第 11 章

終章：何がどこまで正当化されているか

★★★ 最重要 巻全体の答えを 1 枚の表と 3 つの仕組みにまとめる

11.1 近似ごとの正当化の状況

★★★ 最重要 第 1 章の問い (i)〜(iii) への答えの一覧

第 1 章では、物理の近似について (i) 元の方程式とどういう数学的関係にあるか、(ii) 誤差について何が定理として言えるか、(iii) 物理的直観は定理のどの仮定に対応するか、を問うた。第 2〜10 章の結果を、近似ごとに表 11.1 にまとめる。「証明の状況」の欄は、この巻で述べた範囲の要約であり、各章の本文で主張の正確な形と前提を確認してほしい。

表 11.1: 物理の近似と、その数学的な正当化の状況

近似	型	数学が保証すること	証明の状況	破綻する場面
LCAO・基底展開・CI（第 4 章）	A	上界、基底を増やすと単調に下がる、完全系なら収束。速さは解の正則性で決まる	証明済み（min-max 原理・交互定理・Céa の補題）	収束は保証されるが遅い（カスプ、電子間の尖り）
Hartree・Hartree–Fock（第 5・10 章）	A（曲がった集合）	上界。中性原子・正イオンで最小解が存在	存在は証明済み（Lieb–Simon）。誤差（相関エネルギー）の評価は無い	結合の解離（静的相関）、負イオン
平均場極限（第 6 章）	B	$N \to \infty$・相互作用 $1/N$ で多体の解が積状態に近づく。誤差 $\mathcal{O}(1/N)$ 型の評価	古典の滑らかな相互作用、量子の有界な相互作用では証明済み。クーロンは部分的	粒子数が少ない、相互作用が強い・特異
Thomas–Fermi（第 6 章）	B	$Z \to \infty$ でエネルギーの比が 1 に近づく。Scott・Schwinger 補正	証明済み（Lieb–Simon ほか）	有限 Z の化学結合（Teller の定理）
$1/Z$ 展開・有効核電荷（第 10 章）	B と A	摂動 1 次は上界でもある。$1/Z$ の級数は収束半径が正	収束半径が正であることは証明済み（加藤）。ヘリウム（$1/Z = 0.5$）で収束することは数値研究による	負イオン（Z が臨界値に近い）
Born–Oppenheimer（第 7 章）	B	質量比 $\kappa = (m/M)^{1/4}$ による展開、電子・振動・回転の階層	電子のエネルギーにギャップがあれば証明済み	円錐交差（ギャップが閉じる）
境界層・WKB（第 7 章）	B	内部解と外部解の接合、誤差 $\mathcal{O}(\varepsilon)$ が一様に成り立つ	モデル問題・線型問題では証明済み。Navier–Stokes の非粘性極限は未解決	剥離、転回点
Boltzmann 方程式（第 8 章）	B	Boltzmann–Grad 極限で粒子系の 1 体分布が従う	短時間は証明済み（Lanford）。長時間はプレプリント段階	稠密な気体、長時間
流体方程式（第 8 章）	B	Kn $\to$ 0 で Euler・Navier–Stokes が出る。粘性率の式	弱解の意味で証明済み（非圧縮）。Navier–Stokes 自体の滑らかな解の大域存在は未解決	希薄気体、衝撃波の内部、壁近傍の Knudsen 層

近似	型	数学が保証すること	証明の状況	破綻する場面
均質化（第 9 章）	B	微細構造の周期 $\varepsilon \to 0$ で有効係数の方程式。関数は強く、勾配は弱く収束	証明済み（周期・ランダム）	スケール分離が無い媒質
乱流モデル（第 9 章）	C	なし（Kolmogorov の 4/5 則だけが例外的に導ける）	正当化の手段が無い	想定外の流れ（剥離・旋回など）
DFT の近似汎関数（第 9 章）	C	厳密な汎関数の存在（Hohenberg–Kohn）だけ。近似汎関数は上界も下界も保証しない	存在は証明済み、近似の評価は無い	強相関、分散力、電荷移動

表から読み取れることを 3 点挙げる。

第一に、**A 型の正当化はほぼ完成している**。線型部分空間への射影は、上界・単調性・収束の 3 つが一般的な定理で保証される。残っているのは「どれだけ速く収束するか」で、それは解の正則性の問題に帰着する。量子化学で基底関数の選び方が研究され続けているのは、正当化が欠けているからではなく、カスプのせいで収束が遅いからである。

第二に、**B 型は、極限そのものは証明できても、現実の系がその極限に十分近いかは別問題である**。平均場は $N \to \infty$ で、Thomas–Fermi は $Z \to \infty$ で正しいが、炭素原子（$Z = 6$）や水素分子がその極限に近いという保証は定理からは出てこない。定理が与えるのは誤差の次数（$\mathcal{O}(1/N)$、$\mathcal{O}(\kappa^2)$ など）までで、定数まで評価できる場合は限られる。

第三に、**C 型には内部の評価が無く、その位置に「厳密に解ける極限での一致」と「満たすべき厳密条件」が入る**。LDA が一様電子気体の極限で厳密になること、汎関数が Lieb–Oxford の下界を満たすことなどは、C 型の近似にとっての正当化の代わりである。

例題 11.1　Thomas–Fermi の比が 1 に近づく速さ　★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

第 6 章の Lieb–Simon の定理は、原子の基底エネルギー $E(Z)$ について $E(Z)/E^{\mathrm{TF}}(Z) \to 1$（$Z \to \infty$）を保証する。ここで $E^{\mathrm{TF}}(Z) = -0.7687\,Z^{7/3}$、次の補正は Scott 項 $+\frac{1}{2}Z^2$、その次は Schwinger 項 $-0.2699\,Z^{5/3}$ である（Hartree 単位）。

(1) ネオン（$Z = 10$、$E = -128.94$）とヘリウム（$Z = 2$、$E = -2.9037$）で E^{TF}/E を求めよ。

(2) Scott 項と TF 項の大きさの比が $c\,Z^{-1/3}$ の形になることを示し、c を求めよ。ネオンでの値も求めよ。

(3) TF 項だけで相対誤差を 1% 程度にするには、Scott 項の比を 0.01 にする必要がある。そのための Z を見積もり、この結果から B 型の定理について何が言えるかを述べよ。

解答. **(1)** ネオンでは $E^{\mathrm{TF}} = -0.7687 \times 10^{7/3} = -165.62$ なので $E^{\mathrm{TF}}/E = 165.62/128.94 = 1.284$。ヘリウムでは $E^{\mathrm{TF}} = -3.874$ で $E^{\mathrm{TF}}/E = 1.334$。どちらも比は 1 から 30% 前後ずれている。

(2) $\dfrac{\frac{1}{2}Z^2}{0.7687\,Z^{7/3}} = \dfrac{0.5}{0.7687}Z^{-1/3} = 0.650\,Z^{-1/3}$ なので $c = 0.650$。ネオンでは $10^{-1/3} = 0.464$ を掛けて 0.302 となり、(1) のずれ 28% と同じ大きさである。比が 1 からずれる主な原因は Scott 項で、そのずれは $Z^{-1/3}$ でしか小さくならない。

(3) $0.650\,Z^{-1/3} = 0.01$ を解くと $Z = (65.0)^3 \approx 2.75 \times 10^5$。周期表の原子は $Z \le 118$ なので、TF 項だけで 1% に届く原子は存在しない。定理が言うのは「$Z \to \infty$ で比が 1 に近づく」ことと近づく速さ $Z^{-1/3}$ までで、現実の Z でどれだけ近いかは、次の補正項の係数を求めて初めて分かる。実際、Scott 項と Schwinger 項まで足すとネオンで -128.15、比 0.994 になる（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。B 型の近似を使うときは、極限の定理に加えて補正項の大きさを

実際の値で確かめる必要がある、という表の第二の点を、この数字が示している。

11.2 繰り返し現れた 3 つの仕組み

★★★ 最重要 章をまたいで同じ数学が近似を支えている

章ごとに対象は違ったが、近似を正当化する数学の仕組みは 3 つしか出てこなかった。

11.2.1 変分原理

基底状態のエネルギーが $\inf\langle\psi, H\psi\rangle$ で与えられるという事実は、どんな試行関数の集合に制限しても上界が得られることを意味する（第 3 章の min-max 原理）。線型部分空間なら上界に単調性と収束が加わり（第 4 章）、Slater 行列式の集合のような曲がった集合なら上界だけが残る（第 5 章）。第 1 章のガウス変分、第 10 章の有効核電荷 Z' の変分も同じ仕組みである。変分原理が成り立つには H が自己共役で下に有界でなければならず、それを保証するのが Hardy の不等式と Kato–Rellich の定理だった（第 3 章）。

11.2.2 安定性評価（Grönwall 型の不等式）

近似解 $\tilde{u}$ が元の方程式を「残差 r だけ満たさない」とき、真の解との差は、残差の大きさと方程式の安定性（小さな入力の差がどれだけ増幅されるか）の積で抑えられる。第 2 章の Grönwall の不等式がこの形の原型で、第 6 章の Dobrushin の評価（経験測度と Vlasov 解の距離）、Pickl の数え上げ法（凝縮から外れた粒子の割合）、第 7 章の平均化定理・断熱定理、第 9 章の Galerkin 打ち切りの誤差は、どれもこの「残差 × 増幅率」の評価で書かれていた。増幅率は一般に e^{Lt} で時間とともに増えるので、この仕組みで得られる正当化は有限時間に限られることが多い。Lanford の定理が短時間しか言えないこと、Lorenz 方程式への打ち切りが長時間の挙動を保証しないことは、この限界の現れである。

11.2.3 コンパクト性と弱収束

解の存在を言うとき、また極限方程式を導くとき、近似列が何かに収束することを示す必要がある。無限次元では有界な列が収束するとは限らず、第 2 章で見たように「無限遠へ逃げる」「振動して弱極限で消える」「1 点に集中する」の 3 通りの失敗がある。Hartree–Fock の最小解の存在（第 5 章）は「逃げない」ことの証明であり、均質化（第 9 章）・低 Mach 数極限（第 8 章）・Reynolds 応力（第 9 章）は「振動する量の積の弱極限は弱極限の積ではない」ことから生じる現象だった。均質化で有効係数が算術平均でなく調和平均になること、乱流で平均流の方程式が閉じないことは、同じ数学的事実の 2 つの現れである。

閉じない階層と、それを閉じる 3 つの方法

この巻では「閉じない階層」が 3 回現れた。多体の Schrödinger 方程式から得た縮約密度行列の BBGKY 階層（第 6 章）、Boltzmann 方程式のモーメント方程式（第 8 章）、Navier–Stokes 方程式の Reynolds 平均（第 9 章）である。どれも、低次の量の方程式に高次の量が現れて方程式が閉じない。

平均場極限は、粒子数 $1/N$ という小さいパラメータのもとで積状態が保たれることを示して階層を閉じた（B 型）。流体力学極限は、Knudsen 数が小さいと分布が局所 Maxwell 分布に近づくことを示して閉じた（B 型）。乱流モデルには対応する小さいパラメータが無く、渦粘性という仮定で閉じた（C 型）。同じ形の問題が、小さいパラメータの有無によって B 型にも C 型にもなる。

例題 11.2　残差と増幅率で誤差を抑える ★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

初期値問題 $u' = u$、$u(0) = 1$ の近似解として、2 次の Taylor 多項式 $\tilde{u}(t) = 1 + t + \frac{1}{2}t^2$ をとる。

(1) 残差 $r(t) \coloneqq \tilde{u}' - \tilde{u}$ を求め、誤差 $e = u - \tilde{u}$ が満たす方程式を書け。

(2) $e(t)$ を積分の形で表し、$|e(t)| \le \big(\max_{0\le s\le t}|r(s)|\big)(\mathrm{e}^t - 1)$ を示せ。これが「残差 × 増幅率」の評価である。

(3) $t = 1$ と $t = 10$ で、この評価の値と実際の誤差を比べ、評価が何を正しく捉え、何を粗く見積もっているかを述べよ。

解答. **(1)** $\tilde{u}' = 1 + t$ なので $r = 1 + t - (1 + t + \frac{1}{2}t^2) = -\frac{1}{2}t^2$。$u' = u$ から $\tilde{u}' = \tilde{u} + r$ を引くと $e' = e - r = e + \frac{1}{2}t^2$、$e(0) = 0$ である。誤差は、残差を外力として受ける同じ方程式に従う。
(2) 定数変化法で $e(t) = \int_0^t \mathrm{e}^{t-s}\big(-r(s)\big)\mathrm{d}s$。$\mathrm{e}^{t-s}$ は正なので

$$|e(t)| \le \max_{0\le s\le t}|r(s)| \int_0^t \mathrm{e}^{t-s}\mathrm{d}s = \max_{0\le s\le t}|r(s)|\,(\mathrm{e}^t - 1).$$

e^{t-s} は時刻 s に入った小さな誤差が時刻 t までに何倍になるかを表す増幅率で、第 2 章の Grönwall の不等式で $L = 1$ とした場合にあたる。いまの残差では $\max|r| = \frac{1}{2}t^2$ なので、評価は $\frac{1}{2}t^2(\mathrm{e}^t - 1)$ である。
(3) 実際の誤差は $e(t) = \mathrm{e}^t - 1 - t - \frac{1}{2}t^2$（(2) の積分を計算しても同じ）。$t = 1$ では評価 0.859、実際 0.218。$t = 10$ では評価 1.10×10^6、実際 2.20×10^4 である（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。どちらの時刻でも、誤差が e^t で増えるという性質は評価と実際で一致している。$u' = u$ は不安定な方程式なので、増幅率 e^t は評価の都合で付いたものでなく、本当に誤差を増やしている。粗いのは残差を最大値で置き換えた部分だけで、そのため評価は実際の約 $t^2/2$ 倍になる。この例は、Grönwall 型の評価が有限時間でしか役に立たない理由を示している。増幅率が指数関数なので、残差をどれほど小さくしても、十分に長い時間のあとでは評価が意味を失う。

11.3　物理的直観の位置

★★ 重要　第 1 章の問い (iii) への答え

第 1 章では、物理的直観は A 型では「良い部分空間を選ぶこと」、B 型では「小さいパラメータを見つけること」にあたると述べた。各章を通して、この対応はもう少し具体的になった。

A 型で直観が選ぶ部分空間は、真の解の**特異性**をどれだけ表せるかで良し悪しが決まる。原子軌道（Slater 型）は核のカスプを正しく表すので LCAO はよい出発点になるが、電子どうしのカスプは 1 電子軌道の積では表せないので、CI の収束は遅い（第 4 章）。直観が「電子は原子のまわりにいる」ことまでは捉えても、「電子どうしがぶつかる点で波動関数が尖る」ことは捉えにくい。

B 型で直観が見つける小さいパラメータには、**それが小さいことが成り立たなくなる場所**が付随する。Born–Oppenheimer 近似は電子状態のギャップが閉じる円錐交差で、境界層理論は剥離点で、流体近似は衝撃波の内部や壁近傍で破綻する（第 7・8 章）。これらはどれも、小さいパラメータの効果が局所的に増幅される場所である。物理の直観は大域的なパラメータの大きさを見積もるのは得意だが、局所的に近似が破れる場所は、方程式の構造（ギャップ・係数の符号・特異点）を調べて初めて分かることが多い。

講義のフントの規則（第 10 章）は、直観が誤った理由付けをする例だった。「平行スピンの電子は近寄らないので反発が減る」という説明は、三重項のエネルギーが低いという結論は正しく予測するが、精密な計算ではエネルギーが下がる仕組みが違う。結論が正しいことは、理由付けが正しいことを意味しない。近似を数学の側から見る価値は、結論だけでなく理由付けを検査できる点にある。

例題 11.3　小さいパラメータが局所的に大きくなる場所 ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

調和振動子 $V(x)=\frac{1}{2}x^2$（$\hbar=m=1$）の準位 $E=n+\frac{1}{2}$ を WKB 近似で扱う。WKB 近似が使える条件は、局所的な波長 $1/p(x)$ の変化が緩やかなこと、すなわち $|\mathrm{d}(1/p)/\mathrm{d}x|\ll 1$ である（第 7 章）。ここで $p(x)=\sqrt{2E-x^2}$、転回点は $x=a:=\sqrt{2E}$。

(1) $\mathrm{d}(1/p)/\mathrm{d}x$ を計算し、転回点に近づくと発散することを示せ。

(2) $|\mathrm{d}(1/p)/\mathrm{d}x|=1$ となる点 x_* と転回点の距離 $\delta=a-x_*$ が、E が大きいとき $\delta\approx\frac{1}{2}a^{-1/3}$ となることを示せ。

(3) $n=10$ で x_* と δ を数値で求め、古典的に許される領域 $[-a,a]$ のうち WKB が使えない部分の割合を求めよ。

解答. **(1)** $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(2E-x^2)^{-1/2}=x(2E-x^2)^{-3/2}=x/p^3$。$x\to a$ で $p\to 0$ なので発散する。準位がどれほど高くても（$1/E$ がどれほど小さくても）転回点の近くでは条件が破れる。
(2) $x=a-\delta$ とおくと $p^2=(a-x)(a+x)\approx 2a\delta$、分子の x は a で近似できるので、条件 $x=p^3$ は $a\approx(2a\delta)^{3/2}$。両辺を 2/3 乗して $a^{2/3}=2a\delta$、よって $\delta\approx\frac{1}{2}a^{-1/3}$。
(3) $E=10.5$、$a=\sqrt{21}=4.583$。方程式 $x=(21-x^2)^{3/2}$ を数値で解くと $x_*=4.285$、$\delta=0.298$ で、(2) の漸近形 $\frac{1}{2}a^{-1/3}=0.301$ とよく合う（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。両端を合わせて $2\delta/(2a)=\delta/a=0.065$、つまり許される領域の約 6.5% で WKB が使えない。大域的な小さいパラメータ $1/E\approx 0.1$ を見ているだけでは、この局所的な破れは見えない。破れる場所は「$p=0$」という方程式の構造から決まり、第 7 章でこの領域を Airy 関数でつなぐ必要があったのはこのためである。

11.4　近似を使うときの手順

★★ 重要　この巻の結論を実際の計算に持ち帰る

近似を評価する手順

1. その近似が A・B・C のどの型かを判定する。同じ名前の近似が 2 つの型をもつ場合（Hartree–Fock、$1/Z$ 展開）は両方の見方を確認する。
2. **A 型なら**：部分空間を広げて収束を確かめる（基底の外挿）。上界しか得られないので、可能なら Temple や Weinstein の下界で誤差の幅を見積もる（第 4 章）。エネルギーが合っても波動関数は合っていないことがある（誤差の 2 乗則）。
3. **B 型なら**：小さいパラメータの実際の値を見積もり、次の次数の補正の大きさを評価する。パラメータが局所的に大きくなる場所（ギャップの閉じる点、境界、衝撃波）が無いかを確認する。漸近級数は次数を上げると悪化しうる（第 1・7 章）。
4. **C 型なら**：厳密に解ける極限での一致と、厳密条件を満たすかを確認する。ベンチマーク（精密計算・実験）との比較を、適用範囲の外では信用しない。

例題 11.4　エネルギーが合っても波動関数は合っていない ★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

調和振動子 $H=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}x^2$ の基底状態（$E_0=\frac{1}{2}$、$\langle x^2\rangle=\frac{1}{2}$）を、幅のずれた規格化ガウス関数 $\psi_s(x)=(2\pi s)^{-1/4}\mathrm{e}^{-x^2/4s}$、$s=\frac{1}{2}(1+\delta)$ で近似する。第 1 章の例題より $\langle\psi_s,H\psi_s\rangle=\frac{1}{8s}+\frac{s}{2}$、

$\langle x^2\rangle_{\psi_s} = s$ である。

(1) エネルギーの誤差 $E(s) - E_0$ を δ で表せ。

(2) 厳密解 $\phi_0 = \psi_{1/2}$ との重なり $S = \langle \phi_0, \psi_s\rangle$ について $S^2 = 2\sqrt{1+\delta}/(2+\delta)$ を示し、$1 - S^2$ の δ についての最低次を求めよ。

(3) $\delta = 0.2$ のとき、エネルギーの相対誤差、$\|\psi_s - \phi_0\|$、$\langle x^2\rangle$ の相対誤差を比べよ。

(4) 偶関数の範囲で次の固有値が $E_2 = \frac{5}{2}$ であることを使い、$E(s) - E_0 \geq (E_2 - E_0)(1 - S^2)$ を示して、(3) の値で確かめよ。

解答. **(1)** $E(s) = \frac{1}{4}\big[(1+\delta) + (1+\delta)^{-1}\big]$ なので $E(s) - \frac{1}{2} = \dfrac{\delta^2}{4(1+\delta)}$。誤差は δ の 2 次から始まる。$\delta = 0$ が変分の停留点だからである。
(2) 2 つのガウス関数の積の積分は

$$S = (2\pi)^{-1/2}(ss_0)^{-1/4}\int \mathrm{e}^{-x^2\left(\frac{1}{4s}+\frac{1}{4s_0}\right)}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\sqrt{ss_0}}{s+s_0}} \qquad (s_0 = \tfrac{1}{2})$$

で、$s = s_0(1+\delta)$ を入れると $S^2 = 2\sqrt{1+\delta}/(2+\delta)$。対数をとって展開すると $\ln S^2 = (\frac{\delta}{2} - \frac{\delta^2}{4}) - (\frac{\delta}{2} - \frac{\delta^2}{8}) + \mathcal{O}(\delta^3) = -\frac{\delta^2}{8} + \mathcal{O}(\delta^3)$、よって $1 - S^2 = \frac{\delta^2}{8} + \mathcal{O}(\delta^3)$。
(3) $\delta = 0.2$ では $E - E_0 = 0.00833$（相対誤差 1.7%）、$1 - S^2 = 0.00414$、$\|\psi_s - \phi_0\| = \sqrt{2(1-S)} = 0.064$（6.4%）、$\langle x^2\rangle = 0.6$ は厳密値 0.5 から 20% ずれている（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。エネルギーの誤差は波動関数の誤差の 2 乗の大きさなので小さく見えるが、$\langle x^2\rangle$ のようなエネルギー以外の量の誤差は δ の 1 次で現れる。エネルギーが合っていることは、他の物理量が合っていることを保証しない。
(4) ψ_s は偶関数なので、偶の固有関数 $\phi_0, \phi_2, \phi_4, \ldots$ で $\psi_s = \sum c_k \phi_{2k}$ と展開でき、$|c_0|^2 = S^2$。$E(s) - E_0 = \sum_k (E_{2k} - E_0)|c_k|^2 \geq (E_2 - E_0)\sum_{k\geq 1}|c_k|^2 = (E_2 - E_0)(1 - S^2)$。右辺は $2 \times 0.00414 = 0.00828$ で、左辺 0.00833 より確かに小さい。最低次では両辺とも $\delta^2/4$ で一致する。幅のずれは主に ϕ_2 の混入として現れるからである。この不等式を逆に読むと、エネルギーの誤差から波動関数の誤差 $1 - S^2$ の上限が出る。これは第 4 章の Temple の不等式と同じく、次の固有値の情報を使って誤差の幅を見積もる方法である。

11.5 さらに学ぶために

★ 補強 各章の内容を本格的に学ぶための標準的な教科書

各章の内容を本格的に学ぶための標準的な教科書を挙げる。いずれも学部の線型代数・解析学を前提にしており、関数解析は本の中で導入されるか、別の入門書で補う必要がある。

- **偏微分方程式の理論**（第 2 章）：L. C. Evans『Partial Differential Equations』。弱解・ソボレフ空間・エネルギー法・変分法の標準的な教科書。
- **量子力学の作用素論**（第 3 章）：M. Reed, B. Simon『Methods of Modern Mathematical Physics』全 4 巻。自己共役性・Kato–Rellich・HVZ 定理・min-max 原理を含む。
- **原子・分子の数理と平均場**（第 3・5・6 章）：E. H. Lieb, R. Seiringer『The Stability of Matter in Quantum Mechanics』。Hardy・Lieb–Thirring 不等式、Thomas–Fermi 理論、物質の安定性。
- **量子化学の計算法**（第 4・5 章）：A. Szabo, N. S. Ostlund『Modern Quantum Chemistry』。Hartree–Fock・CI・基底関数を、計算の手順として学べる。

- **漸近解析と特異摂動**（第 7 章）：C. M. Bender, S. A. Orszag『Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers』。境界層・WKB・多重尺度法を、物理側の読者向けに書いた本。
- **気体分子運動論**（第 8 章）：C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti『The Mathematical Theory of Dilute Gases』。Boltzmann 方程式と Lanford の定理。流体力学極限は L. Saint-Raymond『Hydrodynamic Limits of the Boltzmann Equation』。
- **均質化**（第 9 章）：A. Bensoussan, J.-L. Lions, G. Papanicolaou『Asymptotic Analysis for Periodic Structures』。

例題 11.5　閉じない階層を閉じる仮定の誤差 ★★ 重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

$x' = -x^3$ に従う粒子の集団を考え、初期値 x_0 が標準正規分布 $\mathrm{N}(0,1)$ に従うとする。モーメント $m_k(t) = \langle x(t)^k \rangle$ を追う。

(1) m_2' を m_4 で表し、m_2 の方程式が閉じないことを確かめよ。

(2) 正規分布の関係 $m_4 = 3m_2^2$ を仮定して方程式を閉じ、$m_2(t)$ を求めよ。

(3) 個々の軌道 $x(t) = x_0/\sqrt{1+2x_0^2 t}$ から厳密な $m_2(t)$ を積分の形で書き、$t \to \infty$ での振る舞いを (2) と比べよ。$t = 1$ での値も比べよ。

(4) この閉じ方は第 1 章の A・B・C のどれにあたるか。$t = 0$ の近くでの一致の次数とあわせて述べよ。

解答. **(1)** $m_2' = \langle 2x\,x' \rangle = -2m_4$。$m_4$ の方程式を作ると $m_4' = -4m_6$ となり、低次の量の方程式に高次の量が必ず現れる。第 6・8・9 章の階層と同じ形である。
(2) $m_2' = -6m_2^2$、$m_2(0) = 1$ を解いて $m_2(t) = \dfrac{1}{1+6t}$。
(3) $x(t)$ を微分すると $x' = -x_0^3(1+2x_0^2 t)^{-3/2} = -x^3$ で、確かに解である。よって

$$m_2(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x_0^2}{1+2x_0^2 t}\, \frac{\mathrm{e}^{-x_0^2/2}}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{d}x_0 .$$

$t \to \infty$ では被積分関数の分数がほぼすべての x_0 で $1/(2t)$ に近づくので $m_2 \approx 1/(2t)$。閉じた式は $1/(6t)$ で、3 倍小さい。数値では $t = 1$ で厳密 0.227 に対し閉じた式 0.143、$t = 100$ では $2t\,m_2$ が厳密 0.916（1 へゆっくり近づく）に対し閉じた式 0.333 である（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。
(4) C 型である。$m_4 = 3m_2^2$ は分布が正規分布のままであるという仮定で、それを保証する小さいパラメータは無い。実際、$x' = -x^3$ は大きい x ほど強く引き戻すので分布はすぐ正規分布から外れる。$t = 0$ では分布が正規分布なので $m_2'(0) = -6$ は厳密と一致するが、2 階微分は厳密が $8m_6 = 8 \times 15 = 120$、閉じた式が 72 で、一致は 1 次までである。誤差は時間とともに小さくならず、長時間では比が 3 という $\mathcal{O}(1)$ のずれになる。「厳密に成り立つ点（ここでは $t = 0$）での一致」は C 型の近似にとって正当化の代わりにはなるが、そこから離れたときの誤差の大きさは何も教えない。

総合問題　1 つの振動子に 3 つの型の近似を当てる ★★★ 最重要

［オリジナル］既存問題に基づかない Claude 作成

第 1 章の非調和振動子 $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4$、$\lambda = 0.1$ の基底エネルギーを、型の違う近似で求めて比べる。厳密値は $E_0 = 0.5591463272$ である（第 1 章）。調和振動子の固有関数を ϕ_n とし、

昇降演算子から得られる行列要素

$$\langle\phi_n|x^4|\phi_n\rangle=\tfrac{1}{4}(6n^2+6n+3),\qquad \langle\phi_{n+2}|x^4|\phi_n\rangle=\tfrac{1}{4}(4n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)},$$
$$\langle\phi_{n+4}|x^4|\phi_n\rangle=\tfrac{1}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}$$

を使ってよい（他の組は 0）。

(1) B 型：摂動級数 $E=\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\lambda-\frac{21}{8}\lambda^2+\frac{333}{16}\lambda^3-\frac{30885}{128}\lambda^4+\cdots$ の各項の大きさと部分和を 4 次まで求め、最適な打ち切りの次数と、そのときの誤差を答えよ。部分和が上界か下界かは言えるか。（使う道具：第 1 章 漸近級数と最適な打ち切り、第 7 章 特異摂動）

(2) A 型（線型部分空間）：$\mathrm{span}\{\phi_0,\phi_2\}$ で Rayleigh–Ritz を行い、最低固有値と固有ベクトル $c_0\phi_0+c_2\phi_2$ を求めよ。（使う道具：第 3 章 min-max 原理、第 4 章 Rayleigh–Ritz）

(3) A 型（曲がった集合）：規格化ガウス関数 ψ_s（第 1 章の例題）で変分し、最適な s とエネルギーを求めよ。（使う道具：第 1 章 ガウス変分、第 5 章 曲がった集合での変分）

(4) C 型：固有状態では $\langle[H,xp]\rangle=0$ から virial 関係 $\langle p^2\rangle=\langle x^2\rangle+4\lambda\langle x^4\rangle$ が成り立つ。ここに $\langle x^4\rangle=3\langle x^2\rangle^2$ と $\langle p^2\rangle=1/(4\langle x^2\rangle)$（不確定性の等号）を仮定して閉じ、(3) と同じ答えになることを示せ。（使う道具：第 6・8・9 章 閉じない階層と閉じ方）

(5) 下界：(2) の Ritz ベクトルに Temple の不等式を当てて下界を求めよ。次のスペクトルの点 ε には何を使えばよいかも説明せよ。（使う道具：第 4 章 Temple の不等式、第 3 章 min-max 原理）

(6) (1)〜(5) の結果を厳密値と並べ、どの近似が誤差について何を保証していたかをまとめよ。（使う道具：第 1 章 3 つの型、本章 表の正当化の状況）

解答. **(1)** 各項の大きさは λ の 1 次から順に 0.075、0.02625、0.02081、0.02413 で、3 次の項が最小になり、4 次で増え始める。部分和は 1 次 0.575、2 次 0.54875、3 次 0.56956、4 次 0.54543。最小の項の手前（2 次）で切っても直後（3 次）で切っても、誤差は -0.0104、$+0.0104$ で、最小の項の半分程度にとどまる。部分和は厳密値の上下を交互に行き来し、どの次数で切っても上界か下界かは定理として言えない。B 型が与えるのは誤差の次数（いまは λ^{k+1}）までで、$\lambda=0.1$ という有限の値では誤差 10^{-2} より小さくできない。
(2) 行列要素は $\langle\phi_0|H|\phi_0\rangle=\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\lambda=0.575$、$\langle\phi_2|H|\phi_2\rangle=\frac{5}{2}+\frac{39}{4}\lambda=3.475$、$\langle\phi_2|H|\phi_0\rangle=\frac{3}{2}\sqrt{2}\,\lambda=0.212132$（$\phi_1$ との要素は奇偶で 0 なので、偶関数だけを取った）。2×2 行列の最低固有値は

$$E_{\mathrm{R}}=\frac{0.575+3.475}{2}-\sqrt{\Big(\frac{3.475-0.575}{2}\Big)^2+0.212132^2}=2.025-1.465435=0.5595649,$$

固有ベクトルは $c_0=0.99736$、$c_2=-0.07257$。min-max 原理により E_{R} は上界で、誤差は $+4.2\times10^{-4}$（第 1 章の表の基底数 2 の行と同じ値）。
(3) $E_{\mathrm{G}}(s)=\frac{1}{8s}+\frac{s}{2}+3\lambda s^2$。$E_{\mathrm{G}}'(s)=0$ に $8s^2$ を掛けると $48\lambda s^3+4s^2-1=0$、すなわち $4.8s^3+4s^2-1=0$。正の根は $s=0.40943$ で、$E_{\mathrm{G}}=0.560307$。試行関数の集合 $\{\psi_s\}$ は線型空間でなく曲がった集合なので、得られるのは上界だけで、集合を広げたときの単調な改善や収束は保証されない。誤差は $+1.2\times10^{-3}$ で、2 次元の線型部分空間 (2) より悪い。
(4) $s=\langle x^2\rangle$ とおくと、仮定から $\langle p^2\rangle=1/(4s)$、$\langle x^4\rangle=3s^2$。virial 関係は $\frac{1}{4s}=s+12\lambda s^2$ となり、$4s$ を掛けて整理すると $48\lambda s^3+4s^2-1=0$。これは (3) の停留条件と同じ式で、エネルギー $\frac{1}{2}\langle p^2\rangle+\frac{1}{2}\langle x^2\rangle+\lambda\langle x^4\rangle=\frac{1}{8s}+\frac{s}{2}+3\lambda s^2$ も同じである。2 つの仮定はちょうどガウス関数が満たす関係なので、閉じた方程式はガウス関数の集合の上での変分の停留条件になっている。モーメントを閉じる手続きだけを見れば C 型で誤差の評価は無いが、この場合は同じ答えを A 型の変分としても読めるので上界が保証される。Hartree–Fock や $1/Z$ 展開と同じく、1 つの近

似が 2 つの型の見方をもつ例である。閉じる仮定が変分の集合に対応しない場合には、この保証は失われる。

(5) H と ϕ_0, ϕ_2 は偶奇で分かれるので、偶関数の部分空間で Temple の不等式を使う。奇関数の $E_1 = 1.77$ は $5/2$ より小さいが、偶関数の Ritz ベクトルとは混ざらないので関係しない。$\lambda x^4 \geq 0$ より $H \geq H_0$ で、min-max 原理から偶の第 2 固有値は H_0 の偶の第 2 固有値 $\frac{5}{2}$ 以上。よって $\varepsilon = \frac{5}{2}$ にとれる（実際の値は 3.139）。Ritz ベクトル $\tilde{\psi}$ では $\mathrm{span}\{\phi_0, \phi_2\}$ の中で $H\tilde{\psi}$ の成分が $E_{\mathrm{R}}\tilde{\psi}$ と一致するので、$\sigma^2 = \|(H - E_{\mathrm{R}})\tilde{\psi}\|^2$ は ϕ_4・ϕ_6 成分だけから来る。

$$(H\tilde{\psi})_4 = \lambda\Big(c_0\tfrac{\sqrt{6}}{2} + 7\sqrt{3}\,c_2\Big) = 0.034166, \qquad (H\tilde{\psi})_6 = \lambda c_2 \tfrac{3\sqrt{10}}{2} = -0.034423,$$

$\sigma^2 = 0.034166^2 + 0.034423^2 = 0.0023522$。Temple の不等式より

$$E_0 \geq 0.5595649 - \frac{0.0023522}{2.5 - 0.5595649} = 0.5595649 - 0.0012122 = 0.5583527.$$

(6) 結果を並べると、Temple 下界 $0.5583527 \leq E_0 = 0.5591463 \leq$ Ritz 上界 0.5595649 で、区間の幅は 1.2×10^{-3} である（検算 `scripts/verify_ch11.py`）。ガウス変分（C 型の閉じ方と同じ値）0.560307 は上界だが Ritz より悪く、摂動の部分和は最良でも誤差 10^{-2} で区間の外にある。

誤差について保証されていたことを型ごとにまとめる。A 型の線型部分空間 (2) は上界と、部分空間を広げたときの単調な改善と収束を保証し、Temple の不等式 (5) と組み合わせると厳密値を挟む区間が手に入る。区間が得られたのはこの組だけである。A 型の曲がった集合 (3) は上界だけを保証する。B 型 (1) は誤差の次数を保証するが、有限の λ での誤差の大きさや符号は保証せず、次数を上げても良くならない。C 型 (4) は単独では何も保証しないが、この例では閉じる仮定がガウス関数の集合に対応していたので A 型の上界を借りることができた。本章の表の三つの読み取り（A 型はほぼ完成、B 型は極限と現実の距離が別問題、C 型は内部の評価が無い）が、1 つの振動子の上でそのまま見える。