第 9 章

均質化と「閉じない」近似

★★★ 最重要 B 型の最後の例と、正当化できない C 型との境目を原理から示す章

この章は二つの部分からなる。前半は B 型（極限）の最後の例として**均質化**を扱う。細かい周期構造をもつ媒質の中の拡散・伝導・流れは、構造の周期 ε を系の大きさに比べて小さくした極限で、一様な「有効媒質」の方程式に置き換わる。複合材料の有効熱伝導率や、多孔質媒体を流れる水の Darcy 則は、この極限として導くことができる。ここでは「どの量が強く収束し、どの量が弱くしか収束しないか」という区別が結論を決めることを、1 次元の厳密な計算から多次元の証明まで追う。

後半は C 型（閉じる）を扱う。乱流の Reynolds 平均と渦粘性モデル、Rayleigh–Bénard 対流の 3 モード打ち切り（Lorenz 方程式）、密度汎関数理論（DFT）の交換相関汎関数である。どれも物理で日常的に使われるが、小さいパラメータがないため、前半のような極限定理の形の正当化ができない。何が厳密に言えて、どこから先がモデルなのかを、それぞれの場合に一つずつ切り分ける。

9.1 1 次元の均質化：平均は算術平均でなく調和平均

★★★ 最重要 弱収束と強収束の区別が有効係数を決めることを、完全に計算できる場合で示す

9.1.1 問題設定と素朴な答え

区間 $(0,1)$ 上で、周期 ε で振動する係数をもつ境界値問題

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(a\big(\tfrac{x}{\varepsilon}\big)\,\frac{\mathrm{d}u_\varepsilon}{\mathrm{d}x}\Big) = f(x), \qquad u_\varepsilon(0) = u_\varepsilon(1) = 0 \tag{9.1}$$

を考える。$a(y)$ は周期 1 の関数で、正の定数 λ, Λ について $0 < \lambda \le a(y) \le \Lambda$ を満たすとする。物理的には、熱伝導率 a が場所によって周期的に変わる棒の定常熱伝導（u は温度、f は熱源）、あるいは抵抗率が周期的に変わる導線の電位の問題である。周期 ε が系の長さ 1 に比べて非常に小さいとき、微細構造を一つ一つ解くのは無駄に思える。そこで問いは次のようになる。$\varepsilon \to 0$ で u_ε は何かの関数 u_0 に近づくか。近づくなら、u_0 はどんな方程式を満たすか。

素朴な答えは「係数を平均で置き換えればよい」、つまり $\langle a \rangle = \int_0^1 a(y)\,\mathrm{d}y$ を一様な係数として $-\langle a \rangle u_0'' = f$ を解けばよい、というものである。この答えは**誤り**である。正しい有効係数は

$$a^* = \Big(\int_0^1 \frac{\mathrm{d}y}{a(y)} \Big)^{-1} = \langle 1/a \rangle^{-1} \tag{9.2}$$

すなわち a の**調和平均**である。算術平均と調和平均は、a が定数でない限り $a^* < \langle a \rangle$ と厳密に異なる（Cauchy–Schwarz の不等式 $1 = \langle \sqrt{a} \cdot 1/\sqrt{a} \rangle^2 \le \langle a \rangle \langle 1/a \rangle$ による）。

直列につないだ抵抗

抵抗率 a^{-1} の細片が長さ方向に直列に並んだ導線を考えると、全体の抵抗は各細片の抵抗の和である。抵抗は抵抗率の長さ平均、すなわち $\langle 1/a \rangle$ に比例するので、全体の伝導率は $\langle 1/a \rangle^{-1}$ になる。1 次元の媒質では、電流（熱流）は細片を一つずつ順番に通るしかない。電流が細片の並びに対して直列にしか流れられないことが、調和平均を生む。物理屋の直観はここまでで正しい答えを出す。以下ではこの直観を、どの量がどの意味で収束するかという言葉で書き直し、多次元へ持ち上げられる形にする。

9.1.2 弱収束の復習と、振動する周期関数の弱極限

第 2 章で導入した弱収束を、この章で使う形で再掲する。

定義 9.1 (L^2 での強収束と弱収束)**.** 区間（または領域）Ω 上の 2 乗可積分関数の空間を $L^2(\Omega)$、そのノルムを $\|g\| = (\int_\Omega |g|^2)^{1/2}$ と書く。関数列 g_ε が g に

- **強収束**するとは、$\|g_\varepsilon - g\| \to 0$ となることをいう。
- **弱収束**するとは、すべての $\varphi \in L^2(\Omega)$ について $\int_\Omega g_\varepsilon \varphi \,\mathrm{d}x \to \int_\Omega g\varphi \,\mathrm{d}x$ となることをいい、$g_\varepsilon \rightharpoonup g$ と書く。

強収束すれば弱収束するが、逆は成り立たない。弱収束は「固定した窓関数 φ で重みをつけて平均した値」が収束することだけを要求するので、窓の幅より細かい振動は平均で消え、極限には現れない。典型例が次の補題である。

補題 9.2 (振動する周期関数の弱極限)**.** $g(y)$ を周期 1 の有界な関数、$\langle g \rangle = \int_0^1 g(y)\,\mathrm{d}y$ とする。$g_\varepsilon(x) = g(x/\varepsilon)$ とおくと、有界区間 Ω 上で $g_\varepsilon \rightharpoonup \langle g \rangle$（定数関数）である。一方、$g$ が定数でなければ g_ε は強収束しない。

証明. $|g| \le M$ とする。まず φ が区間 $[\alpha, \beta]$ の指示関数の場合を示す。変数変換 $y = x/\varepsilon$ により $\int_\alpha^\beta g(x/\varepsilon)\,\mathrm{d}x = \varepsilon \int_{\alpha/\varepsilon}^{\beta/\varepsilon} g(y)\,\mathrm{d}y$ である。区間 $[\alpha/\varepsilon, \beta/\varepsilon]$ は長さ 1 の完全な周期を $n = \lfloor (\beta-\alpha)/\varepsilon \rfloor$ 個含み、残りの長さは 2 未満なので、$\left| \varepsilon \int_{\alpha/\varepsilon}^{\beta/\varepsilon} g\,\mathrm{d}y - \varepsilon n \langle g \rangle \right| \le 2M\varepsilon$。$\varepsilon n \to \beta - \alpha$ だから $\int_\alpha^\beta g_\varepsilon \to (\beta-\alpha)\langle g \rangle$ となる。線型性から、φ が階段関数（有限個の区間の指示関数の線型結合）でも同じ結論が成り立つ。
一般の $\varphi \in L^2$ に対しては、任意の $\delta > 0$ について $\|\varphi - \psi\| < \delta$ となる階段関数 ψ がとれる。Cauchy–Schwarz により $\left| \int (g_\varepsilon - \langle g \rangle)(\varphi - \psi) \right| \le 2M|\Omega|^{1/2}\delta$ で、ε によらない。したがって $\limsup \left| \int (g_\varepsilon - \langle g \rangle)\varphi \right| \le 2M|\Omega|^{1/2}\delta$ で、δ は任意だから極限は 0 である。
強収束しないことは、$\|g_\varepsilon - \langle g \rangle\|^2 = \int |g(x/\varepsilon) - \langle g \rangle|^2 \mathrm{d}x$ に同じ議論を周期関数 $|g - \langle g \rangle|^2$ に対して使うと、これが $|\Omega|\,\langle |g - \langle g \rangle|^2 \rangle > 0$ に収束することからわかる。 □

この補題が、この章の前半全体の基礎である。振動する係数 $a(x/\varepsilon)$ はそれ自身 $\langle a \rangle$ に弱収束し、$1/a(x/\varepsilon)$ は $\langle 1/a \rangle$ に弱収束する。ところが $1/\langle a \rangle \neq \langle 1/a \rangle$ である。「弱収束する列の関数（ここでは逆数）の弱極限は、弱極限の関数ではない」。第 2 章で強調した「弱収束する二つの量の積の弱極限は弱極限の積でない」はこの一例であり、均質化の問題はまさにこの現象の上に立っている。

9.1.3 1 次元の均質化定理

定理 9.3 (1 次元の均質化 ★★★ 最重要)**.** $f \in L^2(0,1)$ とし、u_ε を (9.1) の解とする。$a^* = \langle 1/a \rangle^{-1}$ とおき、u_0 を一様係数の問題

$$-a^* u_0'' = f, \qquad u_0(0) = u_0(1) = 0 \tag{9.3}$$

の解とする。このとき $\varepsilon \to 0$ で次が成り立つ。

1. $u_\varepsilon \to u_0$ は $[0,1]$ 上で一様に（したがって L^2 でも強く）収束する。
2. 流束 $\sigma_\varepsilon := a(x/\varepsilon) u_\varepsilon'$ は $\sigma_0 := a^* u_0'$ に一様に（強く）収束する。
3. 勾配 u_ε' は u_0' に**弱くのみ**収束する。a が定数でなく $\sigma_0 \neq 0$ なら、強収束はしない。

証明. $F(x) = \int_0^x f(s)\,\mathrm{d}s$、$b(y) = 1/a(y)$、$b_\varepsilon(x) = b(x/\varepsilon)$ とおく。
(i) 流束を書き下す。 方程式は $\sigma_\varepsilon' = -f$ と書けるので、ある定数 c_ε を使って $\sigma_\varepsilon(x) = c_\varepsilon - F(x)$ である。したがって $u_\varepsilon' = b_\varepsilon\,\sigma_\varepsilon = b_\varepsilon(c_\varepsilon - F)$。境界条件 $u_\varepsilon(0) = 0$ から $u_\varepsilon(x) = \int_0^x b_\varepsilon(c_\varepsilon - F)\,\mathrm{d}s$、もう一方の境界条件 $u_\varepsilon(1) = 0$ から定数が決まる。

$$c_\varepsilon = \frac{\int_0^1 b_\varepsilon F \,\mathrm{d}x}{\int_0^1 b_\varepsilon \,\mathrm{d}x}. \tag{9.4}$$

(ii) 定数の極限。 補題 9.2 を $g = b$、試験関数 $\varphi = F$ と $\varphi = 1$ に使うと、分子は $\langle b \rangle \int_0^1 F$、分母は $\langle b \rangle$ に収束する。よって $c_\varepsilon \to c_0 := \int_0^1 F\,\mathrm{d}x$。このとき $\sigma_\varepsilon - \sigma_0 = c_\varepsilon - c_0$ は x によらない定数なので、$\sigma_\varepsilon \to \sigma_0 := c_0 - F$ は一様収束である。これが (2) の流束の強収束である（$\sigma_0 = a^* u_0'$ であることは (iv) で示す）。
(iii) 勾配の弱極限。 $u_\varepsilon' = \sigma_0 b_\varepsilon + (c_\varepsilon - c_0) b_\varepsilon$ と分ける。第 2 項は $|c_\varepsilon - c_0|/\lambda$ で一様に抑えられて 0 に行く。

第 1 項は、任意の $\varphi \in L^2$ に対し $\int \sigma_0 b_\varepsilon \varphi \to \langle b\rangle \int \sigma_0 \varphi$（補題で試験関数を $\sigma_0\varphi$ にとる）。よって $u_\varepsilon' \rightharpoonup \langle b\rangle \sigma_0$。

(iv) 関数そのものの極限。 $u_\varepsilon(x) = \int_0^1 \mathbf{1}_{[0,x]} u_\varepsilon' \,\mathrm{d}s$ に (iii) を使うと、各 x で $u_\varepsilon(x) \to \int_0^x \langle b\rangle\sigma_0 \,\mathrm{d}s =: u_0(x)$。$|u_\varepsilon'|$ は ε によらない定数で抑えられるので $\{u_\varepsilon\}$ は同程度連続であり、各点収束は一様収束に格上げされる。極限 u_0 は $u_0' = \langle b\rangle\sigma_0$、つまり $a^* u_0' = \sigma_0 = c_0 - F$ を満たすので、$-(a^* u_0')' = F' = f$。境界値は $u_0(0) = 0$ と $u_0(1) = \langle b\rangle \int_0^1 (c_0 - F) = \langle b\rangle (c_0 - c_0) = 0$。したがって u_0 は (9.3) の解である。

(v) 勾配は強収束しない。 $u_\varepsilon' - u_0' = \sigma_0(b_\varepsilon - \langle b\rangle) + (c_\varepsilon - c_0) b_\varepsilon$。第 2 項は一様に 0 に行く。$\sigma_0$ が連続なら、第 1 項の 2 乗積分は補題を周期関数 $(b - \langle b\rangle)^2$ に使って

$$\|u_\varepsilon' - u_0'\|^2 \;\longrightarrow\; \langle (b - \langle b\rangle)^2 \rangle \int_0^1 \sigma_0^2 \,\mathrm{d}x \tag{9.5}$$

となり、b が定数でなく $\sigma_0 \not\equiv 0$ なら正である。 □

証明の構造を振り返る。強収束したのは流束 $\sigma_\varepsilon = a_\varepsilon u_\varepsilon'$ であり、これは $\sigma_\varepsilon' = -f$ という**方程式そのものが微分を押さえている量**だから振動できない。弱くしか収束しないのは勾配 u_ε' と係数 a_ε で、どちらも微細構造に合わせて振動する。有効係数は「流束の極限を勾配の弱極限で割ったもの」として定義されるべき量であり、

$$a^* = \frac{\lim \sigma_\varepsilon}{\text{w-lim}\, u_\varepsilon'} = \frac{\sigma_0}{\langle 1/a\rangle \sigma_0} = \langle 1/a\rangle^{-1} \tag{9.6}$$

となる（w-lim は弱極限）。素朴な答え $\langle a\rangle$ は、$\sigma_\varepsilon = a_\varepsilon \cdot u_\varepsilon'$ の両因子の弱極限をそれぞれとって掛けた「$\langle a\rangle \cdot u_0'$」を流束の極限と取り違えたものであり、まさに弱極限の積と積の弱極限の取り違えである。

「平均場で係数を均す」の誤り

「微細構造は細かすぎて見えないから係数を平均する」という議論は、平均をとる対象を間違えている。平均してよいのは、極限で振動しなくなる量（ここでは流束）を決める式の中で、振動する因子が**一つだけ**現れる組み合わせである。$u_\varepsilon' = \sigma_\varepsilon / a_\varepsilon$ では振動する因子は $1/a_\varepsilon$ だけで、σ_ε は振動しないから $1/a$ を平均してよい。$\sigma_\varepsilon = a_\varepsilon u_\varepsilon'$ では a_ε と u_ε' の両方が振動し、しかも互いに逆位相で振動する（a が大きい所で勾配が小さい）ので、個別に平均すると相関を落とす。$\langle a\rangle\langle 1/a\rangle \geq 1$ のずれは、この負の相関の大きさである。

9.1.4 数値で見る：2 相媒質

具体例として、$a(y) = 1$ $(0 \leq y < 1/2)$、$a(y) = 4$ $(1/2 \leq y < 1)$、$f \equiv 1$ をとる。$\langle a\rangle = 2.5$、$\langle 1/a\rangle = (1 + 1/4)/2 = 0.625$ だから $a^* = 1.6$ である。均質化解は $u_0(x) = x(1-x)/(2a^*)$ で、中央の値は $u_0(1/2) = 1/(8a^*) = 0.078125$。算術平均を使った誤答では中央の値が $1/(8 \cdot 2.5) = 0.05$ となり、真の解より 36 % も小さい。

u_ε は区間ごとに 2 次式なので厳密に計算できる。図 9.1 に $\varepsilon = 0.1$ の厳密解と u_0、誤答を、表 9.1 に誤差の ε 依存を示す（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。L^2 誤差は ε を半分にするとちょうど半分になり $\mathcal{O}(\varepsilon)$ である。勾配の誤差は ε によらず (9.5) の値 $\sqrt{\langle (b - \langle b\rangle)^2\rangle}\,\|\sigma_0\| = 0.375/\sqrt{12} \approx 0.1083$ に張り付いて減らない（$\sigma_0 = 1/2 - x$、$\|\sigma_0\|^2 = 1/12$）。

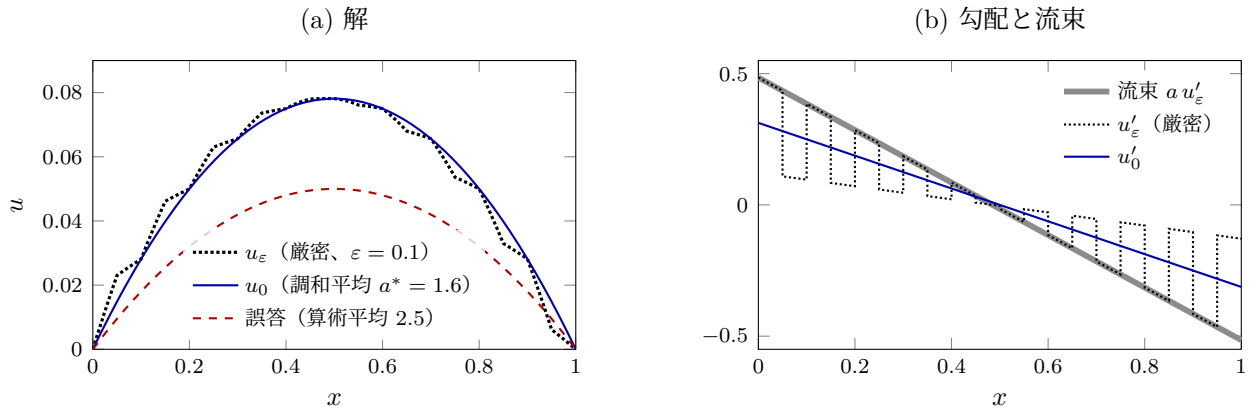


図 9.1　2 相媒質（$a = 1$ と 4 が半々）、$f \equiv 1$、$\varepsilon = 0.1$。(a) 厳密解 u_ε（点線）は均質化解 u_0（実線）に重なり、算術平均による誤答（破線）からは大きく離れる。(b) 勾配 u'_ε（点線）は a に合わせて 4 倍の比で上下に跳び、u'_0（実線）の周りを振動し続ける。流束 $a\,u'_\varepsilon$（灰）は振動せず直線 $\sigma_0 = 1/2 - x$ にほぼ一致する。

表 9.1　1 次元 2 相媒質での誤差（$f \equiv 1$）。u_1 は (9.8) の修正子。

ε	$\|u_\varepsilon - u_0\|$	$\|u'_\varepsilon - u'_0\|$	$\|(u_\varepsilon - u_0 - \varepsilon u_1)'\|$
$1/10$	3.12×10^{-3}	0.1080	7.81×10^{-3}
$1/20$	1.56×10^{-3}	0.1082	3.90×10^{-3}
$1/40$	7.81×10^{-4}	0.1082	1.95×10^{-3}
$1/80$	3.91×10^{-4}	0.1082	9.76×10^{-4}

9.1.5 修正子：勾配まで近似するには

勾配の誤差が減らないのは、u_0 が微細構造の振動を一切もたないからである。振動を足し戻せば勾配も近似できる。周期 1 の関数 $\chi(y)$ を

$$\chi'(y) = \frac{a^*}{a(y)} - 1 \tag{9.7}$$

で定める（右辺の平均は $a^*\langle 1/a\rangle - 1 = 0$ なので、χ は周期関数になる）。

$$u_\varepsilon(x) \approx u_0(x) + \varepsilon\, u_1\!\left(x, \tfrac{x}{\varepsilon}\right), \qquad u_1(x,y) = \chi(y)\, u'_0(x) \tag{9.8}$$

とおくと、その勾配は $u'_0 + \chi'(x/\varepsilon)u'_0 + \varepsilon\chi u''_0 = \frac{a^* u'_0}{a(x/\varepsilon)} + \mathcal{O}(\varepsilon) = \frac{\sigma_0}{a(x/\varepsilon)} + \mathcal{O}(\varepsilon)$ となり、厳密な勾配 $\sigma_\varepsilon/a(x/\varepsilon)$ と $\mathcal{O}(\varepsilon)$ の差しかない。表 9.1 の最右列が確かに $\mathcal{O}(\varepsilon)$ で減っている。修正子 εu_1 は関数値では $\mathcal{O}(\varepsilon)$ の小さな補正だが、微分すると ε が消えて $\mathcal{O}(1)$ の寄与になる。これが「L^2 では無視できるが H^1（勾配まで込めたノルム）では無視できない」項の正体である。

例題 9.1　1 次元均質化を手で解く　★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

$a(y) = a_1$（$0 \le y < \theta$）、$a(y) = a_2$（$\theta \le y < 1$）の 2 相媒質（体積分率 θ と $1-\theta$）を考える。

1. 有効係数 a^* と算術平均 $\langle a\rangle$ を求め、$a^* \le \langle a\rangle$ を確かめよ。等号はいつ成り立つか。
2. $a_1 = 1$、$a_2 = 4$、$\theta = 1/2$、$f \equiv 1$ のとき、u_0 と誤答 $\bar{u}$（$\langle a\rangle$ を使ったもの）の最大値を比べよ。
3. 同じ設定で、修正子 χ を $\chi(0) = 0$ として具体的に求めよ。$1/\varepsilon$ が整数のとき、$u_0 + \varepsilon\chi(x/\varepsilon)u'_0$ は境界条件を満たすか。

解答. **(1)** $\langle 1/a\rangle = \theta/a_1 + (1-\theta)/a_2$ だから $a^* = \dfrac{a_1 a_2}{\theta a_2 + (1-\theta)a_1}$、$\langle a\rangle = \theta a_1 + (1-\theta)a_2$。差をとると

$$\langle a\rangle - a^* = \frac{(\theta a_1 + (1-\theta)a_2)(\theta a_2 + (1-\theta)a_1) - a_1 a_2}{\theta a_2 + (1-\theta)a_1} = \frac{\theta(1-\theta)(a_1 - a_2)^2}{\theta a_2 + (1-\theta)a_1} \geq 0.$$

分子の計算は、展開して $\theta^2 + (1-\theta)^2 = 1 - 2\theta(1-\theta)$ を使えば $\theta(1-\theta)(a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2)$ になる。等号は $a_1 = a_2$ または $\theta \in \{0, 1\}$、つまり媒質が実は一様なときに限る。
(2) (1) より $a^* = 4/(2 + 0.5) = 1.6$、$\langle a\rangle = 2.5$。$-a^* u_0'' = 1$ の解は $u_0 = x(1-x)/(2a^*)$ で、最大値は $x = 1/2$ での $1/(8a^*) = 0.078125$。誤答の最大値は $1/(8 \cdot 2.5) = 0.05$。誤答は温度上昇（あるいは電位差）を $0.05/0.078125 = 0.64 = a^*/\langle a\rangle$ 倍に過小評価する。算術平均は、伝導の悪い相（$a = 1$）が直列に入っていることの影響を薄めすぎる。
(3) (9.7) より、$0 \leq y < 1/2$ で $\chi' = 1.6/1 - 1 = 0.6$、$1/2 \leq y < 1$ で $\chi' = 1.6/4 - 1 = -0.6$。$\chi(0) = 0$ から $\chi(y) = 0.6y$（$y < 1/2$）、$\chi(y) = 0.6(1-y)$（$y \geq 1/2$）で、$\chi(1) = 0$ となり周期的につながる。$1/\varepsilon$ が整数なら $x = 1$ で x/ε は整数なので $\chi(1/\varepsilon) = 0$。$x = 0$ でも $\chi(0) = 0$。したがって修正子つきの近似は両端で 0 になり、境界条件を満たす。表 9.1 の $\mathcal{O}(\varepsilon)$ はこの場合の値である。一般の多次元領域では修正子が境界で消えないので、境界近くの薄い層で補正が要り、H^1 誤差は $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ に落ちる（第 9.3 節）。

9.2 多次元：2 スケール展開とセル問題

★★★ 最重要 有効係数を決める補助問題（セル問題）と、それが算術平均と調和平均の間にあることの証明

9.2.1 設定

d 次元の有界領域 Ω で

$$-\nabla \cdot \big(A(x/\varepsilon)\nabla u_\varepsilon\big) = f \quad (\Omega \text{ 内}), \qquad u_\varepsilon = 0 \quad (\partial\Omega \text{ 上}) \tag{9.9}$$

を考える。$A(y)$ は単位立方体 $Y = [0,1)^d$ を周期とする対称行列値関数で、一様楕円性

$$\lambda|\xi|^2 \leq \xi \cdot A(y)\xi \leq \Lambda|\xi|^2 \qquad (\xi \in \mathbb{R}^d) \tag{9.10}$$

を満たすとする。$\langle g\rangle = \int_Y g(y)\,\mathrm{d}y$ を周期セル上の平均とする。1 次元のように積分で解を書き下すことはもうできない。流束 $A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon$ は発散が $-f$ に押さえられるだけで、発散のない成分（回転成分）は自由に振動できるからである。

9.2.2 2 スケール漸近展開

解が「ゆっくり変わる変数 x」と「微細構造の変数 $y = x/\varepsilon$」の両方に依存すると仮定して

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x, y) + \varepsilon\, u_1(x, y) + \varepsilon^2 u_2(x, y) + \cdots, \qquad y = x/\varepsilon \tag{9.11}$$

と展開する。各 $u_k(x, y)$ は y について Y 周期とする。$y = x/\varepsilon$ を代入した関数を x で微分すると連鎖律により $\nabla\big[v(x, x/\varepsilon)\big] = \big(\nabla_x v + \varepsilon^{-1}\nabla_y v\big)(x, x/\varepsilon)$ となるので、方程式の作用素は

$$-\nabla \cdot (A\nabla) = \varepsilon^{-2} L_0 + \varepsilon^{-1} L_1 + L_2, \tag{9.12}$$

$$L_0 = -\nabla_y \cdot (A\nabla_y), \qquad L_1 = -\nabla_y \cdot (A\nabla_x) - \nabla_x \cdot (A\nabla_y), \qquad L_2 = -\nabla_x \cdot (A\nabla_x)$$

と ε の冪で分かれる。(9.11) を代入して ε の各冪の係数を比べる。その前に、周期関数に対する L_0 の性質を一つ用意する。

補題 9.4 (周期セル上の可解条件)**.** Y 周期の関数 g に対し、方程式 $L_0 w = g$ が Y 周期の解 w をもつための必要十分条件は $\langle g \rangle = 0$ である。解は定数の差を除いて一意で、特に $L_0 w = 0$ の周期解は定数だけである。

証明の骨格. 必要性は、$L_0 w$ が周期関数の発散なので、セル上で積分すると発散定理により境界の寄与が周期性で打ち消し合い $\langle L_0 w \rangle = 0$ となることからわかる。一意性は、$L_0 w = 0$ に w を掛けてセル上で積分し部分積分すると $\langle \nabla_y w \cdot A \nabla_y w \rangle = 0$、楕円性から $\nabla_y w = 0$。十分性（存在）は、平均 0 の周期関数の空間でエネルギー $\frac{1}{2}\langle \nabla w \cdot A \nabla w \rangle - \langle g w \rangle$ を最小化する変分問題として解ける。この最小化が解をもつことは、平均 0 の周期関数に対する Poincaré 不等式 $\|w\| \le C \|\nabla w\|$ と Lax–Milgram の定理（楕円型の変分問題の解の存在と一意性を保証する定理）による。有限次元の言葉で言えば、L_0 は対称で核が定数だけなので、像は核の直交補空間（平均 0 の関数）全体である。 □

ε^{-2} の項。 $L_0 u_0 = 0$。補題 9.4 より u_0 は y によらない。$u_0 = u_0(x)$。

ε^{-1} の項。 $L_0 u_1 + L_1 u_0 = 0$、すなわち $-\nabla_y \cdot \big(A(y)(\nabla_x u_0 + \nabla_y u_1)\big) = 0$。$u_0$ は y によらないので $\nabla_x u_0(x)$ は y についての定数ベクトルとして振る舞う。方程式は線型なので

$$u_1(x, y) = \sum_{j=1}^{d} \chi_j(y) \, \frac{\partial u_0}{\partial x_j}(x) \quad (+\ x \text{ だけの関数}) \tag{9.13}$$

と書け、χ_j は次の**セル問題**の解である。

定義 9.5 (セル問題と有効係数)**.** $j = 1, \dots, d$ について、Y 周期の関数 χ_j を

$$-\nabla_y \cdot \big(A(y)(e_j + \nabla_y \chi_j)\big) = 0 \quad (Y \text{ 上、周期境界条件}) \tag{9.14}$$

の解とする（右辺に相当する $\nabla_y \cdot (A e_j)$ は周期関数の発散なので平均 0、補題 9.4 により解が存在する）。**有効係数**（均質化係数）を

$$A^*_{ij} = \big\langle e_i \cdot A(y)\big(e_j + \nabla_y \chi_j\big) \big\rangle \tag{9.15}$$

で定める。$e_j + \nabla_y \chi_j$ は「巨視的な勾配 e_j をかけたときにセルの中に生じる微視的な勾配」、$A(e_j + \nabla \chi_j)$ はそのときの微視的な流束で、$A^* e_j$ はその平均である。

ε^{0} の項。 $L_0 u_2 + L_1 u_1 + L_2 u_0 = f$。これを u_2 についての方程式と見ると、補題 9.4 の可解条件 $\langle f - L_1 u_1 - L_2 u_0 \rangle = 0$ が必要である。$L_1 u_1$ の第 1 項 $-\nabla_y \cdot (\cdots)$ はセル平均で消えるので、

$$f = \big\langle -\nabla_x \cdot \big(A \nabla_y u_1\big) - \nabla_x \cdot \big(A \nabla_x u_0\big) \big\rangle = -\nabla_x \cdot \Big(\sum_j \big\langle A(e_j + \nabla_y \chi_j) \big\rangle \frac{\partial u_0}{\partial x_j} \Big). \tag{9.16}$$

すなわち u_0 は**均質化方程式**

$$-\nabla \cdot \big(A^* \nabla u_0\big) = f \quad (\Omega \text{ 内}), \qquad u_0 = 0 \quad (\partial\Omega \text{ 上}) \tag{9.17}$$

を満たす。

形式的な展開であること

ここまでの計算は「解が (9.11) の形に展開できる」と仮定した形式計算であり、証明ではない。特に境界 $\partial\Omega$ の近くでは u_1 が境界条件を満たさないので、展開は境界から ε 程度の層で破綻する。それでも極限 (9.17) 自体は正しく、そのことを第 9.3 節で別の方法で証明する。B 型の近似ではこの「形式展開で答えを見つけ、別の論法で正当化する」という二段構えが標準的である（第 7 章の境界層、第 8 章の Chapman–Enskog 展開も同じ構造をもつ）。

9.2.3 有効係数の変分特徴付けと Voigt–Reuss の上下界

命題 9.6 (有効係数の変分特徴付け ★★★ 最重要)**.** A^* は対称で、任意の $\xi \in \mathbb{R}^d$ について

$$\xi \cdot A^* \xi = \min_{\varphi : Y \text{ 周期}} \big\langle (\xi + \nabla\varphi) \cdot A(\xi + \nabla\varphi) \big\rangle \tag{9.18}$$

が成り立ち、最小値は $\varphi = \chi_\xi := \sum_j \xi_j \chi_j$ でとられる。

証明. セル問題 (9.14) に周期関数 χ_i を掛けてセル上で積分し、部分積分（周期性で境界項は消える）すると $\langle \nabla\chi_i \cdot A(e_j + \nabla\chi_j)\rangle = 0$。これを (9.15) に足すと

$$A^*_{ij} = \big\langle (e_i + \nabla\chi_i) \cdot A(e_j + \nabla\chi_j) \big\rangle$$

となり、A の対称性から A^* は対称である。ξ について線型結合すると $\xi \cdot A^* \xi = \langle g \cdot Ag\rangle$、$g = \xi + \nabla\chi_\xi$。任意の周期関数 φ を $\varphi = \chi_\xi + \psi$ と書くと

$$\big\langle (\xi + \nabla\varphi) \cdot A(\xi + \nabla\varphi) \big\rangle = \langle g \cdot Ag\rangle + 2\langle \nabla\psi \cdot Ag\rangle + \langle \nabla\psi \cdot A\nabla\psi\rangle.$$

中央の項はセル問題に ψ を掛けて積分したものなので 0、最後の項は ≥ 0。よって最小値は $\psi = 0$ でとられ $\langle g \cdot Ag\rangle$ に等しい。 □

右辺はセルの中の「静電エネルギー」であり、セル問題は巨視的な勾配 ξ を与えたときにエネルギーを最小にする微視的な場の配置を探す問題である。この特徴付けから、有効係数の上下界が直ちに出る。

定理 9.7 (Voigt–Reuss の上下界 ★★★ 最重要)**.** 行列の意味（$B \leq C$ は $C - B$ が半正定値であること）で

$$\langle A^{-1}\rangle^{-1} \;\leq\; A^* \;\leq\; \langle A\rangle. \tag{9.19}$$

特に $A = a(y)I$（等方的な媒質）なら、A^* の固有値はすべて調和平均 $\langle 1/a\rangle^{-1}$ と算術平均 $\langle a\rangle$ の間にある。

証明. **上界（Voigt）**。(9.18) で試行関数 $\varphi = 0$ をとると $\xi \cdot A^* \xi \leq \xi \cdot \langle A\rangle \xi$。
下界（Reuss）。A が正定値なので、任意のベクトル g, η について各点で $(g - A^{-1}\eta) \cdot A(g - A^{-1}\eta) \geq 0$、展開すると

$$g \cdot Ag \;\geq\; 2\eta \cdot g - \eta \cdot A^{-1}\eta.$$

$g = \xi + \nabla\chi_\xi$、η を定ベクトルとしてセル平均をとる。周期関数の勾配の平均は 0 なので $\langle g\rangle = \xi$ であり、

$$\xi \cdot A^* \xi = \langle g \cdot Ag\rangle \;\geq\; 2\eta \cdot \xi - \eta \cdot \langle A^{-1}\rangle \eta.$$

右辺は η の 2 次式で、$\eta = \langle A^{-1}\rangle^{-1}\xi$ で最大値 $\xi \cdot \langle A^{-1}\rangle^{-1}\xi$ をとる（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。よって $\xi \cdot A^* \xi \geq \xi \cdot \langle A^{-1}\rangle^{-1}\xi$。 □

Voigt の上界は「微視的な勾配が一様である」と仮定した値（試行関数 0）、Reuss の下界は「微視的な流束が一様である」と仮定した値である。真の微視的な場は、勾配と流束のどちらも一様にはならない妥協点にあり、その結果は両者の間に落ちる。1 次元では流束が必ず一様になる（$\sigma'_\varepsilon = -f$ が振動を許さない）ので、下界がそのまま実現した。

例題 9.2　層状媒質の有効テンソル ★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

2 次元で $A(y) = a(y_1)I$（a は y_1 だけに依存し周期 1）とする。これは y_2 方向に伸びる層が y_1 方向に積み重なった層状媒質である。

1. セル問題 (9.14) を $j = 1, 2$ について解け。
2. A^* を求め、層に平行な方向と垂直な方向でそれぞれ Voigt と Reuss の界が等号で実現す

ることを示せ。
3. $a=1$ と 4 が半々のとき A^* を数値で書け。この媒質は巨視的には等方的か。

解答. **(1)** $j=2$：$\nabla_y\cdot(a(y_1)e_2)=\partial_{y_2}a(y_1)=0$ なので、$\chi_2=0$ がセル問題を満たす。$j=1$：y_1 だけの関数 $\chi_1(y_1)$ を試す。方程式は $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y_1}\big(a(y_1)(1+\chi_1')\big)=0$ なので $a(1+\chi_1')=C$（定数）。周期性から $\langle\chi_1'\rangle=0$、すなわち $\langle C/a-1\rangle=0$ で $C=\langle 1/a\rangle^{-1}$。したがって $\chi_1'=\langle 1/a\rangle^{-1}/a-1$。これは第 9.1 節の (9.7) と同じ式である。解は定数の差を除いて一意なので（補題 9.4）、これらが求める解である。
(2) (9.15) より $A^*_{11}=\langle a(1+\chi_1')\rangle=C=\langle 1/a\rangle^{-1}$、$A^*_{22}=\langle a\rangle$、$A^*_{12}=\langle e_1\cdot ae_2\rangle=0$、$A^*_{21}=\langle e_2\cdot a(1+\chi_1')e_1\rangle=0$。

$$A^*=\begin{pmatrix}\langle 1/a\rangle^{-1} & 0\\ 0 & \langle a\rangle\end{pmatrix}.$$

層に垂直な方向（e_1）では電流が各層を直列に通るので調和平均（Reuss の界）、層に平行な方向（e_2）では各層が並列に電流を流すので算術平均（Voigt の界）になる。この例は、定理 9.7 の上下界がどちらも改良できない（最良の）ことを示している。
(3) $A^*=\mathrm{diag}(1.6,\,2.5)$。巨視的には**異方的**である。成分が等方的な二つの材料を混ぜただけで、微細構造の形によって巨視的な異方性が生まれる。差分法でセル問題を数値的に解いても同じ値が得られる（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

例（市松模様） 2 次元で $a=a_1$ と $a=a_2$ を市松模様に並べた媒質は、90° 回転の対称性から $A^*=a^*I$ と等方的になる。このとき $a^*=\sqrt{a_1a_2}$ が厳密に成り立つことが知られている（Keller、Dykhne による双対性の議論。2 次元で伝導率 a の媒質と $1/a$ の媒質の有効係数が逆数の関係になることを使う）。$a_1=1$、$a_2=4$ なら $a^*=2$ で、Reuss の 1.6 と Voigt の 2.5 の間にある。64×64 の格子でセル問題を差分法で解くと 1.989 が得られる（検算 `scripts/verify_ch09.py`。角の特異性のため格子を細かくしても収束は遅い）。同じ体積分率でも、層状なら方向によって 1.6 と 2.5、市松模様なら 2 と、有効係数は微細構造の**幾何**で決まる。体積分率だけでは決まらないことが、上下界という形の結果しか一般には言えない理由である。

9.3 厳密な正当化：振動試験関数の方法

★★ 重要　形式展開の結論を、弱収束しかしない量の積の極限を正しく取る論法で証明する

9.3.1 準備：Sobolev 空間とコンパクト性

多次元の証明には第 2 章の道具を使う。ここで必要な範囲を再掲する。

定義 9.8 (Sobolev 空間 H^1_0)**.** $H^1_0(\Omega)$ は、Ω 上で 2 乗可積分で、（弱い意味の）勾配も 2 乗可積分であり、境界で 0 となる関数の空間で、ノルムは $\|u\|_{H^1}=(\|u\|^2+\|\nabla u\|^2)^{1/2}$ である。名前は S. L. Sobolev に由来する。H^1 ノルムで近いことは、関数値だけでなく勾配（物理的には場の強さやエネルギー密度）まで近いことを意味する。

使う事実は次の四つである（(F1)(F3) の考え方は第 2 章と補題 9.2、(F2) の証明は関数解析の標準的な教科書にある）。
(F1) L^2 の有界な列は弱収束する部分列をもつ。
(F2) （Rellich のコンパクト性）$H^1_0(\Omega)$ で有界な列は、$L^2(\Omega)$ で**強**収束する部分列をもつ。
(F3) （補題 9.2 の多次元版）Y 周期の有界関数 g について $g(x/\varepsilon)\rightharpoonup\langle g\rangle$。
(F4) 弱収束と強収束の積：$p_\varepsilon\rightharpoonup p$ かつ $q_\varepsilon\to q$（強）なら、$\int p_\varepsilon q_\varepsilon\to\int pq$。
(F4) は $\int p_\varepsilon q_\varepsilon-\int pq=\int p_\varepsilon(q_\varepsilon-q)+\int(p_\varepsilon-p)q$ と分ければ、第 1 項は Cauchy–Schwarz で $\sup\|p_\varepsilon\|\|q_\varepsilon-q\|\to 0$、第 2 項は弱収束の定義から 0 に行くことでわかる。両方が弱収束しかしないと、この論法は使えない。

9.3.2 主定理と Tartar の証明

定理 9.9 (周期均質化の収束定理 ★★ 重要)**.** $f \in L^2(\Omega)$ とし、$u_\varepsilon \in H^1_0(\Omega)$ を (9.9) の（弱い意味の）解、u_0 を均質化方程式 (9.17) の解とする。$\varepsilon \to 0$ で

1. $u_\varepsilon \to u_0$（L^2 で強収束）、
2. $\nabla u_\varepsilon \rightharpoonup \nabla u_0$（$L^2$ で弱収束。一般に強収束しない）、
3. $A(x/\varepsilon)\nabla u_\varepsilon \rightharpoonup A^*\nabla u_0$（流束の弱収束）。

さらに u_0 と χ_j が十分滑らかなら、修正子をつけた近似について $\|u_\varepsilon - u_0 - \varepsilon \sum_j \chi_j(x/\varepsilon)\partial_j u_0\|_{H^1} \le C\sqrt{\varepsilon}$ が成り立つ。

証明（*Tartar* のエネルギー法）**. 第 1 段（一様な評価）**。方程式に u_ε を掛けて部分積分すると $\int \nabla u_\varepsilon \cdot A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon = \int f u_\varepsilon$。楕円性と Poincaré 不等式 $\|u\| \le C_P\|\nabla u\|$ から $\lambda\|\nabla u_\varepsilon\|^2 \le \|f\| C_P\|\nabla u_\varepsilon\|$、すなわち $\|\nabla u_\varepsilon\| \le C_P\|f\|/\lambda$。流束 $\sigma_\varepsilon := A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon$ も $\|\sigma_\varepsilon\| \le \Lambda C_P\|f\|/\lambda$ と有界である。
第 2 段（部分列の極限）。(F1)(F2) により部分列をとって、$u_\varepsilon \to u_0$（強）、$\nabla u_\varepsilon \rightharpoonup \nabla u_0$、$\sigma_\varepsilon \rightharpoonup \sigma_0$ とできる。弱形式 $\int \sigma_\varepsilon \cdot \nabla\varphi = \int f\varphi$ は σ_ε について線型なので極限に移せて、$-\nabla\cdot\sigma_0 = f$。残る問題は $\sigma_0 = A^*\nabla u_0$ を示すことである。$\sigma_\varepsilon = A_\varepsilon\nabla u_\varepsilon$ は弱収束する A_ε と弱収束する ∇u_ε の積なので、(F4) は使えない。
第 3 段（振動試験関数）。定ベクトル η に対し、セル問題の解を使って

$$w_\varepsilon(x) = \eta\cdot x + \varepsilon\,\chi_\eta(x/\varepsilon), \qquad \chi_\eta = \sum_j \eta_j \chi_j$$

とおく。この関数は次の性質をもつ。$w_\varepsilon \to \eta\cdot x$（一様収束、修正項は $\mathcal{O}(\varepsilon)$）。$\nabla w_\varepsilon = (\eta + \nabla_y\chi_\eta)(x/\varepsilon) \rightharpoonup \eta$（(F3)、勾配の平均は η）。$\tau_\varepsilon := A_\varepsilon\nabla w_\varepsilon = \big[A(\eta+\nabla_y\chi_\eta)\big](x/\varepsilon) \rightharpoonup A^*\eta$（(F3) と (9.15)）。そしてセル問題を x の変数で書き直すと $\nabla\cdot\tau_\varepsilon = 0$。$w_\varepsilon$ は「同じ微細構造の中で、巨視的に一様な勾配 η をかけたときの微視的な場」である。
第 4 段（同じ量を二通りに計算する）。ϕ を Ω の内部に台をもつ滑らかな関数として $I_\varepsilon = \int \phi\,\sigma_\varepsilon\cdot\nabla w_\varepsilon$ を考える。
(a) ∇w_ε を部分積分で w_ε に移す。$\nabla\cdot(\phi\sigma_\varepsilon) = \nabla\phi\cdot\sigma_\varepsilon - \phi f$ だから

$$I_\varepsilon = -\int w_\varepsilon\,\sigma_\varepsilon\cdot\nabla\phi + \int w_\varepsilon\phi f.$$

w_ε は強収束、σ_ε は弱収束なので (F4) が使えて、$I_\varepsilon \to -\int(\eta\cdot x)\sigma_0\cdot\nabla\phi + \int(\eta\cdot x)\phi f$。$-\nabla\cdot\sigma_0 = f$ を使って部分積分を戻すと、この極限は $\int\phi\,\sigma_0\cdot\eta$ に等しい。
(b) A の対称性から $\sigma_\varepsilon\cdot\nabla w_\varepsilon = \nabla u_\varepsilon\cdot\tau_\varepsilon$。今度は ∇u_ε を部分積分で u_ε に移す。$\nabla\cdot\tau_\varepsilon = 0$ だから

$$I_\varepsilon = -\int u_\varepsilon\,\tau_\varepsilon\cdot\nabla\phi.$$

u_ε は強収束、τ_ε は弱収束なので (F4) により $I_\varepsilon \to -\int u_0\,A^*\eta\cdot\nabla\phi = \int\phi\,\nabla u_0\cdot A^*\eta$。
(a)(b) を等しいとおくと、すべての ϕ と η について $\int\phi\,\sigma_0\cdot\eta = \int\phi\,(A^*\nabla u_0)\cdot\eta$（$A^*$ の対称性を使った）。よって $\sigma_0 = A^*\nabla u_0$ で、u_0 は均質化方程式を満たす。
第 5 段（列全体の収束）。均質化方程式の解は一意なので、どの部分列の極限も同じ u_0 である。したがって列全体が収束する。
修正子の評価 $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ は、$r_\varepsilon = u_\varepsilon - u_0 - \varepsilon u_1 - \varepsilon^2 u_2$ が満たす方程式の残差を評価し、境界での不一致を幅 ε の切断関数で補正することで得られる。$\sqrt{\varepsilon}$ は境界層の幅 ε の平方根（勾配の 2 乗積分が層の幅に比例する）から来る。この部分は計算が長いので省略する。 □

なぜ第 4 段がうまくいくのか

$\sigma_\varepsilon\cdot\nabla w_\varepsilon$ はどちらの因子も弱収束しかしない積なのに、その極限が極限の積 $\sigma_0\cdot\eta$ になった。鍵は、σ_ε の**発散**が固定され（$-f$）、∇w_ε が**勾配**（回転が 0）だという構造である。発散が押さえられたベクトル場は「流れの方向の振動」ができず、勾配場は「流れと垂直な方向の振動」ができない。二つの振動は互いに直交する方向にしか起きないので、内積をとると振動が打ち消し合わずに平均化される。この「発散と回転の補償」は Murat と Tartar の補償コンパクト性（div–curl 補題）として一般的に定式化されている。1 次元で流束が強収束したのは、1 次元では発散と微

分が同じものになり、発散を押さえることが流束そのものを押さえることになるからである。

9.3.3 二スケール収束とランダム均質化

Tartar の方法は、極限方程式の形（セル問題）を事前に知っていることを前提に、振動試験関数を作って極限を確定する。これに対し、Nguetseng（1989 年）が導入し Allaire（1992 年）が整備した**二スケール収束**は、形式展開 (9.11) そのものを正当化する枠組みである。関数列 v_ε が $v_0(x,y)$ に二スケール収束するとは、周期の試験関数 $\psi(x,y)$ すべてについて

$$\int_\Omega v_\varepsilon(x)\,\psi(x,x/\varepsilon)\,\mathrm{d}x \;\longrightarrow\; \int_\Omega\int_Y v_0(x,y)\,\psi(x,y)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$$

となることをいう。弱収束が微細構造の情報を平均で捨てるのに対し、二スケール収束は「セル内の位置 y ごとの振る舞い」を極限に残す。H^1 で有界な列 u_ε について、部分列で $u_\varepsilon \to u_0(x)$ かつ ∇u_ε が $\nabla_x u_0 + \nabla_y u_1(x,y)$ に二スケール収束する、というコンパクト性定理が成り立ち、ここから $u_1 = \sum \chi_j \partial_j u_0$ とセル問題が自然に出てくる。

周期性は均質化の本質ではない。係数 $A(x/\varepsilon,\omega)$ が確率的で、空間の平行移動について統計的に一様かつエルゴード的（空間平均が集団平均に一致する）なら、同じ形の均質化定理が確率 1 で成り立つ（Kozlov、Papanicolaou–Varadhan によるランダム均質化）。このときセル問題は全空間の確率的な問題になり、有効係数は一般に数値的にしか求まらない。大事なのは、極限を閉じさせているのが**周期性かエルゴード性という構造**だという点である。微細構造が統計的に一様でなく、場所ごとに勝手に変わるなら、有効係数という概念自体が成り立たない。

例題 9.3　発散と回転の補償を具体的な列で確かめる　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

1. $\Omega=(0,1)^2$、$\varepsilon = 1/n$（n は正の整数）とし、三つのベクトル場

$$p_\varepsilon = \bigl(\cos\tfrac{2\pi x_1}{\varepsilon},\,0\bigr),\qquad q_\varepsilon = \bigl(\cos\tfrac{2\pi x_1}{\varepsilon},\,0\bigr),\qquad r_\varepsilon = \bigl(0,\,\cos\tfrac{2\pi x_1}{\varepsilon}\bigr)$$

を考える。三つとも 0 に弱収束することを示し、滑らかな ϕ について $\int \phi\, p_\varepsilon\cdot q_\varepsilon$ と $\int \phi\, r_\varepsilon\cdot q_\varepsilon$ の極限を求めよ。どちらの積で「積の極限＝極限の積」が成り立つかを、発散と回転の言葉で説明せよ。

2. 第 9.1 節の 2 相媒質（$a=1$ と 4 が半々、$f\equiv 1$）で、エネルギー $\mathcal{E}_\varepsilon = \int_0^1 a(x/\varepsilon)\,(u_\varepsilon')^2\mathrm{d}x$ の極限を求めよ。それが $a^*\int_0^1 (u_0')^2\mathrm{d}x$ に等しく、$\langle a\rangle\int_0^1(u_0')^2\mathrm{d}x$ とは異なることを示し、(F4) が使える理由を述べよ。

解答. **(1)** 三つの場の成分はどれも周期関数 $\cos 2\pi y$ に $y = x_1/\varepsilon$ を入れたもので、平均は 0 である。(F3)（補題 9.2 の多次元版）により、各成分は 0 に弱収束する。したがって $p_\varepsilon, q_\varepsilon, r_\varepsilon \rightharpoonup 0$ で、極限の積はどれも 0 である。
積の方は、$p_\varepsilon\cdot q_\varepsilon = \cos^2(2\pi x_1/\varepsilon)$ が平均 $1/2$ の周期関数なので、同じく (F3) により

$$\int \phi\, p_\varepsilon\cdot q_\varepsilon\,\mathrm{d}x \;\longrightarrow\; \frac{1}{2}\int \phi\,\mathrm{d}x$$

となり、極限の積 0 と一致しない。一方 $r_\varepsilon\cdot q_\varepsilon = 0$ は恒等的に 0 なので、極限は 0 で、極限の積と一致する。
違いは発散にある。$q_\varepsilon = \nabla\bigl(\frac{\varepsilon}{2\pi}\sin\frac{2\pi x_1}{\varepsilon}\bigr)$ は勾配なので回転が 0 で、振動は x_1 方向、すなわち q_ε 自身の向きに沿って起きる。p_ε の発散は $-\frac{2\pi}{\varepsilon}\sin\frac{2\pi x_1}{\varepsilon}$ で、$\varepsilon\to 0$ で有界にとどまらない。p_ε は自分の向きに沿って振動しており、q_ε と同じ向きに同じ位相で振動するので、内積で振動が平均化されずに $1/2$ が残る。r_ε の発散は $\partial_{x_2}\cos(2\pi x_1/\varepsilon) = 0$ で、発散が押さえられた場である。r_ε は x_1 方向に振動するが、向きは x_2 方向で、振動の方向と場の向きが直交している。勾配場は向きに沿ってしか振動できず、発散の押さえられた場は向きと垂直にしか振動できないので、二

つの振動は内積で打ち消される。これが本文の第 4 段の ideabox で述べた「発散と回転の補償」の最も簡単な例である。
(2) 方程式 $-(a_\varepsilon u_\varepsilon')' = 1$ に u_ε を掛けて $(0,1)$ で積分し、境界条件 $u_\varepsilon(0) = u_\varepsilon(1) = 0$ を使って部分積分すると

$$\mathcal{E}_\varepsilon = \int_0^1 a_\varepsilon (u_\varepsilon')^2 \mathrm{d}x = \int_0^1 u_\varepsilon \, \mathrm{d}x.$$

定理 9.3 により $u_\varepsilon \to u_0$ は一様収束なので、右辺は $\int_0^1 u_0 \, \mathrm{d}x = \int_0^1 \frac{x(1-x)}{2a^*} \mathrm{d}x = \frac{1}{12a^*}$ に収束する。$a^* = 1.6$ を入れて $\mathcal{E}_\varepsilon \to 1/19.2 \approx 0.05208$。
一方 $u_0' = (1-2x)/(2a^*)$ で $\int_0^1 (1-2x)^2 \mathrm{d}x = 1/3$ だから、

$$a^* \int_0^1 (u_0')^2 \mathrm{d}x = \frac{a^*}{3 \cdot 4a^{*2}} = \frac{1}{12a^*} \approx 0.05208, \qquad \langle a \rangle \int_0^1 (u_0')^2 \mathrm{d}x = \frac{2.5}{12 \cdot 2.56} \approx 0.08138.$$

エネルギーの極限は前者に一致し、後者より 36 % 小さい。厳密解で計算すると $\varepsilon = 1/10$ で $\mathcal{E}_\varepsilon \approx 0.05194$、$\varepsilon = 1/40$ で 0.05207 で、確かに 0.05208 へ近づく（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。
エネルギー密度 $a_\varepsilon (u_\varepsilon')^2$ を $\sigma_\varepsilon \cdot u_\varepsilon'$ と書くと、σ_ε は強収束（定理 9.3 の (2)）、u_ε' は弱収束なので、(F4) により $\int \sigma_\varepsilon u_\varepsilon' \to \int \sigma_0 u_0' = \int a^* (u_0')^2$ となる。これを $a_\varepsilon \cdot (u_\varepsilon')^2$ と分けて「係数の弱極限 $\langle a \rangle$ × 勾配の 2 乗の極限」と考えると、弱収束しかしない因子どうしの積に (F4) を使ったことになり、誤る。1 次元では流束が強収束するので第 3 段の振動試験関数は要らず、多次元ではその代わりを w_ε が務める。

9.4 物理の例：有効係数と Darcy 則

★★ 重要　巨視的な構成則が微視的方程式の極限として出る具体例

9.4.1 複合材料の有効熱伝導率・有効誘電率

熱伝導 $\nabla \cdot (\kappa \nabla T) = -q$、静電場 $\nabla \cdot (\varepsilon_r \nabla \phi) = -\rho/\varepsilon_0$、定常電流 $\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = 0$ はすべて (9.9) と同じ形をしている。したがって前節までの結果は、複合材料の有効熱伝導率・有効誘電率・有効電気伝導率にそのまま当てはまる。Fourier 則 $\boldsymbol{q} = -\kappa^* \nabla T$ や Ohm の法則 $\boldsymbol{j} = \sigma^* \boldsymbol{E}$ の巨視的な係数は、微視的な構成則の係数の**平均ではなく**、セル問題の解を通して決まる量であり、一般には体積分率だけで決まらず、Voigt–Reuss の範囲に入ることだけが保証される。

体積分率に加えて「巨視的に等方的」という情報があると範囲はもっと狭まり、それを与えるのが Hashin–Shtrikman の上下界である。3 次元で、誘電率 ε_m の母相の中に誘電率 ε_i の球状粒子が体積分率 ϕ で分散している希薄な系には、Maxwell–Garnett の式

$$\frac{\varepsilon^* - \varepsilon_m}{\varepsilon^* + 2\varepsilon_m} = \phi \, \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_m}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_m} \tag{9.20}$$

がよく使われる。この式は ϕ の 1 次までは孤立した球の分極（Clausius–Mossotti の局所場の議論）から正しく、ϕ の高次は近似である。また (9.20) は、$\varepsilon_i > \varepsilon_m$ のとき Hashin–Shtrikman の下界と一致することが知られている。$\varepsilon_m = 1$、$\varepsilon_i = 4$、$\phi = 0.2$ なら $\varepsilon^* = 4/3 \approx 1.333$ で、Reuss の 1.176 と Voigt の 1.6 の間にある（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

9.4.2 多孔質媒体の Darcy 則

多孔質媒体（砂、岩石、フィルタ）の中の遅い流れでは、巨視的な流速 $\bar{\boldsymbol{u}}$ が圧力勾配に比例するという Darcy 則

$$\bar{\boldsymbol{u}} = -\frac{K}{\mu}\bigl(\nabla p - \boldsymbol{f}\bigr), \qquad \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{u}} = 0 \tag{9.21}$$

が経験則として知られている（μ は粘性率、K は透過率テンソル、$\boldsymbol{f}$ は体積力）。これは Stokes 方程式の均質化極限として導ける。周期 ε で固体の障害物が並び、流体の領域を Ω_ε とする。細孔の大き

さが ε なので、圧力勾配 $\mathcal{O}(1)$ に対する流速は $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ になる。この大きさを取り出すために粘性項に ε^2 をつけた Stokes 方程式

$$-\varepsilon^2\mu\Delta \boldsymbol{u}_\varepsilon + \nabla p_\varepsilon = \boldsymbol{f}, \qquad \nabla\cdot\boldsymbol{u}_\varepsilon = 0 \quad (\Omega_\varepsilon \text{ 内}), \qquad \boldsymbol{u}_\varepsilon = 0 \quad (\text{固体の表面}) \tag{9.22}$$

を考える。2 スケール展開 $\boldsymbol{u}_\varepsilon = \boldsymbol{u}_0(x,y) + \varepsilon \boldsymbol{u}_1 + \cdots$、$p_\varepsilon = p_0(x) + \varepsilon p_1(x,y) + \cdots$ を入れると、最低次で

$$-\mu\Delta_y \boldsymbol{u}_0 + \nabla_y p_1 = \boldsymbol{f} - \nabla_x p_0, \qquad \nabla_y\cdot\boldsymbol{u}_0 = 0 \quad (\text{セルの流体部分 } Y_f), \qquad \boldsymbol{u}_0 = 0 \quad (\text{固体の表面})$$

が出る。右辺は y によらないので、線型性から $\boldsymbol{u}_0 = \mu^{-1}\sum_j \boldsymbol{w}^j(y)(f - \nabla_x p_0)_j$ と書け、$\boldsymbol{w}^j$ は **Stokes のセル問題**

$$-\Delta_y \boldsymbol{w}^j + \nabla_y \pi^j = e_j, \qquad \nabla_y\cdot\boldsymbol{w}^j = 0 \quad (Y_f \text{ 内}), \qquad \boldsymbol{w}^j = 0 \quad (\text{固体の表面}), \qquad \text{周期} \tag{9.23}$$

の解である。セル平均をとると $\bar{\boldsymbol{u}} = \langle \boldsymbol{u}_0\rangle = \mu^{-1}K(\boldsymbol{f} - \nabla p_0)$、透過率は

$$K_{ij} = \langle w_i^j \rangle \qquad (\text{固体部分では } \boldsymbol{w} = 0 \text{ として } Y \text{ 全体で平均}) \tag{9.24}$$

となる。次の次数の可解条件から $\nabla_x\cdot\bar{\boldsymbol{u}} = 0$ が出て、Darcy 則 (9.21) が得られる。

K が対称正定値であることもセル問題から示せる。(9.23) に $\boldsymbol{w}^i$ を掛けて Y_f で積分し部分積分すると、圧力の項は $\nabla\cdot\boldsymbol{w}^i = 0$ と周期性・すべりなし条件で消え、

$$\int_{Y_f} \nabla \boldsymbol{w}^i : \nabla \boldsymbol{w}^j \,\mathrm{d}y = \int_{Y_f} w_j^i \,\mathrm{d}y = K_{ji}$$

($|Y| = 1$)。左辺は i,j について対称で、$\xi\cdot K\xi = \int |\nabla \boldsymbol{w}_\xi|^2 \geq 0$ である。等号が成り立たない（K が正定値になる）のは、流体の領域 Y_f がどの方向にも周期的につながっていて、ξ の向きに流れが通れるときである。平行平板のように一方向に閉じた孔では、その向きの成分が 0 になり K は半正定値にとどまる（例題で確かめる）。Darcy 則の透過率は、セルの中の粘性散逸を表す正定値の量として微視的方程式から決まる。この極限の厳密な正当化は Tartar が与え、その後 Allaire らが拡張した。

巨視的な構成則は極限として導けることがある

Ohm の法則・Fourier 則・Darcy 則は、どれも「流束は勾配に比例する」という巨視的な構成則で、比例係数は実験で測る物質定数として扱われてきた。均質化は、微視的な構造が周期的（またはエルゴード的）で、構造の大きさ ε と系の大きさ L が分離している（$\varepsilon/L \to 0$）ときに、

- 構成則の**形**（線型・局所的）が極限として正しいこと、
- 係数がセル問題の解で**計算できる**こと、
- 係数が満たす不等式（Voigt–Reuss、正定値性）

を定理として与える。どれも小さいパラメータ ε/L の極限という B 型の構造があって初めて言えることであり、次節以降の C 型と対照をなす。ε/L が小さくない（構造と系の大きさが同程度）なら、有効係数による記述そのものが不正確になる。

例題 9.4　平行平板の並んだ媒質の透過率　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

2 次元の周期セル $Y = [0,1)^2$ のうち、$0 < y_2 < h$（$0 < h < 1$）を流体、$h \leq y_2 < 1$ を固体の板とする。セルを周期的に並べると、y_1 方向に伸びる板と流路が交互に積み重なった媒質になる。

1. Stokes のセル問題 (9.23) を $j = 1$ と $j = 2$ について解き、透過率テンソル K を求めよ。
2. $\xi\cdot K\xi = \int_{Y_f}|\nabla \boldsymbol{w}_\xi|^2$ を $\xi = e_1$ で確かめよ。K は正定値か。本文の正定値性の議論はどんな前提を暗に置いているか。
3. $h = 1/2$、セルの大きさ $\ell = 0.1\,\mathrm{mm}$、水（$\mu = 1.0\times10^{-3}\,\mathrm{Pa\,s}$、$\nu = 1.0\times10^{-6}\,\mathrm{m^2/s}$）、板に平行な圧力勾配 $|\nabla p| = 1.0\times10^{4}\,\mathrm{Pa/m}$ のとき、平均流速と、細孔の大きさで測った

Reynolds 数を求めよ。Stokes 方程式から出発したことは正当か。

解答. **(1)** $j=1$：右辺 e_1 も流体領域も y_1 によらないので、$\boldsymbol{w}^1=(w(y_2),0)$、$\pi^1=$ 定数 と置いてみる。$\nabla_y\cdot\boldsymbol{w}^1=\partial_{y_1}w=0$ は自動的に満たされ、運動方程式は $-w''=1$、すべりなし条件は $w(0)=w(h)=0$ になる。解は

$$w(y_2)=\frac{y_2(h-y_2)}{2}$$

で、平板の間の Poiseuille 流である。セル全体で平均すると（固体部分は 0）$K_{11}=\int_0^h\frac{y_2(h-y_2)}{2}\mathrm{d}y_2=\frac{h^3}{12}$、$K_{21}=\langle w_2^1\rangle=0$。
$j=2$：$\boldsymbol{w}^2=0$、$\pi^2=y_2$ が $-\Delta\boldsymbol{w}^2+\nabla\pi^2=e_2$、$\nabla\cdot\boldsymbol{w}^2=0$、すべりなし条件をすべて満たす。$\pi^2=y_2$ は y_2 方向に周期的でないが、流体領域は y_2 方向に固体で区切られているので、各流路の中で別々に定義されていればよく、周期性の要請にかからない。したがって $K_{12}=K_{22}=0$ で、

$$K=\begin{pmatrix}h^3/12 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}.$$

板に垂直な方向には、どれだけ圧力勾配をかけても平均流は生じない。圧力が板で支えられるだけである。
(2) $\nabla\boldsymbol{w}^1$ の成分で 0 でないのは $\partial_{y_2}w=h/2-y_2$ だけなので $\int_{Y_f}|\nabla\boldsymbol{w}^1|^2=\int_0^h(h/2-y_2)^2\mathrm{d}y_2=\frac{h^3}{12}=K_{11}$ で、本文の式と一致する。しかし $\xi=e_2$ では $\boldsymbol{w}_\xi=0$ で $\xi\cdot K\xi=0$ となり、K は半正定値にとどまり正定値ではない。本文の議論の $\int|\nabla\boldsymbol{w}_\xi|^2>0$ は $\boldsymbol{w}_\xi\neq0$ を前提にしており、これは流体領域がすべての方向に周期的につながっていることに対応する。流体がある方向につながっていなければ、その方向の透過率は 0 になる。透過率の値も符号も、体積分率（ここでは h）だけでなく流路のつながり方という幾何で決まる。
(3) 透過率は長さの 2 乗の次元をもち、セルの大きさ ℓ を戻すと $\ell^2K_{11}=\ell^2h^3/12=(1.0\times10^{-4})^2/96\approx1.04\times10^{-10}\,\mathrm{m}^2$。Darcy 則 (9.21) より平均流速は

$$\bar u=\frac{\ell^2K_{11}}{\mu}|\nabla p|=\frac{1.04\times10^{-10}}{1.0\times10^{-3}}\times1.0\times10^{4}\approx1.04\times10^{-3}\,\mathrm{m/s}.$$

細孔の大きさで測った Reynolds 数は $\bar u\ell/\nu\approx1.04\times10^{-3}\times10^{-4}/10^{-6}\approx0.10$ で 1 より十分小さく、慣性項を落とした Stokes 方程式から出発したことと整合する（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。流速を上げて細孔 Reynolds 数が 1 を超えると慣性項が無視できなくなり、流速と圧力勾配の比例（Darcy 則の線型性）が崩れる。

9.5 乱流のクロージャー問題

★★★ 最重要 平均をとった方程式が閉じない構造と、閉じ方（モデル）が極限定理でない理由

9.5.1 Reynolds 平均と Reynolds 応力

非圧縮 Navier–Stokes（NS）方程式

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}+\frac{\partial(u_iu_j)}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\nu\Delta u_i,\qquad \frac{\partial u_j}{\partial x_j}=0 \tag{9.25}$$

を考える（添字の繰り返しは和、$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0$ を使って移流項を発散形に書いた）。乱流では $\boldsymbol{u}$ が時間・空間に激しく揺らぐので、知りたいのは個々の解でなく平均流である。平均 $\langle\cdot\rangle$（集団平均、あるいは十分長い時間平均）をとり、$u_i=U_i+u_i'$、$\langle u_i'\rangle=0$ と分ける。これを **Reynolds 分解**という。

例題 9.5　Reynolds 応力の出現と階層 ★★★ 最重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1. (9.25) の平均をとり、平均流 U_i の方程式を導け。平均は微分と交換し、線型であるとする。
2. 揺らぎ u_i' の方程式を書き、それを使って $R_{ij}=\langle u_i'u_j'\rangle$ の方程式の右辺に 3 次の相関 $\langle u_i'u_j'u_k'\rangle$ が現れることを示せ（他の項は書き下さなくてよい）。

解答. **(1)** 線型な項はそのまま平均に移る：$\langle \partial_t u_i\rangle=\partial_t U_i$、$\langle \partial_i p\rangle=\partial_i P$、$\langle \Delta u_i\rangle=\Delta U_i$。非線型項は

$$\langle u_iu_j\rangle=\langle (U_i+u_i')(U_j+u_j')\rangle=U_iU_j+U_i\langle u_j'\rangle+U_j\langle u_i'\rangle+\langle u_i'u_j'\rangle=U_iU_j+\langle u_i'u_j'\rangle.$$

$\partial_j U_j=0$ を使って移流項を戻すと

$$\frac{\partial U_i}{\partial t}+U_j\frac{\partial U_i}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i}+\nu\Delta U_i-\frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j},\qquad R_{ij}=\langle u_i'u_j'\rangle. \tag{9.26}$$

平均流の方程式に、未知の 2 次の相関 R_{ij}（$-\rho R_{ij}$ を **Reynolds 応力**という）が現れる。未知数は U_i,P の 4 個に対し、R_{ij} の 6 成分が増えて、方程式は閉じない。
(2) (9.25) から (9.26) を引くと

$$\frac{\partial u_i'}{\partial t}+U_j\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}+u_j'\frac{\partial U_i}{\partial x_j}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_i'u_j'-R_{ij}\right)=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}+\nu\Delta u_i'.$$

これに u_k' を掛け、添字 i,k を入れ替えた式と足して平均すると、R_{ik} の時間発展の式になる。左辺の $\partial_j(u_i'u_j')$ の項からは $\langle u_k'\partial_j(u_i'u_j')\rangle+\langle u_i'\partial_j(u_k'u_j')\rangle=\partial_j\langle u_i'u_j'u_k'\rangle$（$\partial_j u_j'=0$ を使った）が出る。したがって R_{ik} の方程式には 3 次の相関 $\langle u_i'u_j'u_k'\rangle$ が現れ、3 次の相関の方程式には 4 次が現れる、という無限の階層になる。

この構造は、第 6 章の BBGKY 階層（k 体の縮約密度行列の方程式に $k+1$ 体が現れる）、第 8 章の Boltzmann 方程式のモーメント階層（n 次のモーメントの方程式に $n+1$ 次が現れる）と同じである。非線型（2 次）の項を平均すると、必ず一つ上の相関が現れる。階層は厳密だが、それを有限で打ち切るには「上の相関を下の相関で表す」関係、すなわち**クロージャー**（閉包）が要る。

9.5.2　第 6 章・第 8 章との違い：なぜ乱流では閉じないのか

第 6 章の平均場極限では、粒子数 $N\to\infty$ で相関が消え（カオスの伝播）、2 体密度が 1 体密度の積に分解した。第 8 章の流体力学極限では、Knudsen 数（平均自由行程 ℓ と流れの代表長 L の比）$\mathrm{Kn}\to 0$ で、衝突が分布を局所 Maxwell 分布に急速に緩和させ、高次のモーメントが密度・流速・温度の 5 つの場で決まった。Chapman–Enskog 展開の次の次数から出てくる粘性係数も、ℓ/L の冪展開の係数として計算できた。

乱流で同じことを試みると、分子の役割を「渦」が、平均自由行程の役割を渦の大きさが担うことになる。Prandtl の**混合距離**の考え方はまさにこの類推で、渦が運動量を混合する距離 ℓ_m を平均自由行程に見立て、渦粘性 $\nu_t=\ell_m^2|\partial U/\partial y|$ を分子粘性と同じ形で書く。しかし類推は次の点で破綻する。

- **スケール分離がない。**乱流のエネルギーを担う最大の渦の大きさは、平均流が変化する長さ L と同程度である。Knudsen 数に相当する比 ℓ_m/L は小さくない。
- **緩和先の分布が分からない。**気体の分子は衝突で Maxwell 分布という既知の平衡に急速に緩和するが、乱流の揺らぎが平均流の時間尺度に比べて速く緩和する先の「平衡分布」は知られていない。
- **大きい Reynolds 数は助けにならない。**$1/\mathrm{Re}$ は小さいパラメータだが、$\mathrm{Re}\to\infty$ で揺らぎは消えず、むしろあらゆるスケールに広がる。極限は特異的で、極限の対象（Euler 方程式の弱解の統計）について閉じた方程式は得られていない。

つまり乱流の平均方程式には、極限をとれば閉じるような小さいパラメータも、閉じさせる構造（周期性、局所平衡）もない。これが乱流のクロージャー問題が C 型である理由である。

9.5.3 閉じ方の例：渦粘性モデル

工学で標準的に使われる閉じ方は、Boussinesq の**渦粘性仮説**

$$-R_{ij} = \nu_t\Big(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\Big) - \frac{2}{3}k\,\delta_{ij}, \qquad k = \tfrac{1}{2}\langle u_i' u_i'\rangle \tag{9.27}$$

である（δ_{ij} の項は両辺のトレースを合わせるため。左辺のトレースは $-2k$、右辺第 1 項のトレースは $2\nu_t \nabla\cdot\boldsymbol{U} = 0$）。これは「Reynolds 応力は分子粘性の応力と同じ形をしている」という仮定であり、未知の 6 成分を 1 つのスカラー ν_t に押し込む。ν_t をどう決めるかでモデルが分かれる。

- 混合距離モデル：$\nu_t = \ell_m^2 |\partial U/\partial y|$ で、ℓ_m は壁からの距離に比例するなどと経験的に与える。
- k–ε モデル：$\nu_t = C_\mu k^2/\varepsilon$（$\varepsilon$ はエネルギー散逸率。次元は $[k] = \mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-2}$、$[\varepsilon] = \mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-3}$ で、k^2/ε は確かに動粘性の次元 $\mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-1}$ をもつ）。k と ε には輸送方程式を立てるが、その中の未知の相関項もまたモデル化される。標準的な定数 $C_\mu = 0.09$、$C_{\varepsilon 1} = 1.44$、$C_{\varepsilon 2} = 1.92$ は、一様せん断流・減衰乱流・壁近くの対数領域などの実験に合わせて決められたものである。

どの段階にも、ある極限で正しくなることを示す定理はない。正当化の代わりにあるのは、特定の流れ（平板境界層、管内流）での実験との一致と、「R_{ij} は半正定値でなければならない」（実現可能性）のような満たすべき条件である。渦粘性モデルは、平均流の勾配が強く回転を伴う流れなどで系統的に誤ることが知られている。

9.5.4 Kolmogorov の理論：次元解析と一つの厳密な結果

閉じない中で、乱流の統計について言える数少ない普遍的な結果が Kolmogorov（1941 年）の理論である。

仮定。十分大きな Reynolds 数で、大きな渦からエネルギーが注入され、小さな渦で粘性により散逸する。単位質量あたりのエネルギー散逸率 ε は、$\nu \to 0$ でも有限の値に残る（**異常散逸**）。エネルギーを注入する尺度 L と散逸する尺度 η の間の**慣性領域** $\eta \ll r \ll L$ では、揺らぎの統計は局所的に一様・等方的で、ε と尺度 r だけで決まり、ν にも L にもよらない。

例題 9.6　Kolmogorov スペクトルの次元解析 ★★ 重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1. エネルギースペクトル $E(k)$（$\int_0^\infty E(k)\,\mathrm{d}k = k_{\text{乱流}}$、波数あたりの運動エネルギー）が慣性領域で ε と波数 k だけで決まるとして、$E(k) = C_K \varepsilon^{\alpha} k^{\beta}$ の指数を求めよ。
2. 散逸が起きる尺度 η が ν と ε だけで決まるとして、η を求めよ。
3. 速度差の p 次の構造関数 $S_p(r) = \langle(\delta u_\parallel(r))^p\rangle$ について、同じ仮定から $S_p \propto (\varepsilon r)^{p/3}$ を導け。

解答. **(1)** 次元は $[E] = [\text{速度}^2]/[k] = \mathrm{L}^3\mathrm{T}^{-2}$、$[\varepsilon] = \mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-3}$、$[k] = \mathrm{L}^{-1}$。$\mathrm{L}^3\mathrm{T}^{-2} = \mathrm{L}^{2\alpha-\beta}\mathrm{T}^{-3\alpha}$ から $-2 = -3\alpha$、$3 = 2\alpha - \beta$。よって $\alpha = 2/3$、$\beta = -5/3$：

$$E(k) = C_K\,\varepsilon^{2/3} k^{-5/3}.$$

（検算 `scripts/verify_ch09.py`。C_K は無次元の定数で、実験ではおよそ 1.5。）
(2) $\eta = \nu^a \varepsilon^b$ とおくと、$\mathrm{L} = \mathrm{L}^{2a+2b}\mathrm{T}^{-a-3b}$。$2a+2b=1$、$a+3b=0$ から $a = 3/4$、$b = -1/4$：$\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$。$\varepsilon \sim U^3/L$（大きな渦がその回転時間 L/U でエネルギー U^2 を手放す）とおくと $L/\eta \sim \mathrm{Re}^{3/4}$ となり、Reynolds 数とともに慣性領域が広がる。
(3) δu の次元は LT^{-1}、εr の次元は $\mathrm{L}^3\mathrm{T}^{-3}$ なので、ε と r から作れる速度は $(\varepsilon r)^{1/3}$ だけである。よって $S_p = C_p(\varepsilon r)^{p/3}$。$p=2$ の $S_2 \propto r^{2/3}$ を Fourier 変換すると $E(k) \propto k^{-5/3}$ となり、(1) と整合する。

この結果は NS 方程式から導かれたものではなく、**仮定と次元解析**から出ている。そして実験では、p が大きいと構造関数の指数が $p/3$ からずれる（間欠性。強い散逸が空間的に偏在するため、ε の揺らぎが統計に影響する）ことが知られている。すなわち仮定の一部（ε の平均値だけで統計が決まる）は厳密には成り立たない。

例外が $p=3$ である。一様・等方・定常な乱流で、上の異常散逸を仮定すると、NS 方程式から導かれる 2 点相関の厳密な関係（Kármán–Howarth の方程式）を使って

$$S_3(r) = \langle (\delta u_\parallel(r))^3 \rangle = -\frac{4}{5}\varepsilon\, r \qquad (\eta \ll r \ll L) \tag{9.28}$$

が導ける（Kolmogorov の **4/5 則**）。係数 $-4/5$ まで含めて決まるのは、この式が次元解析でなく方程式そのものからの帰結だからである。ただし前提の「異常散逸」（$\nu \to 0$ で ε が 0 にならないこと）自体は実験事実であって、NS 方程式から証明されたものではない。4/5 則は、C 型に満ちた乱流理論の中で「仮定を明示すれば厳密に言える」数少ない地点であり、モデルの検証の基準として使われる。

9.6 Galerkin 打ち切りの教訓：Lorenz 方程式

★★ 重要　A 型の射影を非線型・長時間に使うと、誤差を制御する定理がなくなる

9.6.1 Rayleigh–Bénard 対流から 3 変数へ

下から加熱された流体層（Rayleigh–Bénard 対流）を、2 次元・Boussinesq 近似・上下の境界で自由すべり、という最も単純な設定で考える。流れ関数 $\psi(x,z,t)$ と、線型な温度分布からのずれ $\theta(x,z,t)$ を未知数とし、層の厚さを H とする。Saltzman は ψ, θ を 2 重 Fourier 級数に展開し、有限個のモードで打ち切った常微分方程式系を数値的に調べた。Lorenz（1963 年）はそのうち最も少ない 3 つのモード

$$\psi \propto X(t)\sin\frac{\pi a x}{H}\sin\frac{\pi z}{H}, \qquad \theta \propto Y(t)\cos\frac{\pi a x}{H}\sin\frac{\pi z}{H} - Z(t)\sin\frac{2\pi z}{H} \tag{9.29}$$

だけを残し、方程式をこれらのモードの上に射影した。これは第 4 章の Galerkin 法そのもの（A 型の射影）である。

射影で何が捨てられたかを具体的に見る。非線型項は Jacobi 行列式 $J(\psi,\theta) = \psi_x\theta_z - \psi_z\theta_x$ の形で現れる。$k = \pi a/H$、$m = \pi/H$ と書くと、直接計算により（検算 `scripts/verify_ch09.py`）

$$\begin{aligned} J\big(\sin kx\sin mz,\ \cos kx\sin mz\big) &= \frac{km}{2}\sin 2mz, \\ J\big(\sin kx\sin mz,\ \sin 2mz\big) &= km\cos kx\,\big(\sin 3mz - \sin mz\big). \end{aligned}$$

1 つ目は Z のモードそのものなので残る。2 つ目のうち $\cos kx\sin mz$ は Y のモードとして残るが、$\cos kx\sin 3mz$ は 3 つのモードの外にあり、**捨てられる**。渦度の方程式の非線型項 $J(\psi,\nabla^2\psi)$ は、単一モードでは $\nabla^2\psi \propto \psi$ なので 0 になる。こうして得られるのが Lorenz 方程式

$$\dot X = \sigma(Y - X), \qquad \dot Y = X(r - Z) - Y, \qquad \dot Z = XY - bZ \tag{9.30}$$

である。時間は熱拡散の時間で無次元化してあり、$\sigma = \nu/\kappa$ は Prandtl 数、$r = \mathrm{Ra}/\mathrm{Ra}_c$ は臨界値で割った Rayleigh 数、$b = 4/(1+a^2)$ である。自由すべり境界での臨界 Rayleigh 数は $\mathrm{Ra}_c(a) = \pi^4(1+a^2)^3/a^2$ で、$a^2 = 1/2$ で最小値 $27\pi^4/4 \approx 657.5$ をとる。このとき $b = 8/3$ となる。Lorenz が使った値 $\sigma = 10$、$b = 8/3$、$r = 28$ はここから来ている（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

例題 9.7　Lorenz 方程式の固定点と対流の発生　★★ 重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

1. (9.30) の固定点をすべて求めよ。
2. 原点の線型安定性を調べ、$r = 1$ で安定性が変わることを示せ。これは物理的に何に対応するか。

3. $\sigma=10$、$b=8/3$、$r=28$ での非自明な固定点の座標を数値で書け。

解答. **(1)** $\dot X=0$ から $Y=X$。$\dot Z=0$ から $Z=X^2/b$。$\dot Y=0$ に代入して $X(r-1-X^2/b)=0$。よって原点 $(0,0,0)$ と、$r>1$ のときに限り $C_\pm=\bigl(\pm\sqrt{b(r-1)},\ \pm\sqrt{b(r-1)},\ r-1\bigr)$（複号同順）。

(2) 原点での Jacobi 行列は $\begin{pmatrix}-\sigma & \sigma & 0\\ r & -1 & 0\\ 0 & 0 & -b\end{pmatrix}$。$Z$ 方向は固有値 $-b<0$。(X,Y) のブロックはトレース $-(\sigma+1)<0$、行列式 $\sigma(1-r)$。$r<1$ なら行列式が正で、2 つの固有値はともに実部負となり原点は安定。$r>1$ なら行列式が負で、正と負の固有値をもつ鞍点となり不安定。原点は「流れがなく熱伝導だけで熱を運ぶ状態」、$C_\pm$ は「時計回り・反時計回りの定常な対流ロール」である。$r=1$、すなわち $\mathrm{Ra}=\mathrm{Ra}_c$ で熱伝導状態が不安定になり対流が始まる。これは元の PDE の線型安定性解析の結果と一致する。臨界点の近くの振る舞いは、3 モードの打ち切りが正しく再現する部分である。

(3) $b(r-1)=\frac{8}{3}\cdot 27=72$ なので $C_\pm=(\pm 6\sqrt{2},\ \pm 6\sqrt{2},\ 27)\approx(\pm 8.485,\ \pm 8.485,\ 27)$。この 2 点は $r>r_H=\sigma(\sigma+b+3)/(\sigma-b-1)\approx 24.74$ で不安定になり（Hopf 分岐）、$r=28$ では軌道はどの固定点にも落ち着かない（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

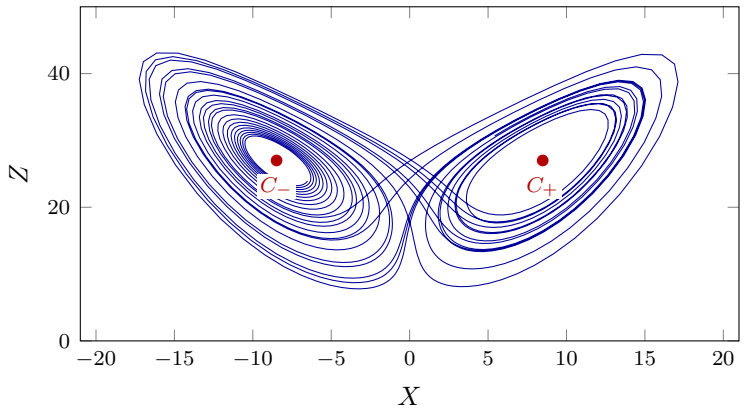


図 9.2　Lorenz 方程式（$\sigma=10$、$b=8/3$、$r=28$）の軌道の (X,Z) 面への射影（$5\le t\le 30$）。軌道は二つの不安定な固定点 $C_\pm$ の周りを不規則に行き来する。

9.6.2 打ち切った系のカオスは元の系の縮図か

$r=28$ の Lorenz 方程式は、決定論的なのに非周期的で、初期値の微小な差が指数的に拡大する（最大 Lyapunov 指数はおよそ 0.9。検算 `scripts/verify_ch09.py`）。軌道は図 9.2 のような奇妙なアトラクタに乗る。このアトラクタが本当に存在する（数値誤差の産物でない）ことは、Tucker による計算機援用証明で確かめられた。Lorenz 方程式は「決定論的な系がカオスを示しうる」ことの模範例として、数学的にも物理的にも大きな意味をもつ。

しかし、このカオスが元の対流の PDE の振る舞いを忠実に縮めたものだという保証はない。$r=28$ は Ra が臨界値の 28 倍の状態で、実際の対流はそこでは 3 次元的な構造をもち、2 次元・3 モードの記述とは対応しない。捨てたモード $\cos kx\sin 3mz$ は、臨界点の近くでは振幅が小さく無視できるが、臨界から遠い所では小さい理由がない。より多くのモードを残した打ち切り系では、同じパラメータでの振る舞いが変わりうる。

この状況を、第 4 章の線型問題の Galerkin 法と比べる。線型の楕円型問題では、部分空間 V_h 上の Galerkin 近似 u_h について

$$\|u-u_h\|_{H^1}\le \frac{\Lambda}{\lambda}\inf_{v\in V_h}\|u-v\|_{H^1} \tag{9.31}$$

（Céa の補題）が成り立った。誤差は「真の解を部分空間でどれだけよく近似できるか」で抑えられ、

解が滑らかなら少ないモードで十分である。時間発展の非線型問題では、打ち切りの誤差 $e(t)$（真の解の低次モードと打ち切り系の解の差）は、捨てたモードからの寄与を δ、ベクトル場の Lipschitz 定数を L とすると、Grönwall の不等式により

$$\|e(t)\| \le \|e(0)\| \mathrm{e}^{Lt} + \frac{\delta}{L}\bigl(\mathrm{e}^{Lt} - 1\bigr) \tag{9.32}$$

としか抑えられない（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。有限時間 t なら $\delta \to 0$ で誤差は 0 に行くが、評価は時間について指数的に悪化する。カオス系では e^{Lt} の増大は評価の甘さでなく実際に起きることで（Lyapunov 指数がその速さ）、個々の軌道を長時間追うことは原理的にできない。長時間で問えるのは統計（不変測度、時間平均）だけだが、「打ち切り系の統計が元の系の統計に近い」ことを保証する一般的な定理はない。

例外的に、散逸の強い系では正の結果がある。2 次元 NS 方程式では、有限個の Fourier モードの長時間の振る舞いが全体の長時間の振る舞いを決めること（決定モード、Foias–Prodi）が証明されている。また一部の散逸的な PDE では、有限次元の不変多様体（慣性多様体）の上に長時間の力学が乗ることが示されている。これらは「打ち切りが正当化できるための構造」が何であるかを示しているが、3 次元の対流や乱流には適用できない。

9.7 密度汎関数理論

★★★ 最重要 厳密な存在定理と、具体形が分からない汎関数を閉じる C 型の近似の境目

9.7.1 設定

N 個の電子からなる系のハミルトニアンを、原子単位で

$$H_v = T + W + V, \qquad T = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \Delta_i, \qquad W = \sum_{i<j} \frac{1}{|x_i - x_j|}, \qquad V = \sum_{i=1}^{N} v(x_i) \tag{9.33}$$

と書く（スピンは記号から省く）。T と W はどの原子・分子でも共通で、系ごとに違うのは原子核がつくる外部ポテンシャル v だけである。反対称な波動関数 ψ の 1 粒子密度を

$$\rho_\psi(x) = N \int |\psi(x, x_2, \dots, x_N)|^2 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_N \tag{9.34}$$

とすると、$\langle \psi, V\psi \rangle = \int v \rho_\psi \, \mathrm{d}x$ となる。外部ポテンシャルのエネルギーは密度だけで決まる。第 5 章の Hartree–Fock 近似は波動関数を Slater 行列式に制限する A 型の近似だった。DFT は、$3N$ 変数の波動関数の代わりに 3 変数の密度 ρ を基本変数にとる。

9.7.2 Hohenberg–Kohn の定理

定理 9.10 (Hohenberg–Kohn の第 1 定理 ★★★ 最重要)**.** 二つの外部ポテンシャル v_1, v_2 について、H_{v_1}、H_{v_2} がそれぞれ縮退のない基底状態 ψ_1, ψ_2 をもち、その密度が等しい（$\rho_{\psi_1} = \rho_{\psi_2} = \rho$）とする。このとき $v_1 - v_2$ は定数である。すなわち、縮退のない基底状態の密度は、外部ポテンシャルを定数の差を除いて決める。

証明. $v_1 - v_2$ が定数でないと仮定して矛盾を導く。基底エネルギーを E_1, E_2 とする。
第 1 段（ψ_1 と ψ_2 は異なる）。もし $\psi_1 = \psi_2 = \psi$（位相を除いて）なら、二つの固有値方程式を引いて $\bigl(\sum_i (v_1 - v_2)(x_i) - (E_1 - E_2)\bigr)\psi = 0$。$\psi$ が正の測度の集合上で 0 にならない（ほとんど至る所で 0 でない）なら、$\sum_i g(x_i) = E_1 - E_2$（$g = v_1 - v_2$）がほとんど至る所で成り立つ。$x_2, \dots, x_N$ を固定して x_1 だけ動かすと $g(x_1)$ が定数となり、仮定に反する。
第 2 段（変分原理）。ψ_2 は H_{v_1} の基底状態ではない（H_{v_1} の基底状態は縮退がなく ψ_1 だけで、第 1 段より

$\psi_2 \neq \psi_1$）。したがって変分原理（第 3 章）により厳密な不等号で

$$E_1 < \langle \psi_2,\, H_{v_1}\psi_2\rangle = \langle \psi_2,\, H_{v_2}\psi_2\rangle + \int (v_1 - v_2)\rho\,\mathrm{d}x = E_2 + \int (v_1 - v_2)\rho\,\mathrm{d}x.$$

1 と 2 の役割を入れ替えると $E_2 < E_1 + \int (v_2 - v_1)\rho\,\mathrm{d}x$。二つを足すと $E_1 + E_2 < E_1 + E_2$ となり矛盾する。 □

証明の中の微妙な一手

第 1 段の「固有関数が正の測度の集合上で 0 にならない」は、Schrödinger 作用素の固有関数の**一意接続性**（ある開集合上で 0 なら至る所で 0）から従う性質で、元の議論では暗黙に使われていた。Coulomb ポテンシャルのような特異性をもつ多体の作用素についてこれを厳密に示すことは自明でなく、比較的最近になって整備された。第 2 段の証明は 3 行で終わるが、定理の主張の重さ（3 変数の関数が $3N$ 変数の問題の全情報を決める）に比べてその証明は驚くほど短い。定理は「決まる」と言うだけで、ρ から v を**どう**求めるかは何も言わない。

定理から、ρ が v を（定数を除いて）決め、v が H_v を決め、H_v が基底状態 ψ を決める。したがって基底状態のすべての性質は ρ の汎関数であり、特に

$$F_{\mathrm{HK}}[\rho] = \langle \psi_\rho,\, (T+W)\psi_\rho\rangle$$

が定義でき、$E_v = \min_\rho \{F_{\mathrm{HK}}[\rho] + \int v\rho\}$ という密度についての変分原理（Hohenberg–Kohn の第 2 定理）が成り立つ。問題は F_{HK} の定義域である。F_{HK} は、ある v の基底状態の密度として現れる ρ（v **表現可能**な密度）の上でしか定義されない。どの ρ が v 表現可能かは分かっておらず、表現可能でない密度が存在することも示されている。変分原理の探索範囲が分からないのでは、変分法として使えない。

9.7.3 Levy–Lieb の制約付き探索と Lieb の凸解析

定義 9.11 (Levy–Lieb の汎関数)**.** 密度 $\rho \geq 0$、$\int \rho = N$、$\sqrt{\rho} \in H^1(\mathbb{R}^3)$ を満たす ρ（このような ρ はどれも有限な運動エネルギーをもつ反対称な ψ の密度として実現できる。これを N 表現可能という）について

$$F_{\mathrm{LL}}[\rho] = \inf\bigl\{\langle \psi,\, (T+W)\psi\rangle \;:\; \psi \text{ は反対称で正規化され、} \rho_\psi = \rho\bigr\} \tag{9.35}$$

と定める。「その密度を与える波動関数のうち、運動エネルギーと電子間反発の和が最小のもの」の値である。

命題 9.12 (制約付き探索による変分原理 ★★★ 最重要)**.** 任意の v について

$$E_v := \inf_\psi \langle \psi,\, H_v\psi\rangle = \inf_\rho \Bigl\{F_{\mathrm{LL}}[\rho] + \int v\rho\,\mathrm{d}x\Bigr\} \tag{9.36}$$

（右辺の inf は N 表現可能な ρ 全体）。v 表現可能な ρ では $F_{\mathrm{LL}}[\rho] = F_{\mathrm{HK}}[\rho]$ である。

証明. 波動関数全体についての inf を、「まず密度を固定して ψ を動かし、次に密度を動かす」二段に分ける。$\langle \psi,\, H_v\psi\rangle = \langle \psi,\, (T+W)\psi\rangle + \int v\rho_\psi$ の第 2 項は密度を固定すれば定数なので

$$\inf_\psi \langle \psi,\, H_v\psi\rangle = \inf_\rho \Bigl[\inf_{\psi:\rho_\psi=\rho} \langle \psi,\, (T+W)\psi\rangle + \int v\rho\Bigr] = \inf_\rho \Bigl[F_{\mathrm{LL}}[\rho] + \int v\rho\Bigr].$$

ρ が v の基底状態 ψ_ρ の密度なら、$\rho_\psi = \rho$ を満たす任意の ψ について $\langle \psi,\, (T+W)\psi\rangle + \int v\rho = \langle \psi,\, H_v\psi\rangle \geq \langle \psi_\rho,\, H_v\psi_\rho\rangle = F_{\mathrm{HK}}[\rho] + \int v\rho$。したがって $F_{\mathrm{LL}}[\rho] \geq F_{\mathrm{HK}}[\rho]$、$\psi = \psi_\rho$ で等号がとられる。 □

この定式化は v 表現可能性の問題を**回避**する。探索範囲は N 表現可能な密度で、これは簡単な条件で特徴付けられている。Hohenberg–Kohn の定理（一意性）は、この変分原理を使うためにはもは

や必要ない。

Lieb はさらにこの構造を凸解析の言葉で整理した。主張だけを述べる。基底エネルギー E_v を v の関数と見ると、E_v は v についてのアフィン関数 $\langle \psi, H_v \psi \rangle$ の下限なので**凹関数**である。そこで Legendre–Fenchel 変換

$$F_{\mathrm{L}}[\rho] = \sup_{v} \Big\{ E_v - \int v\rho \,\mathrm{d}x \Big\} \tag{9.37}$$

を定義すると、F_{L} は凸で下半連続な汎関数になり、$E_v = \inf_\rho \{F_{\mathrm{L}}[\rho] + \int v\rho\}$ が成り立つ（$\rho \in L^1 \cap L^3$、$v \in L^{3/2} + L^\infty$ という対になる関数空間の上で）。F_{L} は F_{LL} の凸包（混合状態にまで探索を広げた汎関数）に一致する。E_v と F_{L} の関係は、熱力学で内部エネルギーと自由エネルギーが Legendre 変換で結ばれるのと同じ構造である。凸性があるので、汎関数の性質（下半連続性、最小値の存在）を一般論から議論できる。ただし F_{L} の微分可能性は自明でなく、Kohn–Sham 方程式の導出で使う「汎関数微分」の存在は数学的にはなお微妙な点として残っている。

9.7.4 Kohn–Sham 方程式

F_{LL} は存在するが、その具体形は分からない。N 電子問題を解かずに $F_{\mathrm{LL}}[\rho]$ を計算する方法がないからである。Kohn と Sham は、分からない部分をできるだけ小さくする書き換えを考えた。相互作用のない N 電子系の運動エネルギーを

$$T_s[\rho] = \inf\big\{ \langle \Phi, T\Phi \rangle \ : \ \Phi \text{ は Slater 行列式で } \rho_\Phi = \rho \big\} \tag{9.38}$$

と定義し、古典的な静電エネルギー（Hartree エネルギー）を $J[\rho] = \tfrac{1}{2}\iint \rho(x)\rho(y)/|x-y| \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$ とする。そして

$$E_{\mathrm{xc}}[\rho] := F_{\mathrm{LL}}[\rho] - T_s[\rho] - J[\rho] \tag{9.39}$$

を**交換相関汎関数**と定義する。これは定義なので、ここまでは何も近似していない。E_{xc} には、Pauli 原理による交換エネルギー、電子が互いを避ける相関エネルギー、そして相互作用による運動エネルギーの増分 $\langle \psi, T\psi \rangle - T_s$ が押し込まれている。

エネルギー $T_s[\rho] + J[\rho] + E_{\mathrm{xc}}[\rho] + \int v\rho$ を最小にする ρ が、ある Slater 行列式 $\Phi = \det(\phi_1, \dots, \phi_N)$ の密度 $\rho = \sum_i |\phi_i|^2$ として実現され（非相互作用 v 表現可能性の仮定）、E_{xc} が汎関数微分 $v_{\mathrm{xc}} = \delta E_{\mathrm{xc}}/\delta\rho$ をもつと仮定する。軌道 ϕ_i について正規直交性の制約のもとで変分をとると（Lagrange 乗数 ε_i）

$$\Big(-\frac{1}{2}\Delta + v(x) + v_{\mathrm{H}}(x) + v_{\mathrm{xc}}(x) \Big)\phi_i = \varepsilon_i \phi_i, \qquad v_{\mathrm{H}}(x) = \int \frac{\rho(y)}{|x-y|}\mathrm{d}y, \qquad \rho = \sum_{i=1}^{N} |\phi_i|^2 \tag{9.40}$$

が得られる。これが **Kohn–Sham 方程式**で、相互作用のない電子が有効ポテンシャル $v_s = v + v_{\mathrm{H}} + v_{\mathrm{xc}}$ の中を運動する 1 体の問題の形をしている。v_s が ρ に依存するので、Hartree–Fock と同じく自己無撞着に解く。

構造をまとめると、Kohn–Sham の枠組みは E_{xc} が厳密なら**厳密**であり、近似はすべて E_{xc} の選び方に集約される。運動エネルギーの大部分（T_s）を軌道で厳密に扱うので、Thomas–Fermi 理論（第 6 章）のように運動エネルギーを密度の局所式で近似したときの大きな誤差（原子の殻構造が出ない、分子が結合しない）は起きない。未知の部分を、全エネルギーの中で比較的小さな E_{xc} に押し込んだことが、この書き換えの要点である。

9.7.5 交換相関汎関数の近似：C 型の閉じ方

E_{xc} の厳密な形は存在が保証されるだけで分からない。実際の計算では近似形を使う。

- **局所密度近似（LDA）**：$E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LDA}}[\rho] = \int \rho(x)\, e_{\mathrm{xc}}\big(\rho(x)\big)\,\mathrm{d}x$。$e_{\mathrm{xc}}(n)$ は密度 n の一様電子気体の 1 電子あたりの交換相関エネルギーである。交換部分は解析的に求まり $e_{\mathrm{x}}(n) = -C_{\mathrm{x}} n^{1/3}$、$C_{\mathrm{x}} = \frac{3}{4}(3/\pi)^{1/3} \approx 0.7386$（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。相関部分は Ceperley と Alder の量子モンテカルロ計算を補間した式が使われる。
- **一般化勾配近似（GGA）**：密度の勾配も入れて $E_{\mathrm{x}}^{\mathrm{GGA}} = -C_{\mathrm{x}} \int \rho^{4/3} F_{\mathrm{x}}(s)$ とする。$s \propto |\nabla\rho|/\rho^{4/3}$ は無次元の勾配、F_{x} は増大因子。

- **混成汎関数**：Hartree–Fock 型の厳密交換エネルギーを一定の割合で混ぜる。B3LYP の 3 つの混合パラメータは、分子の熱化学データに合うように決められた。

どれも小さいパラメータの極限として導かれたものではなく、C 型の閉じ方である。それでも、正当化の完全な欠如ではない部分が二つある。

第一に、LDA はある極限で厳密である。一様電子気体ではもちろん厳密で、密度がゆっくり変化する極限（密度の変化の長さが局所的な Fermi 波長に比べて長い）では、LDA が厳密な汎関数の主要項を与えることが Lewin、Lieb、Seiringer によって数学的に証明されている。LDA は、B 型の極限で正しい式を、その極限から遠い原子・分子（密度が原子核の近くで急変し、外側で指数的に減衰する）に外挿して使っている。外挿がなぜ予想以上にうまくいくかについては、LDA の交換相関の「穴」が和則（穴に含まれる電子がちょうど 1 個であること）を満たしている、という説明がなされている。

第二に、厳密条件が正当化の代わりの制約として使われる。厳密な E_{xc} が満たすべき性質のうち証明できるものがいくつかあり、近似汎関数をそれに合わせて作る。代表例は次の二つである。

- **座標の一様スケーリング**：交換エネルギーは $\rho_\gamma(x)=\gamma^3\rho(\gamma x)$ について $E_{\mathrm{x}}[\rho_\gamma]=\gamma E_{\mathrm{x}}[\rho]$ を満たす（例題 9.8）。
- **Lieb–Oxford の下界**：電子間反発の期待値と古典的な静電エネルギーの差について $\langle\psi,W\psi\rangle - J[\rho_\psi]\ge -C_{\mathrm{LO}}\int\rho_\psi^{4/3}$ がすべての ψ で成り立ち、$C_{\mathrm{LO}}\le 1.68$（Lieb と Oxford の評価）。E_{xc} に対する下界を与える。

Perdew–Burke–Ernzerhof の GGA（PBE）は、経験的なパラメータを使わずに厳密条件だけから増大因子 $F_{\mathrm{x}}(s)=1+\kappa-\kappa/(1+\mu s^2/\kappa)$ を決めている。上限 $1+\kappa$ の $\kappa=0.804$ は、完全にスピン偏極した場合に局所的に Lieb–Oxford の界を満たす最大の値として選ばれている。実際、$2^{1/3}(1+\kappa)C_{\mathrm{x}}=2^{1/3}\times 1.804\times 0.7386\approx 1.679$ となる（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

例題 9.8　座標のスケーリングと厳密条件　★★ 重要

［オリジナル］標準的な題材を自作

N 電子の波動関数 ψ に対し、$\gamma>0$ として $\psi_\gamma(x_1,\dots,x_N)=\gamma^{3N/2}\psi(\gamma x_1,\dots,\gamma x_N)$ とおく（空間を $1/\gamma$ 倍に縮めた状態）。

1. ψ_γ が正規化されていること、$\langle\psi_\gamma,T\psi_\gamma\rangle=\gamma^2\langle\psi,T\psi\rangle$、$\langle\psi_\gamma,W\psi_\gamma\rangle=\gamma\langle\psi,W\psi\rangle$ を示せ。
2. $\rho_{\psi_\gamma}(x)=\gamma^3\rho_\psi(\gamma x)=:\rho_\gamma(x)$ を示せ。
3. LDA の交換エネルギー $E_{\mathrm{x}}^{\mathrm{LDA}}[\rho]=-C_{\mathrm{x}}\int\rho^{4/3}$ が $E_{\mathrm{x}}^{\mathrm{LDA}}[\rho_\gamma]=\gamma E_{\mathrm{x}}^{\mathrm{LDA}}[\rho]$ を満たすことを示せ。Thomas–Fermi の運動エネルギー $\int\rho^{5/3}$ はどう変わるか。

解答. **(1)** 変数変換 $x_i'=\gamma x_i$（Jacobi 行列式 γ^{-3N}）で $\int|\psi_\gamma|^2=\gamma^{3N}\gamma^{-3N}\int|\psi|^2=1$。$\nabla_{x_i}\psi_\gamma=\gamma^{3N/2}\gamma(\nabla\psi)(\gamma x)$ なので、運動エネルギー $\frac12\sum\int|\nabla_i\psi_\gamma|^2$ は同じ変数変換で γ^2 倍になる。$1/|x_i-x_j|=\gamma/|x_i'-x_j'|$ なので、電子間反発は γ 倍になる。

(2) 定義より $\rho_{\psi_\gamma}(x)=N\gamma^{3N}\int|\psi(\gamma x,\gamma x_2,\dots)|^2\mathrm{d}x_2\cdots$。$x_2,\dots,x_N$ について変数変換すると $\gamma^{-3(N-1)}$ が出て、$\gamma^3\rho_\psi(\gamma x)$ になる。

(3) $\int\rho_\gamma^{4/3}\mathrm{d}x=\gamma^4\int\rho(\gamma x)^{4/3}\mathrm{d}x=\gamma^4\gamma^{-3}\int\rho^{4/3}=\gamma\int\rho^{4/3}$。同様に $\int\rho_\gamma^{5/3}=\gamma^5\gamma^{-3}\int\rho^{5/3}=\gamma^2\int\rho^{5/3}$ で、(1) の運動エネルギーの γ^2 と一致する（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。

厳密な交換エネルギーは、T_s を最小にする Slater 行列式 Φ_ρ を使って $E_{\mathrm{x}}[\rho]=\langle\Phi_\rho,W\Phi_\rho\rangle-J[\rho]$ と定義される。(1) より T は一様に γ^2 倍されるので、ρ_γ に対する最小化の解は $(\Phi_\rho)_\gamma$ であり、W と J がともに γ 倍されることから $E_{\mathrm{x}}[\rho_\gamma]=\gamma E_{\mathrm{x}}[\rho]$ が従う。LDA の交換はこの厳密条件を満たす。一方、相関エネルギーは γ の単純な冪では変わらず、満たすべきなのは不等式の形の条件である。こうした条件を満たすように汎関数を作ることは、近似の正しさを保証しないが、物理的にあり得ない振る舞いを排除する。

DFT の実際の評価は、厳密に解ける極限（一様電子気体、1 電子系、強い圧縮の極限など）での一致、厳密条件の充足、そして量子化学の高精度計算や実験値からなる**ベンチマーク**集合での誤差統計によって行われる。LDA から GGA、混成汎関数へと進む系列は、パラメータを加えるごとにベンチマークの誤差を減らしてきたが、それは「ある極限で誤差が 0 に行く」という形の保証ではない。特

定の系（強相関電子系、分散力、自己相互作用誤差が目立つ系）では、どの近似汎関数も系統的に誤ることが知られている。

9.8 三つの型の中で C 型が残る理由

★★★ 最重要 近似が閉じるための構造の有無で、正当化できるものとできないものを分ける

この章で扱った近似を、第 1 章の 3 型の地図に置き直す。

表 9.2　この章の近似の型と、それを閉じさせている構造

近似	型	閉じさせる構造	数学が保証するもの
均質化・有効係数	B	周期性またはエルゴード性と $\varepsilon/L \to 0$	極限方程式、収束の意味（強／弱）、速さ、上下界
Darcy 則	B	同上（細孔の周期構造）	透過率の公式と正定値性
Lorenz の 3 モード	A の形	臨界点の近くでのモードの分離	臨界点の近くの分岐。長時間・強非線型では保証なし
渦粘性・k–ε	C	なし（スケール分離なし）	実現可能性などの必要条件のみ
4/5 則	厳密	一様性・等方性・異常散逸の仮定	仮定の下での厳密な関係
Kohn–Sham の枠組み	厳密	定義による書き換え	E_{xc} が厳密なら厳密
LDA・GGA・混成	C	なし（LDA はゆっくり変わる密度の極限で厳密）	厳密条件の充足

B 型の近似が閉じるのは、小さいパラメータ（ε/L、$1/N$、Kn、質量比）があり、しかもその極限で消える自由度（微細構造の振動、粒子間相関、非平衡の分布）を**既知の構造**が決めているからである。均質化では周期性がセル問題を与え、平均場極限では対称性とカオスの伝播が相関を消し、流体力学極限では局所 Maxwell 分布が高次モーメントを決めた。極限で消える自由度の行き先が分かっているので、残った自由度だけで方程式が閉じる。

C 型が残るのは、(i) 小さいパラメータがない（乱流では渦の大きさと平均流の尺度が同程度、分子の電子では交換相関の穴の大きさと密度変化の尺度が同程度）か、(ii) 小さいパラメータはあっても極限で消える自由度の行き先を決める構造がない（$\mathrm{Re} \to \infty$ の乱流）、のどちらかの場合である。このとき「未知の項を既知の量で表す」関係はどこからも出てこないので、物理的直観・次元解析・実験への当てはめで作るしかない。

C 型の近似を評価する方法は、それでも空ではない。この章で見た方法をまとめると次の三つである。

1. **厳密に解ける極限での一致**：LDA の一様電子気体、渦粘性モデルの壁近くの対数領域。C 型の近似の多くは、ある B 型の極限で正しい式を外挿したものである。
2. **厳密条件**：スケーリング則、Lieb–Oxford の下界、Reynolds 応力の実現可能性、4/5 則。近似の正しさは保証しないが、満たさない近似は排除できる。
3. **ベンチマーク**：信頼できる高精度の数値解（直接数値計算、高精度の量子化学計算）や実験値の集合との系統的な比較。

物理の近似の多くが「直観に基づく」と感じられるのは、C 型の近似が少なからず含まれているからである。B 型・A 型の近似についてはその直観を定理で裏付けられ、C 型の近似についてはその直観がどの極限で正しくどこから外挿なのかを特定できる。この区別が、微分方程式の理論が物理の近似に与える意味付けである。

例題 9.9　消す自由度の大きさで小さいパラメータを測る ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

直径 $D = 0.10\,\mathrm{m}$ の円管を、空気（動粘性率 $\nu = 1.5 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^2/s}$、平均自由行程 $\lambda = 6.8 \times 10^{-8}\,\mathrm{m}$）が Reynolds 数 $\mathrm{Re} = UD/\nu = 1.0 \times 10^5$ で流れている。

1. 平均流速 U と Knudsen 数 $\mathrm{Kn} = \lambda/D$ を求めよ。分子の自由度を消して流体方程式に移る近似（第 8 章）は、どの小さいパラメータで閉じているか。

2. Kolmogorov の長さ $\eta \sim D\,\mathrm{Re}^{-3/4}$ を見積もれ。η/D も小さいのに、Reynolds 平均の方程式がこの比で閉じないのはなぜか。
3. 壁からの距離 y の所で、Reynolds 応力を運ぶ渦の大きさを混合距離 $\ell_m = \kappa y$（$\kappa \approx 0.41$）とする。平均流速は対数則 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}y \propto 1/y$ に従い、尺度 y で変わる。消す自由度の大きさと残す自由度の変化の尺度の比を求め、$\mathrm{Re} \to \infty$ でこの比がどうなるかを述べよ。

解答. **(1)** $U = \mathrm{Re}\,\nu/D = 1.0 \times 10^5 \times 1.5 \times 10^{-5}/0.10 = 15\,\mathrm{m/s}$。$\mathrm{Kn} = 6.8 \times 10^{-8}/0.10 = 6.8 \times 10^{-7}$。流体方程式への移行で消すのは分子の速度分布の非平衡部分で、それが緩和する長さは平均自由行程 λ、残す密度・流速・温度が変わる長さは D である。比 Kn が 10^{-6} 程度と非常に小さいので、Chapman–Enskog 展開は Kn の冪で整理でき、Navier–Stokes 方程式は B 型の近似として閉じている。
(2) $\eta \sim 0.10 \times (10^5)^{-3/4} \approx 0.10 \times 1.78 \times 10^{-4} \approx 1.8 \times 10^{-5}\,\mathrm{m}$、$\eta/D \approx 1.8 \times 10^{-4}$（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。$\eta$ は粘性で散逸する最も小さい渦の大きさである。Reynolds 平均で消すのは揺らぎ u_i' の**すべて**で、その中には η 程度の小さい渦だけでなく、D に近い大きさの渦まで含まれる。Reynolds 応力 R_{ij} を主に担うのはエネルギーを多くもつ大きい渦の方なので、消す自由度の大きさは η でなく大きい渦の大きさで測らなければならない。η/D が小さいことは、散逸の起きる尺度が分離していることを意味するだけで、平均流の方程式を閉じさせる比にはならない。
(3) 比は $\ell_m/y = \kappa \approx 0.41$ である。これは y にも Re にもよらない定数で、$\mathrm{Re} \to \infty$ でも 0 にならない。均質化の ε/L や流体力学極限の Kn は、消す自由度が残す自由度に比べて限りなく細かくなる極限をとれたが、壁乱流の Reynolds 応力では、消す渦と平均流の変化がどこでも同じ尺度にある。展開のパラメータになる小さい比が無く、本節の (i) の場合に当たる。混合距離モデルや渦粘性モデルが定理でなく C 型の閉じ方にとどまるのは、このためである。

9.9 この章のまとめ

★★★ 最重要 章全体の要点

この章の要点

- 周期 ε の微細構造をもつ拡散方程式は、$\varepsilon \to 0$ で有効係数 A^* の方程式に近づく。1 次元では A^* は算術平均でなく調和平均 $\langle 1/a \rangle^{-1}$。
- 核心は収束の意味の区別：u_ε は強収束、流束は（1 次元では強く、多次元では弱く）収束、勾配は弱くのみ収束する。弱収束する量の積の極限は極限の積でない。
- 多次元の A^* はセル問題 (9.14) で決まり、変分特徴付けから $\langle A^{-1} \rangle^{-1} \le A^* \le \langle A \rangle$（Voigt–Reuss）。層状媒質で両方の界が実現する。
- 正当化は Tartar の振動試験関数（発散と回転の補償）または二スケール収束で行う。修正子 εu_1 を足すと勾配まで近似できる。
- Ohm・Fourier・Darcy の構成則は、周期性またはエルゴード性とスケール分離がある場合に、微視的方程式の極限として導ける（B 型）。
- 乱流の Reynolds 平均は BBGKY・モーメント階層と同じ構造で閉じず、スケール分離も局所平衡もないため、渦粘性・k–ε は C 型の閉じ方である。K41 は次元解析と仮定から、4/5 則は仮定の下で NS から厳密に出る。
- 非線型・長時間の Galerkin 打ち切り（Lorenz 方程式）は、線型問題の Céa の補題のような誤差評価をもたず、Grönwall の e^{Lt} でしか抑えられない。
- DFT は Hohenberg–Kohn・Levy–Lieb・Kohn–Sham までは厳密で、近似は E_{xc} に集約される。LDA・GGA・混成は C 型だが、極限での一致と厳密条件で制約される。

この章の前半では、均質化を B 型の近似として正当化した。小さいパラメータ ε/L と、周期性（あるいはエルゴード性）という構造が、セル問題を通じて有効係数を決め、Tartar の方法や二スケール収束が「どの量がどの意味で収束するか」まで含めて極限を確定した。後半で扱った乱流モデル（渦

粘性・k–ε）と DFT の交換相関汎関数（LDA・GGA・混成）は C 型であり、極限定理としての正当化はなく、厳密に解ける極限での一致・厳密条件・ベンチマークによって評価される。Lorenz 方程式は A 型の射影（Galerkin 打ち切り）の形をとるが、非線型・長時間の領域では A 型が本来もつ誤差の保証を失い、実質的に C 型と同じ立場に置かれる。Kohn–Sham の枠組みそのものと 4/5 則は、近似ではなく厳密な書き換え・厳密な帰結である。

総合問題　滑らかに振動する係数の均質化を、変分法と弱収束で読み直す ★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

周期 1 の係数 $a(y)=1+\delta\cos 2\pi y$（$0<\delta<1$）をもつ 1 次元の問題 (9.1) を、$f\equiv 1$ として考える。積分 $\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{d}\theta}{s+\delta\cos\theta}=\frac{2\pi}{\sqrt{s^2-\delta^2}}$（$s>\delta>0$）は既知としてよい。

(1) 算術平均 $\langle a\rangle$ と有効係数 a^* を求めよ。
（使う道具：第 9 章 §1 の 1 次元均質化定理）

(2) 変分特徴付け (9.18) に、1 項の試行関数 $\varphi(y)=\frac{c}{2\pi}\sin 2\pi y$ を入れて c について最小化し、a^* の上界を求めよ。Voigt の上界と比べ、δ の冪で展開した a^* と何次まで一致するかを調べよ。
（使う道具：第 9 章 §2 の変分特徴付けと Voigt–Reuss の上下界、第 4 章の Rayleigh–Ritz 法）

(3) (2) の上界と a^* の差は、試行関数の勾配の誤差 $\varphi'-\chi'$ の「a で重みをつけた 2 乗平均」に等しいことを示せ。試行関数の誤差が $\mathcal{O}(\delta^2)$ なのに上界の誤差が $\mathcal{O}(\delta^4)$ になる理由を述べ、$\delta=0.6$ で数値を確かめよ。
（使う道具：第 9 章 §2 の命題の証明、第 4 章の「エネルギーの誤差は波動関数の誤差の 2 乗」）

(4) $\delta=0.6$ のとき、勾配の誤差 $\|u_\varepsilon'-u_0'\|$ が $\varepsilon\to 0$ で近づく値を求めよ。
（使う道具：第 9 章 §1 の定理の (v)、第 2 章の弱収束）

(5) この問題で使った近似を第 1 章の 3 つの型に分け、どの段階でどの型の近似を使ったかを述べよ。
（使う道具：第 1 章の近似の 3 つの型、第 9 章 §8）

解答. **(1)**（第 9 章 §1）$\langle\cos 2\pi y\rangle=0$ なので $\langle a\rangle=1$。$\theta=2\pi y$ と置き換えると

$$\langle 1/a\rangle=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{d}\theta}{1+\delta\cos\theta}=\frac{1}{\sqrt{1-\delta^2}},\qquad a^*=\sqrt{1-\delta^2}.$$

$a^*<1=\langle a\rangle$ で、Cauchy–Schwarz による不等式と整合する。
(2)（第 9 章 §2、第 4 章）$\varphi'=c\cos 2\pi y$ で、1 次元では $\xi=1$ として

$$E(c)=\big\langle (1+c\cos 2\pi y)^2(1+\delta\cos 2\pi y)\big\rangle.$$

$\langle\cos\rangle=\langle\cos^3\rangle=0$、$\langle\cos^2\rangle=1/2$ を使って展開すると

$$E(c)=1+\frac{c^2}{2}+c\delta.$$

c について最小化すると $c=-\delta$ で、$E(-\delta)=1-\delta^2/2$。よって

$$a^*=\sqrt{1-\delta^2}\ \le\ 1-\frac{\delta^2}{2}\ \le\ 1=\langle a\rangle.$$

試行関数 $\varphi=0$ が Voigt の上界であり、1 項の試行関数を足すだけで上界が改良された。$a^*=1-\delta^2/2-\delta^4/8-\cdots$ なので、上界は δ^2 の項まで一致し、ずれは $\delta^4/8$ から始まる。1 次元では Reuss の下界 $\langle 1/a\rangle^{-1}$ が a^* そのものなので、上下界で挟むと $\sqrt{1-\delta^2}\le a^*\le 1-\delta^2/2$ となる。

(3)（第 9 章 §2 の命題の証明、第 4 章）命題 9.6 の証明で、試行関数を $\varphi = \chi + \psi$（χ はセル問題の解）と書くと、中央の項がセル問題により消えて

$$E(\varphi) - a^* = \big\langle a\,(\psi')^2 \big\rangle = \big\langle a\,(\varphi' - \chi')^2 \big\rangle$$

となった。上界の誤差は、試行関数の勾配の誤差の a で重みをつけた 2 乗平均そのものである。セル問題の解は (9.7) より $\chi' = a^*/a - 1 = \frac{\sqrt{1-\delta^2}}{1+\delta\cos 2\pi y} - 1 = -\delta\cos 2\pi y + \mathcal{O}(\delta^2)$ で、試行関数 $\varphi' = -\delta\cos 2\pi y$ はこの 1 次の項を正確にとらえている。勾配の誤差 $\varphi' - \chi'$ は $\mathcal{O}(\delta^2)$ で、上の式によりエネルギーの誤差はその 2 乗の $\mathcal{O}(\delta^4)$ になる。これは第 4 章で見た「エネルギーの誤差は波動関数の誤差の 2 乗」と同じ構造で、最小化の問題では停留点のまわりで 1 次の変化が消えることから来る。
$\delta = 0.6$ では $a^* = \sqrt{0.64} = 0.8$、上界は $1 - 0.18 = 0.82$、差は 0.02 である。右辺を数値積分しても $\langle a(\varphi' - \chi')^2 \rangle = 0.0200$ が得られ、$\delta^4/8 = 0.0162$ に高次の項 $\delta^6/16 + \cdots$ が足された値になっている（検算 `scripts/verify_ch09.py`）。
(4)（第 9 章 §1、第 2 章）$b = 1/a$ とおく。(9.5) により $\|u_\varepsilon' - u_0'\|^2 \to \langle (b - \langle b\rangle)^2\rangle \int_0^1 \sigma_0^2 \mathrm{d}x$ で、$f \equiv 1$ では $\sigma_0 = 1/2 - x$、$\int_0^1 \sigma_0^2 = 1/12$ である。$\langle b^2 \rangle$ は与えられた積分を s で微分して求める。

$$\int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\theta}{(s + \delta\cos\theta)^2} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\frac{2\pi}{\sqrt{s^2 - \delta^2}} = \frac{2\pi s}{(s^2 - \delta^2)^{3/2}}$$

で $s = 1$ とおき、$\langle b^2 \rangle = (1 - \delta^2)^{-3/2}$。$\delta = 0.6$ では

$$\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2 = \frac{1}{0.512} - \frac{1}{0.64} = 1.953125 - 1.5625 = 0.390625,$$

$$\|u_\varepsilon' - u_0'\| \;\longrightarrow\; \sqrt{0.390625/12} \approx 0.180.$$

$u_\varepsilon \to u_0$ は一様収束でも、勾配は u_0' のまわりで振動し続け、その振れ幅は ε によらない。勾配は第 2 章の意味で弱収束しかしない。
(5)（第 1 章、第 9 章 §8）$\varepsilon \to 0$ で微細構造を有効係数 a^* に置き換える段階は B 型（極限）で、周期性とスケール分離 $\varepsilon \to 0$ が極限を閉じさせ、その結果は (1) と (4) のように「どの量がどの意味で収束するか」まで定理として確定した。(2) で有効係数を 1 項の試行関数で見積もった段階は A 型（射影）で、セル問題の解の空間を $\sin 2\pi y$ の張る部分空間に射影している。A 型であるから、(3) のように誤差が試行関数の近似の良さで評価され、項を増やせば a^* に収束する。この問題には C 型の段階が無く、どの段階の誤差も原理から評価できる。乱流モデルや交換相関汎関数との違いは、この点にある。