

Exponential product approximation to heat kernel of Dirichlet Laplacian and Zeno product

岡山大学・理学部 田村 英男 (Hideo Tamura)
Department of Mathematics, Okayama University

金沢大学・理学部 一瀬 孝 (Takashi Ichinose)
Department of Mathematics, Kanazawa University

Zeno (ゼノン) 量子効果とは、量子系の観測に関わる現象である。古典力学とは著しく異なるこの現象は、計測機器の精度が次第に高くなるに伴い、理論物理、数理物理のみならず実験物理の立場からも少なからず関心を寄せられている問題である。粒子の位置観測 (position measurement) の例を用いて、この量子効果に関する簡単な説明から始めよう。

よく知られているように、 n 次元空間 $\mathbf{R}^n$ を運動する自由粒子 (質量 $1/2$) の波動関数 $u = u(t, x)$ は Schrödinger 方程式 $i \partial_t u = H_0 u$ によって支配される。ただし、 H_0 は $H_0 = -\Delta$ ($\mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbf{R}^n)$) によって定義される Laplace 作用素 $-\Delta$ の自己共役実現である。いま、 $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ を滑らかな境界 $\partial\Omega$ をもつ有界領域、 $\chi = \chi(x)$ を Ω の特性関数とし、射影作用素 P を掛け算作用素として定義する：

$$P = \chi \times : L^2(\mathbf{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbf{R}^n).$$

射影作用素 P は、粒子が Ω に存在するかどうかの観測を記述する作用素である。時刻 $t > 0$ を固定し、 $\tau = t/N$ ($N \gg 1$) とおく。次の作用素積を考える：

$$\chi (P \exp(-i\tau H_0))^N \chi = \chi (P \exp(-i\tau H_0)) \cdots (P \exp(-i\tau H_0)) \chi : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega).$$

この積 (Zeno 積という) は、初期位置が Ω にある粒子が τ 時間後再び Ω に存在するかどうかを調べる観測行為を N 回繰り返すことを意味する。間断なく ($N \rightarrow \infty$) 観測を続行するとき、極限

$$s - \lim_{N \rightarrow \infty} \chi (P \exp(-i\tau H_0))^N \chi = \exp(-itH_D) \text{ on } L^2(\Omega), \quad \tau = t/N, \quad (1)$$

の強収束の存在を問うのが、Zeno 量子効果の典型的問題である。ただし、 H_D は Ω 上での Dirichlet Laplacian の自己共役実現である：

$$H_D = -\Delta, \quad \mathcal{D}(H_D) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega).$$

もし t 時間後に初めて観測すれば、粒子がそのときに Ω に存在する確率は極めて小さい (例えば $t \gg 1$ あるいは Ω が小さいとすれば)。それゆえ、連続的な観測行為は、 Ω の外部に粒子が飛び出すことを妨げることになる。これは有名な Zeno の第 3 逆理「飛ぶ矢は静止している」を想起させ、Zeno 量子効果と命名される所以がここにある。命名者は Misra と Sudarshan [10] による (A quantum particle can not move to where it is not)。その後、この量子効果は物理系論文でしばしば論じられてきたが ([4, 5] とその引用論文

参照)、数学的視点からの研究は少なかったように思える。最近、Exner-Ichino [3] によって本格的な解析が始められた (得られた成果の一端を §3 にて紹介する)。しかし、(1) の強収束は依然として未解決問題として残されている。

§1. 指数積公式による熱核近似 標題の指数積公式による熱核近似問題に話を進めよう。(1) において $it \rightarrow t > 0$ に置き換えると、Zeno 積は指数積 (Trotter-Kato exponential product) になる。実際、ポテンシャル $V(x)$ を

$$V(x) = 0 \quad (x \in \Omega), \quad V(x) = \infty \quad (x \notin \Omega)$$

ようにとれば、形式的ではあるが、Dirichlet Laplacian H_D は $H_D \sim H_0 + V$ とみなすことができ、 $\exp(-\tau V)$ は Ω の特性関数 χ に等しくなる。その結果、半群 $\exp(-tH_D)$ に対する指数積近似は

$$s \lim_{N \rightarrow \infty} \chi(P \exp(-\tau H_0))^N \chi = \exp(-tH_D) \text{ on } L^2(\Omega), \quad \tau = t/N, \quad (2)$$

の形をとる。この収束は、すでにより一般的な結果として [3] によって得られている。その証明は、Kato [9] (form sum に対する指数積の強収束) による巧妙な作用素論的技法に基づくものである。ここでは指数積公式による熱核近似の視点から強収束問題 (2) を見直してみる。

まず、縮小作用素 $G(\tau)$ を次式で定義する：

$$G(\tau) = \chi \exp(-\tau H_0) \chi : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega), \quad \tau = t/N.$$

そのとき、 $G_N(t) := \chi(P \exp(-\tau H_0))^N \chi = G(\tau)^N$ と書け、その積分核は多重積分

$$G_N(x, y; t) = \int_{\Omega} \cdots \int_{\Omega} \left(\prod_{j=0}^{N-1} E(z_j, z_{j+1}; \tau) \right) dz_1 \cdots dz_{N-1}, \quad (x, y) = (z_0, z_N) \in \Omega \times \Omega,$$

として表現される。ただし、 $E(p, q; s)$ は $\exp(-sH_0)$ の積分核を表す：

$$E(p, q; s) = \exp(-sH_0)(p, q) = (4\pi s)^{-n/2} \exp(-|p - q|^2/4s).$$

定理 1 $\exp(-tH_D)$ の積分核を $\exp(-tH_D)(x, y)$ と書く。このとき

$$G_N(x, y; t) = \exp(-tH_D)(x, y) + O(N^{-\sigma}), \quad 0 < \sigma < 1/6,$$

が成り立つ。ただし、誤差評価 $O(N^{-\sigma})$ は $x, y \in \Omega$ と $t \in (0, \infty)$ について広義一様である。

この定理から (2) が直ちに従う。 $L^2(\Omega)$ の内積とノルムをそれぞれ $(\cdot, \cdot)$ と $\|\cdot\|$ とすれば、 $f, g \in C_0^\infty(\Omega)$ に対して、 $(G(\tau)^N f, g) \rightarrow (\exp(-tH_D)f, g)$ と

$$\|G(\tau)^N f\|^2 = (G(\tau)^{2N} f, f) \rightarrow (\exp(-2tH_D)f, f) = \|\exp(-tH_D)f\|^2$$

が成立することに注意しさえすればよい。

定理 1 の証明の概略を述べよう (詳細は [8])。用語を準備する： $U(x)$ を Ω の補集合 Ω^c の特性関数とし、補助作用素

$$H_\tau = H_0 + \tau^{-\nu} U = H_0 + U_\tau, \quad \mathcal{D}(H_\tau) = H^2(\mathbf{R}^n), \quad \nu > 0$$

$$K_N(t) = K(\tau)^N, \quad K(\tau) = \exp(-\tau U_\tau) \exp(-\tau H_0) : L^2(\mathbf{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbf{R}^n)$$

を導入する。証明は次の 2 つの補題に基づく。補題 1 は Brown 運動の滞在時間理論に関する結果 ([1, 2]) を、補題 2 は指数積公式の作用素ノルム収束に関する結果 ([11]) を援用して得られる。

補題 1 $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ とする。このとき

$$\psi(\exp(-tH_D)(x, y) - \exp(-tH_\tau)(x, y))\psi = O(\tau^\rho), \quad 0 < \rho < \nu/2.$$

補題 2 $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ とし、 $K_N(t) : L^2(\mathbf{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbf{R}^n)$ の積分核を $K_N(x, y; t)$ と表す。このとき

$$\psi(\exp(-tH_\tau)(x, y) - K_N(x, y; t))\psi = O(\tau^{1/2-\nu} |\log \tau|).$$

定理 1 の証明 最大値原理によって

$$0 \leq \exp(-sH_D)(x, y) \leq \exp(-sH_0)(x, y)$$

が、そして定義によって $\chi(x) \leq \exp(-\tau U_\tau(x))$ が成り立つ。それゆえ

$$0 \leq \exp(-tH_D)(x, y) \leq G_N(x, y; t) \leq K_N(x, y; t)$$

が従う。その結果、

$$\begin{aligned} 0 &\leq G_N(x, y; t) - \exp(-tH_D)(x, y) \leq K_N(x, y; t) - \exp(-tH_D)(x, y) \\ &= (K_N(x, y; t) - \exp(-tH_\tau)(x, y)) + (\exp(-tH_\tau)(x, y) - \exp(-tH_D)(x, y)) \end{aligned}$$

を得る。補題 1, 2 を右辺に適用すれば、

$$0 \leq G_N(x, y; t) - \exp(-tH_D)(x, y) \sim O(\tau^{1/2-\nu}) + O(\tau^{\nu/2}).$$

したがって、 $\nu = 1/3$ と選べば、 $1/2 - \nu = \nu/2$ が成立し定理を得る。□

定理の証明は、半群 $\exp(-tH_D)$ が有する平滑化の性質にすべてを依存するため、その考えがユニタリ作用素 $\exp(-itH_D)$ に拡がることは残念ながら期待できない。

§2. 大次元空間での積分に対する漸近解析の立場から Zeno 積の強収束の難しさを浮き彫りにするために、(2) に対して積分評価を用いるより直接的な証明らしき試みを行ってみよう。

いま、Dirichlet Laplacian H_D の正規直交固有関数系を $\{\varphi_j\}_{j=1}^\infty$ と表す：

$$H_D \varphi_j = \lambda_j \varphi_j, \quad (\varphi_j, \varphi_k) = \delta_{jk}, \quad \lambda_j > 0 \text{ (eigenvalue)}.$$

$\{\varphi_j\}$ の有限一次結合が張る部分空間は稠密であるから、強収束 (2) を証明するには

$$G(\tau)^N \varphi_j \rightarrow \exp(-t\lambda_j) \varphi_j \text{ in } L^2(\Omega) \quad (3)$$

を示せば十分である。 $j=1$ の場合のみを考える。積分

$$G(\tau)\varphi_1(x) = \int_{\Omega} \exp(-\lambda|x-y|^2) \varphi_1(y) dy, \quad \lambda = 1/4\tau \gg 1,$$

の $\lambda \rightarrow \infty$ ($\tau \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$) での漸近挙動は次のようになる。もし $x \in \Omega$ のとき (x が Ω の内点ならば)、最急降下法 (steepest descent method) によって

$$G(\tau)\varphi_1(x) = \varphi_1(x) + (1/4\lambda)\Delta\varphi_1(x) + O(\lambda^{-2}) = (1 - \lambda_1\tau)\varphi_1(x) + O(\tau^2).$$

そして、 $x \in \partial\Omega$ のとき、Dirichlet 境界条件 ($\varphi_1 = 0$, $\varphi_1 \in C^\infty(\overline{\Omega})$) を考慮すれば

$$G(\tau)\varphi_1(x) = O(\lambda^{-1/2}) = O(\tau^{1/2}), \quad x \in \partial\Omega,$$

を得る。それゆえ、 $G(\tau)\varphi_1 = (1 - \lambda_1\tau)\varphi_1 + g_1$ と表すと、剰余項 g_1 は

$$\int_{\Omega} |g_1(x)| dx = O(\tau), \quad g_1(x) = O(\tau^2) \quad (\text{locally uniformly in } x \in \Omega) \quad (4)$$

をみたす。さらに、

$$G(\tau)^N \varphi_1 = (1 - \lambda_1\tau)^N \varphi_1 + r_N(x) \quad (5)$$

と表され、 r_N は次の形をとる：

$$r_N(x) = \sum_{k=1}^N (1 - \lambda_1\tau)^{N-k} g_k(x), \quad g_k = G(\tau)^{k-1} g_1.$$

(5) の右辺第 1 項が

$$(1 - \lambda_1\tau)^N \varphi_1 \rightarrow \exp(-t\lambda_1) \varphi_1$$

に収束する。第 2 項の剰余項 $r_N(x)$ を評価する。作用素 $G(\tau)^k$ の積分核を $G_k(x, y)$ と表わし、 $g_k(x)$ の積分を

$$\begin{aligned} g_k(x) &= \int_{\Omega} G_{k-1}(x, y) g_1(y) dy = g_{k1}(x) + g_{k2}(x) \\ &= \left\{ \int_{\Omega, d(y, \partial\Omega) < \delta} + \int_{\Omega, d(y, \partial\Omega) > \delta} \right\} \dots dy \end{aligned}$$

と分割する。ただし、 $d(\cdot, \cdot)$ は 2 点間の距離を表す。点 x を Ω の内点として固定する。もし任意の ε , $0 < \varepsilon \ll 1$, に対して、

$$d(y, \partial\Omega) < \delta \implies G_{k-1}(x, y) < \varepsilon, \quad (\text{uniformly in } k), \quad (6)$$

をみたす $\delta > 0$ が存在するならば (証明はできていないが、期待できる結果である)、(4) から $g_{k1}(x) = \varepsilon O(\tau)$ を得る。さらに、評価式

$$\int_{\Omega} G_{k-1}(x, y) dy \leq \int_{R^n} E(x, q; (k-1)\tau) dq \leq 1 \quad (7)$$

が成り立つので、再び (4) から $g_{k2}(x) = O(\tau^2)$ を得る。その結果、

$$G(\tau)^N \varphi_1(x) \rightarrow \exp(-t\lambda_1) \varphi_1(x)$$

〈収束は広義一様〉が成立し、強収束も容易に示すことができる。

Zeno 積の問題 (1) に移る。縮小作用素 $Z(\tau)$ を

$$Z(\tau) = \chi \exp(-i\tau H_0) \chi : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega), \quad \tau = t/N,$$

として定義すれば、(1) の作用素積は $\chi(P \exp(-i\tau H_0))^N \chi = Z(\tau)^N$ と書ける。停留位相法 (stationary phase method) によって、

$$Z(\tau)\varphi_1 = (1 - i\lambda_1\tau)\varphi_1 + f_1$$

と表すと、剰余項 $f_1(x)$ は (4) と全く同じ評価をみたく。作用素 $Z(\tau)^k$ の積分核 $Z_k(x, y)$ が (6), (7) のような性質を有することを示せばよいが、(6) は全く期待できない。内部評価の一様有界性 (7) を示すには、停留位相法 (ただし大次元空間での) で対処できるかもしれない。しかし、(6) は停留位相法によって境界近傍の積分から生じる誤差評価に関わる問題で、Zeno 積の強収束の証明の核心を占める部分と思われる。いづれにしても、これらの難点を克服するためには、振動型積分に対する斬新な漸近手法の開発が待たれる。

§3. Zeno 積公式に関する最近のささやかな結果について 強収束問題 (1) はもっと一般的な枠組みで定式化される。いま、 H を可分な Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の非負自己共役作用素とし、 P を直交射影とする。そして

$$H_P := (H^{1/2}P)^*(H^{1/2}P)$$

とおき、その定義域 $\mathcal{D}(H_P)$ が $\mathcal{H}$ で稠密であると仮定する。 H_P は $\mathcal{H}$ 上の非負自己共役作用素になる。このとき、強収束

$$(P \exp(-it/N)H)P)^N \longrightarrow \exp(-itH_P)P, \quad N \rightarrow \infty, \quad (8)$$

を問うのが (1) の一般化された問題になる。実際、位置観測問題の Zeno 積においては、 H を $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^n)$ 上の非負自己共役作用素 $H = H_0 = -\Delta$ 、 P を再び掛け算作用素 $\chi \times$ とするとき、 H_P に対応する作用素が $L^2(\Omega)$ への制限が Ω 上の Dirichlet Laplacian H_D となることを証明することができる ([3])。問題 (8) について、次の定理が [3] で得られた主結果である。

定理 2 (8) の収束が $L^2_{\text{loc}}(\mathbf{R}; \mathcal{H}) = L^2_{\text{loc}}(\mathbf{R}) \otimes \mathcal{H}$ の位相で成立する。

定理 2 は目指す結果 (1) と比べると明らかに弱いものである。実際、この定理は次のような意味での強収束しか導かない (cf. [7])。

系 1 ある Lebesgue 測度零の集合 $M \subset \mathbf{R}$ と自然数のある単調増加列 $\{N'\}$ が存在して、すべての $f \in \mathcal{H}$ とすべての $t \in \mathbf{R} \setminus M$ に対して、

$$(P \exp(-i(t/N')H)P)^{N'} f \xrightarrow{s} \exp(-itH_P)Pf, \quad N' \rightarrow \infty.$$

証明は、粗く言えば、正軸 ($t > 0$) に対して示された Trotter-Kato 指数積の強収束を解析接続によって虚数軸に広げる手法に基づく。ただし、もし P が有限次元直交射影ならば、強収束が成立つことを証明することができる。さらに、定理の結果は、対称積 $(P \exp(-i(t/N)H)P)^N$ を非対称積 $(\exp(-i(t/N)H)P)^N$ や $(P \exp(-i(t/N)H))^N$ に置き換えても成り立つことが示せる。

すでに述べたように、定理 2 は各固定した t における強収束ではなく、 $L^2_{\text{loc}}(\mathbf{R}; \mathcal{H})$ で収束しか示していない。しかしながら、Zeno 効果の実験ではこれで十分かも知れないという議論がある。その理由は、実際の実験の測定においては常に誤差が伴うからである。例えば、 $\varphi: \mathbf{R}_+ = [0, \infty) \rightarrow \mathbf{R}_+$ をコンパクトな台を有する有界関数で、ある時間で鋭いピークをもつ probability distribution とするとき、この定理は

$$\int \varphi(t) \left\| (P \exp(-i(t/N)H)P)^N f - \exp(-itH_P)Pf \right\|^2 dt \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty,$$

を導くが、これは Zeno 力学極限が実験誤差がどんなに小さくてもそれを平均化した後で成り立つことを裏付けるものとなる。

最後に、(8) の左辺の $\exp(-i(t/N)H)$ を H のスペクトル測度で cutoff したもののやレゾルベント $(I + i(t/N)H)^{-1}$ で置き換えた変形 Zeno 積については、 $\mathcal{H}$ の強位相で成立つことを証明することができることを注意しておく ([4])。

References

- [1] M. Demuth and J.A. van Casteren, *Stochastic Spectral Theory for Selfadjoint Feller Operators – A functional integration approach*, Birkhäuser (2000).
- [2] M. Demuth, W. Kirsch and I. McGillivray, Schrödinger semigroups – geometric estimates in terms of the occupation time, *Commun. Partial Differential Equations*, **20** 37–57 (1995).
- [3] P. Exner and T. Ichinose, A product formula related to quantum Zeno dynamics, to be published in *Ann. H. Poincaré*.
- [4] P. Exner, T. Ichinose, H. Neidhardt and V. A. Zagrebnov, New product formulae and quantum Zeno dynamics with generalized observables, *Preprint* 2004.
- [5] P. Facchi, G. Marmo, S. Pascazio, A. Scardicchio and E. C. G. Sudarshan, Zeno dynamics and constraints, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.*, **6** S492–S501 (2004).
- [6] P. Facchi, S. Pascazio, A. Scardicchio and L.S. Schulman, Zeno dynamics yields ordinary constraints, *Phys. Rev. A*, **65** 012108 (2002).
- [7] C. Friedman, Semigroup product formulas, compressions, and continual observations in quantum mechanics, *Indiana Math. J.*, **21** 1001–1011 (1971/72).
- [8] T. Ichinose and H. Tamura, Exponential product approximation to integral kernels of Schrödinger semigroup and to heat kernel of Dirichlet Laplacian, *Preprint*, 2004.

- [9] T. Kato, Trotter's product formula for an arbitrary pair of self-adjoint contraction semigroups, Topics in Functional Analysis, *Adv. Math. Suppl. Studies*, **3** 185–195, I. Gohberg and M. Kac, eds., Academic Press (1978).
- [10] B. Misra and E. C. G. Sudarshan, The Zeno's paradox in quantum theory, *J. Math Phys.*, **18** 756–763 (1977).
- [11] D. L. Rogava, Error bounds for Trotter-type formulas for self-adjoint operators, *Func. Anal. Appl.*, **27** 217–219 (1993).