

# 線型常微分方程式系に対する接続公式とその応用 — 完全 WKB 解析を用いた非断熱的遷移確率の計算 —

近畿大理工 青木貴史 (Takashi AOKI)  
京大数理研 河合隆裕 (Takahiro KAWAI)  
京大数理研 竹井義次 (Yoshitsugu TAKEI)

## 1 はじめに

Borel 和に基礎をおく完全 WKB 解析を用いた微分方程式の研究は、まず 2 階の線型常微分方程式 (特に Schrödinger 方程式) に対してなされた (cf. [V], [DP], [KT] etc.). その高階方程式への拡張についても, Berk et al. ([BNR]) によって発見された “new Stokes line” (あるいは “new Stokes curve”) の完全な記述を求めるといった問題が残っているものの, 実用的にはほぼ満足な段階にまで理論は整備されたと思われる ([AKT1], [AKT2], [AKT3]). しかし, 具体的な問題への応用を考える際には, 高階方程式よりもむしろ 1 階の連立方程式系に対する理論があった方が望ましい. このノートでは, 1 階の線型常微分方程式系に対する完全 WKB 解析の理論展開を考察すると共に, その応用として, エネルギーレベルの交差に伴う (非断熱的) 遷移確率を完全 WKB 解析の立場から論じる.

## 2 1 階線型常微分方程式系に対する完全 WKB 解析

1 階線型常微分方程式系の WKB 解析的な取り扱いについては, 非常に詳しい結果を含めて既にかかなりの部分が Wasow の本 [W1], [W2] の中で論じられている. (もっとも, Borel 和といった完全 WKB 解析的な視点が扱われている訳ではないが.) この節では, 完全 WKB 解析の立場にたつて, Wasow の本のうちで重要と思われる部分を復習しかつ必要に応じて議論を補充しながら, 連立方程式系の完全 WKB 解析の理論を展開してみよう.

### 2.1 WKB 解の構成

次の形をした 1 階線型常微分方程式系

$$(2.1) \quad \frac{d}{dx}\psi = \eta H(x)\psi \quad (\eta : \text{large parameter})$$

(但し,  $H(x)$  は各成分が正則函数であるような  $n \times n$  行列,  $\psi(x)$  は  $n$  次元ベクトル値の未知函数), あるいはその局所的なモデルとして現れる

$$(2.2) \quad \frac{d}{dx}\psi = \eta H(x, \eta)\psi, \quad H(x, \eta) = H_0(x) + \eta^{-1}H_1(x) + \eta^{-2}H_2(x) + \dots$$

(但し,  $H_j(x)$  は任意のコンパクト集合  $K$  上で  $\sup_K \|H_j(x)\| \leq A_K C_K^j j!$  ( $A_K, C_K$  は定数) という評価を満たすものとする) という形の方程式系を考える. 単独方程式の場合と同様, 議論の出発点となるのは方程式系 (2.1) に対する形式解 (WKB 解) の構成である.

連立方程式系の場合, 2 階単独方程式の場合の Riccati 方程式に相当するような形式解を能率的に (つまり, ほぼ一意にしかも代数的に) 求めるような方法が存在することは期待できない. その代わりに, [W1, Chapter VII], [W2, Chapter II] にならって, ここでは “形式的対角化” を利用して形式解の構成を行う. すなわち,  $\psi = R(x, \eta)\varphi = (R_0(x) + \eta^{-1}R_1(x) + \dots)\varphi$  という形の未知函数の変換によって方程式系 (2.1) を対角化することを考える. まず,  $H(x)$  (あるいは  $H_0(x)$ ) の固有値  $\rho_j(x)$  ( $j = 1, \dots, n$ ) がすべて相異なる, すなわち

$$(2.3) \quad \Omega = \{x \in \mathbb{C}; \rho_j(x) \neq \rho_k(x) \ (j \neq k)\}$$

という領域上 (より正確には, この領域  $\Omega$  の各点の近傍) で考えることにすれば,  $\psi = P_0(x)\tilde{\psi}$  ( $P_0(x)$  は正則函数を成分とする non-singular な行列) という変換によって最高次の項を対角化することは確かに可能である. しかし, この変換によって方程式系 (2.1) は

$$(2.4) \quad \frac{d}{dx}\tilde{\psi} = \eta \left[ \tilde{H}_0(x) - \eta^{-1}P_0(x)^{-1} \frac{dP_0(x)}{dx} \right] \tilde{\psi}, \quad \tilde{H}_0(x) = P_0(x)^{-1}H(x)P_0(x)$$

という形に変換され, 新たに現れた低次の項  $P_0^{-1}dP_0/dx$  を更に対角化する必要が生じる. そこで次に,  $\tilde{\psi} = (1 + \eta^{-1}P_1(x))\tilde{\tilde{\psi}}$  という変換を考える.

$$(2.5) \quad (1 + \eta^{-1}P_1(x))^{-1} = 1 - \eta^{-1}P_1(x) + \eta^{-2}P_1(x)^2 - \dots$$

に注意すれば, 簡単な計算から (2.1) は

$$(2.6) \quad \frac{d}{dx}\tilde{\tilde{\psi}} = \eta \left[ \tilde{H}_0 + \eta^{-1} \left( -P_0^{-1} \frac{dP_0}{dx} + [\tilde{H}_0, P_1] \right) + \dots \right] \tilde{\tilde{\psi}}$$

(ここで,  $[A, B] = AB - BA$  は 2 つの行列  $A$  と  $B$  の交換子を, また  $\dots$  の部分は  $\eta$  に関してより次数の低い項を表す) に変換されることがわかる. 今,  $\tilde{H}_0$  はその成分  $\rho_j$  がすべて異なる対角行列だから, (2.6) の右辺の  $(-1)$  次の項は容易に対角化できる. 実際,  $P_0^{-1}dP_0/dx$  の  $(j, k)$  成分を  $c_{jk}$  で表すとき,  $P_1$  の  $(j, k)$  非対角成分を  $c_{jk}/(\rho_j - \rho_k)$  と定義すれば良い. つまり, 変換  $\tilde{\psi} = (1 + \eta^{-1}P_1(x))\tilde{\tilde{\psi}}$  によって  $(-1)$  次の項まで対角化ができた. この手続きは, 帰納的に任意の次数まで続けることが可能である.  $(\psi \sim^{(j)} = (1 + \eta^{-j}P_j(x))\psi \sim^{(j+1)})$

という変換が方程式系の  $(-j)$  次の項に引き起こす変換は、いつでも  $[\tilde{H}_0, P_j]$  を加えるという形だから.) 結局,  $\Omega$  の各点において,

$$(2.7) \quad \begin{aligned} \psi &= P_0(x)(1 + \eta^{-1}P_1(x))(1 + \eta^{-2}P_2(x)) \cdots \varphi \\ &\stackrel{\text{def}}{=} (R_0(x) + \eta^{-1}R_1(x) + \eta^{-2}R_2(x) + \cdots)\varphi \end{aligned}$$

(但し  $R_j(x)$  の各成分は正則函数, また  $R_0(x)$  は non-singular) という変換によって, 方程式系 (2.1) は

$$(2.8) \quad \frac{d}{dx}\varphi = \eta \left[ \tilde{H}_0(x) + \eta^{-1}\tilde{H}_1(x) + \cdots \right] \varphi, \quad \tilde{H}_j(x) \text{ は対角行列}$$

という形に (形式的に) 対角化できることがわかった.

こうして得られた方程式系 (2.8) は, 対角化されているので容易に解くことができる. この解を変換 (2.7) に代入すれば, 元の方程式系 (2.1) の次の形をした (形式) 解が得られる.

$$(2.9) \quad \psi^{(j)} = \exp \left( \eta \int_{x_0}^x (\rho_j(x) + \cdots) dx \right) R^{(j)}(x).$$

ここで,  $\rho_j(x) + \cdots$  は対角行列  $\tilde{H}(x, \eta) = \tilde{H}_0(x) + \eta^{-1}\tilde{H}_1(x) + \cdots$  の  $j$  番目の対角成分を (上記の構成から  $\tilde{H}_0(x)$  の対角成分は  $H(x)$  の固有値  $\rho_j(x)$  に等しいことに注意),  $R^{(j)}(x)$  は変換行列  $R(x, \eta) = R_0(x) + \eta^{-1}R_1(x) + \cdots$  の第  $j$  列 ( $j$  番目の縦ベクトル) をそれぞれ表す. また,  $x_0$  は適当に取った定点である. これが方程式系 (2.1) の WKB 解である. もちろん, 単独方程式の場合と同様, この解はほぼいつでも収束しない. 完全 WKB 解析では, この解に解析的な意味を与えるために, その Borel 和を考える.

## 2.2 Turning point と Stokes curve

WKB 解 (2.9) の位相因子 (指数函数の中の  $\eta$  に関して  $(+1)$  次の部分) は,  $H(x)$  の固有値  $\rho_j(x)$  の積分として与えられている. 従って, 単独方程式の場合に平行する形で, 方程式系 (2.1) の turning point と Stokes curve が次で定義される.

$$(2.10) \quad \text{turning point} \stackrel{\text{def}}{\iff} \rho_j(a) = \rho_k(a) \text{ となる点 } x = a,$$

$$(2.11) \quad \text{Stokes curve} \stackrel{\text{def}}{\iff} \Im \left( \int_a^x (\rho_j(x) - \rho_k(x)) dx \right) = 0.$$

((2.11) 式中の  $a$  は  $\rho_j(a) = \rho_k(a)$  となるような turning point.)

以下では, 最も generic な場合として,  $\{\rho_j(x)\}$  のうちの 2 個のみが一致するような turning point のみを考える. その中でも, 特に simple 及び double の turning point (すなわち,  $H(x)$  の固有多項式の判別式を  $\Delta(x)$  で表したとき,  $\Delta(x)$  の 1 位あるいは 2 位の零点となっている turning point) のみを考察の対象とする.

### 2.3 Turning point における変換論

WKB 解 (2.9) の Borel 和は, 一般に上で定義した Stokes curve の上でいわゆる Stokes 現象を起こすと考えられる. 方程式系 (2.1) の解の大域的な状況を知るためには, この Stokes 現象を具体的に記述する接続公式を求めておくことが重要である. 接続公式の具体形を決定するために, 我々は turning point における変換論を利用する. この小節では, simple 及び double の turning point での変換論を展開してみよう.

以下,  $x = 0$  を方程式系 (2.1) の (simple あるいは double の) turning point とする. 上述したように各 turning point では  $H(x)$  の固有値のうちの 2 個だけが一致すると仮定しているので, 適当な行列  $S_0(x)$  (non-singular かつその各成分は  $x = 0$  で正則) を用いて  $S_0(x)^{-1}H(x)S_0(x)$  をいわゆる “block diagonalize” (すなわち,  $x = 0$  で重なる 2 個の固有値に対応する  $2 \times 2$  行列の部分と  $(n-2) \times (n-2)$  の対角行列の部分との直和の形に変換) することができる. しかも, WKB 解を構成する際に用いた形式的対角化の場合と同様な議論により, この block diagonalization も  $\eta$  に関して低次の項まで含めて完全に (full order で) 行うことが可能である. すなわち,  $x = 0$  の近傍において,

$$(2.12) \quad \psi = (S_0(x) + \eta^{-1}S_1(x) + \eta^{-2}S_2(x) + \dots)\varphi$$

( $S_j(x)$  の各成分は  $x = 0$  で正則かつ  $S_0(x)$  は non-singular) によって方程式系 (2.1) は

$$(2.13) \quad \frac{d}{dx}\varphi = \eta \left[ \tilde{H}_0(x) + \eta^{-1}\tilde{H}_1(x) + \dots \right] \varphi,$$

但し  $\tilde{H}_j(x)$  は  $2 \times 2$  行列と  $(n-2) \times (n-2)$  の対角行列との直和, という形に変換される. (議論の詳細については例えば [W1, Theorem 25.2] を参照.) 従って, generic な状況を仮定している今の場合, turning point での変換論を考察するには本質的にサイズが  $2 \times 2$  の方程式系を議論すれば十分である.

そこで, 以下 (2.2) の形をしたサイズが  $2 \times 2$  の方程式系を扱うものとし,  $x = 0$  がその (simple あるいは double の) turning point であると仮定する. まず simple turning point での標準形は次の定理で与えられる.

**Theorem 1 ([W1, Theorem 29.1 & 29.2])** サイズが  $2 \times 2$  の方程式系 (2.2) が  $x = 0$  に simple turning point を持つと仮定する. この時, 未知函数の変換

$$(2.14) \quad \psi = \exp\left(\frac{\eta}{2} \int_0^x \text{trace}H_0(x)dx\right) (T_0(x) + \eta^{-1}T_1(x) + \eta^{-2}T_2(x) + \dots)\varphi$$

( $T_j(x)$  の各成分は  $x = 0$  で正則, また  $T_0(x)$  は non-singular), 及び座標変換

$$(2.15) \quad x \mapsto z = z(x)$$

によって, 方程式系 (2.2) は次の形に変換される.

$$(2.16) \quad \frac{d}{dz}\varphi = \eta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ z & 0 \end{pmatrix} \varphi.$$

サイズが  $2 \times 2$  の方程式系の変換論については, Hanson [H], [HR] によって退化の度合いが大きい場合も含めて非常に詳しく調べられている. 特に double turning point での変換論は次の形にまとめられる.

**Theorem 2** サイズが  $2 \times 2$  の方程式系 (2.2) が  $x = 0$  に double turning point を持つと仮定する. この時, 未知函数の変換

$$(2.17) \quad \psi = \exp\left(\frac{\eta}{2} \int_0^x \text{trace} H_0(x) dx\right) (T_0(x) + \eta^{-1} T_1(x) + \eta^{-2} T_2(x) + \dots) \varphi$$

( $T_j(x)$  の各成分は  $x = 0$  で正則, また  $T_0(x)$  は non-singular), 及び座標変換

$$(2.18) \quad x \mapsto z = z(x)$$

によって, 方程式系 (2.2) は

$$(2.19) \quad \frac{d}{dz} \varphi = \eta [\tilde{H}_0(z) + \eta^{-1} \tilde{H}_1(z) + \dots] \varphi$$

に変換される. ここで, 標準形 (2.19) は次の形で与えられる.

(Case I)  $\text{rank}(H_0(0) - \rho_1(0)) = 0$  のとき,

$$(2.20) \quad \tilde{H}_0(z) = \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & -z \end{pmatrix}, \quad \tilde{H}_j(z) = \begin{pmatrix} 0 & \mu_j \\ \nu_j & 0 \end{pmatrix} \quad (j \geq 1).$$

(Case II)  $\text{rank}(H_0(0) - \rho_1(0)) = 1$  のとき,

$$(2.21) \quad \tilde{H}_0(z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ z^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{H}_j(z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \nu_j & 0 \end{pmatrix} \quad (j \geq 1).$$

(但し, Case I, Case II いずれの場合も  $\mu_j, \nu_j$  は適当な定数.)

Theorem 2 の証明の概略を述べよう.

変換  $\psi = \exp\left(\eta \int^x \text{trace} H_0(x) dx / 2\right) \varphi$  を考えることにより,  $\text{trace} H_0(x) = 0$  かつ  $\rho_1(0) = \rho_2(0) = 0$  としても一般性を失わない. 従って  $H_0(x)$  及びその固有多項式の判別式はそれぞれ

$$(2.22) \quad H_0(x) = \begin{pmatrix} a(x) & b(x) \\ c(x) & -a(x) \end{pmatrix}, \quad \Delta(x) = a(x)^2 + b(x)c(x)$$

という形をしていることになる. まず  $H_0(x)$  を標準形に移すことを考えよう. Case I の場合は,  $H_0(0) = 0$  であるから,  $x = 0$  で正則な函数を成分に持つ行列  $H_0^\dagger(x)$  を用いて  $H_0(x) = xH_0^\dagger(x)$  と書くことができる. このとき,  $H_0^\dagger(x)$  の固有多項式の判別式を  $\Delta^\dagger(x)$

で表せば,  $\Delta(x) = x^2\Delta^\dagger(x)$  が成立するので double turning point の仮定より  $\Delta^\dagger(0) \neq 0$  である. 従って  $H_0^\dagger(x)$  は対角化可能, それ故  $H_0(x)$  も対角化可能となる. すなわち, 適当な行列  $T_0(x)$  (その各成分は  $x=0$  で正則) により

$$(2.23) \quad T_0(x)^{-1}H_0(x)T_0(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{\Delta(x)} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\Delta(x)} \end{pmatrix}$$

とできる. さらに, 座標変換  $z = z(x)$  を

$$(2.24) \quad z \frac{dz}{dx} = \sqrt{\Delta}, \quad \text{i.e.,} \quad z(x) = \left( 2 \int_0^x \sqrt{\Delta(x)} dx \right)^{1/2}$$

で定義すれば,  $H_0(x)$  を (2.20) の形に変換することが可能であることがわかる. 一方, Case II の場合は, non-singular な行列  $T_0(x)$  で

$$(2.25) \quad H_0(x)T_0(x) = T_0(x) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \Delta(x) & 0 \end{pmatrix}$$

を満たすものが存在する. 実際,  $T_0(x)$  の第 1 列, 第 2 列をそれぞれ  $\bar{e}_1, \bar{e}_2$  で表せば, (2.25) は  $H_0(x)\bar{e}_2 = \bar{e}_1$  と同値になり,  $\text{rank } H_0(0) = 1$  という仮定からこの式を満足するような  $\bar{e}_1 \nparallel \bar{e}_2$  は容易に見つけられる. ここでさらに (2.24) で定義される座標変換, 及び

$$(2.26) \quad \psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{dz}{dx} \end{pmatrix} \varphi$$

という未知函数の変換を施せば,  $H_0$  が (2.21) の形に変換される.

次に,  $\eta$  に関して低次の項の変換を構成しよう. Case II の場合は simple turning point の場合と構造がほぼ同じなので (cf. [W2, §5.2]), 以下 Case I の場合のみを考察する. 証明には帰納法を利用する. 独立変数としては上で構成した  $z$  を用いることとし, 今,  $j \geq 2$  として

$$(2.27) \quad H_0(z) = \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & -z \end{pmatrix}, \quad H_k(z) = \begin{pmatrix} 0 & \mu_k \\ \nu_k & 0 \end{pmatrix} \quad (1 \leq k \leq j-1),$$

さらに  $H_j(z)$  についても

$$(2.28) \quad H_j(z) = \begin{pmatrix} 0 & b_j(z) \\ c_j(z) & 0 \end{pmatrix}$$

という形にまで既に変換されたものと仮定する. (もちろん,  $H_1(z)$  の変換等, 最初の数項については別に議論しておく必要があるが, それについては [T3] を参照.) このとき,

$$(2.29) \quad \psi = (1 + \eta^{-j}P_j(z))\varphi, \quad P_j(z) = \begin{pmatrix} p(z) & r(z) \\ s(z) & q(z) \end{pmatrix}$$

を考えれば、問題の方程式系は次の形に変換される。

$$(2.30) \quad \frac{d}{dz}\varphi = \eta \left[ H_0 + \cdots + \eta^{-(j-1)}H_{j-1} + \eta^{-j}\tilde{H}_j + \eta^{-(j+1)}\tilde{H}_{j+1} + \cdots \right] \varphi,$$

但し

$$(2.31) \quad \begin{aligned} \tilde{H}_j &= (H_j + [H_0, P_j]) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & b_j(z) + 2zr(z) \\ c_j(z) - 2zs(z) & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$(2.32) \quad \begin{aligned} \tilde{H}_{j+1} &= \left( H_{j+1} + [H_1, P_j] - \frac{dP_j}{dz} \right) \\ &= \begin{pmatrix} a_{j+1} + (\mu_1 s - \nu_1 r) - p' & b_{j+1} - \mu_1(p - q) - r' \\ c_{j+1} + \nu_1(p - q) - s' & d_{j+1} - (\mu_1 s - \nu_1 r) - q' \end{pmatrix} \end{aligned}$$

( $H_{j+1}$  の成分を  $a_{j+1} = a_{j+1}(z)$  等で表した)。従って、

$$(2.33) \quad \mu_j = b_j(0), \quad \nu_j = c_j(0)$$

と選び、

$$(2.34) \quad r(z) = -(b_j(z) - b_j(0))/(2z),$$

$$(2.35) \quad s(z) = (c_j(z) - c_j(0))/(2z),$$

$$(2.36) \quad p(z) = \int_0^z (a_{j+1} + (\mu_1 s - \nu_1 r)) dz,$$

$$(2.37) \quad q(z) = \int_0^z (d_{j+1} - (\mu_1 s - \nu_1 r)) dz,$$

により  $p(z)$  等を定めれば、帰納法が進むことがわかる。

こうして Theorem 2 の証明が終わった。

上で説明した変換の構成の際に、同時に変換行列の評価を行えば、次のような評価が得られる：Theorem 1 及び Theorem 2 に現れる変換行列  $T_j(x)$ 、さらに Theorem 2 については標準形  $\tilde{H}_j(z)$  に対して、適当な定数  $r, A, C$  が存在して、

$$(2.38) \quad \sup_{|x| \leq r} \|T_j(x)\| \leq AC^j j! \quad (j = 0, 1, 2, \dots),$$

$$(2.39) \quad |\mu_j|, |\nu_j| \leq AC^j j! \quad (j = 1, 2, \dots)$$

が成り立つ。この評価の導出については現在準備中の論文 [T3] を参照されたい。

## 2.4 接続公式

Theorem 1 によると simple turning point においては Airy の方程式（正確には，それを方程式系の形に書き直したもの）が，また Theorem 2 によると Case II，すなわち rank が 1 の場合の double turning point においては Weber の方程式が，それぞれ標準形を与えている．従って，それらの turning point から出る Stokes curve 上では，こうした標準形の方程式に対するものと同じ形の接続公式が成立すると考えられる．しかし，例えば次節で論じるエネルギーレベルの交差に伴う非断熱的遷移確率の計算や，あるいは（Painlevé 方程式等に付随した）モノドロミー保存変形の解析といった具体的な問題への応用においては，より退化した Case I，すなわち rank が 0 の場合の double turning point がしばしば現れる．そこでこの小節では，Case I という退化した場合の double turning point から出る Stokes curve 上での接続公式の具体的な記述を与えることにしよう．

Theorem 2 に述べられている通り，Case I の場合の double turning point における標準形は (2.19)~(2.20) という方程式系である．この方程式系，あるいは（次節での応用を念頭に置いて）それにさらに  $\eta$  の半整数巾の項を加えた

$$(2.40) \quad \frac{d}{dz}\varphi = \eta \left[ \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & -z \end{pmatrix} + \sum_{j=1}^{\infty} \eta^{-j/2} \begin{pmatrix} 0 & \mu_{j/2} \\ \nu_{j/2} & 0 \end{pmatrix} \right] \varphi$$

は，原点  $z = 0$  に唯一の (double) turning point を持ち，実軸及び虚軸を Stokes curve とするような方程式系である．[T1, §3] でも論じられているように，(2.40) は (generic には) Weber 方程式の一つの variant であるので，その接続公式は Weber 方程式の場合と同様にガンマ函数を用いて具体的に記述することができる．例えば，基本解系として

$$(2.41) \quad \begin{aligned} \varphi^{(+)} &= \left\{ \left( \begin{array}{c} 1 \\ \frac{\eta^{-1/2}\nu_{1/2}}{2z} \end{array} \right) + \dots \right\} e^{\eta z^2/2} z^{\mu\nu/2} (1 + \dots) \\ \varphi^{(-)} &= \left\{ \left( \begin{array}{c} -\frac{\eta^{-1/2}\mu_{1/2}}{2z} \\ 1 \end{array} \right) + \dots \right\} e^{-\eta z^2/2} z^{-\mu\nu/2} (1 + \dots) \end{aligned}$$

を採用し，正の虚軸という Stokes curve を  $\Re z > 0$  の側から  $\Re z < 0$  の側に横切る際の解析接続を問題にすれば， $\varphi^{(\pm)}$  の Borel 和に関して次の接続公式が成立する．

$$(2.42) \quad \begin{cases} \varphi^{(+)} \mapsto \varphi^{(+)}, \\ \varphi^{(-)} \mapsto \varphi^{(-)} - 2^{\mu\nu/2} \eta^{\mu\nu/2} \mu \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\mu\nu/2 + 1)} e^{-i\pi\mu\nu/2} \varphi^{(+)} \end{cases}$$

(但し  $\mu = \mu_{1/2} + \eta^{-1/2}\mu_1 + \dots$ ,  $\nu = \nu_{1/2} + \eta^{-1/2}\nu_1 + \dots$ , cf. [T1, §3], [T3]) . 他方，Theorem 2 で構成した変換は 2 つの方程式系の WKB 解の間の変換を引き起こす．この



変換は WKB 解のレベルでは形式的な変換だけれども、WKB 解の ( $\eta$  に関する) Borel 変換 (形式的逆 Laplace 変換) への作用を考えれば、上述の評価 (2.38) により、それは microdifferential operator として作用することがわかる。従って、[KT, §2.3] と同様の議論から、一般の方程式系 (2.1) (あるいは (2.2)) に対しても、その基本解系 (の一部) として上記の変換を通じて (2.41) に対応する WKB 解を採用すれば、(2.42) が Case I のタイプの double turning point から出る Stokes curve の上での接続公式を記述していることになる。

**Remark** 方程式系 (2.40) に対する接続公式 (2.42) の導出は WKB 解の Borel 変換を具体的に計算することによってなされるが、実際にこれが可能なのは  $j \geq 2$  に対して  $\mu_{j/2} = \nu_{j/2} = 0$  が成り立っている場合に限られる。また、[KT, §2.3] の議論を用いて一般の方程式系に対する接続公式を導くところも、実際に数学的に証明できるのは WKB 解の Borel 変換に対する接続公式 (より正確には、Ecalee による alien derivative に関する関係式) である。出発点である方程式系 (2.1) の WKB 解 (2.9) の Borel 総和可能性を含め、この周辺の理論を数学的に厳密に整備することは、今後の大きな課題である。

### 3 応用 — 非断熱的遷移確率の計算

前節で展開した 1 階線型常微分方程式系に対する完全 WKB 解析の応用として、エネルギーレベルの交差に伴う非断熱的遷移確率を求めるという問題を考える。

具体的に扱うのは、サイズが  $3 \times 3$  の次の方程式系である。

$$(3.1) \quad i \frac{d}{dt} \psi = \eta \left[ \begin{pmatrix} \rho_1(t) & 0 & 0 \\ 0 & \rho_2(t) & 0 \\ 0 & 0 & \rho_3(t) \end{pmatrix} + \eta^{-1/2} \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & c_{13} \\ \bar{c}_{12} & 0 & c_{23} \\ \bar{c}_{13} & \bar{c}_{23} & 0 \end{pmatrix} \right] \psi,$$

但し

$$(3.2) \quad \rho_1(t) = b_1 t + a, \quad \rho_2(t) = b_2 t, \quad \rho_3(t) = b_3 t$$

( $b_j, a \in \mathbb{R}, c_{jk} \in \mathbb{C}$ )。以下では、 $\rho_j(t)$  と  $\rho_k(t)$  が交わる点を  $t_{jk}$  で表す。すなわち、

$$(3.3) \quad t_{12} = \frac{a}{b_2 - b_1}, \quad t_{23} = 0, \quad t_{13} = \frac{a}{b_3 - b_1}.$$

なお、状況を特定するために  $0 < b_1 < b_2 < b_3, a > 0$  を仮定する。

方程式系 (3.1) は、エネルギーレベルの交差を伴った時間に依存する Schrödinger 方程式の一つの簡単なモデルである。(各  $\rho_j(t)$  がエネルギーレベルにあたり、それらが有限の時間  $t_{jk}$  で交わるのがエネルギーレベルの交差に相当する。) また、その大きなパラメータ  $\eta$  に関する依存の仕方が、(3.1) が非断熱的であることを意味している。“エネルギーレベルの交差に伴う非断熱的遷移確率の問題”とは、こうしたエネルギーレベルの交差が

固有状態の間の遷移確率にどのような影響をもたらすか、すなわち、 $t \sim -\infty$ での固有状態が時間発展の後に $t \sim +\infty$ では固有状態のどのような一次結合に遷移するか、を調べることである。このモデルの場合、不確定特異点 $t = \infty$ での形式解の構成から得られる

$$(3.4) \quad \psi^{\pm, (j)}(t) = e^{-i\phi_j(t)} |t|^{iA_j} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\}_j + O\left(\frac{1}{t}\right) \quad (\text{as } t \rightarrow \pm\infty)$$

(ここで $\phi_j(t) = \int^t (b_j t + a_j) dt$ , また $A_j \in \mathbb{R}$ は定数) という2組の基本解系(漸近解) $\psi^{\pm, (j)}$ がそれぞれ $t \sim \pm\infty$ での固有状態に対応しており、その間の線型関係式

$$(3.5) \quad (\psi^{-, (1)}, \dots, \psi^{-, (n)}) = (\psi^{+, (1)}, \dots, \psi^{+, (n)}) \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ S_{n1} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix}$$

に現れる行列 $S = (S_{jk})_{1 \leq j, k \leq n}$ ( $S$ 行列と呼ばれる)が $t \sim -\infty$ の固有状態から $t \sim \infty$ の固有状態への遷移を記述している。我々の目的は、前節で展開した1階方程式系に対する完全WKB解析(特に接続公式)を用いて、(3.1)の $S$ 行列を具体的に計算することである。なお、この問題に関するこれまでに知られている結果等については、[L], [Z], [CH], [BE], [J] やそこに挙げられている文献を参照されたい(簡単な歴史的解説に関しては[T2]も参照)。

問題の方程式系(3.1)に前節の議論を適用しよう。(3.1)が $\eta^{1/2}$ の項を含んでいるために、実際の適用にあたっては細部の修正が必要であることに注意。この修正に関しては[AKT4, Appendix]を参照。)まず、(3.1)のWKB解は次式で与えられる。

$$(3.6) \quad \psi^{(j)} = \exp\left(\frac{\eta}{i} \int_0^t \rho_j(t) dt\right) (\rho_k - \rho_j)^{-\kappa_{kj}} (\rho_l - \rho_j)^{-\kappa_{lj}} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\}_j + O(\eta^{-1/2}),$$

ここで $\kappa_{\alpha\beta}$ は

$$(3.7) \quad \kappa_{\alpha\beta} = \frac{i|c_{\alpha\beta}|^2}{b_\beta - b_\alpha} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3)$$

により定義されるパラメータであり、また $\{j, k, l\}$ は $\{1, 2, 3\}$ の置換となっているものと

する (すなわち, 集合として  $\{j, k, l\} = \{1, 2, 3\}$  が成り立つ). さらに,

$$(3.8) \quad \begin{aligned} t \rightarrow -\infty \text{ のとき} & \quad \alpha < \beta \text{ ならば } \arg(\rho_\alpha - \rho_\beta) = 0, \\ & \quad \alpha > \beta \text{ ならば } \arg(\rho_\alpha - \rho_\beta) = \pi, \\ t \rightarrow +\infty \text{ のとき} & \quad \alpha < \beta \text{ ならば } \arg(\rho_\alpha - \rho_\beta) = -\pi, \\ & \quad \alpha > \beta \text{ ならば } \arg(\rho_\alpha - \rho_\beta) = 0 \end{aligned}$$

により多価函数  $(\rho_k - \rho_j)^{-\kappa_{kj}}$  等の分枝を定める. このとき, WKB 解  $\psi^{(j)}$  と漸近解  $\psi^{\pm, (j)}$  との間には,

$$(3.9) \quad \psi^{\pm, (j)} = N^{\pm, (j)} \psi^{(j)}$$

という関係式が成り立つことに注意しよう. ( $N^{\pm, (j)}$  は正規化に関わる定数であり, その第 1 項は, 絶対値 1 の複素数を別にして,

$$(3.10) \quad \begin{aligned} N^{-, (1)} &= e^{-i\pi(\kappa_{12} + \kappa_{13})}, & N^{-, (2)} &= e^{-i\pi\kappa_{23}}, & N^{-, (3)} &= 1, \\ N^{+, (1)} &= 1, & N^{+, (2)} &= e^{-i\pi\kappa_{12}}, & N^{+, (3)} &= e^{-i\pi(\kappa_{23} + \kappa_{13})} \end{aligned}$$

で与えられる.) すなわち, WKB 解  $\psi^{(j)}$  は  $\psi^{\pm, (j)}$  の代用物と見なせる.

この WKB 解  $\psi^{(j)}$  の解析接続を論じるために, 次に (3.1) の turning point と Stokes curve を求める. 定義から, turning point はエネルギーレベルが交差する点  $t_{jk}$  に一致することが容易に確かめられる. また, (3.1) の場合  $\rho_j(t)$  は実係数の 1 次式なので, これらの turning point から出る Stokes curve は, Figure 1 に図示されているように傾き  $45^\circ$  の直線となる. なお, Figure 1 に現れた 2 本の曲線は, 方程式系 (3.1) のいわゆる new Stokes curve である. 実は, 実軸との交点の付近においては, この 2 本の new Stokes curve 上では WKB 解の Borel 和の間に Stokes 現象が起こらないことが証明できる. (実軸との交点が “new turning point” (あるいは最近の言葉遣いを用いれば “virtual turning point”) になっているので. 詳しくは [AKT4] を参照. この事実を表現するために, Figure 1 では new Stokes curve の実軸との交点の付近が破線で表示されている.) つまり  $S$  行列を計算する際には, 実軸に沿った解析接続が問題なので, 3 個の turning point  $t_{jk}$  から出る通常の Stokes curve のみを考えれば良い. 容易にわかるように, これら 3 個の turning point はいずれも Theorem 2 の Case I にあたる退化した double turning point である. しかも, (3.1) が  $\eta^{1/2}$  の項を含んでいるが故に, 各  $t_{jk}$  における標準形は  $\eta$  の半整数巾を含んだ方程式系 (2.40) となる. 従って,  $t_{jk}$  を起点とする Stokes curve の上では, (2.40) に対する接続公式 (2.42) と同じ形の接続公式が成立すると期待される.

例えば  $t_{23} = 0$  という turning point を考えよう. 標準形 (2.40) への変換を具体的に構成してみればわかるように,  $t_{23} = 0$  における “不変量”  $\mu, \nu$  (の第 1 項) は

$$(3.11) \quad \mu_{1/2} = -\sqrt{\frac{2i}{b_3 - b_2}} c_{23}, \quad \nu_{1/2} = -\sqrt{\frac{2i}{b_3 - b_2}} \bar{c}_{23}, \quad \frac{\mu\nu}{2} = \frac{i|c_{23}|^2}{b_3 - b_2} + \cdots = \kappa_{23} + \cdots$$

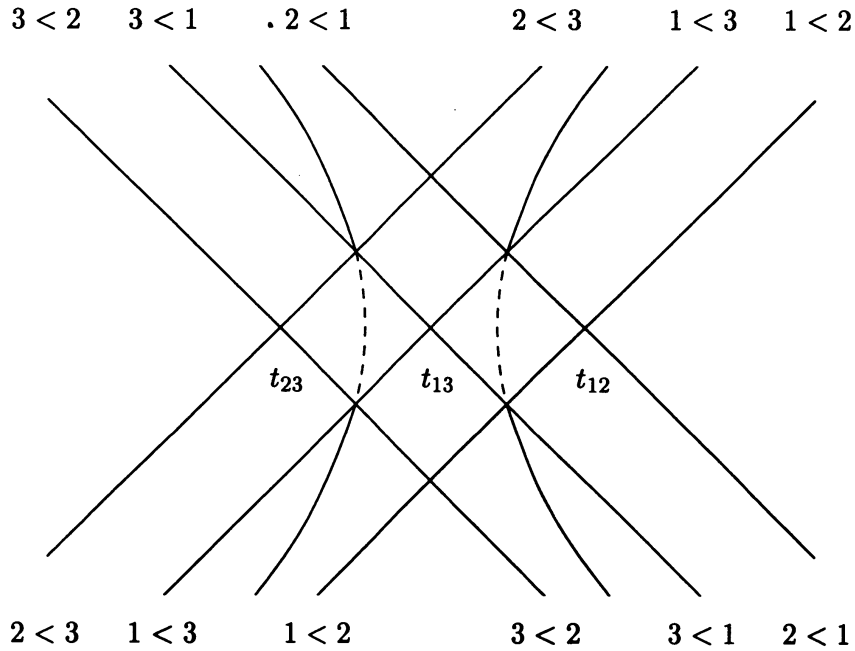


Figure 1 : 方程式系 (3.1) の Stokes curve.

である. ((3.11) において  $\dots$  は  $\eta$  に関して低次の項を表す. 以下でも同様. 本節ではもっぱら  $\eta$  に関する第 1 項のみを扱うので, 混乱の恐れがない限り, しばしば低次の項を無視して  $\dots$  という記号も省略することがある.) また, (2.40) の基本解系 (2.41) にこの変換を通じて対応する解を  $\tilde{\varphi}^{(\pm)}$  で表すと,  $\tilde{\varphi}^{(\pm)}$  と  $\psi^{(j)}$  との間に次の関係が成立する.

$$(3.12) \quad \begin{cases} \tilde{\varphi}^{(+)} = (2(b_3 - b_2))^{-\mu\nu/4} e^{i\pi\mu\nu/8} a^{i|c_{12}|^2/(b_2-b_1)} (1 + \dots) \psi^{(2)}, \\ \tilde{\varphi}^{(-)} = (2(b_3 - b_2))^{\mu\nu/4} e^{-5i\pi\mu\nu/8} a^{i|c_{13}|^2/(b_3-b_1)} (1 + \dots) \psi^{(3)}. \end{cases}$$

解  $\tilde{\varphi}^{(\pm)}$  に対しては (2.42) と同じ形の接続公式が成り立つと考えられる. 従って, 2 組の解の間関係式 (3.12) と接続公式 (2.42) を組み合わせることにより,  $t_{23} = 0$  の左側から右側に上半平面の 2 本の Stokes curve を横切って  $\psi^{(j)}$  ( $j = 2, 3$ ) を解析接続した時,

$$(3.13) \quad \begin{cases} \psi^{(2)} \mapsto (1 + \alpha_{23}^- \alpha_{23}^+) \psi^{(2)} - \alpha_{23}^- \psi^{(3)} \\ \psi^{(3)} \mapsto \psi^{(3)} - \alpha_{23}^+ \psi^{(2)} \end{cases}$$

という公式が成立することが結論される。ここで、

$$(3.14) \quad \alpha_{23}^{\pm} = c_{23}^{\pm} \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1 \pm \kappa_{23})} (e^{\pm i\pi/2}(b_3 - b_2))^{-1/2} (2\eta)^{\pm \kappa_{23}} e^{(1/2 \mp 1)i\pi \kappa_{23}} \beta_{23}^{\pm 1} \quad (\text{複号同順}),$$

$$\beta_{23} = e^{i\pi \kappa_{23}} (2(b_3 - b_2))^{-\kappa_{23}} a^{\kappa_{12} - \kappa_{13}},$$

$$c_{23}^+ = c_{23}, \quad c_{23}^- = \overline{c_{23}}.$$

((3.13) の導出にあたっては接続公式を2度用いた。なお、 $\psi^{(1)}$  については Stokes 現象は起きないことに注意。) すなわち、 $3 \times 3$  行列  $M_{23}$  を

$$(3.15) \quad M_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \alpha_{23}^- \alpha_{23}^+ & -\alpha_{23}^+ \\ 0 & -\alpha_{23}^- & 1 \end{pmatrix}$$

で定義すれば、 $t_{23} = 0$  の左側から右側へと解析接続した時、 $\psi^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) は

$$(3.16) \quad (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) \mapsto (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) M_{23}$$

という接続公式を満足する訳である。

同様に、 $t_{13}$  においては

$$(3.17) \quad (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) \mapsto (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) M_{13},$$

但し

$$(3.18) \quad \alpha_{13}^{\pm} = c_{13}^{\pm} \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1 \pm \kappa_{13})} (e^{\pm i\pi/2}(b_3 - b_1))^{-1/2} (2\eta)^{\pm \kappa_{13}} e^{(1/2 \mp 1)i\pi \kappa_{13}} \beta_{13}^{\pm 1},$$

$$\beta_{13} = e^{i\pi(-\kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{13})} (2(b_3 - b_1))^{-\kappa_{13}} \left( \frac{b_3 - b_2}{b_3 - b_1} a \right)^{-\kappa_{12} - \kappa_{23}} e^{i\eta a^2 / (2(b_3 - b_1))},$$

$$c_{13}^+ = c_{13}, \quad c_{13}^- = \overline{c_{13}}$$

という接続公式が、また  $t_{12}$  においては

$$(3.19) \quad (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) \mapsto (\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \psi^{(3)}) M_{12},$$

$$\begin{aligned}
M_{12} &= \begin{pmatrix} 1 + \alpha_{12}^- \alpha_{12}^+ & -\alpha_{12}^+ & 0 \\ -\alpha_{12}^- & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
(3.20) \quad \alpha_{12}^\pm &= c_{12}^\pm \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1 \pm \kappa_{12})} (e^{\pm i\pi/2}(b_2 - b_1))^{-1/2} (2\eta)^{\pm \kappa_{12}} e^{(1/2 \mp 1)i\pi\kappa_{12}} \beta_{12}^{\pm 1}, \\
\beta_{12} &= e^{i\pi\kappa_{12}} (2(b_2 - b_1))^{-\kappa_{12}} \left( \frac{b_3 - b_2}{b_2 - b_1} a \right)^{\kappa_{23} - \kappa_{13}} e^{i\eta a^2 / (2(b_2 - b_1))}, \\
c_{12}^+ &= c_{12}, \quad c_{12}^- = \overline{c_{12}}
\end{aligned}$$

という接続公式がそれぞれ成立する。

問題の方程式系 (3.1) の  $S$  行列は、これら 3 つの接続公式を組み合わせることで計算できる。より正確に言うと、WKB 解  $\psi^{(j)}$  と漸近解  $\psi^{\pm, (j)}$  との関係 (3.9) を考慮に入れて、

$$(3.21) \quad \begin{pmatrix} N^{+, (1)} & 0 & 0 \\ 0 & N^{+, (2)} & 0 \\ 0 & 0 & N^{+, (3)} \end{pmatrix}^{-1} M_{12} M_{13} M_{23} \begin{pmatrix} N^{-, (1)} & 0 & 0 \\ 0 & N^{-, (2)} & 0 \\ 0 & 0 & N^{-, (3)} \end{pmatrix}$$

が  $S$  行列を与える。上記の結果を代入すれば、今の場合、(3.1) の  $S$  行列の第 1 項は次式で記述されると結論される。

$$(3.22) \quad \begin{pmatrix} e^{i\pi(\kappa_{12} + \kappa_{13})} & \alpha_{23}^- \alpha_{13}^+ e^{i\pi(2\kappa_{12} - \kappa_{23})} - \alpha_{12}^+ e^{i\pi\kappa_{23}} & -\alpha_{13}^+ e^{2i\pi\kappa_{12}} + \alpha_{12}^+ \alpha_{23}^+ \\ -\alpha_{12}^- e^{i\pi\kappa_{13}} & -\alpha_{12}^- \alpha_{23}^- \alpha_{13}^+ e^{i\pi(\kappa_{12} - \kappa_{23})} + e^{i\pi(\kappa_{12} + \kappa_{23})} & (\alpha_{12}^- \alpha_{13}^+ - \alpha_{23}^+) e^{i\pi\kappa_{12}} \\ -\alpha_{13}^- e^{i\pi(-\kappa_{12} + \kappa_{23})} & -\alpha_{23}^- e^{i\pi\kappa_{13}} & e^{i\pi(\kappa_{23} + \kappa_{13})} \end{pmatrix}.$$

この完全 WKB 解析による  $S$  行列の計算は、エネルギーレベル  $\rho_j(t)$  が 1 次式とは限らない一般の実多項式であるようなモデルに対しても有効である。こうした一般化については [AKT4, §4] を参照されたい。

## 参考文献

- [AKT1] T. Aoki, T. Kawai and Y. Takei: New turning points in the exact WKB analysis for higher-order ordinary differential equations, *Analyse algébrique des perturbations singulières*, I, Hermann, 1994, pp. 69–84.

- [AKT2] ———: On the exact WKB analysis for the third order ordinary differential equations with a large parameter, *Asian J. Math.*, **2**(1998), 625–640.
- [AKT3] ———: On the exact steepest descent method: A new method for the description of Stokes curves, *J. Math. Phys.*, **42**(2001), 3691–3713.
- [AKT4] ———: Exact WKB analysis of non-adiabatic transition probabilities for three levels, preprint (RIMS-1331).
- [BNR] H.L. Berk, W.M. Nevins and K.V. Roberts: New Stokes' line in WKB theory, *J. Math. Phys.*, **23**(1982), 988–1002.
- [BE] S. Brundobler and V. Elser: *S*-Matrix for generalized Landau-Zener problem, *J. Phys. A*, **26**(1993), 1211–1227.
- [CH] C.E. Carroll and F.T. Hioe: Transition probabilities for the three-level Landau-Zener model, *J. Phys. A*, **19**(1986), 2061–2073.
- [DP] E. Delabaere and F. Pham: Resurgent methods in semi-classical asymptotics, *Ann. Inst. H. Poincaré*, **71**(1999), 1–94.
- [H] R.J. Hanson: Simplification of second order systems of ordinary differential equations with a turning point, *SIAM J. Appl. Math.*, **16**(1968), 1059–1080.
- [HR] R.J. Hanson and D.L. Russell: Classification and reduction of second order systems at a turning point, *J. Math. and Phys.*, **46**(1967), 74–92.
- [J] A. Joye: Exponential asymptotics in a singular limit for  $n$ -level scattering systems, *SIAM J. Math. Anal.*, **28**(1997), 669–703.
- [KT] 河合隆裕, 竹井義次: 特異摂動の代数解析学, 岩波講座 現代数学の展開, 岩波書店, 1998.
- [L] L.D. Landau: A theory of energy transfer. II, *Collected Papers of L.D. Landau*, Pergamon Press, 1965, pp. 63–66. (Translation of “Zur Theorie der Energieübertragung, *Physik. Z. Sowjet.*, **2**(1932), 46–51.”)
- [T1] Y. Takei: An explicit description of the connection formula for the first Painlevé equation, *Toward the Exact WKB Analysis of Differential Equations, Linear or Non-Linear*, Kyoto Univ. Press, 2000, pp. 271–296.
- [T2] ———: エネルギーレベルの交差に関する Landau-Zener の問題と WKB 解析, 研究集会『数理物理の諸問題と力学系』報告集 (2001年3月, 於 東工大), pp. 9–23.

- [T3] ———: On a double turning point problem for systems of linear ordinary differential equations, in preparation.
- [V] A. Voros: The return of the quartic oscillator. The complex WKB method, *Ann. Inst. H. Poincaré*, **39**(1983), 211–338.
- [W1] W. Wasow: *Asymptotic Expansions for Ordinary Differential Equations*, Interscience Publ., 1965.
- [W2] ———: *Linear Turning Point Theory*, *Applied Mathematical Sciences* Vol. 54, Springer-Verlag, 1985.
- [Z] C. Zener: Non-adiabatic crossing of energy levels, *Proc. Roy. Soc. London*, **137**(1932), 696–702.