

Übersicht zur Hesse-Matrix für Paar-Potentiale

Gegeben sei ein System von N Partikeln mit Ortskoordinaten $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$. Das dazugehörige Potential $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ kann als Summe von Paar-Potentialen V_{r_i, r_j} geschrieben werden:

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N V_{r_i, r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j).$$

Hierbei wird von symmetrischen Paar-Potentialen ausgegangen.

Kraftberechnung

Die aus dem Potential resultierende Kraft auf ein Partikel \vec{r}_i ergibt sich durch den Gradienten von V bzgl. \vec{r}_i , d.h.

$$\vec{F}_{r_i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \nabla_{\vec{r}_i} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \nabla_{\vec{r}_i} \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{r_i, r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j),$$

wobei in der letzten Gleichung die Symmetrie der Paar-Potentiale ausgenutzt wurde. Also

$$\vec{F}_{r_i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \left(\partial_{r_{i1}} \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{r_i, r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \dots, \partial_{r_{i3}} \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{r_i, r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right).$$

Hesse-Matrix

Die Hesse-Matrix des Gesamtsystems bestehend aus den N Partikeln $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ ist eine $3N \times 3N$ -Matrix der Form

$$H_V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \left(\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right)_{i,j=1}^N.$$

Dabei ist $\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ eine 3×3 -Matrix der Form

$$\begin{pmatrix} \partial_{r_{i1}} \partial_{r_{j1}} V(\dots) & \dots & \partial_{r_{i1}} \partial_{r_{j3}} V(\dots) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{r_{i3}} \partial_{r_{j1}} V(\dots) & \dots & \partial_{r_{i3}} \partial_{r_{j3}} V(\dots) \end{pmatrix}$$

Hierbei kann ausgenutzt werden, dass V als Summe von Paar-Potentialen dargestellt werden kann.

1. Fall $i \neq j$

Hier gilt

$$\begin{aligned} \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \partial_{\vec{r}_i} \left(\sum_{k=1, k \neq j}^N \partial_{\vec{r}_j} V_{r_j, r_k}(\vec{r}_j, \vec{r}_k) \right) \\ &= \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V_{r_j, r_i}(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \end{aligned}$$

2. Fall $i = j$

In diesem Fall gilt:

$$\begin{aligned}\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_i} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \partial_{\vec{r}_i} \left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \partial_{\vec{r}_i} V_{r_i r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right) \\ &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_i} V_{r_i r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j).\end{aligned}$$

Zusammenfassung

Insgesamt lässt sich die Hesse-Matrix des Gesamtsystems also wie folgt darstellen:

$$H_V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = (\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N))_{i,j=1}^N$$

mit den 3×3 -Matrizen

$$\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \begin{cases} \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V_{r_j r_i}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) & , \text{ falls } i \neq j \\ \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_i} \sum_{j=1, j \neq i}^N V_{r_i r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) & , \text{ sonst.} \end{cases}$$

Implementierung

Die Hesse-Matrix des Systems wird für die Implementierung in die lokalen 3×3 -Matrizen $\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ aufgeteilt. Jedes `Particle struct` r_i speichert dabei die Matrizen

$$\partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_j} V_{r_i r_j} \text{ für } j = 1, \dots, N, j \neq i \quad \text{und} \quad \partial_{\vec{r}_i} \partial_{\vec{r}_i} V_{r_i r_j} \text{ für } j = 1, \dots, N, j = i.$$

Die dafür benötigten Datenstrukturen sind:

- Ein Array `localHessians` der Größe $N \times (3 \times 3)^1$. Dies soll die lokalen Hesse-Matrizen speichern.
- Eine Map `hessianIndex<particle, localIndex>`, welche die Indizes der Partikel auf den richtigen Eintrag in `localHessians` mapped.

¹Aufgrund der Lokalität der verwendeten Potentiale dürfte auch ein deutlich kleineres Array in diesem Fall genügen.