0.1 一次元鎖

N 個の同一原子 (質量：M) が一直線に並んだ原子の間にバネの力（k : バネ定数, a : 自然長）がはたらくものとする．j 番目の原子の位置を x_j とすると，加速度 α_j は次式で与えられる．

$$\alpha_1 = \frac{k}{M}(x_2 - x_1 - a) \tag{1}$$

$$\alpha_j = -\frac{k}{M}(2x_j - x_{j-1} - x_{j+1}), \qquad (j = 2, \dots N-1) \tag{2}$$

$$\alpha_N = -\frac{k}{M}(x_N - x_{N-1} - a) \tag{3}$$

全エネルギー E は次式で与えられる．

$$E = \frac{1}{2}k\sum_{j=1}^{N-1}(x_{j+1} - x_j - a)^2 + \frac{1}{2}M\sum_{j=1}^{N} v_j^2 \tag{4}$$

0.2 惑星の運動

太陽を原点として，惑星の位置を $\boldsymbol{r}$ で表すと，惑星が太陽から受ける万有引力は

$$\boldsymbol{F} = -G\frac{mM}{r^3}\boldsymbol{r} \quad (r = |\boldsymbol{r}|)$$

ただし，G を重力定数，太陽の質量を M，惑星の質量を m とする．惑星の加速度は次式で与えられる．

$$\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = -G\frac{M}{r^3}\boldsymbol{r} \tag{5}$$

太陽から地球までの距離の長半径を r_0，1 日を τ とし，変数

$$\boldsymbol{r} = r_0\boldsymbol{r}', \qquad t = \tau t' \tag{6}$$

とすると，(5) は次のように**無次元**の式に書き直すことができる．

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t'^2} = -K\frac{\boldsymbol{r}'}{r'^3} \quad \text{ただし，} \quad K = \frac{GM\tau^2}{r_0^3} \tag{7}$$

K は無次元の定数で $G = 6.67\times10^{-11}\mathrm{m}^3/(\mathrm{kg}\cdot\ \mathrm{s}^2)$，$M = 1.989\times10^{30}\mathrm{kg}$，$r_0 = 1.496\times10^{11}\mathrm{m}$，$\tau = 3600\times24\mathrm{s}$，より $K = 2.96\times10^{-4}$ を得る．以後，紛らわしいので記号 $'$ を外すことにする．微少量 ϵ に対して時刻 $t\pm\epsilon$ における $\boldsymbol{r}$ は次式で与えられる．

$$\boldsymbol{r}(t\pm\epsilon) \cong \boldsymbol{r}(t) \pm \boldsymbol{v}(t)\epsilon + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}\epsilon^2 \tag{8}$$

上式より時刻 $t-\epsilon$ と時刻 t の位置より次式から時刻 $t+\epsilon$ の位置が得られる．

$$\boldsymbol{r}(t+\epsilon) = 2\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}(t-\epsilon) + \boldsymbol{\alpha}\epsilon^2 \tag{9}$$

また，時刻 t での速度は上式の $\boldsymbol{r}(t+\epsilon)$ より，次式より得られる．

$$\boldsymbol{v}(t) = \frac{\boldsymbol{r}(t+\epsilon) - \boldsymbol{r}(t-\epsilon)}{2\epsilon} \tag{10}$$

以上の近似法によって運動をシミュレートする方法は **Verlet** によって提案された．ポテンシャルエネルギーは $E_p = -GMm/r$，運動エネルギーは $E_k = m\boldsymbol{v}^2/2$ であるから，次の量は不変量である．すなわち，

$$\frac{\tau^2}{mr_0^2}(E_p + E_k) = -\frac{K}{r} + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 \tag{11}$$