§ Więzy geometryczne (metoda d'Alemberta)

Przypuśćmy, że $r_{k_1,k_2} = d_{k_1,k_2}$

Równania hiperpowierzchni więzów

$$\sigma_k(\vec{r}) = \vec{r}^{\,2}_{k_1k_2} - d^2_{k_1k_2} = 0 \quad k = 1, 2, \dots, N_c$$

Równania ruchu z siłami pochodzącymi od więzów

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i(t) = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}\left(V(\vec{r}) + \sum_{k=1}^{N_c} \lambda_k(t)\sigma_k(\vec{r}) \right)$$

Siły pochodzące od więzów:

$$\vec{F}_i^{\,c}(t) = -\sum_{k=1}^{N_c} \lambda_k(t) \frac{\partial \sigma_k(\vec{r})}{\partial \vec{r}_i}$$

λ_k — mnożniki Lagrange'a

Algorytm dla zabiegu skoku

(1) Propagacja bez więzów

$$\vec{r}_i{}'(t_n + \Delta t) = \vec{r}_i(t_n) + \vec{V}_i\left(t_n - \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t + \frac{\vec{F}_i(t_n)}{2m_i}(\Delta t)^2$$

(2) Uwzględnienie siły "od więzów" jeszcze nie znanych

$$\vec{r}_i(t_n + \Delta t) = \vec{r}_i{}'(t_n + \Delta t) + \frac{\vec{F}_i^{\,c}(t_n)}{2m_i}(\Delta t)^2$$

które to $\vec{r}_i$ muszą spełniać równania więzów

$$\sigma_k\left(\vec{r}(t_n + \Delta t)\right) = 0 \quad k = 1, 2, \dots N_c$$

Prowadzi to do następujących równań

$$\left[\vec{r}_{k_1}'(t_n+\Delta t) + \frac{\vec{F}_{k_1}^{\,c}(t_n)(\Delta t)^2}{2m_{k_1}} - \vec{r}_{k_2}'(t_n+\Delta t) - \frac{\vec{F}_{k_2}^{\,c}(t_n)(\Delta t)^2}{2m_{k_2}}\right]^2 - d_{k_1k_2}^2 = 0 \qquad (*)$$

Podstawiając $\vec{F}_i^{\,c}(t_n) = -\sum_{k=1} \lambda_k(t_n)\frac{\partial \sigma_k(\vec{r}(t_n))}{\partial \vec{r}_i}$ do $(*)$ dostajemy N_c równań, z których można wyznaczyć N_c mnożników Lagrange'a $\lambda_k(t_n)$.

Równania $(*)$ są rozwiązywane iteracyjnie.

Przy danych położeniach $\vec{r}_i(t_n)$ spełniających równania więzów i $\vec{r}_i'(t_n+\Delta t)$ nie uzgodnionych z więzami dostajemy uzgodnione z więzami $\vec{r}_i(t_n+\Delta t)$.

Znana procedura SHAKE

SHAKE $\left(\vec{r}_i(t_n); \vec{r}_i'(t_n+\Delta t); \vec{r}_i(t_n+\Delta t)\right)$

Cofając się:

$$\begin{cases} \vec{F}_i^{\,c}(t_n) = m_i\,\dfrac{\vec{r}_i(t_n+\Delta t) - \vec{r}_i'(t_n+\Delta t)}{2(\Delta t)^2} \\[2ex] v_i\left(t_n+\frac{\Delta t}{2}\right) = \dfrac{\vec{r}_i(t_n+\Delta t) - \vec{r}_i(t_n)}{\Delta t} \end{cases}$$