

# ”SHAKE 拘束モデル” の数式解説 (“shake.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは SHAKE アルゴリズムによって距離拘束を満たす。拘束条件  $\phi_\ell(\mathbf{r}) = 0$  を満たすため、補正は

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^{n+1*} - \sum_{\ell} \lambda_{\ell} \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{\ell} \quad (1)$$

と適用される。ラグランジュ乗数  $\lambda_{\ell}$  は

$$\phi_{\ell}(\mathbf{r}^{n+1}) = 0 \quad (2)$$

が成立するよう逐次的に解かれ、拘束系の時間積分を安定化させる。