

Алгоритм динаміки з багатьма зв'язками SHAKE

Ітеративна схема, щоб позбутись обертання великих матриць

$\sigma_k^c(t + \Delta t) = 0$ Застосовується не одночасно до всіх зв'язків, а послідовно – зв'язок за зв'язком

$$\vec{r}_i^{\text{constrained}}(t + \Delta t) - \vec{r}_i^{\text{unconstrained}}(t + \Delta t) \approx -\frac{\Delta t^2}{m_i} \nabla_i \sigma_k(t)$$

Тому:

$$\sigma_k^u(t + \Delta t) = \Delta t^2 \lambda_k \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \left(\frac{\partial \sigma_k}{\partial \vec{r}_i} \right)_{\vec{r}_i^{\text{unc}}(t+\Delta t)} \left(\frac{\partial \sigma_k}{\partial \vec{r}_i} \right)_{\vec{r}_i^{\text{unc}}(t)}$$