シュレディンガー方程式の解の特異性とその周辺

中村　周　（東京大学・大学院数理科学研究科）

はじめに

この講演では, シュレディンガー方程式, 特に変数係数の場合のシュレディンガー方程式の解の特異性に関して知られている事を振り返り, 最近の結果を紹介する. シュレディンガー方程式の解の特異性の振る舞いは, 一見奇妙に見えながら, 方程式に内在する幾何学的構造や, 古典力学的構造を反映している.「非拘束的」(nontrapping) と呼ばれる, 比較的簡単な場合については, その構造はかなり理解されてきたと言ってよい. これからの研究課題としては, 拘束的 (trapping) な場合の解の特異性の挙動を理解することが大切ではないかと思われる.

1　古典的な偏微分方程式の解の特異性

ここでは, シュレディンガー方程式について考える前に, 古典的な偏微分方程式（ラプラス方程式, 熱方程式, 波動方程式）の解の特異性（特に伝播）について振り返ってみよう.

n 次元ユークリッド空間のなめらかな境界を持つ領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の上のディリクレ問題：

$$\begin{cases} \triangle u(x) = 0, & (x \in \Omega), \\ u(x) = f(x), & (x \in \partial\Omega), \end{cases}$$

を考えてみよう（f は Ω の境界 $\partial\Omega$ 上の与えられた関数）. このとき, よく知られている様に （f に特異性があるとしても）Ω の内部で u はなめらかであり, 解は特異性を持たない. つまり, 解の特異性の伝播は無い（境界条件 f の特異性は内部まで伝播しない）, ということになる.

次に, $\mathbb{R}^n$ 上の熱方程式：

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = \triangle_x u(t,x), & (t > 0, x \in \mathbb{R}^n) \\ u(0,x) = f(x) & (x \in \mathbb{R}^n) \end{cases}$$

を考えてみよう（f は初期条件）. この場合も, よく知られている様に, （f に特異性があるとしても）$t > 0$ で $u(t,x)$ はなめらかであり, 解は特異性を持た

ない. つまり, この場合も, 解の特異性の伝播は無い（f の特異性は $t>0$ の領域には伝播しない）, という事になる.

解の特異性の伝播が問題になるのは, 波動方程式の場合である. $\mathbb{R}^n$ 上の波動方程式：

$$\begin{cases} \partial_t^2 u(t,x) = \triangle_x u(t,x), & (t\in\mathbb{R}, x\in\mathbb{R}^n) \\ u(0,x)=f(x), \quad \partial_t u(0,x)=g(x), & (x\in\mathbb{R}^n) \end{cases}$$

を考えると, 解の特異性は「幾何光学」の法則に従って伝播する. これをもう少し正確に書いてみよう. そのために, Hörmander に従って「波面集合」を導入する. 標準的な記号として, フーリエ変換は

$$\hat{u}(\xi) = \mathcal{F}u(\xi) = (2\pi)^{-n/2}\int e^{-ix\cdot\xi}u(x)dx, \qquad (\xi\in\mathbb{R}^n)$$

と書く. また, $x\in\mathbb{R}^n$ の大きさを表す記号として, $\langle x\rangle = (1+|x|^2)^{1/2}$ を用いる. フーリエ解析で学ぶ様に, 関数 $u(x)$ が $x_0\in\mathbb{R}^n$ で C^∞-級であるための必要十分条件は, x_0 で 0 でない C_0^∞-関数 $\chi(x)$ が存在し, 任意の $N\in\mathbb{N}$ に対して $C_N>0$ が存在して,

$$\left|\widehat{(\chi u)}(\xi)\right| \le C_N\langle\xi\rangle^{-N}, \qquad (\xi\in\mathbb{R}^n)$$

が成り立つ事である. これを方向別に精密化したものが波面集合, あるいは超局所的な特異性である.

定義（波面集合）： $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ とする（$\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ は $\mathbb{R}^n$ 上の緩増加超関数の空間）. $(x_0,\xi_0)\in\mathbb{R}^n\times(\mathbb{R}^n\setminus 0)$ が u の波面集合に入らないとは, ξ_0 の錐状近傍 (conic neighborhood) $\Gamma\in\mathbb{R}^n$ と $\chi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ が存在し, $\chi(x_0)\ne 0$, しかも任意の N に対して $C_N>0$ が存在して,

$$\left|\widehat{(\chi u)}(\xi)\right| = C_N\langle\xi\rangle^{-N} \qquad (\xi\in\Gamma)$$

が成り立つ, という事である. この条件が成り立たない点の集合を波面集合といい, $WF(u)\subset\mathbb{R}^n\times(\mathbb{R}^n\setminus 0)$ で表す.

波動方程式の解については, 幾何光学の原理に従い, 次が証明できる.

$$WF(u(t,\cdot)) \subset \big\{(x\pm t\xi,\xi)\;\big|\;(x,\xi)\in WF(f)\cup WF(g)\big\}.$$

この結果は, もっと精密に等号の形でも書けるが, ここでは省略する. これは, Hörmander の偏微分方程式の解の特異性の伝播定理の典型的な場合である. 解 $u(t,x)$ の特異性は, 初期条件の特異性から速度 1 で伝わっていく. しかも特異性の伝播は直線的であり, もっと一般に底空間が曲がっている場合は測地線に沿って特異性は伝播する.

一般に, 偏微分方程式の解の特異性の伝播, というときは, 波動方程式の解の特異性の伝播をモデルにして, 同様な事が成り立つかを考える. 次の節では, シュレディンガー方程式に関して, そのような拡張が可能かを考えてみよう.

2　自由なシュレディンガー方程式の解の特異性

ここでは, $\mathbb{R}^n$ 上の自由なシュレディンガー方程式：

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = -\triangle_x u(t,x), & (t\in\mathbb{R}, x\in\mathbb{R}^n), \\ u(0,x) = f(x), & (x\in\mathbb{R}^n) \end{cases}$$

について考える．この量子力学の基礎方程式は, $f\in L^2(\mathbb{R}^n)$ の場合には, Stone の定理を用いて（あるいはフーリエ変換を用いて）簡単に解が書ける：

$$u(t,x) = e^{it\triangle}f(x) = \mathcal{F}^{-1}[e^{-it|\xi|^2}\hat{f}(\xi)](x)$$

この方程式は, 一見熱方程式に似ているが, 時間について可逆である．従って, 熱方程式の様に任意の初期条件に対して $t>0$ で解がなめらかになる, というような性質は期待できない（矛盾が導かれる）．一方, （量子力学的波動方程式と呼ばれるのだから）波動方程式と同じ様な特異性の伝播が期待できるかというと, それも成立しない．実際, Hörmander の特異性の伝播定理をそのまま適用しようとすると, 特異性は同じ t の平面で伝播する事が導かれる．これは, 初期値問題として考えると意味が無い様にも思われるが, シュレディンガー方程式の解の特異性の「伝播速度」が無限大である, という物理的性質に対応している．

そこで, シュレディンガー方程式の解のなめらかさについては, 全く違ったアプローチが用いられてきた．自由なシュレディンガー方程式の解は, 具体的に

$$u(t,x) = (4\pi it)^{-n/2}\int e^{-|x-y|^2/4it}f(y)dy, \qquad (t\neq 0, x\in\mathbb{R}^n)$$

と書ける事が知られている（少なくとも, f が良い関数の場合は）．この公式の両辺を微分する事により, 次の事が簡単に証明できる：

$$\langle x\rangle f(x)\in L^2(\mathbb{R}^n) \implies \langle x\rangle^{-1}u(t,x)\in H^1(\mathbb{R}^n).$$

ここで, $H^s(\mathbb{R}^n)$ は $\mathbb{R}^n$ 上の s 次の Sobolev 空間である．さらに,

$$\|\langle\cdot\rangle^{-1}u(t,\cdot)\|_{H^1} \leq C|t|^{-1}\|\langle\cdot\rangle f\|_{L^2}$$

である事もすぐわかる．つまり, 初期条件の無限遠方での減衰から, 解のなめらかさが従う．このような性質を, 「平滑化作用」(smoothing effect) と呼ぶ．この評価を繰り返せば, 初期条件が無限遠で急速に減衰すれば（つまり, 任意の $N\in\mathbb{N}$ について $\langle x\rangle^N f(x)\in L^2(\mathbb{R}^n)$ ならば）, $t\neq 0$ で解は C^∞-級である事が分かる．初期条件になめらかさは仮定していないから, 減衰がなめらかさだけから産み出されている事になる．

物理的な直感を用いてこの性質を説明すると, 次の様になるだろう. シュレディンガー方程式に従う運動は, 大きな運動量の部分は早く遠方に飛んでいく. したがって, 最初の粒子が有界な領域にいたとすれば, 特異性に関わる部分は運動量の大きな部分だから, すぐに無限遠の方に飛んでいってしまって, 解は (有限領域では) なめらかになる.

減衰がなめらかさに置き換えられる, という事実は, 公式：

$$(x - 2it\partial_x)e^{it\triangle} = e^{it\triangle}x$$

からも導かれる. この公式の証明は, 上の解の公式で部分積分をすれば良い. この性質は, 自由なシュレディンガー方程式が, （自由な）ニュートン方程式の量子化である, という事実に対応している. つまり, ニュートン方程式の解のフロー：

$$(x, \xi) \mapsto (x + t\xi, \xi)$$

の量子化が $e^{it\triangle}$ である. そのため, x 空間での重み関数 $\langle x \rangle$ が $\langle x - it\partial_x \rangle$ に変換され, 減衰が（局所的な）正則性を産み出す事になる.

自由なシュレディンガー方程式の解の「平滑化作用」に関しては多くの研究, 様々な一般化（変形）があり, 非線形シュレディンガー方程式の研究などに応用されている. 上の評価で時間に関して積分的な評価に置き換え, 任意の $r \geq 0$ について

$$\langle x \rangle^r f(x) \in L^2(\mathbb{R}^n) \implies t^r u(t, x) \in L^2_{loc}(\mathbb{R}; H^{r+1/2}_{loc}(\mathbb{R}^n))$$

が証明できる（例えば, 加藤・谷島 [KY] 参照）. 特に興味深いのは $r = 0$ の場合であり, $f \in L^2$ だけの条件から, ほとんどすべての $t \in \mathbb{R}$ について解は局所的に $H^{1/2}$-級の正則性を持つ事が分かる[1].

また, 非線形シュレディンガー方程式の理論で広く使われている (L^p,L^q)-評価：

$$\|u(t, \cdot)\|_{L^p} \leq Ct^{n(1/p-1/2)}\|f\|_{L^q}, \qquad (1/p + 1/q = 1, p \geq 2)$$

も, 平滑化作用の一種と考える事ができる[2]. この評価より, (Hardy-Littlewood の不等式を用いて) 非線形シュレディンガー方程式の解の構成で基本的な, Strichartz 評価：

$$\|u\|_{L^r(\mathbb{R}; L^p(\mathbb{R}^n))} \leq C\|f\|_{L^2}, \qquad (1/p + 2/nr = 1/2)$$

も従う.

[1] これは矛盾の様に思えるがそうではない. $u(t, \cdot) \in H^{1/2}$ ではあり得ないが, $H^{1/2}_{loc}$ である事に注意.

[2] 証明は, 上の公式と補完定理を用いればよい.

3　シュレディンガー型方程式の解の超局所的平滑化作用

前節で述べた, 自由なシュレディンガー方程式の解の平滑化作用は, 直感的には古典力学の性質と関係していても, 実際の証明には解の公式を用いており, 幾何学的構造との関係はあまり明らかではなかった. ユークリッド計量でない計量を持つ空間の上のシュレディンガー方程式を考える, あるいは超局所的特異性（波面集合）を考えようとすると, 幾何学的構造を直接用いた解析が必要となる.

そのような方向の（おそらく）最初の結果が, Craig-Kappeler-Strauss の 1995 年の論文 [CKS] である. 考える方程式は,

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = Hu(t,x), & (t\in\mathbb{R}, x\in\mathbb{R}^n), \\ u(0,x) = f(x), & (x\in\mathbb{R}^n) \end{cases}$$

であり, H はシュレディンガー作用素：

$$Hv(x) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^n \partial_{x_i} a_{ij}(x)\partial_{x_j} v(x) + V(x)v(x)$$

である[3]. H は以下のような意味で, 漸近的にフラットであると仮定する.

仮定 (μ)**:** a_{ij}, V は実数値 C^∞-級関数であり, $\mu>0$ と, 任意の $\alpha\in\mathbb{Z}_+^n$ に対して $C_\alpha>0$ が存在して

$$\left|\partial_x^\alpha(a_{ij}(x)-\delta_{ij})\right| \le C_\alpha\langle x\rangle^{-\mu-|\alpha|}, \quad \left|\partial_x V(x)\right| \le C\langle x\rangle^{2-\mu-|\alpha|}, \quad (x\in\mathbb{R}^n)$$

が成り立つ[4].

$\mu>1$ で上の仮定が成り立つとき, H は短距離型であると呼び, そうでないとき H は長距離型であると呼ぶ事にする.

ハミルトン作用素 H に対応する古典的な運動エネルギーとハミルトン関数は,

$$k(x,\xi) = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \qquad p(x,\xi) = k(x,\xi) + V(x),$$

である. 運動エネルギー k が生成するハミルトンフロー: $\exp tH_k$ は測地線流であり, p の生成するハミルトンフロー: $\exp tH_p$ が古典力学系の運動となる.

---

[3]一階の項もあってよいが, ここでは省く. また, 簡単のため係数はすべて実数値とする.
[4]ここで $\alpha\in\mathbb{Z}_+^n$ に対しては $|\alpha| = \sum\alpha_j$ と書く事にする.

相空間の点 $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n \setminus 0)$ での解の特異性を調べるために, その点を通る測地線流を $(\tilde{y}(t), \tilde{\eta}(t))$ と書こう. つまり,

$$(\tilde{y}(t), \tilde{\eta}(t)) = \exp tH_k(x_0, \xi_0), \qquad (t \in \mathbb{R})$$

とする.

定義 (nontrapping): (x_0, ξ_0) が (backward) nontrapping であるとは, $t \to -\infty$ のとき $|\tilde{y}(t)| \to +\infty$ であること.

H が仮定 (μ) を満たし, (x_0, ξ_0) が nontrapping ならば, 漸近運動量：

$$\xi_- = \lim_{t \to -\infty} \tilde{y}(t)$$

が存在する事が知られている（古典力学的散乱理論）. [CKS] での主要結果は次のようなものである：

定理 1(CKS): H が短距離型であり, (x_0, ξ_0) は nontrapping であると仮定する. もし f が $-\xi_-$ のある錐近傍 Γ で急減少する (つまり, 任意の $N \in \mathbb{N}$ について $\langle x \rangle^N f(x) \in L^2(\Gamma)$) ならば, 任意の $t > 0$ について $(x_0, \xi_0) \notin WF(u(t, \cdot))$[5].

この定理は, 初期条件の錐近傍での減衰から超局所的正則性を導くものであり, このような性質は「超局所的平滑化作用」(microlocal smoothing effect) と呼ばれる. この定理は, シュレディンガー作用素を変数係数の場合に拡張しただけではなく, 相空間のある点での超局所的特異性は, 初期条件での特定の方向での減衰（あるいは非減衰）から産み出される, という事を示したと言う点で画期的であったと考えられる. 物理的な直感としては, $(x_0, \lambda\xi_0)$ を通る古典軌道は, $\lambda > 0$ が十分大きいとき, $-s\lambda\xi_-$ $(s < 0)$ に近い軌道を動く, という事を反映している.

この定理から, 前節で述べたような形での平滑化作用を示す事もできる. 土居 [D1,D2] は, Mourre 型の交換子評価などを用いて, さらに一般な幾何学的条件下で類似の平滑化作用を証明した. さらに注目すべき事に, 土居は逆も成り立つ事を証明した. つまり, nontrapping 条件が成り立たなければ, ある種の平滑化作用は成り立たない, という事を証明した.

定理１は, 解の超局所的特異性についての情報を与えているが, 仮定は時間に依存しない形であり, 測地線に沿ったすべての点, すべての正の時間での超局所的正則性の十分条件になっている. Wunsch [W] はより精密な評価を, Melrose の散乱多様体の枠組みの中で証明した. そこでは, 「散乱波面集合」(scattering wavefront set) を変形した, 「２次散乱波面集合」(quadratic scattering wavefront set) の概念が用いられており, 難解な定式化であった. 中村 [N1] は, 仮定 (μ) を満たす長距離型のハミルトニアンの場合に, 類似の結果を, 「斉次波面集合」

[5] Sobolev 空間での評価もできるが, 簡単のためここでは省く.

(homogeneous wavefront set) の概念を用いて証明した．その後, 伊藤 [I] により, 実質的に２次散乱波面集合と斉次波面集合は同等であることが証明された．ここでは, 斉次波面集合を用いた結果を紹介する．

波面集合の定義は, 擬微分作用素を用いて書き換えてみよう．$a(x,\xi)$ が $\mathbb{R}^{2n}$ 上の関数のとき, （形式的に）その (Weyl-) 量子化 $a(x,D_x)$ は

$$a(x,D_x)v(x) = (2\pi)^{-n/2}\int e^{i(x-y)\cdot\xi}a(\tfrac{x+y}{2},\xi)v(y)dy\,d\xi$$

で定義される．この記法を用いると, 波面集合の定義は

$$(x_0,\xi_0)\notin WF(v) \iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|a(x,hD_x)v\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

と書き換えられる．ここで, $\|\cdot\|$ は L^2-ノルムである．これを, x と ξ に関して対象になる様に書き換える．つまり

定義 (homogeneous wavefront set): $v\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$, $(x_0,\xi_0)\in\mathbb{R}^{2n}\setminus(0,0)$ とする．

$$(x_0,\xi_0)\notin HWF(v) \iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|a(hx,hD_x)v\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

により, 斉次波面集合 $HWF(v)$ は定義される．

相空間の点：(x_0,ξ_0) が斉次波面集合に入らない, というのは, 直感的には, u は相空間の中の (x_0,ξ_0) の錐近傍で急減少する, という事である[6]．

定理 2： H が仮定 (μ) $(\mu>0)$ を満たし, (x_0,ξ_0) が nontrapping, $t>0$ とする．もし $-t\xi_-\notin HWF(f)$ ならば, $(x_0,\xi_0)\notin WF(u(t))$.

この定理も, 仮定より測地線上のすべての点での超局所的なめらかさが従う, と言う点で「荒い」結果であるが, 仮定は時間に依存しており, CKS の結果よりはかなり弱い仮定になっている．このタイプの結果も, 適当な領域での減衰から超局所的正則性が従う, と言う結果であり, 「超局所的平滑化作用」の一種と考える事ができる[7]．

以上では, C^∞-急のなめらかさについて考えてきたが, 解析的正則性についても同様の問題を考える事ができる．つまり, 作用素の係数が（適当な意味で）解析的であるという仮定の下で, 錐状領域での指数的減衰から超局所的解析性を導く, という結果である．CKS と Wunsch の結果は, Robbiano と Zuily により, 解析的カテゴリーでも成り立つ事が証明され [RZ1,RZ2], 斉次波面集合を用いた（長距離型の場合の）解析的平滑作用は, Martinez, 中村, Sordoni によって証明された [MNS1].

[6]実際, Bargman 変換, あるいはガウス波束展開を用いてそのように定式化する事もできる．
[7]また, 後で見る様に, 超局所的正則性の必要十分条件からはかなり離れている．

4　シュレディンガー方程式の解の波面集合の特徴付け

ここでは, シュレディンガー方程式の解の時刻 t における波面集合を, 初期条件を用いて特徴づける, という問題を考えよう．もちろん, これは超局所的平滑化作用よりも, はるかに精密な結果を求めようという目標である.

この問題については, 最近, Hassell と Wuncsh により散乱多様体での散乱波面集合を用いた結果が得られている [HW]. その後, 中村により（散乱理論のアイデアを用いた）全く別の定式化による特徴付けが得られた．ここでは, まず中村の結果を紹介し, Hassell-Wunsch の結果との関係については, その後に述べる.

まず, 自由なシュレディンガー方程式の解の波面集合について考えてみよう. 前節に紹介した波面集合の特徴付けにより,

$$(x_0,\xi_0)\notin WF(u(t)) \iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|a(x,hD_x)u(t)\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

である．$u(t)=e^{it\triangle}f$ であり, $e^{it\triangle}$ はユニタリー作用素である事に注意すれば, 右辺の条件は

$$\iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|e^{-it\triangle}a(x,hD_x)e^{it\triangle}f\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

２節で見た公式によれば,

$$e^{-it\triangle}xe^{it\triangle} = x+tD_x, \quad e^{-it\triangle}D_xe^{it\triangle} = D_x$$

である（ここで, $D_x=-i\partial_x$）．これより, 形式的には

$$e^{-it\triangle}a(x,hD_x)e^{it\triangle}f = a(x+tD_x,hD_x)f$$

が予測されるが, 実際これは正しい[8]．したがって,

$$(x_0,\xi_0)\notin WF(u(t)) \iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|a(x+tD_x,hD_x)f\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

が得られる．ここで,

$$(x,\xi)\mapsto(x+t\xi,\xi)$$

が自由なニュートン方程式の解のフローである事を思いだすと,

$$a(x+t\xi,h\xi) = (a_h\circ\exp tH_{p_0})(x,\xi), \qquad (a_h(x,\xi)=a(x,h\xi),\ p_0(x,\xi)=\tfrac{1}{2}|\xi|^2)$$

[8] ここで, Weyl-量子化を用いた事が効いている．他の量子化でも良いのだが, 低階の誤差項が現れる.

である．つまり, 特徴付けに現れる擬微分作用素のシンボルは, 古典力学のフローで引き戻されたものである, と考える事ができる．これより, 一般的に, 次が予想される：

$$(x_0,\xi_0)\notin WF(u(t)) \iff \begin{cases} \exists a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \text{ s.t. } a(x_0,\xi_0)\neq 0, \\ \|(a_h\circ \exp tH_p)(x,D_x)f\| = O(h^\infty) \text{ as } h\downarrow 0 \end{cases}$$

この性質を, SSPP(semiclassical singularity propagation property) と呼ぶ事にしよう．

定理３：H が仮定 (μ) $(\mu>0)$ を満たし, (x_0,ξ_0) が nontrapping, $t>0$ とする．このとき, (x_0,ξ_0) に関して, SSPP が成り立つ．

もちろん, この結果は超局所的平滑化作用の定理より精密であり, $a_h\circ\exp tH_p$ のサポートを調べる事により, この結果から（例えば）定理２は従う．この定理は, 古典力学のフローから超局所的特異性が決定できる, という意味で「半古典的」な結果であり, 証明にも半古典解析の手法が用いられる．しかし, 主要なアイデアは, 散乱理論を用いて長時間の古典力学的フローの挙動を記述する事にある．つぎに, このアイデアについて簡単に紹介する．

定理３の証明は, 短距離型の場合は比較的簡単である[9]．ここでは, $\mu>1$ と仮定して説明する．前節では, 漸近運動量 ξ_- の存在を説明したが, 短距離型の場合はさらに, 「散乱データ」 $(z_-,\xi_-)\in\mathbb{R}^{2n}$ が存在して

$$|\tilde{y}(t)-(z_-+t\xi_-)| \ \to\ 0 \quad (t\to-\infty)$$

が分かる．つまり, $\tilde{y}(t)$ は自由運動 $z_-+t\xi_-$ に漸近する．

$$(x_0,\xi_0)\mapsto(z_-,\xi_-)$$

は, 古典力学的波動作用素（正確には逆波動作用素）と呼ばれる．$u(t)$ の特異性は, 自由なシュレディンガー方程式の解 $e^{-itH_0}f$ の特異性と, 古典力学的波動作用素により１対１対応している事が分かる．ただし, $H_0=-\frac{1}{2}\triangle$ である．

定理４：上の仮定の下で,

$$(x_0,\xi_0)\in WF(u(t)) \iff (z_-,\xi_-)\in WF(e^{-itH_0}f).$$

特に, $a_{ij}(x)=\delta_{ij}$ の場合は, すべての点が nontrapping であり, 波動作用素は恒等写像なので, $WF(u(t))=WF(e^{-itH_0}f)$ が従う．つまり, ポテンシャルは

[9] Hassell-Wunsch は短距離型の場合しか考えていない．

解の特異性に関係しないのである[10]．定理３は, 定理４と最初に述べた自由なシュレディンガー方程式の解の特異性の特徴付けを組み合わせて証明できる.

定理４の証明には, 散乱理論のCook-黒田の方法のアイデアを用いる. つまり,

$$v(t) = e^{-itH_0}e^{-itH}f,$$

を t に関して微分して, $v(t)$ は微分方程式

$$\frac{d}{dt}v(t) = L(t)v(t), \quad L(t) = p(x - tD_x, D_x) - H_0$$

を満たす事を示す. この解の挙動を, Egorov型の定理と古典力学系の散乱理論を用いて解析する事により, 定理４は証明される.

H が長距離型の場合は, 自由なシュレディンガー作用素による時間発展 e^{-itH_0} の代わりに,「変形された」(modified) 自由運動 $e^{iW(t,D_x)}$ を用いる. ここで, $W(t,\xi)$ は適当なHamilton-Jacobi方程式の解であり, 長距離型の散乱理論で用いられる手法を用いている.

さて, 定理４の右辺の条件の自由なシュレディンガー方程式の解は, ２節で見た様に具体的に書き下せる. すると,

$$e^{-itH_0}f(x) = ct^{-n/2}e^{-|x|^2/4it}\mathcal{F}[e^{|\cdot|^2/4it}f](-x/2)$$

と書き直す事ができる. したがって, ($t \neq 0$ のとき)

$$WF(e^{-itH_0}f) = \pi\big[WF(\mathcal{F}[e^{|\cdot|^2/4it}f])\big], \qquad \pi(x,\xi) = (-2x, -2\xi)$$

である. 大まかに言えば, Hassell-Wunschでは, 右辺の表現を用いて解の特異性を記述している[11].

定理３, 定理４についても, 解析的特異性について同様の事が成り立つか, という問題が考えられる. 技術的にはかなり複雑になるが, 短距離型の場合には同じ結果が成り立つ事が最近証明された [MNS2]. 長距離型の場合についても, 同じ結果が予想されるが, 現在は未解決である.

5　関連する話題

非線形シュレディンガー方程式への応用においては, いままで述べてきたような超局所的特異性の解析よりも, Strichartz 評価の方が重要と思われる. 変

[10]ただし, ポテンシャルは短距離型の仮定, 特に $V(x) = O(\langle x\rangle^{2-\mu})$ を満たす事に注意. 一般には, ポテンシャルにより特異性が変化する事があり得る. 例えば, $V(x) = x_1$ の場合, 特異性は平行移動する事が示される.

[11]ユークリッド空間においては, scattering wave front set: ${}^{sc}WF[u]$ は, $WF[\hat{u}]$ の事であると思ってよい.

数係数のシュレディンガー方程式に関する Strichartz 評価については, 近年多くの研究が現れており, 手法的にも深い関係がある. 特に, Bouclet-Tzvetkov [BT] の論文においては, 長距離型のハミルトニアンについての Strichartz 評価を長距離型散乱の手法を用いて証明しており, 定理４の証明と共通する部分がある. また, 変数係数のシュレディンガー方程式の時間発展の基本解の表現については未解決の部分が多く, ここで述べた手法から得られるパラメトリックスの構成は, それ自身興味深い問題であるとともに, Strichartz 評価などへの応用も期待される.

以上の結果のほとんどは, nontrapping 条件の下での結果であるが, trapping な状況での解の特異性の解析は, 極めて興味深い問題である. 土居の示した様に, 強い意味での平滑化作用は trapping な状況では成り立たない. しかし, Burq [B] の示した様に, 弱い捕捉的外部領域[12]の場合には, 対数的な修正を施した平滑化作用が成り立つ. 弱い捕捉的状況（つまり, 双曲的閉軌道のみが存在する場合）の下では, ある種の平滑化作用が成り立つ事が期待されるが, 未解決である.

紙数の関係で詳細は省くが, 摂動された調和振動子をハミルトニアンとするシュレディンガー方程式の解の特異性の伝播も興味深い問題であり, Zelditch, Kapitanski, 谷島, 土居などによる結果がある. 結果自体は一見大きく異なるが, 手法的には今回説明した結果とも深い関係がある.

文献：

[BT] Bouclet, J-M., Tzvetkov, N.: On global Strichartz estimates for non trapping metrics. Preprint 2006 (`http://www.arxiv.org/abs/math.AP/0611705`)

[B] Burq, N.: Smooting effect for Schrödinger boundary value problems. Duke Math. J. **123** (2004), 403–427.

[CKS] Craig, W., Kappeler, T., Strauss, W.: Microlocal dispersive smoothing for the Schrödinger equation, Comm. Pures Appl. Math. **48** (1996), 769–860.

[D1] Doi, S.: Commutator Algebra and Abstract Smoothing Effect, J. Funct. Anal. bf 168 (1999), 428–469

[D2] Doi, S.: Smoothing effects for Schrödinger evolution equation and global behavior of geodesic flow, Math. Ann. **318** (2000), 355–389.

[12]正確には, 複数の強凸領域の外部. 井川の有名な散乱共鳴に関する論文のモデルであり, 実際 Burq は井川の評価を用いて証明している.

[**I**] Ito, K.: Propagation of Singularities for Schrödinger Equations on the Euclidean Space with a Scattering Metric, Comm. P. D. E., **31** (12), 1735–1777 (2006).

[**HW**] Hassel, A., Wunsch, J.: The Schrödinger propagator for scattering metrics, Ann. Math. **162** (2005), 487-523.

[**KY**] Kato, T., Yajima, K.: Some examples of smooth operators and the associated smoothing effect. Rev. Math. Phys., **1** (1989), 481–496.

[**MNS1**] Martinez, A., Nakamura, S., Sordoni, V.: Analytic smoothing effect for the Schrödinger equation with long-range perturbation, Comm. Pure App. Math. **LIX** (2006), 1330–1351.

[**MNS2**] Martinez, A., Nakamura, S., Sordoni, V.: Analytic Wave Front Set for Solutions to Schrödinger Equations, Preprint 2007.

[**N1**] Nakamura, S., Propagation of the Homogeneous Wave Front Set for Schrödinger Equations, Duke Math. J. **126**, 349-367 (2005).

[**N2**] Nakamura, S.: Semiclassical singularity propagation property for Schrödinger equations, Preprint 2006, May.
(`http://www.arxiv.org/abs/math.AP/0605742`)

[**RZ1**] Robbiano, L., Zuily, C.: Microlocal analytic smoothing effect for Schrödinger equation, Duke Math. J. **100** (1999), 93–129.

[**RZ2**] Robbiano, L., Zuily, C.: Analytic theory for the quadratic scattering wave front set and application to the Schrödinger equation, Soc. Math. France, Astérisque **283** (2002), 1–128.

[**W**] Wunsch, J.: Propagation of singularities and growth for Schrödinger operators, Duke Math. J. **98** (1999), 137-186.