

Ασυμπτωτικές Λύσεις της Εξίσωσης Wigner
και Υψίσυχνη Κυματική Διάδοση στην
Περιοχή Κουστικών

Διδακτορική Διατριβή
Ευαγγελία Καλλιγιαννάκη

ΤΜΗΜΑΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

Ηράκλειο 2007

ΕΙΣΗΓΗΤΗΣ
ΓΕΩΡΓΙΟΣ Ν. ΜΑΚΡΑΚΗΣ
Αναπληρωτής Καθηγητής

Τριμελής Επιτροπή
Γεώργιος Κοσιώρης, Αναπληρωτής Καθηγητής
Γεώργιος Ν. Μακράκης, Αναπληρωτής Καθηγητής
Χαράλαμπος Μακρινάκης, Καθηγητής

Επταμελής Επιτροπή
Γεράσιμος Α. Αθανασούλης, Καθηγητής
Θεόδωρος Κατσαούνης, Επίκουρος Καθηγητής
Γεώργιος Κοσιώρης, Αναπληρωτής Καθηγητής
Γεώργιος Ν. Μακράκης, Αναπληρωτής Καθηγητής
Χαράλαμπος Μακρινάκης, Καθηγητής
Φοίβος Ροζάκης, Καθηγητής
Στάθης Φίλιππας, Αναπληρωτής Καθηγητής

Η Διδακτορική Διατριβή Χρηματοδοτήθηκε κατά ένα μέρος από το πρόγραμμα Ηράκλειτος:
Υποτροφίες έρευνας με προτεραιότητα στη Βασική Έρευνα 2002-2005.



Ευχαριστίες

Αυτά τα λίγα λόγια είναι αφιερωμένα στους ανθρώπους, που ο καθένας με τον δικό του τρόπο, συνέβαλαν στην ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω το Ινστιτούτο Υπολογιστικών Μαθηματικών για την οικονομική υποστήριξη στην αρχή αυτής της δουλειάς και έπειτα το πρόγραμμα των Υπουργείου Παιδείας και Θρησκευμάτων και Ευρωπαϊκής Ένωσης 'Ηράκλειτος'.

Θερμά ευχαριστώ τον δάσκαλο μου και επιβλέπων της διατριβής Αναπληρωτή Καθηγητή Γιώργο Μακράκη που στήριξε την προσπάθεια μου, με καθοδήγησε και με εμπιστεύθηκε. Φυσικά τον ευχαριστώ ακόμα περισσότερο για τις πολύτιμες συμβουλές και την υποστήριξη του σε δύσκολες στιγμές.

Επίσης ευχαριστώ τα μέλη της Συμβουλευτικής επιτροπής Καθηγητή Χ. Μακριδάκη και Αναπληρωτή Καθηγητή Γ. Κοσιώρη καθώς και τον Αναπληρωτή Καθηγητή Θ. Κατσαούνη για τις συμβουλές και τον χρόνο που αφιέρωσαν σ' αυτή την προσπάθεια.

Πώς να ευχαριστήσω τους φίλους μου που γέμιζαν και ομόρφαιναν την κάθε μέρα, η Πέννη με την αγάπη και την αποφασιστικότητα της, η Ελένη για την απίστευτη ενέργεια της, η Μαρίζα που ήταν εδώ ακόμα και όταν πρακτικά έλειπε, την Φωτεινή, τον Γιάννη, και τον Γιώργο.

Πολύ πολύ ευχαριστώ τις αδελφές και φίλες μου Νίκη και Κατερίνα, τον Μανώλη και τον Γιώργο για την υπομονή και ανοχή τους για την καθημερινή τους συμπαράσταση ακόμα και όταν δεν καταλάβαιναν. Τα μικρά μου Μαρία, Κωνσταντίνο, Στεφανία και το μωρό, και μόνο η παρουσία τους μου χαρίζει την ευτυχία.

Και τέλος το μεγαλύτερο ευχαριστώ στους γονείς μου Μιχάλη και Πόπη, για την κατανόηση, την υπομονή, την υλική και ηθική υποστήριξη, την αγάπη τους και τόσα άλλα που δεν χωράνε σε μια γραμμή.

Στους γονείς μου,
Πόπη και Μιχάλη

Περιεχόμενα

Εισαγωγή	1
1 Εξίσωση Schrödinger και Γεωμετρική Οπτική	9
1.1 Παραβολική προσέγγιση & εξίσωση Schrödinger	10
1.2 Γεωμετρική Οπτική (μέθοδος WKB)	15
1.3 Γεωμετρική οπτική στον χώρο φάσεων	18
1.3.1 Η μέθοδος του Κανονικού Τελεστή	18
1.3.2 Η τεχνική Kravtsov-Ludwig	18
1.4 Η τεχνική του μετασχηματισμού Wigner	21
1.4.1 Εξισώσεις Schrödinger και von Neumann	22
1.4.2 Μετασχηματισμός Weyl-Wigner	23
1.4.3 Βασικές ιδιότητες της συνάρτησης Wigner	25
1.4.4 Η εξίσωση Wigner	27
1.4.5 Η εξίσωση Liouville (οριακή εξίσωση Wigner)	29
1.4.6 Ο ρόλος της εξίσωσης Liouville στην πολυφασική οπτική	30
2 Ασυμπτωτικές λύσεις της εξίσωσης Wigner	33
2.1 Επισκόπηση των υπάρχοντων ασυμπτωτικών λύσεων της εξίσωσης Wigner	33
2.2 Αρμονική προσέγγιση των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή Schrödinger	35
2.3 Ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Wigner	38
2.3.1 Ιδιοσυναρτήσεις Moyal	38
2.3.2 Αρμονική προσέγγιση των ιδιοσυναρτήσεων Moyal	44
2.4 Ασυμπτωτικά αναπτύγματα χρονο-εξαρτώμενων συναρτήσεων Wigner	49
2.4.1 Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της σειράς ιδιοσυναρτήσεων	51
2.4.2 Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα κοντά στη λύση αρμονικού ταλαντωτή	53

2.4.3	Εκτιμήσεις σφάλματος για την ‘αρμονική προσέγγιση’	55
2.4.4	Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα κοντά στη λύση της εξίσωσης Liouville . . .	65
2.5	Παράδειγμα: Αναρμονικός ταλαντωτής και καυστικές	67
Παράρτημα Α		87
	Παράρτημα Α1: Ασυμπτωτικά αναπτύγματα Rayleigh-Schrödinger	87
	Παράρτημα Α2: Συντελεστής $Z^{\varepsilon, (2)}$ στην αρμονική προσέγγιση	93
	Παράρτημα Α3: (Ημι-)Κλασικό όριο Ιδιοσυναρτήσεων Moyal	98
3	Εξισώσεις διατήρησης κοντά σε καυστικές	103
3.1	Εξισώσεις διατήρησης	104
3.1.1	Ροπές της συνάρτησης Wigner.	104
3.1.2	Εξισώσεις ροπών για την εξίσωση Schrödinger.	106
3.1.3	Οι οριακές εξισώσεις ροπής.	109
3.2	Εξισώσεις διατήρησης από το θεώρημα Noether	110
3.2.1	Αναλλοίωτο ως προς τη μετατόπιση φάσης (gauge invariance)	111
3.2.2	Αναλλοίωτο ως προς τη μετατόπιση χρόνου	112
3.2.3	Μεταβολές ως προς τη χωρική μετατόπιση	113
3.3	Παραδείγματα με καυστικές	115
3.3.1	Εστιακά σημεία συσσώρευσης ενός αρμονικού ταλαντωτή	115
3.3.2	Ομαλή καυστική (fold) για την ελεύθερη εξίσωση Schrödinger	121
Παράρτημα Β: Το Θεώρημα Noether		124
Βιβλιογραφία		129

Εισαγωγή

Η κυματική εξίσωση αποτελεί το βασικό μοντέλο για τη μελέτη της διάδοσης ενέργειας σε μία ευρεία κλάση προβλημάτων τα οποία ανακύπτουν στη Φυσική και την Τεχνολογία, όπως η ακουστική, η ελαστοδυναμική, ο ηλεκτρομαγνητισμός και η οπτική, κλπ. Ωστόσο η αναλυτική μελέτη και αριθμητική επίλυση σε ενδιαφέρουσες περιπτώσεις, όπως η διάδοση σε άπειρα χωρία με σύνορα, ή σε μέσα με σχετικά περίπλοκες ιδιότητες, είναι εξαιρετικά δύσκολη και πολλάκις αδύνατη. Για το λόγο αυτό σε διάφορες εφαρμογές (βλ. την επισκόπηση του Flatté [30]), όπως στην υποβρύχια ακουστική, για την διάδοση σε ένα στρωματοποιημένο θαλάσσιο ηχητικό κανάλι, σχετικά στενό στην κάθετη σε σχέση με την οριζόντια διεύθυνση ([82],[15]), ή για την διάδοση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων ‘κοντά’ στην επιφάνεια της Γής, έχει προταθεί και εφαρμοστεί με επιτυχία η **μέθοδος της παραβολικής προσέγγισης** [52], σύμφωνα με την οποία το πρόβλημα της επίλυσης της κυματικής εξίσωσης προσεγγίζεται από ένα πρόβλημα αρχικών τιμών για την εξίσωση Schrödinger

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - V(x)\psi^\varepsilon(x,t) = 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ \psi^\varepsilon(x,0) = \psi_0^\varepsilon(x) \end{cases}$$

όπου το δυναμικό V σχετίζεται ευθέως με τις ιδιότητες του μέσου διάδοσης. Η παράμετρος ε καθορίζει την κλίμακα της χωρικής και χρονικής μετατόπισης του πεδίου (καθώς και του μέσου διάδοσης και των αρχικών δεδομένων), όπου μικρές τιμές της αντιστοιχούν σε γρήγορες μεταβολές του πεδίου στο χώρο και τον χρόνο. Στην εργασία αυτή ενδιαφερόμαστε για την περίπτωση ισχυρά ταλαντευόμενων αρχικών δεδομένων της μορφής

$$\psi_0^\varepsilon(x) = a_0(x) \exp(iS_0(x)/\varepsilon), \quad \varepsilon \ll 1,$$

τα οποία αντιστοιχούν στο πρόβλημα της παραβολικής προσέγγισης στην ‘περιοχή υψηλών συχνοτήτων’.

Θα θέλαμε στο σημείο αυτό να σημειώσουμε ότι η συγκεκριμένη επιλογή σχετίζεται με την δυνατότητα επέκτασης των λύσεων που παράγει η παραβολική προσέγγιση, κατά το δυνατόν, κοντά στην περιοχή των πηγών, και συνεπώς τη δυνατότητα χρήσης αυτού του μοντέλου ως εξωτερικής λύσης σε τεχνικές αποσύνθεσης χωρίου για την κυματική εξίσωση.

Πέραν τούτου, η εξίσωση Schrödinger είναι επίσης η βασική εξίσωση της κβαντικής μηχανικής (η παράμετρος ε αντιστοιχεί στην σταθερά Planck), όπου το πρόβλημα της ημι-κλασσικής προσέγγισης (συμπεριφορά κβαντικά παρατηρήσιμων ποσοτήτων στην περιοχή $0 < \varepsilon \ll 1$) και της μετάβασης στο λεγόμενο κλασσικό όριο καθώς η σταθερά Planck τείνει στο μηδέν, είναι θεμελιώδους σημασίας (βλ., π.χ., [72], [58], [62]).

Ο πιο διαδεδομένος τρόπος αντιμετώπισης προβλημάτων στην περιοχή υψηλών συχνοτήτων είναι η μέθοδος της Γεωμετρικής Οπτικής (μέθοδος WKB) [10], με την οποία κατασκευάζουμε μια προσεγγιστική λύση του προβλήματος της μορφής $\psi^\varepsilon(x, t) = A(x, t) \exp(iS(x, t)/\varepsilon)$, όπου το πλάτος $A(x, t)$ και η φάση $S(x, t)$ ικανοποιούν τις εξισώσεις μεταφοράς και Hamilton-Jacobi αντίστοιχα. Η μέθοδος αυτή αποτυγχάνει στην παραγωγή ομοιόμορφων λύσεων όταν η λύση της εξίσωσης Hamilton-Jacobi είναι πλειότιμη και δημιουργείται καυστική επί της οποίας η λύση της εξίσωσης μεταφοράς απειριζείται.

Για την κατασκευή ασυμπτωτικών λύσεων, και τον υπολογισμό του σωστού κυματικού πεδίου στην περιοχή καυστικών έχουν αναπτυχθεί διάφορες τεχνικές, όπως η μέθοδος συναρμογής οριακού στρώματος (boundary layer), και οι τεχνικές γεωμετρικής οπτικής στον χώρο φάσεων (κυρίως η μέθοδος Kavitsov-Ludwig και η μέθοδος κανονικού τελεστή του Maslov).

Ένας σχετικά πρόσφατος τρόπος αντιμετώπισης υψίσυχων προβλημάτων βασίζεται στον μετασχηματισμό Wigner της κυματοσυνάρτησης, του οποίου βασικές ιδιότητες (κυρίως η σχέση των ροπών του με σημαντικές φυσικές ποσότητες όπως είναι η πυκνότητα ενέργειας, η ροή ενέργειας, κ.α.), τον καθιστούν κατάλληλο και ιδιαίτερα χρήσιμο για την μελέτη του κυματικού πεδίου. Επιπλέον, η συνάρτηση Wigner ικανοποιεί μια ολοκληρω-διαφορική εξίσωση στο χώρο των φάσεων, η οποία για ομαλά δυναμικά μπορεί να εκφραστεί ως ιδιόμορφη διαταραχή άπειρης τάξεως (με όρους διασποράς ως προς την ορμή του φασικού χώρου), της κλασσικής εξίσωσης Liouville. Στο κλασσικό όριο $\varepsilon = 0$ η λύση της εξίσωσης Liouville συγκλίνει ασθενώς στο λεγόμενο μέτρο Wigner [53], το οποίο για σχετικά ομαλές αρχικές φάσεις S_0 αναπαράγει τις λύσεις της μονοφασικής γεωμετρικής οπτικής. Στην περίπτωση ωστόσο της πολυφασικής οπτικής και της δημιουργίας καυστικών, το μέτρο Wigner δεν είναι το κατάλληλο εργαλείο για την μελέτη του ημι-κλασσικού ορίου, διότι όπως έχει καταδειχθεί

μέσω παραδειγμάτων από τους Filippas & Makrakis [28], [29] (α) δεν μπορεί να εκφρασθεί ως κατανομή ως προς την ορμή για ένα σταθερό χωρο-χρονικό σημείο, και επομένως δεν μπορεί να παράγει το πλάτος της κυματοσυνάρτησης, και (β) δε μπορεί να ‘αναγνωρίσει’ τις σωστές εξαρτήσεις του κυματικού πεδίου από την ημικλασσική παράμετρο ε , κοντά σε καυστικές. Αυτή την δυνατότητα έχουν, κατ’ αρχήν τουλάχιστον, οι λύσεις της ολοκληρω-διαφορικής εξίσωσης Wigner.

Θα πρέπει στο σημείο αυτό να τονίσουμε ότι δεν υπάρχει, προς το παρόν, κάποια συστηματική θεωρητική μελέτη της ολοκληρω-διαφορικής εξίσωσης Wigner (πέραν των αποτελεσμάτων του Markowich [76] για την ισοδυναμία της εξίσωσης Wigner με την εξίσωση Schrödinger, και κάποια σχετικά αποτελέσματα θεωρίας σκέδασης από τους Rogeon & Emamirad [23], [22]), ούτε ασταθής κάποια τεχνική κατασκευής λύσεων ή αναπαραστάσεων τους. Η έλλειψη αυτή συναρτάται με την θεμελιώδη δυσκολία της εξίσωσης αυτής, η οποία είναι μία εξίσωση μη σταθερών συντελεστών, με συνδυασμένους τουλάχιστον δύο διαφορετικούς χαρακτήρες, εκείνο των εξισώσεων μεταφοράς και εκείνο των εξισώσεων διασποράς. Ο πρώτος χαρακτήρας σχετίζεται άμεσα με το Χαμιλτωνιανό σύστημα της εξίσωσης Liouville (και την κλασσική μηχανική του προβλήματος), και ο δεύτερος με την κβαντική μεταφορά ενέργειας έξω από τη Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα του Χαμιλτωνιανού συστήματος, αλλά ! κυρίως εντός ενός οριακού στρώματος περίξ αυτής, το πάχος του οποίου εξαρτάται από την ομαλότητα της πολλαπλότητας και την παρουσία ή μη καυστικών.

Δεδομένων των δυσκολιών αυτών, μέχρι τώρα οι προσπάθειες έχουν επικεντρωθεί αφ’ ενός μεν στην ασυμπτωτική μελέτη της εξίσωσης Wigner στην περιοχή $0 < \varepsilon \ll 1$, και στην παραγωγή ημικλασσικών αναπτυγμάτων, με στόχο να πάρουμε τελικά κυματικές (κβαντικές) διορθώσεις του κλασσικού ορίου η άλλων κατάλληλων προσεγγίσεων, και αφ’ ετέρου στην άμεση αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Wigner.

Από τις αριθμητικές λύσεις που έχουν προταθεί (πολλές εκ των οποίων έχουν αναπτυχθεί για συγκεκριμένες εφαρμογές στη φυσικοχημεία και την κβαντική χημεία), οι πλέον ενδιαφέρουσες, και από την άποψη της μαθηματικής κατανόησης της εξίσωσης Wigner, θεωρούμε ότι είναι (α) η φασματική τεχνική των Hug, Menke & Schleich [42], [43] που βασίζεται στην προσέγγιση της συνάρτησης Wigner με πολυώνυμα Chebyshev στο φασικό χώρο, (β) η μέθοδος των σωματιδίων (particle technique) η οποία προτάθηκε από τους Arnold & Nier [2]. Η τεχνική αυτή εφαρμόστηκε στην αριθμητική διερεύνηση απλών προβλημάτων με καυστικές από την Kalligiannaki [46], όπου τα αποτελέσματα για το πλάτος του κυματικού πεδίου συγκρίνονται με αποτελέσματα κώδικα πεπερασμένων στοιχείων για

την εξίσωση Schrödinger και τον Fregadakis [27] που εφάρμοσε particle in cell μέθοδο στο ίδιο πρόβλημα για τη διάδοση επιπέδων κυμάτων σε γραμμικά στρωματοποιημένο μέσο (όπου οι καυστικές ταυτίζονται με σημεία αναστροφής (turning points) των ακτίνων) και (γ) η πρόσφατη αριθμητική λύση από τον Athanassoulis [4], [5] της ομαλοποιημένης εξίσωσης Wigner με την μέθοδο των σωματιδίων.

Όσον αφορά τις ασυμπτωτικές λύσεις, μπορούμε να διακρίνουμε:

(α) τις εργασίες των Steinrück [78] και Pulvirenti [68], όπου προτείνονται αναπτύγματα κατανομών γύρω από τη λύση της κλασσικής εξίσωσης Liouville, αναπτύσσοντας και τα αρχικά δεδομένα ως προς την ημικλασσική παράμετρο. Σε σχέση με αυτή την ‘στρατηγική’ κατασκευής ασυμπτωτικών λύσεων, ο E. Heller [39], είχε παρατηρήσει ήδη από το 1976, ότι τέτοια κλασσικά αναπτύγματα δεν είναι εν γένει κατάλληλα για την μελέτη της εξέλιξης ιδιόμορφων αρχικών δεδομένων, και πρότεινε ένα διαφορετικό ανάπτυγμα όπου ο αρχικός όρος είναι λύση μιας κλασσικής εξίσωσης Liouville αλλά με ένα ενεργό (effective) δυναμικό. Η χρήση τροποποιημένων χαρακτηριστικών ή ενεργών δυναμικών με σκοπό να ληφθούν έμμεσα υπ’ όψιν κβαντικά φαινόμενα είναι μία γενικότερη φιλοσοφία για την αντιμετώπιση της κβαντικής εξίσωσης Liouville από τους φυσικούς (μέθοδος των τροχιών Wigner, βλ. Lee [51]), η οποία έχει οδηγήσει σε ενδιαφέροντα αριθμητικά αποτελέσματα, και μπορεί να θεωρηθεί ως το ανάλογο της κβαντικής υδροδυναμικής (εξισώσεις Bohm) στο φασικό χώρο και της τεχνικής των Gaussian δεσμών (Gaussian beams). Για το λόγο αυτό ο Narcowich [60] πρότεινε ένα διαφορετικό ανάπτυγμα γύρω από τη λύση της κλασσικής εξίσωσης Liouville, όπου τα αρχικά δεδομένα ‘φορτώνονται’ στη λύση της εξίσωσης Liouville, αποφεύγοντας κατά τον τρόπο αυτό τα αναπτύγματα σε γενικευμένες συναρτήσεις.

(β) τις πρόσφατες εργασίες των Filippas & Makrakis [28], [29], όπου ασυμπτωτικά αναπτύγματα τύπου Airy, τα οποία παράγονται από την ομοιόμορφη ασυμπτωτική προσέγγιση του μετασχηματισμού Wigner των λύσεων WKB (επανακανονικοποίηση) της γεωμετρικής οπτικής, χρησιμοποιώντας την τεχνική της ομοιόμορφης στάσιμης φάσης (– η συγκεκριμένη ασυμπτωτική προσέγγιση των συναρτήσεων Wigner προτάθηκε στα 1977 από τον Berry [11] –), χρησιμοποιούνται ως ασυμπτωτικές λύσεις για τον υπολογισμό το κυματικού πεδίου στην περιοχή απλών καυστικών.

Στην παρούσα διατριβή, έχουμε ως στόχο να συνεισφέρουμε περαιτέρω στην κατανόηση των ασυμπτωτικών λύσεων της εξίσωσης Wigner, και για το σκοπό αυτό υιοθετούμε μία νέα στρατηγική για την κατασκευή ασυμπτωτικών αναπτυγμάτων, εκκινώντας ουσιαστικά από το ανάπτυγμα σε σειρά ιδιοσυναρτήσεων της λύσης της εξίσωσης Schrödinger. Μία

τέτοια προσέγγιση παράγει, κατά φυσιολογικό τρόπο, αναπτύγματα που είναι συμβατά και απορρέουν από την 'ακριβή' λύση της εξίσωσης Schrödinger, η οποία σε σχέση με την λύση WKB δεν εμφανίζει προβλήματα επί των καυστικών (οι οποίες ούτως ή άλλως εμφανίζονται ακριβώς όταν χρησιμοποιούμε την μέθοδο της γεωμετρικής οπτικής). Κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες για το δυναμικό το παραγόμενο ανάπτυγμα ('αρμονική προσέγγιση'–'αρμονικό ανάπτυγμα') ευρίσκεται σε συμφωνία με τα ανάπτυγμα γύρω από τη λύση της κλασσικής εξίσωσης Liouville ('κλασσική προσέγγιση'–'κλασσικό ανάπτυγμα'), και επί των καυστικών στην κατάλληλη ημικλασσική περιοχή των παραμέτρων του προβλήματος.

Στο Πρώτο Κεφάλαιο παρουσιάζουμε κατ' αρχήν μια συνοπτική περιγραφή της παραβολικής προσέγγισης (Παράγραφος 1.1) και της γεωμετρικής οπτικής για την εξίσωση Schrödinger στον φυσικό χώρο (Παράγραφος 1.2). Στη συνέχεια παρουσιάζουμε πολύ συνοπτικά τις δύο βασικές τεχνικές (Maslov, Ludwig) της γεωμετρικής οπτικής στο φασικό χώρο (Παράγραφος 1.3). Τέλος, παρουσιάζοντας συνοπτικά τη θεωρία Weyl-Wigner, εισάγουμε τον μετασχηματισμό Wigner και τις ιδιότητές του, και παράγουμε την εξίσωση Wigner.

Στο Δεύτερο, και πλέον εκτεταμένο, Κεφάλαιο κατασκευάζουμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της συνάρτησης Wigner, για μία κλάση δυναμικών (πηγάδια δυναμικού με πολυωνυμική αύξηση στο άπειρο) τα οποία εξασφαλίζουν καθαρά σημειακό φάσμα για την εξίσωση Schrödinger. Το πρώτο βήμα στην κατασκευή αυτή (Παράγραφος 2.3) είναι η κατασκευή ασυμπτωτικών αναπτύγμάτων για τις στάσιμες συναρτήσεις Wigner (ιδιοσυναρτήσεις Moyal), επί τη βάση ενός υπάρχοντος αναπτύγματος διαταραχών τύπου Rayleigh-Schrödinger για τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του στάσιμου τελεστή Schrödinger, θεωρώντας το δυναμικό ως διαταραχή του αρμονικού ταλαντωτή $V(x) = x^2/2$ (Παράγραφος 2.2). Βασιζόμενοι σε αυτό το αποτέλεσμα κατασκευάζουμε ένα αντίστοιχο ανάπτυγμα ('αρμονική προσέγγιση'–'αρμονικό ανάπτυγμα') για τις χρονικά εξαρτώμενες συναρτήσεις Wigner (Παράγραφος 2.4), η μορφή του οποίου εξαρτάται ισχυρά από τα αρχικά δεδομένα του προβλήματος.

Στη θεωρητική κατεύθυνση διερευνάμε την L^2 σύγκλιση του χρονοεξαρτώμενου ασυμπτωτικού αναπτύγματος στην περίπτωση που τα αρχικά δεδομένα είναι (μετά από κατάλληλο μετασχηματισμό διαστολής των συντεταγμένων) ανεξάρτητα του ε (ομαλά δεδομένα), και την L^2 σύγκλιση με βάρος για αρχικά δεδομένα που αντιστοιχούν σε WKB δεδομένα για την κυματοσυνάρτηση και για τα οποία εν γένει δημιουργείται καυστική (Παράγραφος 2.4.3).

Στη συνέχεια κατασκευάζουμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα (και πάλι τύπου κανονικών διαταραχών) γύρω από τη λύση της κλασσικής εξίσωσης Liouville ('κλασσική προσέγγιση'–'κλασσικό ανάπτυγμα'), επανακτώντας ουσιαστικά το ανάπτυγμα του Narcowich (Παρά-

γραφος 2.4.4). Κατά κάποιο τρόπο, το ‘κλασσικό ανάπτυγμα’ δίνει έμφαση στο χαρακτήρα μεταφοράς της εξίσωσης Wigner, ενώ το ‘αρμονικό ανάπτυγμα’ δίνει μεγαλύτερη έμφαση στο χαρακτήρα διασποράς (οπότε τα δύο αναπτύγματα είναι ταυτοτικά ίδια για την περίπτωση αρμονικού ταλαντωτή, όπου η εξίσωση Wigner και η εξίσωση Liouville ταυτίζονται, αφού οι όροι διασποράς της πρώτης μηδενίζονται ταυτοτικά).

Πρέπει να τονίσουμε ότι και για τα δύο αναπτύγματα, τα αρχικά δεδομένα της συνάρτησης Wigner ‘φορτώνονται’ στον πρώτο όρο του αναπτύγματος, ενώ τα επόμενα προβλήματα της ακολουθίας των συντελεστών έχουν μηδενικά αρχικά δεδομένα. Για το λόγο αυτό τόσο το ‘κλασσικό ανάπτυγμα’ του Narcowich, όσο και το ‘αρμονικό ανάπτυγμα’ δεν μπορούν να θεωρηθούν αμιγώς ημικλασσικά (αλλά ανήκουν στην κατηγορία των σύνθετων αναπτύγμάτων (composite expansions) στα οποία και οι συντελεστές περιέχουν τη μικρή παράμετρο ως προς την οποία επιχειρούμε ανάπτυγμα τύπου κανονικών διαταραχών). Μία τέτοια αμιγής κατασκευή δεν φαίνεται εφικτή, στην περίπτωση μη ομαλών αρχικών δεδομένων ως προς ε , διότι το ε -ανάπτυγμα τους παράγει υποχρεωτικά μία σειρά κατανομών και η θεώρηση της εξίσωσης γίνεται πλέον υποχρεωτικά στα πλαίσια των κανονικών ασυμπτωτικών αναπτύγμάτων γενικευμένων συναρτήσεων (βλ. σχετικά και το ανάπτυγμα (3.23) στο Κεφάλαιο 3), πράγμα που ουσιαστικά γίνεται από τον Pulvirenti [68].

Επίσης πρέπει να σημειώσουμε ότι η ισχύς του αναπτύγματος στην ‘αρμονική προσέγγιση’ περιορίζεται στη συγκεκριμένη κλάση δυναμικών που μπορούν να προσεγγιστούν από τον αρμονικό ταλαντωτή, όμως έχει το πλεονέκτημα ότι κάθε συντελεστής του αναπτύγματος μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά αφού επιλύουμε ένα μη ομογενές πρόβλημα διάδοσης για τον αρμονικό ταλαντωτή, σε αντίθεση με το ‘κλασσικό ανάπτυγμα’ όπου η εύρεση ακόμα και του μηδενικής τάξης συντελεστή απαιτεί τον υπολογισμό των χαρακτηριστικών για το δυναμικό που θεωρούμε, πρόβλημα το οποίο εν γένει είναι αναλυτικά περίπλοκο και στις περισσότερες των περιπτώσεων αδύνατο.

Στην Παράγραφο 2.5 εφαρμόζουμε τα προτεινόμενα ασυμπτωτικά αναπτύγματα στο πρόβλημα του αναρμονικού (διτετράγωνου-quartic) ταλαντωτή $V(x) = x^2/2 + \mu x^4/4$, και υπολογίζουμε τους πρώτους όρους του ασυμπτωτικού αναπτύγματος του πλάτους της κυματοσυνάρτησης με ολοκλήρωση του αναπτύγματος ως προς την ορμή. Για μικρές τιμές της σταθεράς σύζευξης μ το ‘αρμονικό ανάπτυγμα’ και το ‘κλασσικό ανάπτυγμα’ ταυτίζονται, και η τάξη της σταθεράς σύζευξης καθορίζεται συναρτήσεως του ε από τη σύγκριση των κύριων όρων του πλάτους της κυματοσυνάρτησης.

Τέλος, στο Τρίτο Κεφάλαιο κατασκευάζουμε μια άπειρη ακολουθία εξισώσεων διατήρησης-

ς για την ημικλασσική εξίσωση Schrödinger, χρησιμοποιώντας τις ροπές των λύσεων της εξίσωσης Wigner (Παράγραφος 3.1), και μελετάμε την συμπεριφορά των ε -εξαρτώμενων ροπών $m_{\bar{\ell}}$ κοντά σε καυστικές.

Επειδή η εξίσωση Wigner περιέχει όρους κάθε τάξης ως προς την μικρή παράμετρο, παρέχει, αντίθετα από τις εξισώσεις ροπών που προκύπτουν από την κλασσική εξίσωση Liouville, μια ιεραρχία από εξισώσεις διατήρησης οι οποίες ισχύουν ομοιόμορφα ακόμα και όταν το κυματικό πεδίο εμφανίζει καυστικές. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται με αναλυτικά παραδείγματα για απλές καυστικές, όπως τα εστιακά σημεία ενός αρμονικού ταλαντωτή και η ομαλή καυστική fold που δημιουργείται από τα αρχικά δεδομένα στην ειδική περίπτωση της εξίσωσης Schrödinger χωρίς δυναμικό (Παράγραφος 3.3).

Επίσης κάνουμε κάποιες **δομικές παρατηρήσεις** ανάμεσα στην σχέση των αποκτηθέντων εξισώσεων διατήρησης με εκείνες που προκύπτουν από εφαρμογή του μεταβολικού θεωρήματος της Noether (Παράγραφος 3.2). Στην περίπτωση γενικών δυναμικών, αυτή η κλασσική μεταβολική προσέγγιση παρέχει εξισώσεις οι οποίες επαρκούν για την μελέτη ομαλών κυματικών πεδίων χωρίς καυστικές, ενώ η εξίσωση Wigner στο χώρο φάσεων μπορεί να παράσχει όσες εξισώσεις είναι απαραίτητες για μελέτη πολυφασικών κυματικών πεδίων με καυστικές. Ωστόσο η διερεύνηση της δυνατότητας καθορισμού ‘κρυμμένων’ συμμετριών για την εξίσωση Schrödinger, με χρήση της εξίσωσης Wigner, καθώς και ο σωστός μηχανισμός ‘κλεισίματος’ του συστήματος των εξισώσεων διατήρησης, παραμένουν ανοιχτά ερωτήματα.

Κεφάλαιο 1

Εξίσωση Schrödinger και Γεωμετρική Οπτική

1.1 Παραβολική προσέγγιση & εξίσωση Schrödinger

Η παραβολική προσέγγιση της κυματικής εξίσωσης, οδηγεί σε μία εξίσωση τύπου Schrödinger η οποία περιγράφει φαινόμενα κυματικής διάδοσης προς μία επιλεγμένη κατεύθυνση και σε μεγάλες αποστάσεις (forward long-distance propagation), όπου η ενέργεια του κυματικού πεδίου δεν σκεδάζεται σημαντικά εγκάρσια ως προς την κύρια διεύθυνση διάδοσης.

Η μέθοδος της παραβολικής προσέγγισης προτάθηκε για πρώτη φορά από τους Leontovich και Fock [52] (βλέπε επίσης [31], [12], [6]), για την περιγραφή της διάδοσης ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων ‘κοντά’ στην επιφάνεια της Γής. Αργότερα, η μέθοδος εφαρμόστηκε και σε άλλα προβλήματα κυματικής διάδοσης, όπως στην φυσική σωματιδίων (plasma) για την μελέτη διάδοσης δεσμών [81], στην σεισμολογία για την κατανόηση σεισμικών κυμάτων στον φλοιό της Γής, στην οπτική, καθώς και στην κυματική διάδοση σε στοχαστικά μέσα (random waves) [83].

Μία άλλη περιοχή όπου εφαρμόζεται ευρέως η παραβολική προσέγγιση είναι η υποβρύχια ακουστική, όπου η μέθοδος εισήχθη από τον Tappert [82] για την μοντελοποίηση της διάδοσης χαμηλόσυχνων ηχητικών κυμάτων στον ωκεανό σε μεγάλες αποστάσεις, και αποτελεί βασικό εργαλείο για τους σχετικούς αριθμητικούς υπολογισμούς. Στην περίπτωση αυτή η κατακόρυφη στρωματοποίηση της ταχύτητας διάδοσης του ήχου στη θάλασσα έχει ως αποτέλεσμα την δημιουργία ενός κυματοδηγού (ηχητικό κανάλι), στενού στην κατακόρυφη διεύθυνση σχετικά με την οριζόντια κατεύθυνση διάδοσης, ο οποίος περιορίζει τη διάδοση ενέργειας κοντά στη οριζόντια διεύθυνση του ‘άξονα’ του ηχητικού καναλιού, καθιστώντας στις περισσότερες περιπτώσεις αμελητέα την επίδραση του βυθού και της επιφάνειας του ωκεανού.

Η διάδοση ηχητικών κυμάτων που παράγονται από σημειακή πηγή περιγράφεται από την πίεση $P(\mathbf{x}, t)$ η οποία ικανοποιεί την κυματική εξίσωση

$$(1.1) \quad \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - c^2(\mathbf{x})\Delta P = F(t)\delta(\mathbf{x}), \quad t > 0, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3,$$

όπου $\mathbf{x} = (x, y, z)$ είναι οι χωρικές συντεταγμένες, t ο χρόνος, Δ η Λαπλασιανή (Laplacian) ως προς \mathbf{x} , $F(t)$ η χρονική μεταβολή της σημειακής πηγής και $\delta(\mathbf{x})$ η συνάρτηση Dirac. Η ταχύτητα διάδοσης του ήχου $c = c(\mathbf{x})$ είναι χαρακτηριστική ιδιότητα του μέσου διάδοσης.

Εάν η ηχητική πηγή είναι αρμονική ως προς τον χρόνο ($F(t) = e^{i\omega t}$), με συχνότητα ω ,

οπότε και η πίεση θα είναι αρμονική ως προς τον χρόνο,

$$P(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} p(\mathbf{x}),$$

η κυματική εξίσωση στο ανάγεται, στο πεδίο συχνοτήτων, στην εξίσωση Helmholtz

$$(1.2) \quad \Delta p + k^2 \eta^2(\mathbf{x}) p = 0$$

όπου $k = \omega/c_0$ είναι ο κυματικός αριθμός, και $\eta(\mathbf{x}) = c_0/c(\mathbf{x})$ ο δείκτης διάθλασης του μέσου, που αντιστοιχούν σε κατάλληλα επιλεγμένη ταχύτητα αναφοράς c_0 [67].

Σε κυλινδρικές συντεταγμένες, και σε συνθήκες αξονοσυμμετρικής διάδοσης, η εξίσωση Helmholtz γράφεται στη μορφή

$$(1.3) \quad \Delta p + k^2 \eta^2(z, r) p(z, r) = 0$$

όπου τώρα η Λαπλασιανή δίνεται από την έκφραση

$$\Delta p = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}$$

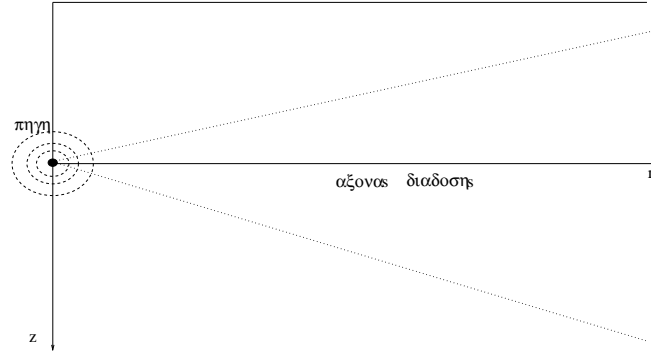
Η βασική υπόθεση της παραβολικής προσέγγισης είναι ότι το κυματικό πεδίο έχει την μορφή ‘δέσμης ακτίνων’ προς μια συγκεκριμένη διεύθυνση. Υποθέτουμε λοιπόν ότι η κυματική ενέργεια διαδίδεται κυρίως στην οριζόντια διεύθυνση r , ‘μακριά’ από την πηγή, οπότε το κυματικό πεδίο έχει την αναπαράσταση (η οποία υποδεικνύεται από τη συνθήκη ακτινοβολίας),

$$(1.4) \quad p(z, r) = \psi(z, r) \frac{1}{\sqrt{kr}} e^{ikr}$$

όπου η συνάρτηση $\psi(z, r)$ μεταβάλλεται αργά ως προς την οριζόντια απόσταση r . Αντικαθιστώντας την αποσύνθεση (1.4) στην εξίσωση Helmholtz (1.3), προκύπτει ότι η συνάρτηση $\psi(z, r)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$(1.5) \quad \frac{1}{4r^2} \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2ik \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 (\eta^2(z, r) - 1) \psi = 0$$

Στη συνέχεια υποθέτουμε ότι η χαρακτηριστική απόσταση διάδοσης είναι L_r στην οριζόν-



Σχήμα 1.1: Παραβολική προσέγγιση

για διεύθυνση και L_z στην κατακόρυφη διεύθυνση, και εισάγουμε τις αδιάστατες μεταβλητές $z' = \frac{z}{L_z}$, $r' = \frac{r}{L_r}$. Μετά την αλλαγή μεταβλητών, και παραλείποντας τους τόνους στις νέες μεταβλητές μεταβλητές z', r' , η εξίσωση (1.5) γράφεται στη μορφή

$$\frac{1}{4L_r^2 r^2} \psi + \frac{1}{L_r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2i \frac{k}{L_r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{L_z^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \psi + k^2 (\eta^2(zL_z, rL_r) - 1) \psi = 0,$$

ή ισοδύναμα

$$(1.6) \quad \frac{1}{4kL_r r^2} \psi + \frac{1}{kL_r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2i \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{L_r}{kL_z^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \psi + kL_r (\eta^2(zL_z, rL_r) - 1) \psi = 0.$$

Ορίζουμε το δυναμικό V από τη σχέση

$$-2\sigma V(z, r) := \eta^2(zL_z, rL_r) - 1$$

όπου $\sigma \ll 1$ είναι μια αδιάστατη παράμετρος. Η επιλογή αυτή της μικρής παραμέτρου σ σημαίνει ότι το μέσο διάδοσης είναι ασθενώς ανομοιογενές.

Για να βρισκόμαστε στην περιοχή όπου η παραβολική προσέγγιση περιγράφει με ακρίβεια ότι η διάδοση γίνεται κυρίως στην οριζόντια διεύθυνση πρέπει να ισχύει $\frac{L_z}{L_r} = \varepsilon \ll 1$. Υποθέτουμε επίσης στην συνέχεια ότι έχουμε υψίσυχη κυματική διάδοση, που σημαίνει ότι η απόσταση διάδοσης των κυμάτων είναι πολύ μεγαλύτερη από το τυπικό μήκος κύματος,

δηλαδή $kL_r = \frac{1}{\delta} \gg 1$.

Επιλέγοντας κατάλληλα την σχέση των παραμέτρων δ και ε να είναι $\delta = \varepsilon^3$, προκύπτει ότι $\frac{L_r}{kL_z^2} = \varepsilon$, οπότε η εξίσωση (1.6) γράφεται στη μορφή

$$\frac{\varepsilon^3}{4r^2}\psi + \varepsilon^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + 2i \frac{\partial \psi}{\partial r} + \varepsilon \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - 2 \frac{\sigma}{\varepsilon^3} V(z, r)\psi = 0$$

Θεωρώντας $\sigma = \varepsilon^2$, οι δύο πρώτοι όροι της εξίσωσης είναι μικροί σε σχέση με τους επόμενους, οπότε παραλείποντας τους, καταλήγουμε στην εξίσωση Schrödinger

$$(1.7) \quad i\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \psi - V(z, r)\psi = 0 ,$$

η οποία αναφέρεται στη βιβλιογραφία της ακουστικής και του ηλεκτρομαγνητισμού ως **παραβολική κυματική εξίσωση (PE)**.

Η εξίσωση (1.7) έχει τη μορφή της μονοδιάστατης κβαντομηχανικής εξίσωσης Schrödinger

$$i\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \psi - V(x, t)\psi(x, t) = 0 ,$$

με χρονοεξαρτώμενο δυναμικό, εάν αντιστοιχίσουμε την οριζόντια μεταβλητή r με το χρόνο t (ο οποίος είναι διαφορετικός από το χρόνο της κυματικής εξίσωσης (1.1)!), και την χωρική μεταβλητή z με την x [30], και η επίλυσή της απαιτεί τον καθορισμό αρχικών δεδομένων για $t = 0$ (στη θέση $r = 0$ της πηγής στις αρχικές μας χωρικές συντεταγμένες).

Ο καθορισμός αυτών των αρχικών δεδομένων σχετίζεται ασταθής με την λύση της εξίσωσης Helmholtz από την οποία παρήχθη η εξίσωση Schrödinger και αποτελεί σημαντικό στοιχείο της μοντελοποίησης στην υποβρύχια ακουστική (PE starters). Δύο κυρίως προσεγγίσεις φαίνεται να έχουν σχετικά επαρκή μαθηματική βάση. Η πρώτη βασίζεται στην ασυμπτωτική προσέγγιση της λύσεως της εξίσωσης Helmholtz με σταθερή ταχύτητα ίση με την ταχύτητα αναφοράς c_0 , κοντά στην πηγή και για μεγάλες συχνότητες [17], και παράγει Gaussian κατανομή του αρχικού πεδίου. Η δεύτερη βασίζεται στην λύση της εξίσωσης Schrödinger με μηδενικό δυναμικό και σημειακή πηγή [65], και παράγει αρχικά δεδομένα τύπου WKB με Gaussian πλάτος και τετραγωνική φάση Fresnel (βλ. επίσης [33], Chapt. 19), μία απλοποιημένη μορφή των οποίων είναι

$$\psi(x, t = 0) = e^{-x^2/2} e^{-ix^2/2} .$$

Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε ότι το δυναμικό είναι ανεξάρτητο του χρόνου (υπόθεση

η οποία στο αρχικό μας μοντέλο αντιστοιχεί σε διάδοση σε οριζόντια στρωματοποιημένο μέσο), και θα μελετήσουμε το πρόβλημα Cauchy για την ημικλασσική εξίσωση Schrödinger ($\varepsilon \ll 1$)

$$(1.8) \quad i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - V(x)\psi^\varepsilon(x,t) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0,$$

με ισχυρά ταλαντευόμενα (highly oscillatory) αρχικά δεδομένα

$$(1.9) \quad \psi^\varepsilon(x, 0) = \psi_0^\varepsilon(x) = A_0(x) \exp(iS_0(x)/\varepsilon).$$

Το πρόβλημα αυτό, πέραν της θεμελιώδους σημασίας του στην κβαντική μηχανική [58], από την πλευρά της παραβολικής προσέγγισης κλασικών κυμάτων, σχετίζεται με την δυνατότητα επέκτασης της ισχύος της παραβολικής προσέγγισης 'πιο κοντά' στην περιοχή μιάς σχετικά υψίσυχνης πηγής, δεδομένου ότι η περιοχή $\varepsilon \ll 1$ αντιστοιχεί στο αρχικό μοντέλο στην περιοχή $kL_r \gg 1$.

1.2 Γεωμετρική Οπτική (μέθοδος WKB)

Υψίσυχνα κύματα, που ικανοποιούν τις (1.8), (1.9) έχουν μελετηθεί παραδοσιακά μέσω της γεωμετρικής οπτικής, όπου κατασκευάζονται ασυμπτωτικές λύσεις της μορφής WKB (π.χ., [10], [12], [47])

$$(1.10) \quad \psi^\varepsilon(x, t) = A(x, t) \exp(iS(x, t)/\varepsilon) .$$

Αντικαθιστώντας την (1.10) στην (1.8), και κρατώντας τους όρους τάξης $O(\varepsilon)$ και $O(1)$ ως προς ε , παίρνουμε την eikonal εξίσωση για την συνάρτηση φάσης $S(x, t)$,

$$(1.11) \quad \partial_t S + (\partial_x S)^2/2 + V = 0 , \quad S(x, t = 0) = S_0(x) ,$$

και την εξίσωση μεταφοράς (transport) για την συνάρτηση πλάτους $A(x, t)$,

$$(1.12) \quad \partial_t(A^2) + \partial_x(A^2 \partial_x S) = 0 , \quad A(x, t = 0) = A_0(x) .$$

Παρατήρηση. Παρατηρούμε ότι αν αντί για την WKB συνάρτηση (1.10), αντικαταστήσουμε στην (1.8) την πιο γενική κυματική συνάρτηση

$$(1.13) \quad \psi^\varepsilon(x, t) = A^\varepsilon(x, t) \exp(iS^\varepsilon(x, t)/\varepsilon) ,$$

και εξισώσουμε με μηδέν το πραγματικό και φανταστικό μέρος της εξίσωσης που προκύπτει, οδηγούμαστε στις εξισώσεις Bohm , για τις ε -εξαρτώμενες συναρτήσεις πλάτους A^ε και φάσης S^ε ([7], [40])

$$(1.14) \quad \partial_t S^\varepsilon + (\partial_x S^\varepsilon)^2/2 + V = \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 A^\varepsilon / A^\varepsilon$$

και

$$(1.15) \quad \partial_t (A^\varepsilon)^2 + \partial_x \left((A^\varepsilon)^2 \partial_x S^\varepsilon \right) = 0 .$$

Το ασθενές υπερβολικό σύστημα (1.14)-(1.15), τουλάχιστον τυπικά, και για ομαλά κυματικά πεδία, ανάγεται στο (1.11)-(1.12), και περιμένουμε ότι, καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, οι A^ε και S^ε συγκλίνουν ομαλά στις A και S , αντίστοιχα. Όμως ο τρόπος σύγκλισης αναμένεται να είναι αρκετά πολύπλοκος κοντά σε καυστικές, όπου το τυπικό όριο A της A^ε , όπως θα δούμε στη συνέχεια απειρίζεται. Θα πρέπει επίσης να τονίσουμε ότι το δεξιό μέλος στην (1.14) είναι ένας ομαλοποιητικός όρος διασποράς (dispersive), που μηδενίζεται στο όριο $\varepsilon \rightarrow 0$, και η λύση του συστήματος μετά τα κύματα κρούσης (shocks) γίνεται ταλαντωτική (oscillatory). Έτσι το όριο αναμένεται να υπάρχει μόνο με την ασθενή έννοια (βλ. τα σχετικά σχόλια στο Jin & Li [44], και τις βιβλιογραφικές αναφορές που δίνονται εκεί).

Το σύστημα (1.11)-(1.12) της γεωμετρικής οπτικής ολοκληρώνεται με αναγωγή σε ένα σύστημα Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (Σ.Δ.Ε.) κατά μήκος των χαρακτηριστικών ως εξής. Ορίζουμε κατ' αρχήν τη Χαμιλτωνιανή (Hamiltonian) συνάρτηση

$$H(x, k) = k^2/2 + V(x),$$

και κατασκευάζουμε τις χαρακτηριστικές $(\tilde{x}(t; q), \tilde{k}(t; q))$, ως τις τροχιές του Χαμιλτωνιανού Hamiltonian συστήματος

$$(1.16) \quad \frac{d\tilde{x}}{dt} = H_k(\tilde{x}, \tilde{k}) = \tilde{k}, \quad \frac{d\tilde{k}}{dt} = -H_x(\tilde{x}, \tilde{k}) = -V'(\tilde{x})$$

με αρχικά δεδομένα

$$\tilde{x}(t=0; q) = q, \quad \tilde{k}(t=0; q) = S'_0(q)$$

Παρατηρούμε ότι οι προβολές των χαρακτηριστικών στον φυσικό χώρο $\tilde{x} = \tilde{x}(t; q)$ είναι οι γνωστές ακτίνες (rays) της γεωμετρικής οπτικής.

Στη συνέχεια, η συνάρτηση φάσης S προκύπτει ολοκληρώνοντας την συνήθη διαφορική εξίσωση

$$\frac{dS}{dt} = \partial_t S + \partial_x S \frac{dx}{dt} = -H(\tilde{x}(t; q), \tilde{k}(t; q)) + \tilde{k}^2(t; q) = \tilde{k}^2(t; q)/2 - V(\tilde{x}(t; q)),$$

με αρχικές συνθήκες

$$S(\tilde{x}(t=0; q)) = S_0(q).$$

Το πλάτος A υπολογίζεται εφαρμόζοντας το θεώρημα απόκλισης σε ένα σωλήνα με

παράπλευρη επιφάνεια που ορίζεται από ακτίνες (ray tube), και δίνεται από την έκφραση

$$A(\tilde{x}(t; q), t) = \frac{A_0(q)}{\sqrt{J(t; q)}},$$

όπου

$$J(t; q) = \frac{\partial \tilde{x}(t; q)}{\partial q}$$

είναι η Ιακωβιανή του μετασχηματισμού των ακτίνων $q \mapsto \tilde{x}(t; q)$.

Η μη γραμμική eikonal εξίσωση (1.11) μπορεί να έχει, γενικά, πλειότιμες (multivalued) λύσεις. Αυτό σημαίνει ότι παρουσιάζονται ιδιομορφίες σε πεπερασμένο χρόνο, όπου η Ιακωβιανή J του μετασχηματισμού μηδενίζεται. Το σύνολο αυτών των ιδιομορφιών ονομάζεται καυστική και ορίζεται $\Sigma = \{\tilde{x}(t; q) : J(t; q) = 0\}$, η οποία είναι περιβάλλουσα του συστήματος των ακτίνων. Όπως φαίνεται από τις παραπάνω σχέσεις το πλάτος απειρίζεται σε όλα τα σημεία της καυστικής.

Το γεγονός αυτό υποδεικνύει την αστοχία της μεθόδου WKB στις περιπτώσεις αυτές, υπό την έννοια ότι η μέθοδος δεν περιγράφει τη σωστή φυσική εικόνα η οποία προκύπτει από ομοιόμορφα ασυμπτωτικά αναπτύγματα της λύσης της εξίσωσης Schrödinger ή κλειστές λύσεις, όταν αυτά μπορούν να κατασκευασθούν, και δείχνουν αύξηση του πλάτους του πεδίου καθώς η συχνότητα αυξάνει, αλλά φραγμένη χωρική κατανομή του.

Υποθέτοντας ότι η πλειότιμη συνάρτηση S είναι τμηματικά γνωστή, μακριά από τις καυστικές, χρησιμοποιώντας τεχνικές οριακού στρώματος και συναρμοσμένων ασυμπτωτικών αναπτυγμάτων (boundary layer-matched asymptotics) στο φυσικό x -χωρο (π.χ., [12] & [6]), έχουν κατασκευαστεί ομοιόμορφα ασυμπτωτικά αναπτύγματα κοντά σε απλές καυστικές. Ωστόσο οι τεχνικές αυτές είναι ιδιαίτερα περίπλοκες αναλυτικά και εξαρτώνται κατά πολύ από την εκάστοτε καυστική η οποία εμφανίζεται.

1.3 Γεωμετρική οπτική στον χώρο φάσεων

Μία διαφορετική κατηγορία τεχνικών για την ομοιόμορφη αναπαράσταση κυματικών λύσεων κοντά σε καυστικές, βασίζεται σε ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις των λύσεων στο χώρο των φάσεων. Οι βασικές τεχνικές αυτής της κατηγορίας είναι ο κανονικός τελεστής του Maslov και τα ολοκληρώματα Lagrange (μέθοδος Kravtsov-Ludwig), οι οποίες ενοποιούνται πλέον σήμερα στα πλαίσια της θεωρίας των ολοκληρωτικών τελεστών Fourier [21].

1.3.1 Η μέθοδος του Κανονικού Τελεστή

(Maslov [57], Maslov & Fedoryuk [58], Schulze, et al [62])

Η μέθοδος του κανονικού τελεστή βασίζεται στην θεμελιώδη γεωμετρική παρατήρηση του Maslov [57] (βλ. επίσης [58] και [45]) ότι οι καυστικές στο φυσικό χώρο είναι ο γεωμετρικός τόπος που ορίζεται από τις προβολές εκείνων των σημείων της Λαγκρανζιανής πολλαπλότητας $k = \partial_x S(x, t)$ στα οποία στρέφεται κατακόρυφα (είναι τοπικά παράλληλη στον άξονα k), και επομένως η προβολή δεν είναι διαφορομορφική (οπότε $J = 0$). Με εξαίρεση παθολογικές γεωμετρικές της πολλαπλότητας, τα σημεία αυτά έχουν ομαλή προβολή στον χώρο k . Με βάση το γεγονός αυτό, οι ιδιομορφίες των καυστικών είναι πάντοτε δυνατόν να αποφευχθούν με κατάλληλη εφαρμογή του μετασχηματισμού Fourier ως προς τη μεταβλητή η οποία παράγει την ιδιομορφία, και κατόπιν αυτού εφαρμογή της μεθόδου WKB στις νέες μεταβλητές.

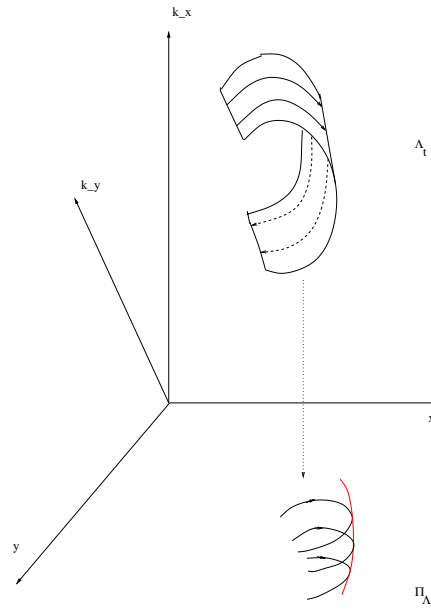
1.3.2 Η τεχνική Kravtsov-Ludwig

(Ludwig [54], Kravtsov & Orlov [47])

Η βασική ιδέα της μεθόδου των Kravtsov-Ludwig είναι να αντικαταστήσουμε το ανάπτυσμα που προτείνει η μέθοδος της γεωμετρικής οπτικής από ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις της μορφής ([54], [38])

$$(1.17) \quad u(x) = \left(\frac{i}{2\pi\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{\Xi} e^{iS(x,\xi)/\varepsilon} A(x,\xi) d\xi, \quad x \in \mathbb{R}_x, \quad \xi \in \Xi \subset \mathbb{R}_\xi .$$

οι οποίες αποτελούν συνεχή υπέρθεση ταλαντωτικών λύσεων της μορφής (1.10). Η φάση $S(x, \xi)$ και το πλάτος $A(x, \xi)$ πρέπει και πάλι να ικανοποιούν τις αντίστοιχες eikonal και transport εξισώσεις, ταυτοτικά ως προς κάθε ξ . Κοντά στην καυστική η φάση $S(x, \xi)$ είναι μια πλειότιμη συνάρτηση και γενικά δεν μπορεί να υπολογιστεί με απλή ολοκλήρωση κατά μήκος των χαρακτηριστικών, αλλά πρέπει να αποτελεί μιά παραμετρική αναπαράσταση της Λαγκρανζιανής πολλαπλότητας $k = \partial_x S(x, t)$. Η μορφή των αναπαραστάσεων αυτών εξαρτάται από το είδος της καυστικής που εμφανίζεται και η κατασκευή τους βασίζεται,



Σχήμα 1.2: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα \mathcal{E} και καυστική

γενικά, στις μεθόδους της θεωρίας ιδιομορφιών [3]. Ο πλήρης καθορισμός της φάσης και του πλάτους προκύπτει από την εφαρμογή της μεθόδου στάσιμης φάσης για τον ασυμπτωτικό υπολογισμό του (1.17), και συναρμογή με την πλειότεμη γεωμετρική λύση μακριά από την καυστική.

Για παράδειγμα, στην περίπτωση της μονοφασικής γεωμετρικής οπτικής (όπου δεν αναπτύσσονται καυστικές) μπορούμε να πάρουμε $S(x, \xi) = \phi(x) - \xi^2$. Τότε υπάρχει μόνο ένα στάσιμο σημείο $\xi = 0$, και με τη μέθοδο της στάσιμης φάσης [13], το ταλαντωτικό ολοκλήρωμα (1.17) ανάγεται ασυμπτωτικά στην (1.10).

Στην περίπτωση της πολυφασικής οπτικής, μακριά από τις καυστικές υπάρχουν περισσότερα από ένα διακριτά στάσιμα σημεία $\xi_j(x)$, δηλαδή, $\partial_\xi S(x, \xi_j(x)) = 0$ και $\partial_\xi^2 S(x, \xi_j(x)) \neq 0$, οπότε με τη μέθοδο της στάσιμης φάσης παίρνουμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της μορφής

$$(1.18) \quad u(x) \sim \sum_j A_0^j(x) e^{ikS_j(x)}$$

όπου οι φάσεις

$$S_j(x) = S(x, \xi_j(\mathbf{x}))$$

είναι λύσεις της eikonal εξίσωσης, και τα πλάτη

$$A_0^j(x) = \exp\left(i \left[\frac{\pi}{2} + \text{sgn} \partial_\xi^2 S(x, \xi_j(x)) \right]\right) \frac{A(x, \xi_j(\mathbf{x}))}{\sqrt{|\partial_\xi^2 S(\mathbf{x}, \xi_j(x))|}}$$

λύνουν την εξίσωση μεταφοράς transport.

Το άθροισμα στην (1.18) είναι ως προς όλα τα στάσιμα σημεία. Προφανώς κάθε όρος στο ανάπτυγμα (1.18) ταυτίζεται με τον όρο μηδενικής τάξης του WKB αναπτύγματος (1.10). Η (1.18) αποτυγχάνει όταν $\partial_\xi^2 S(x, \xi_j(x)) = 0$, δηλαδή όταν η παρουσία πολλαπλών στάσιμων σημείων σχετίζεται με την δημιουργία καυστικών. Στην περίπτωση αυτή ο ασυμπτωτικός υπολογισμός του ολοκληρώματος απαιτεί την εφαρμογή μιας επεκταμένης μορφής της μεθόδου στάσιμης φάσης [13], η οποία είναι γνωστή μέχρι πολλαπλότητα τρίτης τάξης (καυστικές τύπου cusp).

1.4 Η τεχνική του μετασχηματισμού Wigner

Οι δύο προηγούμενες τεχνικές βασίζονται ουσιαστικά στη χρήση μιάς αναπαράστασης της λύσεως (ansatz), ο τελικός καθορισμός της οποίας απαιτεί την πλήρη γνώση της πλειότιμης γεωμετρικής λύσης, ή ισοδύναμα, της Λαγκρανζιανής πολλαπλότητας. Μία σχετικά πρόσφατη τεχνική, η οποία βασίζεται στη χρήση του μετασχηματισμού Wigner, έχει εισαχθεί για την επαναδιατύπωση κυματικών εξισώσεων ως μερικών διαφορικών στο χώρο των φάσεων, και την μελέτη σχετικών προβλημάτων ομογενοποίησης και υψίσυχων λύσεων, όπου η ημικλασσική παράμετρος ε τείνει στο μηδέν. Ειδικότερα, η μέθοδος έχει εφαρμοσθεί [36] για τη μελέτη υπερβολικών εξισώσεων και εξισώσεων τύπου Schrödinger με ισχυρά ταλαντευόμενα αρχικά δεδομένα, τη διάδοση κυμάτων σε στοχαστικά μέσα [66], και την επίλυση της εξίσωσης Helmholtz σε υψηλές συχνότητες [9], [16]. Σε όλες αυτές τις προσεγγίσεις η ομογενοποίηση παράγει μία εξίσωση Liouville (–αυτή της κλασικής μηχανικής –) στο χώρο των φάσεων για ένα κατάλληλα ορισμένο ημικλασσικό μέτρο (semiclassical or defect measure), το οποίο από φυσική άποψη αναπαριστά την πυκνότητα ενέργειας αναλυμένη ως προς τις κατευθύνσεις στο φασικό χώρο.

Η τεχνική αυτή ωστόσο δεν μπορεί να εφαρμοσθεί για τον υπολογισμό του πλάτους της κυματικής λύσης και τον καθορισμό της εξάρτησης του από την μικρή ημικλασσική παράμετρο ε κοντά σε καυστικές, γιατί, όπως έχει εξηγηθεί με συγκεκριμένα παραδείγματα [28], το ημικλασσικό μέτρο δεν μπορεί, εν γένει, να εκφρασθεί ως κατανομή ως προς την μεταβλητή k του φασικού χώρου. Με βάση ωστόσο το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα του μετασχηματισμού Wigner μιάς συνάρτησης WKB που κατασκευάσθηκε από τον Berry [11] για μικρά ε , που αναπαρίσταται από τη συνάρτηση Airy κοντά σε ομαλά σημεία της Λαγκρανζιανής πολλαπλότητας, οι Filippas & Makrakis [28], [29] εξήγησαν πώς μπορεί να υπολογισθεί η εξέλιξη του ασυμπτωτικού αναπτύγματος του μετασχηματισμού Wigner και να χρησιμοποιηθεί στον υπολογισμό του σωστού πλάτους του κυματικού πεδίου σε προβλήματα απλών καυστικών. Ωστόσο και αυτή η προσέγγιση κινείται στη λογική της χρήσεως μιάς ασυμπτωτικής αναπαράστασης! της λύσεως που επανακανονικοποιεί τη λύση WKB, αλλά δεν προτείνει μία μέθοδο για την επίλυση της εξίσωσης που ικανοποιεί ο μετασχηματισμός Wigner, η οποία στη γενική περίπτωση είναι μία ιδιαίτερα περίπλοκη ολοκληρω-διαφορική εξίσωση (το τυπικό όριο της οποίας, για $\varepsilon \rightarrow 0$, είναι η προαναφερθείσα εξίσωση Liouville).

Στην παράγραφο αυτή θα εισάγουμε το μετασχηματισμό Wigner όπως ανακύπτει φυσιολογικά στην περιγραφή von Neumann της κβαντικής μηχανικής, θα περιγράψουμε τις βασικές του ιδιότητες, και κυρίως εκείνες που τον καθιστούν χρήσιμο εργαλείο στην ημι-

κλασσική ανάλυση, και θα παράγουμε την εξίσωση Wigner που αντιστοιχεί στη εξίσωση Schrödinger. Πρέπει να σημειωθεί εδώ ότι ο μετασχηματισμός Wigner μπορεί να εισαχθεί με διάφορους άλλους τρόπους, όπως, π.χ. μέσω της αναπαράστασης Schrödinger της ομάδας Heisenberg (βλ. Folland [32]), οι οποίοι τελικά όλοι σχετίζονται με διάφορες θεωρήσεις της κβαντομηχανικής και κατά κάποιον τρόπο είναι ισοδύναμοι.

1.4.1 Εξισώσεις Schrödinger και von Neumann

Εισάγοντας τον τελεστή Schrödinger

$$(1.19) \quad \hat{H} = -\frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2 + V(x),$$

η κβαντομηχανική εξίσωση Schrödinger γράφεται στη μορφή

$$i\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t).$$

Με $\hat{\cdot}$ θα συμβολίζουμε τελεστές.

Στην συνέχεια για απλοποίηση των συμβολισμών, και μέχρι την παράγραφο 1.4.4 όπου παράγουμε την εξελικτική εξίσωση Wigner, γράφουμε για την κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ αντί $\psi^\varepsilon(x, t)$ θεωρώντας τα ε, t σταθερές παραμέτρους.

Στην κβαντική μηχανική η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ η οποία περιγράφει την κατάσταση του κβαντικού συστήματος είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση, έτσι ώστε η ποσότητα $\eta(x)dx := |\psi(x)|^2 dx$ να δίνει την πιθανότητα ένα σωματίδιο να βρίσκεται στη θέση dx (για κάποια δεδομένη χρονική στιγμή t). Επειδή οι παρατηρήσιμες ποσότητες (observables) στην κβαντική μηχανική είναι τελεστές, και απαιτείται ο υπολογισμός μέσων τιμών, είναι βολικό η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος, με κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, να περιγραφεί από τον τελεστή πυκνότητας $\hat{\rho}$ στον $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$, ο οποίος ορίζεται από τη σχέση

$$\hat{\rho}u(x) = \int_{\mathbb{R}} \rho(x, y)u(y)dy, \quad \forall u \in L^2(\mathbb{R}),$$

και εξαρτάται από την κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ μέσω του πυρήνα

$$\rho(x, y) = \psi(x)\bar{\psi}(y).$$

Σύμφωνα με τον ορισμό του, ο τελεστής πυκνότητας $\hat{\rho}$ (βλ. για παράδειγμα Landau & Lifshitz [49], Berezin & Shubin [75]) είναι θετικά ορισμένος, αυτοσυζυγής, και κλάσεως

ίχνους (trace class) τελεστής στον $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$ με $Tr(\rho) = 1$ (βλ., π.χ., Wong [92]) .

Η εξίσωση εξέλιξης (εξίσωση von Neumann) για τον τελεστή πυκνότητας, προκύπτει με διαφόριση ως προς το χρόνο στον ορισμό του τελεστή πυκνότητας και χρήση της εξίσωσης Schrödinger, και έχει τη μορφή

$$(1.20) \quad \frac{d}{dt} \hat{\rho} = \frac{1}{i\epsilon} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

όπου

$$[\hat{H}, \hat{\rho}] = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}$$

είναι ο μεταθέτης τελεστών. Η εξίσωση von Neumann είναι μια διαφορική εξίσωση στον χώρο των τελεστών κλάσεως ίχνους (trace class) που δρουν στον $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$.

1.4.2 Μετασχηματισμός Weyl-Wigner

Σύμφωνα με την κλασσική στατιστική μηχανική (Balescu [8], Tolman [85]), η μέση τιμή μιας κλασσικά παρατηρήσιμης ποσότητας $A(x, k)$ (συνάρτησης στο φασικό χώρο της κλασσικής μηχανικής) ορίζεται με την βοήθεια μιας συνάρτησης κατανομής πιθανότητας $f_{cl}(x, k)$ στον χώρο φάσεων ως η ποσότητα

$$\langle A \rangle = \int A(x, k) f_{cl}(x, k) dx dk .$$

Ανάλογα με την κλασσική στατιστική μηχανική, η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος σε μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή t , θα έπρεπε να περιγράφεται από μια αντίστοιχη συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $f_{qu}(x, k)$ στον χώρο φάσεων, έτσι ώστε ο υπολογισμός της μέσης τιμής των παρατηρήσιμων ποσοτήτων, οι οποίες στην κβαντική μηχανική είναι τελεστές \hat{A} , που κατά κάποια έννοια, που θα δούμε στη συνέχεια, αντιστοιχούν στις κλασσικές ποσότητες $A(x, k)$, να δίνεται με μία σχέση της μορφής

$$\langle \hat{A} \rangle = \int A(x, k) f_{qu}(x, k) dx dk ,$$

με κατάλληλο ορισμό της μέσης τιμής. Η ύπαρξη όμως μιας τέτοιας συνάρτησης κατανομής πιθανότητας έρχεται σε αντίφαση με την αρχή αβεβαιότητας Heisenberg, αφού θα καθιστούσε δυνατό τον ακριβή υπολογισμό μιας φυσικής ποσότητας συναρτήσει των τελεστών θέσης $\hat{x} = x$ και ορμής $\hat{k} = -i\epsilon\partial_x$.

Επομένως, πριν την εισαγωγή μιας τέτοιας κβαντομηχανικής ‘κατανομής πιθανότητας’

$f_{qu}(x, k)$ (η οποία στη κβαντομηχανική ονομάζεται κατανομή ημι-πιθανότητας), είναι αναγκαίο να έχει καθοριστεί ο κανόνας που θα αντιστοιχεί σε κάθε συνάρτηση $A(x, k)$ στο χώρο των φάσεων, μια μοναδική συνάρτηση των τελεστών θέσης και ορμής $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{k})$. Η διαδικασία καθορισμού της αντιστοιχίας αυτής αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως πρόβλημα κβαντοποίησης (quantization rule). Στην μοντέρνα γλώσσα της 'μικροσκοπικής ανάλυσης' (microlocal analysis), η συνάρτηση $A(x, k)$ είναι το σύμβολο του τελεστή \hat{A} κάτω από τον αντίστοιχο κανόνα κβαντοποίησης [62] (βλ. επίσης [56]).

Έτσι σε κάθε κλασικά παρατηρήσιμη ποσότητα $A(x, k)$ (π.χ. ενέργεια $H(x, k) = \frac{|k|^2}{2} + V(x)$) αντιστοιχεί μία κβαντικά παρατηρήσιμη ποσότητα που είναι ένας τελεστής \hat{A} στον $L^2(\mathbb{R}^2)$. Η αντιστοίχιση της κλασικής παρατήρησης με το κβαντικό ανάλογο της γίνεται με διάφορους κανόνες κβαντοποίησης, αλλά πάντα έτσι ώστε η μέση τιμή κάθε παρατήρησης όταν το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση ψ , $\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = Tr(\hat{\rho}\hat{A})$, να είναι αναλλοίωτη.

Αν λοιπόν $\hat{A}_{qu,1}$ και $\hat{A}_{qu,2}$ είναι το κβαντικό ανάλογο της κλασικά παρατηρήσιμης ποσότητας $A(x, k)$ κάτω από δύο διαφορετικούς κανόνες κβαντοποίησης, τότε θα ισχύει

$$\langle \hat{A}_{qu,1} \rangle = \int A(x, k) f_{qu,1}(x, k) dx dk = \int A(x, k) f_{qu,2}(x, k) dx dk = \langle \hat{A}_{qu,2} \rangle$$

όπου οι συναρτήσεις $f_{qu,1}(x, k)$, $f_{qu,2}(x, k)$ είναι οι συναρτήσεις κατανομής ημι-πιθανότητας για το σύστημα σε κατάσταση ψ κάτω από τον αντίστοιχο κανόνα κβαντοποίησης [51].

Ο πλέον διαδεδομένος και σημαντικός από τους κανόνες κβαντοποίησης είναι ο κανόνας Weyl, σύμφωνα με τον οποίο για κάθε $A(x, k)$ ορίζεται ο τελεστής \hat{A} ως

$$\hat{A}u(x) = \int_{\mathbb{R}} K(x, \xi) u(\xi) d\xi, \quad u \in L^2(\mathbb{R})$$

όπου ο πυρήνας $K(x, \xi)$ δίνεται συναρτήσει του συμβόλου $A(x, k)$ του τελεστή \hat{A} από την έκφραση

$$K(x, \xi) = \frac{1}{2\pi\epsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\epsilon}k(x-\xi)} A\left(\frac{x+\xi}{2}, k\right) dk.$$

Το βασικό πλεονέκτημα του συγκεκριμένου κανόνα είναι ότι οδηγεί στον ορισμό αυτοσυζυγών τελεστών και έχει μία σειρά ιδιοτήτων συμπλεκτικού αναλλοίωτου, οι οποίες είναι σημαντικές σε χειρισμούς αλλαγής μεταβλητών στο φασικό χώρο (βλ. Hörmander [41]).

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός του κανόνα Weyl αντιστοιχεί σε έναν τελεστή \hat{A} με

πυρήνα $K(x, \xi)$ το σύμβολο Weyl $A(x, k)$,

$$(1.21) \quad A(x, k) = \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\varepsilon}k\xi} K\left(x - \frac{\xi}{2}, x + \frac{\xi}{2}\right) d\xi .$$

Ο μετασχηματισμός αυτός αναφέρεται πλέον στη βιβλιογραφία ως μετασχηματισμός Wigner του $K(x, y)$.

Σύμφωνα με τον κανόνα Weyl, η μέση τιμή μιας κβαντικά παρατηρήσιμης ποσότητας \widehat{A} , όταν το σύστημα περιγράφεται από τον τελεστή πυκνότητας $\widehat{\rho}$ (βλ. (1.4.1)), δίνεται από τη σχέση

$$\langle \widehat{A} \rangle = Tr(\widehat{A}\widehat{\rho}) = \int A(x, k) W^\varepsilon(x, k) dx dk .$$

Έτσι ορίζεται κατά μοναδικό τρόπο η συνάρτηση Wigner $W^\varepsilon(x, k)$,

$$(1.22) \quad W^\varepsilon(x, k) := \frac{1}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\varepsilon}k\xi} \rho\left(x + \frac{\xi}{2}, x - \frac{\xi}{2}\right) d\xi = \mathcal{F}_{\xi \rightarrow p} \rho\left(q + \frac{\varepsilon\xi}{2}, q - \frac{\varepsilon\xi}{2}\right)$$

όπου $\rho(x, y)$ είναι ο πυρήνας που αντιστοιχεί στον τελεστή πυκνότητας, και η οποία γράφεται μέσω της κυματοσυνάρτησης στη μορφή (μετασχηματισμός Wigner της συνάρτησης ψ)

$$(1.23) \quad W^\varepsilon[\psi](x, k) = \frac{1}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\varepsilon}k\xi} \psi\left(x + \frac{\xi}{2}\right) \overline{\psi}\left(x - \frac{\xi}{2}\right) d\xi$$

Ανάλογα ορίζεται ο μετασχηματισμός Wigner (μεταξύ) δύο συναρτήσεων $f, g \in L^2(\mathbb{R})$

$$(1.24) \quad W^\varepsilon[f, g](x, k) = \frac{1}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{i}{\varepsilon}k\xi} f\left(x + \frac{\xi}{2}\right) \overline{g}\left(x - \frac{\xi}{2}\right) d\xi$$

Για ιστορικούς λόγους πρέπει να αναφέρουμε ότι η συνάρτηση Wigner εισήχθη για πρώτη φορά από τον E.Wigner το 1932 [91], για την μελέτη των κβαντικών διορθώσεων στην θερμοδυναμική κβαντικών συστημάτων, ως υποκατάστατο της ελλείπουσας συνάρτησης κατανομής πιθανότητας στην κβαντική στατιστική μηχανική.

1.4.3 Βασικές ιδιότητες της συνάρτησης Wigner

Σύμφωνα με τον ορισμό (1.23) η συνάρτηση Wigner, είναι μια πραγματική συνάρτηση στον χώρο φάσεων \mathbb{R}^2 , η οποία όμως δεν είναι κατ' ανάγκη θετική. Για το λόγο αυτό η συνάρτηση Wigner δεν είναι συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (παρ' ότι έχει εισαχθεί ως υποκατάστατο μιάς τέτοιας πυκνότητας στην κβαντική στατιστική θερμοδυναμική), και είναι

ακριβώς αυτή η ιδιότητα η οποία μας δίνει τη δυνατότητα περιγραφής φαινομένων κβαντικής παρεμβολής.

Ωστόσο, υπάρχουν συναρτήσεις Wigner οι οποίες είναι θετικές παντού, όπως ο μετασχηματισμός Wigner των συνοχικών (coherent) καταστάσεων που είναι Gaussian συναρτήσεις, και είναι γνωστό ότι είναι οι μόνες μη-αρνητικές συναρτήσεις Wigner.

Μερικές από τις πλέον σημαντικές ιδιότητες της συνάρτησης Wigner που βοηθούν στον υπολογισμό χρήσιμων ποσοτήτων, τόσο στην θεωρία της κλασικής κυματικής διάδοσης όσο και στην κβαντική μηχανική είναι οι παρακάτω.

1. Το k -ολοκλήρωμα της W^ε ισούται με την πυκνότητα $\eta(x)$,

$$\int_{\mathbb{R}} W^\varepsilon(x, k) dk = \eta(x) := |\psi(x)|^2 .$$

Αντίστοιχα το x -ολοκλήρωμα, ισούται με το μέτρο του μετασχηματισμού Fourier της κυματοσυνάρτησης

$$\int_{\mathbb{R}} dx W^\varepsilon(x, k) = |\mathcal{F}_{x \rightarrow k} \psi(x)|^2$$

2. Η πρώτη ροπή της W^ε ως προς k είναι ίση με την ροή ενέργειας,

$$\int_{\mathbb{R}} kW^\varepsilon(x, k) dk = \mathcal{F}(x) := \frac{\varepsilon}{2i} (\bar{\psi} \partial_x \psi - \psi \partial_x \bar{\psi}) .$$

3. Για μια συνάρτηση τύπου WKB, $\psi(x) = A(x) \exp(iS(x)/\varepsilon)$, η W^ε τείνει καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, σαν γενικευμένη συνάρτηση [53], [66], στο ασθενές όριο

$$(1.25) \quad W^\varepsilon(x, k) \rightarrow |A(x)|^2 \delta(k - S'(x)) .$$

όπου δ συμβολίζει την κατανομή Dirac.

4. Τέλος, το xk -ολοκλήρωμα της W^ε δίνει την ολική ενέργεια της κυματοσυνάρτησης

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dx dk W^\varepsilon(x, k) = \|\psi\|_{L^2}^2 .$$

1.4.4 Η εξίσωση Wigner

Η εφαρμογή του κανόνα κβαντοποίησης Weyl-Wigner στην εξίσωση von Neumann (1.20), οδηγεί στην εξίσωση εξέλιξης της συνάρτησης Wigner, η οποία αναφέρεται στην περιοχή της κυματικής διάδοσης σε στοχαστικά μέσα ως εξίσωση Wigner [66], και στην κβαντομηχανική ως κβαντική εξίσωση Liouville [55], και έχει τη μορφή

$$(1.26) \quad \frac{\partial}{\partial t} W^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}^\varepsilon W^\varepsilon(x, k, t) = 0$$

όπου ο τελεστής \mathcal{L}^ε εξαρτάται από τη Χαμιλτωνιανή $H(x, k)$, και δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{L}^\varepsilon f(x, k) = -\frac{2}{\varepsilon} \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k_f} - \frac{\partial}{\partial x_f} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) f(x, k).$$

Ο συνημιτονικός και ημιτονικός μεταθέτης (cosine bracket και sine bracket) [7] δύο συναρτήσεων $f(x, k)$ και $g(x, k)$, ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} & \cos \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_f} \frac{\partial}{\partial k_g} - \frac{\partial}{\partial x_g} \frac{\partial}{\partial k_f} \right) \right] f(x, k) g(x, k) = \\ & = \frac{1}{2\pi^2 \varepsilon^2} \int dk' dk'' dx' dx'' [f(x', k') g(x'', k'') + g(x', k') f(x'', k'')] \\ & \times \exp \left(-\frac{2i}{\varepsilon} (k(x' - x'') + k'(x'' - x) + k''(x - x')) \right) \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_f} \frac{\partial}{\partial k_g} - \frac{\partial}{\partial x_g} \frac{\partial}{\partial k_f} \right) \right] f(x, k) g(x, k) = \\ & = \frac{1}{2i\pi^2 \varepsilon^2} \int dk' dk'' dx' dx'' [f(x', k') g(x'', k'') - g(x', k') f(x'', k'')] \\ & \times \exp \left(-\frac{2i}{\varepsilon} (k(x' - x'') + k'(x'' - x) + k''(x - x')) \right). \end{aligned}$$

Η μετάβαση από την εξίσωση von Neumann στην εξίσωση Wigner είναι άμεση συνέπεια του κανόνα σύνθεσης δύο τελεστών στην αναπαράσταση Weyl. Αν τα σύμβολα Weyl των τελεστών \hat{A} και \hat{B} είναι $A(x, k)$ και $B(x, k)$, αντίστοιχα, τότε το σύμβολο Weyl του μεταθέτη

τους $\hat{C} := [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, δίνεται από το γινόμενο Moyal (Moyal [59], [51])

$$C(x, k) = 2i \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_A} \frac{\partial}{\partial k_B} - \frac{\partial}{\partial x_B} \frac{\partial}{\partial k_A} \right) \right] A(x, k) B(x, k).$$

Πράγματι, αν $W^\varepsilon(x, k, t)$ είναι ο μετασχηματισμός Wigner του τελεστή πυκνότητας $\hat{\rho}$, τότε εφαρμόζοντας τον μετασχηματισμό Weyl-Wigner στην εξίσωση von Neumann (1.20),

$$\frac{d}{dt}(\hat{\rho}) = \frac{1}{i\varepsilon} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

και παρατηρώντας ότι η Χαμιλτωνιανή $H(x, k)$ είναι το σύμβολο Weyl του τελεστή Schrödinger \hat{H} , προκύπτει

$$\frac{\partial}{\partial t} W^\varepsilon(x, k, t) = \frac{2}{\varepsilon} \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k_{W^\varepsilon}} - \frac{\partial}{\partial x_{W^\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) W^\varepsilon(x, k, t)$$

η οποία δίνει την (1.26).

Παρατηρούμε περαιτέρω ότι αφού το σύμβολο του τελεστή \hat{H} είναι $H(x, k) = \frac{k^2}{2} + V(x)$, ο τελεστής \mathcal{L}^ε μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\mathcal{L}^\varepsilon = k\partial_x - \Theta^\varepsilon[V]$$

όπου ο όρος $\Theta^\varepsilon[V]$ ορίζεται ως

$$\Theta^\varepsilon[V]W^\varepsilon(x, k, t) := Z^\varepsilon(x, k) *_k W^\varepsilon(x, k, t),$$

και είναι ένας μη-τοπικός τελεστής που δίνεται από την συνέλιξη της συνάρτησης Wigner με τον πυρήνα

$$Z^\varepsilon(x, k) = \frac{1}{i\varepsilon} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-iky} \left(V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right) dy.$$

Αυτός ο μη-τοπικός όρος εκφράζει την δράση του δυναμικού στην εξέλιξη της συνάρτησης Wigner. Από τις δύο τελευταίες σχέσεις μπορούμε να πάρουμε την αναπαράσταση (1.27)

$$\Theta^\varepsilon[V]W^\varepsilon(x, k, t) = \frac{i}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} e^{i(k-\xi)y} W^\varepsilon(x, \xi, t) \left[V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right] dy d\xi,$$

η οποία έχει την τυπική μορφή ενός ψευδο-διαφορικού (pseudo-differential) τελεστή, που είναι κατάλληλος για την παραγωγή των εξισώσεων ροπών στο Κεφάλαιο 3.

Έτσι η εξίσωση Wigner γράφεται τελικά στη μορφή

$$(1.28) \quad \partial_t W^\varepsilon(x, k, t) + k \partial_x W^\varepsilon(x, k, t) - \Theta^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, k, t) = 0 .$$

Υποθέτοντας ότι το δυναμικό V είναι αρκετά ομαλό, ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor, μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση (1.28) στην μορφή μίας διαφορικής εξίσωσης άπειρης τάξης

$$(1.29) \quad \partial_t W^\varepsilon + k \partial_x W^\varepsilon - V'(x) \partial_k W^\varepsilon = \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \varepsilon^{2m} V^{(2m+1)}(x) \partial_k^{2m+1} W^\varepsilon(x, k, t) ,$$

όπου $\alpha_m = (-1)^m / 2^{2m} (2m+1)!$, $m = 0, 1, \dots$, και $V^{(2m+1)}(x) = d^{2m+1} V(x) / dx^{2m+1}$.

Τυπικά, η εξίσωση (1.29) είναι μια εξίσωση μεταφοράς - διασποράς, αφού το αριστερό μέλος περιέχει έναν κλασσικό τελεστή μεταφοράς (Liouville), και το δεξιό μέλος είναι ένας τελεστής διασποράς άπειρης τάξης. Επειδή, γενικά η εξίσωση (1.29) περιλαμβάνει άπειρου πλήθους παραγώγους της άγνωστης συνάρτησης μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα πρόβλημα ιδιόμορφων διαταραχών άπειρης τάξης.

Η αρχική συνθήκη για τη εξίσωση (1.29) προκύπτει από τον μετασχηματισμό Wigner

$$(1.30) \quad W^\varepsilon(x, k, t = 0) = W^\varepsilon[\psi_0^\varepsilon] ,$$

της αρχικής κυματικής συνάρτησης $\psi_0^\varepsilon = \psi^\varepsilon(x, t = 0)$.

1.4.5 Η εξίσωση Liouville (οριακή εξίσωση Wigner)

Στο τυπικό όριο $\varepsilon = 0$, το δεξιό μέλος της (1.29) μηδενίζεται, και προκύπτει ότι το ασθενές όριο W^0 της W^ε (ημικλασσικό μέτρο Wigner) ικανοποιεί την κλασσική εξίσωση Liouville (οριακή Wigner) (βλ. Lions & Paul [53])

$$(1.31) \quad \partial_t W^0(x, k, t) + k \partial_x W^0(x, k, t) - V'(x) \partial_k W^0(x, k, t) = 0 .$$

Η εξίσωση αυτή είναι μια 'απλή' εξίσωση μεταφοράς στον χώρο φάσεων, και επομένως, μπορεί να ολοκληρωθεί κατά μήκος των χαρακτηριστικών

$$(1.32) \quad x = x(t; q, ; p), \quad k = k(t; q, p),$$

που είναι λύσεις του Χαμιλτωνιανού συστήματος

$$(1.33) \quad \frac{dx}{dt} = k, \quad \frac{dk}{dt} = -V'(x),$$

με αρχικές συνθήκες $x(t=0; q, p) = q, k(t=0; q, p) = p$.

Παρατηρούμε ότι οι ακτίνες $\tilde{x} = \tilde{x}(t; q)$ της γεωμετρικής οπτικής είναι εκείνες οι χαρακτηριστικές που προέρχονται από την αρχική Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα (καμπύλη) $\{p = S'_0(q)\}$. Επομένως η λύση της εξίσωσης Liouville (1.31) δίνεται από την έκφραση

$$(1.34) \quad W^0(x, k, t) = W_0^0(q(x, k, t), p(x, k, t)),$$

όπου $(q(x, k, t), p(x, k, t))$ είναι οι αντίστροφες χαρακτηριστικές, που υπολογίζονται επιλύοντας τις (1.32) ως προς (q, p) συναρτήσει των (x, k) , για κάθε t , και W_0^0 είναι το ασθενές όριο της αρχικής συνθήκης (1.30).

Χρησιμοποιώντας την (1.25), βλέπουμε ότι το ασθενές όριο της (1.30) για WKB τύπου αρχική κυματική συνάρτηση $\psi_0^\varepsilon(x) = A_0(q)e^{i\frac{S_0(x)}{\varepsilon}}$ έχει την μορφή

$$W_0^0(q, p) := W^0(x(t=0; q, ; p), k = k(t=0; q, p)) = |A_0(q)|^2 \delta(p - S'_0(q)),$$

και επομένως, με άμεσους υπολογισμούς [66], η λύση (1.34) της εξίσωσης Liouville εκφράζεται μέσω των λύσεων των eikonal και transport εξισώσεων (1.11), (1.12), ως

$$(1.35) \quad W^0(x, k, t) = |A(x, t)|^2 \delta(k - \partial_x S(x, t)).$$

1.4.6 Ο ρόλος της εξίσωσης Liouville στην πολυφασική οπτική

Θα πρέπει να τονίσουμε εδώ ότι, για σχετικά ομαλές αρχικές φάσεις S_0 , οι πληροφορίες για το κυματικό πεδίο που προκύπτουν από την W^0 είναι ακριβώς ίδιες με αυτές που δίνει η γεωμετρική οπτική (μέθοδος WKB). Επίσης θα πρέπει να επισημάνουμε ότι η (1.35) ισχύει μόνο στην περίπτωση μιας φάσης, αφού διαφορετικά η S είναι μια πλειότιμη συνάρτηση, και η εξέλιξη της S_0 'σπάει σε αρκετούς κλάδους' μετά από μια συγκεκριμένη κρίσιμη χρονική στιγμή. Σ' αυτή την περίπτωση η W^0 δεν είναι το κατάλληλο εργαλείο για την μελέτη του ημι-κλασσικού ορίου, τουλάχιστον κοντά σε καυστικές, όπως έχει καταδειχθεί μέσω παραδειγμάτων στις εργασίες [28], [29], αφού εμφανίζονται κλίμακες ταλαντώσεων και άλλες εκτός από αυτές που εντοπίζει η λύση WKB, σύμφωνα με την γεωμετρία της καυστικής. Στην περίπτωση της πλειότιμης οπτικής και της δημιουργίας καυστικών, μακριά από τις

καυστικές, η κυματική συνάρτηση έχει τη μορφή

$$\psi^\varepsilon(x, t) = \sum_{m=1}^M A_m(x, t) \exp(iS_m(x, t)/\varepsilon) ,$$

όπου $M(x, t)$ είναι το πλήθος των φάσεων, που ισούται με τον αριθμό των ακτίνων που τέμνονται στο συγκεκριμένο σημείο (x, t) . Οι συναρτήσεις πλάτους A_m και φάσης S_m ικανοποιούν και πάλι τις εξισώσεις μεταφοράς (1.12) και eikonal (1.11), αντίστοιχα. Το αντίστοιχο οριακό μέτρο Wigner W^0 έχει τώρα την μορφή

$$W^0(x, k, t) = \sum_{m=1}^M A_m^2(x, t) \delta(k - \partial_x S_m(x, t)) ,$$

σύμφωνα με το γεγονός ότι οι όροι παρεμβολής (interference) της μορφής

$$A_m A_n \exp(i(S_m - S_n)/\varepsilon) ,$$

που εμφανίζονται στο μετασχηματισμό Wigner, έχουν αμελητέα συνεισφορά καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$ (τείνουν στο μηδέν με την έννοια των κατανομών). Το γεγονός αυτό σχετίζεται με την εξαφάνιση των κβαντικών (κυματικών) παρεμβολών στο κλασσικό όριο.

Η προσέγγιση μέσω του χώρου φάσεων της γεωμετρικής οπτικής με οριακές κατανομές Wigner, έχει μία αξιοσημείωτη σχέση με, και αποσαφηνίζει, την γνωστή υδροδυναμική αναπαράσταση του προβλήματος Cauchy (1.8)-(1.9) (π.χ. , [40] Sec. 3.10, [34]). Για παράδειγμα στην περίπτωση μιας φάσης, εισάγοντας τις υδροδυναμικές μεταβλητές $\rho = A^2$ και $u = \partial_x S$, μπορούμε να ξαναγράψουμε τις (1.11) και (1.12) στην μορφή

$$(1.36) \quad \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 ,$$

$$(1.37) \quad \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2) + \rho V' = 0 ,$$

οι οποίες έχουν πλήρη αντιστοιχία με τις εξισώσεις κίνησης για ασυμπιεστα αέρια, αν ταυτοποιήσουμε το ρ με την πυκνότητα και το u με την ταχύτητα. Τότε, η W^0 έχει την μορφή

$$W^0(x, k, t) = \rho(x, t) \delta(k - u(x, t)) ,$$

ενώ στην περίπτωση πολλών φάσεων, προκύπτει

$$W^0(x, k, t) = \sum_{m=1}^{M(x,t)} \rho_m(x, t) \delta(k - u_m(x, t)) ,$$

με $\rho_m = A_m^2$, $u_m = \partial_x S_m$. Ξανά οι ρ_m και u_m ικανοποιούν τις εξισώσεις ασυμπίεστου αερίου (1.36), (1.37). Αυτή η παρατήρηση έχει υποκινήσει πολλές προσπάθειες επίλυσης προβλημάτων γεωμετρικής οπτικής με τεχνικές που έχουν ήδη εφαρμοστεί στην δυναμική των αερίων, όπου οι καυστικές αντιμετωπίζονται ως το ανάλογο των κυμάτων κρούσεως (shock waves). Όμως, αριθμητικές προσεγγίσεις που βασίζονται σε τεχνικές εντοπισμού των κρουστικών κυμάτων υπολογίζουν τις λύσεις ιξώδους που παραβιάζουν την αρχή υπέρθεσης, και είναι ασύμβατες με τον χαρακτήρα διασποράς του ημικλασσικού ορίου.

Μια εναλλακτική προσέγγιση θεωρεί, αντί των υδροδυναμικών μεταβλητών ρ_m και u_m , το σύστημα των εξισώσεων διατήρησης για τις οριακές ροπές

$$m_\ell^0(x, t) = \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^0(x, k, t) dk .$$

Αυτός ο τρόπος σκέψης είναι κατά κάποιο τρόπο πιο συμβατός με τον χαρακτήρα διασποράς του προβλήματος, αφού οι εξισώσεις διατήρησης που ικανοποιούνται από τις m_ℓ^0 έχουν κατασκευαστεί τοπικά σαν τις εξισώσεις που προκύπτουν από την μέθοδο μέσου όρου (Witham averaging) από τις εξισώσεις διατήρησης που ικανοποιούν οι ε -εξαρτώμενες ροπές [44]

$$m_\ell^\varepsilon(x, t) = \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x, k, t) dk ,$$

και ολικά από τις ροπές, ως προς την ορμή, της εξίσωσης Liouville (1.31).

Μακριά από καυστικές, το σύστημα των οριακών ροπών είναι αυστηρά υπερβολικό, και έχει μελετηθεί θεωρητικά και αριθμητικά από αρκετούς ερευνητές (βλ. [44] και τις αναφορές εκεί). Όμως για την επίλυση του συστήματος είναι απαραίτητη μια υπόθεση κλεισίματος (moment closure condition) η οποία αφορά το πλήθος των διαδιδόμενων φάσεων (αριθμός των ακτίνων που τέμνονται στο σημείο (x, t)), πέρα από το γεγονός ότι η υπερβολικότητα χάνεται καθώς πλησιάζουμε τις καυστικές.

Η συστηματική παραγωγή των παραπάνω εξισώσεων, καθώς και των αντίστοιχων για τις ε -εξαρτώμενες ροπές, η σχέση τους με τις εξισώσεις διατήρησης οι οποίες παράγονται από το θεώρημα Noether, και μερικά παραδείγματα που αφορούν την οριακή συμπεριφορά των εξισώσεων διατήρησης κοντά στις καυστικές θα παρουσιαστούν στο τελευταίο Κεφάλαιο 3.

Κεφάλαιο 2

Ασυμπτωτικές λύσεις της εξίσωσης Wigner

2.1 Επισκόπηση των υπαρχόντων ασυμπτωτικών λύσεων της εξίσωσης Wigner

Τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα για την λύση της εξίσωσης Wigner στην ημι-κλασσική περιοχή, που έχουν προταθεί κατά καιρούς, μπορούν βασικά να ομαδοποιηθούν σε τρεις κατηγορίες.

(α) Εκείνα τα οποία βασίζονται στο κλασσικό ανάλογο που προκύπτει από το τυπικό ημι-κλασσικό όριο $\varepsilon = 0$, έχουν δηλαδή τη μορφή

$$W^\varepsilon(x, k, t) \sim \sum_{\ell=0}^{\infty} W_\ell(x, k, t) \varepsilon^\ell$$

με όρο μηδενικής τάξης $W_0(x, k, t)$ να είναι λύση της κλασσικής εξίσωσης Liouville (στο οποίο αναφερόμαστε ως (ημι-)Κλασσικό ανάπτυγμα (KA)). Οι συντελεστές W_ℓ είναι ομαλές ή γενικευμένες συναρτήσεις, ανάλογα με το αν τα αρχικά δεδομένα αναπτύσσονται επίσης σε αντίστοιχη σειρά, αλλά ανεξάρτητα της παραμέτρου ε .

Ο Steinrück [78] απέδειξε για το (KA) την L^2 σύγκλιση, στην περίπτωση ανεξάρτητων ως προς την μικρή παράμετρο αρχικών δεδομένων, για δύο κατηγορίες δυναμικών, ομαλών με φραγμένες παραγώγους και του φράγματος δυναμικού που μοντελοποιείται με μια συνάρτηση Dirac. Συνεχίζοντας αυτή τη γραμμή δουλειάς πρόσφατα ο Pulvirenti [68] απέδειξε την H^s σύγκλιση για το (KA) για ομαλά ως προς ε αρχικά δεδομένα, ενώ για ιδιόμορφα, όπως

αυτά τα οποία προέρχονται από αρχικές κυματοσυναρτήσεις WKB, απέδειξε την H^{-s} σύγκλιση του αναπτύγματος, και στις δυο περιπτώσεις υποθέτοντας ομαλά δυναμικά με φραγμένες παραγώγους. Τέτοια ασυμπτωτικά αναπτύγματα (τύπου κανονικών διαταραχών) για το σύμβολο κάποιων κλάσεων κβαντικά παρατηρήσιμων ποσοτήτων (observables) και τις ιδιοσυναρτήσεις τους έχουν ήδη χρησιμοποιηθεί από το 1978 στις εργασίες του Voros [90] (βλ. επίσης [89], [88]) για την ανάλυση της ομαλότητας των ψευδο-διαφορικών τελεστών που εισήγαγαν οι Grossman, Louprias & Stein [37] για την αυστηρή περιγραφή της κβαντομηχανικής στο φασικό χώρο.

Επίσης οι Bouzouina & Robert [14], αποδεικνύουν για το ημικλασσικό ανάπτυγμα για την εξέλιξη κβαντικών παρατηρήσεων, με ‘ομαλό’ σύμβολο, και για C^∞ Χαμιλτωνιανές που αυξάνουν το πολύ τετραγωνικά στο άπειρο, εκτίμηση του αντίστοιχου υπολοίπου στην L^2 νόρμα τελεστών.

(β) Εκείνα τα οποία υποθέτουν ‘ασυμπτωτικό’ ανάπτυγμα ως δυναμοσειρά γύρω από την λύση της αντίστοιχης κλασσικής εξίσωσης Liouville αλλά επιτρέπεται οι συντελεστές να εξαρτώνται από την παράμετρο του αναπτύγματος, ούτως ώστε να μην χρειάζεται η υπόθεση της ομαλότητας (ως προς ε) των αρχικών δεδομένων (Narcowich [60]). Ωστόσο σε αυτή την προσέγγιση φαίνεται ιδιαίτερα δύσκολο να αποδειχθεί κάποιου είδους σύγκλιση του αναπτύγματος. Αργότερα ο ίδιος συγγραφέας [61] παρουσίασε ένα ανάπτυγμα τύπου Dyson της συνάρτησης Wigner ως προς μια παράμετρο σύζευξης λ , θεωρώντας την Χαμιλτωνιανή μία λ -διαταραχή της Χαμιλτωνιανής του αρμονικού ταλαντωτή.

(γ) Εκείνα τα οποία, κατά κάποιον τρόπο, επανακανονικοποιούν τη λύση της γεωμετρικής οπτικής, κατασκευάζοντας ασυμπτωτικά αναπτύγματα τύπου Airy της αντίστοιχης συνάρτησης Wigner, με την τεχνική της ομοιόμορφης στάσιμης φάσης, μιά ιδέα που προτάθηκε στα 1977 από τον Berry [11]. Τα ομοιόμορφα αναπτύγματα χρησιμοποιούνται στη συνέχεια ως ασυμπτωτικές λύσεις της εξίσωσης Wigner. Η τεχνική αυτή προτάθηκε πρόσφατα από τους Filippas & Makrakis [28], [29] όπου αναλύεται επίσης πώς οι ασυμπτωτικές λύσεις αυτού του τύπου μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό το κυματικού πεδίου στην περιοχή απλών καυστικών.

Είναι τέλος ενδιαφέρον να αναφέρουμε ότι ήδη από το 1976 ο E. Heller [39], παρατήρησε ότι το (KA) δεν είναι κατάλληλο για την μελέτη της εξέλιξης ιδιόμορφων αρχικών δεδομένων και πρότεινε ένα διαφορετικό ανάπτυγμα όπου ο αρχικός όρος είναι λύση μιας κλασσικής εξίσωσης Liouville αλλά με ένα ενεργό (effective) δυναμικό. Η χρήση τροποποιημένων χαρακτηριστικών η ενεργών δυναμικών με σκοπό να ληφθούν έμμεσα υπ’ όψιν κβαντικά

φαινόμενα είναι μία γενικότερη φιλοσοφία για την αντιμετώπιση της κβαντικής εξίσωσης Liouville από τους φυσικούς (μέθοδος των τροχιών Wigner, βλ. Lee [51]), η οποία έχει οδηγήσει σε ενδιαφέροντα αριθμητικά αποτελέσματα, και μπορεί να θεωρηθεί ως το ανάλογο της κβαντικής υδροδυναμικής (εξισώσεις Bohm) στο φασικό χώρο και της τεχνικής των Gaussian δεσμών (Gaussian beams).

Ο βασικός λόγος για τη χρήση αναπτυγμάτων γύρω από τη λύση της κλασικής εξίσωσης Liouville, είναι το γεγονός ότι τυπικά η κβαντική εξίσωση Liouville μεταπίπτει σε αυτή στο όριο $\varepsilon = 0$. Ωστόσο τα αρχικά δεδομένα στις περισσότερες ενδιαφέρουσες εφαρμογές είναι ιδιόμορφα ως προς ε , και επειδή σε καμία, έστω και απλή, περίπτωση δεν μπορούμε να επιλύσουμε αναλυτικά την κβαντική εξίσωση Liouville, φαίνεται να υπάρχει μία αβεβαιότητα ως προς την καταλληλότητα των προτεινόμενων αναπτυγμάτων και μία δυσκολία στην ανάπτυξη στρατηγικής αντιμετώπισης του προβλήματος και κατανόησης των λύσεων της εξίσωσης αυτής. Για το λόγο αυτό στην παρούσα διατριβή προτείνουμε μία στρατηγική κατασκευής ασυμπτωτικών λύσεων, η οποία είναι διαφορετική από τις περιγραφείσες ανωτέρω και περιλαμβάνει τα ακόλουθα βασικά βήματα

- 1) Κατασκευή της λύσης της κβαντικής εξίσωσης Liouville σε σειρά ιδιοσυναρτήσεων (ιδιοσυναρτήσεις Moyal),
- 2) Κατασκευή ασυμπτωτικών αναπτυγμάτων των ιδιοσυναρτήσεων Moyal, γύρω από τις ιδιοσυναρτήσεις του αντίστοιχου αρμονικού ταλαντωτή, ξεκινώντας από γνωστά και καλώς κατανοημένα ασυμπτωτικά αναπτύγματα του αντίστοιχου τελεστή Schrödinger για μικρά ε ,
- 3) Κατασκευή του τυπικού ασυμπτωτικού αναπτύγματος της λύσης της κβαντικής εξίσωσης Liouville με χρήση των αναπτυγμάτων του δεύτερου βήματος,
- 4) Χρήση του αναπτύγματος του τρίτου βήματος ως υποκατάστατο της λύσης και ακολουθιακός υπολογισμός (τύπου κανονικών διαταραχών) των συντελεστών με αντικατάσταση στην κβαντική εξίσωση Liouville .

2.2 Αρμονική προσέγγιση των ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή Schrödinger

Στη συνέχεια θεωρούμε δυναμικά $V(x)$ τέτοια ώστε ο τελεστής Schrödinger $\hat{H} = -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta + V(x)$ να είναι ουσιαστικά αυτοσυζυγής και να έχει πλήρως διακριτό φάσμα. Για το σκοπό αυτό επιλέγουμε δυναμικά που ικανοποιούν τις υποθέσεις

Υπόθεση 2.1.

$V(x)$ αναλυτική, τοπικά φραγμένη, θετική συνάρτηση ,
 $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$
(ή $V(x) \in L^1_{loc}(\mathbb{R})$, κάτω φραγμένη και $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = \infty$)

Τότε, ο τελεστής \widehat{H} είναι ουσιαστικά αυτοσυζυγής (essentially selfadjoint) στον C_0^∞ , και έχει διακριτό φάσμα $\{E_n^\varepsilon\}_{n=0,1,2,\dots}$, με πλήρες σύνολο ιδιοσυναρτήσεων $\{u_n^\varepsilon(x)\}_{n=0,1,\dots} \subset L^2(\mathbb{R})$, που ικανοποιούν [70], [73]

$$(2.1) \quad \widehat{H}u_n^\varepsilon(x) = E_n^\varepsilon u_n^\varepsilon(x)$$

Προκειμένου να εφαρμόσουμε την τεχνική της ‘αρμονικής προσέγγισης’, και να κατασκευάσουμε ασυμπτωτικά αναπτύγματα (Rayleigh-Schrödinger asymptotic series, [75],[78]) για τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Schrödinger \widehat{H} , κοντά στις αντίστοιχες του αρμονικού ταλαντωτή, οι οποίες είναι αναλυτικά γνωστές, πρέπει το δυναμικό $V(x)$ να ικανοποιεί επίσης τις παρακάτω συνθήκες.

Υπόθεση 2.2.

- i) $V \in C^\infty(\mathbb{R})$
- ii) $V \geq 0$, για κάποιο $R > 0$ $\inf_{|x| > R} V(x) > 0$
- iii) V' έχει πεπερασμένο αριθμό μηδενισμών $\{x^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^\kappa$
- iv) σε κάθε ρίζα $x^{(\alpha)}$: $V''(x^{(\alpha)}) > 0$
- v) V είναι πολυωνυμικά φραγμένο $|V(x)| \leq c(1 + |x|^m)$.

Για την απλοποίηση των υπολογισμών, θα θεωρήσουμε στη συνέχεια ότι $\kappa = 1$ και $x^{(1)} = 0$.

Ορίζουμε τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$[U_\varepsilon f](x) := \varepsilon^{-\frac{1}{4}} f\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}\right), \quad x \in \mathbb{R}, f \in L^2(\mathbb{R}),$$

μέσω του οποίου ο ε -εξαρτώμενος τελεστής Schrödinger για τον αρμονικό ταλαντωτή

$$\widehat{H}_h^\varepsilon := -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta + \frac{x^2}{2},$$

γράφεται στη μορφή

$$\widehat{H}_h^\varepsilon = \frac{\varepsilon}{2}U_\varepsilon\widehat{H}_hU_\varepsilon^{-1},$$

όπου

$$\widehat{H}_h = -\Delta + x^2.$$

Οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του \widehat{H}_h είναι γνωστές και δίνονται από τις εκφράσεις:

$$e_n = 2n + 1,$$

$$\psi_n(x) = h_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

όπου $H_n(x)$ οι συναρτήσεις Hermite, επομένως ο τελεστής $\widehat{H}_h^\varepsilon$ θα έχει ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις

$$e_n^\varepsilon = \frac{\varepsilon}{2}e_n,$$

$$\psi_n^\varepsilon(x) = [U_\varepsilon \psi_n](x) = \varepsilon^{-\frac{1}{4}} \psi_n\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Η τεχνική της αρμονικής προσέγγισης μας δίνει για τον τελεστή \widehat{H} τα παρακάτω ασυμπτωτικά αναπτύγματα (Simon [75]) των ιδιοτιμών

$$(2.2) \quad \frac{2}{\varepsilon}E_n^\varepsilon = e_n + \sum_{l=1}^N a_n^{(l)} \varepsilon^l + O(\varepsilon^{N+1}),$$

και ιδιοσυναρτήσεων

$$(2.3) \quad \varepsilon^{\frac{1}{4}} u_n^\varepsilon(x) \sim \psi_n\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}\right) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)}\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}\right), \quad \psi_n^{(l)} \in L^2(\mathbb{R}), \quad n = 0, 1, \dots, \quad l = 0, 1, \dots$$

υπό την έννοια

$$(2.4) \quad \left\| [U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)}] \right\|_{L^2(\mathbb{R})} = O(\varepsilon^{(N+1)/2}).$$

Οι συντελεστές $a_n^{(l)}, n = 0, 1, \dots, l = 1, 2, \dots$ υπολογίζονται με εφαρμογή της θεω-

ρίας διαταραχών Rayleigh-Schrödinger (βλ. Παράρτημα A1). Επίσης, με αντικατάσταση των παραπάνω αναπτυγμάτων στις εξισώσεις ιδιοτιμών (2.1), και εξίσωση των αντίστοιχων δυνάμεων της μικρής παραμέτρου ε , προκύπτει ότι οι συναρτήσεις $\psi_n^{(l)}$ ικανοποιούν τις παρακάτω διαφορικές εξισώσεις,

$$(2.5) \quad \mathcal{A}_n \psi_n^{(l)}(\xi) = \sum_{j=1}^{\lfloor l/2 \rfloor} a_n^{(j)} \psi_n^{(l-2j)}(\xi) - \sum_{j=3}^{l+2} \frac{2V^{(j)}(0)}{j!} \xi^j \psi_n^{(l+2-j)}(\xi),$$

$$\mathcal{A}_n = -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 - e_n, \quad n = 0, 1, \dots, \quad l = 1, 2, \dots$$

με $\psi_n^{(0)} := \psi_n$.

Οι οποίες με μια συνθήκη κανονικοποίησης δίνουν τις ακριβείς εκφράσεις των συντελεστών $\psi_n^{(l)}$.

2.3 Ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή Wigner

2.3.1 Ιδιοσυναρτήσεις Moyal

Θεωρούμε τον μετασχηματισμό Wigner (βλ. (1.24))

$$(2.6) \quad \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) := W^\varepsilon[u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon](x, k) = \frac{1}{\pi\varepsilon} \int_{\mathbf{R}} e^{-i\frac{2k}{\varepsilon}\sigma} u_n^\varepsilon(x + \sigma) \overline{u_m^\varepsilon(x - \sigma)} d\sigma,$$

των ιδιοσυναρτήσεων $u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon$, $n, m = 0, 1, 2, \dots$, του τελεστή Schrödinger \hat{H} οι οποίες ορίστηκαν στη προηγούμενη παράγραφο 2.2.

Οι συναρτήσεις αυτές (2.6), εισήχθησαν το 1949 από τον Moyal [59], στα πλαίσια μιάς συνεπούς στατιστικής ερμηνείας της κβαντικής μηχανικής, και αντιστοιχούν στον μετασχηματισμό Wigner του τελεστή $\hat{\rho}_{nm}$, που ορίζεται

$$(2.7) \quad \hat{\rho}_{nm} u(x) := u_n^\varepsilon(x) (u, u_m^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R})}, \quad \forall u \in L^2(\mathbb{R})$$

Στο παρακάτω θεώρημα αποδεικνύεται ότι οι συναρτήσεις Moyal αποτελούν πλήρη ορθοκανονική βάση ιδιοσυναρτήσεων στον χώρο φάσεων, που αντιστοιχούν στον κβαντικό τελεστή Liouville \mathcal{L}^ε και τον τελεστή \mathcal{M}^ε (γνωστό στη βιβλιογραφία ως cosine bracket του Baker) ο οποίος ορίζεται στη συνέχεια, και δίνονται οι αντίστοιχες ιδιοτιμές τους. Η διαδικασία της απόδειξης χρησιμοποιεί άμεσα το επίπεδο Schrödinger.

Το φάσμα του τελεστή Schrödinger \hat{H} καθορίζει το φάσμα του αντίστοιχου κβαντικού

τελεστή Liouville [69], και ισχύει

$$\sigma(\mathcal{L}^\varepsilon) = \left\{ \frac{i}{\varepsilon}(E - E'), \quad E, E' \in \sigma(\widehat{H}) \right\} .$$

Η αντίστοιχη σχέση ισχύει και για το διακριτό φάσμα του

$$\sigma_p(\mathcal{L}^\varepsilon) = \left\{ \frac{i}{\varepsilon}(E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon), \quad E_n^\varepsilon, E_m^\varepsilon \in \sigma_p(\widehat{H}) \right\} .$$

Το τι συμβαίνει όσον αφορά το απόλυτα συνεχές και το ιδιόμορφα συνεχές φάσμα του κβαντικού και του κλασσικού τελεστή Liouville, σε σχέση με το αντίστοιχο φάσμα του τελεστή Schrödinger, μελετήθηκε αρχικά από τον Spohn [77], και αργότερα βελτίωσαν τα αποτελέσματα οι Antoniou, et.al [1], αποδεικνύοντας ότι

$$\sigma_{sc,ac}(\mathcal{L}^\varepsilon) \neq \left\{ \frac{i}{\varepsilon}(E - E'), \quad E, E' \in \sigma_{sc,ac}(\widehat{H}) \right\} ,$$

όπου με $\sigma_{sc,ac}$ συμβολίζουμε το ιδιόμορφα συνεχές και απόλυτα συνεχές φάσμα αντίστοιχα. Για το λόγο αυτό, στην παρούσα εργασία επιλέξαμε οι τελεστές \widehat{H} με τους οποίους ασχολούμαστε να έχουν πλήρως διακριτό φάσμα, και επομένως ισχύει

$$\sigma(\mathcal{L}^\varepsilon) = \sigma_p(\mathcal{L}^\varepsilon) = \left\{ \frac{i}{\varepsilon}(E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon), \quad E_n^\varepsilon, E_m^\varepsilon \in \sigma_p(\widehat{H}) \right\} .$$

Υπενθυμίζεται ότι ο συνημιτονικός και ημιτονικός μεταθέτης (cosine bracket και sine bracket) [7] δύο συναρτήσεων $f(x, k)$ και $g(x, k)$, που χρησιμοποιούνται στο επόμενο Θεώρημα, ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} & \cos \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_f} \frac{\partial}{\partial k_g} - \frac{\partial}{\partial x_g} \frac{\partial}{\partial k_f} \right) \right] f(x, k)g(x, k) = \\ & = \frac{1}{2\pi^2\varepsilon^2} \int dk' dk'' dx' dx'' [f(x', k')g(x'', k'') + g(x', k')f(x'', k'')] \\ & \times \exp \left(-\frac{2i}{\varepsilon} (k(x' - x'') + k'(x'' - x) + k''(x - x')) \right) \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_f} \frac{\partial}{\partial k_g} - \frac{\partial}{\partial x_g} \frac{\partial}{\partial k_f} \right) \right] f(x, k) g(x, k) = \\ & = \frac{1}{2i\pi^2\varepsilon^2} \int dk' dk'' dx' dx'' [f(x', k') g(x'', k'') - g(x', k') f(x'', k'')] \\ & \times \exp \left(-\frac{2i}{\varepsilon} (k(x' - x'') + k'(x'' - x) + k''(x - x')) \right) \end{aligned}$$

Θεώρημα 2.1. Έστω $\{u_n^\varepsilon\}_{n=0,1,\dots}$ μια πλήρης ορθοκανονική βάση ιδιοσυναρτήσεων στον $L^2(\mathbb{R}_x)$, που ικανοποιεί τις εξισώσεις (2.1). Τότε, οι συναρτήσεις $\{\sqrt{\varepsilon}\Phi_{nm}^\varepsilon\}_{n,m=0,1,\dots}$ είναι μια πλήρης ορθοκανονική βάση στον $L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)$, και αποτελεί οικογένεια ιδιοσυναρτήσεων των τελεστών

$$(2.8) \quad \mathcal{L}^\varepsilon \bullet \equiv -\frac{2}{\varepsilon} \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) \bullet ,$$

και

$$(2.9) \quad \mathcal{M}^\varepsilon \bullet \equiv \cos \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) \bullet ,$$

με ιδιοτιμές

$$\lambda_{nm} = \frac{i}{\varepsilon} (E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon) ,$$

και

$$\mu_{nm} = \frac{1}{2} (E_n^\varepsilon + E_m^\varepsilon) ,$$

όπου $H(x, k)$ είναι η κλασσική Χαμιλτωνιανή.

Απόδειξη (βλ. επίσης [25], [19])

Από τον ορισμό του (2.7) και τις εξισώσεις ιδιοτιμών $\widehat{H}u_n^\varepsilon(x) = E_n^\varepsilon u_n^\varepsilon(x)$, $\widehat{H}\overline{u_m^\varepsilon(y)} = E_m^\varepsilon \overline{u_m^\varepsilon(y)}$, προκύπτει ότι ο τελεστής $\widehat{\rho}_{nm}$ ικανοποιεί τις εξισώσεις

$$\widehat{H}\widehat{\rho}_{nm} = E_n^\varepsilon \widehat{\rho}_{nm} ,$$

και

$$\widehat{\rho}_{nm}\widehat{H} = E_m^\varepsilon \widehat{\rho}_{nm} .$$

Πράγματι

$$\begin{aligned}\widehat{H}\widehat{\rho}_{nm}u(x) &= \widehat{H}u_n^\varepsilon(x)(u, u_m^\varepsilon) = E_n^\varepsilon u_n^\varepsilon(x)(u, u_m^\varepsilon) = E_n^\varepsilon \widehat{\rho}_{nm}u(x) \\ \widehat{\rho}_{nm}\widehat{H}u(x) &= u_n^\varepsilon(x)(\widehat{H}u, u_m^\varepsilon) = u_n^\varepsilon(x)(u, \widehat{H}u_m^\varepsilon) = E_m^\varepsilon u_n^\varepsilon(x)(u, u_m^\varepsilon) = E_m^\varepsilon \widehat{\rho}_{nm}u(x)\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι ο τελεστής \widehat{H} είναι αυτοσυζυγής.

Αφαιρώντας και προσθέτοντας αντίστοιχα τις παραπάνω εξισώσεις παίρνουμε

$$(2.10) \quad \left[\widehat{H}, \widehat{\rho}_{nm} \right] = \widehat{H}\widehat{\rho}_{nm} - \widehat{\rho}_{nm}\widehat{H} = (E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon)\widehat{\rho}_{nm} \quad (\text{μεταθέτης})$$

$$(2.11) \quad \widehat{H}\widehat{\rho}_{nm} + \widehat{\rho}_{nm}\widehat{H} = (E_n^\varepsilon + E_m^\varepsilon)\widehat{\rho}_{nm} \quad (\text{αντι-μεταθέτης})$$

όπου $[\cdot, \cdot]$ συμβολίζει τον μεταθέτη τελεστών.

Εφαρμόζοντας τον κανόνα αντιστοιχίσης Weyl-Wigner (βλ. Παράγραφο 1.4.2) στις παραπάνω εξισώσεις για τον τελεστή $\widehat{\rho}_{nm}$, προκύπτουν οι εξισώσεις ιδιοτιμών στο χώρο φάσεων για τους τελεστές \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε

$$(2.12) \quad \mathcal{L}^\varepsilon \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) = \frac{i}{\varepsilon}(E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon)\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$$

$$(2.13) \quad \mathcal{M}^\varepsilon \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) = \frac{1}{2}(E_n^\varepsilon + E_m^\varepsilon)\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$$

όπου \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε είναι οι μετασχηματισμοί Weyl-Wigner του μεταθέτη και του αντι-μεταθέτη τελεστών (2.11), (2.10). Η μορφή του \mathcal{L}^ε έχει ήδη δοθεί στην Παράγραφο 1.4.4, και είναι

$$\mathcal{L}^\varepsilon \bullet := -\frac{2}{\varepsilon} \sin \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) \bullet,$$

και αντίστοιχα του \mathcal{M}^ε είναι

$$\mathcal{M}^\varepsilon \bullet := \cos \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_H} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial k_H} \right) \right] H(x, k) \bullet,$$

η οποία προκύπτει επίσης από τον κανόνα σύνθεσης τελεστών στην αναπαράσταση Weyl.

Για την απόδειξη της ορθογωνιότητας και πληρότητας των $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$, είναι βολικό

να εισάγουμε τον μετασχηματισμό Fourier-Wigner $[G(f, g)](\beta, \alpha)$ των $f, g \in L^2(\mathbb{R})$ (βλ. Thangavelu [79])

$$[G(f, g)](\beta, \alpha) = \int_{\mathbb{R}} e^{i\beta\xi} f\left(\xi + \frac{1}{2}\alpha\right) \overline{g\left(\xi - \frac{1}{2}\alpha\right)} d\xi,$$

καθώς και τον αντίστοιχο ε -εξαρτώμενο μετασχηματισμό Fourier-Wigner των f, g ($\varepsilon > 0$)

$$[G^\varepsilon(f, g)](\beta, \alpha) := [G(f, g)](\beta, \varepsilon\alpha) = \int_{\mathbb{R}} e^{i\beta\xi} f\left(\xi + \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right) \overline{g\left(\xi - \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right)} d\xi.$$

Τότε ισχύει

$$\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) = \mathcal{F}_{\beta \rightarrow x, \alpha \rightarrow k}[G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon)](x, k)$$

όπου $\mathcal{F}_{\beta \rightarrow x, \alpha \rightarrow k}$ ο μετασχηματισμός Fourier από τον $L^2(\mathbb{R}_{\beta\alpha}^2)$ στον $L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)$. Πράγματι έχουμε

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\beta \rightarrow x, \alpha \rightarrow k}[G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon)](x, k) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}_{\beta\alpha}^2} e^{-i\alpha k} e^{-i\beta x} \int_{\mathbb{R}} e^{i\beta\xi} u_n^\varepsilon\left(\xi + \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right) \overline{u_m^\varepsilon\left(\xi - \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right)} d\xi d\alpha d\beta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}_{\xi\alpha}^2} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\beta(x-\xi)} d\beta\right) e^{-i\alpha k} u_n^\varepsilon\left(\xi + \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right) \overline{u_m^\varepsilon\left(\xi - \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right)} d\xi d\alpha \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}_{\xi\alpha}^2} \delta(x - \xi) e^{-i\alpha k} u_n^\varepsilon\left(\xi + \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right) \overline{u_m^\varepsilon\left(\xi - \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right)} d\xi d\alpha \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\alpha k} u_n^\varepsilon\left(x + \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right) \overline{u_m^\varepsilon\left(x - \frac{\varepsilon}{2}\alpha\right)} d\alpha \\ &= \frac{1}{\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2k}{\varepsilon}\sigma} u_n^\varepsilon(x + \sigma) \overline{u_m^\varepsilon(x - \sigma)} d\sigma \\ &= \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k), \end{aligned}$$

και επομένως

$$\mathcal{F}^{-1}[\Phi_{nm}^\varepsilon](\beta, \alpha) = [G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon)](\beta, \alpha).$$

Εφαρμόζοντας την Πρόταση (1.3.1) από τον Thangavelu [79] για $d = 1$, σύμφωνα με την οποία:

Για κάθε $f, g, \phi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ ισχύει

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} G(f, g)(\beta, \alpha) \overline{G(\phi, \psi)(\beta, \alpha)} d\beta d\alpha = (f, \phi)(\psi, g).$$

και χρησιμοποιώντας ιδιότητες του μετασχηματισμού Fourier έχουμε

$$\begin{aligned} (\Phi_{nm}^\varepsilon, \Phi_{\mu\nu}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)} &= (\mathcal{F}^{-1}[\Phi_{nm}^\varepsilon], \mathcal{F}^{-1}[\Phi_{\mu\nu}^\varepsilon])_{L^2(\mathbb{R}_{\alpha\beta}^2)} = (G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon), G^\varepsilon(u_\mu^\varepsilon, u_\nu^\varepsilon))_{L^2(\mathbb{R}_{\alpha\beta}^2)} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} (G(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon), G(u_\mu^\varepsilon, u_\nu^\varepsilon))_{L^2(\mathbb{R}_{\alpha\beta}^2)} = \frac{1}{\varepsilon} (u_n^\varepsilon, u_\mu^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R})} (u_\nu^\varepsilon, u_m^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R})} = \frac{1}{\varepsilon} \delta_{n\mu} \delta_{\nu m} \end{aligned}$$

όπου

$$\delta_{n\mu} = \begin{cases} 1, & n = \mu \\ 0, & n \neq \mu \end{cases}$$

συμβολίζει το δέλτα του Kronecker.

Σύμφωνα με τον παραπάνω υπολογισμό

$$(\Phi_{nm}^\varepsilon, \Phi_{\mu\nu}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)} = \frac{1}{\varepsilon} \delta_{n\mu} \delta_{\nu m}, \quad \|\Phi_{nm}^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}},$$

που αποδεικνύει την ορθοκανονικότητα της οικογένειας $\{\sqrt{\varepsilon}\Phi_{nm}^\varepsilon\}_{n,m=1}^\infty$.

Για να αποδείξουμε την πληρότητα, αρκεί να αποδείξουμε ότι αν για τυχαία $f \in L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)$, ισχύει $(f, \Phi_{nm}^\varepsilon) = 0, \forall n, m$, τότε $f \equiv 0$. Πράγματι έχουμε

$$0 = (f, \Phi_{nm}^\varepsilon) = (\mathcal{F}^{-1}f, \mathcal{F}^{-1}[\Phi_{nm}^\varepsilon]) = (\mathcal{F}^{-1}f, G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon)), \quad \forall n, m$$

από όπου σύμφωνα με το Θεώρημα 1.3.2 στο ([79]), το οποίο εξασφαλίζει την ορθογωνιότητα της οικογένειας συναρτήσεων $G^\varepsilon(u_n^\varepsilon, u_m^\varepsilon)$ στον $L^2(\mathbb{R}_{\beta,\alpha}^2)$ προκύπτει $\mathcal{F}^{-1}f \equiv 0$, οπότε $f \equiv 0$.

Επομένως το σύστημα $\{\sqrt{\varepsilon}\Phi_{nm}^\varepsilon\}_{nm}$ αποτελεί μια πλήρη ορθοκανονική βάση στον $L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)$

■

Παρατήρηση 1. Είναι πολύ ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι ο υπολογισμός των συναρτήσεων Moyal από ευθείας στον χώρο φάσεων απαιτεί την γνώση και των δύο προβλημάτων ιδιοτιμών, (2.12) και (2.13), όπως έχει δειχθεί στις εργασίες [19], [48]. Δεν υπάρχει όμως εξίσωση εξέλιξης που αντιστοιχεί στην εξίσωση ιδιοτιμών (2.13), η οποία μπορεί να παραχθεί άμεσα από το επίπεδο Schrödinger, όπως συμβαίνει με την κβαντική εξίσωση Liouville για την (2.12), πράγμα που σημαίνει ότι η (2.13) δεν προκύπτει φυσιολογικά από κάποιο πρόβλημα αρχικών τιμών για την συνάρτηση Wigner. Για την παραγωγή της από ευθείας στον χώρο φάσεων οι Fairlie & Manogue [26] επέκτειναν την συνάρτηση Wigner εισάγοντας έναν φανταστικό χρόνο (s), και κατασκεύασαν ένα δεύτερο πρόβλημα αρχικών τιμών, με χρονική διαφόριση ως προς s , για την συνάρτηση Wigner με 'χωρικό' τελεστή τον \mathcal{M}^ε .

Παρατήρηση 2. Επίσης είναι πολύ σημαντικό να σημειώσουμε ότι δεν είναι εφικτό να υπολογίσουμε το κλασσικό όριο $\varepsilon \rightarrow 0$ των ιδιοσυναρτήσεων Φ_{nm}^ε για οποιαδήποτε n, m ανεξάρτητα μεταξύ των, και αυτό είναι το πλέον σημαντικό εμπόδιο για το άμεσο πέρασμα του αναπτύγματος της εξίσωσης Wigner στο κλασσικό όριο, από όπου θα ανέμενε κανείς να πάρει ένα αντίστοιχο ανάπτυγμα για την εξίσωση Liouville.

Προκειμένου να καταστήσουμε εμφανείς τις σχετικές δυσκολίες, στο Παράρτημα A.3 παρουσιάζουμε το κλασικό όριο ($\varepsilon \rightarrow 0$, $n, m \rightarrow \infty$, $E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon = \text{σταθερό}$) των ιδιοσυναρτήσεων Moyal, το οποίο δίνει κατανομές στις αντίστοιχες κανονικές μεταβλητές δράσης και γωνίας (I, θ) ,

$$\Phi_{nm}^0(I, \theta) = e^{-i\frac{E_{nm}^0}{\gamma_{nm}}\theta} \delta\left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0)\right).$$

Στην διαδικασία της απόδειξης του κλασικού ορίου γίνεται φανερή και η αναγκαιότητα της χρήσης και των δύο εξισώσεων ιδιοτιμών (2.12, 2.13).

Οι Berry & Balazs [11] [12] υπολογίζουν το κλασικό όριο των συναρτήσεων Moyal Φ_{nm}^ε για ολοκληρώσιμες Χαμιλτωνιανές στην περίπτωση $n = m$, και το οποίο είναι $\delta(H(I) - (E_n^0))$. Στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή οι Ripamonti [71] και Truman & Zhao [86] δίνουν αναλυτική απόδειξη του κλασικού ορίου των ιδιοσυναρτήσεων (Moyal) Φ_{nm}^ε για κάθε $n, m = 0, 1, \dots$, με τη βοήθεια ιδιοτήτων των συναρτήσεων *Laguerre*.

2.3.2 Αρμονική προσέγγιση των ιδιοσυναρτήσεων Moyal

Έστω $\Psi_{nm}^\varepsilon(x, k)$, οι ιδιοσυναρτήσεις Moyal που αντιστοιχούν στον αρμονικό ταλαντωτή, δηλαδή

$$\Psi_{nm}^\varepsilon(x, k) := \frac{1}{\pi\varepsilon} \int_{\mathbf{R}} e^{-i\frac{2k}{\varepsilon}\sigma} \psi_n^\varepsilon(x + \sigma) \overline{\psi_m^\varepsilon(x - \sigma)} d\sigma, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots$$

Ορίζουμε τον μετασχηματισμό $[U_{\varepsilon, (xk)} f](x, k) := \varepsilon^{-1} f\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$, $x \in \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{R}$, $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$, για τον οποίο ισχύει $\|[U_{\varepsilon, (xk)} f]\|_{L^2} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \|f\|_{L^2}$, και θα συμβολίζουμε $\tilde{f}(\xi, \eta) = [U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} f](\xi, \eta)$.

Τότε, οι $\Psi_{nm}^\varepsilon(x, k)$ μπορούν να γραφούν μέσω των ε -ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων $\Psi_{nm}(x, k)$, που είναι ο 'διαγώνισ' μετασχηματισμός Wigner των συναρτήσεων Hermite ψ_n , με $\varepsilon = 1$

$$\Psi_{nm}(x, k) := \frac{1}{\pi} \int_{\mathbf{R}} e^{-i2k\sigma} \psi_n(x + \sigma) \overline{\psi_m(x - \sigma)} d\sigma,$$

δηλαδή

$$\Psi_{nm}^\varepsilon(x, k) = [U_{\varepsilon, (xk)} \Psi_{nm}](x, k) = \frac{1}{\varepsilon} \Psi_{nm}\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}\right).$$

Αντικαθιστώντας στον ορισμό των $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$, $n, m = 0, 1, \dots$ τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα (2.2), (2.3) για τις ιδιοσυναρτήσεις u_n^ε της παραγράφου 2.2, καταλήγουμε σε ένα τυπικό ασυμπτωτικό ανάπτυγμα των $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$ της μορφής

$$(2.14) \quad \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) \sim \Psi_{nm}^\varepsilon(x, k) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{l}{2}} Z_{nm}^{\varepsilon, (l)}(x, k)$$

όπου οι συναρτήσεις $Z_{nm}^{\varepsilon, (l)}$ δίνονται από τη σχέση

$$(2.15) \quad \begin{aligned} Z_{nm}^{\varepsilon, (l)}(x, k) &= [U_{\varepsilon, (xk)} \tilde{Z}_{nm}^{(l)}](x, k) = \frac{1}{\varepsilon} \tilde{Z}_{nm}^{(l)}\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}\right) \\ \tilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) &= \sum_{\mu=0}^l W[\psi_n^{(\mu)}, \psi_m^{(l-\mu)}](\xi, \eta), \end{aligned}$$

με $W[f, g](x, k) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i2k\sigma} f(x + \sigma) \bar{g}(x - \sigma) d\sigma$.

Για να κατασκευάσουμε τις εξισώσεις που ικανοποιούν οι συντελεστές $Z_{nm}^{\varepsilon, (l)}$ αντικαταθιστούμε στις εξισώσεις ιδιοτιμών (2.12) και (2.13) το ανάπτυγμα (2.14), και εξισώνουμε τις αντίστοιχες δυνάμεις της μικρής παραμέτρου ε .

Εφαρμόζοντας τον μετασχηματισμό $U_{\varepsilon, (xk)}$ στα προβλήματα ιδιοτιμών (2.12), (2.13) (χρησιμοποιώντας δηλαδή την αλλαγή μεταβλητών $(x, k) \rightarrow (\xi, \eta)$, $\xi = \frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\eta = \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}$), έχουμε

$$(2.16) \quad U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \mathcal{L}^\varepsilon U_{\varepsilon, (xk)} U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) = \frac{i}{\varepsilon} (E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon) U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$$

$$(2.17) \quad U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \mathcal{M}^\varepsilon U_{\varepsilon, (xk)} U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) = \frac{1}{2} (E_n^\varepsilon + E_m^\varepsilon) U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k).$$

Οι τελεστές \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε μετασχηματίζονται στους

$$\tilde{L}^\varepsilon := [U_{\varepsilon, (xk)}]^{-1} \mathcal{L}^\varepsilon [U_{\varepsilon, (xk)}]$$

και

$$\tilde{M}^\varepsilon := [U_{\varepsilon, (xk)}]^{-1} \mathcal{M}^\varepsilon [U_{\varepsilon, (xk)}]$$

Για τον πλήρη διαχωρισμό των δυνάμεων του ε όμως θα πρέπει να αναπτύξουμε και τους τελεστές \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε ως προς ε , το οποίο είναι δυνατόν θεωρώντας αρκετά ομαλά δυναμικά $V(x)$, οπότε μας επιτρέπεται να αντικαταστήσουμε στις εκφράσεις των \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε (2.8), (2.9)

το ανάπτυγμα σε σειρά Taylor του $V(x)$. Έτσι προκύπτουν τα αναπτύγματα

$$(2.18) \quad \mathcal{L}^\varepsilon = k \frac{\partial}{\partial x} - V'(x) \frac{\partial}{\partial k} - \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{2j} \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{V^{(2j+1)}(x)}{(2j+1)!} \frac{\partial^{(2j+1)}}{\partial k^{2j+1}}$$

και

$$(2.19) \quad \mathcal{M}^\varepsilon = -\frac{\varepsilon^2}{8} \Delta_{xk} + H(x, k) + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{2j} \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{V^{(2j)}(x)}{(2j)!} \partial_k^{(2j)} + \frac{\varepsilon^2}{8} \partial_k^2.$$

Αντίστοιχα οι \tilde{L}^ε , \tilde{M}^ε γράφονται

$$(2.20) \quad \tilde{L}^\varepsilon = L_h + \left(\xi - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} V'(\sqrt{\varepsilon}\xi)\right) \frac{\partial}{\partial \eta} - \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^j \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{1}{(2j+1)!} \frac{V^{(2j+1)}(\sqrt{\varepsilon}\xi)}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial^{(2j+1)}}{\partial \eta^{2j+1}}$$

και

$$(2.21) \quad \frac{1}{\varepsilon} \tilde{M}^\varepsilon = M_h + \left(\frac{1}{\varepsilon} V(\sqrt{\varepsilon}\xi) - \frac{\xi^2}{2}\right) + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^j \left(\frac{-1}{4}\right)^j \frac{1}{(2j)!} V^{(2j)}(\sqrt{\varepsilon}\xi) \frac{\partial^{(2j)}}{\partial \eta^{2j}} + \frac{1}{8} \frac{\partial^{(2)}}{\partial \eta^2}$$

όπου

$$(2.22) \quad L_h = \eta \frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad M_h = -\frac{1}{8} \Delta_{\xi\eta} + \frac{\eta^2}{2} + \frac{\xi^2}{2},$$

είναι οι τελεστές \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε μετά τον μετασχηματισμό $U_{\varepsilon,(xk)}$ για τον αρμονικό ταλαντωτή $V_h(x) = \frac{x^2}{2}$.

Οι υποθέσεις (2.2) για το δυναμικό, μας επιτρέπουν να αντικαταστήσουμε με το ανάπτυγμα Taylor του δυναμικού και των παραγώγων του, γύρω από την ελάχιστη τιμή του, την οποία υποθέσαμε χωρίς βλάβη να είναι $V(0) = 0$.

Έτσι οι τελεστές \tilde{L}^ε και \tilde{M}^ε προσεγγίζονται από τα αναπτύγματα

$$(2.23) \quad \tilde{L}^\varepsilon \sim L^\varepsilon := L_h + \sum_{\nu=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{\nu}{2}} \mathcal{B}_\nu\left(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}\right)$$

και

$$(2.24) \quad \frac{1}{\varepsilon} \widetilde{M}^\varepsilon \sim \frac{1}{\varepsilon} M^\varepsilon := M_h + \sum_{\nu=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{\nu}{2}} \Gamma_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta})$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) &= -V^{(\nu+2)}(0) \sum_{j=0}^{[(\nu-1)/2]+1} \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{1}{(2j+1)!} \frac{\xi^{\nu+1-2j}}{(\nu+1-2j)!} \frac{\partial^{(2j+1)}}{\partial \eta^{2j+1}}, \quad \nu \geq 1, \\ \Gamma_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) &= V^{(\nu+2)}(0) \sum_{j=0}^{[\nu/2]+1} \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{1}{(2j)!} \frac{\xi^{\nu+2-2j}}{(\nu+2-2j)!} \frac{\partial^{(2j)}}{\partial \eta^{2j}}, \quad \nu \geq 1, \end{aligned}$$

με $V^{(j)}(0) \equiv \frac{\partial^j V}{\partial x^j}(0)$.

Στην περίπτωση που το δυναμικό είναι πολυωνυμικό, οι παραπάνω προσεγγίσεις είναι ακριβείς, δηλαδή $L^\varepsilon \equiv \widetilde{L}^\varepsilon$ και $M^\varepsilon \equiv \widetilde{M}^\varepsilon$.

Το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα (2.14) των $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$ στις νέες μεταβλητές (ξ, η) γίνεται

$$(2.25) \quad \left[U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon \right] (\xi, \eta) \sim \Psi_{nm}(\xi, \eta) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \widetilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta)$$

Αντικαθιστώντας τις προσεγγίσεις $L^\varepsilon, M^\varepsilon$ των αρχικών τελεστών, των ιδιοτιμών E_n^ε (2.2) και των ιδιοσυναρτήσεων $\Phi_{nm}^\varepsilon(\xi, \eta)$ (2.25), στις εξισώσεις ιδιοτιμών (2.16, 2.17), προκύπτει μια ιεραρχία προβλημάτων ιδιοτιμών που ικανοποιούν οι συναρτήσεις διόρθωσης $\widetilde{Z}_{nm}^{(l)}$, $n, m = 0, 1, \dots, l \geq 1$

$$(2.26) \quad \begin{aligned} \left[L_h - \frac{i}{2}(e_n - e_m) \right] \widetilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) &= B_{nm}^{(l)}(\xi, \eta), \\ \left[M_h - \frac{1}{4}(e_n + e_m) \right] \widetilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) &= G_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) \end{aligned}$$

όπου το δεξιό μέλος των (2.26) δίνεται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} B_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) &= - \sum_{\nu=1}^l \mathcal{B}_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) \widetilde{Z}_{nm}^{(l-\nu)}(\xi, \eta) + \frac{i}{2} \sum_{\nu=1}^{[l/2]} (a_n^{(\nu)} - a_m^{(\nu)}) \widetilde{Z}_{nm}^{(l-2\nu)}(\xi, \eta), \\ G_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) &= - \sum_{\nu=1}^l \Gamma_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) \widetilde{Z}_{nm}^{(l-\nu)}(\xi, \eta) + \frac{1}{4} \sum_{\nu=1}^{[l/2]} (a_n^{(\nu)} + a_m^{(\nu)}) \widetilde{Z}_{nm}^{(l-2\nu)}(\xi, \eta), \\ \widetilde{Z}_{nm}^{(0)}(\xi, \eta) &:= \Psi_{nm}(\xi, \eta). \end{aligned}$$

Μπορεί επίσης να αποδειχθεί με απευθείας υπολογισμούς, χρησιμοποιώντας τις (2.5) ότι οι συναρτήσεις $\tilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta)$ που δίνονται από τις εκφράσεις (2.15) ικανοποιούν τις εξισώσεις (2.26) για κάθε $n, m = 0, 1 \dots$ και $l = 0, 1 \dots$.

Η έννοια του ασυμπτωτικού αναπτύγματος (2.14) περιγράφεται από την L^2 - εκτίμηση

$$\| [U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^{\varepsilon}] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \tilde{Z}_{nm}^{(l)} \|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = O(\varepsilon^{(N+1)/2}).$$

Πράγματι χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση

$$\begin{aligned} [U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^{\varepsilon}] (\xi, \eta) &= \varepsilon \frac{1}{\pi \varepsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-i \frac{2\eta}{\sqrt{\varepsilon}} \sigma} u_n^{\varepsilon}(\sqrt{\varepsilon} \xi + \sigma) \overline{u_m^{\varepsilon}(\sqrt{\varepsilon} \xi - \sigma)} d\sigma = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i 2\eta y} [U_{\varepsilon}^{-1} u_n^{\varepsilon}] (\xi + y) [U_{\varepsilon}^{-1} u_m^{\varepsilon}] (\xi - y) dy \end{aligned}$$

και την ταυτότητα

$$\begin{aligned} [U_{\varepsilon}^{-1} u_n^{\varepsilon}] (\eta) [U_{\varepsilon}^{-1} u_m^{\varepsilon}] (\xi) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=0}^l \psi_n^{(\mu)}(\eta) \psi_m^{(l-\mu)}(\xi) &= \\ = \left([U_{\varepsilon}^{-1} u_n^{\varepsilon}] (\eta) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)}(\eta) \right) \left([U_{\varepsilon}^{-1} u_m^{\varepsilon}] (\xi) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)}(\xi) \right) &+ \\ + \left([U_{\varepsilon}^{-1} u_n^{\varepsilon}] (\eta) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)}(\eta) \right) \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)}(\xi) &+ \\ + \left([U_{\varepsilon}^{-1} u_m^{\varepsilon}] (\xi) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)}(\xi) \right) \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)}(\eta) &+ \\ + \sum_{l=N+1}^{2N} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=l-N}^N \psi_n^{(\mu)}(\eta) \psi_m^{(l-\mu)}(\xi) & \end{aligned}$$

έχουμε

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left[U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon \right] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \tilde{Z}_{nm}^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 = \\
 & \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left| \left[U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon \right] (\xi, \eta) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \tilde{Z}_{nm}^{(l)}(\xi, \eta) \right|^2 d\xi d\eta = \\
 & = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i2\eta y} \left([U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon] (\xi + y) [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] (\xi - y) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=0}^l \psi_n^{(\mu)} (\xi + y) \psi_m^{(l-\mu)} (\xi - y) \right) dy \right|^2 d\xi d\eta = \\
 & = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left| [U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon] (\xi + y) [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] (\xi - y) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=0}^l \psi_n^{(\mu)} (\xi + y) \psi_m^{(l-\mu)} (\xi - y) \right|^2 d\xi dy = \\
 & = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left| [U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon] (\eta) [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] (\xi) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=0}^l \psi_n^{(\mu)} (\eta) \psi_m^{(l-\mu)} (\xi) \right|^2 d\eta d\xi \leq \\
 & \leq \left\| [U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \left\| [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \\
 & + \left\| [U_\varepsilon^{-1} u_n^\varepsilon] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_n^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \left\| \psi_m^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \left\| [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \left\| \psi_n^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \\
 & + \sum_{l=N+1}^{2N} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \sum_{\mu=l-N}^N \left\| \psi_n^{(\mu)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \left\| \psi_m^{(l-\mu)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 .
 \end{aligned}$$

Επειδή $\psi_n^{(\mu)} \in L^2(\mathbb{R})$, $\mu = 0, 1, \dots$, $n = 0, 1, \dots$ και

$$\left\| [U_\varepsilon^{-1} u_m^\varepsilon] - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}} \psi_m^{(l)} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = O(\varepsilon^{(N+1)/2}) ,$$

προκύπτει η ζητούμενη εκτίμηση.

Παρατήρηση . Το παραχθέν ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για τις ιδιοσυναρτήσεις του κβαντικού τελεστή Liouville μπορεί να κατασκευασθεί και απ' ευθείας με θεωρία διαταραχών (Stationary perturbation theory) στον χώρο φάσεων γύρω από τις Ψ_{nm} [20].

2.4 Ασυμπτωτικά αναπτύγματα χρονο-εξαρτώμενων συναρτήσεων Wigner

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών, για την εξίσωση Schrödinger

$$(2.27) \quad \begin{cases} i\varepsilon \frac{\partial \psi^\varepsilon}{\partial t} = \hat{H} \psi^\varepsilon(x, t), & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ \psi^\varepsilon(x, 0) = \psi_0^\varepsilon(x) \end{cases}$$

και το αντίστοιχο πρόβλημα αρχικών τιμών για την εξίσωση Wigner

$$(2.28) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} W^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}^\varepsilon W^\varepsilon(x, k, t) = 0, (x, k) \in \mathbb{R}^2, t > 0 \\ W^\varepsilon(x, k, t)|_{t=0} = W_0^\varepsilon(x, k) \end{cases}$$

όπου $W_0^\varepsilon(x, k)$ είναι ο μετασχηματισμός Wigner των αρχικών δεδομένων $\psi_0^\varepsilon(x)$.

Εφαρμόζοντας τη μέθοδο Fourier, η κυματοσυνάρτηση $\psi^\varepsilon(x, t)$ αναπτύσσεται στις ιδιοσυναρτήσεις u_n^ε του τελεστή \widehat{H} , ως εξής

$$(2.29) \quad \psi^\varepsilon(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{0,n}^\varepsilon u_n^\varepsilon(x) e^{-i \frac{E_n^\varepsilon}{\varepsilon} t}.$$

Οι συντελεστές $A_{0,n}^\varepsilon$ δίνονται από την προβολή των αρχικών δεδομένων στις ιδιοσυναρτήσεις

$$A_{0,n}^\varepsilon = (\psi_0^\varepsilon, u_n^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R})}$$

Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα (2.29) της κυματοσυνάρτησης στον ορισμό του μετασχηματισμού Wigner

$$W^\varepsilon(x, k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik\sigma} \psi^\varepsilon\left(x + \frac{\varepsilon\sigma}{2}, t\right) \overline{\psi^\varepsilon\left(x - \frac{\varepsilon\sigma}{2}, t\right)} d\sigma,$$

και χρησιμοποιώντας τον ορισμό των ιδιοσυναρτήσεων Moyal, καταλήγουμε στο αντίστοιχο ανάπτυγμα της συνάρτησης Wigner ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις Moyal Φ_{nm}^ε , το οποίο έχει τη μορφή

$$(2.30) \quad \begin{aligned} W^\varepsilon(x, k, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} A_{nm}^\varepsilon(t) \Phi_{nm}^\varepsilon(x, k) \\ A_{nm}^\varepsilon(t) &= \frac{(W_0^\varepsilon, \Phi_{nm}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)}}{\|\Phi_{nm}^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2} e^{-i \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} t} = \varepsilon (W_0^\varepsilon, \Phi_{nm}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)} e^{-i \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} t} \end{aligned}$$

Από τον υπολογισμό αυτό προκύπτει ότι οι συντελεστές το αναπτύγματος (2.30) συνδέονται με τους συντελεστές του (2.29) με τη σχέση

$$A_{nm}^\varepsilon(t) = A_{0,n}^\varepsilon \overline{A_{0,m}^\varepsilon} e^{-i \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} t}.$$

2.4.1 Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της σειράς ιδιοσυναρτήσεων

Στην παράγραφο αυτή κατασκευάζουμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για τη λύση $W^\varepsilon(x, k, t)$ του προβλήματος αρχικών τιμών (2.28), χρησιμοποιώντας τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα των ιδιοσυναρτήσεων Moyal Φ_{nm}^ε , και αναπτύγματα των συντελεστών $A_{nm}^\varepsilon(t)$ κοντά στα αντίστοιχα μεγέθη για τον αρμονικό ταλαντωτή.

Κατ' αρχήν με χρήση της αλλαγής μεταβλητής

$$[U_{\varepsilon,(xk)}f](x, k) := \varepsilon^{-1} f\left(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad k \in \mathbb{R}, \quad f \in L^2(\mathbb{R}^2),$$

έχουμε

$$\varepsilon(W_0^\varepsilon, \Phi_{nm}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)} = \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], [U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} \Phi_{nm}^\varepsilon] \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)},$$

και χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα (2.25) οι συντελεστές $A_{nm}^\varepsilon(t)$ προσεγγίζονται ως εξής

$$A_{nm}^\varepsilon(t) \sim \left[\left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \Psi_{nm} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{j}{2}} \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \tilde{Z}_{nm}^{(j)} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} \right] e^{-i \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} t}$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιώντας το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα (2.2) των ιδιοτιμών E_n^ε κοντά στις αντίστοιχες ιδιοτιμές e_n του αρμονικού ταλαντωτή, έχουμε

$$\frac{2(E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon)}{\varepsilon} \sim e_n - e_m + \sum_{l=1}^N \varepsilon^l (a_n^{(l)} - a_m^{(l)}) + O(\varepsilon^{N+1}),$$

και εξ' αυτής παίρνουμε το παρακάτω ανάπτυγμα των χρονικά ταλαντευόμενων εκθετικών όρων

$$e^{-i \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} t} \sim e^{-i \frac{e_n - e_m}{2} t} \left(1 + \varepsilon \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{j-1} \frac{(-it)^j}{j!} \left(\sum_{l=1}^N \varepsilon^{l-1} (a_n^{(l)} - a_m^{(l)}) + O(\varepsilon^N) \right)^j \right)$$

Συνδυάζοντας τα δύο τελευταία αναπτύγματα, οι συντελεστές προσεγγίζονται από το ανάπτυγμα

$$(2.31) \quad A_{nm}^\varepsilon(t) \sim A_{h,nm}^\varepsilon(t) + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{j}{2}} \Delta_{j,nm}^\varepsilon(t)$$

όπου

$$(2.32) \quad A_{h,nm}^\varepsilon(t) = \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \Psi_{nm} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} e^{-i\frac{\varepsilon n - \varepsilon m}{2}t} = \varepsilon (W_0^\varepsilon, \Psi_{nm}^\varepsilon)_{L^2(\mathbb{R}_{xk}^2)} e^{-i\frac{\varepsilon n - \varepsilon m}{2}t},$$

και

$$\Delta_{1,nm}^\varepsilon(t) = e^{-i\frac{\varepsilon n - \varepsilon m}{2}t} \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \tilde{Z}_{nm}^{(1)} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)},$$

$$\Delta_{2,nm}^\varepsilon(t) = e^{-i\frac{\varepsilon n - \varepsilon m}{2}t} \left[\left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \tilde{Z}_{nm}^{(2)} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} + (-it)(a_n^{(1)} - a_m^{(1)}) \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \Psi_{nm} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} \right],$$

$$\Delta_{3,nm}^\varepsilon(t) = e^{-i\frac{\varepsilon n - \varepsilon m}{2}t} \left[\left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \tilde{Z}_{nm}^{(3)} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} + (-it)(a_n^{(1)} - a_m^{(1)}) \left([U_{\varepsilon,(xk)}^{-1} W_0^\varepsilon], \tilde{Z}_{nm}^{(1)} \right)_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} \right].$$

κ.ο.κ

Αντικαθιστώντας τις προσεγγίσεις (2.31) και (2.14) των συντελεστών $A_{nm}^\varepsilon(t)$ και των ιδιοσυναρτήσεων Φ_{nm}^ε , αντίστοιχα, στο ανάπτυγμα ιδιοσυναρτήσεων (2.30), παίρνουμε το ακόλουθο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για την $W^\varepsilon(x, k, t)$

$$(2.33) \quad W^\varepsilon(x, k, t) \sim W_h^\varepsilon(x, k, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{l/2} Z^{\varepsilon,(l)}(x, k, t),$$

όπου

$$(2.34) \quad W_h^\varepsilon(x, k, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} A_{h,nm}^\varepsilon(t) \Psi_{nm}^\varepsilon(x, k),$$

είναι η λύση του προβλήματος αρχικών τιμών

$$(2.35) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W_h^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}_h W_h^\varepsilon(x, k, t) &= 0, (x, k) \in \mathbb{R}^2, t > 0, \\ W_h^\varepsilon(x, k, t)|_{t=0} &= W_0^\varepsilon(x, k) \end{aligned}$$

με

$$\mathcal{L}_h = k \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial k}$$

Το πρόβλημα (2.35) αφορά την εξέλιξη της συνάρτησης Wigner για τον αντίστοιχο αρμονικό ταλαντωτή, με αρχικά δεδομένα τα πλήρη αρχικά δεδομένα $W_0^\varepsilon(x, k)$.

2.4.2 Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα κοντά στη λύση αρμονικού ταλαντωτή

Έχοντας υπό όψιν την παραπάνω ‘αρμονική’ προσέγγιση, που προέκυψε από την ασυμπτωτική ανάλυση της σειράς ιδιοσυναρτήσεων για την $W^\varepsilon(x, k, t)$, θεωρούμε, ανεξάρτητα πλέον από την εξίσωση Schrödinger, το παρακάτω υποκατάστατο (ansatz), ως προσέγγιση της χρονοεξαρτώμενης συνάρτησης Wigner $W^\varepsilon(x, k, t)$,

$$(2.36) \quad W^\varepsilon(x, k, t) \sim W_h^\varepsilon(x, k, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{l/2} Z^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) ,$$

όπου ο ‘πρώτος’ όρος $W_h^\varepsilon(x, k, t)$ ικανοποιεί το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.35), που αντιστοιχεί στον αρμονικό ταλαντωτή. Στη συνέχεια θα αναφερόμαστε στο υποκατάστατο (2.36), με τον όρο ‘αρμονική προσέγγιση της συνάρτησης Wigner’.

Για να χρησιμοποιήσουμε την αρμονική προσέγγιση και να κατασκευάσουμε εξισώσεις για τον υπολογισμό των $Z^{\varepsilon, (l)}$, αλλάζουμε τις μεταβλητές σε (ξ, η) όπως στην Παράγραφο 2.2, και θέτοντας $\tilde{f}(\xi, \eta, t) = [U_{\varepsilon, (xk)}^{-1} f](\xi, \eta, t)$, το ανάπτυγμα (2.36) γράφεται ισοδύναμα

$$(2.37) \quad \widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) \sim \widetilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{l/2} \widetilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) .$$

Στις νέες μεταβλητές η κβαντική εξίσωση Liouville γίνεται

$$(2.38) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) + \widetilde{L}^\varepsilon \widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) = 0 \\ \widetilde{W}^\varepsilon(x, k, t)|_{t=0} = \widetilde{W}_0^\varepsilon(x, k) . \end{cases}$$

Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα (2.37) για την $\widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t)$ και το ανάπτυγμα L^ε στην θέση του $\widetilde{L}^\varepsilon$ (2.23) στην εξίσωση (2.38), και εξισώνοντας τους συντελεστές των δυνάμεων του ε , καταλήγουμε στην ακόλουθη ιεραρχία προβλημάτων αρχικών τιμών για τις $\widetilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t)$ και $\widetilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t)$, $l \geq 1$.

$$(2.39) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \widetilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) + L_h \widetilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) = 0 \\ \widetilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t)|_{t=0} = \widetilde{W}_0^\varepsilon(\xi, \eta) , \end{cases}$$

$$(2.40) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) + L_h \tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) = D^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t), \quad l \geq 1 \\ \tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t)|_{t=0} = 0, \end{cases}$$

όπου

$$D^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) = -\mathcal{B}_l(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) \tilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) - \sum_{\nu=1}^{l-1} \mathcal{B}_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}) \tilde{Z}^{\varepsilon, (l-\nu)}(\xi, \eta, t)$$

Παρατήρηση. Τα αρχικά δεδομένα έχουν ‘φορτωθεί’ εξ’ ολοκλήρου στο πρόβλημα μηδενικής τάξης για το W_h^ε , οπότε όλα τα επόμενα προβλήματα θα έχουν μηδενικά αρχικά δεδομένα. Με αυτή επιλογή αποφεύγουμε να αναπτύξουμε τα αρχικά δεδομένα \tilde{W}_0^ε ως προς την μικρή παράμετρο ε , επιλογή η οποία για WKB αρχικά δεδομένα ψ_0^ε , θα οδηγούσε σε ανάπτυγμα με συντελεστές κατανομές (συγκεκριμένα συναρτήσεις Dirac, βλ. [68]). Άμεση συνέπεια αυτής της επιλογής, είναι ότι οι συντελεστές $\tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}$ θα εξαρτώνται από το ε , και έτσι το ανάπτυγμα δεν είναι ένα ‘καθαρό’ ημι-κλασσικό ανάπτυγμα ([60]).

Για την επίλυση των παραπάνω προβλημάτων αρκεί να παρατηρήσουμε ότι ένα πρόβλημα αρχικών τιμών για τον τελεστή $\frac{\partial}{\partial t} + L_h$ μπορεί να ολοκληρωθεί εφαρμόζοντας την μέθοδο των χαρακτηριστικών, δηλαδή κάθε πρόβλημα της μορφής

$$(2.41) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f(\xi, \eta, t) + L_h f(\xi, \eta, t) = g(\xi, \eta, t) \\ f(\xi, \eta, t)|_{t=0} = f_0(\xi, \eta) \end{cases}$$

έχει λύση

$$(2.42) \quad f(\xi, \eta, t) = f_0(g_h^{-t}(\xi, \eta)) + \int_0^t g(g_h^{-(t-s)}(\xi, \eta), s) ds$$

όπου $g_h^t(q, p)$ είναι η Χαμιλτωνιανή ροή του αρμονικό ταλαντωτή, η λύση δηλαδή του Χαμιλτωνιανού συστήματος

$$\frac{d\xi}{dt} = \eta, \quad \frac{d\eta}{dt} = -\xi,$$

με αρχικές συνθήκες

$$\xi(t=0; q, p) = q, \quad \eta(t=0; q, p) = p,$$

οπότε

$$g_h^t(q, p) = (g_{h,1}^t(q, p), g_{h,2}^t(q, p)) = (\xi(q, p, t) = q \cos(t) + p \sin(t), \eta(q, p, t) = p \cos(t) - q \sin(t)) ,$$

και

$$(2.43) \quad \begin{aligned} g_h^{-t}(\xi, \eta) &= (g_{h,1}^{-t}(\xi, \eta), g_{h,2}^{-t}(\xi, \eta)) \\ &= (q(\xi, \eta, t) := \xi \cos(t) - \eta \sin(t), p(\xi, \eta, t) := \eta \cos(t) + \xi \sin(t)) \end{aligned}$$

Επομένως οι λύσεις των προβλημάτων (2.39) και (2.40) δίνονται από τις σχέσεις

$$(2.44) \quad W_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) = W_0^\varepsilon(q(\xi, \eta, t), p(\xi, \eta, t))$$

και

$$(2.45) \quad \tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) = \int_0^t D^{\varepsilon, (l)}(q(\xi, \eta, t-s), p(\xi, \eta, t-s)), s) ds$$

Παρατήρηση. Η εξάρτηση των συναρτήσεων συντελεστών $\tilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t)$, $\tilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t)$ από το ε , προέρχεται αποκλειστικά από τα ε -εξαρτώμενα αρχικά δεδομένα W_0^ε .

2.4.3 Εκτιμήσεις σφάλματος για την ‘αρμονική προσέγγιση’

Η ισχύς του αναπτύγματος (2.36) εξαρτάται ισχυρά από τις ιδιότητες του δυναμικού $V(x)$ και τα αρχικά δεδομένα W_0^ε . Για τα δυναμικά υποθέτουμε ότι ισχύουν οι (2.2). Όσον αφορά τα αρχικά δεδομένα θα θεωρήσουμε δύο περιπτώσεις, προκειμένου να καταστήσουμε εμφανή τη δυσκολία που ανακύπτει από WKB αρχικά δεδομένα για την κυματοσυνάρτηση. Πρώτον, εκείνα τα οποία μετά τον μετασχηματισμό $U_{\varepsilon, xk}^{-1}$ είναι ανεξάρτητα από το ε , όπου αποδεικνύουμε την ισχύ του αναπτύγματος στην L^2 νόρμα. Δεύτερον, εκείνα τα οποία προκύπτουν από τον μετασχηματισμό Wigner συγκεκριμένων WKB αρχικών δεδομένων, όπου αποδεικνύουμε εκτίμηση του υπολοίπου σε μια L^2 νόρμα με κατάλληλο βάρος.

Η ιδέα της απόδειξης των θεωρημάτων που ακολουθούν είναι βασισμένη στην τεχνική που χρησιμοποιούν οι Bouzouina & Robert [14], όπου αποδεικνύουν εκτίμηση του υπολοίπου στην L^2 νόρμα τελεστών, για το ημικλασσικό ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της εξέλιξης χβαντικά παρατηρήσιμων ποσοτήτων $\hat{A}(t)$, για C^∞ Χαμιλτωνιανές που αυξάνουν το πολύ τετραγωνικά στο άπειρο, και σύμβολο $A(x, k, t)$ που επιδέχεται, ως προς ε , κανονικό ασυμπτωτικό ανάπτυγμα $A(x, k, t) \sim A_0(x, k, t) + \sum_{j \geq 1} \varepsilon^j A_j(x, k, t)$.

Θεώρημα 2.2. Έστω $\widetilde{W}^\varepsilon$ λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (2.38) με αρχικά δεδομένα $\widetilde{f}_0(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ ανεξάρτητα από την παράμετρο ε . Τότε, για κάθε φυσικό N ,

$$\widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) = \sum_{l=0}^N \varepsilon^{l/2} \widetilde{Z}^{(l)}(\xi, \eta, t) + R^{N+1}(\xi, \eta, t)$$

όπου οι $\widetilde{Z}^{(l)}$ δίνονται από τις σχέσεις (2.45). Επιπλέον ισχύει το παρακάτω φράγμα για το υπόλοιπο

$$\|R^{N+1}(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{\xi\eta}^2)} \leq C_N e^{t\varepsilon^{(N+1)/2}}.$$

Μια ενδιαφέρουσα εφαρμογή του Θεωρήματος αυτού είναι η περίπτωση που τα αρχικά δεδομένα $\widetilde{f}_0(\xi, \eta)$ προέρχονται από μια συνοχική (coherent) αρχική κυματοσυνάρτηση

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \left(\frac{1}{\pi\varepsilon}\right)^{1/4} e^{\frac{ik_0x}{\varepsilon}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\varepsilon}},$$

οπότε ο μετασχηματισμός Wigner τους είναι

$$\widetilde{f}_0(\xi, \eta) = [U^{-1}W_0^\varepsilon](\xi, \eta) = \frac{1}{\pi} e^{-(\xi-\xi_0)^2} e^{-(\eta-\eta_0)^2},$$

όπου $\xi_0 = \frac{x_0}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\eta_0 = \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon}}$. Παρατηρούμε ότι η $\widetilde{f}_0(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, και είναι ανεξάρτητη της παραμέτρου ε .

Αντίστοιχο αποτέλεσμα ισχύει και στην περίπτωση που η αρχική κυματοσυνάρτηση $\psi_0^\varepsilon(x) \in L^2(\mathbb{R})$ είναι WKB μορφής $\psi_0^\varepsilon(x) = \alpha_0(x) e^{i\frac{S_0(x)}{\varepsilon}}$, αλλά επειδή τα αρχικά δεδομένα $\widetilde{f}_0(\xi, \eta) = \widetilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta)$ εξαρτώνται από το ε , μια L^2 εκτίμηση του σφάλματος οδηγεί σε αρνητικές δυνάμεις του ε , κάτι που είναι αναμενόμενο αφού το όριο καθώς το ε τείνει στο μηδέν του μετασχηματισμού Wigner μιας WKB κατάστασης είναι κατανομή Dirac. Για να εκτιμήσουμε το υπόλοιπο στην περίπτωση αυτή, επιλέγουμε μια L^2 νόρμα με συνάρτηση βάρους $r^\varepsilon(\xi, \eta) = e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{\varepsilon^2}}$ (Gaussian συνάρτηση συγκεντρωμένη στην αρχή των αξόνων με απόκλιση ε^2). Το επόμενο θεώρημα λοιπόν δίνει μια εκτίμηση του υπολοίπου για το ανάπτυγμα, σε μια L^2 νόρμα με βάρους για συγκεκριμένου τύπου αρχικά δεδομένα.

Θεώρημα 2.3. Έστω $\widetilde{W}^\varepsilon$ λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (2.38) με αρχικά δεδομένα $\widetilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) = [U^{-1}W_0^\varepsilon](\xi, \eta)$, όπου W_0^ε είναι ο μετασχηματισμός Wigner μιας WKB

αρχικής κυματοσυνάρτησης $\psi_0^\varepsilon(x) = \alpha_0(x)e^{i\frac{S_0(x)}{\varepsilon}}$, με

$$\alpha_0(x) = e^{-x^2/2}, \text{ και } S_0(x) = x^2/2 \text{ ή } S_0(x) = x.$$

Τότε, για κάθε φυσικό N ,

$$\widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) = \sum_{l=0}^N \varepsilon^{l/2} \widetilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t) + R^{\varepsilon, N+1}(\xi, \eta, t)$$

όπου οι $\widetilde{Z}^{\varepsilon, (l)}$ δίνονται από την σχέση (2.45). Επιπλέον ισχύει το παρακάτω φράγμα για το υπόλοιπο

$$\|R^{\varepsilon, N+1}(t)\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq C_N e^{t\varepsilon^{(N+1)/2}},$$

όπου $\|\cdot\|_{L_{r^\varepsilon}^2}$ συμβολίζει την $L_{r^\varepsilon}^2$ νόρμα,

$$\|f\|_{L_{r^\varepsilon}^2} = \left(\int_{\mathbb{R}^2} |f(\xi, \eta)|^2 r^\varepsilon(\xi, \eta) d\xi d\eta \right)^{1/2},$$

$$\text{με } r^\varepsilon(\xi, \eta) = e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{\varepsilon^2}}.$$

Στη συνέχεια θα συμβολίζουμε με $\|\cdot\|$ τις νόρμες $\|\cdot\|_{L_{r^\varepsilon}^2}$ ή $\|\cdot\|_{L^2}$ και θα τις γράφουμε πλήρως όπου χρειάζεται η διαφοροποίηση τους. Οι σταθερές C_N είναι της μορφής $N!N^\alpha$, $\alpha > 0$ (βλ. σχετικά και [14]).

Για την απόδειξη των Θεωρημάτων 2.2 και 2.3 θα χρειαστούμε τις παρακάτω προτάσεις/λήμματα.

Λήμμα 2.1. (Τύπος Faà di Bruno [18], [14]).

Έστω $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ αρκετά ομαλές απεικονίσεις. Για κάθε δείκτη $\nu \in \mathbb{N}^2$ και $z = (\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2$,

$$\partial^\nu (f \circ g)(z) = \sum_{0 \neq |\gamma| \leq |\nu|, \gamma \in \mathbb{N}^2} [(\partial^\gamma f) \circ g](z) B_{\nu, \gamma}[\partial g](z)$$

όπου

$$B_{\nu, \gamma}[\partial g] = \nu! \sum_{\alpha_\beta} \prod_{\beta \neq 0} \frac{1}{\alpha_\beta!} \left(\frac{\partial^\beta g_1}{\beta!} \right)^{\alpha_{\beta_1}} \left(\frac{\partial^\beta g_2}{\beta!} \right)^{\alpha_{\beta_2}}$$

$$\mu \in \beta = (\beta_1, \beta_2), \quad \alpha_\beta = (\alpha_{\beta_1}, \alpha_{\beta_2})$$

$$\sum \alpha_{\beta_1} = \gamma_1, \quad \sum \alpha_{\beta_2} = \gamma_2, \quad \sum \beta_1 \alpha_{\beta_1} = \nu_1, \quad \sum \beta_2 \alpha_{\beta_2} = \nu_2.$$

Λήμμα 2.2. Για την Χαμιλτωνιανή ροή του αρμονικού ταλαντωτή $g_h^t = g_h^t(\xi, \eta)$, και για κάθε (ξ, η, t) ισχύουν

$$i) \quad |\partial_\eta g_{h,i}^{\pm t}| \leq 1, \quad |\partial_\xi g_{h,i}^{\pm t}| \leq 1, \\ \partial_\eta^\nu g_{h,i}^{\pm t} = \mathbb{O}_{\nu \times \nu}, \quad \partial_\xi^\nu g_{h,i}^{\pm t} = \mathbb{O}_{\nu \times \nu}, \quad i = 1, 2, \quad \nu = 2, 3, \dots$$

όπου $\mathbb{O}_{\nu \times \nu}$ συμβολίζει τον μηδενικό $\nu \times \nu$ πίνακα.

$$ii) \quad |g_{h,i}^{\pm t}(\xi, \eta)|^\nu \leq (|\xi| + |\eta|)^\nu, \quad i = 1, 2, \quad \nu = 1, 2, \dots$$

iii)

$$|B_{\nu,\gamma} [\partial g_h^{-t}]| \leq C_{\nu,\gamma}$$

όπου $B_{\nu,\gamma}$ εμφανίζεται στο προηγούμενο Λήμμα.

iv) Για κάθε $f(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$

$$\|f(g_h^{-t})\| = \|f\|$$

Λήμμα 2.3. 1. Για κάθε $\tilde{f}_0(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ και για κάθε $m \geq 1$ ισχύει

$$\|(|\xi| + |\eta|)^m \partial^\beta \tilde{f}_0\|_{L^2} \leq C_{m,\beta}$$

2. Για $\tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta)$ όπως στο Θεώρημα 2.3 ισχύει

$$\|(|\xi| + |\eta|)^m \partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq \varepsilon^{m+1} C_\beta$$

όπου $\beta = (\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{N}^2$, $\partial^\beta f = \partial_\xi^{\beta_1} \partial_\eta^{\beta_2} f$

Απόδειξη

Το πρώτο μέρος του Λήμματος είναι άμεσο αφού $\tilde{f}_0(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$.

Για την απόδειξη του δεύτερου μέρους, χρησιμοποιούμε την αναλυτική μορφή των αρχικών δεδομένων $\tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta)$, για $\alpha_0(x) = e^{-x^2/2}$ και $S_0(x) = x^2/2$. Η περίπτωση με $S_0(x) = x$ αποδεικνύεται ανάλογα. Ο μετασχηματισμός Wigner δίνεται από τη σχέση

$$\tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) = \frac{1}{\pi} e^{-\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{(\eta-\xi)^2}{\varepsilon}}$$

Αν $\beta = (\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{N}^2$, $\beta \neq 0$ τότε

$$\partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) = (\sqrt{\varepsilon})^{-|\beta|} \frac{(-2i)^{\beta_2} 2^{-|\beta|} e^{i|\beta|\pi/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{(\eta-\xi)^2}{\varepsilon}} \sum_{j=0}^{\beta_1} \binom{\beta_1}{j} (-2)^j e^{-ij\pi/2} H_j(\sqrt{\varepsilon}\xi) H_{|\beta|-j}\left(\frac{\eta-\xi}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$$

όπου H_j είναι οι συναρτήσεις Hermite.

Ο όρος που επικρατεί για μικρές τιμές του ε στην $\partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta)$ είναι

$$G_\beta^\varepsilon(\xi, \eta) = \varepsilon^{-|\beta|} c_\beta e^{-\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{(\eta-\xi)^2}{\varepsilon}} (\eta - \xi)^{|\beta|},$$

με $c_\beta = (-2i)^{\beta_2} 2^{-|\beta|} e^{i|\beta|\pi/2} / \sqrt{\pi}$.

Επομένως αρκεί να αποδείξουμε ένα φράγμα για τον όρο $(|\xi| + |\eta|)^m G_\beta^\varepsilon$, αφού

$$\|(|\xi| + |\eta|)^m \partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq \sum_{j=1}^m \| |\xi|^j |\eta|^{m-j} \partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon \|_{L_{r^\varepsilon}^2} \sim \sum_{j=1}^m \| |\xi|^j |\eta|^{m-j} G_\beta^\varepsilon \|_{L_{r^\varepsilon}^2}$$

και

$$\begin{aligned} \| |\xi|^j |\eta|^{m-j} G_\beta^\varepsilon \|_{L_{r^\varepsilon}^2}^2 &= c_\beta^2 \varepsilon^{-2|\beta|} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |\xi|^{2j} |\eta|^{2(m-j)} (\eta - \xi)^{2|\beta|} e^{-2\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{2(\eta-\xi)^2}{\varepsilon}} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{\varepsilon}} d\xi d\eta \\ &= c_\beta^2 \varepsilon^{-2|\beta| + 2|\beta| + 2m + 2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |\xi|^{2j} |\eta|^{2(m-j)} (\eta - \xi)^{2|\beta|} e^{-2\varepsilon^3\xi^2} e^{-2\varepsilon(\eta-\xi)^2} e^{-(\xi^2 + \eta^2)} d\xi d\eta = \varepsilon^{2m+2} c_\beta^2 \varepsilon^\varepsilon \end{aligned}$$

όπου $c^\varepsilon \rightarrow c \leq \infty$, καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$.

Επομένως αποδείξαμε το ζητούμενο

$$\|(|\xi| + |\eta|)^m \partial^\beta \tilde{f}_0^\varepsilon\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq \varepsilon^{m+1} C_\beta$$

■

Πρόταση 2.1. 1. Για κάθε $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ και $\nu_j \in \mathbb{N}$, $j = 1, 2, \dots$ ισχύει

$$(2.46) \quad \|\mathcal{B}_{\nu_1} [\mathcal{B}_{\nu_2} [\dots \mathcal{B}_{\nu_j} [f(g_h^{-t_{j+1}})] \dots] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1)\|_{L^2} \leq C_{\nu_1, \dots, \nu_j}$$

2. Για $\tilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta)$ όπως στο Θεώρημα 2.3, και $\nu_j \in \mathbb{N}$, $j = 1, 2, \dots$ ισχύει

$$(2.47) \quad \|\mathcal{B}_{\nu_1} [\mathcal{B}_{\nu_2} [\dots \mathcal{B}_{\nu_j} [f(g_h^{-t_{j+1}})] \dots] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1)\|_{L_{r,\varepsilon}^2} \leq C_{\nu_1, \dots, \nu_j}$$

Απόδειξη

Υπενθυμίζουμε ότι οι τελεστές \mathcal{B}_{ν_j} δίνονται από τη σχέση

$$\mathcal{B}_{\nu_j} = -V^{(\nu_j+2)}(0) \sum_{\lambda_j=0}^{[(\nu_j-1)/2]+1} c_{\lambda_j, \nu_j} \xi^{\nu_j+1-2\lambda_j} \frac{\partial^{(2\lambda_j+1)}}{\partial \eta^{2\lambda_j+1}},$$

$$\text{με } c_{\lambda_j, \nu_j} = \left(\frac{i}{2}\right)^{2\lambda_j} \frac{1}{(2\lambda_j+1)!(\nu_j+1-2\lambda_j)!}$$

Από το Λήμμα 2.2(iv) το αριστερό μέλος των (2.46), (2.47) είναι ίσο με

$$\|\mathcal{B}_{\nu_1} [\mathcal{B}_{\nu_2} [\dots \mathcal{B}_{\nu_j} [f(g_h^{-t_{j+1}})] \dots] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] \|,$$

και επομένως αρκεί να εκτιμήσουμε αυτή την ποσότητα.

Αρχικά αποδεικνύουμε την (2.46) για κάθε j , δίνοντας με λεπτομέρεια τις περιπτώσεις $j = 1$ και $j = 2$.

Για $j = 1$ έχουμε,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{B}_{\nu_1} [f(g_h^{-t_1})]\|_{L^2} &\leq |V^{(\nu_1+2)}(0)| \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} \|\xi^{\nu_1+1-2\lambda_1} \frac{\partial^{(2\lambda_1+1)}}{\partial \eta^{2\lambda_1+1}} f(g_h^{-t_1})\|_{L^2} \\ &\leq \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} \sum_{0 \neq |\gamma| \leq \nu_1} C'_{\nu_1, \gamma} \|\xi^{\nu_1+1-2\lambda_1} [(\partial^\gamma f) \circ g_h^{-t}](z) |B_{\nu_1, \gamma} [\partial g_h^{-t}]|\|_{L^2} \\ &\leq \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} \sum_{0 \neq |\gamma| \leq \nu_1} C_{\nu_1, \gamma} \|(g_{h,1}^{-t})^{\nu_1+1-2\lambda_1} \partial^\gamma f(z)\|_{L^2} \\ &= \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} \sum_{0 \neq |\gamma| \leq \nu} C_{\nu_1, \gamma} \|(|\xi| + |\eta|)^{\nu_1+1-2\lambda_1} \partial^\gamma f(z)\|_{L^2} \end{aligned}$$

όπου στο πρώτο βήμα χρησιμοποιήσαμε τον τύπο Faa di Bruno, και στα δύο επόμενα το Λήμμα 2.2(ii),(iii).

Από το πρώτο μέρος του Λήμματος 2.3 κάθε όρος $\|(|\xi| + |\eta|)^{\nu_1+1-2\lambda_1} (\partial^\gamma f(z))\|_{L^2} \leq C_{\lambda_1, \nu_1, \gamma}$, επομένως

$$\|\mathcal{B}_{\nu_1} [f(g_h^{-t_1})]\|_{L^2} \leq |V^{(\nu_1+2)}(0)| \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} C_{\lambda_1, \nu_1} \leq C_{\nu_1} ,$$

δηλαδή ισχύει η (2.46) για $j = 1$.

Για $j = 2$,

$$\begin{aligned} & \|\mathcal{B}_{\nu_1} [\mathcal{B}_{\nu_2} [f(g_h^{-t_2})] (g_h^{-(t_1-t_2)})]\| \leq \\ & \leq |V^{(\nu_1+2)}(0)| \sum_{\lambda_j=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} \sum_{|\beta^1| \leq 2\lambda_1+1} c_{\beta} \|(|\xi| + |\eta|)^{\nu_1+1-2\lambda_1} \partial^\beta [\mathcal{B}_{\nu_2} [f(g_h^{-t_2})]]\| \\ & \leq |V^{(\nu_1+2)}(0)| |V^{(\nu_2+2)}(0)| \sum_{\lambda_1=0}^{[(\nu_1-1)/2]+1} \sum_{\lambda_2=0}^{[(\nu_2-1)/2]+1} c_{\lambda_1, \nu_1} c_{\lambda_2, \nu_2} \\ & \quad \sum_{|\beta^1| \leq 2\lambda_1+1} c_{\beta} \|(|\xi| + |\eta|)^{\nu_1+1-2\lambda_1} \partial^\beta [\xi^{\nu_2+1-2\lambda_2} \partial_\eta^{2\lambda_2+1} [f(g_h^{-t_2})]]\| \\ & \leq \prod_{i=1,2} |V^{(\nu_i+2)}(0)| \sum_{\lambda_1=0}^{\nu_1^\ell} \sum_{\lambda_2=0}^{\nu_2^\ell} \sum_{|\beta^1| \leq u^1} \sum_{\alpha_1=0}^{\beta_1} \sum_{|\beta^2| \leq u^2} C(\nu_1, \nu_2, \lambda_1, \beta^1, \beta^2, \alpha_1) \|(|\xi| + |\eta|)^{\gamma_1} \partial^{\beta^2} f\| \end{aligned}$$

όπου

$$\nu_i^\ell = [(\nu_i - 1)/2] + 1, \quad \beta^i \in \mathbb{N}^2, \quad u^1 = \lambda_1 + 1, \quad u^2 = (\beta_1^1 - \alpha_1, \beta_2^1 + \lambda_2 + 1) ,$$

και

$$\gamma_1 = \nu_1 + \nu_2 + 2 - 2\lambda_1 - 2\lambda_2 - \alpha_1 ,$$

και επομένως

$$\|\mathcal{B}_{\nu_1} [\mathcal{B}_{\nu_2} [f(g_h^{-t_2})] (g_h^{-(t_1-t_2)})]\|_{L^2} \leq C_{\nu_1, \nu_2} .$$

Αντίστοιχα αποδεικνύεται η γενική περίπτωση για κάθε $j \geq 3$, εφαρμόζοντας διαδοχικά τον τύπο Faa di Bruno, τον τύπο Leibniz και το Λήμμα 2.2, οπότε

(2.48)

$$\begin{aligned} & \|\mathcal{B}_{\nu_1} \left[\mathcal{B}_{\nu_2} \left[\dots \mathcal{B}_{\nu_j} \left[f(g_h^{-t_{j+1}}) \right] \dots \right] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2) \right] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \|_{L^2} \leq \\ & \leq \prod_{i=1}^j |V^{(\nu_i+2)}(0)| \sum_{\lambda_1=0}^{\nu_1^\ell} \sum_{|\beta^1| \leq u^1} \dots \sum_{\lambda_j=0}^{\nu_j^\ell} \sum_{\alpha_{j-1}} \sum_{|\beta^j| \leq u^j} C(\nu_i, \lambda_i, \beta^i, \alpha_i) \|(|\xi| + |\eta|)^{\gamma_{j-1}} \partial^{\beta^j} f\|_{L^2} \leq C_{\nu_1, \dots, \nu_j} \end{aligned}$$

με

$$\nu_i^\ell = [(\nu_i - 1)/2] + 1, \quad \beta^i \in \mathbb{N}^2,$$

και

$$\gamma_i = \sum_{k=1}^i (\nu_k + 1 - 2\lambda_k) - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_k.$$

Για την απόδειξη του δεύτερου μέρους ακολουθούμε την ίδια διαδικασία με την προηγούμενη, χρησιμοποιώντας το δεύτερο μέρος του Λήμματος 2.3 αντί του πρώτου, όπου χρειαζόμαστε φράγμα για κάθε όρο $\|(|\xi| + |\eta|)^{\gamma_{j-1}} \partial^{\beta^j} f\|_{L_{r,\varepsilon}^2}$, δηλαδή $\|(|\xi| + |\eta|)^{\gamma_{j-1}} \partial^{\beta^j} f\|_{L_{r,\varepsilon}^2} \leq \varepsilon^{\gamma_{j-1}+1} C_{\beta^j}$. Αυτή η εκτίμηση και το γεγονός ότι το γ_{j-1} στην έκφραση (2.48) δεν παίρνει αρνητικές τιμές, δίνουν

$$\|\mathcal{B}_{\nu_1} \left[\mathcal{B}_{\nu_2} \left[\dots \mathcal{B}_{\nu_j} \left[f(g_h^{-t_{j+1}}) \right] \dots \right] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2) \right] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \|_{L_{r,\varepsilon}^2} \leq C_{\nu_1, \dots, \nu_j} \quad \blacksquare$$

Συνδυάζοντας τις παραπάνω προτάσεις/λήμματα δίνουμε στην συνέχεια τις αποδείξεις των Θεωρημάτων 2.2 και 2.3.

Απόδειξη του Θεωρήματος 2.2

Το σφάλμα τάξης $N + 1$ στο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα είναι

$$R^{N+1}(\xi, \eta, t) := \widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t) - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{l/2} \widetilde{Z}^{\varepsilon, (l)}(\xi, \eta, t), \quad N = 0, 1, \dots$$

Για κάθε N , το $R^{N+1}(\xi, \eta, t)$ είναι λύση του προβλήματος αρχικών τιμών

$$(2.49) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} R^{N+1}(\xi, \eta, t) + L_h R^{N+1}(\xi, \eta, t) = - \sum_{\nu=1}^{N+1} \mathcal{B}_\nu [R^{N+1-\nu}] (\xi, \eta, t) \\ R^{N+1}(\xi, \eta, t)|_{t=0} = 0 \end{cases}$$

όπου $R^0 = \widetilde{W}_h^\varepsilon$, $\mathcal{B}_\nu := \mathcal{B}_\nu(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta})$.

Σύμφωνα με την αρχή Dunhamel η λύση του προβλήματος (2.49), δίνεται από τη σχέση

$$R^{N+1}(\xi, \eta, t) = - \int_0^t \sum_{\nu=1}^{N+1} \varepsilon^{\nu/2} \mathcal{B}_\nu [R^{N+1-\nu}] (g_h^{-(t-s)}(\xi, \eta), s) ds, \quad N = 0, 1, \dots$$

Εφαρμόζοντας την παραπάνω σχέση αναδρομικά για κάθε $R^{N+1-\nu}$ προκύπτει

$$\begin{aligned} R^{N+1}(\xi, \eta, t) &= \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} \left\{ - \int_0^t dt_1 \mathcal{B}_{N+1} [\tilde{f}_0(g_h^{-t_1})] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \right. \\ &+ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{B}_N [\mathcal{B}_1 [\tilde{f}_0(g_h^{-t_2})] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \\ &+ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{B}_{N-1} [\mathcal{B}_2 [\tilde{f}_0(g_h^{-t_2})] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) dt_1 dt_2 \\ &- \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \mathcal{B}_{N-1} [\mathcal{B}_1 [\mathcal{B}_1 [\tilde{f}_0(g_h^{-t_3})] (g_h^{-(t_2-t_3)}, t_3)] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \\ &+ \dots \\ &\left. + (-1)^N \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_N} dt_{N+1} \mathcal{B}_1 [\mathcal{B}_1 [\dots \mathcal{B}_1 [\tilde{f}_0(g_h^{-t_{N+1}})] \dots]] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1) \right\} \end{aligned}$$

όπου $\tilde{f}_0(\xi, \eta)$ είναι τα αρχικά δεδομένα του προβλήματος αρχικών τιμών για την $\widetilde{W}^\varepsilon(\xi, \eta, t)$.

Συνεπώς

$$\begin{aligned} \|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L^2} &\leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} \left\{ \int_0^t dt_1 \|\mathcal{B}_{N+1} [f_0(g_h^{-t_1})] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1)\|_{L^2} \right. \\ &+ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \|\mathcal{B}_N [\mathcal{B}_1 [f_0(g_h^{-t_2})] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1)\|_{L^2} \\ &+ \dots \\ &\left. + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_N} dt_{N+1} \|\mathcal{B}_1 [\mathcal{B}_1 [\dots \mathcal{B}_1 [f_0(g_h^{-t_{N+1}})] \dots]] (g_h^{-(t_1-t_2)}, t_2)] (g_h^{-(t-t_1)}, t_1)\|_{L^2} \right\} \end{aligned}$$

Από την υπόθεση του Θεωρήματος η συνάρτηση $\tilde{f}_0(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ και είναι ανεξάρτητη από

την παράμετρο ε , επομένως μπορούμε να εφαρμόσουμε το πρώτο μέρος της Πρότασης 2.1 που θα μας δώσει ότι κάθε όρος του αθροίσματος στο δεξιό μέλος της ανισότητας είναι φραγμένος.

Έτσι σύμφωνα με την παραπάνω σχέση

$$\|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L^2} \leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} C_N \left\{ \int_0^t dt_1 + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 + \cdots + \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_N} dt_{N+1} \right\},$$

$$\eta \|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L^2} \leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} C_N \sum_{k=1}^{N+1} \frac{t^k}{k!},$$

$$\eta \|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L^2} \leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} C_N e^t.$$

■

Απόδειξη του Θεωρήματος 2.3

Για $\alpha_0(x) = e^{-x^2/2}$, και $S_0(x) = x^2/2$, έχουμε

$$\widetilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{(\eta-\xi)^2}{\varepsilon}},$$

ενώ για $S_0(x) = x$ έχουμε

$$\widetilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\varepsilon\xi^2} e^{-\frac{(\eta-1)^2}{\varepsilon}}.$$

Και στις δύο περιπτώσεις ισχύει $\widetilde{f}_0^\varepsilon(\xi, \eta) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, και επομένως ακολουθώντας τα βήματα της προηγούμενης απόδειξης και το εφαρμόζοντας το δεύτερο μέρος της Πρότασης 2.1 έχουμε

$$\|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} C_N \left\{ \int_0^t dt_1 + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 + \cdots + \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_N} dt_{N+1} \right\} \Rightarrow$$

$$\|R^{N+1}(\xi, \eta, t)\|_{L_{r^\varepsilon}^2} \leq \varepsilon^{\frac{N+1}{2}} C_N e^t$$

■

2.4.4 Ασυμπτωτικό ανάπτυγμα κοντά στη λύση της εξίσωσης Liouville

Υπενθυμίζουμε ότι ο τελεστής \mathcal{L}^ε αναπτύσσεται (βλ. 2.18)) γύρω από τον κλασσικό τελεστή Liouville

$$\mathcal{L}_c \equiv k \frac{\partial}{\partial x} - V'(x) \frac{\partial}{\partial k} ,$$

στη μορφή

$$\mathcal{L}^\varepsilon = \mathcal{L}_c - \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^{2j} \Theta_j(x, \frac{\partial}{\partial k}) ,$$

όπου

$$\Theta_j(x, \frac{\partial}{\partial k}) \equiv \left(\frac{i}{2}\right)^{2j} \frac{V^{(2j+1)}(x)}{(2j+1)!} \frac{\partial^{(2j+1)}}{\partial k^{2j+1}} .$$

Παρατηρώντας ότι καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, ο \mathcal{L}^ε ταυτίζεται με τον κλασσικό τελεστή \mathcal{L}_c , είναι φυσιολογικό λοιπόν να υποθέσουμε για την λύση της κβαντικής εξίσωσης Liouville, ένα ανάπτυγμα της μορφής

$$(2.50) \quad W^\varepsilon(x, k, t) \sim W_c^\varepsilon(x, k, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{2l} Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) .$$

Στη συνέχεια αναφερόμαστε στο ανάπτυγμα αυτό ως 'κλασσική προσέγγιση'.

Αντικαθιστώντας το (2.50) στην εξίσωση (1.26)

$$\frac{\partial}{\partial t} W^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}^\varepsilon W^\varepsilon(x, k, t) = 0 ,$$

και διαχωρίζοντας τις τάξεις του ε , βρίσκουμε εύκολα ότι ο συντελεστής $W_c^\varepsilon(x, k, t)$ ικανοποιεί το πρόβλημα

$$(2.51) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} W_c^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}_c W_c^\varepsilon(x, k, t) = 0 \\ W_c^\varepsilon(x, k, t)|_{t=0} = W_0^\varepsilon(x, k) , \end{cases}$$

και οι $Z_c^{\varepsilon, (l)}$ την ακολουθία προβλημάτων αρχικών τιμών

$$(2.52) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) + \mathcal{L}_c Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) = \Theta^{(l)}(x, k, t), \quad l \geq 1 \\ Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t)|_{t=0} = 0 \end{cases}$$

όπου

$$\Theta^{(l)}(x, k, t) = \sum_{j=1}^l \Theta_j(x, \frac{\partial}{\partial k}) Z_c^{\varepsilon, (l-j)}(x, k, t),$$

και $Z_c^{\varepsilon, (0)} = W_c^{\varepsilon}$.

Οι λύσεις των προβλημάτων (2.51) και (2.52), εφαρμόζοντας την μέθοδο των χαρακτηριστικών, γράφονται αναλυτικά στη μορφή

$$W_c^{\varepsilon}(x, k, t) = W_0^{\varepsilon}(q_V(x, k, -t), p_V(x, k, -t)) \quad (2.53)$$

$$Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) = \int_0^t \Theta^{(l)}(q_V(x, k, t-s), p_V(x, k, t-s), s) ds$$

όπου $q_V(x, k, t)$, $p_V(x, k, t)$ είναι οι λύσεις του Χαμιλτωνιανού συστήματος

$$\frac{dq_V}{dt} = p_V, \quad \frac{dp_V}{dt} = -V'(q_V) \quad (2.54)$$

$$q_V(0) = x, \quad p_V(0) = k.$$

Παρατήρηση 1 (επί της μορφής του ‘κλασσικού αναπτύγματος’).

α. Το ανάπτυγμα (2.50), το οποίο προτάθηκε για πρώτη φορά από τον Narcowich [60], δεν είναι ένα ημικλασσικό ανάπτυγμα διότι όλοι οι συντελεστές του εξαρτώνται από το ε , αφού τα αρχικά δεδομένα του προβλήματος (2.51) εξαρτώνται από το ε .

β. Το βασικό μορφολογικό χαρακτηριστικό αυτού του αναπτύγματος είναι ότι οδηγεί σε ασυμπτωτικές λύσεις της μορφής

$$W^{\varepsilon}(x, k, t) = W_c^{\varepsilon}(x, k, t) \left(1 + \sum_{\ell \geq 1} \varepsilon^{\ell} W_{\ell}^{\varepsilon}(x, k, t) \right).$$

γ. Καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, οι όροι του ασυμπτωτικού αναπτύγματος συγκεντρώνονται ‘κοντά’ στη σωστή Λαγκρανζιανή ‘πολλαπλότητα’ ($p_V(x, k, t) = S'_0(q_V(x, k, t))$) του προβλήματος, η οποία όμως μπορεί να έχει καυστικές, περίπτωση στην οποία ο πρώτος όρος $W_c^{\varepsilon}(x, k, t)$ συγκλίνει προς ένα ημικλασσικό μέτρο, αλλά δεν μπορεί να εκφραστεί ως κατανομή ως προς k .

Παρατήρηση 2 (επί της περιοχής εφαρμογής των αναπτυγμάτων).

Εκ του τρόπου κατασκευής τους, το ‘αρμονικό ανάπτυγμα’ αναμένεται να είναι σημειακά

ακριβές τουλάχιστον σε μία περιοχή εύρους $\sqrt{\varepsilon}$ γύρω από το πηγάδι δυναμικού, ενώ το ‘κλασσικό ανάπτυγμα’ κοντά στην Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα, και για σχετικά μικρούς χρόνους. Για το λόγο αυτό στο επόμενο παράδειγμα συγκρίνουμε τα δύο αναπτύγματα κοντά στο πηγάδι δυναμικού του μελετώμενου αναρμονικού ταλαντωτή.

2.5 Παράδειγμα: Αναρμονικός ταλαντωτής και καυστικές

Στο παράδειγμα αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τα δύο ασυμπτωτικά αναπτύγματα της συνάρτησης Wigner, για να υπολογίσουμε το πλάτος της κυματοσυνάρτησης ψ^ε που ικανοποιεί το ακόλουθο πρόβλημα

$$(2.55) \quad \begin{cases} i\varepsilon \frac{\partial \psi^\varepsilon}{\partial t} = \widehat{H} \psi^\varepsilon(x, t), & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ \psi^\varepsilon(x, 0) = \psi_0^\varepsilon(x) = a_0(x) e^{i \frac{S_0(x)}{\varepsilon}} \end{cases}$$

με αναρμονικό δυναμικό (quartic oscillator)

$$V(x) = x^2/2 + \mu x^4/4, \quad \mu > 0,$$

και WKB αρχικά δεδομένα (τύπου Gauss-Fresnel)

$$a_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad S_0(x) = \frac{x^2}{2}.$$

Η αντίστοιχη εξίσωση Wigner στον χώρο φάσεων

$$(2.56) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} W^\varepsilon(x, k, t) + \mathcal{L}^\varepsilon W^\varepsilon(x, k, t) = 0, & (x, k) \in \mathbb{R}^2, t > 0 \\ W^\varepsilon(x, k, t)|_{t=0} = W_0^\varepsilon(x, k) \end{cases}$$

όπου

$$\mathcal{L}^\varepsilon \equiv k \frac{\partial}{\partial x} - (x + \mu x^3) \frac{\partial}{\partial k} + \frac{\varepsilon^2}{4} \mu x \frac{\partial^3}{\partial k^3},$$

και αρχικά δεδομένα

$$W_0^\varepsilon(x, k) = \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-x^2} e^{-\frac{(k-x)^2}{\varepsilon^2}}.$$

τον μετασχηματισμό Wigner των αρχικών δεδομένων $\psi_0^\varepsilon(x)$.

Κατ' αρχήν θα υπολογίσουμε τις χαρακτηριστικές για τον αντίστοιχο αρμονικό ταλαντωτή (δυναμικό $V(x) = V_h(x) = x^2/2$), καθώς και τις χαρακτηριστικές του αναρμονικού μας ταλαντωτή.

Υπολογισμός χαρακτηριστικών και καυστικών

Οι χαρακτηριστικές του αρμονικού ταλαντωτή υπολογίζονται εύκολα από τη λύση του Χαμιλτωνιανού συστήματος

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k, & x(0) = q \\ \frac{dk}{dt} = -V'_h(x) = -x & k(0) = p \end{cases}$$

και δίνονται από τις εκφράσεις

$$(x_h, k_h) = g_h^t(q, p) = (q \cos(t) + p \sin(t), p \cos(t) - q \sin(t)),$$

οπότε οι αντίστροφες χαρακτηριστικές είναι

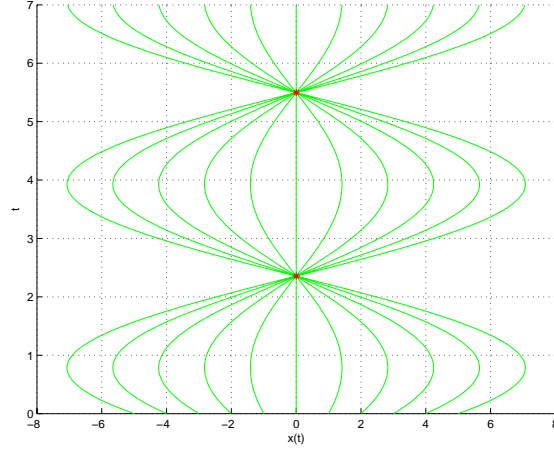
$$(q_h(x, k, t), p_h(x, k, t)) = g_h^{-t}(x, k) = (x \cos(t) - k \sin(t), k \cos(t) + x \sin(t)).$$

Θέτοντας $p = S'_0(q) = q$ παίρνουμε τις εξισώσεις των ακτίνων $\tilde{x}_h = \tilde{x}_h(t; q) = q(\cos(t) + \sin(t))$ και επιλύοντας την εξίσωση $J(q, t) = \frac{\partial \tilde{x}_h}{\partial q} = (\cos(t) + \sin(t)) = 0$ ως προς $q = q(t)$, βρίσκουμε τις καυστικές, οι οποίες για τον αρμονικό ταλαντωτή είναι μια οικογένεια εστιακών σημείων focal points (Σχήμα 2.1)

$$(x_\nu, t_\nu) = (0, \nu\pi - \frac{\pi}{4}), \quad \nu = 1, 2, \dots$$

Οι χαρακτηριστικές $(x_V, k_V) = g_V^t(q, p) = (x_V(q, p, t), k_V(q, p, t))$ του αναρμονικού ταλαντωτή προκύπτουν από την επίλυση του αντίστοιχου Χαμιλτωνιανού συστήματος, και δίνονται από τις σχέσεις

$$x_V(q, p, t) = A(q, p)sd(\Gamma(q, p)t + C(q, p), B(q, p)), \quad k_V(q, p, t) = \frac{\partial x_V}{\partial t}(q, p, t)$$



Σχήμα 2.1: Ακτίνες \mathcal{E} καυστική Αρμονικού ταλαντωτή $V_h(x) = x^2/2$

με

$$c(q, p) = p^2 + q^2 + \mu \frac{q^4}{2}$$

$$A(q, p) = \frac{\sqrt{c(q, p)}}{(2\mu c(q, p) + 1)^{1/4}}, \quad B^2(q, p) = \frac{\sqrt{2\mu c(q, p) + 1} - 1}{2\sqrt{2\mu c(q, p) + 1}},$$

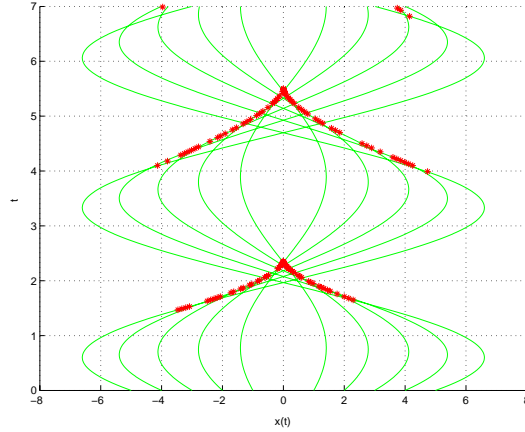
$$\Gamma(q, p) = (2\mu c(q, p) + 1)^{1/4}, \quad C(q, p) = sd^{-1}\left(\frac{q}{A(q, p)}, B(q, p)\right)$$

όπου $sd(a, b) = \frac{sn(a, b)}{dn(a, b)}$, και sn , dn είναι οι ελλειπτικές συναρτήσεις Jacobi.

Σ' αυτήν την περίπτωση δεν είναι δυστυχώς δυνατόν να υπολογίσουμε αναλυτικά την έκφραση για την καυστική. Έτσι, για τις ακτίνες $\tilde{x}_V = \tilde{x}_V(t; q) = x_V(q, p = S'_0(q), t)$ επιλύοντας αριθμητικά την εξίσωση $J(q, t) = \partial_q \tilde{x}_V = 0$ (για την οποία έχουμε αναλυτική έκφραση), παρατηρήσαμε ότι η καυστική είναι μια οικογένεια από cusps με κορυφές beaks στα εστιακά σημεία του αντίστοιχου αρμονικού ταλαντωτή (Σχήμα 2.2). Στη συνέχεια ελέγξαμε αυτή την παρατήρηση αναλυτικά δείχνοντας ότι τα εστιακά σημεία του αρμονικού ταλαντωτή μηδενίζουν την Ιακωβιανή του αναρμονικού ταλαντωτή.

Το γεγονός ότι οι εκφράσεις των χαρακτηριστικών για τον αναρμονικό ταλαντωτή είναι αρκετά πολύπλοκες καθιστά τον υπολογισμό των συντελεστών $Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t)$ αδύνατο. Ωστόσο είναι εφικτό, χρησιμοποιώντας κατάλληλη προσέγγιση των χαρακτηριστικών για μικρές τιμές της παραμέτρου σύζευξης μ , να υπολογίσουμε τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα της συνάρτησης Wigner $W^\varepsilon(x, k, t)$.

Εφαρμόζοντας την μέθοδο πολλαπλών κλιμάκων (multiple scale), με μικρή παράμετρο μ ,



Σχήμα 2.2: Ακτίνες & καυστική Αναρμονικού ταλαντωτή $V(x) = x^2/2 + \mu x^4/4$

στην συνήθη διαφορική εξίσωση $\ddot{x} + x + \mu x^3 = 0$, $x(0) = q$, $\dot{x}(0) = p$, η οποία είναι ισοδύναμη με το Χαμιλτωνιανό σύστημα του αναρμονικού ταλαντωτή ($\dot{x}(t) = k(t)$), παίρνουμε την ακόλουθη προσέγγιση των χαρακτηριστικών

$$\begin{aligned} x_a(q, p, t) &= q \cos(\omega t) + p \sin(\omega t) + O(\mu) \\ k_a(q, p, t) &= p \omega \cos(\omega t) - q \omega \sin(\omega t) + O(\mu) \\ \omega &= 1 + \frac{3}{8} \mu (q^2 + p^2) + O(\mu^2) \end{aligned}$$

και αντιστρέφοντας

$$\begin{aligned} q_a(x, k, t) &= x_a(x, k, -t) = x \cos(\omega t) - k \sin(\omega t) + O(\mu) \\ p_a(x, k, t) &= x_a(x, k, -t) = k \omega \cos(\omega t) + x \omega \sin(\omega t) + O(\mu) \\ \omega &= 1 + \frac{3}{8} \mu (x^2 + k^2) + O(\mu^2) \end{aligned}$$

Υπολογισμός πλάτους κυματοσυνάρτησης από τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα

Το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της $W^\varepsilon(x, k, t)$ γύρω από συναρτήσεις Wigner του αρμονικού ταλαντωτή έχει τη μορφή (βλ. παρ. 2.4.2) στις μεταβλητές (x, k) ,

$$W^\varepsilon(x, k, t) \sim W_h^\varepsilon(x, k, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^j Z^{\varepsilon, (2j)}(x, k, t)$$

όπου

$$\begin{aligned} W_h^\varepsilon(x, k, t) &= W_0^\varepsilon(q_h(x, k, t), p_h(x, k, t)) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-(x \cos(t) - k \sin(t))^2} e^{-\frac{(k(\cos(t) + \sin(t)) - x(\sin(t) - \cos(t)))^2}{\varepsilon^2}}. \end{aligned}$$

Ολοκληρώνοντας ως προς k , υπολογίζουμε τη συνεισφορά του πρώτου όρου W_h^ε στο πλάτος

$$(2.57) \quad |\psi_h^\varepsilon(x, t)|^2 = \int_{\mathbb{R}} W_h^\varepsilon(x, k, t) dk = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 \sin^2(t) + (\cos(t) + \sin(t))^2}} \times \exp\left(-x^2 \frac{(-2 \sin^2(t) + (\cos(t) + \sin(t))^2)^2}{\varepsilon^2 \sin^2(t) + (\cos(t) + \sin(t))^2}\right)$$

Πάνω στα εστιακά σημεία έχουμε

$$|\psi_h^\varepsilon(x = 0, t_\nu)|^2 = \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon}.$$

Στη συνέχεια, ο όρος $Z^{\varepsilon, (2)}(x, k, t)$ μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά είτε με τη μέθοδο των χαρακτηριστικών είτε αναπτύσσοντας ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις Moyal και υπολογίζοντας τους συντελεστές του αναπτύγματος (Παράρτημα A2), και δίνεται από τη μορφή

$$\begin{aligned} Z^{\varepsilon, (2)}(\xi, \eta, t) &= \mu W_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) \left(\frac{1}{\varepsilon^3} F_1(\xi, \eta, t) + \frac{1}{\varepsilon^2} F_2(\xi, \eta, t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\varepsilon} F_3(\xi, \eta, t) + F_4(\xi, \eta, t) + \varepsilon F_5(\xi, \eta, t) + \varepsilon^2 F_6(\xi, \eta, t) + \varepsilon^3 F_7(\xi, \eta, t) \right) \end{aligned}$$

όπου οι συναρτήσεις F_ν , $\nu = 1, \dots, 7$ δίνονται στο Παράρτημα A2.

Η συνεισφορά αυτού του όρου στο πλάτος $|\psi^\varepsilon|^2$ στα εστιακά σημεία υπολογίζεται αναλυτικά (Παράρτημα A2), και είναι

$$\varepsilon \int_{\mathbb{R}} Z^{\varepsilon, (2)}(0, k, t_\nu) dk = \varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{\mathbb{R}} Z^{\varepsilon, (2)}(0, \eta, t_\nu) d\eta = \sqrt{\varepsilon} \frac{\sqrt{2}}{\pi \varepsilon^{3/2}} \mu(\beta + \beta^\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}}{\pi \varepsilon} \mu(\beta + \beta^\varepsilon)$$

όπου

$$\beta = \frac{\pi}{8}(\nu - 1/4) - 3, \quad \beta^\varepsilon = \varepsilon \frac{17}{2} - \varepsilon^2 \left(\frac{3\pi}{16}(\nu - 1/4) + 3 \right).$$

Αναμένεται ότι και οι υπόλοιποι όροι του ασυμπτωτικού αναπτύγματος συνεισφέρουν στο πλάτος $O(\frac{1}{\varepsilon})$.

Το ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της $W^\varepsilon(x, k, t)$ γύρω από λύσεις της αντίστοιχης κλασσικής εξίσωσης Liouville έχει τη μορφή (βλ. παρ. 2.4.4)

$$(2.58) \quad W^\varepsilon(x, k, t) \sim W_c^\varepsilon(x, k, t) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{2l} Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t)$$

Η $W_c^\varepsilon(x, k, t)$ υπολογίζεται στη συνέχεια εφαρμόζοντας την μέθοδο χαρακτηριστικών, χρησιμοποιώντας τις προσεγγιστικές χαρακτηριστικές του αναρμονικού ταλαντωτή, και δίνεται προσεγγιστικά από την αναλυτική αναπαράσταση

$$(2.59) \quad W_c^\varepsilon(x, k, t) \sim W_a^\varepsilon(q_a(x, k, t), p_a(x, k, t)) = W_0^\varepsilon(q_a(x, k, t), p_a(x, k, t)) ,$$

και ανάλογα οι συναρτήσεις $Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t)$,

$$Z_c^{\varepsilon, (l)}(x, k, t) = \int_0^t \Theta^{(l)}(q_a(x, k, s-t), p_a(x, k, s-t), s) ds .$$

Υπολογίζοντας το πλάτος με k - ολοκλήρωση του πρώτου όρου του αναπτύγματος, στα εστιακά σημεία, έχουμε την προσέγγιση

$$\begin{aligned} |\psi^\varepsilon(0, t_\nu)|^2 &= \int_{\mathbb{R}} W_a^\varepsilon(0, k, t_\nu) dk = \int_{\mathbb{R}} W_0^\varepsilon(q_a(0, k, t_\nu), p_a(0, k, t_\nu)) dk \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{k^2}{2}(1-\mu\gamma k^2)^2} e^{-\left(\frac{\mu}{\varepsilon}\right)^2 \alpha^2 k^6} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon^{2/3}}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\varepsilon^{2/3}\xi^2}{2}(1-\mu\gamma\varepsilon^{2/3}\xi^2)^2} e^{-\mu^2\alpha^2\xi^6} d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon^{2/3}\mu^{1/3}}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\varepsilon^{2/3}y^2}{2\mu^{2/3}}(1-\mu^{1/3}\gamma\varepsilon^{2/3}y^2)^2} e^{-\alpha^2y^6} dy , \end{aligned}$$

με γ, α σταθερές ανεξάρτητες των μ, ε , οπότε

$$(2.60) \quad |\psi^\varepsilon(0, t_\nu)|^2 \sim O\left(\frac{1}{\varepsilon^{2/3}\mu^{1/3}}\right), \quad \text{για } \mu \sim \varepsilon^{1-\delta}, 0 \leq \delta \leq 1 ,$$

και

$$(2.61) \quad |\psi^\varepsilon(0, t_\nu)|^2 \sim O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right), \quad \text{για } \mu \sim \varepsilon^{1+\delta}, \quad \delta \geq 0 .$$

Αυτή η εκτίμηση είναι σε συμφωνία με την αντίστοιχη που προέκυψε από την εφαρμογή του αναπτύγματος γύρω από λύσεις του αρμονικού ταλαντωτή, με την επιλογή $\mu = O(\varepsilon^{1+\delta})$, δηλαδή το μ να είναι της ίδιας τάξης ή μικρότερο από την τάξη του ε οπότε $|\psi^\varepsilon(0, t_\nu)|^2 = O(\frac{1}{\varepsilon})$. Η εξάρτηση της παραμέτρου σύζευξης μ από την παράμετρο ε , εκφράζει από φυσική άποψη την αναμενόμενη σχέση μεταξύ συχνότητας και μεγέθους της ανομοιομορφίας (ως προς τον αρμονικό ταλαντωτή) του μέσου διάδοσης προκειμένου να έχουμε ημικλασσική διάδοση.

Παρατήρηση. Τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα για το παράδειγμα του αναρμονικού ταλαντωτή μπορούν να συγκριθούν αναλυτικά παρατηρώντας ότι αν θεωρήσουμε το μ μικρή παράμετρο (π.χ. $O(\varepsilon)$), ώστε να αναπτύσσεται σε ασυμπτωτική σειρά κάθε συντελεστής του κλασσικού ασυμπτωτικού αναπτύγματος, τότε το ανάπτυγμα της συνάρτησης Wigner που προκύπτει ταυτίζεται με το ανάπτυγμα αρμονικής προσέγγισης. Σχηματικά

$$W^\varepsilon(x, k, t) \xrightarrow{\varepsilon \ll 1} W_h^\varepsilon(x, k, t) + \sum \varepsilon^l Z^{\varepsilon, (2l)}$$

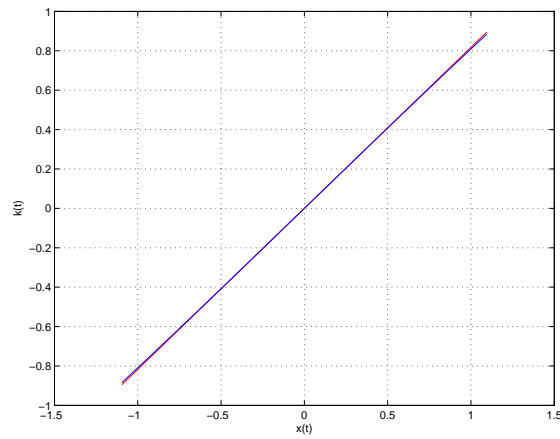
$$W^\varepsilon(x, k, t) \xrightarrow{\varepsilon \ll 1} W_c^\varepsilon(x, k, t) + \sum \varepsilon^{2l} Z_c^{\varepsilon, (l)} \xrightarrow{\mu \ll 1, O(\varepsilon)} W_h^\varepsilon(x, k, t) + \sum \varepsilon^l Z^{\varepsilon, (2l)}$$

Σύγκριση των αναπτυγμάτων. Στα γραφήματα που ακολουθούν συγκρίνουμε τον πρώτο όρο της ‘αρμονικής προσέγγισης’ W_h^ε με τον πρώτο όρο της ‘κλασσικής προσέγγισης’ W_c^ε για δύο τιμές της παραμέτρου σύζευξης $\mu = 0.1$ και 0.01 , και για τιμές της ημικλασσικής παραμέτρου $\varepsilon = 0.1, 0.01$ για διάφορους χρόνους (t , συμπεριλαμβανομένων και των χρόνων δημιουργίας καυστικής (cusp)).

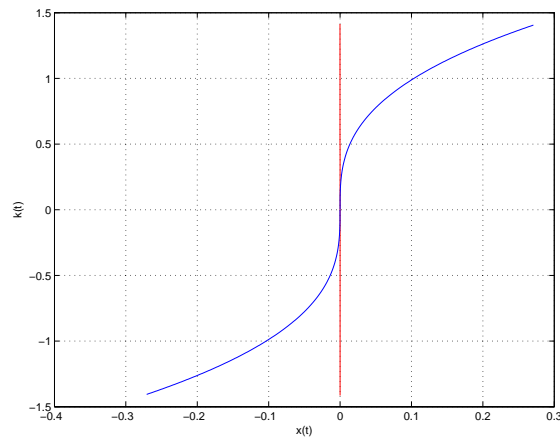
Στα σχήματα (2.3)-(2.7) απεικονίζεται η Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα για τον αρμονικό ταλαντωτή (κόκκινη καμπύλη) και για τον αναρμονικό ταλαντωτή (μπλέ καμπύλη) στο ίδιο γράφημα, όπου παρατηρούμε ότι για μικρές τιμές της παραμέτρου σύζευξης ή για μικρούς χρόνους βρίσκονται αρκετά κοντά. Στο σχήμα (2.4) το οποίο αντιστοιχεί στον πρώτο χρόνο εμφάνισης καυστικής ($t = 3\pi/4$), είναι εύκολο να δούμε την εμφάνιση του εστιακού σημείου εκεί που η Λαγκρανζιανή καμπύλη τέμνει κάθετα τον x -άξονα. Ανάλογα στο σχήμα (2.7) που αντιστοιχεί σε αρκετά μεγάλο χρόνο ($t = 200$), φαίνονται τα σημεία που αντιστοιχούν στις ‘fold’ πλευρές των περιοδικών ‘cusp’ της καυστικής του αναρμονικού ταλαντωτή, και κάθε ‘cusp’ που εμφανίζεται για $x = 0$ αλλά σε διαφορετικούς χρόνους.

Ακολουθούν τα γραφήματα όπου παρουσιάζουμε, τις αναλυτικά γνωστές, συναρτήσεις W_h^ε και W_c^ε (πρώτοι όροι των ασυμπτωτικών αναπτυγμάτων) προκειμένου να τις συγκρί-

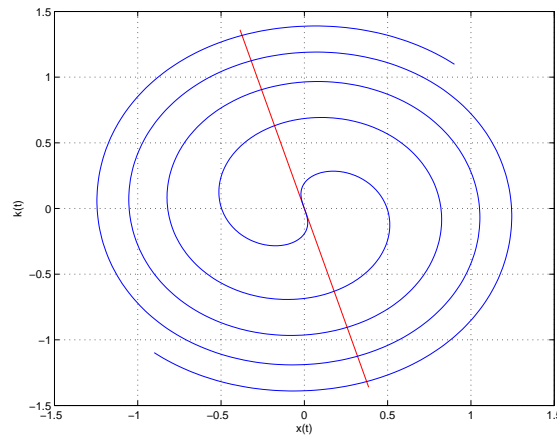
νουμε για διάφορα ε και μ . Στα σχήματα (2.8)-(2.17) έχουμε $\mu = 0.1$ και μεταβάλλουμε το ε για τις χρονικές στιγμές $t = 0.1, 3\pi/4$ (χρόνος καυστικής) και 200. Αντίστοιχα, στα σχήματα (2.17)-(2.27) παρουσιάζεται η περίπτωση $\mu = 0.01$. Παρατηρούμε ότι για μικρούς χρόνους και για οποιαδήποτε τιμή του μ , θεωρώντας σταθερό ε οι δύο συναρτήσεις σχεδόν ταυτίζονται. Επίσης βρίσκονται αρκετά κοντά για σχετικά μεγάλους χρόνους, οι οποίοι περιλαμβάνουν χρόνους καυστικής που μας ενδιαφέρουν, για μικρές τιμές των μ και ε .



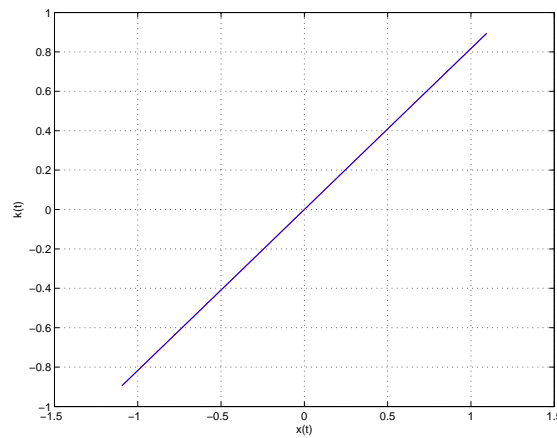
Σχήμα 2.3: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα: $\mu = 0.1$, $t = 0.1$.



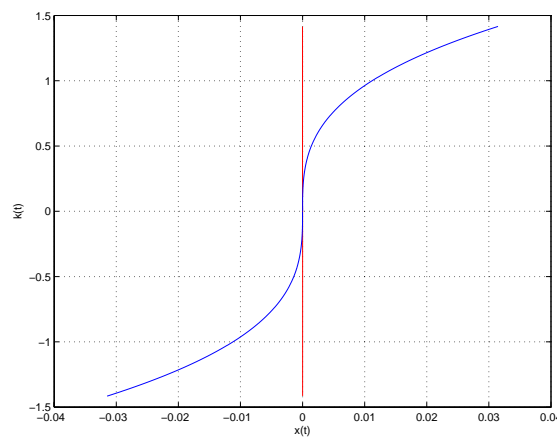
Σχήμα 2.4: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα: $\mu = 0.1$, $t = 3\pi/4$ (χρόνος καυστικής).



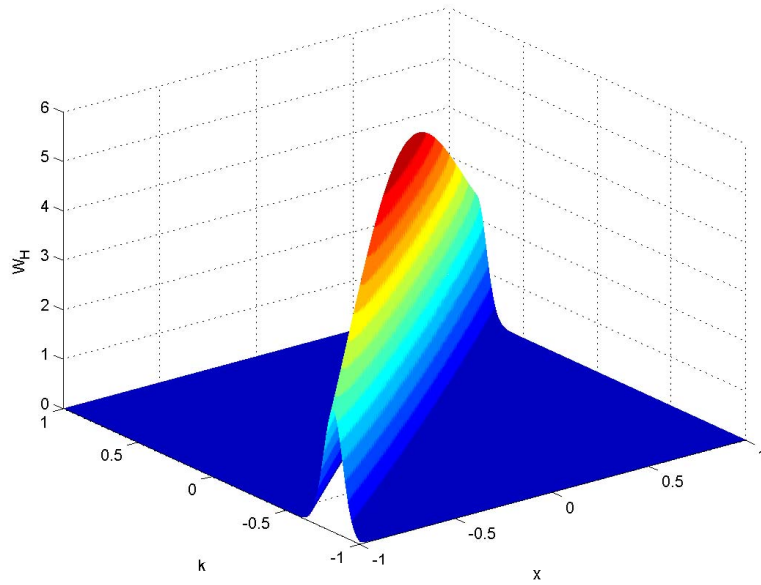
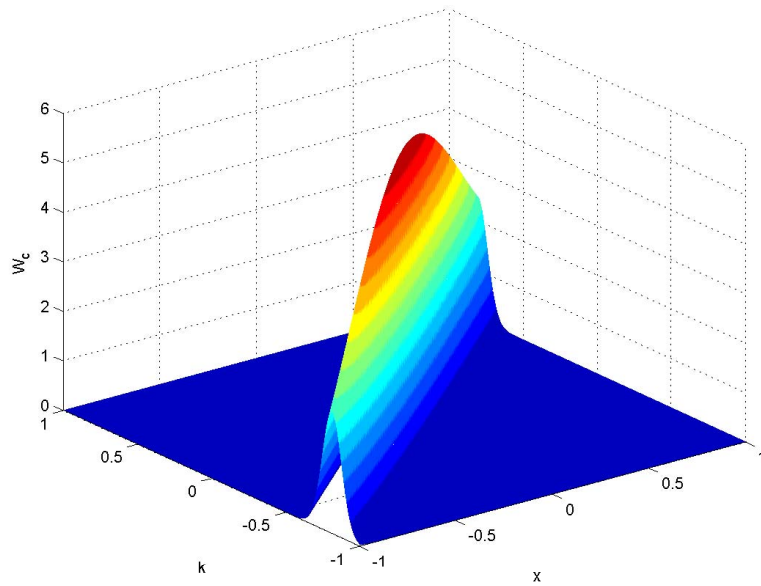
Σχήμα 2.5: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα: $\mu = 0.1$, $t = 200$.

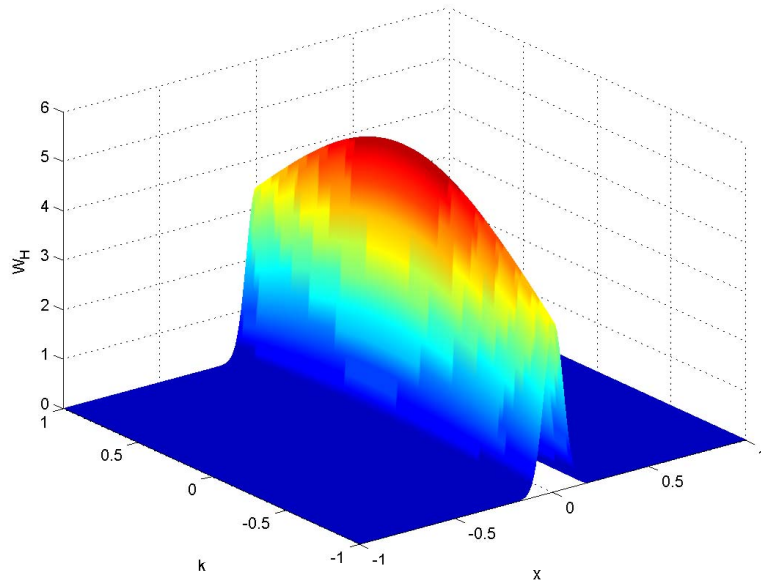


Σχήμα 2.6: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα: $\mu = 0.01$, $t = 0.1$.

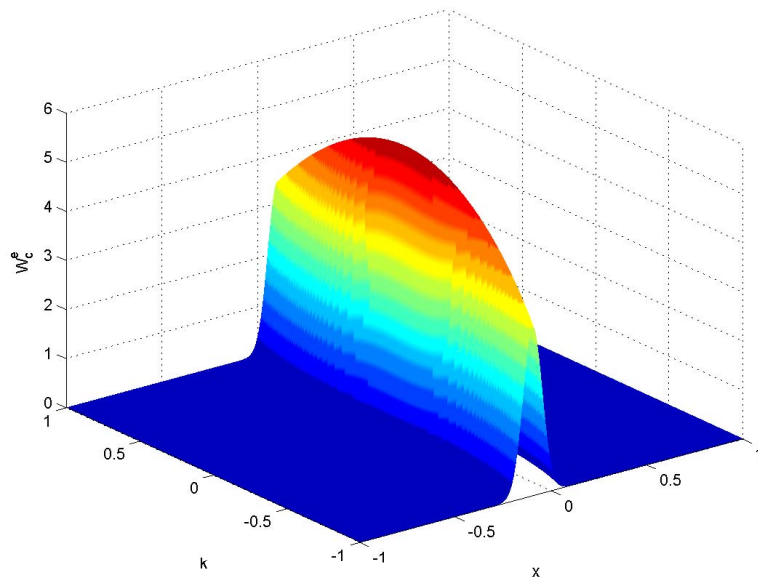


Σχήμα 2.7: Λαγκρανζιανή πολλαπλότητα: $\mu = 0.01$, $t = 3\pi/4$ (χρόνος καυστικής).

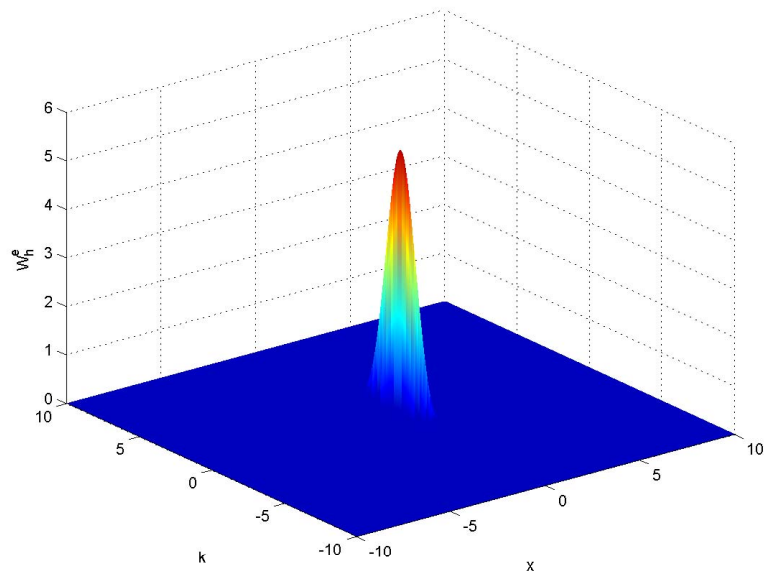
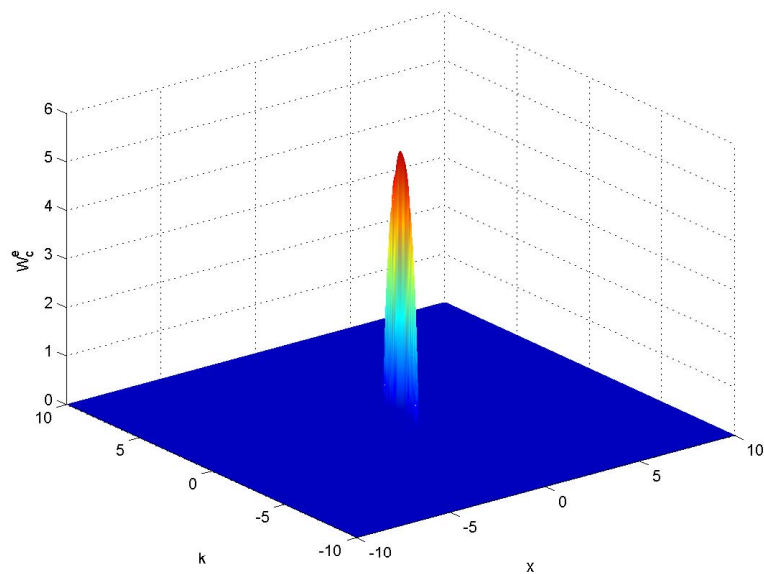
Σχήμα 2.8: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 0.1$ Σχήμα 2.9: W_c^ϵ , $\mu = 0.1$, $\epsilon = 0.1$, $t = 0.1$

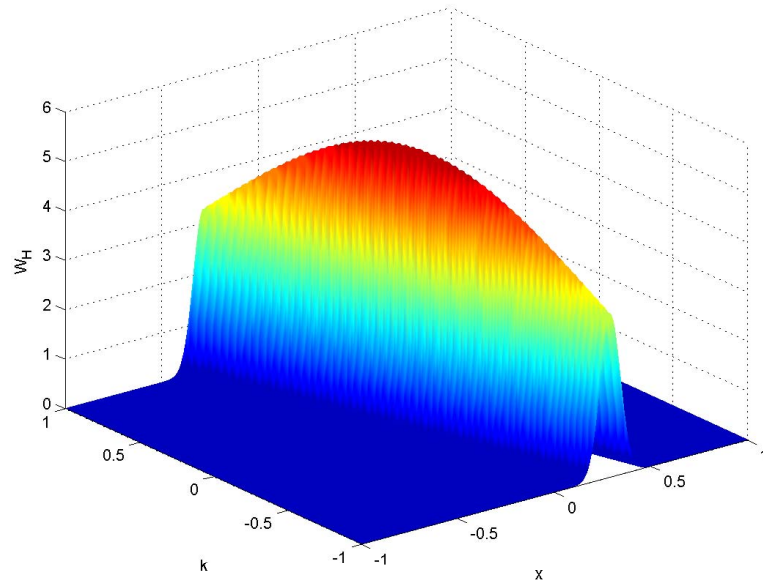


Σχήμα 2.10: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$

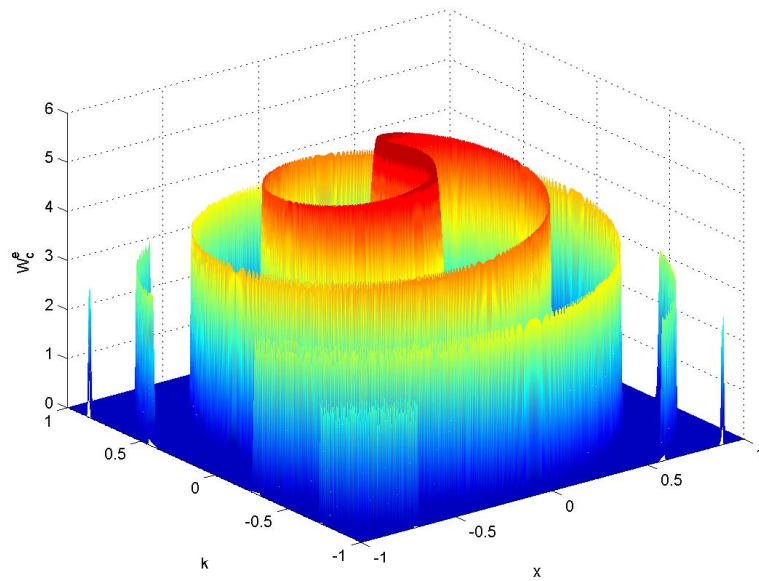


Σχήμα 2.11: W_c^ϵ , $\mu = 0.1$, $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$ χρόνος καυστικής

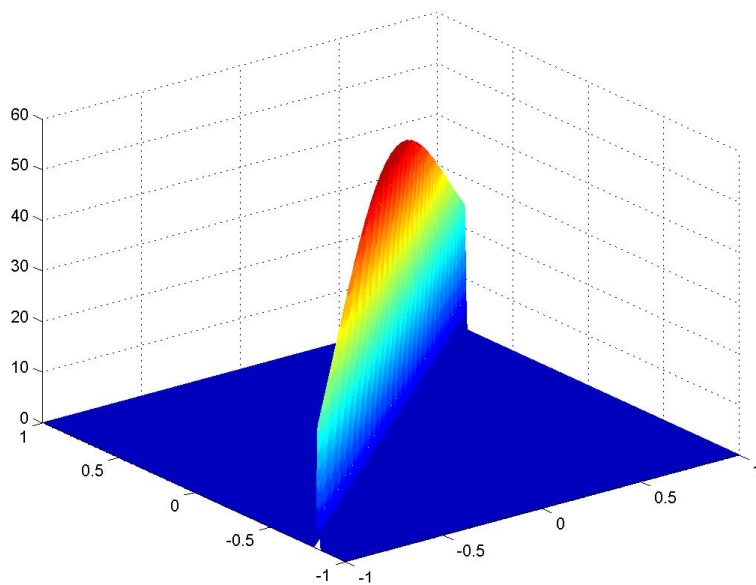
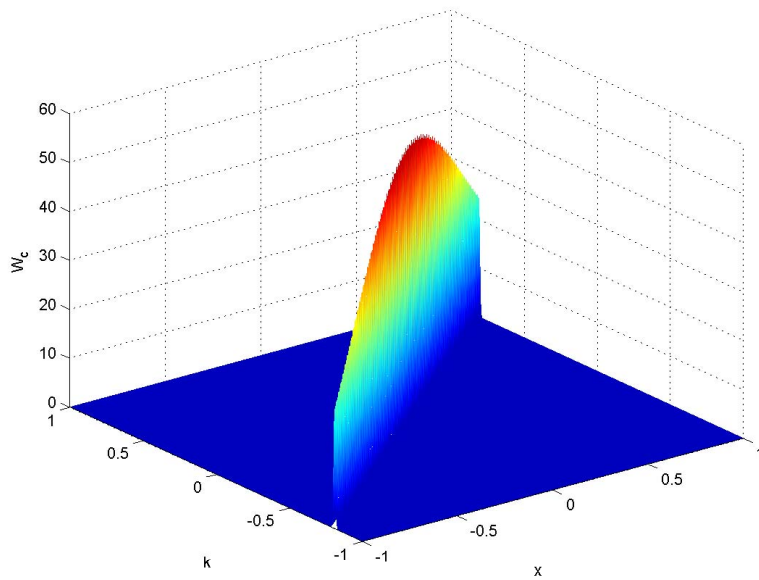
Σχήμα 2.12: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$ Σχήμα 2.13: W_c^ϵ , $\mu = 0.1$, $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$

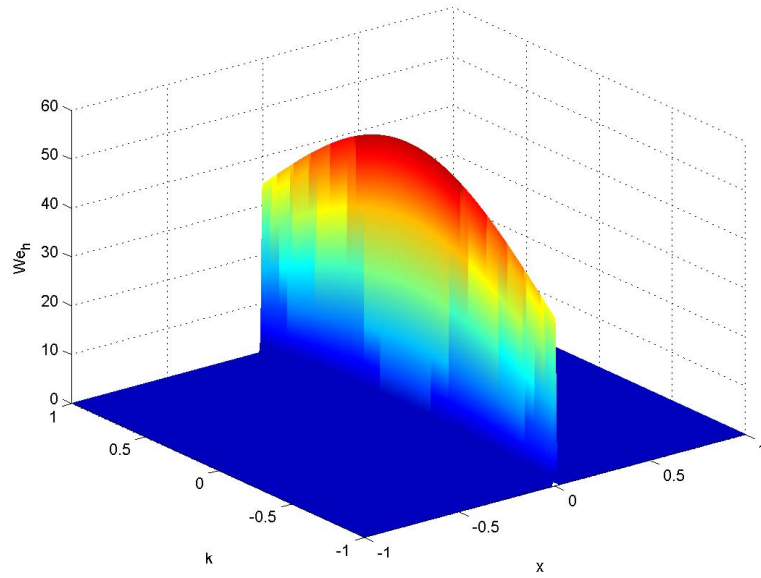


Σχήμα 2.14: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 200$

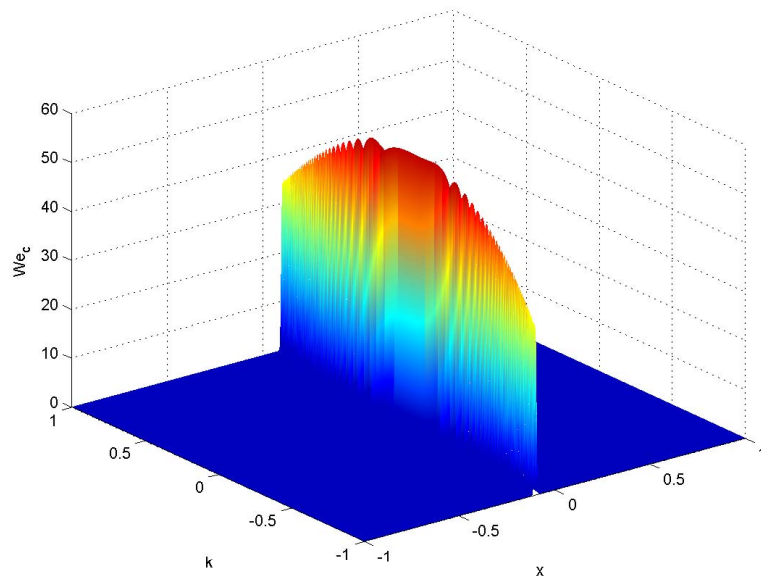


Σχήμα 2.15: W_c^ϵ , $\mu = 0.1$, $\epsilon = 0.1$, $t = 200$

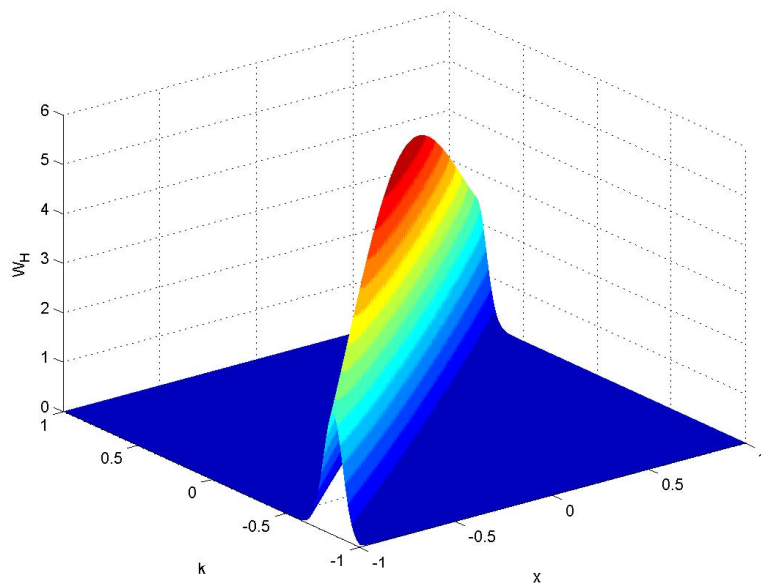
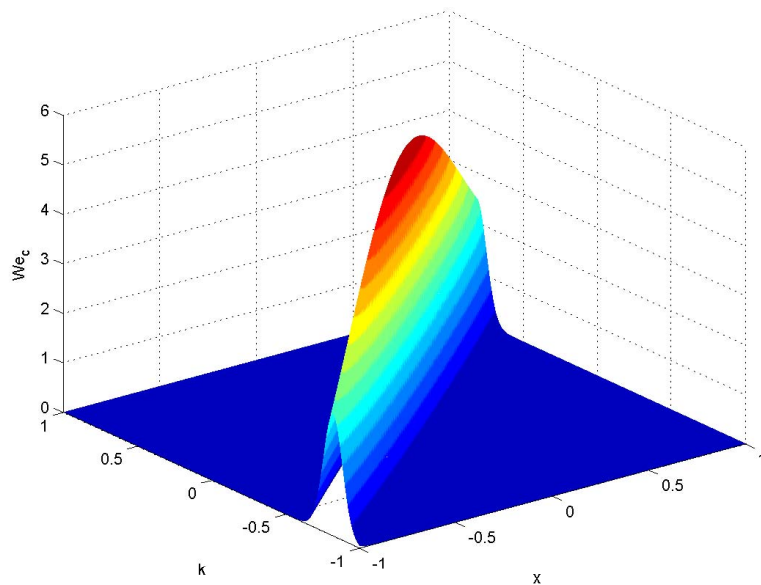
Σχήμα 2.16: W_h^ε , $\varepsilon = 0.01$, $t = 0.1$ Σχήμα 2.17: W_c^ε , $\mu = 0.1$, $\varepsilon = 0.01$, $t = 0.1$

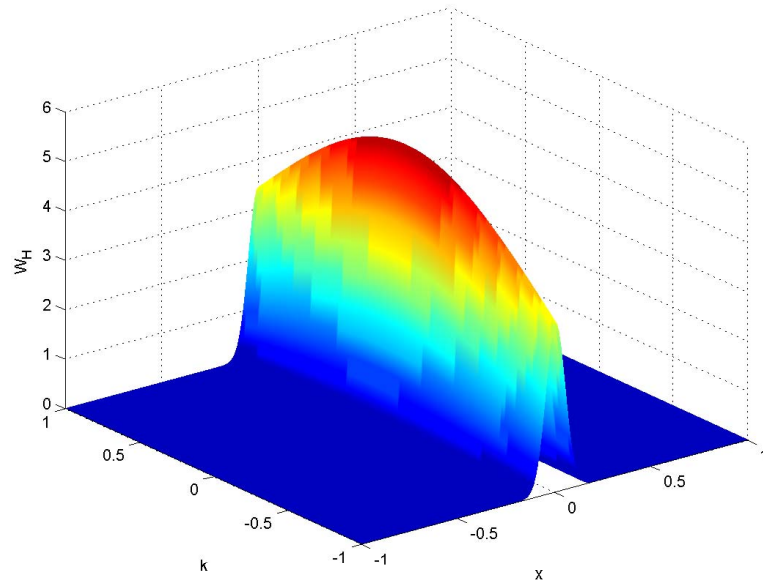


Σχήμα 2.18: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.01$, $t = 3\pi/4$

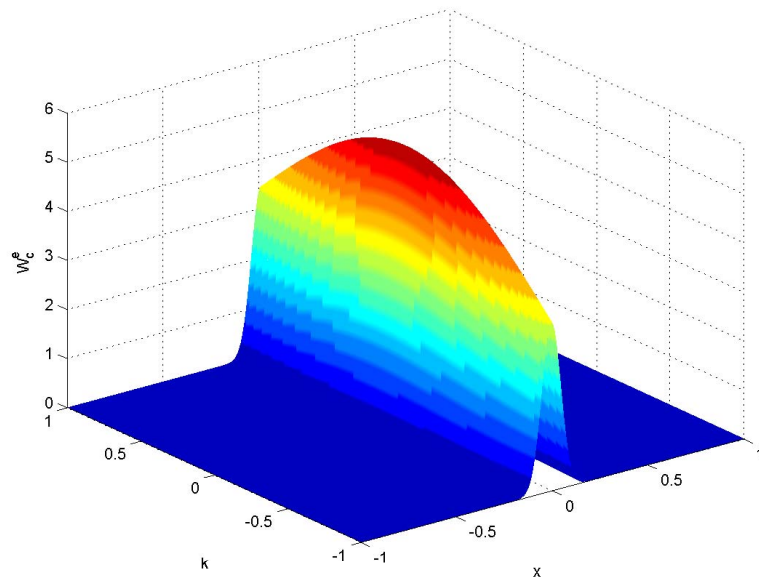


Σχήμα 2.19: W_c^ϵ , $\mu = 0.1$, $\epsilon = 0.01$, $t = 3\pi/4$

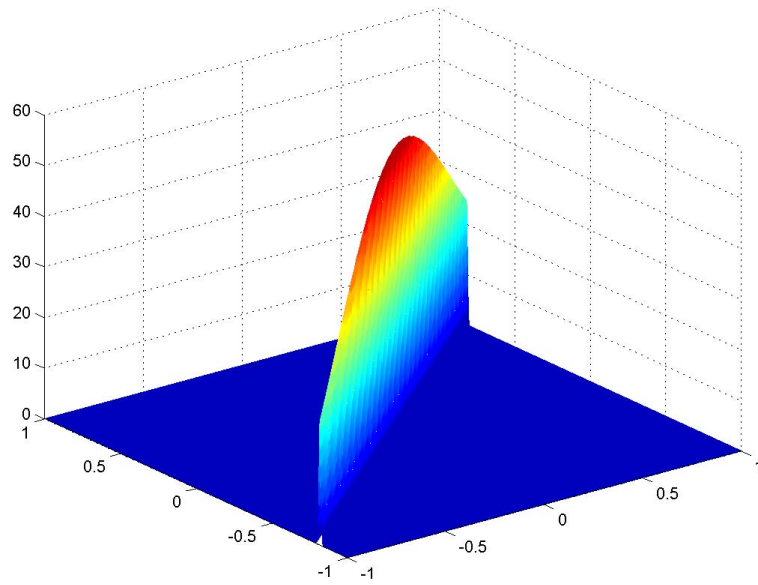
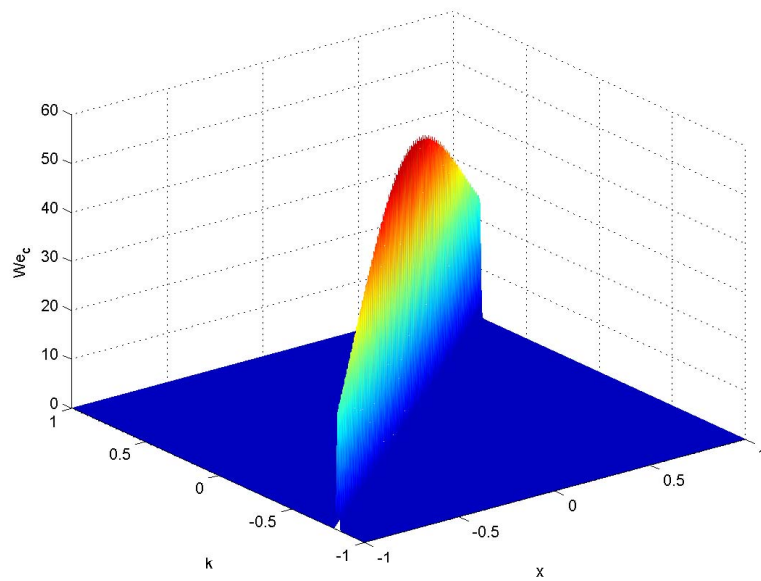
Σχήμα 2.20: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 0.1$ Σχήμα 2.21: W_c^ϵ , $\mu = 0.01$, $\epsilon = 0.1$, $t = 0.1$

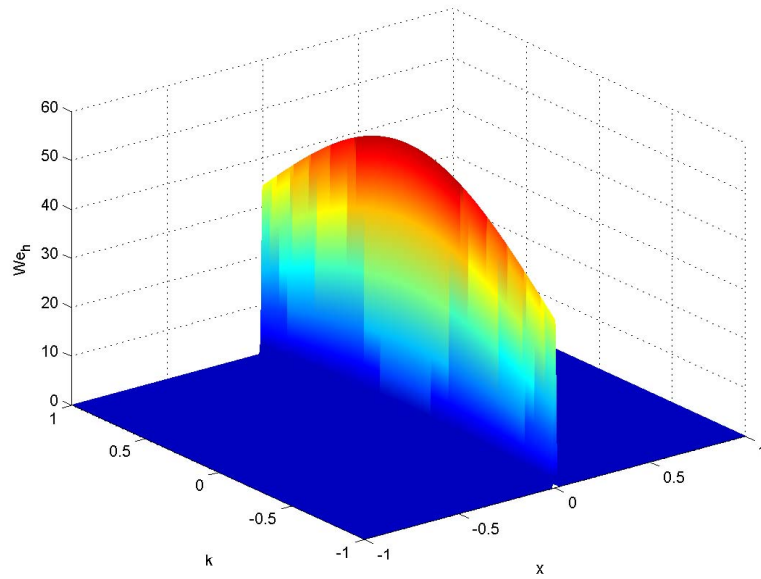


Σχήμα 2.22: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$

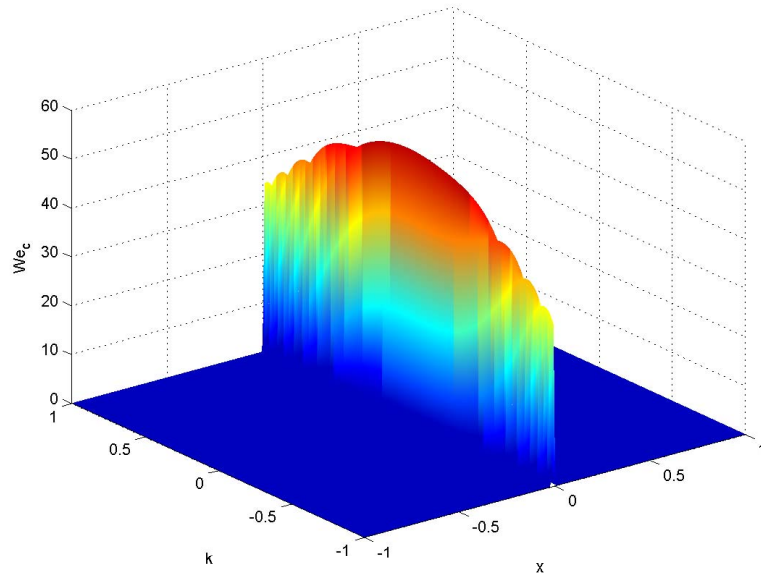


Σχήμα 2.23: W_c^ϵ , $\mu = 0.01$, $\epsilon = 0.1$, $t = 3\pi/4$

Σχήμα 2.24: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.01$, $t = 0.1$ Σχήμα 2.25: W_c^ϵ , $\mu = 0.01$, $\epsilon = 0.01$, $t = 0.1$



Σχήμα 2.26: W_h^ϵ , $\epsilon = 0.01$, $t = 3\pi/4$



Σχήμα 2.27: W_c^ϵ , $\mu = 0.01$, $\epsilon = 0.01$, $t = 3\pi/4$

Παράρτημα Α

Παράρτημα Α1: Rayleigh-Schrödinger

Θεωρούμε τον τελεστή Schrödinger $\hat{H} = -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta + V(x)$, με δυναμικό $V(x)$ να ικανοποιεί κατάλληλες υποθέσεις (2.2,2.1) της Παραγράφου 2.2, ώστε ο \hat{H} να έχει πλήρες διακριτό φάσμα και να επιδέχεται ‘αρμονική προσέγγιση’ με την έννοια που παρουσιάζεται στο [75].

Τότε ισχύουν τα ασυμπτωτικά αναπτύγματα των ιδιοτιμών E_n^ε και ιδιοσυναρτήσεων u_n^ε του \hat{H} , για κάθε n και x κοντά στο x^α με $\varepsilon \ll 1$.

Θεώρημα 2.4.

$$(2.62) \quad \frac{2}{\varepsilon}E_n^\varepsilon \sim e_n + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^l a_n^{(l)}$$

$$(2.63) \quad \varepsilon^{\frac{1}{4}}u_n^\varepsilon(x) \sim \psi_n\left(\frac{x-x^\alpha}{\sqrt{\varepsilon}}\right) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{l}{2}}\psi_n^{(l)}\left(\frac{x-x^\alpha}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$$

οπότε

$$\frac{2}{\varepsilon}E_n^\varepsilon - e_n - \sum_{l=1}^N a_n^{(l)}\varepsilon^l = O(\varepsilon^{N+1})$$

$$\|U_{\varepsilon,\alpha}^{-1}u_n^\varepsilon - \sum_{l=0}^N \varepsilon^{\frac{l}{2}}\psi_n^{(l)}\|_{L^2(\mathbb{R})} = O(\varepsilon^{(N+1)/2})$$

όπου ο μετασχηματισμός ‘διαστολής’ $U_{\varepsilon,\alpha}$ ορίζεται ως:

$$[U_{\varepsilon,\alpha}f](x) = \varepsilon^{-\frac{1}{4}}f\left(\varepsilon^{-\frac{1}{2}}(x-x^\alpha)\right), \quad x \in \mathbb{R}$$

και $e_n, \psi_n, n = 0, 1, \dots$ είναι οι (γνωστές) ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή

$$\widehat{H}_h^\alpha = -\Delta + \frac{h''(x^\alpha)}{2}x^2,$$

με $h(x) = 2V(x)$.

Στο Παράρτημα αυτό στόχος μας είναι να κατασκευάσουμε αναλυτικές εκφράσεις των συντελεστών $a_n^{(l)}$ και $\psi_n^{(l)}$ οι οποίες προκύπτουν με εφαρμογή της κλασικής θεωρίας διαταραχών Rayleigh- Schrödinger ([70]) και ([78]), ακολουθώντας την διαδικασία απόδειξης του θεωρήματος του B. Simon [75], για κατάλληλο τελεστή $\widetilde{H}(\lambda)$ τον οποίο ορίζουμε παρακάτω.

Θέτουμε $\lambda = \frac{1}{\varepsilon}$, και $h(x) = 2V(x)$, και

$$\widehat{H}(\lambda) = \frac{2}{\varepsilon^2} \widehat{H} = -\Delta + \lambda^2 h(x).$$

Ορίζουμε τον τελεστή $\widetilde{H}(\lambda) = \lambda^{-1} U_{\frac{1}{\lambda}, \alpha}^{-1} \widehat{H}(\lambda) U_{\frac{1}{\lambda}, \alpha}$, ο οποίος γράφεται επίσης

$$(2.64) \quad \widetilde{H}(\lambda) = \widehat{H}_H^\alpha + \lambda^{-\frac{1}{2}} \mathcal{V}_\lambda(x),$$

με

$$\mathcal{V}_\lambda(x) = \lambda^{3/2} h(\lambda^{-\frac{1}{2}}x + x^\alpha) - \lambda^{1/2} \frac{h''(x^\alpha)}{2} x^2.$$

Προφανώς ισχύει $\sigma(\widetilde{H}(\lambda)) = \lambda^{-1} \sigma(\widehat{H}(\lambda)) = 2\lambda \sigma(\widehat{H})$ και $u_n^\varepsilon = u_n^\lambda = U_{\frac{1}{\lambda}, \alpha} \widetilde{u}_n^\lambda$, όπου $u_n^\lambda, \widetilde{u}_n^\lambda$ οι ιδιοσυναρτήσεις των $\widehat{H}(\lambda)$ και $\widetilde{H}(\lambda)$ αντίστοιχα. Ανάλογα θα συμβολίζουμε στη συνέχεια τις ιδιοτιμές τους με E_n^λ και \widetilde{E}_n^λ .

Θέτουμε $\beta = \lambda^{-1/2}$ στην έκφραση (2.64), και θεωρούμε προς στιγμήν το \mathcal{V}_λ ανεξάρτητο του β . Έτσι εμφανίζεται ο τελεστής $\widetilde{H}(\lambda) = \widehat{H}_H^\alpha + \beta \mathcal{V}_\lambda(x)$ για τον οποίο το κλασικό Rayleigh- Schrödinger ανάπτυγμα για τις ιδιοτιμές του με $\beta \ll 1$ [70], έχει τη μορφή

$$\widetilde{E}_n^\lambda \sim e_n + \beta \frac{\sum_{l=0}^{\infty} \gamma_n^{(l)} \beta^l}{\sum_{l=0}^{\infty} \delta_n^{(l)} \beta^l}, \quad n = 0, 1, \dots$$

όπου

$$\gamma_n^{(l)} = \frac{(-1)^{l+1}}{2\pi i} \oint_{|e-e_n|<\delta} (\psi_n, [\mathcal{V}_\lambda(\widehat{H}_H^\alpha - e)^{-1}]^{l+1} \psi_n) de,$$

και

$$\delta_n^{(l)} = \frac{(-1)^{l+1}}{2\pi i} \oint_{|e-e_n|<\delta} \left(\psi_n, (\widehat{H}_H^\alpha - e)^{-1} [\mathcal{V}_\lambda (\widehat{H}_H^\alpha - e)^{-1}]^l \psi_n \right) de, \quad l = 0, 1, \dots$$

Το ανάπτυγμα αυτό μπορεί να γραφεί στην απλούστερη μορφή

$$\widetilde{E}_n^\lambda \sim e_n + \sum_{l=1}^{\infty} \beta^l b_n^{(l)}(\lambda)$$

όπου οι συντελεστές $b_n^{(l)}(\lambda)$ προκύπτουν από την προηγούμενη αναπαράσταση, και είναι

$$\begin{aligned} b_n^{(1)}(\lambda) &= \mathcal{V}_\lambda^{nn} \\ b_n^{(2)}(\lambda) &= -\sum_{j \neq n} (e_j - e_n)^{-1} \mathcal{V}_\lambda^{nj} \mathcal{V}_\lambda^{jn} \\ b_n^{(3)}(\lambda) &= \sum_{\nu \neq n \neq j} (e_\nu - e_n)^{-1} (e_j - e_n)^{-1} \mathcal{V}_\lambda^{n\nu} \mathcal{V}_\lambda^{\nu j} \mathcal{V}_\lambda^{jn} - \sum_{\nu \neq n} (e_\nu - e_n)^{-2} \mathcal{V}_\lambda^{n\nu} \mathcal{V}_\lambda^{\nu n} \mathcal{V}_\lambda^{nn}, \end{aligned}$$

με $\mathcal{V}_\lambda^{\nu j} = (\psi_\nu, \mathcal{V}_\lambda \psi_j)$. Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα Taylor του δυναμικού ο όρος \mathcal{V}_λ γράφεται

$$\mathcal{V}_\lambda(x) = \sum_{j=0}^{N-3} \lambda^{-\frac{j}{2}} \frac{h^{(j+3)}(x^\alpha)}{(j+3)!} x^{j+3} + O(\lambda^{-\frac{N+1}{2}}),$$

χρησιμοποιώντας την υπόθεση $h'(x^\alpha) = 0$ (χωρίς βλάβη της γενικότητας θέσαμε $h(x^\alpha) = 0$).

Τότε ο τελεστής $\widetilde{H}(\lambda)$ προσεγγίζεται ως εξής

$$(2.65) \quad \widetilde{H}(\lambda) \sim \widehat{H}_H^\alpha + \lambda^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=0}^{N-3} \lambda^{-\frac{j}{2}} \frac{h^{(j+3)}(x^\alpha)}{(j+3)!} x^{j+3} + O(\lambda^{-\frac{N+1}{2}}).$$

Υπολογίζοντας τους όρους $\mathcal{V}_\lambda^{\nu j}$, και ανακατανέμοντας την σειρά, λαμβάνοντας υπόψη την εξάρτηση του \mathcal{V}_λ από το λ προκύπτει

$$\widetilde{E}_n^\lambda \sim e_n + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^{-l} b_n^l.$$

Το ανάπτυγμα για τις ιδιοσυναρτήσεις προκύπτει από την σχέση

$$\widetilde{u}_n^\lambda = (\psi_n, P(\lambda)\psi_n)P(\lambda)\psi_n,$$

με

$$P(\lambda) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|e-e_n|=\delta} (\widehat{H}_H^\alpha + \beta \mathcal{V}_\lambda - e)^{-1} de ,$$

οπότε

$$\tilde{u}_n^\lambda \sim \psi_n + \sum_{l=0}^{\infty} \beta^l \tilde{\psi}_n^{(l)} ,$$

όπου

$$\tilde{\psi}_n^{(l)} = (-1)^{l+1} (2\pi i)^{-1} \oint_{|e-e_n|=\delta} (\widehat{H}_H^\alpha - e)^{-1} [\mathcal{V}_\lambda (\widehat{H}_H^\alpha - e)]^l \psi_n de ,$$

και επομένως καταλήγουμε στο ανάπτυγμα

$$\varepsilon^{\frac{1}{4}} u_n^\varepsilon(x) \sim \psi_n \left(\frac{x - x^\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) + \sum_{l=1}^{\infty} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \tilde{\psi}_n^{(l)} \left(\frac{x - x^\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right)$$

Ένας εναλλακτικός τρόπος για να υπολογίσουμε τους συντελεστές $\psi_n^{(l)}$ είναι να αντικαταστήσουμε τα ανάπτυγματα (2.62), (2.63) στο πρόβλημα ιδιοτιμών για τον τελεστή $\tilde{H}(\lambda)$, και να εξισώσουμε τις αντίστοιχες δυνάμεις του ε που εμφανίζονται, αντικαθιστώντας την προσέγγιση (2.65) του τελεστή $\tilde{H}(\lambda)$. Προκύπτει τότε ότι κάθε συνάρτηση $\psi_n^{(l)}$, $l = 1, 2, \dots$, $n = 0, 1, \dots$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$(2.66) \quad [\widehat{H}_H^\alpha - e_n] \psi_n^{(l)}(\xi) = \sum_{j=1}^{[l/2]} a_n^{(j)} \psi_n^{(l-2j)}(\xi) - \sum_{j=3}^{l+2} \frac{2V^{(j)}(x^\alpha)}{j!} \xi^j \psi_n^{(l+2-j)}(\xi),$$

όπου συμβολίσαμε με $\psi_n^{(0)} = \psi_n$.

Για απλοποίηση των εκφράσεων στη συνέχεια θα υποθέσουμε ότι $x^\alpha = 0$ και $h''(x^\alpha) = 2$, οπότε οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $\widehat{H}_H^\alpha \equiv \widehat{H}_H$ είναι

$$e_n = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(x) = h_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad \text{οι συναρτήσεις Hermite}$$

Υπολογισμός των πρώτων συντελεστών στην προσέγγιση των ιδιοτιμών E_n^ε .

$$\begin{aligned}
b_n^{(1)} &= \mathcal{V}_\lambda^{nn} = (\psi_n, \mathcal{V}_\lambda \psi_n) = \sum_{j=3}^{\infty} \lambda^{-\frac{j-3}{2}} \frac{2V^{(j)}(0)}{j!} (\psi_n, x^j \psi_n) \\
&= \lambda^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=2}^{\infty} \lambda^{-(j-2)} \frac{2V^{(2j)}(0)}{(2j)!} (\psi_n, x^{2j} \psi_n) = \\
&= \lambda^{-\frac{1}{2}} \frac{2^n}{n!} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-j} \frac{2V^{(2j+4)}(0)}{2^{2j+4}} \sum_{\nu=\max(0, n-j-2)}^n \binom{n}{\nu}^2 \frac{\nu!}{2^{\nu(j+2-n+\nu)}!}
\end{aligned}$$

Για την πρώτη ιδιοτιμή $n = 0$ έχουμε

$$\frac{2}{\varepsilon} E_0^\varepsilon \sim e_0 + \sum_{l=1}^{\infty} (\lambda)^{-l/2} b_0^{(l)}(\lambda)$$

όπου

$$\begin{aligned}
b_0^{(1)} &= \lambda^{-1/2} \frac{1}{16} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-j} \frac{V^{(2j+4)}(0)}{2^{2j}} \\
b_0^{(2)} &= -\sum_{i \neq 0} (e_i - e_0)^{-1} (\mathcal{V}_\lambda^{i0})^2 \\
&\text{όπου} \\
\mathcal{V}_\lambda^{i0} &= (\psi_i, \mathcal{V}_\lambda \psi_0) = \sum_{j=3}^{\infty} \lambda^{-\frac{j-3}{2}} \frac{2V^{(j)}(0)}{j!} (\psi_i, x^j \psi_0)
\end{aligned}$$

με

$$(\psi_i, x^j \psi_k) = \begin{cases} 0, & j - i - k \text{ περιττός} \\ \frac{j!}{2^j} \sqrt{\frac{2^{i+k}}{i!k!}} \sum_{\nu=\max(0, -s)}^{\min(k, i)} \binom{i}{\nu} \binom{k}{\nu} \frac{\nu!}{2^{\nu(s+\nu)}!}, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

$$2s = j - i - k$$

Στην περίπτωση του αναρμονικού ταλαντωτή $V(x) = \frac{x^2}{2} + \mu \frac{x^4}{4}$, έχουμε $\mathcal{V}_\lambda(x) = \lambda^{-1/2} \frac{\mu}{2} x^4$, και επομένως

$$b_n^{(1)} = \lambda^{-1/2} \frac{3\mu}{4} \frac{2^n}{n!} \sum_{\nu=\max(0, n-2)}^n \binom{k}{\nu}^2 \frac{\nu!}{2^{\nu(2-n+\nu)}!}$$

$$b_n^{(2)} = -\lambda^{-1} \frac{\mu^2}{8} \sum_{i \neq n} \frac{1}{i-n} (\psi_i, x^4 \psi_n)^2.$$

Για παράδειγμα οι πρώτοι συντελεστές στα αναπτύγματα των ιδιοτιμών E_0^ε , E_1^ε είναι

$$b_0^{(1)} = \lambda^{-1/2} \frac{3\mu}{8}$$

και

$$b_0^{(2)} = -\lambda^{-1} \frac{\mu^2}{4} \left(\frac{1}{2} (\psi_2, x^4 \psi_0)^2 + \frac{1}{4} (\psi_4, x^4 \psi_0)^2 \right) = -\lambda^{-1} \frac{21\mu^2}{32}$$

οπότε

$$a_0^{(1)} = \frac{3\mu}{8}, \quad a_0^{(2)} = -\frac{21\mu^2}{32},$$

και επομένως

$$\frac{2}{\varepsilon} E_0^\varepsilon \sim e_0 + \varepsilon \frac{3\mu}{8} - \varepsilon^2 \frac{21\mu^2}{32} + O(\varepsilon^3)$$

Επίσης

$$b_1^{(1)} = \lambda^{-1/2} \frac{15\mu}{8}$$

και

$$b_1^{(2)} = -\lambda^{-1} \frac{\mu^2}{2} \left(\frac{1}{6} (\psi_3, x^4 \psi_1)^2 + \frac{1}{10} (\psi_5, x^4 \psi_1)^2 \right)$$

οπότε

$$\frac{2}{\varepsilon} E_1^\varepsilon \sim e_1 + \varepsilon \frac{15\mu}{8} + \varepsilon^2 \frac{\mu^2}{2} \left(\frac{1}{6} (\psi_3, x^4 \psi_1)^2 + \frac{1}{10} (\psi_5, x^4 \psi_1)^2 \right) + O(\varepsilon^3)$$

Οι συντελεστές $\psi_n^{(l)}$ υπολογίζονται από τις εξισώσεις

για $n = 0$

$$\begin{cases} \widehat{H}_H - e_0 & \psi_0^{(1)}(\xi) = 0, \\ \widehat{H}_H - e_0 & \psi_0^{(2)}(\xi) = (a_0^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_0(\xi), \\ \widehat{H}_H - e_0 & \psi_0^{(3)}(\xi) = (a_0^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_0^{(1)}(\xi), \\ \widehat{H}_H - e_0 & \psi_0^{(4)}(\xi) = (a_0^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_0^{(2)}(\xi) + a_0^{(2)}\psi_0(\xi), \end{cases}$$

για $n = 1$

$$\begin{cases} \widehat{H}_H - e_1 & \psi_1^{(1)}(\xi) = 0, \\ \widehat{H}_H - e_1 & \psi_1^{(2)}(\xi) = (a_1^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_1(\xi), \\ \widehat{H}_H - e_1 & \psi_1^{(3)}(\xi) = (a_1^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_1^{(1)}(\xi), \\ \widehat{H}_H - e_1 & \psi_1^{(4)}(\xi) = (a_1^{(1)} - \frac{\mu}{2}\xi^4)\psi_1^{(2)}(\xi) + a_1^{(2)}\psi_1(\xi), \end{cases}$$

κ.ο.κ.,

λαμβάνοντας υπ' όψιν τη συνθήκη κανονικοποίησης $(\psi_n^{(l)}, \psi_n) = 0$.

Παράρτημα Α2: Συντελεστής $Z^{\varepsilon,(2)}$ στην αρμονική προσέγγιση

Σ' αυτό το παράρτημα δίνουμε την αναλυτική λύση για την συνάρτηση συντελεστή $Z^{\varepsilon,(2)}$ που εμφανίζεται στην αρμονική προσέγγιση της συνάρτησης Wigner στο παράδειγμα του αναρμονικού ταλαντωτή που παρουσιάζουμε στην παράγραφο 2.5. Ο αναλυτικός υπολογισμός έγινε αφ' ενός μεν με απ' ευθείας υπολογισμό από την μορφή που προκύπτει από την αρχή Dunhamel, και αφ' ετέρου αναπτύσσοντας σε σειρά ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις Ψ_{nm} (ιδιοσυναρτήσεις Moyal για τον αρμονικό ταλαντωτή).

Σύμφωνα με την αρχή Dunhamel, το πρόβλημα αρχικών τιμών που λύνει η συνάρτηση $Z^{\varepsilon,(2)}$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + L_h \right] \tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t) &= D^{(2)}(\xi, \eta, t) \\ \tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t)|_{t=0} &= 0, \end{aligned}$$

έχει τη λύση

$$\begin{aligned} \tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t) &= \int_0^t D^{(2)}(q(\xi, \eta, t-s), p(\xi, \eta, t-s), s) ds \\ D^{(2)}(\xi, \eta, s) &= -\mu \left[\frac{1}{4} \xi \frac{\partial^3}{\partial \eta^3} - \xi^3 \frac{\partial}{\partial \eta} \right] W_h^\varepsilon(\xi, \eta, s) = -\mathcal{B}_2\left(\xi, \frac{\partial}{\partial \eta}\right) \tilde{W}_h^\varepsilon(\xi, \eta, t). \end{aligned}$$

Με χρήση συμβολικών υπολογισμών – πρόγραμμα **Maple**, υπολογίσαμε την ακόλουθη έκφραση, για τη συνάρτηση $\tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}$, και για κάθε (ξ, η, t) ,

$$\begin{aligned} \tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t) &= \mu W_h^\varepsilon(\xi, \eta, t) \times \\ &\times \left[\frac{1}{\varepsilon^3} F_1(\xi, \eta, t) + \frac{1}{\varepsilon^2} F_2(\xi, \eta, t) + \frac{1}{\varepsilon} F_3(\xi, \eta, t) + \right. \\ &\left. + F_4(\xi, \eta, t) + \varepsilon F_5(\xi, \eta, t) + \varepsilon^2 F_6(\xi, \eta, t) + \varepsilon^3 F_7(\xi, \eta, t) \right], \end{aligned}$$

όπου

$$F_1(\xi, \eta, t) = 2[\eta c(t) + \xi s(t)]^3 (\xi f_1(t) + \eta f_2(t))$$

$$F_2(\xi, \eta, t) = -8[\eta c(t) + \xi s(t)] f_3(t)$$

$$F_3(\xi, \eta, t) = -2[\eta c(t) + \xi s(t)] (\eta^3 f_4(t) + 3\xi\eta^2 f_5(t) + 3\xi^2\eta f_6(t) + \xi^3 f_7(t) + \\ + 3[\eta c(t) + \xi s(t)][\xi \cos(t) - \eta \sin(t)](\eta f_8(t) + \xi f_9(t)))$$

$$F_4(\xi, \eta, t) = 8((\xi \cos(t) - \eta \sin(t))f_{10}(t) + [\eta c(t) + \xi s(t)]f_{11}(t))$$

$$F_5(\xi, \eta, t) = 2(\xi \cos(t) - \eta \sin(t))3[\eta c(t) + \xi s(t)](\xi f_{12}(t) + \eta f_{13}(t)) + \\ + 2(\xi \cos(t) - \eta \sin(t))(\xi^3 f_{14}(t) + 3\xi^2\eta f_{15}(t) + 3\xi\eta^2 f_{16}(t) + \eta^3 f_{17}(t))$$

$$F_6(\xi, \eta, t) = -8(\xi \cos(t) - \eta \sin(t))f_{18}(t)$$

$$F_7(\xi, \eta, t) = -2(\xi \cos(t) - \eta \sin(t))^3 (\xi f_{19}(t) + \eta f_{20}(t))$$

με $c(t) = \cos(t) + \sin(t)$, $s(t) = \sin(t) - \cos(t)$, και $f_j(t)$ να είναι ημιτονοειδείς συναρτήσεις του χρόνου t .

Επιστρέφοντας στις μεταβλητές (x, k) έχουμε

$$Z^{\varepsilon, (2)}(x, k, t) = \mu W_H^\varepsilon(x, k, t) \times \left[\frac{1}{\varepsilon^5} F_1(x, k, t) + \frac{1}{\varepsilon^{5/2}} F_2(x, k, t) + \frac{1}{\varepsilon^3} F_3(x, k, t) + \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} F_4(x, k, t) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\varepsilon} F_5(x, k, t) + \varepsilon^{3/2} F_6(x, k, t) + \varepsilon F_7(x, k, t) \right].$$

Ο υπολογισμός της $\tilde{Z}^{\varepsilon, (2)}$ σε σειρά ιδιοσυναρτήσεων είναι ιδιαίτερα βολικός για την εκτίμηση του πλάτους της κυματοσυνάρτησης, γιατί μπορούμε να εκμεταλλευτούμε ιδιότητες των ιδιοσυναρτήσεων Ψ_{nm} για να κάνουμε την ως προς η ολοκλήρωση. Αντικαθιστούμε στο πρόβλημα αρχικών τιμών (2.40) που ικανοποιεί η $\tilde{Z}^{\varepsilon, (2)}(\xi, \eta, t)$, το ανάπτυγμα της ως προς

τισιδιοσυναρτήσεις $\Psi_{nm}(\xi, \eta)_{n,m=0,1,\dots}$,

$$\tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t) = \sum_n \sum_m z_{nm}^{\varepsilon}(t) \Psi_{nm}(\xi, \eta) ,$$

καθώς και το αντίστοιχο για την $\tilde{W}_h^{\varepsilon}$, που εμφανίζεται στο δεξιό μέλος, και το οποίο δίνεται από την έκφραση

$$\tilde{W}_h^{\varepsilon}(x, k, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} A_{h,nm}^{\varepsilon}(t) \Psi_{nm}(x, k) .$$

Χρησιμοποιώντας την ορθογωνιότητα των Ψ_{nm} προκύπτουν συνήθεις διαφορικές εξισώσεις ως προς τον χρόνο t που ικανοποιούν οι συντελεστές $z_{nm}^{\varepsilon}(t)$ για κάθε $n, m = 0, 1, \dots$. Οι διαφορικές εξισώσεις αυτές είναι επιλύσιμες, λόγω της πολυωνυμικής μορφής του δυναμικού που θεωρούμε στο παράδειγμα και την ειδική μορφή των ιδιοσυναρτήσεων Moyal (πολυώνυμα Laguerre). Τελικά καταλήγουμε στην έκφραση

$$\begin{aligned} \tilde{Z}^{\varepsilon,(2)}(\xi, \eta, t) = & -\frac{\mu}{4\pi} \text{Re} \left(\sum_n \sum_m z_{nm}^{\varepsilon}(t) e^{-i(n-m)t} \Psi_{nm}^{\varepsilon}(\xi, \eta) \right) + \\ & + \frac{3\mu}{4\pi} t \text{Im} \left(\sum_n \sum_m A_{h,nm,o}^{\varepsilon} (n^2 + n) e^{-i(n-m)t} \Psi_{nm}^{\varepsilon}(\xi, \eta) \right) , \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} z_{nm}^{\varepsilon}(t) = & -\frac{1}{8} (e^{i4t} - 1) A_{h,n(m+4),o}^{\varepsilon} ((m+1)(m+2)(m+3)(m+4))^{1/2} + \\ & + \frac{1}{8} (e^{-i4t} - 1) A_{h,n(m-4),o}^{\varepsilon} (m(m-1)(m-2)(m-3))^{1/2} - \\ & - \frac{1}{4} (e^{i2t} - 1) A_{h,n(m+2),o}^{\varepsilon} ((4m+6)(m+1)(m+2))^{1/2} + \\ & + \frac{1}{4} (e^{-i2t} - 1) A_{h,n(m-2),o}^{\varepsilon} ((4m+2)m(m-1))^{1/2} , \end{aligned}$$

με

$$A_{h,nm,o}^{\varepsilon} = (\tilde{W}_0^{\varepsilon}, \Psi_{nm})_{L^2(\mathbb{R}_{\xi,\eta}^2)} .$$

Στη συνέχεια θέτουμε

$$u^\varepsilon = -w^\varepsilon e^{i2t}, \quad w^\varepsilon = \frac{1-z^\varepsilon}{z^\varepsilon}, \quad z^\varepsilon = \frac{1}{2}(1+\varepsilon-i).$$

Για την ολοκλήρωση χρησιμοποιούμε την ταυτότητα

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi_{nm}^\varepsilon(\xi, \eta) d\eta = \psi_n(\xi) \psi_m(\xi),$$

και έχουμε

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \tilde{Z}^{\varepsilon, (2)}(\xi, \eta, t) d\eta &= -\frac{\mu}{4\pi} \sqrt{\varepsilon} \frac{1}{|z^\varepsilon| |1-u^\varepsilon|} e^{-\xi^2} e^{-2\xi^2 \operatorname{Re}\left(\frac{u^\varepsilon}{1-u^\varepsilon}\right)} \times \\ &\times \operatorname{Re} \left(-\frac{1}{8} (e^{i4t} - 1) (\bar{w}^\varepsilon)^2 g_1^\varepsilon(\xi, \eta, t) + \frac{1}{8} (1 - e^{i4t}) g_2^\varepsilon(\xi, \eta, t) - \right. \\ &\left. -\frac{1}{2} (e^{i2t} - 1) \bar{w}^\varepsilon g_3^\varepsilon(\xi, \eta, t) - (e^{-i2t} - 1) e^{i2t} g_4^\varepsilon(\xi, \eta, t) \right) + \\ &+ \frac{3\mu}{4\pi} t \sqrt{\varepsilon} \frac{1}{|z^\varepsilon| |1-u^\varepsilon|} e^{-\xi^2} e^{-2\xi^2 \operatorname{Re}\left(\frac{u^\varepsilon}{1-u^\varepsilon}\right)} \operatorname{Im} (g_5^\varepsilon(\xi, \eta, t)) \end{aligned}$$

με

$$\begin{aligned} g_1^\varepsilon(\xi, \eta, t) &= 3 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^2} + 12\xi^2 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^3} + 4\xi^4 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^4} + 6 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)} + 12\xi^2 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)^2} + 3 \\ g_2^\varepsilon(\xi, \eta, t) &= \frac{3}{(1-u^\varepsilon)^2} + 12\xi^2 \frac{1}{(1-u^\varepsilon)^3} + \xi^4 \frac{1}{(1-u^\varepsilon)^4} \\ g_3^\varepsilon(\xi, \eta, t) &= 6 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^2} + 24\xi^2 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^3} + 8\xi^4 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^4} + 9 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)} + 18\xi^2 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)^2} + 3 \\ g_4^\varepsilon(\xi, \eta, t) &= 3 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)^2} + 12\xi^2 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)^3} + 4\xi^4 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)^4} + \frac{5}{2(1-u^\varepsilon)} + 5\xi^2 \frac{1}{(1-u^\varepsilon)^2} \\ g_5^\varepsilon(\xi, \eta, t) &= \frac{3}{2} \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^2} + 6\xi^2 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^3} + 2\xi^4 \frac{(u^\varepsilon)^2}{(1-u^\varepsilon)^4} + \frac{3u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)} + 3\xi^2 \frac{u^\varepsilon}{(1-u^\varepsilon)}. \end{aligned}$$

Στα εστιακά σημεία $(x_\nu, t_\nu) = (0, \nu\pi - \pi/4)$, $\nu = 1, 2, \dots$, έχουμε $|1-u^\varepsilon| = |1-i\frac{1-\bar{z}^\varepsilon}{z^\varepsilon}| = \frac{1}{|z^\varepsilon|} \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}$, και επομένως

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{Z}^{\varepsilon, (2)}(0, \eta, t_\nu) d\eta = \frac{\sqrt{2}}{\pi\varepsilon^{3/2}} \mu(\beta + \beta^\varepsilon)$$

με

$$\beta^\varepsilon = \left(-\varepsilon^2 \left(\frac{3\pi}{16}(\nu - 1/4) + 3 \right) + \varepsilon \frac{34}{4} \right), \text{ και } \beta = \frac{\pi}{8}(\nu - 1/4) - 3 .$$

Παράρτημα A3: Κλασσικό όριο των ιδιοσυναρτήσεων Moyal

Για να μπορέσουμε να εκτιμήσουμε το κλασσικό όριο $\varepsilon \rightarrow 0$ των ιδιοσυναρτήσεων $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$ στον χώρο φάσεων, είναι απαραίτητο να υπολογίσουμε το όριο

$$(2.67) \quad \varepsilon \rightarrow 0, n \rightarrow \infty, m \rightarrow \infty$$

$$\text{έτσι ώστε } \frac{E_n^\varepsilon - E_m^\varepsilon}{\varepsilon} \rightarrow E_{nm}^0, E_n^\varepsilon \rightarrow E_n^0, E_m^\varepsilon \rightarrow E_m^0,$$

όπου E_{nm}^0, E_n^0, E_m^0 σταθερές (οι λεγόμενες κλασσικές στάθμες ενέργειας της κβαντικής μηχανικής)

Θεώρημα 2.5. Το κλασσικό όριο των (2.67) των συναρτήσεων Moyal $\Phi_{nm}^\varepsilon(x, k)$, που αντιστοιχεί στην Χαμιλτωνιανή $H(x, k)$, σε κανονικές μεταβλητές δράσεως -γωνίας (I, θ) , είναι

$$\Phi_{nm}^0(I, \theta) = e^{-i \frac{E_{nm}^0}{\hbar} \theta} \delta \left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right)$$

Απόδειξη

Θεωρούμε τις εξισώσεις ιδιοτιμών (2.12) και (2.13), για ομαλά δυναμικά $V(x)$ έτσι ώστε οι τελεστές \mathcal{L}^ε και \mathcal{M}^ε να μπορούν να γραφούν στη μορφή (2.18) και (2.19) αντίστοιχα. Οι εξισώσεις (2.12) και (2.13) στο κλασσικό όριο (2.67) δίνουν

$$(2.68) \quad \left(k \frac{\partial}{\partial x} - V'(x) \frac{\partial}{\partial k} \right) \Phi_{nm}^0(x, k) = i E_{nm}^0 \Phi_{nm}^0(x, k),$$

και

$$(2.69) \quad H(x, k) \Phi_{nm}^0(x, k) = \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \Phi_{nm}^0(x, k).$$

Στις κανονικές μεταβλητές (I, θ) , η Χαμιλτωνιανή γίνεται $H(x, k) = H(I)$, και οι (2.68) και (2.69) μετασχηματίζονται στις

$$(2.70) \quad -H'(I) \frac{\partial}{\partial \theta} \Phi_{nm}^0(I, \theta) = iE_{nm}^0 \Phi_{nm}^0(I, \theta) ,$$

και

$$(2.71) \quad H(I) \Phi_{nm}^0(I, \theta) = \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \Phi_{nm}^0(I, \theta) .$$

Η τελευταία οριακή εξίσωση υποδεικνύει ότι η $\Phi_{nm}^0(I, \theta)$ είναι μια συνάρτηση κατανομής της μορφής

$$\Phi_{nm}^0(I, \theta) = g(\theta) \delta \left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right)$$

όπου δ είναι η κατανομή Dirac.

Αντικαθιστώντας στην (2.70) προκύπτει

$$-H'(I) \frac{\partial}{\partial \theta} g(\theta) \delta \left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right) = iE_{nm}^0 g(\theta) \delta \left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right) \Rightarrow$$

$$-\gamma_{nm} \frac{\partial}{\partial \theta} g(\theta) = iE_{nm}^0 g(\theta) \Rightarrow g(\theta) = e^{-i \frac{E_{nm}^0}{\gamma_{nm}} \theta}$$

με $\gamma_{nm} = H' \left(H^{-1} \left(\frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right) \right)$.

$$\text{Επομένως } \Phi_{nm}^0(I, \theta) = e^{-i \frac{E_{nm}^0}{\gamma_{nm}} \theta} \delta \left(H(I) - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right). \quad \blacksquare$$

Για την περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή, όπου $H(x, k) = \frac{k^2}{2} + \frac{x^2}{2}$, έχουμε τον κανονικό μετασχηματισμό

$$H(I) = I , \quad \theta = \arctan \left(\frac{k}{x} \right) ,$$

και $E_n^\varepsilon = \varepsilon(n + \frac{1}{2})$, οπότε το κλασσικό όριο των συναρτήσεων Moyal σύμφωνα με τα παραπάνω θα είναι

$$\Phi_{nm}^0(I, \theta) = e^{-i(n-m)\theta} \delta \left(I - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right)$$

όπου E_n^0 είναι το όριο του εn καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$ και $n \rightarrow \infty$.

Για τον αναρμονικό ταλαντωτή $H(x, k) = \frac{k^2}{2} + \frac{x^4}{4}$, $H(I) = \frac{1}{4}(3I)^{4/3}$ έχουμε τον κανονικό μετασχηματισμό

$$x = (3I)^{1/3} cn(\theta), \quad k = -(3I)^{2/3} sn(\theta) dn(\theta),$$

και επομένως

$$\Phi_{nm}^0(I, \theta) = e^{-i \frac{E_{nm}^0}{\gamma_{nm}} \theta} \delta \left(I - \frac{1}{2}(E_n^0 + E_m^0) \right),$$

με $\gamma_{nm} = \frac{1}{3}(2(E_n^0 + E_m^0))^{1/4}$ [74].

Κεφάλαιο 3

Εξισώσεις διατήρησης κοντά σε καυστικές

Στο κεφάλαιο αυτό κατασκευάζουμε μια άπειρη ακολουθία εξισώσεων διατήρησης για την ημικλασσική εξίσωση Schrödinger, χρησιμοποιώντας τις ροπές των λύσεων της εξίσωσης Wigner (κβαντική εξίσωση Liouville), και μελετάμε την συμπεριφορά των ε -εξαρτώμενων ροπών m_ε^i κοντά σε καυστικές. Επειδή η εξίσωση Wigner περιέχει όρους κάθε τάξης ως προς την μικρή παράμετρο, αντίθετα από τις εξισώσεις ροπών που προκύπτουν από την κλασσική εξίσωση Liouville, παρέχει μια ιεραρχία από εξισώσεις διατήρησης οι οποίες ισχύουν ομοιόμορφα ακόμα και όταν το κυματικό πεδίο εμφανίζει καυστικές. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται με αναλυτικά παραδείγματα για απλές καυστικές, όπως τα εστιακά σημεία ενός αρμονικού ταλαντωτή και η ομαλή καυστική fold που δημιουργείται από τα αρχικά δεδομένα στην ειδική περίπτωση της εξίσωσης Schrödinger χωρίς δυναμικό. Επίσης κάνουμε κάποιες δομικές παρατηρήσεις ανάμεσα στην σχέση των αποκτηθέντων εξισώσεων διατήρησης με εκείνες που προκύπτουν από εφαρμογή του μεταβολικού θεωρήματος της Noether. Στην περίπτωση γενικών δυναμικών, αυτή η κλασσική μεταβολική προσέγγιση παρέχει εξισώσεις οι οποίες επαρκούν για την μελέτη κυματικών πεδίων ελεύθερων από καυστικές, ενώ η εξίσωση Wigner στο χώρο φάσεων μπορεί να παράσχει όσες εξισώσεις είναι απαραίτητες για μελέτη κυματικών πεδίων με καυστικές.

Πιο συγκεκριμένα, στην πρώτη παράγραφο παρατηρούμε ότι παίρνοντας τις ροπές διαδοχικών τάξεων της εξίσωσης Wigner, ως προς την ορμή, παράγουμε ένα άπειρο σύστημα μη-ομογενών εξισώσεων διατήρησης για τις ροπές, όπου ο μη ομογενής όρος εκφράζεται με τις ροπές μικρότερης τάξης. Οι μη ομογενείς όροι τυπικά εξαφανίζονται στο όριο

$\varepsilon \rightarrow 0$. Στην δεύτερη παράγραφο παρουσιάζουμε το θεώρημα Noether, και παράγουμε εξ' αυτού τους νόμους διατήρησης της ενέργειας και της Χαμιλτωνιανής, από το αναλλοίωτο της Λαγκρανζιανής ως προς το χρόνο και τη 'μικρή φάση' (gauge transformation). Επίσης παράγουμε και ένα ακόμα μη-ομογενή νόμο από το μεταβολικό ολοκλήρωμα το οποίο χρησιμοποιείται στην απόδειξη του θεωρήματος Noether με χωρική μεταβολή, παρ' ότι η Λαγκρανζιανή δεν είναι αναλλοίωτη ως προς χωρικές μεταβολές λόγω της παρουσίας του δυναμικού. Συνεπώς η μεταβολική προσέγγιση δεν μπορεί να παράγει (η τουλάχιστον δεν γνωρίζουμε τις απαραίτητες συμμετρίες της Λαγκρανζιανής) το απαραίτητο πλήθος εξισώσεων για την μελέτη της πολυφασικής (multi-phase) οπτικής. Τέλος, στην τελευταία παράγραφο μελετούμε την συμπεριφορά των εξισώσεων διατήρησης στα σημεία εστίασης (focal points) που παράγονται από ένα τετραγωνικό δυναμικό (αρμονικός ταλαντωτής) και για μια ομαλή καυστική (fold) που δημιουργείται από ένα κατάλληλο αρχικό πεδίο ψ_0^ε στην περίπτωση μηδενικού δυναμικού $V \equiv 0$.

Αποδεικνύεται ότι οι ε-εξαρτώμενες εξισώσεις διατήρησης ισχύουν ακόμα και σε περιοχές καυστικών. Επομένως, φαίνεται ότι αυτές οι εξισώσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως εναλλακτικό εργαλείο που μπορεί να επεξεργαστεί τις διαφορετικές κλίμακες (scales) που εμφανίζονται κοντά σε καυστικές, σε αντίθεση με τις εξισώσεις που ικανοποιούν οι οριακές ροπές. Παρ' όλαυτά, η επιλογή της κατάλληλης συνθήκης 'κλεισίματος' για την άπειρη ιεραρχία των εξισώσεων διατήρησης παραμένει ανοιχτό πρόβλημα.

3.1 Εξισώσεις διατήρησης

3.1.1 Ροπές της συνάρτησης Wigner.

Θεωρούμε τον μετασχηματισμό Wigner μιας ομαλής κυματικής συνάρτησης $\psi(x) = \psi^\varepsilon(x, t)$, για σταθερό χρόνο t (βλ.1.23),

$$W^\varepsilon(x, k) = W^\varepsilon[\psi](x, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{iky} \psi\left(x - \frac{\varepsilon y}{2}\right) \bar{\psi}\left(x + \frac{\varepsilon y}{2}\right) dy ,$$

και εισάγουμε τις ℓ -οστες ροπές της ως προς την μεταβλητή ορμής k

$$(3.1) \quad m_\ell^\varepsilon(x) = \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x, k) dk. \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Για συντομία, παραλείπουμε την χρονική μεταβλητή t στα ορίσματα, έως ότου κατασκευά-

σομε τις εξισώσεις εξέλιξης για τις ροπές.

Αντικαθιστώντας την $W^\varepsilon(x, k)$ στην (3.1) έχουμε

$$\begin{aligned}
 m_\ell^\varepsilon(x) &= \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x, k) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} k^\ell e^{iky} \psi(x - \frac{\varepsilon y}{2}) \bar{\psi}(x + \frac{\varepsilon y}{2}) dy dk \\
 &= \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} k^\ell e^{iky} dk \right) \psi(x - \frac{\varepsilon y}{2}) \bar{\psi}(x + \frac{\varepsilon y}{2}) dy \\
 &= \frac{1}{i^\ell} \int_{\mathbb{R}} \delta_0^\ell(y) \psi(x - \frac{\varepsilon y}{2}) \bar{\psi}(x + \frac{\varepsilon y}{2}) dy \\
 &= i^\ell \left(\frac{\varepsilon}{2} \right)^\ell \sum_{\lambda=0}^{\ell} \binom{\ell}{\lambda} (-1)^\lambda \psi^{(\lambda)}(x) \bar{\psi}^{(\ell-\lambda)}(x) ,
 \end{aligned}$$

δηλαδή

$$(3.2) \quad m_\ell^\varepsilon(x) = i^\ell \left(\frac{\varepsilon}{2} \right)^\ell \sum_{\lambda=0}^{\ell} \binom{\ell}{\lambda} (-1)^\lambda \psi^{(\lambda)}(x) \bar{\psi}^{(\ell-\lambda)}(x) .$$

Από την (3.2) προκύπτει ότι η μηδενικής τάξης ροπή (για $\ell = 0$)

$$m_0^\varepsilon(x) = \psi(x) \bar{\psi}(x) = |\psi(x)|^2 ,$$

ταυτίζεται με την πυκνότητα ενέργειας (energy density), ενώ η πρώτης τάξης ροπή (για $\ell = 1$)

$$m_1^\varepsilon(x) = i \frac{\varepsilon}{2} (\psi(x) \bar{\psi}_x(x) - \psi_x(x) \bar{\psi}(x)) = -i \frac{\varepsilon}{2} 2i \operatorname{Im}(\bar{\psi} \psi_x) = \varepsilon \operatorname{Im}(\bar{\psi} \psi_x)$$

ταυτίζεται με την ροή ενέργειας (energy flux). Στην συνέχεια, για $\ell = 2, 3, 4, \dots$ έχουμε

$$\begin{aligned}
 m_2^\varepsilon(x) &= i^2 \left(\frac{\varepsilon}{2} \right)^2 [\psi(x) \bar{\psi}_{xx}(x) - 2\psi_x(x) \bar{\psi}_x(x) + \psi_{xx}(x) \bar{\psi}(x)] \\
 &\quad - \frac{\varepsilon^2}{4} [\psi(x) \bar{\psi}_{xx}(x) + \psi_{xx}(x) \bar{\psi}(x) - 2|\psi_x(x)|^2] \\
 &= -\frac{\varepsilon^2}{2} \operatorname{Re}(\psi_{xx} \bar{\psi}) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\psi_x|^2 ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_3^\varepsilon(x) &= i^3 \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^3 [\psi(x)\bar{\psi}_{xxx}(x) - 3\psi_x(x)\bar{\psi}_{xx}(x) + 3\psi_{xx}(x)\bar{\psi}_x(x) - \psi_{xxx}(x)\bar{\psi}(x)] \\
&= -i \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^3 [-(\psi_{xxx}\bar{\psi} - \psi\bar{\psi}_{xxx}) + 3(\bar{\psi}_x\psi_{xx} - \psi_x\bar{\psi}_{xx})] \\
&= \frac{\varepsilon^3}{8i} [-2i\text{Im}(\psi_{xxx}\bar{\psi}) + 6i\text{Im}(\bar{\psi}_x\psi_{xx})] \\
&= \varepsilon^3 \text{Im} \left(\frac{3}{4}\bar{\psi}_x\psi_{xx} - \frac{1}{4}\bar{\psi}\psi_{xxx} \right),
\end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned}
m_4^\varepsilon(x) &= i^4 \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^4 [\psi(x)\bar{\psi}_{xxxx} - 4\psi_x(x)\bar{\psi}_{xxx}(x) + 6\psi_{xx}(x)\bar{\psi}_{xx}(x) - 4\psi_{xxx}(x)\bar{\psi}_x(x) + \bar{\psi}(x)\psi_{xxxx}(x)] \\
&= \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^4 [2\text{Re}(\psi_{xxxx}\bar{\psi}) + 6|\psi_{xx}|^2 - 8\text{Re}(\psi_{xxx}\bar{\psi}_x)] \\
&= \varepsilon^4 \left[\text{Re} \left(\frac{1}{8}\psi_{xxxx}\bar{\psi} - \frac{1}{2}\bar{\psi}_x\psi_{xxx} \right) + \frac{3}{8}|\psi_{xx}|^2 \right], \quad \text{κ.ο.κ.}
\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι, για κάθε ℓ , η ροπή m_ℓ^ε είναι πραγματική ποσότητα, και εκφράζεται είτε ως το πραγματικό είτε ως το φανταστικό μέρος συναρτήσεων που περιέχουν μόνο χωρικές παραγώγους της κυματοσυνάρτησης, πολλαπλασιασμένη με τον παράγοντα ε^ℓ .

Τέλος, είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι για WKB κυματοσυναρτήσεις $\psi(x) = A(x)e^{iS(x)/\varepsilon}$, μόνο οι ροπές $m_0^\varepsilon, m_1^\varepsilon$ ταυτίζονται με τις αντίστοιχες οριακές ροπές m_0^0, m_1^0 , όπως εύκολα προκύπτει υπολογίζοντας τις ροπές του οριακού μέτρου Wigner, το οποίο δίνεται από την έκφραση $W^0(x, k) = A^2(x)\delta(k - S'(x))$ (βλ.(1.25)). Οι ροπές τάξεως $\ell \geq 2$ εξαρτώνται ουσιωδώς από την παράμετρο ε με όρους τάξεως $O(\varepsilon^\ell)$.

3.1.2 Εξισώσεις ροπών για την εξίσωση Schrödinger.

Έστω ότι η $\psi^\varepsilon(x, t)$ είναι μια ομαλή λύση της εξίσωσης Schrödinger (1.8)

$$(3.3) \quad i\varepsilon\psi_t^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - V(x)\psi^\varepsilon(x, t) = 0,$$

και $W^\varepsilon(x, k, t)$ ο μετασχηματισμός Wigner της $\psi^\varepsilon(x, t)$

Για να πάρουμε τις εξισώσεις ροπών χρησιμοποιούμε την εξίσωση Wigner (1.28)

$$(3.4) \quad \partial_t W^\varepsilon(x, k, t) + k \partial_x W^\varepsilon(x, k, t) - \Theta^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, k, t) = 0$$

Υπενθυμίζεται ότι ο τελεστής $\Theta^\varepsilon[V]$ δίνεται από την έκφραση (1.27). Πολλαπλασιάζοντας αυτή την εξίσωση με k^ℓ , ολοκληρώνοντας στο \mathbb{R} ως προς k , και χρησιμοποιώντας τον ορισμό (3.1) της ℓ -οστης ροπής, έχουμε

$$\int_{\mathbb{R}} k^\ell W_t^\varepsilon(x, k, t) dk + \int_{\mathbb{R}} k^{\ell+1} W_x^\varepsilon(x, k, t) dk - \int_{\mathbb{R}} k^\ell \Theta^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, k, t) dk = 0 ,$$

Υποθέτοντας ότι η W^ε έχει την απαιτούμενη ομαλότητα, και φθίνει καθώς $|k| \rightarrow \infty$, παίρνουμε

$$\partial_t \left[\int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x, k, t) dk \right] + \partial_x \left[\int_{\mathbb{R}} k^{\ell+1} W^\varepsilon(x, k, t) dk \right] - \int_{\mathbb{R}} k^\ell \Theta^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, k, t) dk = 0 .$$

Η τελευταία εξίσωση γράφεται ως προς τις ροπές m_ℓ^ε , στη μορφή

$$\partial_t [m_\ell^\varepsilon(x, t)] + \partial_x [m_{\ell+1}^\varepsilon(x, t)] - \Theta_\ell(x, t) = 0 ,$$

όπου

$$(3.5) \quad \begin{aligned} \Theta_\ell(x, t) &= \int_{\mathbb{R}} k^\ell \Theta^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, k, t) dk \\ &= \frac{i}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} k^\ell \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} e^{i(k-\xi)y} W^\varepsilon(x, \xi, t) \left[V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right] dy d\xi dk \\ &= \frac{i}{2\pi\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} k^\ell e^{iky} dk \right] e^{-i\xi y} W^\varepsilon(x, \xi, t) \left[V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right] dy d\xi \\ &= \frac{i}{\varepsilon i^\ell} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \delta^{(\ell)}(y) e^{-i\xi y} \left[V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right] W^\varepsilon(x, \xi, t) dy d\xi \\ &= \frac{i(-1)^\ell}{\varepsilon i^\ell} \int_{\mathbb{R}} \frac{d^\ell}{dy^\ell} \left\{ e^{-i\xi y} \left[V(x + \frac{\varepsilon}{2}y) - V(x - \frac{\varepsilon}{2}y) \right] \right\} \Big|_{y=0} W^\varepsilon(x, \xi, t) d\xi \\ &= \frac{i(-1)^\ell}{\varepsilon i^\ell} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}_\ell^\varepsilon[V](x, \xi) W^\varepsilon(x, \xi, t) d\xi , \end{aligned}$$

με

$$\mathcal{A}_\ell^\varepsilon[V](x, \xi) := \frac{d^\ell}{dy^\ell} \left\{ e^{-i\xi y} \left[V\left(x + \frac{\varepsilon}{2}y\right) - V\left(x - \frac{\varepsilon}{2}y\right) \right] \right\} \Big|_{y=0} .$$

Επιπλέον υποθέτοντας ότι το δυναμικό είναι ομαλό, ώστε να χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor, οι ποσότητες $\mathcal{A}_\ell^\varepsilon[V]$, $\ell = 1, 2, \dots$ μπορούν να γραφούν ως ακολούθως

$$(3.6) \quad \begin{aligned} \mathcal{A}_\ell^\varepsilon[V] &= 2 \frac{d^\ell}{dy^\ell} \left[e^{-i\xi y} \sum_{j=0}^N \left(\frac{\varepsilon y}{2}\right)^{2j+1} \frac{1}{(2j+1)!} V^{(2j+1)}(x) + O(\varepsilon^{2N+3}) \right] \Big|_{y=0} \\ &= 2 \sum_{\lambda=0, \lambda \text{ odd}}^{\ell} \binom{\ell}{\lambda} (-i\xi)^{\ell-\lambda} \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^\lambda V^{(\lambda)}(x) . \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι για $\ell = 0$ ισχύει

$$\mathcal{A}_0^\varepsilon[V] = e^{-i\xi y} \left[V\left(x + \frac{\varepsilon}{2}y\right) - V\left(x - \frac{\varepsilon}{2}y\right) \right] \Big|_{y=0} = 0 ,$$

επομένως $\Theta_0 = 0$.

Για $\ell \geq 1$, από τις (3.6), (3.5) έχουμε

$$(3.7) \quad \begin{aligned} \Theta_\ell(x, t) &= \frac{i(-1)^\ell}{\varepsilon i^\ell} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}^\varepsilon[V] W^\varepsilon(x, \xi, t) d\xi \\ &= -\ell V'(x) m_{\ell-1}^\varepsilon(x, t) - \sum_{\lambda=3, \lambda \text{ odd}}^{\ell} \binom{\ell}{\lambda} i^{\lambda-1} \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^{\lambda-1} V^{(\lambda)}(x) m_{\ell-\lambda}^\varepsilon(x, t) , \end{aligned}$$

όπου το άθροισμα υπάρχει για $\ell \geq 3$.

Επομένως η μηδενικής τάξης εξίσωση ροπής ($\ell = 0$) δίνεται από

$$(3.8) \quad \partial_t [m_0^\varepsilon(x, t)] + \partial_x [m_1^\varepsilon(x, t)] = 0 ,$$

και οι ℓ -οστης τάξης εξισώσεις ($\ell \geq 1$) δίνονται από

$$(3.9) \quad \begin{aligned} \partial_t [m_\ell^\varepsilon(x, t)] + \partial_x [m_{\ell+1}^\varepsilon(x, t)] &= -\ell V'(x) m_{\ell-1}^\varepsilon(x, t) \\ &- \sum_{\lambda=3, \lambda \text{ odd}}^{\ell} \binom{\ell}{\lambda} i^{\lambda-1} \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^{\lambda-1} V^{(\lambda)}(x) m_{\ell-\lambda}^\varepsilon(x, t) \quad \ell = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

3.1.3 Οι οριακές εξισώσεις ροπής.

Έστω $W^0(x, k, t)$ η οριακή κατανομή Wigner, που είναι το ασθενές όριο του μετασχηματισμού (συνάρτησης) Wigner, καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$. Υπενθυμίζουμε ότι η $W^0(x, k, t)$ είναι τυπικά λύση της οριακής εξίσωσης Wigner (1.31),

$$(3.10) \quad \partial_t W^0(x, k, t) + k \partial_x W^0(x, k, t) - V'(x) \partial_k W^0(x, k, t) = 0 ,$$

Οι οριακές ροπές

$$m_\ell^0(x, t) = \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^0(x, k, t) dk, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots ,$$

ικανοποιούν τυπικά τις οριακές εξισώσεις ροπών

$$\partial_t [m_0^0(x, t)] + \partial_x [m_1^0(x, t)] = 0 , \quad \ell = 0 ,$$

και

$$\partial_t [m_\ell^0(x, t)] + \partial_x [m_{\ell+1}^0(x, t)] = -\ell V'(x) m_{\ell-1}^0(x, t) , \quad \ell = 1, 2, \dots$$

που προκύπτουν ολοκληρώνοντας ως προς k την εξίσωση Liouville πολλαπλασιασμένη με k^ℓ , όπως κάναμε για την ε -εξαρτώμενη εξίσωση Wigner. Παρατηρούμε ότι οι παραπάνω εξισώσεις προκύπτουν επίσης ως το τυπικό όριο καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$ των (3.8) και (3.9).

Είναι σημαντικό σ' αυτό το σημείο να τονίσουμε ότι οι οριακές ροπές m_ℓ^0 , όπως και η εξίσωση Liouville (3.10) , εξαρτώνται μόνο από την πρώτη παράγωγο του δυναμικού $V'(x)$, ενώ οι ε -εξαρτώμενες ροπές εξαρτώνται και από μεγαλύτερης τάξης παραγώγους του δυναμικού. Επίσης παρατηρούμε ότι το άθροισμα στην έκφραση (3.7) εμφανίζεται μόνο για $\ell \geq 3$, επομένως οι όροι $\Theta_\ell, \ell = 1, 2$, εξαρτώνται μόνο από $V'(x)$ και δεν έχουν άμεση εξάρτηση από το ε , ενώ μεγαλύτερης τάξης παράγωγοι του δυναμικού και η άμεση εξάρτηση από το ε μέσω του μη ομογενή όρου, εμφανίζονται μόνο μετά την τρίτης τάξης εξίσωση ροπών. Επιπλέον, προκύπτει ότι οι δυο πρώτες εξισώσεις ροπών έχουν την ίδια μορφή και για τις ε -εξαρτώμενες και για τις οριακές ροπές. Οι Jin και Li [44], έχουν μελετήσει τις m_ℓ^0 ως το ασθενές όριο των m_ℓ^ε , καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, εφαρμόζοντας την μέθοδο Witham's (averaging method).

3.2 Εξισώσεις διατήρησης από το θεώρημα Noether

Σ' αυτήν την παράγραφο περιγράφουμε σύντομα την παραγωγή των νόμων διατήρησης για την εξίσωση Schrödinger που προκύπτουν από την εφαρμογή του θεωρήματος μεταβολών Noether (μια σύντομη παρουσίαση του θεωρήματος δίνεται στο παράρτημα), και σχολιάζουμε τη σχέση των αντίστοιχων εξισώσεων Euler-Lagrange με το σύστημα Bohm.

Υπενθυμίζουμε ότι η εξίσωση Schrödinger μπορεί να παραχθεί από μια Lagrangian πυκνότητα. Αν $\psi = \psi^e$ είναι μια ομαλή λύση της εξίσωσης Schrödinger (3.3), η αντίστοιχη Lagrangian δίνεται από

$$(3.11) \quad \mathcal{L} = \mathcal{L}(x, t, \psi, \bar{\psi}, \psi_t, \bar{\psi}_t, \psi_x, \bar{\psi}_x) \frac{i\varepsilon}{2} (\bar{\psi}\psi_t - \psi\bar{\psi}_t) - \frac{\varepsilon^2}{2} \psi_x \bar{\psi}_x - V(x)\psi\bar{\psi} ,$$

ορισμένη στο $D = \{(x, t) | x \in \mathbb{R}, t > 0\}$. Σημειώνουμε ότι εδώ θεωρούμε τις ψ, ψ_x, ψ_t και τις συζυγείς τους ποσότητες $\bar{\psi}, \bar{\psi}_x, \bar{\psi}_t$ ως ανεξάρτητες μεταβλητές στην \mathcal{L} . Αυτό είναι αποτέλεσμα της ιδιότητας ότι η εξίσωση Schrödinger είναι ένα σύστημα ως προς $\psi_R = \Re\psi$ και $\psi_I = \Im\psi$, ή ισοδύναμα ως προς ψ και $\bar{\psi}$. Το σύστημα των εξισώσεων Euler-Lagrange (3.28) στο Παράρτημα Β, οδηγεί στην (3.3) και την μιγαδική συζυγή της. Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι οι παραγώμενες εξισώσεις για τις $\psi, \bar{\psi}$ δεν είναι συζευγμένες, αφού η εξίσωση Schrödinger είναι μια μονοδιάστατη εξίσωση για την κυματοσυνάρτηση. Πραγματικά οι εξισώσεις (3.28) σ' αυτή την περίπτωση έχουν τη μορφή

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} \right) = 0 ,$$

και

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_t} \right) = 0 ,$$

οι οποίες, μετά από απλούς υπολογισμούς, δίνουν την (3.3) και την μιγαδική συζυγή της.

$$-i\varepsilon \partial_t \bar{\psi} + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 \bar{\psi} - V(x)\bar{\psi} = 0 .$$

Επομένως, μπορούμε να εφαρμόσουμε το θεώρημα Noether για να κατασκευάσουμε νόμους διατήρησης που αντιστοιχούν στην (3.3) . Το ολοκλήρωμα δράσης (action integral)

$$(3.12) \quad \mathcal{J}[\psi^\varepsilon] = \int_0^t \int_{\mathbb{R}} \mathcal{L}(x, t, \psi, \bar{\psi}, \psi_t, \bar{\psi}_t, \psi_x, \bar{\psi}_x) dx dt$$

είναι αναλλοίωτο κάτω από μετατοπίσεις φάσης της ψ και χρονικές μεταβολές. Όμως δεν είναι αναλλοίωτο κάτω από χωρικές μετατοπίσεις λόγω της παρουσίας του δυναμικού $V(x)$, και παρά το γεγονός ότι δεν εφαρμόζεται άμεσα το θεώρημα Noether σ' αυτήν την περίπτωση, μπορούμε, χρησιμοποιώντας την μεταβολική σχέση στο Λήμμα (B.1), να αποκτήσουμε μια τρίτη μη ομογενή εξίσωση διατήρησης.

Στην περίπτωση μας οι νόμοι διατήρησης (3.27) στο Παράρτημα Β γράφονται στη μορφή

$$(3.13) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} (\delta \psi - \psi_t \delta t - \psi_x \delta x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_t} (\delta \bar{\psi} - \bar{\psi}_t \delta t - \bar{\psi}_x \delta x) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathcal{L} \delta x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_x} (\delta \psi - \psi_t \delta t - \psi_x \delta x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_x} (\delta \bar{\psi} - \bar{\psi}_t \delta t - \bar{\psi}_x \delta x) \right] = 0 . \end{aligned}$$

3.2.1 Αναλλοίωτο ως προς τη μετατόπιση φάσης (gauge invariance)

Η Lagrangian πυκνότητα \mathcal{L} , για κάθε ομαλό δυναμικό, είναι gauge αναλλοίωτη, δηλαδή είναι αναλλοίωτη ως προς τον μετασχηματισμό $\psi^* = \psi \exp(is)$, ο οποίος για απειροελάχιστο (infinitesimal) s , δίνει $\delta \psi = is\psi$ με $\delta t = \delta x = 0$. Τότε, η (3.13) δίνει

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} (\delta \psi) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_t} (\delta \bar{\psi}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_x} (\delta \psi) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_x} (\delta \bar{\psi}) \right] = 0 .$$

Αντικαθιστώντας $\delta \psi = is\psi$ και $\delta \bar{\psi} = -is\bar{\psi}$ στην τελευταία εξίσωση έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i\varepsilon}{2} \bar{\psi} is\psi + \left(-\frac{i\varepsilon}{2}\right) \psi (-is\bar{\psi}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{\varepsilon^2}{2} \bar{\psi}_x is\psi + \left(-\frac{\varepsilon^2}{2}\right) \psi_x (-is\bar{\psi}) \right] = 0 ,$$

και απαλείφοντας την παράμετρο s παίρνουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\psi|^2) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varepsilon}{2i} (\psi_x \bar{\psi} - \bar{\psi}_x \psi) \right) = 0 .$$

Εισάγοντας τις ποσότητες

$$m_0^\varepsilon(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

και

$$m_1^\varepsilon(x, t) = \varepsilon \operatorname{Im}(\bar{\psi}(x, t)\psi_x(x, t)) ,$$

δηλαδή, την πυκνότητα ενέργειας και την πυκνότητα ροής, αντίστοιχα, γράφουμε τον νόμο διατήρησης της ενέργειας στη μορφή

$$(3.14) \quad \frac{\partial}{\partial t} m_0^\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x} m_1^\varepsilon = 0.$$

3.2.2 Αναλλοίωτο ως προς τη μετατόπιση χρόνου

Επειδή το δυναμικό είναι ανεξάρτητο του χρόνου, το ολοκλήρωμα δράσης (3.12) είναι επίσης αναλλοίωτο ως προς τις χρονικές μεταβολές $t^* = t + \delta t$ με $\delta x = \delta \psi = \delta \bar{\psi} = 0$. Επομένως οι (3.13) δίνουν

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} \psi_t - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_t} \bar{\psi}_t \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_x} \psi_t - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_x} \bar{\psi}_t \right] = 0$$

και εισάγοντας τις ποσότητες

$$m_2^\varepsilon(x, t) = -\frac{\varepsilon^2}{2} \operatorname{Re}(\bar{\psi}\psi_{xx}) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\psi_x|^2 ,$$

και

$$m_3^\varepsilon(x, t) = \varepsilon^3 \operatorname{Im} \left(\frac{3}{4} \bar{\psi}_x \psi_{xxx} - \frac{1}{4} \bar{\psi} \psi_{xxx} \right) ,$$

έχουμε την εξίσωση διατήρησης

$$\frac{\partial}{\partial t} m_2^\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x} m_3^\varepsilon + \mathbf{A} = 0 ,$$

όπου

$$\mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} \operatorname{Re}(\bar{\psi}\psi_{xx}) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(-m_3^\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{2} (\bar{\psi}_x \psi_t + \psi_x \bar{\psi}_t) \right) + V(x) \partial_t m_0^\varepsilon .$$

Μπορεί να αποδειχθεί μετά από υπολογισμούς, χρησιμοποιώντας την εξίσωση Schrödinger, ότι $\mathbf{A} = 2V'(x)m_1^\varepsilon$, και στην περίπτωση μηδενικού δυναμικού, οδηγεί προφανώς σε τετριμμένο νόμο διατήρησης. (δες, π.χ.[64] για τετριμμένους νόμους διατήρησης).

Επομένως, η εξίσωση διατήρησης που προκύπτει από το αναλλοίωτο ως προς χρονικές

μεταβολές γράφεται τελικά

$$(3.15) \quad \frac{\partial}{\partial t} m_2^\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x} m_3^\varepsilon = -2V'(x)m_1^\varepsilon$$

Σημειώνουμε πως αυτός ο νόμος διατήρησης είναι ισοδύναμος με την διατήρηση της κβαντικής Χαμιλτωνιανής (δες, π.χ., [80] Sec.2.1)

$$\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\partial_x \psi^\varepsilon(x, t)|^2 - V(x) |\psi^\varepsilon(x, t)|^2 \right) dx$$

3.2.3 Μεταβολές ως προς τη χωρική μετατόπιση

Στην περίπτωση γενικού (μη σταθερού) δυναμικού η δράση \mathcal{J} δεν είναι αναλλοίωτη κάτω από χωρικές μετατοπίσεις $x^* = x + \delta x$ με $\delta t = \delta \psi = \delta \bar{\psi} = 0$, και, σ' αυτήν την περίπτωση το θεώρημα Noether δεν εφαρμόζεται.

Παρά το γεγονός αυτό, είναι δυνατόν να πάρουμε μια μη-ομογενή εξίσωση διατήρησης που αντιστοιχεί στη μεταβολή της δράσης κάτω από χωρική μετατόπιση. Σημειώνουμε ότι στη συνέχεια, για να τονίσουμε την εξάρτηση της Lagrangian από το δυναμικό $V(x)$ γράφουμε $\mathcal{L}(V(x))$ παραλείποντας άλλες εξαρτήσεις.

Η μεταβολική σχέση στο Λήμμα B.1 του παραρτήματος, στην οποία βασίζεται η απόδειξη του θεωρήματος Noether, γίνεται

$$\begin{aligned} & \int_D \left(\frac{\partial}{\partial t} \left[\mathcal{L} \delta t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} (\delta \psi - \psi_t \delta t - \psi_x \delta x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_t} (\delta \bar{\psi} - \bar{\psi}_t \delta t - \bar{\psi}_x \delta x) \right] + \right. \\ & \left. \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathcal{L} \delta x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_x} (\delta \psi - \psi_t \delta t - \psi_x \delta x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_x} (\delta \bar{\psi} - \bar{\psi}_t \delta t - \bar{\psi}_x \delta x) \right] \right) dx dt \\ & = \int_D \left(\mathcal{L}(V(x^*)) - \mathcal{L}(V(x)) \right) dx dt \approx -V'(x) |\psi|^2 \delta x . \end{aligned}$$

Έτσι, από την ταυτότητα

$$\frac{i\varepsilon}{2} (\psi_t \bar{\psi} - \psi \bar{\psi}_t) = V(x) |\psi|^2 - \frac{\varepsilon^2}{2} \operatorname{Re}(\psi_{xx} \bar{\psi}) ,$$

η οποία προκύπτει εύκολα από την εξίσωση Schrödinger (3.3), παίρνουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[-\frac{i\varepsilon}{2} \bar{\psi} \psi_x + \frac{i\varepsilon}{2} \psi \bar{\psi}_x \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\varepsilon}{2} (\bar{\psi} \psi_t - \psi \bar{\psi}_t) - \frac{\varepsilon^2}{2} \psi_x \bar{\psi}_x - V(x) \psi \bar{\psi} + \frac{\varepsilon^2}{2} \psi_x \bar{\psi}_x + \frac{\varepsilon^2}{2} \psi_x \bar{\psi}_x \right] = -V'(x) m_0^\varepsilon .$$

Χρησιμοποιώντας τους ορισμούς των m_1^ε και m_2^ε , η προηγούμενη εξίσωση γράφεται

$$(3.16) \quad \partial_t m_1^\varepsilon + \partial_x m_2^\varepsilon = -V'(x) m_0^\varepsilon .$$

Στην περίπτωση μηδενικού δυναμικού οι εξισώσεις διατήρησης (3.15) και (3.16) είναι ομογενείς.

Θα πρέπει επίσης να τονίσουμε εδώ ότι δεν φαίνεται δυνατόν να αποκτήσουμε περισσότερες εξισώσεις διατήρησης μέσω της μεταβολικής σχέσης στο θεώρημα Noether. Όμως, όπως απεδείχθη στην προηγούμενη παράγραφο, τέτοιες εξισώσεις προκύπτουν με έναν απλό άμεσο τρόπο, χρησιμοποιώντας την ιεραρχία των ροπών για την εξίσωση Wigner στον χώρο φάσεων.

Παρατήρηση. Αντικαθιστώντας την κυματική συνάρτηση

$$\psi^\varepsilon(x, t) = A^\varepsilon(x, t) e^{iS^\varepsilon(x, t)/\varepsilon} ,$$

η Λαγκρανζιανή (3.11) γράφεται στη μορφή

$$\mathcal{L}(x, t, A^\varepsilon, \partial_x A^\varepsilon, \partial_t A^\varepsilon, \partial_x S, \partial_t S) = -(A^\varepsilon)^2 \left(\partial_t S^\varepsilon + \frac{1}{2} (\partial_x S^\varepsilon)^2 + V(x) \right) - \frac{\varepsilon^2}{2} (\partial_t A^\varepsilon)^2 ,$$

και θεωρώντας την \mathcal{L} ως συνάρτηση των $(x, t, A^\varepsilon, \partial_x A^\varepsilon, \partial_t A^\varepsilon, \partial_x S^\varepsilon, \partial_t S^\varepsilon)$. Τότε, οι αντίστοιχες εξισώσεις Euler-Lagrange είναι

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A^\varepsilon} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_x A^\varepsilon)} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t A^\varepsilon)} \right) = 0 ,$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial S^\varepsilon} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_x S^\varepsilon)} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t S^\varepsilon)} \right) = 0 ,$$

οι οποίες δίνουν ακριβώς το σύστημα εξισώσεων Bohm (βλ.1.14, 1.15)

3.3 Παραδείγματα με καυστικές

3.3.1 Εστιακά σημεία συσσώρευσης ενός αρμονικού ταλαντωτή

Σ' αυτό το παράδειγμα θεωρούμε τις εξισώσεις ροπών για τον αρμονικό ταλαντωτή

$$i\varepsilon\psi_t^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\psi^\varepsilon - V(x)\psi^\varepsilon = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad V(x) = \frac{\Omega^2 x^2}{2},$$

με αρχικά δεδομένα Gauss-Fresnel

$$\psi_\varepsilon^0(x) = \psi^\varepsilon(x, 0) = A_0(x)e^{iS_0(x)/\varepsilon}$$

$$A_0(x) = e^{-\lambda^2 x^2/2}, \quad S_0(x) = \mu^2 x^2/2,$$

όπου Ω, μ, λ είναι θετικές σταθερές.

Η λύση γεωμετρικής οπτικής γι' αυτό το πρόβλημα προβλέπει την ύπαρξη άπειρου αριθμού εστιακών σημείων (focal points) των ακτίνων, οι οποίες δίνονται από την εξίσωση (βλ. 1.16)

$$\tilde{x}(t; q) = q \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right).$$

Η Ιακωβιανή του μετασχηματισμού είναι

$$(3.17) \quad J(t; q) = \frac{\partial \tilde{x}(t; q)}{\partial q} = \cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t),$$

και μηδενίζεται για $t_m = \frac{1}{\Omega}(m\pi + \arctan(-\Omega/\mu^2))$, $m = 1, 2, \dots$, για κάθε αρχικό σημείο q . Αυτός είναι ο λόγος που στη συνέχεια θα γράφουμε $J(t)$ αντί για το πλήρες σύμβολο $J(t; q)$ που δείχνει την εξάρτηση ως προς q στην γενική περίπτωση. Επομένως, η καυστική αποτελείται από τα σημεία

$$\{x_m = \tilde{x}(t_m; q) = 0, \quad t = t_m\}$$

στο xt -επίπεδο, και κάθε χαρακτηριστική που αρχίζει από τον άξονα x περνάει από τα σημεία συσσώρευσης, δηλαδή, δημιουργείται μια περιοδική εστίαση-αφεστίαση στη διάδοση ενέργειας.

Για το τετραγωνικό δυναμικό που θεωρούμε εδώ, η εξίσωση Wigner, και η οριακή εξίσωση Wigner (Liouville) ταυτίζονται, αφού ο όρος ταυτίζεται $\Theta^\varepsilon[V]$ με $k\partial_x - V'(x)\partial_k$ (βλ.3.4).

Η αρχική συνάρτηση Wigner (1.30) δίνεται από την έκφραση

$$(3.18) \quad W_0^\varepsilon(q, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda\varepsilon} e^{-\lambda^2 q^2} e^{-(\mu^2 q + p^2)^2 / \lambda^2 \varepsilon^2} .$$

Λύνοντας το Χαμιλτωνιανό σύστημα (1.32) και αντιστρέφοντας για τα q, p βρίσκουμε τις αντίστροφες χαρακτηριστικές

$$(3.19) \quad \begin{aligned} q(x, k, t) &= x \cos(\Omega t) - \frac{k}{\Omega} \sin(\Omega t) , \\ p(x, k, t) &= x \Omega \sin(\Omega t) + k \cos(\Omega t) , \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις (3.19) στην (3.18), παίρνουμε την λύση της εξίσωσης Wigner

$$(3.20) \quad W^\varepsilon(x, k, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda\varepsilon} e^{-(ax+bk)^2} e^{-(cx+dk)^2 / \varepsilon^2} ,$$

όπου

$$\begin{aligned} a &= \lambda \cos(\Omega t) , & b &= -\lambda \sin(\Omega t) / \Omega \\ c &= (\Omega \sin(\Omega t) - \mu^2 \cos(\Omega t)) / \lambda \\ d &= (\cos(\Omega t) + \mu^2 \sin(\Omega t) / \Omega) / \lambda \end{aligned}$$

Οι ροπές $m_\ell^\varepsilon(x, t)$ της W^ε δίνονται από την έκφραση

$$(3.21) \quad \begin{aligned} m_\ell^\varepsilon(x, t) &= \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x, k, t) dk = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda\varepsilon} \int_{\mathbb{R}} k^\ell e^{-(ax+bk)^2} e^{-(cx+dk)^2 / \varepsilon^2} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda\varepsilon} e^{-(a^2+c^2/\varepsilon^2)x^2} \int_{\mathbb{R}} k^\ell e^{-(b^2+d^2/\varepsilon^2)k^2} e^{-2(ab+cd/\varepsilon^2)xk} dk \\ &= \frac{(-1)^\ell}{\lambda\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{b^2+d^2/\varepsilon^2}} \exp\left(\left(-a^2+c^2/\varepsilon^2\right) + \frac{(ab+cd/\varepsilon^2)^2}{b^2+d^2/\varepsilon^2}\right) x^2 \\ &\quad \times \left(\frac{ab+cd/\varepsilon^2}{b^2+d^2/\varepsilon^2}\right)^\ell x^\ell \left\{ 1 + \sum_{j=1}^{\lfloor \frac{\ell}{2} \rfloor} \frac{\ell!}{(\ell-2j)!j!} \left(\frac{b^2+d^2/\varepsilon^2}{4(ab+cd/\varepsilon^2)^2}\right)^j x^{-2j} \right\} , \end{aligned}$$

και αντικαθιστώντας στην (3.21) τις εκφράσεις των a, b, c, d , και την ξαναγράφουμε στη μορφή

(3.22)

$$\begin{aligned}
m_\ell^\varepsilon(x, t) &= \frac{(-1)^\ell}{\sqrt{\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) + \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)\right)^2}} \\
&\times \left[\frac{x \left(-\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega} \cos(\Omega t) \sin(\Omega t) + (\Omega \sin(\Omega t) - \mu^2 \cos(\Omega t)) \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right) \right)}{\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t + \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right)^2} \right]^\ell \\
&\times \exp \left(-\frac{\lambda^2 x^2}{\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) + \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right)^2} \right) \\
&\times \left(1 + \sum_{j=1}^{\lfloor \frac{\ell}{2} \rfloor} \frac{\ell!}{(\ell - 2j)! j!} \left[\frac{(\lambda \varepsilon)^2 \left(\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2} (\lambda^4 \varepsilon^2 + \mu^4) + \cos^2(\Omega t) + \frac{2\mu^2}{\Omega} \cos(\Omega t) \sin(\Omega t) \right)}{4x^2 \left(-\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega} \cos(\Omega t) \sin(\Omega t) + (\Omega \sin(\Omega t) - \mu^2 \cos(\Omega t)) \left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right) \right)^2} \right]^j \right).
\end{aligned}$$

Επίσης, αντικαθιστώντας τις αντίστροφες χαρακτηριστικές (3.19) στην αρχική οριακή κατανομή Wigner, βρίσκουμε την λύση της οριακής εξίσωσης Wigner

(3.23)

$$W^0(x, k, t) = \frac{1}{\left| \cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t) \right|} e^{-\lambda^2 \left(x \cos(\Omega t) - \frac{k}{\Omega} \sin(\Omega t) \right)^2} \delta \left(k - \frac{x \left(-\Omega \sin(\Omega t) + \mu^2 \cos(\Omega t) \right)}{\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)} \right).$$

Χρησιμοποιώντας στη συνέχεια το γεγονός ότι, για κάθε ομαλή συνάρτηση F ,

$$\frac{1}{\varepsilon} F \left(\frac{z}{\varepsilon} \right) \rightarrow \delta(z) \int_{\mathbb{R}} F(z) dz, \quad \text{καθώς } \varepsilon \rightarrow 0,$$

είναι εύκολο να επιβεβαιώσουμε ότι, μακριά από τα σημεία συσσώρευσης, η λύση (3.23), προκύπτει επίσης άμεσα από την (3.20) καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$. Επιπλέον, είναι δυνατόν να κατασκευάσουμε ένα πλήρες ανάπτυγμα της W^ε με την έννοια των κατανομών, και ο πρώτος όρος στο ανάπτυγμα είναι ως αναμένεται η κατανομή W^0 . Η κατασκευή βασίζεται στο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα, με την έννοια των κατανομών [24], Sec. 6.2,

$$(3.24) \quad F(Mx) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \mu_n \delta^{(n)}(x)}{n! M^{(n+1)}}, \quad \text{καθώς } M \rightarrow \infty,$$

όπου

$$\mu_n = \int_{\mathbb{R}} z^n F(z) dz$$

είναι η n -οστή ροπή της ομαλής συνάρτησης F .

Για να εφαρμόσουμε αυτό το ανάπτυγμα για την W^ε , αρχικά, γράφουμε τον ε -εξαρτώμενο όρο στην (3.20) στη μορφή

$$\exp\left(-d^2\left(k + cx/d\right)^2/\varepsilon^2\right) = \exp\left(-\left(dy/\varepsilon\right)^2\right),$$

όπου $y = k + cx/d$. Τότε, σύμφωνα με την (3.24), για μικρά ε , παίρνουμε το ανάπτυγμα

$$W^\varepsilon(x, k, t) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} c_n d^{-(n+1)} \varepsilon^n \exp\left[-\left(\frac{1}{d}(ad-bc)x+by\right)^2\right] \delta^{(n)}(y), \quad y = k+cx/d.$$

που $c_n = 0$, για n περιττό και $c_n = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$ για n άρτιο.

Οι διαδοχικοί όροι στο παραπάνω ανάπτυγμα μπορούν να υπολογισθούν με τον κανόνα του Leibniz

$$F(z)\delta^{(m)}(z) = \sum_{\ell=0}^m \binom{m}{\ell} F^{(\ell)}(0)\delta^{(m-\ell)}(z).$$

Συγκεκριμένα, εύκολα βλέπουμε ότι ο όρος μηδενικής τάξης, ως προς ε , είναι η W^0 όπως δίνεται στην (3.23).

Οι οριακές ροπές $m_\ell^0(x, t)$ υπολογίζονται επίσης απλά, χρησιμοποιώντας την σχέση $\int_{\mathbb{R}} f(x)\delta(x-y)dx = f(y)$, και δίνονται από τις εκφράσεις

$$\begin{aligned} m_\ell^0(x, t) &= \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^0(x, k, t) dk \\ &= \frac{(-1)^\ell}{|\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)|} \left[\frac{x(\Omega \sin(\Omega t) - \mu^2 \cos(\Omega t))}{\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)} \right]^\ell \exp\left\{ -\frac{\lambda^2 x^2}{\left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)\right)^2} \right\}. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι οι $m_\ell^0(x, t)$ απειρίζονται καθώς πλησιάζουμε τα σημεία συσσώρευσης ($x = 0, t = t_m$) κατά μήκος του άξονα $x = 0$, αφού ο παρονομαστής (3.17)

$$\cos(\Omega t) + \frac{\Omega^2}{\mu} \sin(\Omega t) = J(t) ,$$

μηδενίζεται στα σημεία αυτά, γεγονός το οποίο συμφωνεί με τη γεωμετρική εικόνα ότι όλες οι χαρακτηριστικές περνούν από τα σημεία συσσώρευσης. Για $x \neq 0$, $m_\ell^0(x, t)$ φθίνουν εκθετικά καθώς $t \rightarrow t_m$.

Αντίθετα, οι $m_\ell^\varepsilon(x, t)$ είναι καλά ορισμένες παντού, λόγω της παρουσίας του όρου $\frac{\lambda^4 \varepsilon^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t)$ που ομαλοποιεί την Ιακωβιανή J στον παρονομαστή στις (3.22). Αυτός ο ‘ομαλοποιητικός’ όρος μπορεί πάντα να είναι σημαντικός για μικρά ε στην περίπτωση που η παράμετρος λ είναι αρκετά μεγάλη, δηλαδή για εντοπισμένη αρχική κυματική συνάρτηση. Παρατηρούμε επίσης, κάτι που ενισχύει τον ισχυρισμό ότι η W^ε είναι το κατάλληλο εργαλείο που πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ακόμα και στα σημεία εστίασης, ότι η σχέση

$$m_\ell^\varepsilon(x=0, t=t_m) = \int_{\mathbb{R}} k^\ell W^\varepsilon(x=0, k, t=t_m) dk ,$$

ισχύει, ανεξάρτητα από την σειρά αντικατάστασης των τιμών $x=0, t=t_m$, το οποίο προφανώς δεν ισχύει για τις οριακές ροπές m_ℓ^0 , αφού η $W^0(x=0, k, t=t_m)$ δεν είναι καλά ορισμένη.

Προφανώς αφού $V^{(j)}(x) = 0$, για $j \geq 3$, μπορεί να επιβεβαιωθεί και με απ’ ευθείας υπολογισμούς χρησιμοποιώντας τις παραπάνω εκφράσεις των ροπών ότι οι ε -εξαρτώμενες και οριακές εξισώσεις ροπών ταυτίζονται. Συγκεκριμένα, οι ε -εξαρτώμενες εξισώσεις ροπών ισχύουν και στα σημεία εστίασης, όπως ήταν αναμενόμενο λόγω της ομαλοποιητικής επίδρασης στην Ιακωβιανή του ε -εξαρτώμενου όρου του παρονομαστού των εκφράσεων των ροπών στον οποίο αναφέρθηκαμε παραπάνω.

Στη συνέχεια θέλουμε να κατανοήσουμε καλύτερα την οριακή συμπεριφορά των $m_\ell^\varepsilon(x, t)$ καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$, και να εξακριβώσουμε όσο το ‘είδος της σύγκλισης’ στις $m_\ell^0(x, t)$, στα σημεία εστίασης.

Αφού κοντά στα σημεία $t = t_m$, μπορούμε να προσεγγίσουμε την Ιακωβιανή με

$$J(t) \approx J'(t_m)(t - t_m) + O((t - t_m)^3) = \sqrt{2}(-1)^m(t - t_m) + O((t - t_m)^3) ,$$

η μηδενικής τάξης ροπή $m_0^0(x, t)$, για παράδειγμα, προσεγγίζεται ως εξής

$$m_0^0(x, t) \approx \frac{1}{\sqrt{2}|t - t_m|} e^{-\left(\lambda^2 x^2 / \sqrt{2}(t - t_m)\right)^2}.$$

Επομένως, για κάθε $m = 1, 2, \dots$,

$$m_0^0(x, t) \rightarrow \sqrt{\pi} \delta(x), \quad \text{για } t \rightarrow t_m,$$

με την έννοια των \mathcal{D}' κατανομών.

Επιπλέον, μπορούμε να δούμε με παρόμοιο τρόπο ότι

$$\lim_{t \rightarrow t_m} m_0^\varepsilon(x, t) = m_0^\varepsilon(x, t = t_m) \rightarrow \sqrt{\pi} \delta(x), \quad \text{καθώς } \varepsilon \rightarrow 0,$$

και πάλι με την έννοια των \mathcal{D}' κατανομών.

Για να διευκρινίσουμε την συγκέντρωση της μάζας Dirac στα σημεία συσσώρευσης, πρώτα αναπτύσσουμε τις ροπές $m_\ell^\varepsilon(x, t)$ σε σειρά Taylor ως προς ε , μακριά από τα σημεία συσσώρευσης. Για παράδειγμα, το ανάπτυγμα της $m_0^\varepsilon(x, t)$ θα είναι

(3.25)

$$m_0^\varepsilon(x, t) = m_0^0(x, t) \left\{ 1 + \frac{\lambda^4}{\Omega^2} \sigma(t) \left[-\frac{\sin^2(\Omega t)}{\left(2 \cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)\right)^2} + x^2 \frac{\sin^2(\Omega t)}{\left(\cos(\Omega t) + \frac{\mu^2}{\Omega} \sin(\Omega t)\right)^4} \right] \varepsilon^2 + O(\varepsilon^4) \right\},$$

με $\sigma(t) = \operatorname{sgn}(\cos(\Omega t) + \frac{\Omega^2}{\mu} \sin(\Omega t))$.

Γενικά, παίρνουμε ένα ανάπτυγμα της μορφής

$$m_\ell^\varepsilon(x, t) = m_\ell^0(x, t) \left(1 + \sum_{\nu=1}^{\infty} \varepsilon^{2\nu} \mathcal{M}_\ell^\nu(x, t) \right).$$

Ο δεύτερος όρος στις αγκύλες στην σχέση (3.25) υποδεικνύει ότι όταν προσεγγίζουμε ένα σημείο συσσώρευσης θα πρέπει να πάρουμε $\varepsilon/|t - t_m|$ μικρό έτσι ώστε οι ε -εξαρτώμενοι όροι να είναι αμελητέοι. Επομένως, εμφανίζεται ένα οριακό στρώμα (boundary layer) καθώς πλησιάζουμε το σημείο συσσώρευσης κατά μήκος του άξονα $x = 0$.

3.3.2 Ομαλή καυστική (fold) για την ελεύθερη εξίσωση Schrödinger

Θεωρούμε τώρα το πρόβλημα αρχικών τιμών για την εξίσωση Schrödinger (3.3 με $V(x) = 0$ και

$$A_0(x) = 1, \quad S_0(x) = -x^3/3.$$

Οι ακτίνες είναι

$$\tilde{x}(t; q) = -q^2 t + q,$$

και η καυστική $J(t; q) = 0$ είναι ένα fold στο xt -επίπεδο, που περιγράφεται από την υπερβολή $xt = 1/4$. Στην φωτισμένη περιοχή $xt < 1/4$, από κάθε σημείο (x, t) , περνάνε δύο ακτίνες με σημεία εκκίνησης $q_{\pm} = (1 \mp \sqrt{1 - 4xt})/2t$. Στη περιοχή σκιάς $xt > 1/4$, δεν περνάει καμία (πραγματική) ακτίνα.

Η συνάρτηση Wigner γι' αυτό το πρόβλημα έχει υπολογιστεί στο [28], όπου για πρώτη φορά έχει κατασκευαστεί ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα λύσης της εξίσωσης Wigner για μικρά ε . Η αρχική συνάρτηση Wigner είναι

$$W_0^\varepsilon(q, p) = \frac{1}{\pi\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i\left(\frac{2}{3\varepsilon} \frac{\sigma^3}{3} + \frac{2}{\varepsilon}(p + q^2)\sigma\right)\right) d\sigma \frac{2^{2/3}}{\varepsilon^{2/3}} Ai\left(\frac{2^{2/3}(p + q^2)}{\varepsilon^{2/3}}\right),$$

όπου $Ai(\cdot)$ συμβολίζει την συνάρτηση Airy (δες, π.χ., [50], Sec. 5.17).

Αφού $V \equiv 0$, η εξίσωση Wigner απλοποιείται στην εξίσωση μεταφοράς

$$\partial_t W^\varepsilon + k \partial_x W^\varepsilon = 0,$$

η οποία ολοκληρώνεται εύκολα κατά μήκος των χαρακτηριστικών

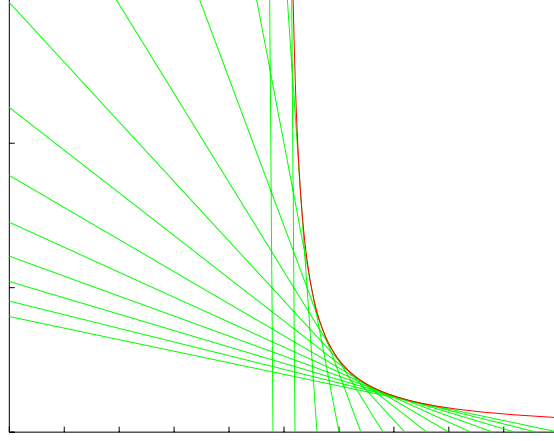
$$x = q + pt, \quad k = p.$$

Επομένως, η συνάρτηση Wigner δίνεται από τη σχέση

$$W^\varepsilon(x, k, t) = \frac{2^{2/3}}{\varepsilon^{2/3}} Ai\left(\frac{2^{2/3}(k^2 t^2 + (1 - 2xt)k + x^2)}{\varepsilon^{2/3}}\right).$$

Παρατηρούμε η συνάρτηση Wigner αρχικά συγκεντρώνεται στη 'Λαγκρανζιανή πολλαπλότη-

τα' $\Lambda_0 = \{(q, p) : p + q^2 = 0\}$, ενώ για χρόνους $t > 0$ συγκεντρώνεται στην αναδιπλωμένη πολλαπλότητα (folded "manifold") $\Lambda_t = \{(x, k) : k^2 t^2 + (1 - 2xt)k + x^2 = 0\}$. Στη φωτισμένη περιοχή η πολλαπλότητα αποτελείται από δύο κλάδους $k^\pm = \partial_x S^\pm(-1 + 2xt \pm \sqrt{1 - 4xt})/2t^2$, ενώ στην περιοχή σκιάς (shadow zone) $xt > 1/4$, τα αντίστοιχα k^\pm γίνονται μιγαδικά. Οι δύο κλάδοι ταυτίζονται πάνω στην καυστική $x_f = 1/4t$ όπου $k^+ = k^- =: k_f$.



Σχήμα 3.1: Ακτίνες & καυστική fold

Ο υπολογισμός των ε -εξαρτώμενων ροπών της W^ε βασίζεται στην σχέση

$$(3.26) \quad \int_{-\infty}^{\infty} Ai(u^2 - \lambda) u^m du = (-1)^m i^m \left(\frac{\partial^m F(\lambda, \xi)}{\partial \xi^m} \right)_{\xi=0},$$

όπου [87]

$$F(\lambda, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} Ai(u^2 - \lambda) e^{i\xi u} du = 2^{2/3} \pi Ai\left(-2^{2/3}(\lambda + \xi)\right) Ai\left(-2^{2/3}(-\lambda + \xi)\right).$$

Η εξίσωση (3.26) αποδεικνύεται εύκολα παραγωγίζοντας ' τυπικά ' m φορές ως προς ξ τον μετασχηματισμό Fourier $F(\lambda, \xi)$, και προφανώς το ολοκλήρωμα μηδενίζεται για περιττές τιμές του m .

Εισάγοντας τις παραμέτρους

$$A = (2/\varepsilon)^{2/3} t^2, \quad B = (2/\varepsilon)^{2/3} (1 - 2xt), \quad \text{και} \quad C = (2/\varepsilon)^{2/3} x^2,$$

και κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $u = \sqrt{A}k + B/2\sqrt{A}$, η οποία δίνει $\lambda = (B^2 - 4AC)/4A$,

οι ροπές γράφονται στη μορφή

$$m_\ell^\varepsilon(x, t) = (2/\varepsilon)^{2/3} G_\ell(A, B, C),$$

όπου

$$G_\ell(A, B, C) = \int_{-\infty}^{\infty} k^\ell Ai(Ak^2+Bk+C) dk = (2/\varepsilon)^{-(\ell+1)/3} t^{-(\ell+1)} \int_{-\infty}^{\infty} (u-B/2\sqrt{A})^\ell Ai(u^2-\lambda) du.$$

Για παράδειγμα,

$$G_0(A, B, C) = \frac{2\pi}{2^{1/3}\sqrt{A}} Ai^2\left(-\frac{B^2-4AC}{4^{5/3}A}\right)$$

$$G_1(A, B, C) = -\frac{B}{2A^{2/3}} \frac{\pi}{2^{1/3}} Ai^2\left(-\frac{B^2-4AC}{4^{5/3}A}\right),$$

και επιστρέφοντας στις μεταβλητές (x, t) , έχουμε

$$m_0^\varepsilon(x, t) = \frac{2\pi}{\varepsilon^{1/3}t} Ai^2\left(-\frac{g(x, t)}{\varepsilon^{1/3}}\right) \quad \text{και} \quad m_1^\varepsilon(x, t) = \frac{-\pi}{\varepsilon^{1/3}} \frac{1-2xt}{t^3} Ai^2\left(-\frac{g(x, t)}{\varepsilon^{1/3}}\right),$$

όπου $g(x, t) = (1-4xt)/4t^2$.

Χρησιμοποιώντας την διαφορική εξίσωση για την συνάρτηση Airy $Ai(z)$, μπορούμε εύκολα να δούμε ότι οι ροπές $m_0^\varepsilon, m_1^\varepsilon$ ικανοποιούν την εξίσωση διατήρησης (3.14), μακριά αλλά και πάνω στην καυστική. Μπορεί να αποδειχθεί επίσης, μετά από μακρείς αλλά απευθείας υπολογισμούς, ότι κάθε εξίσωση στην ιεραρχία ισχύει και πάνω στην καυστική.

Παράρτημα Β: Το Θεώρημα Noether

Το Θεώρημα Noether έχει έναν ρόλο θεμελιώδους σημασίας σε πολλά θεωρητικά πεδία της μηχανικής και της φυσικής, καθώς παρέχει άμεση σχέση μεταξύ νόμων διατήρησης και συμμετριών (αμεταβλητότητας invariance), κάτω από συγκεκριμένους μετασχηματισμούς του ολοκληρώματος μεταβολών του οποίου οι εξισώσεις Euler-Lagrange αποτελούν τις εξισώσεις πεδίου της θεωρίας.

Για ένα σύντομο σχόλιο που αφορά τις εφαρμογές του θεωρήματος Noether στην φυσική και εφαρμοσμένη μηχανική αναφερόμαστε στο [84], και για μια λεπτομερή περιγραφή της σχέσης μεταξύ ομάδων συμμετρίας και νόμων διατήρησης στις διαφορικές εξισώσεις, στο βιβλίο του Olver [64] (κεφάλαιο 4.)

Το Θεώρημα Noether βασίζεται στην θεώρηση ενός συναρτησοειδούς

$$\mathcal{J}[u] = \int_D \mathcal{L}(\mathbf{x}, u, \nabla u) d\mathbf{x}, \quad D \subset \mathbb{R}^n,$$

και μιας οικογένειας μετασχηματισμών $G(\eta)$:

$$(B.1) \quad \begin{aligned} x_i^* &= \Phi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \\ u^* &= \Psi(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \end{aligned}$$

που εξαρτώνται από μια παράμετρο η .

Υποθέτουμε ότι οι συναρτήσεις Φ_i ($i = 1, \dots, n$) και Ψ

1. είναι παραγωγίσιμες ως προς η , και

2. για $\eta = 0$ αντιστοιχούν στον ταυτοτικό μετασχηματισμό, δηλαδή

$$\Phi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u; 0) = x_i ,$$

$$\Psi(\mathbf{x}, u, \nabla u; 0) = u .$$

Ο μετασχηματισμός (B.1) μεταφέρει μια επιφάνεια $\Sigma := \{u = u(\mathbf{x}), \quad x \in D\}$, σε μια επιφάνεια $\Sigma^* := \{u^* = u^*(\mathbf{x}^*), \quad x^* \in D^*\}$. Επομένως, μετατρέπει το συναρτησοειδές $\mathcal{J}[u]$ στο

$$\mathcal{J}[u^*] = \int_{D^*} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, u^*, \nabla^* u^*) d\mathbf{x}^* ,$$

όπου $\nabla^* u^* = (u_{x_1^*}^*, \dots, u_{x_n^*}^*)$.

Εισάγουμε τώρα την έννοια του αναλλοίωτου και ακρότατου για το συναρτησοειδές $\mathcal{J}[u]$.

Ορισμός B.1. Το συναρτησοειδές $\mathcal{J}[u]$ λέγεται αναλλοίωτο κάτω από τον μετασχηματισμό (B.1), αν

$$\mathcal{J}[u^*] = \int_{D^*} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, u^*, \nabla^* u^*) d\mathbf{x}^* = \int_D \mathcal{L}(\mathbf{x}, u, \nabla u) d\mathbf{x} = \mathcal{J}[u] .$$

Ορισμός B.2. Η επιφάνεια Σ λέγεται ακρότατη επιφάνεια για το συναρτησοειδές \mathcal{J} , αν η u είναι λύση των εξισώσεων Euler-Lagrange

$$(B.2) \quad \mathcal{L}_u - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{L}_{u_{x_i}} = 0 ,$$

τότε η \mathcal{L} αναφέρεται ως Lagrangian πυκνότητα.

Διατυπώνουμε τώρα το γνωστό ως πρώτο Θεώρημα της Noether . Η απόδειξη του παρουσιάζεται αναλυτικά από τους Gelfand & Fomin στο [35] (η μετάφραση της αυθεντικής απόδειξης από την Noether στο [63]).

Θεώρημα Noether ([35]). Αν το συναρτησοειδές

$$\mathcal{J}[u] = \int_D \mathcal{L}(\mathbf{x}, u, \nabla u) d\mathbf{x}$$

είναι αναλλοίωτο κάτω από την οικογένεια μετασχηματισμών

$$(A.2) \quad \begin{aligned} x_i^* &= \Phi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \approx x_i + \eta \varphi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u), \quad i = 1, \dots, n \\ u^* &= \Psi(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \approx u + \eta \psi(\mathbf{x}, u, \nabla u), \end{aligned}$$

για η μικρό και αυθαίρετη περιοχή D , τότε

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{L}_{u_{x_i}} \hat{\psi} + \mathcal{L} \varphi_i) = 0, \quad \hat{\psi} = \psi - \sum_{i=1}^n u_{x_i} \varphi_i,$$

σε κάθε ακρότατη επιφάνεια του $\mathcal{J}[u]$. ■

Πρέπει να παρατηρήσουμε ότι η απόδειξη του θεωρήματος βασίζεται στην παρακάτω μεταβολική σχέση, την οποία θα χρησιμοποιήσουμε επίσης στην παράγραφο (3.2) για να εξάγουμε την μη-ομογενή εξίσωση διατήρησης θεωρώντας χωρικές μεταβολές.

Λήμμα Β.1. Το principal part $\delta \mathcal{J}$ της μεταβολής του συναρτησοειδούς $\mathcal{J}[u]$ κάτω από τον μετασχηματισμό (B.2) για μικρό η , δίνεται από την σχέση

$$\delta \mathcal{J} = \eta \int_D \left(\mathcal{L}_u - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{L}_{u_{x_i}} \right) \hat{\psi} d\mathbf{x} + \eta \int_D \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{L}_{u_{x_i}} \hat{\psi} + \mathcal{L} \varphi_i) d\mathbf{x}$$

όπου $\hat{\psi} = \psi - \sum_{i=1}^n u_{x_i} \varphi_i$. ■

Παρατήρηση Β.1. Αν η $u = u(\mathbf{x})$ δεν είναι ακρότατη επιφάνεια του $\mathcal{J}[u]$, το Θεώρημα Noether δίνει την ταυτότητα

$$\left(\mathcal{L}_u - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{L}_{u_{x_i}} \right) \hat{\psi} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{L}_{u_{x_i}} \hat{\psi} + \mathcal{L} \varphi_i) = 0$$

Παρατήρηση Β.2. Για ένα $n \times m$ σύστημα με m άγνωστες συναρτήσεις $u = (u_1, \dots, u_m)$, το αναλλοίωτο του $\mathcal{J}[u]$ κάτω από τον μετασχηματισμό

$$\begin{aligned} x_i^* &= \Phi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \approx x_i + \eta \varphi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u), \quad i = 1, \dots, n \\ u_j^* &= \Psi_j(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \approx u_j + \eta \psi_j(\mathbf{x}, u, \nabla u) \quad j = 1, \dots, m \end{aligned}$$

οδηγεί, με την ίδια αιτιολόγηση όπως στο Θεώρημα Noether, στο παρακάτω σύστημα

εξισώσεων διατήρησης

$$(3.27) \quad \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^m \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)} \widehat{\psi}_j + \mathcal{L} \varphi_i \right) = 0 ,$$

όπου $\widehat{\psi}_j = \psi_j - \sum_{i=1}^n \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \varphi_i$, υπό την προϋπόθεση ότι η u ικανοποιεί το σύστημα των εξισώσεων Euler-Lagrange

$$(3.28) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_j} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)} \right) = 0 , \quad j = 1, \dots, m .$$

Παρατήρηση Β.3. Το αναλλοίωτο του $\mathcal{J}[u]$ κάτω από μια r -παραμετρική οικογένεια μετασχηματισμών

$$\begin{aligned} x_i^* &= \Phi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) \quad x_i + \eta \varphi_i(\mathbf{x}, u, \nabla u), \quad i = 1, \dots, n \\ u^* &= \Psi(\mathbf{x}, u, \nabla u; \eta) u + \sum_{k=1}^r \eta_k \psi^k(\mathbf{x}, u, \nabla u) , \end{aligned}$$

$\eta = (\eta_1, \dots, \eta_r)$ είναι οι παράμετροι της οικογένειας, δίνει τις παρακάτω r -γραμμικά ανεξάρτητες εξισώσεις διατήρησης

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)} \widehat{\psi}^k + \mathcal{L} \varphi_i^k \right) = 0, \quad k = 1, \dots, r$$

όπου $\widehat{\psi}^k = \psi^k - \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \varphi_i^k$.

Βιβλιογραφία

- [1] I. Antoniou, S.A. Shkarin, and Z. Suchanecki. The spectrum of the Liouville-von Neumann operator in the Hilbert-Schmidt space. *J. Math. Phys.*, 40(9):459–469, 1989. pages 39
- [2] A. Arnold and F. Nier. Numerical analysis of the deterministic particle method applied to the Wigner equation. *Math. Comp.* 58, 58:645–669, 1992. pages 3
- [3] V.I. Arnold, A.N. Varchenko, and S.M. Husein-Zade. *Singularities of Differentiable Maps, Vol. 1*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1985. pages 19
- [4] A. Athanassoulis. Smoothed Wigner transforms in the numerical simulation of semiclassical (high-frequency) wave propagation. *preprint*. pages 4
- [5] A. Athanassoulis. *Smoothed Wigner Transforms and homogenization of wave propagation*. Thesis, Princeton University, 2007. pages 4
- [6] V.B. Babich and N.Y. Kirpichnikova. *The Boundary-Layer Method in Diffraction Problems*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1979. pages 10, 17
- [7] G.A. Baker, Jr. Formulation of Quantum Mechanics based on the quasi-probability distribution induced on phase-space. *Physical Review*, 109(6):2198–2206, 1958. pages 15, 27, 39
- [8] R. Balescu. *Equilibrium and non-equilibrium statistical mechanics*. Wiley-Interscience Publ., New York, 1975. pages 23
- [9] J. Benamou, F. Castella, T. Katsaounis, and B. Perthame. High frequency limit of the Helmholtz equations. *Rev. Mat. Iberoamericana*, 18 (1):187–209, 2002. pages 21

- [10] A. Bensoussan, J.-L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North-Holland, Amsterdam-New York-Oxford, 1978. pages 2, 15
- [11] M.V. Berry. Semi-classical mechanics in phase space: A study of Wigner's function. *Phil. Trans. of the Royal Society of London*, 287(1343):237–271, 1977. pages 4, 21, 34, 44
- [12] M.V. Berry and N.L. Balazs. Evolution of semiclassical quantum states in phase space. *J.Phys. A: Math. Gen.*, 12(5):625–642, 1979. pages 10, 15, 17, 44
- [13] N. Bleistein and R. Handelsman. *Asymptotic Expansions of Integrals*. Dover Publications Inc., New York, 1986. pages 19, 20
- [14] A. Bouzouina and D. Robert. Uniform semiclassical estimates for the propagation of quantum observables. *Duke Math. J.*, 111(2), 2002. pages 34, 55, 57
- [15] L.M. Brekhovskikh and Yu.P. Lysanov. *Fundamentals of Ocean Acoustics*. Springer, 1982. pages 1
- [16] F. Castella, B. Perthame, and O. Runborg. High frequency limit of the Helmholtz equation II: source on a general smooth manifold. *Comm. P.D.E.*, 27, N. 3-4:607–651, 2002. pages 21
- [17] M. Collins. A nearfield asymptotic analysis for underwater acoustics. *J. Acoust. Soc. Am.*, 85(3):1107–1114, 1989. pages 13
- [18] Louis Comtet. *Analyse combinatoire (vol.1)*. Presses universitaires de France, Paris, 1970. pages 57
- [19] T. Curtright, D. B. Fairlie, and C. Zachos. Features of time-independent Wigner functions. *Phys. Rev. D*, 58:025002, 1998. pages 40, 43
- [20] T. Curtright, T. Uematsu, and C. Zachos. Generating all Wigner functions. *J.Math.Phys.*, 42:2396, 2001. pages 49
- [21] J.J. Duistermaat. Oscillatory integrals, Lagrangian immersions and unfolding of singularities. *Comm. Pure Appl. Math.*, XXVII:207–281, 1974. pages 18
- [22] H. Emamirad and P. Rogeon. Existence of wave operators for the Wigner equation in $L^{2,p}$ spaces. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(9):811–816, 2002. pages 3

- [23] H. Emamirad and P. Røgeon. Scattering theory for the Wigner equation. *Math. Methods Appl. Sci.*, 28(8):947–960, 2005. pages 3
- [24] R. Estrada and R.P. Kanwal. *Asymptotic Analysis: A Distributional Approach*. Birkhäuser, Boston, 1994. pages 117
- [25] D. B. Fairlie. The formulation of quantum mechanics in terms of phase space functions. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 60:581–586, 1964. pages 40
- [26] D. B. Fairlie and C. A. Manogue. The formulation of quantum mechanics in terms of phase space functions—the third equation. *J. Phys. A:Math. Gen.*, 24:3807–3815, 1991. pages 43
- [27] E. Fergadakis. *Numerical Experiments with the Particle Method for the Wigner equation in high-frequency paraxial propagation*. Master Thesis, University of Crete, 2004. pages 4
- [28] S. Filippas and G.N. Makrakis. Semiclassical Wigner function and geometrical optics. *Multiscale Model. Simul.*, 1(4):674–710, 2003. pages 3, 4, 21, 30, 34, 121
- [29] S. Filippas and G.N. Makrakis. On the evolution of the semi-classical Wigner function in higher dimensions. *Euro. Jnl of Applied Mathematics*, 17:33–62, 2005. pages 3, 4, 21, 30, 34
- [30] S. M. Flattè. The Schrödinger equation in classical physics. *Am. J. Phys.*, 54(12):1088–1092, 1986. pages 1, 13
- [31] V. Fock. Theory of radio-wave propagation in an inhomogeneous stratified atmosphere for a raised source. *Chapter 14 of Electromagnetic Diffraction and Propagation Problems*, 1965. pages 10
- [32] G.B. Folland. *Harmonic analysis in phase space*. Princeton Univ. Press, Princeton, 1989. pages 22
- [33] J.-P. Fouque, J. Garnier, G. Papanicolaou, and Knut Solna. *Wave Propagation and Time Reversal in Randomly Layered Media*. Springer. pages 13
- [34] I. Gasser and P.A. Markowich. Quantum hydrodynamics, Wigner transforms and the classical limit. *Asympt. Anal.*, 14:97–116, 1997. pages 31

- [35] I.M. Gelfand and S.V. Fomin. *Calculus of variations*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1963. pages 126
- [36] P. Gerard, P.A. Markowich, N. Mauser, and F. Poupaud. Homogenization limits and Wigner transforms. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 50:321–377, 1997. pages 21
- [37] A. Grossmann, G. Loupiau, and E. Stein. An algebra of pseudodifferential operators and quantum mechanics in phase space. *Ann. Inst. Fourier, Grenoble*, 18(2):343–368, 1968. pages 34
- [38] V. Guillemin and S. Sternberg. *Geometric Asymptotics, Math. Surveys and Monographs 14*. AMS. pages 18
- [39] Eric J. Heller. Wigner phase space method: Analysis for semiclassical applications. *J. Chem. Phys.*, 65(4):1289–1298, 1976. pages 4, 34
- [40] P. Holland. *The Quantum Theory of Motion*. Cambridge University Press, New York, 1993. pages 15, 31
- [41] L. Hörmander. The Weyl calculus of pseudo-differential operators. *Comm. Pure Appl. Math.*, XXXII:359–443, 1979. pages 24
- [42] M. Hug, C. Menke, and W.P. Schleich. Modified spectral method in phase space: calculation of the Wigner function. I. Fundamentals. *Phys. Rev. A (3)*, 57(5):3188–3205, 1998. pages 3
- [43] M. Hug, C. Menke, and W.P. Schleich. Modified spectral method in phase space: calculation of the Wigner function. II. Generalizations. *Phys. Rev. A (3)*, 57(5):3206–3224, 1998. pages 3
- [44] S. Jin and X. Li. Multi-phase computations of the semiclassical limit of the Schrodinger equation and related problems: Whitham vs. Wigner. *Physica D*, 182:46–85, 2003. pages 16, 32, 109
- [45] E. Kalligiannaki. *Computation of high frequency fields near cusp caustics*. Diploma thesis, University of Crete, 1999. pages 18
- [46] E. Kalligiannaki. *Particle Method for the Wigner equation in high frequency paraxial propagation*. Master Thesis, University of Crete, 2002. pages 3

- [47] Yu.A. Kravtsov and Yu.I. Orlov. *Geometrical Optics of Inhomogeneous Media*. Springer Series on Wave Phenomena 6, Springer-Verlag, Berlin, 1990. pages 15, 18
- [48] J.G. Kruger and A. Poffyn. Quantum mechanics in phase space II. Eigenfunctions of the Liouville operator. *Physica*, 87A:132–144, 1977. pages 43
- [49] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (Non-relativistic theory)*. Elsevier Butterworth-Heinemann, Amsterdam, 2005. pages 22
- [50] N.N. Lebedev. *Special functions & their applications*. Dover Publ. Inc, New York, 1972. pages 121
- [51] H.-W. Lee. Theory and applications of the quantum phase-space distribution functions. *Physics Reports*, 259:147–211, 1995. pages 4, 24, 28, 35
- [52] M. Leontovich and V. Fock. Solution of the problem of propagation of electromagnetic waves along the earth's surface by the method of parabolic equation. *Acad. Sci. USSR. J. Phys*, 10:13–24, 1946. pages 1, 10
- [53] P.L. Lions and T. Paul. Sur les mesures de Wigner. *Rev. Math. Iberoamericana*, 9:563–618, 1993. pages 2, 26, 29
- [54] D. Ludwig. Uniform asymptotic expansions at a caustic. *Comm. Pure Appl. Math.*, XIX:215–250, 1966. pages 18
- [55] P. Markowich. On the Equivalence of the Schrödinger and the Quantum Liouville Equations. *Math. Methods in the Applied Sci.*, 11:4106–4118, 1999. pages 27
- [56] A. Martinez. *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*. Springer, Berlin, 2002. pages 24
- [57] V.P. Maslov. *Perturbation theory and asymptotic methods (French transl.)*. Dunod, Paris, 1972. pages 18
- [58] V.P. Maslov and V.M. Fedoryuk. *Semi-classical approximations in quantum mechanics*. D. Reidel, Dordrecht, 1981. pages 2, 14, 18
- [59] J. E. Moyal. Quantum mechanics as a statistical theory. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 45:99–124, 1949. pages 28, 38

- [60] F. Narcowich. On the quantum Liouville equation. *Physica*, 134A:193–208, 1985. pages 4, 34, 54, 66
- [61] F. Narcowich. A Dyson-like expansion for solutions to the quantum Liouville equation. *J. Math. Phys.*, 27(10):2502–2510, 1986. pages 34
- [62] V.E. Nazaikinskii, B.-W. Schulze, and B.Yu. Sternin. *Quantization Methods in Differential Equations*. Taylor & Francis, London & New York, 2002. pages 2, 18, 24
- [63] E. Noether. Invariant variation problems. *Transp. Theory and Statist. Phys.*, 1(3):186–207, 1971. pages 126
- [64] P.J. Olver. *Applications of Lie Groups to Differential Equations*. Springer-Verlag, New York, 1993. pages 112, 125
- [65] J. Papadakis, M. Taroudakis, and P. Papadakis. A new method for a relativistic treatment of the sea bottom in the parabolic approximation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 92(4):2030–2038, 1992. pages 13
- [66] G. Papanicolaou and L. Ryzhik. *Waves and Transport, Hyperbolic equations and Frequency Interactions (Eds. L. Caffarelli and E. Weinan)*. IAS/ Park City Mathematical Series, AMS, 1999. pages 21, 26, 27, 30
- [67] A. Pierce and D. Lee. The influence of the reference wave number in computational ocean acoustics. *J. Comp. Ac.*, 1(1):77–90, 1993. pages 11
- [68] M. Pulvirenti. Semiclassical expansion of Wigner functions. *J. Math. Phys.*, 47(5):052103, 12pp, 2006. pages 4, 6, 33, 54
- [69] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*. Academic Press, New York, 1972. pages 39
- [70] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators*. Academic Press, New York, 1977. pages 36, 88
- [71] N. Ripamonti. Classical limit of the harmonic oscillator Wigner functions in the Bargmann representation. *J.Phys. A: Math. Gen.*, 29:5137–5151, 1996. pages 44

- [72] D. Robert. *Autour de l'approximation semi-classique*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1987. pages 2
- [73] M. Schechter. *Operator methods in quantum mechanics*. Dover, New York, 1981. pages 36
- [74] W.P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley-VCH, 2001. pages 100
- [75] B. Simon. Semiclassical analysis of low lying eigenvalues, I. Non-degenerate minima: Asymptotic expansions. *Ann. Inst. H. Poincaré*, 38(3):295–307, 1983. pages 22, 36, 37, 87, 88
- [76] C. Sparber, P.A. Markowich, and N.J. Mauser. Wigner functions versus WKB-methods in multivalued geometrical optics. *Asymptot. Anal.*, 33(2):153–187, 2003. pages 3
- [77] H. Spohn. The spectrum of the Liouville-von Neumann operator. *J. Math. Phys.*, 17:57–60, 1976. pages 39
- [78] Herbert Steinrück. Asymptotic analysis of the quantum Liouville equation. *Math. Meth. in the Applied Sciences*, 13:143–157, 1990. pages 4, 33, 36, 88
- [79] S.Thangavelu. *Lectures on Hermite and Laguerre expansions*. Princeton University Press, Preiceton,New Jersey, 1993. pages 42, 43
- [80] C. Sulem and P.-L. Sulem. *The Nonlinear Schrodinger equation*. Springer, Berlin, 1999. pages 113
- [81] F.D. Tappert. *The Parabolic Approximation Method*, volume 70. Wave Propagation and Underwater Acoustics (Eds.J.B. Keller and J.S. Papadakis) Lecture Notes in Physics. pages 10
- [82] F.D. Tappert. Diffractive ray tracing of laser beams. *J. Opt. Soc. Am.*, 66(12):1368–1373, 1976. pages 1, 10
- [83] V.I. Tatarskii. *The Effects of the Turbulent Atmosphere on Wave Propagation*. Israel Program for Scientific Translation, Jerusalem, 1971. pages 10
- [84] M.A. Tavel. Noether's theorem. *Transp. Theory and Statist. Phys.*, 1(3):183–185, 1971. pages 125

- [85] R. Tolman. *The principles of statistical mechanics*. Dover, New York, 1979. pages 23
- [86] A. Truman and H. Z. Zhao. Semi-Classical limit of wave functions. *Proceeding of the AMS*, 128(4):1003–1009, 1999. pages 44
- [87] O. Vallee, M. Soares, and C. de Izarra. An integral representation for the product of Airy functions. *Z. angew. Math. Phys.*, 48:156–160, 1997. pages 122
- [88] A. Voros. Semi-classical approximations. *Ann. Inst. Henri Poincare-Sec. A*, XXIV(1):31–90, 1976. pages 34
- [89] A. Voros. Asymptotic \hbar - expansions of stationary quantum states. *Ann. Inst. Henri Poincare-Sec. A*, XXVI(4):343–403, 1977. pages 34
- [90] A. Voros. An algebra of pseudodifferential operators and the asymptotics of quantum mechanics. *J. Funct. Anal.*, 29:104–132, 1978. pages 34
- [91] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Physical Review*, 40:749–759, 1932. pages 25
- [92] M.W. Wong. *Weyl transforms*. Springer, New York, 1998. pages 23