数理解析研究所講究録
第 190 巻 1973 年 112-116

ＴＦ基礎方程式の数値解

岡山大学計算機センター
川端 親雄

§１．序

ここで取りあげた研究の内容は物理学，特に原子分子理論の研究の際に直面する非線型微分方程式，いわゆる Thomas-Fermi 基礎方程式を数値的に解く問題である．この方程式の物理的意味は原子内多電子問題を取扱うとき、一つの電子におよぼす他の多くの電子の影響がその電子のガスの密度としてのみあらわれるという考えで、電子の密度を統計力学によって求めようというのである．この Thomas-Fermi 方程式の解を求める研究は電子計算機が利用される以前から、いろいろな研究者によってなされている．しかし、１９３４年フランスの L. Brillouin が推測しているパラメーターから出発したら有限な領域で発散するであろうということは、まだ数値的に実証されていない．このＴＦ基礎方程式を詳細に調べることは物理学，ならびに数値解析の研究上有意義である．

§2. Thomas-Fermi基礎方程式とその数値解

Thomas-Fermi 基礎方程式は二階の非線型微分方程式で次の如くである.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{x^{1/2}} \qquad x>0,\ \varphi>0 \quad \cdots\cdots (1)$$

$$\varphi(0) = 1 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (2)$$

TF基礎方程式の数値解のこれまでの研究を要約すると、3種類に分類できる. $x=0,\ \varphi(0)=1$ の点から出発して(1)の微分方程式を解くと1図に示すような傾向の解が得られる.

第一に $x=0$ における傾きが

$$(\mathrm{I}) \qquad -\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=0} = 1.58806\ \cdots\cdots = B_0 \quad \cdots\cdots (3)$$

であるような解は、x の有限の値に対しては零とならず、且つ x が無限大に行くと零に行く. これは x の大きな値に対しては漸近的に次のようになる.

$$\varphi \rightarrow \left[\frac{1}{1+\left(\frac{x}{12^{2/3}}\right)^{0.772}}\right]^{3.886} \longrightarrow \frac{144}{x^3} \quad \cdots\cdots\cdots (4)$$

第二にもっと傾きが急な場合、すなわち

$$(\mathrm{II}) \qquad -\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=0} > B_0 \quad \cdots\cdots\cdots (5)$$

の場合の解はその有限の値 x_0 において零となる.
第三にもっと傾きがゆるやかな場合, すなわち

$$(\mathrm{III}) \qquad -\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=0} < B_0 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (6)$$

の場合には φ は $x=x_m$ で極小 $\varphi_m\ (>0)$ に達し, その後 $x=a$ で $400a\,(x-a)^{-4}$ の形の無限大に向い, $x>a$ では再び減少して $x\to\infty$ と共に零に近づく. この場合は Brillouin のあくまで推測である.
いろいろな数値実験を電子計算機を利用して試みているので以下紹介する.

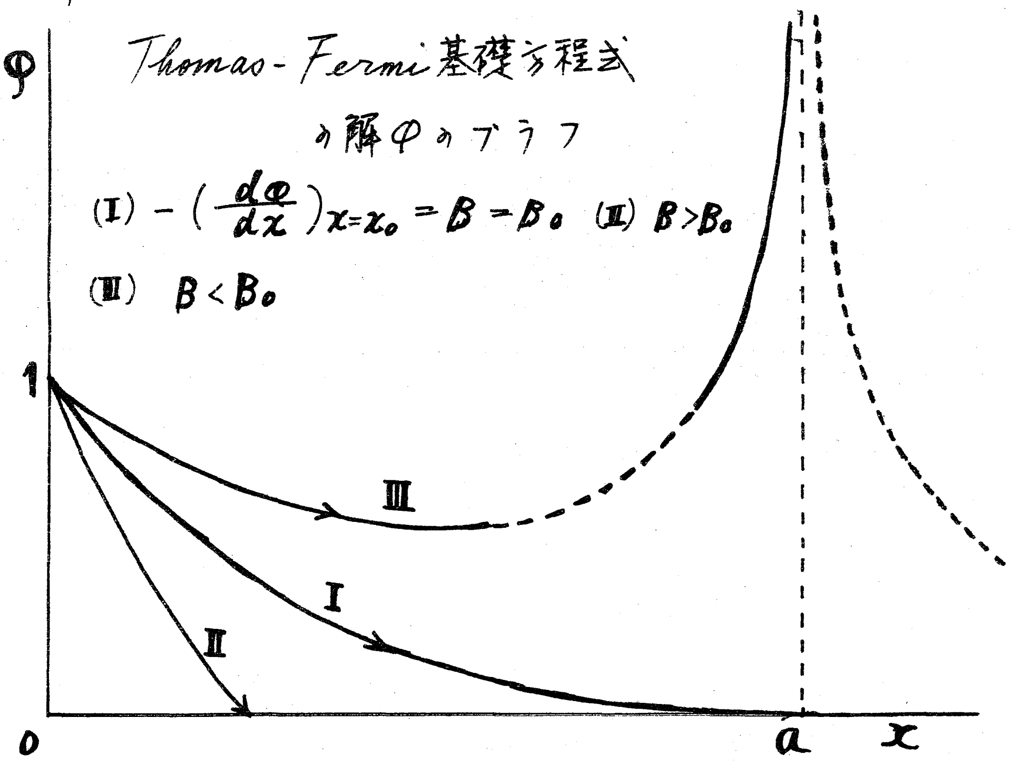

図 1

§3. 数値実験とその考察

ここでは(Ⅲ)の数値解を調べる場合に限って議論する．数値計算をするため以下のような種々の方法が考えられる．

A) $x=a$ の近傍から $\varphi=400a(x-a)^{-4}$ を逆に級数展開して最初の数項を求め，それらを出発値として Runge-Kutta 法等で解く．

B) もとのTF基礎方程式の逆関数 $\phi=\frac{1}{\varphi}$ をとり，$x=a$ から原点に向って解く．

C) この関数 φ は下に凸であるから $\varphi(x_0)=0$ なる点 x_0 がある筈である．この点 x_0 がどこなのかわからないが，適当な点を仮定すれば $\varphi(x_0)=\varphi_0$，$\varphi'(x_0)=0$ の初期値問題となるからいろいろな φ_0 について両側に向って解く．

D) a を勝手に定めたとき $\frac{d^2\varphi}{dx^2}=\frac{\varphi^{3/2}}{x^{1/2}}$，$\varphi(0)=1, \varphi(a)=\infty$ となるから境界値問題として解く．

E) $x=a$ で $\varphi\simeq 400a(x-a)^{-4}$ の形で発散するから $\frac{1}{\varphi^{\frac{1}{4}}}$ を未知関数として解く．

F) a が $-\varphi'(0)=B$ に依存しているとする．すなわち $a=F(B)$ これを B に関する方程式とみなして，一次逆補間法で解く．

G) 清水辰次郎先生の図解法で解く．

現在数値実験中であるがその結果は他の機会に紹介したい．

§4. 結語

この問題を最初に教示して下さいました岡山大学数理物理研究室の富島康雄教授ならびに米井克己助教授、数理解析研究所この研究会でこの研究の促進のために大変有意義な討論と重要なコメントをして下さった下記の諸氏に深く謝意を表します.

慶応大・工	柳井浩
早大・理工	室谷義昭
阪大・工	鳥居達生
東京理大	清水辰次郎
熊本大・理	三好哲彦
京大数理解	一松信
京大数理解	森正武

参考文献

1) L.H. Thomas, Proc. Cambr. Phil. Soc. 23 (1927), 542

2) E. Fermi, ZS. f. Phys., 48 (1928), 73

3) L. Brillouin, Bd. 160, Paris: Hermann Et Cie (1934)