生産と技術　第57巻　第1号　(2005)

研究ノート

シュレディンガー方程式の解の特異性

土　居　伸　一*

Singularities of solutions for Schrödinger equations

Key Words：Schrödinger equations, Hamilton flow, fundamental solution, propagation of singularities

1．はじめに

あまり馴染みがない方のために，偏微分方程式の初期値問題に関連した基本問題を概観しておく．

いろいろな偏微分方程式の内，何らかの時間発展を記述すると解釈できるものを考える．このとき独立変数の中で時間の役割をはたす一つの変数をtで表すことにする．変数tが特定な値aをとるとき未知関数およびその偏導関数のとるべき値を初期値という．そして時刻$t=a$で与えられた初期値をとる(この付加条件を初期条件という)解を求める問題を初期値問題あるいはCauchy問題という．

初期値問題を考える場合に最も基本的な問題として次の3つが挙げられる：(i)解の存在を調べよ．(ii)解が存在するとしてその一意性を調べよ．(iii)解がただ一つ存在するとき，その初期値に対する連続的依存性を調べよ．以上の問題に対して肯定的な答が得られるとき初期値問題は適切であるという．

これらに続く基本問題として次のようなものが挙げられる：(iv)解の滑らかさ・特異性を調べよ．(v)解が有限時間で爆発するか，時間大域的に存在するか，調べよ．(vi)$t\to\infty$での解の漸近挙動を調べよ．(vii)初期値に解を対応させる写像の詳しい性質を調べよ．(viii)基本解の表示式または基本近似解(パラメトリックス)の表示式を求めよ．(ix)偏微分方程式が摂動をうけた場合に摂動により解の性質がどう変化するか調べよ．これ以外にも基本問題があり，さらに個別の偏微分方程式に応じた問題は枚挙に暇ない．

この小論では(iv)，(vii)，(ix)に関する問題として，シュレディンガー方程式を例にとり，その解の特異性と，付随する正準方程式の解の運動量無限大での漸近挙動との関係について説明する．

最後に記号の説明をしておく．**R**で実数全体，**Z**で整数全体を表す．X上で定義されYに値をとる連続写像全体を$C(X,Y)$で表す．

2．シュレディンガー方程式とハミルトン流

d次元ユークリッド空間$\mathbf{R}^d$上でラプラシアン$\Delta=\sum_{j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$と実数値ポテンシャル$V(x)$に対してシュレディンガー作用素$H$を$H=-\frac{1}{2}\Delta+V(x)$で定め，これに付随するシュレディンガー方程式の初期値問題を考える：

$$i\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)=Hu(t,x),\quad (t,x)\in\mathbf{R}^{1+d},$$
$$u(0,x)=\phi(x),\quad x\in\mathbf{R}^d.$$

ここで$i=\sqrt{-1}$である．$\mathbf{R}^d$上の複素数値関数$f(x)$で$\|f\|^2=\int_{\mathbf{R}^d}|f(x)|^2dx<\infty$をみたすもの全体を$\mathcal{H}$とおく．適当な条件の下，任意の$\phi\in\mathcal{H}$に対し，上の初期値問題は一意的な解$u\in C(\mathbf{R},\mathcal{H})$を持ち，解作用素$U(t):\mathcal{H}\ni\phi\mapsto u(t)\in\mathcal{H}$が定まる．このとき$U(t)$は，一意的に定まる超関数$E(t,x,y)$を用いて超関数の意味で

$$(U(t)\phi)(x)=\int_{\mathbf{R}^d}E(t,x,y)\phi(y)dy$$

と表示できる．$E(t,x,y)$を初期値問題の基本解とよぶ．

次にシュレディンガー作用素Hの表象と呼ばれる

* Shin-ichi DOI
1966年8月生
京都大学 大学院理学研究科 数学専攻博士課程中退
現在，大阪大学 大学院 理学研究科 数学専攻，教授，博士(理学)，偏微分方程式論
TEL 06－6850－5326
FAX 06－6850－5327
E-Mail sdoi@math.sci.osaka-u.ac.jp

関数を$h(x,\xi)=\frac{1}{2}|\xi|^2+V(x)((x,\xi)\in\mathbf{R}^{2d})$とおき，これに付随するハミルトンの正準方程式の初期値問題を考える：

$$\dot{x}_j(t)=\frac{\partial h}{\partial \xi_j}(x(t),\xi(t)),\ \dot{\xi}_j(t)=-\frac{\partial h}{\partial x_j}(x(t),\xi(t));$$
$$x_j(0)=y_j,\ \ \xi_j(0)=\eta_j\quad(j=1,\ldots,d).$$

適当な条件の下，任意の$(y,\eta)\in\mathbf{R}^{2d}$に対し，上の初期値問題は時間大域的な解$(x(t),\xi(t))$を持ち，ハミルトン流$\Phi_t:\mathbf{R}^{2d}\ni(y,\eta)\mapsto(x(t),\xi(t))\in\mathbf{R}^{2d}$が定まる．

3．関数の特異性の測り方

関数$f(x)$のフーリエ変換を

$$Ff(\xi)=\hat{f}(\xi)=\int_{\mathbf{R}^d}\mathrm{e}^{-ix\cdot\xi}f(x)dx$$

で定めると，$F:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$は線形同型写像で$\|Ff\|=(2\pi)^{d/2}\|f\|$を満たす．さらに$F$は緩増加超関数のなす空間$S'(\mathbf{R}^d)$（高々多項式オーダーの増大度をもつ$\mathbf{R}^d$上の連続関数およびその形式的有限階偏導関数の線形結合全体と理解されたい）上の線形同型写像に拡張できる．フーリエ変換の重要な性質の一つは偏微分作用素$D_{x_j}:=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$を掛け算作用素$\xi_j$に変換することである：

$$F[D_{x_j}f(x)](\xi)=\xi_jFf(\xi).$$

これによりFfの減少度を用いてfの滑らかさが測れることがわかる．そこで滑らかさを測る尺度となる次の空間を用意する（$\langle\xi\rangle=(1+|\xi|^2)^{1/2}(\xi\in\mathbf{R}^d)$とおく）：$s\in\mathbf{R}$に対して

$$H^s=\{f\in S'(\mathbf{R}^d);\langle\xi\rangle^sFf(\xi)\in\mathcal{H}\}.$$

通常のC^m級での滑らかさとの関係としては，$s>m+d/2$のとき$H^s\subset C^m(\mathbf{R}^d)$であることが知られている．有界集合の外で零となるような$C^\infty(\mathbf{R}^d)$の元全体を$C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$とおく．

緩増加超関数$f\in S'(\mathbf{R}^d)$，位置をあらわす$x_0\in\mathbf{R}^d$，方向をあらわす$\xi_0\in\mathbf{R}^d\backslash\{0\}$に対して，2種類の滑らかさの概念を定義する．

(i) x_0の近傍で1の値をとる関数$a\in C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$が存在して$af\in H^s$となるとき，$f$は$x_0$で$H^s$の滑らかさをもつという．この条件を満たさないような$x_0\in\mathbf{R}^d$全体を$\mathrm{singsupp}_{H^s}f$と表し，fのH^s特異台という．

(ii) x_0の近傍で1の値をとる関数$a\in C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$と$\xi_0$の錐近傍（つまり正数倍するという作用によって不変であるような近傍）Γが存在して，

$$\int_\Gamma\langle\xi\rangle^{2s}|F(af)(\xi)|^2d\xi<\infty$$

が成立するとき，fはx_0でξ_0方向にH^sの滑らかさをもつという．この条件を満たさないような$(x_0,\xi_0)\in\mathbf{R}^d\times(\mathbf{R}^d\backslash\{0\})$全体を$WF_{H^s}f$と表し，$f$の$H^s$波面集合という．

このとき射影$\mathbf{R}^d\times(\mathbf{R}^d\backslash\{0\})\ni(x,\xi)\to x\in\mathbf{R}^d$による$WF_{H^s}f$の像は$\mathrm{singsupp}_{H^s}f$に一致する．

4．既知の結果と小論の目標

基本解$E(t,x,y)$の滑らかさとその周辺について既知の結果を述べる．$|x|\to\infty$のとき$V(x)$が高々$|x|^\rho$の増大度をもつとし，このρの値で場合分けして説明する．なお$V(x)$（および$W(x)$）の偏導関数に関する技術的な仮定は省略する．

$\rho=2$の場合，ある$T>0$に対して$0<|t|<T$で$E(t,x,y)$は(t,x,y)についてC^∞級である（[4], cf. [1]）．ここで$T=\infty$とれるかどうかはVの形に依存する．実際，$V(x)=-\frac{1}{2}\omega^2|x|^2$のとき$T=\infty$ととれるが，$V(x)=\frac{1}{2}\omega^2|x|^2$のときは$t=k\pi/\omega$（$k$は整数）で基本解は$E(k\pi/\omega,x,y)=i^{-dk}\delta(x-(-1)^ky)$なる特異性をもつ．ただし$\delta(x)$はDiracのデルタ関数である．もう少し強い条件$|V(x)|=o(|x|^2)(|x|\to\infty)$を仮定すると$T=\infty$と取れる（[8], cf. [1]）．

$\rho>2$の場合，次元$d=1$のとき，$|x|\gg1$で$V(x)\geq C(1+|x|)^\rho$をみたすとき$E(t,x,y)$はいたるところで(t,x,y)についてC^1級ですらない（[8]）．

$V(x)=\frac{1}{2}\omega^2|x|^2$のとき，$\pi/\omega$の整数倍の時刻に基本解が特異性を持つことを説明した．そこでこの調和振動子に摂動Wを加えた場合，特異性の構造が変化するか考えよう．$V(x)=\frac{1}{2}\omega^2|x|^2+W(x)$，$|W(x)|=o(|x|^2)(|x|\to\infty)$を仮定する．

(i) $t\notin(\pi/\omega)\mathbf{Z}$のとき$E(t,x,y)$は$(t,x,y)$について$C^\infty$級である（[5], cf. [3]）．つまり$W=0$の場合と同様の結果が成り立つ．

(ii) 共鳴時刻$t\in(\pi/\omega)\mathbf{Z}$においては$W$の増大度により，特異性への影響が異なる．

(iia) $W(x)=o(|x|)(|x|\to\infty)$の場合，すべての$\phi\in S'(\mathbf{R}^d)$と整数$k$に対して

$$WF_{H^s}u(k\pi/\omega)=\{(-1)^k(y,\eta)\;;\;(y,\eta)\in WF_{H^s}\phi\}.$$

特に各$y\in\mathbf{R}^d$についてs≧−d/2のとき

$$WF_{H^s}E(k\pi/\omega,\cdot,y)=\{(-1)^k(y,\eta)\;;\;\eta\in\mathbf{R}^d\backslash\{0\}\}.$$

これは基本的に[7],[10],[5],[6]によるが，[2]で改良された結果を引用した．ここではWの影響は現れず，$W=0$と同じ結果であることに注意しておく．この意味で特異性は安定である．

(iib) $W(x)$のオーダーがλ次$(1<\lambda<2)$の場合．

$C_1, C_2>0$があり，$|x|\gg1$のとき

$$C_1\langle x\rangle^{\lambda-2}I_d\leq\nabla^2W(x)\leq C_1\langle x\rangle^{\lambda-2}I_d$$

が成立すると仮定する．ここで$\nabla^2W(x)$は$W(x)$のヘッセ行列である．このとき全ての零でない整数kに対して$E(k\pi/\omega,x,y)$は(x,y)についてC^∞級である([8])．これは特異性の分散を意味する．

以上を踏まえて次の問題を考えよう：

問題．摂動された調和振動子に対してWのオーダーが1次の場合には共鳴時刻に解の特異性の構造はどうなるか?

この小論ではこの問題に一つの解答を与える．つまり解の特異性が離散的な共鳴時刻において有限速度で伝播することを示す．これは波動方程式の解の特異性が有限速度で伝播することと類似した現象である．一方，摂動された非等方的調和振動子に対しては等方的な場合と全く異なる現象が生ずる．例えば$W\in C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$であっても共鳴時刻に超平面に沿って弱い特異性が生成する．ここでは上の問題に限定して話を進める．

5．摂動された調和振動子に対する特異性の伝播

前節に引き続き$V(x)=\frac{1}{2}\omega^2|x|^2+W(x)$とする．一般に$\mathbf{R}^d\backslash\{0\}$上の関数が全ての$t>0$, $x\in\mathbf{R}^d\backslash\{0\}$に対して$f(tx)=t^mf(x)$をみたすとき$m$次斉次であるという．次の条件を仮定しよう：

(W1) すべての非負整数kに対して，$W(x)$のk階偏導関数の$|x|\to\infty$でのオーダーは$1-k$次である；

(W2) 0次斉次関数$F_1,\ldots,F_d\in C(\mathbf{R}^d\backslash\{0\},\mathbf{R})$が存在し，$F=(F_1,\ldots,F_d)$とおくとき次式が成り立つ：$\lim_{|x|\to\infty}|\nabla W(x)-F(x)|=0$.

このとき$\theta_k\in C(\mathbf{R}^d\backslash\{0\},\mathbf{R}^d)$を次式で定める：

(i) $k=2n$, $n\in\mathbf{Z}$, のとき

$$\theta_k(\eta)=(2/\omega^2)\cdot n(F(\eta)-F(-\eta))\;;$$

(ii) $k=2n+1$, $n\in\mathbf{Z}$, のとき

$$\theta_k(\eta)=(2/\omega^2)\cdot(n(F(\eta)-F(-\eta))+F(\eta)).$$

定理1．$(W1)$と$(W2)$を仮定する．$\Phi_t(y,\eta)=(x(t,y,\eta),\xi(t,y,\eta))$とおく．このときすべての整数$k$と$\mathbf{R}^d$の有界集合$B$に対して

$$\lim_{|\eta|\to\infty}\sup_{y\in B}|x(k\pi/\omega,y,\eta)-(-1)^k(y+\theta_k(\eta))|=0.$$

定理2．$(W1)$と$(W2)$を仮定すると，すべての$s\in\mathbf{R}$, $k\in\mathbf{Z}$, $\phi\in S'(\mathbf{R}^d)$に対して次が成立する：

$$WF_{H^s}u(k\pi/\omega)=\{(-1)^k(y+\theta_k(\eta)\eta)\;;\;(y,\eta)\in WF_{H^s}\phi\}.$$

以上2つの定理により解$u(t)$の特異性と，ハミルトン流$\Phi_t(y,\eta)$の$|\eta|\to\infty$での漸近挙動との関連がわかる．

最後に例を挙げる．$W(x)=a\langle x\rangle$ $(a\in\mathbf{R})$のとき

$$WF_{H^s}u(k\pi/\omega)=\left\{(-1)^k(y+\frac{2ak}{\omega^2}\frac{\eta}{|\eta|}\eta)\;;\;(y,\eta)\in WF_{H^s}\phi\right\}$$

特に$s\geq-\frac{d}{2}$のときsingsupp$_{H^s}E(k\pi/\omega,\cdot,y_0)$は中心$(-1)^ky_0$，半径$\frac{2|ak|}{\omega^2}$の球面に一致する．これは波動方程式に対するHuygensの原理と類似している．

参考文献

[1] S. Doi, Smoothness of solutions for Schrodinger equations with unbounded potentials, to appear in Publ. RIMS.

[2] S. Doi, Hyperbolic Problems and Related Topics, pp.185-199, Internatinal Press, Somerville, MA, 2003.

[3] S. Doi, Commun. Math. Phys. 250 (2004), 473-505.

[4] D. Fujiwara, Duke Math. J. 47 (1980), 559-600.

[5] L.Kapitanski, I.Rodianski, and K.Yajima,

Topol. Methods in Nonlinear Anal. 9 (1997), 77-106.

[6] T. Okaji, Preprint (version 8.4), 2000.

[7] A. Weinstein, Amer. J. Math. 107 (1985), 1-21.

[8] K. Yajima, Commun. Math. Phys. 181 (1996), 605-629.

[9] K. Yajima, Contemp. Math. 217 (1998), 49-68.

[10] S. Zelditch, Commun. Math. Phys. 90 (1983), 1-26.