の中の x についての積分変数を $x_m x_{m-1} \cdots x_1$ と書換え、 t の色々違つた組合せの和

を行えば t の m 重和となる、ここで t は order がついているから積分範囲は $t_m \geq t_{m-1} \geq \dots \geq t_1$ で行うことになる。 $m > n-1$ の term は $O(t_{l+1}-t_l)$ であつて近似されぬが、時間の分割点を細かくし、 $\text{Max}|t_{l+1}-t_l| \rightarrow 0$ とすれば (2・13) のように無限和として表わされる。 $t_0 \leq \tau \leq t$ で $|V(v\tau)| \leq M$ ならば $Q_m(xt|x_0t_0) \leq (1/n!)(t-t_0)^n M^n Q_0(xt|x_0t_0)$ で (2・13) は収斂する。(2・10) で $\{x_i\}$ の変数変換を行い、numerical factor をなくすと

$$K(x'_{l+1}, t_{l+1} | x_l, t_l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_{l+1}-t_l)}} \exp\left(-\frac{(x'_{l+1}-x_l)^2}{2(t_{l+1}-t_l)} + V'(x_{l+1})(t_{l+1}-t_l)\right)$$

の形になる。これは Wiener integral と呼ばれている。Kac は Wiener integral を (2・13) の形に書き換えて $V(x) = \frac{1}{2}(1+sgnx)$ なる特別な形を取り扱い、

$$\Pr\left\{\int_0^t V(x(\tau)) d\tau < \alpha\right\} = \int_{-\infty}^{\alpha} \rho_+(xt|00) dx = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{\alpha}{t}}$$

なることを示した。(2・13) の取り扱いでは $V(x)$ がもつと一般の形であつてもよく勿論 t を explicit に含んでもよい。(2・14) にはそれを明記した。(2・7) を解くには A が explicit に t によらなければ位相解析の教科書に書いてある方法によるか、また (2・9) はによつて固有函数及び固有値を求め

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \sum \exp(a(t-t_0)) \psi_a(x) \psi_a^*(x_0)$$

とするのが正攻法であるが、 A, A^* の固有函数がない場合不可能である。固有値を求める方法は t の higher order まで正確に求めることであり、これは不必要に高い精度で計算しているので実際の計算には損である。(2・8) はこの点を利用して表現したものであり、多重積分が遂行されれば、正しい結果を導くものである。Feynman は寧ろ固有値を求めていく問題に対し上述のような計算法で結果を出そうとしたのである。一般に多重積分を遂行するのは不可能であり、近似がなされなくてはならぬ。この近似は固有値を求める摂動計算とは異なり、摂動が収斂しないときでも、精度良く求められるのである。§2 で近似計算の方法を述べよう。

Montroll は path integral の特種な型に対して正確に計算した例をあげている。

Wiener integral $V(x) = p_i x^i$, p_i は正なる const. 即ち

$$\int \exp\left(\lambda \int_0^t p_i(\theta) x^i(\theta) d\theta\right) d_w x \quad (\int d_w x \text{ は Wiener integral})$$

$p_i(\theta) > 0$ を一般化し、

$$\int F\left(\int_0^t V(x(\theta)) d\theta\right) \exp\left(\lambda \int_0^t p_i(\theta) x^i(\theta) d\theta\right) d_w x \quad (i) \quad (2 \cdot 15)$$

の計算法、及び

$$\int \exp\left(-\alpha \int_0^t V(x(\theta)) d\theta\right) d_w x \quad (ii) \quad (2 \cdot 15)$$

の計算法を与えている。Wiener integral で kinetic term $\frac{(x_{j+1}-x_j)^2}{t_{j+1}-t_j}$ の代りに

$$u = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-G(z)\} dz, \quad 0 = \int_{-\infty}^{\infty} z e^{-G(z)} dz, \quad \mu \gamma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-G(z)} dz,$$

の性質をもつた。

$$G((x_{j+1}-x_j)/(t_{j+1}-t_j)^{1/2}) \quad (iii) \quad (2 \cdot 15)$$

で行う process に対する計算法を与えた。(ii) は potential の或る型、(iii) は kinetic term の或る型についての計算法であるが、(2・11) は一般にはこの型にならぬ。

例 2.

$$A = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\varphi \rho}{m} + V(x) \right\} = -\frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar}{i} \frac{\varphi}{m} \frac{d}{dx} + V(x) \right\} \quad (2 \cdot 16)$$

を考えよう。これに対応する K は

$$K(x_{i+1}t_{i+1}|x_it_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_{i+1}-t_i)}} \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1}-x_i}{t_{i+1}-t_i} - \frac{\varphi}{m} \right)^2 - V(x_{i+1}) \right] (t_{i+1}-t_i)\right) \quad (2 \cdot 17)$$

肩は $\frac{1}{2m}(\mathbf{p}-\varphi)^2 - V(x) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\varphi \mathbf{p}}{m} + \frac{\varphi^2}{2m} - V(x)$ であり、Lagrangian $\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\varphi \mathbf{p}}{m} -$

$V(x)$ と normalization の factor を異にする、従つて単に Lagrangian で $\mathbf{p} \rightarrow m(x_{i+1}-x_i)/(t_{i+1}-t_i)$ とおけばよいというわけではない。Feynman, Montroll は path integral で量子力学的平均値 $\langle mv^2/2 \rangle$ を出すには梯形近似を使わなくてはいけないことを述べている。このような人工的なことをしなくても (2・17) を用いれば正しく計算されることを示めよう、

$\partial\psi/\partial t = A\psi$ の解は $t=t_0$ での wave function を $\psi_0(x_0)$ とすると、

$$\psi_\varepsilon(xt) = \int \rho_+(xt|x_0t_0) \psi(x_0) dx_0 = \exp_+ \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar}{i} \frac{\varphi}{m} \frac{d}{dx} + V(x) \right\} ds \right) \psi_0(x)$$

である。今 $\varphi/m = \varepsilon \delta(s-t)$ とすると ψ_+ を (1・28) のように分けたとき、いつも $\exp \frac{\hbar}{i} \frac{\varphi}{m} \frac{d}{dx}$ の因子は前にあるから、これを分けて次のように書ける

$$\exp \left(-\frac{\varphi}{m} \frac{d}{dx} \right) \exp_+ \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} ds \right) \psi_0(x) = \exp \left(-\varepsilon \frac{d}{dx} \right) \psi(xt)$$

但し、
 $\psi(xt) = \exp_+ \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} ds \right) \psi_0(x)$

ψ は $\frac{d\psi}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} \psi$ を満す。

物理量 F の時刻 t における量子力学的期待値は $\langle F \rangle = \int \psi^*(xt) F \psi(xt) dx$ で与えられるから

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2} mv^2 \rangle &= \int \psi^*(xt) \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \psi(xt) dx = \int \psi^*(xt) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \psi(xt) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(xt) \frac{\partial}{\partial x^2} \psi_\varepsilon(xt) dx \Big|_{\varepsilon=0} \end{aligned}$$

となる。一方 (2・17) を用いれば

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(xt) &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{(x-\xi)-\varepsilon}{\tau} \right)^2 - V(x) \right]\right) \psi(\xi, t-\tau) d\xi \\ \frac{\partial}{\partial x^2} \psi_\varepsilon(xt) \Big|_{\varepsilon=0} &= \int \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{\tau} + \left\{ \frac{i}{\hbar} m \left(\frac{x-\xi}{\tau} \right) \right\}^2 \right\} K(xt|\xi, t-\tau) \psi(\xi, t-\tau) d\xi \end{aligned}$$

$$K(xt|\xi, t-\tau) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x-\xi}{\tau} \right)^2 - V(x) \right]\right)$$

$$\langle \frac{1}{2} mv^2 \rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \int \int \psi^*(xt) \left\{ \left(\frac{\hbar}{2\tau i} \right) + \frac{m}{2} \left(\frac{x-\xi}{\tau} \right)^2 \right\} K(xt|\xi, t-\tau) \psi(\xi, t-\tau) d\xi dx$$

即ち $\langle \frac{1}{2} mv^2 \rangle$ を計算するには、やはり直観的な対応で $\frac{m}{2} \left(\frac{x-\xi}{\tau} \right)^2$ の平均を取ると発散してしまい、誤りであることが分る。

今までの議論では確率変数の次元数についてふれなかつたが、確率変数が多數あるとき、 x はそれを成分とする vector と考えれば、今までのこととはそのまま成立する。これからも x は vector 記号で書かぬが次元数 f の vector であると考えてよい。

§2. Classical 近似

(2・7) の多重積分は一般に複雑で遂行されるとは限らない。 (2・8) を近似する方法を考えよう。 e の肩は $t_{i+1}-t_i$ の一次までとればよいから

$$K(x_{i+1} t_{i+1} | x_i t_i) = \frac{1}{A_{i+1}} \exp \left(-S \left(x_{i+1}, \frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i}, t_{i+1} \right) (t_{i+1} - t_i) \right)$$

と書けよう。

ここで A_i は (2・8) の積分を遂行することにより生じる normalization factor である。各 $\prod_{i=1}^n dx_i$ の積分で steepest descents が用いられるとき、 $x_i = \bar{x}_i + \eta_i$ とおき \bar{x}_i は x_i の展開の一次が消えるように決める。 $\eta_n = \eta_0 = 0$ である。

$$\begin{aligned} S(x_{i+1}, x_i, t_{i+1}, t_i) &= S + \eta_{i+1} \cdot \frac{\partial S}{\partial \bar{x}_{i+1}} + \eta_i \cdot \frac{\partial S}{\partial \bar{x}_i} + \frac{\eta_{i+1}^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_{i+1}^2} \\ &\quad + \frac{\eta_i^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_i^2} + \eta_i \eta_{i+1} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_{i+1} \partial \bar{x}_i} + \dots \end{aligned}$$

η_i の係数は

$$\sum_{i=1}^{n-1} \eta_i \left\{ \frac{\partial S(\bar{x}_i, \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, t_i)}{\partial \bar{x}_i} (t_i - t_{i-1}) + \frac{\partial S(\bar{x}_i, \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, t_i)}{\partial(\frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}})} - \frac{\partial S(\bar{x}_{i+1}, \frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{t_{i+1} - t_i}, t_{i+1})}{\partial(\frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{t_{i+1} - t_i})} \right\} = 0 \quad (2 \cdot 19)$$

より \bar{x}_i を決める。

$$\begin{aligned} \rho_+(xt|x_0 t_0) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int \exp \left(-\sum_{i=0}^{n-1} (t_{i+1} - t_i) \left\{ S(\bar{x}_{i+1}, \dot{\bar{x}}_{i+1}, t_{i+1}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \eta_{i+1} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_{i+1}^2} \cdot \eta_{i+1} + \frac{1}{2} \eta_i \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_i^2} \cdot \eta_i + \eta_{i+1} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{x}_{i+1} \partial \bar{x}_i} \cdot \eta_i + \dots \right\} \right) \prod_{i=1}^{n-1} \frac{d\eta_i}{A_{i+1} A_i} \end{aligned}$$

η の二次の項まで取り積分すれば

$$\rho_{c1}(xt|x_0 t_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \exp \left(-\sum_{i=0}^{n-1} (t_{i+1} - t_i) S(\bar{x}_{i+1}, \dot{\bar{x}}_{i+1}, t_{i+1}) \right) \left(\lim_{n \rightarrow \infty} (M_{n-1} \prod_{i=0}^{n-1} A_i^2) \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{(n-1)f} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2 \cdot 20)$$

$$M_{n-1} = \begin{vmatrix} a_{n-1} & b_{n-1} & & 0 & & & \\ b_{n-2} & a_{n-2} & b_{n-2} & & & & \\ & b_{n-2} & & & & & \\ & & 0 & & & & \\ & & & & & b_2 & \\ & & & & & & b_2 \\ & & & & & & a_1 \end{vmatrix} \quad (2 \cdot 21)$$

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{1}{t_{i+1} - t_i} \frac{\partial^2 S(\bar{x}_{i+1}, \frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{t_{i+1} - t_i}, t_{i+1})}{\partial(\frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{t_{i+1} - t_i})^2} + \frac{1}{t_i - t_{i-1}} \frac{\partial^2 S(\bar{x}_i, \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, t_i)}{\partial(\frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}})^2} \\ &\quad + \frac{\partial^2 S(\bar{x}_i, \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, t_i)}{\partial \bar{x}_i \partial(\frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}})} + (t_i - t_{i-1}) \frac{\partial^2 S(\bar{x}_i, \dot{\bar{x}}_i, t_i)}{\partial \bar{x}_i^2} \end{aligned} \quad (2 \cdot 22)$$

$$b_i = - \frac{\partial^2 S\left(\bar{x}_i, \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, t_i\right)}{\partial \bar{x}_i \partial\left(\frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}\right)}$$

ここで $\lim_{n \rightarrow \infty}$ を取れば (2・19) は $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} (t_{i+1} - t_i) S(\bar{x}_{i+1}, \dot{\bar{x}}_{i+1}, t_{i+1}) = S_{cl}\left(\bar{x}, \frac{d\bar{x}}{dt}, t\right)$ とすれば

$$\int_{t_0}^t \left(\frac{\partial S_{cl}\left(\bar{x}, \frac{d\bar{x}}{dt}, t\right)}{\partial \bar{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial S_{cl}\left(\bar{x}, \frac{d\bar{x}}{dt}, t\right)}{\partial\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right)} \right) dt \quad (2 \cdot 23)$$

となり、 $S = L/\hbar$ ならば Lagrangian から classical な運動方程式を導き出す式となり $\bar{x}(t)$ は classical な path を表わす。 (2・20) は

$$p_{cl}(xt|x_0 t_0) = \exp\left(- \int_{t_0}^t S_{cl}\left(\bar{x}, \frac{d\bar{x}}{dt}, t\right) dt\right) \left(\lim_{n \rightarrow \infty} (M_{n-1} \prod_{i=1}^n A_i)^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{(n-1)f}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2 \cdot 20')$$

で S が Lagrangian なら classical path で積分した action を求めて \hbar で割ればよいことになる。この解は Schrödinger eq. を W. K. B. 法で解いた 0th. approximation と一致する。

(2・18) の積分が簡単に求まらないとき (2・20') を決めるには A_i 及び S を求める必要がある。 (2・8) の K の積分で steepest descents 法を用いれば、

$$K(x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i) = \left((2\pi)^f (t_{i+1} - t_i)^f \text{Det} - \frac{\partial^2 A}{\partial \bar{k}_i^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \times \exp((t_{i+1} - t_i) \{A(x_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1}) + i\bar{k}_i \dot{x}_{i+1}\})$$

但し、 \bar{k} は $i\partial A(x_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1}) / \partial \bar{k}_i = \dot{x}_{i+1}$

から決まる。更に前述べた方法を適用すると (2・20') は

$$S(\bar{x}_{i+1}, \dot{\bar{x}}_{i+1}, t_{i+1}) = -A(\bar{x}_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1}) - i\bar{k}_i \cdot \dot{\bar{x}}_{i+1} \quad (2 \cdot 25)$$

$$A_{i+1} = \sqrt{\{2\pi(t_{i+1} - t_i)\}^f \text{Det} - \frac{\partial^2 A(\bar{x}_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1})}{\partial \bar{k}_i^2}} = \sqrt{\{2\pi(t_{i+1} - t_i)\}^f \text{Det} \frac{i\partial \dot{\bar{x}}_{i+1}}{\partial \bar{k}_i}} \quad (2 \cdot 26)$$

$$a_i = \frac{1}{t_{i+1} - t_i} \frac{\partial(-i\bar{k}_i)}{\partial \dot{\bar{x}}_{i+1}} + \frac{1}{t_i - t_{i-1}} \frac{\partial(i\bar{k}_{i-1})}{\partial \dot{\bar{x}}_{i+1}} + \frac{\partial(-i\bar{k}_{i-1})}{\partial \bar{x}_i} + (t_i - t_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} (-A(\bar{x}_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1})) \quad (2 \cdot 22')$$

$$b_i = -\partial(-i\bar{k}_{i-1}) / \partial \bar{x}_i$$

を代入して求まる。ここで $\partial^2 A(x_{i+1}, \bar{k}_i, \kappa(\bar{k}_i), t_{i+1}) / \partial \bar{k}_i^2$ は x_{i+1} について、滑らかな函数で (2・19) を決めるのに余り寄与しないとした。

$\partial(-i\bar{k}_{i-1}) / \partial \bar{x}_i = 0$ 即ち $\bar{k}_{i-1}(\dot{\bar{x}}_i)$ の時、 A で微分演算と x の函数の積がないときは (2・20') は

$$p_{cl}(xt|x_0 t_0) = \exp\left(- \int_{t_0}^t S_{cl}\left(\bar{x}, \frac{d\bar{x}}{dt}, t\right) dt\right) \left((2\pi)^f \prod_{i=1}^f \lambda_i(t) dt\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2 \cdot 20'')$$

ここで $\lambda_i(t)$ は Matrix $-\partial^2 A / \partial \bar{k}_i^2 = J(\dot{\bar{x}}_i; k_i)$ の eigen value である。C. Morette は A が Hermite のとき K が unitary になるということから (2・20) の normalization factor を決めるのに

$$\int K^*(x_{j+1} t_{j+1} | x_j t_j) K(x_{j+1} t_{j+1} | x_j' t_j) dx_{j+1} = \delta(x_j - x_j') \quad (2 \cdot 27)$$

になるように決めた。Morette の方法によると

$$\frac{1}{A_i^2} = \frac{1}{(2\pi)^f} \text{Det} \frac{d^2 S(\bar{x}_{i+1}, \frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{t_{i+1} - t_i}, t_{i+1})}{d\bar{x}_{i+1} d\bar{x}_i} (t_{i+1} - t_i) \quad (2 \cdot 27)$$

である。然しこれは $\text{det}S$ が Lagrangian のときのみ正しいのであり他の場合はよくない。例へば次のような Hamiltonian に対し、 $\text{det}S$ は Lagrangian でなく (2・27) は正しくないことを示めよう。

例 3.

$$A = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2m} (\dot{p} + \varphi(x))^2 + V(x) \right\} \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$K(x_{j+1}t_{j+1}|x_jt_j) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t_{j+1}-t_j)} \right)^{\frac{f}{2}} \times \exp \left(\frac{i}{\hbar}(t_{j+1}-t_j) \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1}-x_j}{t_{j+1}-t_j} \right)^2 - \varphi(x_{j+1}) \cdot \left(\frac{x_{j+1}-x_j}{t_{j+1}-t_j} \right) - \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \varphi(x_{j+1}) - V(x_{j+1}) \right\} \right)$$

これは $(t_{j+1}-t_j)$ の低い order で unitary 性を満している。

$$S(\bar{x}_j, \dot{\bar{x}}_{j+1}, t_{j+1}) = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_{j+1}^2 - \varphi(x_{j+1}) \cdot \dot{\bar{x}}_{j+1} - \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \varphi(x_{j+1}) - V(x_{j+1}) \right\} \quad (2 \cdot 28)$$

第三項がある点 Lagrangian と違つてある。normalization が (2・27) ではない。 $\exp(-\frac{1}{2}\nabla \cdot \varphi/m)$ という因子が入つてゐるからである。 A に $\partial^2/\partial x^2$ までしか含まれてゐないから、(2・28) を導くに用いた (2・24) は正しく (2・28) の結果は正確である。(2・22) は

$$-\text{grad}\{\varphi(xt) \cdot \dot{\bar{x}} + (\hbar/2mi)\nabla \cdot \varphi(\bar{x}t) + V(\bar{x})\} = d(m\dot{\bar{x}} - \varphi(\bar{x}t))/dt \quad (2 \cdot 29)$$

$$a_i = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \left(\frac{1}{t_{i+1}-t_i} + \frac{1}{t_i-t_{i+1}} \right) m \mathbf{1} - \text{grad}_{x_i} \varphi(x_i) - (t_i-t_{i-1}) \text{grad}_{x_i} \text{grad}_{x_i} \left(\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \varphi(x_i) + V(x_i) \right) \right\}$$

$$b_i = \frac{1}{i\hbar} \text{grad}_{x_i} \varphi(x_i)$$

従つて normalization は

$$\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n A_i^2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{(n-1)f} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\pi i \hbar (t-t_0)}{m} \right)^{-\frac{f}{2}} \exp \left(\frac{1}{2m} \nabla \cdot \varphi(\bar{x}) \right) \quad (2 \cdot 30)$$

$$\rho_{01}(xt|x_0t_0) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \left\{ \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}^2 - \varphi(\bar{x}, t) \cdot \dot{\bar{x}} - V(\bar{x}, t) \right\} \right) \left(\frac{2\pi i \hbar (t-t_0)}{m} \right)^{-\frac{f}{2}}$$

$m\dot{\bar{x}}^2/2 - \varphi(\bar{x}t) \cdot \dot{\bar{x}} - V(\bar{x}t)$ は Lagrangian になつてゐる。

然し、(2・29) はこの変分から決まる path を意味してない。 $\nabla \cdot \varphi = 0$ なら一致する。 φ が vector potential なら $\nabla \cdot \varphi = 0$ と置いてよいから問題はないが、 $\nabla \cdot \varphi \neq 0$ のときは (2・30) で $\text{det}S$ が Lagrangian 型になつてゐるからといつて、Morette のような normalization の決め方をするのはよくない。元来 Feynman は $\hbar \rightarrow 0$ での近似として stationary phase の近似に相当して求めたので (2・29) 中の \hbar の項は無視されるべきものであるが一般の微分方程式に対しても許されない。classical path を決める (2・29) が正確に導出できないからである。

例 4.

$$A = a \frac{\partial}{\partial x} + V(x)$$

$$K(x_{i+1}t_{i+1}|x_it_i) = \exp(V(x_{i+1})(t_{i+1}-t_i)) \delta((t_{i+1}-t_i)a + x_{i+1} - x_i)$$

$$\rho(xt|xt_0) = \lim_{\max|t_{i+1}-t_i| \rightarrow 0} e^{V(x_nxt_n-t_{n-1})} \cdots e^{V(x_3xt_3-t_2)} e^{V(x_1xt_1-t_0)} \delta(x_n-x_0+a(t_n-t_0))$$

但し $x_1=x_0-(t_1-t_0)a \quad x_2=x_0-(t_2-t_0)a \cdots x_n=x_0-(t_n-t_0)a$

$$= \exp\left(\int_{t_0}^t V(x(t')) dt'\right) \delta(x-x_0+a(t-t_0)) \quad (2 \cdot 31)$$

但し $x(t')=x_0-a(t'-t_0)$
 t' の代りに $x(t)$ を変数に取れば

$$= \exp\left(-\frac{1}{a} \int_{x_0}^x V(x') dx'\right) \delta(x-x_0+a(t-t_0)) = \exp\left(\frac{1}{T}(F(x)-F(x_0))\right) \delta(x-x_0+a(t-t_0))$$

となり、遷移確率 $\rho_+(xt|xt_0)$ が積分函数 $F(x)$ の最終点と出発点との差のみによる。これは classical 近似を行つたときも、このようになることがある。統計力学では、Boltzmann の原理より確率密度が $\exp((\text{entropy})/T)$ に比例する関係がある。非可逆現象を表わす偏微分方程式から、path integral で状態間の遷移確率を求めるとき、遷移した状態の entropy の増加 $F(x)-F(x_0)$ で表わされることが分る。path integral の統計力学への興味ある応用である。

ここで述べた計算法はそれぞれの応用に対して変形することができる。 $A(x_{i+1}, k_i, \kappa(k_i), t_{i+1})$ が k_i について複雑な函数なら (2・24) で述べたように k についても x と独立に steepest descents 法を行い、且 k を決める (2・23) (2・24) の連立方程式を立て $(2n-1)^f$ 重積分の極限として classical path を決めてよい。この公式は (2・24) 等を少し変えればよいから述べぬことにする。微積分方程式の例題は省略するがこの方法が使える。

第Ⅱ章 Stochastic Problem への応用

今まででは偏微分方程式が与えられたとき、その解を積分表示で現わし微小時間の遷移確率を求める公式を導いた。微小時間の遷移確率 K が与えられたときに、large time における遷移確率 ρ_+ を与える微分方程式は、古くから generalized Fokker-Plank eq. (または Kolmogoroff eq.) として知られているものである。始めの内、前に述べたことと対応させながら復習することにしよう。

微小時間の遷移確率が

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} K(x, t + \Delta t | x_0, t) = \delta(x - x_0) \quad (3 \cdot 1)$$

であるように与えられているならば、(2・8) より

$$K(x, t + \Delta t | x_0, t) = \frac{1}{(2\pi)^f} \int dk \exp(\Delta t A(kx_0) + ik \cdot (x - x_0)) \quad (3 \cdot 2)$$

と書ける。 $\Delta t A(k, x_0)$ は Fourier 変換すると

$$\begin{aligned} \exp(\Delta t A(k, x_0)) &= \int dx \exp(-ik \cdot (x - x_0)) K(xt + \Delta t | x_0, t) \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} ((-ik)^n / n!) M_n(x_0, t) \Delta t + O((\Delta t)^2) \end{aligned} \quad (3 \cdot 3)$$

$$\text{但し } M_n(x_0, t) = \int dx (x - x_0)^n K(xt + \Delta t | x_0, t) \quad \text{の } \Delta t \text{ の一次の order} \quad (3 \cdot 4)$$

である。 $K(xt + \Delta t | x_0, t)$ が与えられれば M_n は必ず決まるが、逆は求まらない。 t での分布 $\rho(xt)$ または遷移確率 $\rho_+(xt | x_0, t_0)$ は

$$\rho(xt + \Delta t) = \int K(xt + \Delta t | \xi \tau) \rho(\xi \tau) d\xi$$

で決まる。従つて

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(xt)}{\partial t} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\rho(xt + \Delta t) - \rho(xt)}{\Delta t} \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^f} \int \int \exp(\Delta t A(k\xi) + ik \cdot (x - \xi)) dk d\xi \rho(\xi t) - \rho(xt) \right\} \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int \exp\left(\Delta t A\left(\frac{\partial}{\partial x}, \xi\right)\right) d\xi \int dk \exp(ik \cdot (x - \xi)) \rho(\xi t) - \rho(xt) \right\} \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int \left[\left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n / n! \right) M_n(\xi t) \Delta t \right] \delta(\xi t) d\xi - \rho(xt) \right\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n / n! \int M_n(\xi t) \delta(x - \xi) \rho(\xi t) d\xi \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n / n! (M_n(xt) \rho(xt))
\end{aligned}$$

これが Kolmogoroff 1st eq. である。Gaussian process ならば (3・5) は $n=2$ でなくなり、普通の拡散方程式型になる。一般的 Markoff process で遷移確率が何であつても n 次の能率で Δt の一次の項 M_n が残れば n 階の微分方程式になる。(3・2) で遷移確率 $K(xt + \Delta t | xt)$ を完全に決めるには、 Δt の高次の項も必要であるが、Kolmogoroff eq. にはその必要はなく、能率の Δt の一次の項が等しい process はすべて同じ微分方程式に従い、実際に用いられるには、 K についてそれほど微細な知識を必要としないのである。

(3・4) を導出したと同様に

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_+(xt | x_0 t_0)}{\partial t_0} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\rho_+(xt | x_0 t_0) - \rho_+(xt | x_0 t_0 - \Delta t)}{\Delta t} \\
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \rho_+(xt | x_0 t_0) - \int d\xi \rho_+(xt | \xi t_0) \int \frac{1}{(2\pi)^f} dk \exp(\Delta t A(kx_0) + ik \cdot (\xi - x_0)) \right\} \\
&= - \int \rho_+(xt | \xi t_0) \sum_{n=1}^{\infty} M_n(x_0 t_0) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n / n! \delta(\xi - x_0) d\xi \\
&= - \sum_{n=1}^{\infty} M_n(x_0 t_0) \left(-\frac{\partial}{\partial x_0}\right)^n / n! \rho_+(xt | x_0 t_0)
\end{aligned} \tag{3・6}$$

(3・6) は Kolmogoroff 2nd eq. として知られている。(3・6) は (2・4) に対応し $\rho_+(xt | x_0 t_0)$ は (2・6) の関係を満す Markoff process である。

$K(xt + \Delta t | xt)$ を求める方程式として、Langevin eq. といわれる方程式がある。これは x の平均値の行動を表わす運動方程式に、 $\langle F(t) \rangle = 0$ の random farce を付した stochastic differential eq. であつて、各瞬間の x の分布を決める方程式である。多くの stochastic problem は stochastic differential eq. で表わされる。この解法が問題となつている。Langevin eq. の解が Markoff process であることが分つているなら、Langevin eq. を微小時間で解いて $K(xt + \Delta t | xt)$ を出し、Kolmogoroff 1st eq. を作り、これを解けば遷移確率が求まる。運動方程式が linear であり random force が Gaussian process に従うなら x も Gaussian process で適当に次元数を増せば Doob の条件を満し、Markoff process になることが分る。従つて Kolmogoroff 1st eq. が導出され、path integral で表わされる。

例 1.

$$\frac{dx}{dt} + Ax = F(t)$$

$F(t)$ は Gaussian process に従い $\langle F(t) \cdot F(t') \rangle = D\delta(t - t')$ とする。Kolmogoroff 1st eq. は

$$\frac{\partial \rho_+(xt | x_0 t_0)}{\partial t} = \left(\frac{1}{2} D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + Ax \frac{\partial}{\partial x} + fA \right) \rho_+(xt | x_0 t_0) \tag{3・7}$$

これを path integral で表わせば

$$K(x_{t+1} t_{t+1} | x_t t_t) = \frac{1}{\sqrt{\{2\pi(t_{t+1}-t_t)D\}^f}} \exp\left(-(t_{t+1}-t_t)\left\{\frac{1}{2D}\left(Ax_{t+1} + \frac{x_{t+1}-x_t}{t_{t+1}-t_t}\right)^2 - fA\right\}\right) \quad (3 \cdot 8)$$

x について積分すると

$$\rho_+(xp|t_0 t_0) = (2\pi \lim M_{n-1} \prod_{i=0}^{n-1} (t_{i+1}-t_i)D)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\int_{t_0}^t \left\{\frac{1}{2D}(A\bar{x} + \dot{x})^2 - fA\right\} ds\right)$$

但し $\frac{d^2\bar{x}}{ds^2} = A^2\bar{x}$ $\dot{A} = 0$ とした。

$$= \left(\frac{A}{\pi D(1-\exp(-2A(t-t_0)))}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{A}{D} \frac{(x-x_0 e^{-A(t-t_0)})^2}{1-e^{-2A(t-t_0)}}\right) \quad (3 \cdot 9)$$

(3・9) の計算は例2の後で述べる特性函数を求める方法で容易に計算される。

例2. $\frac{\partial p}{\partial t} + Ap + Bx + K(t) = F(t)$
 $\frac{\partial x}{\partial t} = Cp$

Kolmogoroff 1st eq.

$$\frac{\partial \rho_+(xp|t_0 t_0)}{\partial t} = \left\{ \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} + (Ap + Bx + K) \frac{\partial}{\partial p} - Cp \frac{\partial}{\partial x} + fA \right\} \rho_+(xp|t_0 t_0) \quad (3 \cdot 10)$$

$$K(x_{t+1} p_{t+1} t_{t+1} | x_t p_t t_t) = ((\dot{x}_{t+1} - Cp_{t+1})(t_{t+1} - t_t)) (2\pi D(t_{t+1} - t_t))^{-\frac{1}{2}} \times \exp\left((t_{t+1} - t_t)fA - (t_{t+1} - t_t) \frac{(\dot{p}_{t+1} + Ap_{t+1} + Bx_{t+1} + K(t_{t+1}))^2}{2D}\right) \quad (3 \cdot 11)$$

$$\rho_+(xp|t_0 t_0) \propto \delta\left(x - x_0 - C \int_{t_0}^t p(s) ds\right) \times \exp\left(-\int_{t_0}^t \frac{1}{2D} (\dot{p}(s) + Ap(s) + Bx_0 + BC \int_{t_0}^s p(s) ds' + K(s))^2 ds\right) \quad (3 \cdot 12)$$

ここで A, B, C は常数とした。 p の path は e の肩の p に関する変分より決まる path について行う。(3・12) の実際の計算は複雑である。計算が容易に遂行できる方法を考える。 ρ_+ を Fourier 変換

$$\rho_+(\alpha\beta t | \quad) = \iint e^{i\alpha x + i\beta p} \rho_+(xp | \quad) dx dp \quad (3 \cdot 13)$$

して、特性函数の満たす微分方程式を作る。

$$\frac{\partial \rho_+(\alpha\beta t | \alpha_0 \beta_0 t_0)}{\partial t} = \left(-\frac{\beta^2}{2} D - \beta \left(A \frac{\partial}{\partial \beta} + B \frac{\partial}{\partial \alpha} + iK\right) + C\alpha \frac{\partial}{\partial \beta}\right) \rho_+(\alpha\beta t | \alpha_0 \beta_0 t_0) \quad (3 \cdot 10')$$

$$K(\alpha_{t+1} \beta_{t+1} t_{t+1} | \alpha_t \beta_t t_t) = \delta(\alpha_{t+1} - \alpha_t - (t_{t+1} - t_t)\beta_{t+1}B) \times \delta((1-A(t_{t+1} - t_t))\beta_{t+1} - \beta_t + \alpha_{t+1}C(t_{t+1} - t_t)) \exp\left(-\left(\frac{D}{2}\beta_{t+1}^2 + iK(t_{t+1})\beta_{t+1}\right)(t_{t+1} - t_t)\right) \quad (3 \cdot 11')$$

α について積分すれば

$$\begin{aligned} \rho_+(\alpha\beta t | \alpha_0 \beta_0 t_0) &= \lim_{\max |t_{t+1} - t_t| \rightarrow 0} \int \cdots \int \delta(\alpha - \alpha_0 - \sum_{j=0}^{n-1} B\beta_{j+1}(t_{j+1} - t_j)) \\ &\times \prod_{i=0}^{n-1} \delta(\beta_{t+1}(1-A(t_{t+1} - t_t)) - \beta_t + (\alpha_0 + \sum_{j=0}^i (t_{j+1} - t_j)\beta_{j+1}B) C(t_{t+1} - t_t)) \\ &\times \exp\left(-\sum_{i=0}^{n-1} (t_{t+1} - t_t) \left(\frac{D}{2}\beta_{t+1}^2 + iK(t_{t+1})\beta_{t+1}\right)\right) \prod_{i=0}^{n-1} d\beta_i \end{aligned}$$

β について積分し極限を取ると

$$\rho_+(\alpha\beta t|\alpha_0\beta_0t_0) = \delta\left(\alpha - \alpha_0 - B \int_{t_0}^t \beta(t') dt'\right) \delta(\beta - \beta(t)) \\ \times \exp\left(A(t-t_0) - \frac{1}{2} D \int_{t_0}^t \beta^2(t') dt' - i \int_{t_0}^t K(t) \beta(t) dt'\right) \quad (3 \cdot 12')$$

但し

$$\left. \begin{aligned} \beta(t') &= \frac{\beta_0 \mu_1 - \alpha_0 C}{(\mu_1 - \mu_2)} \exp(\mu_1(t' - t_0)) - \frac{\beta_0 \mu_2 - \alpha_0 C}{\mu_1 - \mu_2} \exp(\mu_2(t' - t_0)) \\ \mu_1 &= \frac{1}{2}(A + \sqrt{A^2 - 4BC}) \quad \mu_2 = \frac{1}{2}(A - \sqrt{A^2 - 4BC}) \end{aligned} \right\} \quad (3 \cdot 12'')$$

(3・13) より

$$\rho_+(xpt|x_0p_0t_0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \cdots \int e^{-ip\beta - ix\alpha} \rho_+(\alpha\beta t|\alpha_0\beta_0t_0) e^{ix_0\alpha_0 + ip_0\beta_0} d\alpha d\beta d\alpha_0 d\beta_0 \quad (3 \cdot 13')$$

(3・13') ～ (3・12') を代入すれば

$$\begin{aligned} \rho_+(xpt|x_0p_0t_0) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int \exp\left(-ip\beta(t) - ix\alpha(t) + A(t-t_0) - \frac{D}{2} \int_{t_0}^t \beta^2(t') dt'\right. \\ &\quad \left. - i \int_{t_0}^t K(t) \beta(t') dt' + ix_0\alpha_0 + ip_0\beta_0\right) d\alpha d\beta_0 \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int \exp\left(-\frac{1}{2} P \frac{C^2}{\mu_1 \mu_2} \alpha^2 - \frac{1}{2} Q \beta_0^2 + R \frac{C}{\mu_1 \mu_2} \alpha_0 + iT\beta_0 - U\right) d\alpha d\beta_0 \\ &= \frac{1}{2\pi C} \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2}{PQ - R}} \exp\left(-U - \frac{1}{2} \frac{1}{PQ - R^2} (PT^2 + 2RTS + QS^2)\right) \end{aligned} \quad (3 \cdot 15)$$

但し

$$P = \frac{D}{2(\mu_1 - \mu_2)^2} \left\{ \mu_2 e^{2\mu_1(t-t_0)} + \mu_1 e^{2\mu_2(t-t_0)} - \frac{4\mu_1 \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} e^{(\mu_1 + \mu_2)(t-t_0)} - \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_1 + \mu_2} \right\}$$

$$Q = \frac{D}{2(\mu_1 - \mu_2)^2} \left\{ \mu_1 e^{2\mu_1(t-t_0)} + \mu_2 e^{2\mu_2(t-t_0)} - \frac{4\mu_1 \mu_2}{\mu_1 - \mu_2} e^{(\mu_1 + \mu_2)(t-t_0)} - \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_1 + \mu_2} \right\}$$

$$R = \frac{D \sqrt{\mu_1 \mu_2}}{2(\mu_1 - \mu_2)^2} (e^{\mu_1(t-t_0)} - e^{\mu_2(t-t_0)})^2$$

$$S = \sqrt{\frac{B}{C}} x_0 + \sqrt{\frac{B}{C}} x \frac{1}{\mu_1 - \mu_2} (\mu_2 e^{\mu_1(t-t_0)} - \mu_1 e^{\mu_2(t-t_0)}) + \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2} p}{\mu_1 - \mu_2} (e^{\mu_1(t-t_0)} - e^{\mu_2(t-t_0)}) \\ + \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{\mu_1 - \mu_2} \int_{t_0}^t K(t') (e^{\mu_1(t'-t_0)} - e^{\mu_2(t'-t_0)}) dt'$$

$$T = -\sqrt{\frac{B}{C}} x \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{\mu_1 - \mu_2} (e^{\mu_1(t-t_0)} - e^{\mu_2(t-t_0)}) + p_0 - \frac{p}{\mu_1 - \mu_2} (\mu_1 e^{\mu_1(t-t_0)} - \mu_2 e^{\mu_2(t-t_0)}) \\ - \frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \int_{t_0}^t K(t') (\mu_1 e^{\mu_1(t'-t_0)} - \mu_2 e^{\mu_2(t'-t_0)}) dt'$$

$$U = -A(t-t_0)$$

例1及び2は普通の Brown運動の理論及び応用に出てくる例であるが、例2について ρ_+ を求めた式はないので (3・15) の式を書き上げると

$$\begin{aligned} \rho_+(xpt|x_0p_0t_0) &= \left\{ \frac{C}{B} \frac{\pi^2 D^2}{A^2} (1 - \exp(U) \phi^{+2}) (1 - \exp(U) \phi^{-2}) \right\}^{-\frac{1}{2}} \\ &\times \exp\left[-\frac{A}{D} (1 - \exp(U) \phi^{+2})^{-1} \left\{ \sqrt{\frac{B}{C}} \sqrt{\frac{1+\varphi}{2}} \left(x - x_0 \exp\left(\frac{1}{2}U\right) \phi^+\right)\right.\right. \\ &\quad \left.\left. - \sqrt{\frac{1-\varphi}{2}} \left(p + p_0 \exp\left(\frac{1}{2}U\right) \phi^+ - \exp\left(\frac{1}{2}U\right) \phi^- + \int_{t_0}^t K(t') g(t) dt'\right)\right\}^2\right] \\ &\quad + \exp\left(\frac{1}{2}U\right) (\operatorname{cosech} \delta + \phi^+ \coth \delta) \int_{t_0}^t K(t') u(t') dt' \Big\}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \exp \left[-\frac{A}{D}(1-\exp U \phi^{-2})^{-1} \left\{ \sqrt{\frac{B}{C}} \sqrt{\frac{1-\varphi}{2}} \left(x - x_0 \phi^{-} \exp \left(\frac{1}{2} U \right) \right. \right. \right. \\ & + \sqrt{\frac{1+\varphi}{2}} \left(p - p_0 \exp \left(\frac{1}{2} U \right) \phi^{-} + \exp \left(\frac{1}{2} U \right) \phi^{-} \int_{t_0}^t K(t') g(t') dt' \right. \\ & \left. \left. \left. + \exp \left(\frac{1}{2} U \right) (\operatorname{cosech} \delta - \phi^{-} \coth \delta) \int_{t_0}^t K(t') u(t') dt' \right) \right\}^2 \right] \end{aligned} \quad (3 \cdot 16)$$

ここで

$$\begin{aligned} g(t) &= \frac{1}{2} (\exp \mu_1(t-t_0) + \exp \mu_2(t-t_0)) \quad u(t) = \frac{1}{2} (\exp \mu_1(t-t_0) - \exp \mu_2(t-t_0)) \\ \varepsilon &= \frac{A}{\sqrt{A^2 - 4BC}} \quad \delta = \frac{1}{2} \sqrt{A^2 - 4BC} (t-t_0) \quad \varphi = \frac{\cosh \delta}{\sqrt{\varepsilon^2 \sinh^2 \delta + 1}} \\ \phi^{\pm} &= \sqrt{\varepsilon^2 \sinh^2 \delta + 1} \pm \sinh \delta \end{aligned}$$

である。例1及び2では $t \rightarrow \infty$ で初期状態によらぬ一定の分布に従う。例2の場合外力が時間によらぬ常数とすると

$$\rho_+(xp\infty) = \sqrt{\frac{A^2 B}{\pi^2 C D^2}} \exp \left(-\frac{AB}{CD} \left(x + \frac{K}{B} \right)^2 - \frac{A}{D} p^2 \right) \quad (3 \cdot 17)$$

例1で $\rho_+(xp\infty)$ が Maxwell 分布になることから $C=1$ とすれば $D=2kTA/m$ として決まる。(Chandrasekhar 参照)

Onsager & Machlup 及び橋爪氏は random force が Gaussian に従ふとき $\rho_+ \propto \exp(-const \int F^2(t) dt)$ またはこれと似た仮定より出発して、(3・9) 及び (3・12) と類似の式を導出し、random force が Gaussian に従うとき遷移確率を求める公式とした。path integral は Markoff process であるから、Langevin eq. の解が Markoff process に従うことが判つていなければ、この公式は使えない。橋爪氏は例1の場合で O. K. Rice の方法を用いて証明している。

例 4. $\dot{x} + f(x) = F(t)$

$f(x)$ が x について linear でなければ、Markoff であるか分らぬ。正確に解くことも困難である。また正確に解いたからといつて実験に合うかも判らぬ。或種の問題では、刻々に測定される実験値を前の測定値のみに依存する (simple Markoff process) として測定値間の微分方程式を立てることがなされる。これに対応して $\rho_+(xt|x_0, t_0)$ に Markoff の仮定をし微小時間の遷移確率で決まる微分方程式——Kolmogoroff 1st eq. ——で代用することにする。1st eq. は

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho_+ + \frac{\partial}{\partial x} (f(x) \rho_+) \quad (3 \cdot 18)$$

path integral で表わせば

$$K(x_{t+1}, t_{t+1} | x_t, t_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t_{t+1}-t_t)}} \exp \left((t_{t+1}-t_t) f'(x_{t+1}) - \frac{(t_{t+1}-t_t)}{2D} \left(f(x_{t+1}) + \frac{x_{t+1}-x_t}{t_{t+1}-t_t} \right)^2 \right) \quad (3 \cdot 19)$$

となり normalization は別として $\rho_+ \propto e^{-\int_{t_0}^t (F(t'))^2 dt'}$ になつてゐる。Onsager & Machlup 及び橋爪氏の主張はこのように Markoff 仮定をすることの直観的な表現であるといえよう。

例 4. $\dot{x} = ixF(t)$

これも Markoff process であるか判らぬ。 $x(t)$ を解くと

$$x(t) = x(0) \exp \left(i \int_{t_0}^t F(t') dt' \right) \quad (3 \cdot 20)$$

これは位相が刻々に at random に変る確率変数の分布を求める問題であり、電気工学の frequency modulation や共鳴吸収に出てくる問題である。

stochastic equation を正確に解いて見よう。

$$\begin{aligned}
 \rho_+(xt|x_0t_0) &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik(x-x_0)} dk \langle e^{ik(x-x_0)} \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik(x-x_0)} dk \langle \exp\left(ikx_0 \left(\exp\left(i \int_{t_0}^t F(t') dt'\right) - 1\right)\right) \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-ikx_0} dk \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ikx_0)^n}{n!} \frac{1}{1 + \frac{1}{2} D(t-t_0) n^2} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-ikx_0} dk \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ikx_0)^n}{n!} \int_0^{\infty} \frac{1}{2i} \left\{ \exp\left(-\left(n\sqrt{\frac{D}{2}(t-t_0)} + \epsilon - i\right)y\right) \right. \\
 &\quad \left. - \exp\left(-\left(n\sqrt{\frac{D}{2}(t-t_0)} + \epsilon + i\right)y\right) \right\} dy \\
 &= \int_0^{\infty} \delta\left(x - x_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{D}{2}(t-t_0)}y\right)\right) \sin y dy \\
 &= \sqrt{\frac{2}{D(t-t_0)}} \frac{1}{x} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{D(t-t_0)}} \log \frac{x_0}{x}\right)
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

但し、 $x_0 \geq x \geq 0$ で他の値では 0 である。

(3.21) は明らかに Chapman-Kolmogoroff eq. を満さなく non-Markoff であり、境界条件が入っている。

$$\dot{x} = xF(t) \quad x \geq 0$$

に対してやはり non-Markoff であり

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \frac{1}{\sqrt{2D(t-t_0)}} \frac{1}{x} \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{D(t-t_0)}} |\log x - \log x_0|\right) \tag{3.22}$$

Markoff の仮定をして Kolmogoroff 1st eq. を作れば

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x^2 \rho_+) - \frac{D}{2} \frac{\partial}{\partial x} (x \rho_+)$$

この解は

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t-t_0)}} \frac{1}{x} \exp\left(-\frac{(\log x - \log x_0)^2}{2D(t-t_0)}\right) \tag{3.23}$$

であつて、前に述べた Onsager & Machlup 及び橋爪氏の主張 $\rho_+ \propto \exp - \int_{t_0}^t F^2(t') dt$ に従う。

さて (3.22) を t で微分して微分方程式を立てて見ると、 $x=x_0$ 以外では

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial t} = -\frac{D}{4} (\log x - \log x_0) \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} (x \rho_+) \right) \right) - \frac{D}{4} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} (x \rho_+) \right) \tag{3.24}$$

となり、(3.23) と随分異なつている。然も $x=x_0$ では operator として表わせない。(3.22) は $x=x_0$ で x の微分が存在しないが、Markoff の仮定をした (3.23) では $x=x_0$ が丸くなつて微分可能となり operator で表わされている。第一章及び二章で、parameter について微分可能な遷移確率が微分方程式で表わされれば Markoff process であることが分つた。non-Markoff process は operator で表わせない所があり微分方程式で表わしても上の意味をも含めて広い意味での境界条件が付加するのである。これは境界値問題の解法を考慮すれば容易に明らかとなろう。境界値問題を一般に解くには parameter について Laplace 変換を行い、そこで境界条件を満すように微分方程式を解きこれを逆変換して求めるのである。従つて境界条件のために過去、未来の影響がすべて入る。Markoff でなくなるのである。然し境界条件があればすべて non-Markoff であるというわけではない。勿論 Markoff であるものもある。次にその例を示めそう。

例 5. 一次元の Brown 運動で $x=x_1$ に吸収端がある場合. 式で書けば

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 \rho_+}{\partial x^2} \quad \text{で} \quad \rho(x_1 t | x_0 t_0) = 0 \quad (3 \cdot 25)$$

但し $x < x_1$ $x_0 < x_1$

(3・25) の形式的な解は

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \exp\left(\frac{D}{2}(t-t_0)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \delta(x-x_0) \quad (3 \cdot 26)$$

であるが, 境界条件 $\rho(x_1 t | x_0 t_0) = 0$ を考慮して $\delta(x-x_0)$ 関数として $\sum_k \sin k(x-x_1) \sin k(x_0-x_1)$

を取ればよい. (3・26) は

$$\begin{aligned} \rho_+(xt|x_0t_0) &= \frac{1}{\pi} \int dk \exp\left(-\frac{D}{2}k^2(t-t_0)\right) \sin k(x-x_1) \sin k(x_0-x_1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t-t_0)}} \left(\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2D(t-t_0)}\right) - \exp\left(-\frac{(x+x_0-2x_1)^2}{2D(t-t_0)}\right) \right) \end{aligned} \quad (3 \cdot 27)$$

となつて, Chandrasekhar の (24) と一致する.

同様に, 一次元の Brown 運動で $x=x_1$ に完全反射端がある場合.

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 \rho_+}{\partial x^2} \quad \frac{\partial}{\partial x_1} \rho_+(x_1 t | x_0 t_0) = 0 \quad (3 \cdot 28)$$

(3・28) の境界条件を満す δ 関数として $\sum_k \cosh k(x-x_1) \cosh k(x_0-x_1)$ を取れば

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t-t_0)}} \left(\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2D(t-t_0)}\right) + \exp\left(-\frac{(x+x_0-x_1)^2}{2D(t-t_0)}\right) \right) \quad (3 \cdot 29)$$

となり, Chandrasekhar の (20) 式と一致する. 境界条件 (3・25) の意味は直感的には明らかであろうが少々問題がある. (3・28) の直感的意味は, 第二章の例 2 の後で $(1/2)mv^2$ の量子力学的平均値を求めたが, これと同様に考えれば $\partial \rho_+ / \partial x_1 = -\langle \dot{x}_1 \rangle / D$ で境界で Brown 運動する粒子の平均速度が 0 であるということに外ならない. 従つて (3・27) の吸収端における単位時あたりの吸着量 $q(t)$ は

$$q(t) = -D \partial \rho_+(x_1 t | x_0 t_0) / \partial x_1 \quad (3 \cdot 30)$$

で与えられる.

境界条件が一点でなく, 有限な二点 $x_1, x_2 (x_2 > x_1)$ に吸収端, 反射端がある場合, 吸収端の境界条件として (3・25) を採用するなら容易に求められる.

x_1 吸収, x_2 吸収の場合

$$\rho_+(xt|x_0t_0) = \frac{2}{x_2-x_1} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 n^2}{(x_2-x_1)^2}(t-t_0)\right) \sin \frac{\pi(x-x_1)n}{x_2-x_1} \sin \frac{\pi(x_0-x_1)n}{x_2-x_1}$$

x_1 吸収, x_2 反射の場合

$$\begin{aligned} \rho_+(xt|x_0t_0) &= \frac{2}{x_2-x_1} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 \left(n+\frac{1}{2}\right)^2}{(x_2-x_1)^2}(t-t_0)\right) \sin\left(\frac{\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)}{x_2-x_1}(x-x_1)\right) \sin\left(\frac{\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)}{x_2-x_1}(x_0-x_1)\right) \end{aligned}$$

x_1 反射, x_2 反射の場合

$$\begin{aligned} \rho_+(xt|x_0t_0) &= \frac{2}{x_2-x_1} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 n^2}{(x_2-x_1)^2}(t-t_0)\right) \cos\left(\frac{\pi n}{x_2-x_1}(x-x_1)\right) \cos\left(\frac{\pi n}{x_2-x_1}(x_0-x_1)\right) \end{aligned}$$

となる. (3.25); (3.28) のような境界条件を持つ二点がある場合之を満たす函数は総て周期函数であり, 上述のような単純な Brown 運動でなく, A に x を掛ける operator 等が入つていると, $x \sin$ 或は $x \cos$ は周期函数でなく, 周期函数の集合の作る函数空間の外に出て, Markoff として

表わせなくなる, 境界条件を満す δ 函数が作れても, operator A に作用すると境界条件を満さなくなつてしまえば表現を作ることができなく Markoff として表わせない. 境界条件(例4の場合も含めた広義の意味)を満す函数空間が L^2 の中から作れて, A に対して invariant で, その函数空間で δ 函数が作られるならば, Markoff process として表わされる.

このような確率過程の解析的研究が将来どのように発展するかは不明であるが, 尚発展の余地があるように思われる, ここで述べられなかつたことは次の機会に述べることにしよう.

なお本研究は, 昭和30年度文部省助成研究によるものである.

統計数理研究所

参考文献

- Feynman: Rev. Mod. Phys. **20** 367-387. ('48)
- Morette: Phys. Rev. **81** 848-852 ('51)
- Elliott. W. Montroll: Comm. Pure & App. Math. **5** 415-453 ('52).
- S. Chandrasekhar: Rev. Mod. Phys. **15** 1-89 ('43).
- M. C. Wang & G. E. Uhlenbeck: Rev. Mod. Phys. **17** 323-342 ('45)
- Onsager & Machlup: Phys. Rev. **91** 1505-1515 ('53).
- 橋爪: 物性論研究, **80** 52; **81** 55; **82** 31; ('55)
- Kac: 2nd. Berkeley Symposium 189-215 ('51)