

# Алгоритм динаміки з багатьма зв'язками SHAKE

Множники Лагранжа знаходяться просто для кожного  $k$ :

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