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:

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

Hierbei wird von symmetrischen Paar-Potentialen ausgegangen.

Kraftberechnung

Die aus dem Potential resultierende Kraft auf ein Paritkel $\vec{r}_i$ 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

$$\vec{F}_{r_i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \left(\partial_{r_{i_1}} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} V_{r_i,r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \dots, \partial_{r_{i_3}} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} V_{r_i,r_j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right).$$

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

$$\begin{pmatrix} \partial_{r_{i_1}} \partial_{r_{j_1}} V(\dots) & \dots & \partial_{r_{i_1}} \partial_{r_{j_1}} V(\dots) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{r_{i_1}} \partial_{r_{j_1}} V(\dots) & \dots & \partial_{r_{i_1}} \partial_{r_{j_1}} V(\dots) \end{pmatrix}$$

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:

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

Zusammenfassung

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

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

mit den 3×3-Matrizen

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

Implementierung

Die Hesse-Matrix des Systems wird für die Implementierung in die lokalen 3×3-Matrizen $\partial_{\vec{r}_i}\partial_{\vec{r}_j} V(\vec{r_1}, \ldots, \vec{r_N})$ aufgeteilt. Jedes `Particle struct` r_i speichert dabei die Matrizen

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

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.

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