第 1 章

序章：近似を数学の言葉で見る

★★★ 最重要 巻全体の地図。以後の全章がこの章の 3 分類のどれかを掘り下げる

1.1 この巻が答える問い

★★★ 最重要 出発点の問いと、答えの形

多電子原子の波動関数を原子軌道の線型結合で書く、各電子が他の電子の作る平均の場を感じると考える、流体を連続体と見て Navier–Stokes 方程式を立てる。物理ではこうした近似を、方程式が厳密に解けないので「物理的にもっともらしい」理由を付けて導入することが多い。この巻では、同じ近似を微分方程式と作用素の理論の側から眺め直し、それぞれの近似について次の 3 つを問う。

(i) その近似は、元の方程式の解とどういう数学的関係にあるか（部分空間への射影か、ある極限か、それとも根拠のない置き換えか）。

(ii) 近似解と真の解の差について、どこまで定理として言えるか（上界か、収束か、収束の速さか、何も言えないか）。

(iii) 物理的直観は、その定理のどの仮定に対応しているか。直観が外れる場面は、定理のどの仮定が破れる場面か。

ここで「解けない微分方程式の解の性質を調べる分野」と呼んでいるものは、一つの分野ではない。常微分方程式の定性的理論（Poincaré に始まり力学系の理論へ続く流れ）、偏微分方程式の適切性と正則性の理論、量子力学の作用素論（スペクトル理論）、漸近解析と特異摂動論、そして有効方程式を厳密に導く理論（平均場極限・流体力学極限・均質化）の集まりである。これらに共通する態度は、解を式で書くことを諦め、代わりに解が**存在すること、どれだけ滑らかか、パラメータを動かすとどう変わるか**を不等式で押さえることである。近似を正当化するとは、結局のところ「近似解と真の解の距離」を不等式で上から抑えることなので、この態度がそのまま近似の理論になる。

例題 1.1　解を書かずに不等式で押さえる ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

$\varepsilon = 0.1$ として、方程式 $x = 1 + \varepsilon \sin x$ を考える。この方程式の解は初等関数で書けない。

(1) 実数解がちょうど 1 つあり、それを x_* とすると $|x_* - 1| \le \varepsilon$ が成り立つことを示せ。

(2) (1) の範囲 $0.9 \le x_* \le 1.1$ を方程式の右辺に戻して、x_* の範囲を幅 0.011 程度まで狭めよ。

(3) 近似解 $\tilde{x} = 1$ は、この章の問い (i) の意味で元の方程式の解とどういう関係にあるか。

解答. **(1)** $f(x) = x - 1 - \varepsilon \sin x$ とおくと $f'(x) = 1 - \varepsilon \cos x \ge 1 - \varepsilon > 0$ なので f は狭義単調増加で、$f(x) \to \pm\infty$（$x \to \pm\infty$）だから零点はちょうど 1 つある。その零点では $x_* - 1 = \varepsilon \sin x_*$ なので、$|\sin x_*| \le 1$ から $|x_* - 1| \le \varepsilon$ が出る。解を式で書かずに、解の存在と一意性と位置を不等式で押さえたことになる。
(2) sin は $[0.9,\ 1.1]$ で単調増加なので、$x_* = 1 + \varepsilon \sin x_*$ から

$$1 + 0.1 \sin 0.9 \le x_* \le 1 + 0.1 \sin 1.1, \qquad 1.07833 \le x_* \le 1.08912.$$

幅は 0.0108 に縮んだ。同じ操作を繰り返すと区間の幅は毎回およそ $\varepsilon \cos x_* \approx 0.046$ 倍になり、数値解 $x_* = 1.0885978\cdots$ に近づく（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。1 回ごとに幅が一定の比で縮むのは、写像 $x \mapsto 1 + \varepsilon \sin x$ の傾きが ε 以下だからで、これは第 2 章で扱う縮小写像の

不動点定理の最も簡単な場合である。
(3) $\tilde{x}=1$ は $\varepsilon\to 0$ の極限の問題 $x=1$ の解で、(1) の不等式 $|x_*-\tilde{x}|\le\varepsilon$ がその近似の誤差評価になっている。問い (ii) に対しては「誤差は ε 以下」という上界が定理として言える。次の節の言葉では B 型（極限）の近似である。

1.2 近似の 3 つの型

★★★ 最重要 巻の骨格となる分類

元の問題の解を u とし、近似解を $\tilde{u}$ とする。物理で使われる近似の多くは、$\tilde{u}$ の作り方によって次の 3 つの型に分かれる。

定義 1.1 (近似の 3 つの型)**.** **A 型** （射影）u は関数の空間 V の元である。V の中の扱いやすい部分集合 V_n を選び、V_n の中で元の方程式（またはそれと同値な変分問題）を「できるだけ満たす」元として $\tilde{u}=u_n$ を決める。V_n を大きくしていく列 $V_1\subset V_2\subset\cdots$ を考えることができる。

B 型 （極限）元の問題がパラメータ ε を含む族 P_ε の一員であり、$\varepsilon\to 0$ で P_ε の解 u_ε がある別の問題 P_0 の解 u_0 に近づく。P_0 の解を近似 $\tilde{u}=u_0$ として使う。

C 型 （閉じる）元の問題を、ある未知の量 X が分かれば閉じる形に書き直し、X を既知の量の関数 $X\approx F(\cdots)$ で置き換える。置き換えの正しさを保証する小さいパラメータも部分空間の列も無い。

3 つの型は、正当化の形が違う。

A 型では、近似の誤差は「V_n が u をどれだけうまく近似できるか」で抑えられる。V_n が線型空間で問題が線型なら、Céa の補題（第 4 章）が

$$\|u-u_n\|\le C\inf_{v\in V_n}\|u-v\|$$

を与え、固有値問題なら min-max 原理（第 3 章）が近似固有値が真の固有値の**上界**になることを保証する。右辺の $\inf_{v\in V_n}\|u-v\|$ がどれだけ速く 0 に近づくかは、u の**滑らかさ**（正則性）で決まる。したがって A 型の近似の良し悪しは、解の正則性の理論に帰着する。

B 型では、誤差は「ε がどれだけ小さいか」で抑えられる。数学が与えるのは、極限 $u_\varepsilon\to u_0$ が存在するという定理、それがどういう意味の収束か（エネルギーだけが収束するのか、関数として各点で収束するのか、平均としてしか収束しないのか）、そして収束の速さ $\|u_\varepsilon-u_0\|=\mathcal{O}(\varepsilon^\alpha)$ である。現実の物理系では ε は 0 でなく固定された値（電子と核の質量比、Knudsen 数、微細構造の周期と系の大きさの比）なので、B 型の近似を使うことは「この系はその極限に十分近い」と判断することにあたる。

C 型には、近似の内部に誤差を抑える仕組みが無い。正しさは、厳密に解ける場合との一致、満たすべき厳密な条件、実験や数値計算との比較で外から評価するしかない。

物理的直観は何をしているか

A 型で物理的直観が担うのは、**良い部分空間を選ぶこと**である。原子軌道の線型結合という選択は「分子の中の電子も、核の近くでは孤立原子の軌道に似ているはずだ」という直観の表現で、数学はこの選択が良いかどうかを教えない。数学が教えるのは「選んだ部分空間の中で最良の近似から定数倍しか悪くならない」ことと「固有値は上から近づく」ことまでである。
B 型で物理的直観が担うのは、**小さいパラメータを見つけること**である。「核は重いので止まって見える」「分子の平均自由行程は流れの長さに比べて短い」という直観は、それぞれ質量比 m/M と Knudsen 数 Kn という無次元量を見つけ、それを 0 に送った極限を考えることにあたる。

同じ名前の近似が、見方によって別の型に入ることがある。いちばん重要な例は平均場近似である。Hartree–Fock 法は、多体波動関数を Slater 行列式という特別な形に制限した変分法（A 型）だと見

ることもできるし、粒子数 $N \to \infty$ で相互作用を $1/N$ に弱めた極限で厳密になる理論（B 型）だと見ることもできる。前者からは「エネルギーの上界」しか得られないが、後者からは「その極限では平均場が正しい」という定理が得られる。第 5 章と第 6 章はこの 2 つの顔をそれぞれ扱う。

例題 1.2　2 行 2 列の行列で A 型と B 型を比べる ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

$g > 0$ として、行列 $H = \begin{pmatrix} 1 & g \\ g & 3 \end{pmatrix}$ の最小固有値 E を考える。

(1) E を厳密に求めよ。

(2) A 型の近似として、試行ベクトルを $e_1 = (1, 0)^{\mathsf{T}}$ の張る 1 次元部分空間に制限した値 $\tilde{E}_{\mathrm{A}} = \langle e_1, He_1 \rangle$ を求め、$\tilde{E}_{\mathrm{A}} \geq E$ を示せ。

(3) B 型の近似として、g についての展開の 2 次までの値 $\tilde{E}_{\mathrm{B}}$ を求めよ。$g = 0.5$ で (1)〜(3) の値を比べ、誤差の符号について何が言えるかを述べよ。

解答. **(1)** 固有方程式 $(1-E)(3-E) - g^2 = 0$ を解くと $E = 2 - \sqrt{1+g^2}$。
(2) $\tilde{E}_{\mathrm{A}} = 1$。$\sqrt{1+g^2} \geq 1$ なので $E = 2 - \sqrt{1+g^2} \leq 1 = \tilde{E}_{\mathrm{A}}$。実対称行列の最小固有値は $\langle v, Hv \rangle / \langle v, v \rangle$ の最小値なので、どの試行ベクトルでもこの不等式が成り立つ。これが第 3 章の min-max 原理の最も簡単な形である。
(3) $\sqrt{1+g^2} = 1 + \frac{1}{2}g^2 - \frac{1}{8}g^4 + \mathcal{O}(g^6)$ より $\tilde{E}_{\mathrm{B}} = 1 - \frac{1}{2}g^2$。$g = 0.5$ では

$$E = 0.881966\cdots, \qquad \tilde{E}_{\mathrm{A}} = 1, \qquad \tilde{E}_{\mathrm{B}} = 0.875.$$

$\tilde{E}_{\mathrm{A}}$ の誤差 $+0.118$ は常に正で、これは g の大きさに依らない定理である。$\tilde{E}_{\mathrm{B}}$ の誤差 -0.0070 は小さいが負で、次の 4 次の項 $+\frac{1}{8}g^4$ を足すと 0.8828125（誤差 $+0.00085$）と符号が変わる。B 型が保証するのは「誤差が $\mathcal{O}(g^4)$」という大きさの評価だけで、どちら側から近づくかは保証しない。A 型の上界と B 型の誤差の次数は、別の種類の情報である。

1.3　1 つの問題で 3 つの型を比べる

★★★ 最重要　3 つの型の振る舞いの違いを、厳密値の分かる問題で数値として見る

3 つの型の違いを、厳密値が数値的に求まる 1 次元の問題で見ておく。非調和振動子

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} + \lambda x^4, \qquad p = -\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \quad (\hbar = m = \omega = 1) \tag{1.1}$$

の基底エネルギー $E(\lambda)$ を、$\lambda = 0.1$ で求める。λx^4 が入ると $H\psi = E\psi$ は閉じた形では解けない。調和振動子の固有関数を大量に（120 個）使った対角化で得た値

$$E(0.1) = 0.559146327\cdots$$

を「厳密値」として基準にする（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。

1.3.1　A 型その 1：線型部分空間への射影（Ritz 法）

調和振動子の固有関数 $\phi_0, \phi_1, \ldots$ のうち、基底状態と同じ偶パリティの $\phi_0, \phi_2, \ldots, \phi_{2K-2}$ の K 個が張る部分空間 V_K に試行関数を制限し、H の期待値を最小化する。これは $K \times K$ 行列 $\big(\langle \phi_{2i} | H | \phi_{2j} \rangle\big)$ の最小固有値を求めることと同じである（第 4 章で示す）。$K = 1$ では $\langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda = 0.575$ となり、これは 1 次摂動の値と一致する。

1.3.2 A 型その 2：曲がった集合への制限（ガウス変分）

試行関数を幅だけが可変なガウス関数 $\psi_s(x) \propto \exp(-x^2/4s)$ に制限する。$\langle x^2\rangle = s$、$\langle p^2\rangle = 1/(4s)$、$\langle x^4\rangle = 3s^2$ なので

$$E_{\mathrm{G}}(s) = \frac{1}{8s} + \frac{s}{2} + 3\lambda s^2 .$$

これを s で最小化する。ガウス関数の全体は線型空間ではない（2 つのガウス関数の和はガウス関数でない）。この制限の仕方は、多体波動関数を Slater 行列式に制限する Hartree–Fock 法と同じ構造をもつ。変分原理により $E_{\mathrm{G}} \geq E$ は保証されるが、集合を大きくしていく列が無いので、誤差を 0 に近づける手段が無い。$\lambda = 0.1$ での最小は $s = 0.40943\cdots$、$E_{\mathrm{G}} = 0.560307\cdots$ である。

1.3.3 B 型：小さいパラメータについての展開（摂動級数）

λ を小さいパラメータとみなして $E(\lambda) = \sum_{k} c_k \lambda^k$ と展開する。Rayleigh–Schrödinger 摂動論で係数を厳密に計算すると

$$E(\lambda) = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda - \frac{21}{8}\lambda^2 + \frac{333}{16}\lambda^3 - \frac{30885}{128}\lambda^4 + \frac{916731}{256}\lambda^5 - \frac{65518401}{1024}\lambda^6 + \cdots$$

となる（検算 `scripts/verify_ch01.py` で 6 次まで再計算）。係数の比 $|c_{k+1}/c_k|$ は k とともに増え続け、実際この級数の収束半径は 0 である（Bender と Wu が係数の増え方 $c_k \sim (-1)^{k+1}$ 定数$\cdot 3^k\,\Gamma(k+\tfrac{1}{2})$ を求めた）。

表 1.1　非調和振動子 $\lambda = 0.1$ の基底エネルギー（厳密値 0.5591463272）。誤差は近似値 − 厳密値

A 型：Ritz（偶関数基底 K 個）			B 型：摂動級数の部分和		
K	近似値	誤差	次数	部分和	誤差
1	0.5750000000	$+1.6\times10^{-2}$	0	0.500000	-5.9×10^{-2}
2	0.5595649110	$+4.2\times10^{-4}$	1	0.575000	$+1.6\times10^{-2}$
4	0.5591659502	$+2.0\times10^{-5}$	2	0.548750	-1.0×10^{-2}
6	0.5591466072	$+2.8\times10^{-7}$	3	0.569562	$+1.0\times10^{-2}$
8	0.5591463324	$+5.3\times10^{-9}$	4	0.545434	-1.4×10^{-2}
10	0.5591463274	$+2.1\times10^{-10}$	5	0.581243	$+2.2\times10^{-2}$
14	0.5591463272	$+2.2\times10^{-13}$	6	0.517261	-4.2×10^{-2}
A 型（曲がった集合）：ガウス変分 $E_{\mathrm{G}} = 0.5603073711$、誤差 $+1.2\times10^{-3}$（これ以上改善する手段が無い）					

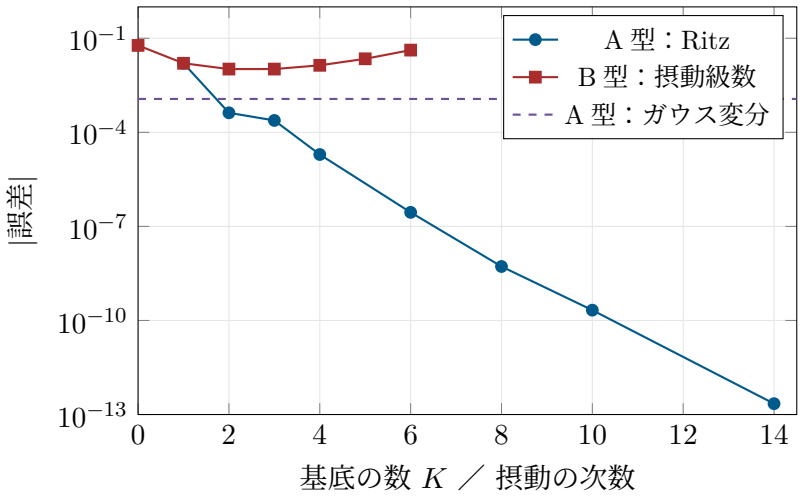


図 1.1　非調和振動子（$\lambda = 0.1$）での 3 つの近似の誤差。Ritz は基底を増やすと指数的に誤差が減る。摂動級数は 2〜3 次で誤差が最小になり、その先は悪化する。ガウス変分は 1 点で止まる

表 1.1 と図 1.1 から、3 つの近似の性格の違いが読み取れる。

線型部分空間への射影（Ritz 法）は、すべての近似値が厳密値より大きく（上界）、基底を増やすと単調に下がり、誤差はおよそ指数的に 0 へ近づく。上界性と単調性は min-max 原理（第 3 章）から、速い収束は基底状態の波動関数が非常に滑らか（実解析的）であることから来る（第 4 章）。分子の計算でガウス型基底の収束がこれよりずっと遅いのは、真の波動関数が原子核や電子どうしの衝突点で尖っていて（Kato のカスプ）、滑らかなガウス関数ではその尖りを表せないためである。

曲がった集合への制限（ガウス変分）は上界を与えるが、基底を 2 個にした Ritz（誤差 4.2×10^{-4}）よりも悪い。ガウス関数の集合をどう広げれば厳密解に近づくかという手順が、この集合自体には含まれていない。Hartree–Fock 法の誤差（相関エネルギー）が、計算をどれだけ精密にしても消えないのと同じ構造である（第 5 章）。

摂動級数は、$\lambda=0.1$ では 2〜3 次で打ち切ると誤差 10^{-2} 程度で、それ以上次数を上げると悪化する。これは級数が**漸近級数**であることの現れで、各次数 k について $\lambda\to0$ で $E(\lambda)-\sum_{j\le k}c_j\lambda^j=\mathcal{O}(\lambda^{k+1})$ は成り立つが、λ を固定して $k\to\infty$ とすると発散する。実際 $\lambda=0.01$ では 3 次までの部分和の誤差は 2.1×10^{-6} まで小さくなる（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。B 型の近似は、パラメータが十分小さいときには極めて正確だが、パラメータを固定したまま精度を上げる手段は持たない（第 7 章）。

「近似を上げれば正確になる」とは限らない

A 型の線型版だけが「計算量を増やせば必ず厳密解に近づく」という性質をもつ。曲がった集合への制限は改善の手段を持たず、漸近級数は次数を上げると悪化しうる。物理の近似で「次の次数まで計算すれば良くなるはず」と考えるときは、それがどの型の近似かを確認する必要がある。

例題 1.3　基底 2 個の Ritz 法を手で解く　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

非調和振動子 (1.1) で、調和振動子の固有関数 ϕ_n について次の行列要素が成り立つ（$x=(a+a^\dagger)/\sqrt{2}$ から計算できる）。

$$\langle\phi_0|x^4|\phi_0\rangle=\frac{3}{4},\qquad \langle\phi_2|x^4|\phi_2\rangle=\frac{39}{4},\qquad \langle\phi_0|x^4|\phi_2\rangle=\frac{3\sqrt{2}}{2},\qquad \langle\phi_0|x^4|\phi_4\rangle=\frac{\sqrt{6}}{2}.$$

(1) $K=2$（ϕ_0,ϕ_2 の 2 個）の Ritz 法の 2×2 行列を書き、$\lambda=0.1$ での最小固有値を求めて表 1.1 の値と比べよ。

(2) その最小固有値を λ について 2 次まで展開し、厳密な 2 次の係数 $-\frac{21}{8}$ と比べよ。足りない分は ϕ_4 からの寄与であることを確かめよ。

解答. **(1)** $\langle\phi_n|H|\phi_n\rangle$ の調和振動子部分は $n+\frac12$ なので、

$$H_2=\begin{pmatrix}\frac12+\frac34\lambda & \frac{3\sqrt2}{2}\lambda\\ \frac{3\sqrt2}{2}\lambda & \frac52+\frac{39}{4}\lambda\end{pmatrix}.$$

$\lambda=0.1$ では対角成分が $a=0.575$、$d=3.475$、非対角成分が $b=0.212132$ で、最小固有値は

$$\frac{a+d}{2}-\sqrt{\left(\frac{d-a}{2}\right)^2+b^2}=2.025-\sqrt{2.1025+0.045}=0.5595649\cdots$$

となり、表の $K=2$ の値 0.5595649110 と一致する。

(2) 2×2 行列の最小固有値は、非対角成分について 2 次まで $a-b^2/(d-a)+\cdots$ である。$d-a=2+\mathcal{O}(\lambda)$、$b^2=\frac92\lambda^2$ なので、λ の 2 次までで

$$\frac12+\frac34\lambda-\frac94\lambda^2.$$

厳密な係数との差は $-\frac{21}{8}+\frac{9}{4}=-\frac{3}{8}$。2 次摂動は $-\sum_{n\geq 1}|\langle\phi_0|x^4|\phi_n\rangle|^2/n$ で、偶パリティで ϕ_0 とつながるのは ϕ_2 と ϕ_4 だけである。ϕ_4 の項は $-(\sqrt{6}/2)^2/4=-\frac{3}{8}$ で、ちょうど足りない分に一致する。部分空間 V_2 に入っていない ϕ_4 の方向の寄与が欠けた分だけ、Ritz の値は厳密値より上に残る。$-\frac{9}{4}$ は例題「ガウス変分のエネルギー」で得た係数と同じで、どちらの試行関数も x^2 の方向にしか形を変えられないことを反映している（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。

1.4 各章の役割と読み方

★★ 重要 章の依存関係と、どこから読めるか

表 1.2　各章で扱う近似の型と、主な数学的道具

章	内容	型	主な数学的道具
2	解けない方程式を調べる方法	道具	不動点定理、Grönwall、弱解、コンパクト性
3	量子力学の作用素論	土台	自己共役性、Hardy 不等式、min-max、HVZ
4	Rayleigh–Ritz・Galerkin・LCAO	A	Céa の補題、交互定理、カスプ条件
5	Hartree–Fock の変分構造	A（曲がった集合）	縮約密度行列、Lieb の変分原理
6	平均場極限・Thomas–Fermi	B	Wasserstein 距離、BBGKY、半古典極限
7	Born–Oppenheimer・境界層・WKB	B	接合漸近展開、多重尺度、断熱定理
8	Boltzmann 方程式から流体方程式へ	B	H 定理、Hilbert・Chapman–Enskog 展開
9	均質化・乱流モデル・DFT	B と C	弱収束、セル問題、Hohenberg–Kohn
10	講義の近似を読む（ヘリウム・Hartree・HF）	A と B	$1/Z$ 展開、遮蔽、交換積分の正値性
11	何がどこまで正当化されているか	総括	

第 2 章と第 3 章は、以後の章が使う数学の道具を用意する。関数解析を学んでいない読者を想定し、ヒルベルト空間・定義域・弱収束などの語は使う前に定義する。第 4 章以降は、第 2・3 章の該当箇所を参照しながらどの章からでも読める。量子化学の近似に関心があれば第 3 → 4 → 5 → 6 章、流体の近似に関心があれば第 2 → 7 → 8 → 9 章の順が自然である。第 10 章は、講義「分子エレクトロニクス」第 2 回で使われたヘリウム・Hartree・Hartree–Fock の近似を、この巻の枠組みで一つずつ読み直すケーススタディで、第 3〜6 章の結果を具体的な原子に当てはめる。

重要度バッジは、この巻では**巻の主題（物理の近似を微分方程式・作用素の理論から意味付けること）にとっての中心性**で付けている。★★★ 最重要 は主題の骨格、★★ 重要 は骨格を支える重要な道具や例、★ 補強 は補強・発展である。例題は全問この巻のための自作で、各問題の冒頭に「オリジナル」の印を付けている。

記法

内積は数学の流儀で $\langle f,g\rangle=\int\overline{f}g$（第 1 引数について反線形）と書き、物理のブラケット $\langle f|g\rangle$ と同じものを表す。ノルムは $\|f\|=\langle f,f\rangle^{1/2}$。原子単位（$\hbar=m_e=e=4\pi\varepsilon_0=1$）を使い、エネルギーの単位は hartree（$\approx 27.211\,\mathrm{eV}$）である。$\mathcal{O}(\varepsilon)$ は「ある定数 C について $\leq C\varepsilon$」、$o(1)$ は「0 に収束する量」を表す。

例題 1.4　原子単位と $\mathcal{O}$ の記法 ★ 補強

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

(1) ヘリウム原子の基底エネルギーは原子単位で -2.903724 hartree である。これを eV で表せ。

(2) $\lambda\to 0$ で、$\mathrm{e}^{-1/\lambda}$ はすべての自然数 n について $\mathcal{O}(\lambda^n)$ であることを示せ。

(3) $\lambda\log(1/\lambda)$ は $\lambda\to 0$ で $o(1)$ だが $\mathcal{O}(\lambda)$ ではないことを示せ。

解答. **(1)** 1 hartree $=27.211386$ eV なので $-2.903724\times 27.211386=-79.014$ eV（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。第 10 章で扱うヘリウムの近似は、この値との差で良し悪しを測る。
(2) $t=1/\lambda$ とおくと $\mathrm{e}^{-1/\lambda}/\lambda^n=t^n\mathrm{e}^{-t}$ で、これは $t\to\infty$ で 0 に収束するので有界である。よって $\mathrm{e}^{-1/\lambda}\le C_n\lambda^n$ となる定数 C_n がある。例題「漸近級数の最適な打ち切り」の誤差 $\mathrm{e}^{-1/\lambda}$ は、べき級数の言葉では「どの次数でも見えない」大きさであることがこれで分かる。
(3) $\lambda\log(1/\lambda)=(\log t)/t\to 0$ $(t=1/\lambda\to\infty)$ なので $o(1)$。一方 $\lambda\log(1/\lambda)/\lambda=\log(1/\lambda)\to\infty$ なので、$\le C\lambda$ となる定数 C は無く、$\mathcal{O}(\lambda)$ ではない。B 型の誤差評価では、収束の速さにこうした対数の因子が付くことがあり、$\mathcal{O}(\varepsilon^{\alpha})$ の α だけでは収束の速さを言い尽くせない。

1.5 例題

★★ 重要 3 つの型の区別を手で確かめる

例題 1.5　ガウス変分のエネルギー ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成
非調和振動子 (1.1) について、規格化した試行関数 $\psi_s(x)=(2\pi s)^{-1/4}\exp(-x^2/4s)$（$s>0$）を考える。

(1) $\langle x^2\rangle=s$、$\langle x^4\rangle=3s^2$、$\langle p^2\rangle=1/(4s)$ を示せ。

(2) $\lambda=0$ のとき $E_{\mathrm{G}}(s)$ を最小化し、厳密な基底エネルギー $1/2$ が得られることを確かめよ。

(3) $\lambda>0$ が小さいとき、最小値を λ の 1 次まで求め、1 次摂動の結果と一致することを示せ。

解答. **(1)** $|\psi_s|^2=(2\pi s)^{-1/2}\mathrm{e}^{-x^2/2s}$ は分散 s の正規分布の密度なので、$\langle x^2\rangle=s$、4 次モーメントは $3s^2$ である。運動エネルギーは部分積分で $\langle p^2\rangle=\int|\psi_s'|^2\mathrm{d}x$ となり、$\psi_s'=-(x/2s)\psi_s$ より $\langle p^2\rangle=\langle x^2\rangle/(4s^2)=1/(4s)$。
(2) $E_{\mathrm{G}}(s)=1/(8s)+s/2$ を s で微分して 0 とおくと $-1/(8s^2)+1/2=0$、$s=1/2$。このとき $E_{\mathrm{G}}=1/4+1/4=1/2$。$\psi_{1/2}$ は調和振動子の基底状態そのものなので、試行関数の集合が厳密解を含み、変分の結果は厳密になる。
(3) $s=\frac12+\delta$ とおくと、$\lambda=0$ での最小点が $s=1/2$ なので $\delta=\mathcal{O}(\lambda)$ である。$E_{\mathrm{G}}(s)=E_{\mathrm{G}}^{(0)}(s)+3\lambda s^2$ で、$E_{\mathrm{G}}^{(0)}$ は $s=1/2$ で停留しているから $E_{\mathrm{G}}^{(0)}(\frac12+\delta)=\frac12+\mathcal{O}(\delta^2)=\frac12+\mathcal{O}(\lambda^2)$。第 2 項は $3\lambda(\frac12)^2+\mathcal{O}(\lambda\delta)=\frac34\lambda+\mathcal{O}(\lambda^2)$。よって $\min E_{\mathrm{G}}=\frac12+\frac34\lambda+\mathcal{O}(\lambda^2)$ で、1 次摂動 $\langle\phi_0|\lambda x^4|\phi_0\rangle=3\lambda/4$ と一致する。2 次の係数は一致しない。同じ計算を 2 次まで進めると $\delta=-\frac32\lambda$、$\min E_{\mathrm{G}}=\frac12+\frac34\lambda-\frac94\lambda^2+\mathcal{O}(\lambda^3)$ となり、厳密な係数 $-\frac{21}{8}$ に届かない（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。試行関数がガウス形に縛られているので、基底状態の形の歪み（x^4 成分の混入）を表せないためである。

例題 1.6　漸近級数の最適な打ち切り ★ 補強

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成
ある量 $F(\lambda)$ の漸近級数の係数が $c_k=(-1)^k k!$ であるとする。

(1) $\lambda>0$ を固定したとき、第 k 項 $|c_k|\lambda^k$ が最小になる k を求めよ。

(2) その最小の項の大きさが $\exp(-1/\lambda)$ 程度であることを Stirling の公式で示せ。これを「最適打ち切りの誤差」という。

解答. **(1)** 隣り合う項の比は $|c_{k+1}\lambda^{k+1}|/|c_k\lambda^k| = (k+1)\lambda$。これが 1 より小さい間は項が減り、$k+1 > 1/\lambda$ で増え始める。よって $k \approx 1/\lambda$ で最小になる。
(2) $k = 1/\lambda$ とおくと、Stirling の公式 $k! \approx \sqrt{2\pi k}\,(k/\mathrm{e})^k$ より

$$k!\,\lambda^k \approx \sqrt{2\pi k}\Big(\frac{k\lambda}{\mathrm{e}}\Big)^k = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}}\,\mathrm{e}^{-1/\lambda}.$$

交代級数では、最小の項で打ち切ったときの誤差はその項と同程度なので、誤差は $\mathrm{e}^{-1/\lambda}$ 程度になる。$\lambda \to 0$ ではどんなべき λ^n よりも速く 0 に近づくが、λ を固定すると $\mathrm{e}^{-1/\lambda}$ より小さくはできない。非調和振動子の係数は $3^k\Gamma(k+\frac{1}{2})$ 程度で増えるので、同じ議論で $k \approx 1/(3\lambda)$ が最適な次数になり、$\lambda = 0.1$ では $k \approx 3$ となる。これは表 1.1 で誤差が最小になる次数（2〜3 次）と合う。

例題 1.7　近似の型の判定 ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成
次の近似が A 型・B 型・C 型のどれにあたるかを判定し、そう判定する理由を、近似の誤差を何が抑えるか（または何も抑えないか）で述べよ。

(1) 水素分子イオン H_2^+ の電子の波動関数を、2 つの水素原子の 1s 軌道の線型結合 $c_A\phi_A + c_B\phi_B$ で表し、エネルギーを最小化する。

(2) 地球を回る人工衛星の軌道計算で、地球を質点とみなす。

(3) 乱流中の応力を、平均流の速度勾配に比例する「渦粘性」で表す。

解答. **(1)** A 型（線型部分空間への射影）。試行関数は 2 次元の線型部分空間 $\mathrm{span}\{\phi_A, \phi_B\}$ に制限され、変分原理（第 3 章の min-max 原理）により得られるエネルギーは真の基底エネルギーの上界になる。部分空間を広げれば（軌道指数を最適化する、2p 軌道を足すなど）単調に改善する。誤差は「その部分空間で真の波動関数をどこまで表せるか」で抑えられる（第 4 章）。
(2) B 型（極限）。小さいパラメータは「地球の半径と扁平率に起因する重力の非球対称成分」÷「中心の質点の重力」で、軌道半径を r、地球の半径を R とすると四重極の補正は $J_2(R/r)^2$ 程度（$J_2 \approx 10^{-3}$）である。誤差はこのパラメータの大きさで抑えられ、低軌道で長時間積分すると補正が累積して効果が現れる（極限の近似が、長時間では破れる例）。
(3) C 型（閉じる）。平均化した Navier–Stokes 方程式には Reynolds 応力という未知量が現れ、それを平均流の量で表す式を仮定することで方程式を閉じている。この仮定を正当化する小さいパラメータは無く、誤差を抑える定理も無い（第 9 章）。

1.6　この章のまとめ

★★★ 最重要

要点

- 物理の近似は、**A 型（射影）・B 型（極限）・C 型（閉じる）**の 3 つに分けられる。
- A 型の線型版は上界・単調性・収束を保証し、収束の速さは解の滑らかさで決まる。曲がった集合への制限（ガウス変分、Hartree–Fock）は上界だけを保証する。
- B 型はパラメータが十分小さければ正確だが、パラメータを固定したまま精度を上げる手段を持たない。漸近級数は発散しうる。

- C 型には内部に誤差の評価が無い。
- 物理的直観は、A 型では「良い部分空間を選ぶ」こと、B 型では「小さいパラメータを見つける」ことにあたる。

非調和振動子の例では、3 つの型の違いが数値としてはっきり現れた。線型の Ritz 法は基底 14 個で誤差 10^{-13} に達し、ガウス変分は 10^{-3} で止まり、摂動級数は 3 次付近で誤差 10^{-2} が限界だった。以後の章では、多電子系と流体という、厳密値が手に入らない問題について、同じ区別を定理の形で確かめていく。

例題 1.8　指数的な収束を外挿する　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

表 1.1 の Ritz 法の誤差は $K=6$ で 2.80×10^{-7}、$K=10$ で 2.13×10^{-10} である。

(1) 誤差が K を 1 つ増やすごとに一定の比 r で減ると仮定して、r を求めよ。

(2) その仮定で $K=14$ の誤差を予測し、表の値と比べよ。

(3) 摂動級数の誤差に同じ外挿を使えない理由を述べよ。

解答. **(1)** $K=6$ から 10 までの 4 段で誤差が $2.13\times10^{-10}/2.80\times10^{-7}=7.60\times10^{-4}$ 倍になったので、$r=(7.60\times10^{-4})^{1/4}=0.166$。基底を 1 つ足すごとに誤差がおよそ 6 分の 1 になる。
(2) $K=14$ では $2.13\times10^{-10}\times r^4=1.6\times10^{-13}$ と予測される。表の値は 2.2×10^{-13} で、桁まで合う（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。比 r がほぼ一定に保たれることが、指数的な収束の中身である。この比がどう決まるかは解の滑らかさの問題で、第 4 章で扱う。
(3) 摂動級数の誤差は表で 1.6×10^{-2}、1.0×10^{-2}、1.0×10^{-2}、1.4×10^{-2} と変わり、隣り合う比は 1 より小さい値から 1 より大きい値へ移っていく。漸近級数では比 $|c_{k+1}|\lambda/|c_k|$ が k とともに増え続けるので、一定の比で外挿する前提そのものが成り立たない。

総合問題　厳密に解ける摂動で 3 つの型を検証する　★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

調和振動子に 2 次の摂動を加えた $H_g=\frac{p^2}{2}+\frac{x^2}{2}+gx^2$（$g>-\frac{1}{2}$）の基底エネルギー $E(g)$ を考える。この問題は厳密に解けるので、この章で見た近似の性質を誤差まで含めて確かめることができる。

(1) $E(g)$ を厳密に求めよ。（使う道具：第 1 章「1 つの問題で 3 つの型を比べる」の設定）

(2) ϕ_0 だけを使う Ritz 法（$K=1$）の値 $\tilde{E}_1(g)$ を求め、すべての $g>-\frac{1}{2}$ で $\tilde{E}_1(g)\geq E(g)$ を確かめよ。（使う道具：第 1 章「近似の 3 つの型」の A 型の上界）

(3) ガウス変分 $\psi_s\propto\exp(-x^2/4s)$ の最小値を求め、$E(g)$ と一致することを示せ。非調和振動子のガウス変分が厳密値に届かなかったこととの違いを述べよ。（使う道具：第 1 章「1 つの問題で 3 つの型を比べる」のガウス変分、例題「ガウス変分のエネルギー」）

(4) $E(g)$ を g について展開し、5 次までの係数と収束半径を求めよ。$g=0.1$ では 2 次までの部分和を、$g=1$ では 5 次までの部分和の列を、厳密値と比べよ。（使う道具：第 1 章「1 つの問題で 3 つの型を比べる」の摂動級数、例題「漸近級数の最適な打ち切り」）

(5) 収束半径を決めている点 $g=-\frac{1}{2}$ で H_g に何が起きているかを述べ、非調和振動子の級数の収束半径が 0 になることとの関係を説明せよ。（使う道具：第 1 章「近似の 3 つの型」の B 型、第 1 章「1 つの問題で 3 つの型を比べる」）

解答. (1) $\frac{x^2}{2}+gx^2=\frac{1}{2}(1+2g)x^2$ なので、角振動数 $\omega=\sqrt{1+2g}$ の調和振動子である。基底エネルギーは

$$E(g)=\frac{1}{2}\sqrt{1+2g}.$$

(2) $\tilde{E}_1(g)=\langle\phi_0|H_g|\phi_0\rangle=\frac{1}{2}+g\langle\phi_0|x^2|\phi_0\rangle=\frac{1}{2}+\frac{g}{2}$。$1+2g>0$ のとき $(1+g)^2=1+2g+g^2\geq 1+2g$ で、$1+g>0$ なので $1+g\geq\sqrt{1+2g}$、すなわち $\tilde{E}_1(g)\geq E(g)$。等号は $g=0$ のときだけである。$g=0.1$ では $\tilde{E}_1=0.55$、$E=0.5477226$ で、誤差は $+2.3\times10^{-3}$。$\tilde{E}_1$ は 1 次摂動の値と一致しており、本文の非調和振動子で $K=1$ の Ritz と 1 次摂動が一致したのと同じことが起きている。
(3) $\langle x^2\rangle=s$、$\langle p^2\rangle=1/(4s)$ より

$$E_{\mathrm{G}}(s)=\frac{1}{8s}+\frac{1+2g}{2}s.$$

s で微分して 0 とおくと $s^2=\dfrac{1}{4(1+2g)}$、$s=\dfrac{1}{2\sqrt{1+2g}}$ で、そのとき $E_{\mathrm{G}}=\dfrac{\sqrt{1+2g}}{4}+\dfrac{\sqrt{1+2g}}{4}=\dfrac{1}{2}\sqrt{1+2g}=E(g)$。$H_g$ の基底状態は幅の違うガウス関数なので、ガウス関数の集合が厳密解を含み、曲がった集合への制限でも厳密になる。非調和振動子では基底状態がガウス形からずれているので、ガウス関数の集合の中にいる限り誤差 1.2×10^{-3} が残った。曲がった集合への制限が厳密になるかどうかは、真の解がその集合に入っているかどうかだけで決まる。
(4) 二項展開 $\sqrt{1+2g}=\sum_{k}\binom{1/2}{k}(2g)^k$ から

$$E(g)=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}g-\frac{1}{4}g^2+\frac{1}{4}g^3-\frac{5}{16}g^4+\frac{7}{16}g^5+\cdots.$$

$\sqrt{1+z}$ の級数は $|z|<1$ で収束し $|z|>1$ で発散するので、$z=2g$ について収束半径は $\frac{1}{2}$ である。$g=0.1$ では 2 次までの部分和が $0.5+0.05-0.0025=0.5475$ で、厳密値 0.5477226 との差は -2.2×10^{-4}。$g=1$ では部分和が $0.5,\ 1,\ 0.75,\ 1,\ 0.6875,\ 1.125,\ldots$ と振れ幅を広げながら振動し、厳密値 0.8660254 に近づかない（検算 `scripts/verify_ch01.py`）。
(5) $g=-\frac{1}{2}$ では x^2 の係数 $\frac{1}{2}(1+2g)$ が 0 になり、$g<-\frac{1}{2}$ ではポテンシャルが下に開いて H_g に基底状態が無くなる。$E(g)$ は $g=-\frac{1}{2}$ で $\sqrt{\ }$ の分岐点をもち、複素 g 平面で原点からこの特異点までの距離 $\frac{1}{2}$ が収束半径になる。この問題では g が正でも、$|g|>\frac{1}{2}$ なら級数は使えない。B 型の近似がどこまで使えるかは、物理的に意味のある $g>0$ の側だけでなく、パラメータを複素数まで広げたときの特異点の位置で決まる。非調和振動子では $\lambda<0$ にするとどんなに小さくても λx^4 が十分大きな $|x|$ で $x^2/2$ に勝ってポテンシャルが下に開くので、特異点が原点に集まり、収束半径が 0 になる。漸近級数として小さい λ でしか使えないという本文の結果は、この見方から理解できる。