第 6 章

平均場極限：多体から一体へ

★★★ 最重要 平均場近似を「ある極限で厳密になる理論」として定理の形で述べる、B 型近似の代表例

第 5 章では、Hartree–Fock 近似を「多体の波動関数を探す空間を Slater 行列式の集合へ狭めた変分問題」として扱った。この見方（A 型＝射影）で数学が保証するものは、Hartree–Fock のエネルギーが真の基底エネルギーの**上界**であることに限られる。上界がどれほど真値に近いのかは、変分の枠組みからは出てこない。

同じ「平均場近似」には、もう一つの顔がある。粒子数 N を大きくし、それに合わせて一対の相互作用を $1/N$ 倍に弱めると、多体の解そのものが一体方程式（Vlasov 方程式、Hartree 方程式、Thomas–Fermi 方程式）の解に**近づく**。この見方では、平均場近似は「ある極限で厳密になる有効方程式」であり、第 1 章の分類では B 型（極限）に属する。B 型の近似について数学が言えることは、極限がどの意味で存在するか、どれだけの速さで近づくか、どこで破綻するか、の三つである。この章では、古典系でこれを完全に証明し（Dobrushin の定理）、量子系では有界な相互作用の場合に証明を書き切り（Pickl の方法）、原子については結果を正確に述べる（Lieb–Simon の定理と Scott・Schwinger 補正）。

6.1 平均場スケーリングと問いの立て方

★★★ 最重要「何を小さいパラメータとみなすか」を決めないと、近似が厳密になる極限そのものが定義できない

6.1.1 なぜ相互作用を 1/N 倍するのか

d 次元空間の N 個の同種粒子を考える。古典力学なら運動方程式、量子力学ならハミルトニアン

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} h_j + \lambda_N \sum_{1 \le i < j \le N} W(x_i - x_j) \tag{6.1}$$

が出発点になる。h_j は j 番目の粒子に働く一体の作用素（運動エネルギーと外場）、W は二体の相互作用、λ_N は結合の強さである。各項の大きさを数えると、一体の部分は N 個の項の和なので $\mathcal{O}(N)$、相互作用の部分は粒子の対の数 $N(N-1)/2$ に比例するので $\mathcal{O}(\lambda_N N^2)$ になる。λ_N を N によらない定数にしておくと、$N \to \infty$ で相互作用が運動エネルギーを圧倒し、エネルギーは粒子 1 個あたりで見ても発散する（系はつぶれるか飛び散る）。逆に λ_N を $1/N$ より速く小さくすると、相互作用は極限で消えて自由粒子しか残らない。両者が同じ $\mathcal{O}(N)$ で釣り合うのは

$$\lambda_N = \frac{1}{N} \quad （または \ \tfrac{1}{N-1}）$$

のときだけである。これを**平均場スケーリング**と呼ぶ。このとき粒子 i に働く力は

$$-\frac{1}{N} \sum_{j \neq i} \nabla W(x_i - x_j)$$

となり、小さな力 N 個の**平均**の形をとる。平均は大数の法則によって揺らぎが消えるので、$N \to \infty$ では「他の粒子全体がつくる滑らかな平均の力」で置き換えてよいはずだ、というのが平均場近似の直観である。

平均場スケーリングの物理的な意味

$1/N$ 倍は人為的な操作に見えるが、物理の系には同じ構造が自然に現れる。重い原子では原子核の電荷 Z と電子数 $N=Z$ が一緒に大きくなり、長さを $Z^{-1/3}$ 倍に縮めると電子間反発の係数が $1/Z$ になる（第 6.7 節）。銀河の星の運動やプラズマでも、粒子 1 個の寄与は全体のつくる場に比べて小さい。「多数の弱い相互作用の平均」が成り立つ状況を数学の言葉で言い表したものが平均場スケーリングである。

6.1.2 問いの形

平均場スケーリングの下で、次の問いを立てる。

> N 体の解（古典なら N 個の粒子の軌道、量子なら N 体の波動関数）は、$N\to\infty$ で一体方程式の解の「積」に近づくか。近づくなら、それはどういう意味で、どれだけの速さか。

「近づく」の意味をきちんと決めることがこの章の中心的な仕事になる。N 体の波動関数 ψ_N と積 $\varphi^{\otimes N}$ の L^2 距離は、後で見るとおり一般には $N\to\infty$ で小さくならない（例題 6.6.1 の調和結合ボソンで確かめる）。近づく対象は、少数の粒子だけを見たときの統計（周辺分布・縮約密度行列）や、1 粒子あたりのエネルギーである。物理の直観「平均場近似は良い」は、この意味において数学的に正しい。

例題 6.1　平均場スケーリングの次元解析　★★ 重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1 次元の N 粒子系 $H_N=\sum_{j}\bigl(-\tfrac12\partial_{x_j}^2+\tfrac12 x_j^2\bigr)+\lambda\sum_{i<j}W(x_i-x_j)$ を考える。W は有界とする。

1. 積状態 $\varphi^{\otimes N}$（φ は規格化された 1 粒子の波動関数）でのエネルギー期待値を、N と λ を使って書け。
2. λ を N によらない定数とすると、1 粒子あたりのエネルギーが $N\to\infty$ で発散することを示せ（$\iint W|\varphi|^2|\varphi|^2\neq 0$ とする）。
3. $\lambda=1/(N-1)$ とすると、1 粒子あたりのエネルギーが N によらない汎関数になることを示し、その汎関数を書け。

解答. **(1)** 一体の項は各粒子について同じ値 $\langle\varphi,h\varphi\rangle$ を与えるので合計 $N\langle\varphi,h\varphi\rangle$。相互作用の項は対 (i,j) ごとに $\iint W(x-y)|\varphi(x)|^2|\varphi(y)|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y=:D_W(\varphi)$ を与え、対は $N(N-1)/2$ 個あるので

$$\langle\varphi^{\otimes N},H_N\varphi^{\otimes N}\rangle=N\langle\varphi,h\varphi\rangle+\lambda\frac{N(N-1)}{2}D_W(\varphi).$$

(2) 1 粒子あたりでは $\langle\varphi,h\varphi\rangle+\lambda\frac{N-1}{2}D_W(\varphi)$ となり、第 2 項は N に比例して $\pm\infty$ へ発散する。$D_W>0$（反発的）なら φ を広げて D_W を小さくしようとし、$D_W<0$（引力的）なら最小値が $-\infty$ に向かって系がつぶれる。いずれにせよ $N\to\infty$ の極限は意味を持たない。
(3) $\lambda=1/(N-1)$ なら 1 粒子あたり $\langle\varphi,h\varphi\rangle+\frac12 D_W(\varphi)$ となり、N が消える。これが **Hartree 汎関数**

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\varphi]=\langle\varphi,h\varphi\rangle+\frac12\iint W(x-y)|\varphi(x)|^2|\varphi(y)|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

である。$\lambda=1/N$ としても差は $\mathcal{O}(1/N)$ で、極限は同じになる。

6.2 古典版：Vlasov 方程式と Dobrushin の安定性

★★★ 最重要 平均場近似が N →∞ で厳密になることを、省略なしに証明できる最も簡単な場合

この節では、粒子の位置と速度 $z = (x, v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ を持つ古典 N 粒子系を扱う。運動方程式は

$$\dot{x}_i = v_i, \qquad \dot{v}_i = -\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \nabla W(x_i - x_j) \qquad (i = 1, \dots, N) \tag{6.2}$$

とする。W は偶関数（$W(-x) = W(x)$）で、∇W は**リプシッツ連続**、つまりある定数 L について $|\nabla W(x) - \nabla W(y)| \le L|x - y|$ を満たすとする。W が偶関数なので $\nabla W(0) = 0$ であり、和に $j = i$ の項を含めても含めなくても同じになる。

6.2.1 経験測度：N 個の点を 1 つの分布として見る

N 体の状態 $(z_1, \dots, z_N)$ と一体の分布関数 $f(x, v)$ を比べるには、両者を同じ種類の対象にそろえる必要がある。そのための道具が測度である。

定義 6.1 (確率測度・Dirac 測度・経験測度)**.** 相空間 $\mathbb{R}^{2d}$ 上の**確率測度** μ とは、$\mathbb{R}^{2d}$ の部分集合 A に「A に入る確率」$\mu(A) \in [0, 1]$ を割り当てる対応で、確率論の確率分布と同じものである（密度関数を持つ必要はない）。連続関数 g の期待値を $\int g \, \mathrm{d}\mu$ と書く。点 z_0 に全確率を集めた測度を **Dirac 測度** δ_{z_0} と書く（$\int g \, \mathrm{d}\delta_{z_0} = g(z_0)$）。$N$ 個の点 $z_1, \dots, z_N$ に確率 $1/N$ ずつを置いた

$$\mu_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \delta_{z_i}, \qquad \int g \, \mathrm{d}\mu_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(z_i)$$

を**経験測度**と呼ぶ。名前は統計学の経験分布（標本から作った分布）に由来する。密度 f を持つ測度は $\int g \, \mathrm{d}\mu = \int g f \, \mathrm{d}z$ で同一視する。

経験測度にすると、粒子に番号を付けた情報が消え、「どこに何割の粒子がいるか」だけが残る。同種粒子の系ではこれで十分であり、しかも粒子数 N が違う系どうしや、連続な分布 f と同じ土俵で比べられる。相空間の測度 μ から位置の分布 ρ_μ（v について積分したもの）を作り、平均の力を

$$(\nabla W * \rho_\mu)(x) = \int \nabla W(x - y) \, \mathrm{d}\rho_\mu(y)$$

と書く（$*$ は畳み込み）。経験測度なら $(\nabla W * \rho_{\mu_N})(x_i) = \frac{1}{N}\sum_j \nabla W(x_i - x_j)$ で、まさに (6.2) の右辺の力である。

6.2.2 Vlasov 方程式と、経験測度がその解であること

一体の分布関数 $f_t(x, v)$ に対する **Vlasov 方程式**は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f - (\nabla W * \rho_f) \cdot \nabla_v f = 0, \qquad \rho_f(x) = \int f(x, v) \, \mathrm{d}v \tag{6.3}$$

である。これは「各粒子は、全体がつくる平均の力 $-\nabla W * \rho_f$ の中を独立に運動する」という一体の運動方程式を、分布関数の連続の式に書き直したものである。力が f 自身に依存するので**非線形**の偏微分方程式になる。

経験測度は滑らかでないので (6.3) に直接代入できない。そこで滑らかな試験関数 $g(x, v)$ を掛けて部分積分した形

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int g \, \mathrm{d}\mu_t = \int \big[v \cdot \nabla_x g - (\nabla W * \rho_{\mu_t}) \cdot \nabla_v g \big] \mathrm{d}\mu_t \tag{6.4}$$

がすべての g で成り立つことを、測度 μ_t が Vlasov 方程式を（弱い意味で）満たすことの定義とする。μ_t が滑らかな密度 f_t を持てば、部分積分を戻して (6.3) と同値になる。

命題 6.2 (粒子系は Vlasov 方程式の厳密解 ★★★ 最重要)**.** $(z_1(t),\dots,z_N(t))$ が (6.2) の解なら、経験測度 $\mu_N(t)=\frac{1}{N}\sum_i \delta_{z_i(t)}$ は *Vlasov* 方程式 (6.4) を満たす。

証明. $\int g\,\mathrm{d}\mu_N(t)=\frac{1}{N}\sum_i g(x_i(t),v_i(t))$ を時間微分すると、連鎖律と (6.2) により

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int g\,\mathrm{d}\mu_N=\frac{1}{N}\sum_i\Big[\nabla_x g(z_i)\cdot v_i-\nabla_v g(z_i)\cdot\frac{1}{N}\sum_j\nabla W(x_i-x_j)\Big].$$

内側の和は $(\nabla W*\rho_{\mu_N})(x_i)$ に等しいので、右辺は $\int[v\cdot\nabla_x g-(\nabla W*\rho_{\mu_N})\cdot\nabla_v g]\,\mathrm{d}\mu_N$ である。 □

この命題の意味は大きい。N 体の問題と一体の問題は**同じ方程式**の異なる初期値に対する解であり、「平均場近似が正しいか」という問いは「Vlasov 方程式の解は初期値に連続に依存するか」という**安定性**の問いに置き換わる。初期値が N 個の点の経験測度 $\mu_N(0)$ か、滑らかな f_0 か、の違いだけである。

6.2.3 Wasserstein 距離：点の集合と滑らかな分布を比べる

安定性を述べるには測度どうしの距離が要る。ここで素朴な距離は役に立たない。たとえば密度の差の L^1 ノルム $\int|f-g|\,\mathrm{d}z$ を測度へ拡張した全変動距離では、経験測度 μ_N と滑らかな f の距離は、N をどれだけ大きくしても最大値の 2 のままである（μ_N は N 個の点に集中し、f はその点に確率 0 しか置かないため）。ここで要る距離は、「点の位置が少しずれたら距離も少しだけ変わる」もの、つまり**確率の質量を運ぶ距離**を測るものである。

定義 6.3 (カップリングと Wasserstein-1 距離)**.** $\mathbb{R}^{2d}$ のノルムを $|z|=|x|+|v|$ とする。確率測度 μ,ν の**カップリング**とは、$\mathbb{R}^{2d}\times\mathbb{R}^{2d}$ 上の確率測度 π で、第 1 成分の分布が μ、第 2 成分の分布が ν になるもの（同時分布）をいう。その全体を $\Pi(\mu,\nu)$ と書き、

$$W_1(\mu,\nu)=\inf_{\pi\in\Pi(\mu,\nu)}\iint|z-z'|\,\mathrm{d}\pi(z,z')$$

を **Wasserstein-1 距離**と呼ぶ（1 次モーメント $\int|z|\,\mathrm{d}\mu$ が有限な測度の間で定義する）。

カップリング π は「μ の質量のどれだけを ν のどこへ運ぶか」という輸送計画であり、W_1 はその最小の輸送コストである（最適輸送の Monge–Kantorovich 問題）。点の数が同じ経験測度どうしなら、W_1 は点の対応付け（置換 σ）の最小値 $\min_\sigma\frac{1}{N}\sum_i|z_i-z'_{\sigma(i)}|$ に一致する。点 z_0 と z_0' の Dirac 測度なら $W_1=|z_0-z_0'|$ で、点が少し動けば距離も少しだけ変わる。

双対表示と弱収束

W_1 には Kantorovich–Rubinstein の双対表示 $W_1(\mu,\nu)=\sup\{\int g\,\mathrm{d}\mu-\int g\,\mathrm{d}\nu:\ g\text{ は 1-リプシッツ}\}$ がある（証明は省く）。つまり W_1 が小さいとは、変化の緩やかな観測量の期待値がすべて近いということである。物理で測るのはまさにこの種の量（密度を滑らかな関数で平均したもの）なので、W_1 は物理の要請に合った距離になっている。また、確率測度の列 μ_n が μ に**弱収束**する（$\mu_n\rightharpoonup\mu$）とは、有界連続なすべての g で $\int g\,\mathrm{d}\mu_n\to\int g\,\mathrm{d}\mu$ となることをいう。$W_1(\mu_n,\mu)\to0$ は、弱収束に 1 次モーメントの収束を加えたものと同値である。

6.2.4 Dobrushin の安定性定理

一般の初期測度 μ_0 に対して、Vlasov 方程式の解は次の**非線形の特性曲線**で作る。μ_t が分かっているとして、

$$\dot X=V,\qquad \dot V=-(\nabla W*\rho_{\mu_t})(X),\qquad (X,V)(0)=z \tag{6.5}$$

の解を $Z_t^\mu(z)=(X_t^\mu(z),V_t^\mu(z))$ と書き、μ_t を「μ_0 の各点を Z_t^μ で運んだ測度」(**押し出し** $\mu_t=(Z_t^\mu)_{\#}\mu_0$、すなわち $\int g\,\mathrm{d}\mu_t=\int g(Z_t^\mu(z))\,\mathrm{d}\mu_0(z)$) とする。力が μ_t に依存するので自己無撞着な条件になるが、

∇W がリプシッツなら Picard の逐次近似（第 2 章の存在定理と同じ論法）で大域的に一意に解けることが知られている。μ_0 が経験測度なら、Z_t^{μ} は (6.2) の各粒子の軌道そのものである。

定理 6.4 (Dobrushin ★★★ 最重要)**.** *∇W がリプシッツ定数 L を持つとする。1 次モーメントが有限な初期測度 μ_0, ν_0 から出発した Vlasov 方程式の解 μ_t, ν_t について*

$$W_1(\mu_t, \nu_t) \le \mathrm{e}^{(1+2L)t}\, W_1(\mu_0, \nu_0) \qquad (t \ge 0).$$

証明. 証明の考え方は「二つの測度の粒子をカップリングで組にし、組ごとに軌道のずれを追う」ことである。
(i) 初期のカップリング。 $\varepsilon > 0$ を任意にとり、$\iint |z - z'| \,\mathrm{d}\pi_0 \le W_1(\mu_0, \nu_0) + \varepsilon$ となる $\pi_0 \in \Pi(\mu_0, \nu_0)$ を選ぶ。組 (z, z') を μ 側の特性曲線 $Z_t^{\mu}(z)$ と ν 側の特性曲線 $Z_t^{\nu}(z')$ で運び、

$$D(t) = \iint |Z_t^{\mu}(z) - Z_t^{\nu}(z')| \,\mathrm{d}\pi_0(z, z')$$

とおく。組を運んだ測度 π_t（$\iint G \,\mathrm{d}\pi_t = \iint G(Z_t^{\mu}(z), Z_t^{\nu}(z'))\,\mathrm{d}\pi_0$）の第 1 成分の分布は $(Z_t^{\mu})_{\#}\mu_0 = \mu_t$、第 2 成分は ν_t なので $\pi_t \in \Pi(\mu_t, \nu_t)$ であり、W_1 の定義から

$$W_1(\mu_t, \nu_t) \le \iint |z - z'| \,\mathrm{d}\pi_t = D(t), \qquad D(0) \le W_1(\mu_0, \nu_0) + \varepsilon. \tag{6.6}$$

(ii) 力の差の評価。 組 (z, z') を固定し、$X = X_t^{\mu}(z)$、$X' = X_t^{\nu}(z')$ と略記する。ρ_{μ_t} は μ_0 を運んだ測度の位置成分なので $(\nabla W * \rho_{\mu_t})(X) = \int \nabla W(X - X_t^{\mu}(w))\,\mathrm{d}\mu_0(w)$ と書け、ν 側も同様である。π_0 の周辺分布が μ_0, ν_0 であることを使って一つの積分にまとめると

$$(\nabla W * \rho_{\mu_t})(X) - (\nabla W * \rho_{\nu_t})(X') = \iint \big[\nabla W(X - X_t^{\mu}(w)) - \nabla W(X' - X_t^{\nu}(w'))\big] \mathrm{d}\pi_0(w, w').$$

リプシッツ性から被積分関数の大きさは $L|X - X'| + L|X_t^{\mu}(w) - X_t^{\nu}(w')|$ 以下なので、

$$\big|(\nabla W * \rho_{\mu_t})(X) - (\nabla W * \rho_{\nu_t})(X')\big| \le L|X - X'| + L\, D(t).$$

ここが証明の要である。平均の力のずれは「自分の位置のずれ」と「他の粒子の位置のずれの平均」で抑えられ、後者が再び D になる。
(iii) 軌道のずれ。 (6.5) を積分形に書き、$V = V_t^{\mu}(z)$、$V' = V_t^{\nu}(z')$ として

$$|X(t) - X'(t)| \le |x - x'| + \int_0^t |V - V'| \,\mathrm{d}s, \qquad |V(t) - V'(t)| \le |v - v'| + \int_0^t \big(L|X - X'| + L\, D(s)\big)\mathrm{d}s.$$

足し合わせ、$|V - V'| + L|X - X'| \le (1 + L)|Z - Z'|$ を使うと

$$|Z_t^{\mu}(z) - Z_t^{\nu}(z')| \le |z - z'| + \int_0^t \big[(1 + L)|Z_s^{\mu}(z) - Z_s^{\nu}(z')| + L\, D(s)\big]\mathrm{d}s.$$

両辺を π_0 で積分すると $D(t) \le D(0) + (1 + 2L)\int_0^t D(s)\,\mathrm{d}s$ を得る。
(iv) Grönwall の不等式で閉じる。 $G(t) = D(0) + (1+2L)\int_0^t D\,\mathrm{d}s$ とおくと $D \le G$ なので $G' = (1+2L)D \le (1 + 2L)G$、したがって $(\mathrm{e}^{-(1+2L)t}G)' \le 0$ から $D(t) \le G(t) \le \mathrm{e}^{(1+2L)t}D(0)$。(6.6) と合わせ、$\varepsilon \to 0$ とすれば主張を得る。 □

系 6.5 (古典平均場極限 ★★★ 最重要)**.** *f_0 を 1 次モーメント有限な確率密度、f_t を対応する Vlasov 方程式の解とする。N 粒子系の初期配置を f_0 から独立に抽出すると、確率 1 で $W_1(\mu_N(0), f_0) \to 0$ となり、任意の T について*

$$\sup_{0 \le t \le T} W_1(\mu_N(t), f_t) \le \mathrm{e}^{(1+2L)T}\, W_1(\mu_N(0), f_0) \xrightarrow[N \to \infty]{} 0.$$

証明. 命題 6.2 により $\mu_N(t)$ は Vlasov 方程式の解なので、定理 6.4 を $\mu_0 = \mu_N(0)$、$\nu_0 = f_0$ に使えばよい。初期の収束 $W_1(\mu_N(0), f_0) \to 0$ は経験測度の大数の法則（有界連続関数の標本平均が期待値に収束し、1 次

モーメントも収束する）による。 □

これが「平均場近似は $N \to \infty$ で厳密になる」の最初の完全な例である。物理屋の直観と照らし合わせると、直観の「力の揺らぎは平均されて消える」は初期時刻の大数の法則に対応し、直観では暗黙にされている「消えた揺らぎが時間発展で増幅されない」ことを保証するのが Dobrushin の安定性である。後者は自明でない。カオス的な力学系では初期のずれが指数関数的に増え、定理の $\mathrm{e}^{(1+2L)t}$ はまさにその最悪の増え方を表している。したがって近似の保証は有限時間 T の間に限られ、N を固定して $t \to \infty$ とすると保証は失われる（$t \sim \log N$ の時間で破綻しうる）。

収束の速さと次元

初期の誤差 $W_1(\mu_N(0), f_0)$ の典型的な大きさは相空間の次元 $D = 2d$ に依存し、$D \geq 3$ では $N^{-1/D}$ 程度でしか小さくならない。相空間が 6 次元の現実の系では $N^{-1/6}$ であり、遅い。ただしこれは「分布全体を一様に近似する」という厳しい要求の値であり、1 つの滑らかな観測量 $\int g \,\mathrm{d}\mu_N$ の誤差は中心極限定理によって $N^{-1/2}$ 程度である。次節のカオスの伝播はこの $N^{-1/2}$ の速さを与える。

6.2.5 数値で見る

1 次元（$d = 1$）で $W(x) = -\cos x$（$\nabla W = \sin x$、$L = 1$ の引力的な相互作用）をとり、初期分布 f_0 を $x \sim \mathcal{N}(0, 1)$、$v \sim \mathcal{N}(0, 0.3^2)$ の独立な正規分布とした。Vlasov 方程式は、f_0 を Gauss–Hermite 求積の重みつき点（220^2 個）で表して特性曲線 (6.5) を解いた（150^2 個との差は $0 \leq t \leq 8$ で 5×10^{-4} 未満）。図 6.1 は、凝集の度合い $m(t) = \int \cos x \,\mathrm{d}\rho_t$ を Vlasov 解と、f_0 から抽出した $N = 100$、2000 粒子の系とで比べたものである。N 粒子系の $m_N(t)$ は Vlasov 解のまわりに揺らぎ、その揺らぎは N とともに小さくなる。12 回の抽出で平均した $\sup_{0 \leq t \leq 8} |m_N(t) - m(t)|$ は $N = 10^2, 10^3, 10^4$ でそれぞれ 0.075、0.020、0.0052 であり、両対数の傾きは -0.58 で $N^{-1/2}$ に近い。同じ系で二つの $N = 150$ 粒子配置の W_1 を最適割当で直接計算すると、$W_1(\mu_t, \nu_t)/W_1(\mu_0, \nu_0)$ は $t = 3$ で 1.12 にとどまり、評価 $\mathrm{e}^{3t} \approx 8100$ よりはるかに小さい。Dobrushin の評価は最悪の場合に対するもので、典型的な配置では緩い（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

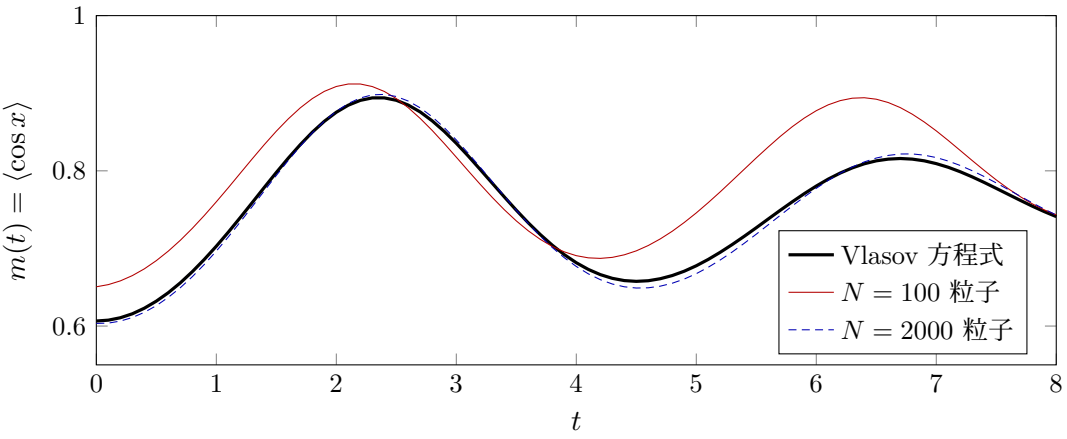


図 6.1　1 次元の平均場系（$\nabla W = \sin x$）における凝集度 $m(t)$。N 粒子系は Vlasov 解のまわりで揺らぎ、揺らぎは $N^{-1/2}$ 程度で小さくなる。

例題 6.2　自由運動での W_1 の伸び ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

1 次元（$d = 1$）で相互作用のない場合（$W = 0$、$L = 0$）を考える。2 点の経験測度

$$\mu_0 = \tfrac{1}{2}\big(\delta_{(0,0)} + \delta_{(1,0)}\big), \qquad \nu_0 = \tfrac{1}{2}\big(\delta_{(0,0.1)} + \delta_{(1,0.1)}\big)$$

をとる（点は (x, v) の順。ν_0 は μ_0 の 2 粒子に同じ速度 0.1 を与えたもの）。

(1) $W_1(\mu_0,\nu_0)$ を、2 通りの対応付けのコストを比べて求めよ。また全変動距離の意味では 2 つの測度が最大値 2 だけ離れていることを確かめよ。

(2) $0\le t\le 10$ で $W_1(\mu_t,\nu_t)=0.1(1+t)$ となることを示せ。

(3) Dobrushin の評価 $\mathrm{e}^{(1+2L)t}W_1(\mu_0,\nu_0)$ と $t=3$ で比べ、評価の指数の「1」が何に由来するかを述べよ。

解答. **(1)** 点の数が同じ経験測度どうしなので、W_1 は対応付けの最小コストである。番号どおりに組むと各組のずれは $|0-0|+|0-0.1|=0.1$ で、平均 0.1。入れ替えて組むと各組のずれは $1+0.1=1.1$ で、平均 1.1。よって $W_1(\mu_0,\nu_0)=0.1$。一方、μ_0 の 2 点と ν_0 の 2 点は 1 つも重ならないので、μ_0 が確率 1 を置く集合に ν_0 は確率 0 しか置かず、全変動距離は 2 になる。速度がわずか 0.1 違うだけの 2 つの配置を「最大限に違う」と判定する距離では、平均場極限の誤差を測れない。
(2) $W=0$ なので各点は $x(t)=x+vt$ で等速に動く。μ_t の点は $(0,0)$、$(1,0)$ のまま、ν_t の点は $(0.1t,\,0.1)$、$(1+0.1t,\,0.1)$ になる。番号どおりの対応のコストは各組 $0.1t+0.1$ で、平均 $0.1(1+t)$。入れ替えた対応のコストは $\frac12\big[(1+0.1t+0.1)+(|1-0.1t|+0.1)\big]$ で、$0\le t\le 10$ では $|1-0.1t|=1-0.1t$ だから 1.1。$0.1(1+t)\le 1.1$ は $t\le 10$ と同値なので、この範囲では最小値は $0.1(1+t)$ である。
(3) $L=0$ のとき評価は $\mathrm{e}^t\times 0.1$ で、$t=3$ では 2.01。実際の値は $0.1\times 4=0.4$ である。指数の「1」は、相互作用がなくても位置のずれが速度のずれから $|x-x'|+t|v-v'|$ と時間に比例して育つ（相空間の剪断）ことから来ている。定理の証明 (iii) はこの 1 次の増え方を Grönwall の不等式で e^t に置き換えたので、自由運動に対しても評価は緩い。相互作用の寄与 $2L$ のうち一方は自分の位置のずれ、もう一方は他の粒子の位置のずれの平均 $D(t)$ から来る（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

6.3 カオスの伝播

★★ 重要 「粒子が独立にふるまう」という平均場の仮定が、時間発展で保たれることの正確な言い換え

経験測度の収束は「粒子全体の分布」についての主張だった。平均場の直観にはもう一つの側面がある。それは「粒子 1 と粒子 2 の運動はほとんど独立である」という主張で、これを数学にしたものが Kac による**カオス**の概念である。

定義 6.6 (Kac のカオス性)**.** 各 N について、N 粒子の相空間 $(\mathbb{R}^{2d})^N$ 上の対称な（粒子の番号の入れ替えで変わらない）確率測度 F_N が与えられているとする。固定した各 k について、F_N の k 粒子周辺分布（最初の k 粒子以外を積分したもの）$F_N^{(k)}$ が $N\to\infty$ で $f^{\otimes k}$（f の k 個の独立なコピーの同時分布）に弱収束するとき、列 F_N は **f-カオス的**であるという。

名前の「カオス」は力学系のカオスとは無関係で、Boltzmann の「分子カオス」（衝突する 2 分子の速度は独立）に由来する。$F_N=f_0^{\otimes N}$（独立同分布の初期値）はもちろん f_0-カオス的である。問題は、相互作用のある時間発展の後でもそれが保たれるかであり、保たれることを**カオスの伝播**という。これを示す最も見通しのよい方法は、Sznitman による次のカップリングである。

定理 6.7 (カオスの伝播 ★★ 重要)**.** f_0 は 2 次モーメント有限な確率密度、∇W はリプシッツ定数 L を持つとする。初期値 $Z_i(0)$ を f_0 から独立に抽出し、$Z_i(t)$ を (6.2) の解、$\bar Z_i(t)=Z_t^{f}(Z_i(0))$ を *Vlasov* 解 f_t の特性曲線で同じ初期値を運んだものとする（$\bar Z_1,\dots,\bar Z_N$ は互いに独立で、それぞれの分布は f_t）。このとき、T と f_0 で決まる定数 M_T があって、$0\le t\le T$ で

$$\mathbb{E}|Z_1(t)-\bar Z_1(t)|\le \frac{M_T}{\sqrt{N}}\cdot\frac{\mathrm{e}^{(1+2L)t}-1}{1+2L}.$$

とくに k 粒子周辺分布 $F_N^{(k)}(t)$ について $W_1(F_N^{(k)}(t),f_t^{\otimes k})\le k\,\mathbb{E}|Z_1(t)-\bar Z_1(t)|\to 0$ となる。

証明. $F=-\nabla W$ と書く。粒子 1 の加速度の差は

$$\frac{1}{N}\sum_j F(X_1-X_j)-(F*\rho_t)(\bar X_1)=\underbrace{\frac{1}{N}\sum_j\bigl[F(X_1-X_j)-F(\bar X_1-\bar X_j)\bigr]}_{\text{(a)}}+\underbrace{\frac{1}{N}\sum_j F(\bar X_1-\bar X_j)-(F*\rho_t)(\bar X_1)}_{\text{(b)}}$$

と分かれる。(a) はリプシッツ性から $L|X_1-\bar X_1|+\frac{L}{N}\sum_j|X_j-\bar X_j|$ 以下である。(b) は N 体の力学を含まない、独立な $\bar X_j$ だけの量である。$j=1$ の項は $F(0)=0$ で消え、$j\neq 1$ の項 $Y_j=F(\bar X_1-\bar X_j)-(F*\rho_t)(\bar X_1)$ は $\bar X_1$ を固定すると互いに独立で平均 0 である（$\bar X_j$ の分布が ρ_t だから）。したがって分散の加法性から $\mathbb{E}|\frac{1}{N}\sum_{j\neq1}Y_j|\le\frac{1}{N}\sqrt{(N-1)\mathbb{E}|Y_2|^2}$ となり、残りの $-\frac{1}{N}(F*\rho_t)(\bar X_1)$ と合わせて $\mathbb{E}|(\mathrm{b})|\le M_T/\sqrt{N}$ と書ける（$|F(x)|\le L|x|$ と 2 次モーメントの有限性から $M_T<\infty$）。粒子の番号の対称性から $\mathbb{E}|Z_j-\bar Z_j|$ はすべての j で等しいので、これを $\Delta(t)$ とおき、定理 6.4 の証明 (iii) と同じ計算をすると

$$\Delta(t)\le\int_0^t\Bigl[(1+2L)\Delta(s)+\frac{M_T}{\sqrt{N}}\Bigr]\mathrm{d}s$$

を得る（初期値は同じなので $\Delta(0)=0$）。Grönwall の不等式の非斉次版で主張の評価になる。周辺分布については、$(Z_1,\dots,Z_k)$ と $(\bar Z_1,\dots,\bar Z_k)$ の同時分布が $F_N^{(k)}$ と $f_t^{\otimes k}$ のカップリングになることから従う。 □

カオスの伝播が言っていること

平均場近似は「多体の分布 $\approx f\otimes f\otimes\cdots\otimes f$」と仮定する近似である。定理 6.7 は、この仮定が初期時刻に成り立てば有限時間の間は保たれ続けることを主張する。ただし N 体の分布そのものが積に近づくのではなく、**固定した少数の粒子**の分布が積に近づく。有限の N では 2 粒子の相関は $\mathcal{O}(1/N)$ の大きさで残り、それが N^2 個の対すべてに散らばっている。全体の相関を足し上げると無視できない量になりうる。

直観が外れる場面

相互作用が特異な場合（重力・クーロン力のように $\nabla W\sim|x|^{-2}$）は、リプシッツ性が成り立たず、上の証明は最初の一歩から使えない。近接遭遇（二つの粒子がたまたま近づくこと）で力が非常に大きくなり、大数の法則による平均化が働かなくなるためである。Vlasov–Poisson 方程式（プラズマ・銀河力学の基本方程式）を、カットオフなしの点粒子系から導くことは、現在でも一般には未解決の問題として扱われている。

例題 6.3　独立性が力の揺らぎを消すこと　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

定理 6.7 の証明の (b) 項を具体的に計算する。1 次元で $F(x)=-\sin x$（数値例と同じ相互作用）とし、$\bar X_1,\dots,\bar X_N$ を円周 $[0,2\pi)$ 上の一様分布から独立に抽出する。

(1) 一様分布 ρ に対して平均の力 $(F*\rho)(x)$ が恒等的に 0 であることを示せ。

(2) $(\mathrm{b})=-\frac{1}{N}\sum_{j\neq1}\sin(\bar X_1-\bar X_j)$ の 2 乗平均が $\mathbb{E}|(\mathrm{b})|^2=\frac{N-1}{2N^2}$ であることを示し、$N=100$ での 2 乗平均平方根を求めよ。

(3) 逆に、すべての $j\ge2$ で $\bar X_j=\bar X_1+c$（c は定数で $\sin c\neq0$）と完全に相関していたら (b) はどうなるか。カオス性の仮定の役割を述べよ。

解答. **(1)** $(F*\rho)(x)=-\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin(x-y)\,\mathrm{d}y$ で、$\sin(x-y)$ を y について 1 周積分すると 0 になる。
(2) $\bar X_1$ を固定すると、$Y_j=-\sin(\bar X_1-\bar X_j)$ $(j\ge2)$ は互いに独立で、$\bar X_j$ が一様なので平均 0、2 乗平均 $\frac{1}{2\pi}\int\sin^2=\frac12$ である。独立で平均 0 の変数の和の 2 乗平均は、交差項 $\mathbb{E}[Y_jY_k]=\mathbb{E}[Y_j]\mathbb{E}[Y_k]=0$

が消えて 2 乗平均の和になるので

$$\mathbb{E}|(\mathrm{b})|^2 = \frac{1}{N^2}\sum_{j\neq 1}\mathbb{E}Y_j^2 = \frac{N-1}{2N^2}.$$

これは $\bar{X}_1$ によらないので、そのまま全体の期待値でもある。$N=100$ では $\sqrt{99/20000}\approx 0.0704$ で、$1/\sqrt{2N}$ 程度に小さい。
(3) 完全に相関していると $Y_j = -\sin(-c) = \sin c$ がすべての j で同じ値になり、$(\mathrm{b}) = \frac{N-1}{N}\sin c$ は $N\to\infty$ でも $\sin c$ に近づくだけで消えない。平均の力からのずれが $N^{-1/2}$ で消えるのは、粒子どうしが独立で交差項が消えるからであり、それを時間発展の間も保証するのがカオス性（とその伝播）である。$N^{-1/2}$ の速さは、中心極限定理の速さそのものである（モンテカルロでの確認は `scripts/verify_ch06.py`）。

6.4 量子版：BBGKY 階層と Hartree 方程式

★★★ 最重要 多体の方程式から一体の方程式を作ろうとすると「閉じない」階層が現れ、平均場近似はその打ち切りに当たる

6.4.1 縮約密度行列

量子系では N 個のボソンの波動関数 $\psi_N(x_1,\dots,x_N)$（変数の入れ替えで対称、$\|\psi_N\|=1$）を考える。古典系の k 粒子周辺分布に当たるのが k **体縮約密度行列**

$$\gamma_N^{(k)}(x_1,\dots,x_k;y_1,\dots,y_k) = \int \psi_N(x_1,\dots,x_k,z)\,\overline{\psi_N(y_1,\dots,y_k,z)}\,\mathrm{d}z \tag{6.7}$$

である（$z=(z_{k+1},\dots,z_N)$ について積分する。これを部分トレース $\gamma_N^{(k)} = \mathrm{Tr}_{k+1,\dots,N}|\psi_N\rangle\langle\psi_N|$ と書く）。この核を持つ積分作用素 $\gamma_N^{(k)}$ は正（$\langle u,\gamma u\rangle\ge 0$）でトレースが 1 であり、$k$ 粒子までの観測量の期待値はすべて $\gamma_N^{(k)}$ で決まる。たとえば $\langle\psi_N, A_1\psi_N\rangle = \mathrm{Tr}(A\gamma_N^{(1)})$ である。積状態 $\psi_N=\varphi^{\otimes N}$ なら $\gamma_N^{(k)} = |\varphi\rangle\langle\varphi|^{\otimes k}$ になる。

縮約密度行列の差を測るには**トレースノルム**を使う。自己共役なトレースクラスの作用素 A（固有値の絶対値の和が有限なもの）について $\|A\|_1 = \mathrm{Tr}|A| = \sum|\lambda_n|$ と定める。$\|A\|_1$ が小さいことは、すべての有界な観測量 B について $|\mathrm{Tr}(BA)|\le\|B\|\|A\|_1$ が小さいことを意味する。古典の W_1 に当たる量だが、量子では状態が波動関数（重ね合わせ）なので、点の輸送のような幾何は無く、作用素のノルムで足りる。

6.4.2 BBGKY 階層の導出

ハミルトニアン (6.1) で $h=-\Delta$ とし、$\mathrm{i}\partial_t\psi_N = H_N\psi_N$ に従う時間発展を考える。

命題 6.8 (BBGKY 階層 ★★★ 最重要)**.** $k=1,\dots,N$ について

$$\mathrm{i}\partial_t\gamma_N^{(k)} = \sum_{j=1}^{k}\left[h_j,\gamma_N^{(k)}\right] + \lambda_N\sum_{1\le i<j\le k}\left[W_{ij},\gamma_N^{(k)}\right] + \lambda_N(N-k)\sum_{j=1}^{k}\mathrm{Tr}_{k+1}\left[W_{j,k+1},\gamma_N^{(k+1)}\right]. \tag{6.8}$$

ここで W_{ij} は $W(x_i-x_j)$ を掛ける作用素、Tr_{k+1} は $k+1$ 番目の変数についての部分トレースである。

証明. $k=1$ の場合を核で計算する（一般の k も同じ計算である）。(6.7) を時間微分して $\mathrm{i}\partial_t\psi = H\psi$ を使うと

$$\mathrm{i}\partial_t\gamma^{(1)}(x;y) = \int\Big[(H\psi)(x,z)\overline{\psi(y,z)} - \psi(x,z)\overline{(H\psi)(y,z)}\Big]\mathrm{d}z$$

となる。H の項を一つずつ見る。

- h_1：x と y にそれぞれ作用して $(h_x - h_y)\gamma^{(1)}(x;y)$、これは作用素として $\bigl[h,\,\gamma^{(1)}\bigr]$ の核である。
- h_j $(j \ge 2)$：z_j について積分しているので、h の自己共役性（部分積分）から $\int (h_j\psi)\bar{\psi}\,\mathrm{d}z_j = \int \psi\,\overline{h_j\psi}\,\mathrm{d}z_j$ となって打ち消し合う。
- W_{ij} $(i,j \ge 2)$：掛け算の作用素で、x 側と y 側で同じ値 $W(z_i - z_j)$ を掛けるので差は 0。
- W_{1j} $(j \ge 2)$：$\bigl[W(x-z_j) - W(y-z_j)\bigr]\psi(x,z)\overline{\psi(y,z)}$ を積分する。z_j 以外を積分すると $\gamma^{(2)}(x,z_j;y,z_j)$ が現れ、$\int [W(x-z_j) - W(y-z_j)]\gamma^{(2)}(x,z_j;y,z_j)\,\mathrm{d}z_j$ となる。これは $\mathrm{Tr}_2\bigl[W_{12},\,\gamma^{(2)}\bigr]$ の核であり、ボソンの対称性から $N-1$ 個の j で同じ値になる。

以上を合わせて $\mathrm{i}\partial_t\gamma^{(1)} = \bigl[h,\,\gamma^{(1)}\bigr] + \lambda_N(N-1)\,\mathrm{Tr}_2\bigl[W_{12},\,\gamma^{(2)}\bigr]$ を得る。 □

式 (6.8) の最後の項が要点である。$\gamma^{(1)}$ の方程式には $\gamma^{(2)}$ が、$\gamma^{(2)}$ の方程式には $\gamma^{(3)}$ が現れ、どの段も次の段を含む。有限の k で切ると方程式が**閉じない**。全体は $k = N$ で N 体の Schrödinger 方程式そのものに戻るので、階層は元の問題と同じ難しさを持つ。この構造は量子に固有のものではなく、古典の Liouville 方程式から周辺分布の方程式を作っても同じ階層が現れる（BBGKY は Bogoliubov・Born・Green・Kirkwood・Yvon の頭文字である）。第 9 章で扱う乱流のクロージャー問題、つまり平均流の方程式に 2 次相関（Reynolds 応力）が現れ、その方程式に 3 次相関が現れる、という無限の連鎖も同じ構造をしている。違いは、平均場スケーリングには小さいパラメータ $1/N$ があり、閉じ方が極限として**導かれる**のに対し、乱流にはそれが無く、閉じ方をモデルとして**置く**しかない（C 型）ことである。

6.4.3 平均場スケーリングでの極限と、積状態による閉包

$\lambda_N = 1/(N-1)$ とすると、(6.8) の第 2 項の係数は $1/(N-1) \to 0$、第 3 項の係数は $(N-k)/(N-1) \to 1$ になる。形式的に $N \to \infty$ とすると、**Hartree 階層**

$$\mathrm{i}\partial_t\gamma^{(k)} = \sum_{j=1}^{k}\Bigl[h_j,\,\gamma^{(k)}\Bigr] + \sum_{j=1}^{k}\mathrm{Tr}_{k+1}\Bigl[W_{j,k+1},\,\gamma^{(k+1)}\Bigr] \tag{6.9}$$

を得る。これも閉じていない無限の連立方程式だが、特別な解を持つ。

命題 6.9 (積状態は階層を閉じる ★★★ 最重要). φ_t が ***Hartree* 方程式**

$$\mathrm{i}\partial_t\varphi = -\Delta\varphi + (W * |\varphi|^2)\varphi \tag{6.10}$$

を満たすなら、$\gamma^{(k)} = |\varphi_t\rangle\langle\varphi_t|^{\otimes k}$ $(k = 1, 2, \dots)$ は *Hartree* 階層 (6.9) の解である。

証明. $p = |\varphi\rangle\langle\varphi|$、$V = W * |\varphi|^2$ とおく。鍵になる恒等式は

$$\mathrm{Tr}_2\bigl[W_{12}\,(p\otimes p)\bigr] = V\,p, \qquad \mathrm{Tr}_2\bigl[(p\otimes p)\,W_{12}\bigr] = p\,V \tag{6.11}$$

である。左の式の核は $\int W(x-z)\varphi(x)\varphi(z)\overline{\varphi(y)}\,\overline{\varphi(z)}\,\mathrm{d}z = (W*|\varphi|^2)(x)\varphi(x)\overline{\varphi(y)}$ で、これは Vp の核に等しい。右の式も同様である。これを $\gamma^{(k+1)} = p^{\otimes(k+1)}$ の j 番目と $k+1$ 番目に使うと $\mathrm{Tr}_{k+1}\bigl[W_{j,k+1},\,p^{\otimes(k+1)}\bigr] = \bigl[V_j,\,p^{\otimes k}\bigr]$ となり、(6.9) の右辺は $\sum_j \bigl[h_j + V_j,\,p^{\otimes k}\bigr]$ になる。一方、(6.10) から $\mathrm{i}\partial_t p = [h+V,\,p]$ であり、積の微分で $\mathrm{i}\partial_t p^{\otimes k} = \sum_j \bigl[h_j + V_j,\,p^{\otimes k}\bigr]$。両辺が一致する。 □

この命題が平均場近似の「閉じ方」の正体である。多体の相関を捨てて「2 粒子の状態は 1 粒子の状態の積」と置くと、階層は第 1 段で閉じ、1 粒子の非線形方程式（Hartree 方程式）になる。ポテンシャル $V = W * |\varphi|^2$ は「他のすべての粒子が平均としてつくる場」である。

階層による証明の難所

命題 6.9 は「積状態は極限の階層を満たす」と言っているだけで、「N 体の解の極限が積状態になる」とは言っていない。後者を階層の方法で示すには、(1) $\gamma_N^{(k)}$ の部分列が何かに収束し、(2) その極限が Hartree 階層を満たし、(3) Hartree 階層の解が初期値から**一意**に決まる、の 3 段階が要る。(3) が難所で、有界な

W なら級数展開で示せる（Spohn）が、クーロン型や接触型の相互作用では Erdős–Schlein–Yau による長大な組合せ論的評価が必要になった。次節では、この難所を迂回する別の方法を述べる。

例題 6.4　BBGKY 第 1 式と閉包の確認 ★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

$N=2$ のボソン系 $H=h_1+h_2+W_{12}$（$\lambda=1$）を考える。

1. $\gamma^{(1)}$ の方程式が $\mathrm{i}\partial_t\gamma^{(1)}=\bigl[h,\,\gamma^{(1)}\bigr]+\mathrm{Tr}_2\bigl[W_{12},\,\gamma^{(2)}\bigr]$ になることを、$\gamma^{(2)}=|\psi\rangle\langle\psi|$ に注意して確かめよ。
2. $\psi=\varphi\otimes\varphi$ を仮に代入したとき、右辺が $\bigl[h+W*|\varphi|^2,\,\gamma^{(1)}\bigr]$ になることを示せ。
3. (2) の右辺が正しい $\gamma^{(1)}$ の時間微分と一致し続けないのはなぜか。$N=2$ と $N\to\infty$ で何が違うかを述べよ。

解答. **(1)** 命題 6.8 の証明で $N=2$、$\lambda_N=1$ とすれば、W_{1j} の項は $j=2$ の 1 つだけで、係数 $\lambda_N(N-1)=1$ である。$N=2$ では $\gamma^{(2)}$ は 2 体の状態そのもの $|\psi\rangle\langle\psi|$ であり、階層は 2 段で閉じている（第 2 段は Schrödinger 方程式）。
(2) $\gamma^{(2)}=p\otimes p$ とすれば恒等式 (6.11) から $\mathrm{Tr}_2\,[W_{12},\,p\otimes p]=Vp-pV=[V,\,p]$、$V=W*|\varphi|^2$。$\gamma^{(1)}=p$ なので右辺は $\bigl[h+V,\,\gamma^{(1)}\bigr]$ になる。
(3) 時刻 0 で積状態でも、W_{12} は 2 粒子をもつれさせるので、ψ_t は直ちに積状態でなくなる。そのずれ $\gamma^{(2)}-\gamma^{(1)}\otimes\gamma^{(1)}$ は $N=2$ では $\mathcal{O}(1)$ の大きさで育ち、Hartree 方程式からのずれも $\mathcal{O}(1)$ になる。$N\to\infty$ で $\lambda_N=1/(N-1)$ のときは、1 対あたりのもつれが $\mathcal{O}(1/N)$ に抑えられ、粒子 1 に関わる $N-1$ 対の寄与を合わせても、粒子 1 が凝縮から外れる確率は $\mathcal{O}(1/N)$ にとどまる。これを定量化するのが次節の定理である（BBGKY 第 1 式そのものは有限次元の数値微分で検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

6.5　量子平均場極限の定理：Pickl の数え上げ法

★★★ 最重要　有界な相互作用なら、Hartree 方程式が N →∞ で厳密になることを数ページで証明できる

6.5.1　主張

定理 6.10 (有界な相互作用での量子平均場極限 ★★★ 最重要)**.** $W:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$ は偶関数で有界（$\|W\|_\infty<\infty$）とし、

$$H_N=\sum_{j=1}^{N}(-\Delta_j)+\frac{1}{N-1}\sum_{i<j}W(x_i-x_j)$$

とする。$\varphi_0\in L^2(\mathbb{R}^3)$、$\|\varphi_0\|=1$ に対し、$\psi_N(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_Nt}\varphi_0^{\otimes N}$、$\varphi_t$ を *Hartree* 方程式 (6.10) の解とする。このとき

$$\alpha_N(t):=\langle\psi_N(t),\,q_1\psi_N(t)\rangle\le\frac{\mathrm{e}^{7\|W\|_\infty t}-1}{7(N-1)},\qquad \mathrm{Tr}\bigl|\gamma_N^{(1)}(t)-|\varphi_t\rangle\langle\varphi_t|\bigr|\le 2\alpha_N(t)+2\sqrt{\alpha_N(t)}.$$

ここで $p=|\varphi_t\rangle\langle\varphi_t|$、$q=1-p$ で、添字 *1* は第 *1* 粒子に作用することを表す。とくに固定した t で $\gamma_N^{(1)}(t)\to|\varphi_t\rangle\langle\varphi_t|$（トレースノルム）。

$\alpha_N(t)$ は「第 1 粒子が凝縮状態 φ_t から外れている確率」であり、ボソンの対称性から「凝縮から外れた粒子の割合の期待値」とも読める。この量に Grönwall 型の評価をかけるのが Pickl の方法の骨子で、階層の一意性という難所を通らずに済む。Hartree 方程式は、W が有界なら非線形項 $\varphi\mapsto(W*|\varphi|^2)\varphi$

が L^2 で局所リプシッツであり、$\|\varphi_t\| = 1$ が保存されるので、大域的に一意な解を持つ（第 2 章の Picard の論法がそのまま使える）。

6.5.2 α とトレースノルムの関係

補題 6.11（★★ 重要）. γ を正でトレース *1* の作用素、$p = |\varphi\rangle\langle\varphi|$、$q = 1 - p$、$\alpha = \mathrm{Tr}(q\gamma)$ とすると $\alpha \le \|\gamma - p\|_1 \le 2\alpha + 2\sqrt{\alpha}$。

証明. $\gamma - p = (p\gamma p - p) + p\gamma q + q\gamma p + q\gamma q$ と分ける。$p\gamma p = \langle\varphi, \gamma\varphi\rangle p = (1-\alpha)p$ なので第 1 項のトレースノルムは α。$q\gamma q$ は正なのでトレースノルムはトレース α に等しい。$p\gamma q = |\varphi\rangle\langle q\gamma\varphi|$ は階数 1 で、トレースノルムは $\|q\gamma\varphi\| \le \|q\gamma^{1/2}\|\,\|\gamma^{1/2}\varphi\| \le \sqrt{\mathrm{Tr}(q\gamma q)}\cdot 1 = \sqrt{\alpha}$（$\|q\gamma^{1/2}\|^2 = \|q\gamma q\| \le \mathrm{Tr}(q\gamma q)$ を使った）。$q\gamma p$ も同じ。合計で上界を得る。下界は $\alpha = \mathrm{Tr}(q(\gamma-p)) \le \|q\|\,\|\gamma - p\|_1$ による。 □

$\alpha_N = \langle\psi_N, q_1\psi_N\rangle = \mathrm{Tr}(q\gamma_N^{(1)})$ なので、補題から $\alpha_N \to 0$ と $\gamma_N^{(1)} \to p$（トレースノルム）は同値である。

例題 6.5　補題の上界の $\sqrt{\alpha}$ は落とせない　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

2 次元の 1 粒子空間で、正規直交な φ, χ をとり、$p = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ とする。$0 < \alpha < 1$ として次の 2 つの状態を考える。

$$\gamma_{\mathrm{mix}} = (1-\alpha)|\varphi\rangle\langle\varphi| + \alpha|\chi\rangle\langle\chi|, \qquad \gamma_{\mathrm{pure}} = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad \psi = \sqrt{1-\alpha}\,\varphi + \sqrt{\alpha}\,\chi.$$

(1) どちらも $\mathrm{Tr}(q\gamma) = \alpha$ であることを確かめよ。

(2) $\|\gamma_{\mathrm{mix}} - p\|_1 = 2\alpha$、$\|\gamma_{\mathrm{pure}} - p\|_1 = 2\sqrt{\alpha}$ を示せ。

(3) $\alpha = 0.01$ のとき 2 つの値と補題の上界 $2\alpha + 2\sqrt{\alpha}$ を比べ、定理 6.10 のトレースノルムの速さが $N^{-1/2}$ になる理由を述べよ。

解答. **(1)** $q = |\chi\rangle\langle\chi|$ である。$\mathrm{Tr}(q\gamma_{\mathrm{mix}}) = \alpha$ は直接読める。$\mathrm{Tr}(q\gamma_{\mathrm{pure}}) = |\langle\chi, \psi\rangle|^2 = \alpha$。
(2) 基底 (φ, χ) で行列に書く。$\gamma_{\mathrm{mix}} - p = \mathrm{diag}(-\alpha, \alpha)$ なので固有値の絶対値の和は 2α。$\gamma_{\mathrm{pure}} - p = \begin{pmatrix} -\alpha & \sqrt{\alpha(1-\alpha)} \\ \sqrt{\alpha(1-\alpha)} & \alpha \end{pmatrix}$ はトレースが 0 で、行列式が $-\alpha^2 - \alpha(1-\alpha) = -\alpha$ なので固有値は $\pm\sqrt{\alpha}$、トレースノルムは $2\sqrt{\alpha}$。
(3) $\alpha = 0.01$ で混合状態は 0.02、純粋状態は 0.2、補題の上界は 0.22 である。凝縮から外れた成分が凝縮と**干渉する**（非対角要素 $p\gamma q$ を持つ）と、トレースノルムは α でなく $\sqrt{\alpha}$ の大きさになる。補題はこの最悪の場合を含むので、$\alpha_N = \mathcal{O}(1/N)$ から言えるトレースノルムの速さは $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ にとどまる。実際の $\gamma_N^{(1)}$ では非対角要素も $1/N$ で小さいことが別の方法で示され、トレースノルムでも $1/N$ になる（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

6.5.3 証明

定理 *6.10* の証明（前半）. $\psi = \psi_N(t)$、$V = W * |\varphi_t|^2$、$\|W\| = \|W\|_\infty$ と略記する。$\|V\|_\infty \le \|W\|$ である。以下の計算は ψ と φ_t が十分滑らかとして行う（有界な W では H_N の定義域は $-\Delta$ のものと同じなので、滑らかな初期値で示してから近似で一般の L^2 の初期値へ広げられる）。
(i) α の時間微分。 $\mathrm{i}\partial_t\varphi_t = (h+V)\varphi_t$ から $\partial_t p = -\mathrm{i}\,[h+V, p]$、よって $\partial_t q_1 = \mathrm{i}\,[h_1 + V_1, q_1]$。また $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi, A\psi\rangle = \langle\psi, (\partial_t A + \mathrm{i}\,[H_N, A])\psi\rangle$ なので

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\,\langle\psi, [H_N - h_1 - V_1, q_1]\,\psi\rangle.$$

H_N のうち q_1 と交換しないのは h_1 と W_{1j}（$j \ge 2$）だけで、h_1 は引き算で消える。ボソンの対称性から W_{1j}

の寄与はすべて W_{12} と同じなので、$\frac{1}{N-1}\sum_{j\ge 2} W_{1j}$ は W_{12} に置き換えてよく、$A := W_{12} - V_1$ として

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\big(\langle\psi,\, Aq_1\psi\rangle - \langle\psi,\, q_1 A\psi\rangle\big) = -2\,\mathrm{Im}\langle\psi,\, Aq_1\psi\rangle.$$

左に $1 = p_1 + q_1$ を挿むと、$\langle\psi,\, q_1 A q_1\psi\rangle$ は実数（A は自己共役）なので虚部に寄与しない。さらに左右に $1 = p_2 + q_2$ を挿むと、$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = -2\,\mathrm{Im}(\mathrm{a}+\mathrm{b}+\mathrm{c}+\mathrm{d})$ で

$$\mathrm{a} = \langle\psi,\, p_1p_2Aq_1p_2\psi\rangle,\quad \mathrm{b} = \langle\psi,\, p_1p_2Aq_1q_2\psi\rangle,\quad \mathrm{c} = \langle\psi,\, p_1q_2Aq_1p_2\psi\rangle,\quad \mathrm{d} = \langle\psi,\, p_1q_2Aq_1q_2\psi\rangle.$$

(ii) Hartree の場が打ち消すもの。恒等式 (6.11) の作用素版 $p_2W_{12}p_2 = V_1p_2$ から $p_1p_2Aq_1p_2 = p_1(p_2W_{12}p_2 - V_1p_2)q_1 = 0$、すなわち $\mathrm{a} = 0$。これが平均場 $V = W * |\varphi|^2$ を選んだ理由そのものである。平均場は「粒子 2 が凝縮にいるときに粒子 1 が感じる力」を正確に差し引くので、凝縮どうしの相互作用は α を変えない。b と d の V_1 の部分は $p_2V_1q_2 = V_1p_2q_2 = 0$ で消え、c の V_1 の部分も $q_2V_1p_2 = 0$ で消える。$\mathrm{c} = \langle\psi,\, p_1q_2W_{12}q_1p_2\psi\rangle$ は、粒子 1 と 2 の入れ替えで作用素がその共役に移り、ψ が対称なので実数になる。よって

$$\Big|\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}\Big| \le 2|\mathrm{b}| + 2|\mathrm{d}|.$$

残る b と d を評価する。

定理 *6.10* の証明（後半）. **(iii) d の評価（凝縮から外れた粒子が関わる項）。**$\|q_2\psi\|^2 = \|q_1\psi\|^2 = \alpha$（対称性）、$\|q_1q_2\psi\| \le \|q_1\psi\|$ を使い

$$|\mathrm{d}| = |\langle p_1q_2\psi,\, (W_{12}-V_1)q_1q_2\psi\rangle| \le \|q_2\psi\|\cdot 2\|W\|\cdot\|q_1\psi\| = 2\|W\|\alpha.$$

(iv) b の評価（2 粒子が同時に凝縮から飛び出す項）。素朴には $|\mathrm{b}| \le \|W\|\|q_1q_2\psi\| \le \|W\|\sqrt{\alpha}$ で、これでは $\alpha' \lesssim \sqrt{\alpha}$ となって $\alpha(0) = 0$ から小ささが出ない。そこで、対称性を使って W_{12} を $N-1$ 本に広げ直す。

$$|\mathrm{b}| = \Big|\frac{1}{N-1}\sum_{j=2}^{N}\langle q_1q_j\psi,\, W_{1j}p_1p_j\psi\rangle\Big| = \frac{1}{N-1}\Big|\Big\langle q_1\psi,\, \sum_{j=2}^{N} q_jW_{1j}p_1p_j\psi\Big\rangle\Big| \le \frac{\sqrt{\alpha}}{N-1}\Big\|\sum_{j=2}^{N} q_jW_{1j}p_1p_j\psi\Big\|.$$

右辺のノルムの 2 乗を展開すると、$j = k$ の項は $N-1$ 個でそれぞれ $\|W\|^2$ 以下。$j \ne k$ の項では、q_k が粒子 $1, j$ の作用素と、q_j が粒子 $1, k$ の作用素と交換するので

$$\langle\psi,\, p_1p_jW_{1j}q_jq_kW_{1k}p_1p_k\psi\rangle = \langle q_k\psi,\, p_1p_jW_{1j}W_{1k}p_1p_k\, q_j\psi\rangle$$

と並べ替えられ、大きさは $\|W\|^2\|q_k\psi\|\|q_j\psi\| = \|W\|^2\alpha$ 以下である。こちらは $(N-1)(N-2)$ 個あるので

$$|\mathrm{b}| \le \frac{\sqrt{\alpha}}{N-1}\|W\|\sqrt{(N-1)+(N-1)^2\alpha} \le \|W\|\Big(\alpha + \sqrt{\tfrac{\alpha}{N-1}}\Big) \le \|W\|\Big(\tfrac{3}{2}\alpha + \tfrac{1}{2(N-1)}\Big).$$

最後に $\sqrt{ab} \le (a+b)/2$ を使った。ここで $1/N$ が出てくる仕組みが見える。2 粒子が同時に凝縮から飛び出す振幅は、1 対あたり $1/(N-1)$ と小さく、異なる対どうしの交差項は、どちらの側にも凝縮から外れた粒子を含むので α 程度に小さく、振幅の和の 2 乗は $(N-1)^2$ でなく $N-1$ 程度（と αN^2）にしかならない。**(v) Grönwall で閉じる。**(ii)〜(iv) から

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} \le 2\|W\|\Big(\tfrac{3}{2}\alpha + \tfrac{1}{2(N-1)}\Big) + 4\|W\|\alpha = \|W\|\Big(7\alpha + \frac{1}{N-1}\Big).$$

$\alpha(0) = 0$（初期値が積状態）なので、$(\mathrm{e}^{-7\|W\|t}\alpha)' \le \|W\|\mathrm{e}^{-7\|W\|t}/(N-1)$ を積分して $\alpha(t) \le (\mathrm{e}^{7\|W\|t} - 1)/(7(N-1))$。トレースノルムの評価は補題 6.11 による。 □

この定理が保証する収束の速さは、トレースノルムで $N^{-1/2}$（α で N^{-1}）である。実際にはトレースノルムでも $1/N$ の速さが成り立つことが、揺らぎを Bogoliubov 理論で追う別の方法で知られている。いずれにしても、評価の時間依存 $\mathrm{e}^{7\|W\|t}$ は Dobrushin の定理と同じく最悪の場合のもので、近似の保証は有限時間に限られる。

6.5.4 数値による確認

定理の証明は 1 粒子のヒルベルト空間が何であっても同じように通る。そこで 1 粒子空間を 2 次元（2 つのモード a, b）にとった模型

$$H_N = -J\sum_{j}\big(|a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a|\big)_j + \frac{U}{N-1}\sum_{i<j} W_{ij}, \qquad W_{ij} = \sum_{c=a,b}(|cc\rangle\langle cc|)_{ij}$$

（同じモードにいる対だけが U のエネルギーを持つ。$\|W\| = 1$）で、$J = U = 1$、$\varphi_0 = (\cos 0.3, \sin 0.3)$ として $\alpha_N(t)$ を厳密に計算した（Fock 基底で $N+1$ 次元の行列になる）。表 6.1 のとおり $N\alpha_N(2)$ はほぼ一定で、$\alpha_N \propto 1/N$ が確認できる。定理の上界 $(\mathrm{e}^{14}-1)/(7(N-1))$ は $N = 10$ で約 1.9×10^{4} であり、N 依存は正しいが時間依存は大幅な過大評価である（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

表 6.1　2 モード模型での凝縮からの外れ $\alpha_N(t=2)$。

N	10	40	80	160	320
$\alpha_N(2)$	1.14×10^{-2}	2.57×10^{-3}	1.26×10^{-3}	6.27×10^{-4}	3.12×10^{-4}
$N\alpha_N(2)$	0.114	0.103	0.101	0.100	0.100

6.5.5 特異な相互作用での難所

クーロン相互作用 $W(x) = 1/|x|$ では $\|W\|_\infty = \infty$ なので、上の証明のどこが壊れるかを見ておく。(iv) の b 項は生き残る。W_{1j} の右に p_j があり、$\|W_{12}p_2\|^2 = \sup_x \int |W(x-y)|^2|\varphi(y)|^2\mathrm{d}y$ は Hardy の不等式 $\int|u|^2/|x|^2 \le 4\int|\nabla u|^2$ によって $\varphi \in H^1$ なら有限になるからである。凝縮状態 p が特異性をならしてくれる。壊れるのは (iii) の d 項で、W_{12} が $q_1q_2\psi$、つまり凝縮から外れた二つの粒子に直接作用する。これを抑えるには外れた粒子の運動エネルギー $\|\nabla_1 q_1\psi\|$ が要るが、エネルギー保存からはこれが $\mathcal{O}(1)$ であることしか分からず、小さいことは出てこない。Knowles と Pickl はこの困難に対し、α の代わりに「外れた粒子の割合」を非線形に重み付けた量を数え、エネルギーの差も合わせて追跡することで、クーロン型を含む特異な場合の平均場極限を示した。必要な道具は、Hartree 方程式の解が H^1 に留まるという正則性（第 2 章の意味でのアプリオリ評価）と、多体のエネルギーと Hartree エネルギーの差が初期に小さいという仮定である。特異な相互作用では、有界の場合の短い証明が使えないこと自体が、物理的に「近接した二粒子の相関は平均場では表せない」ことの反映である。

6.6 定常版：基底状態エネルギーと量子 de Finetti 定理

★★ 重要　時間発展でなく基底状態でも、1 粒子あたりのエネルギーが Hartree 汎関数の最小値に収束する

6.6.1 正定値な相互作用での初等的な証明

外場 U_{ext}（無限遠で $+\infty$ に増える閉じ込めポテンシャル）の中のボソン系

$$H_N = \sum_{j=1}^{N} h_j + \frac{1}{N-1}\sum_{i<j} W(x_i - x_j), \qquad h = -\Delta + U_{\mathrm{ext}}$$

の基底エネルギーを E_N、Hartree 汎関数（例題 6.1.2）の最小値を $e_{\mathrm{H}} = \inf_{\|\varphi\|=1}\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\varphi]$ とする。

定理 6.12 (正定値な相互作用での基底エネルギー ★★ 重要)**.** W は連続・有界・偶関数で**正定値**（フーリエ変換 $\hat W \ge 0$）とし、$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}$ の最小値を与える φ_{H} が存在するとする。このとき

$$N e_{\mathrm{H}} - \frac{N\,W(0)}{2(N-1)} \le E_N \le N e_{\mathrm{H}}, \qquad \text{とくに} \quad \Big|\frac{E_N}{N} - e_{\mathrm{H}}\Big| \le \frac{W(0)}{2(N-1)}.$$

証明. **上界**は変分原理（第 3 章の min-max 原理の最も簡単な場合）による。試行関数 $\varphi_{\mathrm{H}}^{\otimes N}$ のエネルギーは例題 6.1.2 (3) によりちょうど $N\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\varphi_{\mathrm{H}}] = Ne_{\mathrm{H}}$ である。
下界は、相互作用を一体の作用素で下から抑えることで得る。$D(\mu,\nu) = \iint W(x-y)\,\mathrm{d}\mu(x)\,\mathrm{d}\nu(y)$ と書く。W が正定値なので、符号つきの測度 σ について $D(\sigma,\sigma) = \int \hat{W}|\hat{\sigma}|^2 \geq 0$ である。$\sigma = \sum_i \delta_{x_i} - \rho$（$\rho$ は任意の密度）に使って展開すると

$$\sum_{i,j} W(x_i - x_j) \geq 2\sum_i (W*\rho)(x_i) - D(\rho,\rho),$$

左辺の $i=j$ の項 $NW(0)$ を除いて 2 で割ると $\sum_{i<j} W(x_i-x_j) \geq \sum_i (W*\rho)(x_i) - \frac{1}{2}D(\rho,\rho) - \frac{N}{2}W(0)$ となる。$\rho = (N-1)|\varphi_{\mathrm{H}}|^2 =: (N-1)\rho_{\mathrm{H}}$ を代入し $N-1$ で割ると、作用素の不等式

$$H_N \geq \sum_{j=1}^{N} \bigl(h + W*\rho_{\mathrm{H}}\bigr)_j - \frac{N-1}{2}D(\rho_{\mathrm{H}},\rho_{\mathrm{H}}) - \frac{N\,W(0)}{2(N-1)}$$

を得る。右辺の一体部分の最小値は、平均場の作用素 $h_{\mathrm{MF}} = h + W*\rho_{\mathrm{H}}$ の最低固有値 μ_1 の N 倍である。ここで $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}[|\varphi|] \leq \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[\varphi]$（$|\nabla|\varphi|| \leq |\nabla\varphi|$ による）なので最小化元は $\varphi_{\mathrm{H}} \geq 0$ にとれる。最小化の条件（Euler–Lagrange 方程式）は $h_{\mathrm{MF}}\varphi_{\mathrm{H}} = \mu\varphi_{\mathrm{H}}$ であり、Schrödinger 作用素の固有関数のうち符号を変えないものは基底状態に限られる（基底状態は正で縮退しないので、別の固有関数は基底状態と直交し、符号を変えざるをえない）。したがって $\mu_1 = \mu = \langle\varphi_{\mathrm{H}}, h_{\mathrm{MF}}\varphi_{\mathrm{H}}\rangle = e_{\mathrm{H}} + \frac{1}{2}D(\rho_{\mathrm{H}},\rho_{\mathrm{H}})$。代入して

$$E_N \geq Ne_{\mathrm{H}} + \frac{N}{2}D(\rho_{\mathrm{H}},\rho_{\mathrm{H}}) - \frac{N-1}{2}D(\rho_{\mathrm{H}},\rho_{\mathrm{H}}) - \frac{NW(0)}{2(N-1)} \geq Ne_{\mathrm{H}} - \frac{NW(0)}{2(N-1)}.$$

□

この証明では、上界は第 5 章と同じ変分原理（A 型の論理）から、下界は相互作用の正定値性から出ている。A 型の近似が単独では上界しか与えないのに対し、平均場極限では下界が別の議論で得られ、上界と下界がそろうことで「厳密になる」が言える。前節の 2 モード模型（W は同じモードの対にだけ働くので正定値）で $E_N/N - e_{\mathrm{H}}$ を計算すると、$N = 10, 40, 160, 640$ で -2.9×10^{-3}、-6.5×10^{-4}、-1.6×10^{-4}、-4.0×10^{-5} と $1/N$ で 0 に近づき、定理の範囲 $[-U/(2(N-1)), 0]$ に収まっている（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

例題 6.6　調和結合ボソン：厳密解と平均場 ★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1 次元の N 個のボソン $H_N = \sum_j \bigl(-\frac{1}{2}\partial_{x_j}^2 + \frac{1}{2}x_j^2\bigr) + \frac{g}{N}\sum_{i<j}\frac{1}{2}(x_i-x_j)^2$（$g>0$）を考える。

1. 正規モードに分解して、基底エネルギーの厳密値 E_N を求めよ。
2. 積状態 $\varphi^{\otimes N}$ に限ったときの最小エネルギー E_N^{H} を求めよ。
3. E_N/N と E_N^{H}/N が同じ極限を持ち、$E_N^{\mathrm{H}} - E_N$ が $N\to\infty$ で正の定数に近づくことを示せ。これは「1 粒子あたりのエネルギーの相対誤差が $\mathcal{O}(1/N)$」と「全エネルギーの誤差は $\mathcal{O}(1)$ で消えない」のどちらを意味するか。

解答. **(1)** $\sum_{i<j}(x_i-x_j)^2 = N\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2$ を使うと、ポテンシャルは $\frac{1}{2}\sum_i x_i^2(1+g) - \frac{g}{2N}(\sum_i x_i)^2 = \frac{1}{2}x^{\mathsf{T}}Kx$、$K = (1+g)I - \frac{g}{N}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathsf{T}}$ となる。K の固有ベクトルは重心方向 $\mathbf{1}/\sqrt{N}$（固有値 $1+g-g=1$）と、それに直交する $N-1$ 方向（固有値 $1+g$）である。質量 1 の調和振動子の零点エネルギーは $\omega/2$ なので

$$E_N = \frac{1}{2} + \frac{N-1}{2}\sqrt{1+g}.$$

重心は相互作用を感じず、相対運動だけが固くなる。
(2) 対称性から $\langle\varphi, x\varphi\rangle = 0$ の φ を考えればよい（ずらしても運動・相互作用のエネルギーは

下がらない）。対ごとの期待値は $\frac{1}{2}\langle (x_i-x_j)^2\rangle = \langle x^2\rangle$、対は $N(N-1)/2$ 個なので

$$\langle \varphi^{\otimes N},\, H_N \varphi^{\otimes N}\rangle = N\Big[\langle -\tfrac{1}{2}\partial^2\rangle + \tfrac{1}{2}\Big(1+g\tfrac{N-1}{N}\Big)\langle x^2\rangle\Big].$$

括弧の中は角振動数 $\Omega = \sqrt{1+g(N-1)/N}$ の調和振動子のエネルギーで、最小値は $\Omega/2$。よって $E_N^{\mathrm{H}} = \frac{N}{2}\sqrt{1+g(N-1)/N}$。
(3) $\sqrt{1+g-g/N} = \sqrt{1+g} - \frac{g}{2N\sqrt{1+g}} + \mathcal{O}(N^{-2})$ から

$$E_N^{\mathrm{H}} = \frac{N}{2}\sqrt{1+g} - \frac{g}{4\sqrt{1+g}} + \mathcal{O}(1/N),$$

$$E_N^{\mathrm{H}} - E_N \to \frac{\sqrt{1+g}}{2} - \frac{1}{2} - \frac{g}{4\sqrt{1+g}} = \frac{(\sqrt{1+g}-1)^2}{4\sqrt{1+g}} > 0.$$

両者とも $E/N \to \sqrt{1+g}/2$ で、1 粒子あたりの相対誤差は $\mathcal{O}(1/N)$ である。一方、全エネルギーの差は $\mathcal{O}(1)$ で消えない（$g=3$ で $1/8$）。差が正なのは変分原理（上界）と整合する。全エネルギーの $\mathcal{O}(1)$ の差は、平均場が落とした相関（Bogoliubov の零点揺らぎ）のエネルギーである。平均場極限の保証は「1 粒子あたり」の一致までにとどまる。なお厳密な基底状態の 1 体密度行列を計算すると、凝縮から外れた割合 $1-\lambda_0$（λ_0 は $\gamma^{(1)}$ の最大固有値）は $g=3$ で $N=10,100,1000$ に対し 1.10×10^{-2}、1.23×10^{-3}、1.25×10^{-4} と $1/N$ で減る。一方、波動関数そのものは積状態にならない（重心と相対運動の振動数が違う）。「波動関数は近づかないが、1 体密度行列とエネルギー密度は近づく」という平均場極限の典型が、厳密に解ける形で現れている（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

この例の $W(x) = \frac{g}{2}x^2$ は有界でも正定値でもないので、定理 6.12 の仮定の外にある。仮定は証明の都合であって、平均場極限そのものはもっと広く成り立つ。一般の場合を扱う道具が次の de Finetti 定理である。

6.2.2 量子 de Finetti 定理

古典確率論には **de Finetti の定理**（Hewitt–Savage による一般化）がある。無限個の確率変数の列で、どの有限個の番号を入れ替えても同時分布が変わらないもの（交換可能な列）は、独立同分布の列の**重ね合わせ**（確率混合）に限る、という主張である。量子版は次のとおりである。

定理 6.13 （量子 de Finetti（Størmer, Hudson–Moody）★★ 重要）**.** *1 粒子のヒルベルト空間を $\mathcal{H}$ とする。各 k について $\mathcal{H}^{\otimes k}$ の対称部分上の密度行列 $\gamma^{(k)}$ が与えられ、$\mathrm{Tr}_{k+1}\,\gamma^{(k+1)} = \gamma^{(k)}$（両立性）を満たすとする。このとき $\mathcal{H}$ の単位球面上の確率測度 μ がただ一つ存在し、すべての k で*

$$\gamma^{(k)} = \int |u\rangle\langle u|^{\otimes k}\,\mathrm{d}\mu(u).$$

意味は次のとおりである。$N\to\infty$ の極限で得られる対称な状態の縮約密度行列は、どれも**積状態の重ね合わせ**になる。これを基底状態の問題に使うと、1 粒子あたりのエネルギーは H_N の係数を $1/(N-1)$ にしたことで

$$\frac{E_N}{N} = \mathrm{Tr}\big(h\gamma_N^{(1)}\big) + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big(W_{12}\gamma_N^{(2)}\big)$$

と、$\gamma^{(1)},\gamma^{(2)}$ だけで厳密に書ける。極限で $\gamma^{(2)} = \int |u\rangle\langle u|^{\otimes 2}\mathrm{d}\mu$ となれば右辺は $\int \mathcal{E}_{\mathrm{H}}[u]\,\mathrm{d}\mu(u) \ge e_{\mathrm{H}}$ となり、下界が得られる。上界は積の試行関数で得られるので $E_N/N \to e_{\mathrm{H}}$ が従う。定理 6.12 のような相互作用の符号の仮定は要らない。

難所は、極限をとる段階にある。$N\to\infty$ で粒子の一部が無限遠へ逃げると（閉じ込めのない系ではありうる）、$\gamma_N^{(k)}$ の極限はトレースが 1 より小さくなり、定理 6.13 の両立性の仮定が崩れる。Lewin–Nam–Rougerie（2014）は、質量の損失を許す弱い形の de Finetti 定理を用意し、相互作用に

一般的な条件を課すだけで $E_N/N \to e_{\mathrm{H}}$ を示した。de Finetti 定理は「平均場では状態が積になる」という直観の正確な形であり、同時に「積状態の**重ね合わせ**までしか言えない」という限界も示している（μ が一点に集中するのは Hartree 汎関数の最小化元が一意なときである）。

6.7 フェルミオンと原子：Thomas–Fermi 理論

★★★ 最重要 「重い原子ほど平均場が良い」の正確な意味と、極限で正しい理論が有限 Z の化学を落とす例

6.7.1 TF 汎関数の導出

原子番号 Z の中性原子（電子 $N = Z$ 個）を原子単位で考える。電子はフェルミオンなので、ボソンのように全員が同じ 1 粒子状態に入ることはできない。Thomas と Fermi の発想は、電子密度 $\rho(x)$ がゆっくり変わるなら、各点の近傍の電子を「その点の密度を持つ一様な自由電子気体」と見なせる、というものである（**局所密度近似**、または半古典近似）。

一様な自由電子気体では、スピン 2 重度を含めて、Fermi 波数 k_F までの運動量の状態がすべて埋まる。運動量空間の体積 $\frac{4}{3}\pi k_F^3$ を状態 1 個あたりの体積 $(2\pi)^3$ で割り、スピンの 2 を掛けると密度は

$$\rho = 2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2},$$

運動エネルギー密度は、運動量の大きさの 2 乗の平均 $\frac{3}{5}k_F^2$ を使って

$$\tau = \rho \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{5}k_F^2 = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3} =: c_{\mathrm{TF}}\,\rho^{5/3}, \qquad c_{\mathrm{TF}} \approx 2.871$$

となる。これを各点で使い、原子核との引力と電子間の古典的な Coulomb 反発（Hartree 項）を加えたものが **Thomas–Fermi 汎関数**

$$\mathcal{E}^{\mathrm{TF}}[\rho] = c_{\mathrm{TF}} \int \rho^{5/3}\mathrm{d}x - Z\int \frac{\rho(x)}{|x|}\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|}\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \tag{6.12}$$

である。これを $\int\rho = Z$、$\rho \ge 0$ の下で最小化した値を $E^{\mathrm{TF}}(Z)$ とする。波動関数（$3Z$ 変数）の問題が、密度（3 変数）の問題に置き換わっている。交換エネルギー・相関エネルギー・密度の勾配による運動エネルギーの補正は、すべて落とされている。

TF 方程式と数値

最小化の Euler–Lagrange 方程式は $\frac{1}{2}(3\pi^2\rho)^{2/3} = \big(\phi_{\mathrm{TF}}(x)\big)_+$、$\phi_{\mathrm{TF}} = Z/|x| - \rho * |x|^{-1}$（中性原子では化学ポテンシャルが 0）で、左辺は局所的な Fermi エネルギー $k_F^2/2$ である。$\phi_{\mathrm{TF}}(r) = \frac{Z}{r}\chi(r/b)$、$b = \frac{1}{2}(3\pi/4)^{2/3}Z^{-1/3} \approx 0.8853\,Z^{-1/3}$ とおくと、Poisson 方程式から普遍的な **TF 方程式** $\chi'' = \chi^{3/2}/\sqrt{x}$、$\chi(0)=1$、$\chi(\infty)=0$ が得られる。これを境界値問題として数値で解くと $\chi'(0) = -1.588071$ で、エネルギーは $E^{\mathrm{TF}}(Z) = \frac{3}{7}\chi'(0)Z^2/b = -0.7687\,Z^{7/3}$ になる。得られた密度を (6.12) に代入して直接評価しても -0.7684（離散化の誤差内で一致）、運動エネルギーは $-E$（ビリアル定理）、電子間反発は核引力の $-1/7$ 倍になる（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

例題 6.7　TF エネルギーのスケーリング ★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1. 密度を $\rho(x) = Z^2\rho_1(Z^{1/3}x)$ と書くと、$\int\rho = Z\int\rho_1$ で、(6.12) の 3 つの項がすべて $Z^{7/3}$ 倍になることを示せ（核電荷は Z のまま）。
2. (1) から $E^{\mathrm{TF}}(Z) = Z^{7/3}E^{\mathrm{TF}}(1)$ を導け。また原子の大きさが $Z^{-1/3}$ に比例して**縮む**ことを述べよ。
3. 量子力学のハミルトニアンで長さを $x = Z^{-1/3}y$ と変えると、$H/Z^{4/3}$ が「$\hbar_{\mathrm{eff}} = Z^{-1/3}$ の

一体部分」と「係数 $1/Z$ の電子間反発」の和になることを示せ。

解答. **(1)** 3 次元で $y = Z^{1/3}x$ と変数変換すると $\mathrm{d}x = Z^{-1}\mathrm{d}y$、$|x| = Z^{-1/3}|y|$。

- 電子数：$\int Z^2\rho_1(y)Z^{-1}\mathrm{d}y = Z\int\rho_1$。
- 運動エネルギー：$\int (Z^2\rho_1)^{5/3}Z^{-1}\mathrm{d}y = Z^{10/3-1}\int\rho_1^{5/3} = Z^{7/3}\int\rho_1^{5/3}$。
- 核引力：$Z\int Z^2\rho_1\cdot Z^{1/3}|y|^{-1}Z^{-1}\mathrm{d}y = Z^{1+2+1/3-1}\int\rho_1/|y| = Z^{7/3}\int\rho_1/|y|$。
- 電子間反発：$Z^4\cdot Z^{1/3}\cdot Z^{-2} = Z^{7/3}$ 倍。

(2) (1) より $\mathcal{E}^{\mathrm{TF}}_Z[\rho] = Z^{7/3}\mathcal{E}^{\mathrm{TF}}_1[\rho_1]$ で、制約 $\int\rho = Z$ は $\int\rho_1 = 1$ に対応する。$\rho \leftrightarrow \rho_1$ は 1 対 1 なので、最小値どうしも $E^{\mathrm{TF}}(Z) = Z^{7/3}E^{\mathrm{TF}}(1) = -0.7687\,Z^{7/3}$。最小化する密度は ρ_1 を $Z^{-1/3}$ 倍に縮めたものなので、電子の大部分は核から $Z^{-1/3}$ 程度の距離にいる。重い原子ほど小さく密になる。
(3) $x = Z^{-1/3}y$ で $-\frac{1}{2}\Delta_x = -\frac{1}{2}Z^{2/3}\Delta_y$、$Z/|x| = Z^{4/3}/|y|$、$1/|x_i - x_j| = Z^{1/3}/|y_i - y_j|$ なので

$$\frac{H}{Z^{4/3}} = \sum_{i=1}^{Z}\Big(-\frac{\hbar_{\mathrm{eff}}^2}{2}\Delta_{y_i} - \frac{1}{|y_i|}\Big) + \frac{1}{Z}\sum_{i<j}\frac{1}{|y_i - y_j|}, \qquad \hbar_{\mathrm{eff}} = Z^{-1/3}.$$

電子間反発に平均場スケーリングの係数 $1/N$（$N = Z$）が自然に現れ、同時に Planck 定数が実効的に $Z^{-1/3}$ へ小さくなる。エネルギーの大きさは $Z^{4/3}\times$(粒子数 Z) $= Z^{7/3}$ で、(2) と合う（スケーリングの指数は検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

6.7.2 Lieb–Simon の定理と高次の補正

定理 6.14 (Lieb–Simon（1973）★★★ 最重要)**.** $E^{\mathrm{Q}}(Z)$ を原子番号 Z の中性原子の（非相対論的な）*Schrödinger* 方程式の基底エネルギーとすると

$$\lim_{Z\to\infty}\frac{E^{\mathrm{Q}}(Z)}{E^{\mathrm{TF}}(Z)} = 1.$$

さらに密度もこのスケールで収束し、$Z^{-2}\rho^{\mathrm{Q}}_Z(Z^{-1/3}y) \to \rho^{\mathrm{TF}}_1(y)$（弱い意味で）となる。分子（核の配置を $Z^{-1/3}$ でスケールしたもの）についても同様である。

証明の骨格は、ボソンの定理 6.12 と同じく上界と下界を別々に示すことにある。上界は、TF 密度を持つ Slater 行列式（局所的に平面波を詰めたもの）を試行関数にして変分原理で得る。下界には二つの道具が要る。一つは電子間反発を一体の項で下から抑える不等式（正定値性の議論のクーロン版で、交換の誤差 $\mathcal{O}(Z^{5/3})$ を許す）、もう一つは一体の作用素 $-\frac{1}{2}\Delta - \phi$ の負の固有値の和を、位相空間の体積 $\iint(\frac{p^2}{2} - \phi)_-\frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p}{(2\pi)^3}$ で評価する半古典の不等式（Lieb–Thirring 型の評価）である。難所は後者で、核近傍で $\phi \sim Z/|x|$ が特異なところでも半古典の数え上げが主要項を正しく与えることを示す部分にある。

主要項 $Z^{7/3}$ の後には、次のような展開が続くことが分かっている。

$$E^{\mathrm{Q}}(Z) = -0.7687\,Z^{7/3} + \frac{1}{2}Z^2 - 0.2699\,Z^{5/3} + o(Z^{5/3}). \tag{6.13}$$

第 2 項は **Scott 補正**である。核から Z^{-1} 程度の距離にいる内殻の電子は、エネルギー $\sim Z^2$ で強く束縛され、そこでは局所的な de Broglie 波長が密度の変化の長さと同程度になって半古典近似が成り立たない。内殻の電子は事実上、他の電子を感じない水素様のエネルギー準位にあり、その離散性が Z^2 の補正を生む（例題 6.7.2 で、電子間反発を無視した模型について正確に導く）。Scott の予想は

Siedentop–Weikard と Hughes によって厳密に証明された。第 3 項は **Schwinger 項**で、Dirac の交換エネルギー $-c_{\mathrm{D}}\int \rho_{\mathrm{TF}}^{4/3}$（$c_{\mathrm{D}} = \frac{3}{4}(3/\pi)^{1/3}$。TF 密度で評価すると $-0.2208\,Z^{5/3}$）と、運動エネルギーの半古典展開の次の項（交換の 2/9 倍）の和として $\frac{11}{9}\times 0.2208 = 0.2699$ になる。これは Fefferman と Seco によって厳密化された。

表 6.2 と図 6.2 は、展開 (6.13) を軽い原子の非相対論的な厳密エネルギーの文献値と比べたものである。TF 単独ではネオンでも 28% の誤差があるが、Scott 補正と Schwinger 項を加えると誤差は 1% 未満になる。展開は $Z^{-1/3}$ のべきの展開なので、$Z = 10$ でも展開パラメータは 0.46 と大きく、それでもこの精度が得られている（数値は検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

表 6.2　原子の基底エネルギー（Hartree 単位）。文献値は非相対論的な厳密値。

	TF $-0.7687Z^{7/3}$	＋ Scott $\frac{1}{2}Z^2$	＋ Schwinger $-0.2699Z^{5/3}$	文献値
H（$Z=1$）	-0.769	-0.269	-0.539	-0.5
He（$Z=2$）	-3.874	-1.874	-2.731	-2.9037
Ne（$Z=10$）	-165.62	-115.62	-128.15	-128.94

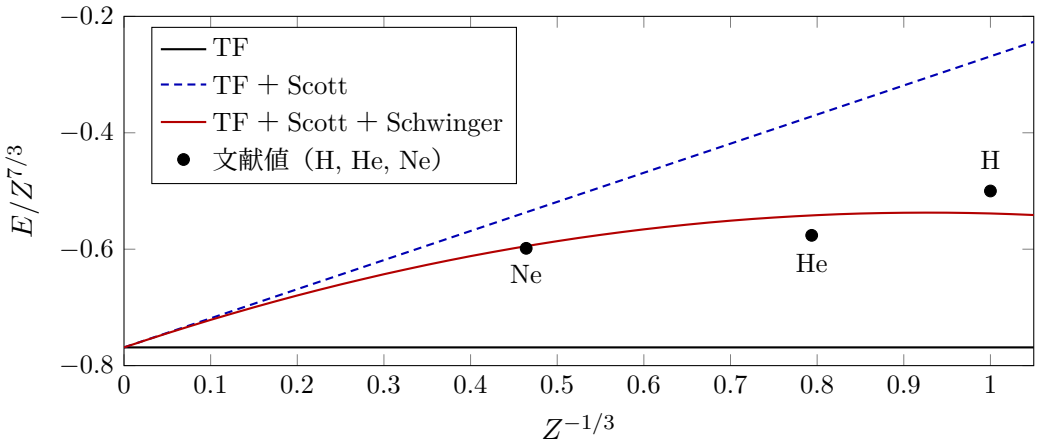


図 6.2　原子の基底エネルギーを $Z^{7/3}$ で割り、$Z^{-1/3}$ に対して描いたもの。$Z\to\infty$（左端）で TF の値 -0.7687 に近づき、Scott 補正が傾き、Schwinger 項が曲がりを与える。

例題 6.8　電子間反発のない原子での Scott 補正 ★★ 重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

電子間反発を無視した「Bohr 原子」を考える。各電子は核電荷 Z の水素様準位 $-Z^2/(2n^2)$ に入り、主量子数 n の殻にはスピンを含めて $2n^2$ 個入る。

1. 第 L 殻までちょうど満たすとき $Z = \sum_{n=1}^{L} 2n^2$ と全エネルギー $E = -Z^2 L$ を示せ。
2. $Z = \frac{2}{3}(L+\frac{1}{2})^3 - \frac{1}{6}(L+\frac{1}{2})$ を確かめ、$L+\frac{1}{2} = (3Z/2)^{1/3} + \mathcal{O}(Z^{-1/3})$ を導け。
3. $E = -(3/2)^{1/3}Z^{7/3} + \frac{1}{2}Z^2 + \mathcal{O}(Z^{5/3})$ を示し、第 1 項と第 2 項の由来を説明せよ。

解答. **(1)** n 殻の $2n^2$ 個の電子はそれぞれ $-Z^2/(2n^2)$ を持つので、殻ごとのエネルギーは n によらず $-Z^2$。L 殻で $-Z^2L$。電子数は $\sum_{n=1}^{L} 2n^2 = \frac{1}{3}L(L+1)(2L+1)$。
(2) $\frac{2}{3}(L+\frac{1}{2})^3 = \frac{1}{3}(2L^3+3L^2+\frac{3}{2}L+\frac{1}{4})$ と $\frac{1}{3}L(L+1)(2L+1) = \frac{1}{3}(2L^3+3L^2+L)$ の差は $-\frac{1}{3}(\frac{1}{2}L+\frac{1}{4}) = -\frac{1}{6}(L+\frac{1}{2})$ なので恒等式が成り立つ。$s = L+\frac{1}{2}$ とおくと $s^3 = \frac{3}{2}Z + \frac{1}{4}s$、$s\sim(3Z/2)^{1/3}$ だから $s = (3Z/2)^{1/3}\bigl(1+\mathcal{O}(Z^{-2/3})\bigr) = (3Z/2)^{1/3} + \mathcal{O}(Z^{-1/3})$。
(3) $E = -Z^2L = -Z^2(s-\frac{1}{2}) = -Z^2(3Z/2)^{1/3} + \frac{1}{2}Z^2 + \mathcal{O}(Z^{2-1/3})$。第 1 項は半古典（TF）の

値で、実際に電子間反発を落とした TF 汎関数 $c_{\mathrm{TF}}\int\rho^{5/3}-Z\int\rho/|x|$ を $\int\rho=Z$ で最小化するとちょうど $-(3/2)^{1/3}Z^{7/3}$ になる（数値で確認 `scripts/verify_ch06.py`）。第 2 項 $+\frac{1}{2}Z^2$ は、殻の数 L を連続変数 s で数えたときの「$\frac{1}{2}$ のずれ」から出ている。半古典の数え上げは準位を連続とみなすが、実際の準位は離散で、最も深い準位（$n=1$、エネルギー $-Z^2/2$）の付近でそのずれが最大になる。これが Scott 補正の正体で、相互作用のある原子でも同じ $\frac{1}{2}Z^2$ になる（内殻の電子は事実上、他の電子を感じないため）。

6.7.3 「重い原子ほど平均場が良い」の正確な意味と、Teller の定理

Lieb–Simon の定理は、**エネルギーの比**が 1 に近づくことを主張する。誤差は (6.13) のとおり絶対値では Z^2 で増え続ける。したがって「重い原子ほど TF が良い」は相対誤差の意味でのみ正しい。

化学では原子どうしの結合エネルギーが問題になり、これは数 eV、つまり $\mathcal{O}(1)$（Hartree 単位で 0.1 程度）の量である。TF の誤差はこれより何桁も大きく、展開 (6.13) の何項目までとっても化学結合の大きさには届かない。実際、TF 理論には **Teller の定理**がある。TF 汎関数で分子のエネルギーを計算すると、どの核配置でも、ばらばらの原子のエネルギーの和より**高く**なる。つまり TF 理論では分子は結合しない（Teller の指摘を Lieb と Simon が厳密に証明した）。$Z\to\infty$ の極限で正しい理論が、有限の Z の化学を完全に落とす例である。B 型の近似の保証は極限で消える誤差の大きさまでで、その誤差より小さいエネルギー差で決まる現象について何も言わない。第 9 章で扱う密度汎関数理論（Kohn–Sham 法）は、TF の運動エネルギーの局所近似を軌道の運動エネルギーで置き換え、交換相関だけを汎関数にすることで、この限界を越えようとする。ただしその交換相関汎関数は、もはや極限定理による保証を持たない（C 型）。

6.8 半古典極限との関係

★★ 重要　平均場極限は「大きい N」と「小さい ħ」が組になって現れることが多い

例題 6.7.1 (3) で見たとおり、原子では長さを TF のスケールに測り直すと、$N=Z$ 個の粒子が係数 $1/N$ の相互作用を持ち、同時に $\hbar_{\mathrm{eff}}=N^{-1/3}$ になる。これは偶然ではない。N 個のフェルミオンは Pauli の原理によって位相空間の体積 $(2\pi\hbar)^3$ ごとに（スピンを除いて）1 個ずつしか入れないので、位相空間の大きさが $\mathcal{O}(1)$ の領域に N 個を詰めるには $\hbar^3\sim 1/N$、つまり $\hbar\sim N^{-1/3}$ でなければならない。フェルミオンの平均場極限は、自動的に半古典極限を伴う。

二つの極限が組になると、得られる有効方程式も古典に近づく。ボソンの平均場極限は Hartree 方程式（量子の一体方程式）だったが、フェルミオンでは $\hbar=N^{-1/3}$ の組で Hartree–Fock 方程式が得られ（Benedikter–Porta–Schlein らの結果）、さらに $\hbar\to 0$ で第 6.2 節の Vlasov 方程式に移る。TF 理論はその定常版で、Vlasov 方程式の定常解のうち「位相空間で Fermi 面まで一様に詰まった」分布 $f(x,p)=\mathbf{1}\{p^2/2<\phi_{\mathrm{TF}}(x)\}$ の密度が TF 密度になっている。こうして本章の三つの話題（古典の Vlasov、ボソンの Hartree、フェルミオンの TF）は、$1/N$ と $\hbar$ の二つの小さいパラメータの平面上の異なる点として一つにつながる。

二つの小さいパラメータ

- $1/N\to 0$（$\hbar$ 固定）：ボソンの平均場極限。多体 Schrödinger → Hartree 方程式。
- $1/N\to 0$ と $\hbar=N^{-1/3}\to 0$ の組：フェルミオンの平均場極限。多体 Schrödinger → Hartree–Fock → Vlasov ／ Thomas–Fermi。
- 古典粒子系の $1/N\to 0$：Newton 方程式 → Vlasov 方程式（Dobrushin）。

半古典の補正（$\hbar$ のべき）は Scott・Schwinger 項として原子のエネルギーに現れ、平均場からのずれ（$1/N$ のべき）は Bogoliubov の揺らぎとして現れる。

例題 6.9　位相空間の数え上げと $\hbar \sim N^{-1/3}$ ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

3 次元の調和ポテンシャル $\frac{1}{2}x^2$ の中の、相互作用のないフェルミオン（スピン 2 重度あり、質量 1）を考える。

(1) 位相空間の分布 $f(x,p) = \mathbf{1}\{p^2/2 < \phi(x)\}$ の密度が、スピンを含めて $\rho(x) = \big(2\phi(x)\big)^{3/2}/(3\pi^2\hbar^3)$ になることを示せ（$\hbar = 1$ で TF 方程式の左辺と同じ関係）。

(2) Fermi エネルギーを μ とし、$\phi(x) = \mu - \frac{1}{2}x^2$ として、半古典の粒子数 $N_{\mathrm{sc}} = \mu^3/(3\hbar^3)$ を導け。

(3) 量子力学の準位は $\hbar(n + \frac{3}{2})$、縮退度は $(n+1)(n+2)/2$ である。$n = 0, \dots, K-1$ の殻を満たしたときの粒子数 $N = K(K+1)(K+2)/3$ を示し、$\mu = \hbar(K+1)$ とおくと $N = N_{\mathrm{sc}} - \mu/(3\hbar)$ となることを確かめよ。$\mu = 1$ に固定したときの $\hbar$ の N 依存を述べよ。

解答. **(1)** 点 x で運動量の大きさが $p_F = \sqrt{2\phi(x)}$ 以下の状態がすべて埋まる。位相空間の体積 $(2\pi\hbar)^3$ に 1 つの状態があり、スピンで 2 倍なので

$$\rho(x) = 2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} = \frac{\big(2\phi(x)\big)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}.$$

$\hbar = 1$ では $\frac{1}{2}(3\pi^2\rho)^{2/3} = \phi$ となり、TF 方程式の「局所 Fermi エネルギー＝ポテンシャル」と一致する。
(2) 埋まる領域は 6 次元の球 $\{p^2/2 + x^2/2 < \mu\}$ で、半径は $\sqrt{2\mu}$。6 次元の単位球の体積 $\pi^3/6$ を使うと体積は $\frac{\pi^3}{6}(2\mu)^3 = \frac{4}{3}\pi^3\mu^3$。よって $N_{\mathrm{sc}} = 2 \cdot \frac{4}{3}\pi^3\mu^3/(2\pi\hbar)^3 = \mu^3/(3\hbar^3)$。
(3) $\sum_{n=0}^{K-1} 2 \cdot \frac{(n+1)(n+2)}{2} = \sum_{m=1}^{K} m(m+1) = \frac{K(K+1)(K+2)}{3}$。$\mu = \hbar(K+1)$ なら $\mu/\hbar = K+1$ で、$\frac{(K+1)^3 - (K+1)}{3} = \frac{(K+1)K(K+2)}{3} = N$ が成り立つ。主要項は位相空間の体積の数え上げ N_{sc} で、離散性の補正は相対的に $\mathcal{O}(N^{-2/3})$ である（例題 6.7.2 の殻の数え上げと同じ構造）。$\mu = 1$ に固定すると $N \approx 1/(3\hbar^3)$、つまり $\hbar \approx (3N)^{-1/3}$。エネルギーの尺度を $\mathcal{O}(1)$ に保ったまま粒子を増やすと、Pauli の原理によって $\hbar$ が $N^{-1/3}$ で小さくならざるを得ない。たとえば $K = 13$ では $N = 910$、$\hbar = 1/14 \approx 0.071$ で、$(3N)^{-1/3} \approx 0.072$ に近い（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

6.9　この章のまとめ

★★★ 最重要　平均場が「どのスケーリングで、どの意味で」厳密になるかの一覧

表 6.3　平均場極限の一覧。いずれも「固定した少数の粒子」または「1 粒子あたり」の量についての主張である。

系	スケーリング	収束の意味	速さ・条件
古典粒子 → Vlasov	力 $\times\frac{1}{N}$	経験測度の W_1 距離（弱収束）	初期誤差 $\times \mathrm{e}^{(1+2L)t}$、$\nabla W$ リプシッツ
カオスの伝播	同上	k 粒子周辺分布 $\to f_t^{\otimes k}$	$k\,N^{-1/2}\mathrm{e}^{Ct}$
ボソン → Hartree（時間発展）	$\frac{1}{N-1}\sum W$	$\gamma^{(1)}$ のトレースノルム	$\alpha \le \mathcal{O}(\mathrm{e}^{7\|W\|t}/N)$、$W$ 有界（特異な場合は別の方法）
ボソンの基底状態	同上	$E_N/N \to e_{\mathrm{H}}$	$\mathcal{O}(1/N)$（W 正定値）、一般は de Finetti
原子 → TF	$N = Z$、$\hbar_{\mathrm{eff}} = Z^{-1/3}$	$E^{\mathrm{Q}}/E^{\mathrm{TF}} \to 1$、密度の弱収束	誤差 $\frac{1}{2}Z^2$（Scott）、$Z^{5/3}$（Schwinger）

この章の要点

- 平均場近似には二つの顔がある。第 5 章の変分の顔（A 型）が与えるのは上界だけだが、極限の顔（B 型）では、相互作用を $1/N$ 倍するスケーリングの下で多体の解が一体方程式の解に**収束する**ことが定理になる。
- 古典系では、粒子系の経験測度が Vlasov 方程式の厳密解であり（命題 6.2）、平均場近似の正しさは Vlasov 方程式の安定性（Dobrushin の定理、W_1 距離と Grönwall）に帰着する。
- 収束するのは波動関数や N 体の分布そのものではなく、少数粒子の周辺分布・縮約密度行列・1 粒子あたりのエネルギーである。全エネルギーには $\mathcal{O}(1)$ の相関が残る。
- 量子系の BBGKY 階層は閉じず、積状態の仮定が第 1 段で閉じて Hartree 方程式を与える。Pickl の方法は、凝縮から外れた粒子の割合 α_N に Grönwall をかけて、有界な相互作用で $\alpha_N = \mathcal{O}(1/N)$ を示す。Hartree の場は凝縮どうしの寄与を正確に打ち消すように選ばれている。
- 特異な相互作用（クーロン）では、古典・量子とも短い証明は使えず、近接した粒子の相関の制御が難所になる。
- 原子では $N = Z$ で平均場と半古典が組になり、TF 理論はエネルギーの比の意味で厳密（Lieb–Simon）。誤差は Z^2 で増え、化学結合は落ちる（Teller の定理）。

この章で正当化した近似は、すべて B 型（極限）である。Vlasov 方程式・Hartree 方程式・Thomas–Fermi 理論は、それぞれ $N \to \infty$（と $\hbar_{\mathrm{eff}} \to 0$）の極限で厳密になる有効方程式として、収束の意味（経験測度の弱収束・縮約密度行列のトレースノルム・エネルギー比）と速さ（$N^{-1/2}$、N^{-1}、$Z^{-1/3}$ の相対誤差）まで含めて定理で裏付けられた。第 5 章で A 型（射影）として見た Hartree–Fock 近似が「上界」以上のことを言えなかったのに対し、同じ平均場の考え方が B 型として見直されると下界と収束が得られる。ただし保証は「極限で消える量」の大きさまでであり、その誤差より小さい現象（化学結合、長時間の振る舞い）は極限定理の外にある。その外側を埋めようとするのが、第 9 章で扱う C 型（閉じる）の近似である。

例題 6.10　保証の続く時間は $\log N$ でしか伸びない ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

定理 6.10 の評価 $\alpha_N(t) \le (\mathrm{e}^{7\|W\|t} - 1)/(7(N-1))$ で $\|W\|_\infty = 1$ とする。

(1) $\alpha_N(t) \le 0.01$ が保証される時間の上限 $t_*(N)$ を式で書け。

(2) $N = 10^4$ と $N = 10^8$ で t_* を求めよ。

(3) 粒子数を 1 万倍にして伸びる保証時間が小さい理由を、評価の形から説明せよ。

解答. **(1)** $\mathrm{e}^{7t} - 1 \le 0.07(N-1)$ を解いて $t_*(N) = \frac{1}{7}\ln\bigl(1 + 0.07(N-1)\bigr)$。
(2) $N = 10^4$ で $\frac{1}{7}\ln(700.93) \approx 0.936$、$N = 10^8$ で $\frac{1}{7}\ln(7.0 \times 10^6) \approx 2.25$。
(3) 誤差の源は $1/N$ だが、それを時間方向に増やす係数が e^{7t} なので、許容誤差を固定すると $t_* \approx \frac{1}{7}\ln N$ となる。N を 1 万倍にしても t_* は $\frac{1}{7}\ln 10^4 \approx 1.3$ だけ伸びる。これは第 6.2 節の注意「$t \sim \log N$ の時間で破綻しうる」と同じ構造で、Grönwall の不等式で得る評価はどれも最悪の指数増大を仮定している。数値の 2 モード模型では $N\alpha_N(2) \approx 0.1$ で、実際の誤差は評価よりはるかに小さい（検算 `scripts/verify_ch06.py`）。

総合問題　2 モードのボソン模型を上下から挟む ★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

第 6.5 節の 2 モード模型

$$H_N = -J\sum_{j=1}^{N}\bigl(|a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a|\bigr)_j + \frac{U}{N-1}\sum_{i<j} W_{ij}, \qquad W_{ij} = \sum_{c=a,b}(|cc\rangle\langle cc|)_{ij}$$

（$J, U > 0$）の基底状態を、変分（A 型）と平均場極限（B 型）の両側から調べる。

(1) 1 粒子状態 $\varphi = (\cos\theta, \sin\theta)$ について Hartree 汎関数 $e_{\mathrm{H}}(\theta) = \langle \varphi^{\otimes N}, H_N \varphi^{\otimes N}\rangle / N$ を求め、最小値 $e_{\mathrm{H}} = -J + U/4$ と最小化元を求めよ。（使う道具：第 6 章 §1 の例題、第 5 章の積状態に制限した変分問題）

(2) 占有数基底 $|n_a, n_b\rangle$（$n_a + n_b = N$）で H_N の行列要素を書き、$E_N \le N e_{\mathrm{H}}$ を説明せよ。対称部分空間が $N+1$ 次元であることの意味も述べよ。（使う道具：第 3 章の min-max 原理、第 4 章の Rayleigh–Ritz 法）

(3) $N = 2$、$J = U = 1$ で E_2 を厳密に求め、$E_2/2 - e_{\mathrm{H}}$ が定理 6.12 の範囲 $[-U/(2(N-1)), 0]$ に入ることを確かめよ。（使う道具：第 6 章 §5 の定理）

(4) (3) の基底状態の 1 体密度行列 $\gamma^{(1)}$ を求め、$p = |\varphi_{\mathrm{H}}\rangle\langle\varphi_{\mathrm{H}}|$ に対する $\alpha = \mathrm{Tr}(q\gamma^{(1)})$ と $\|\gamma^{(1)} - p\|_1$ を計算して補題 6.11 と比べよ。（使う道具：第 6 章 §4 の補題、§3 の縮約密度行列）

(5) $J = U = 1$ で数値対角化すると $E_N - N e_{\mathrm{H}}$ は $N = 10, 40, 160, 640, 2560$ で -0.0286、-0.0260、-0.0254、-0.0253、-0.0253 となる。1 粒子あたりの誤差と全エネルギーの誤差について何が言えるか。（使う道具：第 6 章 §5 の調和結合ボソンの例題、第 5 章の Hartree–Fock の上界）

解答. **(1)** 一体の項は各粒子で $-J\cdot 2\cos\theta\sin\theta = -J\sin 2\theta$。対 (i,j) が同じモードにいる確率は $\cos^4\theta + \sin^4\theta = 1 - \frac{1}{2}\sin^2 2\theta$ で、対は $N(N-1)/2$ 個、係数は $U/(N-1)$ なので、相互作用は 1 粒子あたり $\frac{U}{2}(1 - \frac{1}{2}\sin^2 2\theta)$。$s = \sin 2\theta$ とおくと

$$e_{\mathrm{H}}(\theta) = -Js + \frac{U}{2} - \frac{U}{4}s^2.$$

e_{H} は s の上に凸な 2 次関数なので、$s \in [-1, 1]$ での最小値は端点 $s = \pm 1$ のどちらかでとり、$e(1) = -J + U/4 < e(-1) = J + U/4$。よって最小化元は $\theta = \pi/4$（$\varphi_{\mathrm{H}} = (1,1)/\sqrt{2}$、2 つのモードに均等）で、$e_{\mathrm{H}} = -J + U/4$。$J = U = 1$ では -0.75。
(2) ボソンの対称な状態は各モードの粒子数で決まるので、基底 $|n_a, N - n_a\rangle$（$n_a = 0, \dots, N$）の $N+1$ 次元で足りる。$\sum_{i<j} W_{ij}$ は同じモードにいる対を数えるので対角で $\frac{n_a(n_a-1)+n_b(n_b-1)}{2}$、跳び移りの項は $\langle n_a+1, n_b-1|\sum_j (|a\rangle\langle b|)_j |n_a, n_b\rangle = \sqrt{(n_a+1)n_b}$ を与える。よって

$$\langle n_a, n_b|H_N|n_a, n_b\rangle = \frac{U}{N-1}\cdot\frac{n_a(n_a-1) + n_b(n_b-1)}{2},$$
$$\langle n_a+1, n_b-1|H_N|n_a, n_b\rangle = -J\sqrt{(n_a+1)n_b}.$$

積状態 $\varphi_{\mathrm{H}}^{\otimes N}$ は対称部分空間の 1 つのベクトルなので、min-max 原理（最低固有値は Rayleigh 商の最小値）から $E_N \le \langle \varphi_{\mathrm{H}}^{\otimes N}, H_N \varphi_{\mathrm{H}}^{\otimes N}\rangle = N e_{\mathrm{H}}$。Rayleigh–Ritz 法で見ると、部分空間を「積状態」という 1 パラメータの多様体に狭めたのが Hartree 近似であり、部分空間を $N+1$ 次元の対称部分空間全体にとれば近似は厳密になる。この模型で厳密解が計算できるのは、空間全体が N の 1 次でしか大きくならないからである。

(3) $N=2$ では $U/(N-1)=U$。対称部分空間の基底 $|2,0\rangle,|1,1\rangle,|0,2\rangle$ で

$$H_2=\begin{pmatrix} U & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & U \end{pmatrix}.$$

$a\leftrightarrow b$ の入れ替えで対称な組 $\frac{|2,0\rangle+|0,2\rangle}{\sqrt{2}},|1,1\rangle$ に制限すると $\begin{pmatrix} U & -2J \\ -2J & 0 \end{pmatrix}$ で、最低固有値は $E_2=\frac{U-\sqrt{U^2+16J^2}}{2}$。$J=U=1$ で $E_2=\frac{1-\sqrt{17}}{2}\approx -1.5616$、$E_2/2-e_{\mathrm{H}}\approx -0.7808+0.75=-0.0308$ で、範囲 $[-0.5,0]$ に入る（反対称な組の固有値は $U=1$ で、これより高い）。
(4) 固有ベクトルを $u\frac{|2,0\rangle+|0,2\rangle}{\sqrt{2}}+v|1,1\rangle$ とすると、固有方程式の第 1 行 $Uu-2Jv=E_2u$ から $v=\frac{U-E_2}{2J}u$。$J=U=1$ では $v/u=1.2808$、規格化して $u\approx 0.6154$、$v\approx 0.7882$。対称性から $\gamma^{(1)}=\begin{pmatrix} \frac12 & c \\ c & \frac12 \end{pmatrix}$ の形で、$c=\frac{1}{N}\langle\psi|\sum_j(|a\rangle\langle b|)_j|\psi\rangle$ を計算すると、$|1,1\rangle\to\sqrt{2}|2,0\rangle$ と $|0,2\rangle\to\sqrt{2}|1,1\rangle$ の 2 つの寄与から $c=\frac12\cdot 2uv=uv\approx 0.4851$。$p=\frac12\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ なので

$$\alpha=\mathrm{Tr}(q\gamma^{(1)})=1-\langle\varphi_{\mathrm{H}},\gamma^{(1)}\varphi_{\mathrm{H}}\rangle=\frac12-c\approx 0.0149,$$
$$\gamma^{(1)}-p=\left(c-\frac12\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\qquad \|\gamma^{(1)}-p\|_1=1-2c\approx 0.0299.$$

$\|\gamma^{(1)}-p\|_1=2\alpha$ で、補題の範囲 $[\alpha,\,2\alpha+2\sqrt{\alpha}]=[0.0149,\,0.274]$ の下の端に近い。$\gamma^{(1)}$ と p が同じ固有ベクトル $(1,\pm1)/\sqrt{2}$ を持ち、凝縮と外れた成分の干渉項が無いので、例題 6.5 の混合状態の場合に当たる。$N=2$ でも凝縮から外れた割合は 1.5% と小さく、相互作用が J と同程度でも積状態がよい近似になっている。
(5) 差 E_N-Ne_{H} は負で（(2) の上界と整合）、$N\to\infty$ で約 -0.0253 に収束し 0 にはならない。1 粒子あたりでは $E_N/N-e_{\mathrm{H}}\approx -0.0253/N$ で $1/N$ で消える。これは調和結合ボソンの例題と同じ構図で、平均場極限が保証するのは 1 粒子あたりのエネルギーまでであり、全エネルギーには平均場が落とした相関（Bogoliubov の揺らぎ）の $\mathcal{O}(1)$ の寄与が残る。第 5 章の見方では Hartree（ボソンの Hartree–Fock）は上界を与えるだけだったが、定理 6.12 の下界と合わせると誤差が $\mathcal{O}(1/N)$ の幅に挟まれ、「上界がどれほど真値に近いか」に答えが出る（数値は `scripts/verify_ch06.py` で検算）。