

# Stellingen

behorende bij het proefschrift

'A Stochastic quasi Newton method for molecular simulations'

1. De inverse Hessiaan van de energiepotentiaal als mobiliteitstensor voor de Langevin vergelijking draagt bij aan de snellere verplaatsing over energiebarrières.

*Hoofdstuk 2 van dit proefschrift*

2. Het gefactoriseerde-secant-update schema (FSU) convergeert naar de inverse Hessiaan en is een goede basis voor de constructie van een gelimiteerde - in opslag en rekentijd - FSU versie (L-FSU).

*Hoofdstuk 3 van het proefschrift*

3. Het (L)-FSU schema draagt automatisch bij aan multi-schaling en de bewandeling van grotere gebieden van het energie landschap.

*Hoofdstuk 3 en 4 van het proefschrift*

4. De constructie van (L)-FSU en de automatische multi-schaling eigenschap van de mobiliteit in de Langevin vergelijking, geeft ons een veelbelovende methode voor moleculaire simulaties.

*Hoofdstuk 5 van het proefschrift*

5. Voor een niet-triviaal model zal de Fourier Acceleratie methode de kritische vertragingen in simulaties niet compleet ontnemen.

*B. Dünweg, Computer simulations of surfaces and interfaces, proceedings of the NATO Advanced Study Institute (2003)*

6. Volledige benutting van voorspellende eigenschappen van simulaties vereist multi-schaling methodes.  
*J.T. Oden, T. Belytschko, V. Babuska, T.J.R. Hughes, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 192, 913 (2003)*
7. Ondanks het bestaan van betere optimalisatietechnieken blijft de BFGS methode de meest populaire quasi-Newton methode.  
*J. A. Ford and S. Tharmlikit, J. Comp. Appl. Math. 152, 133 (2003)*
8. Door onderzoek naar nieuwe en verbetering van bestaande optimalisatietechnieken, ontbreekt er fundamenteel onderzoek over de oorzaak van het goed presteren van de populaire L-BFGS methode.
9. Wovon man nicht sprechen kann, darüber *soll* man schweigen.  
*L.J.J. Wittgenstein (modified by C.D. Chau)*
10. Goed in het  $\beta$ -vak wiskunde zijn = goed in taal zijn.
11. Het lijkt erop dat  $\epsilon\nu\rho\omega$  momenten belangrijker zijn in de wetenschap dan  $\epsilon\nu\rho\eta\kappa\alpha$  momenten.