境界要素法とカオスの半古典量子化

ATR 環境適応通信研究所 原山卓久

都立大学 首藤啓

奈良女子大学、基礎化学研究所 田崎秀一

概要：2次元ヘルムホルツ方程式をディリクレ条件下で解く場合の境界要素法に現れる行列式をFredholmの行列式として定義し、その第1リーマン面と正の実軸を合わせた領域における零点はヘルムホルツ方程式の固有値のみであることを示す。また、第2リーマン面の零点の実部と虚部は、それぞれノイマン型散乱問題の共鳴エネルギーと幅の1つと一致することを示す。Kacの逆問題やカオスの半古典量子化との関係についても議論する。

1　序

閉曲線 ∂B で囲まれた2次元平面のある領域 B 内ではヘルムホルツ方程式で記述され、∂B の上ではディリクレ条件を満足するという固有値問題を考える。これは、膜の振動、音響、電磁気、量子現象などでしばしば現れ大変重要である。一般に数値的にしか解けないが、強力な数値解法として境界要素法が知られている (Berry & Wilkinson 1984)。

従来の境界要素法の定式化では、境界の分割が無限に細かくなったとき行列式が意味を持つかどうかが明らかでなく収束性も判然としない。またもし境界の分割数が無限大になるとき行列式が意味を持つならば、固有値が零点であることを示す必要がある。さらにそのとき固有値以外に零点を持たないことも明らかではない。

境界要素法で現れる無限次元行列式がFredholmの積分方程式理論を用いて意味付けれられ、オイラー積表示を持ち得ることがGeorgeot と Prange によって指摘された (Georget & Prange 1995)。我々は境界要素法に現れる行列式の意味をFredholm理論を援用して厳密に明らかにした。これにより、境界要素法で数値的に解く場合、近似解が得られること、固有値または共鳴以外に零点を持たないことが保証される。

さらに、この結果からKacの逆問題に対する物理的な解釈や新しいカオスの半古典量子化公式が得られる。

2　境界要素法とFredholm行列式

まず、ヘルムホルツ方程式をディリクレ条件の下で解く境界要素法について説明する (Berry & Wilkinson 1984)。区分的 C^2 である剛体壁 ∂B に囲まれた2次元平面内の有界領域 B におけ

る粒子の定常状態について考える。領域 B では時間に依存しないシュレディンガー－ヘルムホルツ方程式

$$\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(\boldsymbol{r}) = 0, \quad \boldsymbol{r} \text{ in } B \tag{2.1}$$

を満足する。ここで ψ、m、E、$\hbar$ はそれぞれ、粒子の波動関数、質量、エネルギー、プランク定数を表す。また、剛体壁上には粒子は存在しないので

$$\psi(\boldsymbol{r}) = 0, \quad \boldsymbol{r} \text{ on } \partial B \tag{2.2}$$

である。(2.1)、(2.2) に関して、スペクトルは離散的で固有値はすべて正となり、累積状態密度の漸近極限が Weyl の公式で与えられることが知られている (Reed & Simon 1978)。

$$G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';E) = -\frac{1}{4}iH_0^{(1)}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right) \tag{2.3}$$

は (2.1) の自由グリーン関数である。ここで $H_0^{(1)}$ は第 1 種 0 次のハンケル関数である (Abramobitz & Stegun 1964)。グリーンの定理などから、 Fredholm の第 2 種積分方程式

$$\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}(t))}{\partial n_t} - \oint_{\partial B} dsK(t,s)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}(s))}{\partial n_s} = 0$$

$$K(t,s) = -2\frac{\partial G_0(\boldsymbol{r}(\mathrm{t}),\boldsymbol{r}(s);E)}{\partial n_t} \tag{2.5}$$

を得る。積分方程式 (2.5) を境界の離散的な分割によって解く方法が境界要素法である。 Fredholm の理論から、固有エネルギーは Fredholm 行列式

$$D(E) \equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} D_n(E), \tag{2.6}$$

の零点であることがわかる。ここで

$$D_n(E) = \frac{(-1)^n}{n!}\oint_{\partial B} ds_1 \cdots \oint_{\partial B} ds_n \begin{vmatrix} K(s_1,s_1) & \ldots & K(s_1,s_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(s_n,s_1) & \ldots & K(s_n,s_n) \end{vmatrix}. \tag{2.7}$$

である。

3 Fredholm 行列式の零点

我々は境界要素法に現れる Fredholm 行列式に関し以下の定理を得た。

<u>定理 1</u>

B は $\boldsymbol{R}^2$ 内の閉領域で、その境界 ∂B は区分的に C^2 であり、 $\boldsymbol{R}^2 \setminus B$ は連結であるとする。(こ

れは (Eckmann & Pillet 1997) における standard domain と同じである). このとき、以下が成り立つ。

1) $D(E)$ は内部項と外部項との積で表せる:

$$D(E) = D(0) d_{int}(E) d_{ext}(E), \tag{3.1}$$

$$d_{int}(E) = \exp\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^E dE' \int_B d^2\boldsymbol{r}\,[G_D(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';E') - G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';E')]_{\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}}\right\}, \tag{3.2}$$

$$d_{ext}(E) = \exp\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^E dE' \lim_{R\to\infty}\int_{C_R\backslash B} d^2\boldsymbol{r}\,[G_N(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';E') - G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';E')]_{\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}}\right\}, \tag{3.3}$$

ここで G_D と G_N はそれぞれ内部ディリクレ問題、外部ノイマン問題のグリーン関数である。また、C_R は B を含む半径 R の円盤である。なお $D(0)$ は実である。

2) 内部項はアダマール因子分解で表現される:

$$d_{int}(E) = e^{i\frac{mA}{2\hbar^2}E}\left(\frac{m\ell^2 E}{2\hbar^2}\right)^{-\frac{mA}{2\pi\hbar^2}E} e^{-\frac{mA}{\pi\hbar^2}\gamma' E}\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{E}{E_n}\right)e^{\frac{E}{E_n}}, \tag{3.4}$$

ここで E_n' は内部ディリクレ問題の固有エネルギーであり、A と ℓ はそれぞれ B の面積と周長である。γ' は B の形状に依存した定数である。この積は Weyl の公式から収束することがいえる。

3) 外部項は散乱と関係する:

$$d_{ext}(E) = \exp\left\{E\int_0^\infty \frac{dE'}{2\pi}\frac{1}{E-E'+i0}\left(\frac{mA}{\hbar^2} - \frac{2}{E'}\sum_{m=1}^{\infty}\delta_m(E')\right)\right\}, \tag{3.5}$$

ここで $\delta_m(E)$ は外部ノイマン問題の位相のずれであり、$e^{-2i\delta_m(E)}$ は定エネルギー殻上の S 行列 $\hat{S}_N(E)$ の固有値である。$\hat{S}_N(E)-I$ は trace-class であることから、位相のずれが可算個であり、$\sum_{m=1}^{\infty}\delta_m(E)$ が収束することがいえる。

定理 1 より内部項と外部項の零点に関する以下の定理が得られる。

<u>定理 2</u>

1) 内部項 $d_{int}(E)$ のすべての零点は内部ディリクレ問題のすべての固有エネルギーと一致する。

2) 外部項 $d_{ext}(E)$ は第 1 リーマン面 $\{E = |E|e^{i\theta}|0 \le \theta < 2\pi\}$ では零点を持たない。正の実軸を通る第 2 リーマンへの解析接続 $d_{ext}^{II}(E)$ は

$$d_{ext}^{II}(E) = e^{-i\frac{mA}{\hbar^2}E}\frac{d_{ext}(E)}{\det \hat{S}_N^{II}(E)}, \tag{3.6}$$

となる。ここで $\hat{S}_N^{II}$ は $\hat{S}_N$ の第2リーマン面への解析接続である。式 (3.6) より $d_{ext}^{II}(E)$ の零点は S 行列の極、即ち、共鳴に一致する。

4　議論

定理1と2を用いて、「太鼓の音から形がわかるか」というKacの逆問題 (Kac 1969) を考察する。これは固有エネルギーと形状は1対1に対応するかということであり、最近反例が見つかっている (Gordon,Webb & Wolpert 1992)。我々の得た定理は、まさに固有エネルギーと形状を結び付けるものであり、形状が異なっても固有エネルギーは不変であるような図形が存在し得ることがわかる。そのような図形の場合には、外部散乱問題で共鳴あるいは断面積が異なっていることが重要である。つまり、形が変わったことを外部問題にだけ影響させることで、内部問題への影響を回避することができるのである。そこでKacの逆問題に代わるものとして「内部問題の固有値と外部問題の断面積から太鼓の形がわかるか」という新たな問題が提起される。

また、Fredholm 行列式は絶対収束級数で定義されているので、半古典極限でも絶対収束する可能性を持つ。しかも定理によりその零点は固有エネルギーと共鳴に一致するので、半古典量子化と密接に関係している。特に、カオス系では周期軌道の個数が周期の長さに対して指数関数的に増大するために、級数で定義される半古典量子化が収束しないという大きな問題がある。我々の方法に基付いた半古典量子化のカオス系に対する収束性の解明が今後の課題である。

参考文献

Abramobitz, M. & Stegun, I.A.(eds.) 1964 Handbook of Mathematical functions.(Wasington, U.S. National Bureau of Standards)

Berry, M.V. & Wilkinson, M. 1984 Proc. R. Soc. Lond. A 392, 15

Eckmann, J.-P. & Pillet, C.-A. Zeta Functions with Dirichlet and Neumann Boundary Conditions for Exterior Domains. Preprint. 1997

Georgeot, B. & Prange, R.E. 1995 Phys. Rev. Lett. 74, 2851

Gordon, C., Webb, D.& Wolpert, S. 1992 Invent. Math. 110,1

Kac, M. 1969 Ann. Math. Monthly 73, 1

Reed, M. & Simon, D. 1978 Methods of Modern Mathematical Physics