دانشکده مهندسی مکانیک

فصل سوم: سطح انرژی پتانسیل و مینیمم کردن انرژی

دینامیک مولکولی

ارائه: حسین نجات

نیمسال دوم ۱۳۹۷

رئوس مطالب

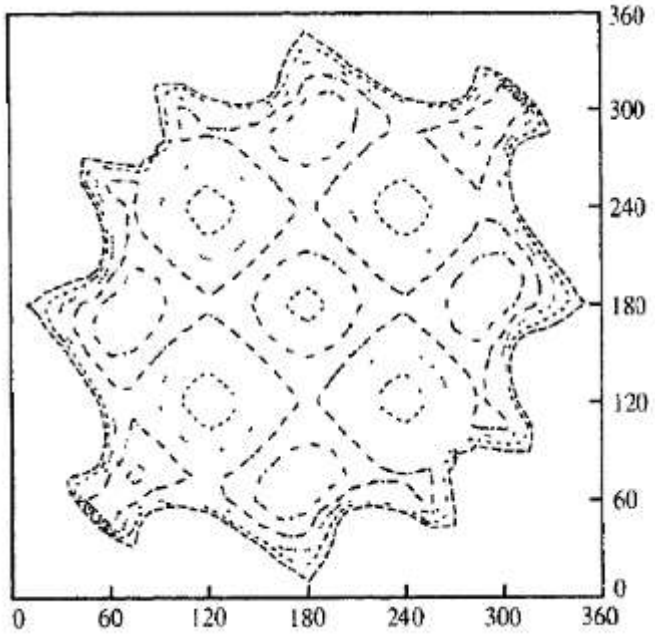
- مقدمه
- سطح انرژی پتانسیل
- روشهای مختلف کمینه سازی انرژی

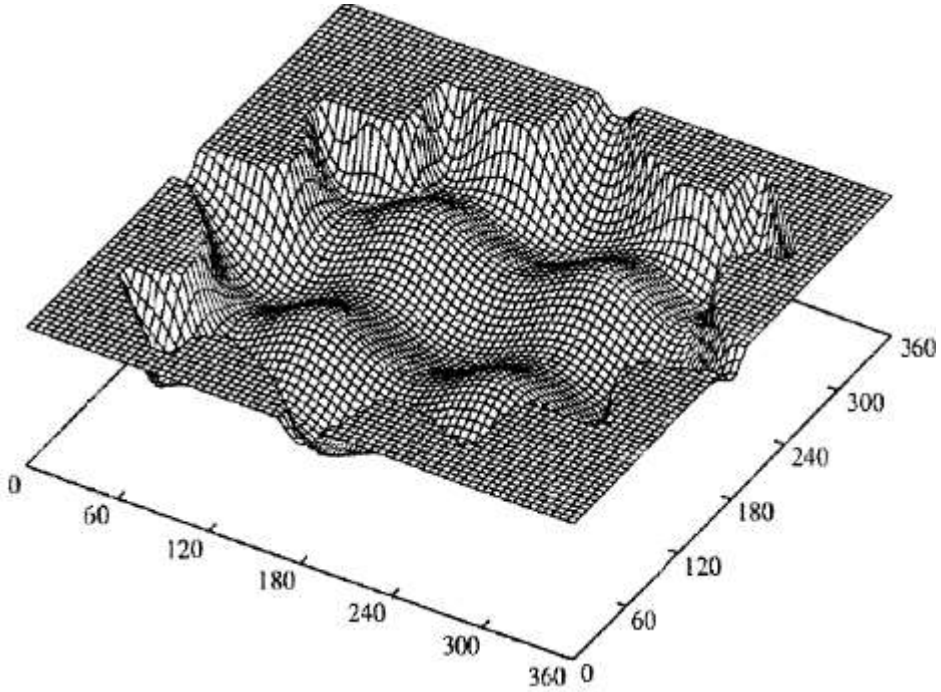
سطح انرژی پتانسیل و مینیمم کردن انرژی

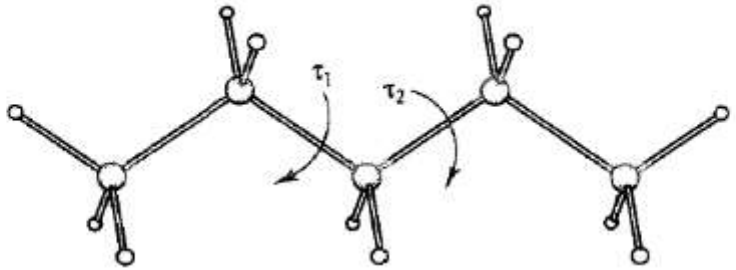
- کمینه سازی انرژی کاربرد زیادی در مدلسازی مولکولی دارد و در **تعیین پیکربندی اولیه سیستم** بسیار کاربرد دارد.
- کمینه سازی انرژی می تواند در یک شبیه سازی دینامیک مولکولی یا مونت کارلو استفاده شود تا **برهم کنش های نامطلوب موجود در پیکربندی اولیه را از بین ببرد.**
- **کمینه سازی بویژه برای سیستمهای بزرگ و انعطاف پذیر اهمیت زیادی دارد.**
- **تغییر انرژی در نتیجه تغییر در موقعیت اتمها می باشد.**
- **میزان تغییر انرژی به نوع حرکت مربوطه بستگی دارد:**
  - برای تغییر طول پیوند کووالانسی کربن-کربن به اندازه ۰/۱ آنگستروم نسبت به فاصله تعادلی حدودا ۳ کیلوکالری بر مول انرژی لازم است.
  - برای افزایش فاصله غیرکووالانسی بین دو اتم آرگون به اندازه ۱ آنگستروم نسبت به فاصله تعادلی ۰/۱ کیلوکالری بر مول انرژی لازم است.
  - برای مولکولهای کوچک انرژی پیچش نسبتا کم است. برای پیچش حول پیوند کربن-کربن در اتان تغییرات انرژی در حد ۳ کیلوکالری بر مول است.

سطح انرژی پتانسیل

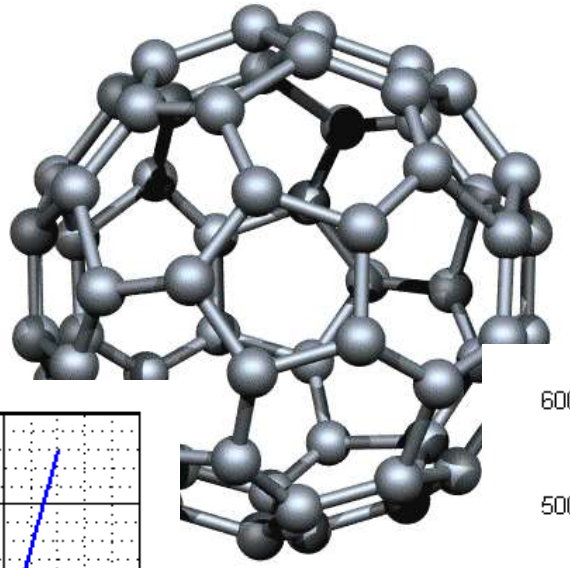
- سطح انرژی پتانسیل در مولکول پنتان به ازای تغییر دو زوایه ی پیچش



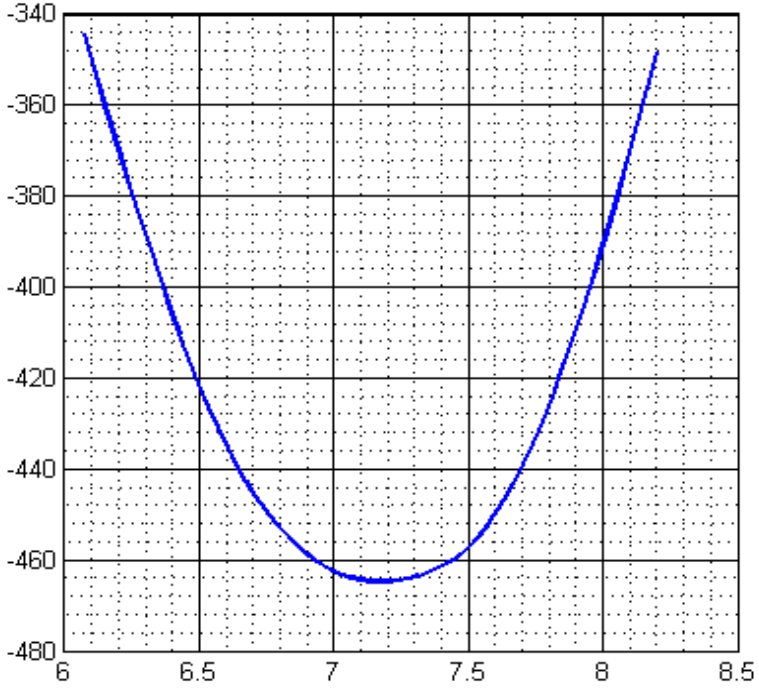




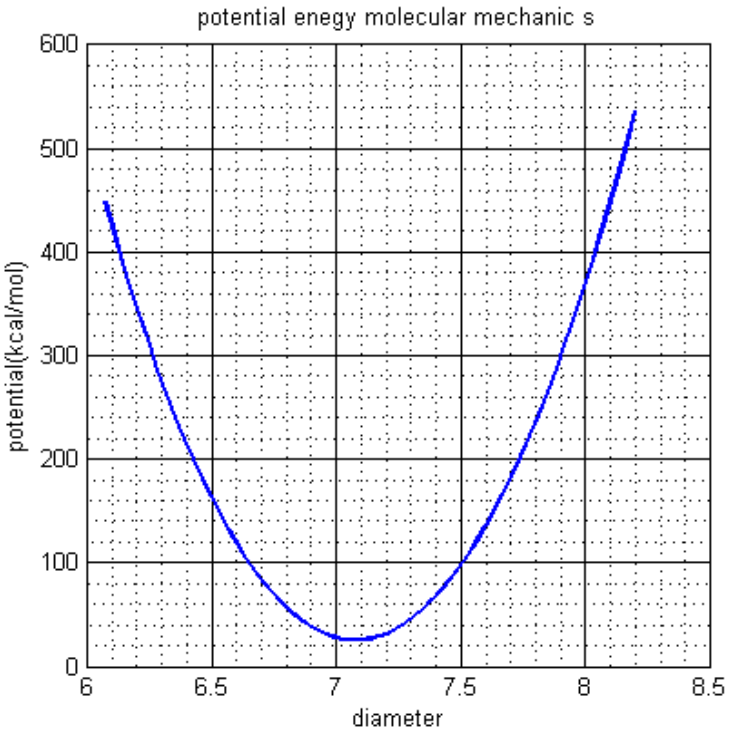
تغییرات انرژی در مولکول فولرین بر حسب قطر مولکول



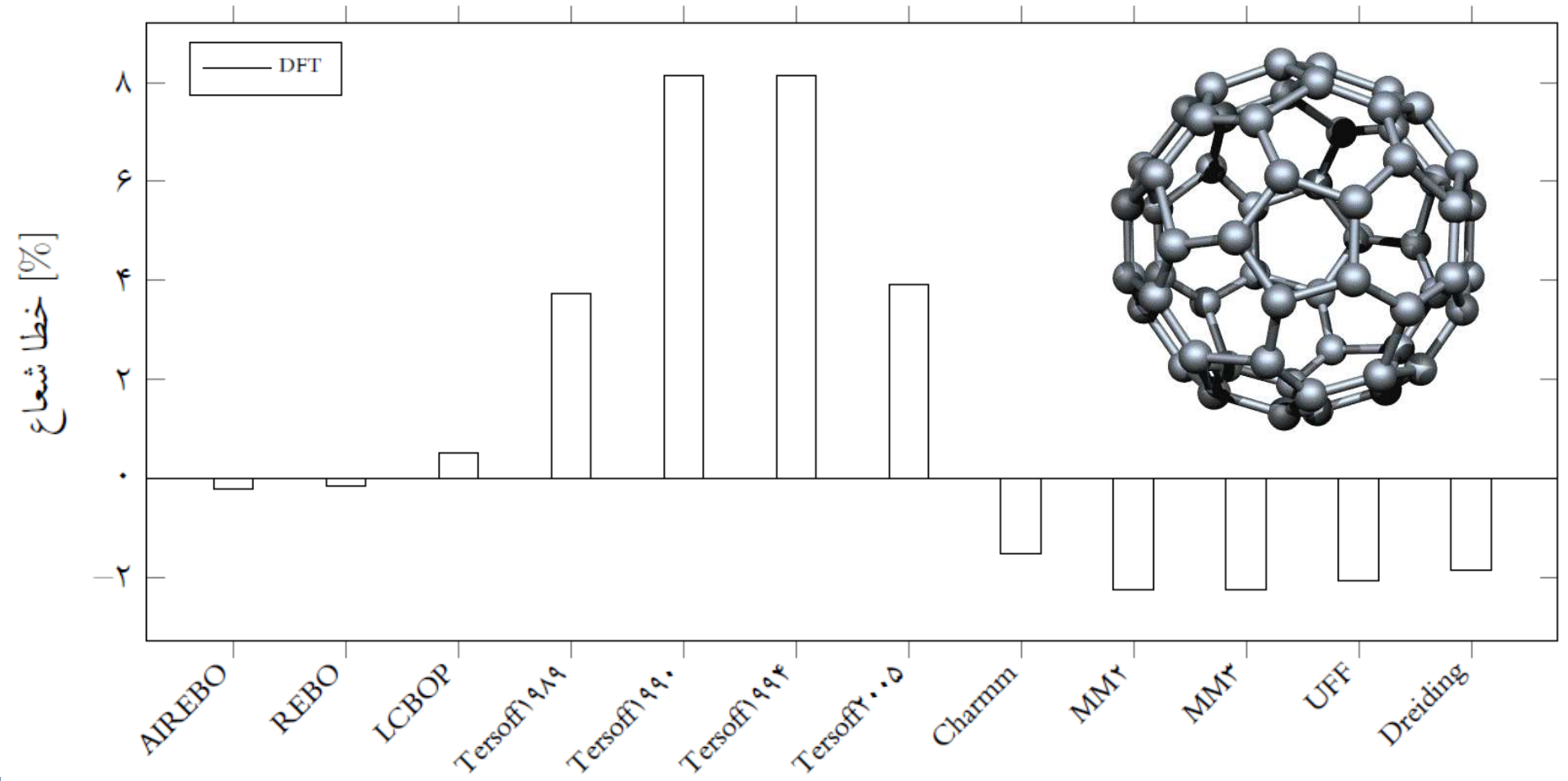
Tersoff



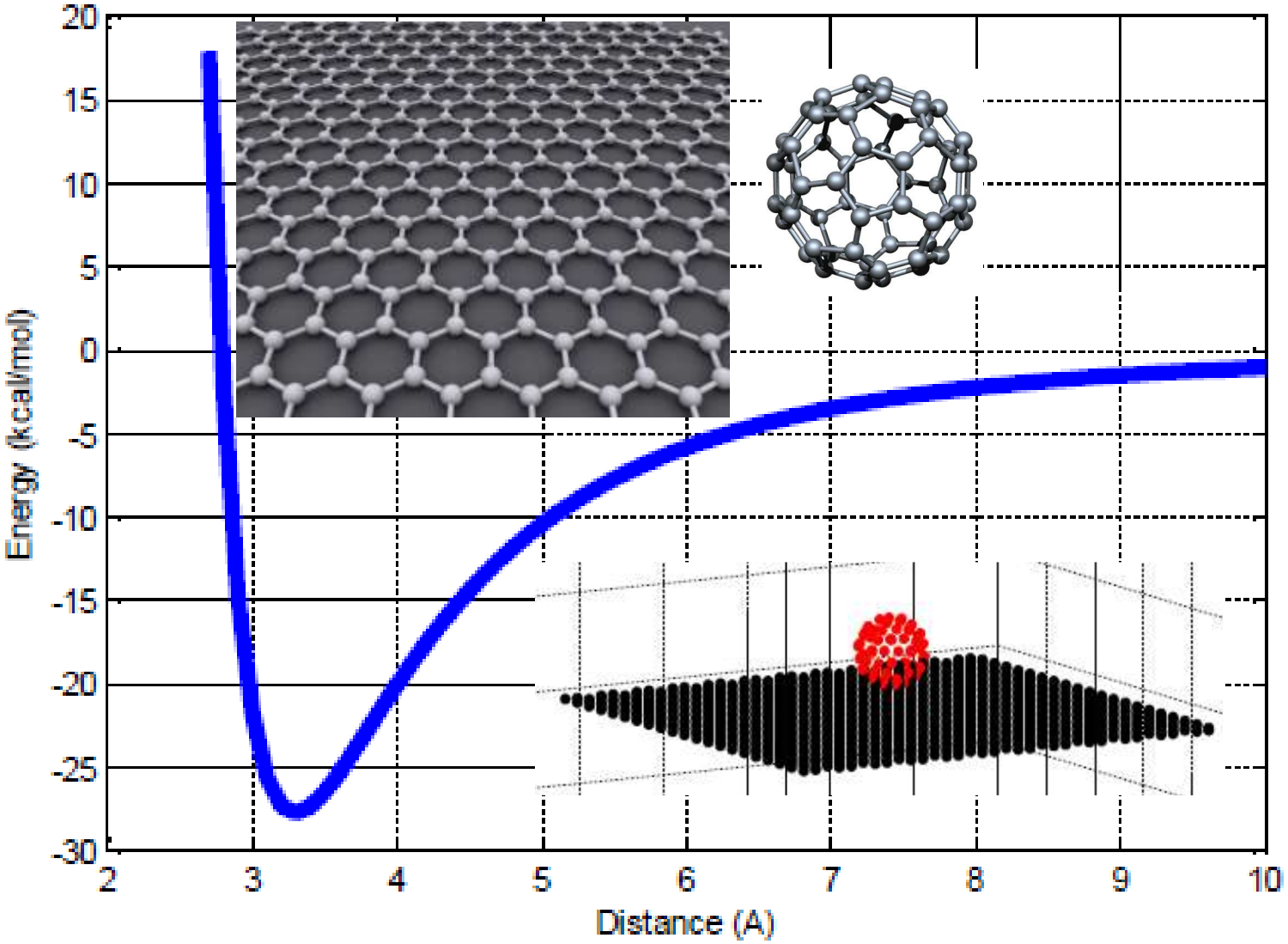
Molecular Mechanics



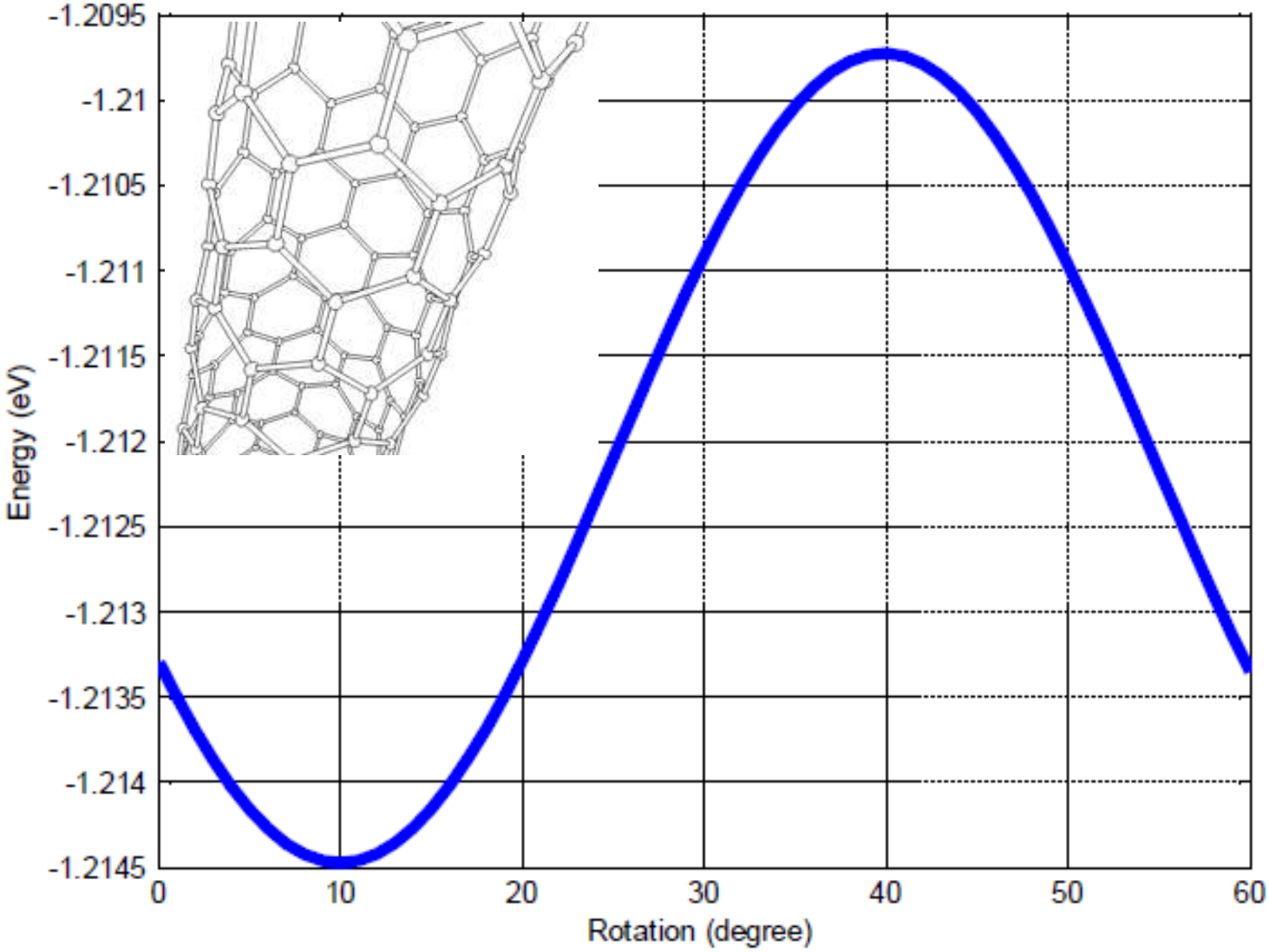
مقایسه پتانسیلهای مختلف در تخمین شعاع فولرین



تغییرات انرژی سیستم فولرین-گرافن بر حسب ارتفاع مولکول فولرین از سطح گرافن

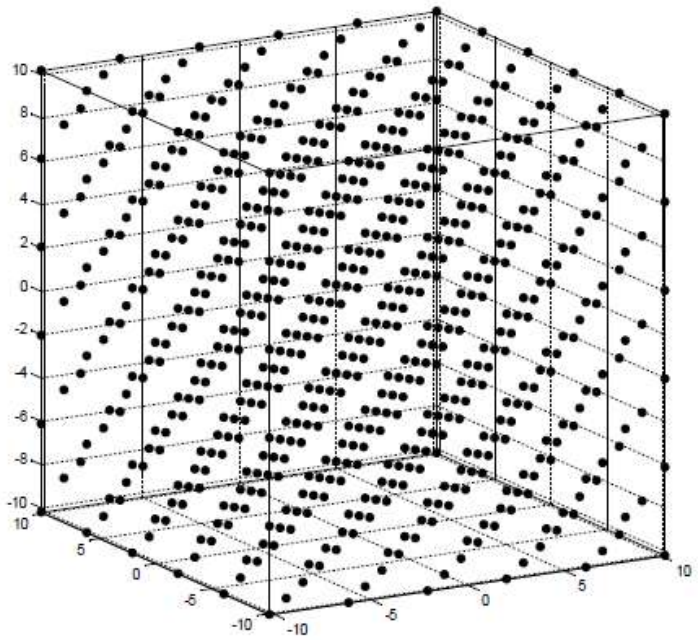


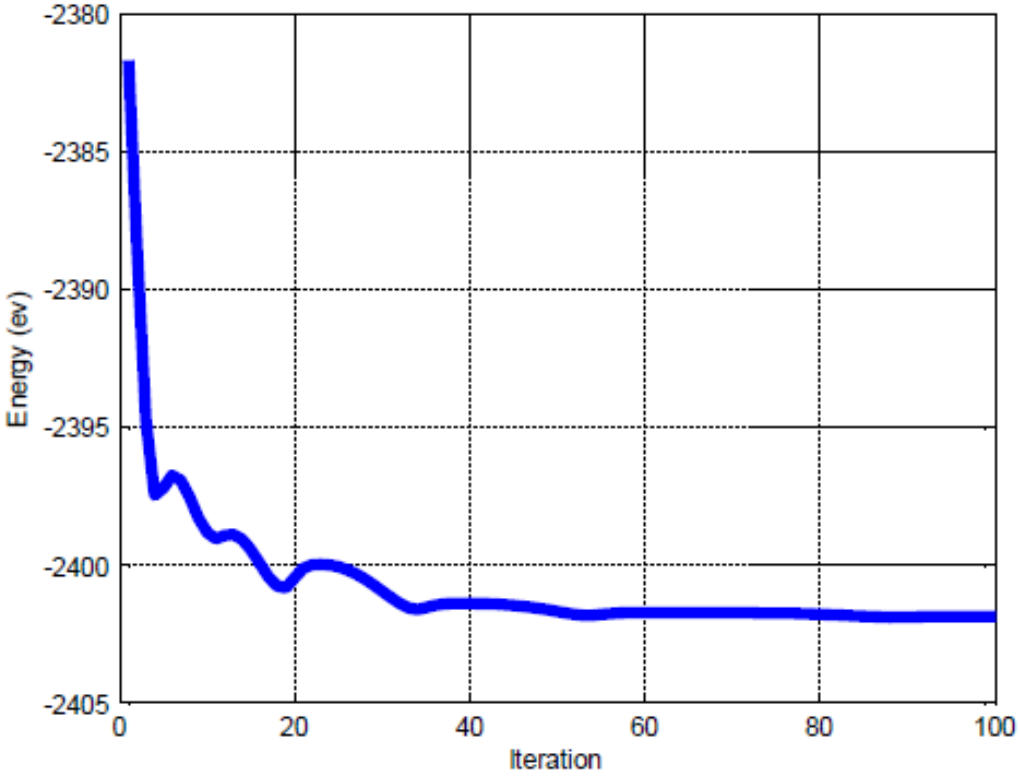
انرژی پتانسیل لنارد-جونز بین یک نانوتیوب و سطح نقره بر حسب زاویه دوران نانوتیوب حول محور خودش



تعیین ساختار بهینه برای یک یک مکعب از جنس طلا با ابعاد ۵ در ۵ در ۵ برابر ثابت شبکه (پتانسیل ساتن-چن)

- کمینه سازی انرژی و تعیین ساختار بهینه با استفاده از دو روش تندترین شیب و گرادیان مزدوج صورت پذیرفته است.





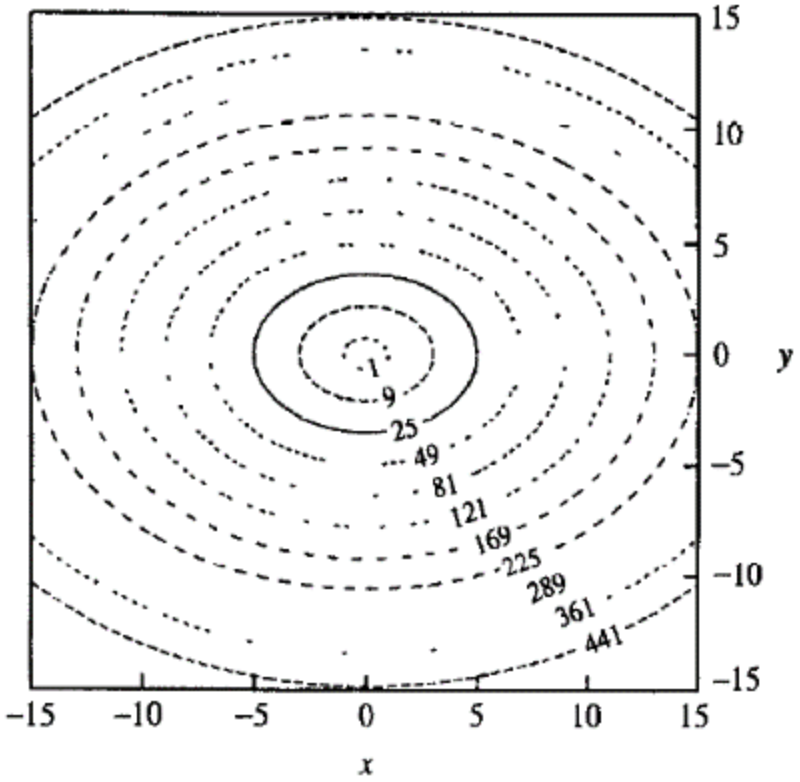
کمینه سازی انرژی

- در مدلسازی مولکولی توجه ویژه ای به **نقاط حداقل روی سطح انرژی** معطوف می شود.
- آرایشهای اتمی با **حداقل انرژی** با **حالتهای پایداری** از سیستم متناظر هستند.
- معمولا ساختارهای زیادی از سیستم منجر به ایجاد حداقل انرژی می گردد ولی هر تابع پتانسیلی برای یک سیستم مورد مطالعه تنها دارای یک نقطه کلی مینیمم است. (Global Minimum)
- برای **شناسایی ساختارهای هندسی متناظر با نقاط حداقل** روی سطح انرژی سیستم از یک **الگوریتم حداقل سازی** استفاده می شود.
- غیر از نقاط تعادل **پایدار** نقاط تعادل **ناپایدار** و نقاط **زینی** نیز مورد توجه هستند زیرا آرایش اتمها در این ساختار گذرا است.

مساله کمینه کردن انرژی

- مساله حداقل کردن انرژی را می توان به صورت بهینه سازی یک تابع چند متغیره f تعریف نمود.

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

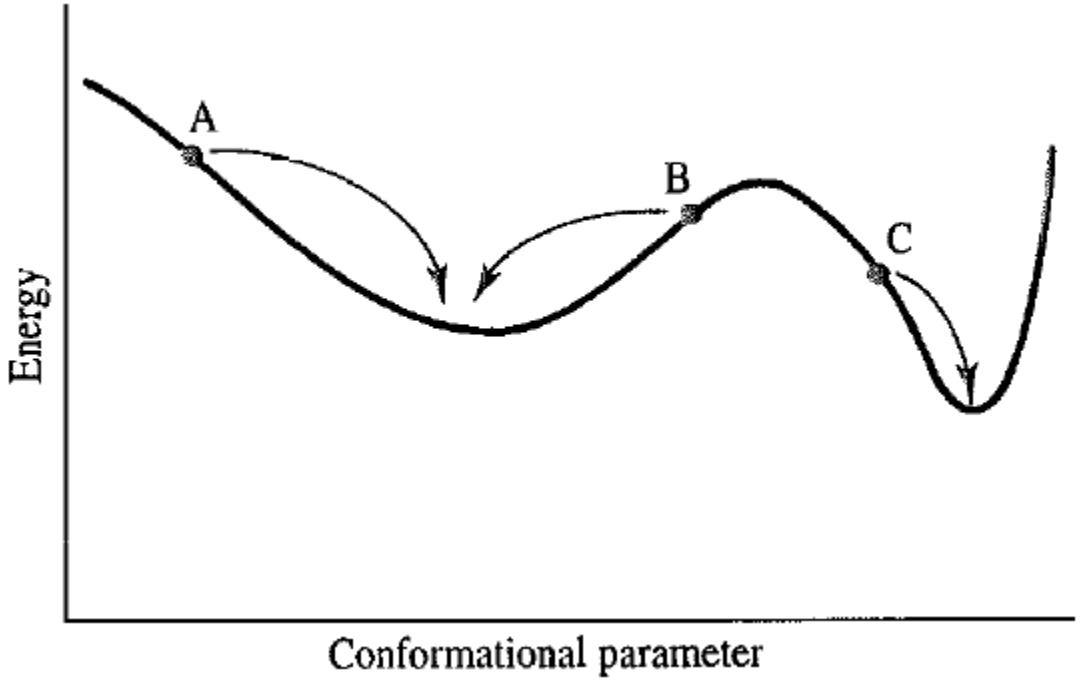


$$f(x, y) = x^2 + 2y^2$$

- بهینه سازی تابع تک متغیره

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0; \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} > 0$$

- هدف یافتن ساختاری است که در آن انرژی سیستم به صورت محلی حداقل گردد.



- **الگوریتم کمینه سازی ایده ال** الگوریتمی است که **خیلی سریع** و با استفاده از **حداقل پردازش و حافظه** مکان نقطه مینیمم را بیابد.
- **ورودی یک برنامه کمینه سازی انرژی**، مجموعه ای از مختصات اولیه برای اتمهای موجود در سیستم است. برای مثال **مکان اولیه اتمهای** یک پروتئین به صورت تجربی از **طریق کریستالوگرافی اشعه x یا NMR** بدست می آید.

- روشهای کمینه سازی انرژی دو دسته کلی اند:

❑ **روشهایی که از مشتقات انرژی استفاده نمی کنند** ۱- روش Simplex ۲- روش Sequential

❑ **روشهایی که از مشتقات انرژی استفاده می کنند:**

➢ **استفاده از مشتق تحلیلی:** این مشتقات دقیق هستند و معمولا می توان سریع آنها را محاسبه نمود.

➢ **استفاده از مشتق عددی:** گاهی اوقات در صورت عدم دسترسی به مشتق تحلیلی، بایستی سراغ روشهایی برویم که از مشتق عددی استفاده می کنند.

- نکته: در صورت نیاز به محاسبه مشتق عددی تابع انرژی نسبت به یک متغیر، به صورت زیر عمل می نماییم:

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} \cong \frac{E(x_1,\ldots,x_i+h_{xi},\ldots,x_n,Y,Z)-E(x_1,\ldots,x_i,\ldots,x_n,Y,Z)}{h_{xi}}+O(h)$$

$$or$$

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} \cong \frac{E(x_1,\ldots,x_i+h_{xi},\ldots,x_n,Y,Z)-E(x_1,\ldots,x_i-h_{xi},\ldots,x_n,Y,Z)}{2h_{xi}}+O(h^2)$$

روش Simplex

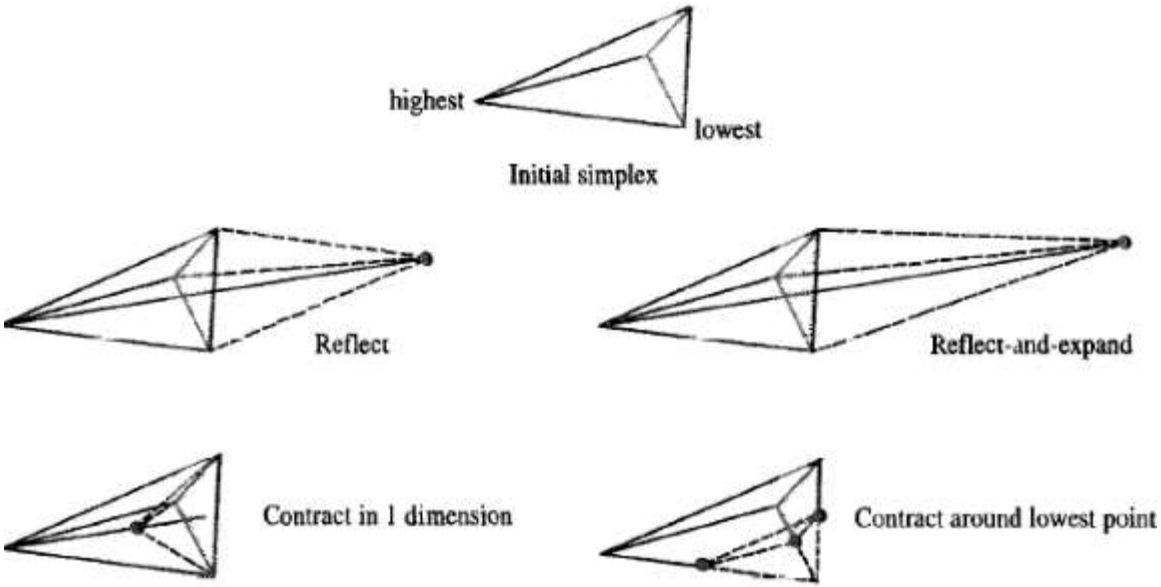
- یک سیمپلکس یک شکل هندسی با M+1 راس متصل به هم است، که M ابعاد تابع انرژی را نشان می دهد. برای یک تابع دو متغیره سیمپلکس یک مثلث است. برای سیستمی با N اتم سیمپلکس دارای 3N+1 راس خواهد بود.
- الگوریتم سیمپلکس حداقل انرژی را با حرکت روی سطح انرژی پتانسیل، با سه نوع حرکت اصلی بدست می آورد:

۱- انعکاس راس با بالاترین مقدار (انرژی)

از طریق صفحه مقابل و انبساط

۲- انقباض در یک بعد

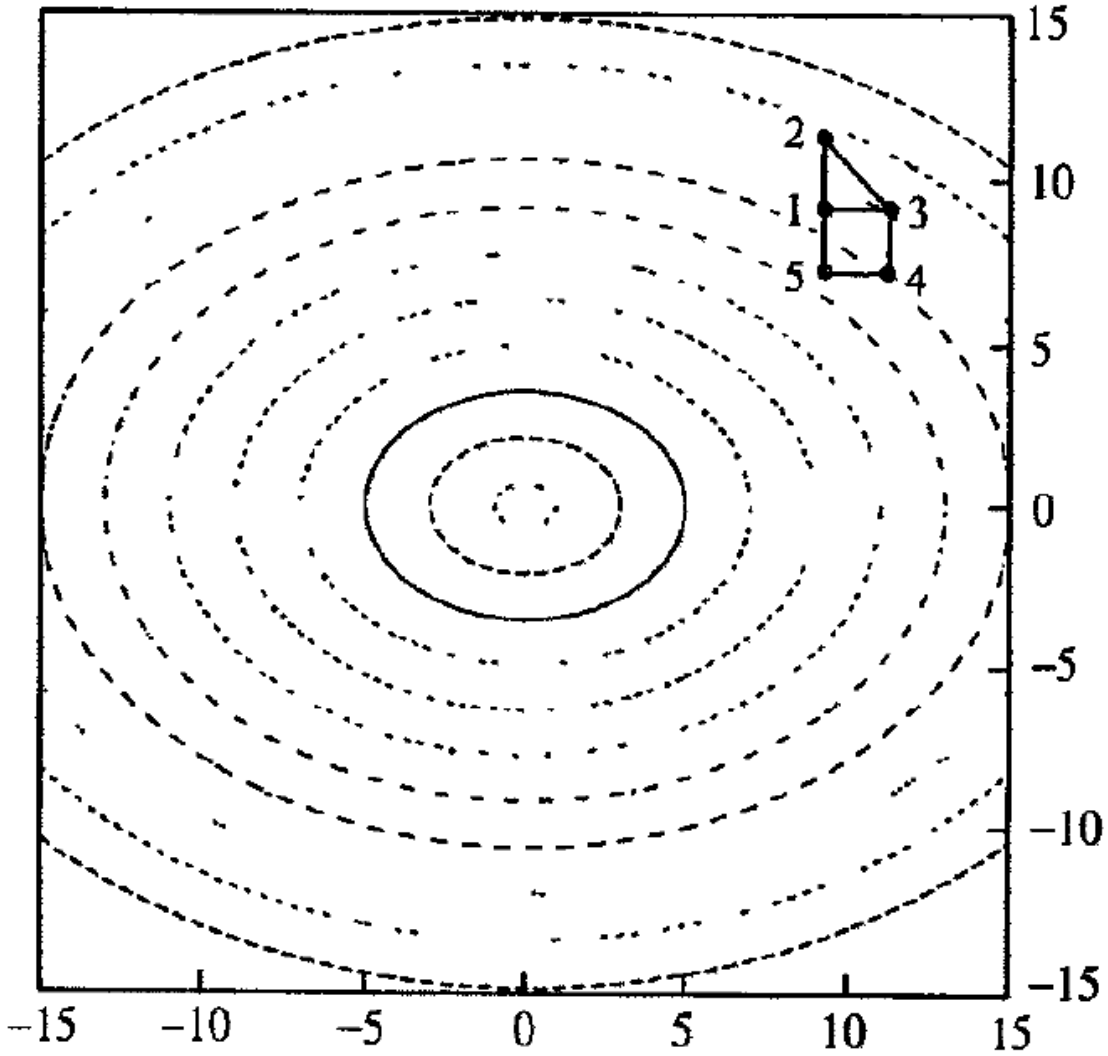
۳- انقباض به سمت پایین ترین نقطه



- در ابتدا انعکاس بالاترین راس از طریق صفحه مقابل صورت می پذیرد.
- اگر انرژی این نقطه جدید کمترین انرژی نسبت به نقاط دیگر سیمپلکس باشد می توان یک حرکت انعکاسی و انبساطی برای یافتن نقطه مینیمم انجام داد.
- زمانیکه به نقطه مینیمم نزدیک هستیم ممکن است انعکاس نتواند نقطه بهتری تولید کند در این صورت سیمپلکس از بالاترین نقطه در امتداد یکی از ابعاد منقبض می شود.
- اگر با این روش انرژی کاهش نیابد در آن صورت نوع سومی از حرکت امکان پذیر است که در آن سیمپلکس در تمام جهات منقبض می شود تا به طرف بهترین نقطه (نقطه ای با انرژی پتانسیل کمتر) کشیده شود.
- برای اجرای الگوریتم سیمپلکس ابتدا لازم است که رئوس سیمپلکس اولیه تولید شوند.
- باقی نقاط را می توان از روی ساختار اولیه و با توجه به ابعاد سیستم تولید نمود.
- **روش سیمپلکس در مراحل اولیه بهینه سازی بسیار خوب عمل می کند ولی بعد از طی چند مرحله اولیه بهتر است با روش دیگری جایگزین شود.**

- تعیین نقطه مینیمم تابع $f(x,y) = x^2 + 2y^2$

$$f_1 = 243$$
$$f_2 = 323$$
$$f_3 = 283$$
$$f_4 = 219$$
$$f_5 = 179$$



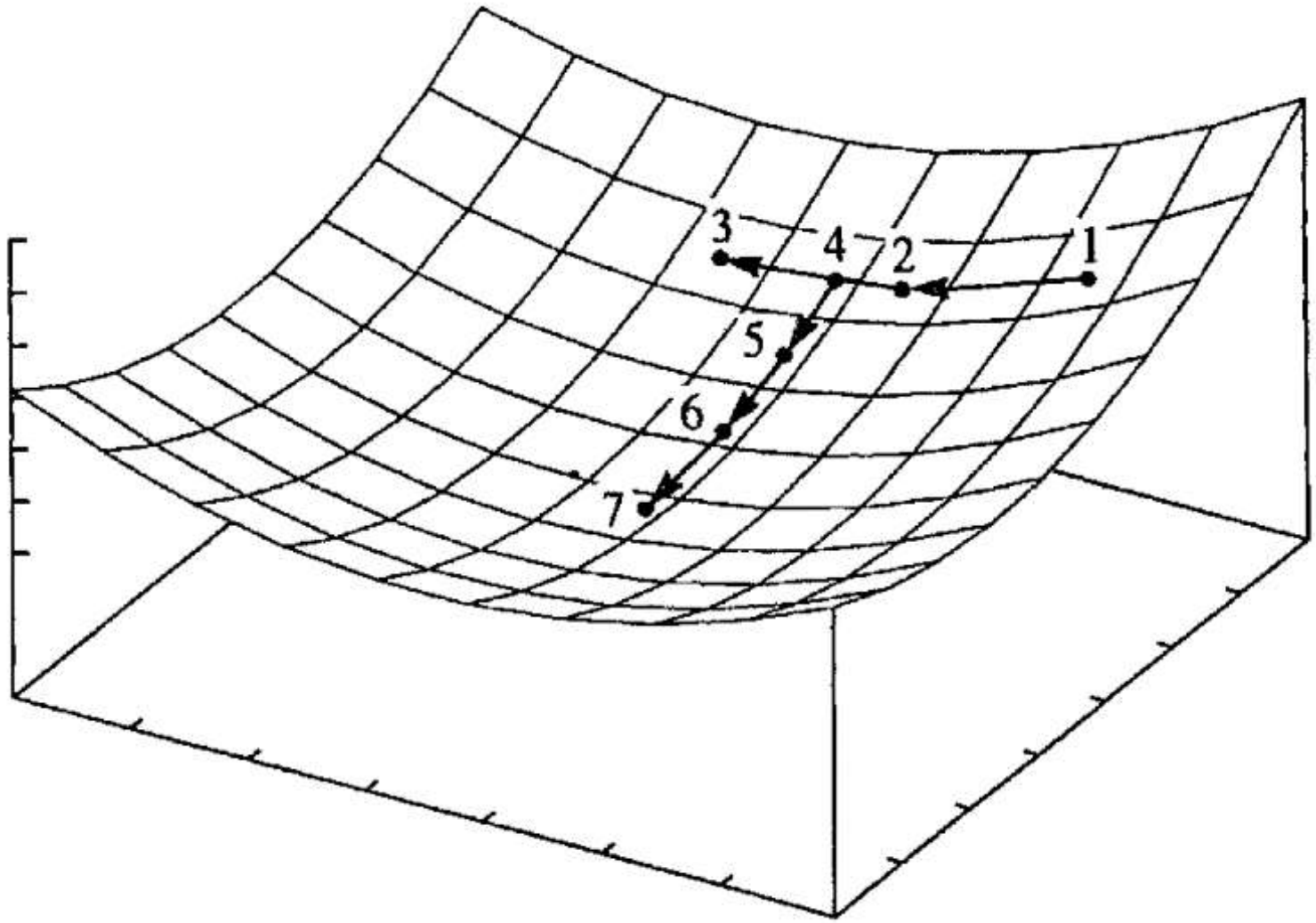
- برای این مساله الگوریتم سیمپلکس برای رسیدن به نقطه ای که مقدار تابع کمتر از 0.1 باشد به بیش از ۳۰ مرحله نیاز دارد.

روش ترتیبی یک جهته Sequential Univariate Method

- روش ترتیبی از یک نقطه اولیه شروع می کند و در ابتدا در راستای یک مختصات نقطه مینیمم را می یابد و سپس با یافتن نقطه بهینه در این راستا سراغ مختصه بعدی می رود تا مینیمم تابع را به ازای تغییر این مختصه بیابد.

- برای تعیین نقطه مینیمم در هر راستا دو ساختار تولید می شود برای نمونه ساختار مربوط به نقطه ی x_i را داریم دو نقطه دیگر $x_i + dx_i$ و $x_i + 2dx_i$ را نیز تولید نموده و یک سهمی از این سه نقطه می گذرانیم و نقطه مینیمم این سهمی را به عنوان نقطه مینیمم تقریبی در نظر می گیریم و سپس با استفاده از این سه نقطه (دو نقطه از نقاط قبلی و یک نقطه مینیمم سهمی) یک سهمی دیگر تولید شده و نقطه مینیمم جدید پیدا می شود تا اینکه میزان تغییرات تابع خیلی کم شود. در این صورت الگوریتم وارد مختصه بعدی می شود و با تولید دو ساختار جدید در مختصه جدید نقطه مینیمم را می یابد.

- مثالی از تعیین حداقل انرژی با استفاده از روش ترتیبی



روشهای کمینه سازی انرژی با استفاده از مشتق تابع

- با توجه به اطلاعات مفیدی که مشتق تابع انرژی در اختیار می گذارد در بیشتر روشهای کمینه سازی انرژی از مشتقات استفاده می شود. **جهت مشتق اول انرژی** (یا همان جهت گرادیان) به سمت **خلاف موقعیت کمینه انرژی** و مقدار گرادیان تعیین کننده شیب موضعی تغییرات تابع است.
- انرژی هر سیستم را می توان با **حرکت دادن هر اتم در پاسخ به نیرویی** که بر آن اعمال می شود کاهش داد. این نیرو با منفی گرادیان تابع انرژی برابر است.
- از اطلاعات مشتق دوم می توان برای فهمیدن نوع نقطه تعادل سیستم استفاده کرد.
- گرادیان تابع انرژی را در یک نقطه k به صورت زیر می نویسیم:

$$\mathbf{g}_k = \left[\frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}_k}\right]_{3N\times 1}$$

- مشتق دوم تابع انرژی، یک ماتریس $3N \times 3N$ است که به عنوان ماتریس هسیان یا ماتریس سختی شناخته می شود.

$$\mathbf{H}(i,j) = \frac{\partial^2 U}{\partial X(i)\partial X(j)}$$

روشهای کمینه سازی مشتقی مرتبه ی اول

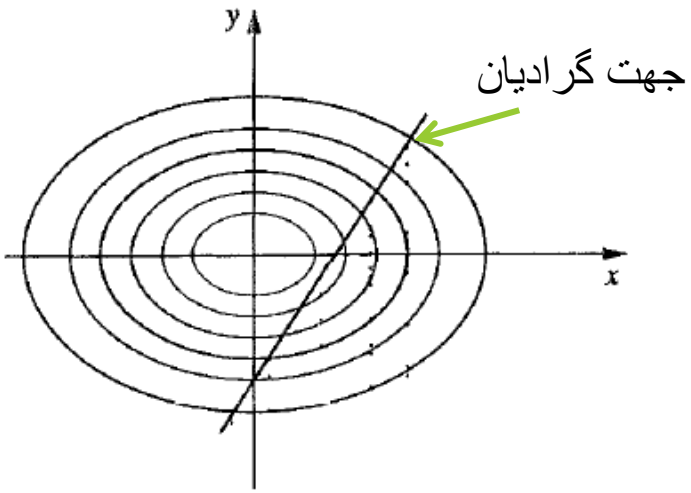
- دو روش مهم در بهینه سازی تابع انرژی بر اساس مشتق مرتبه اول روش **تندترین کاهش (Steepest Descents)** و روش **گرادیانهای مزدوج (Conjugate Gradients)** می باشند. در این روشها مختصات اتم ها به تدریج تغییر داده می شود و سیستم به نقطه حداقل نزدیک و نزدیک تر می شود.
- نقطه اول بهینه سازی بر اساس ساختار اولیه بوده و به صورت $\mathbf{x}_1$ نشان داده می شود و پس از $\mathbf{k}$ مرحله بهینه سازی به پیکر بندی $\mathbf{x}_k$ خواهیم رسید.

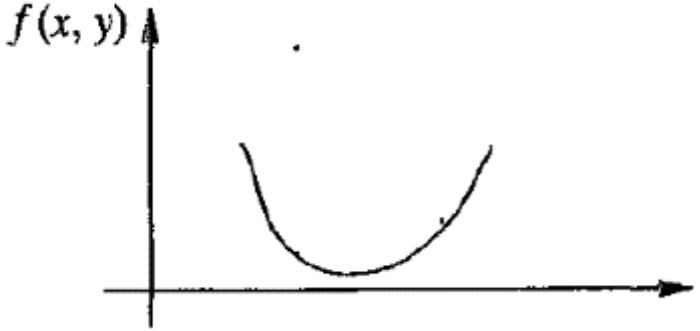
روش تندترین کاهش

- **روش تندترین کاهش در جهت موازی با نیروی خالص حرکت می کند که در تشبیه جغرافیایی مانند حرکت به سمت سرازیری است.** برای یک تابع جهت گرادیان را می توان به صورت زیر تعیین نمود:

$$\mathbf{s}_k = -\frac{\mathbf{g}_k}{|\mathbf{g}_k|}$$

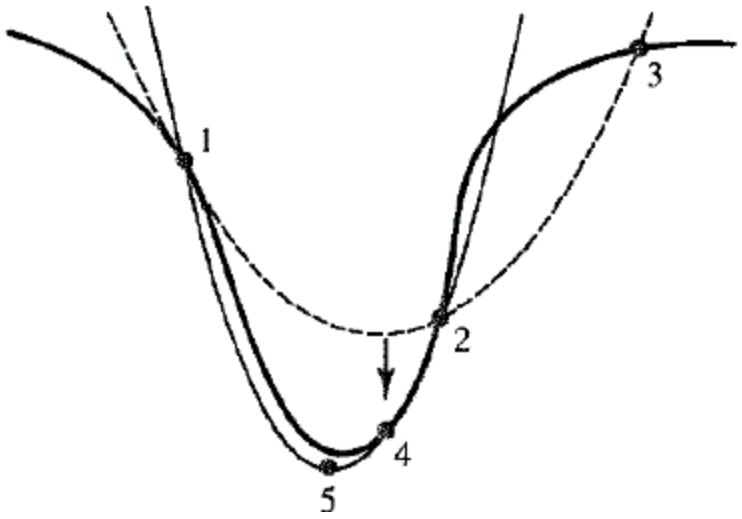
- پس از تعیین جهت حرکت بایستی در مورد مقدار حرکت در این جهت تصمیم بگیریم. شکل زیر را در نظر بگیرید. جهت گرادیان در نقطه شروع در امتداد خط نشان داده شده است. اگر یک برش از سطح انرژی را در امتداد این خط در نظر بگیریم، تابع از یک حداقل می گذرد و سپس افزایش می یابد. می توانیم این نقطه حداقل را با انجام یک جستجوی خطی بیابیم و یا یک حرکت با گام دلخواه در امتداد جهت نیرو انجام دهیم.





جستجوی خطی در یک بعد line search

- هدف از جستجوی خطی، یافتن نقطه کمینه در امتداد یک جهت مشخص است (مثلا در راستای یک خط در فضای چند بعدی).
- در ابتدا سه نقطه پیدا می شوند که انرژی نقطه میانی پایین تر از انرژی دو نقطه دیگر باشد. اگر سه نقطه با این مشخصات پیدا شود دست کم بایستی یک حداقل بین دو نقطه بیرونی وجود داشته باشد. با استفاده از یک فرآیند تکراری می توان فاصله بین سه نقطه را کاهش داد. یک روش منطبق کردن یک چندجمله ای درجه دوم بر این سه نقطه و یافتن محل مینیمم این چند جمله ای و تکرار این فرآیند (شکل زیر) تا نزدیک شدن به محل بهینه است.

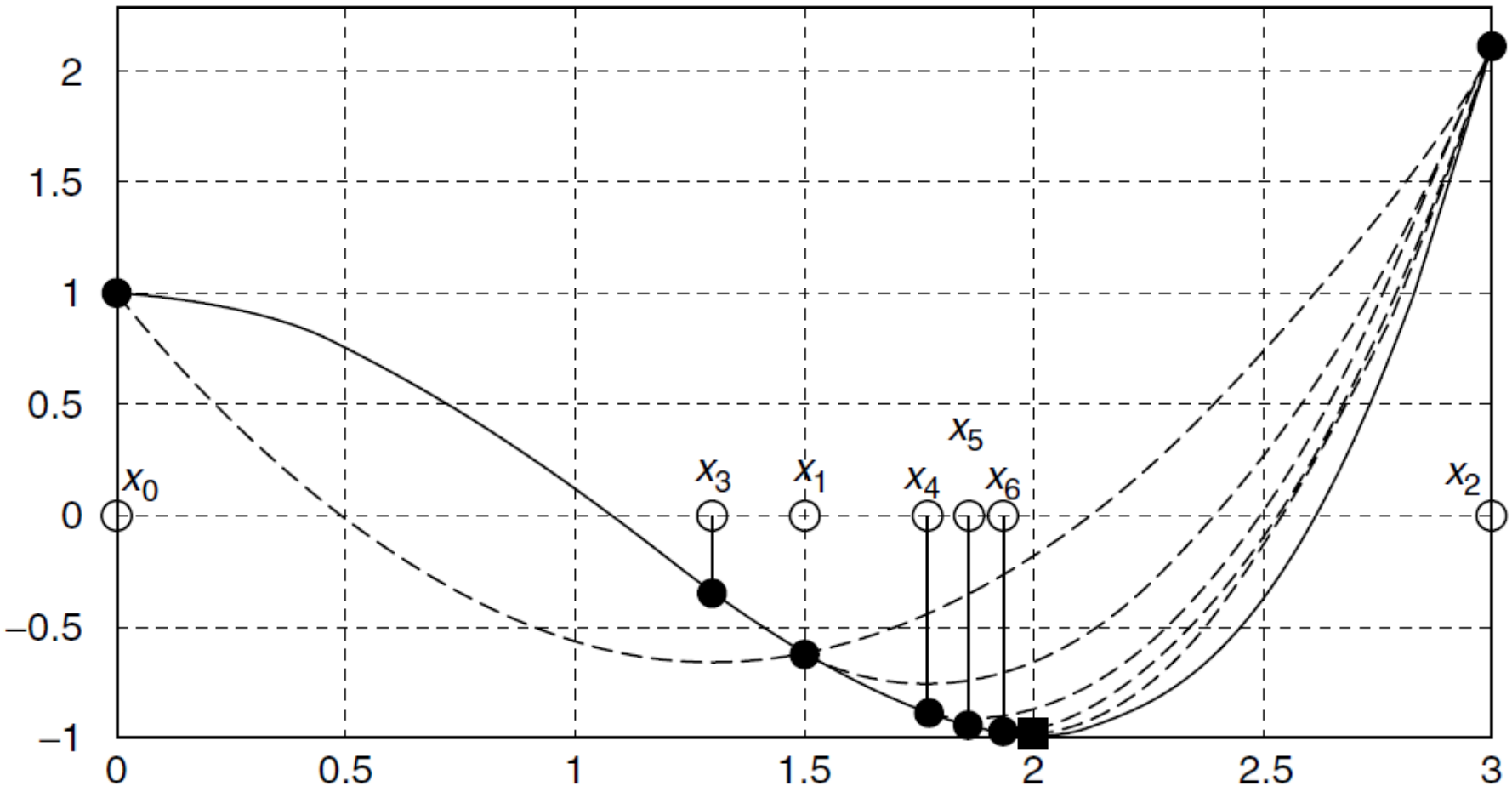


- در گرادیانی که با روش جستجوی خطی بدست می آید گرادیان

بر جهت قبلی عمود است. بنابراین در صورتی که روش جستجوی خطی در روش تندترین شیب مورد استفاده قرار گیرد داریم:

$$\mathbf{g}_k \bullet \mathbf{g}_{k-1} = 0$$

- نمونه ای از تعیین حداقل یک تابع با استفاده از روش منطبق کردن یک چندجمله ای درجه دوم

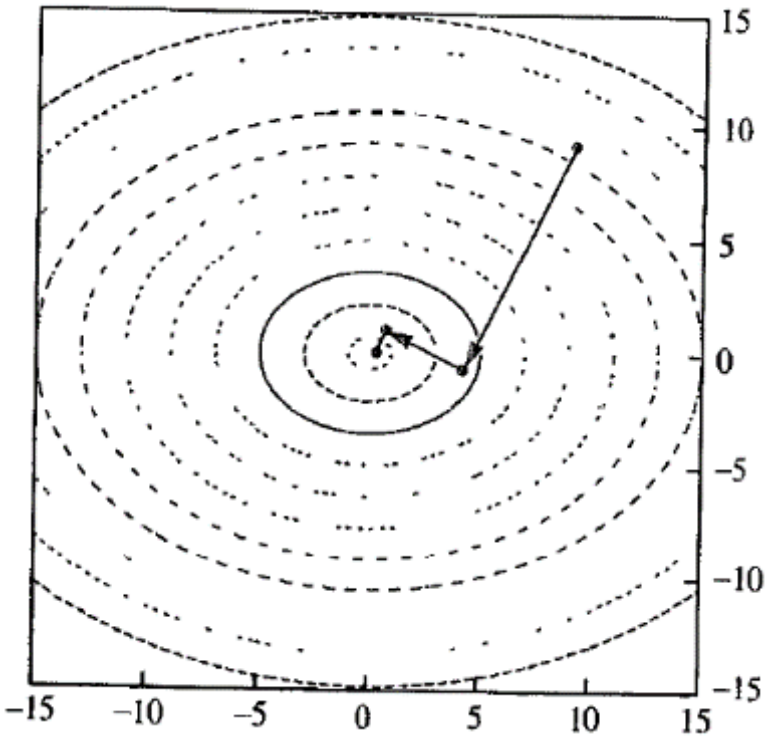


- مثال: اعمال روش تندترین کاهش برای تابع $f(x,y)=x^2+2y^2$

$$\nabla f(x,y)=(2x,4y) \qquad \mathbf{x}_0=(9,9)$$

با توجه به نقطه اولیه و شیب تابع یعنی $4y/2x$ بایستی مینیمم تابع را در راستای خط $y=2x-9$ یافت.

اگر این کار را با استفاده از ضرایب لاگرانژ انجام دهیم نقطه حداقل تابع به صورت $\mathbf{x}_1=(4,-1)$ بدست می آید. جهت خط بعدی بردار $-\nabla f=(-8,4)$ است و نقطه حداقل بعدی $\mathbf{x}_2=(2/3,2/3)$ است.



روش گام دلخواه

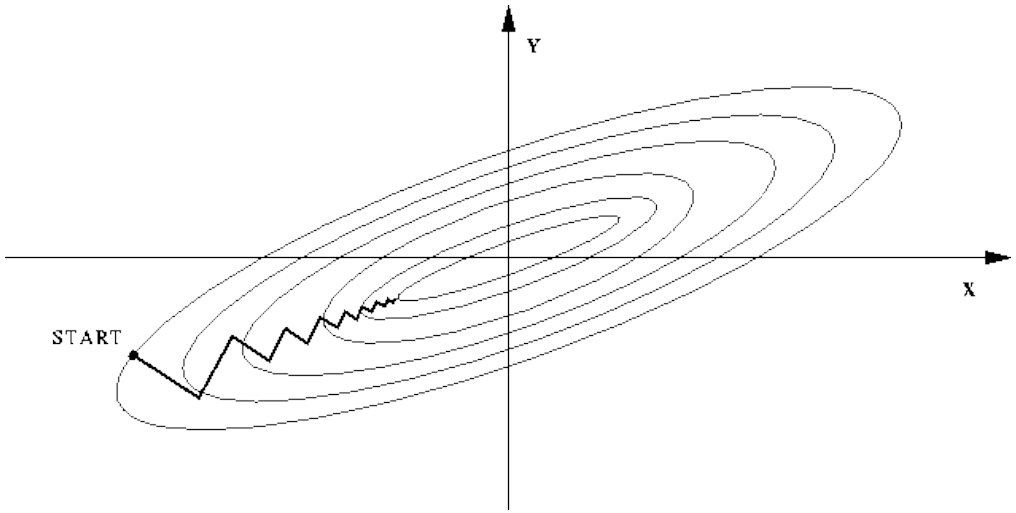
- با توجه به اینکه جستجوی خطی از نظر محاسباتی سنگین است می توان مختصات جدید را با یک حرکت با گام دلخواه در امتداد بردار واحد گرادیان $\mathbf{s}_k$ به دست آورد. در این صورت مجموعه مختصات بعد از مرحله k ام از معادله زیر بدست می آید:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{s}_k$$

- λ_k اندازه گام دلخواه است. در ابتدا یک مقدار پیش فرض برای طول گام لحاظ می شود. اگر اولین مرحله منجر به کاهش انرژی شود، برای مرحله دوم اندازه گام را با استفاده از یک ضریب افزاینده (مانند 1.2) افزایش می دهیم. این فرآیند تا وقتی که در هر مرحله انرژی کاهش یابد ادامه پیدا می کند. اگر در مرحله ای انرژی افزایش یافت فرض می شود که از روی چاه عبور کرده ایم و لذا یک ضریب کاهنده (مانند 0.5) استفاده می شود.
- **اندازه گام به ماهیت سطح انرژی بستگی دارد. بنابراین برای یک سطح هموار اندازه های گام بزرگ مناسب است در حالی که برای یک دره کوچک باریک اندازه ی گام بسیار کوچکتری نیاز است.**
- روش حرکت با گام دلخواه برای رسیدن به نقطه مینیمم به تعداد مراحل بسیار بیشتری نیاز دارد اما غالبا نیازمند تعداد مراحل کمتری از ارزیابی تابع است و بنابراین از نظر محاسباتی نسبت به روش جستجوی خطی به صرفه تر است.

جمع بندی روش تندترین کاهش

- جهت گرادیان با جهت نیروهای بین اتمی تعیین می شود و بنابراین روش تندترین کاهش یک روش مناسب **جهت آسایش یافتن قسمتهای پرانرژی در پیکربندی اولیه** است.
- این روش به طور کلی یک روش قوی است حتی اگر پیکربندی اولیه دور از نقطه مینیمم باشد و تقریب هارمونیک برای سطح انرژی یک تقریب ضعیفی باشد.
- مشکل این روش این است که برای رسیدن به نقطه مینیمم یک **دره باریک** نیاز به **تعداد زیادی مراحل** است. با توجه به **حرکت زیگزاگی** (به علت تغییر جهت ۹۰ درجه) ممکن است مسیر حرکت بهترین مسیر به سمت نقطه حداقل نباشد.



روش گرادیان های مزدوج

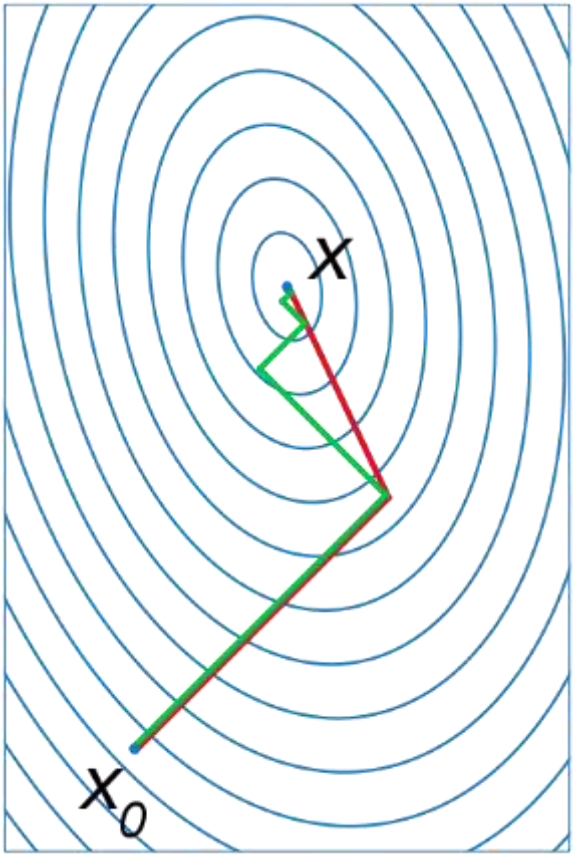
- روش گرادیان های مزدوج مجموعه ای از جهت ها را تولید می کند که در دره های باریک، مانند روش تندترین کاهش رفتار نوسانی از خود نشان نمی دهد.
- در روش تندترین کاهش گرادیانها (و لذا جهت مراحل پی در پی) متعامد هستند ولی در این روش جهت های پی در پی متعامد نیستند.
- روشهای گرادیانهای مزدوج در جهت $\mathbf{v}_k$ از نقطه $\mathbf{x}_k$ حرکت می کند که $\mathbf{v}_k$ از گرادیان در آن نقطه و بردار جهت مرحله قبلی $\mathbf{v}_{k-1}$ به دست می آید:

$$\mathbf{v}_k = -\mathbf{g}_k + \gamma_k \mathbf{v}_{k-1}$$

در اینجا γ_k یک ثابت عددی است که از رابطه زیر به دست می آید:

$$\gamma_k = \frac{\mathbf{g}_k \bullet \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1} \bullet \mathbf{g}_{k-1}}$$

- رابطه ی نوشته شده برای بردار جهت را می توان از مرحله دوم به بعد استفاده نمود بنابراین مرحله اول در روش گرادیانهای مزدوج (از نظر جهت گرادیان) مانند روش تندترین کاهش است.
- در حالت ایده آل می توان از روش جستجوی خطی برای یافتن حداقل یک بعدی در هر جهت استفاده کرد تا اطمینان حاصل شود که هر گرادیان بر گرادیان قبلی عمود است و هر جهت با جهت های قبلی مزدوج است. البته می توان از روش گام دلخواه نیز استفاده نمود.



- مقایسه دو روش تندترین شیب (سبز) و گرادیانهای مزدوج (قرمز)

در تعیین مینیمم یک تابع درجه دوم از دو متغیر

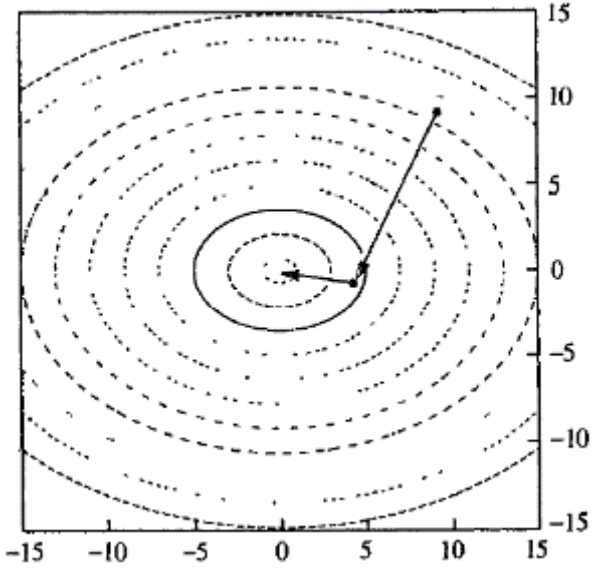
- **مثال:** اعمال روش گرادیان های مزدوج برای تابع $f(x,y)=x^2+2y^2$

$\nabla f(x,y)=(2x,4y)$ $\quad \mathbf{x}_0=(9,9)$ در گام اول مشابه روش تندترین شیب عمل می کنیم.

با توجه به نقطه اولیه و شیب تابع یعنی $4y/2x$ بایستی مینیمم تابع را در راستای خط $y=2x-9$ یافت.

اگر این کار را با استفاده از ضرایب لاگرانژ انجام دهیم نقطه حداقل تابع به صورت $\mathbf{x}_1=(4,-1)$ بدست می آید. برای یافتن جهت حرکت بعدی، ابتدا منفی گرادیان در نقطه فعلی را تعیین می کنیم که با بردار $-\nabla f=(-8,4)$ برابر است. طبق روش گرادیانهای مزدوج داریم:

$$\mathbf{v}_k=\begin{pmatrix}-8\\4\end{pmatrix}+\frac{(-8)^2+(4)^2}{(-18)^2+(-36)^2}\begin{pmatrix}-18\\-36\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-80/9\\+20/9\end{pmatrix}$$



برای تعیین نقطه دوم باید یک جستجوی خطی در امتداد خطی

با گرادیان $-1/4$ که از نقطه $\mathbf{x}_1=(4,-1)$ می گذرد انجام

دهیم. نقطه بهینه در امتداد این خط در مبدا قرار دارد که

همان مینیمم تابع است.

روشهای مشتق دوم: روش نیوتن-رافسون Newton-Raphson

- روشهای مرتبه ی دوم برای یافتن حداقل از هر دو مشتق اول (گرادیان) و دوم (ماتریس هسیان) استفاده می کنند. مشتقات دوم اطلاعاتی درباره ی انحنای تابع در اختیار می گذارند. روش **نیوتن-رافسون** ساده ترین **روش مرتبه ی دوم** است.
- می خواهیم مینیمم یک تابع انرژی تک متغیره را با استفاده از روش نیوتن-رافسون که در تعیین صفر یک تابع استفاده می شود بدست آوریم. کافی است محل صفر تابع گرادیان را تعیین نماییم:

$$U(x) = U(x_k) + U'(x_k)(x - x_k) + U''(x_k)(x - x_k)^2 / 2 + \cdots$$

$$U'(x) = U'(x_k) + U''(x_k)(x - x_k) + \cdots$$

$$U'(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{k+1} = x_k - \frac{U'(x_k)}{U''(x_k)}$$

- برای یک تابع چند متغیره این رابطه به صورت زیر تبدیل می شود:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - U''(\mathbf{x}_k)^{-1} U'(\mathbf{x}_k)$$

- **محاسبه معکوس ماتریس هسیان** برای سیستمهایی با **تعداد اتم زیاد** از نظر **محاسباتی پر هزینه** است و همچنین ممکن است به **مقدار قابل توجهی حافظه** نیاز داشته باشد. و لذا این روش **تنها برای سیستمهای با تعداد اتم کم** مناسب است.
- **برای توابع درجه ی دوم روش نیوتن-رافسون نقطه حداقل را از هر نقطه روی سطح در یک مرحله تعیین می کند.**
- مثال: اعمال روش نیوتن-رافسون برای تعیین مینیمم تابع $f(x,y)=x^2+2y^2$

$$\mathbf{f}''=\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & 4\end{pmatrix} \qquad \mathbf{f}''^{-1}=\begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 1/4\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \mathbf{x}^*=\begin{pmatrix}9\\ 9\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 1/4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}18\\ 36\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

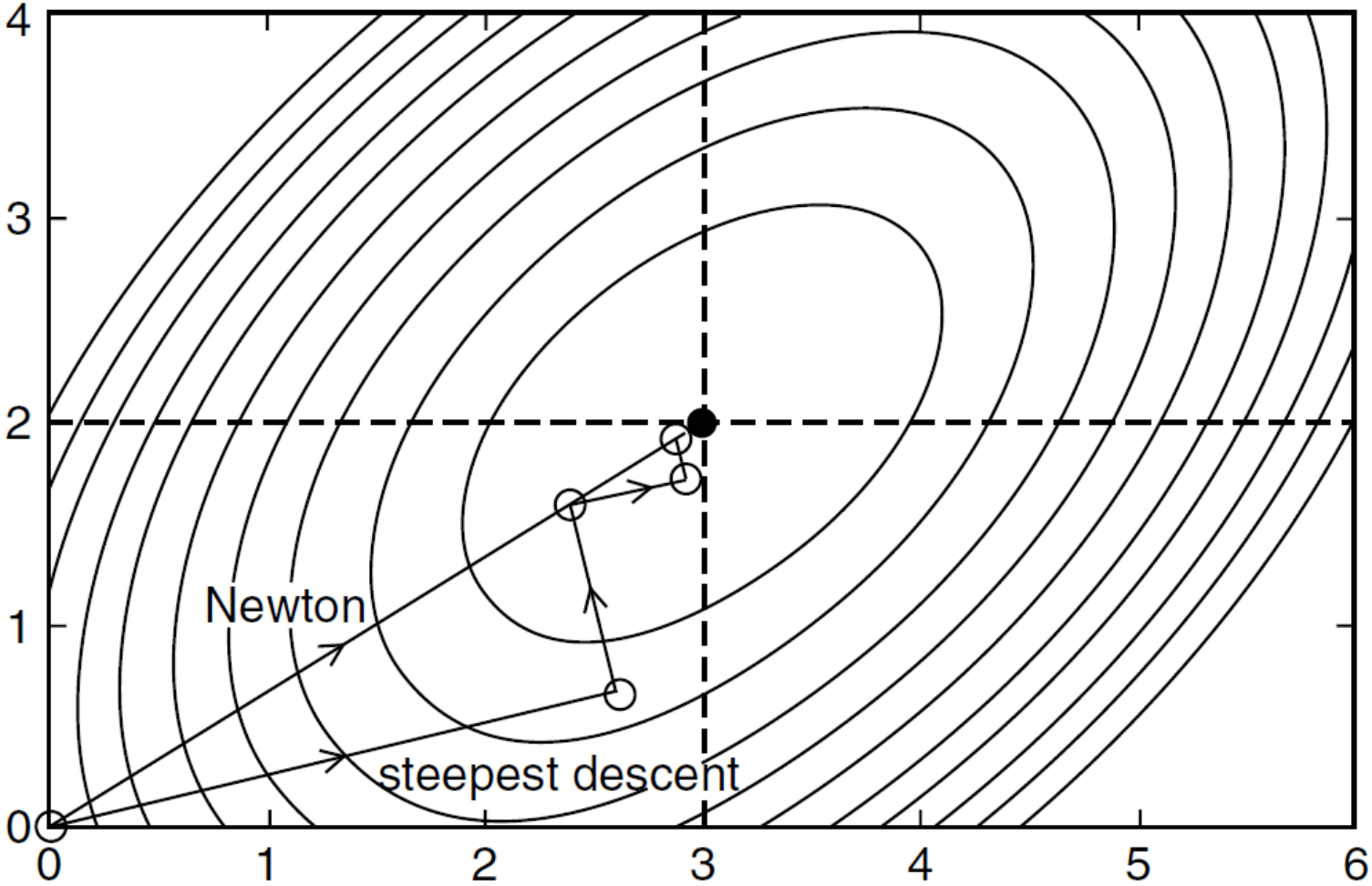
- برای این که روش نیوتن به سمت نقاط تعادل با حداقل انرژی نزدیک شود بایستی ماتریس هسیان مثبت معین باشد یعنی تمام مقادیر ویژه آن مثبت باشند.
- معمولا بهتر است ابتدا با یک روش قویتر وارد محدوده ای شویم که ماتریس هسیان مثبت معین است و سپس از روش نیوتن-رافسون استفاده نماییم.

مشکلات روش نیوتن-رافسون

- ممکن است تعیین فرم تحلیلی ماتریس هسیان بسیار سخت باشد.
- محاسبه معکوس یک ماتریس مرتبه ی (3N*3N) در هر مرحله بسیار حجیم و وقت گیر است.

- نمونه ای از مینیمم سازی با دو روش نیوتن-رافسون و تندترین شیب

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1 x_2 - 4x_1 + x_2^2 - x_2$$

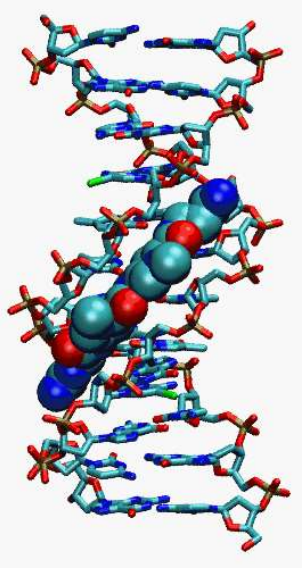


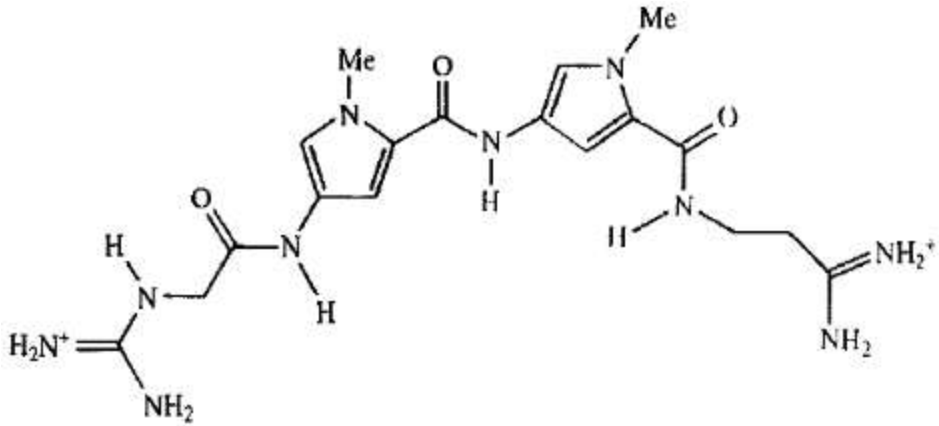
انتخاب روش بهینه سازی مناسب

- انتخاب روش بهینه سازی به عواملی نظیر **حجم محاسبات و حافظه مورد نیاز**، در دسترس بودن مشتقات تحلیلی و قدرت روش بستگی دارد.
- روشهایی که نیاز به محاسبه و ذخیره سازی و معکوس گیری از ماتریس هسیان دارند برای سیستمهای با تعداد اتم بالا (چندین هزار اتم) مشکل خواهند داشت.
- برای سیستمهای با تعداد اتم زیاد در مکانیک مولکولی از روشهای گرادیان مزدوج و تندترین شیب (کاهش) استفاده می شود.
- با این حال برای مولکولهای خیلی کوچک روش نیوتن-رافسون مناسب است، البته برای نقاط دور از نقطه حداقل الگوریتم همگرا نمی شود. لذا شاید لازم باشد ابتدا با استفاده از یک روش قویتر (مانند روشهای گرادیان مزدوج و تندترین شیب) به نقطه حداقل نزدیک شویم و سپس با استفاده از روش نیوتن نقطه حداقل را بیابیم.

مقایسه کارایی دو روش تندترین کاهش و گرادیانهای مزدوج

- یک مدل از آنتی بیوتیک نتروپسین که به DNA متصل می شود را می خواهیم طی دو مرحله به حالت انرژی کمینه برسانیم. هدف مرحله اول تولید پیکربندی است که هیچ گونه بر هم کنش پر انرژی نداشته باشد. سپس ساختار دوباره حداقل سازی می شود تا ساختاری بسیار نزدیکتر به انرژی کمینه حاصل گردد.





Method	Initial refinement (Av. gradient <1 kcal Å^{-2}) CPU time (s)	Number of iterations	Stringent minimisation (Av. gradient <0.1 kcal Å^{-2}) CPU time (s)	Number of iterations
Steepest descents	67	98	1405	1893
Conjugate gradients	149	213	257	367

معیار همگرایی و اتمام مرحله کمینه سازی انرژی

- تکرار الگوریتم بهینه سازی برای دفعات مشخص
- استفاده از تغییرات انرژی و خروج از برنامه بهینه سازی در صورت کمتر شدن مقدار تغییرات انرژی از یک حد مشخص
- استفاده از تغییرات بین دو پیکربندی و خروج از برنامه بهینه سازی در صورت کمتر شدن مقدار تغییرات پیکربندی از یک حد مشخص
- استفاده از بزرگی بردار گرادیان

$$\mathrm{RMS} = \sqrt{\frac{\mathbf{g}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}}{3N}}$$

- استفاده از بزرگترین المان بردار گرادیان

$$Cond = \max_{1 \le j \le 3N}\left(\left|\mathbf{g}_k(j)\right|\right)$$