Lennard-Jones 38 clusters

rgmin (0.4.0) · DOGLEG
rgmin (0.4.1) · DOGLEG
rgmin (0.4.0) · NEWTON
rgmin (0.4.1) · NEWTON
eOn (3.6.0) · LBFGS
rgmin (0.4.0) · LBFGS
rgmin (0.4.1) · LBFGS
DL-FIND (0.0.3) · L-BFGS
TSASE (1.0) · SDLBFGS
pele (0.1.2) · MYLBFGS
OPTIM (svn-snapshot) · L-BFGS
pele (0.1.2) · LBFGS
GMIN (df8da5992675) · LBFGS
ASE (3.29.0) · BFGSLineSearch
vc-SQNM (1.3) · ASE-SQNM
vc-SQNM (1.3) · SQNM
rgmin (0.4.0) · BB
rgmin (0.4.1) · BB
rgmin (0.4.0) · CG
rgmin (0.4.1) · CG
ASE (3.29.0) · PreconLBFGS
ASE (3.29.0) · FIRE
Sella (2.6.0) · Sella
rgmin (0.4.0) · FIRE
rgmin (0.4.1) · FIRE
rgmin (0.4.0) · FIRE2
rgmin (0.4.1) · FIRE2
rgmin (0.4.0) · BFGS
rgmin (0.4.1) · BFGS
LAMMPS (30 Sep 2026) · Hessian-free truncated Newton
ASE (3.29.0) · PreconFIRE
rgmin (0.4.0) · QUICKMIN
rgmin (0.4.1) · QUICKMIN
rgmin (0.4.1) · DIIS
pele (0.1.2) · FIRE
rgmin (0.4.1) · SR1
rgmin (0.4.1) · SR2
DL-FIND (0.0.3) · conjugate gradient
DL-FIND (0.0.3) · steepest descent
LAMMPS (30 Sep 2026) · Quickmin
LAMMPS (30 Sep 2026) · conjugate gradient
LAMMPS (30 Sep 2026) · FIRE
rgmin (0.4.0) · SD
rgmin (0.4.1) · SD
rgmin (0.4.1) · ADAM
LAMMPS (30 Sep 2026) · steepest descent
pysisyphus (0.1.dev1) · conjugate gradient
pysisyphus (0.1.dev1) · steepest descent
rgmin (0.4.0) · ADAM
rgmin (0.4.0) · SR1
rgmin (0.4.0) · DIIS
TSASE (1.0) · MDMin
pele (0.1.2) · steepest descent
pysisyphus (0.1.dev1) · L-BFGS
rgmin (0.4.0) · SR2

10^1 10^2 10^3 10^4

Force calls

Success Failure

Force calls on each recorded start for Lennard-Jones 38 clusters. The box is the quartiles of those counts. A blue point is a success and a vermillion cross is a recorded failure (10441). The horizontal position is the recorded count. The vertical offset only keeps marks from covering one another.