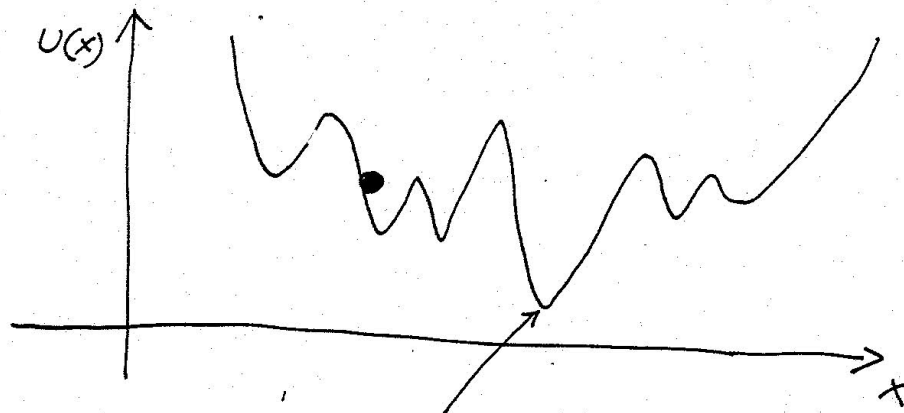


§ Zagadnienie porzukiwania globalnego minimum.



Jak dotniec do tego minimum?

Metody lokalne, typu "najszybszego spadku" lub "Newtona - Raphsona" nieskuteczne.

1. Wykonanie metod kwantowej dynamiki. Uzycie układow kwantowym, cząstka/cząstki będą tunelować, odbierając energię, układow powinien dotniec w okolicie minimum globalnego.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$H = \hat{T} + V$$

Jak rozwiązać równanie Schrödingera

2. Metoda "drugiej pochodnej".

- Do badanej funkcji dodajemy "trójkę" jej drugiej pochodnej:

$$U^{[1]}(x) = U(x) + \beta U''(x), \beta > 0$$

- $U^{[2]}(x) = U^{[1]}(x) + \beta U^{[1]''}(x)$

- $U^{[N]}(x) = \left(1 + \beta \frac{d^2}{dx^2}\right)^N U(x)$

Patrz Fig. 1 oraz Fig. 2, gdzie

$$U \stackrel{\text{ozn}}{=} f$$

- Po zlokalizowaniu minimum, powtórzymy z całą procedurą "trójmiejscowe" zlokalizowanego minimum.

3. Metoda "dyfuzyjna".

Metoda jest uogólnieniem "metody drugiej pochodnej".

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{t}{N} \frac{d^2}{dx^2} \right)^N U(x) \\
 &= \exp \left(t \frac{d^2}{dx^2} \right) U(x)
 \end{aligned}$$

Pozostaliśmy $\beta = \frac{t}{N}$, $t > 0$ parametr.

Uwaga: $\exp(A)$ oznacza operator, reprezentowany jako szeregi Taylora:

$$\exp(A) = 1 + A + \frac{1}{2!} A^2 + \frac{1}{3!} A^3 + \dots$$

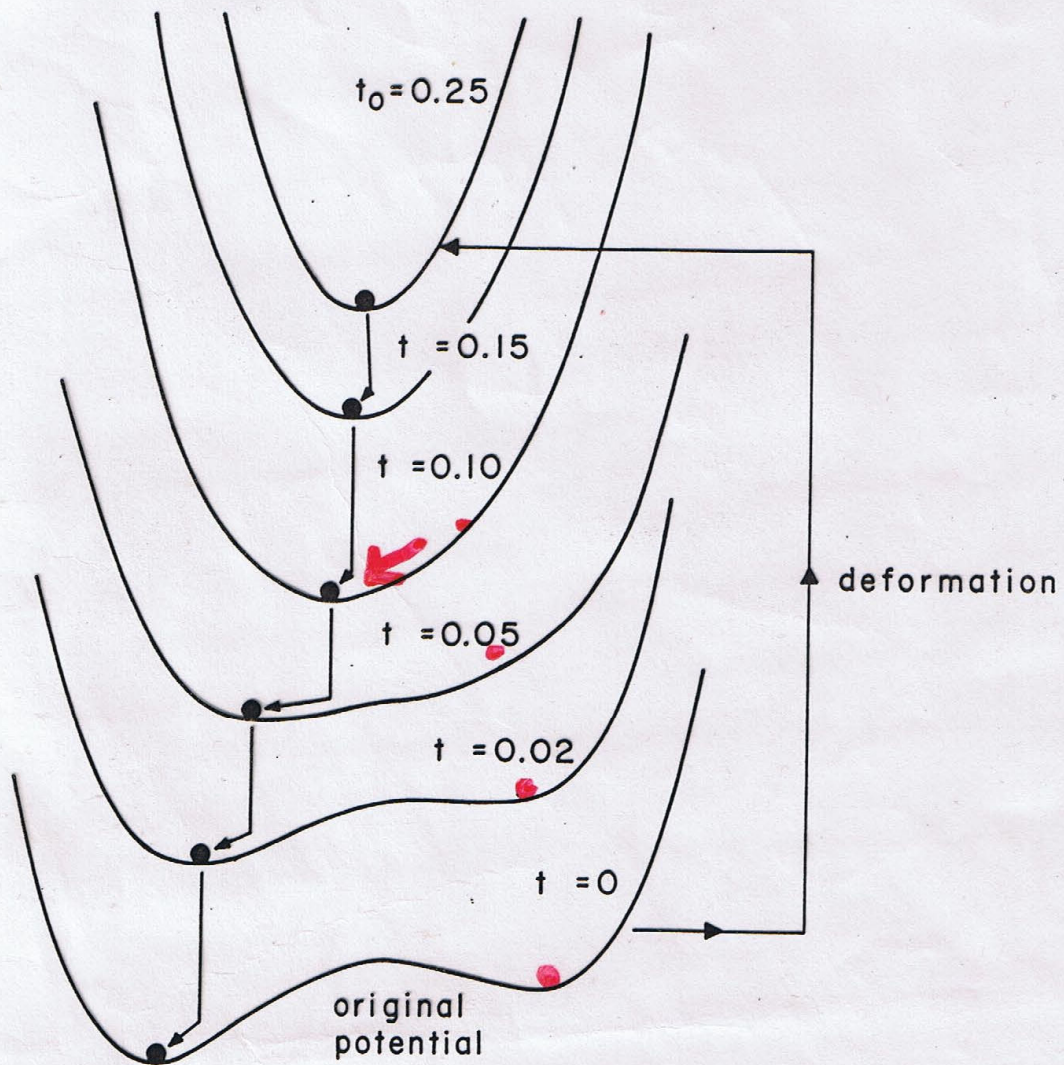
Funkcja $U(x, t)$ spełnia równanie dyfuzji lub przewodnictwa ciepła,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{\partial U}{\partial t} \quad (*)$$

z warunkiem początkowym

$$U(x, 0) = U(x)$$

- Algorytm. Aby znaleźć ⁴ najchłodniejsze "miejsce" x_{min} ($U_{min} = U(x_{min})$)
 poprzez rozwiązanie zagadnienia (*)



Z pracy
L. Pielki i H. Scheraga

-4-

znajdujemy $V(x, t)$, dla dostatecznie dużych t . V jest już dostatecznie gładkie. Poszukujemy

minimum $V_t(x)$ metodami

konwencjonalnymi. Wracamy z

odwzorowaniem $V_t(x) \rightarrow V_0(x) = V(x)$ "trzymając się" zaleźnego minimum.

Problemy:

W przypadku funkcji:



musimy mieć utropoty. Zawsze metoda kwantowa jak i dyfuzyjna globalizuje nasz nasz szersze minimum niż wąskie.