Supplementary information for energy optimization approaches in orbital-free density-functional theory

May 5, 2023

Contents

1 Figures

Figure 1: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the conjPW91 functional.
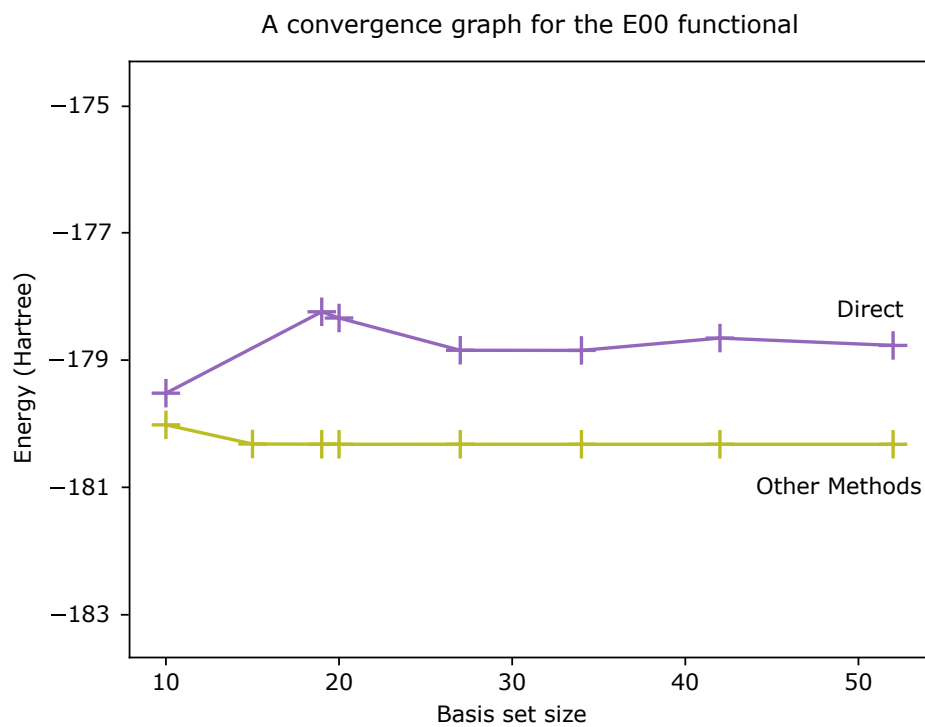
Figure 2: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the E00 functional. Results for acevedo, basin hopping, CCH, differential evolution, dual annealing, TRIM, DIRECT+TRIM and TRIM+repeats are visually indistinguishable on this plot and are labelled together as "other methods".

A convergence graph for the OL1 functional
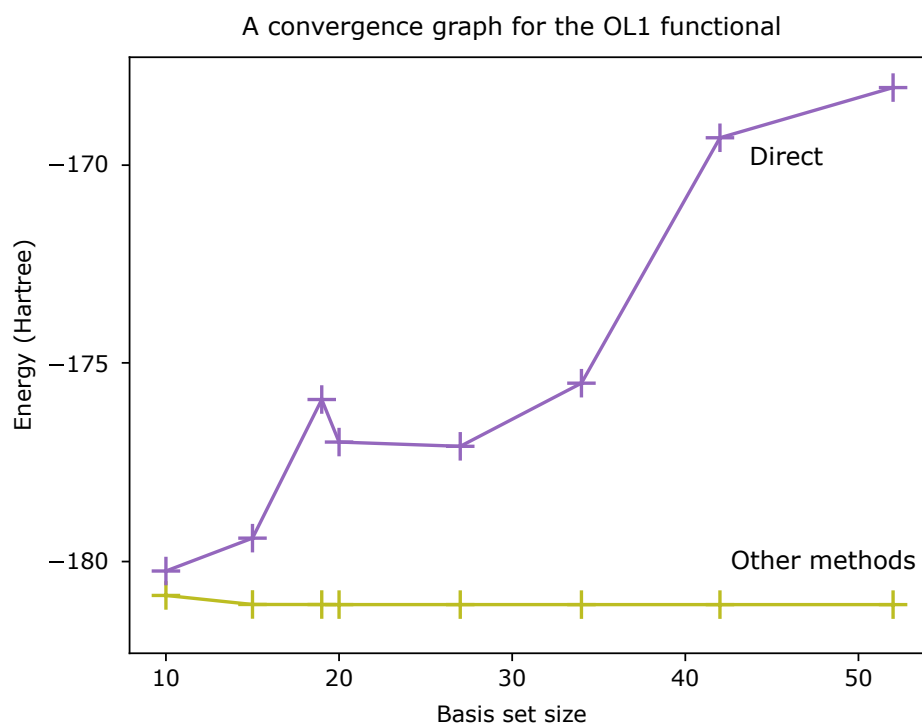
Figure 3: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the OL1 functional. Results for acevedo, basin hopping, CCH, differential evolution, dual annealing, TRIM, DIRECT+TRIM and TRIM+repeats are visually indistinguishable on this plot and are labelled together as "other methods".
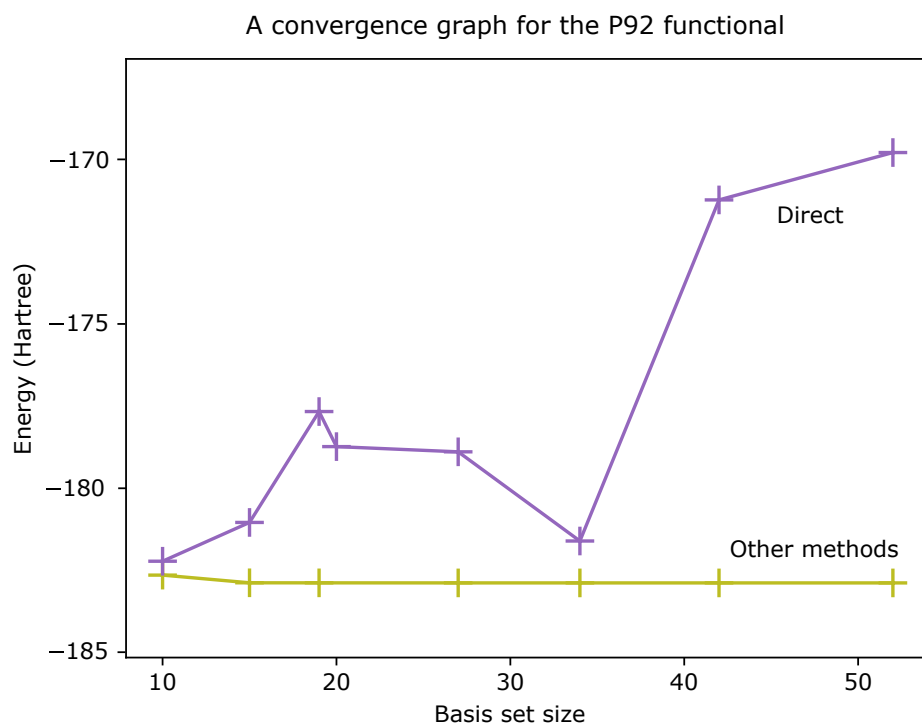
Figure 4: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the P92 functional. Results for acevedo, basin hopping, CCH, differential evolution, dual annealing, TRIM, DIRECT+TRIM and TRIM+repeats are visually indistinguishable on this plot and are labelled together as "other methods".

A convergence graph for the TF + 1/5 vW functional
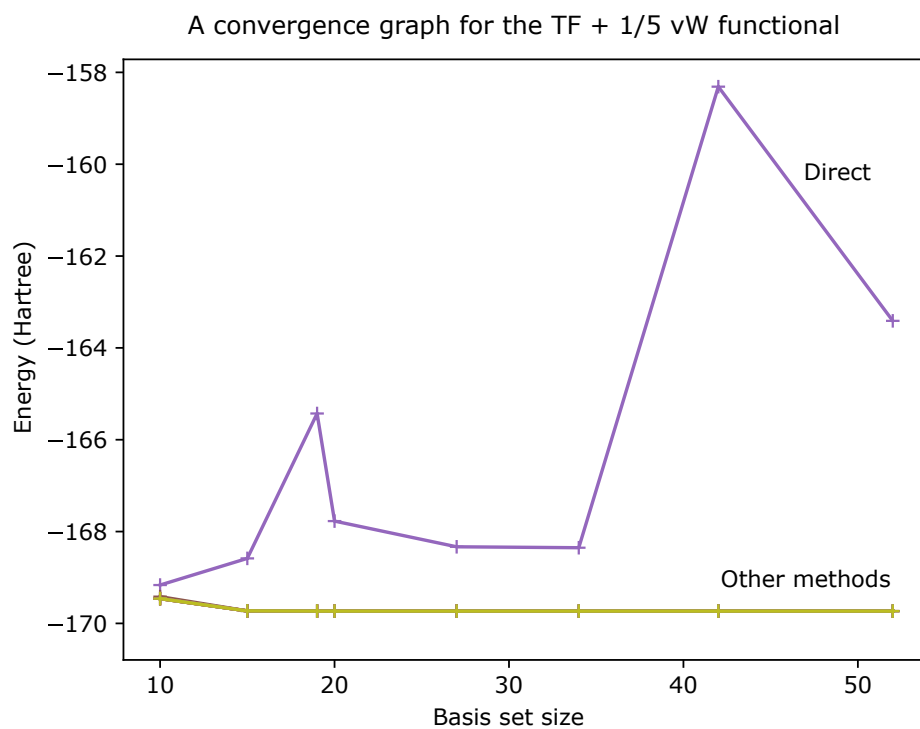
Figure 5: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the TF + $0.2 \times VW$ + LDA functional. Results for acevedo, basin hopping, CCH, differential evolution, dual annealing, TRIM, DIRECT+TRIM and TRIM+repeats are visually indistinguishable on this plot and are labelled together as "other methods".
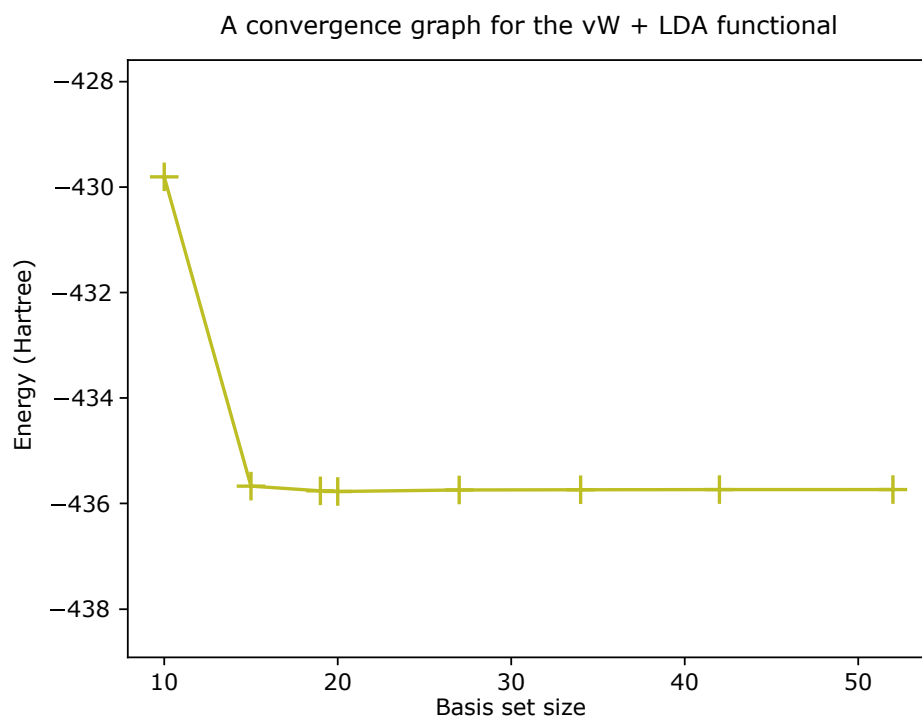
Figure 6: A basis set convergence graph showing how the energy converges with increasing basis set size for the VW + LDA functional. All methods are represented except CCH which had incomplete results for this functional.

Atoms

2   10s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

2.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7196132168	1300.0	1300.0	1300.0	19.6	10.0	286.4
He	-3.3680197776	1126.6	1126.6	1126.6	18.0	10.0	276.8
Li	-8.5008780571	972.0	972.0	972.0	13.4	10.0	198.4
Be	-16.4867149933	1006.4	1006.4	1006.4	5.4	10.0	239.3
B	-28.1289230717	950.6	950.6	950.6	5.0	10.0	175.2
C	-42.7948371678	877.4	877.4	877.4	1.6	10.0	222.0
N	-60.7015479081	837.6	837.6	837.6	1.8	10.0	181.1
O	-83.5382493682	800.2	800.2	800.2	1.4	10.0	163.9
F	-110.9639968091	810.4	810.4	810.4	1.0	10.0	148.7
Ne	-142.1243791490	803.0	803.0	803.0	1.2	10.0	162.5
Na	-177.8374380653	755.2	755.2	755.2	1.2	10.0	184.7
Mg	-213.1185192980	783.4	783.4	783.4	2.0	10.0	209.9
Al	-263.4722880367	757.0	757.0	757.0	1.0	10.0	171.8
Si	-313.6930447252	740.8	740.8	740.8	1.0	10.0	125.5
P	-368.7429446569	763.2	763.2	763.2	2.2	10.0	149.4
S	-404.6984034823	739.0	739.0	739.0	1.2	10.0	132.8
Cl	-485.1001758641	774.0	774.0	774.0	1.6	10.0	173.8
Ar	-566.2930321731	751.0	751.0	751.0	1.8	10.0	149.0

Table 2: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6955109934	212.0	111.0	111.0	nan	10.0	4.8
He	-2.9622411658	176.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.9
Li	-5.4279546775	410.0	227.0	227.0	nan	10.0	8.0
Be	-12.0293198667	507.0	267.0	267.0	nan	10.0	8.5
B	-21.7989730137	521.0	290.0	290.0	nan	10.0	9.4
C	-42.1033615669	177.0	94.0	94.0	nan	10.0	4.9
N	-58.6327169194	154.0	86.0	86.0	nan	10.0	4.7
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-107.7493165257	172.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.8
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-175.2842517907	156.0	85.0	85.0	nan	10.0	5.2
Mg	-218.4972777767	238.0	131.0	131.0	nan	10.0	5.5
Al	-259.5245120284	231.0	123.0	123.0	nan	10.0	5.3
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-341.3287189455	177.0	98.0	98.0	nan	10.0	3.6
S	-416.5285921716	188.0	104.0	104.0	nan	10.0	3.7
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	-524.7960610620	170.0	93.0	93.0	nan	10.0	3.5

Table 3: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7254816165	4993.8	0.0	0.0	nan	10.0	29.9
He	-3.4086151102	5632.2	0.0	0.0	nan	10.0	32.5
Li	-8.6147139175	5544.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.9
Be	-16.7598154129	5905.2	0.0	0.0	nan	10.0	34.5
B	-28.1579917772	6463.8	0.0	0.0	nan	10.0	36.3
C	-43.0785626012	6106.8	0.0	0.0	nan	10.0	35.9
N	-61.7585609665	6098.4	0.0	0.0	nan	10.0	34.3
O	-84.4117083064	6535.2	0.0	0.0	nan	10.0	36.3
F	-111.2342013898	5968.2	0.0	0.0	nan	10.0	33.6
Ne	-142.1243646929	6001.8	0.0	0.0	nan	10.0	36.2
Na	-178.1062515291	6430.2	0.0	0.0	nan	10.0	38.4
Mg	-218.4897398579	6186.6	0.0	0.0	nan	10.0	34.1
Al	-263.7135627305	5216.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.4
Si	-313.9251664205	5531.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.3
P	-369.2652102016	6636.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.1
S	-429.6160913375	5300.4	0.0	0.0	nan	10.0	27.0
Cl	-495.5720317342	6455.4	0.0	0.0	nan	10.0	35.1
Ar	-567.3629960622	5518.8	0.0	0.0	nan	10.0	30.8

Table 4: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7217077279	6913.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.2
He	-3.3593473921	5369.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.9
Li	-8.4332001973	4959.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
Be	-16.5147058833	6671.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.7
B	-27.7829264857	6055.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
C	-42.4773747614	8057.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.5
N	-60.8378224267	5247.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.9
O	-80.6752488439	5251.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
F	-110.1942368150	5427.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.3
Ne	-140.5206645664	5013.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.6
Na	-175.8758221437	4765.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
Mg	-214.6840524447	4753.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.4
Al	-241.0928648804	5173.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.1
Si	-293.2018125262	4987.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.2
P	-362.9442012416	5645.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1
S	-425.6829048172	4987.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.8
Cl	-492.8075104048	5117.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
Ar	-560.8315404205	4937.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7

Table 5: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6978022650	6939.0	24.0	24.0	nan	10.0	41.4
He	-3.0002997432	5404.0	33.0	33.0	nan	10.0	30.0
Li	-8.4016475330	4982.0	21.0	21.0	nan	10.0	28.8
Be	-16.5830419505	6680.0	7.0	7.0	nan	10.0	42.5
B	-27.8293217198	6064.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.7
C	-42.3033004021	8077.0	18.0	18.0	nan	10.0	45.4
N	-61.0275026424	5255.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.9
O	-81.5411963685	5261.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.4
F	-110.7500856007	5435.0	6.0	6.0	nan	10.0	25.7
Ne	-140.8831190560	5023.0	8.0	8.0	nan	10.0	29.6
Na	-167.7914331905	4788.0	21.0	21.0	nan	10.0	28.4
Mg	-205.3148156456	4771.0	16.0	16.0	nan	10.0	27.4
Al	-241.5779454926	5183.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.1
Si	-294.1934754730	4999.0	10.0	10.0	nan	10.0	28.0
P	-367.6156451370	5656.0	9.0	9.0	nan	10.0	32.4
S	-429.2116105373	4997.0	8.0	8.0	nan	10.0	27.1
Cl	-493.5014366154	5127.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.5
Ar	-550.0611123064	4952.0	13.0	13.0	nan	10.0	29.2

Table 6: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7254830227	20213.0	211.0	211.0	6.0	10.0	145.6
He	-3.4054365725	20255.8	253.8	253.8	12.4	10.0	146.7
Li	-8.6091978296	20048.4	46.4	46.4	1.8	10.0	124.3
Be	-16.7598166070	20219.2	217.2	217.2	11.6	10.0	136.4
B	-28.1579935780	20067.8	65.8	65.8	3.0	10.0	119.5
C	-43.0785651900	20097.2	95.2	95.2	4.0	10.0	127.1
N	-61.5592637203	20038.0	36.0	36.0	2.0	10.0	120.6
O	-83.5915206599	20069.0	67.0	67.0	3.4	10.0	119.4
F	-110.9701859747	20032.4	30.4	30.4	1.6	10.0	116.4
Ne	-141.6548900540	20045.4	43.4	43.4	2.4	10.0	115.5
Na	-177.8374380043	20054.6	52.6	52.6	3.0	10.0	118.8
Mg	-218.1618375023	20057.0	55.0	55.0	2.6	10.0	128.7
Al	-263.2475473843	20061.6	59.6	59.6	3.2	10.0	131.1
Si	-313.5846884229	20041.8	39.8	39.8	2.8	10.0	117.8
P	-369.1503312390	20025.4	23.4	23.4	1.6	10.0	114.9
S	-429.6161294185	20035.2	33.2	33.2	2.2	10.0	119.5
Cl	-495.7260469306	20033.6	31.6	31.6	2.2	10.0	117.5
Ar	-567.3630382609	20033.8	31.8	31.8	2.4	10.0	118.6

Table 7: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7075768695	34.0	34.0	34.0	nan	10.0	2.8
He	-3.1940407062	39.0	39.0	39.0	nan	10.0	2.9
Li	-8.3409018009	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	4.5
Be	-15.7852620470	24.0	24.0	24.0	nan	10.0	3.6
B	-28.1579935989	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.9
C	-42.3033004021	34.0	34.0	34.0	nan	10.0	5.7
N	-61.1703166692	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	2.0
O	-79.8941547629	17.0	17.0	17.0	nan	10.0	2.7
F	-110.1371768830	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	2.5
Ne	-140.9871764436	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	3.8
Na	-166.9469728274	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	5.3
Mg	-211.2179758627	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	2.4
Al	-245.8457071617	29.0	29.0	29.0	nan	10.0	6.7
Si	-310.5604956476	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	4.7
P	-364.9102259718	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	6.5
S	-429.6161295420	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	7.3
Cl	-481.2832416628	22.0	22.0	22.0	nan	10.0	9.2
Ar	-561.0144615972	22.0	22.0	22.0	nan	10.0	11.8

Table 8: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7254830238	660.0	660.0	660.0	17.0	10.0	5.2
He	-3.4015336273	331.0	331.0	331.0	6.0	10.0	3.3
Li	-8.6147145780	374.0	374.0	374.0	11.0	10.0	3.8
Be	-16.7598166212	475.0	475.0	475.0	7.0	10.0	4.2
B	-28.1579935989	502.0	502.0	502.0	7.0	10.0	3.1
C	-43.0785652186	416.0	416.0	416.0	7.0	10.0	3.3
N	-61.7585642924	456.0	456.0	456.0	8.0	10.0	3.7
O	-84.4117199030	397.0	397.0	397.0	7.0	10.0	3.1
F	-111.2342119354	395.0	395.0	395.0	5.0	10.0	2.8
Ne	-142.4085487097	413.0	413.0	413.0	7.0	10.0	3.4
Na	-178.1062576438	376.0	376.0	376.0	8.0	10.0	2.7
Mg	-218.4897548851	331.0	331.0	331.0	5.0	10.0	2.7
Al	-263.7135919965	361.0	361.0	361.0	4.0	10.0	2.6
Si	-313.9251977872	329.0	329.0	329.0	4.0	10.0	2.6
P	-369.2652230243	319.0	319.0	319.0	4.0	10.0	3.0
S	-429.8676471219	317.0	317.0	317.0	3.0	10.0	2.5
Cl	-495.8598747147	331.0	331.0	331.0	4.0	10.0	2.9
Ar	-567.3630384536	332.0	332.0	332.0	4.0	10.0	2.7

Table 9: trust region repeats

2.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.7196132168	1300.0	1300.0	1300.0	19.6	10.0	286.4
cch second order	-0.6955109934	212.0	111.0	111.0	nan	10.0	4.8
diff evo	-0.7254816165	4993.8	0.0	0.0	nan	10.0	29.9
direct	-0.7217077279	6913.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.2
direct with trim	-0.6978022650	6939.0	24.0	24.0	nan	10.0	41.4
dual anneal	-0.7254830227	20213.0	211.0	211.0	6.0	10.0	145.6
trust region	-0.7075768695	34.0	34.0	34.0	nan	10.0	2.8
trust region repeats	-0.7254830238	660.0	660.0	660.0	17.0	10.0	5.2

Table 10: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.3680197776	1126.6	1126.6	1126.6	18.0	10.0	276.8
cch second order	-2.9622411658	176.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.9
diff evo	-3.4086151102	5632.2	0.0	0.0	nan	10.0	32.5
direct	-3.3593473921	5369.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.9
direct with trim	-3.0002997432	5404.0	33.0	33.0	nan	10.0	30.0
dual anneal	-3.4054365725	20255.8	253.8	253.8	12.4	10.0	146.7
trust region	-3.1940407062	39.0	39.0	39.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-3.4015336273	331.0	331.0	331.0	6.0	10.0	3.3

Table 11: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5008780571	972.0	972.0	972.0	13.4	10.0	198.4
cch second order	-5.4279546775	410.0	227.0	227.0	nan	10.0	8.0
diff evo	-8.6147139175	5544.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.9
direct	-8.4332001973	4959.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
direct with trim	-8.4016475330	4982.0	21.0	21.0	nan	10.0	28.8
dual anneal	-8.6091978296	20048.4	46.4	46.4	1.8	10.0	124.3
trust region	-8.3409018009	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	4.5
trust region repeats	-8.6147145780	374.0	374.0	374.0	11.0	10.0	3.8

Table 12: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.4867149933	1006.4	1006.4	1006.4	5.4	10.0	239.3
cch second order	-12.0293198667	507.0	267.0	267.0	nan	10.0	8.5
diff evo	-16.7598154129	5905.2	0.0	0.0	nan	10.0	34.5
direct	-16.5147058833	6671.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.7
direct with trim	-16.5830419505	6680.0	7.0	7.0	nan	10.0	42.5
dual anneal	-16.7598166070	20219.2	217.2	217.2	11.6	10.0	136.4
trust region	-15.7852620470	24.0	24.0	24.0	nan	10.0	3.6
trust region repeats	-16.7598166212	475.0	475.0	475.0	7.0	10.0	4.2

Table 13: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-28.1289230717	950.6	950.6	950.6	5.0	10.0	175.2
cch second order	-21.7989730137	521.0	290.0	290.0	nan	10.0	9.4
diff evo	-28.1579917772	6463.8	0.0	0.0	nan	10.0	36.3
direct	-27.7829264857	6055.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
direct with trim	-27.8293217198	6064.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.7
dual anneal	-28.1579935780	20067.8	65.8	65.8	3.0	10.0	119.5
trust region	-28.1579935989	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-28.1579935989	502.0	502.0	502.0	7.0	10.0	3.1

Table 14: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-42.7948371678	877.4	877.4	877.4	1.6	10.0	222.0
cch second order	-42.1033615669	177.0	94.0	94.0	nan	10.0	4.9
diff evo	-43.0785626012	6106.8	0.0	0.0	nan	10.0	35.9
direct	-42.4773747614	8057.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.5
direct with trim	-42.3033004021	8077.0	18.0	18.0	nan	10.0	45.4
dual anneal	-43.0785651900	20097.2	95.2	95.2	4.0	10.0	127.1
trust region	-42.3033004021	34.0	34.0	34.0	nan	10.0	5.7
trust region repeats	-43.0785652186	416.0	416.0	416.0	7.0	10.0	3.3

Table 15: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.7015479081	837.6	837.6	837.6	1.8	10.0	181.1
cch second order	-58.6327169194	154.0	86.0	86.0	nan	10.0	4.7
diff evo	-61.7585609665	6098.4	0.0	0.0	nan	10.0	34.3
direct	-60.8378224267	5247.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.9
direct with trim	-61.0275026424	5255.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.9
dual anneal	-61.5592637203	20038.0	36.0	36.0	2.0	10.0	120.6
trust region	-61.1703166692	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-61.7585642924	456.0	456.0	456.0	8.0	10.0	3.7

Table 16: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-83.5382493682	800.2	800.2	800.2	1.4	10.0	163.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-84.4117083064	6535.2	0.0	0.0	nan	10.0	36.3
direct	-80.6752488439	5251.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct with trim	-81.5411963685	5261.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.4
dual anneal	-83.5915206599	20069.0	67.0	67.0	3.4	10.0	119.4
trust region	-79.8941547629	17.0	17.0	17.0	nan	10.0	2.7
trust region repeats	-84.4117199030	397.0	397.0	397.0	7.0	10.0	3.1

Table 17: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-110.9639968091	810.4	810.4	810.4	1.0	10.0	148.7
cch second order	-107.7493165257	172.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.8
diff evo	-111.2342013898	5968.2	0.0	0.0	nan	10.0	33.6
direct	-110.1942368150	5427.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.3
direct with trim	-110.7500856007	5435.0	6.0	6.0	nan	10.0	25.7
dual anneal	-110.9701859747	20032.4	30.4	30.4	1.6	10.0	116.4
trust region	-110.1371768830	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	2.5
trust region repeats	-111.2342119354	395.0	395.0	395.0	5.0	10.0	2.8

Table 18: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-142.1243791490	803.0	803.0	803.0	1.2	10.0	162.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-142.1243646929	6001.8	0.0	0.0	nan	10.0	36.2
direct	-140.5206645664	5013.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.6
direct with trim	-140.8831190560	5023.0	8.0	8.0	nan	10.0	29.6
dual anneal	-141.6548900540	20045.4	43.4	43.4	2.4	10.0	115.5
trust region	-140.9871764436	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	3.8
trust region repeats	-142.4085487097	413.0	413.0	413.0	7.0	10.0	3.4

Table 19: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-177.8374380653	755.2	755.2	755.2	1.2	10.0	184.7
cch second order	-175.2842517907	156.0	85.0	85.0	nan	10.0	5.2
diff evo	-178.1062515291	6430.2	0.0	0.0	nan	10.0	38.4
direct	-175.8758221437	4765.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
direct with trim	-167.7914331905	4788.0	21.0	21.0	nan	10.0	28.4
dual anneal	-177.8374380043	20054.6	52.6	52.6	3.0	10.0	118.8
trust region	-166.9469728274	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	5.3
trust region repeats	-178.1062576438	376.0	376.0	376.0	8.0	10.0	2.7

Table 20: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.1185192980	783.4	783.4	783.4	2.0	10.0	209.9
cch second order	-218.4972777767	238.0	131.0	131.0	nan	10.0	5.5
diff evo	-218.4897398579	6186.6	0.0	0.0	nan	10.0	34.1
direct	-214.6840524447	4753.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.4
direct with trim	-205.3148156456	4771.0	16.0	16.0	nan	10.0	27.4
dual anneal	-218.1618375023	20057.0	55.0	55.0	2.6	10.0	128.7
trust region	-211.2179758627	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	2.4
trust region repeats	-218.4897548851	331.0	331.0	331.0	5.0	10.0	2.7

Table 21: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-263.4722880367	757.0	757.0	757.0	1.0	10.0	171.8
cch second order	-259.5245120284	231.0	123.0	123.0	nan	10.0	5.3
diff evo	-263.7135627305	5216.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.4
direct	-241.0928648804	5173.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.1
direct with trim	-241.5779454926	5183.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.1
dual anneal	-263.2475473843	20061.6	59.6	59.6	3.2	10.0	131.1
trust region	-245.8457071617	29.0	29.0	29.0	nan	10.0	6.7
trust region repeats	-263.7135919965	361.0	361.0	361.0	4.0	10.0	2.6

Table 22: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-313.6930447252	740.8	740.8	740.8	1.0	10.0	125.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-313.9251664205	5531.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.3
direct	-293.2018125262	4987.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.2
direct with trim	-294.1934754730	4999.0	10.0	10.0	nan	10.0	28.0
dual anneal	-313.5846884229	20041.8	39.8	39.8	2.8	10.0	117.8
trust region	-310.5604956476	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	4.7
trust region repeats	-313.9251977872	329.0	329.0	329.0	4.0	10.0	2.6

Table 23: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-368.7429446569	763.2	763.2	763.2	2.2	10.0	149.4
cch second order	-341.3287189455	177.0	98.0	98.0	nan	10.0	3.6
diff evo	-369.2652102016	6636.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.1
direct	-362.9442012416	5645.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1
direct with trim	-367.6156451370	5656.0	9.0	9.0	nan	10.0	32.4
dual anneal	-369.1503312390	20025.4	23.4	23.4	1.6	10.0	114.9
trust region	-364.9102259718	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	6.5
trust region repeats	-369.2652230243	319.0	319.0	319.0	4.0	10.0	3.0

Table 24: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-404.6984034823	739.0	739.0	739.0	1.2	10.0	132.8
cch second order	-416.5285921716	188.0	104.0	104.0	nan	10.0	3.7
diff evo	-429.6160913375	5300.4	0.0	0.0	nan	10.0	27.0
direct	-425.6829048172	4987.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.8
direct with trim	-429.2116105373	4997.0	8.0	8.0	nan	10.0	27.1
dual anneal	-429.6161294185	20035.2	33.2	33.2	2.2	10.0	119.5
trust region	-429.6161295420	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	7.3
trust region repeats	-429.8676471219	317.0	317.0	317.0	3.0	10.0	2.5

Table 25: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.1001758641	774.0	774.0	774.0	1.6	10.0	173.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-495.5720317342	6455.4	0.0	0.0	nan	10.0	35.1
direct	-492.8075104048	5117.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
direct with trim	-493.5014366154	5127.0	8.0	8.0	nan	10.0	30.5
dual anneal	-495.7260469306	20033.6	31.6	31.6	2.2	10.0	117.5
trust region	-481.2832416628	22.0	22.0	22.0	nan	10.0	9.2
trust region repeats	-495.8598747147	331.0	331.0	331.0	4.0	10.0	2.9

Table 26: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-566.2930321731	751.0	751.0	751.0	1.8	10.0	149.0
cch second order	-524.7960610620	170.0	93.0	93.0	nan	10.0	3.5
diff evo	-567.3629960622	5518.8	0.0	0.0	nan	10.0	30.8
direct	-560.8315404205	4937.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
direct with trim	-550.0611123064	4952.0	13.0	13.0	nan	10.0	29.2
dual anneal	-567.3630382609	20033.8	31.8	31.8	2.4	10.0	118.6
trust region	-561.0144615972	22.0	22.0	22.0	nan	10.0	11.8
trust region repeats	-567.3630384536	332.0	332.0	332.0	4.0	10.0	2.7

Table 27: Ar

2.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	trust region repeats	-0.7254830238
He	diff evo	-3.4086151102
Li	trust region repeats	-8.6147145780
Be	trust region repeats	-16.7598166212
B	trust region	-28.1579935989
C	trust region repeats	-43.0785652186
N	trust region repeats	-61.7585642924
O	trust region repeats	-84.4117199030
F	trust region repeats	-111.2342119354
Ne	trust region repeats	-142.4085487097
Na	trust region repeats	-178.1062576438
Mg	cch second order	-218.4972777767
Al	trust region repeats	-263.7135919965
Si	trust region repeats	-313.9251977872
P	trust region repeats	-369.2652230243
S	trust region repeats	-429.8676471219
Cl	trust region repeats	-495.8598747147
Ar	trust region repeats	-567.3630384536

Table 28: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	22.9	22.9	22.9	nan	-181.2262839143	4.9
cch second order	249.2	135.6	135.6	nan	-156.2399148931	5.5
trust region repeats	395.3	395.3	395.3	6.6	-185.3967631742	3.2
basin hopping	863.8	863.8	863.8	4.5	-182.7935003233	186.2
direct	5518.1	0.0	0.0	nan	-181.0354413321	26.3
direct with trim	5532.9	12.8	12.8	nan	-180.1269328711	31.6
diff evo	5918.0	0.0	0.0	nan	-185.3513925369	33.1
dual anneal	20079.4	77.4	77.4	3.8	-185.1777450206	124.4

Table 29: Average (all systems)

3 10s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

3.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 30: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8930629244	1174.6	1174.6	1174.6	20.4	10.0	318.8
He	-4.0198054545	1033.8	1033.8	1033.8	16.6	10.0	338.5
Li	-9.6560967480	966.0	966.0	966.0	14.0	10.0	241.4
Be	-18.5393099636	850.8	850.8	850.8	9.4	10.0	215.7
B	-30.5935290380	764.4	764.4	764.4	3.8	10.0	187.4
C	-46.4079725467	760.4	760.4	760.4	3.0	10.0	187.0
N	-65.8738381000	767.0	767.0	767.0	2.6	10.0	167.9
O	-89.5260462590	775.8	775.8	775.8	1.0	10.0	157.2
F	-117.3166406682	755.6	755.6	755.6	1.8	10.0	165.8
Ne	-149.0983639279	772.8	772.8	772.8	1.0	10.0	180.7
Na	-187.3072224866	773.4	773.4	773.4	1.0	10.0	185.5
Mg	-227.3877030481	752.0	752.0	752.0	1.4	10.0	152.5
Al	-273.7378580244	747.6	747.6	747.6	1.0	10.0	167.5
Si	-327.5852277135	773.0	773.0	773.0	1.0	10.0	186.6
P	-380.5374891873	767.2	767.2	767.2	1.4	10.0	189.1
S	-425.3689344084	747.2	747.2	747.2	1.4	10.0	170.0
Cl	-507.2078171501	768.4	768.4	768.4	2.4	10.0	175.0
Ar	-578.7216212122	756.6	756.6	756.6	2.0	10.0	151.7

Table 31: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5953173944	161.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.8
He	-3.7977863569	236.0	124.0	124.0	nan	10.0	3.9
Li	-5.6461644963	431.0	233.0	233.0	nan	10.0	5.8
Be	-13.0429176225	494.0	263.0	263.0	nan	10.0	9.4
B	-22.4748282639	540.0	292.0	292.0	nan	10.0	6.8
C	-38.2266940932	156.0	88.0	88.0	nan	10.0	5.4
N	-63.8502912939	165.0	90.0	90.0	nan	10.0	5.4
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-109.4654395931	220.0	125.0	125.0	nan	10.0	6.1
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-172.6999625607	191.0	105.0	105.0	nan	10.0	5.6
Mg	-214.2985837107	178.0	99.0	99.0	nan	10.0	5.5
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-373.6698789490	174.0	93.0	93.0	nan	10.0	4.6
S	-415.5129798396	190.0	104.0	104.0	nan	10.0	5.1
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	-518.5653343143	152.0	85.0	85.0	nan	10.0	4.7

Table 32: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9250438302	7463.4	0.0	0.0	nan	10.0	57.9
He	-4.0060837294	7921.2	0.0	0.0	nan	10.0	57.7
Li	-9.7278265595	8164.8	0.0	0.0	nan	10.0	61.3
Be	-18.5029181395	7555.8	0.0	0.0	nan	10.0	59.8
B	-30.5935262638	7396.2	0.0	0.0	nan	10.0	53.2
C	-46.4079705240	8421.0	0.0	0.0	nan	10.0	66.2
N	-66.0016060167	7198.8	0.0	0.0	nan	10.0	49.1
O	-89.7814325553	7728.0	0.0	0.0	nan	10.0	50.7
F	-117.8290867337	8072.4	0.0	0.0	nan	10.0	61.7
Ne	-150.3127205557	7102.2	0.0	0.0	nan	10.0	54.6
Na	-187.3882934263	6837.6	0.0	0.0	nan	10.0	48.4
Mg	-229.2017813769	6573.0	0.0	0.0	nan	10.0	52.1
Al	-275.8906650956	6518.4	0.0	0.0	nan	10.0	53.7
Si	-327.5852164188	6686.4	0.0	0.0	nan	10.0	50.3
P	-384.4094752030	6220.2	0.0	0.0	nan	10.0	36.9
S	-446.4819611207	6501.6	0.0	0.0	nan	10.0	53.3
Cl	-510.2551935005	5523.0	0.0	0.0	nan	10.0	45.6
Ar	-582.7928727588	5418.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.9

Table 33: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8573503981	4797.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.0
He	-3.8538397090	5085.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.4
Li	-9.2686742942	4887.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.9
Be	-17.5491647187	4741.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.1
B	-29.9181797826	7269.0	0.0	0.0	nan	10.0	47.0
C	-45.6258245166	4901.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.5
N	-64.7479375409	5121.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.9
O	-86.3044895272	5227.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.8
F	-113.6706407686	4937.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.8
Ne	-147.2123315758	4569.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.2
Na	-183.6891003399	4603.0	0.0	0.0	nan	10.0	32.2
Mg	-223.7351112082	4631.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.4
Al	-250.4859179155	5525.0	0.0	0.0	nan	10.0	38.8
Si	-307.3021167770	5109.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.3
P	-368.5952205712	5767.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.6
S	-441.9281241095	5005.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.4
Cl	-498.7695746974	5235.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.0
Ar	-569.4324743305	5003.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.8

Table 34: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8664754069	4806.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.9
He	-3.9329751709	5095.0	8.0	8.0	nan	10.0	40.1
Li	-9.2960508986	4896.0	7.0	7.0	nan	10.0	28.2
Be	-17.5835221648	4749.0	6.0	6.0	nan	10.0	32.4
B	-30.1280161412	7278.0	7.0	7.0	nan	10.0	42.7
C	-45.7816682795	4911.0	8.0	8.0	nan	10.0	28.3
N	-64.9407477313	5130.0	7.0	7.0	nan	10.0	29.4
O	-87.9175872591	5238.0	9.0	9.0	nan	10.0	30.1
F	-115.0383570283	4947.0	8.0	8.0	nan	10.0	31.4
Ne	-147.9717071164	4579.0	8.0	8.0	nan	10.0	26.0
Na	-184.4038265384	4613.0	8.0	8.0	nan	10.0	29.1
Mg	-225.4806283961	4642.0	9.0	9.0	nan	10.0	31.3
Al	-250.8164318004	5534.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.6
Si	-308.9745952769	5121.0	10.0	10.0	nan	10.0	30.4
P	-374.0930205320	5778.0	9.0	9.0	nan	10.0	36.9
S	-446.4821328148	5014.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
Cl	-501.1766505017	5245.0	8.0	8.0	nan	10.0	32.3
Ar	-578.7216212122	5025.0	20.0	20.0	nan	10.0	32.9

Table 35: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9250439581	20053.8	51.8	51.8	2.0	10.0	138.3
He	-3.9996328352	20123.8	121.8	121.8	8.2	10.0	152.3
Li	-9.7278284279	20028.6	26.6	26.6	1.4	10.0	137.0
Be	-18.5029244930	20031.4	29.4	29.4	1.6	10.0	137.0
B	-30.5935289390	20042.0	40.0	40.0	1.8	10.0	134.4
C	-46.3301593302	20035.4	33.4	33.4	1.8	10.0	132.5
N	-66.0016949304	20055.8	53.8	53.8	2.8	10.0	144.0
O	-89.7814447468	20029.6	27.6	27.6	1.6	10.0	138.1
F	-117.8291045765	20031.2	29.2	29.2	2.0	10.0	137.7
Ne	-150.2406045742	20035.4	33.4	33.4	2.4	10.0	116.7
Na	-185.8878719499	20030.4	28.4	28.4	2.0	10.0	125.5
Mg	-227.3877028622	20036.0	34.0	34.0	1.8	10.0	139.2
Al	-273.3021782730	20037.0	35.0	35.0	2.0	10.0	141.4
Si	-327.5852272720	20039.8	37.8	37.8	2.8	10.0	128.3
P	-380.5374887096	20027.2	25.2	25.2	1.6	10.0	129.5
S	-446.4821322873	20035.6	33.6	33.6	1.8	10.0	126.9
Cl	-509.7725738722	20030.0	28.0	28.0	1.6	10.0	108.2
Ar	-586.8236196211	20033.6	31.6	31.6	2.0	10.0	127.4

Table 36: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9082517215	29.0	29.0	29.0	nan	10.0	8.2
He	-3.6374078829	17.0	17.0	17.0	nan	10.0	3.4
Li	-9.1711257565	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	3.1
Be	-18.2595218569	48.0	48.0	48.0	nan	10.0	3.9
B	-30.3780998978	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	7.2
C	-45.0402912298	20.0	20.0	20.0	nan	10.0	3.1
N	-63.8349195068	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.0
O	-87.0494766453	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	7.6
F	-116.5267933273	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	4.0
Ne	-149.0983639279	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	1.9
Na	-185.8878721147	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.8
Mg	-221.5479548372	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	6.9
Al	-273.7378580244	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.4
Si	-319.4789344550	20.0	20.0	20.0	nan	10.0	3.5
P	-377.4996917921	18.0	18.0	18.0	nan	10.0	9.1
S	-441.0153341591	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	2.1
Cl	-510.2552701516	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.5
Ar	-582.1568985735	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	6.4

Table 37: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9250439666	438.0	438.0	438.0	13.0	10.0	4.2
He	-4.0060841980	448.0	448.0	448.0	14.0	10.0	3.7
Li	-9.7278284598	356.0	356.0	356.0	10.0	10.0	3.8
Be	-18.5371582828	356.0	356.0	356.0	11.0	10.0	3.1
B	-30.6842766095	407.0	407.0	407.0	8.0	10.0	3.9
C	-46.3301594534	462.0	462.0	462.0	13.0	10.0	3.2
N	-65.9201577421	397.0	397.0	397.0	8.0	10.0	2.9
O	-89.5260462590	436.0	436.0	436.0	11.0	10.0	4.6
F	-117.8291048265	326.0	326.0	326.0	4.0	10.0	3.3
Ne	-149.0983639279	309.0	309.0	309.0	5.0	10.0	2.7
Na	-185.8878721147	305.0	305.0	305.0	4.0	10.0	2.7
Mg	-229.2017945430	348.0	348.0	348.0	6.0	10.0	3.0
Al	-273.7378580244	322.0	322.0	322.0	4.0	10.0	3.3
Si	-325.0721684021	325.0	325.0	325.0	6.0	10.0	2.9
P	-381.5196562193	334.0	334.0	334.0	5.0	10.0	3.0
S	-443.2059753154	314.0	314.0	314.0	5.0	10.0	2.6
Cl	-510.2552701516	309.0	309.0	309.0	4.0	10.0	3.1
Ar	-582.7934328567	324.0	324.0	324.0	5.0	10.0	2.7

Table 38: trust region repeats

3.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.8930629244	1174.6	1174.6	1174.6	20.4	10.0	318.8
cch second order	-0.5953173944	161.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.8
diff evo	-0.9250438302	7463.4	0.0	0.0	nan	10.0	57.9
direct	-0.8573503981	4797.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.0
direct with trim	-0.8664754069	4806.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.9
dual anneal	-0.9250439581	20053.8	51.8	51.8	2.0	10.0	138.3
trust region	-0.9082517215	29.0	29.0	29.0	nan	10.0	8.2
trust region repeats	-0.9250439666	438.0	438.0	438.0	13.0	10.0	4.2

Table 39: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-4.0198054545	1033.8	1033.8	1033.8	16.6	10.0	338.5
cch second order	-3.7977863569	236.0	124.0	124.0	nan	10.0	3.9
diff evo	-4.0060837294	7921.2	0.0	0.0	nan	10.0	57.7
direct	-3.8538397090	5085.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.4
direct with trim	-3.9329751709	5095.0	8.0	8.0	nan	10.0	40.1
dual anneal	-3.9996328352	20123.8	121.8	121.8	8.2	10.0	152.3
trust region	-3.6374078829	17.0	17.0	17.0	nan	10.0	3.4
trust region repeats	-4.0060841980	448.0	448.0	448.0	14.0	10.0	3.7

Table 40: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-9.6560967480	966.0	966.0	966.0	14.0	10.0	241.4
cch second order	-5.6461644963	431.0	233.0	233.0	nan	10.0	5.8
diff evo	-9.7278265595	8164.8	0.0	0.0	nan	10.0	61.3
direct	-9.2686742942	4887.0	0.0	0.0	nan	10.0	34.9
direct with trim	-9.2960508986	4896.0	7.0	7.0	nan	10.0	28.2
dual anneal	-9.7278284279	20028.6	26.6	26.6	1.4	10.0	137.0
trust region	-9.1711257565	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-9.7278284598	356.0	356.0	356.0	10.0	10.0	3.8

Table 41: Li

33

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-18.5393099636	850.8	850.8	850.8	9.4	10.0	215.7
cch second order	-13.0429176225	494.0	263.0	263.0	nan	10.0	9.4
diff evo	-18.5029181395	7555.8	0.0	0.0	nan	10.0	59.8
direct	-17.5491647187	4741.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.1
direct with trim	-17.5835221648	4749.0	6.0	6.0	nan	10.0	32.4
dual anneal	-18.5029244930	20031.4	29.4	29.4	1.6	10.0	137.0
trust region	-18.2595218569	48.0	48.0	48.0	nan	10.0	3.9
trust region repeats	-18.5371582828	356.0	356.0	356.0	11.0	10.0	3.1

Table 42: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-30.5935290380	764.4	764.4	764.4	3.8	10.0	187.4
cch second order	-22.4748282639	540.0	292.0	292.0	nan	10.0	6.8
diff evo	-30.5935262638	7396.2	0.0	0.0	nan	10.0	53.2
direct	-29.9181797826	7269.0	0.0	0.0	nan	10.0	47.0
direct with trim	-30.1280161412	7278.0	7.0	7.0	nan	10.0	42.7
dual anneal	-30.5935289390	20042.0	40.0	40.0	1.8	10.0	134.4
trust region	-30.3780998978	25.0	25.0	25.0	nan	10.0	7.2
trust region repeats	-30.6842766095	407.0	407.0	407.0	8.0	10.0	3.9

Table 43: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-46.4079725467	760.4	760.4	760.4	3.0	10.0	187.0
cch second order	-38.2266940932	156.0	88.0	88.0	nan	10.0	5.4
diff evo	-46.4079705240	8421.0	0.0	0.0	nan	10.0	66.2
direct	-45.6258245166	4901.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.5
direct with trim	-45.7816682795	4911.0	8.0	8.0	nan	10.0	28.3
dual anneal	-46.3301593302	20035.4	33.4	33.4	1.8	10.0	132.5
trust region	-45.0402912298	20.0	20.0	20.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-46.3301594534	462.0	462.0	462.0	13.0	10.0	3.2

Table 44: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-65.8738381000	767.0	767.0	767.0	2.6	10.0	167.9
cch second order	-63.8502912939	165.0	90.0	90.0	nan	10.0	5.4
diff evo	-66.0016060167	7198.8	0.0	0.0	nan	10.0	49.1
direct	-64.7479375409	5121.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.9
direct with trim	-64.9407477313	5130.0	7.0	7.0	nan	10.0	29.4
dual anneal	-66.0016949304	20055.8	53.8	53.8	2.8	10.0	144.0
trust region	-63.8349195068	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-65.9201577421	397.0	397.0	397.0	8.0	10.0	2.9

Table 45: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-89.5260462590	775.8	775.8	775.8	1.0	10.0	157.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-89.7814325553	7728.0	0.0	0.0	nan	10.0	50.7
direct	-86.3044895272	5227.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.8
direct with trim	-87.9175872591	5238.0	9.0	9.0	nan	10.0	30.1
dual anneal	-89.7814447468	20029.6	27.6	27.6	1.6	10.0	138.1
trust region	-87.0494766453	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	7.6
trust region repeats	-89.5260462590	436.0	436.0	436.0	11.0	10.0	4.6

Table 46: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-117.3166406682	755.6	755.6	755.6	1.8	10.0	165.8
cch second order	-109.4654395931	220.0	125.0	125.0	nan	10.0	6.1
diff evo	-117.8290867337	8072.4	0.0	0.0	nan	10.0	61.7
direct	-113.6706407686	4937.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.8
direct with trim	-115.0383570283	4947.0	8.0	8.0	nan	10.0	31.4
dual anneal	-117.8291045765	20031.2	29.2	29.2	2.0	10.0	137.7
trust region	-116.5267933273	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	4.0
trust region repeats	-117.8291048265	326.0	326.0	326.0	4.0	10.0	3.3

Table 47: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-149.0983639279	772.8	772.8	772.8	1.0	10.0	180.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-150.3127205557	7102.2	0.0	0.0	nan	10.0	54.6
direct	-147.2123315758	4569.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.2
direct with trim	-147.9717071164	4579.0	8.0	8.0	nan	10.0	26.0
dual anneal	-150.2406045742	20035.4	33.4	33.4	2.4	10.0	116.7
trust region	-149.0983639279	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-149.0983639279	309.0	309.0	309.0	5.0	10.0	2.7

Table 48: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-187.3072224866	773.4	773.4	773.4	1.0	10.0	185.5
cch second order	-172.6999625607	191.0	105.0	105.0	nan	10.0	5.6
diff evo	-187.3882934263	6837.6	0.0	0.0	nan	10.0	48.4
direct	-183.6891003399	4603.0	0.0	0.0	nan	10.0	32.2
direct with trim	-184.4038265384	4613.0	8.0	8.0	nan	10.0	29.1
dual anneal	-185.8878719499	20030.4	28.4	28.4	2.0	10.0	125.5
trust region	-185.8878721147	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-185.8878721147	305.0	305.0	305.0	4.0	10.0	2.7

Table 49: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-227.3877030481	752.0	752.0	752.0	1.4	10.0	152.5
cch second order	-214.2985837107	178.0	99.0	99.0	nan	10.0	5.5
diff evo	-229.2017813769	6573.0	0.0	0.0	nan	10.0	52.1
direct	-223.7351112082	4631.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.4
direct with trim	-225.4806283961	4642.0	9.0	9.0	nan	10.0	31.3
dual anneal	-227.3877028622	20036.0	34.0	34.0	1.8	10.0	139.2
trust region	-221.5479548372	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	6.9
trust region repeats	-229.2017945430	348.0	348.0	348.0	6.0	10.0	3.0

Table 50: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-273.7378580244	747.6	747.6	747.6	1.0	10.0	167.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-275.8906650956	6518.4	0.0	0.0	nan	10.0	53.7
direct	-250.4859179155	5525.0	0.0	0.0	nan	10.0	38.8
direct with trim	-250.8164318004	5534.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.6
dual anneal	-273.3021782730	20037.0	35.0	35.0	2.0	10.0	141.4
trust region	-273.7378580244	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.4
trust region repeats	-273.7378580244	322.0	322.0	322.0	4.0	10.0	3.3

Table 51: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-327.5852277135	773.0	773.0	773.0	1.0	10.0	186.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-327.5852164188	6686.4	0.0	0.0	nan	10.0	50.3
direct	-307.3021167770	5109.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.3
direct with trim	-308.9745952769	5121.0	10.0	10.0	nan	10.0	30.4
dual anneal	-327.5852272720	20039.8	37.8	37.8	2.8	10.0	128.3
trust region	-319.4789344550	20.0	20.0	20.0	nan	10.0	3.5
trust region repeats	-325.0721684021	325.0	325.0	325.0	6.0	10.0	2.9

Table 52: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-380.5374891873	767.2	767.2	767.2	1.4	10.0	189.1
cch second order	-373.6698789490	174.0	93.0	93.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-384.4094752030	6220.2	0.0	0.0	nan	10.0	36.9
direct	-368.5952205712	5767.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.6
direct with trim	-374.0930205320	5778.0	9.0	9.0	nan	10.0	36.9
dual anneal	-380.5374887096	20027.2	25.2	25.2	1.6	10.0	129.5
trust region	-377.4996917921	18.0	18.0	18.0	nan	10.0	9.1
trust region repeats	-381.5196562193	334.0	334.0	334.0	5.0	10.0	3.0

Table 53: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.3689344084	747.2	747.2	747.2	1.4	10.0	170.0
cch second order	-415.5129798396	190.0	104.0	104.0	nan	10.0	5.1
diff evo	-446.4819611207	6501.6	0.0	0.0	nan	10.0	53.3
direct	-441.9281241095	5005.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.4
direct with trim	-446.4821328148	5014.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
dual anneal	-446.4821322873	20035.6	33.6	33.6	1.8	10.0	126.9
trust region	-441.0153341591	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-443.2059753154	314.0	314.0	314.0	5.0	10.0	2.6

Table 54: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-507.2078171501	768.4	768.4	768.4	2.4	10.0	175.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-510.2551935005	5523.0	0.0	0.0	nan	10.0	45.6
direct	-498.7695746974	5235.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.0
direct with trim	-501.1766505017	5245.0	8.0	8.0	nan	10.0	32.3
dual anneal	-509.7725738722	20030.0	28.0	28.0	1.6	10.0	108.2
trust region	-510.2552701516	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.5
trust region repeats	-510.2552701516	309.0	309.0	309.0	4.0	10.0	3.1

Table 55: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-578.7216212122	756.6	756.6	756.6	2.0	10.0	151.7
cch second order	-518.5653343143	152.0	85.0	85.0	nan	10.0	4.7
diff evo	-582.7928727588	5418.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.9
direct	-569.4324743305	5003.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.8
direct with trim	-578.7216212122	5025.0	20.0	20.0	nan	10.0	32.9
dual anneal	-586.8236196211	20033.6	31.6	31.6	2.0	10.0	127.4
trust region	-582.1568985735	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	6.4
trust region repeats	-582.7934328567	324.0	324.0	324.0	5.0	10.0	2.7

Table 56: Ar

3.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	trust region repeats	-0.9250439666
He	basin hopping	-4.0198054545
Li	trust region repeats	-9.7278284598
Be	basin hopping	-18.5393099636
B	trust region repeats	-30.6842766095
C	basin hopping	-46.4079725467
N	dual anneal	-66.0016949304
O	dual anneal	-89.7814447468
F	trust region repeats	-117.8291048265
Ne	diff evo	-150.3127205557
Na	diff evo	-187.3882934263
Mg	trust region repeats	-229.2017945430
Al	diff evo	-275.8906650956
Si	basin hopping	-327.5852277135
P	diff evo	-384.4094752030
S	direct with trim	-446.4821328148
Cl	trust region	-510.2552701516
Ar	dual anneal	-586.8236196211

Table 57: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	19.8	19.8	19.8	nan	-190.8602258811	4.5
cch second order	252.9	137.6	137.6	nan	-150.1420137299	5.6
trust region repeats	362.0	362.0	362.0	7.6	-192.4587917418	3.3
basin hopping	817.0	817.0	817.0	4.7	-191.0988077145	196.6
direct	5134.0	0.0	0.0	nan	-186.8303373767	33.8
direct with trim	5144.5	8.5	8.5	nan	-188.5336674594	32.1
diff evo	7072.3	0.0	0.0	nan	-193.2274263227	52.9
dual anneal	20040.9	38.9	38.9	2.3	-192.8728200922	133.0

Table 58: Average (all systems)

4   10s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

4.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 59: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174556136	971.6	971.6	971.6	1.0	10.0	305.9
He	-3.0782595190	1036.8	1036.8	1036.8	1.0	10.0	319.3
Li	-7.9644375716	982.8	982.8	982.8	1.0	10.0	268.1
Be	-15.6881994909	994.8	994.8	994.8	1.2	10.0	266.0
B	-26.5803100679	991.0	991.0	991.0	1.0	10.0	249.6
C	-40.9218436992	994.6	994.6	994.6	1.0	10.0	279.0
N	-58.9595366877	1027.0	1027.0	1027.0	1.0	10.0	294.5
O	-80.9147152909	1033.8	1033.8	1033.8	1.0	10.0	319.5
F	-106.9890462473	1046.0	1046.0	1046.0	1.0	10.0	305.0
Ne	-137.3684604680	1070.8	1070.8	1070.8	1.0	10.0	233.9
Na	-172.2259449835	1145.0	1145.0	1145.0	1.0	10.0	291.7
Mg	-211.7236028123	1121.4	1121.4	1121.4	1.0	10.0	273.1
Al	-256.0142225335	1112.4	1112.4	1112.4	1.0	10.0	323.7
Si	-305.2425083220	1142.4	1142.4	1142.4	1.0	10.0	338.4
P	-359.5460669659	1146.0	1146.0	1146.0	1.0	10.0	331.1
S	-419.0562154149	1159.8	1159.8	1159.8	1.0	10.0	367.6
Cl	-483.8986519888	1197.2	1197.2	1197.2	1.0	10.0	316.4
Ar	-554.1940214476	1179.8	1179.8	1179.8	1.0	10.0	292.8

Table 60: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174555972	142.0	79.0	79.0	nan	10.0	4.5
He	-3.0782595514	159.0	85.0	85.0	nan	10.0	4.6
Li	-7.9644376109	144.0	82.0	82.0	nan	10.0	5.0
Be	-15.6881994375	149.0	84.0	84.0	nan	10.0	5.1
B	-26.5803099698	158.0	89.0	89.0	nan	10.0	2.9
C	-40.9218436095	138.0	78.0	78.0	nan	10.0	2.7
N	-58.9595366444	156.0	89.0	89.0	nan	10.0	3.1
O	-80.9147152268	145.0	78.0	78.0	nan	10.0	2.8
F	-106.9890462970	172.0	95.0	95.0	nan	10.0	2.9
Ne	-137.3684605264	159.0	90.0	90.0	nan	10.0	2.8
Na	-172.2259450452	170.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.0
Mg	-211.7236028169	169.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.0
Al	-256.0142224857	190.0	103.0	103.0	nan	10.0	3.2
Si	-305.2425083782	183.0	93.0	93.0	nan	10.0	5.3
P	-359.5460669456	170.0	92.0	92.0	nan	10.0	5.3
S	-419.0761475083	223.0	125.0	125.0	nan	10.0	5.4
Cl	-483.8986519588	201.0	109.0	109.0	nan	10.0	5.0
Ar	-554.1940214699	200.0	106.0	106.0	nan	10.0	4.9

Table 61: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174555721	3171.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
He	-3.0782594277	4015.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
Li	-7.9644371870	3771.6	0.0	0.0	nan	10.0	21.5
Be	-15.6881984778	4099.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.8
B	-26.5803085504	3994.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.0
C	-40.9218413285	4309.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
N	-58.9595349043	4447.8	0.0	0.0	nan	10.0	28.4
O	-80.9147109997	4284.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.1
F	-106.9890424551	4594.8	0.0	0.0	nan	10.0	31.1
Ne	-137.3684496666	4632.6	0.0	0.0	nan	10.0	28.0
Na	-172.2259336184	4288.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.3
Mg	-211.7235927244	4389.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.7
Al	-256.0142063278	4552.8	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
Si	-305.2424945034	5086.2	0.0	0.0	nan	10.0	32.6
P	-359.5460532059	4393.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.6
S	-419.0562064811	4296.6	0.0	0.0	nan	10.0	24.2
Cl	-483.8986250710	5019.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5
Ar	-554.1940075275	4048.8	0.0	0.0	nan	10.0	25.6

Table 62: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6173308397	5291.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.5
He	-3.0681874495	4445.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
Li	-7.9528209628	7999.0	0.0	0.0	nan	10.0	42.2
Be	-15.6796447737	5203.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.4
B	-26.5198248536	4889.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.5
C	-40.9169453295	5285.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.7
N	-58.7524679769	5257.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
O	-80.8278482347	9095.0	0.0	0.0	nan	10.0	47.3
F	-106.8208433577	9011.0	0.0	0.0	nan	10.0	50.1
Ne	-137.2458657244	4561.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.6
Na	-171.9520793906	4941.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.8
Mg	-209.8876233748	4935.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
Al	-253.2124449833	4851.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.1
Si	-304.4283739676	5283.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.9
P	-359.3839477793	5155.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.7
S	-418.1690795967	6095.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.7
Cl	-483.0489427753	5475.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.4
Ar	-553.5655216118	5253.0	0.0	0.0	nan	10.0	32.7

Table 63: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174556136	5300.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.5
He	-3.0782595190	4455.0	8.0	8.0	nan	10.0	18.4
Li	-7.9644375716	8008.0	7.0	7.0	nan	10.0	29.9
Be	-15.6881994909	5212.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.0
B	-26.5803100679	4898.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.0
C	-40.9218436992	5294.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.5
N	-58.9595366877	5266.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.6
O	-80.9147152909	9104.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.0
F	-106.9890462473	9020.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.7
Ne	-137.3684604680	4570.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.0
Na	-172.2259449835	4949.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.3
Mg	-211.7236028122	4946.0	9.0	9.0	nan	10.0	20.4
Al	-256.0142225335	4860.0	7.0	7.0	nan	10.0	18.4
Si	-305.2425083220	5292.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.8
P	-359.5460669659	5164.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.3
S	-419.0562154149	6106.0	9.0	9.0	nan	10.0	24.3
Cl	-483.8986519888	5486.0	9.0	9.0	nan	10.0	22.8
Ar	-554.1940214476	5262.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.7

Table 64: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174556136	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	77.5
He	-3.0782595190	20010.8	8.8	8.8	1.0	10.0	77.8
Li	-7.9644375716	20011.4	9.4	9.4	1.0	10.0	76.9
Be	-15.6881994908	20010.4	8.4	8.4	1.0	10.0	77.5
B	-26.5803100677	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	77.2
C	-40.9218436990	20015.0	13.0	13.0	1.0	10.0	77.9
N	-58.9595366874	20012.2	10.2	10.2	1.0	10.0	78.2
O	-80.9147152904	20014.6	12.6	12.6	1.0	10.0	78.5
F	-106.9890462467	20013.8	11.8	11.8	1.0	10.0	78.2
Ne	-137.3684604671	20016.8	14.8	14.8	1.0	10.0	77.9
Na	-172.2259449823	20021.8	19.8	19.8	1.0	10.0	81.5
Mg	-211.7236028107	20024.2	22.2	22.2	1.0	10.0	79.8
Al	-256.0142225314	20021.8	19.8	19.8	1.0	10.0	73.2
Si	-305.2425083195	20021.2	19.2	19.2	1.0	10.0	78.4
P	-359.5460669628	20022.8	20.8	20.8	1.0	10.0	81.8
S	-419.0562154111	20027.6	25.6	25.6	1.0	10.0	78.0
Cl	-483.8986519842	20024.2	22.2	22.2	1.0	10.0	79.4
Ar	-554.1940214421	20022.6	20.6	20.6	1.0	10.0	79.3

Table 65: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174556136	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.8
He	-3.0782595190	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	6.2
Li	-7.9644375716	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.7
Be	-15.6881994909	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
B	-26.5803100679	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
C	-40.9218436992	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.7
N	-58.9595366877	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.1
O	-80.9147152909	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.8
F	-106.9890462473	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
Ne	-137.3684604680	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	2.0
Na	-172.2259449835	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.5
Mg	-211.7236028122	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
Al	-256.0142225335	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	1.9
Si	-305.2425083220	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	3.2
P	-359.5460669659	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	3.0
S	-419.0562154149	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	3.0
Cl	-483.8986519888	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.1
Ar	-554.1940214476	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	3.0

Table 66: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6174556136	253.0	253.0	253.0	1.0	10.0	4.9
He	-3.0782595190	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	4.4
Li	-7.9644375716	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	4.6
Be	-15.6881994909	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	4.4
B	-26.5803100679	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	4.3
C	-40.9218436992	269.0	269.0	269.0	1.0	10.0	4.3
N	-58.9595366877	268.0	268.0	268.0	1.0	10.0	4.4
O	-80.9147152909	270.0	270.0	270.0	1.0	10.0	4.1
F	-106.9890462473	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	4.3
Ne	-137.3684604680	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	4.3
Na	-172.2259449835	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	4.5
Mg	-211.7236028122	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	4.1
Al	-256.0142225335	284.0	284.0	284.0	1.0	10.0	4.6
Si	-305.2425083220	285.0	285.0	285.0	1.0	10.0	4.5
P	-359.5460669659	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.6
S	-419.0562154149	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.5
Cl	-483.8986519888	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	4.3
Ar	-554.1940214476	291.0	291.0	291.0	1.0	10.0	4.4

Table 67: trust region repeats

4.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6174556136	971.6	971.6	971.6	1.0	10.0	305.9
cch second order	-0.6174555972	142.0	79.0	79.0	nan	10.0	4.5
diff evo	-0.6174555721	3171.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
direct	-0.6173308397	5291.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.5
direct with trim	-0.6174556136	5300.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.5
dual anneal	-0.6174556136	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	77.5
trust region	-0.6174556136	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.8
trust region repeats	-0.6174556136	253.0	253.0	253.0	1.0	10.0	4.9

Table 68: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0782595190	1036.8	1036.8	1036.8	1.0	10.0	319.3
cch second order	-3.0782595514	159.0	85.0	85.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-3.0782594277	4015.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
direct	-3.0681874495	4445.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
direct with trim	-3.0782595190	4455.0	8.0	8.0	nan	10.0	18.4
dual anneal	-3.0782595190	20010.8	8.8	8.8	1.0	10.0	77.8
trust region	-3.0782595190	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	6.2
trust region repeats	-3.0782595190	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	4.4

Table 69: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9644375716	982.8	982.8	982.8	1.0	10.0	268.1
cch second order	-7.9644376109	144.0	82.0	82.0	nan	10.0	5.0
diff evo	-7.9644371870	3771.6	0.0	0.0	nan	10.0	21.5
direct	-7.9528209628	7999.0	0.0	0.0	nan	10.0	42.2
direct with trim	-7.9644375716	8008.0	7.0	7.0	nan	10.0	29.9
dual anneal	-7.9644375716	20011.4	9.4	9.4	1.0	10.0	76.9
trust region	-7.9644375716	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.7
trust region repeats	-7.9644375716	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	4.6

Table 70: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.6881994909	994.8	994.8	994.8	1.2	10.0	266.0
cch second order	-15.6881994375	149.0	84.0	84.0	nan	10.0	5.1
diff evo	-15.6881984778	4099.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.8
direct	-15.6796447737	5203.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.4
direct with trim	-15.6881994909	5212.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.0
dual anneal	-15.6881994908	20010.4	8.4	8.4	1.0	10.0	77.5
trust region	-15.6881994909	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
trust region repeats	-15.6881994909	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	4.4

Table 71: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.5803100679	991.0	991.0	991.0	1.0	10.0	249.6
cch second order	-26.5803099698	158.0	89.0	89.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-26.5803085504	3994.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.0
direct	-26.5198248536	4889.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.5
direct with trim	-26.5803100679	4898.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.0
dual anneal	-26.5803100677	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	77.2
trust region	-26.5803100679	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-26.5803100679	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	4.3

Table 72: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-40.9218436992	994.6	994.6	994.6	1.0	10.0	279.0
cch second order	-40.9218436095	138.0	78.0	78.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-40.9218413285	4309.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.5
direct	-40.9169453295	5285.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.7
direct with trim	-40.9218436992	5294.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.5
dual anneal	-40.9218436990	20015.0	13.0	13.0	1.0	10.0	77.9
trust region	-40.9218436992	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.7
trust region repeats	-40.9218436992	269.0	269.0	269.0	1.0	10.0	4.3

Table 73: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-58.9595366877	1027.0	1027.0	1027.0	1.0	10.0	294.5
cch second order	-58.9595366444	156.0	89.0	89.0	nan	10.0	3.1
diff evo	-58.9595349043	4447.8	0.0	0.0	nan	10.0	28.4
direct	-58.7524679769	5257.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
direct with trim	-58.9595366877	5266.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.6
dual anneal	-58.9595366874	20012.2	10.2	10.2	1.0	10.0	78.2
trust region	-58.9595366877	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-58.9595366877	268.0	268.0	268.0	1.0	10.0	4.4

Table 74: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-80.9147152909	1033.8	1033.8	1033.8	1.0	10.0	319.5
cch second order	-80.9147152268	145.0	78.0	78.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-80.9147109997	4284.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.1
direct	-80.8278482347	9095.0	0.0	0.0	nan	10.0	47.3
direct with trim	-80.9147152909	9104.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.0
dual anneal	-80.9147152904	20014.6	12.6	12.6	1.0	10.0	78.5
trust region	-80.9147152909	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-80.9147152909	270.0	270.0	270.0	1.0	10.0	4.1

Table 75: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-106.9890462473	1046.0	1046.0	1046.0	1.0	10.0	305.0
cch second order	-106.9890462970	172.0	95.0	95.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-106.9890424551	4594.8	0.0	0.0	nan	10.0	31.1
direct	-106.8208433577	9011.0	0.0	0.0	nan	10.0	50.1
direct with trim	-106.9890462473	9020.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.7
dual anneal	-106.9890462467	20013.8	11.8	11.8	1.0	10.0	78.2
trust region	-106.9890462473	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-106.9890462473	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	4.3

Table 76: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.3684604680	1070.8	1070.8	1070.8	1.0	10.0	233.9
cch second order	-137.3684605264	159.0	90.0	90.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-137.3684496666	4632.6	0.0	0.0	nan	10.0	28.0
direct	-137.2458657244	4561.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.6
direct with trim	-137.3684604680	4570.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.0
dual anneal	-137.3684604671	20016.8	14.8	14.8	1.0	10.0	77.9
trust region	-137.3684604680	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-137.3684604680	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	4.3

Table 77: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.2259449835	1145.0	1145.0	1145.0	1.0	10.0	291.7
cch second order	-172.2259450452	170.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-172.2259336184	4288.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.3
direct	-171.9520793906	4941.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.8
direct with trim	-172.2259449835	4949.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.3
dual anneal	-172.2259449823	20021.8	19.8	19.8	1.0	10.0	81.5
trust region	-172.2259449835	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.5
trust region repeats	-172.2259449835	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	4.5

Table 78: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-211.7236028123	1121.4	1121.4	1121.4	1.0	10.0	273.1
cch second order	-211.7236028169	169.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-211.7235927244	4389.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.7
direct	-209.8876233748	4935.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
direct with trim	-211.7236028122	4946.0	9.0	9.0	nan	10.0	20.4
dual anneal	-211.7236028107	20024.2	22.2	22.2	1.0	10.0	79.8
trust region	-211.7236028122	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-211.7236028122	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	4.1

Table 79: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.0142225335	1112.4	1112.4	1112.4	1.0	10.0	323.7
cch second order	-256.0142224857	190.0	103.0	103.0	nan	10.0	3.2
diff evo	-256.0142063278	4552.8	0.0	0.0	nan	10.0	26.2
direct	-253.2124449833	4851.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.1
direct with trim	-256.0142225335	4860.0	7.0	7.0	nan	10.0	18.4
dual anneal	-256.0142225314	20021.8	19.8	19.8	1.0	10.0	73.2
trust region	-256.0142225335	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-256.0142225335	284.0	284.0	284.0	1.0	10.0	4.6

Table 80: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.2425083220	1142.4	1142.4	1142.4	1.0	10.0	338.4
cch second order	-305.2425083782	183.0	93.0	93.0	nan	10.0	5.3
diff evo	-305.2424945034	5086.2	0.0	0.0	nan	10.0	32.6
direct	-304.4283739676	5283.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.9
direct with trim	-305.2425083220	5292.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.8
dual anneal	-305.2425083195	20021.2	19.2	19.2	1.0	10.0	78.4
trust region	-305.2425083220	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	3.2
trust region repeats	-305.2425083220	285.0	285.0	285.0	1.0	10.0	4.5

Table 81: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-359.5460669659	1146.0	1146.0	1146.0	1.0	10.0	331.1
cch second order	-359.5460669456	170.0	92.0	92.0	nan	10.0	5.3
diff evo	-359.5460532059	4393.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.6
direct	-359.3839477793	5155.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.7
direct with trim	-359.5460669659	5164.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.3
dual anneal	-359.5460669628	20022.8	20.8	20.8	1.0	10.0	81.8
trust region	-359.5460669659	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-359.5460669659	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.6

Table 82: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.0562154149	1159.8	1159.8	1159.8	1.0	10.0	367.6
cch second order	-419.0761475083	223.0	125.0	125.0	nan	10.0	5.4
diff evo	-419.0562064811	4296.6	0.0	0.0	nan	10.0	24.2
direct	-418.1690795967	6095.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.7
direct with trim	-419.0562154149	6106.0	9.0	9.0	nan	10.0	24.3
dual anneal	-419.0562154111	20027.6	25.6	25.6	1.0	10.0	78.0
trust region	-419.0562154149	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-419.0562154149	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.5

Table 83: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-483.8986519888	1197.2	1197.2	1197.2	1.0	10.0	316.4
cch second order	-483.8986519588	201.0	109.0	109.0	nan	10.0	5.0
diff evo	-483.8986250710	5019.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5
direct	-483.0489427753	5475.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.4
direct with trim	-483.8986519888	5486.0	9.0	9.0	nan	10.0	22.8
dual anneal	-483.8986519842	20024.2	22.2	22.2	1.0	10.0	79.4
trust region	-483.8986519888	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-483.8986519888	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	4.3

Table 84: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-554.1940214476	1179.8	1179.8	1179.8	1.0	10.0	292.8
cch second order	-554.1940214699	200.0	106.0	106.0	nan	10.0	4.9
diff evo	-554.1940075275	4048.8	0.0	0.0	nan	10.0	25.6
direct	-553.5655216118	5253.0	0.0	0.0	nan	10.0	32.7
direct with trim	-554.1940214476	5262.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.7
dual anneal	-554.1940214421	20022.6	20.6	20.6	1.0	10.0	79.3
trust region	-554.1940214476	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-554.1940214476	291.0	291.0	291.0	1.0	10.0	4.4

Table 85: Ar

4.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6174556136
He	cch second order	-3.0782595514
Li	cch second order	-7.9644376109
Be	basin hopping	-15.6881994909
B	basin hopping	-26.5803100679
C	basin hopping	-40.9218436992
N	basin hopping	-58.9595366877
O	direct with trim	-80.9147152909
F	cch second order	-106.9890462970
Ne	cch second order	-137.3684605264
Na	cch second order	-172.2259450452
Mg	cch second order	-211.7236028169
Al	basin hopping	-256.0142225335
Si	cch second order	-305.2425083782
P	basin hopping	-359.5460669659
S	cch second order	-419.0761475083
Cl	trust region	-483.8986519888
Ar	cch second order	-554.1940214699

Table 86: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.1	11.1	11.1	nan	-180.0546388402	2.7
cch second order	168.2	92.7	92.7	nan	-180.0557461711	4.0
trust region repeats	273.4	273.4	273.4	1.0	-180.0546388402	4.4
basin hopping	1075.2	1075.2	1075.2	1.0	-180.0546388402	298.6
diff evo	4299.6	0.0	0.0	nan	-180.0546310016	26.4
direct	5723.6	0.0	0.0	nan	-179.5583218323	31.0
direct with trim	5732.9	7.3	7.3	nan	-180.0546388402	22.9
dual anneal	20017.5	15.5	15.5	1.0	-180.0546388387	78.3

Table 87: Average (all systems)

5 10s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

5.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 88: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550844194	1056.8	1056.8	1056.8	1.2	10.0	262.1
He	-3.1735716903	1024.2	1024.2	1024.2	2.0	10.0	213.0
Li	-8.1328594914	1045.2	1045.2	1045.2	2.4	10.0	223.6
Be	-15.9407209102	897.2	897.2	897.2	2.0	10.0	196.6
B	-26.9248526193	910.2	910.2	910.2	3.6	10.0	216.2
C	-41.3638865132	890.2	890.2	890.2	3.4	10.0	253.9
N	-59.5026622196	791.6	791.6	791.6	2.4	10.0	167.3
O	-81.5610377189	791.2	791.2	791.2	2.2	10.0	173.7
F	-107.7394813700	772.2	772.2	772.2	1.2	10.0	157.9
Ne	-138.2228763671	815.8	815.8	815.8	1.8	10.0	177.5
Na	-173.1832485467	982.2	982.2	982.2	1.6	10.0	181.3
Mg	-212.7818015067	798.4	798.4	798.4	1.6	10.0	176.8
Al	-257.1704817769	769.6	769.6	769.6	1.4	10.0	188.1
Si	-306.4932115765	813.8	813.8	813.8	1.6	10.0	157.1
P	-360.8868786786	843.6	843.6	843.6	1.8	10.0	182.2
S	-420.4821441865	842.8	842.8	842.8	3.2	10.0	167.7
Cl	-485.4041109499	850.2	850.2	850.2	2.6	10.0	181.4
Ar	-555.7728834644	777.6	777.6	777.6	2.6	10.0	169.2

Table 89: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550843898	130.0	70.0	70.0	nan	10.0	3.8
He	-3.1735716865	165.0	89.0	89.0	nan	10.0	4.2
Li	-8.1328594956	160.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.5
Be	-10.9229346430	469.0	247.0	247.0	nan	10.0	8.1
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-41.3638864903	184.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.9
N	-59.5026622126	160.0	90.0	90.0	nan	10.0	4.7
O	-81.5610377217	186.0	102.0	102.0	nan	10.0	5.3
F	-107.7394813654	184.0	101.0	101.0	nan	10.0	5.1
Ne	-138.2228763624	188.0	104.0	104.0	nan	10.0	2.9
Na	-173.1832484823	199.0	108.0	108.0	nan	10.0	4.6
Mg	-212.7818014831	194.0	103.0	103.0	nan	10.0	3.0
Al	-257.1704817515	202.0	109.0	109.0	nan	10.0	3.5
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	-479.0937756685	157.0	88.0	88.0	nan	10.0	2.7
Ar	-515.3154239560	552.0	297.0	297.0	nan	10.0	9.0

Table 90: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550843328	3452.4	0.0	0.0	nan	10.0	21.6
He	-3.1735715090	3700.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
Li	-8.1328591456	4330.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
Be	-15.9407194217	4342.8	0.0	0.0	nan	10.0	27.3
B	-26.9248507556	4418.4	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
C	-41.3638841238	5048.4	0.0	0.0	nan	10.0	25.4
N	-59.5026610257	4649.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.1
O	-81.5610344034	4779.6	0.0	0.0	nan	10.0	29.8
F	-107.7394774181	4653.6	0.0	0.0	nan	10.0	23.9
Ne	-138.2228692913	4985.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.8
Na	-173.1832391491	4414.2	0.0	0.0	nan	10.0	19.2
Mg	-212.7817902849	4750.2	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
Al	-257.1704598395	4166.4	0.0	0.0	nan	10.0	21.9
Si	-306.4931950407	4699.8	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
P	-360.8868651591	5854.8	0.0	0.0	nan	10.0	30.6
S	-420.4821109068	4321.8	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
Cl	-485.4040864199	4456.2	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
Ar	-555.7728593794	4981.2	0.0	0.0	nan	10.0	28.0

Table 91: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550798642	4771.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.2
He	-3.1672419996	5145.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.6
Li	-8.1004060180	5093.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.2
Be	-15.9297427884	5067.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.2
B	-26.8637726542	5103.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.0
C	-41.3580890900	4989.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.6
N	-59.1933602297	5275.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
O	-80.8133824331	5451.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.3
F	-107.5735436479	8157.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.6
Ne	-138.1137479043	5021.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
Na	-173.0003973909	4849.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.4
Mg	-211.1051793302	4903.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
Al	-256.5249773268	4983.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.7
Si	-305.2569791425	5049.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5
P	-360.6771794108	7913.0	0.0	0.0	nan	10.0	45.6
S	-419.3142214905	5989.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.5
Cl	-485.1336083102	5559.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.2
Ar	-551.5192337532	5085.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5

Table 92: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550844194	4778.0	5.0	5.0	nan	10.0	27.5
He	-3.1735716903	5153.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.9
Li	-8.1328594914	5101.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.3
Be	-15.9407209102	5075.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.7
B	-26.9248526193	5112.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.0
C	-41.3638865132	4997.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.0
N	-59.5026622196	5283.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.6
O	-81.4606952297	5462.0	9.0	9.0	nan	10.0	29.9
F	-107.7394813700	8166.0	7.0	7.0	nan	10.0	49.5
Ne	-138.2228763671	5030.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.6
Na	-173.1832485467	4857.0	6.0	6.0	nan	10.0	31.3
Mg	-212.7818015067	4913.0	8.0	8.0	nan	10.0	31.3
Al	-257.0093983275	4992.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
Si	-306.4932115765	5059.0	8.0	8.0	nan	10.0	32.3
P	-360.7017342281	7921.0	6.0	6.0	nan	10.0	47.0
S	-420.4821441865	6003.0	12.0	12.0	nan	10.0	36.8
Cl	-485.1949459823	5567.0	6.0	6.0	nan	10.0	34.0
Ar	-555.7728834644	5094.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.6

Table 93: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550844194	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	112.2
He	-3.1735716903	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	113.1
Li	-8.1328594914	20014.6	12.6	12.6	1.0	10.0	112.3
Be	-15.9407209101	20011.2	9.2	9.2	1.0	10.0	114.6
B	-26.9248526191	20025.4	23.4	23.4	1.8	10.0	112.9
C	-41.3638865130	20020.0	18.0	18.0	1.6	10.0	114.4
N	-59.5026622193	20018.2	16.2	16.2	1.4	10.0	114.8
O	-81.5610377184	20018.6	16.6	16.6	1.8	10.0	107.3
F	-107.7394813693	20026.0	24.0	24.0	2.2	10.0	124.7
Ne	-138.2228763661	20022.4	20.4	20.4	2.0	10.0	124.4
Na	-173.1832485453	20015.2	13.2	13.2	1.2	10.0	124.2
Mg	-212.7818015050	20019.2	17.2	17.2	1.4	10.0	125.7
Al	-257.1704817747	20023.6	21.6	21.6	2.2	10.0	125.6
Si	-306.4932115737	20022.2	20.2	20.2	1.8	10.0	122.9
P	-360.8868786751	20025.2	23.2	23.2	2.0	10.0	126.7
S	-420.4821441823	20017.4	15.4	15.4	1.2	10.0	123.0
Cl	-485.4041109448	20024.8	22.8	22.8	2.2	10.0	121.1
Ar	-555.7728834582	20020.4	18.4	18.4	1.6	10.0	123.8

Table 94: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550844194	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
He	-3.1735716903	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	4.0
Li	-8.1328594914	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.8
Be	-15.9407209102	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.9
B	-26.9248526193	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.3
C	-41.3638865132	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
N	-59.5026622196	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.7
O	-81.5610377189	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.1
F	-107.7394813700	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.6
Ne	-138.2228763671	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.1
Na	-173.1832485467	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
Mg	-212.7818015067	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.1
Al	-257.1704817769	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.0
Si	-306.4932115765	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
P	-360.8868786786	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	6.2
S	-420.4821441865	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.2
Cl	-485.4041109499	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.3
Ar	-555.7728834644	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.1

Table 95: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6550844194	215.0	215.0	215.0	1.0	10.0	3.2
He	-3.1735716903	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	3.9
Li	-8.1328594914	241.0	241.0	241.0	1.0	10.0	3.1
Be	-15.9407209102	252.0	252.0	252.0	1.0	10.0	3.5
B	-26.9248526193	255.0	255.0	255.0	1.0	10.0	3.1
C	-41.3638865132	260.0	260.0	260.0	1.0	10.0	2.9
N	-59.5026622196	265.0	265.0	265.0	1.0	10.0	3.1
O	-81.5610377189	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	3.1
F	-107.7394813700	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	3.5
Ne	-138.2228763671	275.0	275.0	275.0	1.0	10.0	3.8
Na	-173.1832485467	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	3.4
Mg	-212.7818015067	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	3.5
Al	-257.1704817769	285.0	285.0	285.0	1.0	10.0	3.0
Si	-306.4932115765	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	3.2
P	-360.8868786786	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	2.9
S	-420.4821441865	288.0	288.0	288.0	1.0	10.0	3.0
Cl	-485.4041109499	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	3.2
Ar	-555.7728834644	290.0	290.0	290.0	1.0	10.0	3.4

Table 96: trust region repeats

5.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6550844194	1056.8	1056.8	1056.8	1.2	10.0	262.1
cch second order	-0.6550843898	130.0	70.0	70.0	nan	10.0	3.8
diff evo	-0.6550843328	3452.4	0.0	0.0	nan	10.0	21.6
direct	-0.6550798642	4771.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.2
direct with trim	-0.6550844194	4778.0	5.0	5.0	nan	10.0	27.5
dual anneal	-0.6550844194	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	112.2
trust region	-0.6550844194	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-0.6550844194	215.0	215.0	215.0	1.0	10.0	3.2

Table 97: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1735716903	1024.2	1024.2	1024.2	2.0	10.0	213.0
cch second order	-3.1735716865	165.0	89.0	89.0	nan	10.0	4.2
diff evo	-3.1735715090	3700.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
direct	-3.1672419996	5145.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.6
direct with trim	-3.1735716903	5153.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.9
dual anneal	-3.1735716903	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	113.1
trust region	-3.1735716903	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	4.0
trust region repeats	-3.1735716903	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	3.9

Table 98: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1328594914	1045.2	1045.2	1045.2	2.4	10.0	223.6
cch second order	-8.1328594956	160.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.5
diff evo	-8.1328591456	4330.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct	-8.1004060180	5093.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.2
direct with trim	-8.1328594914	5101.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.3
dual anneal	-8.1328594914	20014.6	12.6	12.6	1.0	10.0	112.3
trust region	-8.1328594914	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.8
trust region repeats	-8.1328594914	241.0	241.0	241.0	1.0	10.0	3.1

Table 99: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9407209102	897.2	897.2	897.2	2.0	10.0	196.6
cch second order	-10.9229346430	469.0	247.0	247.0	nan	10.0	8.1
diff evo	-15.9407194217	4342.8	0.0	0.0	nan	10.0	27.3
direct	-15.9297427884	5067.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.2
direct with trim	-15.9407209102	5075.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.7
dual anneal	-15.9407209101	20011.2	9.2	9.2	1.0	10.0	114.6
trust region	-15.9407209102	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-15.9407209102	252.0	252.0	252.0	1.0	10.0	3.5

Table 100: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9248526193	910.2	910.2	910.2	3.6	10.0	216.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-26.9248507556	4418.4	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
direct	-26.8637726542	5103.0	0.0	0.0	nan	10.0	29.0
direct with trim	-26.9248526193	5112.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.0
dual anneal	-26.9248526191	20025.4	23.4	23.4	1.8	10.0	112.9
trust region	-26.9248526193	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.3
trust region repeats	-26.9248526193	255.0	255.0	255.0	1.0	10.0	3.1

Table 101: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.3638865132	890.2	890.2	890.2	3.4	10.0	253.9
cch second order	-41.3638864903	184.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.9
diff evo	-41.3638841238	5048.4	0.0	0.0	nan	10.0	25.4
direct	-41.3580890900	4989.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.6
direct with trim	-41.3638865132	4997.0	6.0	6.0	nan	10.0	29.0
dual anneal	-41.3638865130	20020.0	18.0	18.0	1.6	10.0	114.4
trust region	-41.3638865132	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-41.3638865132	260.0	260.0	260.0	1.0	10.0	2.9

Table 102: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5026622196	791.6	791.6	791.6	2.4	10.0	167.3
cch second order	-59.5026622126	160.0	90.0	90.0	nan	10.0	4.7
diff evo	-59.5026610257	4649.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.1
direct	-59.1933602297	5275.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
direct with trim	-59.5026622196	5283.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.6
dual anneal	-59.5026622193	20018.2	16.2	16.2	1.4	10.0	114.8
trust region	-59.5026622196	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.7
trust region repeats	-59.5026622196	265.0	265.0	265.0	1.0	10.0	3.1

Table 103: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.5610377189	791.2	791.2	791.2	2.2	10.0	173.7
cch second order	-81.5610377217	186.0	102.0	102.0	nan	10.0	5.3
diff evo	-81.5610344034	4779.6	0.0	0.0	nan	10.0	29.8
direct	-80.8133824331	5451.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.3
direct with trim	-81.4606952297	5462.0	9.0	9.0	nan	10.0	29.9
dual anneal	-81.5610377184	20018.6	16.6	16.6	1.8	10.0	107.3
trust region	-81.5610377189	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-81.5610377189	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	3.1

Table 104: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.7394813700	772.2	772.2	772.2	1.2	10.0	157.9
cch second order	-107.7394813654	184.0	101.0	101.0	nan	10.0	5.1
diff evo	-107.7394774181	4653.6	0.0	0.0	nan	10.0	23.9
direct	-107.5735436479	8157.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.6
direct with trim	-107.7394813700	8166.0	7.0	7.0	nan	10.0	49.5
dual anneal	-107.7394813693	20026.0	24.0	24.0	2.2	10.0	124.7
trust region	-107.7394813700	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.6
trust region repeats	-107.7394813700	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	3.5

Table 105: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.2228763671	815.8	815.8	815.8	1.8	10.0	177.5
cch second order	-138.2228763624	188.0	104.0	104.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-138.2228692913	4985.4	0.0	0.0	nan	10.0	29.8
direct	-138.1137479043	5021.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
direct with trim	-138.2228763671	5030.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.6
dual anneal	-138.2228763661	20022.4	20.4	20.4	2.0	10.0	124.4
trust region	-138.2228763671	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-138.2228763671	275.0	275.0	275.0	1.0	10.0	3.8

Table 106: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.1832485467	982.2	982.2	982.2	1.6	10.0	181.3
cch second order	-173.1832484823	199.0	108.0	108.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-173.1832391491	4414.2	0.0	0.0	nan	10.0	19.2
direct	-173.0003973909	4849.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.4
direct with trim	-173.1832485467	4857.0	6.0	6.0	nan	10.0	31.3
dual anneal	-173.1832485453	20015.2	13.2	13.2	1.2	10.0	124.2
trust region	-173.1832485467	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-173.1832485467	277.0	277.0	277.0	1.0	10.0	3.4

Table 107: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.7818015067	798.4	798.4	798.4	1.6	10.0	176.8
cch second order	-212.7818014831	194.0	103.0	103.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-212.7817902849	4750.2	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
direct	-211.1051793302	4903.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
direct with trim	-212.7818015067	4913.0	8.0	8.0	nan	10.0	31.3
dual anneal	-212.7818015050	20019.2	17.2	17.2	1.4	10.0	125.7
trust region	-212.7818015067	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-212.7818015067	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	3.5

Table 108: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.1704817769	769.6	769.6	769.6	1.4	10.0	188.1
cch second order	-257.1704817515	202.0	109.0	109.0	nan	10.0	3.5
diff evo	-257.1704598395	4166.4	0.0	0.0	nan	10.0	21.9
direct	-256.5249773268	4983.0	0.0	0.0	nan	10.0	30.7
direct with trim	-257.0093983275	4992.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
dual anneal	-257.1704817747	20023.6	21.6	21.6	2.2	10.0	125.6
trust region	-257.1704817769	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-257.1704817769	285.0	285.0	285.0	1.0	10.0	3.0

Table 109: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.4932115765	813.8	813.8	813.8	1.6	10.0	157.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-306.4931950407	4699.8	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
direct	-305.2569791425	5049.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5
direct with trim	-306.4932115765	5059.0	8.0	8.0	nan	10.0	32.3
dual anneal	-306.4932115737	20022.2	20.2	20.2	1.8	10.0	122.9
trust region	-306.4932115765	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-306.4932115765	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	3.2

Table 110: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.8868786786	843.6	843.6	843.6	1.8	10.0	182.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-360.8868651591	5854.8	0.0	0.0	nan	10.0	30.6
direct	-360.6771794108	7913.0	0.0	0.0	nan	10.0	45.6
direct with trim	-360.7017342281	7921.0	6.0	6.0	nan	10.0	47.0
dual anneal	-360.8868786751	20025.2	23.2	23.2	2.0	10.0	126.7
trust region	-360.8868786786	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	6.2
trust region repeats	-360.8868786786	282.0	282.0	282.0	1.0	10.0	2.9

Table 111: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.4821441865	842.8	842.8	842.8	3.2	10.0	167.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-420.4821109068	4321.8	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
direct	-419.3142214905	5989.0	0.0	0.0	nan	10.0	31.5
direct with trim	-420.4821441865	6003.0	12.0	12.0	nan	10.0	36.8
dual anneal	-420.4821441823	20017.4	15.4	15.4	1.2	10.0	123.0
trust region	-420.4821441865	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.2
trust region repeats	-420.4821441865	288.0	288.0	288.0	1.0	10.0	3.0

Table 112: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.4041109499	850.2	850.2	850.2	2.6	10.0	181.4
cch second order	-479.0937756685	157.0	88.0	88.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-485.4040864199	4456.2	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
direct	-485.1336083102	5559.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.2
direct with trim	-485.1949459823	5567.0	6.0	6.0	nan	10.0	34.0
dual anneal	-485.4041109448	20024.8	22.8	22.8	2.2	10.0	121.1
trust region	-485.4041109499	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.3
trust region repeats	-485.4041109499	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	3.2

Table 113: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.7728834644	777.6	777.6	777.6	2.6	10.0	169.2
cch second order	-515.3154239560	552.0	297.0	297.0	nan	10.0	9.0
diff evo	-555.7728593794	4981.2	0.0	0.0	nan	10.0	28.0
direct	-551.5192337532	5085.0	0.0	0.0	nan	10.0	28.5
direct with trim	-555.7728834644	5094.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.6
dual anneal	-555.7728834582	20020.4	18.4	18.4	1.6	10.0	123.8
trust region	-555.7728834644	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-555.7728834644	290.0	290.0	290.0	1.0	10.0	3.4

Table 114: Ar

5.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6550844194
He	basin hopping	-3.1735716903
Li	cch second order	-8.1328594956
Be	basin hopping	-15.9407209102
B	basin hopping	-26.9248526193
C	basin hopping	-41.3638865132
N	trust region	-59.5026622196
O	cch second order	-81.5610377217
F	basin hopping	-107.7394813700
Ne	trust region	-138.2228763671
Na	trust region repeats	-173.1832485467
Mg	basin hopping	-212.7818015067
Al	trust region repeats	-257.1704817769
Si	basin hopping	-306.4932115765
P	trust region repeats	-360.8868786786
S	basin hopping	-420.4821441865
Cl	trust region	-485.4041109499
Ar	trust region	-555.7728834644

Table 115: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.4	10.4	10.4	nan	-180.8550996670	2.9
cch second order	223.6	121.2	121.2	nan	-149.2013661220	4.7
trust region repeats	267.2	267.2	267.2	1.0	-180.8550996670	3.3
basin hopping	870.7	870.7	870.7	2.1	-180.8550996670	191.4
diff evo	4555.8	0.0	0.0	nan	-180.8550898670	25.2
direct	5466.8	0.0	0.0	nan	-180.2388968214	29.5
direct with trim	5475.7	6.9	6.9	nan	-180.8186699249	33.0
dual anneal	20019.3	17.3	17.3	1.6	-180.8550996653	119.1

Table 116: Average (all systems)

6 10s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

6.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 117: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787603	1026.6	1026.6	1026.6	1.4	10.0	217.8
He	-3.2144027365	1068.4	1068.4	1068.4	1.8	10.0	248.9
Li	-8.2328141428	1025.0	1025.0	1025.0	2.0	10.0	257.8
Be	-16.1297367775	852.6	852.6	852.6	1.6	10.0	182.7
B	-27.2347775994	979.8	979.8	979.8	2.6	10.0	188.3
C	-41.8280693968	912.6	912.6	912.6	3.8	10.0	184.9
N	-60.1556952045	818.6	818.6	818.6	2.6	10.0	126.7
O	-82.4385752933	796.0	796.0	796.0	2.0	10.0	162.4
F	-108.8781037009	783.6	783.6	783.6	1.4	10.0	157.4
Ne	-139.6599826323	803.6	803.6	803.6	1.8	10.0	172.6
Na	-174.9569720649	803.8	803.8	803.8	1.8	10.0	191.1
Mg	-214.9309411935	790.6	790.6	790.6	1.6	10.0	163.9
Al	-259.7344459161	817.0	817.0	817.0	1.2	10.0	212.8
Si	-309.5119709146	799.4	799.4	799.4	1.2	10.0	135.9
P	-364.4009266230	806.0	806.0	806.0	2.0	10.0	135.7
S	-424.5324624823	891.0	891.0	891.0	3.2	10.0	178.7
Cl	-490.0321396543	882.2	882.2	882.2	3.2	10.0	238.5
Ar	-561.0204943613	845.2	845.2	845.2	3.2	10.0	154.1

Table 118: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787702	144.0	80.0	80.0	nan	10.0	4.6
He	-3.2144027411	160.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.1
Li	-8.2328140968	174.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.4
Be	-11.1727561853	485.0	261.0	261.0	nan	10.0	5.3
B	-20.5625723331	529.0	286.0	286.0	nan	10.0	6.3
C	-41.8280694600	156.0	84.0	84.0	nan	10.0	4.5
N	-60.1556952174	151.0	84.0	84.0	nan	10.0	3.0
O	-82.4385753094	190.0	105.0	105.0	nan	10.0	4.0
F	-108.8781036705	186.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.7
Ne	-139.6599826828	186.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.3
Na	-174.9569721215	197.0	108.0	108.0	nan	10.0	5.1
Mg	-214.9309412089	203.0	109.0	109.0	nan	10.0	5.1
Al	-259.7344458905	199.0	109.0	109.0	nan	10.0	3.6
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 119: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640786845	3175.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.0
He	-3.2144026155	3612.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.2
Li	-8.2328135297	4569.6	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
Be	-16.1297361708	4405.8	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
B	-27.2347760999	4267.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
C	-41.8280677871	4657.8	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
N	-60.1556915708	5195.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.6
O	-82.4385720399	5678.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.1
F	-108.8780968498	5212.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.2
Ne	-139.6599759824	4746.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.9
Na	-174.9569600666	4363.8	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
Mg	-214.9309337206	4792.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.6
Al	-259.7344304371	7014.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.9
Si	-309.5119463316	5035.8	0.0	0.0	nan	10.0	26.3
P	-364.4009184251	8887.2	0.0	0.0	nan	10.0	44.5
S	-424.5324524057	4271.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.9
Cl	-490.0320942755	4074.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
Ar	-561.0204670614	4620.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1

Table 120: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640728453	4621.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
He	-3.2088240993	5125.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.8
Li	-8.2156242952	8485.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.0
Be	-16.1166615840	5165.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.0
B	-27.1735110790	4839.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
C	-41.8272708630	5273.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.8
N	-60.1382880955	5543.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.0
O	-82.3902641133	9297.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.4
F	-108.7978253391	8807.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.8
Ne	-139.5289342163	4801.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.2
Na	-174.7401549717	4645.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.3
Mg	-213.2182673817	4955.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.6
Al	-259.2296692781	4791.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.9
Si	-306.9047505409	5069.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.8
P	-364.2032423931	9589.0	0.0	0.0	nan	10.0	42.5
S	-423.4676051829	6979.0	0.0	0.0	nan	10.0	35.4
Cl	-489.9087930642	8595.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.2
Ar	-560.2179685890	5429.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.4

Table 121: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787603	4628.0	5.0	5.0	nan	10.0	29.9
He	-3.2144027365	5133.0	6.0	6.0	nan	10.0	32.5
Li	-8.2328141428	8494.0	7.0	7.0	nan	10.0	49.2
Be	-16.1297367775	5174.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.6
B	-27.2347775994	4848.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.5
C	-41.8280693968	5280.0	5.0	5.0	nan	10.0	33.0
N	-60.1556952045	5551.0	6.0	6.0	nan	10.0	34.5
O	-82.4385752933	9307.0	8.0	8.0	nan	10.0	53.8
F	-108.8781037009	8815.0	6.0	6.0	nan	10.0	48.2
Ne	-139.6599826323	4810.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.4
Na	-174.9569720649	4654.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.1
Mg	-214.9309411935	4965.0	8.0	8.0	nan	10.0	33.0
Al	-259.5754733916	4800.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.8
Si	-309.5119709146	5078.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
P	-364.2181232416	9597.0	6.0	6.0	nan	10.0	56.8
S	-424.3377589475	6989.0	8.0	8.0	nan	10.0	41.3
Cl	-490.0321396543	8603.0	6.0	6.0	nan	10.0	50.7
Ar	-561.0204943613	5438.0	7.0	7.0	nan	10.0	33.8

Table 122: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787603	20011.6	9.6	9.6	1.0	10.0	114.3
He	-3.2144027365	20011.4	9.4	9.4	1.0	10.0	112.5
Li	-8.2328141428	20012.6	10.6	10.6	1.0	10.0	116.4
Be	-16.1297367774	20017.2	15.2	15.2	1.4	10.0	113.6
B	-27.2347775992	20016.6	14.6	14.6	1.4	10.0	115.5
C	-41.8280693966	20030.6	28.6	28.6	2.8	10.0	113.0
N	-60.1556952041	20026.4	24.4	24.4	2.2	10.0	113.7
O	-82.4385752927	20021.8	19.8	19.8	2.2	10.0	112.5
F	-108.8781037001	20024.4	22.4	22.4	2.2	10.0	106.6
Ne	-139.6599826312	20025.2	23.2	23.2	2.2	10.0	115.3
Na	-174.9569720634	20019.4	17.4	17.4	1.8	10.0	117.1
Mg	-214.9309411916	20022.2	20.2	20.2	2.2	10.0	116.1
Al	-259.7344459138	20036.6	34.6	34.6	3.8	10.0	119.4
Si	-309.5119709116	20023.0	21.0	21.0	2.0	10.0	117.0
P	-364.4009266193	20024.6	22.6	22.6	1.8	10.0	113.3
S	-424.5324624777	20022.8	20.8	20.8	1.6	10.0	113.3
Cl	-490.0321396488	20022.0	20.0	20.0	2.0	10.0	112.3
Ar	-561.0204943548	20017.0	15.0	15.0	1.4	10.0	111.2

Table 123: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787603	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.1
He	-3.2144027365	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.8
Li	-8.2328141428	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.4
Be	-16.1297367775	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
B	-27.2347775994	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.6
C	-41.8280693968	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.7
N	-60.1556952045	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
O	-82.4385752933	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
F	-108.8781037009	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
Ne	-139.6599826323	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
Na	-174.9569720649	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	7.1
Mg	-214.9309411935	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.2
Al	-259.7344459161	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
Si	-309.5119709146	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.6
P	-364.4009266230	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.3
S	-424.5324624823	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.2
Cl	-490.0321396543	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
Ar	-561.0204943613	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	1.8

Table 124: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6640787603	215.0	215.0	215.0	1.0	10.0	3.7
He	-3.2144027365	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	2.7
Li	-8.2328141428	246.0	246.0	246.0	1.0	10.0	3.3
Be	-16.1297367775	253.0	253.0	253.0	1.0	10.0	2.6
B	-27.2347775994	259.0	259.0	259.0	1.0	10.0	2.8
C	-41.8280693968	262.0	262.0	262.0	1.0	10.0	2.4
N	-60.1556952045	268.0	268.0	268.0	1.0	10.0	2.7
O	-82.4385752933	271.0	271.0	271.0	1.0	10.0	2.6
F	-108.8781037009	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	2.4
Ne	-139.6599826323	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	2.5
Na	-174.9569720649	279.0	279.0	279.0	1.0	10.0	2.4
Mg	-214.9309411935	284.0	284.0	284.0	1.0	10.0	2.5
Al	-259.7344459161	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	2.4
Si	-309.5119709146	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	2.7
P	-364.4009266230	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	2.8
S	-424.5324624823	292.0	292.0	292.0	1.0	10.0	2.5
Cl	-490.0321396543	290.0	290.0	290.0	1.0	10.0	2.5
Ar	-561.0204943613	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	2.9

Table 125: trust region repeats

6.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6640787603	1026.6	1026.6	1026.6	1.4	10.0	217.8
cch second order	-0.6640787702	144.0	80.0	80.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-0.6640786845	3175.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.0
direct	-0.6640728453	4621.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
direct with trim	-0.6640787603	4628.0	5.0	5.0	nan	10.0	29.9
dual anneal	-0.6640787603	20011.6	9.6	9.6	1.0	10.0	114.3
trust region	-0.6640787603	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-0.6640787603	215.0	215.0	215.0	1.0	10.0	3.7

Table 126: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2144027365	1068.4	1068.4	1068.4	1.8	10.0	248.9
cch second order	-3.2144027411	160.0	88.0	88.0	nan	10.0	4.1
diff evo	-3.2144026155	3612.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.2
direct	-3.2088240993	5125.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.8
direct with trim	-3.2144027365	5133.0	6.0	6.0	nan	10.0	32.5
dual anneal	-3.2144027365	20011.4	9.4	9.4	1.0	10.0	112.5
trust region	-3.2144027365	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.8
trust region repeats	-3.2144027365	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	2.7

Table 127: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2328141428	1025.0	1025.0	1025.0	2.0	10.0	257.8
cch second order	-8.2328140968	174.0	96.0	96.0	nan	10.0	3.4
diff evo	-8.2328135297	4569.6	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
direct	-8.2156242952	8485.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.0
direct with trim	-8.2328141428	8494.0	7.0	7.0	nan	10.0	49.2
dual anneal	-8.2328141428	20012.6	10.6	10.6	1.0	10.0	116.4
trust region	-8.2328141428	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.4
trust region repeats	-8.2328141428	246.0	246.0	246.0	1.0	10.0	3.3

Table 128: Li

69

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1297367775	852.6	852.6	852.6	1.6	10.0	182.7
cch second order	-11.1727561853	485.0	261.0	261.0	nan	10.0	5.3
diff evo	-16.1297361708	4405.8	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
direct	-16.1166615840	5165.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.0
direct with trim	-16.1297367775	5174.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.6
dual anneal	-16.1297367774	20017.2	15.2	15.2	1.4	10.0	113.6
trust region	-16.1297367775	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
trust region repeats	-16.1297367775	253.0	253.0	253.0	1.0	10.0	2.6

Table 129: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2347775994	979.8	979.8	979.8	2.6	10.0	188.3
cch second order	-20.5625723331	529.0	286.0	286.0	nan	10.0	6.3
diff evo	-27.2347760999	4267.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct	-27.1735110790	4839.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.4
direct with trim	-27.2347775994	4848.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.5
dual anneal	-27.2347775992	20016.6	14.6	14.6	1.4	10.0	115.5
trust region	-27.2347775994	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.6
trust region repeats	-27.2347775994	259.0	259.0	259.0	1.0	10.0	2.8

Table 130: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8280693968	912.6	912.6	912.6	3.8	10.0	184.9
cch second order	-41.8280694600	156.0	84.0	84.0	nan	10.0	4.5
diff evo	-41.8280677871	4657.8	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
direct	-41.8272708630	5273.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.8
direct with trim	-41.8280693968	5280.0	5.0	5.0	nan	10.0	33.0
dual anneal	-41.8280693966	20030.6	28.6	28.6	2.8	10.0	113.0
trust region	-41.8280693968	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.7
trust region repeats	-41.8280693968	262.0	262.0	262.0	1.0	10.0	2.4

Table 131: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.1556952045	818.6	818.6	818.6	2.6	10.0	126.7
cch second order	-60.1556952174	151.0	84.0	84.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-60.1556915708	5195.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.6
direct	-60.1382880955	5543.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.0
direct with trim	-60.1556952045	5551.0	6.0	6.0	nan	10.0	34.5
dual anneal	-60.1556952041	20026.4	24.4	24.4	2.2	10.0	113.7
trust region	-60.1556952045	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-60.1556952045	268.0	268.0	268.0	1.0	10.0	2.7

Table 132: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.4385752933	796.0	796.0	796.0	2.0	10.0	162.4
cch second order	-82.4385753094	190.0	105.0	105.0	nan	10.0	4.0
diff evo	-82.4385720399	5678.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.1
direct	-82.3902641133	9297.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.4
direct with trim	-82.4385752933	9307.0	8.0	8.0	nan	10.0	53.8
dual anneal	-82.4385752927	20021.8	19.8	19.8	2.2	10.0	112.5
trust region	-82.4385752933	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-82.4385752933	271.0	271.0	271.0	1.0	10.0	2.6

Table 133: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-108.8781037009	783.6	783.6	783.6	1.4	10.0	157.4
cch second order	-108.8781036705	186.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.7
diff evo	-108.8780968498	5212.2	0.0	0.0	nan	10.0	25.2
direct	-108.7978253391	8807.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.8
direct with trim	-108.8781037009	8815.0	6.0	6.0	nan	10.0	48.2
dual anneal	-108.8781037001	20024.4	22.4	22.4	2.2	10.0	106.6
trust region	-108.8781037009	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-108.8781037009	274.0	274.0	274.0	1.0	10.0	2.4

Table 134: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.6599826323	803.6	803.6	803.6	1.8	10.0	172.6
cch second order	-139.6599826828	186.0	101.0	101.0	nan	10.0	4.3
diff evo	-139.6599759824	4746.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.9
direct	-139.5289342163	4801.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.2
direct with trim	-139.6599826323	4810.0	7.0	7.0	nan	10.0	31.4
dual anneal	-139.6599826312	20025.2	23.2	23.2	2.2	10.0	115.3
trust region	-139.6599826323	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-139.6599826323	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	2.5

Table 135: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-174.9569720649	803.8	803.8	803.8	1.8	10.0	191.1
cch second order	-174.9569721215	197.0	108.0	108.0	nan	10.0	5.1
diff evo	-174.9569600666	4363.8	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
direct	-174.7401549717	4645.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.3
direct with trim	-174.9569720649	4654.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.1
dual anneal	-174.9569720634	20019.4	17.4	17.4	1.8	10.0	117.1
trust region	-174.9569720649	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	7.1
trust region repeats	-174.9569720649	279.0	279.0	279.0	1.0	10.0	2.4

Table 136: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-214.9309411935	790.6	790.6	790.6	1.6	10.0	163.9
cch second order	-214.9309412089	203.0	109.0	109.0	nan	10.0	5.1
diff evo	-214.9309337206	4792.2	0.0	0.0	nan	10.0	23.6
direct	-213.2182673817	4955.0	0.0	0.0	nan	10.0	25.6
direct with trim	-214.9309411935	4965.0	8.0	8.0	nan	10.0	33.0
dual anneal	-214.9309411916	20022.2	20.2	20.2	2.2	10.0	116.1
trust region	-214.9309411935	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.2
trust region repeats	-214.9309411935	284.0	284.0	284.0	1.0	10.0	2.5

Table 137: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-259.7344459161	817.0	817.0	817.0	1.2	10.0	212.8
cch second order	-259.7344458905	199.0	109.0	109.0	nan	10.0	3.6
diff evo	-259.7344304371	7014.0	0.0	0.0	nan	10.0	36.9
direct	-259.2296692781	4791.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.9
direct with trim	-259.5754733916	4800.0	7.0	7.0	nan	10.0	30.8
dual anneal	-259.7344459138	20036.6	34.6	34.6	3.8	10.0	119.4
trust region	-259.7344459161	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-259.7344459161	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	2.4

Table 138: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.5119709146	799.4	799.4	799.4	1.2	10.0	135.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-309.5119463316	5035.8	0.0	0.0	nan	10.0	26.3
direct	-306.9047505409	5069.0	0.0	0.0	nan	10.0	26.8
direct with trim	-309.5119709146	5078.0	7.0	7.0	nan	10.0	32.1
dual anneal	-309.5119709116	20023.0	21.0	21.0	2.0	10.0	117.0
trust region	-309.5119709146	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.6
trust region repeats	-309.5119709146	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	2.7

Table 139: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.4009266230	806.0	806.0	806.0	2.0	10.0	135.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-364.4009184251	8887.2	0.0	0.0	nan	10.0	44.5
direct	-364.2032423931	9589.0	0.0	0.0	nan	10.0	42.5
direct with trim	-364.2181232416	9597.0	6.0	6.0	nan	10.0	56.8
dual anneal	-364.4009266193	20024.6	22.6	22.6	1.8	10.0	113.3
trust region	-364.4009266230	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.3
trust region repeats	-364.4009266230	286.0	286.0	286.0	1.0	10.0	2.8

Table 140: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-424.5324624823	891.0	891.0	891.0	3.2	10.0	178.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-424.5324524057	4271.4	0.0	0.0	nan	10.0	26.9
direct	-423.4676051829	6979.0	0.0	0.0	nan	10.0	35.4
direct with trim	-424.3377589475	6989.0	8.0	8.0	nan	10.0	41.3
dual anneal	-424.5324624777	20022.8	20.8	20.8	1.6	10.0	113.3
trust region	-424.5324624823	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.2
trust region repeats	-424.5324624823	292.0	292.0	292.0	1.0	10.0	2.5

Table 141: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.0321396543	882.2	882.2	882.2	3.2	10.0	238.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-490.0320942755	4074.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
direct	-489.9087930642	8595.0	0.0	0.0	nan	10.0	37.2
direct with trim	-490.0321396543	8603.0	6.0	6.0	nan	10.0	50.7
dual anneal	-490.0321396488	20022.0	20.0	20.0	2.0	10.0	112.3
trust region	-490.0321396543	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-490.0321396543	290.0	290.0	290.0	1.0	10.0	2.5

Table 142: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.0204943613	845.2	845.2	845.2	3.2	10.0	154.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-561.0204670614	4620.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1
direct	-560.2179685890	5429.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.4
direct with trim	-561.0204943613	5438.0	7.0	7.0	nan	10.0	33.8
dual anneal	-561.0204943548	20017.0	15.0	15.0	1.4	10.0	111.2
trust region	-561.0204943613	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-561.0204943613	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	2.9

Table 143: Ar

6.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6640787702
He	cch second order	-3.2144027411
Li	basin hopping	-8.2328141428
Be	basin hopping	-16.1297367775
B	basin hopping	-27.2347775994
C	cch second order	-41.8280694600
N	cch second order	-60.1556952174
O	cch second order	-82.4385753094
F	basin hopping	-108.8781037009
Ne	cch second order	-139.6599826828
Na	cch second order	-174.9569721215
Mg	cch second order	-214.9309412089
Al	basin hopping	-259.7344459161
Si	basin hopping	-309.5119709146
P	basin hopping	-364.4009266230
S	basin hopping	-424.5324624823
Cl	trust region	-490.0321396543
Ar	trust region	-561.0204943613

Table 144: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.4	10.4	10.4	nan	-182.6420327475	2.6
cch second order	227.7	124.0	124.0	nan	-86.6484161298	4.5
trust region repeats	269.4	269.4	269.4	1.0	-182.6420327475	2.7
basin hopping	872.3	872.3	872.3	2.1	-182.6420327475	183.9
diff evo	4921.0	0.0	0.0	nan	-182.6420230030	25.6
direct	6222.7	0.0	0.0	nan	-182.2195404406	28.9
direct with trim	6231.3	6.7	6.7	nan	-182.6122283341	38.0
dual anneal	20021.4	19.4	19.4	1.9	-182.6420327457	114.1

Table 145: Average (all systems)

7   10s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

7.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 146: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642352602	1004.4	1004.4	1004.4	1.2	10.0	329.6
He	-2.8102265782	1040.4	1040.4	1040.4	1.0	10.0	252.1
Li	-7.3047676699	1037.6	1037.6	1037.6	1.2	10.0	243.2
Be	-14.4519198700	1053.4	1053.4	1053.4	1.0	10.0	280.7
B	-24.5773025199	1119.4	1119.4	1119.4	1.4	10.0	327.2
C	-37.9583478266	1117.4	1117.4	1117.4	1.4	10.0	247.9
N	-54.8391242059	965.6	965.6	965.6	1.2	10.0	211.1
O	-75.4389118861	888.0	888.0	888.0	1.0	10.0	201.4
F	-99.9577153709	939.4	939.4	939.4	1.2	10.0	251.3
Ne	-128.5800502584	923.0	923.0	923.0	1.0	10.0	183.7
Na	-161.4776651069	1040.6	1040.6	1040.6	1.8	10.0	185.3
Mg	-198.8115666315	1009.4	1009.4	1009.4	2.2	10.0	267.3
Al	-240.7335702141	926.6	926.6	926.6	3.0	10.0	188.5
Si	-287.3875163954	906.6	906.6	906.6	2.0	10.0	191.1
P	-338.9102456894	922.2	922.2	922.2	1.6	10.0	189.4
S	-395.4323940748	914.2	914.2	914.2	3.0	10.0	181.9
Cl	-457.0790523455	1002.2	1002.2	1002.2	2.8	10.0	235.0
Ar	-523.9703199421	878.0	878.0	878.0	3.4	10.0	209.1

Table 147: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642353019	138.0	77.0	77.0	nan	10.0	4.2
He	-2.8102265721	142.0	80.0	80.0	nan	10.0	4.1
Li	-7.3047677104	148.0	83.0	83.0	nan	10.0	4.3
Be	-14.4519199120	172.0	96.0	96.0	nan	10.0	4.6
B	-24.5773025146	171.0	95.0	95.0	nan	10.0	3.1
C	-37.9583478705	174.0	96.0	96.0	nan	10.0	4.2
N	-54.8391241789	146.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.7
O	-75.4389119089	198.0	106.0	106.0	nan	10.0	4.5
F	-99.9577153732	146.0	81.0	81.0	nan	10.0	2.7
Ne	-128.5800503082	169.0	94.0	94.0	nan	10.0	5.0
Na	-161.4776651055	180.0	99.0	99.0	nan	10.0	3.3
Mg	-198.8115665822	180.0	97.0	97.0	nan	10.0	4.9
Al	-240.7335702035	192.0	100.0	100.0	nan	10.0	3.2
Si	-287.3875164541	171.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.6
P	-338.9102456779	176.0	97.0	97.0	nan	10.0	4.8
S	-395.4323940309	173.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.2
Cl	-457.0790523156	159.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.8
Ar	-523.9864831951	286.0	154.0	154.0	nan	10.0	3.9

Table 148: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642351671	3565.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.7
He	-2.8102264402	3767.4	0.0	0.0	nan	10.0	17.4
Li	-7.3047671127	3855.6	0.0	0.0	nan	10.0	17.5
Be	-14.4519189571	3855.6	0.0	0.0	nan	10.0	18.2
B	-24.5772997608	4300.8	0.0	0.0	nan	10.0	20.6
C	-37.9583462526	4179.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
N	-54.8391216091	4019.4	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
O	-75.4389062216	4489.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.8
F	-99.9577070693	4557.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.7
Ne	-128.5800345321	4296.6	0.0	0.0	nan	10.0	22.5
Na	-161.4776523183	4594.8	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
Mg	-198.8115503314	4494.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.3
Al	-240.7335524641	4023.6	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
Si	-287.3874905078	4578.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.9
P	-338.9102370498	4174.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.8
S	-395.4323719319	4317.6	0.0	0.0	nan	10.0	21.0
Cl	-457.0790188389	4137.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
Ar	-523.9702638856	4510.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.6

Table 149: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642213819	6253.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.6
He	-2.8061662296	9213.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.5
Li	-7.2830030060	4669.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.0
Be	-14.4298213563	5169.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
B	-24.5706797750	8741.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.3
C	-37.9581466790	5025.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.7
N	-54.7615565475	5219.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
O	-75.2726399946	5299.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.5
F	-99.7571879064	5065.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
Ne	-128.5167704060	4913.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.6
Na	-161.0138831482	4919.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.3
Mg	-198.5157801604	5067.0	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
Al	-238.9768336625	5079.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.8
Si	-286.9790329510	5155.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.1
P	-338.8638578066	5103.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
S	-394.7870627073	5251.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.1
Cl	-456.8057380161	4869.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
Ar	-523.1002704712	5039.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.6

Table 150: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642352602	6260.0	5.0	5.0	nan	10.0	25.1
He	-2.8102265781	9222.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.7
Li	-7.3047676699	4680.0	9.0	9.0	nan	10.0	20.2
Be	-14.4519198700	5178.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.3
B	-24.5773025199	8749.0	6.0	6.0	nan	10.0	28.1
C	-37.9583478266	5032.0	5.0	5.0	nan	10.0	15.8
N	-54.8391242059	5229.0	8.0	8.0	nan	10.0	19.8
O	-75.4389118861	5307.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.6
F	-99.9577153709	5073.0	6.0	6.0	nan	10.0	21.1
Ne	-128.5800502584	4921.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.1
Na	-161.4776651069	4928.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.0
Mg	-198.8115666315	5076.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.7
Al	-240.7335702141	5091.0	10.0	10.0	nan	10.0	21.8
Si	-287.3875163954	5164.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.1
P	-338.9102456894	5113.0	8.0	8.0	nan	10.0	19.2
S	-395.1883862058	5266.0	13.0	13.0	nan	10.0	19.7
Cl	-456.8213287756	4882.0	11.0	11.0	nan	10.0	21.1
Ar	-523.6989680912	5054.0	13.0	13.0	nan	10.0	19.6

Table 151: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642352602	20010.0	8.0	8.0	1.0	10.0	74.3
He	-2.8102265781	20009.8	7.8	7.8	1.0	10.0	77.0
Li	-7.3047676699	20013.2	11.2	11.2	1.0	10.0	75.6
Be	-14.4519198699	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	69.7
B	-24.5773025199	20010.4	8.4	8.4	1.0	10.0	66.0
C	-37.9583478265	20020.6	18.6	18.6	1.0	10.0	66.3
N	-54.8391242058	20022.4	20.4	20.4	1.4	10.0	69.5
O	-75.4389118858	20013.4	11.4	11.4	1.2	10.0	70.7
F	-99.9577153706	20026.2	24.2	24.2	1.6	10.0	71.8
Ne	-128.5800502580	20026.4	24.4	24.4	1.4	10.0	71.3
Na	-161.4776651062	20035.6	33.6	33.6	1.8	10.0	70.3
Mg	-198.8115666306	20024.4	22.4	22.4	1.6	10.0	70.2
Al	-240.7335702130	20023.4	21.4	21.4	1.8	10.0	70.0
Si	-287.3875163940	20022.8	20.8	20.8	1.8	10.0	70.7
P	-338.9102456877	20023.6	21.6	21.6	1.6	10.0	71.8
S	-395.4323940727	20020.6	18.6	18.6	1.4	10.0	70.5
Cl	-457.0790523429	20019.2	17.2	17.2	1.4	10.0	71.4
Ar	-523.9703199391	20026.4	24.4	24.4	1.8	10.0	72.5

Table 152: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642352602	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.0
He	-2.8102265781	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.7
Li	-7.3047676699	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.0
Be	-14.4519198700	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.8
B	-24.5773025199	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
C	-37.9583478266	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
N	-54.8391242059	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.2
O	-75.4389118861	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.0
F	-99.9577153709	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.2
Ne	-128.5800502584	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
Na	-161.4776651069	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
Mg	-198.8115666315	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	7.0
Al	-240.7335702141	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	4.5
Si	-287.3875163954	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.1
P	-338.9102456894	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.7
S	-395.4323940748	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.9
Cl	-457.0790523455	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	6.5
Ar	-523.9703199421	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	2.1

Table 153: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5642352602	209.0	209.0	209.0	1.0	10.0	3.0
He	-2.8102265781	225.0	225.0	225.0	1.0	10.0	3.2
Li	-7.3047676699	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	2.7
Be	-14.4519198700	243.0	243.0	243.0	1.0	10.0	2.6
B	-24.5773025199	252.0	252.0	252.0	1.0	10.0	2.6
C	-37.9583478266	255.0	255.0	255.0	1.0	10.0	2.6
N	-54.8391242059	262.0	262.0	262.0	1.0	10.0	2.6
O	-75.4389118861	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	2.6
F	-99.9577153709	265.0	265.0	265.0	1.0	10.0	2.6
Ne	-128.5800502584	273.0	273.0	273.0	1.0	10.0	2.3
Na	-161.4776651069	269.0	269.0	269.0	1.0	10.0	2.5
Mg	-198.8115666315	275.0	275.0	275.0	1.0	10.0	2.4
Al	-240.7335702141	272.0	272.0	272.0	1.0	10.0	2.5
Si	-287.3875163954	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	3.0
P	-338.9102456894	278.0	278.0	278.0	1.0	10.0	2.4
S	-395.4323940748	279.0	279.0	279.0	1.0	10.0	2.8
Cl	-457.0790523455	281.0	281.0	281.0	1.0	10.0	2.5
Ar	-523.9703199421	283.0	283.0	283.0	1.0	10.0	2.7

Table 154: trust region repeats

7.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5642352602	1004.4	1004.4	1004.4	1.2	10.0	329.6
cch second order	-0.5642353019	138.0	77.0	77.0	nan	10.0	4.2
diff evo	-0.5642351671	3565.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.7
direct	-0.5642213819	6253.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.6
direct with trim	-0.5642352602	6260.0	5.0	5.0	nan	10.0	25.1
dual anneal	-0.5642352602	20010.0	8.0	8.0	1.0	10.0	74.3
trust region	-0.5642352602	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-0.5642352602	209.0	209.0	209.0	1.0	10.0	3.0

Table 155: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8102265782	1040.4	1040.4	1040.4	1.0	10.0	252.1
cch second order	-2.8102265721	142.0	80.0	80.0	nan	10.0	4.1
diff evo	-2.8102264402	3767.4	0.0	0.0	nan	10.0	17.4
direct	-2.8061662296	9213.0	0.0	0.0	nan	10.0	40.5
direct with trim	-2.8102265781	9222.0	7.0	7.0	nan	10.0	34.7
dual anneal	-2.8102265781	20009.8	7.8	7.8	1.0	10.0	77.0
trust region	-2.8102265781	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.7
trust region repeats	-2.8102265781	225.0	225.0	225.0	1.0	10.0	3.2

Table 156: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3047676699	1037.6	1037.6	1037.6	1.2	10.0	243.2
cch second order	-7.3047677104	148.0	83.0	83.0	nan	10.0	4.3
diff evo	-7.3047671127	3855.6	0.0	0.0	nan	10.0	17.5
direct	-7.2830030060	4669.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.0
direct with trim	-7.3047676699	4680.0	9.0	9.0	nan	10.0	20.2
dual anneal	-7.3047676699	20013.2	11.2	11.2	1.0	10.0	75.6
trust region	-7.3047676699	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-7.3047676699	234.0	234.0	234.0	1.0	10.0	2.7

Table 157: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4519198700	1053.4	1053.4	1053.4	1.0	10.0	280.7
cch second order	-14.4519199120	172.0	96.0	96.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-14.4519189571	3855.6	0.0	0.0	nan	10.0	18.2
direct	-14.4298213563	5169.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
direct with trim	-14.4519198700	5178.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.3
dual anneal	-14.4519198699	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	69.7
trust region	-14.4519198700	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-14.4519198700	243.0	243.0	243.0	1.0	10.0	2.6

Table 158: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.5773025199	1119.4	1119.4	1119.4	1.4	10.0	327.2
cch second order	-24.5773025146	171.0	95.0	95.0	nan	10.0	3.1
diff evo	-24.5772997608	4300.8	0.0	0.0	nan	10.0	20.6
direct	-24.5706797750	8741.0	0.0	0.0	nan	10.0	33.3
direct with trim	-24.5773025199	8749.0	6.0	6.0	nan	10.0	28.1
dual anneal	-24.5773025199	20010.4	8.4	8.4	1.0	10.0	66.0
trust region	-24.5773025199	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-24.5773025199	252.0	252.0	252.0	1.0	10.0	2.6

Table 159: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-37.9583478266	1117.4	1117.4	1117.4	1.4	10.0	247.9
cch second order	-37.9583478705	174.0	96.0	96.0	nan	10.0	4.2
diff evo	-37.9583462526	4179.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
direct	-37.9581466790	5025.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.7
direct with trim	-37.9583478266	5032.0	5.0	5.0	nan	10.0	15.8
dual anneal	-37.9583478265	20020.6	18.6	18.6	1.0	10.0	66.3
trust region	-37.9583478266	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-37.9583478266	255.0	255.0	255.0	1.0	10.0	2.6

Table 160: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.8391242059	965.6	965.6	965.6	1.2	10.0	211.1
cch second order	-54.8391241789	146.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-54.8391216091	4019.4	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
direct	-54.7615565475	5219.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
direct with trim	-54.8391242059	5229.0	8.0	8.0	nan	10.0	19.8
dual anneal	-54.8391242058	20022.4	20.4	20.4	1.4	10.0	69.5
trust region	-54.8391242059	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.2
trust region repeats	-54.8391242059	262.0	262.0	262.0	1.0	10.0	2.6

Table 161: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.4389118861	888.0	888.0	888.0	1.0	10.0	201.4
cch second order	-75.4389119089	198.0	106.0	106.0	nan	10.0	4.5
diff evo	-75.4389062216	4489.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.8
direct	-75.2726399946	5299.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.5
direct with trim	-75.4389118861	5307.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.6
dual anneal	-75.4389118858	20013.4	11.4	11.4	1.2	10.0	70.7
trust region	-75.4389118861	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-75.4389118861	263.0	263.0	263.0	1.0	10.0	2.6

Table 162: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-99.9577153709	939.4	939.4	939.4	1.2	10.0	251.3
cch second order	-99.9577153732	146.0	81.0	81.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-99.9577070693	4557.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.7
direct	-99.7571879064	5065.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.8
direct with trim	-99.9577153709	5073.0	6.0	6.0	nan	10.0	21.1
dual anneal	-99.9577153706	20026.2	24.2	24.2	1.6	10.0	71.8
trust region	-99.9577153709	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.2
trust region repeats	-99.9577153709	265.0	265.0	265.0	1.0	10.0	2.6

Table 163: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.5800502584	923.0	923.0	923.0	1.0	10.0	183.7
cch second order	-128.5800503082	169.0	94.0	94.0	nan	10.0	5.0
diff evo	-128.5800345321	4296.6	0.0	0.0	nan	10.0	22.5
direct	-128.5167704060	4913.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.6
direct with trim	-128.5800502584	4921.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.1
dual anneal	-128.5800502580	20026.4	24.4	24.4	1.4	10.0	71.3
trust region	-128.5800502584	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-128.5800502584	273.0	273.0	273.0	1.0	10.0	2.3

Table 164: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.4776651069	1040.6	1040.6	1040.6	1.8	10.0	185.3
cch second order	-161.4776651055	180.0	99.0	99.0	nan	10.0	3.3
diff evo	-161.4776523183	4594.8	0.0	0.0	nan	10.0	23.7
direct	-161.0138831482	4919.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.3
direct with trim	-161.4776651069	4928.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.0
dual anneal	-161.4776651062	20035.6	33.6	33.6	1.8	10.0	70.3
trust region	-161.4776651069	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-161.4776651069	269.0	269.0	269.0	1.0	10.0	2.5

Table 165: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-198.8115666315	1009.4	1009.4	1009.4	2.2	10.0	267.3
cch second order	-198.8115665822	180.0	97.0	97.0	nan	10.0	4.9
diff evo	-198.8115503314	4494.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.3
direct	-198.5157801604	5067.0	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
direct with trim	-198.8115666315	5076.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.7
dual anneal	-198.8115666306	20024.4	22.4	22.4	1.6	10.0	70.2
trust region	-198.8115666315	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	7.0
trust region repeats	-198.8115666315	275.0	275.0	275.0	1.0	10.0	2.4

Table 166: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-240.7335702141	926.6	926.6	926.6	3.0	10.0	188.5
cch second order	-240.7335702035	192.0	100.0	100.0	nan	10.0	3.2
diff evo	-240.7335524641	4023.6	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct	-238.9768336625	5079.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.8
direct with trim	-240.7335702141	5091.0	10.0	10.0	nan	10.0	21.8
dual anneal	-240.7335702130	20023.4	21.4	21.4	1.8	10.0	70.0
trust region	-240.7335702141	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	4.5
trust region repeats	-240.7335702141	272.0	272.0	272.0	1.0	10.0	2.5

Table 167: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.3875163954	906.6	906.6	906.6	2.0	10.0	191.1
cch second order	-287.3875164541	171.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.6
diff evo	-287.3874905078	4578.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.9
direct	-286.9790329510	5155.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.1
direct with trim	-287.3875163954	5164.0	7.0	7.0	nan	10.0	19.1
dual anneal	-287.3875163940	20022.8	20.8	20.8	1.8	10.0	70.7
trust region	-287.3875163954	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-287.3875163954	276.0	276.0	276.0	1.0	10.0	3.0

Table 168: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-338.9102456894	922.2	922.2	922.2	1.6	10.0	189.4
cch second order	-338.9102456779	176.0	97.0	97.0	nan	10.0	4.8
diff evo	-338.9102370498	4174.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.8
direct	-338.8638578066	5103.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
direct with trim	-338.9102456894	5113.0	8.0	8.0	nan	10.0	19.2
dual anneal	-338.9102456877	20023.6	21.6	21.6	1.6	10.0	71.8
trust region	-338.9102456894	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.7
trust region repeats	-338.9102456894	278.0	278.0	278.0	1.0	10.0	2.4

Table 169: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-395.4323940748	914.2	914.2	914.2	3.0	10.0	181.9
cch second order	-395.4323940309	173.0	95.0	95.0	nan	10.0	4.2
diff evo	-395.4323719319	4317.6	0.0	0.0	nan	10.0	21.0
direct	-394.7870627073	5251.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.1
direct with trim	-395.1883862058	5266.0	13.0	13.0	nan	10.0	19.7
dual anneal	-395.4323940727	20020.6	18.6	18.6	1.4	10.0	70.5
trust region	-395.4323940748	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-395.4323940748	279.0	279.0	279.0	1.0	10.0	2.8

Table 170: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.0790523455	1002.2	1002.2	1002.2	2.8	10.0	235.0
cch second order	-457.0790523156	159.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-457.0790188389	4137.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
direct	-456.8057380161	4869.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
direct with trim	-456.8213287756	4882.0	11.0	11.0	nan	10.0	21.1
dual anneal	-457.0790523429	20019.2	17.2	17.2	1.4	10.0	71.4
trust region	-457.0790523455	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	6.5
trust region repeats	-457.0790523455	281.0	281.0	281.0	1.0	10.0	2.5

Table 171: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-523.9703199421	878.0	878.0	878.0	3.4	10.0	209.1
cch second order	-523.9864831951	286.0	154.0	154.0	nan	10.0	3.9
diff evo	-523.9702638856	4510.8	0.0	0.0	nan	10.0	21.6
direct	-523.1002704712	5039.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.6
direct with trim	-523.6989680912	5054.0	13.0	13.0	nan	10.0	19.6
dual anneal	-523.9703199391	20026.4	24.4	24.4	1.8	10.0	72.5
trust region	-523.9703199421	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-523.9703199421	283.0	283.0	283.0	1.0	10.0	2.7

Table 172: Ar

7.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.5642353019
He	basin hopping	-2.8102265782
Li	cch second order	-7.3047677104
Be	cch second order	-14.4519199120
B	basin hopping	-24.5773025199
C	cch second order	-37.9583478705
N	basin hopping	-54.8391242059
O	cch second order	-75.4389119089
F	cch second order	-99.9577153732
Ne	cch second order	-128.5800503082
Na	basin hopping	-161.4776651069
Mg	basin hopping	-198.8115666315
Al	basin hopping	-240.7335702141
Si	cch second order	-287.3875164541
P	trust region	-338.9102456894
S	basin hopping	-395.4323940748
Cl	basin hopping	-457.0790523455
Ar	cch second order	-523.9864831951

Table 173: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.1	10.1	10.1	nan	-169.4602739914	3.0
cch second order	173.4	95.2	95.2	nan	-169.4611719564	3.9
trust region repeats	260.8	260.8	260.8	1.0	-169.4602739914	2.6
basin hopping	982.7	982.7	982.7	1.7	-169.4602739914	232.0
diff evo	4206.5	0.0	0.0	nan	-169.4602611361	20.6
direct	5558.2	0.0	0.0	nan	-169.1645917892	20.8
direct with trim	5568.1	7.8	7.8	nan	-169.4173249198	21.3
dual anneal	20020.1	18.1	18.1	1.4	-169.4602739906	71.1

Table 174: Average (all systems)

8 10s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

8.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112620	836.0	836.0	0.0	nan	10.0	5.0
He	-1.4666494793	997.0	997.0	0.0	nan	10.0	5.3
Li	-4.0819901753	1101.0	1101.0	0.0	nan	10.0	4.3
Be	-8.4499729418	1129.0	1129.0	0.0	nan	10.0	4.3
B	-14.8581280779	1122.0	1122.0	0.0	nan	10.0	4.4
C	-23.5565022901	1095.0	1095.0	0.0	nan	10.0	4.0
N	-34.7680606849	1046.0	1046.0	0.0	nan	10.0	5.6
O	-48.6951910717	934.0	934.0	0.0	nan	10.0	3.6
F	-65.5240155023	930.0	930.0	0.0	nan	10.0	3.6
Ne	-85.4273757004	1016.0	1016.0	0.0	nan	10.0	3.8
Na	-108.5669973618	1058.0	1058.0	0.0	nan	10.0	4.2
Mg	-135.0951270704	1073.0	1073.0	0.0	nan	10.0	3.9
Al	-165.1558131771	1075.0	1075.0	0.0	nan	10.0	4.1
Si	-198.8859336344	1064.0	1064.0	0.0	nan	10.0	4.2
P	-236.4160359180	1037.0	1037.0	0.0	nan	10.0	3.9
S	-277.8710327270	986.0	986.0	0.0	nan	10.0	4.0
Cl	-323.3707844200	896.0	896.0	0.0	nan	10.0	3.9
Ar	-373.0305910943	1018.0	1018.0	0.0	nan	10.0	3.9

Table 175: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112799	1005.8	1005.8	1005.8	1.0	10.0	401.2
He	-1.4666494957	955.6	955.6	955.6	1.0	10.0	283.7
Li	-4.0819901901	996.2	996.2	996.2	1.0	10.0	274.9
Be	-8.4499729558	977.8	977.8	977.8	1.0	10.0	306.0
B	-14.8581280915	967.6	967.6	967.6	1.0	10.0	319.1
C	-23.5565023036	1004.0	1004.0	1004.0	1.0	10.0	304.9
N	-34.7680606986	976.6	976.6	976.6	1.0	10.0	257.9
O	-48.6951910858	998.2	998.2	998.2	1.0	10.0	333.0
F	-65.5240155169	1017.8	1017.8	1017.8	1.0	10.0	312.5
Ne	-85.4273757155	1018.4	1018.4	1018.4	1.0	10.0	276.8
Na	-108.5669973779	1010.8	1010.8	1010.8	1.0	10.0	230.9
Mg	-135.0951270878	1011.8	1011.8	1011.8	1.0	10.0	332.9
Al	-165.1558131963	1021.0	1021.0	1021.0	1.0	10.0	293.9
Si	-198.8859336560	1004.2	1004.2	1004.2	1.0	10.0	414.1
P	-236.4160359427	1009.0	1009.0	1009.0	1.0	10.0	257.9
S	-277.8710327558	1061.8	1061.8	1061.8	1.0	10.0	312.3
Cl	-323.3707844557	1074.2	1074.2	1074.2	1.0	10.0	326.5
Ar	-373.0305911345	1036.4	1036.4	1036.4	1.0	10.0	326.4

Table 176: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112170	139.0	77.0	77.0	nan	10.0	3.7
He	-1.4666494609	146.0	83.0	83.0	nan	10.0	3.7
Li	-4.0819903001	151.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.6
Be	-8.4499731030	154.0	87.0	87.0	nan	10.0	2.9
B	-14.8581279452	142.0	82.0	82.0	nan	10.0	2.5
C	-23.5565021684	155.0	89.0	89.0	nan	10.0	2.7
N	-34.7680607313	145.0	81.0	81.0	nan	10.0	2.7
O	-48.6951909227	134.0	76.0	76.0	nan	10.0	3.4
F	-65.5240156266	159.0	90.0	90.0	nan	10.0	3.7
Ne	-85.4273758832	167.0	91.0	91.0	nan	10.0	2.9
Na	-108.5669973836	171.0	93.0	93.0	nan	10.0	3.0
Mg	-135.0951271668	152.0	85.0	85.0	nan	10.0	3.6
Al	-165.1558130516	177.0	96.0	96.0	nan	10.0	2.9
Si	-198.8859336774	188.0	102.0	102.0	nan	10.0	3.0
P	-236.4160358798	173.0	96.0	96.0	nan	10.0	2.8
S	-277.8710327665	165.0	94.0	94.0	nan	10.0	2.8
Cl	-323.3707843941	183.0	102.0	102.0	nan	10.0	2.8
Ar	-373.0305912091	192.0	105.0	105.0	nan	10.0	2.9

Table 177: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112303	3490.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
He	-1.4666493210	3347.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
Li	-4.0819898468	3448.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.5
Be	-8.4499723757	3691.8	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
B	-14.8581274055	3729.6	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
C	-23.5565009259	3792.6	0.0	0.0	nan	10.0	18.7
N	-34.7680582134	3826.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.9
O	-48.6951893016	3729.6	0.0	0.0	nan	10.0	16.7
F	-65.5240128656	4044.6	0.0	0.0	nan	10.0	16.6
Ne	-85.4273734568	3960.6	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
Na	-108.5669937795	4082.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
Mg	-135.0951147605	4124.4	0.0	0.0	nan	10.0	18.4
Al	-165.1558067739	4048.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
Si	-198.8859235124	3901.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
P	-236.4160290697	3922.8	0.0	0.0	nan	10.0	19.6
S	-277.8710229784	4015.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.6
Cl	-323.3707674948	3721.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.4
Ar	-373.0305701725	3847.2	0.0	0.0	nan	10.0	19.9

Table 178: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112555	4311.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.2
He	-1.4661660188	4729.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.8
Li	-4.0817469490	4815.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
Be	-8.4364481777	4973.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.5
B	-14.7889200579	8501.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.9
C	-23.4048605286	5153.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.3
N	-34.5963141263	4921.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.2
O	-48.6560189428	4781.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.7
F	-65.5172978573	4753.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
Ne	-85.4170762411	5473.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1
Na	-108.5437538509	5015.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.9
Mg	-134.5911781892	5071.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
Al	-164.8792646880	4861.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.1
Si	-198.2338097748	5133.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
P	-236.1859167173	5109.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
S	-276.1196112984	4967.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.0
Cl	-321.9254302895	4765.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
Ar	-372.6067799652	4945.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.9

Table 179: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112799	4317.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.9
He	-1.4666494957	4736.0	5.0	5.0	nan	10.0	19.7
Li	-4.0819901901	4822.0	5.0	5.0	nan	10.0	22.5
Be	-8.4499729558	4981.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.0
B	-14.8581280915	8509.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.9
C	-23.5565023036	5162.0	7.0	7.0	nan	10.0	22.1
N	-34.7680606986	4930.0	7.0	7.0	nan	10.0	18.7
O	-48.6951910858	4789.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.3
F	-65.5240155169	4761.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.1
Ne	-85.4273757155	5481.0	6.0	6.0	nan	10.0	21.1
Na	-108.5669973779	5023.0	6.0	6.0	nan	10.0	23.8
Mg	-135.0951270878	5080.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.3
Al	-165.1558131963	4870.0	7.0	7.0	nan	10.0	23.4
Si	-198.8859336560	5142.0	7.0	7.0	nan	10.0	22.1
P	-236.4160359427	5118.0	7.0	7.0	nan	10.0	17.9
S	-277.8710327558	4978.0	9.0	9.0	nan	10.0	23.4
Cl	-323.3707844557	4774.0	7.0	7.0	nan	10.0	23.8
Ar	-373.0305911345	4954.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.3

Table 180: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112799	20009.2	7.2	7.2	1.0	10.0	71.5
He	-1.4666494957	20010.2	8.2	8.2	1.0	10.0	60.1
Li	-4.0819901901	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	73.6
Be	-8.4499729558	20011.8	9.8	9.8	1.0	10.0	73.4
B	-14.8581280915	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	74.9
C	-23.5565023036	20013.2	11.2	11.2	1.0	10.0	74.7
N	-34.7680606985	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	75.9
O	-48.6951910857	20012.8	10.8	10.8	1.0	10.0	75.8
F	-65.5240155169	20014.4	12.4	12.4	1.0	10.0	75.6
Ne	-85.4273757155	20013.4	11.4	11.4	1.0	10.0	74.8
Na	-108.5669973778	20014.4	12.4	12.4	1.0	10.0	74.6
Mg	-135.0951270877	20017.2	15.2	15.2	1.0	10.0	73.9
Al	-165.1558131961	20013.6	11.6	11.6	1.0	10.0	66.2
Si	-198.8859336558	20013.4	11.4	11.4	1.0	10.0	75.5
P	-236.4160359424	20015.8	13.8	13.8	1.0	10.0	79.6
S	-277.8710327554	20014.2	12.2	12.2	1.0	10.0	79.8
Cl	-323.3707844553	20013.8	11.8	11.8	1.0	10.0	77.0
Ar	-373.0305911340	20020.4	18.4	18.4	1.0	10.0	74.2

Table 181: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112799	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
He	-1.4666494957	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.8
Li	-4.0819901901	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.5
Be	-8.4499729558	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
B	-14.8581280915	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
C	-23.5565023036	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
N	-34.7680606986	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
O	-48.6951910858	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
F	-65.5240155169	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.9
Ne	-85.4273757155	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.8
Na	-108.5669973779	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.5
Mg	-135.0951270878	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.8
Al	-165.1558131963	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
Si	-198.8859336560	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
P	-236.4160359427	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.6
S	-277.8710327558	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.9
Cl	-323.3707844557	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	1.9
Ar	-373.0305911345	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.0

Table 182: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2591112799	196.0	196.0	196.0	1.0	10.0	2.6
He	-1.4666494957	210.0	210.0	210.0	1.0	10.0	2.6
Li	-4.0819901901	220.0	220.0	220.0	1.0	10.0	2.4
Be	-8.4499729558	225.0	225.0	225.0	1.0	10.0	2.6
B	-14.8581280915	231.0	231.0	231.0	1.0	10.0	2.3
C	-23.5565023036	230.0	230.0	230.0	1.0	10.0	2.3
N	-34.7680606986	241.0	241.0	241.0	1.0	10.0	2.4
O	-48.6951910858	236.0	236.0	236.0	1.0	10.0	2.3
F	-65.5240155169	244.0	244.0	244.0	1.0	10.0	2.5
Ne	-85.4273757155	247.0	247.0	247.0	1.0	10.0	2.4
Na	-108.5669973779	249.0	249.0	249.0	1.0	10.0	2.5
Mg	-135.0951270878	247.0	247.0	247.0	1.0	10.0	2.6
Al	-165.1558131963	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	2.3
Si	-198.8859336560	250.0	250.0	250.0	1.0	10.0	2.6
P	-236.4160359427	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	2.2
S	-277.8710327558	256.0	256.0	256.0	1.0	10.0	2.5
Cl	-323.3707844557	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	2.3
Ar	-373.0305911345	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	2.6

Table 183: trust region repeats

8.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2591112620	836.0	836.0	0.0	nan	10.0	5.0
basin hopping	-0.2591112799	1005.8	1005.8	1005.8	1.0	10.0	401.2
cch second order	-0.2591112170	139.0	77.0	77.0	nan	10.0	3.7
diff evo	-0.2591112303	3490.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
direct	-0.2591112555	4311.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.2
direct with trim	-0.2591112799	4317.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.9
dual anneal	-0.2591112799	20009.2	7.2	7.2	1.0	10.0	71.5
trust region	-0.2591112799	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
trust region repeats	-0.2591112799	196.0	196.0	196.0	1.0	10.0	2.6

Table 184: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4666494793	997.0	997.0	0.0	nan	10.0	5.3
basin hopping	-1.4666494957	955.6	955.6	955.6	1.0	10.0	283.7
cch second order	-1.4666494609	146.0	83.0	83.0	nan	10.0	3.7
diff evo	-1.4666493210	3347.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
direct	-1.4661660188	4729.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.8
direct with trim	-1.4666494957	4736.0	5.0	5.0	nan	10.0	19.7
dual anneal	-1.4666494957	20010.2	8.2	8.2	1.0	10.0	60.1
trust region	-1.4666494957	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-1.4666494957	210.0	210.0	210.0	1.0	10.0	2.6

Table 185: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.0819901753	1101.0	1101.0	0.0	nan	10.0	4.3
basin hopping	-4.0819901901	996.2	996.2	996.2	1.0	10.0	274.9
cch second order	-4.0819903001	151.0	84.0	84.0	nan	10.0	2.6
diff evo	-4.0819898468	3448.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.5
direct	-4.0817469490	4815.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
direct with trim	-4.0819901901	4822.0	5.0	5.0	nan	10.0	22.5
dual anneal	-4.0819901901	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	73.6
trust region	-4.0819901901	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	2.5
trust region repeats	-4.0819901901	220.0	220.0	220.0	1.0	10.0	2.4

Table 186: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4499729418	1129.0	1129.0	0.0	nan	10.0	4.3
basin hopping	-8.4499729558	977.8	977.8	977.8	1.0	10.0	306.0
cch second order	-8.4499731030	154.0	87.0	87.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-8.4499723757	3691.8	0.0	0.0	nan	10.0	17.9
direct	-8.4364481777	4973.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.5
direct with trim	-8.4499729558	4981.0	6.0	6.0	nan	10.0	19.0
dual anneal	-8.4499729558	20011.8	9.8	9.8	1.0	10.0	73.4
trust region	-8.4499729558	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	1.7
trust region repeats	-8.4499729558	225.0	225.0	225.0	1.0	10.0	2.6

Table 187: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.8581280779	1122.0	1122.0	0.0	nan	10.0	4.4
basin hopping	-14.8581280915	967.6	967.6	967.6	1.0	10.0	319.1
cch second order	-14.8581279452	142.0	82.0	82.0	nan	10.0	2.5
diff evo	-14.8581274055	3729.6	0.0	0.0	nan	10.0	19.5
direct	-14.7889200579	8501.0	0.0	0.0	nan	10.0	39.9
direct with trim	-14.8581280915	8509.0	6.0	6.0	nan	10.0	30.9
dual anneal	-14.8581280915	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	74.9
trust region	-14.8581280915	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-14.8581280915	231.0	231.0	231.0	1.0	10.0	2.3

Table 188: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.5565022901	1095.0	1095.0	0.0	nan	10.0	4.0
basin hopping	-23.5565023036	1004.0	1004.0	1004.0	1.0	10.0	304.9
cch second order	-23.5565021684	155.0	89.0	89.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-23.5565009259	3792.6	0.0	0.0	nan	10.0	18.7
direct	-23.4048605286	5153.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.3
direct with trim	-23.5565023036	5162.0	7.0	7.0	nan	10.0	22.1
dual anneal	-23.5565023036	20013.2	11.2	11.2	1.0	10.0	74.7
trust region	-23.5565023036	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-23.5565023036	230.0	230.0	230.0	1.0	10.0	2.3

Table 189: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.7680606849	1046.0	1046.0	0.0	nan	10.0	5.6
basin hopping	-34.7680606986	976.6	976.6	976.6	1.0	10.0	257.9
cch second order	-34.7680607313	145.0	81.0	81.0	nan	10.0	2.7
diff evo	-34.7680582134	3826.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.9
direct	-34.5963141263	4921.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.2
direct with trim	-34.7680606986	4930.0	7.0	7.0	nan	10.0	18.7
dual anneal	-34.7680606985	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	75.9
trust region	-34.7680606986	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-34.7680606986	241.0	241.0	241.0	1.0	10.0	2.4

Table 190: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.6951910717	934.0	934.0	0.0	nan	10.0	3.6
basin hopping	-48.6951910858	998.2	998.2	998.2	1.0	10.0	333.0
cch second order	-48.6951909227	134.0	76.0	76.0	nan	10.0	3.4
diff evo	-48.6951893016	3729.6	0.0	0.0	nan	10.0	16.7
direct	-48.6560189428	4781.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.7
direct with trim	-48.6951910858	4789.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.3
dual anneal	-48.6951910857	20012.8	10.8	10.8	1.0	10.0	75.8
trust region	-48.6951910858	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-48.6951910858	236.0	236.0	236.0	1.0	10.0	2.3

Table 191: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.5240155023	930.0	930.0	0.0	nan	10.0	3.6
basin hopping	-65.5240155169	1017.8	1017.8	1017.8	1.0	10.0	312.5
cch second order	-65.5240156266	159.0	90.0	90.0	nan	10.0	3.7
diff evo	-65.5240128656	4044.6	0.0	0.0	nan	10.0	16.6
direct	-65.5172978573	4753.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.3
direct with trim	-65.5240155169	4761.0	6.0	6.0	nan	10.0	20.1
dual anneal	-65.5240155169	20014.4	12.4	12.4	1.0	10.0	75.6
trust region	-65.5240155169	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-65.5240155169	244.0	244.0	244.0	1.0	10.0	2.5

Table 192: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.4273757004	1016.0	1016.0	0.0	nan	10.0	3.8
basin hopping	-85.4273757155	1018.4	1018.4	1018.4	1.0	10.0	276.8
cch second order	-85.4273758832	167.0	91.0	91.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-85.4273734568	3960.6	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
direct	-85.4170762411	5473.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.1
direct with trim	-85.4273757155	5481.0	6.0	6.0	nan	10.0	21.1
dual anneal	-85.4273757155	20013.4	11.4	11.4	1.0	10.0	74.8
trust region	-85.4273757155	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-85.4273757155	247.0	247.0	247.0	1.0	10.0	2.4

Table 193: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.5669973618	1058.0	1058.0	0.0	nan	10.0	4.2
basin hopping	-108.5669973779	1010.8	1010.8	1010.8	1.0	10.0	230.9
cch second order	-108.5669973836	171.0	93.0	93.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-108.5669937795	4082.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.4
direct	-108.5437538509	5015.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.9
direct with trim	-108.5669973779	5023.0	6.0	6.0	nan	10.0	23.8
dual anneal	-108.5669973778	20014.4	12.4	12.4	1.0	10.0	74.6
trust region	-108.5669973779	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	2.5
trust region repeats	-108.5669973779	249.0	249.0	249.0	1.0	10.0	2.5

Table 194: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.0951270704	1073.0	1073.0	0.0	nan	10.0	3.9
basin hopping	-135.0951270878	1011.8	1011.8	1011.8	1.0	10.0	332.9
cch second order	-135.0951271668	152.0	85.0	85.0	nan	10.0	3.6
diff evo	-135.0951147605	4124.4	0.0	0.0	nan	10.0	18.4
direct	-134.5911781892	5071.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.6
direct with trim	-135.0951270878	5080.0	7.0	7.0	nan	10.0	20.3
dual anneal	-135.0951270877	20017.2	15.2	15.2	1.0	10.0	73.9
trust region	-135.0951270878	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-135.0951270878	247.0	247.0	247.0	1.0	10.0	2.6

Table 195: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.1558131771	1075.0	1075.0	0.0	nan	10.0	4.1
basin hopping	-165.1558131963	1021.0	1021.0	1021.0	1.0	10.0	293.9
cch second order	-165.1558130516	177.0	96.0	96.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-165.1558067739	4048.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
direct	-164.8792646880	4861.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.1
direct with trim	-165.1558131963	4870.0	7.0	7.0	nan	10.0	23.4
dual anneal	-165.15558131961	20013.6	11.6	11.6	1.0	10.0	66.2
trust region	-165.1558131963	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-165.1558131963	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	2.3

Table 196: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-198.8859336344	1064.0	1064.0	0.0	nan	10.0	4.2
basin hopping	-198.8859336560	1004.2	1004.2	1004.2	1.0	10.0	414.1
cch second order	-198.8859336774	188.0	102.0	102.0	nan	10.0	3.0
diff evo	-198.8859235124	3901.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
direct	-198.2338097748	5133.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
direct with trim	-198.8859336560	5142.0	7.0	7.0	nan	10.0	22.1
dual anneal	-198.8859336558	20013.4	11.4	11.4	1.0	10.0	75.5
trust region	-198.8859336560	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-198.8859336560	250.0	250.0	250.0	1.0	10.0	2.6

Table 197: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-236.4160359180	1037.0	1037.0	0.0	nan	10.0	3.9
basin hopping	-236.4160359427	1009.0	1009.0	1009.0	1.0	10.0	257.9
cch second order	-236.4160358798	173.0	96.0	96.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-236.4160290697	3922.8	0.0	0.0	nan	10.0	19.6
direct	-236.1859167173	5109.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct with trim	-236.4160359427	5118.0	7.0	7.0	nan	10.0	17.9
dual anneal	-236.4160359424	20015.8	13.8	13.8	1.0	10.0	79.6
trust region	-236.4160359427	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	2.6
trust region repeats	-236.4160359427	254.0	254.0	254.0	1.0	10.0	2.2

Table 198: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-277.8710327270	986.0	986.0	0.0	nan	10.0	4.0
basin hopping	-277.8710327558	1061.8	1061.8	1061.8	1.0	10.0	312.3
cch second order	-277.8710327665	165.0	94.0	94.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-277.8710229784	4015.2	0.0	0.0	nan	10.0	16.6
direct	-276.1196112984	4967.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.0
direct with trim	-277.8710327558	4978.0	9.0	9.0	nan	10.0	23.4
dual anneal	-277.8710327554	20014.2	12.2	12.2	1.0	10.0	79.8
trust region	-277.8710327558	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-277.8710327558	256.0	256.0	256.0	1.0	10.0	2.5

Table 199: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-323.3707844200	896.0	896.0	0.0	nan	10.0	3.9
basin hopping	-323.3707844557	1074.2	1074.2	1074.2	1.0	10.0	326.5
cch second order	-323.3707843941	183.0	102.0	102.0	nan	10.0	2.8
diff evo	-323.3707674948	3721.2	0.0	0.0	nan	10.0	15.4
direct	-321.9254302895	4765.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
direct with trim	-323.3707844557	4774.0	7.0	7.0	nan	10.0	23.8
dual anneal	-323.3707844553	20013.8	11.8	11.8	1.0	10.0	77.0
trust region	-323.3707844557	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	1.9
trust region repeats	-323.3707844557	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	2.3

Table 200: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-373.0305910943	1018.0	1018.0	0.0	nan	10.0	3.9
basin hopping	-373.0305911345	1036.4	1036.4	1036.4	1.0	10.0	326.4
cch second order	-373.0305912091	192.0	105.0	105.0	nan	10.0	2.9
diff evo	-373.0305701725	3847.2	0.0	0.0	nan	10.0	19.9
direct	-372.6067799652	4945.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.9
direct with trim	-373.0305911345	4954.0	7.0	7.0	nan	10.0	21.3
dual anneal	-373.0305911340	20020.4	18.4	18.4	1.0	10.0	74.2
trust region	-373.0305911345	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	2.0
trust region repeats	-373.0305911345	261.0	261.0	261.0	1.0	10.0	2.6

Table 201: Ar

8.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.2591112799
He	basin hopping	-1.4666494957
Li	cch second order	-4.0819903001
Be	cch second order	-8.4499731030
B	basin hopping	-14.8581280915
C	basin hopping	-23.5565023036
N	cch second order	-34.7680607313
O	basin hopping	-48.6951910858
F	cch second order	-65.5240156266
Ne	cch second order	-85.4273758832
Na	cch second order	-108.5669973836
Mg	cch second order	-135.0951271668
Al	trust region	-165.1558131963
Si	cch second order	-198.8859336774
P	basin hopping	-236.4160359427
S	cch second order	-277.8710327665
Cl	trust region	-323.3707844557
Ar	cch second order	-373.0305912091

Table 202: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	10.2	10.2	10.2	nan	-116.9710729411	2.0
cch second order	160.7	89.6	89.6	nan	-116.9710729382	3.0
trust region repeats	239.6	239.6	239.6	1.0	-116.9710729411	2.4
basin hopping	1008.2	1008.2	1008.2	1.0	-116.9710729411	309.2
acevedo	1022.9	1022.9	0.0	nan	-116.9710729216	4.2
diff evo	3818.0	0.0	0.0	nan	-116.9710674158	17.6
direct	5126.4	0.0	0.0	nan	-116.6505391627	22.9
direct with trim	5134.8	6.4	6.4	nan	-116.9710729411	21.6
dual anneal	20013.5	11.5	11.5	1.0	-116.9710729410	74.0

Table 203: Average (all systems)

9   10s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

9.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 204: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999245063	977.0	977.0	977.0	1.0	10.0	262.8
He	-2.6744251496	953.0	953.0	953.0	1.0	10.0	285.1
Li	-8.3958413097	955.4	955.4	955.4	1.2	10.0	310.9
Be	-19.0779452064	914.0	914.0	914.0	1.0	10.0	274.2
B	-36.1935773338	900.2	900.2	900.2	1.0	10.0	254.0
C	-61.2433451449	908.6	908.6	908.6	1.0	10.0	264.6
N	-95.7409473416	904.0	904.0	904.0	1.2	10.0	226.1
O	-141.1858414740	916.2	916.2	916.2	1.2	10.0	235.2
F	-199.0592798721	884.6	884.6	884.6	1.0	10.0	271.8
Ne	-270.8323021664	869.2	869.2	869.2	1.4	10.0	144.1
Na	-357.9715360724	912.6	912.6	912.6	1.2	10.0	279.5
Mg	-461.9410373941	898.2	898.2	898.2	1.2	10.0	230.0
Al	-584.2029395501	931.4	931.4	931.4	1.0	10.0	246.9
Si	-726.2187292533	944.6	944.6	944.6	1.2	10.0	266.7
P	-889.4510583168	946.0	946.0	946.0	1.4	10.0	279.3
S	-1075.3651161688	1049.4	1049.4	1049.4	2.0	10.0	330.6
Cl	-1285.4288686398	1039.0	1039.0	1039.0	1.0	10.0	357.6
Ar	-1521.1123591788	1125.6	1125.6	1125.6	1.0	10.0	381.2

Table 205: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999243575	158.0	91.0	91.0	nan	10.0	3.2
He	-2.6744251310	192.0	108.0	108.0	nan	10.0	3.2
Li	-8.3958420024	235.0	131.0	131.0	nan	10.0	3.8
Be	-19.0779450992	274.0	153.0	153.0	nan	10.0	5.7
B	-36.1935789436	330.0	175.0	175.0	nan	10.0	6.2
C	-61.2433424184	373.0	207.0	207.0	nan	10.0	6.6
N	-95.7409501318	432.0	245.0	245.0	nan	10.0	7.5
O	-141.1858459511	498.0	285.0	285.0	nan	10.0	5.0
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 206: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999244588	3204.6	0.0	0.0	nan	10.0	15.1
He	-2.6745260901	5006.4	0.0	0.0	nan	10.0	22.7
Li	-8.3958408037	3339.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.2
Be	-19.0779440334	3355.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
B	-36.1936046425	4212.6	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
C	-61.2433423686	2872.8	0.0	0.0	nan	10.0	14.9
N	-95.7409418389	3439.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.8
O	-141.1974592228	14490.0	0.0	0.0	nan	10.0	57.9
F	-199.0592680350	3381.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.2
Ne	-270.8322870695	3179.4	0.0	0.0	nan	10.0	14.7
Na	-357.9715286171	3032.4	0.0	0.0	nan	10.0	12.8
Mg	-461.9410180942	3137.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
Al	-584.2028910325	3116.4	0.0	0.0	nan	10.0	15.7
Si	-726.2186593954	3049.2	0.0	0.0	nan	10.0	14.4
P	-889.4509581246	2952.6	0.0	0.0	nan	10.0	12.6
S	-1075.3650579971	3187.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.4
Cl	-1285.4287971990	2877.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.3
Ar	-1521.1122765472	2961.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.0

Table 207: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999244827	4267.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
He	-2.6744251244	3799.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.3
Li	-8.3958407348	4349.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.6
Be	-19.0774983762	4495.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
B	-36.1935758201	5957.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.4
C	-61.2433237193	4501.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
N	-95.7409300448	4511.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
O	-141.1858382935	4249.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
F	-199.0590261633	4983.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.6
Ne	-270.8322582964	3885.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.2
Na	-357.9443898221	4199.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.5
Mg	-461.9394968867	4655.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
Al	-584.1400702471	4845.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
Si	-726.2184443481	4267.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
P	-889.4493210172	4543.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
S	-1075.3571576073	4601.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
Cl	-1285.4287287524	4117.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.3
Ar	-1521.1122434535	4527.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.7

Table 208: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999245063	4273.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.4
He	-2.6744251496	3805.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.2
Li	-8.3958413097	4355.0	4.0	4.0	nan	10.0	16.7
Be	-19.0776986944	4502.0	5.0	5.0	nan	10.0	19.4
B	-36.1935773338	5963.0	4.0	4.0	nan	10.0	22.4
C	-61.2433451449	4508.0	5.0	5.0	nan	10.0	21.0
N	-95.7409473416	4518.0	5.0	5.0	nan	10.0	15.4
O	-141.1858414740	4255.0	4.0	4.0	nan	10.0	16.7
F	-199.0592798721	4990.0	5.0	5.0	nan	10.0	23.0
Ne	-270.8323021664	3891.0	4.0	4.0	nan	10.0	17.5
Na	-357.9715360724	4211.0	10.0	10.0	nan	10.0	18.7
Mg	-461.9410373941	4662.0	5.0	5.0	nan	10.0	23.4
Al	-584.1848802745	4853.0	6.0	6.0	nan	10.0	18.5
Si	-726.2187292533	4274.0	5.0	5.0	nan	10.0	17.3
P	-889.4510583168	4550.0	5.0	5.0	nan	10.0	22.1
S	-1075.3651116960	4608.0	5.0	5.0	nan	10.0	18.2
Cl	-1285.4288686398	4123.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.2
Ar	-1521.1123591788	4534.0	5.0	5.0	nan	10.0	18.8

Table 209: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999245063	20009.0	7.0	7.0	1.0	10.0	76.1
He	-2.6746690807	20012.8	10.8	10.8	1.6	10.0	75.3
Li	-8.3963118115	20011.4	9.4	9.4	1.2	10.0	75.8
Be	-19.0779452063	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	79.0
B	-36.1935773332	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	80.1
C	-61.2433451433	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	76.7
N	-95.7409473377	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	80.7
O	-141.1858414658	20014.0	12.0	12.0	1.0	10.0	74.4
F	-199.0592798564	20015.4	13.4	13.4	1.0	10.0	79.6
Ne	-270.8323021382	20016.0	14.0	14.0	1.0	10.0	82.3
Na	-357.9715360241	20023.2	21.2	21.2	1.4	10.0	80.5
Mg	-461.9410373147	20019.0	17.0	17.0	1.0	10.0	79.0
Al	-584.2029394241	20020.0	18.0	18.0	1.0	10.0	82.3
Si	-726.2187290596	20021.6	19.6	19.6	1.0	10.0	82.1
P	-889.4510580271	20023.4	21.4	21.4	1.0	10.0	82.0
S	-1075.3651112734	20025.8	23.8	23.8	1.0	10.0	78.1
Cl	-1285.4288680376	20030.8	28.8	28.8	1.0	10.0	83.9
Ar	-1521.1123583388	20030.2	28.2	28.2	1.0	10.0	85.9

Table 210: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999245063	7.0	7.0	7.0	nan	10.0	3.0
He	-2.6744251496	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.0
Li	-8.3958413097	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.0
Be	-19.0779452064	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
B	-36.1935773338	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.9
C	-61.2433451449	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.2
N	-95.7409473416	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.2
O	-141.1858414740	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	3.1
F	-199.0592798721	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	4.5
Ne	-270.8323021664	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	6.8
Na	-357.9715360724	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	2.1
Mg	-461.9410373941	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.1
Al	-584.2029395501	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	4.5
Si	-726.2187292533	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	3.4
P	-889.4510583168	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	3.3
S	-1075.3651116960	23.0	23.0	23.0	nan	10.0	4.5
Cl	-1285.4288686398	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	7.0
Ar	-1521.1123591788	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	6.7

Table 211: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.3999245063	161.0	161.0	161.0	1.0	10.0	2.8
He	-2.6745261161	188.0	188.0	188.0	2.0	10.0	3.6
Li	-8.3958413097	191.0	191.0	191.0	1.0	10.0	2.8
Be	-19.0779452064	195.0	195.0	195.0	1.0	10.0	3.5
B	-36.1935773338	211.0	211.0	211.0	1.0	10.0	4.0
C	-61.2433451449	223.0	223.0	223.0	1.0	10.0	3.6
N	-95.7409473416	236.0	236.0	236.0	1.0	10.0	4.0
O	-141.1974592310	248.0	248.0	248.0	2.0	10.0	3.1
F	-199.0592798721	272.0	272.0	272.0	1.0	10.0	4.5
Ne	-270.8323021664	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.2
Na	-357.9715360724	313.0	313.0	313.0	1.0	10.0	3.7
Mg	-461.9410373941	344.0	344.0	344.0	1.0	10.0	5.8
Al	-584.2029395501	363.0	363.0	363.0	2.0	10.0	5.8
Si	-726.2187292533	403.0	403.0	403.0	1.0	10.0	6.7
P	-889.4510583168	447.0	447.0	447.0	1.0	10.0	6.2
S	-1075.3651116960	483.0	483.0	483.0	1.0	10.0	7.1
Cl	-1285.4288686398	571.0	571.0	571.0	1.0	10.0	9.1
Ar	-1521.1123591788	597.0	597.0	597.0	1.0	10.0	7.7

Table 212: trust region repeats

9.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.3999245063	977.0	977.0	977.0	1.0	10.0	262.8
cch second order	-0.3999243575	158.0	91.0	91.0	nan	10.0	3.2
diff evo	-0.3999244588	3204.6	0.0	0.0	nan	10.0	15.1
direct	-0.3999244827	4267.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
direct with trim	-0.3999245063	4273.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.4
dual anneal	-0.3999245063	20009.0	7.0	7.0	1.0	10.0	76.1
trust region	-0.3999245063	7.0	7.0	7.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-0.3999245063	161.0	161.0	161.0	1.0	10.0	2.8

Table 213: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.6744251496	953.0	953.0	953.0	1.0	10.0	285.1
cch second order	-2.6744251310	192.0	108.0	108.0	nan	10.0	3.2
diff evo	-2.6745260901	5006.4	0.0	0.0	nan	10.0	22.7
direct	-2.6744251244	3799.0	0.0	0.0	nan	10.0	18.3
direct with trim	-2.6744251496	3805.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.2
dual anneal	-2.6746690807	20012.8	10.8	10.8	1.6	10.0	75.3
trust region	-2.6744251496	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-2.6745261161	188.0	188.0	188.0	2.0	10.0	3.6

Table 214: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.3958413097	955.4	955.4	955.4	1.2	10.0	310.9
cch second order	-8.3958420024	235.0	131.0	131.0	nan	10.0	3.8
diff evo	-8.3958408037	3339.0	0.0	0.0	nan	10.0	17.2
direct	-8.3958407348	4349.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.6
direct with trim	-8.3958413097	4355.0	4.0	4.0	nan	10.0	16.7
dual anneal	-8.3963118115	20011.4	9.4	9.4	1.2	10.0	75.8
trust region	-8.3958413097	8.0	8.0	8.0	nan	10.0	3.0
trust region repeats	-8.3958413097	191.0	191.0	191.0	1.0	10.0	2.8

Table 215: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.0779452064	914.0	914.0	914.0	1.0	10.0	274.2
cch second order	-19.0779450992	274.0	153.0	153.0	nan	10.0	5.7
diff evo	-19.0779440334	3355.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.6
direct	-19.0774983762	4495.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
direct with trim	-19.0776986944	4502.0	5.0	5.0	nan	10.0	19.4
dual anneal	-19.0779452063	20011.0	9.0	9.0	1.0	10.0	79.0
trust region	-19.0779452064	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	1.8
trust region repeats	-19.0779452064	195.0	195.0	195.0	1.0	10.0	3.5

Table 216: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.1935773338	900.2	900.2	900.2	1.0	10.0	254.0
cch second order	-36.1935789436	330.0	175.0	175.0	nan	10.0	6.2
diff evo	-36.1936046425	4212.6	0.0	0.0	nan	10.0	20.0
direct	-36.1935758201	5957.0	0.0	0.0	nan	10.0	27.4
direct with trim	-36.1935773338	5963.0	4.0	4.0	nan	10.0	22.4
dual anneal	-36.1935773332	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	80.1
trust region	-36.1935773338	9.0	9.0	9.0	nan	10.0	2.9
trust region repeats	-36.1935773338	211.0	211.0	211.0	1.0	10.0	4.0

Table 217: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-61.2433451449	908.6	908.6	908.6	1.0	10.0	264.6
cch second order	-61.2433424184	373.0	207.0	207.0	nan	10.0	6.6
diff evo	-61.2433423686	2872.8	0.0	0.0	nan	10.0	14.9
direct	-61.2433237193	4501.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
direct with trim	-61.2433451449	4508.0	5.0	5.0	nan	10.0	21.0
dual anneal	-61.2433451433	20012.0	10.0	10.0	1.0	10.0	76.7
trust region	-61.2433451449	10.0	10.0	10.0	nan	10.0	3.2
trust region repeats	-61.2433451449	223.0	223.0	223.0	1.0	10.0	3.6

Table 218: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-95.7409473416	904.0	904.0	904.0	1.2	10.0	226.1
cch second order	-95.7409501318	432.0	245.0	245.0	nan	10.0	7.5
diff evo	-95.7409418389	3439.8	0.0	0.0	nan	10.0	16.8
direct	-95.7409300448	4511.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
direct with trim	-95.7409473416	4518.0	5.0	5.0	nan	10.0	15.4
dual anneal	-95.7409473377	20013.0	11.0	11.0	1.0	10.0	80.7
trust region	-95.7409473416	11.0	11.0	11.0	nan	10.0	3.2
trust region repeats	-95.7409473416	236.0	236.0	236.0	1.0	10.0	4.0

Table 219: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-141.1858414740	916.2	916.2	916.2	1.2	10.0	235.2
cch second order	-141.1858459511	498.0	285.0	285.0	nan	10.0	5.0
diff evo	-141.1974592228	14490.0	0.0	0.0	nan	10.0	57.9
direct	-141.1858382935	4249.0	0.0	0.0	nan	10.0	22.0
direct with trim	-141.1858414740	4255.0	4.0	4.0	nan	10.0	16.7
dual anneal	-141.1858414658	20014.0	12.0	12.0	1.0	10.0	74.4
trust region	-141.1858414740	12.0	12.0	12.0	nan	10.0	3.1
trust region repeats	-141.1974592310	248.0	248.0	248.0	2.0	10.0	3.1

Table 220: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.0592798721	884.6	884.6	884.6	1.0	10.0	271.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-199.0592680350	3381.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.2
direct	-199.0590261633	4983.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.6
direct with trim	-199.0592798721	4990.0	5.0	5.0	nan	10.0	23.0
dual anneal	-199.0592798564	20015.4	13.4	13.4	1.0	10.0	79.6
trust region	-199.0592798721	13.0	13.0	13.0	nan	10.0	4.5
trust region repeats	-199.0592798721	272.0	272.0	272.0	1.0	10.0	4.5

Table 221: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-270.8323021664	869.2	869.2	869.2	1.4	10.0	144.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-270.8322870695	3179.4	0.0	0.0	nan	10.0	14.7
direct	-270.8322582964	3885.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.2
direct with trim	-270.8323021664	3891.0	4.0	4.0	nan	10.0	17.5
dual anneal	-270.8323021382	20016.0	14.0	14.0	1.0	10.0	82.3
trust region	-270.8323021664	14.0	14.0	14.0	nan	10.0	6.8
trust region repeats	-270.8323021664	287.0	287.0	287.0	1.0	10.0	4.2

Table 222: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-357.9715360724	912.6	912.6	912.6	1.2	10.0	279.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-357.9715286171	3032.4	0.0	0.0	nan	10.0	12.8
direct	-357.9443898221	4199.0	0.0	0.0	nan	10.0	21.5
direct with trim	-357.9715360724	4211.0	10.0	10.0	nan	10.0	18.7
dual anneal	-357.9715360241	20023.2	21.2	21.2	1.4	10.0	80.5
trust region	-357.9715360724	15.0	15.0	15.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-357.9715360724	313.0	313.0	313.0	1.0	10.0	3.7

Table 223: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-461.9410373941	898.2	898.2	898.2	1.2	10.0	230.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-461.9410180942	3137.4	0.0	0.0	nan	10.0	16.2
direct	-461.9394968867	4655.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.3
direct with trim	-461.9410373941	4662.0	5.0	5.0	nan	10.0	23.4
dual anneal	-461.9410373147	20019.0	17.0	17.0	1.0	10.0	79.0
trust region	-461.9410373941	16.0	16.0	16.0	nan	10.0	2.1
trust region repeats	-461.9410373941	344.0	344.0	344.0	1.0	10.0	5.8

Table 224: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-584.2029395501	931.4	931.4	931.4	1.0	10.0	246.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-584.2028910325	3116.4	0.0	0.0	nan	10.0	15.7
direct	-584.1400702471	4845.0	0.0	0.0	nan	10.0	24.7
direct with trim	-584.1848802745	4853.0	6.0	6.0	nan	10.0	18.5
dual anneal	-584.2029394241	20020.0	18.0	18.0	1.0	10.0	82.3
trust region	-584.2029395501	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	4.5
trust region repeats	-584.2029395501	363.0	363.0	363.0	2.0	10.0	5.8

Table 225: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-726.2187292533	944.6	944.6	944.6	1.2	10.0	266.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-726.2186593954	3049.2	0.0	0.0	nan	10.0	14.4
direct	-726.2184443481	4267.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.5
direct with trim	-726.2187292533	4274.0	5.0	5.0	nan	10.0	17.3
dual anneal	-726.2187290596	20021.6	19.6	19.6	1.0	10.0	82.1
trust region	-726.2187292533	19.0	19.0	19.0	nan	10.0	3.4
trust region repeats	-726.2187292533	403.0	403.0	403.0	1.0	10.0	6.7

Table 226: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-889.4510583168	946.0	946.0	946.0	1.4	10.0	279.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-889.4509581246	2952.6	0.0	0.0	nan	10.0	12.6
direct	-889.4493210172	4543.0	0.0	0.0	nan	10.0	23.2
direct with trim	-889.4510583168	4550.0	5.0	5.0	nan	10.0	22.1
dual anneal	-889.4510580271	20023.4	21.4	21.4	1.0	10.0	82.0
trust region	-889.4510583168	21.0	21.0	21.0	nan	10.0	3.3
trust region repeats	-889.4510583168	447.0	447.0	447.0	1.0	10.0	6.2

Table 227: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1075.3651161688	1049.4	1049.4	1049.4	2.0	10.0	330.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1075.3650579971	3187.8	0.0	0.0	nan	10.0	18.4
direct	-1075.3571576073	4601.0	0.0	0.0	nan	10.0	20.3
direct with trim	-1075.3651116960	4608.0	5.0	5.0	nan	10.0	18.2
dual anneal	-1075.3651112734	20025.8	23.8	23.8	1.0	10.0	78.1
trust region	-1075.3651116960	23.0	23.0	23.0	nan	10.0	4.5
trust region repeats	-1075.3651116960	483.0	483.0	483.0	1.0	10.0	7.1

Table 228: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1285.4288686398	1039.0	1039.0	1039.0	1.0	10.0	357.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1285.4287971990	2877.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.3
direct	-1285.4287287524	4117.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.3
direct with trim	-1285.4288686398	4123.0	4.0	4.0	nan	10.0	18.2
dual anneal	-1285.4288680376	20030.8	28.8	28.8	1.0	10.0	83.9
trust region	-1285.4288686398	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	7.0
trust region repeats	-1285.4288686398	571.0	571.0	571.0	1.0	10.0	9.1

Table 229: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1521.1123591788	1125.6	1125.6	1125.6	1.0	10.0	381.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1521.1122765472	2961.0	0.0	0.0	nan	10.0	14.0
direct	-1521.1122434535	4527.0	0.0	0.0	nan	10.0	19.7
direct with trim	-1521.1123591788	4534.0	5.0	5.0	nan	10.0	18.8
dual anneal	-1521.1123583388	20030.2	28.2	28.2	1.0	10.0	85.9
trust region	-1521.1123591788	27.0	27.0	27.0	nan	10.0	6.7
trust region repeats	-1521.1123591788	597.0	597.0	597.0	1.0	10.0	7.7

Table 230: Ar

9.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.3999245063
He	dual anneal	-2.6746690807
Li	dual anneal	-8.3963118115
Be	basin hopping	-19.0779452064
B	diff evo	-36.1936046425
C	trust region repeats	-61.2433451449
N	cch second order	-95.7409501318
O	trust region repeats	-141.1974592310
F	trust region repeats	-199.0592798721
Ne	basin hopping	-270.8323021664
Na	basin hopping	-357.9715360724
Mg	trust region repeats	-461.9410373941
Al	trust region repeats	-584.2029395501
Si	basin hopping	-726.2187292533
P	trust region repeats	-889.4510583168
S	basin hopping	-1075.3651161688
Cl	basin hopping	-1285.4288686398
Ar	basin hopping	-1521.1123591788

Table 231: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	14.9	14.9	14.9	nan	-429.8052816448	3.8
cch second order	311.5	174.4	174.4	nan	-45.6139817544	5.1
trust region repeats	318.5	318.5	318.5	1.2	-429.8059326850	4.9
basin hopping	946.1	946.1	946.1	1.2	-429.8052818933	272.3
diff evo	3933.1	0.0	0.0	nan	-429.8059069761	18.4
direct	4486.1	0.0	0.0	nan	-429.7995829550	21.7
direct with trim	4493.1	4.9	4.9	nan	-429.8042646566	19.1
dual anneal	20017.8	15.8	15.8	1.1	-429.8053211877	79.7

Table 232: Average (all systems)

10   15s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

10.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 233: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6993403054	2819.6	2819.6	2819.6	20.8	15.0	550.7
He	-3.3635430098	2083.4	2083.4	2083.4	18.2	15.0	658.7
Li	-8.4627032250	1782.4	1782.4	1782.4	13.0	15.0	530.4
Be	-16.7114657116	1470.8	1470.8	1470.8	3.0	15.0	294.7
B	-28.3390581572	1681.6	1681.6	1681.6	1.0	15.0	388.9
C	-41.5454650554	1595.8	1595.8	1595.8	1.2	15.0	350.9
N	-61.0776804711	1556.4	1556.4	1556.4	1.8	15.0	316.4
O	-82.3134316317	1660.6	1660.6	1660.6	1.4	15.0	297.5
F	-109.8389903163	1498.8	1498.8	1498.8	1.0	15.0	309.5
Ne	-138.9383579189	1485.4	1485.4	1485.4	1.2	15.0	205.1
Na	-175.9735786619	1541.4	1541.4	1541.4	1.2	15.0	295.3
Mg	-210.6951034570	1416.0	1416.0	1416.0	1.0	15.0	195.4
Al	-261.6067326899	1428.2	1428.2	1428.2	1.0	15.0	230.9
Si	-312.7843072338	1425.4	1425.4	1425.4	1.0	15.0	264.9
P	-371.2859862428	1442.4	1442.4	1442.4	1.0	15.0	330.2
S	-425.7486257844	1447.6	1447.6	1447.6	1.0	15.0	197.4
Cl	-473.0994445322	1367.4	1367.4	1367.4	1.0	15.0	192.0
Ar	-563.0177971655	1481.6	1481.6	1481.6	1.0	15.0	260.8

Table 234: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6421749939	242.0	119.0	119.0	nan	15.0	3.6
He	-2.8258649077	206.0	108.0	108.0	nan	15.0	3.5
Li	-5.7044955285	456.0	244.0	244.0	nan	15.0	7.8
Be	-12.6042390397	478.0	251.0	251.0	nan	15.0	5.8
B	-27.0965884681	174.0	93.0	93.0	nan	15.0	5.3
C	-41.9595433625	230.0	121.0	121.0	nan	15.0	3.7
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-133.0820547415	220.0	113.0	113.0	nan	15.0	5.5
Na	-170.1058832817	294.0	148.0	148.0	nan	15.0	6.8
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 235: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7329548201	44230.8	0.0	0.0	nan	15.0	216.5
He	-3.4416688148	55223.4	0.0	0.0	nan	15.0	345.1
Li	-8.6811855670	60605.0	0.0	0.0	nan	15.0	341.9
Be	-16.8741989727	80073.0	0.0	0.0	nan	15.0	509.5
B	-28.3390565951	73649.8	0.0	0.0	nan	15.0	422.5
C	-43.2370600810	58466.0	0.0	0.0	nan	15.0	331.6
N	-61.9826798562	55304.0	0.0	0.0	nan	15.0	294.4
O	-84.8841861026	63339.2	0.0	0.0	nan	15.0	373.3
F	-111.6138738696	34434.8	0.0	0.0	nan	15.0	195.2
Ne	-143.0271337945	34955.6	0.0	0.0	nan	15.0	204.8
Na	-179.0386798468	33244.4	0.0	0.0	nan	15.0	203.1
Mg	-218.7641292389	23572.4	0.0	0.0	nan	15.0	157.4
Al	-265.1055546434	24409.4	0.0	0.0	nan	15.0	147.4
Si	-315.6169202758	20050.8	0.0	0.0	nan	15.0	117.2
P	-371.2852886540	22524.6	0.0	0.0	nan	15.0	127.1
S	-431.1821323286	20677.0	0.0	0.0	nan	15.0	132.6
Cl	-497.6950068148	24229.6	0.0	0.0	nan	15.0	134.7
Ar	-570.4275105963	22840.8	0.0	0.0	nan	15.0	136.5

Table 236: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6590209240	13817.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.6
He	-3.3757988495	11713.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.7
Li	-8.4958472001	11353.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.2
Be	-15.8486731877	15003.0	0.0	0.0	nan	15.0	72.0
B	-27.4482290850	11705.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.0
C	-41.3618593646	11743.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.4
N	-61.5464632820	10837.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.3
O	-83.3376064122	13259.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.7
F	-104.8855840776	11811.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.7
Ne	-139.4738721799	11387.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.0
Na	-177.5584252703	11343.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.5
Mg	-210.9546545302	11381.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.0
Al	-239.2230190744	11041.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.5
Si	-287.1553450665	11139.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.8
P	-361.1532058055	12333.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.9
S	-424.8663982117	12117.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.7
Cl	-481.2064449695	11993.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.5
Ar	-559.9828658533	10975.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.1

Table 237: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6238777676	13842.0	23.0	23.0	nan	15.0	90.4
He	-3.3139133407	11838.2	123.2	123.2	nan	15.0	83.1
Li	-8.3710869271	11489.0	134.0	134.0	nan	15.0	82.0
Be	-15.7334823796	15032.0	27.0	27.0	nan	15.0	83.7
B	-27.8973824321	11786.8	79.8	79.8	nan	15.0	88.4
C	-40.9817533054	11763.0	18.0	18.0	nan	15.0	75.8
N	-60.3461069918	10856.0	17.0	17.0	nan	15.0	65.8
O	-84.1982751484	13280.0	19.0	19.0	nan	15.0	82.0
F	-109.8394325111	11889.2	76.2	76.2	nan	15.0	75.3
Ne	-142.6162580589	11405.0	16.0	16.0	nan	15.0	62.2
Na	-172.7393308787	11374.0	29.0	29.0	nan	15.0	76.2
Mg	-210.6951034570	11405.0	22.0	22.0	nan	15.0	73.1
Al	-237.8092936344	11100.4	57.4	57.4	nan	15.0	69.3
Si	-283.5271854508	11193.6	52.6	52.6	nan	15.0	84.1
P	-340.0883248117	12353.0	18.0	18.0	nan	15.0	79.3
S	-413.5513529132	12149.2	30.2	30.2	nan	15.0	81.1
Cl	-497.2464517283	12021.8	26.8	26.8	nan	15.0	71.5
Ar	-556.0532937917	10999.0	22.0	22.0	nan	15.0	75.9

Table 238: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7278653562	31324.8	1322.8	1322.8	11.6	15.0	519.9
He	-3.3806911446	30457.4	455.4	455.4	5.2	15.0	263.4
Li	-8.5675052802	30730.4	728.4	728.4	12.6	15.0	351.1
Be	-16.7777860127	30756.2	754.2	754.2	14.0	15.0	348.2
B	-28.1359334230	31002.8	1000.8	1000.8	17.4	15.0	346.4
C	-43.1337618212	30112.0	110.0	110.0	3.4	15.0	207.5
N	-61.9116413832	30973.4	971.4	971.4	25.2	15.0	351.6
O	-83.4146760374	30069.4	67.4	67.4	1.8	15.0	188.4
F	-110.6395838230	30069.0	67.0	67.0	2.8	15.0	178.6
Ne	-142.0377917602	30087.2	85.2	85.2	2.8	15.0	190.7
Na	-178.8971617991	30220.4	218.4	218.4	6.2	15.0	174.7
Mg	-217.8386582590	30077.2	75.2	75.2	2.0	15.0	199.6
Al	-263.4832342914	30105.0	103.0	103.0	2.8	15.0	195.9
Si	-313.1368998024	30074.0	72.0	72.0	2.6	15.0	181.2
P	-368.3184095016	30192.6	190.6	190.6	3.2	15.0	201.7
S	-432.2311125247	30356.4	354.4	354.4	14.8	15.0	199.3
Cl	-494.7597970793	32584.0	2582.0	2582.0	104.2	15.0	612.9
Ar	-570.4275993326	30053.2	51.2	51.2	1.8	15.0	200.5

Table 239: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7100008879	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	7.8
He	-3.1985654993	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	4.4
Li	-8.6365145455	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	5.6
Be	-14.7760190009	30.0	30.0	30.0	nan	15.0	14.0
B	-25.7529772556	43.0	43.0	43.0	nan	15.0	13.7
C	-42.0507794881	19.0	19.0	19.0	nan	15.0	5.5
N	-57.3339332624	73.0	73.0	73.0	nan	15.0	30.5
O	-79.8457077177	37.0	37.0	37.0	nan	15.0	7.0
F	-109.8891617065	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	11.0
Ne	-137.3735938176	28.0	28.0	28.0	nan	15.0	11.1
Na	-178.7786389731	27.0	27.0	27.0	nan	15.0	10.4
Mg	-213.6545753225	21.0	21.0	21.0	nan	15.0	4.7
Al	-254.5902329567	49.0	49.0	49.0	nan	15.0	9.1
Si	-299.2402891142	91.0	91.0	91.0	nan	15.0	24.9
P	-362.2136650526	16.0	16.0	16.0	nan	15.0	3.7
S	-422.6075773642	43.0	43.0	43.0	nan	15.0	4.2
Cl	-488.2682228830	23.0	23.0	23.0	nan	15.0	3.8
Ar	-566.6422498017	28.0	28.0	28.0	nan	15.0	3.8

Table 240: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7108863554	1889.0	1889.0	1889.0	20.0	15.0	24.0
He	-3.4184230048	1575.0	1575.0	1575.0	20.0	15.0	15.0
Li	-8.6804839701	994.0	994.0	994.0	20.0	15.0	12.7
Be	-16.8562867520	1149.0	1149.0	1149.0	17.0	15.0	12.2
B	-28.3390581572	839.0	839.0	839.0	19.0	15.0	8.6
C	-43.3411667391	922.0	922.0	922.0	18.0	15.0	7.9
N	-61.9826827991	665.0	665.0	665.0	14.0	15.0	5.9
O	-84.7424690089	599.0	599.0	599.0	17.0	15.0	5.7
F	-111.6982927748	491.0	491.0	491.0	14.0	15.0	3.9
Ne	-143.0273449698	533.0	533.0	533.0	16.0	15.0	4.2
Na	-178.8971618785	700.0	700.0	700.0	15.0	15.0	4.9
Mg	-219.6309440795	687.0	687.0	687.0	18.0	15.0	6.3
Al	-265.1057486069	457.0	457.0	457.0	14.0	15.0	3.4
Si	-315.6169781786	548.0	548.0	548.0	14.0	15.0	7.1
P	-370.7912684805	626.0	626.0	626.0	13.0	15.0	6.4
S	-431.5571245721	611.0	611.0	611.0	13.0	15.0	5.1
Cl	-497.6950993800	582.0	582.0	582.0	13.0	15.0	5.7
Ar	-570.4275995189	534.0	534.0	534.0	13.0	15.0	4.2

Table 241: trust region repeats

10.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6993403054	2819.6	2819.6	2819.6	20.8	15.0	550.7
cch second order	-0.6421749939	242.0	119.0	119.0	nan	15.0	3.6
diff evo	-0.7329548201	44230.8	0.0	0.0	nan	15.0	216.5
direct	-0.6590209240	13817.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.6
direct with trim	-0.6238777676	13842.0	23.0	23.0	nan	15.0	90.4
dual anneal	-0.7278653562	31324.8	1322.8	1322.8	11.6	15.0	519.9
trust region	-0.7100008879	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	7.8
trust region repeats	-0.7108863554	1889.0	1889.0	1889.0	20.0	15.0	24.0

Table 242: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.3635430098	2083.4	2083.4	2083.4	18.2	15.0	658.7
cch second order	-2.8258649077	206.0	108.0	108.0	nan	15.0	3.5
diff evo	-3.4416688148	55223.4	0.0	0.0	nan	15.0	345.1
direct	-3.3757988495	11713.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.7
direct with trim	-3.3139133407	11838.2	123.2	123.2	nan	15.0	83.1
dual anneal	-3.3806911446	30457.4	455.4	455.4	5.2	15.0	263.4
trust region	-3.1985654993	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	4.4
trust region repeats	-3.4184230048	1575.0	1575.0	1575.0	20.0	15.0	15.0

Table 243: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.4627032250	1782.4	1782.4	1782.4	13.0	15.0	530.4
cch second order	-5.7044955285	456.0	244.0	244.0	nan	15.0	7.8
diff evo	-8.6811855670	60605.0	0.0	0.0	nan	15.0	341.9
direct	-8.4958472001	11353.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.2
direct with trim	-8.3710869271	11489.0	134.0	134.0	nan	15.0	82.0
dual anneal	-8.5675052802	30730.4	728.4	728.4	12.6	15.0	351.1
trust region	-8.6365145455	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	5.6
trust region repeats	-8.6804839701	994.0	994.0	994.0	20.0	15.0	12.7

Table 244: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.7114657116	1470.8	1470.8	1470.8	3.0	15.0	294.7
cch second order	-12.6042390397	478.0	251.0	251.0	nan	15.0	5.8
diff evo	-16.8741989727	80073.0	0.0	0.0	nan	15.0	509.5
direct	-15.8486731877	15003.0	0.0	0.0	nan	15.0	72.0
direct with trim	-15.7334823796	15032.0	27.0	27.0	nan	15.0	83.7
dual anneal	-16.7777860127	30756.2	754.2	754.2	14.0	15.0	348.2
trust region	-14.7760190009	30.0	30.0	30.0	nan	15.0	14.0
trust region repeats	-16.8562867520	1149.0	1149.0	1149.0	17.0	15.0	12.2

Table 245: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-28.3390581572	1681.6	1681.6	1681.6	1.0	15.0	388.9
cch second order	-27.0965884681	174.0	93.0	93.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-28.3390565951	73649.8	0.0	0.0	nan	15.0	422.5
direct	-27.4482290850	11705.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.0
direct with trim	-27.8973824321	11786.8	79.8	79.8	nan	15.0	88.4
dual anneal	-28.1359334230	31002.8	1000.8	1000.8	17.4	15.0	346.4
trust region	-25.7529772556	43.0	43.0	43.0	nan	15.0	13.7
trust region repeats	-28.3390581572	839.0	839.0	839.0	19.0	15.0	8.6

Table 246: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.5454650554	1595.8	1595.8	1595.8	1.2	15.0	350.9
cch second order	-41.9595433625	230.0	121.0	121.0	nan	15.0	3.7
diff evo	-43.2370600810	58466.0	0.0	0.0	nan	15.0	331.6
direct	-41.3618593646	11743.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.4
direct with trim	-40.9817533054	11763.0	18.0	18.0	nan	15.0	75.8
dual anneal	-43.1337618212	30112.0	110.0	110.0	3.4	15.0	207.5
trust region	-42.0507794881	19.0	19.0	19.0	nan	15.0	5.5
trust region repeats	-43.3411667391	922.0	922.0	922.0	18.0	15.0	7.9

Table 247: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-61.0776804711	1556.4	1556.4	1556.4	1.8	15.0	316.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-61.9826798562	55304.0	0.0	0.0	nan	15.0	294.4
direct	-61.5464632820	10837.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.3
direct with trim	-60.3461069918	10856.0	17.0	17.0	nan	15.0	65.8
dual anneal	-61.9116413832	30973.4	971.4	971.4	25.2	15.0	351.6
trust region	-57.3339332624	73.0	73.0	73.0	nan	15.0	30.5
trust region repeats	-61.9826827991	665.0	665.0	665.0	14.0	15.0	5.9

Table 248: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.3134316317	1660.6	1660.6	1660.6	1.4	15.0	297.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-84.8841861026	63339.2	0.0	0.0	nan	15.0	373.3
direct	-83.3376064122	13259.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.7
direct with trim	-84.1982751484	13280.0	19.0	19.0	nan	15.0	82.0
dual anneal	-83.4146760374	30069.4	67.4	67.4	1.8	15.0	188.4
trust region	-79.8457077177	37.0	37.0	37.0	nan	15.0	7.0
trust region repeats	-84.7424690089	599.0	599.0	599.0	17.0	15.0	5.7

Table 249: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.8389903163	1498.8	1498.8	1498.8	1.0	15.0	309.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-111.6138738696	34434.8	0.0	0.0	nan	15.0	195.2
direct	-104.8855840776	11811.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.7
direct with trim	-109.8394325111	11889.2	76.2	76.2	nan	15.0	75.3
dual anneal	-110.6395838230	30069.0	67.0	67.0	2.8	15.0	178.6
trust region	-109.8891617065	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	11.0
trust region repeats	-111.6982927748	491.0	491.0	491.0	14.0	15.0	3.9

Table 250: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.9383579189	1485.4	1485.4	1485.4	1.2	15.0	205.1
cch second order	-133.0820547415	220.0	113.0	113.0	nan	15.0	5.5
diff evo	-143.0271337945	34955.6	0.0	0.0	nan	15.0	204.8
direct	-139.4738721799	11387.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.0
direct with trim	-142.6162580589	11405.0	16.0	16.0	nan	15.0	62.2
dual anneal	-142.0377917602	30087.2	85.2	85.2	2.8	15.0	190.7
trust region	-137.3735938176	28.0	28.0	28.0	nan	15.0	11.1
trust region repeats	-143.0273449698	533.0	533.0	533.0	16.0	15.0	4.2

Table 251: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.9735786619	1541.4	1541.4	1541.4	1.2	15.0	295.3
cch second order	-170.1058832817	294.0	148.0	148.0	nan	15.0	6.8
diff evo	-179.0386798468	33244.4	0.0	0.0	nan	15.0	203.1
direct	-177.5584252703	11343.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.5
direct with trim	-172.7393308787	11374.0	29.0	29.0	nan	15.0	76.2
dual anneal	-178.8971617991	30220.4	218.4	218.4	6.2	15.0	174.7
trust region	-178.7786389731	27.0	27.0	27.0	nan	15.0	10.4
trust region repeats	-178.8971618785	700.0	700.0	700.0	15.0	15.0	4.9

Table 252: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-210.6951034570	1416.0	1416.0	1416.0	1.0	15.0	195.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-218.7641292389	23572.4	0.0	0.0	nan	15.0	157.4
direct	-210.9546545302	11381.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.0
direct with trim	-210.6951034570	11405.0	22.0	22.0	nan	15.0	73.1
dual anneal	-217.8386582590	30077.2	75.2	75.2	2.0	15.0	199.6
trust region	-213.6545753225	21.0	21.0	21.0	nan	15.0	4.7
trust region repeats	-219.6309440795	687.0	687.0	687.0	18.0	15.0	6.3

Table 253: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-261.6067326899	1428.2	1428.2	1428.2	1.0	15.0	230.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-265.1055546434	24409.4	0.0	0.0	nan	15.0	147.4
direct	-239.2230190744	11041.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.5
direct with trim	-237.8092936344	11100.4	57.4	57.4	nan	15.0	69.3
dual anneal	-263.4832342914	30105.0	103.0	103.0	2.8	15.0	195.9
trust region	-254.5902329567	49.0	49.0	49.0	nan	15.0	9.1
trust region repeats	-265.1057486069	457.0	457.0	457.0	14.0	15.0	3.4

Table 254: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-312.7843072338	1425.4	1425.4	1425.4	1.0	15.0	264.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-315.6169202758	20050.8	0.0	0.0	nan	15.0	117.2
direct	-287.1553450665	11139.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.8
direct with trim	-283.5271854508	11193.6	52.6	52.6	nan	15.0	84.1
dual anneal	-313.1368998024	30074.0	72.0	72.0	2.6	15.0	181.2
trust region	-299.2402891142	91.0	91.0	91.0	nan	15.0	24.9
trust region repeats	-315.6169781786	548.0	548.0	548.0	14.0	15.0	7.1

Table 255: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-371.2859862428	1442.4	1442.4	1442.4	1.0	15.0	330.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-371.2852886540	22524.6	0.0	0.0	nan	15.0	127.1
direct	-361.1532058055	12333.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.9
direct with trim	-340.0883248117	12353.0	18.0	18.0	nan	15.0	79.3
dual anneal	-368.3184095016	30192.6	190.6	190.6	3.2	15.0	201.7
trust region	-362.2136650526	16.0	16.0	16.0	nan	15.0	3.7
trust region repeats	-370.7912684805	626.0	626.0	626.0	13.0	15.0	6.4

Table 256: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.7486257844	1447.6	1447.6	1447.6	1.0	15.0	197.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-431.1821323286	20677.0	0.0	0.0	nan	15.0	132.6
direct	-424.8663982117	12117.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.7
direct with trim	-413.5513529132	12149.2	30.2	30.2	nan	15.0	81.1
dual anneal	-432.2311125247	30356.4	354.4	354.4	14.8	15.0	199.3
trust region	-422.6075773642	43.0	43.0	43.0	nan	15.0	4.2
trust region repeats	-431.5571245721	611.0	611.0	611.0	13.0	15.0	5.1

Table 257: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-473.0994445322	1367.4	1367.4	1367.4	1.0	15.0	192.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-497.6950068148	24229.6	0.0	0.0	nan	15.0	134.7
direct	-481.2064449695	11993.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.5
direct with trim	-497.2464517283	12021.8	26.8	26.8	nan	15.0	71.5
dual anneal	-494.7597970793	32584.0	2582.0	2582.0	104.2	15.0	612.9
trust region	-488.2682228830	23.0	23.0	23.0	nan	15.0	3.8
trust region repeats	-497.6950993800	582.0	582.0	582.0	13.0	15.0	5.7

Table 258: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-563.0177971655	1481.6	1481.6	1481.6	1.0	15.0	260.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-570.4275105963	22840.8	0.0	0.0	nan	15.0	136.5
direct	-559.9828658533	10975.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.1
direct with trim	-556.0532937917	10999.0	22.0	22.0	nan	15.0	75.9
dual anneal	-570.4275993326	30053.2	51.2	51.2	1.8	15.0	200.5
trust region	-566.6422498017	28.0	28.0	28.0	nan	15.0	3.8
trust region repeats	-570.4275995189	534.0	534.0	534.0	13.0	15.0	4.2

Table 259: Ar

10.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	diff evo	-0.7329548201
He	diff evo	-3.4416688148
Li	diff evo	-8.6811855670
Be	diff evo	-16.8741989727
B	trust region repeats	-28.3390581572
C	trust region repeats	-43.3411667391
N	trust region repeats	-61.9826827991
O	diff evo	-84.8841861026
F	trust region repeats	-111.6982927748
Ne	trust region repeats	-143.0273449698
Na	diff evo	-179.0386798468
Mg	trust region repeats	-219.6309440795
Al	trust region repeats	-265.1057486069
Si	trust region repeats	-315.6169781786
P	basin hopping	-371.2859862428
S	dual anneal	-432.2311125247
Cl	trust region repeats	-497.6950993800
Ar	trust region repeats	-570.4275995189

Table 260: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	34.6	34.6	34.6	nan	-181.4201502583	9.7
cch second order	287.5	149.6	149.6	nan	-49.2526055404	5.3
trust region repeats	800.1	800.1	800.1	16.0	-186.2510566237	8.0
basin hopping	1621.4	1621.4	1621.4	3.9	-182.5278673094	326.1
direct	11941.7	0.0	0.0	nan	-179.3629618524	53.1
direct with trim	11987.6	44.0	44.0	nan	-178.0906614182	77.7
dual anneal	30513.6	511.6	511.6	13.0	-185.4344504795	272.9
diff evo	41768.4	0.0	0.0	nan	-186.2182900484	243.9

Table 261: Average (all systems)

11   15s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

11.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 262: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9511337496	2037.0	2037.0	2037.0	20.8	15.0	475.8
He	-4.0224123975	1848.2	1848.2	1848.2	19.4	15.0	352.3
Li	-9.9530311143	1808.6	1808.6	1808.6	16.4	15.0	392.2
Be	-19.0679276907	1373.8	1373.8	1373.8	7.0	15.0	245.2
B	-32.2802916253	1480.8	1480.8	1480.8	1.0	15.0	273.0
C	-47.6570061004	1288.2	1288.2	1288.2	1.2	15.0	203.9
N	-68.0690487930	1335.6	1335.6	1335.6	1.0	15.0	283.9
O	-89.9025774111	1375.8	1375.8	1375.8	1.2	15.0	254.4
F	-122.9367766518	1475.6	1475.6	1475.6	1.2	15.0	310.3
Ne	-155.2327555420	1366.0	1366.0	1366.0	1.0	15.0	242.1
Na	-190.6802464451	1521.8	1521.8	1521.8	1.0	15.0	259.0
Mg	-230.6528010944	1443.2	1443.2	1443.2	1.4	15.0	268.9
Al	-282.3066228761	1445.2	1445.2	1445.2	1.2	15.0	263.6
Si	-331.8340234590	1417.8	1417.8	1417.8	1.0	15.0	241.7
P	-391.3193729876	1582.2	1582.2	1582.2	1.0	15.0	265.9
S	-446.7215436434	1365.8	1365.8	1365.8	1.0	15.0	251.0
Cl	-520.7554756539	1405.0	1405.0	1405.0	1.0	15.0	275.4
Ar	-596.7398590992	1572.2	1572.2	1572.2	1.0	15.0	220.1

Table 263: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7883221693	300.0	151.0	151.0	nan	15.0	7.3
He	-3.6490413681	210.0	109.0	109.0	nan	15.0	6.7
Li	-9.3726641817	205.0	110.0	110.0	nan	15.0	3.8
Be	-14.5463968308	496.0	262.0	262.0	nan	15.0	6.7
B	-29.1704180778	211.0	109.0	109.0	nan	15.0	3.8
C	-44.0908851332	273.0	140.0	140.0	nan	15.0	4.4
N	-66.0704745847	264.0	136.0	136.0	nan	15.0	6.5
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-142.4355794324	217.0	112.0	112.0	nan	15.0	5.5
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 264: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9928365994	97699.6	0.0	0.0	nan	15.0	705.0
He	-4.2350877727	98425.0	0.0	0.0	nan	15.0	765.3
Li	-10.2815517614	108283.0	0.0	0.0	nan	15.0	729.6
Be	-19.6736497607	87246.4	0.0	0.0	nan	15.0	617.2
B	-32.5244908036	67728.8	0.0	0.0	nan	15.0	440.2
C	-49.2512641477	115642.4	0.0	0.0	nan	15.0	1001.7
N	-69.8847544244	70760.6	0.0	0.0	nan	15.0	501.2
O	-92.4770180226	50207.6	0.0	0.0	nan	15.0	382.8
F	-122.0498797513	38161.0	0.0	0.0	nan	15.0	300.1
Ne	-157.6392493798	34038.0	0.0	0.0	nan	15.0	272.1
Na	-196.0062912097	25779.6	0.0	0.0	nan	15.0	212.7
Mg	-234.3961616986	22456.4	0.0	0.0	nan	15.0	176.2
Al	-287.2806666545	37503.8	0.0	0.0	nan	15.0	273.0
Si	-334.1776088956	34162.0	0.0	0.0	nan	15.0	284.5
P	-391.7539205785	21321.8	0.0	0.0	nan	15.0	163.4
S	-459.7105969600	31694.4	0.0	0.0	nan	15.0	233.6
Cl	-522.9121552365	28706.0	0.0	0.0	nan	15.0	223.2
Ar	-606.2484977013	38923.6	0.0	0.0	nan	15.0	270.1

Table 265: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8587098249	10917.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.5
He	-3.7912478230	11045.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.7
Li	-9.6433414052	11033.0	0.0	0.0	nan	15.0	78.9
Be	-17.4489041676	11539.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.9
B	-28.7292258413	11667.0	0.0	0.0	nan	15.0	77.1
C	-45.3759407477	11075.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.4
N	-67.1408959354	9779.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.0
O	-89.7993000813	12895.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.4
F	-112.9975694033	11593.0	0.0	0.0	nan	15.0	75.9
Ne	-149.2559576347	11393.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.0
Na	-183.3140631468	10727.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8
Mg	-221.6389366382	10755.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.0
Al	-252.0184869567	10815.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.6
Si	-299.1574475110	11487.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.5
P	-370.7075903471	11605.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.0
S	-443.3995147853	11291.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.4
Cl	-501.2653978254	11491.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.8
Ar	-566.9418445328	10843.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.5

Table 266: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8765911083	10927.0	8.0	8.0	nan	15.0	72.1
He	-3.9296226894	11065.0	18.0	18.0	nan	15.0	81.6
Li	-10.2369466659	11086.4	51.4	51.4	nan	15.0	86.1
Be	-18.8066345601	11594.4	53.4	53.4	nan	15.0	92.3
B	-30.1233337411	11694.0	25.0	25.0	nan	15.0	81.4
C	-48.4630017451	11114.8	37.8	37.8	nan	15.0	92.7
N	-67.7532004933	9789.0	8.0	8.0	nan	15.0	69.8
O	-94.0233478762	12921.0	24.0	24.0	nan	15.0	88.7
F	-118.6439256781	11633.0	38.0	38.0	nan	15.0	89.3
Ne	-157.6392758099	11439.0	44.0	44.0	nan	15.0	83.9
Na	-184.5386122419	10747.0	18.0	18.0	nan	15.0	77.8
Mg	-228.4925681758	10793.2	36.2	36.2	nan	15.0	73.1
Al	-257.1113484079	10843.0	26.0	26.0	nan	15.0	67.3
Si	-326.5321302653	11512.0	23.0	23.0	nan	15.0	64.0
P	-398.8135801071	11637.2	30.2	30.2	nan	15.0	79.7
S	-449.5717415703	11309.0	16.0	16.0	nan	15.0	82.4
Cl	-507.8604911448	11507.0	14.0	14.0	nan	15.0	81.8
Ar	-576.2309882438	10862.0	17.0	17.0	nan	15.0	78.9

Table 267: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9998918580	30273.8	271.8	271.8	4.6	15.0	282.2
He	-4.1884934189	30079.4	77.4	77.4	2.0	15.0	227.8
Li	-10.2093162710	30109.2	107.2	107.2	2.4	15.0	211.7
Be	-19.0791805010	30039.6	37.6	37.6	1.2	15.0	221.7
B	-31.7360661993	30060.8	58.8	58.8	1.8	15.0	244.5
C	-48.5265801556	30077.4	75.4	75.4	1.8	15.0	217.5
N	-69.4384791184	30057.4	55.4	55.4	1.8	15.0	243.1
O	-94.0233474756	30268.0	266.0	266.0	9.2	15.0	226.9
F	-122.9367761948	30064.8	62.8	62.8	1.8	15.0	246.7
Ne	-156.3589926404	30078.2	76.2	76.2	2.4	15.0	227.5
Na	-194.4505153014	30039.6	37.6	37.6	1.4	15.0	220.5
Mg	-231.2482996459	30061.8	59.8	59.8	1.8	15.0	237.4
Al	-287.2813948842	30051.2	49.2	49.2	1.6	15.0	189.5
Si	-338.1482086040	30082.6	80.6	80.6	2.4	15.0	172.6
P	-396.2770182566	30072.8	70.8	70.8	2.2	15.0	229.7
S	-449.5717409678	30079.2	77.2	77.2	2.6	15.0	216.0
Cl	-531.5947634116	30070.6	68.6	68.6	2.4	15.0	221.8
Ar	-602.9076146218	30055.8	53.8	53.8	2.0	15.0	202.9

Table 268: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8671637838	107.0	107.0	107.0	nan	15.0	31.0
He	-3.9593554858	62.0	62.0	62.0	nan	15.0	16.8
Li	-9.5033792518	37.0	37.0	37.0	nan	15.0	16.9
Be	-18.5325813338	105.0	105.0	105.0	nan	15.0	31.7
B	-31.9788952685	48.0	48.0	48.0	nan	15.0	13.8
C	-48.9891326937	32.0	32.0	32.0	nan	15.0	3.9
N	-66.6667162796	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	4.6
O	-85.2859523853	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	6.0
F	-119.2644926518	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	3.0
Ne	-156.3589931560	27.0	27.0	27.0	nan	15.0	8.5
Na	-187.8302556697	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	17.3
Mg	-223.2414452924	41.0	41.0	41.0	nan	15.0	11.1
Al	-282.3066228761	32.0	32.0	32.0	nan	15.0	2.4
Si	-321.5581843725	29.0	29.0	29.0	nan	15.0	2.3
P	-382.0998139904	25.0	25.0	25.0	nan	15.0	7.0
S	-442.9126179946	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	3.7
Cl	-513.5459113733	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	5.7
Ar	-589.0822254929	17.0	17.0	17.0	nan	15.0	2.2

Table 269: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9864114190	1118.0	1118.0	1118.0	20.0	15.0	16.9
He	-4.2065324716	1144.0	1144.0	1144.0	20.0	15.0	12.7
Li	-10.3606933904	864.0	864.0	864.0	19.0	15.0	11.2
Be	-19.6736541379	655.0	655.0	655.0	19.0	15.0	7.6
B	-31.9788952685	724.0	724.0	724.0	18.0	15.0	8.2
C	-48.2704277795	878.0	878.0	878.0	17.0	15.0	8.6
N	-68.9969954844	678.0	678.0	678.0	16.0	15.0	7.0
O	-94.0233478762	557.0	557.0	557.0	16.0	15.0	4.9
F	-122.1269151026	548.0	548.0	548.0	16.0	15.0	6.3
Ne	-156.3589931560	657.0	657.0	657.0	17.0	15.0	5.4
Na	-196.0076544106	697.0	697.0	697.0	17.0	15.0	5.9
Mg	-239.1766372693	585.0	585.0	585.0	14.0	15.0	6.1
Al	-287.2813955551	560.0	560.0	560.0	15.0	15.0	8.1
Si	-340.4518793852	575.0	575.0	575.0	16.0	15.0	5.9
P	-398.8135801071	558.0	558.0	558.0	16.0	15.0	6.0
S	-462.4883071751	475.0	475.0	475.0	13.0	15.0	5.3
Cl	-520.7554756539	496.0	496.0	496.0	14.0	15.0	4.7
Ar	-606.2486474058	534.0	534.0	534.0	14.0	15.0	5.8

Table 270: trust region repeats

11.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.9511337496	2037.0	2037.0	2037.0	20.8	15.0	475.8
cch second order	-0.7883221693	300.0	151.0	151.0	nan	15.0	7.3
diff evo	-0.9928365994	97699.6	0.0	0.0	nan	15.0	705.0
direct	-0.8587098249	10917.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.5
direct with trim	-0.8765911083	10927.0	8.0	8.0	nan	15.0	72.1
dual anneal	-0.9998918580	30273.8	271.8	271.8	4.6	15.0	282.2
trust region	-0.8671637838	107.0	107.0	107.0	nan	15.0	31.0
trust region repeats	-0.9864114190	1118.0	1118.0	1118.0	20.0	15.0	16.9

Table 271: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-4.0224123975	1848.2	1848.2	1848.2	19.4	15.0	352.3
cch second order	-3.6490413681	210.0	109.0	109.0	nan	15.0	6.7
diff evo	-4.2350877727	98425.0	0.0	0.0	nan	15.0	765.3
direct	-3.7912478230	11045.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.7
direct with trim	-3.9296226894	11065.0	18.0	18.0	nan	15.0	81.6
dual anneal	-4.1884934189	30079.4	77.4	77.4	2.0	15.0	227.8
trust region	-3.9593554858	62.0	62.0	62.0	nan	15.0	16.8
trust region repeats	-4.2065324716	1144.0	1144.0	1144.0	20.0	15.0	12.7

Table 272: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-9.9530311143	1808.6	1808.6	1808.6	16.4	15.0	392.2
cch second order	-9.3726641817	205.0	110.0	110.0	nan	15.0	3.8
diff evo	-10.2815517614	108283.0	0.0	0.0	nan	15.0	729.6
direct	-9.6433414052	11033.0	0.0	0.0	nan	15.0	78.9
direct with trim	-10.2369466659	11086.4	51.4	51.4	nan	15.0	86.1
dual anneal	-10.2093162710	30109.2	107.2	107.2	2.4	15.0	211.7
trust region	-9.5033792518	37.0	37.0	37.0	nan	15.0	16.9
trust region repeats	-10.3606933904	864.0	864.0	864.0	19.0	15.0	11.2

Table 273: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.0679276907	1373.8	1373.8	1373.8	7.0	15.0	245.2
cch second order	-14.5463968308	496.0	262.0	262.0	nan	15.0	6.7
diff evo	-19.6736497607	87246.4	0.0	0.0	nan	15.0	617.2
direct	-17.4489041676	11539.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.9
direct with trim	-18.8066345601	11594.4	53.4	53.4	nan	15.0	92.3
dual anneal	-19.0791805010	30039.6	37.6	37.6	1.2	15.0	221.7
trust region	-18.5325813338	105.0	105.0	105.0	nan	15.0	31.7
trust region repeats	-19.6736541379	655.0	655.0	655.0	19.0	15.0	7.6

Table 274: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-32.2802916253	1480.8	1480.8	1480.8	1.0	15.0	273.0
cch second order	-29.1704180778	211.0	109.0	109.0	nan	15.0	3.8
diff evo	-32.5244908036	67728.8	0.0	0.0	nan	15.0	440.2
direct	-28.7292258413	11667.0	0.0	0.0	nan	15.0	77.1
direct with trim	-30.1233337411	11694.0	25.0	25.0	nan	15.0	81.4
dual anneal	-31.7360661993	30060.8	58.8	58.8	1.8	15.0	244.5
trust region	-31.9788952685	48.0	48.0	48.0	nan	15.0	13.8
trust region repeats	-31.9788952685	724.0	724.0	724.0	18.0	15.0	8.2

Table 275: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-47.6570061004	1288.2	1288.2	1288.2	1.2	15.0	203.9
cch second order	-44.0908851332	273.0	140.0	140.0	nan	15.0	4.4
diff evo	-49.2512641477	115642.4	0.0	0.0	nan	15.0	1001.7
direct	-45.3759407477	11075.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.4
direct with trim	-48.4630017451	11114.8	37.8	37.8	nan	15.0	92.7
dual anneal	-48.5265801556	30077.4	75.4	75.4	1.8	15.0	217.5
trust region	-48.9891326937	32.0	32.0	32.0	nan	15.0	3.9
trust region repeats	-48.2704277795	878.0	878.0	878.0	17.0	15.0	8.6

Table 276: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-68.0690487930	1335.6	1335.6	1335.6	1.0	15.0	283.9
cch second order	-66.0704745847	264.0	136.0	136.0	nan	15.0	6.5
diff evo	-69.8847544244	70760.6	0.0	0.0	nan	15.0	501.2
direct	-67.1408959354	9779.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.0
direct with trim	-67.7532004933	9789.0	8.0	8.0	nan	15.0	69.8
dual anneal	-69.4384791184	30057.4	55.4	55.4	1.8	15.0	243.1
trust region	-66.6667162796	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	4.6
trust region repeats	-68.9969954844	678.0	678.0	678.0	16.0	15.0	7.0

Table 277: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-89.9025774111	1375.8	1375.8	1375.8	1.2	15.0	254.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-92.4770180226	50207.6	0.0	0.0	nan	15.0	382.8
direct	-89.7993000813	12895.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.4
direct with trim	-94.0233478762	12921.0	24.0	24.0	nan	15.0	88.7
dual anneal	-94.0233474756	30268.0	266.0	266.0	9.2	15.0	226.9
trust region	-85.2859523853	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	6.0
trust region repeats	-94.0233478762	557.0	557.0	557.0	16.0	15.0	4.9

Table 278: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-122.9367766518	1475.6	1475.6	1475.6	1.2	15.0	310.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-122.0498797513	38161.0	0.0	0.0	nan	15.0	300.1
direct	-112.9975694033	11593.0	0.0	0.0	nan	15.0	75.9
direct with trim	-118.6439256781	11633.0	38.0	38.0	nan	15.0	89.3
dual anneal	-122.9367761948	30064.8	62.8	62.8	1.8	15.0	246.7
trust region	-119.2644926518	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	3.0
trust region repeats	-122.1269151026	548.0	548.0	548.0	16.0	15.0	6.3

Table 279: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-155.2327555420	1366.0	1366.0	1366.0	1.0	15.0	242.1
cch second order	-142.4355794324	217.0	112.0	112.0	nan	15.0	5.5
diff evo	-157.6392493798	34038.0	0.0	0.0	nan	15.0	272.1
direct	-149.2559576347	11393.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.0
direct with trim	-157.6392758099	11439.0	44.0	44.0	nan	15.0	83.9
dual anneal	-156.3589926404	30078.2	76.2	76.2	2.4	15.0	227.5
trust region	-156.3589931560	27.0	27.0	27.0	nan	15.0	8.5
trust region repeats	-156.3589931560	657.0	657.0	657.0	17.0	15.0	5.4

Table 280: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-190.6802464451	1521.8	1521.8	1521.8	1.0	15.0	259.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-196.0062912097	25779.6	0.0	0.0	nan	15.0	212.7
direct	-183.3140631468	10727.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8
direct with trim	-184.5386122419	10747.0	18.0	18.0	nan	15.0	77.8
dual anneal	-194.4505153014	30039.6	37.6	37.6	1.4	15.0	220.5
trust region	-187.8302556697	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	17.3
trust region repeats	-196.0076544106	697.0	697.0	697.0	17.0	15.0	5.9

Table 281: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-230.6528010944	1443.2	1443.2	1443.2	1.4	15.0	268.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-234.3961616986	22456.4	0.0	0.0	nan	15.0	176.2
direct	-221.6389366382	10755.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.0
direct with trim	-228.4925681758	10793.2	36.2	36.2	nan	15.0	73.1
dual anneal	-231.2482996459	30061.8	59.8	59.8	1.8	15.0	237.4
trust region	-223.2414452924	41.0	41.0	41.0	nan	15.0	11.1
trust region repeats	-239.1766372693	585.0	585.0	585.0	14.0	15.0	6.1

Table 282: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-282.3066228761	1445.2	1445.2	1445.2	1.2	15.0	263.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-287.2806666545	37503.8	0.0	0.0	nan	15.0	273.0
direct	-252.0184869567	10815.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.6
direct with trim	-257.1113484079	10843.0	26.0	26.0	nan	15.0	67.3
dual anneal	-287.2813948842	30051.2	49.2	49.2	1.6	15.0	189.5
trust region	-282.3066228761	32.0	32.0	32.0	nan	15.0	2.4
trust region repeats	-287.2813955551	560.0	560.0	560.0	15.0	15.0	8.1

Table 283: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-331.8340234590	1417.8	1417.8	1417.8	1.0	15.0	241.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-334.1776088956	34162.0	0.0	0.0	nan	15.0	284.5
direct	-299.1574475110	11487.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.5
direct with trim	-326.5321302653	11512.0	23.0	23.0	nan	15.0	64.0
dual anneal	-338.1482086040	30082.6	80.6	80.6	2.4	15.0	172.6
trust region	-321.5581843725	29.0	29.0	29.0	nan	15.0	2.3
trust region repeats	-340.4518793852	575.0	575.0	575.0	16.0	15.0	5.9

Table 284: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-391.3193729876	1582.2	1582.2	1582.2	1.0	15.0	265.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-391.7539205785	21321.8	0.0	0.0	nan	15.0	163.4
direct	-370.7075903471	11605.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.0
direct with trim	-398.8135801071	11637.2	30.2	30.2	nan	15.0	79.7
dual anneal	-396.2770182566	30072.8	70.8	70.8	2.2	15.0	229.7
trust region	-382.0998139904	25.0	25.0	25.0	nan	15.0	7.0
trust region repeats	-398.8135801071	558.0	558.0	558.0	16.0	15.0	6.0

Table 285: P

133

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-446.7215436434	1365.8	1365.8	1365.8	1.0	15.0	251.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-459.7105969600	31694.4	0.0	0.0	nan	15.0	233.6
direct	-443.3995147853	11291.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.4
direct with trim	-449.5717415703	11309.0	16.0	16.0	nan	15.0	82.4
dual anneal	-449.5717409678	30079.2	77.2	77.2	2.6	15.0	216.0
trust region	-442.9126179946	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	3.7
trust region repeats	-462.4883071751	475.0	475.0	475.0	13.0	15.0	5.3

Table 286: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-520.7554756539	1405.0	1405.0	1405.0	1.0	15.0	275.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-522.9121552365	28706.0	0.0	0.0	nan	15.0	223.2
direct	-501.2653978254	11491.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.8
direct with trim	-507.8604911448	11507.0	14.0	14.0	nan	15.0	81.8
dual anneal	-531.5947634116	30070.6	68.6	68.6	2.4	15.0	221.8
trust region	-513.5459113733	33.0	33.0	33.0	nan	15.0	5.7
trust region repeats	-520.7554756539	496.0	496.0	496.0	14.0	15.0	4.7

Table 287: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-596.7398590992	1572.2	1572.2	1572.2	1.0	15.0	220.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-606.2484977013	38923.6	0.0	0.0	nan	15.0	270.1
direct	-566.9418445328	10843.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.5
direct with trim	-576.2309882438	10862.0	17.0	17.0	nan	15.0	78.9
dual anneal	-602.9076146218	30055.8	53.8	53.8	2.0	15.0	202.9
trust region	-589.0822254929	17.0	17.0	17.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-606.2486474058	534.0	534.0	534.0	14.0	15.0	5.8

Table 288: Ar

11.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	dual anneal	-0.9998918580
He	diff evo	-4.2350877727
Li	trust region repeats	-10.3606933904
Be	trust region repeats	-19.6736541379
B	diff evo	-32.5244908036
C	diff evo	-49.2512641477
N	diff evo	-69.8847544244
O	direct with trim	-94.0233478762
F	basin hopping	-122.9367766518
Ne	direct with trim	-157.6392758099
Na	trust region repeats	-196.0076544106
Mg	trust region repeats	-239.1766372693
Al	trust region repeats	-287.2813955551
Si	trust region repeats	-340.4518793852
P	trust region repeats	-398.8135801071
S	trust region repeats	-462.4883071751
Cl	dual anneal	-531.5947634116
Ar	trust region repeats	-606.2486474058

Table 289: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	40.1	40.1	40.1	nan	-193.5546521862	10.4
cch second order	272.0	141.1	141.1	nan	-38.7654727223	5.6
trust region repeats	683.5	683.5	683.5	16.5	-200.4559135027	7.6
basin hopping	1507.9	1507.9	1507.9	4.4	-196.7268281297	282.2
direct	11219.4	0.0	0.0	nan	-186.8602430338	69.2
direct with trim	11248.6	27.1	27.1	nan	-193.3137411402	80.2
dual anneal	30090.1	88.1	88.1	2.5	-199.3875933070	224.4
diff evo	56041.1	0.0	0.0	nan	-199.5275378532	419.6

Table 290: Average (all systems)

12 15s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

12.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 291: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212584984	1245.0	1245.0	1245.0	1.0	15.0	302.6
He	-3.0898625505	1317.6	1317.6	1317.6	1.0	15.0	290.6
Li	-7.9883310793	1266.8	1266.8	1266.8	1.0	15.0	274.8
Be	-15.7292021041	1327.0	1327.0	1327.0	1.0	15.0	279.5
B	-26.6434276360	1372.8	1372.8	1372.8	1.0	15.0	300.6
C	-41.0121208564	1340.4	1340.4	1340.4	1.2	15.0	365.1
N	-59.0821047187	1351.6	1351.6	1351.6	1.0	15.0	356.1
O	-81.0748629760	1395.2	1395.2	1395.2	1.2	15.0	339.4
F	-107.1922348176	1387.6	1387.6	1387.6	1.0	15.0	320.3
Ne	-137.6202939967	1448.8	1448.8	1448.8	1.0	15.0	355.2
Na	-172.5321263884	1463.0	1463.0	1463.0	1.2	15.0	369.3
Mg	-212.0898961234	1505.2	1505.2	1505.2	1.0	15.0	244.5
Al	-256.4464296430	1485.4	1485.4	1485.4	1.0	15.0	404.6
Si	-305.7464603254	1461.8	1461.8	1461.8	1.2	15.0	325.3
P	-360.1276265079	1530.8	1530.8	1530.8	1.0	15.0	324.3
S	-419.7212855972	1532.0	1532.0	1532.0	1.0	15.0	382.1
Cl	-484.6531879478	1492.4	1492.4	1492.4	1.0	15.0	252.2
Ar	-555.0440417646	1525.4	1525.4	1525.4	1.0	15.0	369.0

Table 292: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6109045598	117.0	67.0	67.0	nan	15.0	2.7
He	-3.0898624695	148.0	84.0	84.0	nan	15.0	5.0
Li	-7.9883310979	164.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.9
Be	-15.7292021487	157.0	88.0	88.0	nan	15.0	3.1
B	-26.6434276329	167.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
C	-41.0121208217	159.0	89.0	89.0	nan	15.0	3.0
N	-59.0821047085	159.0	90.0	90.0	nan	15.0	3.2
O	-81.0748630089	155.0	89.0	89.0	nan	15.0	5.3
F	-107.1922347239	168.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
Ne	-137.6202939609	197.0	105.0	105.0	nan	15.0	5.6
Na	-172.5321264730	174.0	96.0	96.0	nan	15.0	4.6
Mg	-212.0898961064	180.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.4
Al	-256.4464296576	206.0	112.0	112.0	nan	15.0	3.5
Si	-305.7464603376	161.0	90.0	90.0	nan	15.0	3.1
P	-360.1276265853	177.0	95.0	95.0	nan	15.0	5.3
S	-419.7212855129	204.0	109.0	109.0	nan	15.0	3.4
Cl	-484.6531879187	193.0	103.0	103.0	nan	15.0	3.4
Ar	-555.0440417546	170.0	95.0	95.0	nan	15.0	4.7

Table 293: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212583289	10304.4	0.0	0.0	nan	15.0	54.5
He	-3.0898622863	9920.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.7
Li	-7.9883297021	10434.6	0.0	0.0	nan	15.0	50.2
Be	-15.7291997746	10062.6	0.0	0.0	nan	15.0	61.1
B	-26.6434252960	10657.8	0.0	0.0	nan	15.0	51.8
C	-41.0121152881	10794.2	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
N	-59.0820990260	10912.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.1
O	-81.0748563191	10974.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.9
F	-107.1922192900	10986.4	0.0	0.0	nan	15.0	59.9
Ne	-137.6202787608	11587.8	0.0	0.0	nan	15.0	69.5
Na	-172.5321066872	11749.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.8
Mg	-212.0898546611	12524.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.8
Al	-256.4463956868	12505.4	0.0	0.0	nan	15.0	59.7
Si	-305.7464103073	11339.8	0.0	0.0	nan	15.0	62.6
P	-360.1275535629	14408.8	0.0	0.0	nan	15.0	82.1
S	-419.7212236154	12871.2	0.0	0.0	nan	15.0	60.4
Cl	-484.6531157570	13757.8	0.0	0.0	nan	15.0	71.8
Ar	-555.0439854967	13069.6	0.0	0.0	nan	15.0	57.9

Table 294: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6204197029	10759.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.8
He	-3.0664670999	12225.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.6
Li	-7.9541485417	11101.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8
Be	-15.6778519031	11353.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.2
B	-26.6270513197	14431.0	0.0	0.0	nan	15.0	83.8
C	-40.9254538423	11227.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.4
N	-58.9849402002	11585.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.2
O	-80.4368004687	10691.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.0
F	-107.0368939180	15073.0	0.0	0.0	nan	15.0	94.0
Ne	-136.3320625774	11379.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.8
Na	-170.1993998370	11477.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.4
Mg	-209.3652191709	11631.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.4
Al	-253.7479614738	11009.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.6
Si	-301.1608428754	11355.0	0.0	0.0	nan	15.0	63.7
P	-353.7223868099	11745.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.2
S	-415.8551769232	11779.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.3
Cl	-483.0448213854	15097.0	0.0	0.0	nan	15.0	87.8
Ar	-554.3513059879	15027.0	0.0	0.0	nan	15.0	87.2

Table 295: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212584984	10768.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.9
He	-3.0898625505	12234.0	7.0	7.0	nan	15.0	71.9
Li	-7.9883310793	11111.0	8.0	8.0	nan	15.0	55.5
Be	-15.7292021041	11363.0	8.0	8.0	nan	15.0	72.2
B	-26.6434276360	14440.0	7.0	7.0	nan	15.0	88.5
C	-41.0121208564	11236.0	7.0	7.0	nan	15.0	71.9
N	-59.0821047187	11594.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.7
O	-81.0748629760	10700.0	7.0	7.0	nan	15.0	56.6
F	-107.1922348176	15082.0	7.0	7.0	nan	15.0	87.0
Ne	-137.6202939967	11388.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.0
Na	-172.5321263884	11486.0	7.0	7.0	nan	15.0	57.9
Mg	-212.0898961234	11644.0	11.0	11.0	nan	15.0	57.9
Al	-256.4464296430	11017.0	6.0	6.0	nan	15.0	65.1
Si	-305.7464603254	11364.0	7.0	7.0	nan	15.0	58.5
P	-360.1276265079	11756.0	9.0	9.0	nan	15.0	62.7
S	-419.7212855972	11792.0	11.0	11.0	nan	15.0	63.4
Cl	-484.6531879478	15106.0	7.0	7.0	nan	15.0	88.8
Ar	-555.0440417646	15038.0	9.0	9.0	nan	15.0	88.2

Table 296: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212584984	30012.0	10.0	10.0	1.0	15.0	149.0
He	-3.0898625505	30011.8	9.8	9.8	1.0	15.0	147.8
Li	-7.9883310793	30011.0	9.0	9.0	1.0	15.0	150.2
Be	-15.7292021040	30013.2	11.2	11.2	1.0	15.0	162.0
B	-26.6434276359	30014.6	12.6	12.6	1.0	15.0	137.3
C	-41.0121208563	30015.6	13.6	13.6	1.0	15.0	147.8
N	-59.0821047184	30011.8	9.8	9.8	1.0	15.0	158.9
O	-81.0748629756	30016.2	14.2	14.2	1.0	15.0	141.2
F	-107.1922348170	30017.4	15.4	15.4	1.0	15.0	149.6
Ne	-137.6202939960	30019.0	17.0	17.0	1.0	15.0	178.4
Na	-172.5321263874	30021.6	19.6	19.6	1.0	15.0	151.9
Mg	-212.0898961221	30016.2	14.2	14.2	1.0	15.0	155.6
Al	-256.4464296414	30016.8	14.8	14.8	1.0	15.0	179.1
Si	-305.7464603234	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	159.0
P	-360.1276265054	30022.6	20.6	20.6	1.0	15.0	151.3
S	-419.7212855941	30024.6	22.6	22.6	1.0	15.0	141.6
Cl	-484.6531879442	30026.2	24.2	24.2	1.0	15.0	154.8
Ar	-555.0440417603	30029.2	27.2	27.2	1.0	15.0	168.0

Table 297: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212584984	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	5.6
He	-3.0898625505	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
Li	-7.9883310793	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.0
Be	-15.7292021041	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.9
B	-26.6434276360	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.9
C	-41.0121208564	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	1.9
N	-59.0821047187	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
O	-81.0748629760	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
F	-107.1922348176	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.2
Ne	-137.6202939967	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
Na	-172.5321263884	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.9
Mg	-212.0898961234	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
Al	-256.4464296430	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.4
Si	-305.7464603254	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
P	-360.1276265079	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.0
S	-419.7212855972	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.1
Cl	-484.6531879478	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
Ar	-555.0440417646	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.4

Table 298: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6212584984	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	3.0
He	-3.0898625505	257.0	257.0	257.0	1.0	15.0	3.4
Li	-7.9883310793	274.0	274.0	274.0	1.0	15.0	2.8
Be	-15.7292021041	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	2.8
B	-26.6434276360	268.0	268.0	268.0	1.0	15.0	3.0
C	-41.0121208564	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.7
N	-59.0821047187	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.8
O	-81.0748629760	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	2.7
F	-107.1922348176	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	2.9
Ne	-137.6202939967	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	3.4
Na	-172.5321263884	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.7
Mg	-212.0898961234	282.0	282.0	282.0	1.0	15.0	2.8
Al	-256.4464296430	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	3.1
Si	-305.7464603254	284.0	284.0	284.0	1.0	15.0	3.0
P	-360.1276265079	286.0	286.0	286.0	1.0	15.0	3.1
S	-419.7212855972	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.7
Cl	-484.6531879478	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.9
Ar	-555.0440417646	292.0	292.0	292.0	1.0	15.0	3.0

Table 299: trust region repeats

12.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6212584984	1245.0	1245.0	1245.0	1.0	15.0	302.6
cch second order	-0.6109045598	117.0	67.0	67.0	nan	15.0	2.7
diff evo	-0.6212583289	10304.4	0.0	0.0	nan	15.0	54.5
direct	-0.6204197029	10759.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.8
direct with trim	-0.6212584984	10768.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.9
dual anneal	-0.6212584984	30012.0	10.0	10.0	1.0	15.0	149.0
trust region	-0.6212584984	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	5.6
trust region repeats	-0.6212584984	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	3.0

Table 300: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0898625505	1317.6	1317.6	1317.6	1.0	15.0	290.6
cch second order	-3.0898624695	148.0	84.0	84.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-3.0898622863	9920.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.7
direct	-3.0664670999	12225.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.6
direct with trim	-3.0898625505	12234.0	7.0	7.0	nan	15.0	71.9
dual anneal	-3.0898625505	30011.8	9.8	9.8	1.0	15.0	147.8
trust region	-3.0898625505	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-3.0898625505	257.0	257.0	257.0	1.0	15.0	3.4

Table 301: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9883310793	1266.8	1266.8	1266.8	1.0	15.0	274.8
cch second order	-7.9883310979	164.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.9
diff evo	-7.9883297021	10434.6	0.0	0.0	nan	15.0	50.2
direct	-7.9541485417	11101.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8
direct with trim	-7.9883310793	11111.0	8.0	8.0	nan	15.0	55.5
dual anneal	-7.9883310793	30011.0	9.0	9.0	1.0	15.0	150.2
trust region	-7.9883310793	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-7.9883310793	274.0	274.0	274.0	1.0	15.0	2.8

Table 302: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7292021041	1327.0	1327.0	1327.0	1.0	15.0	279.5
cch second order	-15.7292021487	157.0	88.0	88.0	nan	15.0	3.1
diff evo	-15.7291997746	10062.6	0.0	0.0	nan	15.0	61.1
direct	-15.6778519031	11353.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.2
direct with trim	-15.7292021041	11363.0	8.0	8.0	nan	15.0	72.2
dual anneal	-15.7292021040	30013.2	11.2	11.2	1.0	15.0	162.0
trust region	-15.7292021041	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-15.7292021041	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	2.8

Table 303: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6434276360	1372.8	1372.8	1372.8	1.0	15.0	300.6
cch second order	-26.6434276329	167.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-26.6434252960	10657.8	0.0	0.0	nan	15.0	51.8
direct	-26.6270513197	14431.0	0.0	0.0	nan	15.0	83.8
direct with trim	-26.6434276360	14440.0	7.0	7.0	nan	15.0	88.5
dual anneal	-26.6434276359	30014.6	12.6	12.6	1.0	15.0	137.3
trust region	-26.6434276360	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-26.6434276360	268.0	268.0	268.0	1.0	15.0	3.0

Table 304: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0121208564	1340.4	1340.4	1340.4	1.2	15.0	365.1
cch second order	-41.0121208217	159.0	89.0	89.0	nan	15.0	3.0
diff evo	-41.0121152881	10794.2	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
direct	-40.9254538423	11227.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.4
direct with trim	-41.0121208564	11236.0	7.0	7.0	nan	15.0	71.9
dual anneal	-41.0121208563	30015.6	13.6	13.6	1.0	15.0	147.8
trust region	-41.0121208564	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-41.0121208564	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.7

Table 305: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0821047187	1351.6	1351.6	1351.6	1.0	15.0	356.1
cch second order	-59.0821047085	159.0	90.0	90.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-59.0820990260	10912.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.1
direct	-58.9849402002	11585.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.2
direct with trim	-59.0821047187	11594.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.7
dual anneal	-59.0821047184	30011.8	9.8	9.8	1.0	15.0	158.9
trust region	-59.0821047187	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-59.0821047187	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.8

Table 306: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0748629760	1395.2	1395.2	1395.2	1.2	15.0	339.4
cch second order	-81.0748630089	155.0	89.0	89.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-81.0748563191	10974.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.9
direct	-80.4368004687	10691.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.0
direct with trim	-81.0748629760	10700.0	7.0	7.0	nan	15.0	56.6
dual anneal	-81.0748629756	30016.2	14.2	14.2	1.0	15.0	141.2
trust region	-81.0748629760	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-81.0748629760	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	2.7

Table 307: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1922348176	1387.6	1387.6	1387.6	1.0	15.0	320.3
cch second order	-107.1922347239	168.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-107.1922192900	10986.4	0.0	0.0	nan	15.0	59.9
direct	-107.0368939180	15073.0	0.0	0.0	nan	15.0	94.0
direct with trim	-107.1922348176	15082.0	7.0	7.0	nan	15.0	87.0
dual anneal	-107.1922348170	30017.4	15.4	15.4	1.0	15.0	149.6
trust region	-107.1922348176	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-107.1922348176	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	2.9

Table 308: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6202939967	1448.8	1448.8	1448.8	1.0	15.0	355.2
cch second order	-137.6202939609	197.0	105.0	105.0	nan	15.0	5.6
diff evo	-137.6202787608	11587.8	0.0	0.0	nan	15.0	69.5
direct	-136.3320625774	11379.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.8
direct with trim	-137.6202939967	11388.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.0
dual anneal	-137.6202939960	30019.0	17.0	17.0	1.0	15.0	178.4
trust region	-137.6202939967	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-137.6202939967	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	3.4

Table 309: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.5321263884	1463.0	1463.0	1463.0	1.2	15.0	369.3
cch second order	-172.5321264730	174.0	96.0	96.0	nan	15.0	4.6
diff evo	-172.5321066872	11749.0	0.0	0.0	nan	15.0	74.8
direct	-170.1993998370	11477.0	0.0	0.0	nan	15.0	66.4
direct with trim	-172.5321263884	11486.0	7.0	7.0	nan	15.0	57.9
dual anneal	-172.5321263874	30021.6	19.6	19.6	1.0	15.0	151.9
trust region	-172.5321263884	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-172.5321263884	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.7

Table 310: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0898961234	1505.2	1505.2	1505.2	1.0	15.0	244.5
cch second order	-212.0898961064	180.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-212.0898546611	12524.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.8
direct	-209.3652191709	11631.0	0.0	0.0	nan	15.0	71.4
direct with trim	-212.0898961234	11644.0	11.0	11.0	nan	15.0	57.9
dual anneal	-212.0898961221	30016.2	14.2	14.2	1.0	15.0	155.6
trust region	-212.0898961234	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-212.0898961234	282.0	282.0	282.0	1.0	15.0	2.8

Table 311: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4464296430	1485.4	1485.4	1485.4	1.0	15.0	404.6
cch second order	-256.4464296576	206.0	112.0	112.0	nan	15.0	3.5
diff evo	-256.4463956868	12505.4	0.0	0.0	nan	15.0	59.7
direct	-253.7479614738	11009.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.6
direct with trim	-256.4464296430	11017.0	6.0	6.0	nan	15.0	65.1
dual anneal	-256.4464296414	30016.8	14.8	14.8	1.0	15.0	179.1
trust region	-256.4464296430	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-256.4464296430	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	3.1

Table 312: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7464603254	1461.8	1461.8	1461.8	1.2	15.0	325.3
cch second order	-305.7464603376	161.0	90.0	90.0	nan	15.0	3.1
diff evo	-305.7464103073	11339.8	0.0	0.0	nan	15.0	62.6
direct	-301.1608428754	11355.0	0.0	0.0	nan	15.0	63.7
direct with trim	-305.7464603254	11364.0	7.0	7.0	nan	15.0	58.5
dual anneal	-305.7464603234	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	159.0
trust region	-305.7464603254	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-305.7464603254	284.0	284.0	284.0	1.0	15.0	3.0

Table 313: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1276265079	1530.8	1530.8	1530.8	1.0	15.0	324.3
cch second order	-360.1276265853	177.0	95.0	95.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-360.1275535629	14408.8	0.0	0.0	nan	15.0	82.1
direct	-353.7223868099	11745.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.2
direct with trim	-360.1276265079	11756.0	9.0	9.0	nan	15.0	62.7
dual anneal	-360.1276265054	30022.6	20.6	20.6	1.0	15.0	151.3
trust region	-360.1276265079	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-360.1276265079	286.0	286.0	286.0	1.0	15.0	3.1

Table 314: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7212855972	1532.0	1532.0	1532.0	1.0	15.0	382.1
cch second order	-419.7212855129	204.0	109.0	109.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-419.7212236154	12871.2	0.0	0.0	nan	15.0	60.4
direct	-415.8551769232	11779.0	0.0	0.0	nan	15.0	68.3
direct with trim	-419.7212855972	11792.0	11.0	11.0	nan	15.0	63.4
dual anneal	-419.7212855941	30024.6	22.6	22.6	1.0	15.0	141.6
trust region	-419.7212855972	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-419.7212855972	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.7

Table 315: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6531879478	1492.4	1492.4	1492.4	1.0	15.0	252.2
cch second order	-484.6531879187	193.0	103.0	103.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-484.6531157570	13757.8	0.0	0.0	nan	15.0	71.8
direct	-483.0448213854	15097.0	0.0	0.0	nan	15.0	87.8
direct with trim	-484.6531879478	15106.0	7.0	7.0	nan	15.0	88.8
dual anneal	-484.6531879442	30026.2	24.2	24.2	1.0	15.0	154.8
trust region	-484.6531879478	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-484.6531879478	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.9

Table 316: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0440417646	1525.4	1525.4	1525.4	1.0	15.0	369.0
cch second order	-555.0440417546	170.0	95.0	95.0	nan	15.0	4.7
diff evo	-555.0439854967	13069.6	0.0	0.0	nan	15.0	57.9
direct	-554.3513059879	15027.0	0.0	0.0	nan	15.0	87.2
direct with trim	-555.0440417646	15038.0	9.0	9.0	nan	15.0	88.2
dual anneal	-555.0440417603	30029.2	27.2	27.2	1.0	15.0	168.0
trust region	-555.0440417646	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-555.0440417646	292.0	292.0	292.0	1.0	15.0	3.0

Table 317: Ar

12.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6212584984
He	basin hopping	-3.0898625505
Li	cch second order	-7.9883310979
Be	cch second order	-15.7292021487
B	basin hopping	-26.6434276360
C	basin hopping	-41.0121208564
N	trust region	-59.0821047187
O	cch second order	-81.0748630089
F	basin hopping	-107.1922348176
Ne	basin hopping	-137.6202939967
Na	cch second order	-172.5321264730
Mg	basin hopping	-212.0898961234
Al	cch second order	-256.4464296576
Si	cch second order	-305.7464603376
P	cch second order	-360.1276265853
S	basin hopping	-419.7212855972
Cl	basin hopping	-484.6531879478
Ar	trust region	-555.0440417646

Table 318: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.5	10.5	10.5	nan	-180.3563751962	2.5
cch second order	169.8	93.9	93.9	nan	-180.3557999711	3.9
trust region repeats	278.6	278.6	278.6	1.0	-180.3563751962	2.9
basin hopping	1413.8	1413.8	1413.8	1.0	-180.3563751962	325.3
diff evo	11603.3	0.0	0.0	nan	-180.3563494359	61.1
direct	12163.6	0.0	0.0	nan	-178.8394002243	70.5
direct with trim	12173.3	7.7	7.7	nan	-180.3563751962	68.8
dual anneal	30017.8	15.8	15.8	1.0	-180.3563751950	154.6

Table 319: Average (all systems)

13 15s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

13.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 320: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951519	1254.8	1254.8	1254.8	1.0	15.0	350.3
He	-3.1804868705	1264.8	1264.8	1264.8	1.2	15.0	314.1
Li	-8.1480252257	1309.0	1309.0	1309.0	1.0	15.0	325.4
Be	-15.9677905287	1329.8	1329.8	1329.8	1.0	15.0	339.2
B	-26.9676787131	1356.4	1356.4	1356.4	1.4	15.0	385.1
C	-41.4265246948	1413.0	1413.0	1413.0	1.0	15.0	393.7
N	-59.5893443514	1437.4	1437.4	1437.4	1.0	15.0	380.8
O	-81.6761281933	1580.6	1580.6	1580.6	1.0	15.0	293.9
F	-107.8874455733	1587.2	1587.2	1587.2	1.0	15.0	426.3
Ne	-138.4082671393	1661.0	1661.0	1661.0	1.0	15.0	392.2
Na	-173.4107046361	1642.8	1642.8	1642.8	1.0	15.0	458.1
Mg	-213.0560507138	1710.4	1710.4	1710.4	1.0	15.0	538.0
Al	-257.4963439247	2901.6	2901.6	2901.6	1.0	15.0	675.2
Si	-306.8755991029	1769.6	1769.6	1769.6	1.0	15.0	468.5
P	-361.3307944507	1770.8	1770.8	1770.8	1.0	15.0	516.8
S	-420.9926770686	1780.4	1780.4	1780.4	1.0	15.0	465.0
Cl	-485.9864299834	2280.4	2280.4	2280.4	1.0	15.0	410.7
Ar	-556.4322315030	1853.8	1853.8	1853.8	1.0	15.0	381.7

Table 321: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951824	157.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.6
He	-3.1804868920	170.0	90.0	90.0	nan	15.0	4.5
Li	-8.1480251655	161.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.7
Be	-15.9753244429	282.0	153.0	153.0	nan	15.0	5.7
B	-26.9676787042	184.0	101.0	101.0	nan	15.0	5.3
C	-41.4346435132	241.0	134.0	134.0	nan	15.0	3.8
N	-59.5893442970	178.0	96.0	96.0	nan	15.0	5.0
O	-81.6761282081	145.0	81.0	81.0	nan	15.0	3.0
F	-107.8874455314	178.0	98.0	98.0	nan	15.0	4.8
Ne	-138.4082671553	184.0	102.0	102.0	nan	15.0	4.7
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-213.0560506864	191.0	102.0	102.0	nan	15.0	5.4
Al	-257.4963438685	250.0	126.0	126.0	nan	15.0	3.8
Si	-306.8755991098	266.0	136.0	136.0	nan	15.0	5.8
P	-361.3307944326	251.0	130.0	130.0	nan	15.0	3.7
S	-420.9926771322	296.0	145.0	145.0	nan	15.0	5.7
Cl	-485.9864299689	227.0	120.0	120.0	nan	15.0	3.7
Ar	-556.4322314513	237.0	126.0	126.0	nan	15.0	6.0

Table 322: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570949341	10633.0	0.0	0.0	nan	15.0	69.1
He	-3.1804864259	15047.4	0.0	0.0	nan	15.0	86.5
Li	-8.1480245860	18593.8	0.0	0.0	nan	15.0	117.9
Be	-15.9677892577	19778.0	0.0	0.0	nan	15.0	109.5
B	-26.9676754412	21693.8	0.0	0.0	nan	15.0	114.9
C	-41.4265215444	24911.6	0.0	0.0	nan	15.0	147.2
N	-59.5893373133	21669.0	0.0	0.0	nan	15.0	137.3
O	-81.6761119960	15481.4	0.0	0.0	nan	15.0	88.9
F	-107.8874263842	16771.0	0.0	0.0	nan	15.0	107.2
Ne	-138.4082532837	17924.2	0.0	0.0	nan	15.0	88.0
Na	-173.4106061452	13131.6	0.0	0.0	nan	15.0	82.2
Mg	-213.0552871688	12858.8	0.0	0.0	nan	15.0	83.7
Al	-257.4962976461	14396.4	0.0	0.0	nan	15.0	77.3
Si	-306.8755625887	15332.6	0.0	0.0	nan	15.0	73.7
P	-361.3307556983	14694.0	0.0	0.0	nan	15.0	88.4
S	-420.9925794081	14948.2	0.0	0.0	nan	15.0	79.4
Cl	-485.9863462247	15214.8	0.0	0.0	nan	15.0	88.4
Ar	-556.4321891989	19616.8	0.0	0.0	nan	15.0	104.1

Table 323: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6564831608	10941.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.7
He	-3.1719962110	11467.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.7
Li	-8.1373594263	11719.0	0.0	0.0	nan	15.0	63.3
Be	-15.8955692651	11015.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.8
B	-26.7693545151	14719.0	0.0	0.0	nan	15.0	72.3
C	-41.3419188312	11283.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.8
N	-59.3728985840	10979.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.7
O	-81.3797814411	11615.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.5
F	-106.4261313412	15011.0	0.0	0.0	nan	15.0	73.4
Ne	-137.2545421520	11609.0	0.0	0.0	nan	15.0	56.9
Na	-172.5835950549	11351.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.5
Mg	-211.0546382695	11761.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.1
Al	-254.0492610473	10157.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.9
Si	-305.3138799754	10483.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.3
P	-355.6893993862	11511.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.5
S	-417.2095128458	11853.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.6
Cl	-484.3906141594	15101.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.3
Ar	-548.6755350636	10897.0	0.0	0.0	nan	15.0	46.6

Table 324: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951519	10949.0	6.0	6.0	nan	15.0	55.6
He	-3.1804868705	11476.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.6
Li	-8.1480252257	11727.0	6.0	6.0	nan	15.0	51.1
Be	-15.9677905287	11024.0	7.0	7.0	nan	15.0	56.5
B	-26.9676787131	14730.0	9.0	9.0	nan	15.0	67.9
C	-41.4265246948	11293.0	8.0	8.0	nan	15.0	61.7
N	-59.5893443514	10988.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.0
O	-81.6761281933	11626.0	9.0	9.0	nan	15.0	51.4
F	-107.8874455733	15026.0	13.0	13.0	nan	15.0	76.3
Ne	-138.4082671393	11618.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.3
Na	-173.4107046360	11360.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.1
Mg	-213.0560507138	11776.0	13.0	13.0	nan	15.0	61.9
Al	-257.4963439247	10167.0	8.0	8.0	nan	15.0	47.4
Si	-306.8755991029	10494.0	9.0	9.0	nan	15.0	50.2
P	-361.3307944507	11524.0	11.0	11.0	nan	15.0	60.2
S	-420.9926770686	11869.0	14.0	14.0	nan	15.0	52.5
Cl	-485.9864299834	15111.0	8.0	8.0	nan	15.0	71.7
Ar	-556.4322315030	10908.0	9.0	9.0	nan	15.0	44.4

Table 325: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951519	30012.0	10.0	10.0	1.0	15.0	142.5
He	-3.1804868705	30013.0	11.0	11.0	1.0	15.0	161.1
Li	-8.1480252257	30012.2	10.2	10.2	1.0	15.0	166.0
Be	-15.9677905287	30014.2	12.2	12.2	1.0	15.0	182.4
B	-26.9676787130	30017.0	15.0	15.0	1.0	15.0	158.6
C	-41.4265246947	30019.2	17.2	17.2	1.0	15.0	170.0
N	-59.5893443511	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	150.9
O	-81.6761281929	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	174.1
F	-107.8874455728	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	144.5
Ne	-138.4082671386	30030.2	28.2	28.2	1.0	15.0	179.6
Na	-173.4107046351	30030.4	28.4	28.4	1.0	15.0	142.0
Mg	-213.0560507125	30022.2	20.2	20.2	1.0	15.0	161.2
Al	-257.4963439231	30221.6	219.6	219.6	1.2	15.0	284.1
Si	-306.8755991009	30040.0	38.0	38.0	1.4	15.0	176.8
P	-361.3307944482	30019.4	17.4	17.4	1.4	15.0	147.7
S	-420.9926770655	30029.0	27.0	27.0	1.0	15.0	161.8
Cl	-485.9864299797	30022.8	20.8	20.8	1.2	15.0	183.7
Ar	-556.4322314987	30023.4	21.4	21.4	1.0	15.0	151.9

Table 326: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951519	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
He	-3.1804868705	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.1
Li	-8.1480252257	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.5
Be	-15.9677905287	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
B	-26.9676787131	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	1.8
C	-41.4265246948	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	6.0
N	-59.5893443514	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
O	-81.6761281933	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
F	-107.8874455733	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.0
Ne	-138.4082671393	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	3.5
Na	-173.4107046361	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.1
Mg	-213.0560507138	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	2.1
Al	-257.4963439247	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	2.2
Si	-306.8755991029	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.3
P	-361.3307944507	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.2
S	-420.9926770686	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	2.9
Cl	-485.9864299834	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.1
Ar	-556.4322315030	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.9

Table 327: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570951519	213.0	213.0	213.0	1.0	15.0	3.3
He	-3.1804868705	231.0	231.0	231.0	1.0	15.0	3.0
Li	-8.1480252257	248.0	248.0	248.0	1.0	15.0	3.3
Be	-15.9677905287	255.0	255.0	255.0	1.0	15.0	3.3
B	-26.9676787131	258.0	258.0	258.0	1.0	15.0	3.0
C	-41.4265246948	265.0	265.0	265.0	1.0	15.0	3.0
N	-59.5893443514	269.0	269.0	269.0	1.0	15.0	2.9
O	-81.6761281933	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	3.2
F	-107.8874455733	276.0	276.0	276.0	1.0	15.0	2.8
Ne	-138.4082671393	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	3.0
Na	-173.4107046361	282.0	282.0	282.0	1.0	15.0	3.5
Mg	-213.0560507138	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	2.8
Al	-257.4963439247	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	2.6
Si	-306.8755991029	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	2.8
P	-361.3307944507	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	2.7
S	-420.9926770686	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.7
Cl	-485.9864299834	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	3.8
Ar	-556.4322315030	292.0	292.0	292.0	1.0	15.0	3.2

Table 328: trust region repeats

13.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6570951519	1254.8	1254.8	1254.8	1.0	15.0	350.3
cch second order	-0.6570951824	157.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.6
diff evo	-0.6570949341	10633.0	0.0	0.0	nan	15.0	69.1
direct	-0.6564831608	10941.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.7
direct with trim	-0.6570951519	10949.0	6.0	6.0	nan	15.0	55.6
dual anneal	-0.6570951519	30012.0	10.0	10.0	1.0	15.0	142.5
trust region	-0.6570951519	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-0.6570951519	213.0	213.0	213.0	1.0	15.0	3.3

Table 329: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1804868705	1264.8	1264.8	1264.8	1.2	15.0	314.1
cch second order	-3.1804868920	170.0	90.0	90.0	nan	15.0	4.5
diff evo	-3.1804864259	15047.4	0.0	0.0	nan	15.0	86.5
direct	-3.1719962110	11467.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.7
direct with trim	-3.1804868705	11476.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.6
dual anneal	-3.1804868705	30013.0	11.0	11.0	1.0	15.0	161.1
trust region	-3.1804868705	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-3.1804868705	231.0	231.0	231.0	1.0	15.0	3.0

Table 330: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1480252257	1309.0	1309.0	1309.0	1.0	15.0	325.4
cch second order	-8.1480251655	161.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.7
diff evo	-8.1480245860	18593.8	0.0	0.0	nan	15.0	117.9
direct	-8.1373594263	11719.0	0.0	0.0	nan	15.0	63.3
direct with trim	-8.1480252257	11727.0	6.0	6.0	nan	15.0	51.1
dual anneal	-8.1480252257	30012.2	10.2	10.2	1.0	15.0	166.0
trust region	-8.1480252257	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.5
trust region repeats	-8.1480252257	248.0	248.0	248.0	1.0	15.0	3.3

Table 331: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9677905287	1329.8	1329.8	1329.8	1.0	15.0	339.2
cch second order	-15.9753244429	282.0	153.0	153.0	nan	15.0	5.7
diff evo	-15.9677892577	19778.0	0.0	0.0	nan	15.0	109.5
direct	-15.8955692651	11015.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.8
direct with trim	-15.9677905287	11024.0	7.0	7.0	nan	15.0	56.5
dual anneal	-15.9677905287	30014.2	12.2	12.2	1.0	15.0	182.4
trust region	-15.9677905287	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-15.9677905287	255.0	255.0	255.0	1.0	15.0	3.3

Table 332: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9676787131	1356.4	1356.4	1356.4	1.4	15.0	385.1
cch second order	-26.9676787042	184.0	101.0	101.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-26.9676754412	21693.8	0.0	0.0	nan	15.0	114.9
direct	-26.7693545151	14719.0	0.0	0.0	nan	15.0	72.3
direct with trim	-26.9676787131	14730.0	9.0	9.0	nan	15.0	67.9
dual anneal	-26.9676787130	30017.0	15.0	15.0	1.0	15.0	158.6
trust region	-26.9676787131	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	1.8
trust region repeats	-26.9676787131	258.0	258.0	258.0	1.0	15.0	3.0

Table 333: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4265246948	1413.0	1413.0	1413.0	1.0	15.0	393.7
cch second order	-41.4346435132	241.0	134.0	134.0	nan	15.0	3.8
diff evo	-41.4265215444	24911.6	0.0	0.0	nan	15.0	147.2
direct	-41.3419188312	11283.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.8
direct with trim	-41.4265246948	11293.0	8.0	8.0	nan	15.0	61.7
dual anneal	-41.4265246947	30019.2	17.2	17.2	1.0	15.0	170.0
trust region	-41.4265246948	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	6.0
trust region repeats	-41.4265246948	265.0	265.0	265.0	1.0	15.0	3.0

Table 334: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5893443514	1437.4	1437.4	1437.4	1.0	15.0	380.8
cch second order	-59.5893442970	178.0	96.0	96.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-59.5893373133	21669.0	0.0	0.0	nan	15.0	137.3
direct	-59.3728985840	10979.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.7
direct with trim	-59.5893443514	10988.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.0
dual anneal	-59.5893443511	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	150.9
trust region	-59.5893443514	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-59.5893443514	269.0	269.0	269.0	1.0	15.0	2.9

Table 335: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6761281933	1580.6	1580.6	1580.6	1.0	15.0	293.9
cch second order	-81.6761282081	145.0	81.0	81.0	nan	15.0	3.0
diff evo	-81.6761119960	15481.4	0.0	0.0	nan	15.0	88.9
direct	-81.3797814411	11615.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.5
direct with trim	-81.6761281933	11626.0	9.0	9.0	nan	15.0	51.4
dual anneal	-81.6761281929	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	174.1
trust region	-81.6761281933	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-81.6761281933	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	3.2

Table 336: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8874455733	1587.2	1587.2	1587.2	1.0	15.0	426.3
cch second order	-107.8874455314	178.0	98.0	98.0	nan	15.0	4.8
diff evo	-107.8874263842	16771.0	0.0	0.0	nan	15.0	107.2
direct	-106.4261313412	15011.0	0.0	0.0	nan	15.0	73.4
direct with trim	-107.8874455733	15026.0	13.0	13.0	nan	15.0	76.3
dual anneal	-107.8874455728	30020.4	18.4	18.4	1.0	15.0	144.5
trust region	-107.8874455733	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.0
trust region repeats	-107.8874455733	276.0	276.0	276.0	1.0	15.0	2.8

Table 337: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4082671393	1661.0	1661.0	1661.0	1.0	15.0	392.2
cch second order	-138.4082671553	184.0	102.0	102.0	nan	15.0	4.7
diff evo	-138.4082532837	17924.2	0.0	0.0	nan	15.0	88.0
direct	-137.2545421520	11609.0	0.0	0.0	nan	15.0	56.9
direct with trim	-138.4082671393	11618.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.3
dual anneal	-138.4082671386	30030.2	28.2	28.2	1.0	15.0	179.6
trust region	-138.4082671393	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	3.5
trust region repeats	-138.4082671393	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	3.0

Table 338: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4107046361	1642.8	1642.8	1642.8	1.0	15.0	458.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-173.4106061452	13131.6	0.0	0.0	nan	15.0	82.2
direct	-172.5835950549	11351.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.5
direct with trim	-173.4107046360	11360.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.1
dual anneal	-173.4107046351	30030.4	28.4	28.4	1.0	15.0	142.0
trust region	-173.4107046361	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-173.4107046361	282.0	282.0	282.0	1.0	15.0	3.5

Table 339: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0560507138	1710.4	1710.4	1710.4	1.0	15.0	538.0
cch second order	-213.0560506864	191.0	102.0	102.0	nan	15.0	5.4
diff evo	-213.0552871688	12858.8	0.0	0.0	nan	15.0	83.7
direct	-211.0546382695	11761.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.1
direct with trim	-213.0560507138	11776.0	13.0	13.0	nan	15.0	61.9
dual anneal	-213.0560507125	30022.2	20.2	20.2	1.0	15.0	161.2
trust region	-213.0560507138	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-213.0560507138	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	2.8

Table 340: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.4963439247	2901.6	2901.6	2901.6	1.0	15.0	675.2
cch second order	-257.4963438685	250.0	126.0	126.0	nan	15.0	3.8
diff evo	-257.4962976461	14396.4	0.0	0.0	nan	15.0	77.3
direct	-254.0492610473	10157.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.9
direct with trim	-257.4963439247	10167.0	8.0	8.0	nan	15.0	47.4
dual anneal	-257.4963439231	30221.6	219.6	219.6	1.2	15.0	284.1
trust region	-257.4963439247	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-257.4963439247	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	2.6

Table 341: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8755991029	1769.6	1769.6	1769.6	1.0	15.0	468.5
cch second order	-306.8755991098	266.0	136.0	136.0	nan	15.0	5.8
diff evo	-306.8755625887	15332.6	0.0	0.0	nan	15.0	73.7
direct	-305.3138799754	10483.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.3
direct with trim	-306.8755991029	10494.0	9.0	9.0	nan	15.0	50.2
dual anneal	-306.8755991009	30040.0	38.0	38.0	1.4	15.0	176.8
trust region	-306.8755991029	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.3
trust region repeats	-306.8755991029	287.0	287.0	287.0	1.0	15.0	2.8

Table 342: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3307944507	1770.8	1770.8	1770.8	1.0	15.0	516.8
cch second order	-361.3307944326	251.0	130.0	130.0	nan	15.0	3.7
diff evo	-361.3307556983	14694.0	0.0	0.0	nan	15.0	88.4
direct	-355.6893993862	11511.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.5
direct with trim	-361.3307944507	11524.0	11.0	11.0	nan	15.0	60.2
dual anneal	-361.3307944482	30019.4	17.4	17.4	1.4	15.0	147.7
trust region	-361.3307944507	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-361.3307944507	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	2.7

Table 343: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.9926770686	1780.4	1780.4	1780.4	1.0	15.0	465.0
cch second order	-420.9926771322	296.0	145.0	145.0	nan	15.0	5.7
diff evo	-420.9925794081	14948.2	0.0	0.0	nan	15.0	79.4
direct	-417.2095128458	11853.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.6
direct with trim	-420.9926770686	11869.0	14.0	14.0	nan	15.0	52.5
dual anneal	-420.9926770655	30029.0	27.0	27.0	1.0	15.0	161.8
trust region	-420.9926770686	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-420.9926770686	293.0	293.0	293.0	1.0	15.0	2.7

Table 344: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9864299834	2280.4	2280.4	2280.4	1.0	15.0	410.7
cch second order	-485.9864299689	227.0	120.0	120.0	nan	15.0	3.7
diff evo	-485.9863462247	15214.8	0.0	0.0	nan	15.0	88.4
direct	-484.3906141594	15101.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.3
direct with trim	-485.9864299834	15111.0	8.0	8.0	nan	15.0	71.7
dual anneal	-485.9864299797	30022.8	20.8	20.8	1.2	15.0	183.7
trust region	-485.9864299834	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-485.9864299834	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	3.8

Table 345: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4322315030	1853.8	1853.8	1853.8	1.0	15.0	381.7
cch second order	-556.4322314513	237.0	126.0	126.0	nan	15.0	6.0
diff evo	-556.4321891989	19616.8	0.0	0.0	nan	15.0	104.1
direct	-548.6755350636	10897.0	0.0	0.0	nan	15.0	46.6
direct with trim	-556.4322315030	10908.0	9.0	9.0	nan	15.0	44.4
dual anneal	-556.4322314987	30023.4	21.4	21.4	1.0	15.0	151.9
trust region	-556.4322315030	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-556.4322315030	292.0	292.0	292.0	1.0	15.0	3.2

Table 346: Ar

13.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6570951824
He	cch second order	-3.1804868920
Li	basin hopping	-8.1480252257
Be	cch second order	-15.9753244429
B	basin hopping	-26.9676787131
C	cch second order	-41.4346435132
N	basin hopping	-59.5893443514
O	cch second order	-81.6761282081
F	basin hopping	-107.8874455733
Ne	cch second order	-138.4082671553
Na	basin hopping	-173.4107046361
Mg	basin hopping	-213.0560507138
Al	basin hopping	-257.4963439247
Si	cch second order	-306.8755991098
P	basin hopping	-361.3307944507
S	cch second order	-420.9926771322
Cl	basin hopping	-485.9864299834
Ar	trust region repeats	-556.4322315030

Table 347: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.9	11.9	11.9	nan	-181.0827565458	2.8
cch second order	211.6	112.5	112.5	nan	-181.5349744554	4.7
trust region repeats	270.6	270.6	270.6	1.0	-181.0827565458	3.1
basin hopping	1661.3	1661.3	1661.3	1.0	-181.0827565459	417.5
direct	11859.6	0.0	0.0	nan	-179.4095817072	57.3
direct with trim	11870.3	8.8	8.8	nan	-181.0827565458	58.1
diff evo	16816.5	0.0	0.0	nan	-181.0826858470	96.9
dual anneal	30032.5	30.5	30.5	1.1	-181.0827565446	168.8

Table 348: Average (all systems)

14 15s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

14.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 349: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661051185	1190.2	1190.2	1190.2	1.2	15.0	297.1
He	-3.2214691237	1276.2	1276.2	1276.2	1.0	15.0	319.7
Li	-8.2483705889	1291.4	1291.4	1291.4	1.2	15.0	368.1
Be	-16.1575347320	1327.4	1327.4	1327.4	1.0	15.0	344.2
B	-27.2787714706	1372.2	1372.2	1372.2	1.2	15.0	310.3
C	-41.8924216988	1382.2	1382.2	1382.2	1.0	15.0	347.7
N	-60.2447448454	1425.8	1425.8	1425.8	1.0	15.0	419.0
O	-82.5567914097	1564.0	1564.0	1564.0	1.2	15.0	367.4
F	-109.0300548927	1631.0	1631.0	1631.0	1.2	15.0	315.4
Ne	-139.8503253965	1642.0	1642.0	1642.0	1.0	15.0	416.7
Na	-175.1904509122	1661.0	1661.0	1661.0	1.2	15.0	358.8
Mg	-215.2123925857	1741.6	1741.6	1741.6	1.0	15.0	447.0
Al	-260.0688012135	1756.6	1756.6	1756.6	1.2	15.0	362.6
Si	-309.9042564096	1758.6	1758.6	1758.6	1.0	15.0	395.4
P	-364.8562605608	1759.2	1759.2	1759.2	1.2	15.0	380.3
S	-425.0560498293	1742.0	1742.0	1742.0	1.0	15.0	405.8
Cl	-490.6292656123	1677.0	1677.0	1677.0	1.0	15.0	410.9
Ar	-561.6965175370	1741.2	1741.2	1741.2	1.0	15.0	287.1

Table 350: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661050817	154.0	84.0	84.0	nan	15.0	3.4
He	-3.2214691266	181.0	98.0	98.0	nan	15.0	5.5
Li	-8.2483705874	169.0	91.0	91.0	nan	15.0	5.3
Be	-16.1651390006	262.0	146.0	146.0	nan	15.0	6.3
B	-27.2866919907	229.0	129.0	129.0	nan	15.0	5.8
C	-41.8924216976	190.0	101.0	101.0	nan	15.0	3.7
N	-60.2447448582	163.0	85.0	85.0	nan	15.0	4.9
O	-82.5567913498	151.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.8
F	-109.0388662878	240.0	131.0	131.0	nan	15.0	4.6
Ne	-139.8503253975	182.0	98.0	98.0	nan	15.0	5.2
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-215.2123926133	240.0	124.0	124.0	nan	15.0	6.2
Al	-260.0688012061	276.0	138.0	138.0	nan	15.0	6.5
Si	-309.9042564269	261.0	134.0	134.0	nan	15.0	4.3
P	-364.8562606130	250.0	130.0	130.0	nan	15.0	5.8
S	-425.0560498930	238.0	121.0	121.0	nan	15.0	5.8
Cl	-490.6292656415	212.0	108.0	108.0	nan	15.0	3.9
Ar	-561.6965175640	176.0	96.0	96.0	nan	15.0	5.2

Table 351: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661049758	10837.6	0.0	0.0	nan	15.0	60.1
He	-3.2214687404	14284.8	0.0	0.0	nan	15.0	62.4
Li	-8.2483691751	18228.0	0.0	0.0	nan	15.0	97.7
Be	-16.1575318356	19920.6	0.0	0.0	nan	15.0	111.8
B	-27.2787689772	21210.2	0.0	0.0	nan	15.0	103.2
C	-41.8924173439	23603.4	0.0	0.0	nan	15.0	128.0
N	-60.2447166232	18296.2	0.0	0.0	nan	15.0	92.3
O	-82.5567816906	18947.2	0.0	0.0	nan	15.0	90.9
F	-109.0300400480	20881.6	0.0	0.0	nan	15.0	121.3
Ne	-139.8502856798	14415.0	0.0	0.0	nan	15.0	80.8
Na	-175.1904256848	16932.2	0.0	0.0	nan	15.0	91.8
Mg	-215.2123832200	13416.8	0.0	0.0	nan	15.0	76.6
Al	-260.0686047309	12257.4	0.0	0.0	nan	15.0	66.0
Si	-309.9042117254	14545.2	0.0	0.0	nan	15.0	82.8
P	-364.8562166080	14842.8	0.0	0.0	nan	15.0	78.5
S	-425.0560099342	15921.6	0.0	0.0	nan	15.0	89.8
Cl	-490.6292193384	14508.0	0.0	0.0	nan	15.0	73.3
Ar	-561.6964046885	14402.6	0.0	0.0	nan	15.0	95.6

Table 352: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6654131471	11005.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.1
He	-3.2125849651	10961.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.0
Li	-8.2375520222	10747.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.1
Be	-16.0398516709	11405.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
B	-27.1809821742	15009.0	0.0	0.0	nan	15.0	86.7
C	-41.3938440418	11161.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.9
N	-60.0330752825	11269.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.3
O	-82.2559132131	11781.0	0.0	0.0	nan	15.0	60.7
F	-108.6349752383	15037.0	0.0	0.0	nan	15.0	81.7
Ne	-139.4803193654	15035.0	0.0	0.0	nan	15.0	85.1
Na	-174.3264685705	11295.0	0.0	0.0	nan	15.0	67.2
Mg	-214.0029773669	10865.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.9
Al	-257.9595906124	10589.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.5
Si	-308.9213728557	10987.0	0.0	0.0	nan	15.0	60.6
P	-359.2832059356	11847.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.1
S	-422.4868758946	11497.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.4
Cl	-481.0514573593	11571.0	0.0	0.0	nan	15.0	69.6
Ar	-553.5416083984	11167.0	0.0	0.0	nan	15.0	65.2

Table 353: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661051185	11013.0	6.0	6.0	nan	15.0	63.1
He	-3.2214691237	10970.0	7.0	7.0	nan	15.0	59.3
Li	-8.2483705888	10755.0	6.0	6.0	nan	15.0	61.9
Be	-16.1575347320	11413.0	6.0	6.0	nan	15.0	64.7
B	-27.2787714706	15019.0	8.0	8.0	nan	15.0	78.5
C	-41.8924216988	11171.0	8.0	8.0	nan	15.0	54.4
N	-60.2447448454	11278.0	7.0	7.0	nan	15.0	67.0
O	-82.5567914097	11792.0	9.0	9.0	nan	15.0	70.2
F	-109.0300548927	15047.0	8.0	8.0	nan	15.0	86.8
Ne	-139.8503253965	15046.0	9.0	9.0	nan	15.0	79.6
Na	-175.1904509122	11304.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.1
Mg	-215.2123925857	10878.0	11.0	11.0	nan	15.0	59.1
Al	-260.0688012135	10598.0	7.0	7.0	nan	15.0	61.8
Si	-309.9042564096	10999.0	10.0	10.0	nan	15.0	66.4
P	-364.8562605608	11860.0	11.0	11.0	nan	15.0	64.1
S	-425.0560498293	11513.0	14.0	14.0	nan	15.0	66.0
Cl	-490.6292656123	11583.0	10.0	10.0	nan	15.0	66.3
Ar	-561.6965175370	11176.0	7.0	7.0	nan	15.0	59.3

Table 354: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661051185	30012.2	10.2	10.2	1.0	15.0	159.5
He	-3.2214691237	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	170.8
Li	-8.2483705888	30013.8	11.8	11.8	1.0	15.0	175.2
Be	-16.1575347319	30015.8	13.8	13.8	1.0	15.0	161.3
B	-27.2787714705	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	164.3
C	-41.8924216986	30015.6	13.6	13.6	1.0	15.0	167.9
N	-60.2447448451	30017.2	15.2	15.2	1.0	15.0	164.9
O	-82.5567914093	30021.8	19.8	19.8	1.0	15.0	179.5
F	-109.0300548921	30030.4	28.4	28.4	1.0	15.0	178.1
Ne	-139.8503253958	30027.0	25.0	25.0	1.0	15.0	187.5
Na	-175.1904509111	30025.6	23.6	23.6	1.0	15.0	187.6
Mg	-215.2123925844	30038.6	36.6	36.6	1.2	15.0	176.2
Al	-260.0688012118	30025.0	23.0	23.0	1.2	15.0	185.7
Si	-309.9042564075	30026.4	24.4	24.4	1.2	15.0	183.0
P	-364.8562605582	30025.8	23.8	23.8	1.4	15.0	190.2
S	-425.0560498260	30026.0	24.0	24.0	1.0	15.0	178.2
Cl	-490.6292656084	30042.4	40.4	40.4	1.6	15.0	180.1
Ar	-561.6965175324	30033.0	31.0	31.0	1.2	15.0	189.8

Table 355: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661051185	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.1
He	-3.2214691237	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.1
Li	-8.2483705888	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.2
Be	-16.1575347320	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.8
B	-27.2787714706	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.4
C	-41.8924216988	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.0
N	-60.2447448454	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.3
O	-82.5567914097	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.2
F	-109.0300548927	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.1
Ne	-139.8503253965	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	3.3
Na	-175.1904509122	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	7.7
Mg	-215.2123925857	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	1.9
Al	-260.0688012135	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	4.6
Si	-309.9042564096	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	10.8
P	-364.8562605608	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.1
S	-425.0560498293	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	7.2
Cl	-490.6292656123	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.2
Ar	-561.6965175370	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.3

Table 356: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661051185	216.0	216.0	216.0	1.0	15.0	3.1
He	-3.2214691237	237.0	237.0	237.0	1.0	15.0	3.1
Li	-8.2483705888	247.0	247.0	247.0	1.0	15.0	2.6
Be	-16.1575347320	256.0	256.0	256.0	2.0	15.0	3.5
B	-27.2787714706	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	2.6
C	-41.8924216988	264.0	264.0	264.0	1.0	15.0	3.0
N	-60.2447448454	269.0	269.0	269.0	1.0	15.0	2.9
O	-82.5567914097	273.0	273.0	273.0	1.0	15.0	3.0
F	-109.0300548927	274.0	274.0	274.0	1.0	15.0	2.8
Ne	-139.8503253965	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	3.0
Na	-175.1904509122	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.9
Mg	-215.2123925857	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	3.0
Al	-260.0688012135	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.8
Si	-309.9042564096	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.6
P	-364.8562605608	289.0	289.0	289.0	1.0	15.0	2.7
S	-425.0560498293	289.0	289.0	289.0	1.0	15.0	3.0
Cl	-490.6292656123	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	3.2
Ar	-561.6965175370	296.0	296.0	296.0	1.0	15.0	3.4

Table 357: trust region repeats

14.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661051185	1190.2	1190.2	1190.2	1.2	15.0	297.1
cch second order	-0.6661050817	154.0	84.0	84.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-0.6661049758	10837.6	0.0	0.0	nan	15.0	60.1
direct	-0.6654131471	11005.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.1
direct with trim	-0.6661051185	11013.0	6.0	6.0	nan	15.0	63.1
dual anneal	-0.6661051185	30012.2	10.2	10.2	1.0	15.0	159.5
trust region	-0.6661051185	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.1
trust region repeats	-0.6661051185	216.0	216.0	216.0	1.0	15.0	3.1

Table 358: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2214691237	1276.2	1276.2	1276.2	1.0	15.0	319.7
cch second order	-3.2214691266	181.0	98.0	98.0	nan	15.0	5.5
diff evo	-3.2214687404	14284.8	0.0	0.0	nan	15.0	62.4
direct	-3.2125849651	10961.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.0
direct with trim	-3.2214691237	10970.0	7.0	7.0	nan	15.0	59.3
dual anneal	-3.2214691237	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	170.8
trust region	-3.2214691237	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.1
trust region repeats	-3.2214691237	237.0	237.0	237.0	1.0	15.0	3.1

Table 359: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2483705889	1291.4	1291.4	1291.4	1.2	15.0	368.1
cch second order	-8.2483705874	169.0	91.0	91.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-8.2483691751	18228.0	0.0	0.0	nan	15.0	97.7
direct	-8.2375520222	10747.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.1
direct with trim	-8.2483705888	10755.0	6.0	6.0	nan	15.0	61.9
dual anneal	-8.2483705888	30013.8	11.8	11.8	1.0	15.0	175.2
trust region	-8.2483705888	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-8.2483705888	247.0	247.0	247.0	1.0	15.0	2.6

Table 360: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1575347320	1327.4	1327.4	1327.4	1.0	15.0	344.2
cch second order	-16.1651390006	262.0	146.0	146.0	nan	15.0	6.3
diff evo	-16.1575318356	19920.6	0.0	0.0	nan	15.0	111.8
direct	-16.0398516709	11405.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
direct with trim	-16.1575347320	11413.0	6.0	6.0	nan	15.0	64.7
dual anneal	-16.1575347319	30015.8	13.8	13.8	1.0	15.0	161.3
trust region	-16.1575347320	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.8
trust region repeats	-16.1575347320	256.0	256.0	256.0	2.0	15.0	3.5

Table 361: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2787714706	1372.2	1372.2	1372.2	1.2	15.0	310.3
cch second order	-27.2866919907	229.0	129.0	129.0	nan	15.0	5.8
diff evo	-27.2787689772	21210.2	0.0	0.0	nan	15.0	103.2
direct	-27.1809821742	15009.0	0.0	0.0	nan	15.0	86.7
direct with trim	-27.2787714706	15019.0	8.0	8.0	nan	15.0	78.5
dual anneal	-27.2787714705	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	164.3
trust region	-27.2787714706	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-27.2787714706	262.0	262.0	262.0	1.0	15.0	2.6

Table 362: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8924216988	1382.2	1382.2	1382.2	1.0	15.0	347.7
cch second order	-41.8924216976	190.0	101.0	101.0	nan	15.0	3.7
diff evo	-41.8924173439	23603.4	0.0	0.0	nan	15.0	128.0
direct	-41.3938440418	11161.0	0.0	0.0	nan	15.0	64.9
direct with trim	-41.8924216988	11171.0	8.0	8.0	nan	15.0	54.4
dual anneal	-41.8924216986	30015.6	13.6	13.6	1.0	15.0	167.9
trust region	-41.8924216988	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.0
trust region repeats	-41.8924216988	264.0	264.0	264.0	1.0	15.0	3.0

Table 363: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2447448454	1425.8	1425.8	1425.8	1.0	15.0	419.0
cch second order	-60.2447448582	163.0	85.0	85.0	nan	15.0	4.9
diff evo	-60.2447166232	18296.2	0.0	0.0	nan	15.0	92.3
direct	-60.0330752825	11269.0	0.0	0.0	nan	15.0	54.3
direct with trim	-60.2447448454	11278.0	7.0	7.0	nan	15.0	67.0
dual anneal	-60.2447448451	30017.2	15.2	15.2	1.0	15.0	164.9
trust region	-60.2447448454	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.3
trust region repeats	-60.2447448454	269.0	269.0	269.0	1.0	15.0	2.9

Table 364: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5567914097	1564.0	1564.0	1564.0	1.2	15.0	367.4
cch second order	-82.5567913498	151.0	86.0	86.0	nan	15.0	4.8
diff evo	-82.5567816906	18947.2	0.0	0.0	nan	15.0	90.9
direct	-82.2559132131	11781.0	0.0	0.0	nan	15.0	60.7
direct with trim	-82.5567914097	11792.0	9.0	9.0	nan	15.0	70.2
dual anneal	-82.5567914093	30021.8	19.8	19.8	1.0	15.0	179.5
trust region	-82.5567914097	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-82.5567914097	273.0	273.0	273.0	1.0	15.0	3.0

Table 365: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0300548927	1631.0	1631.0	1631.0	1.2	15.0	315.4
cch second order	-109.0388662878	240.0	131.0	131.0	nan	15.0	4.6
diff evo	-109.0300400480	20881.6	0.0	0.0	nan	15.0	121.3
direct	-108.6349752383	15037.0	0.0	0.0	nan	15.0	81.7
direct with trim	-109.0300548927	15047.0	8.0	8.0	nan	15.0	86.8
dual anneal	-109.0300548921	30030.4	28.4	28.4	1.0	15.0	178.1
trust region	-109.0300548927	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-109.0300548927	274.0	274.0	274.0	1.0	15.0	2.8

Table 366: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8503253965	1642.0	1642.0	1642.0	1.0	15.0	416.7
cch second order	-139.8503253975	182.0	98.0	98.0	nan	15.0	5.2
diff evo	-139.8502856798	14415.0	0.0	0.0	nan	15.0	80.8
direct	-139.4803193654	15035.0	0.0	0.0	nan	15.0	85.1
direct with trim	-139.8503253965	15046.0	9.0	9.0	nan	15.0	79.6
dual anneal	-139.8503253958	30027.0	25.0	25.0	1.0	15.0	187.5
trust region	-139.8503253965	13.0	13.0	13.0	nan	15.0	3.3
trust region repeats	-139.8503253965	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	3.0

Table 367: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1904509122	1661.0	1661.0	1661.0	1.2	15.0	358.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-175.1904256848	16932.2	0.0	0.0	nan	15.0	91.8
direct	-174.3264685705	11295.0	0.0	0.0	nan	15.0	67.2
direct with trim	-175.1904509122	11304.0	7.0	7.0	nan	15.0	62.1
dual anneal	-175.1904509111	30025.6	23.6	23.6	1.0	15.0	187.6
trust region	-175.1904509122	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	7.7
trust region repeats	-175.1904509122	277.0	277.0	277.0	1.0	15.0	2.9

Table 368: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2123925857	1741.6	1741.6	1741.6	1.0	15.0	447.0
cch second order	-215.2123926133	240.0	124.0	124.0	nan	15.0	6.2
diff evo	-215.2123832200	13416.8	0.0	0.0	nan	15.0	76.6
direct	-214.0029773669	10865.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.9
direct with trim	-215.2123925857	10878.0	11.0	11.0	nan	15.0	59.1
dual anneal	-215.2123925844	30038.6	36.6	36.6	1.2	15.0	176.2
trust region	-215.2123925857	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-215.2123925857	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	3.0

Table 369: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0688012135	1756.6	1756.6	1756.6	1.2	15.0	362.6
cch second order	-260.0688012061	276.0	138.0	138.0	nan	15.0	6.5
diff evo	-260.0686047309	12257.4	0.0	0.0	nan	15.0	66.0
direct	-257.9595906124	10589.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.5
direct with trim	-260.0688012135	10598.0	7.0	7.0	nan	15.0	61.8
dual anneal	-260.0688012118	30025.0	23.0	23.0	1.2	15.0	185.7
trust region	-260.0688012135	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	4.6
trust region repeats	-260.0688012135	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.8

Table 370: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9042564096	1758.6	1758.6	1758.6	1.0	15.0	395.4
cch second order	-309.9042564269	261.0	134.0	134.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-309.9042117254	14545.2	0.0	0.0	nan	15.0	82.8
direct	-308.9213728557	10987.0	0.0	0.0	nan	15.0	60.6
direct with trim	-309.9042564096	10999.0	10.0	10.0	nan	15.0	66.4
dual anneal	-309.9042564075	30026.4	24.4	24.4	1.2	15.0	183.0
trust region	-309.9042564096	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	10.8
trust region repeats	-309.9042564096	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.6

Table 371: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8562605608	1759.2	1759.2	1759.2	1.2	15.0	380.3
cch second order	-364.8562606130	250.0	130.0	130.0	nan	15.0	5.8
diff evo	-364.8562166080	14842.8	0.0	0.0	nan	15.0	78.5
direct	-359.2832059356	11847.0	0.0	0.0	nan	15.0	62.1
direct with trim	-364.8562605608	11860.0	11.0	11.0	nan	15.0	64.1
dual anneal	-364.8562605582	30025.8	23.8	23.8	1.4	15.0	190.2
trust region	-364.8562605608	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.1
trust region repeats	-364.8562605608	289.0	289.0	289.0	1.0	15.0	2.7

Table 372: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0560498293	1742.0	1742.0	1742.0	1.0	15.0	405.8
cch second order	-425.0560498930	238.0	121.0	121.0	nan	15.0	5.8
diff evo	-425.0560099342	15921.6	0.0	0.0	nan	15.0	89.8
direct	-422.4868758946	11497.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.4
direct with trim	-425.0560498293	11513.0	14.0	14.0	nan	15.0	66.0
dual anneal	-425.0560498260	30026.0	24.0	24.0	1.0	15.0	178.2
trust region	-425.0560498293	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	7.2
trust region repeats	-425.0560498293	289.0	289.0	289.0	1.0	15.0	3.0

Table 373: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6292656123	1677.0	1677.0	1677.0	1.0	15.0	410.9
cch second order	-490.6292656415	212.0	108.0	108.0	nan	15.0	3.9
diff evo	-490.6292193384	14508.0	0.0	0.0	nan	15.0	73.3
direct	-481.0514573593	11571.0	0.0	0.0	nan	15.0	69.6
direct with trim	-490.6292656123	11583.0	10.0	10.0	nan	15.0	66.3
dual anneal	-490.6292656084	30042.4	40.4	40.4	1.6	15.0	180.1
trust region	-490.6292656123	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-490.6292656123	291.0	291.0	291.0	1.0	15.0	3.2

Table 374: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.6965175370	1741.2	1741.2	1741.2	1.0	15.0	287.1
cch second order	-561.6965175640	176.0	96.0	96.0	nan	15.0	5.2
diff evo	-561.6964046885	14402.6	0.0	0.0	nan	15.0	95.6
direct	-553.5416083984	11167.0	0.0	0.0	nan	15.0	65.2
direct with trim	-561.6965175370	11176.0	7.0	7.0	nan	15.0	59.3
dual anneal	-561.6965175324	30033.0	31.0	31.0	1.2	15.0	189.8
trust region	-561.6965175370	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.3
trust region repeats	-561.6965175370	296.0	296.0	296.0	1.0	15.0	3.4

Table 375: Ar

14.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6661051185
He	cch second order	-3.2214691266
Li	basin hopping	-8.2483705889
Be	cch second order	-16.1651390006
B	cch second order	-27.2866919907
C	basin hopping	-41.8924216988
N	cch second order	-60.2447448582
O	trust region	-82.5567914097
F	cch second order	-109.0388662878
Ne	cch second order	-139.8503253975
Na	basin hopping	-175.1904509122
Mg	cch second order	-215.2123926133
Al	basin hopping	-260.0688012135
Si	cch second order	-309.9042564269
P	cch second order	-364.8562606130
S	cch second order	-425.0560498930
Cl	cch second order	-490.6292656415
Ar	cch second order	-561.6965175640

Table 376: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.9	11.9	11.9	nan	-182.8755879965	3.9
cch second order	210.2	111.8	111.8	nan	-183.3290864315	5.1
trust region repeats	270.3	270.3	270.3	1.1	-182.8755879965	3.0
basin hopping	1552.2	1552.2	1552.2	1.1	-182.8755879965	364.1
direct	11846.0	0.0	0.0	nan	-181.0393371174	64.4
direct with trim	11856.4	8.4	8.4	nan	-182.8755879965	66.1
diff evo	16525.1	0.0	0.0	nan	-182.8755533900	89.0
dual anneal	30023.7	21.7	21.7	1.1	-182.8755879952	176.7

Table 377: Average (all systems)

15   15s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

15.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 378: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665835713	1232.6	1232.6	1232.6	1.4	15.0	296.5
He	-2.8182205810	1231.8	1231.8	1231.8	1.0	15.0	320.2
Li	-7.3224150748	1220.0	1220.0	1220.0	1.2	15.0	239.0
Be	-14.4835653570	1234.2	1234.2	1234.2	1.0	15.0	243.4
B	-24.6275877146	1289.8	1289.8	1289.8	1.0	15.0	269.4
C	-38.0320840747	1273.8	1273.8	1273.8	1.0	15.0	327.1
N	-54.9412407320	1319.8	1319.8	1319.8	1.0	15.0	375.3
O	-75.5744629120	1329.2	1329.2	1329.2	1.0	15.0	308.5
F	-100.1318940481	1358.8	1358.8	1358.8	1.0	15.0	265.7
Ne	-128.7981885170	1376.0	1376.0	1376.0	1.0	15.0	356.6
Na	-161.7452203281	1389.0	1389.0	1389.0	1.0	15.0	299.8
Mg	-199.1341024353	1407.4	1407.4	1407.4	1.0	15.0	376.9
Al	-241.1167376630	1422.0	1422.0	1422.0	1.0	15.0	301.7
Si	-287.8370391059	1453.2	1453.2	1453.2	1.0	15.0	481.8
P	-339.4319099426	1474.2	1474.2	1474.2	1.0	15.0	373.1
S	-396.0320435488	1512.6	1512.6	1512.6	1.0	15.0	353.4
Cl	-457.7625864141	1584.8	1584.8	1584.8	1.0	15.0	359.0
Ar	-524.7436943245	1583.2	1583.2	1583.2	1.0	15.0	448.1

Table 379: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665836037	140.0	79.0	79.0	nan	15.0	3.2
He	-2.8182205974	158.0	85.0	85.0	nan	15.0	4.6
Li	-7.3224150194	166.0	92.0	92.0	nan	15.0	4.5
Be	-14.4835652932	166.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.8
B	-24.6275876917	152.0	86.0	86.0	nan	15.0	5.1
C	-38.0320840639	186.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.2
N	-54.9412407682	172.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.1
O	-75.5744628505	176.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
F	-100.1318940143	178.0	95.0	95.0	nan	15.0	5.1
Ne	-128.8101336593	239.0	132.0	132.0	nan	15.0	5.3
Na	-161.7452203628	143.0	78.0	78.0	nan	15.0	4.5
Mg	-199.1341023674	186.0	98.0	98.0	nan	15.0	3.3
Al	-241.1167377178	187.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.2
Si	-287.8370390616	180.0	99.0	99.0	nan	15.0	5.0
P	-339.4319099130	174.0	94.0	94.0	nan	15.0	5.0
S	-396.0320435250	198.0	108.0	108.0	nan	15.0	5.2
Cl	-457.7625863502	175.0	96.0	96.0	nan	15.0	3.1
Ar	-524.7436942586	201.0	107.0	107.0	nan	15.0	5.2

Table 380: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665833658	8723.4	0.0	0.0	nan	15.0	36.5
He	-2.8182201295	12753.4	0.0	0.0	nan	15.0	58.5
Li	-7.3224143534	14960.6	0.0	0.0	nan	15.0	61.4
Be	-14.4835639249	17012.8	0.0	0.0	nan	15.0	78.1
B	-24.6275854655	18314.8	0.0	0.0	nan	15.0	84.0
C	-38.0320805730	19226.2	0.0	0.0	nan	15.0	83.9
N	-54.9412352235	16870.2	0.0	0.0	nan	15.0	78.6
O	-75.5744537483	16423.8	0.0	0.0	nan	15.0	81.1
F	-100.1318887187	20881.6	0.0	0.0	nan	15.0	87.7
Ne	-128.7981665998	12889.8	0.0	0.0	nan	15.0	53.1
Na	-161.7451958433	15140.4	0.0	0.0	nan	15.0	56.9
Mg	-199.1340780527	14687.8	0.0	0.0	nan	15.0	64.5
Al	-241.1167159938	15332.6	0.0	0.0	nan	15.0	77.0
Si	-287.8369884120	12449.6	0.0	0.0	nan	15.0	66.1
P	-339.4318845638	13646.2	0.0	0.0	nan	15.0	56.5
S	-396.0319319074	16355.6	0.0	0.0	nan	15.0	66.5
Cl	-457.7625523773	14594.8	0.0	0.0	nan	15.0	59.4
Ar	-524.7436490641	15537.2	0.0	0.0	nan	15.0	58.4

Table 381: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5651632154	10801.0	0.0	0.0	nan	15.0	41.4
He	-2.7909234411	11223.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.3
Li	-7.2891619596	11173.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.5
Be	-14.4201876084	11017.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.5
B	-24.6059253227	11635.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.6
C	-37.9686968672	11085.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.4
N	-54.9186333552	10495.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.3
O	-75.5006733655	15055.0	0.0	0.0	nan	15.0	61.4
F	-99.5634210962	11915.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.5
Ne	-127.7602075979	11517.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.2
Na	-160.7309655419	10381.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.1
Mg	-198.1423947449	11115.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.5
Al	-238.5381236542	10767.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.2
Si	-287.0526765443	15085.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.5
P	-335.5904332437	11735.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.6
S	-393.2696460999	11947.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.5
Cl	-453.2443867172	11781.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.7
Ar	-522.5647233280	12169.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8

Table 382: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665835713	10808.0	5.0	5.0	nan	15.0	41.5
He	-2.8182205809	11232.0	7.0	7.0	nan	15.0	45.9
Li	-7.3224150747	11182.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.2
Be	-14.4835653570	11025.0	6.0	6.0	nan	15.0	48.6
B	-24.6275877146	11644.0	7.0	7.0	nan	15.0	41.4
C	-38.0320840746	11093.0	6.0	6.0	nan	15.0	45.7
N	-54.9412407320	10503.0	6.0	6.0	nan	15.0	40.4
O	-75.5744629120	15064.0	7.0	7.0	nan	15.0	57.1
F	-100.1318940481	11925.0	8.0	8.0	nan	15.0	42.0
Ne	-128.7981885170	11526.0	7.0	7.0	nan	15.0	44.5
Na	-161.7452203281	10390.0	7.0	7.0	nan	15.0	39.0
Mg	-199.1341024353	11125.0	8.0	8.0	nan	15.0	42.7
Al	-241.1167376630	10778.0	9.0	9.0	nan	15.0	37.0
Si	-287.8370391059	15095.0	8.0	8.0	nan	15.0	56.5
P	-339.4319099426	11750.0	13.0	13.0	nan	15.0	46.9
S	-396.0320435488	11961.0	12.0	12.0	nan	15.0	38.4
Cl	-457.7625864141	11798.0	15.0	15.0	nan	15.0	46.5
Ar	-524.7436943245	12178.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.7

Table 383: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665835713	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	105.7
He	-2.8182205809	30010.8	8.8	8.8	1.0	15.0	123.1
Li	-7.3224150747	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	123.9
Be	-14.4835653570	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	111.2
B	-24.6275877145	30017.4	15.4	15.4	1.0	15.0	115.5
C	-38.0320840746	30016.4	14.4	14.4	1.0	15.0	114.7
N	-54.9412407319	30019.6	17.6	17.6	1.0	15.0	119.3
O	-75.5744629118	30018.0	16.0	16.0	1.0	15.0	118.5
F	-100.1318940479	30024.8	22.8	22.8	1.0	15.0	123.6
Ne	-128.7981885166	30021.8	19.8	19.8	1.0	15.0	122.4
Na	-161.7452203276	30024.8	22.8	22.8	1.0	15.0	122.5
Mg	-199.1341024347	30025.2	23.2	23.2	1.0	15.0	109.7
Al	-241.1167376622	30027.2	25.2	25.2	1.0	15.0	119.2
Si	-287.8370391049	30025.8	23.8	23.8	1.0	15.0	122.2
P	-339.4319099413	30027.4	25.4	25.4	1.0	15.0	120.4
S	-396.0320435472	30024.2	22.2	22.2	1.0	15.0	117.3
Cl	-457.7625864122	30030.6	28.6	28.6	1.0	15.0	135.0
Ar	-524.7436943222	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	115.9

Table 384: dual anneal

175

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665835713	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	4.5
He	-2.8182205809	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.2
Li	-7.3224150747	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
Be	-14.4835653570	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
B	-24.6275877146	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	7.5
C	-38.0320840746	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	1.9
N	-54.9412407320	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
O	-75.5744629120	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.3
F	-100.1318940481	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
Ne	-128.7981885170	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.1
Na	-161.7452203281	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.2
Mg	-199.1341024353	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	7.8
Al	-241.1167376630	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.6
Si	-287.8370391059	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.7
P	-339.4319099426	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.4
S	-396.0320435488	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.4
Cl	-457.7625864141	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.9
Ar	-524.7436943245	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.2

Table 385: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665835713	208.0	208.0	208.0	1.0	15.0	3.3
He	-2.8182205809	230.0	230.0	230.0	1.0	15.0	2.6
Li	-7.3224150747	235.0	235.0	235.0	1.0	15.0	2.9
Be	-14.4835653570	243.0	243.0	243.0	1.0	15.0	3.3
B	-24.6275877146	254.0	254.0	254.0	1.0	15.0	2.8
C	-38.0320840746	256.0	256.0	256.0	1.0	15.0	2.5
N	-54.9412407320	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	2.9
O	-75.5744629120	263.0	263.0	263.0	1.0	15.0	2.6
F	-100.1318940481	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	2.8
Ne	-128.7981885170	270.0	270.0	270.0	1.0	15.0	2.8
Na	-161.7452203281	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	2.9
Mg	-199.1341024353	271.0	271.0	271.0	1.0	15.0	2.9
Al	-241.1167376630	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	2.6
Si	-287.8370391059	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	3.0
P	-339.4319099426	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	2.9
S	-396.0320435488	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	2.8
Cl	-457.7625864141	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	2.8
Ar	-524.7436943245	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.5

Table 386: trust region repeats

15.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5665835713	1232.6	1232.6	1232.6	1.4	15.0	296.5
cch second order	-0.5665836037	140.0	79.0	79.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-0.5665833658	8723.4	0.0	0.0	nan	15.0	36.5
direct	-0.5651632154	10801.0	0.0	0.0	nan	15.0	41.4
direct with trim	-0.5665835713	10808.0	5.0	5.0	nan	15.0	41.5
dual anneal	-0.5665835713	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	105.7
trust region	-0.5665835713	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	4.5
trust region repeats	-0.5665835713	208.0	208.0	208.0	1.0	15.0	3.3

Table 387: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8182205810	1231.8	1231.8	1231.8	1.0	15.0	320.2
cch second order	-2.8182205974	158.0	85.0	85.0	nan	15.0	4.6
diff evo	-2.8182201295	12753.4	0.0	0.0	nan	15.0	58.5
direct	-2.7909234411	11223.0	0.0	0.0	nan	15.0	55.3
direct with trim	-2.8182205809	11232.0	7.0	7.0	nan	15.0	45.9
dual anneal	-2.8182205809	30010.8	8.8	8.8	1.0	15.0	123.1
trust region	-2.8182205809	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-2.8182205809	230.0	230.0	230.0	1.0	15.0	2.6

Table 388: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3224150748	1220.0	1220.0	1220.0	1.2	15.0	239.0
cch second order	-7.3224150194	166.0	92.0	92.0	nan	15.0	4.5
diff evo	-7.3224143534	14960.6	0.0	0.0	nan	15.0	61.4
direct	-7.2891619596	11173.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.5
direct with trim	-7.3224150747	11182.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.2
dual anneal	-7.3224150747	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	123.9
trust region	-7.3224150747	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-7.3224150747	235.0	235.0	235.0	1.0	15.0	2.9

Table 389: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4835653570	1234.2	1234.2	1234.2	1.0	15.0	243.4
cch second order	-14.4835652932	166.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.8
diff evo	-14.4835639249	17012.8	0.0	0.0	nan	15.0	78.1
direct	-14.4201876084	11017.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.5
direct with trim	-14.4835653570	11025.0	6.0	6.0	nan	15.0	48.6
dual anneal	-14.4835653570	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	111.2
trust region	-14.4835653570	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-14.4835653570	243.0	243.0	243.0	1.0	15.0	3.3

Table 390: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6275877146	1289.8	1289.8	1289.8	1.0	15.0	269.4
cch second order	-24.6275876917	152.0	86.0	86.0	nan	15.0	5.1
diff evo	-24.6275854655	18314.8	0.0	0.0	nan	15.0	84.0
direct	-24.6059253227	11635.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.6
direct with trim	-24.6275877146	11644.0	7.0	7.0	nan	15.0	41.4
dual anneal	-24.6275877145	30017.4	15.4	15.4	1.0	15.0	115.5
trust region	-24.6275877146	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	7.5
trust region repeats	-24.6275877146	254.0	254.0	254.0	1.0	15.0	2.8

Table 391: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0320840747	1273.8	1273.8	1273.8	1.0	15.0	327.1
cch second order	-38.0320840639	186.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-38.0320805730	19226.2	0.0	0.0	nan	15.0	83.9
direct	-37.9686968672	11085.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.4
direct with trim	-38.0320840746	11093.0	6.0	6.0	nan	15.0	45.7
dual anneal	-38.0320840746	30016.4	14.4	14.4	1.0	15.0	114.7
trust region	-38.0320840746	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-38.0320840746	256.0	256.0	256.0	1.0	15.0	2.5

Table 392: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9412407320	1319.8	1319.8	1319.8	1.0	15.0	375.3
cch second order	-54.9412407682	172.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.1
diff evo	-54.9412352235	16870.2	0.0	0.0	nan	15.0	78.6
direct	-54.9186333552	10495.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.3
direct with trim	-54.9412407320	10503.0	6.0	6.0	nan	15.0	40.4
dual anneal	-54.9412407319	30019.6	17.6	17.6	1.0	15.0	119.3
trust region	-54.9412407320	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-54.9412407320	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	2.9

Table 393: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5744629120	1329.2	1329.2	1329.2	1.0	15.0	308.5
cch second order	-75.5744628505	176.0	94.0	94.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-75.5744537483	16423.8	0.0	0.0	nan	15.0	81.1
direct	-75.5006733655	15055.0	0.0	0.0	nan	15.0	61.4
direct with trim	-75.5744629120	15064.0	7.0	7.0	nan	15.0	57.1
dual anneal	-75.5744629118	30018.0	16.0	16.0	1.0	15.0	118.5
trust region	-75.5744629120	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.3
trust region repeats	-75.5744629120	263.0	263.0	263.0	1.0	15.0	2.6

Table 394: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1318940481	1358.8	1358.8	1358.8	1.0	15.0	265.7
cch second order	-100.1318940143	178.0	95.0	95.0	nan	15.0	5.1
diff evo	-100.1318887187	20881.6	0.0	0.0	nan	15.0	87.7
direct	-99.5634210962	11915.0	0.0	0.0	nan	15.0	50.5
direct with trim	-100.1318940481	11925.0	8.0	8.0	nan	15.0	42.0
dual anneal	-100.1318940479	30024.8	22.8	22.8	1.0	15.0	123.6
trust region	-100.1318940481	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-100.1318940481	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	2.8

Table 395: F

179

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.7981885170	1376.0	1376.0	1376.0	1.0	15.0	356.6
cch second order	-128.8101336593	239.0	132.0	132.0	nan	15.0	5.3
diff evo	-128.7981665998	12889.8	0.0	0.0	nan	15.0	53.1
direct	-127.7602075979	11517.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.2
direct with trim	-128.7981885170	11526.0	7.0	7.0	nan	15.0	44.5
dual anneal	-128.7981885166	30021.8	19.8	19.8	1.0	15.0	122.4
trust region	-128.7981885170	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.1
trust region repeats	-128.7981885170	270.0	270.0	270.0	1.0	15.0	2.8

Table 396: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7452203281	1389.0	1389.0	1389.0	1.0	15.0	299.8
cch second order	-161.7452203628	143.0	78.0	78.0	nan	15.0	4.5
diff evo	-161.7451958433	15140.4	0.0	0.0	nan	15.0	56.9
direct	-160.7309655419	10381.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.1
direct with trim	-161.7452203281	10390.0	7.0	7.0	nan	15.0	39.0
dual anneal	-161.7452203276	30024.8	22.8	22.8	1.0	15.0	122.5
trust region	-161.7452203281	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-161.7452203281	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	2.9

Table 397: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1341024353	1407.4	1407.4	1407.4	1.0	15.0	376.9
cch second order	-199.1341023674	186.0	98.0	98.0	nan	15.0	3.3
diff evo	-199.1340780527	14687.8	0.0	0.0	nan	15.0	64.5
direct	-198.1423947449	11115.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.5
direct with trim	-199.1341024353	11125.0	8.0	8.0	nan	15.0	42.7
dual anneal	-199.1341024347	30025.2	23.2	23.2	1.0	15.0	109.7
trust region	-199.1341024353	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	7.8
trust region repeats	-199.1341024353	271.0	271.0	271.0	1.0	15.0	2.9

Table 398: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1167376630	1422.0	1422.0	1422.0	1.0	15.0	301.7
cch second order	-241.1167377178	187.0	100.0	100.0	nan	15.0	3.2
diff evo	-241.1167159938	15332.6	0.0	0.0	nan	15.0	77.0
direct	-238.5381236542	10767.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.2
direct with trim	-241.1167376630	10778.0	9.0	9.0	nan	15.0	37.0
dual anneal	-241.1167376622	30027.2	25.2	25.2	1.0	15.0	119.2
trust region	-241.1167376630	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.6
trust region repeats	-241.1167376630	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	2.6

Table 399: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8370391059	1453.2	1453.2	1453.2	1.0	15.0	481.8
cch second order	-287.8370390616	180.0	99.0	99.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-287.8369884120	12449.6	0.0	0.0	nan	15.0	66.1
direct	-287.0526765443	15085.0	0.0	0.0	nan	15.0	70.5
direct with trim	-287.8370391059	15095.0	8.0	8.0	nan	15.0	56.5
dual anneal	-287.8370391049	30025.8	23.8	23.8	1.0	15.0	122.2
trust region	-287.8370391059	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.7
trust region repeats	-287.8370391059	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	3.0

Table 400: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4319099426	1474.2	1474.2	1474.2	1.0	15.0	373.1
cch second order	-339.4319099130	174.0	94.0	94.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-339.4318845638	13646.2	0.0	0.0	nan	15.0	56.5
direct	-335.5904332437	11735.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.6
direct with trim	-339.4319099426	11750.0	13.0	13.0	nan	15.0	46.9
dual anneal	-339.4319099413	30027.4	25.4	25.4	1.0	15.0	120.4
trust region	-339.4319099426	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-339.4319099426	281.0	281.0	281.0	1.0	15.0	2.9

Table 401: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0320435488	1512.6	1512.6	1512.6	1.0	15.0	353.4
cch second order	-396.0320435250	198.0	108.0	108.0	nan	15.0	5.2
diff evo	-396.0319319074	16355.6	0.0	0.0	nan	15.0	66.5
direct	-393.2696460999	11947.0	0.0	0.0	nan	15.0	49.5
direct with trim	-396.0320435488	11961.0	12.0	12.0	nan	15.0	38.4
dual anneal	-396.0320435472	30024.2	22.2	22.2	1.0	15.0	117.3
trust region	-396.0320435488	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-396.0320435488	279.0	279.0	279.0	1.0	15.0	2.8

Table 402: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7625864141	1584.8	1584.8	1584.8	1.0	15.0	359.0
cch second order	-457.7625863502	175.0	96.0	96.0	nan	15.0	3.1
diff evo	-457.7625523773	14594.8	0.0	0.0	nan	15.0	59.4
direct	-453.2443867172	11781.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.7
direct with trim	-457.7625864141	11798.0	15.0	15.0	nan	15.0	46.5
dual anneal	-457.7625864122	30030.6	28.6	28.6	1.0	15.0	135.0
trust region	-457.7625864141	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-457.7625864141	278.0	278.0	278.0	1.0	15.0	2.8

Table 403: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7436943245	1583.2	1583.2	1583.2	1.0	15.0	448.1
cch second order	-524.7436942586	201.0	107.0	107.0	nan	15.0	5.2
diff evo	-524.7436490641	15537.2	0.0	0.0	nan	15.0	58.4
direct	-522.5647233280	12169.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.8
direct with trim	-524.7436943245	12178.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.7
dual anneal	-524.7436943222	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	115.9
trust region	-524.7436943245	14.0	14.0	14.0	nan	15.0	3.2
trust region repeats	-524.7436943245	283.0	283.0	283.0	1.0	15.0	2.5

Table 404: Ar

15.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.5665836037
He	cch second order	-2.8182205974
Li	basin hopping	-7.3224150748
Be	basin hopping	-14.4835653570
B	basin hopping	-24.6275877146
C	basin hopping	-38.0320840747
N	cch second order	-54.9412407682
O	basin hopping	-75.5744629120
F	basin hopping	-100.1318940481
Ne	cch second order	-128.8101336593
Na	cch second order	-161.7452203628
Mg	basin hopping	-199.1341024353
Al	cch second order	-241.1167377178
Si	trust region	-287.8370391059
P	basin hopping	-339.4319099426
S	basin hopping	-396.0320435488
Cl	trust region repeats	-457.7625864141
Ar	basin hopping	-524.7436943245

Table 405: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.6	11.6	11.6	nan	-169.7277542414	3.4
cch second order	176.5	96.0	96.0	nan	-169.7284178399	4.2
trust region repeats	261.2	261.2	261.2	1.0	-169.7277542414	2.8
basin hopping	1371.8	1371.8	1371.8	1.0	-169.7277542414	333.1
direct	11716.4	0.0	0.0	nan	-168.5842413169	52.7
direct with trim	11726.5	8.1	8.1	nan	-169.7277542414	44.9
diff evo	15322.3	0.0	0.0	nan	-169.7277326843	67.1
dual anneal	30020.3	18.3	18.3	1.0	-169.7277542408	118.9

Table 406: Average (all systems)

16   15s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

16.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092525	910.0	910.0	0.0	nan	15.0	7.0
He	-1.4772223965	1069.0	1069.0	0.0	nan	15.0	6.6
Li	-4.1049538392	1088.0	1088.0	0.0	nan	15.0	6.6
Be	-8.4913988183	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	6.6
B	-14.9246856097	1064.0	1064.0	0.0	nan	15.0	6.6
C	-23.6551619974	1067.0	1067.0	0.0	nan	15.0	6.3
N	-34.9060972957	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	4.6
O	-48.8801503585	1093.0	1093.0	0.0	nan	15.0	7.4
F	-65.7636405424	1102.0	1102.0	0.0	nan	15.0	7.8
Ne	-85.7295427387	1107.0	1107.0	0.0	nan	15.0	6.7
Na	-108.9396823132	1105.0	1105.0	0.0	nan	15.0	7.3
Mg	-135.5463992466	1103.0	1103.0	0.0	nan	15.0	6.7
Al	-165.6938444341	1096.0	1096.0	0.0	nan	15.0	6.5
Si	-199.5190120109	1089.0	1089.0	0.0	nan	15.0	6.6
P	-237.1525767337	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	7.2
S	-278.7195839076	1067.0	1067.0	0.0	nan	15.0	6.3
Cl	-324.3400254899	1056.0	1056.0	0.0	nan	15.0	4.2
Ar	-374.1293267842	1047.0	1047.0	0.0	nan	15.0	6.3

Table 407: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092532	1247.4	1247.4	1247.4	1.2	15.0	303.5
He	-1.4772224145	1222.4	1222.4	1222.4	1.4	15.0	383.1
Li	-4.1049538617	1178.6	1178.6	1178.6	1.0	15.0	277.0
Be	-8.4913988410	1224.6	1224.6	1224.6	1.0	15.0	360.7
B	-14.9246856320	1199.8	1199.8	1199.8	1.2	15.0	245.8
C	-23.6551620193	1181.0	1181.0	1181.0	1.0	15.0	362.5
N	-34.9060973174	1192.8	1192.8	1192.8	1.0	15.0	293.1
O	-48.8801503803	1222.8	1222.8	1222.8	1.0	15.0	240.4
F	-65.7636405646	1201.4	1201.4	1201.4	1.0	15.0	311.1
Ne	-85.7295427614	1207.6	1207.6	1207.6	1.2	15.0	310.7
Na	-108.9396823369	1228.4	1228.4	1228.4	1.0	15.0	349.7
Mg	-135.5463992717	1248.8	1248.8	1248.8	1.0	15.0	334.2
Al	-165.6938444613	1232.6	1232.6	1232.6	1.0	15.0	262.8
Si	-199.5190120408	1239.4	1239.4	1239.4	1.0	15.0	289.7
P	-237.1525767672	1251.4	1251.4	1251.4	1.0	15.0	247.1
S	-278.7195839459	1248.2	1248.2	1248.2	1.0	15.0	255.0
Cl	-324.3400255345	1242.4	1242.4	1242.4	1.0	15.0	289.4
Ar	-374.1293268366	1242.2	1242.2	1242.2	1.0	15.0	259.4

Table 408: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092221	126.0	73.0	73.0	nan	15.0	4.0
He	-1.4772224422	197.0	107.0	107.0	nan	15.0	5.0
Li	-4.1049538507	228.0	118.0	118.0	nan	15.0	4.9
Be	-8.4913989213	142.0	79.0	79.0	nan	15.0	4.2
B	-14.9246856280	165.0	92.0	92.0	nan	15.0	4.2
C	-23.6551620825	154.0	88.0	88.0	nan	15.0	4.2
N	-34.9060972080	126.0	72.0	72.0	nan	15.0	3.9
O	-48.8801502495	145.0	81.0	81.0	nan	15.0	4.2
F	-65.7636406843	157.0	89.0	89.0	nan	15.0	4.3
Ne	-85.7295427120	173.0	94.0	94.0	nan	15.0	4.3
Na	-108.9396822005	165.0	93.0	93.0	nan	15.0	4.3
Mg	-135.5463992315	160.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.3
Al	-165.6938444963	168.0	93.0	93.0	nan	15.0	4.5
Si	-199.5190119024	158.0	89.0	89.0	nan	15.0	4.4
P	-237.1525766479	171.0	97.0	97.0	nan	15.0	4.9
S	-278.7195840083	212.0	113.0	113.0	nan	15.0	4.8
Cl	-324.3400255606	163.0	92.0	92.0	nan	15.0	5.0
Ar	-374.1293268914	172.0	98.0	98.0	nan	15.0	4.3

Table 409: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617091227	8754.4	0.0	0.0	nan	15.0	39.2
He	-1.4772221891	9492.2	0.0	0.0	nan	15.0	43.1
Li	-4.1049533376	10292.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.7
Be	-8.4913972561	10205.2	0.0	0.0	nan	15.0	42.0
B	-14.9246838626	10589.6	0.0	0.0	nan	15.0	51.3
C	-23.6551586671	11048.4	0.0	0.0	nan	15.0	57.3
N	-34.9060937676	10595.8	0.0	0.0	nan	15.0	51.5
O	-48.8801430488	9957.2	0.0	0.0	nan	15.0	48.1
F	-65.7636338728	9424.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.5
Ne	-85.7295325431	10341.6	0.0	0.0	nan	15.0	46.7
Na	-108.9396657359	9709.2	0.0	0.0	nan	15.0	46.9
Mg	-135.5463820693	10409.8	0.0	0.0	nan	15.0	50.4
Al	-165.6938307381	10670.2	0.0	0.0	nan	15.0	48.8
Si	-199.5189969354	10676.4	0.0	0.0	nan	15.0	47.2
P	-237.1525581718	12424.8	0.0	0.0	nan	15.0	55.1
S	-278.7195065832	10769.4	0.0	0.0	nan	15.0	47.6
Cl	-324.3399689749	10186.6	0.0	0.0	nan	15.0	44.7
Ar	-374.1292678947	11966.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.8

Table 410: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617085851	11729.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
He	-1.4763057477	9149.0	0.0	0.0	nan	15.0	39.4
Li	-4.0884116835	9897.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.3
Be	-8.4892419032	10407.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.2
B	-14.8564514172	10769.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.7
C	-23.5642524939	11085.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.5
N	-34.5530483833	11241.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.1
O	-48.7166682938	11159.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.0
F	-65.3554923953	10787.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.3
Ne	-85.5407676452	11123.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.0
Na	-108.6847927619	10291.0	0.0	0.0	nan	15.0	39.9
Mg	-135.3714681125	15107.0	0.0	0.0	nan	15.0	76.9
Al	-163.5538115747	11125.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.3
Si	-198.0886291571	10611.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.4
P	-236.1376551069	11267.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.3
S	-278.4246876435	11003.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.6
Cl	-324.0893996365	10603.0	0.0	0.0	nan	15.0	56.0
Ar	-373.6694139231	10751.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.4

Table 411: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092532	11735.0	4.0	4.0	nan	15.0	48.9
He	-1.4772224145	9156.0	5.0	5.0	nan	15.0	33.8
Li	-4.1049538617	9905.0	6.0	6.0	nan	15.0	41.0
Be	-8.4913988410	10415.0	6.0	6.0	nan	15.0	42.7
B	-14.9246856320	10777.0	6.0	6.0	nan	15.0	44.6
C	-23.6551620193	11093.0	6.0	6.0	nan	15.0	43.9
N	-34.9060973174	11250.0	7.0	7.0	nan	15.0	47.8
O	-48.8801503803	11168.0	7.0	7.0	nan	15.0	49.3
F	-65.7636405646	10796.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.5
Ne	-85.7295427614	11132.0	7.0	7.0	nan	15.0	43.5
Na	-108.9396823369	10300.0	7.0	7.0	nan	15.0	44.1
Mg	-135.5463992717	15116.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.8
Al	-165.6938444613	11134.0	7.0	7.0	nan	15.0	54.5
Si	-199.5190120408	10619.0	6.0	6.0	nan	15.0	46.8
P	-237.1525767672	11275.0	6.0	6.0	nan	15.0	45.3
S	-278.7195839459	11012.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.9
Cl	-324.3400255345	10612.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.8
Ar	-374.1293268366	10761.0	8.0	8.0	nan	15.0	44.5

Table 412: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092532	30008.8	6.8	6.8	1.0	15.0	124.6
He	-1.4772224145	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	136.0
Li	-4.1049538617	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	135.8
Be	-8.4913988410	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	138.1
B	-14.9246856320	30010.6	8.6	8.6	1.0	15.0	105.2
C	-23.6551620193	30014.0	12.0	12.0	1.0	15.0	138.1
N	-34.9060973174	30013.2	11.2	11.2	1.0	15.0	134.6
O	-48.8801503803	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	121.6
F	-65.7636405645	30012.6	10.6	10.6	1.0	15.0	138.0
Ne	-85.7295427614	30012.4	10.4	10.4	1.0	15.0	140.1
Na	-108.9396823368	30014.8	12.8	12.8	1.0	15.0	135.7
Mg	-135.5463992716	30016.4	14.4	14.4	1.0	15.0	124.7
Al	-165.6938444611	30012.6	10.6	10.6	1.0	15.0	133.6
Si	-199.5190120406	30014.0	12.0	12.0	1.0	15.0	126.2
P	-237.1525767670	30015.0	13.0	13.0	1.0	15.0	135.0
S	-278.7195839456	30017.8	15.8	15.8	1.0	15.0	134.2
Cl	-324.3400255342	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	140.6
Ar	-374.1293268362	30014.6	12.6	12.6	1.0	15.0	131.3

Table 413: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092532	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	2.8
He	-1.4772224145	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	5.2
Li	-4.1049538617	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	2.9
Be	-8.4913988410	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
B	-14.9246856320	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	3.4
C	-23.6551620193	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
N	-34.9060973174	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.0
O	-48.8801503803	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
F	-65.7636405646	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.9
Ne	-85.7295427614	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.0
Na	-108.9396823369	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
Mg	-135.5463992717	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.1
Al	-165.6938444613	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
Si	-199.5190120408	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
P	-237.1525767672	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
S	-278.7195839459	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
Cl	-324.3400255345	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
Ar	-374.1293268366	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8

Table 414: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617092532	196.0	196.0	196.0	1.0	15.0	3.1
He	-1.4772224145	213.0	213.0	213.0	1.0	15.0	3.1
Li	-4.1049538617	216.0	216.0	216.0	1.0	15.0	2.7
Be	-8.4913988410	227.0	227.0	227.0	2.0	15.0	2.8
B	-14.9246856320	232.0	232.0	232.0	1.0	15.0	2.7
C	-23.6551620193	232.0	232.0	232.0	1.0	15.0	2.7
N	-34.9060973174	241.0	241.0	241.0	1.0	15.0	2.8
O	-48.8801503803	242.0	242.0	242.0	1.0	15.0	2.9
F	-65.7636405646	244.0	244.0	244.0	1.0	15.0	2.7
Ne	-85.7295427614	253.0	253.0	253.0	1.0	15.0	2.6
Na	-108.9396823369	246.0	246.0	246.0	1.0	15.0	2.9
Mg	-135.5463992717	256.0	256.0	256.0	1.0	15.0	2.7
Al	-165.6938444613	259.0	259.0	259.0	1.0	15.0	2.6
Si	-199.5190120408	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	3.0
P	-237.1525767672	258.0	258.0	258.0	1.0	15.0	2.8
S	-278.7195839459	259.0	259.0	259.0	1.0	15.0	2.8
Cl	-324.3400255345	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	2.8
Ar	-374.1293268366	265.0	265.0	265.0	1.0	15.0	2.9

Table 415: trust region repeats

16.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2617092525	910.0	910.0	0.0	nan	15.0	7.0
basin hopping	-0.2617092532	1247.4	1247.4	1247.4	1.2	15.0	303.5
cch second order	-0.2617092221	126.0	73.0	73.0	nan	15.0	4.0
diff evo	-0.2617091227	8754.4	0.0	0.0	nan	15.0	39.2
direct	-0.2617085851	11729.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.2
direct with trim	-0.2617092532	11735.0	4.0	4.0	nan	15.0	48.9
dual anneal	-0.2617092532	30008.8	6.8	6.8	1.0	15.0	124.6
trust region	-0.2617092532	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-0.2617092532	196.0	196.0	196.0	1.0	15.0	3.1

Table 416: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4772223965	1069.0	1069.0	0.0	nan	15.0	6.6
basin hopping	-1.4772224145	1222.4	1222.4	1222.4	1.4	15.0	383.1
cch second order	-1.4772224422	197.0	107.0	107.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-1.4772221891	9492.2	0.0	0.0	nan	15.0	43.1
direct	-1.4763057477	9149.0	0.0	0.0	nan	15.0	39.4
direct with trim	-1.4772224145	9156.0	5.0	5.0	nan	15.0	33.8
dual anneal	-1.4772224145	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	136.0
trust region	-1.4772224145	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	5.2
trust region repeats	-1.4772224145	213.0	213.0	213.0	1.0	15.0	3.1

Table 417: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1049538392	1088.0	1088.0	0.0	nan	15.0	6.6
basin hopping	-4.1049538617	1178.6	1178.6	1178.6	1.0	15.0	277.0
cch second order	-4.1049538507	228.0	118.0	118.0	nan	15.0	4.9
diff evo	-4.1049533376	10292.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.7
direct	-4.0884116835	9897.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.3
direct with trim	-4.1049538617	9905.0	6.0	6.0	nan	15.0	41.0
dual anneal	-4.1049538617	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	135.8
trust region	-4.1049538617	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-4.1049538617	216.0	216.0	216.0	1.0	15.0	2.7

Table 418: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4913988183	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	6.6
basin hopping	-8.4913988410	1224.6	1224.6	1224.6	1.0	15.0	360.7
cch second order	-8.4913989213	142.0	79.0	79.0	nan	15.0	4.2
diff evo	-8.4913972561	10205.2	0.0	0.0	nan	15.0	42.0
direct	-8.4892419032	10407.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.2
direct with trim	-8.4913988410	10415.0	6.0	6.0	nan	15.0	42.7
dual anneal	-8.4913988410	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	138.1
trust region	-8.4913988410	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-8.4913988410	227.0	227.0	227.0	2.0	15.0	2.8

Table 419: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9246856097	1064.0	1064.0	0.0	nan	15.0	6.6
basin hopping	-14.9246856320	1199.8	1199.8	1199.8	1.2	15.0	245.8
cch second order	-14.9246856280	165.0	92.0	92.0	nan	15.0	4.2
diff evo	-14.9246838626	10589.6	0.0	0.0	nan	15.0	51.3
direct	-14.8564514172	10769.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.7
direct with trim	-14.9246856320	10777.0	6.0	6.0	nan	15.0	44.6
dual anneal	-14.9246856320	30010.6	8.6	8.6	1.0	15.0	105.2
trust region	-14.9246856320	8.0	8.0	8.0	nan	15.0	3.4
trust region repeats	-14.9246856320	232.0	232.0	232.0	1.0	15.0	2.7

Table 420: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6551619974	1067.0	1067.0	0.0	nan	15.0	6.3
basin hopping	-23.6551620193	1181.0	1181.0	1181.0	1.0	15.0	362.5
cch second order	-23.6551620825	154.0	88.0	88.0	nan	15.0	4.2
diff evo	-23.6551586671	11048.4	0.0	0.0	nan	15.0	57.3
direct	-23.5642524939	11085.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.5
direct with trim	-23.6551620193	11093.0	6.0	6.0	nan	15.0	43.9
dual anneal	-23.6551620193	30014.0	12.0	12.0	1.0	15.0	138.1
trust region	-23.6551620193	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-23.6551620193	232.0	232.0	232.0	1.0	15.0	2.7

Table 421: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9060972957	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	4.6
basin hopping	-34.9060973174	1192.8	1192.8	1192.8	1.0	15.0	293.1
cch second order	-34.9060972080	126.0	72.0	72.0	nan	15.0	3.9
diff evo	-34.9060937676	10595.8	0.0	0.0	nan	15.0	51.5
direct	-34.5530483833	11241.0	0.0	0.0	nan	15.0	48.1
direct with trim	-34.9060973174	11250.0	7.0	7.0	nan	15.0	47.8
dual anneal	-34.9060973174	30013.2	11.2	11.2	1.0	15.0	134.6
trust region	-34.9060973174	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.0
trust region repeats	-34.9060973174	241.0	241.0	241.0	1.0	15.0	2.8

Table 422: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8801503585	1093.0	1093.0	0.0	nan	15.0	7.4
basin hopping	-48.8801503803	1222.8	1222.8	1222.8	1.0	15.0	240.4
cch second order	-48.8801502495	145.0	81.0	81.0	nan	15.0	4.2
diff evo	-48.8801430488	9957.2	0.0	0.0	nan	15.0	48.1
direct	-48.7166682938	11159.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.0
direct with trim	-48.8801503803	11168.0	7.0	7.0	nan	15.0	49.3
dual anneal	-48.8801503803	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	121.6
trust region	-48.8801503803	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-48.8801503803	242.0	242.0	242.0	1.0	15.0	2.9

Table 423: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7636405424	1102.0	1102.0	0.0	nan	15.0	7.8
basin hopping	-65.7636405646	1201.4	1201.4	1201.4	1.0	15.0	311.1
cch second order	-65.7636406843	157.0	89.0	89.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-65.7636338728	9424.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.5
direct	-65.3554923953	10787.0	0.0	0.0	nan	15.0	57.3
direct with trim	-65.7636405646	10796.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.5
dual anneal	-65.7636405645	30012.6	10.6	10.6	1.0	15.0	138.0
trust region	-65.7636405646	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.9
trust region repeats	-65.7636405646	244.0	244.0	244.0	1.0	15.0	2.7

Table 424: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7295427387	1107.0	1107.0	0.0	nan	15.0	6.7
basin hopping	-85.7295427614	1207.6	1207.6	1207.6	1.2	15.0	310.7
cch second order	-85.7295427120	173.0	94.0	94.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-85.7295325431	10341.6	0.0	0.0	nan	15.0	46.7
direct	-85.5407676452	11123.0	0.0	0.0	nan	15.0	59.0
direct with trim	-85.7295427614	11132.0	7.0	7.0	nan	15.0	43.5
dual anneal	-85.7295427614	30012.4	10.4	10.4	1.0	15.0	140.1
trust region	-85.7295427614	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	3.0
trust region repeats	-85.7295427614	253.0	253.0	253.0	1.0	15.0	2.6

Table 425: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9396823132	1105.0	1105.0	0.0	nan	15.0	7.3
basin hopping	-108.9396823369	1228.4	1228.4	1228.4	1.0	15.0	349.7
cch second order	-108.9396822005	165.0	93.0	93.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-108.9396657359	9709.2	0.0	0.0	nan	15.0	46.9
direct	-108.6847927619	10291.0	0.0	0.0	nan	15.0	39.9
direct with trim	-108.9396823369	10300.0	7.0	7.0	nan	15.0	44.1
dual anneal	-108.9396823368	30014.8	12.8	12.8	1.0	15.0	135.7
trust region	-108.9396823369	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-108.9396823369	246.0	246.0	246.0	1.0	15.0	2.9

Table 426: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5463992466	1103.0	1103.0	0.0	nan	15.0	6.7
basin hopping	-135.5463992717	1248.8	1248.8	1248.8	1.0	15.0	334.2
cch second order	-135.5463992315	160.0	91.0	91.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-135.5463820693	10409.8	0.0	0.0	nan	15.0	50.4
direct	-135.3714681125	15107.0	0.0	0.0	nan	15.0	76.9
direct with trim	-135.5463992717	15116.0	7.0	7.0	nan	15.0	66.8
dual anneal	-135.5463992716	30016.4	14.4	14.4	1.0	15.0	124.7
trust region	-135.5463992717	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	3.1
trust region repeats	-135.5463992717	256.0	256.0	256.0	1.0	15.0	2.7

Table 427: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.6938444341	1096.0	1096.0	0.0	nan	15.0	6.5
basin hopping	-165.6938444613	1232.6	1232.6	1232.6	1.0	15.0	262.8
cch second order	-165.6938444963	168.0	93.0	93.0	nan	15.0	4.5
diff evo	-165.6938307381	10670.2	0.0	0.0	nan	15.0	48.8
direct	-163.5538115747	11125.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.3
direct with trim	-165.6938444613	11134.0	7.0	7.0	nan	15.0	54.5
dual anneal	-165.6938444611	30012.6	10.6	10.6	1.0	15.0	133.6
trust region	-165.6938444613	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-165.6938444613	259.0	259.0	259.0	1.0	15.0	2.6

Table 428: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5190120109	1089.0	1089.0	0.0	nan	15.0	6.6
basin hopping	-199.5190120408	1239.4	1239.4	1239.4	1.0	15.0	289.7
cch second order	-199.5190119024	158.0	89.0	89.0	nan	15.0	4.4
diff evo	-199.5189969354	10676.4	0.0	0.0	nan	15.0	47.2
direct	-198.0886291571	10611.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.4
direct with trim	-199.5190120408	10619.0	6.0	6.0	nan	15.0	46.8
dual anneal	-199.5190120406	30014.0	12.0	12.0	1.0	15.0	126.2
trust region	-199.5190120408	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-199.5190120408	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	3.0

Table 429: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1525767337	1079.0	1079.0	0.0	nan	15.0	7.2
basin hopping	-237.1525767672	1251.4	1251.4	1251.4	1.0	15.0	247.1
cch second order	-237.1525766479	171.0	97.0	97.0	nan	15.0	4.9
diff evo	-237.1525581718	12424.8	0.0	0.0	nan	15.0	55.1
direct	-236.1376551069	11267.0	0.0	0.0	nan	15.0	58.3
direct with trim	-237.1525767672	11275.0	6.0	6.0	nan	15.0	45.3
dual anneal	-237.1525767670	30015.0	13.0	13.0	1.0	15.0	135.0
trust region	-237.1525767672	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-237.1525767672	258.0	258.0	258.0	1.0	15.0	2.8

Table 430: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7195839076	1067.0	1067.0	0.0	nan	15.0	6.3
basin hopping	-278.7195839459	1248.2	1248.2	1248.2	1.0	15.0	255.0
cch second order	-278.7195840083	212.0	113.0	113.0	nan	15.0	4.8
diff evo	-278.7195065832	10769.4	0.0	0.0	nan	15.0	47.6
direct	-278.4246876435	11003.0	0.0	0.0	nan	15.0	52.6
direct with trim	-278.7195839459	11012.0	7.0	7.0	nan	15.0	46.9
dual anneal	-278.7195839456	30017.8	15.8	15.8	1.0	15.0	134.2
trust region	-278.7195839459	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-278.7195839459	259.0	259.0	259.0	1.0	15.0	2.8

Table 431: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3400254899	1056.0	1056.0	0.0	nan	15.0	4.2
basin hopping	-324.3400255345	1242.4	1242.4	1242.4	1.0	15.0	289.4
cch second order	-324.3400255606	163.0	92.0	92.0	nan	15.0	5.0
diff evo	-324.3399689749	10186.6	0.0	0.0	nan	15.0	44.7
direct	-324.0893996365	10603.0	0.0	0.0	nan	15.0	56.0
direct with trim	-324.3400255345	10612.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.8
dual anneal	-324.3400255342	30012.8	10.8	10.8	1.0	15.0	140.6
trust region	-324.3400255345	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-324.3400255345	260.0	260.0	260.0	1.0	15.0	2.8

Table 432: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1293267842	1047.0	1047.0	0.0	nan	15.0	6.3
basin hopping	-374.1293268366	1242.2	1242.2	1242.2	1.0	15.0	259.4
cch second order	-374.1293268914	172.0	98.0	98.0	nan	15.0	4.3
diff evo	-374.1292678947	11966.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.8
direct	-373.6694139231	10751.0	0.0	0.0	nan	15.0	51.4
direct with trim	-374.1293268366	10761.0	8.0	8.0	nan	15.0	44.5
dual anneal	-374.1293268362	30014.6	12.6	12.6	1.0	15.0	131.3
trust region	-374.1293268366	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.8
trust region repeats	-374.1293268366	265.0	265.0	265.0	1.0	15.0	2.9

Table 433: Ar

16.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.2617092532
He	cch second order	-1.4772224422
Li	basin hopping	-4.1049538617
Be	cch second order	-8.4913989213
B	basin hopping	-14.9246856320
C	cch second order	-23.6551620825
N	basin hopping	-34.9060973174
O	basin hopping	-48.8801503803
F	cch second order	-65.7636406843
Ne	basin hopping	-85.7295427614
Na	basin hopping	-108.9396823369
Mg	basin hopping	-135.5463992717
Al	cch second order	-165.6938444963
Si	trust region	-199.5190120408
P	basin hopping	-237.1525767672
S	cch second order	-278.7195840083
Cl	cch second order	-324.3400255606
Ar	cch second order	-374.1293268914

Table 434: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	9.8	9.8	9.8	nan	-117.3463896800	2.9
cch second order	165.7	92.2	92.2	nan	-117.3463896633	4.4
trust region repeats	242.2	242.2	242.2	1.1	-117.3463896800	2.8
acevedo	1072.2	1072.2	0.0	nan	-117.3463896538	6.5
basin hopping	1222.9	1222.9	1222.9	1.1	-117.3463896800	298.6
diff evo	10417.4	0.0	0.0	nan	-117.3463724873	47.8
direct	11005.8	0.0	0.0	nan	-116.9401225814	53.2
direct with trim	11014.2	6.4	6.4	nan	-117.3463896800	46.8
dual anneal	30013.0	11.0	11.0	1.0	-117.3463896799	131.9

Table 435: Average (all systems)

17   15s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

17.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 436: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063658591	1215.2	1215.2	1215.2	1.0	15.0	317.7
He	-2.7227468528	1163.6	1163.6	1163.6	1.6	15.0	252.9
Li	-8.5232022415	1182.8	1182.8	1182.8	1.2	15.0	280.9
Be	-19.3472291072	1131.2	1131.2	1131.2	1.0	15.0	313.5
B	-36.7191544663	1145.6	1145.6	1145.6	1.0	15.0	285.9
C	-62.1529010724	1132.6	1132.6	1132.6	1.4	15.0	303.1
N	-97.1565529288	1161.6	1161.6	1161.6	1.2	15.0	331.6
O	-143.2342076442	1188.8	1188.8	1188.8	1.0	15.0	290.5
F	-201.8862866635	1193.2	1193.2	1193.2	1.4	15.0	237.1
Ne	-274.6098597574	1149.4	1149.4	1149.4	1.6	15.0	309.8
Na	-362.8992799788	1174.0	1174.0	1174.0	1.6	15.0	361.4
Mg	-468.2466884056	1194.8	1194.8	1194.8	1.2	15.0	285.2
Al	-592.1428552027	1152.8	1152.8	1152.8	1.4	15.0	358.5
Si	-736.0771994017	1133.0	1133.0	1133.0	1.0	15.0	318.4
P	-901.5381407101	1197.8	1197.8	1197.8	1.2	15.0	348.4
S	-1090.0129883282	1322.2	1322.2	1322.2	1.6	15.0	388.4
Cl	-1302.9882435211	1310.0	1310.0	1310.0	2.0	15.0	374.8
Ar	-1541.9493458478	1234.2	1234.2	1234.2	2.4	15.0	336.7

Table 437: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063659725	169.0	95.0	95.0	nan	15.0	3.4
He	-2.7227466570	211.0	116.0	116.0	nan	15.0	3.4
Li	-8.5232018509	234.0	127.0	127.0	nan	15.0	3.4
Be	-19.3472281690	290.0	156.0	156.0	nan	15.0	3.9
B	-36.7191546647	323.0	170.0	170.0	nan	15.0	4.1
C	-62.1529009223	414.0	223.0	223.0	nan	15.0	4.8
N	-97.1565546037	439.0	245.0	245.0	nan	15.0	5.6
O	-143.2342071141	583.0	309.0	309.0	nan	15.0	5.9
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 438: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063657160	9231.8	0.0	0.0	nan	15.0	41.6
He	-2.7227465739	9355.8	0.0	0.0	nan	15.0	37.5
Li	-8.5232014436	9827.0	0.0	0.0	nan	15.0	42.4
Be	-19.3472270080	8773.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.0
B	-36.7191507775	8593.2	0.0	0.0	nan	15.0	38.9
C	-62.1528935596	8723.4	0.0	0.0	nan	15.0	32.2
N	-97.1565417207	8140.6	0.0	0.0	nan	15.0	33.1
O	-143.2341860158	7805.8	0.0	0.0	nan	15.0	29.9
F	-201.8862732383	8990.0	0.0	0.0	nan	15.0	36.4
Ne	-274.6098243273	8326.6	0.0	0.0	nan	15.0	40.5
Na	-362.8994366663	13844.6	0.0	0.0	nan	15.0	54.9
Mg	-468.2466499325	8605.6	0.0	0.0	nan	15.0	35.5
Al	-592.1427942752	8153.0	0.0	0.0	nan	15.0	36.0
Si	-736.0771326204	8140.6	0.0	0.0	nan	15.0	39.6
P	-901.5379907620	8599.4	0.0	0.0	nan	15.0	38.5
S	-1090.0128188303	7991.8	0.0	0.0	nan	15.0	29.9
Cl	-1302.9880266926	8785.4	0.0	0.0	nan	15.0	32.9
Ar	-1541.9491814428	7762.4	0.0	0.0	nan	15.0	39.2

Table 439: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063657936	8607.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.2
He	-2.7223992580	10019.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.8
Li	-8.5228696491	9123.0	0.0	0.0	nan	15.0	42.6
Be	-19.3472037413	8621.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.3
B	-36.7183760505	9251.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.5
C	-62.1505538683	9355.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.0
N	-97.1407223314	9241.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.0
O	-143.2337509481	9373.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.5
F	-201.8837406279	9685.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.8
Ne	-274.6043112729	9285.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.4
Na	-362.8912419549	10131.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.7
Mg	-468.2378752893	9341.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.5
Al	-592.0464481038	9063.0	0.0	0.0	nan	15.0	40.9
Si	-735.9897038814	11117.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.1
P	-901.4373270246	10273.0	0.0	0.0	nan	15.0	46.0
S	-1089.9157637948	8641.0	0.0	0.0	nan	15.0	40.8
Cl	-1302.9154756848	9227.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.8
Ar	-1541.9440294423	9111.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.4

Table 440: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063658591	8613.0	4.0	4.0	nan	15.0	33.6
He	-2.7227468528	10026.0	5.0	5.0	nan	15.0	39.3
Li	-8.5232022415	9130.0	5.0	5.0	nan	15.0	36.6
Be	-19.3472291072	8628.0	5.0	5.0	nan	15.0	37.9
B	-36.7191544663	9258.0	5.0	5.0	nan	15.0	44.6
C	-62.1529010724	9362.0	5.0	5.0	nan	15.0	40.6
N	-97.1565529288	9249.0	6.0	6.0	nan	15.0	40.4
O	-143.2342076442	9381.0	6.0	6.0	nan	15.0	36.9
F	-201.8862859112	9692.0	5.0	5.0	nan	15.0	44.2
Ne	-274.6098597574	9292.0	5.0	5.0	nan	15.0	38.3
Na	-362.8992488299	10138.0	5.0	5.0	nan	15.0	41.5
Mg	-468.2466884056	9348.0	5.0	5.0	nan	15.0	42.8
Al	-592.1428431478	9072.0	7.0	7.0	nan	15.0	42.8
Si	-736.0771994017	11125.0	6.0	6.0	nan	15.0	54.7
P	-901.5381116878	10282.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.1
S	-1090.0129869693	8651.0	8.0	8.0	nan	15.0	33.7
Cl	-1302.9882435211	9236.0	7.0	7.0	nan	15.0	39.3
Ar	-1541.9493363984	9118.0	5.0	5.0	nan	15.0	45.9

Table 441: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063658591	30008.8	6.8	6.8	1.0	15.0	128.6
He	-2.7227468528	30009.2	7.2	7.2	1.0	15.0	136.7
Li	-8.5232022415	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	116.3
Be	-19.3472291071	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	115.7
B	-36.7191544658	30011.6	9.6	9.6	1.0	15.0	132.4
C	-62.1529010710	30012.4	10.4	10.4	1.0	15.0	130.7
N	-97.1565529257	30013.0	11.0	11.0	1.0	15.0	130.6
O	-143.2342076375	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	130.0
F	-201.8862858981	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	127.8
Ne	-274.6098597338	30016.0	14.0	14.0	1.0	15.0	135.2
Na	-362.8992487893	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	134.0
Mg	-468.2466883389	30021.4	19.4	19.4	1.0	15.0	126.9
Al	-592.1428550974	30021.6	19.6	19.6	1.0	15.0	148.9
Si	-736.0771992408	30024.0	22.0	22.0	1.0	15.0	139.0
P	-901.5381114489	30025.0	23.0	23.0	1.0	15.0	129.3
S	-1090.0129866233	30026.2	24.2	24.2	1.0	15.0	146.0
Cl	-1302.9882430308	30030.0	28.0	28.0	1.0	15.0	141.1
Ar	-1541.9493357171	30031.4	29.4	29.4	1.0	15.0	149.8

Table 442: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063658591	7.0	7.0	7.0	nan	15.0	2.0
He	-2.7227468528	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
Li	-8.5232022415	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
Be	-19.3472291072	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.5
B	-36.7191544663	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.3
C	-62.1529010724	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.0
N	-97.1565529288	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
O	-143.2342076442	18.0	18.0	18.0	nan	15.0	2.2
F	-201.8862859112	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	5.3
Ne	-274.6098597574	17.0	17.0	17.0	nan	15.0	6.0
Na	-362.8992488299	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	6.0
Mg	-468.2466884056	16.0	16.0	16.0	nan	15.0	2.2
Al	-592.1428552027	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	8.9
Si	-736.0771994017	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	2.2
P	-901.5381116878	21.0	21.0	21.0	nan	15.0	6.9
S	-1090.0129869693	23.0	23.0	23.0	nan	15.0	2.3
Cl	-1302.9882435211	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	3.9
Ar	-1541.9493363984	31.0	31.0	31.0	nan	15.0	4.9

Table 443: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4063658591	157.0	157.0	157.0	1.0	15.0	2.8
He	-2.7227468528	173.0	173.0	173.0	1.0	15.0	3.8
Li	-8.5232022415	207.0	207.0	207.0	1.0	15.0	3.3
Be	-19.3472291072	182.0	182.0	182.0	1.0	15.0	2.9
B	-36.7191544663	201.0	201.0	201.0	1.0	15.0	3.7
C	-62.1529010724	206.0	206.0	206.0	1.0	15.0	3.7
N	-97.1565529288	228.0	228.0	228.0	2.0	15.0	3.1
O	-143.2342076442	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	3.7
F	-201.8862866635	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	4.6
Ne	-274.6098597574	288.0	288.0	288.0	1.0	15.0	5.3
Na	-362.8992488299	320.0	320.0	320.0	1.0	15.0	4.9
Mg	-468.2466884056	354.0	354.0	354.0	1.0	15.0	6.9
Al	-592.1428552027	369.0	369.0	369.0	3.0	15.0	5.4
Si	-736.0771994017	401.0	401.0	401.0	1.0	15.0	7.9
P	-901.5381116878	464.0	464.0	464.0	1.0	15.0	8.9
S	-1090.0129869693	491.0	491.0	491.0	1.0	15.0	8.5
Cl	-1302.9882435211	545.0	545.0	545.0	1.0	15.0	6.7
Ar	-1541.9493363984	652.0	652.0	652.0	2.0	15.0	9.7

Table 444: trust region repeats

17.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4063658591	1215.2	1215.2	1215.2	1.0	15.0	317.7
cch second order	-0.4063659725	169.0	95.0	95.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-0.4063657160	9231.8	0.0	0.0	nan	15.0	41.6
direct	-0.4063657936	8607.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.2
direct with trim	-0.4063658591	8613.0	4.0	4.0	nan	15.0	33.6
dual anneal	-0.4063658591	30008.8	6.8	6.8	1.0	15.0	128.6
trust region	-0.4063658591	7.0	7.0	7.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-0.4063658591	157.0	157.0	157.0	1.0	15.0	2.8

Table 445: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7227468528	1163.6	1163.6	1163.6	1.6	15.0	252.9
cch second order	-2.7227466570	211.0	116.0	116.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-2.7227465739	9355.8	0.0	0.0	nan	15.0	37.5
direct	-2.7223992580	10019.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.8
direct with trim	-2.7227468528	10026.0	5.0	5.0	nan	15.0	39.3
dual anneal	-2.7227468528	30009.2	7.2	7.2	1.0	15.0	136.7
trust region	-2.7227468528	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	1.9
trust region repeats	-2.7227468528	173.0	173.0	173.0	1.0	15.0	3.8

Table 446: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5232022415	1182.8	1182.8	1182.8	1.2	15.0	280.9
cch second order	-8.5232018509	234.0	127.0	127.0	nan	15.0	3.4
diff evo	-8.5232014436	9827.0	0.0	0.0	nan	15.0	42.4
direct	-8.5228696491	9123.0	0.0	0.0	nan	15.0	42.6
direct with trim	-8.5232022415	9130.0	5.0	5.0	nan	15.0	36.6
dual anneal	-8.5232022415	30010.0	8.0	8.0	1.0	15.0	116.3
trust region	-8.5232022415	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-8.5232022415	207.0	207.0	207.0	1.0	15.0	3.3

Table 447: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3472291072	1131.2	1131.2	1131.2	1.0	15.0	313.5
cch second order	-19.3472281690	290.0	156.0	156.0	nan	15.0	3.9
diff evo	-19.3472270080	8773.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.0
direct	-19.3472037413	8621.0	0.0	0.0	nan	15.0	44.3
direct with trim	-19.3472291072	8628.0	5.0	5.0	nan	15.0	37.9
dual anneal	-19.3472291071	30011.4	9.4	9.4	1.0	15.0	115.7
trust region	-19.3472291072	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.5
trust region repeats	-19.3472291072	182.0	182.0	182.0	1.0	15.0	2.9

Table 448: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7191544663	1145.6	1145.6	1145.6	1.0	15.0	285.9
cch second order	-36.7191546647	323.0	170.0	170.0	nan	15.0	4.1
diff evo	-36.7191507775	8593.2	0.0	0.0	nan	15.0	38.9
direct	-36.7183760505	9251.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.5
direct with trim	-36.7191544663	9258.0	5.0	5.0	nan	15.0	44.6
dual anneal	-36.7191544658	30011.6	9.6	9.6	1.0	15.0	132.4
trust region	-36.7191544663	9.0	9.0	9.0	nan	15.0	3.3
trust region repeats	-36.7191544663	201.0	201.0	201.0	1.0	15.0	3.7

Table 449: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1529010724	1132.6	1132.6	1132.6	1.4	15.0	303.1
cch second order	-62.1529009223	414.0	223.0	223.0	nan	15.0	4.8
diff evo	-62.1528935596	8723.4	0.0	0.0	nan	15.0	32.2
direct	-62.1505538683	9355.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.0
direct with trim	-62.1529010724	9362.0	5.0	5.0	nan	15.0	40.6
dual anneal	-62.1529010710	30012.4	10.4	10.4	1.0	15.0	130.7
trust region	-62.1529010724	10.0	10.0	10.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-62.1529010724	206.0	206.0	206.0	1.0	15.0	3.7

Table 450: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1565529288	1161.6	1161.6	1161.6	1.2	15.0	331.6
cch second order	-97.1565546037	439.0	245.0	245.0	nan	15.0	5.6
diff evo	-97.1565417207	8140.6	0.0	0.0	nan	15.0	33.1
direct	-97.1407223314	9241.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.0
direct with trim	-97.1565529288	9249.0	6.0	6.0	nan	15.0	40.4
dual anneal	-97.1565529257	30013.0	11.0	11.0	1.0	15.0	130.6
trust region	-97.1565529288	11.0	11.0	11.0	nan	15.0	2.0
trust region repeats	-97.1565529288	228.0	228.0	228.0	2.0	15.0	3.1

Table 451: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2342076442	1188.8	1188.8	1188.8	1.0	15.0	290.5
cch second order	-143.2342071141	583.0	309.0	309.0	nan	15.0	5.9
diff evo	-143.2341860158	7805.8	0.0	0.0	nan	15.0	29.9
direct	-143.2337509481	9373.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.5
direct with trim	-143.2342076442	9381.0	6.0	6.0	nan	15.0	36.9
dual anneal	-143.2342076375	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	130.0
trust region	-143.2342076442	18.0	18.0	18.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-143.2342076442	267.0	267.0	267.0	1.0	15.0	3.7

Table 452: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.8862866635	1193.2	1193.2	1193.2	1.4	15.0	237.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-201.8862732383	8990.0	0.0	0.0	nan	15.0	36.4
direct	-201.8837406279	9685.0	0.0	0.0	nan	15.0	45.8
direct with trim	-201.8862859112	9692.0	5.0	5.0	nan	15.0	44.2
dual anneal	-201.8862858981	30016.6	14.6	14.6	1.0	15.0	127.8
trust region	-201.8862859112	12.0	12.0	12.0	nan	15.0	5.3
trust region repeats	-201.8862866635	275.0	275.0	275.0	1.0	15.0	4.6

Table 453: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6098597574	1149.4	1149.4	1149.4	1.6	15.0	309.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-274.6098243273	8326.6	0.0	0.0	nan	15.0	40.5
direct	-274.6043112729	9285.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.4
direct with trim	-274.6098597574	9292.0	5.0	5.0	nan	15.0	38.3
dual anneal	-274.6098597338	30016.0	14.0	14.0	1.0	15.0	135.2
trust region	-274.6098597574	17.0	17.0	17.0	nan	15.0	6.0
trust region repeats	-274.6098597574	288.0	288.0	288.0	1.0	15.0	5.3

Table 454: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.8992799788	1174.0	1174.0	1174.0	1.6	15.0	361.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-362.8994366663	13844.6	0.0	0.0	nan	15.0	54.9
direct	-362.8912419549	10131.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.7
direct with trim	-362.8992488299	10138.0	5.0	5.0	nan	15.0	41.5
dual anneal	-362.8992487893	30018.4	16.4	16.4	1.0	15.0	134.0
trust region	-362.8992488299	15.0	15.0	15.0	nan	15.0	6.0
trust region repeats	-362.8992488299	320.0	320.0	320.0	1.0	15.0	4.9

Table 455: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.2466884056	1194.8	1194.8	1194.8	1.2	15.0	285.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-468.2466499325	8605.6	0.0	0.0	nan	15.0	35.5
direct	-468.2378752893	9341.0	0.0	0.0	nan	15.0	47.5
direct with trim	-468.2466884056	9348.0	5.0	5.0	nan	15.0	42.8
dual anneal	-468.2466883389	30021.4	19.4	19.4	1.0	15.0	126.9
trust region	-468.2466884056	16.0	16.0	16.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-468.2466884056	354.0	354.0	354.0	1.0	15.0	6.9

Table 456: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.1428552027	1152.8	1152.8	1152.8	1.4	15.0	358.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-592.1427942752	8153.0	0.0	0.0	nan	15.0	36.0
direct	-592.0464481038	9063.0	0.0	0.0	nan	15.0	40.9
direct with trim	-592.1428431478	9072.0	7.0	7.0	nan	15.0	42.8
dual anneal	-592.1428550974	30021.6	19.6	19.6	1.0	15.0	148.9
trust region	-592.1428552027	20.0	20.0	20.0	nan	15.0	8.9
trust region repeats	-592.1428552027	369.0	369.0	369.0	3.0	15.0	5.4

Table 457: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.0771994017	1133.0	1133.0	1133.0	1.0	15.0	318.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-736.0771326204	8140.6	0.0	0.0	nan	15.0	39.6
direct	-735.9897038814	11117.0	0.0	0.0	nan	15.0	53.1
direct with trim	-736.0771994017	11125.0	6.0	6.0	nan	15.0	54.7
dual anneal	-736.0771992408	30024.0	22.0	22.0	1.0	15.0	139.0
trust region	-736.0771994017	22.0	22.0	22.0	nan	15.0	2.2
trust region repeats	-736.0771994017	401.0	401.0	401.0	1.0	15.0	7.9

Table 458: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.5381407101	1197.8	1197.8	1197.8	1.2	15.0	348.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-901.5379907620	8599.4	0.0	0.0	nan	15.0	38.5
direct	-901.4373270246	10273.0	0.0	0.0	nan	15.0	46.0
direct with trim	-901.5381116878	10282.0	7.0	7.0	nan	15.0	48.1
dual anneal	-901.5381114489	30025.0	23.0	23.0	1.0	15.0	129.3
trust region	-901.5381116878	21.0	21.0	21.0	nan	15.0	6.9
trust region repeats	-901.5381116878	464.0	464.0	464.0	1.0	15.0	8.9

Table 459: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.0129883282	1322.2	1322.2	1322.2	1.6	15.0	388.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1090.0128188303	7991.8	0.0	0.0	nan	15.0	29.9
direct	-1089.9157637948	8641.0	0.0	0.0	nan	15.0	40.8
direct with trim	-1090.0129869693	8651.0	8.0	8.0	nan	15.0	33.7
dual anneal	-1090.0129866233	30026.2	24.2	24.2	1.0	15.0	146.0
trust region	-1090.0129869693	23.0	23.0	23.0	nan	15.0	2.3
trust region repeats	-1090.0129869693	491.0	491.0	491.0	1.0	15.0	8.5

Table 460: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1302.9882435211	1310.0	1310.0	1310.0	2.0	15.0	374.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1302.9880266926	8785.4	0.0	0.0	nan	15.0	32.9
direct	-1302.9154756848	9227.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.8
direct with trim	-1302.9882435211	9236.0	7.0	7.0	nan	15.0	39.3
dual anneal	-1302.9882430308	30030.0	28.0	28.0	1.0	15.0	141.1
trust region	-1302.9882435211	24.0	24.0	24.0	nan	15.0	3.9
trust region repeats	-1302.9882435211	545.0	545.0	545.0	1.0	15.0	6.7

Table 461: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1541.9493458478	1234.2	1234.2	1234.2	2.4	15.0	336.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1541.9491814428	7762.4	0.0	0.0	nan	15.0	39.2
direct	-1541.9440294423	9111.0	0.0	0.0	nan	15.0	43.4
direct with trim	-1541.9493363984	9118.0	5.0	5.0	nan	15.0	45.9
dual anneal	-1541.9493357171	30031.4	29.4	29.4	1.0	15.0	149.8
trust region	-1541.9493363984	31.0	31.0	31.0	nan	15.0	4.9
trust region repeats	-1541.9493363984	652.0	652.0	652.0	2.0	15.0	9.7

Table 462: Ar

17.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.4063659725
He	basin hopping	-2.7227468528
Li	trust region repeats	-8.5232022415
Be	basin hopping	-19.3472291072
B	cch second order	-36.7191546647
C	basin hopping	-62.1529010724
N	cch second order	-97.1565546037
O	trust region	-143.2342076442
F	basin hopping	-201.8862866635
Ne	basin hopping	-274.6098597574
Na	diff evo	-362.8994366663
Mg	basin hopping	-468.2466884056
Al	basin hopping	-592.1428552027
Si	trust region repeats	-736.0771994017
P	basin hopping	-901.5381407101
S	basin hopping	-1090.0129883282
Cl	basin hopping	-1302.9882435211
Ar	basin hopping	-1541.9493458478

Table 463: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.7	15.7	15.7	nan	-435.7007320143	3.8
trust region repeats	321.1	321.1	321.1	1.2	-435.7007320561	5.3
cch second order	332.9	180.1	180.1	nan	-46.2827949943	4.3
basin hopping	1187.9	1187.9	1187.9	1.4	-435.7007359994	316.4
diff evo	8869.4	0.0	0.0	nan	-435.7006912002	37.9
direct	9414.7	0.0	0.0	nan	-435.6726754843	44.9
direct with trim	9422.3	5.6	5.6	nan	-435.7007313446	41.2
dual anneal	30018.0	16.0	16.0	1.0	-435.7007318933	133.3

Table 464: Average (all systems)

18   19s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

18.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 465: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7142412861	6108.4	6108.4	6108.4	20.4	19.0	1953.7
He	-3.2796853509	4851.6	4851.6	4851.6	18.2	19.0	1239.3
Li	-8.4945677229	4328.6	4328.6	4328.6	12.8	19.0	939.1
Be	-16.7628977907	5358.4	5358.4	5358.4	3.0	19.0	815.6
B	-27.0847042907	5224.8	5224.8	5224.8	2.2	19.0	893.4
C	-42.3374974740	4919.2	4919.2	4919.2	1.2	19.0	927.0
N	-60.8894480016	3188.2	3188.2	3188.2	1.2	19.0	667.8
O	-83.6489100322	3028.8	3028.8	3028.8	1.0	19.0	647.6
F	-109.8651099955	2581.6	2581.6	2581.6	1.0	19.0	545.2
Ne	-134.5677796521	2807.8	2807.8	2807.8	1.2	19.0	610.8
Na	-175.2042134083	2564.8	2564.8	2564.8	1.2	19.0	659.1
Mg	-211.1090403132	2372.2	2372.2	2372.2	1.0	19.0	486.7
Al	-260.7300505585	2459.6	2459.6	2459.6	1.0	19.0	551.8
Si	-311.8609805605	2184.6	2184.6	2184.6	1.0	19.0	437.2
P	-363.2918768069	2325.8	2325.8	2325.8	1.0	19.0	542.5
S	-418.5864568218	2093.6	2093.6	2093.6	1.0	19.0	465.9
Cl	-488.5186304132	2184.6	2184.6	2184.6	1.0	19.0	533.1
Ar	-558.5994729963	2011.8	2011.8	2011.8	1.4	19.0	363.9

Table 466: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6067072472	216.0	115.0	115.0	nan	19.0	4.0
He	-3.0318979243	250.0	131.0	131.0	nan	19.0	4.5
Li	-8.4212727847	273.0	140.0	140.0	nan	19.0	4.7
Be	-16.4020018703	202.0	107.0	107.0	nan	19.0	5.7
B	-23.2767235246	484.0	253.0	253.0	nan	19.0	6.7
C	-38.6102113049	223.0	119.0	119.0	nan	19.0	4.2
N	-57.8864382960	281.0	144.0	144.0	nan	19.0	7.0
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-139.1964946985	292.0	149.0	149.0	nan	19.0	4.7
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	-426.7207487312	371.0	184.0	184.0	nan	19.0	5.3
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 467: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7369542236	473335.2	0.0	0.0	nan	19.0	2707.3
He	-3.4501500789	294481.2	0.0	0.0	nan	19.0	1355.6
Li	-8.7150339715	163597.2	0.0	0.0	nan	19.0	872.0
Be	-16.9090927514	184314.0	0.0	0.0	nan	19.0	1286.7
B	-28.4155849446	165937.2	0.0	0.0	nan	19.0	1087.1
C	-43.4347048515	144541.8	0.0	0.0	nan	19.0	924.6
N	-62.2553035261	60691.8	0.0	0.0	nan	19.0	393.7
O	-85.0730313660	121352.4	0.0	0.0	nan	19.0	711.6
F	-112.0887283229	127545.6	0.0	0.0	nan	19.0	854.8
Ne	-143.4642887638	104574.6	0.0	0.0	nan	19.0	630.2
Na	-179.3928760096	72844.2	0.0	0.0	nan	19.0	440.7
Mg	-220.0289356237	81299.4	0.0	0.0	nan	19.0	463.3
Al	-265.7800691022	68554.2	0.0	0.0	nan	19.0	356.1
Si	-315.8535446861	69880.2	0.0	0.0	nan	19.0	406.4
P	-371.8087566062	86595.6	0.0	0.0	nan	19.0	493.0
S	-433.0099231021	55824.6	0.0	0.0	nan	19.0	278.7
Cl	-499.3644833219	76806.6	0.0	0.0	nan	19.0	439.7
Ar	-569.6376151685	71471.4	0.0	0.0	nan	19.0	381.4

Table 468: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6976421510	19137.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.0
He	-3.2959942005	18239.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.4
Li	-8.4512543785	18959.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.3
Be	-16.6035173321	17879.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.0
B	-26.9119638414	19013.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.2
C	-42.1392790753	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.9
N	-59.4906423822	19069.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.7
O	-81.6602197201	19049.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.8
F	-105.4783833339	17561.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.8
Ne	-140.7025491538	18699.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
Na	-172.9105233412	18397.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.0
Mg	-215.1698038736	18801.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.5
Al	-260.1829809116	18531.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.3
Si	-306.2614394689	18323.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.4
P	-343.1053065920	17235.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7
S	-399.9493115561	19043.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.9
Cl	-448.9235703407	18449.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.6
Ar	-560.3883891007	19109.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.5

Table 469: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7211850010	19372.2	233.2	233.2	nan	19.0	170.1
He	-3.3086826896	18531.8	290.8	290.8	nan	19.0	146.8
Li	-8.5359001176	19093.0	132.0	132.0	nan	19.0	156.7
Be	-15.5003524671	17966.2	85.2	85.2	nan	19.0	113.9
B	-26.7650773682	19036.0	21.0	21.0	nan	19.0	119.5
C	-41.1373805986	19251.4	94.4	94.4	nan	19.0	143.7
N	-61.4936436442	19325.6	254.6	254.6	nan	19.0	180.2
O	-80.5587559259	19120.2	69.2	69.2	nan	19.0	115.1
F	-102.4633174995	17601.4	38.4	38.4	nan	19.0	118.7
Ne	-139.2109993959	18801.6	100.6	100.6	nan	19.0	122.5
Na	-175.5552367116	18448.2	49.2	49.2	nan	19.0	129.0
Mg	-213.0280968678	18925.4	122.4	122.4	nan	19.0	133.1
Al	-258.9570013174	18579.0	46.0	46.0	nan	19.0	111.5
Si	-302.3428371337	18337.0	12.0	12.0	nan	19.0	108.6
P	-336.4366127279	17286.6	49.6	49.6	nan	19.0	115.3
S	-388.2900344783	19067.0	22.0	22.0	nan	19.0	126.6
Cl	-454.6065234799	18498.6	47.6	47.6	nan	19.0	96.2
Ar	-562.6153323597	19203.8	92.8	92.8	nan	19.0	124.4

Table 470: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7232917466	50181.5	12179.5	12179.5	39.5	19.0	2973.6
He	-3.4362435080	39395.0	1393.0	1393.0	10.2	19.0	485.7
Li	-8.5723417172	40378.6	2376.6	2376.6	24.0	19.0	800.2
Be	-16.6073599338	38405.2	403.2	403.2	4.6	19.0	267.5
B	-27.7801177214	38368.6	366.6	366.6	3.2	19.0	319.8
C	-43.1026799290	40568.8	2566.8	2566.8	39.8	19.0	603.3
N	-61.4655536929	39859.4	1857.4	1857.4	26.6	19.0	642.2
O	-84.1924499364	40307.8	2305.8	2305.8	34.4	19.0	742.7
F	-110.5626922093	38844.2	842.2	842.2	13.8	19.0	307.7
Ne	-141.4667062033	38159.0	157.0	157.0	3.2	19.0	212.8
Na	-176.8290652273	38169.2	167.2	167.2	3.8	19.0	214.6
Mg	-215.0425109796	38151.8	149.8	149.8	2.6	19.0	261.7
Al	-263.0702089128	40469.6	2467.6	2467.6	51.2	19.0	809.8
Si	-316.3447453846	38369.2	367.2	367.2	7.8	19.0	329.2
P	-370.0096029532	38273.4	271.4	271.4	5.8	19.0	285.9
S	-428.0719234983	38111.8	109.8	109.8	2.0	19.0	248.9
Cl	-497.5252713168	38512.8	510.8	510.8	3.8	19.0	332.3
Ar	-564.2514588567	38085.0	83.0	83.0	2.2	19.0	204.4

Table 471: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6275130754	221.0	221.0	221.0	nan	19.0	88.8
He	-3.1413976575	145.0	145.0	145.0	nan	19.0	26.2
Li	-8.1221430069	33.0	33.0	33.0	nan	19.0	3.1
Be	-16.2445689156	52.0	52.0	52.0	nan	19.0	9.5
B	-27.0275778957	109.0	109.0	109.0	nan	19.0	12.8
C	-41.4804402519	94.0	94.0	94.0	nan	19.0	26.2
N	-59.5514285666	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	10.1
O	-82.9981981056	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	2.6
F	-109.8968773223	29.0	29.0	29.0	nan	19.0	11.6
Ne	-141.3918250354	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	8.4
Na	-170.4683729827	59.0	59.0	59.0	nan	19.0	8.9
Mg	-205.6254446940	41.0	41.0	41.0	nan	19.0	7.0
Al	-259.8271205243	48.0	48.0	48.0	nan	19.0	10.3
Si	-311.8609805605	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.5
P	-361.7216186994	50.0	50.0	50.0	nan	19.0	7.8
S	-420.7087176967	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	2.9
Cl	-478.5535674014	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	6.7
Ar	-557.6566670520	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	5.0

Table 472: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7177903210	5436.0	5436.0	5436.0	1.0	19.0	77.3
He	-3.3456796341	2701.0	2701.0	2701.0	19.0	19.0	33.5
Li	-8.5331476304	1898.0	1898.0	1898.0	19.0	19.0	23.0
Be	-16.6453055405	1577.0	1577.0	1577.0	20.0	19.0	20.2
B	-28.3026376089	1448.0	1448.0	1448.0	20.0	19.0	18.5
C	-43.0998462956	1553.0	1553.0	1553.0	20.0	19.0	15.5
N	-62.0773801537	1552.0	1552.0	1552.0	20.0	19.0	19.0
O	-84.1394381274	1181.0	1181.0	1181.0	20.0	19.0	15.6
F	-110.1107445627	1616.0	1616.0	1616.0	19.0	19.0	18.9
Ne	-143.3358712757	1074.0	1074.0	1074.0	20.0	19.0	11.7
Na	-179.2388659854	1077.0	1077.0	1077.0	20.0	19.0	12.3
Mg	-216.6622486242	1144.0	1144.0	1144.0	19.0	19.0	16.1
Al	-265.3269402253	1028.0	1028.0	1028.0	19.0	19.0	11.7
Si	-315.8544600772	1329.0	1329.0	1329.0	19.0	19.0	14.2
P	-371.5496096885	753.0	753.0	753.0	20.0	19.0	8.8
S	-432.5158883293	786.0	786.0	786.0	17.0	19.0	10.3
Cl	-498.8753650107	801.0	801.0	801.0	17.0	19.0	9.4
Ar	-570.7453921947	683.0	683.0	683.0	14.0	19.0	7.8

Table 473: trust region repeats

18.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.7142412861	6108.4	6108.4	6108.4	20.4	19.0	1953.7
cch second order	-0.6067072472	216.0	115.0	115.0	nan	19.0	4.0
diff evo	-0.7369542236	473335.2	0.0	0.0	nan	19.0	2707.3
direct	-0.6976421510	19137.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.0
direct with trim	-0.7211850010	19372.2	233.2	233.2	nan	19.0	170.1
dual anneal	-0.7232917466	50181.5	12179.5	12179.5	39.5	19.0	2973.6
trust region	-0.6275130754	221.0	221.0	221.0	nan	19.0	88.8
trust region repeats	-0.7177903210	5436.0	5436.0	5436.0	1.0	19.0	77.3

Table 474: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2796853509	4851.6	4851.6	4851.6	18.2	19.0	1239.3
cch second order	-3.0318979243	250.0	131.0	131.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-3.4501500789	294481.2	0.0	0.0	nan	19.0	1355.6
direct	-3.2959942005	18239.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.4
direct with trim	-3.3086826896	18531.8	290.8	290.8	nan	19.0	146.8
dual anneal	-3.4362435080	39395.0	1393.0	1393.0	10.2	19.0	485.7
trust region	-3.1413976575	145.0	145.0	145.0	nan	19.0	26.2
trust region repeats	-3.3456796341	2701.0	2701.0	2701.0	19.0	19.0	33.5

Table 475: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.4945677229	4328.6	4328.6	4328.6	12.8	19.0	939.1
cch second order	-8.4212727847	273.0	140.0	140.0	nan	19.0	4.7
diff evo	-8.7150339715	163597.2	0.0	0.0	nan	19.0	872.0
direct	-8.4512543785	18959.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.3
direct with trim	-8.5359001176	19093.0	132.0	132.0	nan	19.0	156.7
dual anneal	-8.5723417172	40378.6	2376.6	2376.6	24.0	19.0	800.2
trust region	-8.1221430069	33.0	33.0	33.0	nan	19.0	3.1
trust region repeats	-8.5331476304	1898.0	1898.0	1898.0	19.0	19.0	23.0

Table 476: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.7628977907	5358.4	5358.4	5358.4	3.0	19.0	815.6
cch second order	-16.4020018703	202.0	107.0	107.0	nan	19.0	5.7
diff evo	-16.9090927514	184314.0	0.0	0.0	nan	19.0	1286.7
direct	-16.6035173321	17879.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.0
direct with trim	-15.5003524671	17966.2	85.2	85.2	nan	19.0	113.9
dual anneal	-16.6073599338	38405.2	403.2	403.2	4.6	19.0	267.5
trust region	-16.2445689156	52.0	52.0	52.0	nan	19.0	9.5
trust region repeats	-16.6453055405	1577.0	1577.0	1577.0	20.0	19.0	20.2

Table 477: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.0847042907	5224.8	5224.8	5224.8	2.2	19.0	893.4
cch second order	-23.2767235246	484.0	253.0	253.0	nan	19.0	6.7
diff evo	-28.4155849446	165937.2	0.0	0.0	nan	19.0	1087.1
direct	-26.9119638414	19013.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.2
direct with trim	-26.7650773682	19036.0	21.0	21.0	nan	19.0	119.5
dual anneal	-27.7801177214	38368.6	366.6	366.6	3.2	19.0	319.8
trust region	-27.0275778957	109.0	109.0	109.0	nan	19.0	12.8
trust region repeats	-28.3026376089	1448.0	1448.0	1448.0	20.0	19.0	18.5

Table 478: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-42.3374974740	4919.2	4919.2	4919.2	1.2	19.0	927.0
cch second order	-38.6102113049	223.0	119.0	119.0	nan	19.0	4.2
diff evo	-43.4347048515	144541.8	0.0	0.0	nan	19.0	924.6
direct	-42.1392790753	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.9
direct with trim	-41.1373805986	19251.4	94.4	94.4	nan	19.0	143.7
dual anneal	-43.1026799290	40568.8	2566.8	2566.8	39.8	19.0	603.3
trust region	-41.4804402519	94.0	94.0	94.0	nan	19.0	26.2
trust region repeats	-43.0998462956	1553.0	1553.0	1553.0	20.0	19.0	15.5

Table 479: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.8894480016	3188.2	3188.2	3188.2	1.2	19.0	667.8
cch second order	-57.8864382960	281.0	144.0	144.0	nan	19.0	7.0
diff evo	-62.2553035261	60691.8	0.0	0.0	nan	19.0	393.7
direct	-59.4906423822	19069.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.7
direct with trim	-61.4936436442	19325.6	254.6	254.6	nan	19.0	180.2
dual anneal	-61.4655536929	39859.4	1857.4	1857.4	26.6	19.0	642.2
trust region	-59.5514285666	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	10.1
trust region repeats	-62.0773801537	1552.0	1552.0	1552.0	20.0	19.0	19.0

Table 480: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-83.6489100322	3028.8	3028.8	3028.8	1.0	19.0	647.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-85.0730313660	121352.4	0.0	0.0	nan	19.0	711.6
direct	-81.6602197201	19049.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.8
direct with trim	-80.5587559259	19120.2	69.2	69.2	nan	19.0	115.1
dual anneal	-84.1924499364	40307.8	2305.8	2305.8	34.4	19.0	742.7
trust region	-82.9981981056	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-84.1394381274	1181.0	1181.0	1181.0	20.0	19.0	15.6

Table 481: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.8651099955	2581.6	2581.6	2581.6	1.0	19.0	545.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-112.0887283229	127545.6	0.0	0.0	nan	19.0	854.8
direct	-105.4783833339	17561.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.8
direct with trim	-102.4633174995	17601.4	38.4	38.4	nan	19.0	118.7
dual anneal	-110.5626922093	38844.2	842.2	842.2	13.8	19.0	307.7
trust region	-109.8968773223	29.0	29.0	29.0	nan	19.0	11.6
trust region repeats	-110.1107445627	1616.0	1616.0	1616.0	19.0	19.0	18.9

Table 482: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-134.5677796521	2807.8	2807.8	2807.8	1.2	19.0	610.8
cch second order	-139.1964946985	292.0	149.0	149.0	nan	19.0	4.7
diff evo	-143.4642887638	104574.6	0.0	0.0	nan	19.0	630.2
direct	-140.7025491538	18699.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
direct with trim	-139.2109993959	18801.6	100.6	100.6	nan	19.0	122.5
dual anneal	-141.4667062033	38159.0	157.0	157.0	3.2	19.0	212.8
trust region	-141.3918250354	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	8.4
trust region repeats	-143.3358712757	1074.0	1074.0	1074.0	20.0	19.0	11.7

Table 483: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.2042134083	2564.8	2564.8	2564.8	1.2	19.0	659.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-179.3928760096	72844.2	0.0	0.0	nan	19.0	440.7
direct	-172.9105233412	18397.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.0
direct with trim	-175.5552367116	18448.2	49.2	49.2	nan	19.0	129.0
dual anneal	-176.8290652273	38169.2	167.2	167.2	3.8	19.0	214.6
trust region	-170.4683729827	59.0	59.0	59.0	nan	19.0	8.9
trust region repeats	-179.2388659854	1077.0	1077.0	1077.0	20.0	19.0	12.3

Table 484: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-211.1090403132	2372.2	2372.2	2372.2	1.0	19.0	486.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-220.0289356237	81299.4	0.0	0.0	nan	19.0	463.3
direct	-215.1698038736	18801.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.5
direct with trim	-213.0280968678	18925.4	122.4	122.4	nan	19.0	133.1
dual anneal	-215.0425109796	38151.8	149.8	149.8	2.6	19.0	261.7
trust region	-205.6254446940	41.0	41.0	41.0	nan	19.0	7.0
trust region repeats	-216.6622486242	1144.0	1144.0	1144.0	19.0	19.0	16.1

Table 485: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.7300505585	2459.6	2459.6	2459.6	1.0	19.0	551.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-265.7800691022	68554.2	0.0	0.0	nan	19.0	356.1
direct	-260.1829809116	18531.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.3
direct with trim	-258.9570013174	18579.0	46.0	46.0	nan	19.0	111.5
dual anneal	-263.0702089128	40469.6	2467.6	2467.6	51.2	19.0	809.8
trust region	-259.8271205243	48.0	48.0	48.0	nan	19.0	10.3
trust region repeats	-265.3269402253	1028.0	1028.0	1028.0	19.0	19.0	11.7

Table 486: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-311.8609805605	2184.6	2184.6	2184.6	1.0	19.0	437.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-315.8535446861	69880.2	0.0	0.0	nan	19.0	406.4
direct	-306.2614394689	18323.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.4
direct with trim	-302.3428371337	18337.0	12.0	12.0	nan	19.0	108.6
dual anneal	-316.3447453846	38369.2	367.2	367.2	7.8	19.0	329.2
trust region	-311.8609805605	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.5
trust region repeats	-315.8544600772	1329.0	1329.0	1329.0	19.0	19.0	14.2

Table 487: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-363.2918768069	2325.8	2325.8	2325.8	1.0	19.0	542.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-371.8087566062	86595.6	0.0	0.0	nan	19.0	493.0
direct	-343.1053065920	17235.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7
direct with trim	-336.4366127279	17286.6	49.6	49.6	nan	19.0	115.3
dual anneal	-370.0096029532	38273.4	271.4	271.4	5.8	19.0	285.9
trust region	-361.7216186994	50.0	50.0	50.0	nan	19.0	7.8
trust region repeats	-371.5496096885	753.0	753.0	753.0	20.0	19.0	8.8

Table 488: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-418.5864568218	2093.6	2093.6	2093.6	1.0	19.0	465.9
cch second order	-426.7207487312	371.0	184.0	184.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-433.0099231021	55824.6	0.0	0.0	nan	19.0	278.7
direct	-399.9493115561	19043.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.9
direct with trim	-388.2900344783	19067.0	22.0	22.0	nan	19.0	126.6
dual anneal	-428.0719234983	38111.8	109.8	109.8	2.0	19.0	248.9
trust region	-420.7087176967	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	2.9
trust region repeats	-432.5158883293	786.0	786.0	786.0	17.0	19.0	10.3

Table 489: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-488.5186304132	2184.6	2184.6	2184.6	1.0	19.0	533.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-499.3644833219	76806.6	0.0	0.0	nan	19.0	439.7
direct	-448.9235703407	18449.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.6
direct with trim	-454.6065234799	18498.6	47.6	47.6	nan	19.0	96.2
dual anneal	-497.5252713168	38512.8	510.8	510.8	3.8	19.0	332.3
trust region	-478.5535674014	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	6.7
trust region repeats	-498.8753650107	801.0	801.0	801.0	17.0	19.0	9.4

Table 490: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-558.5994729963	2011.8	2011.8	2011.8	1.4	19.0	363.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-569.6376151685	71471.4	0.0	0.0	nan	19.0	381.4
direct	-560.3883891007	19109.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.5
direct with trim	-562.6153323597	19203.8	92.8	92.8	nan	19.0	124.4
dual anneal	-564.2514588567	38085.0	83.0	83.0	2.2	19.0	204.4
trust region	-557.6566670520	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	5.0
trust region repeats	-570.7453921947	683.0	683.0	683.0	14.0	19.0	7.8

Table 491: Ar

18.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	diff evo	-0.7369542236
He	diff evo	-3.4501500789
Li	diff evo	-8.7150339715
Be	diff evo	-16.9090927514
B	diff evo	-28.4155849446
C	diff evo	-43.4347048515
N	diff evo	-62.2553035261
O	diff evo	-85.0730313660
F	diff evo	-112.0887283229
Ne	diff evo	-143.4642887638
Na	diff evo	-179.3928760096
Mg	diff evo	-220.0289356237
Al	diff evo	-265.7800691022
Si	dual anneal	-316.3447453846
P	diff evo	-371.8087566062
S	diff evo	-433.0099231021
Cl	diff evo	-499.3644833219
Ar	trust region repeats	-570.7453921947

Table 492: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	58.1	58.1	58.1	nan	-180.9391366358	13.9
cch second order	288.0	149.1	149.1	nan	-79.3502773757	5.2
trust region repeats	1535.4	1535.4	1535.4	17.9	-186.1709228492	19.1
basin hopping	3366.4	3366.4	3366.4	3.9	-181.9747535264	737.8
direct	18591.6	0.0	0.0	nan	-177.3512650419	89.5
direct with trim	18691.4	97.8	97.8	nan	-176.1959427658	129.6
dual anneal	39589.5	1587.5	1587.5	15.5	-184.9474568737	557.9
diff evo	134647.1	0.0	0.0	nan	-186.6343931345	782.4

Table 493: Average (all systems)

19   19s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

19.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 494: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.2087431866	2406.4	2406.4	2406.4	20.4	19.0	721.4
He	-4.8162788872	2479.0	2479.0	2479.0	17.8	19.0	792.5
Li	-11.1645517447	2176.0	2176.0	2176.0	15.2	19.0	620.5
Be	-21.0126907381	2228.8	2228.8	2228.8	7.2	19.0	567.5
B	-34.4457768973	2345.2	2345.2	2345.2	4.4	19.0	524.2
C	-49.9998836747	2833.8	2833.8	2833.8	2.4	19.0	558.2
N	-70.5925562516	3042.6	3042.6	3042.6	3.0	19.0	651.8
O	-92.7877881119	2316.8	2316.8	2316.8	2.2	19.0	546.8
F	-119.3090945412	3188.0	3188.0	3188.0	1.6	19.0	545.0
Ne	-156.1470864820	2498.2	2498.2	2498.2	1.2	19.0	554.9
Na	-194.3326088487	2167.0	2167.0	2167.0	1.0	19.0	474.4
Mg	-230.7884092186	1790.8	1790.8	1790.8	1.0	19.0	410.2
Al	-284.3207119015	1664.4	1664.4	1664.4	1.0	19.0	458.8
Si	-326.8012800362	1666.0	1666.0	1666.0	1.4	19.0	484.1
P	-395.1602216493	1953.8	1953.8	1953.8	1.0	19.0	470.5
S	-463.8149186996	1780.4	1780.4	1780.4	1.0	19.0	429.7
Cl	-533.1985952739	1692.2	1692.2	1692.2	1.0	19.0	475.5
Ar	-609.3360554220	1668.6	1668.6	1668.6	1.0	19.0	463.2

Table 495: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9511561134	280.0	138.0	138.0	nan	19.0	5.3
He	-2.8666298467	237.0	121.0	121.0	nan	19.0	4.6
Li	-9.4799579612	263.0	136.0	136.0	nan	19.0	4.8
Be	-13.9828566934	201.0	105.0	105.0	nan	19.0	2.8
B	-25.4840214547	496.0	260.0	260.0	nan	19.0	7.9
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-66.1856726816	381.0	195.0	195.0	nan	19.0	6.5
O	-93.1326254607	437.0	224.0	224.0	nan	19.0	6.8
F	-116.5431338602	309.0	152.0	152.0	nan	19.0	8.9
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-225.1376930310	218.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.6
Al	-259.9079540064	339.0	172.0	172.0	nan	19.0	8.8
Si	-315.0098791253	437.0	225.0	225.0	nan	19.0	7.0
P	-389.3462781231	324.0	163.0	163.0	nan	19.0	5.8
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	-514.5695856882	178.0	96.0	96.0	nan	19.0	4.5
Ar	-596.0535142994	496.0	268.0	268.0	nan	19.0	7.7

Table 496: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.1784391458	175552.0	0.0	0.0	nan	19.0	1356.7
He	-4.5820743833	180209.2	0.0	0.0	nan	19.0	1254.2
Li	-11.3362188535	245583.0	0.0	0.0	nan	19.0	1900.2
Be	-20.4252057017	155945.4	0.0	0.0	nan	19.0	1318.7
B	-33.9793466671	231886.2	0.0	0.0	nan	19.0	1814.6
C	-50.6739412550	153020.4	0.0	0.0	nan	19.0	1201.5
N	-71.0594278458	169821.6	0.0	0.0	nan	19.0	1159.4
O	-96.7243439368	196692.6	0.0	0.0	nan	19.0	1267.8
F	-125.3426569245	181872.6	0.0	0.0	nan	19.0	1322.9
Ne	-160.0842748961	131664.0	0.0	0.0	nan	19.0	1088.1
Na	-198.0629584059	110869.2	0.0	0.0	nan	19.0	803.0
Mg	-241.4574615232	210951.0	0.0	0.0	nan	19.0	1782.5
Al	-287.5014315695	144612.0	0.0	0.0	nan	19.0	1212.5
Si	-342.8909387155	106220.4	0.0	0.0	nan	19.0	693.3
P	-401.7356080393	121999.8	0.0	0.0	nan	19.0	1009.9
S	-465.7757780111	89208.6	0.0	0.0	nan	19.0	675.8
Cl	-532.2661326797	141679.2	0.0	0.0	nan	19.0	1187.0
Ar	-608.7796472904	147123.6	0.0	0.0	nan	19.0	1188.9

Table 497: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9038351706	18047.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.9
He	-3.9354838541	19005.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.5
Li	-9.9404958662	18461.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.2
Be	-17.4300928285	16711.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.4
B	-29.8492601793	18847.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.8
C	-45.4967859659	19081.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.1
N	-62.2931027823	18525.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.5
O	-87.7788567841	19133.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.2
F	-113.4132961025	16553.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.8
Ne	-146.4367883653	17279.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.4
Na	-183.0697914520	18541.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.5
Mg	-220.9214219478	18791.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.6
Al	-272.6355152471	18653.0	0.0	0.0	nan	19.0	120.7
Si	-317.6852721064	17771.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
P	-359.9284804646	18351.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.8
S	-419.4140945314	19115.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.5
Cl	-507.9132772737	19005.0	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
Ar	-580.7171036980	19105.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.5

Table 498: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.0152474182	18662.0	613.0	613.0	nan	19.0	205.5
He	-4.1479671710	19229.4	222.4	222.4	nan	19.0	156.6
Li	-11.2409435886	18516.8	53.8	53.8	nan	19.0	127.0
Be	-20.4606814002	16802.6	89.6	89.6	nan	19.0	164.9
B	-33.5890021403	18890.6	41.6	41.6	nan	19.0	128.2
C	-50.0297613480	19170.6	87.6	87.6	nan	19.0	167.6
N	-70.9684930728	18591.6	64.6	64.6	nan	19.0	127.3
O	-96.4255412003	19190.0	55.0	55.0	nan	19.0	145.4
F	-122.1010131672	16593.6	38.6	38.6	nan	19.0	121.3
Ne	-152.4540718279	17293.0	12.0	12.0	nan	19.0	138.5
Na	-188.8976127846	18576.8	33.8	33.8	nan	19.0	146.8
Mg	-232.8605511545	18832.8	39.8	39.8	nan	19.0	147.5
Al	-280.2928317718	18742.8	87.8	87.8	nan	19.0	169.0
Si	-336.0981783674	17852.2	79.2	79.2	nan	19.0	125.5
P	-372.4709906172	18436.8	83.8	83.8	nan	19.0	146.4
S	-436.8384170521	19164.0	47.0	47.0	nan	19.0	116.4
Cl	-533.1985952739	19025.0	18.0	18.0	nan	19.0	154.8
Ar	-604.9910993109	19132.0	25.0	25.0	nan	19.0	133.3

Table 499: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.1400459061	38344.2	342.2	342.2	3.2	19.0	374.2
He	-4.6515998435	38115.0	113.0	113.0	1.8	19.0	275.8
Li	-10.8767235367	38170.0	168.0	168.0	2.4	19.0	303.5
Be	-19.9596263514	38093.0	91.0	91.0	1.0	19.0	324.1
B	-33.6860677627	38153.8	151.8	151.8	2.4	19.0	298.8
C	-50.5243972762	38099.8	97.8	97.8	2.0	19.0	297.1
N	-69.9780752229	38058.0	56.0	56.0	1.2	19.0	289.0
O	-95.2181818597	38118.0	116.0	116.0	1.8	19.0	362.7
F	-123.7414497756	38124.8	122.8	122.8	1.8	19.0	308.4
Ne	-157.7637367010	38363.2	361.2	361.2	8.6	19.0	337.8
Na	-198.6374419780	38096.0	94.0	94.0	2.6	19.0	302.6
Mg	-237.5207181834	38460.0	458.0	458.0	10.6	19.0	417.3
Al	-285.0632003067	38095.6	93.6	93.6	2.2	19.0	300.5
Si	-338.9241561068	38091.8	89.8	89.8	1.6	19.0	287.4
P	-398.3825089298	38087.0	85.0	85.0	2.2	19.0	312.3
S	-461.4546188896	38104.4	102.4	102.4	2.2	19.0	269.1
Cl	-532.9791076876	38070.4	68.4	68.4	1.4	19.0	285.3
Ar	-605.4749615786	38689.8	687.8	687.8	44.8	19.0	376.9

Table 500: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-4.5649761527	77.0	77.0	77.0	nan	19.0	20.3
Li	-10.9924215188	56.0	56.0	56.0	nan	19.0	12.5
Be	-19.5186533831	47.0	47.0	47.0	nan	19.0	8.2
B	-31.3340024998	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	7.7
C	-47.5526464938	76.0	76.0	76.0	nan	19.0	10.4
N	-70.9276345270	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	5.0
O	-90.8965963621	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	4.5
F	-124.0058816855	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	9.2
Ne	-157.1795379570	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	2.8
Na	-187.3991463570	85.0	85.0	85.0	nan	19.0	14.2
Mg	-232.0573578007	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	4.2
Al	-280.3030564682	57.0	57.0	57.0	nan	19.0	9.5
Si	-334.4631907247	37.0	37.0	37.0	nan	19.0	5.0
P	-386.0758766968	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	11.3
S	-452.4030776449	49.0	49.0	49.0	nan	19.0	8.6
Cl	-509.1080130651	33.0	33.0	33.0	nan	19.0	7.9
Ar	-549.6867931144	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	13.5

Table 501: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.1902563582	2668.0	2668.0	2668.0	19.0	19.0	32.4
He	-4.7968979334	1437.0	1437.0	1437.0	20.0	19.0	20.1
Li	-11.2409435886	1579.0	1579.0	1579.0	19.0	19.0	23.3
Be	-20.6417052037	1636.0	1636.0	1636.0	20.0	19.0	22.6
B	-33.9409587732	1028.0	1028.0	1028.0	20.0	19.0	12.0
C	-51.2595981326	1076.0	1076.0	1076.0	20.0	19.0	14.3
N	-72.0030684664	1188.0	1188.0	1188.0	20.0	19.0	14.1
O	-97.1561052285	1084.0	1084.0	1084.0	17.0	19.0	11.6
F	-125.0846861535	1046.0	1046.0	1046.0	20.0	19.0	13.8
Ne	-159.5355049192	1272.0	1272.0	1272.0	20.0	19.0	16.1
Na	-195.5737537054	994.0	994.0	994.0	20.0	19.0	11.9
Mg	-239.0435393533	917.0	917.0	917.0	18.0	19.0	13.5
Al	-289.3966544301	999.0	999.0	999.0	20.0	19.0	9.9
Si	-342.8913956728	808.0	808.0	808.0	20.0	19.0	9.0
P	-399.8729960493	961.0	961.0	961.0	20.0	19.0	11.8
S	-464.8599434418	689.0	689.0	689.0	15.0	19.0	8.8
Cl	-533.2061519018	1021.0	1021.0	1021.0	20.0	19.0	13.3
Ar	-610.4439860670	891.0	891.0	891.0	19.0	19.0	10.5

Table 502: trust region repeats

19.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1.2087431866	2406.4	2406.4	2406.4	20.4	19.0	721.4
cch second order	-0.9511561134	280.0	138.0	138.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-1.1784391458	175552.0	0.0	0.0	nan	19.0	1356.7
direct	-0.9038351706	18047.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.9
direct with trim	-1.0152474182	18662.0	613.0	613.0	nan	19.0	205.5
dual anneal	-1.1400459061	38344.2	342.2	342.2	3.2	19.0	374.2
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-1.1902563582	2668.0	2668.0	2668.0	19.0	19.0	32.4

Table 503: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-4.8162788872	2479.0	2479.0	2479.0	17.8	19.0	792.5
cch second order	-2.8666298467	237.0	121.0	121.0	nan	19.0	4.6
diff evo	-4.5820743833	180209.2	0.0	0.0	nan	19.0	1254.2
direct	-3.9354838541	19005.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.5
direct with trim	-4.1479671710	19229.4	222.4	222.4	nan	19.0	156.6
dual anneal	-4.6515998435	38115.0	113.0	113.0	1.8	19.0	275.8
trust region	-4.5649761527	77.0	77.0	77.0	nan	19.0	20.3
trust region repeats	-4.7968979334	1437.0	1437.0	1437.0	20.0	19.0	20.1

Table 504: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-11.1645517447	2176.0	2176.0	2176.0	15.2	19.0	620.5
cch second order	-9.4799579612	263.0	136.0	136.0	nan	19.0	4.8
diff evo	-11.3362188535	245583.0	0.0	0.0	nan	19.0	1900.2
direct	-9.9404958662	18461.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.2
direct with trim	-11.2409435886	18516.8	53.8	53.8	nan	19.0	127.0
dual anneal	-10.8767235367	38170.0	168.0	168.0	2.4	19.0	303.5
trust region	-10.9924215188	56.0	56.0	56.0	nan	19.0	12.5
trust region repeats	-11.2409435886	1579.0	1579.0	1579.0	19.0	19.0	23.3

Table 505: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-21.0126907381	2228.8	2228.8	2228.8	7.2	19.0	567.5
cch second order	-13.9828566934	201.0	105.0	105.0	nan	19.0	2.8
diff evo	-20.4252057017	155945.4	0.0	0.0	nan	19.0	1318.7
direct	-17.4300928285	16711.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.4
direct with trim	-20.4606814002	16802.6	89.6	89.6	nan	19.0	164.9
dual anneal	-19.9596263514	38093.0	91.0	91.0	1.0	19.0	324.1
trust region	-19.5186533831	47.0	47.0	47.0	nan	19.0	8.2
trust region repeats	-20.6417052037	1636.0	1636.0	1636.0	20.0	19.0	22.6

Table 506: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-34.4457768973	2345.2	2345.2	2345.2	4.4	19.0	524.2
cch second order	-25.4840214547	496.0	260.0	260.0	nan	19.0	7.9
diff evo	-33.9793466671	231886.2	0.0	0.0	nan	19.0	1814.6
direct	-29.8492601793	18847.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.8
direct with trim	-33.5890021403	18890.6	41.6	41.6	nan	19.0	128.2
dual anneal	-33.6860677627	38153.8	151.8	151.8	2.4	19.0	298.8
trust region	-31.3340024998	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	7.7
trust region repeats	-33.9409587732	1028.0	1028.0	1028.0	20.0	19.0	12.0

Table 507: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-49.9998836747	2833.8	2833.8	2833.8	2.4	19.0	558.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-50.6739412550	153020.4	0.0	0.0	nan	19.0	1201.5
direct	-45.4967859659	19081.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.1
direct with trim	-50.0297613480	19170.6	87.6	87.6	nan	19.0	167.6
dual anneal	-50.5243972762	38099.8	97.8	97.8	2.0	19.0	297.1
trust region	-47.5526464938	76.0	76.0	76.0	nan	19.0	10.4
trust region repeats	-51.2595981326	1076.0	1076.0	1076.0	20.0	19.0	14.3

Table 508: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-70.5925562516	3042.6	3042.6	3042.6	3.0	19.0	651.8
cch second order	-66.1856726816	381.0	195.0	195.0	nan	19.0	6.5
diff evo	-71.0594278458	169821.6	0.0	0.0	nan	19.0	1159.4
direct	-62.2931027823	18525.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.5
direct with trim	-70.9684930728	18591.6	64.6	64.6	nan	19.0	127.3
dual anneal	-69.9780752229	38058.0	56.0	56.0	1.2	19.0	289.0
trust region	-70.9276345270	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	5.0
trust region repeats	-72.0030684664	1188.0	1188.0	1188.0	20.0	19.0	14.1

Table 509: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-92.7877881119	2316.8	2316.8	2316.8	2.2	19.0	546.8
cch second order	-93.1326254607	437.0	224.0	224.0	nan	19.0	6.8
diff evo	-96.7243439368	196692.6	0.0	0.0	nan	19.0	1267.8
direct	-87.7788567841	19133.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.2
direct with trim	-96.4255412003	19190.0	55.0	55.0	nan	19.0	145.4
dual anneal	-95.2181818597	38118.0	116.0	116.0	1.8	19.0	362.7
trust region	-90.8965963621	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-97.1561052285	1084.0	1084.0	1084.0	17.0	19.0	11.6

Table 510: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-119.3090945412	3188.0	3188.0	3188.0	1.6	19.0	545.0
cch second order	-116.5431338602	309.0	152.0	152.0	nan	19.0	8.9
diff evo	-125.3426569245	181872.6	0.0	0.0	nan	19.0	1322.9
direct	-113.4132961025	16553.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.8
direct with trim	-122.1010131672	16593.6	38.6	38.6	nan	19.0	121.3
dual anneal	-123.7414497756	38124.8	122.8	122.8	1.8	19.0	308.4
trust region	-124.0058816855	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	9.2
trust region repeats	-125.0846861535	1046.0	1046.0	1046.0	20.0	19.0	13.8

Table 511: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-156.1470864820	2498.2	2498.2	2498.2	1.2	19.0	554.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-160.0842748961	131664.0	0.0	0.0	nan	19.0	1088.1
direct	-146.4367883653	17279.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.4
direct with trim	-152.4540718279	17293.0	12.0	12.0	nan	19.0	138.5
dual anneal	-157.7637367010	38363.2	361.2	361.2	8.6	19.0	337.8
trust region	-157.1795379570	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	2.8
trust region repeats	-159.5355049192	1272.0	1272.0	1272.0	20.0	19.0	16.1

Table 512: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-194.3326088487	2167.0	2167.0	2167.0	1.0	19.0	474.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-198.0629584059	110869.2	0.0	0.0	nan	19.0	803.0
direct	-183.0697914520	18541.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.5
direct with trim	-188.8976127846	18576.8	33.8	33.8	nan	19.0	146.8
dual anneal	-198.6374419780	38096.0	94.0	94.0	2.6	19.0	302.6
trust region	-187.3991463570	85.0	85.0	85.0	nan	19.0	14.2
trust region repeats	-195.5737537054	994.0	994.0	994.0	20.0	19.0	11.9

Table 513: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-230.7884092186	1790.8	1790.8	1790.8	1.0	19.0	410.2
cch second order	-225.1376930310	218.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.6
diff evo	-241.4574615232	210951.0	0.0	0.0	nan	19.0	1782.5
direct	-220.9214219478	18791.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.6
direct with trim	-232.8605511545	18832.8	39.8	39.8	nan	19.0	147.5
dual anneal	-237.5207181834	38460.0	458.0	458.0	10.6	19.0	417.3
trust region	-232.0573578007	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-239.0435393533	917.0	917.0	917.0	18.0	19.0	13.5

Table 514: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-284.3207119015	1664.4	1664.4	1664.4	1.0	19.0	458.8
cch second order	-259.9079540064	339.0	172.0	172.0	nan	19.0	8.8
diff evo	-287.5014315695	144612.0	0.0	0.0	nan	19.0	1212.5
direct	-272.6355152471	18653.0	0.0	0.0	nan	19.0	120.7
direct with trim	-280.2928317718	18742.8	87.8	87.8	nan	19.0	169.0
dual anneal	-285.0632003067	38095.6	93.6	93.6	2.2	19.0	300.5
trust region	-280.3030564682	57.0	57.0	57.0	nan	19.0	9.5
trust region repeats	-289.3966544301	999.0	999.0	999.0	20.0	19.0	9.9

Table 515: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-326.8012800362	1666.0	1666.0	1666.0	1.4	19.0	484.1
cch second order	-315.0098791253	437.0	225.0	225.0	nan	19.0	7.0
diff evo	-342.8909387155	106220.4	0.0	0.0	nan	19.0	693.3
direct	-317.6852721064	17771.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
direct with trim	-336.0981783674	17852.2	79.2	79.2	nan	19.0	125.5
dual anneal	-338.9241561068	38091.8	89.8	89.8	1.6	19.0	287.4
trust region	-334.4631907247	37.0	37.0	37.0	nan	19.0	5.0
trust region repeats	-342.8913956728	808.0	808.0	808.0	20.0	19.0	9.0

Table 516: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-395.1602216493	1953.8	1953.8	1953.8	1.0	19.0	470.5
cch second order	-389.3462781231	324.0	163.0	163.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-401.7356080393	121999.8	0.0	0.0	nan	19.0	1009.9
direct	-359.9284804646	18351.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.8
direct with trim	-372.4709906172	18436.8	83.8	83.8	nan	19.0	146.4
dual anneal	-398.3825089298	38087.0	85.0	85.0	2.2	19.0	312.3
trust region	-386.0758766968	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	11.3
trust region repeats	-399.8729960493	961.0	961.0	961.0	20.0	19.0	11.8

Table 517: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-463.8149186996	1780.4	1780.4	1780.4	1.0	19.0	429.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-465.7757780111	89208.6	0.0	0.0	nan	19.0	675.8
direct	-419.4140945314	19115.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.5
direct with trim	-436.8384170521	19164.0	47.0	47.0	nan	19.0	116.4
dual anneal	-461.4546188896	38104.4	102.4	102.4	2.2	19.0	269.1
trust region	-452.4030776449	49.0	49.0	49.0	nan	19.0	8.6
trust region repeats	-464.8599434418	689.0	689.0	689.0	15.0	19.0	8.8

Table 518: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-533.1985952739	1692.2	1692.2	1692.2	1.0	19.0	475.5
cch second order	-514.5695856882	178.0	96.0	96.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-532.2661326797	141679.2	0.0	0.0	nan	19.0	1187.0
direct	-507.9132772737	19005.0	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
direct with trim	-533.1985952739	19025.0	18.0	18.0	nan	19.0	154.8
dual anneal	-532.9791076876	38070.4	68.4	68.4	1.4	19.0	285.3
trust region	-509.1080130651	33.0	33.0	33.0	nan	19.0	7.9
trust region repeats	-533.2061519018	1021.0	1021.0	1021.0	20.0	19.0	13.3

Table 519: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-609.3360554220	1668.6	1668.6	1668.6	1.0	19.0	463.2
cch second order	-596.0535142994	496.0	268.0	268.0	nan	19.0	7.7
diff evo	-608.7796472904	147123.6	0.0	0.0	nan	19.0	1188.9
direct	-580.7171036980	19105.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.5
direct with trim	-604.9910993109	19132.0	25.0	25.0	nan	19.0	133.3
dual anneal	-605.4749615786	38689.8	687.8	687.8	44.8	19.0	376.9
trust region	-549.6867931144	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	13.5
trust region repeats	-610.4439860670	891.0	891.0	891.0	19.0	19.0	10.5

Table 520: Ar

19.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-1.2087431866
He	basin hopping	-4.8162788872
Li	diff evo	-11.3362188535
Be	basin hopping	-21.0126907381
B	basin hopping	-34.4457768973
C	trust region repeats	-51.2595981326
N	trust region repeats	-72.0030684664
O	trust region repeats	-97.1561052285
F	diff evo	-125.3426569245
Ne	diff evo	-160.0842748961
Na	dual anneal	-198.6374419780
Mg	diff evo	-241.4574615232
Al	trust region repeats	-289.3966544301
Si	trust region repeats	-342.8913956728
P	diff evo	-401.7356080393
S	diff evo	-465.7757780111
Cl	trust region repeats	-533.2061519018
Ar	trust region repeats	-610.4439860670

Table 521: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	47.3	47.3	47.3	nan	-205.2040507325	9.1
cch second order	328.3	169.4	169.4	nan	-187.7607827389	6.1
trust region repeats	1183.0	1183.0	1183.0	19.3	-202.8965636322	15.0
basin hopping	2216.6	2216.6	2216.6	4.7	-199.9576250870	541.6
direct	18387.4	0.0	0.0	nan	-187.7646085900	114.1
direct with trim	18483.5	94.0	94.0	nan	-197.1156110370	145.7
dual anneal	38185.3	183.3	183.3	5.2	-201.4431454387	317.9
diff evo	160828.4	0.0	0.0	nan	-202.9919936580	1235.4

Table 522: Average (all systems)

20 19s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

20.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 523: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563512	1725.4	1725.4	1725.4	1.4	19.0	553.6
He	-3.0901074562	1741.2	1741.2	1741.2	1.6	19.0	582.5
Li	-7.9887778487	1847.2	1847.2	1847.2	1.2	19.0	417.5
Be	-15.7299071420	1772.0	1772.0	1772.0	1.2	19.0	459.0
B	-26.6444501073	2022.0	2022.0	2022.0	1.2	19.0	609.6
C	-41.0135225389	1923.4	1923.4	1923.4	1.0	19.0	536.7
N	-59.0839494831	2014.0	2014.0	2014.0	1.6	19.0	579.2
O	-81.0772163958	1941.8	1941.8	1941.8	1.0	19.0	664.5
F	-107.1951639325	1830.2	1830.2	1830.2	1.2	19.0	613.3
Ne	-137.6238671162	1840.8	1840.8	1840.8	1.0	19.0	576.7
Na	-172.5364129205	2002.4	2002.4	2002.4	1.0	19.0	614.6
Mg	-212.0949664612	2157.8	2157.8	2157.8	1.0	19.0	653.9
Al	-256.4523551178	2068.6	2068.6	2068.6	1.0	19.0	632.1
Si	-305.7533132098	2137.0	2137.0	2137.0	1.0	19.0	764.3
P	-360.1354800438	2051.6	2051.6	2051.6	1.0	19.0	747.7
S	-419.7302140263	2080.0	2080.0	2080.0	1.2	19.0	547.3
Cl	-484.6632665364	2212.2	2212.2	2212.2	1.0	19.0	603.1
Ar	-555.0553468220	2067.6	2067.6	2067.6	1.2	19.0	679.9

Table 524: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213562646	131.0	74.0	74.0	nan	19.0	5.0
He	-3.0901074076	157.0	87.0	87.0	nan	19.0	6.1
Li	-7.9887778505	183.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.9
Be	-15.7299072040	173.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.9
B	-26.6444500531	144.0	78.0	78.0	nan	19.0	3.5
C	-41.0135225269	173.0	96.0	96.0	nan	19.0	3.8
N	-59.0839494956	180.0	101.0	101.0	nan	19.0	4.1
O	-81.0772163866	155.0	88.0	88.0	nan	19.0	3.7
F	-107.1951639202	182.0	99.0	99.0	nan	19.0	3.7
Ne	-137.6238671768	157.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.7
Na	-172.5364128346	172.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.8
Mg	-212.0949664556	162.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.7
Al	-256.4523551042	206.0	113.0	113.0	nan	19.0	4.1
Si	-305.7533131862	232.0	118.0	118.0	nan	19.0	6.1
P	-360.1354799583	178.0	99.0	99.0	nan	19.0	6.1
S	-419.7302140507	195.0	109.0	109.0	nan	19.0	3.9
Cl	-484.6632666224	197.0	107.0	107.0	nan	19.0	3.8
Ar	-555.0553467665	167.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.8

Table 525: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213562380	25623.0	0.0	0.0	nan	19.0	144.7
He	-3.0901064662	25162.8	0.0	0.0	nan	19.0	118.7
Li	-7.9887767407	42057.6	0.0	0.0	nan	19.0	278.5
Be	-15.7299047940	38844.0	0.0	0.0	nan	19.0	198.3
B	-26.6444371557	37401.0	0.0	0.0	nan	19.0	204.0
C	-41.0135123178	31707.0	0.0	0.0	nan	19.0	187.0
N	-59.0839317847	32658.6	0.0	0.0	nan	19.0	166.5
O	-81.0771977552	33672.6	0.0	0.0	nan	19.0	176.1
F	-107.1951333708	35607.0	0.0	0.0	nan	19.0	192.0
Ne	-137.6238317444	35295.0	0.0	0.0	nan	19.0	197.5
Na	-172.5363635824	36090.6	0.0	0.0	nan	19.0	206.4
Mg	-212.0948997845	35981.4	0.0	0.0	nan	19.0	192.7
Al	-256.4522293640	34273.2	0.0	0.0	nan	19.0	187.8
Si	-305.7532013650	36106.2	0.0	0.0	nan	19.0	188.9
P	-360.1354210398	35162.4	0.0	0.0	nan	19.0	186.3
S	-419.7300341832	37806.6	0.0	0.0	nan	19.0	205.2
Cl	-484.6630864737	39483.6	0.0	0.0	nan	19.0	224.7
Ar	-555.0551806711	40996.8	0.0	0.0	nan	19.0	217.5

Table 526: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6203294652	17961.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.7
He	-3.0820678987	16767.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.0
Li	-7.9238922258	17935.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
Be	-15.6672768736	17741.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.6
B	-26.5956682073	17139.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9
C	-40.9141163873	16439.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.7
N	-58.0905260951	18769.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
O	-80.3735363578	18179.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.6
F	-106.7953333990	17375.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.5
Ne	-137.1924519064	19195.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.4
Na	-171.9122152159	17597.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
Mg	-210.1106759731	18537.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.5
Al	-253.0139059683	18043.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
Si	-304.1776393974	18485.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.7
P	-355.3862087659	18011.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.5
S	-415.0152327760	17791.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
Cl	-477.5154634979	17543.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
Ar	-546.4048640220	18323.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.0

Table 527: direct

234

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563512	17970.0	7.0	7.0	nan	19.0	104.4
He	-3.0901074562	16777.0	8.0	8.0	nan	19.0	96.5
Li	-7.9887778487	17945.0	8.0	8.0	nan	19.0	97.2
Be	-15.7299071420	17749.0	6.0	6.0	nan	19.0	101.2
B	-26.6444501073	17148.0	7.0	7.0	nan	19.0	90.7
C	-41.0135225389	16449.0	8.0	8.0	nan	19.0	79.5
N	-59.0839494831	18779.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.4
O	-81.0772163958	18189.0	8.0	8.0	nan	19.0	87.8
F	-107.1951639325	17384.0	7.0	7.0	nan	19.0	85.2
Ne	-137.6238671162	19205.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.5
Na	-172.5364129205	17606.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.0
Mg	-212.0949664612	18547.0	8.0	8.0	nan	19.0	85.1
Al	-256.4523551178	18053.0	8.0	8.0	nan	19.0	94.4
Si	-305.7533132098	18493.0	6.0	6.0	nan	19.0	88.7
P	-360.1354800438	18020.0	7.0	7.0	nan	19.0	95.2
S	-419.7302140263	17801.0	8.0	8.0	nan	19.0	92.3
Cl	-484.6632665364	17556.0	11.0	11.0	nan	19.0	86.5
Ar	-555.0553468220	18338.0	13.0	13.0	nan	19.0	97.4

Table 528: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563512	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	204.1
He	-3.0901074562	38010.8	8.8	8.8	1.0	19.0	199.2
Li	-7.9887778487	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	220.5
Be	-15.7299071420	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	199.4
B	-26.6444501072	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	212.9
C	-41.0135225387	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	217.4
N	-59.0839494828	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	206.1
O	-81.0772163954	38019.2	17.2	17.2	1.0	19.0	226.8
F	-107.1951639318	38018.0	16.0	16.0	1.0	19.0	217.8
Ne	-137.6238671152	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	206.5
Na	-172.5364129193	38011.2	9.2	9.2	1.0	19.0	191.9
Mg	-212.0949664596	38024.6	22.6	22.6	1.0	19.0	211.3
Al	-256.4523551157	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	205.6
Si	-305.7533132073	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	196.0
P	-360.1354800407	38023.2	21.2	21.2	1.0	19.0	194.1
S	-419.7302140225	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	210.1
Cl	-484.6632665319	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	207.2
Ar	-555.0553468166	38028.6	26.6	26.6	1.0	19.0	180.0

Table 529: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563512	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
He	-3.0901074562	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
Li	-7.9887778487	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
Be	-15.7299071420	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
B	-26.6444501073	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.2
C	-41.0135225389	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.3
N	-59.0839494831	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	3.6
O	-81.0772163958	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
F	-107.1951639325	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.3
Ne	-137.6238671162	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	7.1
Na	-172.5364129205	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	7.0
Mg	-212.0949664612	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.2
Al	-256.4523551178	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.9
Si	-305.7533132098	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	2.5
P	-360.1354800438	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	2.2
S	-419.7302140263	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.4
Cl	-484.6632665364	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.2
Ar	-555.0553468220	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4

Table 530: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563512	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.7
He	-3.0901074562	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.9
Li	-7.9887778487	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.2
Be	-15.7299071420	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	2.9
B	-26.6444501073	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.5
C	-41.0135225389	272.0	272.0	272.0	1.0	19.0	3.4
N	-59.0839494831	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.8
O	-81.0772163958	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	3.4
F	-107.1951639325	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.2
Ne	-137.6238671162	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.5
Na	-172.5364129205	282.0	282.0	282.0	1.0	19.0	3.3
Mg	-212.0949664612	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.2
Al	-256.4523551178	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.4
Si	-305.7533132098	288.0	288.0	288.0	1.0	19.0	3.2
P	-360.1354800438	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.3
S	-419.7302140263	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.0
Cl	-484.6632665364	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.5
Ar	-555.0553468220	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.5

Table 531: trust region repeats

20.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213563512	1725.4	1725.4	1725.4	1.4	19.0	553.6
cch second order	-0.6213562646	131.0	74.0	74.0	nan	19.0	5.0
diff evo	-0.6213562380	25623.0	0.0	0.0	nan	19.0	144.7
direct	-0.6203294652	17961.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.7
direct with trim	-0.6213563512	17970.0	7.0	7.0	nan	19.0	104.4
dual anneal	-0.6213563512	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	204.1
trust region	-0.6213563512	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-0.6213563512	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.7

Table 532: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901074562	1741.2	1741.2	1741.2	1.6	19.0	582.5
cch second order	-3.0901074076	157.0	87.0	87.0	nan	19.0	6.1
diff evo	-3.0901064662	25162.8	0.0	0.0	nan	19.0	118.7
direct	-3.0820678987	16767.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.0
direct with trim	-3.0901074562	16777.0	8.0	8.0	nan	19.0	96.5
dual anneal	-3.0901074562	38010.8	8.8	8.8	1.0	19.0	199.2
trust region	-3.0901074562	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-3.0901074562	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.9

Table 533: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887778487	1847.2	1847.2	1847.2	1.2	19.0	417.5
cch second order	-7.9887778505	183.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.9
diff evo	-7.9887767407	42057.6	0.0	0.0	nan	19.0	278.5
direct	-7.9238922258	17935.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
direct with trim	-7.9887778487	17945.0	8.0	8.0	nan	19.0	97.2
dual anneal	-7.9887778487	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	220.5
trust region	-7.9887778487	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-7.9887778487	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.2

Table 534: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299071420	1772.0	1772.0	1772.0	1.2	19.0	459.0
cch second order	-15.7299072040	173.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.9
diff evo	-15.7299047940	38844.0	0.0	0.0	nan	19.0	198.3
direct	-15.6672768736	17741.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.6
direct with trim	-15.7299071420	17749.0	6.0	6.0	nan	19.0	101.2
dual anneal	-15.7299071420	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	199.4
trust region	-15.7299071420	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-15.7299071420	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	2.9

Table 535: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6444501073	2022.0	2022.0	2022.0	1.2	19.0	609.6
cch second order	-26.6444500531	144.0	78.0	78.0	nan	19.0	3.5
diff evo	-26.6444371557	37401.0	0.0	0.0	nan	19.0	204.0
direct	-26.5956682073	17139.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9
direct with trim	-26.6444501073	17148.0	7.0	7.0	nan	19.0	90.7
dual anneal	-26.6444501072	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	212.9
trust region	-26.6444501073	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-26.6444501073	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.5

Table 536: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0135225389	1923.4	1923.4	1923.4	1.0	19.0	536.7
cch second order	-41.0135225269	173.0	96.0	96.0	nan	19.0	3.8
diff evo	-41.0135123178	31707.0	0.0	0.0	nan	19.0	187.0
direct	-40.9141163873	16439.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.7
direct with trim	-41.0135225389	16449.0	8.0	8.0	nan	19.0	79.5
dual anneal	-41.0135225387	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	217.4
trust region	-41.0135225389	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-41.0135225389	272.0	272.0	272.0	1.0	19.0	3.4

Table 537: C

238

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0839494831	2014.0	2014.0	2014.0	1.6	19.0	579.2
cch second order	-59.0839494956	180.0	101.0	101.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-59.0839317847	32658.6	0.0	0.0	nan	19.0	166.5
direct	-58.0905260951	18769.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
direct with trim	-59.0839494831	18779.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.4
dual anneal	-59.0839494828	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	206.1
trust region	-59.0839494831	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-59.0839494831	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.8

Table 538: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0772163958	1941.8	1941.8	1941.8	1.0	19.0	664.5
cch second order	-81.0772163866	155.0	88.0	88.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-81.0771977552	33672.6	0.0	0.0	nan	19.0	176.1
direct	-80.3735363578	18179.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.6
direct with trim	-81.0772163958	18189.0	8.0	8.0	nan	19.0	87.8
dual anneal	-81.0772163954	38019.2	17.2	17.2	1.0	19.0	226.8
trust region	-81.0772163958	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-81.0772163958	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	3.4

Table 539: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1951639325	1830.2	1830.2	1830.2	1.2	19.0	613.3
cch second order	-107.1951639202	182.0	99.0	99.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-107.1951333708	35607.0	0.0	0.0	nan	19.0	192.0
direct	-106.7953333990	17375.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.5
direct with trim	-107.1951639325	17384.0	7.0	7.0	nan	19.0	85.2
dual anneal	-107.1951639318	38018.0	16.0	16.0	1.0	19.0	217.8
trust region	-107.1951639325	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-107.1951639325	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.2

Table 540: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6238671162	1840.8	1840.8	1840.8	1.0	19.0	576.7
cch second order	-137.6238671768	157.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-137.6238317444	35295.0	0.0	0.0	nan	19.0	197.5
direct	-137.1924519064	19195.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.4
direct with trim	-137.6238671162	19205.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.5
dual anneal	-137.6238671152	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	206.5
trust region	-137.6238671162	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	7.1
trust region repeats	-137.6238671162	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.5

Table 541: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.5364129205	2002.4	2002.4	2002.4	1.0	19.0	614.6
cch second order	-172.5364128346	172.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.8
diff evo	-172.5363635824	36090.6	0.0	0.0	nan	19.0	206.4
direct	-171.9122152159	17597.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
direct with trim	-172.5364129205	17606.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.0
dual anneal	-172.5364129193	38011.2	9.2	9.2	1.0	19.0	191.9
trust region	-172.5364129205	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	7.0
trust region repeats	-172.5364129205	282.0	282.0	282.0	1.0	19.0	3.3

Table 542: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0949664612	2157.8	2157.8	2157.8	1.0	19.0	653.9
cch second order	-212.0949664556	162.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.7
diff evo	-212.0948997845	35981.4	0.0	0.0	nan	19.0	192.7
direct	-210.1106759731	18537.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.5
direct with trim	-212.0949664612	18547.0	8.0	8.0	nan	19.0	85.1
dual anneal	-212.0949664596	38024.6	22.6	22.6	1.0	19.0	211.3
trust region	-212.0949664612	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-212.0949664612	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.2

Table 543: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4523551178	2068.6	2068.6	2068.6	1.0	19.0	632.1
cch second order	-256.4523551042	206.0	113.0	113.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-256.4522293640	34273.2	0.0	0.0	nan	19.0	187.8
direct	-253.0139059683	18043.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
direct with trim	-256.4523551178	18053.0	8.0	8.0	nan	19.0	94.4
dual anneal	-256.4523551157	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	205.6
trust region	-256.4523551178	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.9
trust region repeats	-256.4523551178	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.4

Table 544: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7533132098	2137.0	2137.0	2137.0	1.0	19.0	764.3
cch second order	-305.7533131862	232.0	118.0	118.0	nan	19.0	6.1
diff evo	-305.7532013650	36106.2	0.0	0.0	nan	19.0	188.9
direct	-304.1776393974	18485.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.7
direct with trim	-305.7533132098	18493.0	6.0	6.0	nan	19.0	88.7
dual anneal	-305.7533132073	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	196.0
trust region	-305.7533132098	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	2.5
trust region repeats	-305.7533132098	288.0	288.0	288.0	1.0	19.0	3.2

Table 545: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1354800438	2051.6	2051.6	2051.6	1.0	19.0	747.7
cch second order	-360.1354799583	178.0	99.0	99.0	nan	19.0	6.1
diff evo	-360.1354210398	35162.4	0.0	0.0	nan	19.0	186.3
direct	-355.3862087659	18011.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.5
direct with trim	-360.1354800438	18020.0	7.0	7.0	nan	19.0	95.2
dual anneal	-360.1354800407	38023.2	21.2	21.2	1.0	19.0	194.1
trust region	-360.1354800438	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-360.1354800438	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.3

Table 546: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7302140263	2080.0	2080.0	2080.0	1.2	19.0	547.3
cch second order	-419.7302140507	195.0	109.0	109.0	nan	19.0	3.9
diff evo	-419.7300341832	37806.6	0.0	0.0	nan	19.0	205.2
direct	-415.0152327760	17791.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
direct with trim	-419.7302140263	17801.0	8.0	8.0	nan	19.0	92.3
dual anneal	-419.7302140225	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	210.1
trust region	-419.7302140263	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.4
trust region repeats	-419.7302140263	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.0

Table 547: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6632665364	2212.2	2212.2	2212.2	1.0	19.0	603.1
cch second order	-484.6632666224	197.0	107.0	107.0	nan	19.0	3.8
diff evo	-484.6630864737	39483.6	0.0	0.0	nan	19.0	224.7
direct	-477.5154634979	17543.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
direct with trim	-484.6632665364	17556.0	11.0	11.0	nan	19.0	86.5
dual anneal	-484.6632665319	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	207.2
trust region	-484.6632665364	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-484.6632665364	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.5

Table 548: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0553468220	2067.6	2067.6	2067.6	1.2	19.0	679.9
cch second order	-555.0553467665	167.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.8
diff evo	-555.0551806711	40996.8	0.0	0.0	nan	19.0	217.5
direct	-546.4048640220	18323.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.0
direct with trim	-555.0553468220	18338.0	13.0	13.0	nan	19.0	97.4
dual anneal	-555.0553468166	38028.6	26.6	26.6	1.0	19.0	180.0
trust region	-555.0553468220	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-555.0553468220	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.5

Table 549: Ar

20.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6213563512
He	basin hopping	-3.0901074562
Li	cch second order	-7.9887778505
Be	cch second order	-15.7299072040
B	trust region	-26.6444501073
C	basin hopping	-41.0135225389
N	cch second order	-59.0839494956
O	trust region	-81.0772163958
F	trust region	-107.1951639325
Ne	cch second order	-137.6238671768
Na	basin hopping	-172.5364129205
Mg	trust region	-212.0949664612
Al	trust region	-256.4523551178
Si	trust region	-305.7533132098
P	basin hopping	-360.1354800438
S	cch second order	-419.7302140507
Cl	cch second order	-484.6632666224
Ar	trust region repeats	-555.0553468220

Table 550: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.9	10.9	10.9	nan	-180.3605374172	3.6
cch second order	174.7	96.1	96.1	nan	-180.3605374036	4.4
trust region repeats	277.9	277.9	277.9	1.0	-180.3605374172	3.4
basin hopping	1968.6	1968.6	1968.6	1.2	-180.3605374172	602.0
direct	17879.4	0.0	0.0	nan	-178.3773002463	101.7
direct with trim	17889.4	7.9	7.9	nan	-180.3605374172	92.4
diff evo	35218.3	0.0	0.0	nan	-180.3604780462	192.9
dual anneal	38017.5	15.5	15.5	1.0	-180.3605374157	205.9

Table 551: Average (all systems)

21 19s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

21.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 552: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821396	1779.0	1779.0	1779.0	1.8	19.0	446.4
He	-3.1805188901	1382.0	1382.0	1382.0	1.0	19.0	435.2
Li	-8.1481840525	1406.6	1406.6	1406.6	1.2	19.0	442.1
Be	-15.9681457023	1424.4	1424.4	1424.4	1.2	19.0	356.3
B	-26.9682917975	1491.8	1491.8	1491.8	1.0	19.0	440.7
C	-41.4274717019	1498.0	1498.0	1498.0	1.4	19.0	518.9
N	-59.5906437622	1587.0	1587.0	1587.0	1.2	19.0	575.8
O	-81.6778535082	1539.8	1539.8	1539.8	1.0	19.0	431.7
F	-107.8896699412	1566.0	1566.0	1566.0	1.4	19.0	456.4
Ne	-138.4110095947	1597.4	1597.4	1597.4	1.0	19.0	364.4
Na	-173.4140550473	1649.2	1649.2	1649.2	1.2	19.0	587.4
Mg	-213.0600486101	1687.4	1687.4	1687.4	1.2	19.0	544.4
Al	-257.5010354081	1777.0	1777.0	1777.0	1.0	19.0	479.8
Si	-306.8810570086	1831.0	1831.0	1831.0	1.6	19.0	537.9
P	-361.3370790662	1803.4	1803.4	1803.4	1.0	19.0	456.5
S	-420.9998499495	1839.2	1839.2	1839.2	1.6	19.0	564.7
Cl	-485.9945540319	1896.2	1896.2	1896.2	1.8	19.0	493.2
Ar	-556.4413710507	1943.0	1943.0	1943.0	1.0	19.0	556.3

Table 553: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821286	160.0	82.0	82.0	nan	19.0	4.0
He	-3.1805188703	183.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.1
Li	-8.1481840612	191.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.7
Be	-15.9681456634	173.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.2
B	-26.9682917708	177.0	98.0	98.0	nan	19.0	4.1
C	-41.4274531228	179.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.6
N	-59.5906438101	184.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.2
O	-81.6778534728	153.0	85.0	85.0	nan	19.0	4.1
F	-107.8982356296	355.0	183.0	183.0	nan	19.0	5.3
Ne	-138.4110266374	182.0	99.0	99.0	nan	19.0	4.1
Na	-173.4140394323	184.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.5
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	-257.5010353531	243.0	128.0	128.0	nan	19.0	4.7
Si	-306.8810569759	286.0	141.0	141.0	nan	19.0	6.4
P	-361.3370790163	311.0	152.0	152.0	nan	19.0	5.8
S	-420.9998499198	285.0	145.0	145.0	nan	19.0	5.2
Cl	-485.9945540179	225.0	111.0	111.0	nan	19.0	6.9
Ar	-556.4413857849	204.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.5

Table 554: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570867185	28602.6	0.0	0.0	nan	19.0	176.1
He	-3.1805250452	27627.6	0.0	0.0	nan	19.0	159.1
Li	-8.1481817257	32861.4	0.0	0.0	nan	19.0	232.4
Be	-15.9681243148	34639.8	0.0	0.0	nan	19.0	217.9
B	-26.9682812226	42042.0	0.0	0.0	nan	19.0	257.5
C	-41.4273890999	36621.0	0.0	0.0	nan	19.0	216.7
N	-59.5905166451	32596.2	0.0	0.0	nan	19.0	208.7
O	-81.6777415374	39452.4	0.0	0.0	nan	19.0	228.0
F	-107.8895841377	36067.2	0.0	0.0	nan	19.0	209.1
Ne	-138.4108052009	38914.2	0.0	0.0	nan	19.0	229.4
Na	-173.4139764119	41020.2	0.0	0.0	nan	19.0	260.6
Mg	-213.0598766169	35240.4	0.0	0.0	nan	19.0	206.6
Al	-257.5009977422	39826.8	0.0	0.0	nan	19.0	202.4
Si	-306.8808640916	36738.0	0.0	0.0	nan	19.0	214.1
P	-361.3368863994	48601.8	0.0	0.0	nan	19.0	313.8
S	-420.9996948870	38056.2	0.0	0.0	nan	19.0	253.1
Cl	-485.9943231945	45372.6	0.0	0.0	nan	19.0	268.9
Ar	-556.4410589169	42946.8	0.0	0.0	nan	19.0	243.8

Table 555: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6547955167	19197.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
He	-3.1505409357	17827.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.3
Li	-8.1089972141	19079.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.7
Be	-15.9185223753	18343.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.2
B	-26.7641237321	18155.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
C	-41.0296567630	17747.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.6
N	-58.3375991073	18921.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.5
O	-81.1137759360	18339.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
F	-107.5493812102	18059.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.9
Ne	-137.4289694965	17573.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
Na	-170.2665766976	18533.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.3
Mg	-210.9317291771	17893.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.1
Al	-254.5471195835	17923.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
Si	-305.3715629976	18711.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.7
P	-357.6352730489	16167.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.1
S	-372.9712662832	18139.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.9
Cl	-482.7395835572	19053.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.0
Ar	-551.2177629676	17869.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.7

Table 556: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821396	19205.0	6.0	6.0	nan	19.0	114.7
He	-3.1805188901	17837.0	8.0	8.0	nan	19.0	93.8
Li	-8.1481840525	19089.0	8.0	8.0	nan	19.0	108.7
Be	-15.9681457023	18352.0	7.0	7.0	nan	19.0	94.2
B	-26.9682917975	18166.0	9.0	9.0	nan	19.0	87.6
C	-41.4274531461	17764.0	15.0	15.0	nan	19.0	108.8
N	-59.5906437622	18938.0	15.0	15.0	nan	19.0	112.8
O	-81.6778535082	18350.0	9.0	9.0	nan	19.0	94.5
F	-107.8896517599	18067.0	6.0	6.0	nan	19.0	103.2
Ne	-138.4110095947	17585.0	10.0	10.0	nan	19.0	92.4
Na	-173.4140394547	18542.0	7.0	7.0	nan	19.0	119.6
Mg	-213.0600348713	17903.0	8.0	8.0	nan	19.0	93.1
Al	-257.5010354081	17933.0	8.0	8.0	nan	19.0	92.3
Si	-306.8810570086	18721.0	8.0	8.0	nan	19.0	113.6
P	-361.3370790662	16176.0	7.0	7.0	nan	19.0	89.3
S	-420.9998499495	18171.0	30.0	30.0	nan	19.0	120.7
Cl	-485.9945540319	19064.0	9.0	9.0	nan	19.0	114.1
Ar	-556.4413710507	17886.0	15.0	15.0	nan	19.0	97.4

Table 557: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821396	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	236.9
He	-3.1805188901	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	260.2
Li	-8.1481840525	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	210.1
Be	-15.9681457023	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	190.4
B	-26.9682917974	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	191.2
C	-41.4274531459	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	188.5
N	-59.5906437619	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	221.1
O	-81.6778535077	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	213.2
F	-107.8896517592	38019.0	17.0	17.0	1.0	19.0	218.9
Ne	-138.4110095938	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	245.7
Na	-173.4140394534	38024.8	22.8	22.8	1.0	19.0	243.9
Mg	-213.0600348696	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	234.9
Al	-257.5010354060	38028.4	26.4	26.4	1.0	19.0	226.2
Si	-306.8810660904	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	197.8
P	-361.3370790629	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	224.5
S	-420.9998499455	38030.4	28.4	28.4	1.0	19.0	235.3
Cl	-485.9945540271	38031.6	29.6	29.6	1.0	19.0	193.3
Ar	-556.4413710450	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	235.7

Table 558: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821396	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.6
He	-3.1805188901	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.2
Li	-8.1481840525	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.9
Be	-15.9681457023	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.6
B	-26.9682917975	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.0
C	-41.4274531461	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
N	-59.5906437622	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
O	-81.6778535082	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.7
F	-107.8896517599	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.2
Ne	-138.4110095947	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	2.6
Na	-173.4140394547	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	5.9
Mg	-213.0600348713	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.5
Al	-257.5010354081	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.0
Si	-306.8810570086	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.8
P	-361.3370790662	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.7
S	-420.9998499495	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.6
Cl	-485.9945540319	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.8
Ar	-556.4413710507	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.6

Table 559: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821396	217.0	217.0	217.0	1.0	19.0	3.1
He	-3.1805188901	235.0	235.0	235.0	1.0	19.0	4.8
Li	-8.1481840525	243.0	243.0	243.0	2.0	19.0	3.5
Be	-15.9681457023	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.0
B	-26.9682917975	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	3.3
C	-41.4274531461	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.2
N	-59.5906437622	268.0	268.0	268.0	2.0	19.0	3.3
O	-81.6778535082	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.1
F	-107.8896517599	274.0	274.0	274.0	2.0	19.0	2.9
Ne	-138.4110095947	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.7
Na	-173.4140394547	278.0	278.0	278.0	1.0	19.0	3.0
Mg	-213.0600348713	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.4
Al	-257.5010354081	280.0	280.0	280.0	2.0	19.0	3.8
Si	-306.8810570086	284.0	284.0	284.0	2.0	19.0	3.1
P	-361.3370790662	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.7
S	-420.9998499495	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.9
Cl	-485.9945540319	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.3
Ar	-556.4413710507	294.0	294.0	294.0	2.0	19.0	3.9

Table 560: trust region repeats

21.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6570821396	1779.0	1779.0	1779.0	1.8	19.0	446.4
cch second order	-0.6570821286	160.0	82.0	82.0	nan	19.0	4.0
diff evo	-0.6570867185	28602.6	0.0	0.0	nan	19.0	176.1
direct	-0.6547955167	19197.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
direct with trim	-0.6570821396	19205.0	6.0	6.0	nan	19.0	114.7
dual anneal	-0.6570821396	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	236.9
trust region	-0.6570821396	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-0.6570821396	217.0	217.0	217.0	1.0	19.0	3.1

Table 561: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805188901	1382.0	1382.0	1382.0	1.0	19.0	435.2
cch second order	-3.1805188703	183.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-3.1805250452	27627.6	0.0	0.0	nan	19.0	159.1
direct	-3.1505409357	17827.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.3
direct with trim	-3.1805188901	17837.0	8.0	8.0	nan	19.0	93.8
dual anneal	-3.1805188901	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	260.2
trust region	-3.1805188901	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.2
trust region repeats	-3.1805188901	235.0	235.0	235.0	1.0	19.0	4.8

Table 562: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1481840525	1406.6	1406.6	1406.6	1.2	19.0	442.1
cch second order	-8.1481840612	191.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.7
diff evo	-8.1481817257	32861.4	0.0	0.0	nan	19.0	232.4
direct	-8.1089972141	19079.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.7
direct with trim	-8.1481840525	19089.0	8.0	8.0	nan	19.0	108.7
dual anneal	-8.1481840525	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	210.1
trust region	-8.1481840525	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.9
trust region repeats	-8.1481840525	243.0	243.0	243.0	2.0	19.0	3.5

Table 563: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9681457023	1424.4	1424.4	1424.4	1.2	19.0	356.3
cch second order	-15.9681456634	173.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.2
diff evo	-15.9681243148	34639.8	0.0	0.0	nan	19.0	217.9
direct	-15.9185223753	18343.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.2
direct with trim	-15.9681457023	18352.0	7.0	7.0	nan	19.0	94.2
dual anneal	-15.9681457023	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	190.4
trust region	-15.9681457023	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-15.9681457023	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.0

Table 564: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9682917975	1491.8	1491.8	1491.8	1.0	19.0	440.7
cch second order	-26.9682917708	177.0	98.0	98.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-26.9682812226	42042.0	0.0	0.0	nan	19.0	257.5
direct	-26.7641237321	18155.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
direct with trim	-26.9682917975	18166.0	9.0	9.0	nan	19.0	87.6
dual anneal	-26.9682917974	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	191.2
trust region	-26.9682917975	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-26.9682917975	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	3.3

Table 565: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4274717019	1498.0	1498.0	1498.0	1.4	19.0	518.9
cch second order	-41.4274531228	179.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.6
diff evo	-41.4273890999	36621.0	0.0	0.0	nan	19.0	216.7
direct	-41.0296567630	17747.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.6
direct with trim	-41.4274531461	17764.0	15.0	15.0	nan	19.0	108.8
dual anneal	-41.4274531459	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	188.5
trust region	-41.4274531461	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-41.4274531461	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.2

Table 566: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5906437622	1587.0	1587.0	1587.0	1.2	19.0	575.8
cch second order	-59.5906438101	184.0	97.0	97.0	nan	19.0	4.2
diff evo	-59.5905166451	32596.2	0.0	0.0	nan	19.0	208.7
direct	-58.3375991073	18921.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.5
direct with trim	-59.5906437622	18938.0	15.0	15.0	nan	19.0	112.8
dual anneal	-59.5906437619	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	221.1
trust region	-59.5906437622	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-59.5906437622	268.0	268.0	268.0	2.0	19.0	3.3

Table 567: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6778535082	1539.8	1539.8	1539.8	1.0	19.0	431.7
cch second order	-81.6778534728	153.0	85.0	85.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-81.6777415374	39452.4	0.0	0.0	nan	19.0	228.0
direct	-81.1137759360	18339.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
direct with trim	-81.6778535082	18350.0	9.0	9.0	nan	19.0	94.5
dual anneal	-81.6778535077	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	213.2
trust region	-81.6778535082	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.7
trust region repeats	-81.6778535082	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.1

Table 568: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8896699412	1566.0	1566.0	1566.0	1.4	19.0	456.4
cch second order	-107.8982356296	355.0	183.0	183.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-107.8895841377	36067.2	0.0	0.0	nan	19.0	209.1
direct	-107.5493812102	18059.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.9
direct with trim	-107.8896517599	18067.0	6.0	6.0	nan	19.0	103.2
dual anneal	-107.8896517592	38019.0	17.0	17.0	1.0	19.0	218.9
trust region	-107.8896517599	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-107.8896517599	274.0	274.0	274.0	2.0	19.0	2.9

Table 569: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4110095947	1597.4	1597.4	1597.4	1.0	19.0	364.4
cch second order	-138.4110266374	182.0	99.0	99.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-138.4108052009	38914.2	0.0	0.0	nan	19.0	229.4
direct	-137.4289694965	17573.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
direct with trim	-138.4110095947	17585.0	10.0	10.0	nan	19.0	92.4
dual anneal	-138.4110095938	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	245.7
trust region	-138.4110095947	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-138.4110095947	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.7

Table 570: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4140550473	1649.2	1649.2	1649.2	1.2	19.0	587.4
cch second order	-173.4140394323	184.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-173.4139764119	41020.2	0.0	0.0	nan	19.0	260.6
direct	-170.2665766976	18533.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.3
direct with trim	-173.4140394547	18542.0	7.0	7.0	nan	19.0	119.6
dual anneal	-173.4140394534	38024.8	22.8	22.8	1.0	19.0	243.9
trust region	-173.4140394547	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	5.9
trust region repeats	-173.4140394547	278.0	278.0	278.0	1.0	19.0	3.0

Table 571: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0600486101	1687.4	1687.4	1687.4	1.2	19.0	544.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-213.0598766169	35240.4	0.0	0.0	nan	19.0	206.6
direct	-210.9317291771	17893.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.1
direct with trim	-213.0600348713	17903.0	8.0	8.0	nan	19.0	93.1
dual anneal	-213.0600348696	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	234.9
trust region	-213.0600348713	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-213.0600348713	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.4

Table 572: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5010354081	1777.0	1777.0	1777.0	1.0	19.0	479.8
cch second order	-257.5010353531	243.0	128.0	128.0	nan	19.0	4.7
diff evo	-257.5009977422	39826.8	0.0	0.0	nan	19.0	202.4
direct	-254.5471195835	17923.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
direct with trim	-257.5010354081	17933.0	8.0	8.0	nan	19.0	92.3
dual anneal	-257.5010354060	38028.4	26.4	26.4	1.0	19.0	226.2
trust region	-257.5010354081	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.0
trust region repeats	-257.5010354081	280.0	280.0	280.0	2.0	19.0	3.8

Table 573: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8810570086	1831.0	1831.0	1831.0	1.6	19.0	537.9
cch second order	-306.8810569759	286.0	141.0	141.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-306.8808640916	36738.0	0.0	0.0	nan	19.0	214.1
direct	-305.3715629976	18711.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.7
direct with trim	-306.8810570086	18721.0	8.0	8.0	nan	19.0	113.6
dual anneal	-306.8810660904	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	197.8
trust region	-306.8810570086	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.8
trust region repeats	-306.8810570086	284.0	284.0	284.0	2.0	19.0	3.1

Table 574: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3370790662	1803.4	1803.4	1803.4	1.0	19.0	456.5
cch second order	-361.3370790163	311.0	152.0	152.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-361.3368863994	48601.8	0.0	0.0	nan	19.0	313.8
direct	-357.6352730489	16167.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.1
direct with trim	-361.3370790662	16176.0	7.0	7.0	nan	19.0	89.3
dual anneal	-361.3370790629	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	224.5
trust region	-361.3370790662	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-361.3370790662	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.7

Table 575: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.9998499495	1839.2	1839.2	1839.2	1.6	19.0	564.7
cch second order	-420.9998499198	285.0	145.0	145.0	nan	19.0	5.2
diff evo	-420.9996948870	38056.2	0.0	0.0	nan	19.0	253.1
direct	-372.9712662832	18139.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.9
direct with trim	-420.9998499495	18171.0	30.0	30.0	nan	19.0	120.7
dual anneal	-420.9998499455	38030.4	28.4	28.4	1.0	19.0	235.3
trust region	-420.9998499495	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-420.9998499495	286.0	286.0	286.0	1.0	19.0	3.9

Table 576: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9945540319	1896.2	1896.2	1896.2	1.8	19.0	493.2
cch second order	-485.9945540179	225.0	111.0	111.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-485.9943231945	45372.6	0.0	0.0	nan	19.0	268.9
direct	-482.7395835572	19053.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.0
direct with trim	-485.9945540319	19064.0	9.0	9.0	nan	19.0	114.1
dual anneal	-485.9945540271	38031.6	29.6	29.6	1.0	19.0	193.3
trust region	-485.9945540319	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-485.9945540319	290.0	290.0	290.0	1.0	19.0	3.3

Table 577: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4413710507	1943.0	1943.0	1943.0	1.0	19.0	556.3
cch second order	-556.4413857849	204.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-556.4410589169	42946.8	0.0	0.0	nan	19.0	243.8
direct	-551.2177629676	17869.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.7
direct with trim	-556.4413710507	17886.0	15.0	15.0	nan	19.0	97.4
dual anneal	-556.4413710450	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	235.7
trust region	-556.4413710507	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-556.4413710507	294.0	294.0	294.0	2.0	19.0	3.9

Table 578: Ar

21.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	diff evo	-0.6570867185
He	diff evo	-3.1805250452
Li	cch second order	-8.1481840612
Be	basin hopping	-15.9681457023
B	basin hopping	-26.9682917975
C	basin hopping	-41.4274717019
N	cch second order	-59.5906438101
O	basin hopping	-81.6778535082
F	cch second order	-107.8982356296
Ne	cch second order	-138.4110266374
Na	basin hopping	-173.4140550473
Mg	basin hopping	-213.0600486101
Al	basin hopping	-257.5010354081
Si	dual anneal	-306.8810660904
P	basin hopping	-361.3370790662
S	basin hopping	-420.9998499495
Cl	trust region repeats	-485.9945540319
Ar	cch second order	-556.4413857849

Table 579: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.2	12.2	12.2	nan	-181.0859919552	3.2
cch second order	216.2	113.0	113.0	nan	-179.2056726863	5.1
trust region repeats	268.9	268.9	268.9	1.3	-181.0859919552	3.5
basin hopping	1649.9	1649.9	1649.9	1.3	-181.0859956257	482.7
direct	18196.0	0.0	0.0	nan	-176.9854020333	105.1
direct with trim	18208.3	10.3	10.3	nan	-181.0859919552	102.8
diff evo	37623.7	0.0	0.0	nan	-181.0858841060	227.7
dual anneal	38021.3	19.3	19.3	1.0	-181.0859924583	220.4

Table 580: Average (all systems)

22   19s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

22.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 581: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660984743	1904.6	1904.6	1904.6	1.8	19.0	450.2
He	-3.2215091830	1458.2	1458.2	1458.2	1.4	19.0	434.6
Li	-8.2485264845	1475.8	1475.8	1475.8	1.2	19.0	383.8
Be	-16.1579036524	1466.8	1466.8	1466.8	1.4	19.0	412.6
B	-27.2793853175	1484.2	1484.2	1484.2	1.2	19.0	448.4
C	-41.8933756091	1511.8	1511.8	1511.8	1.2	19.0	472.1
N	-60.2460777940	1510.8	1510.8	1510.8	1.4	19.0	458.6
O	-82.5585393327	1586.6	1586.6	1586.6	1.4	19.0	453.3
F	-109.0322949013	1571.2	1571.2	1571.2	1.2	19.0	537.1
Ne	-139.8531147586	1636.2	1636.2	1636.2	1.0	19.0	462.2
Na	-175.1938475745	1633.4	1633.4	1633.4	1.0	19.0	474.5
Mg	-215.2164553761	1677.2	1677.2	1677.2	1.4	19.0	444.4
Al	-260.0735899846	1772.6	1772.6	1772.6	1.2	19.0	434.8
Si	-309.9098321490	1813.6	1813.6	1813.6	1.2	19.0	560.5
P	-364.8626854846	1851.0	1851.0	1851.0	1.0	19.0	529.3
S	-425.0633874707	1904.2	1904.2	1904.2	1.2	19.0	558.8
Cl	-490.6375809128	1902.6	1902.6	1902.6	1.4	19.0	485.6
Ar	-561.7058769406	1959.8	1959.8	1959.8	1.2	19.0	486.8

Table 582: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937742	163.0	89.0	89.0	nan	19.0	4.2
He	-3.2214999029	190.0	100.0	100.0	nan	19.0	4.5
Li	-8.2485265397	152.0	83.0	83.0	nan	19.0	5.3
Be	-16.1578876490	205.0	110.0	110.0	nan	19.0	4.4
B	-27.2793852792	186.0	101.0	101.0	nan	19.0	5.7
C	-41.8933561586	193.0	105.0	105.0	nan	19.0	6.4
N	-60.2460330551	217.0	113.0	113.0	nan	19.0	6.0
O	-82.5585393166	187.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.6
F	-107.1693147618	432.0	214.0	214.0	nan	19.0	6.4
Ne	-139.8531342237	189.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.2
Na	-175.1938475323	178.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.6
Mg	-215.2164554366	219.0	114.0	114.0	nan	19.0	4.6
Al	-260.0735899989	233.0	122.0	122.0	nan	19.0	4.1
Si	-309.9189918865	402.0	207.0	207.0	nan	19.0	6.0
P	-364.8719163738	349.0	186.0	186.0	nan	19.0	7.4
S	-425.0633874716	265.0	138.0	138.0	nan	19.0	4.3
Cl	-490.6375808493	214.0	113.0	113.0	nan	19.0	5.9
Ar	-561.7058769158	187.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.5

Table 583: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660981462	29117.4	0.0	0.0	nan	19.0	182.5
He	-3.2215082533	29008.2	0.0	0.0	nan	19.0	176.3
Li	-8.2485311687	31262.4	0.0	0.0	nan	19.0	184.6
Be	-16.1578684500	36808.2	0.0	0.0	nan	19.0	212.6
B	-27.2793658507	35950.2	0.0	0.0	nan	19.0	192.4
C	-41.8933099462	37104.6	0.0	0.0	nan	19.0	219.9
N	-60.2460381132	40833.0	0.0	0.0	nan	19.0	251.6
O	-82.5584177455	35778.6	0.0	0.0	nan	19.0	231.4
F	-109.0322575151	41558.4	0.0	0.0	nan	19.0	250.6
Ne	-139.8529670514	33891.0	0.0	0.0	nan	19.0	161.7
Na	-175.1936519994	38415.0	0.0	0.0	nan	19.0	207.0
Mg	-215.2164003125	43422.6	0.0	0.0	nan	19.0	273.3
Al	-260.0735107029	45458.4	0.0	0.0	nan	19.0	269.3
Si	-309.9097186201	43118.4	0.0	0.0	nan	19.0	226.4
P	-364.8625905967	42081.0	0.0	0.0	nan	19.0	227.5
S	-425.0632982246	53695.2	0.0	0.0	nan	19.0	307.0
Cl	-490.6373361365	44428.8	0.0	0.0	nan	19.0	226.1
Ar	-561.7053676035	39889.2	0.0	0.0	nan	19.0	250.2

Table 584: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6639382886	19039.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.3
He	-3.2098567498	17827.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.2
Li	-8.2349846069	17121.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.5
Be	-16.0799451383	18367.0	0.0	0.0	nan	19.0	91.9
B	-27.0811880198	18639.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.0
C	-41.5312036738	19153.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.3
N	-58.9569622617	18767.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
O	-81.9805964122	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.3
F	-108.6060671260	17311.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.8
Ne	-138.8553473711	17329.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.5
Na	-174.3140382856	19131.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.8
Mg	-212.9319799877	18015.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.8
Al	-257.0313763848	18735.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.6
Si	-306.6301135587	17833.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.3
P	-361.2488424102	16995.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.4
S	-377.2977279169	17373.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.7
Cl	-486.5349165433	19025.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.3
Ar	-556.0572519877	18193.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.9

Table 585: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937729	19047.0	6.0	6.0	nan	19.0	124.0
He	-3.2214998425	17836.0	7.0	7.0	nan	19.0	118.6
Li	-8.2485264845	17130.0	7.0	7.0	nan	19.0	107.3
Be	-16.1578876527	18375.0	6.0	6.0	nan	19.0	123.8
B	-27.2793853175	18650.0	9.0	9.0	nan	19.0	115.8
C	-41.8933561411	19164.0	9.0	9.0	nan	19.0	118.1
N	-60.2460575633	18784.0	15.0	15.0	nan	19.0	129.5
O	-82.5585393327	19166.0	9.0	9.0	nan	19.0	125.5
F	-109.0322949013	17322.0	9.0	9.0	nan	19.0	117.2
Ne	-139.8531147586	17340.0	9.0	9.0	nan	19.0	116.1
Na	-175.1938475745	19141.0	8.0	8.0	nan	19.0	125.3
Mg	-215.2164553761	18025.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.0
Al	-260.0735899846	18745.0	8.0	8.0	nan	19.0	123.2
Si	-309.9098321490	17842.0	7.0	7.0	nan	19.0	115.6
P	-364.8626854846	17004.0	7.0	7.0	nan	19.0	99.9
S	-425.0633874707	17405.0	30.0	30.0	nan	19.0	109.6
Cl	-490.6375809128	19036.0	9.0	9.0	nan	19.0	122.5
Ar	-561.7058769406	18211.0	16.0	16.0	nan	19.0	123.9

Table 586: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937729	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	228.6
He	-3.2214998425	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	255.1
Li	-8.2485264845	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	189.3
Be	-16.1578876527	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	247.9
B	-27.2793853173	38020.2	18.2	18.2	1.0	19.0	235.1
C	-41.8933561409	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	221.5
N	-60.2460575629	38020.0	18.0	18.0	1.0	19.0	250.7
O	-82.5585393322	38020.4	18.4	18.4	1.0	19.0	258.8
F	-109.0322949006	38024.4	22.4	22.4	1.0	19.0	242.2
Ne	-139.8531147576	38020.6	18.6	18.6	1.0	19.0	255.7
Na	-175.1938475731	38025.0	23.0	23.0	1.0	19.0	256.4
Mg	-215.2164553743	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	257.8
Al	-260.0735899824	38033.4	31.4	31.4	1.0	19.0	248.0
Si	-309.9098321462	38028.4	26.4	26.4	1.0	19.0	252.4
P	-364.8626854811	38036.2	34.2	34.2	1.0	19.0	259.4
S	-425.0633874665	38031.0	29.0	29.0	1.0	19.0	237.7
Cl	-490.6375809077	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	253.2
Ar	-561.7058769345	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	251.4

Table 587: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937729	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.8
He	-3.2214998425	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.7
Li	-8.2485264845	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.4
Be	-16.1578876527	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
B	-27.2793853175	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
C	-41.8933561411	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.1
N	-60.2460575633	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.3
O	-82.5585393327	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4
F	-109.0322949013	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.8
Ne	-139.8531147586	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.2
Na	-175.1938475745	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	3.7
Mg	-215.2164553761	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	8.1
Al	-260.0735899846	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	4.8
Si	-309.9098321490	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.3
P	-364.8626854846	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	8.1
S	-425.0633874707	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.7
Cl	-490.6375809128	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.2
Ar	-561.7058769406	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.4

Table 588: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937729	217.0	217.0	217.0	1.0	19.0	3.3
He	-3.2214998425	233.0	233.0	233.0	1.0	19.0	3.3
Li	-8.2485264845	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.6
Be	-16.1578876527	251.0	251.0	251.0	1.0	19.0	3.5
B	-27.2793853175	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.1
C	-41.8933561411	264.0	264.0	264.0	2.0	19.0	3.2
N	-60.2460575633	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.2
O	-82.5585393327	274.0	274.0	274.0	1.0	19.0	3.5
F	-109.0322949013	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.4
Ne	-139.8531147586	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.4
Na	-175.1938475745	279.0	279.0	279.0	1.0	19.0	3.0
Mg	-215.2164553761	279.0	279.0	279.0	1.0	19.0	3.4
Al	-260.0735899846	282.0	282.0	282.0	1.0	19.0	3.0
Si	-309.9098321490	288.0	288.0	288.0	1.0	19.0	3.3
P	-364.8626854846	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.3
S	-425.0633874707	293.0	293.0	293.0	1.0	19.0	3.4
Cl	-490.6375809128	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.5
Ar	-561.7058769406	294.0	294.0	294.0	1.0	19.0	3.8

Table 589: trust region repeats

22.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6660984743	1904.6	1904.6	1904.6	1.8	19.0	450.2
cch second order	-0.6660937742	163.0	89.0	89.0	nan	19.0	4.2
diff evo	-0.6660981462	29117.4	0.0	0.0	nan	19.0	182.5
direct	-0.6639382886	19039.0	0.0	0.0	nan	19.0	116.3
direct with trim	-0.6660937729	19047.0	6.0	6.0	nan	19.0	124.0
dual anneal	-0.6660937729	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	228.6
trust region	-0.6660937729	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.8
trust region repeats	-0.6660937729	217.0	217.0	217.0	1.0	19.0	3.3

Table 590: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215091830	1458.2	1458.2	1458.2	1.4	19.0	434.6
cch second order	-3.2214999029	190.0	100.0	100.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-3.2215082533	29008.2	0.0	0.0	nan	19.0	176.3
direct	-3.2098567498	17827.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.2
direct with trim	-3.2214998425	17836.0	7.0	7.0	nan	19.0	118.6
dual anneal	-3.2214998425	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	255.1
trust region	-3.2214998425	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.7
trust region repeats	-3.2214998425	233.0	233.0	233.0	1.0	19.0	3.3

Table 591: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2485264845	1475.8	1475.8	1475.8	1.2	19.0	383.8
cch second order	-8.2485265397	152.0	83.0	83.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-8.2485311687	31262.4	0.0	0.0	nan	19.0	184.6
direct	-8.2349846069	17121.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.5
direct with trim	-8.2485264845	17130.0	7.0	7.0	nan	19.0	107.3
dual anneal	-8.2485264845	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	189.3
trust region	-8.2485264845	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.4
trust region repeats	-8.2485264845	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.6

Table 592: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1579036524	1466.8	1466.8	1466.8	1.4	19.0	412.6
cch second order	-16.1578876490	205.0	110.0	110.0	nan	19.0	4.4
diff evo	-16.1578684500	36808.2	0.0	0.0	nan	19.0	212.6
direct	-16.0799451383	18367.0	0.0	0.0	nan	19.0	91.9
direct with trim	-16.1578876527	18375.0	6.0	6.0	nan	19.0	123.8
dual anneal	-16.1578876527	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	247.9
trust region	-16.1578876527	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-16.1578876527	251.0	251.0	251.0	1.0	19.0	3.5

Table 593: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2793853175	1484.2	1484.2	1484.2	1.2	19.0	448.4
cch second order	-27.2793852792	186.0	101.0	101.0	nan	19.0	5.7
diff evo	-27.2793658507	35950.2	0.0	0.0	nan	19.0	192.4
direct	-27.0811880198	18639.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.0
direct with trim	-27.2793853175	18650.0	9.0	9.0	nan	19.0	115.8
dual anneal	-27.2793853173	38020.2	18.2	18.2	1.0	19.0	235.1
trust region	-27.2793853175	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-27.2793853175	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.1

Table 594: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8933756091	1511.8	1511.8	1511.8	1.2	19.0	472.1
cch second order	-41.8933561586	193.0	105.0	105.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-41.8933099462	37104.6	0.0	0.0	nan	19.0	219.9
direct	-41.5312036738	19153.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.3
direct with trim	-41.8933561411	19164.0	9.0	9.0	nan	19.0	118.1
dual anneal	-41.8933561409	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	221.5
trust region	-41.8933561411	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.1
trust region repeats	-41.8933561411	264.0	264.0	264.0	2.0	19.0	3.2

Table 595: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2460777940	1510.8	1510.8	1510.8	1.4	19.0	458.6
cch second order	-60.2460330551	217.0	113.0	113.0	nan	19.0	6.0
diff evo	-60.2460381132	40833.0	0.0	0.0	nan	19.0	251.6
direct	-58.9569622617	18767.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.3
direct with trim	-60.2460575633	18784.0	15.0	15.0	nan	19.0	129.5
dual anneal	-60.2460575629	38020.0	18.0	18.0	1.0	19.0	250.7
trust region	-60.2460575633	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-60.2460575633	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.2

Table 596: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5585393327	1586.6	1586.6	1586.6	1.4	19.0	453.3
cch second order	-82.5585393166	187.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-82.5584177455	35778.6	0.0	0.0	nan	19.0	231.4
direct	-81.9805964122	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.3
direct with trim	-82.5585393327	19166.0	9.0	9.0	nan	19.0	125.5
dual anneal	-82.5585393322	38020.4	18.4	18.4	1.0	19.0	258.8
trust region	-82.5585393327	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-82.5585393327	274.0	274.0	274.0	1.0	19.0	3.5

Table 597: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0322949013	1571.2	1571.2	1571.2	1.2	19.0	537.1
cch second order	-107.1693147618	432.0	214.0	214.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-109.0322575151	41558.4	0.0	0.0	nan	19.0	250.6
direct	-108.6060671260	17311.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.8
direct with trim	-109.0322949013	17322.0	9.0	9.0	nan	19.0	117.2
dual anneal	-109.0322949006	38024.4	22.4	22.4	1.0	19.0	242.2
trust region	-109.0322949013	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-109.0322949013	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.4

Table 598: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8531147586	1636.2	1636.2	1636.2	1.0	19.0	462.2
cch second order	-139.8531342237	189.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.2
diff evo	-139.8529670514	33891.0	0.0	0.0	nan	19.0	161.7
direct	-138.8553473711	17329.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.5
direct with trim	-139.8531147586	17340.0	9.0	9.0	nan	19.0	116.1
dual anneal	-139.8531147576	38020.6	18.6	18.6	1.0	19.0	255.7
trust region	-139.8531147586	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-139.8531147586	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.4

Table 599: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1938475745	1633.4	1633.4	1633.4	1.0	19.0	474.5
cch second order	-175.1938475323	178.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-175.1936519994	38415.0	0.0	0.0	nan	19.0	207.0
direct	-174.3140382856	19131.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.8
direct with trim	-175.1938475745	19141.0	8.0	8.0	nan	19.0	125.3
dual anneal	-175.1938475731	38025.0	23.0	23.0	1.0	19.0	256.4
trust region	-175.1938475745	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-175.1938475745	279.0	279.0	279.0	1.0	19.0	3.0

Table 600: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2164553761	1677.2	1677.2	1677.2	1.4	19.0	444.4
cch second order	-215.2164554366	219.0	114.0	114.0	nan	19.0	4.6
diff evo	-215.2164003125	43422.6	0.0	0.0	nan	19.0	273.3
direct	-212.9319799877	18015.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.8
direct with trim	-215.2164553761	18025.0	8.0	8.0	nan	19.0	101.0
dual anneal	-215.2164553743	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	257.8
trust region	-215.2164553761	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	8.1
trust region repeats	-215.2164553761	279.0	279.0	279.0	1.0	19.0	3.4

Table 601: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0735899846	1772.6	1772.6	1772.6	1.2	19.0	434.8
cch second order	-260.0735899989	233.0	122.0	122.0	nan	19.0	4.1
diff evo	-260.0735107029	45458.4	0.0	0.0	nan	19.0	269.3
direct	-257.0313763848	18735.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.6
direct with trim	-260.0735899846	18745.0	8.0	8.0	nan	19.0	123.2
dual anneal	-260.0735899824	38033.4	31.4	31.4	1.0	19.0	248.0
trust region	-260.0735899846	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	4.8
trust region repeats	-260.0735899846	282.0	282.0	282.0	1.0	19.0	3.0

Table 602: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9098321490	1813.6	1813.6	1813.6	1.2	19.0	560.5
cch second order	-309.9189918865	402.0	207.0	207.0	nan	19.0	6.0
diff evo	-309.9097186201	43118.4	0.0	0.0	nan	19.0	226.4
direct	-306.6301135587	17833.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.3
direct with trim	-309.9098321490	17842.0	7.0	7.0	nan	19.0	115.6
dual anneal	-309.9098321462	38028.4	26.4	26.4	1.0	19.0	252.4
trust region	-309.9098321490	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-309.9098321490	288.0	288.0	288.0	1.0	19.0	3.3

Table 603: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8626854846	1851.0	1851.0	1851.0	1.0	19.0	529.3
cch second order	-364.8719163738	349.0	186.0	186.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-364.8625905967	42081.0	0.0	0.0	nan	19.0	227.5
direct	-361.2488424102	16995.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.4
direct with trim	-364.8626854846	17004.0	7.0	7.0	nan	19.0	99.9
dual anneal	-364.8626854811	38036.2	34.2	34.2	1.0	19.0	259.4
trust region	-364.8626854846	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	8.1
trust region repeats	-364.8626854846	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.3

Table 604: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0633874707	1904.2	1904.2	1904.2	1.2	19.0	558.8
cch second order	-425.0633874716	265.0	138.0	138.0	nan	19.0	4.3
diff evo	-425.0632982246	53695.2	0.0	0.0	nan	19.0	307.0
direct	-377.2977279169	17373.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.7
direct with trim	-425.0633874707	17405.0	30.0	30.0	nan	19.0	109.6
dual anneal	-425.0633874665	38031.0	29.0	29.0	1.0	19.0	237.7
trust region	-425.0633874707	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.7
trust region repeats	-425.0633874707	293.0	293.0	293.0	1.0	19.0	3.4

Table 605: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6375809128	1902.6	1902.6	1902.6	1.4	19.0	485.6
cch second order	-490.6375808493	214.0	113.0	113.0	nan	19.0	5.9
diff evo	-490.6373361365	44428.8	0.0	0.0	nan	19.0	226.1
direct	-486.5349165433	19025.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.3
direct with trim	-490.6375809128	19036.0	9.0	9.0	nan	19.0	122.5
dual anneal	-490.6375809077	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	253.2
trust region	-490.6375809128	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-490.6375809128	292.0	292.0	292.0	1.0	19.0	3.5

Table 606: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7058769406	1959.8	1959.8	1959.8	1.2	19.0	486.8
cch second order	-561.7058769158	187.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-561.7053676035	39889.2	0.0	0.0	nan	19.0	250.2
direct	-556.0572519877	18193.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.9
direct with trim	-561.7058769406	18211.0	16.0	16.0	nan	19.0	123.9
dual anneal	-561.7058769345	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	251.4
trust region	-561.7058769406	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.4
trust region repeats	-561.7058769406	294.0	294.0	294.0	1.0	19.0	3.8

Table 607: Ar

22.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6660984743
He	basin hopping	-3.2215091830
Li	diff evo	-8.2485311687
Be	basin hopping	-16.1579036524
B	trust region	-27.2793853175
C	basin hopping	-41.8933756091
N	basin hopping	-60.2460777940
O	basin hopping	-82.5585393327
F	basin hopping	-109.0322949013
Ne	cch second order	-139.8531342237
Na	basin hopping	-175.1938475745
Mg	cch second order	-215.2164554366
Al	cch second order	-260.0735899989
Si	cch second order	-309.9189918865
P	cch second order	-364.8719163738
S	cch second order	-425.0633874716
Cl	basin hopping	-490.6375809128
Ar	basin hopping	-561.7058769406

Table 608: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.3	12.3	12.3	nan	-182.8788895367	3.7
cch second order	231.2	121.8	121.8	nan	-182.7764120625	5.2
trust region repeats	270.2	270.2	270.2	1.1	-182.8788895367	3.3
basin hopping	1673.4	1673.4	1673.4	1.3	-182.8788934111	471.5
direct	18222.7	0.0	0.0	nan	-178.7359075957	107.4
direct with trim	18234.6	9.9	9.9	nan	-182.8788895367	117.6
dual anneal	38022.5	20.5	20.5	1.0	-182.8788895350	244.5
diff evo	38990.0	0.0	0.0	nan	-182.8787909131	225.0

Table 609: Average (all systems)

23 19s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

23.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 610: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103886	1381.0	1381.0	1381.0	3.6	19.0	418.9
He	-2.8183302057	1390.4	1390.4	1390.4	1.4	19.0	424.1
Li	-7.3226787407	1374.6	1374.6	1374.6	1.2	19.0	383.4
Be	-14.4840512681	1397.8	1397.8	1397.8	1.2	19.0	348.1
B	-24.6283629916	1402.0	1402.0	1402.0	1.4	19.0	452.5
C	-38.0332144634	1414.2	1414.2	1414.2	1.0	19.0	435.1
N	-54.9427944841	1421.2	1421.2	1421.2	1.2	19.0	333.2
O	-75.5765074513	1431.8	1431.8	1431.8	1.4	19.0	401.7
F	-100.1344973224	1455.8	1455.8	1455.8	1.0	19.0	485.9
Ne	-128.8014191156	1447.2	1447.2	1447.2	1.4	19.0	465.4
Na	-161.7491475563	1476.2	1476.2	1476.2	1.2	19.0	359.1
Mg	-199.1387963480	1494.2	1494.2	1494.2	1.0	19.0	409.0
Al	-241.1222690728	1509.2	1509.2	1509.2	1.0	19.0	375.9
Si	-287.8434795804	1491.8	1491.8	1491.8	1.0	19.0	308.3
P	-339.4393318028	1536.0	1536.0	1536.0	1.0	19.0	428.6
S	-396.0405198728	1576.2	1576.2	1576.2	1.0	19.0	442.4
Cl	-457.7721910465	1619.6	1619.6	1619.6	1.2	19.0	457.3
Ar	-524.7545018902	1591.0	1591.0	1591.0	2.0	19.0	336.4

Table 611: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103276	330.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.3
He	-2.8183299552	140.0	78.0	78.0	nan	19.0	3.3
Li	-7.3226778554	159.0	87.0	87.0	nan	19.0	3.3
Be	-14.4840501072	151.0	83.0	83.0	nan	19.0	5.9
B	-24.6283617882	178.0	96.0	96.0	nan	19.0	3.7
C	-38.0332143888	208.0	113.0	113.0	nan	19.0	5.5
N	-54.9427944839	155.0	88.0	88.0	nan	19.0	5.5
O	-75.5765074325	147.0	83.0	83.0	nan	19.0	4.7
F	-100.1344973426	155.0	84.0	84.0	nan	19.0	4.9
Ne	-128.8014191663	169.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.3
Na	-161.7491455244	184.0	97.0	97.0	nan	19.0	5.3
Mg	-199.1387963302	238.0	106.0	106.0	nan	19.0	5.8
Al	-241.1222690019	199.0	105.0	105.0	nan	19.0	3.7
Si	-287.8434795271	176.0	98.0	98.0	nan	19.0	3.7
P	-339.4393317964	229.0	123.0	123.0	nan	19.0	5.8
S	-396.0405198546	175.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.5
Cl	-457.7721910831	187.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.6
Ar	-524.7545018403	142.0	81.0	81.0	nan	19.0	5.0

Table 612: cch second order

269

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666099073	24320.4	0.0	0.0	nan	19.0	129.3
He	-2.8183287154	26527.8	0.0	0.0	nan	19.0	141.8
Li	-7.3226730322	25545.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.9
Be	-14.4840421937	29640.0	0.0	0.0	nan	19.0	158.1
B	-24.6283407135	29343.6	0.0	0.0	nan	19.0	141.5
C	-38.0332034878	31863.0	0.0	0.0	nan	19.0	163.6
N	-54.9427609382	33532.2	0.0	0.0	nan	19.0	182.6
O	-75.5764951617	37861.2	0.0	0.0	nan	19.0	186.3
F	-100.1344817920	33196.8	0.0	0.0	nan	19.0	150.7
Ne	-128.8013702037	32175.0	0.0	0.0	nan	19.0	147.6
Na	-161.7490767704	34288.8	0.0	0.0	nan	19.0	163.5
Mg	-199.1387582736	38352.6	0.0	0.0	nan	19.0	174.2
Al	-241.1221832417	33040.8	0.0	0.0	nan	19.0	164.1
Si	-287.8434140550	46597.2	0.0	0.0	nan	19.0	236.3
P	-339.4392240648	39054.6	0.0	0.0	nan	19.0	196.8
S	-396.0403368603	30349.8	0.0	0.0	nan	19.0	156.7
Cl	-457.7720306974	34429.2	0.0	0.0	nan	19.0	150.9
Ar	-524.7543934907	35856.6	0.0	0.0	nan	19.0	155.5

Table 613: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5660501156	17287.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.7
He	-2.8125595410	16835.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.3
Li	-7.2910974110	17705.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.3
Be	-14.4668999861	18693.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.7
B	-24.5926322468	17613.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.1
C	-37.7911520850	17307.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9
N	-53.9176870591	17995.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.2
O	-75.2896126026	17583.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.6
F	-99.9616291638	17831.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.1
Ne	-127.8798335067	17449.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.9
Na	-160.7420904116	16145.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.7
Mg	-197.3760690328	17701.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.7
Al	-239.7627261304	18747.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.2
Si	-286.7412400752	17877.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.4
P	-335.2552998791	17517.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
S	-382.8035327804	19187.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
Cl	-454.9175402193	19049.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.3
Ar	-517.7476901193	18595.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.8

Table 614: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	17294.0	5.0	5.0	nan	19.0	82.5
He	-2.8183299118	16843.0	6.0	6.0	nan	19.0	61.5
Li	-7.3226778310	17713.0	6.0	6.0	nan	19.0	81.0
Be	-14.4840500990	18701.0	6.0	6.0	nan	19.0	76.2
B	-24.6282954867	17621.0	6.0	6.0	nan	19.0	77.0
C	-38.0332144634	17316.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.5
N	-54.9427944841	18009.0	12.0	12.0	nan	19.0	81.3
O	-75.5765074513	17592.0	7.0	7.0	nan	19.0	71.7
F	-100.1344973224	17839.0	6.0	6.0	nan	19.0	80.4
Ne	-128.8014191156	17460.0	9.0	9.0	nan	19.0	71.7
Na	-161.7491475563	16155.0	8.0	8.0	nan	19.0	68.1
Mg	-199.1387963480	17710.0	7.0	7.0	nan	19.0	79.4
Al	-241.1222690728	18756.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.6
Si	-287.8434795804	17888.0	9.0	9.0	nan	19.0	81.3
P	-339.4393318028	17526.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.9
S	-396.0405198728	19206.0	17.0	17.0	nan	19.0	91.2
Cl	-457.7721910465	19059.0	8.0	8.0	nan	19.0	80.6
Ar	-524.7545018902	18613.0	16.0	16.0	nan	19.0	77.9

Table 615: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	177.7
He	-2.8183299118	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	171.8
Li	-7.3226778310	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	178.3
Be	-14.4840500990	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	181.0
B	-24.6283618011	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	151.5
C	-38.0332144633	38017.0	15.0	15.0	1.0	19.0	150.2
N	-54.9427944840	38020.6	18.6	18.6	1.0	19.0	170.1
O	-75.5765074510	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	160.5
F	-100.1344973221	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	182.4
Ne	-128.8014191151	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	149.9
Na	-161.7491475556	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	158.3
Mg	-199.1387963471	38033.0	31.0	31.0	1.0	19.0	179.9
Al	-241.1222690717	38021.6	19.6	19.6	1.0	19.0	150.6
Si	-287.8434795791	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	152.8
P	-339.4393318011	38025.2	23.2	23.2	1.0	19.0	166.6
S	-396.0405198708	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	152.7
Cl	-457.7721910441	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	162.2
Ar	-524.7545018873	38027.4	25.4	25.4	1.0	19.0	184.1

Table 616: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.2
He	-2.8183299118	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
Li	-7.3226778310	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.0
Be	-14.4840512681	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
B	-24.6283618012	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.5
C	-38.0332144634	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.4
N	-54.9427944841	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
O	-75.5765074513	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.8
F	-100.1344973224	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	5.8
Ne	-128.8014191156	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	7.1
Na	-161.7491475563	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.7
Mg	-199.1387963480	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.8
Al	-241.1222690728	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	7.0
Si	-287.8434795804	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.0
P	-339.4393318028	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	6.1
S	-396.0405198728	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.7
Cl	-457.7721910465	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	2.3
Ar	-524.7545016323	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.5

Table 617: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103887	219.0	219.0	219.0	1.0	19.0	3.0
He	-2.8183299118	227.0	227.0	227.0	1.0	19.0	3.5
Li	-7.3226778310	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	4.1
Be	-14.4840500990	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.0
B	-24.6283618012	250.0	250.0	250.0	1.0	19.0	3.6
C	-38.0332144634	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.5
N	-54.9427944841	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.2
O	-75.5765074513	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.0
F	-100.1344973224	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.7
Ne	-128.8014191156	272.0	272.0	272.0	1.0	19.0	3.3
Na	-161.7491475563	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.4
Mg	-199.1387963480	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.3
Al	-241.1222690728	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	3.5
Si	-287.8434795804	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.3
P	-339.4393318028	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.2
S	-396.0405198728	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.0
Cl	-457.7721910465	284.0	284.0	284.0	1.0	19.0	3.2
Ar	-524.7545018902	289.0	289.0	289.0	2.0	19.0	3.3

Table 618: trust region repeats

23.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666103886	1381.0	1381.0	1381.0	3.6	19.0	418.9
cch second order	-0.5666103276	330.0	116.0	116.0	nan	19.0	4.3
diff evo	-0.5666099073	24320.4	0.0	0.0	nan	19.0	129.3
direct	-0.5660501156	17287.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.7
direct with trim	-0.5666103579	17294.0	5.0	5.0	nan	19.0	82.5
dual anneal	-0.5666103579	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	177.7
trust region	-0.5666103579	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-0.5666103887	219.0	219.0	219.0	1.0	19.0	3.0

Table 619: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183302057	1390.4	1390.4	1390.4	1.4	19.0	424.1
cch second order	-2.8183299552	140.0	78.0	78.0	nan	19.0	3.3
diff evo	-2.8183287154	26527.8	0.0	0.0	nan	19.0	141.8
direct	-2.8125595410	16835.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.3
direct with trim	-2.8183299118	16843.0	6.0	6.0	nan	19.0	61.5
dual anneal	-2.8183299118	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	171.8
trust region	-2.8183299118	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-2.8183299118	227.0	227.0	227.0	1.0	19.0	3.5

Table 620: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3226787407	1374.6	1374.6	1374.6	1.2	19.0	383.4
cch second order	-7.3226778554	159.0	87.0	87.0	nan	19.0	3.3
diff evo	-7.3226730322	25545.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.9
direct	-7.2910974110	17705.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.3
direct with trim	-7.3226778310	17713.0	6.0	6.0	nan	19.0	81.0
dual anneal	-7.3226778310	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	178.3
trust region	-7.3226778310	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-7.3226778310	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	4.1

Table 621: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4840512681	1397.8	1397.8	1397.8	1.2	19.0	348.1
cch second order	-14.4840501072	151.0	83.0	83.0	nan	19.0	5.9
diff evo	-14.4840421937	29640.0	0.0	0.0	nan	19.0	158.1
direct	-14.4668999861	18693.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.7
direct with trim	-14.4840500990	18701.0	6.0	6.0	nan	19.0	76.2
dual anneal	-14.4840500990	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	181.0
trust region	-14.4840512681	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-14.4840500990	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.0

Table 622: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6283629916	1402.0	1402.0	1402.0	1.4	19.0	452.5
cch second order	-24.6283617882	178.0	96.0	96.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-24.6283407135	29343.6	0.0	0.0	nan	19.0	141.5
direct	-24.5926322468	17613.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.1
direct with trim	-24.6282954867	17621.0	6.0	6.0	nan	19.0	77.0
dual anneal	-24.6283618011	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	151.5
trust region	-24.6283618012	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-24.6283618012	250.0	250.0	250.0	1.0	19.0	3.6

Table 623: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332144634	1414.2	1414.2	1414.2	1.0	19.0	435.1
cch second order	-38.0332143888	208.0	113.0	113.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-38.0332034878	31863.0	0.0	0.0	nan	19.0	163.6
direct	-37.7911520850	17307.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9
direct with trim	-38.0332144634	17316.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.5
dual anneal	-38.0332144633	38017.0	15.0	15.0	1.0	19.0	150.2
trust region	-38.0332144634	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-38.0332144634	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.5

Table 624: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9427944841	1421.2	1421.2	1421.2	1.2	19.0	333.2
cch second order	-54.9427944839	155.0	88.0	88.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-54.9427609382	33532.2	0.0	0.0	nan	19.0	182.6
direct	-53.9176870591	17995.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.2
direct with trim	-54.9427944841	18009.0	12.0	12.0	nan	19.0	81.3
dual anneal	-54.9427944840	38020.6	18.6	18.6	1.0	19.0	170.1
trust region	-54.9427944841	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-54.9427944841	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.2

Table 625: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5765074513	1431.8	1431.8	1431.8	1.4	19.0	401.7
cch second order	-75.5765074325	147.0	83.0	83.0	nan	19.0	4.7
diff evo	-75.5764951617	37861.2	0.0	0.0	nan	19.0	186.3
direct	-75.2896126026	17583.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.6
direct with trim	-75.5765074513	17592.0	7.0	7.0	nan	19.0	71.7
dual anneal	-75.5765074510	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	160.5
trust region	-75.5765074513	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-75.5765074513	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.0

Table 626: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1344973224	1455.8	1455.8	1455.8	1.0	19.0	485.9
cch second order	-100.1344973426	155.0	84.0	84.0	nan	19.0	4.9
diff evo	-100.1344817920	33196.8	0.0	0.0	nan	19.0	150.7
direct	-99.9616291638	17831.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.1
direct with trim	-100.1344973224	17839.0	6.0	6.0	nan	19.0	80.4
dual anneal	-100.1344973221	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	182.4
trust region	-100.1344973224	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	5.8
trust region repeats	-100.1344973224	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.7

Table 627: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8014191156	1447.2	1447.2	1447.2	1.4	19.0	465.4
cch second order	-128.8014191663	169.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-128.8013702037	32175.0	0.0	0.0	nan	19.0	147.6
direct	-127.8798335067	17449.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.9
direct with trim	-128.8014191156	17460.0	9.0	9.0	nan	19.0	71.7
dual anneal	-128.8014191151	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	149.9
trust region	-128.8014191156	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	7.1
trust region repeats	-128.8014191156	272.0	272.0	272.0	1.0	19.0	3.3

Table 628: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7491475563	1476.2	1476.2	1476.2	1.2	19.0	359.1
cch second order	-161.7491455244	184.0	97.0	97.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-161.7490767704	34288.8	0.0	0.0	nan	19.0	163.5
direct	-160.7420904116	16145.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.7
direct with trim	-161.7491475563	16155.0	8.0	8.0	nan	19.0	68.1
dual anneal	-161.7491475556	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	158.3
trust region	-161.7491475563	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.7
trust region repeats	-161.7491475563	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.4

Table 629: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1387963480	1494.2	1494.2	1494.2	1.0	19.0	409.0
cch second order	-199.1387963302	238.0	106.0	106.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-199.1387582736	38352.6	0.0	0.0	nan	19.0	174.2
direct	-197.3760690328	17701.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.7
direct with trim	-199.1387963480	17710.0	7.0	7.0	nan	19.0	79.4
dual anneal	-199.1387963471	38033.0	31.0	31.0	1.0	19.0	179.9
trust region	-199.1387963480	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-199.1387963480	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.3

Table 630: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1222690728	1509.2	1509.2	1509.2	1.0	19.0	375.9
cch second order	-241.1222690019	199.0	105.0	105.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-241.1221832417	33040.8	0.0	0.0	nan	19.0	164.1
direct	-239.7627261304	18747.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.2
direct with trim	-241.1222690728	18756.0	7.0	7.0	nan	19.0	78.6
dual anneal	-241.1222690717	38021.6	19.6	19.6	1.0	19.0	150.6
trust region	-241.1222690728	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	7.0
trust region repeats	-241.1222690728	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	3.5

Table 631: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8434795804	1491.8	1491.8	1491.8	1.0	19.0	308.3
cch second order	-287.8434795271	176.0	98.0	98.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-287.8434140550	46597.2	0.0	0.0	nan	19.0	236.3
direct	-286.7412400752	17877.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.4
direct with trim	-287.8434795804	17888.0	9.0	9.0	nan	19.0	81.3
dual anneal	-287.8434795791	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	152.8
trust region	-287.8434795804	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-287.8434795804	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	3.3

Table 632: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4393318028	1536.0	1536.0	1536.0	1.0	19.0	428.6
cch second order	-339.4393317964	229.0	123.0	123.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-339.4392240648	39054.6	0.0	0.0	nan	19.0	196.8
direct	-335.2552998791	17517.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
direct with trim	-339.4393318028	17526.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.9
dual anneal	-339.4393318011	38025.2	23.2	23.2	1.0	19.0	166.6
trust region	-339.4393318028	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	6.1
trust region repeats	-339.4393318028	281.0	281.0	281.0	1.0	19.0	3.2

Table 633: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0405198728	1576.2	1576.2	1576.2	1.0	19.0	442.4
cch second order	-396.0405198546	175.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.5
diff evo	-396.0403368603	30349.8	0.0	0.0	nan	19.0	156.7
direct	-382.8035327804	19187.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
direct with trim	-396.0405198728	19206.0	17.0	17.0	nan	19.0	91.2
dual anneal	-396.0405198708	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	152.7
trust region	-396.0405198728	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-396.0405198728	276.0	276.0	276.0	1.0	19.0	3.0

Table 634: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7721910465	1619.6	1619.6	1619.6	1.2	19.0	457.3
cch second order	-457.7721910831	187.0	97.0	97.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-457.7720306974	34429.2	0.0	0.0	nan	19.0	150.9
direct	-454.9175402193	19049.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.3
direct with trim	-457.7721910465	19059.0	8.0	8.0	nan	19.0	80.6
dual anneal	-457.7721910441	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	162.2
trust region	-457.7721910465	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-457.7721910465	284.0	284.0	284.0	1.0	19.0	3.2

Table 635: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7545018902	1591.0	1591.0	1591.0	2.0	19.0	336.4
cch second order	-524.7545018403	142.0	81.0	81.0	nan	19.0	5.0
diff evo	-524.7543934907	35856.6	0.0	0.0	nan	19.0	155.5
direct	-517.7476901193	18595.0	0.0	0.0	nan	19.0	85.8
direct with trim	-524.7545018902	18613.0	16.0	16.0	nan	19.0	77.9
dual anneal	-524.7545018873	38027.4	25.4	25.4	1.0	19.0	184.1
trust region	-524.7545016323	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-524.7545018902	289.0	289.0	289.0	2.0	19.0	3.3

Table 636: Ar

23.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	trust region repeats	-0.5666103887
He	basin hopping	-2.8183302057
Li	basin hopping	-7.3226787407
Be	trust region	-14.4840512681
B	basin hopping	-24.6283629916
C	basin hopping	-38.0332144634
N	trust region	-54.9427944841
O	basin hopping	-75.5765074513
F	cch second order	-100.1344973426
Ne	cch second order	-128.8014191663
Na	basin hopping	-161.7491475563
Mg	trust region repeats	-199.1387963480
Al	basin hopping	-241.1222690728
Si	basin hopping	-287.8434795804
P	basin hopping	-339.4393318028
S	basin hopping	-396.0405198728
Cl	cch second order	-457.7721910831
Ar	basin hopping	-524.7545018902

Table 637: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.3	12.3	12.3	nan	-169.7315944955	4.1
cch second order	184.6	95.6	95.6	nan	-169.7315943225	4.6
trust region repeats	262.7	262.7	262.7	1.1	-169.7315944466	3.3
basin hopping	1467.2	1467.2	1467.2	1.3	-169.7315946445	403.6
direct	17839.8	0.0	0.0	nan	-167.7730745759	84.6
direct with trim	17850.1	8.3	8.3	nan	-169.7315907607	77.4
diff evo	33109.7	0.0	0.0	nan	-169.7315402000	161.7
dual anneal	38019.8	17.8	17.8	1.0	-169.7315944441	165.6

Table 638: Average (all systems)

24   19s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

24.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047266	907.0	907.0	0.0	nan	19.0	8.1
He	-1.4774416561	1047.0	1047.0	0.0	nan	19.0	5.2
Li	-4.1054087677	1065.0	1065.0	0.0	nan	19.0	3.2
Be	-8.4921589801	1057.0	1057.0	0.0	nan	19.0	5.4
B	-14.9258416380	1039.0	1039.0	0.0	nan	19.0	7.3
C	-23.6568149623	1024.0	1024.0	0.0	nan	19.0	5.5
N	-34.9083535316	1021.0	1021.0	0.0	nan	19.0	5.2
O	-48.8831195311	1024.0	1024.0	0.0	nan	19.0	5.6
F	-65.7674347714	1032.0	1032.0	0.0	nan	19.0	5.2
Ne	-85.7342760866	1041.0	1041.0	0.0	nan	19.0	5.3
Na	-108.9454704753	1047.0	1047.0	0.0	nan	19.0	5.5
Mg	-135.5533593715	1051.0	1051.0	0.0	nan	19.0	5.5
Al	-165.7020950130	1052.0	1052.0	0.0	nan	19.0	5.5
Si	-199.5286727914	1054.0	1054.0	0.0	nan	19.0	5.5
P	-237.1637686362	1053.0	1053.0	0.0	nan	19.0	5.5
S	-278.7324289394	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	5.2
Cl	-324.3546466614	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	5.5
Ar	-374.1458480325	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	7.5

Table 639: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047280	1495.6	1495.6	1495.6	1.0	19.0	364.3
He	-1.4774416751	1375.6	1375.6	1375.6	1.2	19.0	311.9
Li	-4.1054087874	1392.8	1392.8	1392.8	1.0	19.0	337.6
Be	-8.4921589964	1356.2	1356.2	1356.2	1.2	19.0	292.6
B	-14.9258416519	1367.0	1367.0	1367.0	1.4	19.0	339.5
C	-23.6568149746	1347.4	1347.4	1347.4	1.0	19.0	363.7
N	-34.9083535430	1359.8	1359.8	1359.8	1.0	19.0	342.8
O	-48.8831195421	1381.2	1381.2	1381.2	1.0	19.0	273.2
F	-65.7674347826	1380.2	1380.2	1380.2	1.0	19.0	299.2
Ne	-85.7342760983	1384.4	1384.4	1384.4	1.0	19.0	323.9
Na	-108.9454704883	1354.0	1354.0	1354.0	1.0	19.0	339.4
Mg	-135.5533593866	1370.8	1370.8	1370.8	1.0	19.0	293.2
Al	-165.7020950312	1365.4	1365.4	1365.4	1.2	19.0	352.7
Si	-199.5286728138	1422.4	1422.4	1422.4	1.0	19.0	259.0
P	-237.1637686644	1388.6	1388.6	1388.6	1.2	19.0	342.4
S	-278.7324289753	1376.6	1376.6	1376.6	1.0	19.0	324.4
Cl	-324.3546467073	1405.2	1405.2	1405.2	1.2	19.0	319.8
Ar	-374.1458480912	1435.6	1435.6	1435.6	1.2	19.0	349.2

Table 640: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047984	135.0	75.0	75.0	nan	19.0	4.8
He	-1.4774417821	184.0	102.0	102.0	nan	19.0	5.8
Li	-4.1054088769	161.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.2
Be	-8.4921591221	163.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.2
B	-14.9258415466	171.0	94.0	94.0	nan	19.0	5.6
C	-23.6568149767	154.0	87.0	87.0	nan	19.0	5.8
N	-34.9083535883	151.0	85.0	85.0	nan	19.0	3.3
O	-48.8831195350	153.0	88.0	88.0	nan	19.0	5.5
F	-65.7674346981	160.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.1
Ne	-85.7342760345	159.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.6
Na	-108.9454705910	183.0	99.0	99.0	nan	19.0	2.4
Mg	-135.5533594448	162.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.5
Al	-165.7020950773	165.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.6
Si	-199.5286729851	161.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.6
P	-237.1637687133	191.0	99.0	99.0	nan	19.0	5.8
S	-278.7324288986	178.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.6
Cl	-324.3546468510	181.0	101.0	101.0	nan	19.0	3.8
Ar	-374.1458479639	164.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.7

Table 641: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618044666	21161.4	0.0	0.0	nan	19.0	93.1
He	-1.4774409383	26637.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.8
Li	-4.1054078923	26356.2	0.0	0.0	nan	19.0	118.3
Be	-8.4921556592	23696.4	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
B	-14.9258351980	24655.8	0.0	0.0	nan	19.0	101.3
C	-23.6568082464	25116.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.7
N	-34.9083471927	24616.8	0.0	0.0	nan	19.0	130.9
O	-48.8830963423	24624.6	0.0	0.0	nan	19.0	105.9
F	-65.7674120934	23056.8	0.0	0.0	nan	19.0	94.4
Ne	-85.7342199168	26683.8	0.0	0.0	nan	19.0	120.5
Na	-108.9454308275	24016.2	0.0	0.0	nan	19.0	108.7
Mg	-135.5533347596	25482.6	0.0	0.0	nan	19.0	135.1
Al	-165.7020641543	24897.6	0.0	0.0	nan	19.0	109.4
Si	-199.5285885177	27237.6	0.0	0.0	nan	19.0	111.7
P	-237.1637169327	23376.6	0.0	0.0	nan	19.0	94.6
S	-278.7323445681	26426.4	0.0	0.0	nan	19.0	104.1
Cl	-324.3545683287	26442.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.4
Ar	-374.1457888929	26535.6	0.0	0.0	nan	19.0	126.2

Table 642: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618011029	14529.0	0.0	0.0	nan	19.0	70.4
He	-1.4773294262	19271.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
Li	-4.1019396753	15053.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.8
Be	-8.4639933736	16333.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.7
B	-14.9187331799	16425.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.5
C	-23.4900038104	16913.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.1
N	-34.8511640947	15493.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.4
O	-48.8223285057	17435.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.8
F	-65.3214705107	17065.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
Ne	-85.4482852605	16235.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.9
Na	-108.6298897475	16881.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.7
Mg	-135.2476346887	16131.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.6
Al	-165.4118372827	16023.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.3
Si	-197.6411072962	16141.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.3
P	-235.4480962216	17119.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.6
S	-277.2916709503	17455.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.5
Cl	-323.2079865029	17349.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.7
Ar	-373.0224568569	17481.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.7

Table 643: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047280	14535.0	4.0	4.0	nan	19.0	78.0
He	-1.4774416751	19278.0	5.0	5.0	nan	19.0	85.1
Li	-4.1054087874	15061.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.9
Be	-8.4921589964	16341.0	6.0	6.0	nan	19.0	89.3
B	-14.9258416519	16433.0	6.0	6.0	nan	19.0	68.0
C	-23.6568149746	16921.0	6.0	6.0	nan	19.0	89.7
N	-34.9083535430	15501.0	6.0	6.0	nan	19.0	77.5
O	-48.8831195421	17444.0	7.0	7.0	nan	19.0	82.7
F	-65.7674347826	17073.0	6.0	6.0	nan	19.0	88.1
Ne	-85.7342760983	16243.0	6.0	6.0	nan	19.0	86.3
Na	-108.9454704883	16889.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.1
Mg	-135.5533593866	16140.0	7.0	7.0	nan	19.0	76.8
Al	-165.7020950312	16031.0	6.0	6.0	nan	19.0	82.5
Si	-199.5286728138	16150.0	7.0	7.0	nan	19.0	86.2
P	-237.1637686644	17127.0	6.0	6.0	nan	19.0	97.9
S	-278.7324289753	17464.0	7.0	7.0	nan	19.0	76.7
Cl	-324.3546467073	17358.0	7.0	7.0	nan	19.0	97.6
Ar	-374.1458480912	17489.0	6.0	6.0	nan	19.0	84.5

Table 644: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047280	38008.8	6.8	6.8	1.0	19.0	187.7
He	-1.4774416751	38009.4	7.4	7.4	1.0	19.0	195.0
Li	-4.1054087874	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	205.7
Be	-8.4921589964	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	196.9
B	-14.9258416519	38011.2	9.2	9.2	1.0	19.0	203.5
C	-23.6568149746	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	216.1
N	-34.9083535430	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	201.9
O	-48.8831195421	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	218.0
F	-65.7674347825	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	203.2
Ne	-85.7342760983	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	167.4
Na	-108.9454704882	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	203.3
Mg	-135.5533593865	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	225.9
Al	-165.7020950310	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	200.9
Si	-199.5286728136	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	212.2
P	-237.1637686641	38015.2	13.2	13.2	1.0	19.0	198.2
S	-278.7324289749	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	204.6
Cl	-324.3546467069	38016.2	14.2	14.2	1.0	19.0	201.5
Ar	-374.1458480907	38017.2	15.2	15.2	1.0	19.0	174.4

Table 645: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047280	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.4
He	-1.4774416751	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	3.4
Li	-4.1054087874	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	1.5
Be	-8.4921589964	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
B	-14.9258416519	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
C	-23.6568149746	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
N	-34.9083535430	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
O	-48.8831195421	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
F	-65.7674347826	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4
Ne	-85.7342760983	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.4
Na	-108.9454704883	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
Mg	-135.5533593866	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.3
Al	-165.7020950312	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.2
Si	-199.5286728138	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.4
P	-237.1637686644	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.8
S	-278.7324289753	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.5
Cl	-324.3546467073	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.3
Ar	-374.1458480912	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.7

Table 646: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047280	200.0	200.0	200.0	1.0	19.0	3.6
He	-1.4774416751	213.0	213.0	213.0	1.0	19.0	3.3
Li	-4.1054087874	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.2
Be	-8.4921589964	224.0	224.0	224.0	1.0	19.0	3.2
B	-14.9258416519	235.0	235.0	235.0	1.0	19.0	3.0
C	-23.6568149746	236.0	236.0	236.0	1.0	19.0	3.3
N	-34.9083535430	239.0	239.0	239.0	2.0	19.0	3.2
O	-48.8831195421	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	3.0
F	-65.7674347826	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.6
Ne	-85.7342760983	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.1
Na	-108.9454704883	249.0	249.0	249.0	1.0	19.0	3.2
Mg	-135.5533593866	256.0	256.0	256.0	1.0	19.0	3.2
Al	-165.7020950312	258.0	258.0	258.0	1.0	19.0	3.1
Si	-199.5286728138	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.1
P	-237.1637686644	259.0	259.0	259.0	1.0	19.0	3.5
S	-278.7324289753	261.0	261.0	261.0	1.0	19.0	3.0
Cl	-324.3546467073	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.4
Ar	-374.1458480912	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.9

Table 647: trust region repeats

24.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618047266	907.0	907.0	0.0	nan	19.0	8.1
basin hopping	-0.2618047280	1495.6	1495.6	1495.6	1.0	19.0	364.3
cch second order	-0.2618047984	135.0	75.0	75.0	nan	19.0	4.8
diff evo	-0.2618044666	21161.4	0.0	0.0	nan	19.0	93.1
direct	-0.2618011029	14529.0	0.0	0.0	nan	19.0	70.4
direct with trim	-0.2618047280	14535.0	4.0	4.0	nan	19.0	78.0
dual anneal	-0.2618047280	38008.8	6.8	6.8	1.0	19.0	187.7
trust region	-0.2618047280	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-0.2618047280	200.0	200.0	200.0	1.0	19.0	3.6

Table 648: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774416561	1047.0	1047.0	0.0	nan	19.0	5.2
basin hopping	-1.4774416751	1375.6	1375.6	1375.6	1.2	19.0	311.9
cch second order	-1.4774417821	184.0	102.0	102.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-1.4774409383	26637.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.8
direct	-1.4773294262	19271.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
direct with trim	-1.4774416751	19278.0	5.0	5.0	nan	19.0	85.1
dual anneal	-1.4774416751	38009.4	7.4	7.4	1.0	19.0	195.0
trust region	-1.4774416751	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	3.4
trust region repeats	-1.4774416751	213.0	213.0	213.0	1.0	19.0	3.3

Table 649: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054087677	1065.0	1065.0	0.0	nan	19.0	3.2
basin hopping	-4.1054087874	1392.8	1392.8	1392.8	1.0	19.0	337.6
cch second order	-4.1054088769	161.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.2
diff evo	-4.1054078923	26356.2	0.0	0.0	nan	19.0	118.3
direct	-4.1019396753	15053.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.8
direct with trim	-4.1054087874	15061.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.9
dual anneal	-4.1054087874	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	205.7
trust region	-4.1054087874	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	1.5
trust region repeats	-4.1054087874	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.2

Table 650: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921589801	1057.0	1057.0	0.0	nan	19.0	5.4
basin hopping	-8.4921589964	1356.2	1356.2	1356.2	1.2	19.0	292.6
cch second order	-8.4921591221	163.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.2
diff evo	-8.4921556592	23696.4	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
direct	-8.4639933736	16333.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.7
direct with trim	-8.4921589964	16341.0	6.0	6.0	nan	19.0	89.3
dual anneal	-8.4921589964	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	196.9
trust region	-8.4921589964	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-8.4921589964	224.0	224.0	224.0	1.0	19.0	3.2

Table 651: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258416380	1039.0	1039.0	0.0	nan	19.0	7.3
basin hopping	-14.9258416519	1367.0	1367.0	1367.0	1.4	19.0	339.5
cch second order	-14.9258415466	171.0	94.0	94.0	nan	19.0	5.6
diff evo	-14.9258351980	24655.8	0.0	0.0	nan	19.0	101.3
direct	-14.9187331799	16425.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.5
direct with trim	-14.9258416519	16433.0	6.0	6.0	nan	19.0	68.0
dual anneal	-14.9258416519	38011.2	9.2	9.2	1.0	19.0	203.5
trust region	-14.9258416519	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-14.9258416519	235.0	235.0	235.0	1.0	19.0	3.0

Table 652: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568149623	1024.0	1024.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-23.6568149746	1347.4	1347.4	1347.4	1.0	19.0	363.7
cch second order	-23.6568149767	154.0	87.0	87.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-23.6568082464	25116.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.7
direct	-23.4900038104	16913.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.1
direct with trim	-23.6568149746	16921.0	6.0	6.0	nan	19.0	89.7
dual anneal	-23.6568149746	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	216.1
trust region	-23.6568149746	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-23.6568149746	236.0	236.0	236.0	1.0	19.0	3.3

Table 653: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9083535316	1021.0	1021.0	0.0	nan	19.0	5.2
basin hopping	-34.9083535430	1359.8	1359.8	1359.8	1.0	19.0	342.8
cch second order	-34.9083535883	151.0	85.0	85.0	nan	19.0	3.3
diff evo	-34.9083471927	24616.8	0.0	0.0	nan	19.0	130.9
direct	-34.8511640947	15493.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.4
direct with trim	-34.9083535430	15501.0	6.0	6.0	nan	19.0	77.5
dual anneal	-34.9083535430	38012.2	10.2	10.2	1.0	19.0	201.9
trust region	-34.9083535430	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-34.9083535430	239.0	239.0	239.0	2.0	19.0	3.2

Table 654: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8831195311	1024.0	1024.0	0.0	nan	19.0	5.6
basin hopping	-48.8831195421	1381.2	1381.2	1381.2	1.0	19.0	273.2
cch second order	-48.8831195350	153.0	88.0	88.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-48.8830963423	24624.6	0.0	0.0	nan	19.0	105.9
direct	-48.8223285057	17435.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.8
direct with trim	-48.8831195421	17444.0	7.0	7.0	nan	19.0	82.7
dual anneal	-48.8831195421	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	218.0
trust region	-48.8831195421	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-48.8831195421	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	3.0

Table 655: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7674347714	1032.0	1032.0	0.0	nan	19.0	5.2
basin hopping	-65.7674347826	1380.2	1380.2	1380.2	1.0	19.0	299.2
cch second order	-65.7674346981	160.0	91.0	91.0	nan	19.0	5.1
diff evo	-65.7674120934	23056.8	0.0	0.0	nan	19.0	94.4
direct	-65.3214705107	17065.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
direct with trim	-65.7674347826	17073.0	6.0	6.0	nan	19.0	88.1
dual anneal	-65.7674347825	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	203.2
trust region	-65.7674347826	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-65.7674347826	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.6

Table 656: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7342760866	1041.0	1041.0	0.0	nan	19.0	5.3
basin hopping	-85.7342760983	1384.4	1384.4	1384.4	1.0	19.0	323.9
cch second order	-85.7342760345	159.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-85.7342199168	26683.8	0.0	0.0	nan	19.0	120.5
direct	-85.4482852605	16235.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.9
direct with trim	-85.7342760983	16243.0	6.0	6.0	nan	19.0	86.3
dual anneal	-85.7342760983	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	167.4
trust region	-85.7342760983	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-85.7342760983	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.1

Table 657: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9454704753	1047.0	1047.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-108.9454704883	1354.0	1354.0	1354.0	1.0	19.0	339.4
cch second order	-108.9454705910	183.0	99.0	99.0	nan	19.0	2.4
diff evo	-108.9454308275	24016.2	0.0	0.0	nan	19.0	108.7
direct	-108.6298897475	16881.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.7
direct with trim	-108.9454704883	16889.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.1
dual anneal	-108.9454704882	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	203.3
trust region	-108.9454704883	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-108.9454704883	249.0	249.0	249.0	1.0	19.0	3.2

Table 658: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5533593715	1051.0	1051.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-135.5533593866	1370.8	1370.8	1370.8	1.0	19.0	293.2
cch second order	-135.5533594448	162.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.5
diff evo	-135.5533347596	25482.6	0.0	0.0	nan	19.0	135.1
direct	-135.2476346887	16131.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.6
direct with trim	-135.5533593866	16140.0	7.0	7.0	nan	19.0	76.8
dual anneal	-135.5533593865	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	225.9
trust region	-135.5533593866	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-135.5533593866	256.0	256.0	256.0	1.0	19.0	3.2

Table 659: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7020950130	1052.0	1052.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-165.7020950312	1365.4	1365.4	1365.4	1.2	19.0	352.7
cch second order	-165.7020950773	165.0	92.0	92.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-165.7020641543	24897.6	0.0	0.0	nan	19.0	109.4
direct	-165.4118372827	16023.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.3
direct with trim	-165.7020950312	16031.0	6.0	6.0	nan	19.0	82.5
dual anneal	-165.7020950310	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	200.9
trust region	-165.7020950312	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.2
trust region repeats	-165.7020950312	258.0	258.0	258.0	1.0	19.0	3.1

Table 660: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5286727914	1054.0	1054.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-199.5286728138	1422.4	1422.4	1422.4	1.0	19.0	259.0
cch second order	-199.5286729851	161.0	89.0	89.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-199.5285885177	27237.6	0.0	0.0	nan	19.0	111.7
direct	-197.6411072962	16141.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.3
direct with trim	-199.5286728138	16150.0	7.0	7.0	nan	19.0	86.2
dual anneal	-199.5286728136	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	212.2
trust region	-199.5286728138	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.4
trust region repeats	-199.5286728138	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.1

Table 661: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1637686362	1053.0	1053.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-237.1637686644	1388.6	1388.6	1388.6	1.2	19.0	342.4
cch second order	-237.1637687133	191.0	99.0	99.0	nan	19.0	5.8
diff evo	-237.1637169327	23376.6	0.0	0.0	nan	19.0	94.6
direct	-235.4480962216	17119.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.6
direct with trim	-237.1637686644	17127.0	6.0	6.0	nan	19.0	97.9
dual anneal	-237.1637686641	38015.2	13.2	13.2	1.0	19.0	198.2
trust region	-237.1637686644	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-237.1637686644	259.0	259.0	259.0	1.0	19.0	3.5

Table 662: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7324289394	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	5.2
basin hopping	-278.7324289753	1376.6	1376.6	1376.6	1.0	19.0	324.4
cch second order	-278.7324288986	178.0	100.0	100.0	nan	19.0	3.6
diff evo	-278.7323445681	26426.4	0.0	0.0	nan	19.0	104.1
direct	-277.2916709503	17455.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.5
direct with trim	-278.7324289753	17464.0	7.0	7.0	nan	19.0	76.7
dual anneal	-278.7324289749	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	204.6
trust region	-278.7324289753	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-278.7324289753	261.0	261.0	261.0	1.0	19.0	3.0

Table 663: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3546466614	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	5.5
basin hopping	-324.3546467073	1405.2	1405.2	1405.2	1.2	19.0	319.8
cch second order	-324.3546468510	181.0	101.0	101.0	nan	19.0	3.8
diff evo	-324.3545683287	26442.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.4
direct	-323.2079865029	17349.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.7
direct with trim	-324.3546467073	17358.0	7.0	7.0	nan	19.0	97.6
dual anneal	-324.3546467069	38016.2	14.2	14.2	1.0	19.0	201.5
trust region	-324.3546467073	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-324.3546467073	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.4

Table 664: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1458480325	1055.0	1055.0	0.0	nan	19.0	7.5
basin hopping	-374.1458480912	1435.6	1435.6	1435.6	1.2	19.0	349.2
cch second order	-374.1458479639	164.0	94.0	94.0	nan	19.0	3.7
diff evo	-374.1457888929	26535.6	0.0	0.0	nan	19.0	126.2
direct	-373.0224568569	17481.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.7
direct with trim	-374.1458480912	17489.0	6.0	6.0	nan	19.0	84.5
dual anneal	-374.1458480907	38017.2	15.2	15.2	1.0	19.0	174.4
trust region	-374.1458480912	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-374.1458480912	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.9

Table 665: Ar

24.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.2618047984
He	cch second order	-1.4774417821
Li	cch second order	-4.1054088769
Be	cch second order	-8.4921591221
B	basin hopping	-14.9258416519
C	cch second order	-23.6568149767
N	cch second order	-34.9083535883
O	trust region repeats	-48.8831195421
F	basin hopping	-65.7674347826
Ne	trust region	-85.7342760983
Na	cch second order	-108.9454705910
Mg	cch second order	-135.5533594448
Al	cch second order	-165.7020950773
Si	cch second order	-199.5286729851
P	cch second order	-237.1637687133
S	basin hopping	-278.7324289753
Cl	cch second order	-324.3546468510
Ar	trust region repeats	-374.1458480912

Table 666: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	10.0	10.0	10.0	nan	-117.3521636076	2.8
cch second order	165.3	92.2	92.2	nan	-117.3521636380	4.4
trust region repeats	242.3	242.3	242.3	1.1	-117.3521636076	3.3
acevedo	1037.7	1037.7	0.0	nan	-117.3521635873	5.6
basin hopping	1386.6	1386.6	1386.6	1.1	-117.3521636076	323.8
direct	16629.6	0.0	0.0	nan	-116.8365404715	83.4
direct with trim	16637.7	6.1	6.1	nan	-117.3521636076	85.0
diff evo	25056.6	0.0	0.0	nan	-117.3521313849	111.4
dual anneal	38013.2	11.2	11.2	1.0	-117.3521636075	200.9

Table 667: Average (all systems)

25   19s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

25.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 668: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262801	1499.0	1499.0	1499.0	1.6	19.0	411.2
He	-2.7236043085	1339.2	1339.2	1339.2	1.6	19.0	304.8
Li	-8.5257313634	1323.6	1323.6	1323.6	1.0	19.0	488.8
Be	-19.3526838691	1445.4	1445.4	1445.4	1.2	19.0	299.6
B	-36.7287605326	1323.8	1323.8	1323.8	1.0	19.0	416.9
C	-62.1689452917	1334.6	1334.6	1334.6	1.0	19.0	363.2
N	-97.1817946688	1335.0	1335.0	1335.0	1.2	19.0	412.3
O	-143.2712172866	1306.8	1306.8	1306.8	1.6	19.0	322.2
F	-201.9375500799	1399.6	1399.6	1399.6	1.8	19.0	454.9
Ne	-274.6782247059	1359.4	1359.4	1359.4	1.2	19.0	339.5
Na	-362.9882511586	1357.8	1357.8	1357.8	1.0	19.0	447.4
Mg	-468.3606196353	1375.8	1375.8	1375.8	1.0	19.0	319.8
Al	-592.2866288407	1409.8	1409.8	1409.8	1.0	19.0	509.7
Si	-736.2561340409	1413.6	1413.6	1413.6	1.4	19.0	450.3
P	-901.7577248822	1408.2	1408.2	1408.2	1.4	19.0	527.3
S	-1090.2788531919	1408.6	1408.6	1408.6	1.2	19.0	421.7
Cl	-1303.3059484684	1446.0	1446.0	1446.0	1.0	19.0	536.7
Ar	-1542.3245058521	1510.6	1510.6	1510.6	1.0	19.0	515.7

Table 669: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065263099	178.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.7
He	-2.7236041859	206.0	115.0	115.0	nan	19.0	6.5
Li	-8.5257311946	232.0	131.0	131.0	nan	19.0	3.9
Be	-19.3526837714	325.0	151.0	151.0	nan	19.0	4.5
B	-36.7287588800	314.0	171.0	171.0	nan	19.0	4.5
C	-62.1689439010	374.0	208.0	208.0	nan	19.0	7.3
N	-97.1817922226	427.0	238.0	238.0	nan	19.0	9.1
O	-143.2712192011	533.0	286.0	286.0	nan	19.0	6.2
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 670: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065260406	20779.2	0.0	0.0	nan	19.0	90.3
He	-2.7236035073	22659.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.3
Li	-8.5257298116	22565.4	0.0	0.0	nan	19.0	96.1
Be	-19.3526804831	20740.2	0.0	0.0	nan	19.0	90.0
B	-36.7287487105	23088.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.8
C	-62.1689274975	22370.4	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
N	-97.1817882738	24211.2	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
O	-143.2711784359	21886.8	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
F	-201.9374931965	21333.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.3
Ne	-274.6781500756	20014.8	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
Na	-362.9881888118	20724.6	0.0	0.0	nan	19.0	96.4
Mg	-468.3605550588	19094.4	0.0	0.0	nan	19.0	92.1
Al	-592.2865068204	20966.4	0.0	0.0	nan	19.0	89.7
Si	-736.2559205224	21964.8	0.0	0.0	nan	19.0	115.1
P	-901.7574280147	21590.4	0.0	0.0	nan	19.0	95.3
S	-1090.2787307824	25646.4	0.0	0.0	nan	19.0	108.3
Cl	-1303.3056882257	20833.8	0.0	0.0	nan	19.0	119.9
Ar	-1542.3242722963	22425.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.9

Table 671: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262710	7411.0	0.0	0.0	nan	19.0	34.6
He	-2.7234463505	13123.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.0
Li	-8.5251783968	14487.0	0.0	0.0	nan	19.0	72.1
Be	-19.3526749202	16647.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.5
B	-36.7255243507	16847.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.3
C	-62.1677753698	14039.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
N	-97.1478105432	14685.0	0.0	0.0	nan	19.0	74.0
O	-143.2705935491	19123.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
F	-201.9104449108	15463.0	0.0	0.0	nan	19.0	66.7
Ne	-274.6737287298	14859.0	0.0	0.0	nan	19.0	68.2
Na	-362.9784631176	18365.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.8
Mg	-468.2650893885	16441.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.4
Al	-592.0834129143	15755.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.9
Si	-736.2433133126	19063.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.1
P	-901.7314680470	14449.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.6
S	-1090.1417120804	15243.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.3
Cl	-1303.2679203369	13483.0	0.0	0.0	nan	19.0	58.8
Ar	-1542.3214508086	13357.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.5

Table 672: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262801	7417.0	4.0	4.0	nan	19.0	30.6
He	-2.7236043085	13130.0	5.0	5.0	nan	19.0	58.3
Li	-8.5257313634	14497.0	8.0	8.0	nan	19.0	64.2
Be	-19.3526838691	16657.0	8.0	8.0	nan	19.0	80.7
B	-36.7287605326	16854.0	5.0	5.0	nan	19.0	70.9
C	-62.1689452917	14046.0	5.0	5.0	nan	19.0	52.9
N	-97.1817946688	14693.0	6.0	6.0	nan	19.0	66.3
O	-143.2712166825	19130.0	5.0	5.0	nan	19.0	86.3
F	-201.9375496994	15471.0	6.0	6.0	nan	19.0	65.3
Ne	-274.6782247059	14871.0	10.0	10.0	nan	19.0	63.9
Na	-362.9882511586	18372.0	5.0	5.0	nan	19.0	84.5
Mg	-468.3606196353	16449.0	6.0	6.0	nan	19.0	79.1
Al	-592.2866288407	15763.0	6.0	6.0	nan	19.0	72.3
Si	-736.2561332126	19070.0	5.0	5.0	nan	19.0	93.7
P	-901.7577220421	14457.0	6.0	6.0	nan	19.0	72.2
S	-1090.2788511706	15251.0	6.0	6.0	nan	19.0	64.6
Cl	-1303.3059474345	13491.0	6.0	6.0	nan	19.0	63.4
Ar	-1542.3245058521	13364.0	5.0	5.0	nan	19.0	56.5

Table 673: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262801	38009.6	7.6	7.6	1.0	19.0	201.4
He	-2.7236043085	38009.0	7.0	7.0	1.0	19.0	193.1
Li	-8.5257313634	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	186.3
Be	-19.3526838689	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	184.6
B	-36.7287605320	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	173.4
C	-62.1689452901	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	193.5
N	-97.1817946648	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	190.5
O	-143.2712166740	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	185.4
F	-201.9375500635	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	183.7
Ne	-274.6782246761	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	197.5
Na	-362.9882511075	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	183.3
Mg	-468.3606195514	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	189.4
Al	-592.2866287083	38021.8	19.8	19.8	1.0	19.0	182.2
Si	-736.2561330103	38023.0	21.0	21.0	1.0	19.0	172.3
P	-901.7577217416	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	169.3
S	-1090.2788507355	38028.2	26.2	26.2	1.0	19.0	204.2
Cl	-1303.3059478518	38029.2	27.2	27.2	1.0	19.0	176.2
Ar	-1542.3245049953	38029.8	27.8	27.8	1.0	19.0	208.5

Table 674: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262801	7.0	7.0	7.0	nan	19.0	3.6
He	-2.7236043085	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
Li	-8.5257313634	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.7
Be	-19.3526838691	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.3
B	-36.7287605326	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.3
C	-62.1689452917	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
N	-97.1817946688	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	5.1
O	-143.2712166824	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	11.1
F	-201.9375496994	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.5
Ne	-274.6782247059	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	9.9
Na	-362.9882511586	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	7.1
Mg	-468.3606196353	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.5
Al	-592.2866288407	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.8
Si	-736.2561332126	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	9.0
P	-901.7577220421	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	2.5
S	-1090.2788511706	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	8.4
Cl	-1303.3059484684	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	4.2
Ar	-1542.3245058521	26.0	26.0	26.0	nan	19.0	5.8

Table 675: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262801	142.0	142.0	142.0	1.0	19.0	3.1
He	-2.7236043085	179.0	179.0	179.0	1.0	19.0	4.3
Li	-8.5257313634	192.0	192.0	192.0	1.0	19.0	3.4
Be	-19.3526838691	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	3.6
B	-36.7287605326	198.0	198.0	198.0	2.0	19.0	3.6
C	-62.1689452917	204.0	204.0	204.0	1.0	19.0	3.8
N	-97.1817946688	223.0	223.0	223.0	2.0	19.0	3.7
O	-143.2712172866	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	5.7
F	-201.9375500799	280.0	280.0	280.0	2.0	19.0	5.0
Ne	-274.6782247059	294.0	294.0	294.0	1.0	19.0	4.7
Na	-362.9882511586	336.0	336.0	336.0	1.0	19.0	6.4
Mg	-468.3606196353	357.0	357.0	357.0	1.0	19.0	5.3
Al	-592.2866288407	383.0	383.0	383.0	1.0	19.0	6.5
Si	-736.2561332126	407.0	407.0	407.0	1.0	19.0	7.3
P	-901.7577220421	448.0	448.0	448.0	1.0	19.0	7.8
S	-1090.2788511706	466.0	466.0	466.0	1.0	19.0	8.1
Cl	-1303.3059484684	507.0	507.0	507.0	1.0	19.0	8.4
Ar	-1542.3245058521	573.0	573.0	573.0	1.0	19.0	9.1

Table 676: trust region repeats

25.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065262801	1499.0	1499.0	1499.0	1.6	19.0	411.2
cch second order	-0.4065263099	178.0	100.0	100.0	nan	19.0	5.7
diff evo	-0.4065260406	20779.2	0.0	0.0	nan	19.0	90.3
direct	-0.4065262710	7411.0	0.0	0.0	nan	19.0	34.6
direct with trim	-0.4065262801	7417.0	4.0	4.0	nan	19.0	30.6
dual anneal	-0.4065262801	38009.6	7.6	7.6	1.0	19.0	201.4
trust region	-0.4065262801	7.0	7.0	7.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-0.4065262801	142.0	142.0	142.0	1.0	19.0	3.1

Table 677: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236043085	1339.2	1339.2	1339.2	1.6	19.0	304.8
cch second order	-2.7236041859	206.0	115.0	115.0	nan	19.0	6.5
diff evo	-2.7236035073	22659.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.3
direct	-2.7234463505	13123.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.0
direct with trim	-2.7236043085	13130.0	5.0	5.0	nan	19.0	58.3
dual anneal	-2.7236043085	38009.0	7.0	7.0	1.0	19.0	193.1
trust region	-2.7236043085	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-2.7236043085	179.0	179.0	179.0	1.0	19.0	4.3

Table 678: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5257313634	1323.6	1323.6	1323.6	1.0	19.0	488.8
cch second order	-8.5257311946	232.0	131.0	131.0	nan	19.0	3.9
diff evo	-8.5257298116	22565.4	0.0	0.0	nan	19.0	96.1
direct	-8.5251783968	14487.0	0.0	0.0	nan	19.0	72.1
direct with trim	-8.5257313634	14497.0	8.0	8.0	nan	19.0	64.2
dual anneal	-8.5257313634	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	186.3
trust region	-8.5257313634	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	2.7
trust region repeats	-8.5257313634	192.0	192.0	192.0	1.0	19.0	3.4

Table 679: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3526838691	1445.4	1445.4	1445.4	1.2	19.0	299.6
cch second order	-19.3526837714	325.0	151.0	151.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-19.3526804831	20740.2	0.0	0.0	nan	19.0	90.0
direct	-19.3526749202	16647.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.5
direct with trim	-19.3526838691	16657.0	8.0	8.0	nan	19.0	80.7
dual anneal	-19.3526838689	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	184.6
trust region	-19.3526838691	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.3
trust region repeats	-19.3526838691	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	3.6

Table 680: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7287605326	1323.8	1323.8	1323.8	1.0	19.0	416.9
cch second order	-36.7287588800	314.0	171.0	171.0	nan	19.0	4.5
diff evo	-36.7287487105	23088.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.8
direct	-36.7255243507	16847.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.3
direct with trim	-36.7287605326	16854.0	5.0	5.0	nan	19.0	70.9
dual anneal	-36.7287605320	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	173.4
trust region	-36.7287605326	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.3
trust region repeats	-36.7287605326	198.0	198.0	198.0	2.0	19.0	3.6

Table 681: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1689452917	1334.6	1334.6	1334.6	1.0	19.0	363.2
cch second order	-62.1689439010	374.0	208.0	208.0	nan	19.0	7.3
diff evo	-62.1689274975	22370.4	0.0	0.0	nan	19.0	101.5
direct	-62.1677753698	14039.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
direct with trim	-62.1689452917	14046.0	5.0	5.0	nan	19.0	52.9
dual anneal	-62.1689452901	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	193.5
trust region	-62.1689452917	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-62.1689452917	204.0	204.0	204.0	1.0	19.0	3.8

Table 682: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1817946688	1335.0	1335.0	1335.0	1.2	19.0	412.3
cch second order	-97.1817922226	427.0	238.0	238.0	nan	19.0	9.1
diff evo	-97.1817882738	24211.2	0.0	0.0	nan	19.0	103.4
direct	-97.1478105432	14685.0	0.0	0.0	nan	19.0	74.0
direct with trim	-97.1817946688	14693.0	6.0	6.0	nan	19.0	66.3
dual anneal	-97.1817946648	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	190.5
trust region	-97.1817946688	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	5.1
trust region repeats	-97.1817946688	223.0	223.0	223.0	2.0	19.0	3.7

Table 683: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2712172866	1306.8	1306.8	1306.8	1.6	19.0	322.2
cch second order	-143.2712192011	533.0	286.0	286.0	nan	19.0	6.2
diff evo	-143.2711784359	21886.8	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
direct	-143.2705935491	19123.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
direct with trim	-143.2712166825	19130.0	5.0	5.0	nan	19.0	86.3
dual anneal	-143.2712166740	38014.8	12.8	12.8	1.0	19.0	185.4
trust region	-143.2712166824	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	11.1
trust region repeats	-143.2712172866	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	5.7

Table 684: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9375500799	1399.6	1399.6	1399.6	1.8	19.0	454.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-201.9374931965	21333.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.3
direct	-201.9104449108	15463.0	0.0	0.0	nan	19.0	66.7
direct with trim	-201.9375496994	15471.0	6.0	6.0	nan	19.0	65.3
dual anneal	-201.9375500635	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	183.7
trust region	-201.9375496994	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	2.5
trust region repeats	-201.9375500799	280.0	280.0	280.0	2.0	19.0	5.0

Table 685: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6782247059	1359.4	1359.4	1359.4	1.2	19.0	339.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-274.6781500756	20014.8	0.0	0.0	nan	19.0	101.0
direct	-274.6737287298	14859.0	0.0	0.0	nan	19.0	68.2
direct with trim	-274.6782247059	14871.0	10.0	10.0	nan	19.0	63.9
dual anneal	-274.6782246761	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	197.5
trust region	-274.6782247059	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	9.9
trust region repeats	-274.6782247059	294.0	294.0	294.0	1.0	19.0	4.7

Table 686: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9882511586	1357.8	1357.8	1357.8	1.0	19.0	447.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-362.9881888118	20724.6	0.0	0.0	nan	19.0	96.4
direct	-362.9784631176	18365.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.8
direct with trim	-362.9882511586	18372.0	5.0	5.0	nan	19.0	84.5
dual anneal	-362.9882511075	38018.8	16.8	16.8	1.0	19.0	183.3
trust region	-362.9882511586	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	7.1
trust region repeats	-362.9882511586	336.0	336.0	336.0	1.0	19.0	6.4

Table 687: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3606196353	1375.8	1375.8	1375.8	1.0	19.0	319.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-468.3605550588	19094.4	0.0	0.0	nan	19.0	92.1
direct	-468.2650893885	16441.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.4
direct with trim	-468.3606196353	16449.0	6.0	6.0	nan	19.0	79.1
dual anneal	-468.3606195514	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	189.4
trust region	-468.3606196353	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	2.5
trust region repeats	-468.3606196353	357.0	357.0	357.0	1.0	19.0	5.3

Table 688: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2866288407	1409.8	1409.8	1409.8	1.0	19.0	509.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-592.2865068204	20966.4	0.0	0.0	nan	19.0	89.7
direct	-592.0834129143	15755.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.9
direct with trim	-592.2866288407	15763.0	6.0	6.0	nan	19.0	72.3
dual anneal	-592.2866287083	38021.8	19.8	19.8	1.0	19.0	182.2
trust region	-592.2866288407	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.8
trust region repeats	-592.2866288407	383.0	383.0	383.0	1.0	19.0	6.5

Table 689: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2561340409	1413.6	1413.6	1413.6	1.4	19.0	450.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-736.2559205224	21964.8	0.0	0.0	nan	19.0	115.1
direct	-736.2433133126	19063.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.1
direct with trim	-736.2561332126	19070.0	5.0	5.0	nan	19.0	93.7
dual anneal	-736.2561330103	38023.0	21.0	21.0	1.0	19.0	172.3
trust region	-736.2561332126	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	9.0
trust region repeats	-736.2561332126	407.0	407.0	407.0	1.0	19.0	7.3

Table 690: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7577248822	1408.2	1408.2	1408.2	1.4	19.0	527.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-901.7574280147	21590.4	0.0	0.0	nan	19.0	95.3
direct	-901.7314680470	14449.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.6
direct with trim	-901.7577220421	14457.0	6.0	6.0	nan	19.0	72.2
dual anneal	-901.7577217416	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	169.3
trust region	-901.7577220421	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	2.5
trust region repeats	-901.7577220421	448.0	448.0	448.0	1.0	19.0	7.8

Table 691: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2788531919	1408.6	1408.6	1408.6	1.2	19.0	421.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1090.2787307824	25646.4	0.0	0.0	nan	19.0	108.3
direct	-1090.1417120804	15243.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.3
direct with trim	-1090.2788511706	15251.0	6.0	6.0	nan	19.0	64.6
dual anneal	-1090.2788507355	38028.2	26.2	26.2	1.0	19.0	204.2
trust region	-1090.2788511706	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	8.4
trust region repeats	-1090.2788511706	466.0	466.0	466.0	1.0	19.0	8.1

Table 692: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3059484684	1446.0	1446.0	1446.0	1.0	19.0	536.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1303.3056882257	20833.8	0.0	0.0	nan	19.0	119.9
direct	-1303.2679203369	13483.0	0.0	0.0	nan	19.0	58.8
direct with trim	-1303.3059474345	13491.0	6.0	6.0	nan	19.0	63.4
dual anneal	-1303.3059478518	38029.2	27.2	27.2	1.0	19.0	176.2
trust region	-1303.3059484684	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-1303.3059484684	507.0	507.0	507.0	1.0	19.0	8.4

Table 693: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3245058521	1510.6	1510.6	1510.6	1.0	19.0	515.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1542.3242722963	22425.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.9
direct	-1542.3214508086	13357.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.5
direct with trim	-1542.3245058521	13364.0	5.0	5.0	nan	19.0	56.5
dual anneal	-1542.3245049953	38029.8	27.8	27.8	1.0	19.0	208.5
trust region	-1542.3245058521	26.0	26.0	26.0	nan	19.0	5.8
trust region repeats	-1542.3245058521	573.0	573.0	573.0	1.0	19.0	9.1

Table 694: Ar

25.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.4065263099
He	basin hopping	-2.7236043085
Li	basin hopping	-8.5257313634
Be	basin hopping	-19.3526838691
B	basin hopping	-36.7287605326
C	basin hopping	-62.1689452917
N	basin hopping	-97.1817946688
O	cch second order	-143.2712192011
F	basin hopping	-201.9375500799
Ne	basin hopping	-274.6782247059
Na	trust region repeats	-362.9882511586
Mg	trust region repeats	-468.3606196353
Al	basin hopping	-592.2866288407
Si	basin hopping	-736.2561340409
P	basin hopping	-901.7577248822
S	basin hopping	-1090.2788531919
Cl	basin hopping	-1303.3059484684
Ar	trust region repeats	-1542.3245058521

Table 695: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	14.9	14.9	14.9	nan	-435.8074276546	5.1
trust region repeats	315.9	315.9	315.9	1.2	-435.8074277093	5.5
cch second order	323.6	175.0	175.0	nan	-46.2949074583	6.0
basin hopping	1388.7	1388.7	1388.7	1.2	-435.8074280254	419.0
direct	15157.8	0.0	0.0	nan	-435.7742518554	70.3
direct with trim	15165.7	5.9	5.9	nan	-435.8074275971	68.1
diff evo	21827.4	0.0	0.0	nan	-435.8073398092	101.6
dual anneal	38018.5	16.5	16.5	1.0	-435.8074275235	187.5

Table 696: Average (all systems)

26   20s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

26.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 697: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7099861072	7880.2	7880.2	7880.2	19.5	20.0	2412.0
He	-3.3725464243	4969.4	4969.4	4969.4	17.6	20.0	1174.8
Li	-8.6468908491	4841.0	4841.0	4841.0	14.4	20.0	966.2
Be	-16.9531424726	4238.8	4238.8	4238.8	6.4	20.0	774.6
B	-27.9850282682	5282.8	5282.8	5282.8	6.8	20.0	1070.0
C	-43.1532635433	4050.2	4050.2	4050.2	1.4	20.0	754.0
N	-60.9842337605	3756.4	3756.4	3756.4	1.2	20.0	783.2
O	-84.9956935776	3830.0	3830.0	3830.0	1.0	20.0	806.1
F	-111.0744335520	3348.0	3348.0	3348.0	1.0	20.0	633.3
Ne	-141.8263127050	3116.4	3116.4	3116.4	1.0	20.0	731.0
Na	-177.3925361984	2979.2	2979.2	2979.2	1.0	20.0	576.1
Mg	-218.7033545084	3064.4	3064.4	3064.4	1.0	20.0	555.1
Al	-254.0208209594	2493.4	2493.4	2493.4	1.0	20.0	501.4
Si	-290.5701074260	2890.6	2890.6	2890.6	1.0	20.0	542.0
P	-370.1113048625	2437.6	2437.6	2437.6	1.0	20.0	513.2
S	-429.7426623833	2260.4	2260.4	2260.4	1.2	20.0	442.9
Cl	-502.9532671262	2186.0	2186.0	2186.0	1.0	20.0	475.7
Ar	-562.6236866300	2256.8	2256.8	2256.8	1.2	20.0	472.2

Table 698: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6594928546	262.0	128.0	128.0	nan	20.0	4.6
He	-1.4650051829	306.0	172.0	172.0	nan	20.0	5.0
Li	-6.2027585496	350.0	190.0	190.0	nan	20.0	9.1
Be	-13.0714167069	427.0	225.0	225.0	nan	20.0	6.2
B	-27.7204422088	327.0	163.0	163.0	nan	20.0	5.0
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-53.4221025601	503.0	281.0	281.0	nan	20.0	7.2
O	-78.8794501224	313.0	156.0	156.0	nan	20.0	7.1
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-215.9024912537	341.0	170.0	170.0	nan	20.0	8.0
Al	-246.1312549560	398.0	199.0	199.0	nan	20.0	8.3
Si	-305.3997021378	399.0	198.0	198.0	nan	20.0	7.9
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	-429.5417668996	306.0	151.0	151.0	nan	20.0	4.8
Cl	-459.4890238781	271.0	136.0	136.0	nan	20.0	7.8
Ar	-546.6905316824	347.0	170.0	170.0	nan	20.0	7.5

Table 699: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7406019294	499257.0	0.0	0.0	nan	20.0	2944.2
He	-3.4786508169	285715.3	0.0	0.0	nan	20.0	1866.0
Li	-8.7941093739	236865.2	0.0	0.0	nan	20.0	1601.1
Be	-17.1184844353	234118.2	0.0	0.0	nan	20.0	1280.1
B	-28.7385674227	217209.8	0.0	0.0	nan	20.0	1420.3
C	-43.9289507358	167837.6	0.0	0.0	nan	20.0	969.4
N	-63.0490110492	178702.6	0.0	0.0	nan	20.0	1160.3
O	-86.0618132213	138711.2	0.0	0.0	nan	20.0	952.0
F	-113.5727825330	153479.4	0.0	0.0	nan	20.0	992.7
Ne	-145.1454164852	121712.6	0.0	0.0	nan	20.0	826.8
Na	-181.8533236252	98022.8	0.0	0.0	nan	20.0	644.2
Mg	-222.7822764920	85796.6	0.0	0.0	nan	20.0	555.9
Al	-269.2651904602	112905.8	0.0	0.0	nan	20.0	717.4
Si	-320.5874095516	85444.0	0.0	0.0	nan	20.0	597.9
P	-377.1543233221	109724.2	0.0	0.0	nan	20.0	736.0
S	-439.0807367648	72643.8	0.0	0.0	nan	20.0	478.5
Cl	-504.9951987754	90880.6	0.0	0.0	nan	20.0	539.1
Ar	-579.5022291753	89872.0	0.0	0.0	nan	20.0	611.5

Table 700: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7009720396	20027.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.1
He	-3.3067677492	20053.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.0
Li	-8.5095967285	20121.0	0.0	0.0	nan	20.0	102.1
Be	-16.7375313655	20123.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.0
B	-27.1443990271	20103.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.4
C	-42.2401534316	20057.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.2
N	-60.0329794910	20025.0	0.0	0.0	nan	20.0	110.8
O	-81.9193671597	20139.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.0
F	-106.4518476608	19659.0	0.0	0.0	nan	20.0	103.4
Ne	-141.8945044754	20029.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.0
Na	-174.4119932853	20041.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.2
Mg	-215.9618497364	20143.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3
Al	-260.9251211102	20065.0	0.0	0.0	nan	20.0	85.1
Si	-307.9280511142	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.0
P	-344.1270076855	19937.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.6
S	-401.1892051006	20071.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.6
Cl	-450.9003614861	20165.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.7
Ar	-561.6493581503	20077.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3

Table 701: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7211552815	20295.0	266.0	266.0	nan	20.0	165.6
He	-3.0048873400	20297.0	242.0	242.0	nan	20.0	188.1
Li	-8.4480201659	20246.6	123.6	123.6	nan	20.0	116.7
Be	-16.2544267122	20236.8	111.8	111.8	nan	20.0	141.0
B	-27.0625087031	20226.6	121.6	121.6	nan	20.0	139.6
C	-41.8328763644	20181.4	122.4	122.4	nan	20.0	116.4
N	-60.5928985943	20144.0	117.0	117.0	nan	20.0	142.8
O	-82.2681749954	20216.0	75.0	75.0	nan	20.0	136.1
F	-110.1589956521	19783.2	122.2	122.2	nan	20.0	159.0
Ne	-141.8263127050	20123.6	92.6	92.6	nan	20.0	122.1
Na	-170.9002993550	20185.4	142.4	142.4	nan	20.0	148.3
Mg	-217.8948567849	20159.0	14.0	14.0	nan	20.0	115.7
Al	-251.8312089554	20152.6	85.6	85.6	nan	20.0	120.2
Si	-315.1467719493	20179.8	58.8	58.8	nan	20.0	118.1
P	-330.8877985642	20007.2	68.2	68.2	nan	20.0	135.9
S	-402.9891509436	20098.0	25.0	25.0	nan	20.0	120.1
Cl	-446.7730526596	20249.2	82.2	82.2	nan	20.0	143.8
Ar	-541.9562769167	20174.4	95.4	95.4	nan	20.0	149.5

Table 702: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-3.4128153845	41017.4	1015.4	1015.4	6.6	20.0	418.8
Li	-8.6728413821	40391.2	389.2	389.2	3.0	20.0	287.9
Be	-16.9738703246	40846.8	844.8	844.8	7.4	20.0	520.3
B	-28.6991888825	40169.6	167.6	167.6	2.2	20.0	279.8
C	-43.8849896151	40274.0	272.0	272.0	2.6	20.0	312.9
N	-62.2522764625	42316.0	2314.0	2314.0	25.6	20.0	801.5
O	-85.7335712197	40639.0	637.0	637.0	5.6	20.0	361.9
F	-111.7338575648	40573.8	571.8	571.8	6.0	20.0	365.4
Ne	-144.6527841805	40282.0	280.0	280.0	4.2	20.0	250.1
Na	-178.3710318535	40219.0	217.0	217.0	2.6	20.0	267.7
Mg	-219.6741228021	40240.4	238.4	238.4	3.2	20.0	292.8
Al	-266.6933799619	41426.8	1424.8	1424.8	19.4	20.0	613.2
Si	-317.7645922098	40132.0	130.0	130.0	2.2	20.0	261.9
P	-373.4355967065	40254.6	252.6	252.6	2.8	20.0	258.9
S	-435.0207416421	40202.4	200.4	200.4	3.2	20.0	273.2
Cl	-493.4928392121	42620.0	2618.0	2618.0	47.4	20.0	646.8
Ar	-578.0487971584	41593.0	1591.0	1591.0	32.0	20.0	411.3

Table 703: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6955773824	99.0	99.0	99.0	nan	20.0	31.6
He	-3.1839809753	335.0	335.0	335.0	nan	20.0	71.4
Li	-8.1992657745	34.0	34.0	34.0	nan	20.0	8.4
Be	-15.7059627559	78.0	78.0	78.0	nan	20.0	11.8
B	-26.6005378489	92.0	92.0	92.0	nan	20.0	44.0
C	-37.9277798545	502.0	502.0	502.0	nan	20.0	159.1
N	-58.4884908960	145.0	145.0	145.0	nan	20.0	30.5
O	-76.6267835143	177.0	177.0	177.0	nan	20.0	25.8
F	-105.6173892845	119.0	119.0	119.0	nan	20.0	30.1
Ne	-142.0713292197	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	7.8
Na	-165.4437433536	48.0	48.0	48.0	nan	20.0	9.9
Mg	-213.2050322952	280.0	280.0	280.0	nan	20.0	92.3
Al	-246.7776811982	120.0	120.0	120.0	nan	20.0	60.6
Si	-317.4543565045	43.0	43.0	43.0	nan	20.0	10.9
P	-324.3037667876	46.0	46.0	46.0	nan	20.0	7.4
S	-419.1076841921	40.0	40.0	40.0	nan	20.0	11.1
Cl	-473.4985762022	35.0	35.0	35.0	nan	20.0	5.9
Ar	-548.5041270615	57.0	57.0	57.0	nan	20.0	14.8

Table 704: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7201668867	5299.0	5299.0	5299.0	19.0	20.0	83.7
He	-3.4449708931	4046.0	4046.0	4046.0	20.0	20.0	46.4
Li	-8.6071449600	2823.0	2823.0	2823.0	20.0	20.0	37.6
Be	-16.5435342371	2343.0	2343.0	2343.0	20.0	20.0	31.3
B	-27.9850282682	1927.0	1927.0	1927.0	20.0	20.0	27.2
C	-43.1286535341	3352.0	3352.0	3352.0	20.0	20.0	50.1
N	-61.6514961258	2614.0	2614.0	2614.0	19.0	20.0	37.3
O	-85.0741396313	1711.0	1711.0	1711.0	20.0	20.0	23.0
F	-112.2663492947	1913.0	1913.0	1913.0	20.0	20.0	25.6
Ne	-143.5577385626	1421.0	1421.0	1421.0	20.0	20.0	17.3
Na	-179.3842880855	1820.0	1820.0	1820.0	20.0	20.0	21.0
Mg	-220.7083494755	1651.0	1651.0	1651.0	18.0	20.0	20.2
Al	-265.5859278020	1348.0	1348.0	1348.0	20.0	20.0	17.4
Si	-319.8339814826	1890.0	1890.0	1890.0	19.0	20.0	22.5
P	-374.5760128130	1267.0	1267.0	1267.0	20.0	20.0	16.6
S	-436.9069761313	1853.0	1853.0	1853.0	20.0	20.0	23.3
Cl	-501.3666935427	1101.0	1101.0	1101.0	17.0	20.0	13.3
Ar	-576.5650299956	1121.0	1121.0	1121.0	19.0	20.0	14.4

Table 705: trust region repeats

26.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.7099861072	7880.2	7880.2	7880.2	19.5	20.0	2412.0
cch second order	-0.6594928546	262.0	128.0	128.0	nan	20.0	4.6
diff evo	-0.7406019294	499257.0	0.0	0.0	nan	20.0	2944.2
direct	-0.7009720396	20027.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.1
direct with trim	-0.7211552815	20295.0	266.0	266.0	nan	20.0	165.6
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-0.6955773824	99.0	99.0	99.0	nan	20.0	31.6
trust region repeats	-0.7201668867	5299.0	5299.0	5299.0	19.0	20.0	83.7

Table 706: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.3725464243	4969.4	4969.4	4969.4	17.6	20.0	1174.8
cch second order	-1.4650051829	306.0	172.0	172.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-3.4786508169	285715.3	0.0	0.0	nan	20.0	1866.0
direct	-3.3067677492	20053.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.0
direct with trim	-3.0048873400	20297.0	242.0	242.0	nan	20.0	188.1
dual anneal	-3.4128153845	41017.4	1015.4	1015.4	6.6	20.0	418.8
trust region	-3.1839809753	335.0	335.0	335.0	nan	20.0	71.4
trust region repeats	-3.4449708931	4046.0	4046.0	4046.0	20.0	20.0	46.4

Table 707: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.6468908491	4841.0	4841.0	4841.0	14.4	20.0	966.2
cch second order	-6.2027585496	350.0	190.0	190.0	nan	20.0	9.1
diff evo	-8.7941093739	236865.2	0.0	0.0	nan	20.0	1601.1
direct	-8.5095967285	20121.0	0.0	0.0	nan	20.0	102.1
direct with trim	-8.4480201659	20246.6	123.6	123.6	nan	20.0	116.7
dual anneal	-8.6728413821	40391.2	389.2	389.2	3.0	20.0	287.9
trust region	-8.1992657745	34.0	34.0	34.0	nan	20.0	8.4
trust region repeats	-8.6071449600	2823.0	2823.0	2823.0	20.0	20.0	37.6

Table 708: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.9531424726	4238.8	4238.8	4238.8	6.4	20.0	774.6
cch second order	-13.0714167069	427.0	225.0	225.0	nan	20.0	6.2
diff evo	-17.1184844353	234118.2	0.0	0.0	nan	20.0	1280.1
direct	-16.7375313655	20123.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.0
direct with trim	-16.2544267122	20236.8	111.8	111.8	nan	20.0	141.0
dual anneal	-16.9738703246	40846.8	844.8	844.8	7.4	20.0	520.3
trust region	-15.7059627559	78.0	78.0	78.0	nan	20.0	11.8
trust region repeats	-16.5435342371	2343.0	2343.0	2343.0	20.0	20.0	31.3

Table 709: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.9850282682	5282.8	5282.8	5282.8	6.8	20.0	1070.0
cch second order	-27.7204422088	327.0	163.0	163.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-28.7385674227	217209.8	0.0	0.0	nan	20.0	1420.3
direct	-27.1443990271	20103.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.4
direct with trim	-27.0625087031	20226.6	121.6	121.6	nan	20.0	139.6
dual anneal	-28.6991888825	40169.6	167.6	167.6	2.2	20.0	279.8
trust region	-26.6005378489	92.0	92.0	92.0	nan	20.0	44.0
trust region repeats	-27.9850282682	1927.0	1927.0	1927.0	20.0	20.0	27.2

Table 710: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-43.1532635433	4050.2	4050.2	4050.2	1.4	20.0	754.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-43.9289507358	167837.6	0.0	0.0	nan	20.0	969.4
direct	-42.2401534316	20057.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.2
direct with trim	-41.8328763644	20181.4	122.4	122.4	nan	20.0	116.4
dual anneal	-43.8849896151	40274.0	272.0	272.0	2.6	20.0	312.9
trust region	-37.9277798545	502.0	502.0	502.0	nan	20.0	159.1
trust region repeats	-43.1286535341	3352.0	3352.0	3352.0	20.0	20.0	50.1

Table 711: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.9842337605	3756.4	3756.4	3756.4	1.2	20.0	783.2
cch second order	-53.4221025601	503.0	281.0	281.0	nan	20.0	7.2
diff evo	-63.0490110492	178702.6	0.0	0.0	nan	20.0	1160.3
direct	-60.0329794910	20025.0	0.0	0.0	nan	20.0	110.8
direct with trim	-60.5928985943	20144.0	117.0	117.0	nan	20.0	142.8
dual anneal	-62.2522764625	42316.0	2314.0	2314.0	25.6	20.0	801.5
trust region	-58.4884908960	145.0	145.0	145.0	nan	20.0	30.5
trust region repeats	-61.6514961258	2614.0	2614.0	2614.0	19.0	20.0	37.3

Table 712: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-84.9956935776	3830.0	3830.0	3830.0	1.0	20.0	806.1
cch second order	-78.8794501224	313.0	156.0	156.0	nan	20.0	7.1
diff evo	-86.0618132213	138711.2	0.0	0.0	nan	20.0	952.0
direct	-81.9193671597	20139.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.0
direct with trim	-82.2681749954	20216.0	75.0	75.0	nan	20.0	136.1
dual anneal	-85.7335712197	40639.0	637.0	637.0	5.6	20.0	361.9
trust region	-76.6267835143	177.0	177.0	177.0	nan	20.0	25.8
trust region repeats	-85.0741396313	1711.0	1711.0	1711.0	20.0	20.0	23.0

Table 713: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-111.0744335520	3348.0	3348.0	3348.0	1.0	20.0	633.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-113.5727825330	153479.4	0.0	0.0	nan	20.0	992.7
direct	-106.4518476608	19659.0	0.0	0.0	nan	20.0	103.4
direct with trim	-110.1589956521	19783.2	122.2	122.2	nan	20.0	159.0
dual anneal	-111.7338575648	40573.8	571.8	571.8	6.0	20.0	365.4
trust region	-105.6173892845	119.0	119.0	119.0	nan	20.0	30.1
trust region repeats	-112.2663492947	1913.0	1913.0	1913.0	20.0	20.0	25.6

Table 714: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-141.8263127050	3116.4	3116.4	3116.4	1.0	20.0	731.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-145.1454164852	121712.6	0.0	0.0	nan	20.0	826.8
direct	-141.8945044754	20029.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.0
direct with trim	-141.8263127050	20123.6	92.6	92.6	nan	20.0	122.1
dual anneal	-144.6527841805	40282.0	280.0	280.0	4.2	20.0	250.1
trust region	-142.0713292197	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	7.8
trust region repeats	-143.5577385626	1421.0	1421.0	1421.0	20.0	20.0	17.3

Table 715: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-177.3925361984	2979.2	2979.2	2979.2	1.0	20.0	576.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-181.8533236252	98022.8	0.0	0.0	nan	20.0	644.2
direct	-174.4119932853	20041.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.2
direct with trim	-170.9002993550	20185.4	142.4	142.4	nan	20.0	148.3
dual anneal	-178.3710318535	40219.0	217.0	217.0	2.6	20.0	267.7
trust region	-165.4437433536	48.0	48.0	48.0	nan	20.0	9.9
trust region repeats	-179.3842880855	1820.0	1820.0	1820.0	20.0	20.0	21.0

Table 716: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-218.7033545084	3064.4	3064.4	3064.4	1.0	20.0	555.1
cch second order	-215.9024912537	341.0	170.0	170.0	nan	20.0	8.0
diff evo	-222.7822764920	85796.6	0.0	0.0	nan	20.0	555.9
direct	-215.9618497364	20143.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3
direct with trim	-217.8948567849	20159.0	14.0	14.0	nan	20.0	115.7
dual anneal	-219.6741228021	40240.4	238.4	238.4	3.2	20.0	292.8
trust region	-213.2050322952	280.0	280.0	280.0	nan	20.0	92.3
trust region repeats	-220.7083494755	1651.0	1651.0	1651.0	18.0	20.0	20.2

Table 717: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-254.0208209594	2493.4	2493.4	2493.4	1.0	20.0	501.4
cch second order	-246.1312549560	398.0	199.0	199.0	nan	20.0	8.3
diff evo	-269.2651904602	112905.8	0.0	0.0	nan	20.0	717.4
direct	-260.9251211102	20065.0	0.0	0.0	nan	20.0	85.1
direct with trim	-251.8312089554	20152.6	85.6	85.6	nan	20.0	120.2
dual anneal	-266.6933799619	41426.8	1424.8	1424.8	19.4	20.0	613.2
trust region	-246.7776811982	120.0	120.0	120.0	nan	20.0	60.6
trust region repeats	-265.5859278020	1348.0	1348.0	1348.0	20.0	20.0	17.4

Table 718: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-290.5701074260	2890.6	2890.6	2890.6	1.0	20.0	542.0
cch second order	-305.3997021378	399.0	198.0	198.0	nan	20.0	7.9
diff evo	-320.5874095516	85444.0	0.0	0.0	nan	20.0	597.9
direct	-307.9280511142	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.0
direct with trim	-315.1467719493	20179.8	58.8	58.8	nan	20.0	118.1
dual anneal	-317.7645922098	40132.0	130.0	130.0	2.2	20.0	261.9
trust region	-317.4543565045	43.0	43.0	43.0	nan	20.0	10.9
trust region repeats	-319.8339814826	1890.0	1890.0	1890.0	19.0	20.0	22.5

Table 719: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-370.1113048625	2437.6	2437.6	2437.6	1.0	20.0	513.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-377.1543233221	109724.2	0.0	0.0	nan	20.0	736.0
direct	-344.1270076855	19937.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.6
direct with trim	-330.8877985642	20007.2	68.2	68.2	nan	20.0	135.9
dual anneal	-373.4355967065	40254.6	252.6	252.6	2.8	20.0	258.9
trust region	-324.3037667876	46.0	46.0	46.0	nan	20.0	7.4
trust region repeats	-374.5760128130	1267.0	1267.0	1267.0	20.0	20.0	16.6

Table 720: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-429.7426623833	2260.4	2260.4	2260.4	1.2	20.0	442.9
cch second order	-429.5417668996	306.0	151.0	151.0	nan	20.0	4.8
diff evo	-439.0807367648	72643.8	0.0	0.0	nan	20.0	478.5
direct	-401.1892051006	20071.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.6
direct with trim	-402.9891509436	20098.0	25.0	25.0	nan	20.0	120.1
dual anneal	-435.0207416421	40202.4	200.4	200.4	3.2	20.0	273.2
trust region	-419.1076841921	40.0	40.0	40.0	nan	20.0	11.1
trust region repeats	-436.9069761313	1853.0	1853.0	1853.0	20.0	20.0	23.3

Table 721: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-502.9532671262	2186.0	2186.0	2186.0	1.0	20.0	475.7
cch second order	-459.4890238781	271.0	136.0	136.0	nan	20.0	7.8
diff evo	-504.9951987754	90880.6	0.0	0.0	nan	20.0	539.1
direct	-450.9003614861	20165.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.7
direct with trim	-446.7730526596	20249.2	82.2	82.2	nan	20.0	143.8
dual anneal	-493.4928392121	42620.0	2618.0	2618.0	47.4	20.0	646.8
trust region	-473.4985762022	35.0	35.0	35.0	nan	20.0	5.9
trust region repeats	-501.3666935427	1101.0	1101.0	1101.0	17.0	20.0	13.3

Table 722: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-562.6236866300	2256.8	2256.8	2256.8	1.2	20.0	472.2
cch second order	-546.6905316824	347.0	170.0	170.0	nan	20.0	7.5
diff evo	-579.5022291753	89872.0	0.0	0.0	nan	20.0	611.5
direct	-561.6493581503	20077.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3
direct with trim	-541.9562769167	20174.4	95.4	95.4	nan	20.0	149.5
dual anneal	-578.0487971584	41593.0	1591.0	1591.0	32.0	20.0	411.3
trust region	-548.5041270615	57.0	57.0	57.0	nan	20.0	14.8
trust region repeats	-576.5650299956	1121.0	1121.0	1121.0	19.0	20.0	14.4

Table 723: Ar

26.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	diff evo	-0.7406019294
He	diff evo	-3.4786508169
Li	diff evo	-8.7941093739
Be	diff evo	-17.1184844353
B	diff evo	-28.7385674227
C	diff evo	-43.9289507358
N	diff evo	-63.0490110492
O	diff evo	-86.0618132213
F	diff evo	-113.5727825330
Ne	diff evo	-145.1454164852
Na	diff evo	-181.8533236252
Mg	diff evo	-222.7822764920
Al	diff evo	-269.2651904602
Si	diff evo	-320.5874095516
P	diff evo	-377.1543233221
S	diff evo	-439.0807367648
Cl	diff evo	-504.9951987754
Ar	diff evo	-579.5022291753

Table 724: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	126.3	126.3	126.3	nan	-176.8562258389	35.2
cch second order	350.0	179.9	179.9	nan	-183.4288799225	6.8
trust region repeats	2194.4	2194.4	2194.4	19.5	-187.6614712068	29.3
basin hopping	3660.1	3660.1	3660.1	4.4	-183.6566261863	788.0
direct	20053.0	0.0	0.0	nan	-178.1128370443	103.4
direct with trim	20164.2	109.2	109.2	nan	-176.1416484801	137.7
dual anneal	40776.4	774.4	774.4	10.4	-198.1480762684	389.7
diff evo	165494.4	0.0	0.0	nan	-189.2138375650	1049.6

Table 725: Average (all systems)

27   20s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

27.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 726: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.7053845495	3137.2	3137.2	3137.2	17.8	20.0	822.6
He	-6.3870649651	2775.6	2775.6	2775.6	12.2	20.0	562.8
Li	-14.2924837522	2642.4	2642.4	2642.4	8.8	20.0	575.8
Be	-26.5391925743	3834.0	3834.0	3834.0	3.6	20.0	867.8
B	-41.3523703257	3136.8	3136.8	3136.8	3.0	20.0	627.4
C	-61.9169561671	4067.4	4067.4	4067.4	2.6	20.0	696.7
N	-86.3427723236	2675.6	2675.6	2675.6	3.0	20.0	609.1
O	-114.2715149012	3365.4	3365.4	3365.4	4.2	20.0	603.3
F	-142.5875961140	2761.4	2761.4	2761.4	1.8	20.0	534.6
Ne	-181.3375590129	2525.0	2525.0	2525.0	1.2	20.0	535.3
Na	-223.4779464010	2096.4	2096.4	2096.4	1.4	20.0	521.6
Mg	-264.5804302430	2019.2	2019.2	2019.2	1.0	20.0	413.4
Al	-329.5492453851	1988.4	1988.4	1988.4	1.0	20.0	396.2
Si	-380.4647946997	2061.0	2061.0	2061.0	1.0	20.0	504.0
P	-431.6291575656	1886.2	1886.2	1886.2	1.2	20.0	367.8
S	-508.3715069393	1839.6	1839.6	1839.6	1.4	20.0	475.5
Cl	-563.5408035602	1866.6	1866.6	1866.6	1.2	20.0	393.9
Ar	-670.2786348124	1926.0	1926.0	1926.0	1.0	20.0	370.3

Table 727: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8856457497	255.0	129.0	129.0	nan	20.0	4.8
He	-4.4518579917	286.0	144.0	144.0	nan	20.0	5.2
Li	-11.1355232091	292.0	148.0	148.0	nan	20.0	7.6
Be	-14.3050794479	425.0	227.0	227.0	nan	20.0	11.1
B	-33.9900117439	402.0	201.0	201.0	nan	20.0	6.5
C	-37.0595362283	500.0	270.0	270.0	nan	20.0	11.9
N	-70.7788770339	401.0	196.0	196.0	nan	20.0	10.0
O	-87.5104978779	279.0	145.0	145.0	nan	20.0	7.5
F	-134.7409516243	192.0	97.0	97.0	nan	20.0	4.2
Ne	-145.1090395982	315.0	170.0	170.0	nan	20.0	6.0
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-207.2115274729	278.0	130.0	130.0	nan	20.0	5.0
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-425.5546818750	296.0	144.0	144.0	nan	20.0	7.5
S	-478.9557823906	386.0	208.0	208.0	nan	20.0	9.2
Cl	-583.0711775983	218.0	111.0	111.0	nan	20.0	6.5
Ar	-551.9444379936	429.0	231.0	231.0	nan	20.0	6.9

Table 728: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.6711006261	348828.0	0.0	0.0	nan	20.0	2954.2
He	-6.4475919538	199407.6	0.0	0.0	nan	20.0	1651.0
Li	-14.8299530423	283785.6	0.0	0.0	nan	20.0	2393.7
Be	-24.1058393707	283238.2	0.0	0.0	nan	20.0	2151.1
B	-40.9263384697	204275.7	0.0	0.0	nan	20.0	1249.8
C	-59.0175154016	146894.8	0.0	0.0	nan	20.0	1225.7
N	-82.8689026907	142770.2	0.0	0.0	nan	20.0	1249.7
O	-111.8654842340	191459.8	0.0	0.0	nan	20.0	1539.2
F	-146.2290577942	187255.2	0.0	0.0	nan	20.0	1581.9
Ne	-182.4833449891	114882.0	0.0	0.0	nan	20.0	808.2
Na	-228.3802695692	139432.8	0.0	0.0	nan	20.0	1272.1
Mg	-271.5445170070	192126.0	0.0	0.0	nan	20.0	1714.7
Al	-327.3272532811	130564.5	0.0	0.0	nan	20.0	1148.5
Si	-385.2466733914	177907.2	0.0	0.0	nan	20.0	1456.0
P	-450.0401475188	203450.2	0.0	0.0	nan	20.0	1859.3
S	-521.4304463528	165943.4	0.0	0.0	nan	20.0	1266.8
Cl	-594.6533196671	169217.2	0.0	0.0	nan	20.0	1558.6
Ar	-675.6018565676	151956.2	0.0	0.0	nan	20.0	1327.9

Table 729: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.0675864512	20081.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.7
He	-4.5809676580	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.0
Li	-10.9738026029	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.1
Be	-18.9748769289	19281.0	0.0	0.0	nan	20.0	125.4
B	-33.6020106467	20067.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.5
C	-49.3302943741	20053.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.3
N	-69.0016515199	20099.0	0.0	0.0	nan	20.0	110.2
O	-94.2241892661	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	141.5
F	-123.3926271238	19063.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.3
Ne	-158.7559406813	19897.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.3
Na	-198.3051156959	20011.0	0.0	0.0	nan	20.0	141.2
Mg	-235.1240497038	20047.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.6
Al	-288.5398728028	20017.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.0
Si	-335.9670250851	19639.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.5
P	-380.5424950684	19851.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.2
S	-447.5936782193	20109.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.7
Cl	-544.0787930857	20123.0	0.0	0.0	nan	20.0	138.6
Ar	-613.8270757100	20143.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.1

Table 730: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.3346072968	20297.6	214.6	214.6	nan	20.0	169.1
He	-4.9766956155	20136.4	55.4	55.4	nan	20.0	156.9
Li	-12.7759364176	20197.2	116.2	116.2	nan	20.0	204.4
Be	-24.1215353465	19430.4	147.4	147.4	nan	20.0	157.2
B	-40.2964193872	20109.2	40.2	40.2	nan	20.0	149.2
C	-58.3000417798	20119.8	64.8	64.8	nan	20.0	159.9
N	-80.5847685788	20150.4	49.4	49.4	nan	20.0	155.5
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-167.2339202045	19933.0	34.0	34.0	nan	20.0	188.3
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-248.0580443918	20064.0	15.0	15.0	nan	20.0	141.2
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-400.1738801689	19872.0	19.0	19.0	nan	20.0	163.4
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 731: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.4054987626	41009.6	1007.6	1007.6	5.2	20.0	652.9
He	-5.3513279552	40363.4	361.4	361.4	2.2	20.0	411.9
Li	-13.3525296981	40270.2	268.2	268.2	2.8	20.0	345.2
Be	-24.9056169282	40163.6	161.6	161.6	1.4	20.0	335.6
B	-40.8348372535	40357.0	355.0	355.0	1.6	20.0	378.5
C	-61.9796172966	40334.0	332.0	332.0	1.8	20.0	383.9
N	-81.9665596146	41394.0	1392.0	1392.0	15.4	20.0	750.9
O	-114.1527705049	40128.6	126.6	126.6	2.0	20.0	338.1
F	-144.7995111166	40277.6	275.6	275.6	1.8	20.0	380.3
Ne	-184.4081817695	40086.8	84.8	84.8	1.6	20.0	332.5
Na	-224.3195753098	40124.8	122.8	122.8	2.0	20.0	384.6
Mg	-270.5603715272	40081.4	79.4	79.4	1.2	20.0	263.6
Al	-322.7675186126	40062.6	60.6	60.6	1.4	20.0	354.3
Si	-374.2305631287	40071.6	69.6	69.6	1.6	20.0	323.9
P	-447.9807725971	40138.8	136.8	136.8	2.2	20.0	352.1
S	-503.5901795804	40127.8	125.8	125.8	1.8	20.0	356.3
Cl	-596.5803275994	40047.0	45.0	45.0	1.0	20.0	314.2
Ar	-677.0135469002	40067.2	65.2	65.2	1.8	20.0	320.3

Table 732: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.6192253200	62.0	62.0	62.0	nan	20.0	9.8
He	-5.0683558709	25.0	25.0	25.0	nan	20.0	7.8
Li	-11.3678552823	45.0	45.0	45.0	nan	20.0	13.4
Be	-22.1116194496	52.0	52.0	52.0	nan	20.0	12.4
B	-38.0633073472	32.0	32.0	32.0	nan	20.0	6.8
C	-55.4212660845	36.0	36.0	36.0	nan	20.0	18.1
N	-82.3607653295	70.0	70.0	70.0	nan	20.0	33.0
O	-106.5843646192	27.0	27.0	27.0	nan	20.0	5.9
F	-139.9764555110	35.0	35.0	35.0	nan	20.0	3.2
Ne	-155.2070220535	44.0	44.0	44.0	nan	20.0	19.7
Na	-223.5052625447	70.0	70.0	70.0	nan	20.0	17.9
Mg	-255.5410304635	44.0	44.0	44.0	nan	20.0	9.4
Al	-327.3294705234	30.0	30.0	30.0	nan	20.0	4.7
Si	-365.9800470447	107.0	107.0	107.0	nan	20.0	20.4
P	-428.0673544062	51.0	51.0	51.0	nan	20.0	23.0
S	-516.8878721055	64.0	64.0	64.0	nan	20.0	7.8
Cl	-574.8895649499	41.0	41.0	41.0	nan	20.0	16.0
Ar	-674.4394595696	50.0	50.0	50.0	nan	20.0	12.8

Table 733: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.7168747660	2875.0	2875.0	2875.0	18.0	20.0	48.2
He	-6.6746382956	2038.0	2038.0	2038.0	20.0	20.0	25.2
Li	-13.8274883720	1990.0	1990.0	1990.0	20.0	20.0	29.5
Be	-26.0013866390	1431.0	1431.0	1431.0	20.0	20.0	18.2
B	-42.7323800785	1413.0	1413.0	1413.0	18.0	20.0	19.1
C	-62.5226469300	1671.0	1671.0	1671.0	20.0	20.0	22.5
N	-86.1337267399	1266.0	1266.0	1266.0	20.0	20.0	18.7
O	-111.8671558312	1029.0	1029.0	1029.0	20.0	20.0	9.7
F	-147.0133075075	1126.0	1126.0	1126.0	20.0	20.0	14.0
Ne	-185.4569698898	925.0	925.0	925.0	19.0	20.0	12.1
Na	-228.3809694430	998.0	998.0	998.0	19.0	20.0	12.2
Mg	-276.3106909369	1207.0	1207.0	1207.0	19.0	20.0	16.5
Al	-326.4533463102	1083.0	1083.0	1083.0	20.0	20.0	12.3
Si	-387.6224476379	975.0	975.0	975.0	20.0	20.0	11.2
P	-447.5871277625	1091.0	1091.0	1091.0	18.0	20.0	12.0
S	-520.2115560505	1046.0	1046.0	1046.0	18.0	20.0	15.2
Cl	-589.2597709653	918.0	918.0	918.0	18.0	20.0	11.6
Ar	-674.8490006380	896.0	896.0	896.0	16.0	20.0	11.7

Table 734: trust region repeats

27.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1.7053845495	3137.2	3137.2	3137.2	17.8	20.0	822.6
cch second order	-0.8856457497	255.0	129.0	129.0	nan	20.0	4.8
diff evo	-1.6711006261	348828.0	0.0	0.0	nan	20.0	2954.2
direct	-1.0675864512	20081.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.7
direct with trim	-1.3346072968	20297.6	214.6	214.6	nan	20.0	169.1
dual anneal	-1.4054987626	41009.6	1007.6	1007.6	5.2	20.0	652.9
trust region	-1.6192253200	62.0	62.0	62.0	nan	20.0	9.8
trust region repeats	-1.7168747660	2875.0	2875.0	2875.0	18.0	20.0	48.2

Table 735: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-6.3870649651	2775.6	2775.6	2775.6	12.2	20.0	562.8
cch second order	-4.4518579917	286.0	144.0	144.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-6.4475919538	199407.6	0.0	0.0	nan	20.0	1651.0
direct	-4.5809676580	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.0
direct with trim	-4.9766956155	20136.4	55.4	55.4	nan	20.0	156.9
dual anneal	-5.3513279552	40363.4	361.4	361.4	2.2	20.0	411.9
trust region	-5.0683558709	25.0	25.0	25.0	nan	20.0	7.8
trust region repeats	-6.6746382956	2038.0	2038.0	2038.0	20.0	20.0	25.2

Table 736: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.2924837522	2642.4	2642.4	2642.4	8.8	20.0	575.8
cch second order	-11.1355232091	292.0	148.0	148.0	nan	20.0	7.6
diff evo	-14.8299530423	283785.6	0.0	0.0	nan	20.0	2393.7
direct	-10.9738026029	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.1
direct with trim	-12.7759364176	20197.2	116.2	116.2	nan	20.0	204.4
dual anneal	-13.3525296981	40270.2	268.2	268.2	2.8	20.0	345.2
trust region	-11.3678552823	45.0	45.0	45.0	nan	20.0	13.4
trust region repeats	-13.8274883720	1990.0	1990.0	1990.0	20.0	20.0	29.5

Table 737: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.5391925743	3834.0	3834.0	3834.0	3.6	20.0	867.8
cch second order	-14.3050794479	425.0	227.0	227.0	nan	20.0	11.1
diff evo	-24.1058393707	283238.2	0.0	0.0	nan	20.0	2151.1
direct	-18.9748769289	19281.0	0.0	0.0	nan	20.0	125.4
direct with trim	-24.1215353465	19430.4	147.4	147.4	nan	20.0	157.2
dual anneal	-24.9056169282	40163.6	161.6	161.6	1.4	20.0	335.6
trust region	-22.1116194496	52.0	52.0	52.0	nan	20.0	12.4
trust region repeats	-26.0013866390	1431.0	1431.0	1431.0	20.0	20.0	18.2

Table 738: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.3523703257	3136.8	3136.8	3136.8	3.0	20.0	627.4
cch second order	-33.9900117439	402.0	201.0	201.0	nan	20.0	6.5
diff evo	-40.9263384697	204275.7	0.0	0.0	nan	20.0	1249.8
direct	-33.6020106467	20067.0	0.0	0.0	nan	20.0	119.5
direct with trim	-40.2964193872	20109.2	40.2	40.2	nan	20.0	149.2
dual anneal	-40.8348372535	40357.0	355.0	355.0	1.6	20.0	378.5
trust region	-38.0633073472	32.0	32.0	32.0	nan	20.0	6.8
trust region repeats	-42.7323800785	1413.0	1413.0	1413.0	18.0	20.0	19.1

Table 739: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-61.9169561671	4067.4	4067.4	4067.4	2.6	20.0	696.7
cch second order	-37.0595362283	500.0	270.0	270.0	nan	20.0	11.9
diff evo	-59.0175154016	146894.8	0.0	0.0	nan	20.0	1225.7
direct	-49.3302943741	20053.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.3
direct with trim	-58.3000417798	20119.8	64.8	64.8	nan	20.0	159.9
dual anneal	-61.9796172966	40334.0	332.0	332.0	1.8	20.0	383.9
trust region	-55.4212660845	36.0	36.0	36.0	nan	20.0	18.1
trust region repeats	-62.5226469300	1671.0	1671.0	1671.0	20.0	20.0	22.5

Table 740: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-86.3427723236	2675.6	2675.6	2675.6	3.0	20.0	609.1
cch second order	-70.7788770339	401.0	196.0	196.0	nan	20.0	10.0
diff evo	-82.8689026907	142770.2	0.0	0.0	nan	20.0	1249.7
direct	-69.0016515199	20099.0	0.0	0.0	nan	20.0	110.2
direct with trim	-80.5847685788	20150.4	49.4	49.4	nan	20.0	155.5
dual anneal	-81.9665596146	41394.0	1392.0	1392.0	15.4	20.0	750.9
trust region	-82.3607653295	70.0	70.0	70.0	nan	20.0	33.0
trust region repeats	-86.1337267399	1266.0	1266.0	1266.0	20.0	20.0	18.7

Table 741: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-114.2715149012	3365.4	3365.4	3365.4	4.2	20.0	603.3
cch second order	-87.5104978779	279.0	145.0	145.0	nan	20.0	7.5
diff evo	-111.8654842340	191459.8	0.0	0.0	nan	20.0	1539.2
direct	-94.2241892661	20079.0	0.0	0.0	nan	20.0	141.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-114.1527705049	40128.6	126.6	126.6	2.0	20.0	338.1
trust region	-106.5843646192	27.0	27.0	27.0	nan	20.0	5.9
trust region repeats	-111.8671558312	1029.0	1029.0	1029.0	20.0	20.0	9.7

Table 742: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-142.5875961140	2761.4	2761.4	2761.4	1.8	20.0	534.6
cch second order	-134.7409516243	192.0	97.0	97.0	nan	20.0	4.2
diff evo	-146.2290577942	187255.2	0.0	0.0	nan	20.0	1581.9
direct	-123.3926271238	19063.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-144.7995111166	40277.6	275.6	275.6	1.8	20.0	380.3
trust region	-139.9764555110	35.0	35.0	35.0	nan	20.0	3.2
trust region repeats	-147.0133075075	1126.0	1126.0	1126.0	20.0	20.0	14.0

Table 743: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-181.3375590129	2525.0	2525.0	2525.0	1.2	20.0	535.3
cch second order	-145.1090395982	315.0	170.0	170.0	nan	20.0	6.0
diff evo	-182.4833449891	114882.0	0.0	0.0	nan	20.0	808.2
direct	-158.7559406813	19897.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.3
direct with trim	-167.2339202045	19933.0	34.0	34.0	nan	20.0	188.3
dual anneal	-184.4081817695	40086.8	84.8	84.8	1.6	20.0	332.5
trust region	-155.2070220535	44.0	44.0	44.0	nan	20.0	19.7
trust region repeats	-185.4569698898	925.0	925.0	925.0	19.0	20.0	12.1

Table 744: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-223.4779464010	2096.4	2096.4	2096.4	1.4	20.0	521.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-228.3802695692	139432.8	0.0	0.0	nan	20.0	1272.1
direct	-198.3051156959	20011.0	0.0	0.0	nan	20.0	141.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-224.3195753098	40124.8	122.8	122.8	2.0	20.0	384.6
trust region	-223.5052625447	70.0	70.0	70.0	nan	20.0	17.9
trust region repeats	-228.3809694430	998.0	998.0	998.0	19.0	20.0	12.2

Table 745: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-264.5804302430	2019.2	2019.2	2019.2	1.0	20.0	413.4
cch second order	-207.2115274729	278.0	130.0	130.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-271.5445170070	192126.0	0.0	0.0	nan	20.0	1714.7
direct	-235.1240497038	20047.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.6
direct with trim	-248.0580443918	20064.0	15.0	15.0	nan	20.0	141.2
dual anneal	-270.5603715272	40081.4	79.4	79.4	1.2	20.0	263.6
trust region	-255.5410304635	44.0	44.0	44.0	nan	20.0	9.4
trust region repeats	-276.3106909369	1207.0	1207.0	1207.0	19.0	20.0	16.5

Table 746: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-329.5492453851	1988.4	1988.4	1988.4	1.0	20.0	396.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-327.3272532811	130564.5	0.0	0.0	nan	20.0	1148.5
direct	-288.5398728028	20017.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-322.7675186126	40062.6	60.6	60.6	1.4	20.0	354.3
trust region	-327.3294705234	30.0	30.0	30.0	nan	20.0	4.7
trust region repeats	-326.4533463102	1083.0	1083.0	1083.0	20.0	20.0	12.3

Table 747: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-380.4647946997	2061.0	2061.0	2061.0	1.0	20.0	504.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-385.2466733914	177907.2	0.0	0.0	nan	20.0	1456.0
direct	-335.9670250851	19639.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-374.2305631287	40071.6	69.6	69.6	1.6	20.0	323.9
trust region	-365.9800470447	107.0	107.0	107.0	nan	20.0	20.4
trust region repeats	-387.6224476379	975.0	975.0	975.0	20.0	20.0	11.2

Table 748: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-431.6291575656	1886.2	1886.2	1886.2	1.2	20.0	367.8
cch second order	-425.5546818750	296.0	144.0	144.0	nan	20.0	7.5
diff evo	-450.0401475188	203450.2	0.0	0.0	nan	20.0	1859.3
direct	-380.5424950684	19851.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.2
direct with trim	-400.1738801689	19872.0	19.0	19.0	nan	20.0	163.4
dual anneal	-447.9807725971	40138.8	136.8	136.8	2.2	20.0	352.1
trust region	-428.0673544062	51.0	51.0	51.0	nan	20.0	23.0
trust region repeats	-447.5871277625	1091.0	1091.0	1091.0	18.0	20.0	12.0

Table 749: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-508.3715069393	1839.6	1839.6	1839.6	1.4	20.0	475.5
cch second order	-478.9557823906	386.0	208.0	208.0	nan	20.0	9.2
diff evo	-521.4304463528	165943.4	0.0	0.0	nan	20.0	1266.8
direct	-447.5936782193	20109.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-503.5901795804	40127.8	125.8	125.8	1.8	20.0	356.3
trust region	-516.8878721055	64.0	64.0	64.0	nan	20.0	7.8
trust region repeats	-520.2115560505	1046.0	1046.0	1046.0	18.0	20.0	15.2

Table 750: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-563.5408035602	1866.6	1866.6	1866.6	1.2	20.0	393.9
cch second order	-583.0711775983	218.0	111.0	111.0	nan	20.0	6.5
diff evo	-594.6533196671	169217.2	0.0	0.0	nan	20.0	1558.6
direct	-544.0787930857	20123.0	0.0	0.0	nan	20.0	138.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-596.5803275994	40047.0	45.0	45.0	1.0	20.0	314.2
trust region	-574.8895649499	41.0	41.0	41.0	nan	20.0	16.0
trust region repeats	-589.2597709653	918.0	918.0	918.0	18.0	20.0	11.6

Table 751: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-670.2786348124	1926.0	1926.0	1926.0	1.0	20.0	370.3
cch second order	-551.9444379936	429.0	231.0	231.0	nan	20.0	6.9
diff evo	-675.6018565676	151956.2	0.0	0.0	nan	20.0	1327.9
direct	-613.8270757100	20143.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-677.0135469002	40067.2	65.2	65.2	1.8	20.0	320.3
trust region	-674.4394595696	50.0	50.0	50.0	nan	20.0	12.8
trust region repeats	-674.8490006380	896.0	896.0	896.0	16.0	20.0	11.7

Table 752: Ar

27.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	trust region repeats	-1.7168747660
He	trust region repeats	-6.6746382956
Li	diff evo	-14.8299530423
Be	basin hopping	-26.5391925743
B	trust region repeats	-42.7323800785
C	trust region repeats	-62.5226469300
N	basin hopping	-86.3427723236
O	basin hopping	-114.2715149012
F	trust region repeats	-147.0133075075
Ne	trust region repeats	-185.4569698898
Na	trust region repeats	-228.3809694430
Mg	trust region repeats	-276.3106909369
Al	basin hopping	-329.5492453851
Si	trust region repeats	-387.6224476379
P	diff evo	-450.0401475188
S	diff evo	-521.4304463528
Cl	dual anneal	-596.5803275994
Ar	dual anneal	-677.0135469002

Table 753: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	49.2	49.2	49.2	nan	-221.3566832486	13.4
cch second order	330.3	170.1	170.1	nan	-185.7803085224	7.3
trust region repeats	1332.1	1332.1	1332.1	19.1	-229.7011935996	17.8
basin hopping	2589.1	2589.1	2589.1	3.7	-224.9236341273	548.8
direct	19928.8	0.0	0.0	nan	-200.4378918124	123.4
direct with trim	20031.0	75.6	75.6	nan	-103.7855849187	164.5
dual anneal	40283.7	281.7	281.7	2.7	-227.2332947864	387.7
diff evo	190744.1	0.0	0.0	nan	-229.1483117737	1578.2

Table 754: Average (all systems)

28   20s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

28.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 755: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563462	1769.6	1769.6	1769.6	1.2	20.0	560.9
He	-3.0901074537	1940.4	1940.4	1940.4	1.6	20.0	696.2
Li	-7.9887778619	1951.0	1951.0	1951.0	1.0	20.0	611.3
Be	-15.7299072118	2164.2	2164.2	2164.2	1.2	20.0	709.0
B	-26.6444503295	2073.8	2073.8	2073.8	1.0	20.0	639.5
C	-41.0135231006	2025.6	2025.6	2025.6	1.4	20.0	530.3
N	-59.0839507082	2066.0	2066.0	2066.0	1.0	20.0	707.7
O	-81.0772188007	2066.6	2066.6	2066.6	1.4	20.0	522.4
F	-107.1951682904	2067.4	2067.4	2067.4	1.2	20.0	637.9
Ne	-137.6238745315	2180.0	2180.0	2180.0	1.2	20.0	817.7
Na	-172.5364249131	2092.8	2092.8	2092.8	1.2	20.0	791.1
Mg	-212.0949850588	2363.6	2363.6	2363.6	1.0	20.0	805.3
Al	-256.4523829595	2289.2	2289.2	2289.2	1.2	20.0	617.8
Si	-305.7533536575	2386.0	2386.0	2386.0	1.8	20.0	658.4
P	-360.1355373034	2294.4	2294.4	2294.4	1.2	20.0	665.4
S	-419.7302932786	2255.6	2255.6	2255.6	1.2	20.0	651.9
Cl	-484.6633740769	2252.2	2252.2	2252.2	1.0	20.0	660.2
Ar	-555.0554902098	2361.2	2361.2	2361.2	1.2	20.0	766.0

Table 756: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213564033	131.0	75.0	75.0	nan	20.0	5.0
He	-3.0901074044	159.0	86.0	86.0	nan	20.0	5.2
Li	-7.9887777687	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	6.5
Be	-15.7299072782	147.0	83.0	83.0	nan	20.0	5.0
B	-26.6444502769	130.0	72.0	72.0	nan	20.0	3.5
C	-41.0135230962	172.0	95.0	95.0	nan	20.0	3.7
N	-59.0839506178	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	5.7
O	-81.0772188012	166.0	94.0	94.0	nan	20.0	4.0
F	-107.1951682886	180.0	98.0	98.0	nan	20.0	3.9
Ne	-137.6238746033	185.0	100.0	100.0	nan	20.0	5.6
Na	-172.5364248388	187.0	102.0	102.0	nan	20.0	4.0
Mg	-212.0949850654	163.0	89.0	89.0	nan	20.0	3.7
Al	-256.4523829585	209.0	112.0	112.0	nan	20.0	6.2
Si	-305.7533536469	211.0	114.0	114.0	nan	20.0	4.4
P	-360.1355372313	219.0	117.0	117.0	nan	20.0	4.5
S	-419.7302931919	203.0	106.0	106.0	nan	20.0	5.8
Cl	-484.6633740513	177.0	98.0	98.0	nan	20.0	6.3
Ar	-555.0554901691	234.0	123.0	123.0	nan	20.0	6.3

Table 757: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213560697	29183.8	0.0	0.0	nan	20.0	164.6
He	-3.0901064015	30799.2	0.0	0.0	nan	20.0	188.9
Li	-7.9887761118	36818.0	0.0	0.0	nan	20.0	201.8
Be	-15.7299051665	41606.8	0.0	0.0	nan	20.0	256.6
B	-26.6444432224	47806.0	0.0	0.0	nan	20.0	300.1
C	-41.0135083672	34284.2	0.0	0.0	nan	20.0	205.5
N	-59.0839199033	35456.8	0.0	0.0	nan	20.0	219.0
O	-81.0771646971	36211.2	0.0	0.0	nan	20.0	221.8
F	-107.1951452585	40114.4	0.0	0.0	nan	20.0	226.2
Ne	-137.6238092704	34702.4	0.0	0.0	nan	20.0	196.2
Na	-172.5363673620	34284.2	0.0	0.0	nan	20.0	208.1
Mg	-212.0948752967	42631.8	0.0	0.0	nan	20.0	274.9
Al	-256.4523148795	37326.4	0.0	0.0	nan	20.0	240.6
Si	-305.7532280222	40294.8	0.0	0.0	nan	20.0	247.7
P	-360.1354973642	44509.6	0.0	0.0	nan	20.0	286.3
S	-419.7301672543	40885.2	0.0	0.0	nan	20.0	277.1
Cl	-484.6632593072	40836.0	0.0	0.0	nan	20.0	254.3
Ar	-555.0552873930	39023.8	0.0	0.0	nan	20.0	257.9

Table 758: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6203294603	19495.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.3
He	-3.0820678966	18175.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.0
Li	-7.9238528969	19489.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.3
Be	-15.6672765031	19367.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3
B	-26.5956682252	18817.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.3
C	-40.9141317340	17983.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.4
N	-58.0905258600	20039.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.9
O	-80.3734100645	19913.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.5
F	-106.7953338926	19151.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.6
Ne	-137.1893624518	20091.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.2
Na	-171.9121956142	19335.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.8
Mg	-210.1106905544	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.1
Al	-253.0139120477	19807.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.4
Si	-304.1776489199	20109.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.2
P	-355.3862174996	20099.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.6
S	-415.0152536954	19725.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.9
Cl	-477.5140991808	19397.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.6
Ar	-546.4138834822	20087.0	0.0	0.0	nan	20.0	108.8

Table 759: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563462	19504.0	7.0	7.0	nan	20.0	105.2
He	-3.0901074537	18185.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.4
Li	-7.9887778619	19499.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.4
Be	-15.7299072118	19376.0	7.0	7.0	nan	20.0	92.3
B	-26.6444503295	18826.0	7.0	7.0	nan	20.0	93.9
C	-41.0135231006	17993.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.8
N	-59.0839507082	20049.0	8.0	8.0	nan	20.0	108.6
O	-81.0772188007	19923.0	8.0	8.0	nan	20.0	123.9
F	-107.1951682904	19160.0	7.0	7.0	nan	20.0	110.7
Ne	-137.6238745315	20101.0	8.0	8.0	nan	20.0	100.7
Na	-172.5364249131	19345.0	8.0	8.0	nan	20.0	104.3
Mg	-212.0949850588	20128.0	7.0	7.0	nan	20.0	99.3
Al	-256.4523829595	19817.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.0
Si	-305.7533536575	20117.0	6.0	6.0	nan	20.0	111.9
P	-360.1355373034	20108.0	7.0	7.0	nan	20.0	109.8
S	-419.7302932786	19735.0	8.0	8.0	nan	20.0	114.2
Cl	-484.6633740769	19410.0	11.0	11.0	nan	20.0	102.7
Ar	-555.0554902098	20100.0	11.0	11.0	nan	20.0	108.4

Table 760: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563462	40011.6	9.6	9.6	1.0	20.0	234.7
He	-3.0901074537	40012.0	10.0	10.0	1.0	20.0	187.1
Li	-7.9887778619	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	219.6
Be	-15.7299072118	40012.6	10.6	10.6	1.0	20.0	220.1
B	-26.6444503294	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	203.3
C	-41.0135231003	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	223.6
N	-59.0839507079	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	188.7
O	-81.0772188002	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	202.8
F	-107.1951682897	40017.8	15.8	15.8	1.0	20.0	204.4
Ne	-137.6238745306	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	228.4
Na	-172.5364249118	40016.2	14.2	14.2	1.0	20.0	212.0
Mg	-212.0949850572	40015.0	13.0	13.0	1.0	20.0	223.9
Al	-256.4523829573	40016.6	14.6	14.6	1.0	20.0	222.9
Si	-305.7533536548	40023.6	21.6	21.6	1.0	20.0	234.3
P	-360.1355373001	40018.8	16.8	16.8	1.0	20.0	217.4
S	-419.7302932746	40017.4	15.4	15.4	1.0	20.0	224.6
Cl	-484.6633740720	40026.2	24.2	24.2	1.0	20.0	249.3
Ar	-555.0554902040	40025.6	23.6	23.6	1.0	20.0	221.8

Table 761: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563462	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
He	-3.0901074537	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
Li	-7.9887778619	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.3
Be	-15.7299072118	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	3.4
B	-26.6444503295	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.2
C	-41.0135231006	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
N	-59.0839507082	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.3
O	-81.0772188007	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
F	-107.1951682904	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.8
Ne	-137.6238745315	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	4.0
Na	-172.5364249131	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.4
Mg	-212.0949850588	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.3
Al	-256.4523829595	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.4
Si	-305.7533536575	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	5.5
P	-360.1355373034	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.5
S	-419.7302932786	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	3.5
Cl	-484.6633740769	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.3
Ar	-555.0554902098	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.6

Table 762: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213563462	304.0	304.0	304.0	1.0	20.0	4.4
He	-3.0901074537	259.0	259.0	259.0	1.0	20.0	3.8
Li	-7.9887778619	281.0	281.0	281.0	1.0	20.0	3.2
Be	-15.7299072118	282.0	282.0	282.0	1.0	20.0	3.6
B	-26.6444503295	283.0	283.0	283.0	1.0	20.0	3.3
C	-41.0135231006	286.0	286.0	286.0	1.0	20.0	3.5
N	-59.0839507082	285.0	285.0	285.0	1.0	20.0	3.0
O	-81.0772188007	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.6
F	-107.1951682904	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	3.8
Ne	-137.6238745315	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.2
Na	-172.5364249131	291.0	291.0	291.0	1.0	20.0	3.2
Mg	-212.0949850588	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	4.0
Al	-256.4523829595	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	3.6
Si	-305.7533536575	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	3.7
P	-360.1355373034	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.5
S	-419.7302932786	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.7
Cl	-484.6633740769	298.0	298.0	298.0	1.0	20.0	3.5
Ar	-555.0554902098	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.5

Table 763: trust region repeats

28.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213563462	1769.6	1769.6	1769.6	1.2	20.0	560.9
cch second order	-0.6213564033	131.0	75.0	75.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-0.6213560697	29183.8	0.0	0.0	nan	20.0	164.6
direct	-0.6203294603	19495.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.3
direct with trim	-0.6213563462	19504.0	7.0	7.0	nan	20.0	105.2
dual anneal	-0.6213563462	40011.6	9.6	9.6	1.0	20.0	234.7
trust region	-0.6213563462	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-0.6213563462	304.0	304.0	304.0	1.0	20.0	4.4

Table 764: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901074537	1940.4	1940.4	1940.4	1.6	20.0	696.2
cch second order	-3.0901074044	159.0	86.0	86.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-3.0901064015	30799.2	0.0	0.0	nan	20.0	188.9
direct	-3.0820678966	18175.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.0
direct with trim	-3.0901074537	18185.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.4
dual anneal	-3.0901074537	40012.0	10.0	10.0	1.0	20.0	187.1
trust region	-3.0901074537	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
trust region repeats	-3.0901074537	259.0	259.0	259.0	1.0	20.0	3.8

Table 765: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887778619	1951.0	1951.0	1951.0	1.0	20.0	611.3
cch second order	-7.9887777687	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	6.5
diff evo	-7.9887761118	36818.0	0.0	0.0	nan	20.0	201.8
direct	-7.9238528969	19489.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.3
direct with trim	-7.9887778619	19499.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.4
dual anneal	-7.9887778619	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	219.6
trust region	-7.9887778619	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.3
trust region repeats	-7.9887778619	281.0	281.0	281.0	1.0	20.0	3.2

Table 766: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299072118	2164.2	2164.2	2164.2	1.2	20.0	709.0
cch second order	-15.7299072782	147.0	83.0	83.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-15.7299051665	41606.8	0.0	0.0	nan	20.0	256.6
direct	-15.6672765031	19367.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.3
direct with trim	-15.7299072118	19376.0	7.0	7.0	nan	20.0	92.3
dual anneal	-15.7299072118	40012.6	10.6	10.6	1.0	20.0	220.1
trust region	-15.7299072118	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	3.4
trust region repeats	-15.7299072118	282.0	282.0	282.0	1.0	20.0	3.6

Table 767: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6444503295	2073.8	2073.8	2073.8	1.0	20.0	639.5
cch second order	-26.6444502769	130.0	72.0	72.0	nan	20.0	3.5
diff evo	-26.6444432224	47806.0	0.0	0.0	nan	20.0	300.1
direct	-26.5956682252	18817.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.3
direct with trim	-26.6444503295	18826.0	7.0	7.0	nan	20.0	93.9
dual anneal	-26.6444503294	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	203.3
trust region	-26.6444503295	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.2
trust region repeats	-26.6444503295	283.0	283.0	283.0	1.0	20.0	3.3

Table 768: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0135231006	2025.6	2025.6	2025.6	1.4	20.0	530.3
cch second order	-41.0135230962	172.0	95.0	95.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-41.0135083672	34284.2	0.0	0.0	nan	20.0	205.5
direct	-40.9141317340	17983.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.4
direct with trim	-41.0135231006	17993.0	8.0	8.0	nan	20.0	95.8
dual anneal	-41.0135231003	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	223.6
trust region	-41.0135231006	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-41.0135231006	286.0	286.0	286.0	1.0	20.0	3.5

Table 769: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0839507082	2066.0	2066.0	2066.0	1.0	20.0	707.7
cch second order	-59.0839506178	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	5.7
diff evo	-59.0839199033	35456.8	0.0	0.0	nan	20.0	219.0
direct	-58.0905258600	20039.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.9
direct with trim	-59.0839507082	20049.0	8.0	8.0	nan	20.0	108.6
dual anneal	-59.0839507079	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	188.7
trust region	-59.0839507082	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.3
trust region repeats	-59.0839507082	285.0	285.0	285.0	1.0	20.0	3.0

Table 770: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0772188007	2066.6	2066.6	2066.6	1.4	20.0	522.4
cch second order	-81.0772188012	166.0	94.0	94.0	nan	20.0	4.0
diff evo	-81.0771646971	36211.2	0.0	0.0	nan	20.0	221.8
direct	-80.3734100645	19913.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.5
direct with trim	-81.0772188007	19923.0	8.0	8.0	nan	20.0	123.9
dual anneal	-81.0772188002	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	202.8
trust region	-81.0772188007	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-81.0772188007	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.6

Table 771: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1951682904	2067.4	2067.4	2067.4	1.2	20.0	637.9
cch second order	-107.1951682886	180.0	98.0	98.0	nan	20.0	3.9
diff evo	-107.1951452585	40114.4	0.0	0.0	nan	20.0	226.2
direct	-106.7953338926	19151.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.6
direct with trim	-107.1951682904	19160.0	7.0	7.0	nan	20.0	110.7
dual anneal	-107.1951682897	40017.8	15.8	15.8	1.0	20.0	204.4
trust region	-107.1951682904	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.8
trust region repeats	-107.1951682904	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	3.8

Table 772: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6238745315	2180.0	2180.0	2180.0	1.2	20.0	817.7
cch second order	-137.6238746033	185.0	100.0	100.0	nan	20.0	5.6
diff evo	-137.6238092704	34702.4	0.0	0.0	nan	20.0	196.2
direct	-137.1893624518	20091.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.2
direct with trim	-137.6238745315	20101.0	8.0	8.0	nan	20.0	100.7
dual anneal	-137.6238745306	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	228.4
trust region	-137.6238745315	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-137.6238745315	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.2

Table 773: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.5364249131	2092.8	2092.8	2092.8	1.2	20.0	791.1
cch second order	-172.5364248388	187.0	102.0	102.0	nan	20.0	4.0
diff evo	-172.5363673620	34284.2	0.0	0.0	nan	20.0	208.1
direct	-171.9121956142	19335.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.8
direct with trim	-172.5364249131	19345.0	8.0	8.0	nan	20.0	104.3
dual anneal	-172.5364249118	40016.2	14.2	14.2	1.0	20.0	212.0
trust region	-172.5364249131	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-172.5364249131	291.0	291.0	291.0	1.0	20.0	3.2

Table 774: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0949850588	2363.6	2363.6	2363.6	1.0	20.0	805.3
cch second order	-212.0949850654	163.0	89.0	89.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-212.0948752967	42631.8	0.0	0.0	nan	20.0	274.9
direct	-210.1106905544	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.1
direct with trim	-212.0949850588	20128.0	7.0	7.0	nan	20.0	99.3
dual anneal	-212.0949850572	40015.0	13.0	13.0	1.0	20.0	223.9
trust region	-212.0949850588	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.3
trust region repeats	-212.0949850588	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	4.0

Table 775: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4523829595	2289.2	2289.2	2289.2	1.2	20.0	617.8
cch second order	-256.4523829585	209.0	112.0	112.0	nan	20.0	6.2
diff evo	-256.4523148795	37326.4	0.0	0.0	nan	20.0	240.6
direct	-253.0139120477	19807.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.4
direct with trim	-256.4523829595	19817.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.0
dual anneal	-256.4523829573	40016.6	14.6	14.6	1.0	20.0	222.9
trust region	-256.4523829595	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-256.4523829595	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	3.6

Table 776: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7533536575	2386.0	2386.0	2386.0	1.8	20.0	658.4
cch second order	-305.7533536469	211.0	114.0	114.0	nan	20.0	4.4
diff evo	-305.7532280222	40294.8	0.0	0.0	nan	20.0	247.7
direct	-304.1776489199	20109.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.2
direct with trim	-305.7533536575	20117.0	6.0	6.0	nan	20.0	111.9
dual anneal	-305.7533536548	40023.6	21.6	21.6	1.0	20.0	234.3
trust region	-305.7533536575	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	5.5
trust region repeats	-305.7533536575	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	3.7

Table 777: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1355373034	2294.4	2294.4	2294.4	1.2	20.0	665.4
cch second order	-360.1355372313	219.0	117.0	117.0	nan	20.0	4.5
diff evo	-360.1354973642	44509.6	0.0	0.0	nan	20.0	286.3
direct	-355.3862174996	20099.0	0.0	0.0	nan	20.0	120.6
direct with trim	-360.1355373034	20108.0	7.0	7.0	nan	20.0	109.8
dual anneal	-360.1355373001	40018.8	16.8	16.8	1.0	20.0	217.4
trust region	-360.1355373034	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.5
trust region repeats	-360.1355373034	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.5

Table 778: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7302932786	2255.6	2255.6	2255.6	1.2	20.0	651.9
cch second order	-419.7302931919	203.0	106.0	106.0	nan	20.0	5.8
diff evo	-419.7301672543	40885.2	0.0	0.0	nan	20.0	277.1
direct	-415.0152536954	19725.0	0.0	0.0	nan	20.0	116.9
direct with trim	-419.7302932786	19735.0	8.0	8.0	nan	20.0	114.2
dual anneal	-419.7302932746	40017.4	15.4	15.4	1.0	20.0	224.6
trust region	-419.7302932786	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	3.5
trust region repeats	-419.7302932786	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.7

Table 779: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6633740769	2252.2	2252.2	2252.2	1.0	20.0	660.2
cch second order	-484.6633740513	177.0	98.0	98.0	nan	20.0	6.3
diff evo	-484.6632593072	40836.0	0.0	0.0	nan	20.0	254.3
direct	-477.5140991808	19397.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.6
direct with trim	-484.6633740769	19410.0	11.0	11.0	nan	20.0	102.7
dual anneal	-484.6633740720	40026.2	24.2	24.2	1.0	20.0	249.3
trust region	-484.6633740769	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.3
trust region repeats	-484.6633740769	298.0	298.0	298.0	1.0	20.0	3.5

Table 780: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0554902098	2361.2	2361.2	2361.2	1.2	20.0	766.0
cch second order	-555.0554901691	234.0	123.0	123.0	nan	20.0	6.3
diff evo	-555.0552873930	39023.8	0.0	0.0	nan	20.0	257.9
direct	-546.4138834822	20087.0	0.0	0.0	nan	20.0	108.8
direct with trim	-555.0554902098	20100.0	11.0	11.0	nan	20.0	108.4
dual anneal	-555.0554902040	40025.6	23.6	23.6	1.0	20.0	221.8
trust region	-555.0554902098	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-555.0554902098	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.5

Table 781: Ar

338

28.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6213564033
He	basin hopping	-3.0901074537
Li	basin hopping	-7.9887778619
Be	cch second order	-15.7299072782
B	trust region	-26.6444503295
C	basin hopping	-41.0135231006
N	trust region	-59.0839507082
O	cch second order	-81.0772188012
F	basin hopping	-107.1951682904
Ne	cch second order	-137.6238746033
Na	basin hopping	-172.5364249131
Mg	cch second order	-212.0949850654
Al	basin hopping	-256.4523829595
Si	trust region repeats	-305.7533536575
P	basin hopping	-360.1355373034
S	basin hopping	-419.7302932786
Cl	trust region	-484.6633740769
Ar	trust region	-555.0554902098

Table 782: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.2	10.2	10.2	nan	-180.3605653385	3.1
cch second order	178.2	97.1	97.1	nan	-180.3605653162	4.9
trust region repeats	289.3	289.3	289.3	1.0	-180.3605653385	3.6
basin hopping	2144.4	2144.4	2144.4	1.2	-180.3605653385	669.4
direct	19511.0	0.0	0.0	nan	-178.3775477766	108.3
direct with trim	19520.9	7.9	7.9	nan	-180.3605653385	104.4
diff evo	38154.1	0.0	0.0	nan	-180.3605072971	234.9
dual anneal	40016.2	14.2	14.2	1.0	-180.3605653369	217.7

Table 783: Average (all systems)

29 20s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

29.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 784: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821403	1725.6	1725.6	1725.6	1.8	20.0	446.9
He	-3.1805271338	1640.4	1640.4	1640.4	1.8	20.0	435.7
Li	-8.1481958773	1521.4	1521.4	1521.4	1.2	20.0	470.4
Be	-15.9681605868	1539.8	1539.8	1539.8	1.4	20.0	360.5
B	-26.9683093237	1534.0	1534.0	1534.0	1.4	20.0	470.8
C	-41.4274541120	1595.2	1595.2	1595.2	1.6	20.0	365.9
N	-59.5906458463	1585.6	1585.6	1585.6	1.0	20.0	361.3
O	-81.6778575728	1603.2	1603.2	1603.2	1.0	20.0	392.6
F	-107.8896590936	1640.8	1640.8	1640.8	1.0	20.0	460.2
Ne	-138.4110220340	1670.4	1670.4	1670.4	1.0	20.0	503.6
Na	-173.4140595221	1706.4	1706.4	1706.4	1.2	20.0	415.7
Mg	-213.0600659283	1737.4	1737.4	1737.4	1.0	20.0	412.2
Al	-257.5010818236	1831.2	1831.2	1831.2	1.2	20.0	537.7
Si	-306.8811435810	1866.0	1866.0	1866.0	1.4	20.0	603.3
P	-361.3371742724	1893.4	1893.4	1893.4	1.0	20.0	507.3
S	-420.9999815867	1920.6	1920.6	1920.6	1.2	20.0	452.6
Cl	-485.9947324984	1948.8	1948.8	1948.8	1.0	20.0	539.1
Ar	-556.4416088300	2060.6	2060.6	2060.6	1.0	20.0	528.8

Table 785: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570863523	185.0	95.0	95.0	nan	20.0	6.6
He	-3.1805189439	186.0	99.0	99.0	nan	20.0	4.1
Li	-8.1481840453	162.0	90.0	90.0	nan	20.0	4.1
Be	-15.9681458224	173.0	94.0	94.0	nan	20.0	4.2
B	-26.9682921846	180.0	98.0	98.0	nan	20.0	6.6
C	-41.4274541760	222.0	113.0	113.0	nan	20.0	6.1
N	-59.5906458042	226.0	120.0	120.0	nan	20.0	6.0
O	-81.6778575838	173.0	93.0	93.0	nan	20.0	5.4
F	-103.4485654131	379.0	194.0	194.0	nan	20.0	6.3
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-173.4140594674	185.0	100.0	100.0	nan	20.0	6.4
Mg	-213.0600659392	223.0	116.0	116.0	nan	20.0	6.7
Al	-257.5100648820	458.0	247.0	247.0	nan	20.0	6.5
Si	-306.8811243697	211.0	112.0	112.0	nan	20.0	4.3
P	-361.3371742586	240.0	125.0	125.0	nan	20.0	4.8
S	-420.9999815719	288.0	144.0	144.0	nan	20.0	7.5
Cl	-485.9947324795	440.0	209.0	209.0	nan	20.0	10.0
Ar	-556.4416215500	189.0	100.0	100.0	nan	20.0	4.4

Table 786: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570862256	34243.2	0.0	0.0	nan	20.0	217.1
He	-3.1805261095	31561.8	0.0	0.0	nan	20.0	206.8
Li	-8.1481763249	37055.8	0.0	0.0	nan	20.0	252.8
Be	-15.9681352575	39901.2	0.0	0.0	nan	20.0	260.8
B	-26.9682761743	39934.0	0.0	0.0	nan	20.0	253.1
C	-41.4273828221	42877.8	0.0	0.0	nan	20.0	259.0
N	-59.5905502565	40057.0	0.0	0.0	nan	20.0	234.4
O	-81.6778011837	44042.2	0.0	0.0	nan	20.0	211.0
F	-107.8896151145	40458.8	0.0	0.0	nan	20.0	274.2
Ne	-138.4107991542	40352.2	0.0	0.0	nan	20.0	255.6
Na	-173.4138509561	39753.6	0.0	0.0	nan	20.0	233.0
Mg	-213.0599504936	44337.4	0.0	0.0	nan	20.0	306.8
Al	-257.5010495558	46822.0	0.0	0.0	nan	20.0	270.8
Si	-306.8809758997	44673.6	0.0	0.0	nan	20.0	270.3
P	-361.3369574978	44944.2	0.0	0.0	nan	20.0	280.5
S	-420.9997797842	48626.0	0.0	0.0	nan	20.0	291.4
Cl	-485.9944860203	42607.2	0.0	0.0	nan	20.0	237.3
Ar	-556.4414476431	46904.0	0.0	0.0	nan	20.0	257.1

Table 787: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6547954062	20057.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.6
He	-3.1505409359	19383.0	0.0	0.0	nan	20.0	131.2
Li	-8.1089899946	20179.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.0
Be	-15.9185214481	20067.0	0.0	0.0	nan	20.0	108.3
B	-26.7641236007	19763.0	0.0	0.0	nan	20.0	123.6
C	-41.0296581438	19369.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.6
N	-58.3376577260	20167.0	0.0	0.0	nan	20.0	123.7
O	-81.1137721684	20091.0	0.0	0.0	nan	20.0	128.3
F	-107.5493821712	19895.0	0.0	0.0	nan	20.0	128.5
Ne	-137.4289834288	19225.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.2
Na	-170.2665805346	20163.0	0.0	0.0	nan	20.0	129.9
Mg	-210.9317346178	19613.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.5
Al	-254.5471281310	19669.0	0.0	0.0	nan	20.0	132.9
Si	-305.3715648549	20011.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.4
P	-357.6352732961	18103.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.4
S	-372.9746349053	19847.0	0.0	0.0	nan	20.0	125.0
Cl	-482.7395110662	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	131.0
Ar	-551.2178713776	19591.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.8

Table 788: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821403	20065.0	6.0	6.0	nan	20.0	108.8
He	-3.1805188939	19393.0	8.0	8.0	nan	20.0	129.2
Li	-8.1481840838	20189.0	8.0	8.0	nan	20.0	132.0
Be	-15.9681458319	20076.0	7.0	7.0	nan	20.0	106.2
B	-26.9682921878	19774.0	9.0	9.0	nan	20.0	106.8
C	-41.4274541120	19384.0	13.0	13.0	nan	20.0	124.0
N	-59.5906458463	20184.0	15.0	15.0	nan	20.0	129.5
O	-81.6778575728	20102.0	9.0	9.0	nan	20.0	130.4
F	-107.8896590936	19903.0	6.0	6.0	nan	20.0	89.6
Ne	-138.4110220340	19237.0	10.0	10.0	nan	20.0	112.5
Na	-173.4140595221	20172.0	7.0	7.0	nan	20.0	123.5
Mg	-213.0600659283	19623.0	8.0	8.0	nan	20.0	126.6
Al	-257.5010818236	19679.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.3
Si	-306.8811243433	20021.0	8.0	8.0	nan	20.0	112.4
P	-361.3371742724	18112.0	7.0	7.0	nan	20.0	96.2
S	-420.9999815867	19879.0	30.0	30.0	nan	20.0	130.7
Cl	-485.9947324984	20130.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.7
Ar	-556.4416088300	19608.0	15.0	15.0	nan	20.0	130.9

Table 789: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821403	40012.0	10.0	10.0	1.0	20.0	221.4
He	-3.1805188939	40013.6	11.6	11.6	1.0	20.0	238.9
Li	-8.1481840837	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	220.8
Be	-15.9681458318	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	256.0
B	-26.9682921877	40012.6	10.6	10.6	1.0	20.0	199.4
C	-41.4274541117	40019.2	17.2	17.2	1.0	20.0	208.2
N	-59.5906458460	40021.0	19.0	19.0	1.0	20.0	242.2
O	-81.6778575723	40023.6	21.6	21.6	1.0	20.0	263.8
F	-107.8896590928	40023.4	21.4	21.4	1.0	20.0	214.5
Ne	-138.4110220330	40025.0	23.0	23.0	1.0	20.0	282.6
Na	-173.4140595208	40025.2	23.2	23.2	1.0	20.0	238.6
Mg	-213.0600659265	40019.4	17.4	17.4	1.0	20.0	234.2
Al	-257.5010818214	40021.6	19.6	19.6	1.0	20.0	270.8
Si	-306.8811243404	40031.2	29.2	29.2	1.0	20.0	215.1
P	-361.3371742688	40023.2	21.2	21.2	1.0	20.0	277.9
S	-420.9999815825	40030.8	28.8	28.8	1.0	20.0	257.3
Cl	-485.9947324932	40028.2	26.2	26.2	1.0	20.0	259.5
Ar	-556.4416088239	40021.2	19.2	19.2	1.0	20.0	260.9

Table 790: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570821403	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.6
He	-3.1805188939	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	7.4
Li	-8.1481840838	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.9
Be	-15.9681458319	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.0
B	-26.9682921878	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.2
C	-41.4274541120	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.7
N	-59.5906458463	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.7
O	-81.6778575728	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
F	-107.8896590936	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.4
Ne	-138.4110220340	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	3.7
Na	-173.4140595221	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	4.3
Mg	-213.0600659283	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	2.6
Al	-257.5010818236	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.5
Si	-306.8811243433	20.0	20.0	20.0	nan	20.0	4.0
P	-361.3371742724	17.0	17.0	17.0	nan	20.0	4.8
S	-420.9999815867	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	3.8
Cl	-485.9947324984	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	6.1
Ar	-556.4416088300	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	3.6

Table 791: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570863375	220.0	220.0	220.0	2.0	20.0	4.4
He	-3.1805188939	241.0	241.0	241.0	1.0	20.0	4.0
Li	-8.1481840838	252.0	252.0	252.0	1.0	20.0	3.5
Be	-15.9681458319	273.0	273.0	273.0	2.0	20.0	3.2
B	-26.9682921878	262.0	262.0	262.0	1.0	20.0	3.9
C	-41.4274541120	264.0	264.0	264.0	1.0	20.0	3.0
N	-59.5906458463	272.0	272.0	272.0	1.0	20.0	3.5
O	-81.6778788032	276.0	276.0	276.0	2.0	20.0	3.7
F	-107.8896590936	279.0	279.0	279.0	1.0	20.0	3.2
Ne	-138.4110220340	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.7
Na	-173.4140595221	279.0	279.0	279.0	1.0	20.0	3.3
Mg	-213.0600659283	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.6
Al	-257.5010818236	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.7
Si	-306.8811243433	295.0	295.0	295.0	1.0	20.0	4.0
P	-361.3371742724	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	3.3
S	-420.9999815867	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.4
Cl	-485.9947324984	296.0	296.0	296.0	2.0	20.0	3.6
Ar	-556.4416088300	300.0	300.0	300.0	1.0	20.0	4.2

Table 792: trust region repeats

29.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6570821403	1725.6	1725.6	1725.6	1.8	20.0	446.9
cch second order	-0.6570863523	185.0	95.0	95.0	nan	20.0	6.6
diff evo	-0.6570862256	34243.2	0.0	0.0	nan	20.0	217.1
direct	-0.6547954062	20057.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.6
direct with trim	-0.6570821403	20065.0	6.0	6.0	nan	20.0	108.8
dual anneal	-0.6570821403	40012.0	10.0	10.0	1.0	20.0	221.4
trust region	-0.6570821403	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-0.6570863375	220.0	220.0	220.0	2.0	20.0	4.4

Table 793: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805271338	1640.4	1640.4	1640.4	1.8	20.0	435.7
cch second order	-3.1805189439	186.0	99.0	99.0	nan	20.0	4.1
diff evo	-3.1805261095	31561.8	0.0	0.0	nan	20.0	206.8
direct	-3.1505409359	19383.0	0.0	0.0	nan	20.0	131.2
direct with trim	-3.1805188939	19393.0	8.0	8.0	nan	20.0	129.2
dual anneal	-3.1805188939	40013.6	11.6	11.6	1.0	20.0	238.9
trust region	-3.1805188939	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	7.4
trust region repeats	-3.1805188939	241.0	241.0	241.0	1.0	20.0	4.0

Table 794: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1481958773	1521.4	1521.4	1521.4	1.2	20.0	470.4
cch second order	-8.1481840453	162.0	90.0	90.0	nan	20.0	4.1
diff evo	-8.1481763249	37055.8	0.0	0.0	nan	20.0	252.8
direct	-8.1089899946	20179.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.0
direct with trim	-8.1481840838	20189.0	8.0	8.0	nan	20.0	132.0
dual anneal	-8.1481840837	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	220.8
trust region	-8.1481840838	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.9
trust region repeats	-8.1481840838	252.0	252.0	252.0	1.0	20.0	3.5

Table 795: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9681605868	1539.8	1539.8	1539.8	1.4	20.0	360.5
cch second order	-15.9681458224	173.0	94.0	94.0	nan	20.0	4.2
diff evo	-15.9681352575	39901.2	0.0	0.0	nan	20.0	260.8
direct	-15.9185214481	20067.0	0.0	0.0	nan	20.0	108.3
direct with trim	-15.9681458319	20076.0	7.0	7.0	nan	20.0	106.2
dual anneal	-15.9681458318	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	256.0
trust region	-15.9681458319	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-15.9681458319	273.0	273.0	273.0	2.0	20.0	3.2

Table 796: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9683093237	1534.0	1534.0	1534.0	1.4	20.0	470.8
cch second order	-26.9682921846	180.0	98.0	98.0	nan	20.0	6.6
diff evo	-26.9682761743	39934.0	0.0	0.0	nan	20.0	253.1
direct	-26.7641236007	19763.0	0.0	0.0	nan	20.0	123.6
direct with trim	-26.9682921878	19774.0	9.0	9.0	nan	20.0	106.8
dual anneal	-26.9682921877	40012.6	10.6	10.6	1.0	20.0	199.4
trust region	-26.9682921878	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.2
trust region repeats	-26.9682921878	262.0	262.0	262.0	1.0	20.0	3.9

Table 797: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4274541120	1595.2	1595.2	1595.2	1.6	20.0	365.9
cch second order	-41.4274541760	222.0	113.0	113.0	nan	20.0	6.1
diff evo	-41.4273828221	42877.8	0.0	0.0	nan	20.0	259.0
direct	-41.0296581438	19369.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.6
direct with trim	-41.4274541120	19384.0	13.0	13.0	nan	20.0	124.0
dual anneal	-41.4274541117	40019.2	17.2	17.2	1.0	20.0	208.2
trust region	-41.4274541120	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-41.4274541120	264.0	264.0	264.0	1.0	20.0	3.0

Table 798: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5906458463	1585.6	1585.6	1585.6	1.0	20.0	361.3
cch second order	-59.5906458042	226.0	120.0	120.0	nan	20.0	6.0
diff evo	-59.5905502565	40057.0	0.0	0.0	nan	20.0	234.4
direct	-58.3376577260	20167.0	0.0	0.0	nan	20.0	123.7
direct with trim	-59.5906458463	20184.0	15.0	15.0	nan	20.0	129.5
dual anneal	-59.5906458460	40021.0	19.0	19.0	1.0	20.0	242.2
trust region	-59.5906458463	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-59.5906458463	272.0	272.0	272.0	1.0	20.0	3.5

Table 799: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6778575728	1603.2	1603.2	1603.2	1.0	20.0	392.6
cch second order	-81.6778575838	173.0	93.0	93.0	nan	20.0	5.4
diff evo	-81.6778011837	44042.2	0.0	0.0	nan	20.0	211.0
direct	-81.1137721684	20091.0	0.0	0.0	nan	20.0	128.3
direct with trim	-81.6778575728	20102.0	9.0	9.0	nan	20.0	130.4
dual anneal	-81.6778575723	40023.6	21.6	21.6	1.0	20.0	263.8
trust region	-81.6778575728	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-81.6778788032	276.0	276.0	276.0	2.0	20.0	3.7

Table 800: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8896590936	1640.8	1640.8	1640.8	1.0	20.0	460.2
cch second order	-103.4485654131	379.0	194.0	194.0	nan	20.0	6.3
diff evo	-107.8896151145	40458.8	0.0	0.0	nan	20.0	274.2
direct	-107.5493821712	19895.0	0.0	0.0	nan	20.0	128.5
direct with trim	-107.8896590936	19903.0	6.0	6.0	nan	20.0	89.6
dual anneal	-107.8896590928	40023.4	21.4	21.4	1.0	20.0	214.5
trust region	-107.8896590936	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.4
trust region repeats	-107.8896590936	279.0	279.0	279.0	1.0	20.0	3.2

Table 801: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4110220340	1670.4	1670.4	1670.4	1.0	20.0	503.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-138.4107991542	40352.2	0.0	0.0	nan	20.0	255.6
direct	-137.4289834288	19225.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.2
direct with trim	-138.4110220340	19237.0	10.0	10.0	nan	20.0	112.5
dual anneal	-138.4110220330	40025.0	23.0	23.0	1.0	20.0	282.6
trust region	-138.4110220340	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-138.4110220340	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.7

Table 802: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4140595221	1706.4	1706.4	1706.4	1.2	20.0	415.7
cch second order	-173.4140594674	185.0	100.0	100.0	nan	20.0	6.4
diff evo	-173.4138509561	39753.6	0.0	0.0	nan	20.0	233.0
direct	-170.2665805346	20163.0	0.0	0.0	nan	20.0	129.9
direct with trim	-173.4140595221	20172.0	7.0	7.0	nan	20.0	123.5
dual anneal	-173.4140595208	40025.2	23.2	23.2	1.0	20.0	238.6
trust region	-173.4140595221	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	4.3
trust region repeats	-173.4140595221	279.0	279.0	279.0	1.0	20.0	3.3

Table 803: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0600659283	1737.4	1737.4	1737.4	1.0	20.0	412.2
cch second order	-213.0600659392	223.0	116.0	116.0	nan	20.0	6.7
diff evo	-213.0599504936	44337.4	0.0	0.0	nan	20.0	306.8
direct	-210.9317346178	19613.0	0.0	0.0	nan	20.0	121.5
direct with trim	-213.0600659283	19623.0	8.0	8.0	nan	20.0	126.6
dual anneal	-213.0600659265	40019.4	17.4	17.4	1.0	20.0	234.2
trust region	-213.0600659283	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-213.0600659283	288.0	288.0	288.0	1.0	20.0	3.6

Table 804: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5010818236	1831.2	1831.2	1831.2	1.2	20.0	537.7
cch second order	-257.5100648820	458.0	247.0	247.0	nan	20.0	6.5
diff evo	-257.5010495558	46822.0	0.0	0.0	nan	20.0	270.8
direct	-254.5471281310	19669.0	0.0	0.0	nan	20.0	132.9
direct with trim	-257.5010818236	19679.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.3
dual anneal	-257.5010818214	40021.6	19.6	19.6	1.0	20.0	270.8
trust region	-257.5010818236	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-257.5010818236	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.7

Table 805: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8811435810	1866.0	1866.0	1866.0	1.4	20.0	603.3
cch second order	-306.8811243697	211.0	112.0	112.0	nan	20.0	4.3
diff evo	-306.8809758997	44673.6	0.0	0.0	nan	20.0	270.3
direct	-305.3715648549	20011.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.4
direct with trim	-306.8811243433	20021.0	8.0	8.0	nan	20.0	112.4
dual anneal	-306.8811243404	40031.2	29.2	29.2	1.0	20.0	215.1
trust region	-306.8811243433	20.0	20.0	20.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-306.8811243433	295.0	295.0	295.0	1.0	20.0	4.0

Table 806: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3371742724	1893.4	1893.4	1893.4	1.0	20.0	507.3
cch second order	-361.3371742586	240.0	125.0	125.0	nan	20.0	4.8
diff evo	-361.3369574978	44944.2	0.0	0.0	nan	20.0	280.5
direct	-357.6352732961	18103.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.4
direct with trim	-361.3371742724	18112.0	7.0	7.0	nan	20.0	96.2
dual anneal	-361.3371742688	40023.2	21.2	21.2	1.0	20.0	277.9
trust region	-361.3371742724	17.0	17.0	17.0	nan	20.0	4.8
trust region repeats	-361.3371742724	292.0	292.0	292.0	1.0	20.0	3.3

Table 807: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.9999815867	1920.6	1920.6	1920.6	1.2	20.0	452.6
cch second order	-420.9999815719	288.0	144.0	144.0	nan	20.0	7.5
diff evo	-420.9997797842	48626.0	0.0	0.0	nan	20.0	291.4
direct	-372.9746349053	19847.0	0.0	0.0	nan	20.0	125.0
direct with trim	-420.9999815867	19879.0	30.0	30.0	nan	20.0	130.7
dual anneal	-420.9999815825	40030.8	28.8	28.8	1.0	20.0	257.3
trust region	-420.9999815867	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	3.8
trust region repeats	-420.9999815867	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.4

Table 808: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9947324984	1948.8	1948.8	1948.8	1.0	20.0	539.1
cch second order	-485.9947324795	440.0	209.0	209.0	nan	20.0	10.0
diff evo	-485.9944860203	42607.2	0.0	0.0	nan	20.0	237.3
direct	-482.7395110662	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	131.0
direct with trim	-485.9947324984	20130.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.7
dual anneal	-485.9947324932	40028.2	26.2	26.2	1.0	20.0	259.5
trust region	-485.9947324984	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	6.1
trust region repeats	-485.9947324984	296.0	296.0	296.0	2.0	20.0	3.6

Table 809: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4416088300	2060.6	2060.6	2060.6	1.0	20.0	528.8
cch second order	-556.4416215500	189.0	100.0	100.0	nan	20.0	4.4
diff evo	-556.4414476431	46904.0	0.0	0.0	nan	20.0	257.1
direct	-551.2178713776	19591.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.8
direct with trim	-556.4416088300	19608.0	15.0	15.0	nan	20.0	130.9
dual anneal	-556.4416088239	40021.2	19.2	19.2	1.0	20.0	260.9
trust region	-556.4416088300	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	3.6
trust region repeats	-556.4416088300	300.0	300.0	300.0	1.0	20.0	4.2

Table 810: Ar

29.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6570863523
He	basin hopping	-3.1805271338
Li	basin hopping	-8.1481958773
Be	basin hopping	-15.9681605868
B	basin hopping	-26.9683093237
C	cch second order	-41.4274541760
N	basin hopping	-59.5906458463
O	trust region repeats	-81.6778788032
F	basin hopping	-107.8896590936
Ne	trust region repeats	-138.4110220340
Na	basin hopping	-173.4140595221
Mg	cch second order	-213.0600659392
Al	cch second order	-257.5100648820
Si	basin hopping	-306.8811435810
P	trust region repeats	-361.3371742724
S	basin hopping	-420.9999815867
Cl	trust region repeats	-485.9947324984
Ar	cch second order	-556.4416215500

Table 811: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.1	13.1	13.1	nan	-181.0860383667	4.0
cch second order	242.4	126.4	126.4	nan	-183.3356220496	5.9
trust region repeats	275.2	275.2	275.2	1.2	-181.0860397794	3.6
basin hopping	1723.4	1723.4	1723.4	1.2	-181.0860423202	459.1
direct	19739.6	0.0	0.0	nan	-176.9855957671	121.8
direct with trim	19751.7	10.2	10.2	nan	-181.0860383667	117.3
dual anneal	40021.1	19.1	19.1	1.0	-181.0860383650	242.3
diff evo	41619.6	0.0	0.0	nan	-181.0859359152	254.0

Table 812: Average (all systems)

30   20s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

30.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 813: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660977877	2046.0	2046.0	2046.0	2.4	20.0	509.1
He	-3.2215078322	1429.2	1429.2	1429.2	1.8	20.0	519.6
Li	-8.2485265167	1462.6	1462.6	1462.6	1.0	20.0	455.0
Be	-16.1578877923	1516.0	1516.0	1516.0	1.2	20.0	416.7
B	-27.2794029295	1517.6	1517.6	1517.6	1.2	20.0	398.7
C	-41.8933571998	1530.6	1530.6	1530.6	1.0	20.0	424.2
N	-60.2460598522	1571.2	1571.2	1571.2	1.2	20.0	423.6
O	-82.5585438007	1600.4	1600.4	1600.4	1.6	20.0	493.6
F	-109.0323029662	1626.6	1626.6	1626.6	1.0	20.0	491.4
Ne	-139.8531284413	1674.4	1674.4	1674.4	1.0	20.0	428.4
Na	-175.1938928964	1670.4	1670.4	1670.4	1.2	20.0	451.2
Mg	-215.2164895440	1771.4	1771.4	1771.4	1.0	20.0	500.5
Al	-260.0736410512	1803.4	1803.4	1803.4	1.0	20.0	522.8
Si	-309.9099062323	1830.2	1830.2	1830.2	1.2	20.0	492.7
P	-364.8627902336	1932.2	1932.2	1932.2	1.4	20.0	606.9
S	-425.0635519630	1927.0	1927.0	1927.0	1.2	20.0	509.7
Cl	-490.6377955344	2009.2	2009.2	2009.2	1.6	20.0	740.8
Ar	-561.7061385524	1995.2	1995.2	1995.2	1.2	20.0	526.2

Table 814: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660977967	167.0	85.0	85.0	nan	20.0	6.3
He	-3.2215078933	200.0	106.0	106.0	nan	20.0	4.3
Li	-8.2485265344	187.0	100.0	100.0	nan	20.0	3.9
Be	-16.1578877588	164.0	88.0	88.0	nan	20.0	5.9
B	-27.2793857487	192.0	100.0	100.0	nan	20.0	4.4
C	-41.8933571726	164.0	90.0	90.0	nan	20.0	3.5
N	-60.2460598188	168.0	94.0	94.0	nan	20.0	3.8
O	-82.5585438627	173.0	95.0	95.0	nan	20.0	4.1
F	-109.0409821324	397.0	211.0	211.0	nan	20.0	8.2
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-175.1938696141	188.0	101.0	101.0	nan	20.0	3.9
Mg	-215.2164895843	204.0	110.0	110.0	nan	20.0	4.4
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-309.9099061754	211.0	112.0	112.0	nan	20.0	6.5
P	-364.8627901795	347.0	167.0	167.0	nan	20.0	5.3
S	-425.0635322718	282.0	143.0	143.0	nan	20.0	5.3
Cl	-490.6377772382	242.0	125.0	125.0	nan	20.0	6.9
Ar	-561.7061385424	202.0	105.0	105.0	nan	20.0	4.0

Table 815: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660975322	32004.6	0.0	0.0	nan	20.0	201.9
He	-3.2215071029	32947.6	0.0	0.0	nan	20.0	196.9
Li	-8.2485365305	38613.8	0.0	0.0	nan	20.0	226.8
Be	-16.1578794796	38203.8	0.0	0.0	nan	20.0	234.3
B	-27.2793603504	39884.8	0.0	0.0	nan	20.0	221.9
C	-41.8933048563	41721.6	0.0	0.0	nan	20.0	243.0
N	-60.2459603122	42656.4	0.0	0.0	nan	20.0	234.8
O	-82.5584302462	42861.4	0.0	0.0	nan	20.0	260.9
F	-109.0322233137	44731.0	0.0	0.0	nan	20.0	257.0
Ne	-139.8530640785	40393.2	0.0	0.0	nan	20.0	247.8
Na	-175.1938538722	42361.2	0.0	0.0	nan	20.0	282.0
Mg	-215.2162409877	37875.8	0.0	0.0	nan	20.0	214.7
Al	-260.0734594090	38687.6	0.0	0.0	nan	20.0	202.1
Si	-309.9097834026	49044.2	0.0	0.0	nan	20.0	299.6
P	-364.8625702641	45895.4	0.0	0.0	nan	20.0	247.6
S	-425.0633489647	48166.8	0.0	0.0	nan	20.0	283.5
Cl	-490.6376803875	48437.4	0.0	0.0	nan	20.0	245.1
Ar	-561.7058742378	40188.2	0.0	0.0	nan	20.0	229.8

Table 816: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6639382849	20051.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.0
He	-3.2098567520	19379.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.1
Li	-8.2349856930	18643.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.8
Be	-16.0799451516	20021.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.3
B	-27.0811832635	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.0
C	-41.5311782324	20191.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.9
N	-58.9569966234	20209.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.6
O	-81.9805888764	20135.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.6
F	-108.6060680045	19193.0	0.0	0.0	nan	20.0	124.6
Ne	-138.8553584168	18999.0	0.0	0.0	nan	20.0	103.4
Na	-174.2458957612	20063.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.0
Mg	-212.9319866212	19855.0	0.0	0.0	nan	20.0	135.0
Al	-257.0313791535	20015.0	0.0	0.0	nan	20.0	124.5
Si	-306.6301257553	19731.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.8
P	-361.2488438527	19055.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.4
S	-377.3006148089	18971.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.8
Cl	-486.5345682897	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.1
Ar	-556.0572708951	19979.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.2

Table 817: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937730	20059.0	6.0	6.0	nan	20.0	139.0
He	-3.2214998452	19388.0	7.0	7.0	nan	20.0	101.2
Li	-8.2485265167	18652.0	7.0	7.0	nan	20.0	117.1
Be	-16.1578877923	20029.0	6.0	6.0	nan	20.0	128.2
B	-27.2793857434	20140.0	9.0	9.0	nan	20.0	111.3
C	-41.8933571998	20202.0	9.0	9.0	nan	20.0	122.1
N	-60.2460271268	20226.0	15.0	15.0	nan	20.0	136.7
O	-82.5585438007	20146.0	9.0	9.0	nan	20.0	121.5
F	-109.0323029662	19204.0	9.0	9.0	nan	20.0	118.8
Ne	-139.8531284413	19010.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.2
Na	-175.1938696506	20072.0	7.0	7.0	nan	20.0	108.6
Mg	-215.2164895440	19865.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.8
Al	-260.0736410512	20025.0	8.0	8.0	nan	20.0	128.6
Si	-309.9099062323	19740.0	7.0	7.0	nan	20.0	111.6
P	-364.8627902336	19064.0	7.0	7.0	nan	20.0	112.0
S	-425.0635323029	19003.0	30.0	30.0	nan	20.0	124.2
Cl	-490.6377772678	20130.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.2
Ar	-561.7061385524	19997.0	16.0	16.0	nan	20.0	132.5

Table 818: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937730	40012.4	10.4	10.4	1.0	20.0	245.7
He	-3.2214998452	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	277.7
Li	-8.2485265167	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	232.2
Be	-16.1578877922	40017.6	15.6	15.6	1.0	20.0	268.6
B	-27.2793857432	40020.0	18.0	18.0	1.0	20.0	248.3
C	-41.8933571996	40018.2	16.2	16.2	1.0	20.0	271.6
N	-60.2460598518	40015.6	13.6	13.6	1.0	20.0	234.0
O	-82.5585438001	40021.8	19.8	19.8	1.0	20.0	253.7
F	-109.0323029654	40018.0	16.0	16.0	1.0	20.0	247.2
Ne	-139.8531284402	40019.8	17.8	17.8	1.0	20.0	247.5
Na	-175.1938696491	40027.4	25.4	25.4	1.0	20.0	265.3
Mg	-215.2164895421	40030.6	28.6	28.6	1.0	20.0	237.0
Al	-260.0736410488	40028.6	26.6	26.6	1.0	20.0	224.1
Si	-309.9099062293	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	214.2
P	-364.8627902299	40026.4	24.4	24.4	1.0	20.0	239.4
S	-425.0635322983	40035.0	33.0	33.0	1.0	20.0	243.6
Cl	-490.6377772623	40033.4	31.4	31.4	1.0	20.0	208.2
Ar	-561.7061385459	40037.6	35.6	35.6	1.0	20.0	266.9

Table 819: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660937730	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.3
He	-3.2214998452	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.9
Li	-8.2485265167	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.4
Be	-16.1578877923	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.8
B	-27.2793857434	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.7
C	-41.8933571998	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.7
N	-60.2460598522	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.4
O	-82.5585438007	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
F	-109.0323029662	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	5.2
Ne	-139.8531284413	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.5
Na	-175.1938696506	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	3.5
Mg	-215.2164895440	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.0
Al	-260.0736410512	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	7.4
Si	-309.9099062323	20.0	20.0	20.0	nan	20.0	4.8
P	-364.8627902336	17.0	17.0	17.0	nan	20.0	2.5
S	-425.0635323029	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	5.4
Cl	-490.6377772678	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	4.1
Ar	-561.7061385524	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	2.4

Table 820: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6660977877	219.0	219.0	219.0	2.0	20.0	3.7
He	-3.2214998452	237.0	237.0	237.0	1.0	20.0	3.9
Li	-8.2485265167	249.0	249.0	249.0	1.0	20.0	3.5
Be	-16.1578877923	255.0	255.0	255.0	1.0	20.0	3.2
B	-27.2793857434	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.7
C	-41.8933571998	268.0	268.0	268.0	1.0	20.0	3.4
N	-60.2460598522	275.0	275.0	275.0	1.0	20.0	3.8
O	-82.5585438007	273.0	273.0	273.0	1.0	20.0	3.4
F	-109.0323257032	278.0	278.0	278.0	2.0	20.0	3.5
Ne	-139.8531284413	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.5
Na	-175.1938696506	286.0	286.0	286.0	1.0	20.0	3.5
Mg	-215.2164895440	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.7
Al	-260.0736410512	291.0	291.0	291.0	1.0	20.0	3.7
Si	-309.9099062323	294.0	294.0	294.0	2.0	20.0	3.7
P	-364.8627902336	290.0	290.0	290.0	1.0	20.0	3.8
S	-425.0635323029	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.4
Cl	-490.6377772678	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.4
Ar	-561.7061552360	298.0	298.0	298.0	2.0	20.0	3.4

Table 821: trust region repeats

30.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6660977877	2046.0	2046.0	2046.0	2.4	20.0	509.1
cch second order	-0.6660977967	167.0	85.0	85.0	nan	20.0	6.3
diff evo	-0.6660975322	32004.6	0.0	0.0	nan	20.0	201.9
direct	-0.6639382849	20051.0	0.0	0.0	nan	20.0	118.0
direct with trim	-0.6660937730	20059.0	6.0	6.0	nan	20.0	139.0
dual anneal	-0.6660937730	40012.4	10.4	10.4	1.0	20.0	245.7
trust region	-0.6660937730	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.3
trust region repeats	-0.6660977877	219.0	219.0	219.0	2.0	20.0	3.7

Table 822: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215078322	1429.2	1429.2	1429.2	1.8	20.0	519.6
cch second order	-3.2215078933	200.0	106.0	106.0	nan	20.0	4.3
diff evo	-3.2215071029	32947.6	0.0	0.0	nan	20.0	196.9
direct	-3.2098567520	19379.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.1
direct with trim	-3.2214998452	19388.0	7.0	7.0	nan	20.0	101.2
dual anneal	-3.2214998452	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	277.7
trust region	-3.2214998452	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.9
trust region repeats	-3.2214998452	237.0	237.0	237.0	1.0	20.0	3.9

Table 823: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2485265167	1462.6	1462.6	1462.6	1.0	20.0	455.0
cch second order	-8.2485265344	187.0	100.0	100.0	nan	20.0	3.9
diff evo	-8.2485365305	38613.8	0.0	0.0	nan	20.0	226.8
direct	-8.2349856930	18643.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.8
direct with trim	-8.2485265167	18652.0	7.0	7.0	nan	20.0	117.1
dual anneal	-8.2485265167	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	232.2
trust region	-8.2485265167	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-8.2485265167	249.0	249.0	249.0	1.0	20.0	3.5

Table 824: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1578877923	1516.0	1516.0	1516.0	1.2	20.0	416.7
cch second order	-16.1578877588	164.0	88.0	88.0	nan	20.0	5.9
diff evo	-16.1578794796	38203.8	0.0	0.0	nan	20.0	234.3
direct	-16.0799451516	20021.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.3
direct with trim	-16.1578877923	20029.0	6.0	6.0	nan	20.0	128.2
dual anneal	-16.1578877922	40017.6	15.6	15.6	1.0	20.0	268.6
trust region	-16.1578877923	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.8
trust region repeats	-16.1578877923	255.0	255.0	255.0	1.0	20.0	3.2

Table 825: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2794029295	1517.6	1517.6	1517.6	1.2	20.0	398.7
cch second order	-27.2793857487	192.0	100.0	100.0	nan	20.0	4.4
diff evo	-27.2793603504	39884.8	0.0	0.0	nan	20.0	221.9
direct	-27.0811832635	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	126.0
direct with trim	-27.2793857434	20140.0	9.0	9.0	nan	20.0	111.3
dual anneal	-27.2793857432	40020.0	18.0	18.0	1.0	20.0	248.3
trust region	-27.2793857434	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.7
trust region repeats	-27.2793857434	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.7

Table 826: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8933571998	1530.6	1530.6	1530.6	1.0	20.0	424.2
cch second order	-41.8933571726	164.0	90.0	90.0	nan	20.0	3.5
diff evo	-41.8933048563	41721.6	0.0	0.0	nan	20.0	243.0
direct	-41.5311782324	20191.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.9
direct with trim	-41.8933571998	20202.0	9.0	9.0	nan	20.0	122.1
dual anneal	-41.8933571996	40018.2	16.2	16.2	1.0	20.0	271.6
trust region	-41.8933571998	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-41.8933571998	268.0	268.0	268.0	1.0	20.0	3.4

Table 827: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2460598522	1571.2	1571.2	1571.2	1.2	20.0	423.6
cch second order	-60.2460598188	168.0	94.0	94.0	nan	20.0	3.8
diff evo	-60.2459603122	42656.4	0.0	0.0	nan	20.0	234.8
direct	-58.9569966234	20209.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.6
direct with trim	-60.2460271268	20226.0	15.0	15.0	nan	20.0	136.7
dual anneal	-60.2460598518	40015.6	13.6	13.6	1.0	20.0	234.0
trust region	-60.2460598522	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-60.2460598522	275.0	275.0	275.0	1.0	20.0	3.8

Table 828: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5585438007	1600.4	1600.4	1600.4	1.6	20.0	493.6
cch second order	-82.5585438627	173.0	95.0	95.0	nan	20.0	4.1
diff evo	-82.5584302462	42861.4	0.0	0.0	nan	20.0	260.9
direct	-81.9805888764	20135.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.6
direct with trim	-82.5585438007	20146.0	9.0	9.0	nan	20.0	121.5
dual anneal	-82.5585438001	40021.8	19.8	19.8	1.0	20.0	253.7
trust region	-82.5585438007	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-82.5585438007	273.0	273.0	273.0	1.0	20.0	3.4

Table 829: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0323029662	1626.6	1626.6	1626.6	1.0	20.0	491.4
cch second order	-109.0409821324	397.0	211.0	211.0	nan	20.0	8.2
diff evo	-109.0322233137	44731.0	0.0	0.0	nan	20.0	257.0
direct	-108.6060680045	19193.0	0.0	0.0	nan	20.0	124.6
direct with trim	-109.0323029662	19204.0	9.0	9.0	nan	20.0	118.8
dual anneal	-109.0323029654	40018.0	16.0	16.0	1.0	20.0	247.2
trust region	-109.0323029662	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	5.2
trust region repeats	-109.0323257032	278.0	278.0	278.0	2.0	20.0	3.5

Table 830: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8531284413	1674.4	1674.4	1674.4	1.0	20.0	428.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-139.8530640785	40393.2	0.0	0.0	nan	20.0	247.8
direct	-138.8553584168	18999.0	0.0	0.0	nan	20.0	103.4
direct with trim	-139.8531284413	19010.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.2
dual anneal	-139.8531284402	40019.8	17.8	17.8	1.0	20.0	247.5
trust region	-139.8531284413	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-139.8531284413	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.5

Table 831: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1938928964	1670.4	1670.4	1670.4	1.2	20.0	451.2
cch second order	-175.1938696141	188.0	101.0	101.0	nan	20.0	3.9
diff evo	-175.1938538722	42361.2	0.0	0.0	nan	20.0	282.0
direct	-174.2458957612	20063.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.0
direct with trim	-175.1938696506	20072.0	7.0	7.0	nan	20.0	108.6
dual anneal	-175.1938696491	40027.4	25.4	25.4	1.0	20.0	265.3
trust region	-175.1938696506	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	3.5
trust region repeats	-175.1938696506	286.0	286.0	286.0	1.0	20.0	3.5

Table 832: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2164895440	1771.4	1771.4	1771.4	1.0	20.0	500.5
cch second order	-215.2164895843	204.0	110.0	110.0	nan	20.0	4.4
diff evo	-215.2162409877	37875.8	0.0	0.0	nan	20.0	214.7
direct	-212.9319866212	19855.0	0.0	0.0	nan	20.0	135.0
direct with trim	-215.2164895440	19865.0	8.0	8.0	nan	20.0	107.8
dual anneal	-215.2164895421	40030.6	28.6	28.6	1.0	20.0	237.0
trust region	-215.2164895440	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-215.2164895440	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.7

Table 833: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0736410512	1803.4	1803.4	1803.4	1.0	20.0	522.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-260.0734594090	38687.6	0.0	0.0	nan	20.0	202.1
direct	-257.0313791535	20015.0	0.0	0.0	nan	20.0	124.5
direct with trim	-260.0736410512	20025.0	8.0	8.0	nan	20.0	128.6
dual anneal	-260.0736410488	40028.6	26.6	26.6	1.0	20.0	224.1
trust region	-260.0736410512	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	7.4
trust region repeats	-260.0736410512	291.0	291.0	291.0	1.0	20.0	3.7

Table 834: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9099062323	1830.2	1830.2	1830.2	1.2	20.0	492.7
cch second order	-309.9099061754	211.0	112.0	112.0	nan	20.0	6.5
diff evo	-309.9097834026	49044.2	0.0	0.0	nan	20.0	299.6
direct	-306.6301257553	19731.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.8
direct with trim	-309.9099062323	19740.0	7.0	7.0	nan	20.0	111.6
dual anneal	-309.9099062293	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	214.2
trust region	-309.9099062323	20.0	20.0	20.0	nan	20.0	4.8
trust region repeats	-309.9099062323	294.0	294.0	294.0	2.0	20.0	3.7

Table 835: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8627902336	1932.2	1932.2	1932.2	1.4	20.0	606.9
cch second order	-364.8627901795	347.0	167.0	167.0	nan	20.0	5.3
diff evo	-364.8625702641	45895.4	0.0	0.0	nan	20.0	247.6
direct	-361.2488438527	19055.0	0.0	0.0	nan	20.0	130.4
direct with trim	-364.8627902336	19064.0	7.0	7.0	nan	20.0	112.0
dual anneal	-364.8627902299	40026.4	24.4	24.4	1.0	20.0	239.4
trust region	-364.8627902336	17.0	17.0	17.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-364.8627902336	290.0	290.0	290.0	1.0	20.0	3.8

Table 836: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0635519630	1927.0	1927.0	1927.0	1.2	20.0	509.7
cch second order	-425.0635322718	282.0	143.0	143.0	nan	20.0	5.3
diff evo	-425.0633489647	48166.8	0.0	0.0	nan	20.0	283.5
direct	-377.3006148089	18971.0	0.0	0.0	nan	20.0	113.8
direct with trim	-425.0635323029	19003.0	30.0	30.0	nan	20.0	124.2
dual anneal	-425.0635322983	40035.0	33.0	33.0	1.0	20.0	243.6
trust region	-425.0635323029	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	5.4
trust region repeats	-425.0635323029	296.0	296.0	296.0	1.0	20.0	3.4

Table 837: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6377955344	2009.2	2009.2	2009.2	1.6	20.0	740.8
cch second order	-490.6377772382	242.0	125.0	125.0	nan	20.0	6.9
diff evo	-490.6376803875	48437.4	0.0	0.0	nan	20.0	245.1
direct	-486.5345682897	20119.0	0.0	0.0	nan	20.0	117.1
direct with trim	-490.6377772678	20130.0	9.0	9.0	nan	20.0	115.2
dual anneal	-490.6377772623	40033.4	31.4	31.4	1.0	20.0	208.2
trust region	-490.6377772678	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	4.1
trust region repeats	-490.6377772678	297.0	297.0	297.0	1.0	20.0	3.4

Table 838: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7061385524	1995.2	1995.2	1995.2	1.2	20.0	526.2
cch second order	-561.7061385424	202.0	105.0	105.0	nan	20.0	4.0
diff evo	-561.7058742378	40188.2	0.0	0.0	nan	20.0	229.8
direct	-556.0572708951	19979.0	0.0	0.0	nan	20.0	115.2
direct with trim	-561.7061385524	19997.0	16.0	16.0	nan	20.0	132.5
dual anneal	-561.7061385459	40037.6	35.6	35.6	1.0	20.0	266.9
trust region	-561.7061385524	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-561.7061552360	298.0	298.0	298.0	2.0	20.0	3.4

Table 839: Ar

30.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6660977967
He	cch second order	-3.2215078933
Li	diff evo	-8.2485365305
Be	basin hopping	-16.1578877923
B	basin hopping	-27.2794029295
C	basin hopping	-41.8933571998
N	basin hopping	-60.2460598522
O	cch second order	-82.5585438627
F	cch second order	-109.0409821324
Ne	basin hopping	-139.8531284413
Na	basin hopping	-175.1938928964
Mg	cch second order	-215.2164895843
Al	basin hopping	-260.0736410512
Si	basin hopping	-309.9099062323
P	basin hopping	-364.8627902336
S	basin hopping	-425.0635519630
Cl	basin hopping	-490.6377955344
Ar	trust region repeats	-561.7061552360

Table 840: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.9	12.9	12.9	nan	-182.8789405981	3.6
cch second order	218.0	114.5	114.5	nan	-180.7439282703	5.1
trust region repeats	274.2	274.2	274.2	1.2	-182.8789430112	3.6
basin hopping	1717.4	1717.4	1717.4	1.3	-182.8789456181	495.1
direct	19707.7	0.0	0.0	nan	-178.7322658020	116.7
direct with trim	19719.6	9.9	9.9	nan	-182.8789387800	119.5
dual anneal	40022.3	20.3	20.3	1.0	-182.8789405963	245.8
diff evo	41370.8	0.0	0.0	nan	-182.8788430738	240.5

Table 841: Average (all systems)

31 20s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

31.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 842: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103587	1431.2	1431.2	1431.2	1.2	20.0	455.1
He	-2.8183306274	1504.4	1504.4	1504.4	2.0	20.0	476.9
Li	-7.3226791386	1465.2	1465.2	1465.2	1.6	20.0	413.6
Be	-14.4840501283	1427.8	1427.8	1427.8	1.2	20.0	467.8
B	-24.6283618920	1487.0	1487.0	1487.0	1.2	20.0	366.3
C	-38.0332146920	1467.8	1467.8	1467.8	1.0	20.0	501.1
N	-54.9427949825	1488.2	1488.2	1488.2	1.0	20.0	444.0
O	-75.5765084297	1508.2	1508.2	1508.2	1.0	20.0	390.2
F	-100.1344990958	1510.6	1510.6	1510.6	1.0	20.0	479.8
Ne	-128.8014230403	1520.8	1520.8	1520.8	1.2	20.0	454.1
Na	-161.7491528538	1534.0	1534.0	1534.0	1.2	20.0	382.2
Mg	-199.1388039207	1553.4	1553.4	1553.4	1.4	20.0	379.5
Al	-241.1222804119	1575.8	1575.8	1575.8	1.2	20.0	497.5
Si	-287.8434960575	1557.0	1557.0	1557.0	1.0	20.0	452.2
P	-339.4393551348	1598.8	1598.8	1598.8	1.0	20.0	403.3
S	-396.0405521759	1586.8	1586.8	1586.8	1.0	20.0	456.2
Cl	-457.7722348940	1653.0	1653.0	1653.0	1.2	20.0	339.3
Ar	-524.7545603740	1663.2	1663.2	1663.2	1.0	20.0	410.9

Table 843: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103423	157.0	76.0	76.0	nan	20.0	5.0
He	-2.8183299582	127.0	71.0	71.0	nan	20.0	5.7
Li	-7.3226791708	171.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.6
Be	-14.4840517773	171.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.8
B	-24.6283618845	216.0	113.0	113.0	nan	20.0	4.1
C	-38.0332146220	168.0	94.0	94.0	nan	20.0	3.8
N	-54.9427949854	161.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.6
O	-75.5765084124	155.0	87.0	87.0	nan	20.0	5.2
F	-100.1344991157	149.0	83.0	83.0	nan	20.0	3.6
Ne	-128.8014221827	140.0	79.0	79.0	nan	20.0	5.1
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-199.1388038983	184.0	99.0	99.0	nan	20.0	3.9
Al	-241.1222803355	161.0	90.0	90.0	nan	20.0	5.2
Si	-287.8434959981	200.0	108.0	108.0	nan	20.0	4.1
P	-339.4393551222	187.0	98.0	98.0	nan	20.0	3.8
S	-396.0405488970	245.0	131.0	131.0	nan	20.0	6.9
Cl	-457.7722349255	206.0	110.0	110.0	nan	20.0	5.9
Ar	-524.7543925400	217.0	115.0	115.0	nan	20.0	4.0

Table 844: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666100976	25551.2	0.0	0.0	nan	20.0	133.6
He	-2.8183290583	31299.4	0.0	0.0	nan	20.0	130.3
Li	-7.3226746657	33939.8	0.0	0.0	nan	20.0	178.8
Be	-14.4840415194	34210.4	0.0	0.0	nan	20.0	190.4
B	-24.6283498108	32791.8	0.0	0.0	nan	20.0	188.3
C	-38.0331989296	33989.0	0.0	0.0	nan	20.0	169.4
N	-54.9427697950	36957.4	0.0	0.0	nan	20.0	182.0
O	-75.5764705297	36834.4	0.0	0.0	nan	20.0	191.7
F	-100.1344396116	33611.8	0.0	0.0	nan	20.0	180.7
Ne	-128.8013953539	38991.0	0.0	0.0	nan	20.0	216.3
Na	-161.7490948208	36227.6	0.0	0.0	nan	20.0	185.9
Mg	-199.1387344766	40967.2	0.0	0.0	nan	20.0	192.5
Al	-241.1221940170	34751.6	0.0	0.0	nan	20.0	181.5
Si	-287.8433494994	37137.8	0.0	0.0	nan	20.0	205.6
P	-339.4391347763	33767.6	0.0	0.0	nan	20.0	169.8
S	-396.0404574697	42738.4	0.0	0.0	nan	20.0	231.7
Cl	-457.7720600184	38097.2	0.0	0.0	nan	20.0	179.1
Ar	-524.7543775017	42533.4	0.0	0.0	nan	20.0	245.1

Table 845: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5660501161	18717.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.4
He	-2.8125595001	18215.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.1
Li	-7.2910974111	19341.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.3
Be	-14.4669004017	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.7
B	-24.5925662574	19745.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.3
C	-37.7911521540	18803.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.4
N	-53.9175594150	19773.0	0.0	0.0	nan	20.0	89.0
O	-75.2896127897	19339.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.6
F	-99.9616295179	19557.0	0.0	0.0	nan	20.0	95.0
Ne	-127.8798343917	19199.0	0.0	0.0	nan	20.0	93.1
Na	-160.7420921291	17669.0	0.0	0.0	nan	20.0	95.9
Mg	-197.3760725246	19401.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.3
Al	-239.7627280072	20089.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.4
Si	-286.7412445131	19673.0	0.0	0.0	nan	20.0	109.5
P	-335.2553042302	19523.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.2
S	-382.8027218886	20015.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.5
Cl	-454.8993825894	20061.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.9
Ar	-517.7476332807	20051.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.2

Table 846: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	18724.0	5.0	5.0	nan	20.0	100.1
He	-2.8183299125	18223.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.5
Li	-7.3226778377	19349.0	6.0	6.0	nan	20.0	95.9
Be	-14.4840501283	20137.0	6.0	6.0	nan	20.0	106.1
B	-24.6283618920	19753.0	6.0	6.0	nan	20.0	104.7
C	-38.0332146920	18812.0	7.0	7.0	nan	20.0	87.6
N	-54.9427949825	19787.0	12.0	12.0	nan	20.0	99.1
O	-75.5765084297	19348.0	7.0	7.0	nan	20.0	87.0
F	-100.1344990958	19565.0	6.0	6.0	nan	20.0	97.6
Ne	-128.8014221338	19210.0	9.0	9.0	nan	20.0	74.5
Na	-161.7491524385	17679.0	8.0	8.0	nan	20.0	76.7
Mg	-199.1388039207	19410.0	7.0	7.0	nan	20.0	93.5
Al	-241.1222804119	20098.0	7.0	7.0	nan	20.0	102.2
Si	-287.8434960575	19686.0	11.0	11.0	nan	20.0	92.5
P	-339.4393551348	19532.0	7.0	7.0	nan	20.0	90.3
S	-396.0405521759	20034.0	17.0	17.0	nan	20.0	111.4
Cl	-457.7722348940	20071.0	8.0	8.0	nan	20.0	86.6
Ar	-524.7545603740	20067.0	14.0	14.0	nan	20.0	109.5

Table 847: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	40010.0	8.0	8.0	1.0	20.0	179.8
He	-2.8183299125	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	206.5
Li	-7.3226778377	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	169.4
Be	-14.4840501282	40013.6	11.6	11.6	1.0	20.0	181.7
B	-24.6283618920	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	194.0
C	-38.0332146919	40015.8	13.8	13.8	1.0	20.0	219.7
N	-54.9427949823	40014.6	12.6	12.6	1.0	20.0	214.1
O	-75.5765084294	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	174.9
F	-100.1344990954	40015.6	13.6	13.6	1.0	20.0	195.5
Ne	-128.8014221333	40023.8	21.8	21.8	1.0	20.0	191.5
Na	-161.7491524378	40020.2	18.2	18.2	1.0	20.0	185.0
Mg	-199.1388039198	40020.8	18.8	18.8	1.0	20.0	208.1
Al	-241.1222804108	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	181.1
Si	-287.8434960561	40027.4	25.4	25.4	1.0	20.0	214.6
P	-339.4393551330	40023.4	21.4	21.4	1.0	20.0	196.8
S	-396.0405521738	40026.4	24.4	24.4	1.0	20.0	211.3
Cl	-457.7722348914	40035.2	33.2	33.2	1.0	20.0	196.4
Ar	-524.7545603709	40030.4	28.4	28.4	1.0	20.0	165.3

Table 848: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
He	-2.8183299125	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
Li	-7.3226778377	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.4
Be	-14.4840501283	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
B	-24.6283618920	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.4
C	-38.0332146920	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.5
N	-54.9427949825	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.9
O	-75.5765084297	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.7
F	-100.1344990958	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	2.5
Ne	-128.8014221338	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.5
Na	-161.7491524385	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.1
Mg	-199.1388039206	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	2.5
Al	-241.1222804119	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.6
Si	-287.8434960575	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.5
P	-339.4393551348	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.4
S	-396.0405521759	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	2.6
Cl	-457.7722348940	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.7
Ar	-524.7545603740	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.3

Table 849: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666103579	220.0	220.0	220.0	1.0	20.0	4.6
He	-2.8183299125	230.0	230.0	230.0	1.0	20.0	3.6
Li	-7.3226778377	238.0	238.0	238.0	1.0	20.0	3.3
Be	-14.4840501283	246.0	246.0	246.0	1.0	20.0	3.7
B	-24.6283637133	257.0	257.0	257.0	2.0	20.0	3.5
C	-38.0332146920	258.0	258.0	258.0	1.0	20.0	3.7
N	-54.9427949825	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.3
O	-75.5765084297	266.0	266.0	266.0	1.0	20.0	3.4
F	-100.1345003991	272.0	272.0	272.0	2.0	20.0	3.6
Ne	-128.8014221338	276.0	276.0	276.0	1.0	20.0	3.5
Na	-161.7491524385	278.0	278.0	278.0	1.0	20.0	3.4
Mg	-199.1388039206	277.0	277.0	277.0	1.0	20.0	3.6
Al	-241.1222804119	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.4
Si	-287.8434960575	278.0	278.0	278.0	1.0	20.0	3.4
P	-339.4393551348	283.0	283.0	283.0	1.0	20.0	3.5
S	-396.0405521759	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.9
Cl	-457.7722348940	287.0	287.0	287.0	1.0	20.0	3.9
Ar	-524.7545603740	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	4.2

Table 850: trust region repeats

31.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666103587	1431.2	1431.2	1431.2	1.2	20.0	455.1
cch second order	-0.5666103423	157.0	76.0	76.0	nan	20.0	5.0
diff evo	-0.5666100976	25551.2	0.0	0.0	nan	20.0	133.6
direct	-0.5660501161	18717.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.4
direct with trim	-0.5666103579	18724.0	5.0	5.0	nan	20.0	100.1
dual anneal	-0.5666103579	40010.0	8.0	8.0	1.0	20.0	179.8
trust region	-0.5666103579	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-0.5666103579	220.0	220.0	220.0	1.0	20.0	4.6

Table 851: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183306274	1504.4	1504.4	1504.4	2.0	20.0	476.9
cch second order	-2.8183299582	127.0	71.0	71.0	nan	20.0	5.7
diff evo	-2.8183290583	31299.4	0.0	0.0	nan	20.0	130.3
direct	-2.8125595001	18215.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.1
direct with trim	-2.8183299125	18223.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.5
dual anneal	-2.8183299125	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	206.5
trust region	-2.8183299125	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-2.8183299125	230.0	230.0	230.0	1.0	20.0	3.6

Table 852: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3226791386	1465.2	1465.2	1465.2	1.6	20.0	413.6
cch second order	-7.3226791708	171.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.6
diff evo	-7.3226746657	33939.8	0.0	0.0	nan	20.0	178.8
direct	-7.2910974111	19341.0	0.0	0.0	nan	20.0	98.3
direct with trim	-7.3226778377	19349.0	6.0	6.0	nan	20.0	95.9
dual anneal	-7.3226778377	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	169.4
trust region	-7.3226778377	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-7.3226778377	238.0	238.0	238.0	1.0	20.0	3.3

Table 853: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4840501283	1427.8	1427.8	1427.8	1.2	20.0	467.8
cch second order	-14.4840517773	171.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.8
diff evo	-14.4840415194	34210.4	0.0	0.0	nan	20.0	190.4
direct	-14.4669004017	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.7
direct with trim	-14.4840501283	20137.0	6.0	6.0	nan	20.0	106.1
dual anneal	-14.4840501282	40013.6	11.6	11.6	1.0	20.0	181.7
trust region	-14.4840501283	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
trust region repeats	-14.4840501283	246.0	246.0	246.0	1.0	20.0	3.7

Table 854: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6283618920	1487.0	1487.0	1487.0	1.2	20.0	366.3
cch second order	-24.6283618845	216.0	113.0	113.0	nan	20.0	4.1
diff evo	-24.6283498108	32791.8	0.0	0.0	nan	20.0	188.3
direct	-24.5925662574	19745.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.3
direct with trim	-24.6283618920	19753.0	6.0	6.0	nan	20.0	104.7
dual anneal	-24.6283618920	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	194.0
trust region	-24.6283618920	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-24.6283637133	257.0	257.0	257.0	2.0	20.0	3.5

Table 855: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332146920	1467.8	1467.8	1467.8	1.0	20.0	501.1
cch second order	-38.0332146220	168.0	94.0	94.0	nan	20.0	3.8
diff evo	-38.0331989296	33989.0	0.0	0.0	nan	20.0	169.4
direct	-37.7911521540	18803.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.4
direct with trim	-38.0332146920	18812.0	7.0	7.0	nan	20.0	87.6
dual anneal	-38.0332146919	40015.8	13.8	13.8	1.0	20.0	219.7
trust region	-38.0332146920	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.5
trust region repeats	-38.0332146920	258.0	258.0	258.0	1.0	20.0	3.7

Table 856: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9427949825	1488.2	1488.2	1488.2	1.0	20.0	444.0
cch second order	-54.9427949854	161.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.6
diff evo	-54.9427697950	36957.4	0.0	0.0	nan	20.0	182.0
direct	-53.9175594150	19773.0	0.0	0.0	nan	20.0	89.0
direct with trim	-54.9427949825	19787.0	12.0	12.0	nan	20.0	99.1
dual anneal	-54.9427949823	40014.6	12.6	12.6	1.0	20.0	214.1
trust region	-54.9427949825	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	3.9
trust region repeats	-54.9427949825	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.3

Table 857: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5765084297	1508.2	1508.2	1508.2	1.0	20.0	390.2
cch second order	-75.5765084124	155.0	87.0	87.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-75.5764705297	36834.4	0.0	0.0	nan	20.0	191.7
direct	-75.2896127897	19339.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.6
direct with trim	-75.5765084297	19348.0	7.0	7.0	nan	20.0	87.0
dual anneal	-75.5765084294	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	174.9
trust region	-75.5765084297	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-75.5765084297	266.0	266.0	266.0	1.0	20.0	3.4

Table 858: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1344990958	1510.6	1510.6	1510.6	1.0	20.0	479.8
cch second order	-100.1344991157	149.0	83.0	83.0	nan	20.0	3.6
diff evo	-100.1344396116	33611.8	0.0	0.0	nan	20.0	180.7
direct	-99.9616295179	19557.0	0.0	0.0	nan	20.0	95.0
direct with trim	-100.1344990958	19565.0	6.0	6.0	nan	20.0	97.6
dual anneal	-100.1344990954	40015.6	13.6	13.6	1.0	20.0	195.5
trust region	-100.1344990958	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-100.1345003991	272.0	272.0	272.0	2.0	20.0	3.6

Table 859: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8014230403	1520.8	1520.8	1520.8	1.2	20.0	454.1
cch second order	-128.8014221827	140.0	79.0	79.0	nan	20.0	5.1
diff evo	-128.8013953539	38991.0	0.0	0.0	nan	20.0	216.3
direct	-127.8798343917	19199.0	0.0	0.0	nan	20.0	93.1
direct with trim	-128.8014221338	19210.0	9.0	9.0	nan	20.0	74.5
dual anneal	-128.8014221333	40023.8	21.8	21.8	1.0	20.0	191.5
trust region	-128.8014221338	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-128.8014221338	276.0	276.0	276.0	1.0	20.0	3.5

Table 860: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7491528538	1534.0	1534.0	1534.0	1.2	20.0	382.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-161.7490948208	36227.6	0.0	0.0	nan	20.0	185.9
direct	-160.7420921291	17669.0	0.0	0.0	nan	20.0	95.9
direct with trim	-161.7491524385	17679.0	8.0	8.0	nan	20.0	76.7
dual anneal	-161.7491524378	40020.2	18.2	18.2	1.0	20.0	185.0
trust region	-161.7491524385	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.1
trust region repeats	-161.7491524385	278.0	278.0	278.0	1.0	20.0	3.4

Table 861: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1388039207	1553.4	1553.4	1553.4	1.4	20.0	379.5
cch second order	-199.1388038983	184.0	99.0	99.0	nan	20.0	3.9
diff evo	-199.1387344766	40967.2	0.0	0.0	nan	20.0	192.5
direct	-197.3760725246	19401.0	0.0	0.0	nan	20.0	111.3
direct with trim	-199.1388039207	19410.0	7.0	7.0	nan	20.0	93.5
dual anneal	-199.1388039198	40020.8	18.8	18.8	1.0	20.0	208.1
trust region	-199.1388039206	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-199.1388039206	277.0	277.0	277.0	1.0	20.0	3.6

Table 862: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1222804119	1575.8	1575.8	1575.8	1.2	20.0	497.5
cch second order	-241.1222803355	161.0	90.0	90.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-241.1221940170	34751.6	0.0	0.0	nan	20.0	181.5
direct	-239.7627280072	20089.0	0.0	0.0	nan	20.0	104.4
direct with trim	-241.1222804119	20098.0	7.0	7.0	nan	20.0	102.2
dual anneal	-241.1222804108	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	181.1
trust region	-241.1222804119	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	3.6
trust region repeats	-241.1222804119	280.0	280.0	280.0	1.0	20.0	3.4

Table 863: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8434960575	1557.0	1557.0	1557.0	1.0	20.0	452.2
cch second order	-287.8434959981	200.0	108.0	108.0	nan	20.0	4.1
diff evo	-287.8433494994	37137.8	0.0	0.0	nan	20.0	205.6
direct	-286.7412445131	19673.0	0.0	0.0	nan	20.0	109.5
direct with trim	-287.8434960575	19686.0	11.0	11.0	nan	20.0	92.5
dual anneal	-287.8434960561	40027.4	25.4	25.4	1.0	20.0	214.6
trust region	-287.8434960575	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.5
trust region repeats	-287.8434960575	278.0	278.0	278.0	1.0	20.0	3.4

Table 864: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4393551348	1598.8	1598.8	1598.8	1.0	20.0	403.3
cch second order	-339.4393551222	187.0	98.0	98.0	nan	20.0	3.8
diff evo	-339.4391347763	33767.6	0.0	0.0	nan	20.0	169.8
direct	-335.2553042302	19523.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.2
direct with trim	-339.4393551348	19532.0	7.0	7.0	nan	20.0	90.3
dual anneal	-339.4393551330	40023.4	21.4	21.4	1.0	20.0	196.8
trust region	-339.4393551348	15.0	15.0	15.0	nan	20.0	4.4
trust region repeats	-339.4393551348	283.0	283.0	283.0	1.0	20.0	3.5

Table 865: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0405521759	1586.8	1586.8	1586.8	1.0	20.0	456.2
cch second order	-396.0405488970	245.0	131.0	131.0	nan	20.0	6.9
diff evo	-396.0404574697	42738.4	0.0	0.0	nan	20.0	231.7
direct	-382.8027218886	20015.0	0.0	0.0	nan	20.0	107.5
direct with trim	-396.0405521759	20034.0	17.0	17.0	nan	20.0	111.4
dual anneal	-396.0405521738	40026.4	24.4	24.4	1.0	20.0	211.3
trust region	-396.0405521759	14.0	14.0	14.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-396.0405521759	289.0	289.0	289.0	1.0	20.0	3.9

Table 866: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7722348940	1653.0	1653.0	1653.0	1.2	20.0	339.3
cch second order	-457.7722349255	206.0	110.0	110.0	nan	20.0	5.9
diff evo	-457.7720600184	38097.2	0.0	0.0	nan	20.0	179.1
direct	-454.8993825894	20061.0	0.0	0.0	nan	20.0	106.9
direct with trim	-457.7722348940	20071.0	8.0	8.0	nan	20.0	86.6
dual anneal	-457.7722348914	40035.2	33.2	33.2	1.0	20.0	196.4
trust region	-457.7722348940	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.7
trust region repeats	-457.7722348940	287.0	287.0	287.0	1.0	20.0	3.9

Table 867: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7545603740	1663.2	1663.2	1663.2	1.0	20.0	410.9
cch second order	-524.7543925400	217.0	115.0	115.0	nan	20.0	4.0
diff evo	-524.7543775017	42533.4	0.0	0.0	nan	20.0	245.1
direct	-517.7476332807	20051.0	0.0	0.0	nan	20.0	101.2
direct with trim	-524.7545603740	20067.0	14.0	14.0	nan	20.0	109.5
dual anneal	-524.7545603709	40030.4	28.4	28.4	1.0	20.0	165.3
trust region	-524.7545603740	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.3
trust region repeats	-524.7545603740	294.0	294.0	294.0	1.0	20.0	4.2

Table 868: Ar

31.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.5666103587
He	basin hopping	-2.8183306274
Li	cch second order	-7.3226791708
Be	cch second order	-14.4840517773
B	trust region repeats	-24.6283637133
C	trust region repeats	-38.0332146920
N	cch second order	-54.9427949854
O	trust region	-75.5765084297
F	trust region repeats	-100.1345003991
Ne	basin hopping	-128.8014230403
Na	basin hopping	-161.7491528538
Mg	basin hopping	-199.1388039207
Al	basin hopping	-241.1222804119
Si	basin hopping	-287.8434960575
P	basin hopping	-339.4393551348
S	basin hopping	-396.0405521759
Cl	cch second order	-457.7722349255
Ar	basin hopping	-524.7545603740

Table 869: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.8	11.8	11.8	nan	-169.7316058261	3.2
cch second order	177.4	95.7	95.7	nan	-170.2011520099	4.5
trust region repeats	266.1	266.1	266.1	1.1	-169.7316059997	3.6
basin hopping	1529.6	1529.6	1529.6	1.2	-169.7316060116	431.7
direct	19405.6	0.0	0.0	nan	-167.7720078399	101.7
direct with trim	19415.8	8.3	8.3	nan	-169.7316058261	95.0
diff evo	35799.8	0.0	0.0	nan	-169.7315378862	186.3
dual anneal	40018.9	16.9	16.9	1.0	-169.7316058252	193.7

Table 870: Average (all systems)

32   20s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

32.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047266	903.0	903.0	0.0	nan	20.0	5.0
He	-1.4774416562	1040.0	1040.0	0.0	nan	20.0	8.7
Li	-4.1054087677	1064.0	1064.0	0.0	nan	20.0	8.0
Be	-8.4921589804	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	8.2
B	-14.9258416389	1039.0	1039.0	0.0	nan	20.0	5.6
C	-23.6568149647	1023.0	1023.0	0.0	nan	20.0	8.1
N	-34.9083535369	1013.0	1013.0	0.0	nan	20.0	7.7
O	-48.8831195417	1022.0	1022.0	0.0	nan	20.0	5.4
F	-65.7674347910	1028.0	1028.0	0.0	nan	20.0	8.0
Ne	-85.7342761205	1037.0	1037.0	0.0	nan	20.0	7.5
Na	-108.9454705309	1047.0	1047.0	0.0	nan	20.0	5.5
Mg	-135.5533594590	1045.0	1045.0	0.0	nan	20.0	8.6
Al	-165.7020951455	1048.0	1048.0	0.0	nan	20.0	8.5
Si	-199.5286729858	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	8.6
P	-237.1637689140	1052.0	1052.0	0.0	nan	20.0	8.5
S	-278.7324293272	1052.0	1052.0	0.0	nan	20.0	7.6
Cl	-324.3546471919	1056.0	1056.0	0.0	nan	20.0	5.6
Ar	-374.1458487451	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	7.9

Table 871: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047375	1495.6	1495.6	1495.6	1.2	20.0	466.8
He	-1.4774416773	1465.2	1465.2	1465.2	1.0	20.0	535.2
Li	-4.1054087828	1414.0	1414.0	1414.0	1.0	20.0	452.5
Be	-8.4921589918	1449.2	1449.2	1449.2	1.0	20.0	439.1
B	-14.9258416484	1412.6	1412.6	1412.6	1.0	20.0	396.5
C	-23.6568149732	1413.4	1413.4	1413.4	1.2	20.0	373.6
N	-34.9083535452	1408.4	1408.4	1408.4	1.2	20.0	410.3
O	-48.8831195507	1410.8	1410.8	1410.8	1.0	20.0	428.1
F	-65.7674348016	1433.4	1433.4	1433.4	1.2	20.0	403.0
Ne	-85.7342761338	1470.4	1470.4	1470.4	1.2	20.0	296.2
Na	-108.9454705488	1424.6	1424.6	1424.6	1.0	20.0	453.8
Mg	-135.5533594836	1449.0	1449.0	1449.0	1.0	20.0	583.6
Al	-165.7020951797	1456.4	1456.4	1456.4	1.0	20.0	439.8
Si	-199.5286730333	1408.8	1408.8	1408.8	1.0	20.0	331.3
P	-237.1637689794	1405.0	1405.0	1405.0	1.0	20.0	407.1
S	-278.7324294163	1448.8	1448.8	1448.8	1.2	20.0	421.1
Cl	-324.3546473116	1422.8	1422.8	1422.8	1.0	20.0	478.7
Ar	-374.1458489039	1444.8	1444.8	1444.8	1.4	20.0	446.5

Table 872: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618046832	162.0	83.0	83.0	nan	20.0	5.7
He	-1.4774416702	173.0	95.0	95.0	nan	20.0	3.7
Li	-4.1054088713	162.0	91.0	91.0	nan	20.0	5.2
Be	-8.4921591107	156.0	89.0	89.0	nan	20.0	5.2
B	-14.9258415344	170.0	96.0	96.0	nan	20.0	3.7
C	-23.6568149658	155.0	88.0	88.0	nan	20.0	4.9
N	-34.9083535807	148.0	84.0	84.0	nan	20.0	5.1
O	-48.8831195338	159.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.7
F	-65.7674347073	164.0	91.0	91.0	nan	20.0	5.8
Ne	-85.7342760602	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	5.8
Na	-108.9454706416	175.0	98.0	98.0	nan	20.0	5.9
Mg	-135.5533595320	170.0	94.0	94.0	nan	20.0	5.9
Al	-165.7020952160	169.0	96.0	96.0	nan	20.0	3.7
Si	-199.5286731948	155.0	87.0	87.0	nan	20.0	5.1
P	-237.1637690185	182.0	98.0	98.0	nan	20.0	5.4
S	-278.7324293298	182.0	100.0	100.0	nan	20.0	5.3
Cl	-324.3546474455	186.0	101.0	101.0	nan	20.0	6.1
Ar	-374.1458487668	190.0	103.0	103.0	nan	20.0	6.1

Table 873: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618044511	26190.8	0.0	0.0	nan	20.0	147.2
He	-1.4774409715	31119.0	0.0	0.0	nan	20.0	166.1
Li	-4.1054076355	30569.6	0.0	0.0	nan	20.0	148.0
Be	-8.4921569418	28880.4	0.0	0.0	nan	20.0	130.8
B	-14.9258370439	28675.4	0.0	0.0	nan	20.0	133.6
C	-23.6568109652	27338.8	0.0	0.0	nan	20.0	143.5
N	-34.9083459924	30225.2	0.0	0.0	nan	20.0	147.2
O	-48.8831122310	30061.2	0.0	0.0	nan	20.0	136.1
F	-65.7674027780	29118.2	0.0	0.0	nan	20.0	147.9
Ne	-85.7342613541	29397.0	0.0	0.0	nan	20.0	150.1
Na	-108.9454426955	28478.6	0.0	0.0	nan	20.0	146.7
Mg	-135.5533165160	29528.2	0.0	0.0	nan	20.0	133.4
Al	-165.7020524886	27420.8	0.0	0.0	nan	20.0	113.9
Si	-199.5286332882	27986.6	0.0	0.0	nan	20.0	132.8
P	-237.1636621587	28314.6	0.0	0.0	nan	20.0	123.6
S	-278.7323688297	30299.0	0.0	0.0	nan	20.0	143.9
Cl	-324.3545614486	33136.2	0.0	0.0	nan	20.0	174.0
Ar	-374.1457493985	30545.0	0.0	0.0	nan	20.0	149.8

Table 874: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618011130	15523.0	0.0	0.0	nan	20.0	68.1
He	-1.4773294155	20023.0	0.0	0.0	nan	20.0	97.5
Li	-4.1019396964	16185.0	0.0	0.0	nan	20.0	75.0
Be	-8.4639933744	17651.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.0
B	-14.9187332027	17749.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.7
C	-23.4900038189	18381.0	0.0	0.0	nan	20.0	100.0
N	-34.8511650164	16835.0	0.0	0.0	nan	20.0	96.8
O	-48.8223285188	18981.0	0.0	0.0	nan	20.0	97.5
F	-65.3214705227	18623.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.4
Ne	-85.4482852845	17695.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.6
Na	-108.6298898251	18423.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.9
Mg	-135.2476347855	17643.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.1
Al	-165.4118374328	17517.0	0.0	0.0	nan	20.0	77.7
Si	-197.6411075361	17721.0	0.0	0.0	nan	20.0	94.3
P	-235.4480966089	18761.0	0.0	0.0	nan	20.0	87.9
S	-277.2916714690	19183.0	0.0	0.0	nan	20.0	90.3
Cl	-323.2079872176	19055.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.0
Ar	-373.0224577341	19205.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.6

Table 875: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047375	15529.0	4.0	4.0	nan	20.0	82.6
He	-1.4774416773	20030.0	5.0	5.0	nan	20.0	110.4
Li	-4.1054087828	16193.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.1
Be	-8.4921589918	17659.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.8
B	-14.9258416484	17757.0	6.0	6.0	nan	20.0	92.8
C	-23.6568149732	18389.0	6.0	6.0	nan	20.0	107.8
N	-34.9083535452	16844.0	7.0	7.0	nan	20.0	96.7
O	-48.8831195507	18990.0	7.0	7.0	nan	20.0	104.1
F	-65.7674348016	18631.0	6.0	6.0	nan	20.0	96.9
Ne	-85.7342761338	17703.0	6.0	6.0	nan	20.0	75.4
Na	-108.9454705488	18431.0	6.0	6.0	nan	20.0	104.9
Mg	-135.5533594836	17652.0	7.0	7.0	nan	20.0	101.1
Al	-165.7020951797	17525.0	6.0	6.0	nan	20.0	79.1
Si	-199.5286730333	17730.0	7.0	7.0	nan	20.0	99.4
P	-237.1637689794	18769.0	6.0	6.0	nan	20.0	102.1
S	-278.7324294163	19192.0	7.0	7.0	nan	20.0	103.7
Cl	-324.3546473116	19064.0	7.0	7.0	nan	20.0	98.2
Ar	-374.1458489039	19213.0	6.0	6.0	nan	20.0	103.0

Table 876: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047375	40009.0	7.0	7.0	1.0	20.0	197.5
He	-1.4774416773	40009.8	7.8	7.8	1.0	20.0	193.6
Li	-4.1054087828	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	181.7
Be	-8.4921589918	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	186.8
B	-14.9258416484	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	207.0
C	-23.6568149732	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	238.0
N	-34.9083535452	40012.4	10.4	10.4	1.0	20.0	206.8
O	-48.8831195506	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	220.7
F	-65.7674348015	40013.2	11.2	11.2	1.0	20.0	204.2
Ne	-85.7342761338	40014.0	12.0	12.0	1.0	20.0	223.0
Na	-108.9454705487	40011.6	9.6	9.6	1.0	20.0	222.9
Mg	-135.5533594834	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	219.3
Al	-165.7020951795	40015.0	13.0	13.0	1.0	20.0	217.1
Si	-199.5286730331	40016.2	14.2	14.2	1.0	20.0	225.8
P	-237.1637689791	40017.6	15.6	15.6	1.0	20.0	225.8
S	-278.7324294159	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	224.9
Cl	-324.3546473111	40017.0	15.0	15.0	1.0	20.0	224.2
Ar	-374.1458489033	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	231.7

Table 877: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047375	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	2.9
He	-1.4774416773	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	2.4
Li	-4.1054087828	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
Be	-8.4921589918	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.7
B	-14.9258416484	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.4
C	-23.6568149732	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.7
N	-34.9083535452	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.5
O	-48.8831195507	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	5.9
F	-65.7674348016	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
Ne	-85.7342761338	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.0
Na	-108.9454705488	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	8.4
Mg	-135.5533594836	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.0
Al	-165.7020951797	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.5
Si	-199.5286730333	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	7.4
P	-237.1637689794	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.3
S	-278.7324294163	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.0
Cl	-324.3546473116	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.5
Ar	-374.1458489039	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.5

Table 878: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618047375	201.0	201.0	201.0	1.0	20.0	4.4
He	-1.4774416773	215.0	215.0	215.0	1.0	20.0	3.7
Li	-4.1054087828	222.0	222.0	222.0	1.0	20.0	3.2
Be	-8.4921589918	228.0	228.0	228.0	1.0	20.0	3.4
B	-14.9258416484	235.0	235.0	235.0	1.0	20.0	3.0
C	-23.6568149732	236.0	236.0	236.0	1.0	20.0	3.3
N	-34.9083535452	240.0	240.0	240.0	1.0	20.0	3.7
O	-48.8831195507	248.0	248.0	248.0	1.0	20.0	2.9
F	-65.7674348016	248.0	248.0	248.0	1.0	20.0	3.3
Ne	-85.7342761338	250.0	250.0	250.0	1.0	20.0	3.5
Na	-108.9454705488	252.0	252.0	252.0	1.0	20.0	3.2
Mg	-135.5533594836	257.0	257.0	257.0	1.0	20.0	3.1
Al	-165.7020951797	260.0	260.0	260.0	1.0	20.0	3.2
Si	-199.5286730333	259.0	259.0	259.0	1.0	20.0	3.5
P	-237.1637689794	262.0	262.0	262.0	1.0	20.0	3.3
S	-278.7324294163	265.0	265.0	265.0	1.0	20.0	3.3
Cl	-324.3546473116	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.4
Ar	-374.1458489039	266.0	266.0	266.0	1.0	20.0	3.1

Table 879: trust region repeats

32.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618047266	903.0	903.0	0.0	nan	20.0	5.0
basin hopping	-0.2618047375	1495.6	1495.6	1495.6	1.2	20.0	466.8
cch second order	-0.2618046832	162.0	83.0	83.0	nan	20.0	5.7
diff evo	-0.2618044511	26190.8	0.0	0.0	nan	20.0	147.2
direct	-0.2618011130	15523.0	0.0	0.0	nan	20.0	68.1
direct with trim	-0.2618047375	15529.0	4.0	4.0	nan	20.0	82.6
dual anneal	-0.2618047375	40009.0	7.0	7.0	1.0	20.0	197.5
trust region	-0.2618047375	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	2.9
trust region repeats	-0.2618047375	201.0	201.0	201.0	1.0	20.0	4.4

Table 880: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774416562	1040.0	1040.0	0.0	nan	20.0	8.7
basin hopping	-1.4774416773	1465.2	1465.2	1465.2	1.0	20.0	535.2
cch second order	-1.4774416702	173.0	95.0	95.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-1.4774409715	31119.0	0.0	0.0	nan	20.0	166.1
direct	-1.4773294155	20023.0	0.0	0.0	nan	20.0	97.5
direct with trim	-1.4774416773	20030.0	5.0	5.0	nan	20.0	110.4
dual anneal	-1.4774416773	40009.8	7.8	7.8	1.0	20.0	193.6
trust region	-1.4774416773	8.0	8.0	8.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-1.4774416773	215.0	215.0	215.0	1.0	20.0	3.7

Table 881: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054087677	1064.0	1064.0	0.0	nan	20.0	8.0
basin hopping	-4.1054087828	1414.0	1414.0	1414.0	1.0	20.0	452.5
cch second order	-4.1054088713	162.0	91.0	91.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-4.1054076355	30569.6	0.0	0.0	nan	20.0	148.0
direct	-4.1019396964	16185.0	0.0	0.0	nan	20.0	75.0
direct with trim	-4.1054087828	16193.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.1
dual anneal	-4.1054087828	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	181.7
trust region	-4.1054087828	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-4.1054087828	222.0	222.0	222.0	1.0	20.0	3.2

Table 882: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921589804	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	8.2
basin hopping	-8.4921589918	1449.2	1449.2	1449.2	1.0	20.0	439.1
cch second order	-8.4921591107	156.0	89.0	89.0	nan	20.0	5.2
diff evo	-8.4921569418	28880.4	0.0	0.0	nan	20.0	130.8
direct	-8.4639933744	17651.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.0
direct with trim	-8.4921589918	17659.0	6.0	6.0	nan	20.0	94.8
dual anneal	-8.4921589918	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	186.8
trust region	-8.4921589918	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-8.4921589918	228.0	228.0	228.0	1.0	20.0	3.4

Table 883: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258416389	1039.0	1039.0	0.0	nan	20.0	5.6
basin hopping	-14.9258416484	1412.6	1412.6	1412.6	1.0	20.0	396.5
cch second order	-14.9258415344	170.0	96.0	96.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-14.9258370439	28675.4	0.0	0.0	nan	20.0	133.6
direct	-14.9187332027	17749.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.7
direct with trim	-14.9258416484	17757.0	6.0	6.0	nan	20.0	92.8
dual anneal	-14.9258416484	40012.8	10.8	10.8	1.0	20.0	207.0
trust region	-14.9258416484	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.4
trust region repeats	-14.9258416484	235.0	235.0	235.0	1.0	20.0	3.0

Table 884: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568149647	1023.0	1023.0	0.0	nan	20.0	8.1
basin hopping	-23.6568149732	1413.4	1413.4	1413.4	1.2	20.0	373.6
cch second order	-23.6568149658	155.0	88.0	88.0	nan	20.0	4.9
diff evo	-23.6568109652	27338.8	0.0	0.0	nan	20.0	143.5
direct	-23.4900038189	18381.0	0.0	0.0	nan	20.0	100.0
direct with trim	-23.6568149732	18389.0	6.0	6.0	nan	20.0	107.8
dual anneal	-23.6568149732	40011.0	9.0	9.0	1.0	20.0	238.0
trust region	-23.6568149732	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.7
trust region repeats	-23.6568149732	236.0	236.0	236.0	1.0	20.0	3.3

Table 885: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9083535369	1013.0	1013.0	0.0	nan	20.0	7.7
basin hopping	-34.9083535452	1408.4	1408.4	1408.4	1.2	20.0	410.3
cch second order	-34.9083535807	148.0	84.0	84.0	nan	20.0	5.1
diff evo	-34.9083459924	30225.2	0.0	0.0	nan	20.0	147.2
direct	-34.8511650164	16835.0	0.0	0.0	nan	20.0	96.8
direct with trim	-34.9083535452	16844.0	7.0	7.0	nan	20.0	96.7
dual anneal	-34.9083535452	40012.4	10.4	10.4	1.0	20.0	206.8
trust region	-34.9083535452	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	3.5
trust region repeats	-34.9083535452	240.0	240.0	240.0	1.0	20.0	3.7

Table 886: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8831195417	1022.0	1022.0	0.0	nan	20.0	5.4
basin hopping	-48.8831195507	1410.8	1410.8	1410.8	1.0	20.0	428.1
cch second order	-48.8831195338	159.0	91.0	91.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-48.8831122310	30061.2	0.0	0.0	nan	20.0	136.1
direct	-48.8223285188	18981.0	0.0	0.0	nan	20.0	97.5
direct with trim	-48.8831195507	18990.0	7.0	7.0	nan	20.0	104.1
dual anneal	-48.8831195506	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	220.7
trust region	-48.8831195507	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	5.9
trust region repeats	-48.8831195507	248.0	248.0	248.0	1.0	20.0	2.9

Table 887: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7674347910	1028.0	1028.0	0.0	nan	20.0	8.0
basin hopping	-65.7674348016	1433.4	1433.4	1433.4	1.2	20.0	403.0
cch second order	-65.7674347073	164.0	91.0	91.0	nan	20.0	5.8
diff evo	-65.7674027780	29118.2	0.0	0.0	nan	20.0	147.9
direct	-65.3214705227	18623.0	0.0	0.0	nan	20.0	99.4
direct with trim	-65.7674348016	18631.0	6.0	6.0	nan	20.0	96.9
dual anneal	-65.7674348015	40013.2	11.2	11.2	1.0	20.0	204.2
trust region	-65.7674348016	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-65.7674348016	248.0	248.0	248.0	1.0	20.0	3.3

Table 888: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7342761205	1037.0	1037.0	0.0	nan	20.0	7.5
basin hopping	-85.7342761338	1470.4	1470.4	1470.4	1.2	20.0	296.2
cch second order	-85.7342760602	167.0	92.0	92.0	nan	20.0	5.8
diff evo	-85.7342613541	29397.0	0.0	0.0	nan	20.0	150.1
direct	-85.4482852845	17695.0	0.0	0.0	nan	20.0	91.6
direct with trim	-85.7342761338	17703.0	6.0	6.0	nan	20.0	75.4
dual anneal	-85.7342761338	40014.0	12.0	12.0	1.0	20.0	223.0
trust region	-85.7342761338	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-85.7342761338	250.0	250.0	250.0	1.0	20.0	3.5

Table 889: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9454705309	1047.0	1047.0	0.0	nan	20.0	5.5
basin hopping	-108.9454705488	1424.6	1424.6	1424.6	1.0	20.0	453.8
cch second order	-108.9454706416	175.0	98.0	98.0	nan	20.0	5.9
diff evo	-108.9454426955	28478.6	0.0	0.0	nan	20.0	146.7
direct	-108.6298898251	18423.0	0.0	0.0	nan	20.0	92.9
direct with trim	-108.9454705488	18431.0	6.0	6.0	nan	20.0	104.9
dual anneal	-108.9454705487	40011.6	9.6	9.6	1.0	20.0	222.9
trust region	-108.9454705488	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	8.4
trust region repeats	-108.9454705488	252.0	252.0	252.0	1.0	20.0	3.2

Table 890: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5533594590	1045.0	1045.0	0.0	nan	20.0	8.6
basin hopping	-135.5533594836	1449.0	1449.0	1449.0	1.0	20.0	583.6
cch second order	-135.5533595320	170.0	94.0	94.0	nan	20.0	5.9
diff evo	-135.5533165160	29528.2	0.0	0.0	nan	20.0	133.4
direct	-135.2476347855	17643.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.1
direct with trim	-135.5533594836	17652.0	7.0	7.0	nan	20.0	101.1
dual anneal	-135.5533594834	40015.4	13.4	13.4	1.0	20.0	219.3
trust region	-135.5533594836	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-135.5533594836	257.0	257.0	257.0	1.0	20.0	3.1

Table 891: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7020951455	1048.0	1048.0	0.0	nan	20.0	8.5
basin hopping	-165.7020951797	1456.4	1456.4	1456.4	1.0	20.0	439.8
cch second order	-165.7020952160	169.0	96.0	96.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-165.7020524886	27420.8	0.0	0.0	nan	20.0	113.9
direct	-165.4118374328	17517.0	0.0	0.0	nan	20.0	77.7
direct with trim	-165.7020951797	17525.0	6.0	6.0	nan	20.0	79.1
dual anneal	-165.7020951795	40015.0	13.0	13.0	1.0	20.0	217.1
trust region	-165.7020951797	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-165.7020951797	260.0	260.0	260.0	1.0	20.0	3.2

Table 892: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5286729858	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	8.6
basin hopping	-199.5286730333	1408.8	1408.8	1408.8	1.0	20.0	331.3
cch second order	-199.5286731948	155.0	87.0	87.0	nan	20.0	5.1
diff evo	-199.5286332882	27986.6	0.0	0.0	nan	20.0	132.8
direct	-197.6411075361	17721.0	0.0	0.0	nan	20.0	94.3
direct with trim	-199.5286730333	17730.0	7.0	7.0	nan	20.0	99.4
dual anneal	-199.5286730331	40016.2	14.2	14.2	1.0	20.0	225.8
trust region	-199.5286730333	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	7.4
trust region repeats	-199.5286730333	259.0	259.0	259.0	1.0	20.0	3.5

Table 893: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1637689140	1052.0	1052.0	0.0	nan	20.0	8.5
basin hopping	-237.1637689794	1405.0	1405.0	1405.0	1.0	20.0	407.1
cch second order	-237.1637690185	182.0	98.0	98.0	nan	20.0	5.4
diff evo	-237.1636621587	28314.6	0.0	0.0	nan	20.0	123.6
direct	-235.4480966089	18761.0	0.0	0.0	nan	20.0	87.9
direct with trim	-237.1637689794	18769.0	6.0	6.0	nan	20.0	102.1
dual anneal	-237.1637689791	40017.6	15.6	15.6	1.0	20.0	225.8
trust region	-237.1637689794	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.3
trust region repeats	-237.1637689794	262.0	262.0	262.0	1.0	20.0	3.3

Table 894: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7324293272	1052.0	1052.0	0.0	nan	20.0	7.6
basin hopping	-278.7324294163	1448.8	1448.8	1448.8	1.2	20.0	421.1
cch second order	-278.7324293298	182.0	100.0	100.0	nan	20.0	5.3
diff evo	-278.7323688297	30299.0	0.0	0.0	nan	20.0	143.9
direct	-277.2916714690	19183.0	0.0	0.0	nan	20.0	90.3
direct with trim	-278.7324294163	19192.0	7.0	7.0	nan	20.0	103.7
dual anneal	-278.7324294159	40013.0	11.0	11.0	1.0	20.0	224.9
trust region	-278.7324294163	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	4.0
trust region repeats	-278.7324294163	265.0	265.0	265.0	1.0	20.0	3.3

Table 895: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3546471919	1056.0	1056.0	0.0	nan	20.0	5.6
basin hopping	-324.3546473116	1422.8	1422.8	1422.8	1.0	20.0	478.7
cch second order	-324.3546474455	186.0	101.0	101.0	nan	20.0	6.1
diff evo	-324.3545614486	33136.2	0.0	0.0	nan	20.0	174.0
direct	-323.2079872176	19055.0	0.0	0.0	nan	20.0	105.0
direct with trim	-324.3546473116	19064.0	7.0	7.0	nan	20.0	98.2
dual anneal	-324.3546473111	40017.0	15.0	15.0	1.0	20.0	224.2
trust region	-324.3546473116	12.0	12.0	12.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-324.3546473116	261.0	261.0	261.0	1.0	20.0	3.4

Table 896: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1458487451	1053.0	1053.0	0.0	nan	20.0	7.9
basin hopping	-374.1458489039	1444.8	1444.8	1444.8	1.4	20.0	446.5
cch second order	-374.1458487668	190.0	103.0	103.0	nan	20.0	6.1
diff evo	-374.1457493985	30545.0	0.0	0.0	nan	20.0	149.8
direct	-373.0224577341	19205.0	0.0	0.0	nan	20.0	83.6
direct with trim	-374.1458489039	19213.0	6.0	6.0	nan	20.0	103.0
dual anneal	-374.1458489033	40013.8	11.8	11.8	1.0	20.0	231.7
trust region	-374.1458489039	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-374.1458489039	266.0	266.0	266.0	1.0	20.0	3.1

Table 897: Ar

32.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.2618047375
He	basin hopping	-1.4774416773
Li	cch second order	-4.1054088713
Be	cch second order	-8.4921591107
B	basin hopping	-14.9258416484
C	basin hopping	-23.6568149732
N	cch second order	-34.9083535807
O	basin hopping	-48.8831195507
F	trust region	-65.7674348016
Ne	basin hopping	-85.7342761338
Na	cch second order	-108.9454706416
Mg	cch second order	-135.5533595320
Al	cch second order	-165.7020952160
Si	cch second order	-199.5286731948
P	cch second order	-237.1637690185
S	basin hopping	-278.7324294163
Cl	cch second order	-324.3546474455
Ar	trust region repeats	-374.1458489039

Table 898: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	10.0	10.0	10.0	nan	-117.3521637611	3.9
cch second order	168.1	93.2	93.2	nan	-117.3521637701	5.1
trust region repeats	244.7	244.7	244.7	1.0	-117.3521637611	3.4
acevedo	1034.9	1034.9	0.0	nan	-117.3521637236	7.4
basin hopping	1435.2	1435.2	1435.2	1.1	-117.3521637611	431.3
direct	18064.1	0.0	0.0	nan	-116.8365406985	90.2
direct with trim	18072.3	6.2	6.2	nan	-117.3521637611	97.1
diff evo	29293.6	0.0	0.0	nan	-117.3521315105	142.7
dual anneal	40013.3	11.3	11.3	1.0	-117.3521637609	213.9

Table 899: Average (all systems)

387

33 20s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

33.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 900: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262831	1607.4	1607.4	1607.4	1.2	20.0	520.2
He	-2.7236043037	1414.4	1414.4	1414.4	1.2	20.0	578.3
Li	-8.5257313648	1418.4	1418.4	1418.4	1.2	20.0	498.9
Be	-19.3526838379	1407.8	1407.8	1407.8	1.2	20.0	449.9
B	-36.7287605388	1379.0	1379.0	1379.0	1.0	20.0	429.0
C	-62.1689453101	1365.2	1365.2	1365.2	1.2	20.0	449.2
N	-97.1817947121	1392.0	1392.0	1392.0	1.4	20.0	517.3
O	-143.2714132410	16721.6	16721.6	16721.6	3.2	20.0	759.9
F	-201.9375506007	1366.2	1366.2	1366.2	1.8	20.0	497.7
Ne	-274.6782253084	1423.4	1423.4	1423.4	2.2	20.0	390.3
Na	-362.9882518152	1443.0	1443.0	1443.0	1.6	20.0	405.5
Mg	-468.3606207377	1462.6	1462.6	1462.6	1.2	20.0	472.4
Al	-592.2866306268	1432.8	1432.8	1432.8	1.2	20.0	458.7
Si	-736.2561374052	1494.4	1494.4	1494.4	1.2	20.0	451.3
P	-901.7577293668	1423.8	1423.8	1423.8	1.4	20.0	378.9
S	-1090.2788608099	1500.8	1500.8	1500.8	1.2	20.0	477.5
Cl	-1303.3059599523	1502.8	1502.8	1502.8	1.2	20.0	416.8
Ar	-1542.3245182548	1506.0	1506.0	1506.0	1.0	20.0	421.3

Table 901: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065263309	199.0	110.0	110.0	nan	20.0	5.7
He	-2.7236041599	186.0	106.0	106.0	nan	20.0	3.7
Li	-8.5257311961	213.0	122.0	122.0	nan	20.0	6.8
Be	-19.3526837738	281.0	150.0	150.0	nan	20.0	4.6
B	-36.7287588864	438.0	218.0	218.0	nan	20.0	9.5
C	-62.1689439206	394.0	218.0	218.0	nan	20.0	8.1
N	-97.1817922452	448.0	251.0	251.0	nan	20.0	9.9
O	-143.2712187906	577.0	289.0	289.0	nan	20.0	10.4
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 902: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065260043	26035.0	0.0	0.0	nan	20.0	127.8
He	-2.7236037848	25756.2	0.0	0.0	nan	20.0	140.6
Li	-8.5257288946	25174.0	0.0	0.0	nan	20.0	127.5
Be	-19.3526785370	26592.6	0.0	0.0	nan	20.0	121.8
B	-36.7287489596	25403.6	0.0	0.0	nan	20.0	124.8
C	-62.1689268433	25567.6	0.0	0.0	nan	20.0	134.2
N	-97.1817664390	25239.6	0.0	0.0	nan	20.0	128.0
O	-143.2711866837	27060.0	0.0	0.0	nan	20.0	138.8
F	-201.9374937212	26387.6	0.0	0.0	nan	20.0	133.5
Ne	-274.6781420810	24485.2	0.0	0.0	nan	20.0	125.7
Na	-362.9881768776	24796.8	0.0	0.0	nan	20.0	100.4
Mg	-468.3604026065	25444.6	0.0	0.0	nan	20.0	114.5
Al	-592.2865078540	24583.6	0.0	0.0	nan	20.0	124.1
Si	-736.2560240525	24567.2	0.0	0.0	nan	20.0	112.4
P	-901.7575560212	24829.6	0.0	0.0	nan	20.0	123.3
S	-1090.2785568491	24862.4	0.0	0.0	nan	20.0	110.5
Cl	-1303.3055653986	25231.4	0.0	0.0	nan	20.0	125.0
Ar	-1542.3241864824	23337.2	0.0	0.0	nan	20.0	99.4

Table 903: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262741	7875.0	0.0	0.0	nan	20.0	40.4
He	-2.7234463506	14061.0	0.0	0.0	nan	20.0	78.1
Li	-8.5251693652	16255.0	0.0	0.0	nan	20.0	74.6
Be	-19.3526749219	17873.0	0.0	0.0	nan	20.0	85.7
B	-36.7255245533	18353.0	0.0	0.0	nan	20.0	94.0
C	-62.1677753996	14889.0	0.0	0.0	nan	20.0	80.0
N	-97.1478105861	15885.0	0.0	0.0	nan	20.0	76.6
O	-143.2704945603	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	86.7
F	-201.9104449992	16705.0	0.0	0.0	nan	20.0	73.8
Ne	-274.6737291178	15807.0	0.0	0.0	nan	20.0	71.2
Na	-362.9784637861	19841.0	0.0	0.0	nan	20.0	96.7
Mg	-468.2650904707	17881.0	0.0	0.0	nan	20.0	90.8
Al	-592.0834146941	17161.0	0.0	0.0	nan	20.0	75.4
Si	-736.2433153664	20087.0	0.0	0.0	nan	20.0	93.1
P	-901.7314726159	15657.0	0.0	0.0	nan	20.0	74.6
S	-1090.1417181343	16601.0	0.0	0.0	nan	20.0	82.2
Cl	-1303.2678641508	16525.0	0.0	0.0	nan	20.0	87.6
Ar	-1542.3214630517	14489.0	0.0	0.0	nan	20.0	73.6

Table 904: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262831	7881.0	4.0	4.0	nan	20.0	34.1
He	-2.7236043036	14068.0	5.0	5.0	nan	20.0	53.1
Li	-8.5257313648	16262.0	5.0	5.0	nan	20.0	72.4
Be	-19.3526838379	17880.0	5.0	5.0	nan	20.0	78.5
B	-36.7287605388	18361.0	6.0	6.0	nan	20.0	80.5
C	-62.1689453101	14899.0	8.0	8.0	nan	20.0	60.3
N	-97.1817947121	15893.0	6.0	6.0	nan	20.0	76.1
O	-143.2712172703	20149.4	18.4	18.4	nan	20.0	87.5
F	-201.9375499007	16713.0	6.0	6.0	nan	20.0	68.7
Ne	-274.6782250822	15816.0	7.0	7.0	nan	20.0	75.1
Na	-362.9882518152	19848.0	5.0	5.0	nan	20.0	86.9
Mg	-468.3606207377	17889.0	6.0	6.0	nan	20.0	87.2
Al	-592.2866306268	17169.0	6.0	6.0	nan	20.0	77.6
Si	-736.2561359831	20094.0	5.0	5.0	nan	20.0	91.5
P	-901.7577262189	15665.0	6.0	6.0	nan	20.0	64.7
S	-1090.2788573214	16609.0	6.0	6.0	nan	20.0	66.5
Cl	-1303.3059572882	16532.0	5.0	5.0	nan	20.0	68.8
Ar	-1542.3245182548	14496.0	5.0	5.0	nan	20.0	63.4

Table 905: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262831	40009.8	7.8	7.8	1.0	20.0	194.1
He	-2.7236043036	40009.6	7.6	7.6	1.0	20.0	212.1
Li	-8.5257313648	40010.6	8.6	8.6	1.0	20.0	201.5
Be	-19.3526838377	40013.2	11.2	11.2	1.0	20.0	201.0
B	-36.7287605381	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	193.8
C	-62.1689453083	40014.0	12.0	12.0	1.0	20.0	175.2
N	-97.1817947079	40013.4	11.4	11.4	1.0	20.0	189.3
O	-143.2712172613	40018.8	16.8	16.8	1.0	20.0	186.9
F	-201.9375498834	40018.0	16.0	16.0	1.0	20.0	204.2
Ne	-274.6782252769	40017.4	15.4	15.4	1.0	20.0	179.4
Na	-362.9882517611	40022.2	20.2	20.2	1.0	20.0	199.8
Mg	-468.3606206487	40023.0	21.0	21.0	1.0	20.0	171.4
Al	-592.2866304864	40021.8	19.8	19.8	1.0	20.0	177.9
Si	-736.2561357744	40128.0	126.0	126.0	1.0	20.0	315.4
P	-901.7577259003	40025.2	23.2	23.2	1.0	20.0	200.7
S	-1090.2788568599	40025.8	23.8	23.8	1.0	20.0	228.5
Cl	-1303.3059566343	40028.8	26.8	26.8	1.0	20.0	237.5
Ar	-1542.3245173460	40029.2	27.2	27.2	1.0	20.0	188.4

Table 906: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262831	7.0	7.0	7.0	nan	20.0	2.4
He	-2.7236043036	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
Li	-8.5257313648	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.2
Be	-19.3526838379	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
B	-36.7287605388	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.1
C	-62.1689453101	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.6
N	-97.1817947121	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.6
O	-143.2709674345	18.0	18.0	18.0	nan	20.0	6.9
F	-201.9375499007	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	7.6
Ne	-274.6782250822	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.5
Na	-362.9882518152	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.8
Mg	-468.3606207377	19.0	19.0	19.0	nan	20.0	11.6
Al	-592.2866306268	22.0	22.0	22.0	nan	20.0	9.2
Si	-736.2561359831	19.0	19.0	19.0	nan	20.0	4.2
P	-901.7577262189	21.0	21.0	21.0	nan	20.0	4.2
S	-1090.2788573214	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	8.6
Cl	-1303.3059572882	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	10.1
Ar	-1542.3245182548	27.0	27.0	27.0	nan	20.0	9.3

Table 907: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065262831	147.0	147.0	147.0	1.0	20.0	3.8
He	-2.7236043036	181.0	181.0	181.0	1.0	20.0	3.4
Li	-8.5257313648	196.0	196.0	196.0	1.0	20.0	3.9
Be	-19.3526838379	206.0	206.0	206.0	2.0	20.0	3.4
B	-36.7287605388	194.0	194.0	194.0	1.0	20.0	3.7
C	-62.1689453101	210.0	210.0	210.0	1.0	20.0	3.6
N	-97.1817947121	233.0	233.0	233.0	1.0	20.0	3.4
O	-143.2712172703	539.0	539.0	539.0	1.0	20.0	6.4
F	-201.9375506007	263.0	263.0	263.0	1.0	20.0	4.4
Ne	-274.6782253084	298.0	298.0	298.0	1.0	20.0	5.6
Na	-362.9882518152	333.0	333.0	333.0	1.0	20.0	6.5
Mg	-468.3606207377	355.0	355.0	355.0	1.0	20.0	6.8
Al	-592.2866306268	389.0	389.0	389.0	1.0	20.0	7.3
Si	-736.2561359877	1231.0	1231.0	1231.0	1.0	20.0	44.2
P	-901.7577293668	454.0	454.0	454.0	2.0	20.0	8.3
S	-1090.2788608099	469.0	469.0	469.0	2.0	20.0	8.9
Cl	-1303.3059572882	507.0	507.0	507.0	1.0	20.0	9.4
Ar	-1542.3245182548	544.0	544.0	544.0	1.0	20.0	9.1

Table 908: trust region repeats

33.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065262831	1607.4	1607.4	1607.4	1.2	20.0	520.2
cch second order	-0.4065263309	199.0	110.0	110.0	nan	20.0	5.7
diff evo	-0.4065260043	26035.0	0.0	0.0	nan	20.0	127.8
direct	-0.4065262741	7875.0	0.0	0.0	nan	20.0	40.4
direct with trim	-0.4065262831	7881.0	4.0	4.0	nan	20.0	34.1
dual anneal	-0.4065262831	40009.8	7.8	7.8	1.0	20.0	194.1
trust region	-0.4065262831	7.0	7.0	7.0	nan	20.0	2.4
trust region repeats	-0.4065262831	147.0	147.0	147.0	1.0	20.0	3.8

Table 909: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236043037	1414.4	1414.4	1414.4	1.2	20.0	578.3
cch second order	-2.7236041599	186.0	106.0	106.0	nan	20.0	3.7
diff evo	-2.7236037848	25756.2	0.0	0.0	nan	20.0	140.6
direct	-2.7234463506	14061.0	0.0	0.0	nan	20.0	78.1
direct with trim	-2.7236043036	14068.0	5.0	5.0	nan	20.0	53.1
dual anneal	-2.7236043036	40009.6	7.6	7.6	1.0	20.0	212.1
trust region	-2.7236043036	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	2.5
trust region repeats	-2.7236043036	181.0	181.0	181.0	1.0	20.0	3.4

Table 910: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5257313648	1418.4	1418.4	1418.4	1.2	20.0	498.9
cch second order	-8.5257311961	213.0	122.0	122.0	nan	20.0	6.8
diff evo	-8.5257288946	25174.0	0.0	0.0	nan	20.0	127.5
direct	-8.5251693652	16255.0	0.0	0.0	nan	20.0	74.6
direct with trim	-8.5257313648	16262.0	5.0	5.0	nan	20.0	72.4
dual anneal	-8.5257313648	40010.6	8.6	8.6	1.0	20.0	201.5
trust region	-8.5257313648	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	4.2
trust region repeats	-8.5257313648	196.0	196.0	196.0	1.0	20.0	3.9

Table 911: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3526838379	1407.8	1407.8	1407.8	1.2	20.0	449.9
cch second order	-19.3526837738	281.0	150.0	150.0	nan	20.0	4.6
diff evo	-19.3526785370	26592.6	0.0	0.0	nan	20.0	121.8
direct	-19.3526749219	17873.0	0.0	0.0	nan	20.0	85.7
direct with trim	-19.3526838379	17880.0	5.0	5.0	nan	20.0	78.5
dual anneal	-19.3526838377	40013.2	11.2	11.2	1.0	20.0	201.0
trust region	-19.3526838379	9.0	9.0	9.0	nan	20.0	3.9
trust region repeats	-19.3526838379	206.0	206.0	206.0	2.0	20.0	3.4

Table 912: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7287605388	1379.0	1379.0	1379.0	1.0	20.0	429.0
cch second order	-36.7287588864	438.0	218.0	218.0	nan	20.0	9.5
diff evo	-36.7287489596	25403.6	0.0	0.0	nan	20.0	124.8
direct	-36.7255245533	18353.0	0.0	0.0	nan	20.0	94.0
direct with trim	-36.7287605388	18361.0	6.0	6.0	nan	20.0	80.5
dual anneal	-36.7287605381	40012.2	10.2	10.2	1.0	20.0	193.8
trust region	-36.7287605388	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	4.1
trust region repeats	-36.7287605388	194.0	194.0	194.0	1.0	20.0	3.7

Table 913: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1689453101	1365.2	1365.2	1365.2	1.2	20.0	449.2
cch second order	-62.1689439206	394.0	218.0	218.0	nan	20.0	8.1
diff evo	-62.1689268433	25567.6	0.0	0.0	nan	20.0	134.2
direct	-62.1677753996	14889.0	0.0	0.0	nan	20.0	80.0
direct with trim	-62.1689453101	14899.0	8.0	8.0	nan	20.0	60.3
dual anneal	-62.1689453083	40014.0	12.0	12.0	1.0	20.0	175.2
trust region	-62.1689453101	10.0	10.0	10.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-62.1689453101	210.0	210.0	210.0	1.0	20.0	3.6

Table 914: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1817947121	1392.0	1392.0	1392.0	1.4	20.0	517.3
cch second order	-97.1817922452	448.0	251.0	251.0	nan	20.0	9.9
diff evo	-97.1817664390	25239.6	0.0	0.0	nan	20.0	128.0
direct	-97.1478105861	15885.0	0.0	0.0	nan	20.0	76.6
direct with trim	-97.1817947121	15893.0	6.0	6.0	nan	20.0	76.1
dual anneal	-97.1817947079	40013.4	11.4	11.4	1.0	20.0	189.3
trust region	-97.1817947121	11.0	11.0	11.0	nan	20.0	2.6
trust region repeats	-97.1817947121	233.0	233.0	233.0	1.0	20.0	3.4

Table 915: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2714132410	16721.6	16721.6	16721.6	3.2	20.0	759.9
cch second order	-143.2712187906	577.0	289.0	289.0	nan	20.0	10.4
diff evo	-143.2711866837	27060.0	0.0	0.0	nan	20.0	138.8
direct	-143.2704945603	20129.0	0.0	0.0	nan	20.0	86.7
direct with trim	-143.2712172703	20149.4	18.4	18.4	nan	20.0	87.5
dual anneal	-143.2712172613	40018.8	16.8	16.8	1.0	20.0	186.9
trust region	-143.2709674345	18.0	18.0	18.0	nan	20.0	6.9
trust region repeats	-143.2712172703	539.0	539.0	539.0	1.0	20.0	6.4

Table 916: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9375506007	1366.2	1366.2	1366.2	1.8	20.0	497.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-201.9374937212	26387.6	0.0	0.0	nan	20.0	133.5
direct	-201.9104449992	16705.0	0.0	0.0	nan	20.0	73.8
direct with trim	-201.9375499007	16713.0	6.0	6.0	nan	20.0	68.7
dual anneal	-201.9375498834	40018.0	16.0	16.0	1.0	20.0	204.2
trust region	-201.9375499007	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	7.6
trust region repeats	-201.9375506007	263.0	263.0	263.0	1.0	20.0	4.4

Table 917: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6782253084	1423.4	1423.4	1423.4	2.2	20.0	390.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-274.6781420810	24485.2	0.0	0.0	nan	20.0	125.7
direct	-274.6737291178	15807.0	0.0	0.0	nan	20.0	71.2
direct with trim	-274.6782250822	15816.0	7.0	7.0	nan	20.0	75.1
dual anneal	-274.6782252769	40017.4	15.4	15.4	1.0	20.0	179.4
trust region	-274.6782250822	13.0	13.0	13.0	nan	20.0	4.5
trust region repeats	-274.6782253084	298.0	298.0	298.0	1.0	20.0	5.6

Table 918: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9882518152	1443.0	1443.0	1443.0	1.6	20.0	405.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-362.9881768776	24796.8	0.0	0.0	nan	20.0	100.4
direct	-362.9784637861	19841.0	0.0	0.0	nan	20.0	96.7
direct with trim	-362.9882518152	19848.0	5.0	5.0	nan	20.0	86.9
dual anneal	-362.9882517611	40022.2	20.2	20.2	1.0	20.0	199.8
trust region	-362.9882518152	16.0	16.0	16.0	nan	20.0	2.8
trust region repeats	-362.9882518152	333.0	333.0	333.0	1.0	20.0	6.5

Table 919: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3606207377	1462.6	1462.6	1462.6	1.2	20.0	472.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-468.3604026065	25444.6	0.0	0.0	nan	20.0	114.5
direct	-468.2650904707	17881.0	0.0	0.0	nan	20.0	90.8
direct with trim	-468.3606207377	17889.0	6.0	6.0	nan	20.0	87.2
dual anneal	-468.3606206487	40023.0	21.0	21.0	1.0	20.0	171.4
trust region	-468.3606207377	19.0	19.0	19.0	nan	20.0	11.6
trust region repeats	-468.3606207377	355.0	355.0	355.0	1.0	20.0	6.8

Table 920: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2866306268	1432.8	1432.8	1432.8	1.2	20.0	458.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-592.2865078540	24583.6	0.0	0.0	nan	20.0	124.1
direct	-592.0834146941	17161.0	0.0	0.0	nan	20.0	75.4
direct with trim	-592.2866306268	17169.0	6.0	6.0	nan	20.0	77.6
dual anneal	-592.2866304864	40021.8	19.8	19.8	1.0	20.0	177.9
trust region	-592.2866306268	22.0	22.0	22.0	nan	20.0	9.2
trust region repeats	-592.2866306268	389.0	389.0	389.0	1.0	20.0	7.3

Table 921: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2561374052	1494.4	1494.4	1494.4	1.2	20.0	451.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-736.2560240525	24567.2	0.0	0.0	nan	20.0	112.4
direct	-736.2433153664	20087.0	0.0	0.0	nan	20.0	93.1
direct with trim	-736.2561359831	20094.0	5.0	5.0	nan	20.0	91.5
dual anneal	-736.2561357744	40128.0	126.0	126.0	1.0	20.0	315.4
trust region	-736.2561359831	19.0	19.0	19.0	nan	20.0	4.2
trust region repeats	-736.2561359877	1231.0	1231.0	1231.0	1.0	20.0	44.2

Table 922: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7577293668	1423.8	1423.8	1423.8	1.4	20.0	378.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-901.7575560212	24829.6	0.0	0.0	nan	20.0	123.3
direct	-901.7314726159	15657.0	0.0	0.0	nan	20.0	74.6
direct with trim	-901.7577262189	15665.0	6.0	6.0	nan	20.0	64.7
dual anneal	-901.7577259003	40025.2	23.2	23.2	1.0	20.0	200.7
trust region	-901.7577262189	21.0	21.0	21.0	nan	20.0	4.2
trust region repeats	-901.7577293668	454.0	454.0	454.0	2.0	20.0	8.3

Table 923: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2788608099	1500.8	1500.8	1500.8	1.2	20.0	477.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1090.2785568491	24862.4	0.0	0.0	nan	20.0	110.5
direct	-1090.1417181343	16601.0	0.0	0.0	nan	20.0	82.2
direct with trim	-1090.2788573214	16609.0	6.0	6.0	nan	20.0	66.5
dual anneal	-1090.2788568599	40025.8	23.8	23.8	1.0	20.0	228.5
trust region	-1090.2788573214	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	8.6
trust region repeats	-1090.2788608099	469.0	469.0	469.0	2.0	20.0	8.9

Table 924: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3059599523	1502.8	1502.8	1502.8	1.2	20.0	416.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1303.3055653986	25231.4	0.0	0.0	nan	20.0	125.0
direct	-1303.2678641508	16525.0	0.0	0.0	nan	20.0	87.6
direct with trim	-1303.3059572882	16532.0	5.0	5.0	nan	20.0	68.8
dual anneal	-1303.3059566343	40028.8	26.8	26.8	1.0	20.0	237.5
trust region	-1303.3059572882	24.0	24.0	24.0	nan	20.0	10.1
trust region repeats	-1303.3059572882	507.0	507.0	507.0	1.0	20.0	9.4

Table 925: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3245182548	1506.0	1506.0	1506.0	1.0	20.0	421.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1542.3241864824	23337.2	0.0	0.0	nan	20.0	99.4
direct	-1542.3214630517	14489.0	0.0	0.0	nan	20.0	73.6
direct with trim	-1542.3245182548	14496.0	5.0	5.0	nan	20.0	63.4
dual anneal	-1542.3245173460	40029.2	27.2	27.2	1.0	20.0	188.4
trust region	-1542.3245182548	27.0	27.0	27.0	nan	20.0	9.3
trust region repeats	-1542.3245182548	544.0	544.0	544.0	1.0	20.0	9.1

Table 926: Ar

33.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.4065263309
He	basin hopping	-2.7236043037
Li	trust region repeats	-8.5257313648
Be	basin hopping	-19.3526838379
B	basin hopping	-36.7287605388
C	basin hopping	-62.1689453101
N	basin hopping	-97.1817947121
O	basin hopping	-143.2714132410
F	trust region repeats	-201.9375506007
Ne	trust region repeats	-274.6782253084
Na	basin hopping	-362.9882518152
Mg	basin hopping	-468.3606207377
Al	basin hopping	-592.2866306268
Si	basin hopping	-736.2561374052
P	basin hopping	-901.7577293668
S	basin hopping	-1090.2788608099
Cl	basin hopping	-1303.3059599523
Ar	trust region repeats	-1542.3245182548

Table 927: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.8	15.8	15.8	nan	-435.8074159452	5.6
cch second order	342.0	183.0	183.0	nan	-46.2949074129	7.3
trust region repeats	374.9	374.9	374.9	1.2	-435.8074302454	7.9
basin hopping	2292.3	2292.3	2292.3	1.4	-435.8074413594	476.3
direct	16448.6	0.0	0.0	nan	-435.7742443554	79.7
direct with trim	16456.9	6.4	6.4	nan	-435.8074298250	71.8
diff evo	25297.5	0.0	0.0	nan	-435.8073210050	122.9
dual anneal	40024.5	22.5	22.5	1.0	-435.8074296765	203.2

Table 928: Average (all systems)

34   27s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

34.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 929: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6729021813	19120.0	19120.0	19120.0	11.0	27.0	3297.8
He	-3.4617695251	14217.2	14217.2	14217.2	15.8	27.0	2631.8
Li	-8.2781510187	13955.2	13955.2	13955.2	13.8	27.0	2539.8
Be	-16.6196225361	13781.6	13781.6	13781.6	3.2	27.0	1962.6
B	-27.7069928958	12765.8	12765.8	12765.8	1.6	27.0	1933.6
C	-42.2884450379	12122.8	12122.8	12122.8	1.8	27.0	2111.5
N	-60.2237453864	11796.8	11796.8	11796.8	1.0	27.0	2297.3
O	-85.0860813028	9505.8	9505.8	9505.8	1.0	27.0	1531.3
F	-103.4501305798	8676.4	8676.4	8676.4	1.0	27.0	1015.2
Ne	-143.0825817139	8677.8	8677.8	8677.8	1.0	27.0	990.6
Na	-178.8063861494	6628.0	6628.0	6628.0	1.0	27.0	950.0
Mg	-213.0341730579	6631.6	6631.6	6631.6	1.0	27.0	1106.2
Al	-256.6112887360	6446.2	6446.2	6446.2	1.0	27.0	994.7
Si	-297.6588792268	5773.8	5773.8	5773.8	1.0	27.0	1084.1
P	-361.3059362539	4802.6	4802.6	4802.6	1.0	27.0	1235.5
S	-426.7630476006	4317.8	4317.8	4317.8	1.0	27.0	855.9
Cl	-469.2137255781	4070.0	4070.0	4070.0	1.0	27.0	740.1
Ar	-562.3681315245	3973.8	3973.8	3973.8	1.0	27.0	737.5

Table 930: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6736894552	332.0	161.0	161.0	nan	27.0	10.3
He	-2.7934662646	311.0	167.0	167.0	nan	27.0	7.5
Li	-7.1774008542	300.0	152.0	152.0	nan	27.0	10.5
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-42.3071669790	306.0	153.0	153.0	nan	27.0	10.4
N	-54.3220903854	489.0	264.0	264.0	nan	27.0	13.3
O	-80.3705944468	356.0	164.0	164.0	nan	27.0	10.6
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-212.0514641673	281.0	139.0	139.0	nan	27.0	10.0
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-301.7019179569	392.0	175.0	175.0	nan	27.0	12.1
P	-356.8539102819	237.0	121.0	121.0	nan	27.0	9.3
S	-420.4660268840	317.0	153.0	153.0	nan	27.0	10.8
Cl	-468.8363412844	298.0	145.0	145.0	nan	27.0	11.7
Ar	-567.3657407456	384.0	176.0	176.0	nan	27.0	11.4

Table 931: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-43.9714161517	359040.0	0.0	0.0	nan	27.0	1705.7
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-114.0474367157	464915.0	0.0	0.0	nan	27.0	2718.9
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	-576.4217646769	606512.5	0.0	0.0	nan	27.0	3547.3

Table 932: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7055239414	27115.0	0.0	0.0	nan	27.0	225.1
He	-3.3661034716	27149.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.9
Li	-8.5585879434	27181.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.3
Be	-16.2323089096	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	205.3
B	-26.5707062062	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.9
C	-41.9906776242	27061.0	0.0	0.0	nan	27.0	199.0
N	-61.1275946663	27075.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.5
O	-83.7338521994	27101.0	0.0	0.0	nan	27.0	219.1
F	-106.9219149430	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	221.5
Ne	-131.4567303367	27167.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.0
Na	-176.0048870154	27189.0	0.0	0.0	nan	27.0	223.5
Mg	-212.4989918756	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.6
Al	-261.6767240438	27191.0	0.0	0.0	nan	27.0	221.5
Si	-292.3369710788	27183.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.9
P	-341.4551254612	27177.0	0.0	0.0	nan	27.0	227.0
S	-425.9872070227	27025.0	0.0	0.0	nan	27.0	211.0
Cl	-487.9295274919	27219.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.0
Ar	-561.7244792662	27075.0	0.0	0.0	nan	27.0	204.8

Table 933: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7069310603	27605.0	488.0	488.0	nan	27.0	387.1
He	-3.3555596259	27859.2	708.2	708.2	nan	27.0	340.0
Li	-8.4947254797	27587.6	404.6	404.6	nan	27.0	321.4
Be	-16.6233602534	27451.6	384.6	384.6	nan	27.0	276.4
B	-27.4393390351	27236.4	211.4	211.4	nan	27.0	297.0
C	-42.8030486230	27419.2	356.2	356.2	nan	27.0	236.3
N	-60.4337850636	27330.8	253.8	253.8	nan	27.0	276.5
O	-80.4207568995	27655.6	552.6	552.6	nan	27.0	347.8
F	-109.5416476278	27407.4	378.4	378.4	nan	27.0	237.7
Ne	-138.8884044113	27406.4	237.4	237.4	nan	27.0	275.7
Na	-174.1740136771	27266.6	75.6	75.6	nan	27.0	217.3
Mg	-215.5426731668	27334.8	159.8	159.8	nan	27.0	220.9
Al	-264.5408763990	27416.6	223.6	223.6	nan	27.0	240.8
Si	-279.4942911915	27258.2	73.2	73.2	nan	27.0	247.9
P	-346.7143743745	27483.2	304.2	304.2	nan	27.0	298.6
S	-433.5795222262	27273.8	246.8	246.8	nan	27.0	299.0
Cl	-497.8380394922	27290.0	69.0	69.0	nan	27.0	192.4
Ar	-560.5327413164	27158.8	81.8	81.8	nan	27.0	199.6

Table 934: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-3.2325360174	60203.0	6201.0	6201.0	10.0	27.0	2551.7
Li	315.5863766993	56209.0	2207.0	2207.0	4.0	27.0	714.4
Be	-17.0362792214	63726.0	9724.0	9724.0	22.0	27.0	3265.2
B	-28.4335049791	60534.3	6532.3	6532.3	12.7	27.0	1974.1
C	-43.7884537347	55916.0	1914.0	1914.0	8.4	27.0	764.7
N	-62.7506300579	54826.0	824.0	824.0	3.0	27.0	649.8
O	-86.4996920294	54409.0	407.0	407.0	3.0	27.0	485.9
F	-113.4724460598	54669.6	667.6	667.6	3.8	27.0	607.4
Ne	-143.9249597507	54283.8	281.8	281.8	2.2	27.0	438.2
Na	-181.0809545467	54246.8	244.8	244.8	2.0	27.0	471.5
Mg	-222.3811777782	54327.6	325.6	325.6	1.8	27.0	488.9
Al	-267.0451973739	54399.8	397.8	397.8	3.0	27.0	502.7
Si	-319.4490798396	54332.8	330.8	330.8	2.5	27.0	444.9
P	-377.8927457765	54178.6	176.6	176.6	1.8	27.0	409.6
S	-437.0588323581	54146.6	144.6	144.6	1.8	27.0	423.6
Cl	-507.6468823717	54594.8	592.8	592.8	3.4	27.0	545.9
Ar	-578.5191943245	54141.8	139.8	139.8	1.4	27.0	409.3

Table 935: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	-8.1655850881	728.0	728.0	728.0	nan	27.0	256.4
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	-26.3643218749	381.0	381.0	381.0	nan	27.0	101.9
C	-41.3121664714	397.0	397.0	397.0	nan	27.0	97.2
N	-57.9818827872	308.0	308.0	308.0	nan	27.0	66.9
O	-80.4267025738	125.0	125.0	125.0	nan	27.0	57.0
F	-108.0742337012	128.0	128.0	128.0	nan	27.0	42.0
Ne	-145.3075629750	80.0	80.0	80.0	nan	27.0	24.9
Na	-175.5273516470	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	12.5
Mg	-206.1071190161	59.0	59.0	59.0	nan	27.0	15.4
Al	-252.0054954011	227.0	227.0	227.0	nan	27.0	84.5
Si	-301.5597559158	83.0	83.0	83.0	nan	27.0	34.4
P	-342.3031266670	400.0	400.0	400.0	nan	27.0	125.5
S	-426.6941889587	41.0	41.0	41.0	nan	27.0	15.2
Cl	-471.4585031832	78.0	78.0	78.0	nan	27.0	29.8
Ar	-528.0277494947	50.0	50.0	50.0	nan	27.0	22.6

Table 936: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6930808427	1417.0	1417.0	1417.0	1.0	27.0	127.9
He	-3.4563261199	3738.0	3738.0	3738.0	10.0	27.0	119.3
Li	-8.6949177338	6939.0	6939.0	6939.0	19.0	27.0	106.0
Be	-16.8617616360	7495.0	7495.0	7495.0	19.0	27.0	112.7
B	-28.3175306433	3639.0	3639.0	3639.0	18.0	27.0	61.8
C	-43.4624703573	4447.0	4447.0	4447.0	19.0	27.0	77.7
N	-61.8715081355	4377.0	4377.0	4377.0	19.0	27.0	67.8
O	-84.4850623133	3313.0	3313.0	3313.0	19.0	27.0	51.9
F	-111.7562718928	4257.0	4257.0	4257.0	20.0	27.0	58.5
Ne	-144.5566302045	3291.0	3291.0	3291.0	20.0	27.0	42.1
Na	-180.1425331573	3461.0	3461.0	3461.0	20.0	27.0	56.3
Mg	-221.9027528948	2764.0	2764.0	2764.0	20.0	27.0	44.3
Al	-267.2642675355	2434.0	2434.0	2434.0	20.0	27.0	36.8
Si	-320.0655098892	2268.0	2268.0	2268.0	20.0	27.0	30.5
P	-372.7963562059	2133.0	2133.0	2133.0	18.0	27.0	28.7
S	-432.0042645550	1864.0	1864.0	1864.0	18.0	27.0	28.0
Cl	-503.7492975904	2097.0	2097.0	2097.0	20.0	27.0	29.0
Ar	-569.0742587205	2079.0	2079.0	2079.0	19.0	27.0	30.3

Table 937: trust region repeats

34.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6729021813	19120.0	19120.0	19120.0	11.0	27.0	3297.8
cch second order	-0.6736894552	332.0	161.0	161.0	nan	27.0	10.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.7055239414	27115.0	0.0	0.0	nan	27.0	225.1
direct with trim	-0.7069310603	27605.0	488.0	488.0	nan	27.0	387.1
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-0.6930808427	1417.0	1417.0	1417.0	1.0	27.0	127.9

Table 938: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.4617695251	14217.2	14217.2	14217.2	15.8	27.0	2631.8
cch second order	-2.7934662646	311.0	167.0	167.0	nan	27.0	7.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.3661034716	27149.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.9
direct with trim	-3.3555596259	27859.2	708.2	708.2	nan	27.0	340.0
dual anneal	-3.2325360174	60203.0	6201.0	6201.0	10.0	27.0	2551.7
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-3.4563261199	3738.0	3738.0	3738.0	10.0	27.0	119.3

Table 939: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2781510187	13955.2	13955.2	13955.2	13.8	27.0	2539.8
cch second order	-7.1774008542	300.0	152.0	152.0	nan	27.0	10.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.5585879434	27181.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.3
direct with trim	-8.4947254797	27587.6	404.6	404.6	nan	27.0	321.4
dual anneal	315.5863766993	56209.0	2207.0	2207.0	4.0	27.0	714.4
trust region	-8.1655850881	728.0	728.0	728.0	nan	27.0	256.4
trust region repeats	-8.6949177338	6939.0	6939.0	6939.0	19.0	27.0	106.0

Table 940: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.6196225361	13781.6	13781.6	13781.6	3.2	27.0	1962.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-16.2323089096	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	205.3
direct with trim	-16.6233602534	27451.6	384.6	384.6	nan	27.0	276.4
dual anneal	-17.0362792214	63726.0	9724.0	9724.0	22.0	27.0	3265.2
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-16.8617616360	7495.0	7495.0	7495.0	19.0	27.0	112.7

Table 941: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.7069928958	12765.8	12765.8	12765.8	1.6	27.0	1933.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.5707062062	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.9
direct with trim	-27.4393390351	27236.4	211.4	211.4	nan	27.0	297.0
dual anneal	-28.4335049791	60534.3	6532.3	6532.3	12.7	27.0	1974.1
trust region	-26.3643218749	381.0	381.0	381.0	nan	27.0	101.9
trust region repeats	-28.3175306433	3639.0	3639.0	3639.0	18.0	27.0	61.8

Table 942: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-42.2884450379	12122.8	12122.8	12122.8	1.8	27.0	2111.5
cch second order	-42.3071669790	306.0	153.0	153.0	nan	27.0	10.4
diff evo	-43.9714161517	359040.0	0.0	0.0	nan	27.0	1705.7
direct	-41.9906776242	27061.0	0.0	0.0	nan	27.0	199.0
direct with trim	-42.8030486230	27419.2	356.2	356.2	nan	27.0	236.3
dual anneal	-43.7884537347	55916.0	1914.0	1914.0	8.4	27.0	764.7
trust region	-41.3121664714	397.0	397.0	397.0	nan	27.0	97.2
trust region repeats	-43.4624703573	4447.0	4447.0	4447.0	19.0	27.0	77.7

Table 943: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2237453864	11796.8	11796.8	11796.8	1.0	27.0	2297.3
cch second order	-54.3220903854	489.0	264.0	264.0	nan	27.0	13.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-61.1275946663	27075.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.5
direct with trim	-60.4337850636	27330.8	253.8	253.8	nan	27.0	276.5
dual anneal	-62.7506300579	54826.0	824.0	824.0	3.0	27.0	649.8
trust region	-57.9818827872	308.0	308.0	308.0	nan	27.0	66.9
trust region repeats	-61.8715081355	4377.0	4377.0	4377.0	19.0	27.0	67.8

Table 944: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-85.0860813028	9505.8	9505.8	9505.8	1.0	27.0	1531.3
cch second order	-80.3705944468	356.0	164.0	164.0	nan	27.0	10.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-83.7338521994	27101.0	0.0	0.0	nan	27.0	219.1
direct with trim	-80.4207568995	27655.6	552.6	552.6	nan	27.0	347.8
dual anneal	-86.4996920294	54409.0	407.0	407.0	3.0	27.0	485.9
trust region	-80.4267025738	125.0	125.0	125.0	nan	27.0	57.0
trust region repeats	-84.4850623133	3313.0	3313.0	3313.0	19.0	27.0	51.9

Table 945: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-103.4501305798	8676.4	8676.4	8676.4	1.0	27.0	1015.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-114.0474367157	464915.0	0.0	0.0	nan	27.0	2718.9
direct	-106.9219149430	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	221.5
direct with trim	-109.5416476278	27407.4	378.4	378.4	nan	27.0	237.7
dual anneal	-113.4724460598	54669.6	667.6	667.6	3.8	27.0	607.4
trust region	-108.0742337012	128.0	128.0	128.0	nan	27.0	42.0
trust region repeats	-111.7562718928	4257.0	4257.0	4257.0	20.0	27.0	58.5

Table 946: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.0825817139	8677.8	8677.8	8677.8	1.0	27.0	990.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-131.4567303367	27167.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.0
direct with trim	-138.8884044113	27406.4	237.4	237.4	nan	27.0	275.7
dual anneal	-143.9249597507	54283.8	281.8	281.8	2.2	27.0	438.2
trust region	-145.3075629750	80.0	80.0	80.0	nan	27.0	24.9
trust region repeats	-144.5566302045	3291.0	3291.0	3291.0	20.0	27.0	42.1

Table 947: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-178.8063861494	6628.0	6628.0	6628.0	1.0	27.0	950.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-176.0048870154	27189.0	0.0	0.0	nan	27.0	223.5
direct with trim	-174.1740136771	27266.6	75.6	75.6	nan	27.0	217.3
dual anneal	-181.0809545467	54246.8	244.8	244.8	2.0	27.0	471.5
trust region	-175.5273516470	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	12.5
trust region repeats	-180.1425331573	3461.0	3461.0	3461.0	20.0	27.0	56.3

Table 948: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0341730579	6631.6	6631.6	6631.6	1.0	27.0	1106.2
cch second order	-212.0514641673	281.0	139.0	139.0	nan	27.0	10.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-212.4989918756	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	224.6
direct with trim	-215.5426731668	27334.8	159.8	159.8	nan	27.0	220.9
dual anneal	-222.3811777782	54327.6	325.6	325.6	1.8	27.0	488.9
trust region	-206.1071190161	59.0	59.0	59.0	nan	27.0	15.4
trust region repeats	-221.9027528948	2764.0	2764.0	2764.0	20.0	27.0	44.3

Table 949: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.6112887360	6446.2	6446.2	6446.2	1.0	27.0	994.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-261.6767240438	27191.0	0.0	0.0	nan	27.0	221.5
direct with trim	-264.5408763990	27416.6	223.6	223.6	nan	27.0	240.8
dual anneal	-267.0451973739	54399.8	397.8	397.8	3.0	27.0	502.7
trust region	-252.0054954011	227.0	227.0	227.0	nan	27.0	84.5
trust region repeats	-267.2642675355	2434.0	2434.0	2434.0	20.0	27.0	36.8

Table 950: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-297.6588792268	5773.8	5773.8	5773.8	1.0	27.0	1084.1
cch second order	-301.7019179569	392.0	175.0	175.0	nan	27.0	12.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-292.3369710788	27183.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.9
direct with trim	-279.4942911915	27258.2	73.2	73.2	nan	27.0	247.9
dual anneal	-319.4490798396	54332.8	330.8	330.8	2.5	27.0	444.9
trust region	-301.5597559158	83.0	83.0	83.0	nan	27.0	34.4
trust region repeats	-320.0655098892	2268.0	2268.0	2268.0	20.0	27.0	30.5

Table 951: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3059362539	4802.6	4802.6	4802.6	1.0	27.0	1235.5
cch second order	-356.8539102819	237.0	121.0	121.0	nan	27.0	9.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-341.4551254612	27177.0	0.0	0.0	nan	27.0	227.0
direct with trim	-346.7143743745	27483.2	304.2	304.2	nan	27.0	298.6
dual anneal	-377.8927457765	54178.6	176.6	176.6	1.8	27.0	409.6
trust region	-342.3031266670	400.0	400.0	400.0	nan	27.0	125.5
trust region repeats	-372.7963562059	2133.0	2133.0	2133.0	18.0	27.0	28.7

Table 952: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-426.7630476006	4317.8	4317.8	4317.8	1.0	27.0	855.9
cch second order	-420.4660268840	317.0	153.0	153.0	nan	27.0	10.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-425.9872070227	27025.0	0.0	0.0	nan	27.0	211.0
direct with trim	-433.5795222262	27273.8	246.8	246.8	nan	27.0	299.0
dual anneal	-437.0588323581	54146.6	144.6	144.6	1.8	27.0	423.6
trust region	-426.6941889587	41.0	41.0	41.0	nan	27.0	15.2
trust region repeats	-432.0042645550	1864.0	1864.0	1864.0	18.0	27.0	28.0

Table 953: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-469.2137255781	4070.0	4070.0	4070.0	1.0	27.0	740.1
cch second order	-468.8363412844	298.0	145.0	145.0	nan	27.0	11.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-487.9295274919	27219.0	0.0	0.0	nan	27.0	217.0
direct with trim	-497.8380394922	27290.0	69.0	69.0	nan	27.0	192.4
dual anneal	-507.6468823717	54594.8	592.8	592.8	3.4	27.0	545.9
trust region	-471.4585031832	78.0	78.0	78.0	nan	27.0	29.8
trust region repeats	-503.7492975904	2097.0	2097.0	2097.0	20.0	27.0	29.0

Table 954: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-562.3681315245	3973.8	3973.8	3973.8	1.0	27.0	737.5
cch second order	-567.3657407456	384.0	176.0	176.0	nan	27.0	11.4
diff evo	-576.4217646769	606512.5	0.0	0.0	nan	27.0	3547.3
direct	-561.7244792662	27075.0	0.0	0.0	nan	27.0	204.8
direct with trim	-560.5327413164	27158.8	81.8	81.8	nan	27.0	199.6
dual anneal	-578.5191943245	54141.8	139.8	139.8	1.4	27.0	409.3
trust region	-528.0277494947	50.0	50.0	50.0	nan	27.0	22.6
trust region repeats	-569.0742587205	2079.0	2079.0	2079.0	19.0	27.0	30.3

Table 955: Ar

34.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct with trim	-0.7069310603
He	basin hopping	-3.4617695251
Li	trust region repeats	-8.6949177338
Be	dual anneal	-17.0362792214
B	dual anneal	-28.4335049791
C	diff evo	-43.9714161517
N	dual anneal	-62.7506300579
O	dual anneal	-86.4996920294
F	diff evo	-114.0474367157
Ne	trust region	-145.3075629750
Na	dual anneal	-181.0809545467
Mg	dual anneal	-222.3811777782
Al	trust region repeats	-267.2642675355
Si	trust region repeats	-320.0655098892
P	dual anneal	-377.8927457765
S	dual anneal	-437.0588323581
Cl	dual anneal	-507.6468823717
Ar	dual anneal	-578.5191943245

Table 956: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	207.1	207.1	207.1	nan	-211.4210497170	65.8
cch second order	333.6	164.2	164.2	nan	-209.5766508088	10.7
trust region repeats	3445.2	3445.2	3445.2	17.7	-187.2863778015	61.6
basin hopping	9292.4	9292.4	9292.4	3.3	-180.9239994614	1556.4
direct	27122.0	0.0	0.0	nan	-180.0154396387	217.6
direct with trim	27413.4	289.4	289.4	nan	-181.1735605513	272.9
dual anneal	55832.1	1830.1	1830.1	5.1	-180.8603640894	891.0
diff evo	476822.5	0.0	0.0	nan	-244.8135391814	2657.3

Table 957: Average (all systems)

35 27s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

35.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 958: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-2.4758348392	9585.6	9585.6	9585.6	17.0	27.0	1193.8
He	-8.5609290096	9087.4	9087.4	9087.4	13.0	27.0	1152.9
Li	-19.2552327168	7401.8	7401.8	7401.8	6.2	27.0	942.2
Be	-34.0082760703	8151.6	8151.6	8151.6	6.0	27.0	990.7
B	-49.5858009150	9708.0	9708.0	9708.0	2.0	27.0	1141.5
C	-75.8457053562	8190.2	8190.2	8190.2	5.0	27.0	977.6
N	-103.3458651241	7029.6	7029.6	7029.6	3.0	27.0	974.3
O	-130.3242904846	7708.0	7708.0	7708.0	4.8	27.0	1113.3
F	-171.5328067994	5693.2	5693.2	5693.2	1.6	27.0	727.5
Ne	-212.2913620390	6621.0	6621.0	6621.0	4.0	27.0	1055.3
Na	-257.5584152939	5871.2	5871.2	5871.2	4.0	27.0	918.6
Mg	-296.0451345147	4304.4	4304.4	4304.4	3.6	27.0	604.9
Al	-354.2787605181	4345.2	4345.2	4345.2	1.6	27.0	569.7
Si	-408.1004776813	4752.0	4752.0	4752.0	4.6	27.0	560.0
P	-486.8490644405	3710.2	3710.2	3710.2	1.6	27.0	759.4
S	-578.3873051931	3222.6	3222.6	3222.6	1.0	27.0	551.3
Cl	-657.7471592372	3053.4	3053.4	3053.4	1.0	27.0	638.2
Ar	-689.9775108002	3199.4	3199.4	3199.4	3.6	27.0	441.8

Table 959: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.3050539633	238.0	124.0	124.0	nan	27.0	10.4
He	-5.8916417511	316.0	146.0	146.0	nan	27.0	7.4
Li	-9.9724573715	450.0	226.0	226.0	nan	27.0	15.1
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-54.5669694878	443.0	249.0	249.0	nan	27.0	10.0
O	-90.0167279037	355.0	180.0	180.0	nan	27.0	11.8
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-143.0126066747	438.0	211.0	211.0	nan	27.0	14.0
Na	-187.3941534070	510.0	255.0	255.0	nan	27.0	10.1
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-368.7083033966	317.0	158.0	158.0	nan	27.0	12.4
P	-347.7887854740	242.0	123.0	123.0	nan	27.0	6.7
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	-473.1308316316	249.0	135.0	135.0	nan	27.0	9.9
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 960: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 961: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.0293533741	27019.0	0.0	0.0	nan	27.0	245.7
He	-4.5938399253	27157.0	0.0	0.0	nan	27.0	258.5
Li	-10.8788688594	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	258.2
Be	-19.7558294417	27017.0	0.0	0.0	nan	27.0	251.7
B	-31.8569943926	27105.0	0.0	0.0	nan	27.0	253.0
C	-49.8648189919	27025.0	0.0	0.0	nan	27.0	250.1
N	-70.8344513945	27159.0	0.0	0.0	nan	27.0	219.4
O	-96.3758886182	27061.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.0
F	-124.9813060176	27211.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.5
Ne	-146.4074583297	27253.0	0.0	0.0	nan	27.0	220.8
Na	-197.8712294254	27145.0	0.0	0.0	nan	27.0	226.6
Mg	-240.8963907987	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	268.6
Al	-282.0414427385	27215.0	0.0	0.0	nan	27.0	266.0
Si	-322.8932866440	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	190.5
P	-378.7303893887	27165.0	0.0	0.0	nan	27.0	256.7
S	-452.3394486348	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	264.1
Cl	-537.8204618053	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.5
Ar	-613.7650172006	27031.0	0.0	0.0	nan	27.0	251.3

Table 962: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.3720590785	27684.4	663.4	663.4	nan	27.0	511.4
He	-6.2841192204	27384.6	225.6	225.6	nan	27.0	309.2
Li	-15.6107329864	27142.0	117.0	117.0	nan	27.0	257.9
Be	-25.6326593360	27192.0	173.0	173.0	nan	27.0	353.2
B	-36.0697178989	27289.0	182.0	182.0	nan	27.0	325.8
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-70.8441361890	27311.0	150.0	150.0	nan	27.0	311.2
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 963: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	-12.3341434341	63743.0	9741.0	9741.0	37.0	27.0	2355.9
Be	-24.4388751269	58378.3	4376.3	4376.3	17.3	27.0	1672.3
B	-47.5086281781	54934.2	932.2	932.2	6.0	27.0	648.5
C	-66.4058327872	54786.0	784.0	784.0	3.4	27.0	592.5
N	-92.7642722945	54164.0	162.0	162.0	1.8	27.0	559.8
O	-127.1355217421	54290.0	288.0	288.0	1.2	27.0	573.1
F	-165.3046593320	54900.8	898.8	898.8	3.2	27.0	667.5
Ne	-204.0846505142	54204.0	202.0	202.0	2.2	27.0	480.4
Na	-239.7610531422	54130.0	128.0	128.0	1.5	27.0	518.3
Mg	-313.4235472965	54100.4	98.4	98.4	1.2	27.0	540.8
Al	-360.8916400316	54215.4	213.4	213.4	2.0	27.0	490.1
Si	-428.2824506461	54120.4	118.4	118.4	1.6	27.0	468.5
P	-498.3100486227	54061.2	59.2	59.2	1.0	27.0	484.1
S	-576.9715029517	54168.0	166.0	166.0	1.4	27.0	488.6
Cl	-661.4701310137	54143.8	141.8	141.8	1.4	27.0	485.4
Ar	-738.3731947352	54143.2	141.2	141.2	1.6	27.0	513.0

Table 964: dual anneal

415

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.7652804194	119.0	119.0	119.0	nan	27.0	15.5
He	-4.3515508989	416.0	416.0	416.0	nan	27.0	148.5
Li	-12.5828826625	57.0	57.0	57.0	nan	27.0	11.6
Be	-26.9872367960	68.0	68.0	68.0	nan	27.0	12.2
B	-45.2695053350	100.0	100.0	100.0	nan	27.0	24.7
C	-56.4594396292	97.0	97.0	97.0	nan	27.0	40.6
N	-86.2212106696	50.0	50.0	50.0	nan	27.0	36.0
O	-122.1525652715	95.0	95.0	95.0	nan	27.0	35.1
F	-146.9736653009	135.0	135.0	135.0	nan	27.0	23.2
Ne	-160.0638759228	48.0	48.0	48.0	nan	27.0	14.2
Na	-228.2696665778	129.0	129.0	129.0	nan	27.0	78.5
Mg	-293.4526081427	94.0	94.0	94.0	nan	27.0	19.1
Al	-294.7553884596	38.0	38.0	38.0	nan	27.0	13.2
Si	-404.5744459150	77.0	77.0	77.0	nan	27.0	15.4
P	-455.0682144304	62.0	62.0	62.0	nan	27.0	21.8
S	-573.1687119326	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	9.7
Cl	-662.5460479121	77.0	77.0	77.0	nan	27.0	27.3
Ar	-741.1991851479	93.0	93.0	93.0	nan	27.0	21.9

Table 965: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.6302097362	3497.0	3497.0	3497.0	13.0	27.0	95.1
He	-7.4029495762	3772.0	3772.0	3772.0	15.0	27.0	77.0
Li	-15.9158844886	2904.0	2904.0	2904.0	19.0	27.0	50.5
Be	-28.9488190146	2662.0	2662.0	2662.0	20.0	27.0	38.0
B	-45.5056170934	2299.0	2299.0	2299.0	19.0	27.0	45.9
C	-68.4581611678	1924.0	1924.0	1924.0	18.0	27.0	32.9
N	-97.6831645991	2657.0	2657.0	2657.0	20.0	27.0	44.7
O	-129.0855432325	1588.0	1588.0	1588.0	20.0	27.0	25.2
F	-172.4840607488	2369.0	2369.0	2369.0	20.0	27.0	36.5
Ne	-209.1949657935	2017.0	2017.0	2017.0	20.0	27.0	30.6
Na	-259.3477203254	2121.0	2121.0	2121.0	20.0	27.0	34.3
Mg	-313.4235586105	1748.0	1748.0	1748.0	20.0	27.0	30.6
Al	-378.2411896196	1708.0	1708.0	1708.0	18.0	27.0	25.5
Si	-442.1030881147	1865.0	1865.0	1865.0	19.0	27.0	24.5
P	-514.0973493970	1700.0	1700.0	1700.0	17.0	27.0	28.1
S	-590.5445689227	1465.0	1465.0	1465.0	20.0	27.0	23.7
Cl	-672.7675042368	1576.0	1576.0	1576.0	20.0	27.0	24.7
Ar	-744.8850266098	1523.0	1523.0	1523.0	19.0	27.0	25.3

Table 966: trust region repeats

35.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.4758348392	9585.6	9585.6	9585.6	17.0	27.0	1193.8
cch second order	-1.3050539633	238.0	124.0	124.0	nan	27.0	10.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1.0293533741	27019.0	0.0	0.0	nan	27.0	245.7
direct with trim	-1.3720590785	27684.4	663.4	663.4	nan	27.0	511.4
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-1.7652804194	119.0	119.0	119.0	nan	27.0	15.5
trust region repeats	-1.6302097362	3497.0	3497.0	3497.0	13.0	27.0	95.1

Table 967: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5609290096	9087.4	9087.4	9087.4	13.0	27.0	1152.9
cch second order	-5.8916417511	316.0	146.0	146.0	nan	27.0	7.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-4.5938399253	27157.0	0.0	0.0	nan	27.0	258.5
direct with trim	-6.2841192204	27384.6	225.6	225.6	nan	27.0	309.2
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-4.3515508989	416.0	416.0	416.0	nan	27.0	148.5
trust region repeats	-7.4029495762	3772.0	3772.0	3772.0	15.0	27.0	77.0

Table 968: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.2552327168	7401.8	7401.8	7401.8	6.2	27.0	942.2
cch second order	-9.9724573715	450.0	226.0	226.0	nan	27.0	15.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-10.8788688594	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	258.2
direct with trim	-15.6107329864	27142.0	117.0	117.0	nan	27.0	257.9
dual anneal	-12.3341434341	63743.0	9741.0	9741.0	37.0	27.0	2355.9
trust region	-12.5828826625	57.0	57.0	57.0	nan	27.0	11.6
trust region repeats	-15.9158844886	2904.0	2904.0	2904.0	19.0	27.0	50.5

Table 969: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-34.0082760703	8151.6	8151.6	8151.6	6.0	27.0	990.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-19.7558294417	27017.0	0.0	0.0	nan	27.0	251.7
direct with trim	-25.6326593360	27192.0	173.0	173.0	nan	27.0	353.2
dual anneal	-24.4388751269	58378.3	4376.3	4376.3	17.3	27.0	1672.3
trust region	-26.9872367960	68.0	68.0	68.0	nan	27.0	12.2
trust region repeats	-28.9488190146	2662.0	2662.0	2662.0	20.0	27.0	38.0

Table 970: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-49.5858009150	9708.0	9708.0	9708.0	2.0	27.0	1141.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-31.8569943926	27105.0	0.0	0.0	nan	27.0	253.0
direct with trim	-36.0697178989	27289.0	182.0	182.0	nan	27.0	325.8
dual anneal	-47.5086281781	54934.2	932.2	932.2	6.0	27.0	648.5
trust region	-45.2695053350	100.0	100.0	100.0	nan	27.0	24.7
trust region repeats	-45.5056170934	2299.0	2299.0	2299.0	19.0	27.0	45.9

Table 971: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.8457053562	8190.2	8190.2	8190.2	5.0	27.0	977.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-49.8648189919	27025.0	0.0	0.0	nan	27.0	250.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-66.4058327872	54786.0	784.0	784.0	3.4	27.0	592.5
trust region	-56.4594396292	97.0	97.0	97.0	nan	27.0	40.6
trust region repeats	-68.4581611678	1924.0	1924.0	1924.0	18.0	27.0	32.9

Table 972: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-103.3458651241	7029.6	7029.6	7029.6	3.0	27.0	974.3
cch second order	-54.5669694878	443.0	249.0	249.0	nan	27.0	10.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-70.8344513945	27159.0	0.0	0.0	nan	27.0	219.4
direct with trim	-70.8441361890	27311.0	150.0	150.0	nan	27.0	311.2
dual anneal	-92.7642722945	54164.0	162.0	162.0	1.8	27.0	559.8
trust region	-86.2212106696	50.0	50.0	50.0	nan	27.0	36.0
trust region repeats	-97.6831645991	2657.0	2657.0	2657.0	20.0	27.0	44.7

Table 973: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-130.3242904846	7708.0	7708.0	7708.0	4.8	27.0	1113.3
cch second order	-90.0167279037	355.0	180.0	180.0	nan	27.0	11.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-96.3758886182	27061.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-127.1355217421	54290.0	288.0	288.0	1.2	27.0	573.1
trust region	-122.1525652715	95.0	95.0	95.0	nan	27.0	35.1
trust region repeats	-129.0855432325	1588.0	1588.0	1588.0	20.0	27.0	25.2

Table 974: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-171.5328067994	5693.2	5693.2	5693.2	1.6	27.0	727.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-124.9813060176	27211.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-165.3046593320	54900.8	898.8	898.8	3.2	27.0	667.5
trust region	-146.9736653009	135.0	135.0	135.0	nan	27.0	23.2
trust region repeats	-172.4840607488	2369.0	2369.0	2369.0	20.0	27.0	36.5

Table 975: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.2913620390	6621.0	6621.0	6621.0	4.0	27.0	1055.3
cch second order	-143.0126066747	438.0	211.0	211.0	nan	27.0	14.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-146.4074583297	27253.0	0.0	0.0	nan	27.0	220.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-204.0846505142	54204.0	202.0	202.0	2.2	27.0	480.4
trust region	-160.0638759228	48.0	48.0	48.0	nan	27.0	14.2
trust region repeats	-209.1949657935	2017.0	2017.0	2017.0	20.0	27.0	30.6

Table 976: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5584152939	5871.2	5871.2	5871.2	4.0	27.0	918.6
cch second order	-187.3941534070	510.0	255.0	255.0	nan	27.0	10.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-197.8712294254	27145.0	0.0	0.0	nan	27.0	226.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-239.7610531422	54130.0	128.0	128.0	1.5	27.0	518.3
trust region	-228.2696665778	129.0	129.0	129.0	nan	27.0	78.5
trust region repeats	-259.3477203254	2121.0	2121.0	2121.0	20.0	27.0	34.3

Table 977: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-296.0451345147	4304.4	4304.4	4304.4	3.6	27.0	604.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-240.8963907987	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	268.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-313.4235472965	54100.4	98.4	98.4	1.2	27.0	540.8
trust region	-293.4526081427	94.0	94.0	94.0	nan	27.0	19.1
trust region repeats	-313.4235586105	1748.0	1748.0	1748.0	20.0	27.0	30.6

Table 978: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-354.2787605181	4345.2	4345.2	4345.2	1.6	27.0	569.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-282.0414427385	27215.0	0.0	0.0	nan	27.0	266.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-360.8916400316	54215.4	213.4	213.4	2.0	27.0	490.1
trust region	-294.7553884596	38.0	38.0	38.0	nan	27.0	13.2
trust region repeats	-378.2411896196	1708.0	1708.0	1708.0	18.0	27.0	25.5

Table 979: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-408.1004776813	4752.0	4752.0	4752.0	4.6	27.0	560.0
cch second order	-368.7083033966	317.0	158.0	158.0	nan	27.0	12.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-322.8932866440	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	190.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-428.2824506461	54120.4	118.4	118.4	1.6	27.0	468.5
trust region	-404.5744459150	77.0	77.0	77.0	nan	27.0	15.4
trust region repeats	-442.1030881147	1865.0	1865.0	1865.0	19.0	27.0	24.5

Table 980: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-486.8490644405	3710.2	3710.2	3710.2	1.6	27.0	759.4
cch second order	-347.7887854740	242.0	123.0	123.0	nan	27.0	6.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-378.7303893887	27165.0	0.0	0.0	nan	27.0	256.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-498.3100486227	54061.2	59.2	59.2	1.0	27.0	484.1
trust region	-455.0682144304	62.0	62.0	62.0	nan	27.0	21.8
trust region repeats	-514.0973493970	1700.0	1700.0	1700.0	17.0	27.0	28.1

Table 981: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-578.3873051931	3222.6	3222.6	3222.6	1.0	27.0	551.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-452.3394486348	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	264.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-576.9715029517	54168.0	166.0	166.0	1.4	27.0	488.6
trust region	-573.1687119326	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	9.7
trust region repeats	-590.5445689227	1465.0	1465.0	1465.0	20.0	27.0	23.7

Table 982: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-657.7471592372	3053.4	3053.4	3053.4	1.0	27.0	638.2
cch second order	-473.1308316316	249.0	135.0	135.0	nan	27.0	9.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-537.8204618053	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-661.4701310137	54143.8	141.8	141.8	1.4	27.0	485.4
trust region	-662.5460479121	77.0	77.0	77.0	nan	27.0	27.3
trust region repeats	-672.7675042368	1576.0	1576.0	1576.0	20.0	27.0	24.7

Table 983: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-689.9775108002	3199.4	3199.4	3199.4	3.6	27.0	441.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-613.7650172006	27031.0	0.0	0.0	nan	27.0	251.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-738.3731947352	54143.2	141.2	141.2	1.6	27.0	513.0
trust region	-741.1991851479	93.0	93.0	93.0	nan	27.0	21.9
trust region repeats	-744.8850266098	1523.0	1523.0	1523.0	19.0	27.0	25.3

Table 984: Ar

35.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-2.4758348392
He	basin hopping	-8.5609290096
Li	basin hopping	-19.2552327168
Be	basin hopping	-34.0082760703
B	basin hopping	-49.5858009150
C	basin hopping	-75.8457053562
N	basin hopping	-103.3458651241
O	basin hopping	-130.3242904846
F	trust region repeats	-172.4840607488
Ne	basin hopping	-212.2913620390
Na	trust region repeats	-259.3477203254
Mg	trust region repeats	-313.4235586105
Al	trust region repeats	-378.2411896196
Si	trust region repeats	-442.1030881147
P	trust region repeats	-514.0973493970
S	trust region repeats	-590.5445689227
Cl	trust region repeats	-672.7675042368
Ar	trust region repeats	-744.8850266098

Table 985: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	355.8	180.7	180.7	nan	-168.1787531061	10.8
basin hopping	6201.9	6201.9	6201.9	4.6	-252.0094406130	850.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	98.7	98.7	98.7	nan	-239.7700823013	31.6
trust region repeats	2188.6	2188.6	2188.6	18.7	-260.6510767382	38.5
direct	27104.6	0.0	0.0	nan	-199.0520264434	237.9
direct with trim	27333.8	251.8	251.8	nan	-25.9689041182	344.8
dual anneal	55155.2	1153.2	1153.2	5.2	-284.8412594905	721.2

Table 986: Average (all systems)

36 27s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

36.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 987: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213617653	6972.8	6972.8	6972.8	4.4	27.0	1180.8
He	-3.0901193370	5505.0	5505.0	5505.0	3.4	27.0	1377.1
Li	-7.9887989270	5254.2	5254.2	5254.2	2.8	27.0	1548.7
Be	-15.7299400160	4900.6	4900.6	4900.6	3.0	27.0	971.0
B	-26.6444974392	5556.8	5556.8	5556.8	2.2	27.0	1421.5
C	-41.0135870253	4524.4	4524.4	4524.4	1.6	27.0	1308.6
N	-59.0840338663	4871.4	4871.4	4871.4	1.8	27.0	1147.9
O	-81.0773235091	5878.8	5878.8	5878.8	2.8	27.0	1750.4
F	-107.1952967621	4896.6	4896.6	4896.6	1.8	27.0	1341.9
Ne	-137.6240288727	5382.6	5382.6	5382.6	2.0	27.0	1780.6
Na	-172.5366071169	4760.2	4760.2	4760.2	1.8	27.0	1525.9
Mg	-212.0951969972	4538.6	4538.6	4538.6	1.2	27.0	1176.9
Al	-256.4526263706	5038.8	5038.8	5038.8	2.0	27.0	1433.5
Si	-305.7536301314	3861.4	3861.4	3861.4	1.2	27.0	1219.8
P	-360.1358482643	4898.4	4898.4	4898.4	1.6	27.0	1126.0
S	-419.7306399649	5021.4	5021.4	5021.4	2.0	27.0	1341.2
Cl	-484.6637575190	4683.6	4683.6	4683.6	1.8	27.0	1242.7
Ar	-555.0559112055	6488.8	6488.8	6488.8	2.6	27.0	1836.3

Table 988: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6121446923	167.0	76.0	76.0	nan	27.0	5.6
He	-3.0901192518	165.0	92.0	92.0	nan	27.0	8.3
Li	-7.9887989628	166.0	90.0	90.0	nan	27.0	5.7
Be	-15.7299399696	183.0	100.0	100.0	nan	27.0	5.9
B	-26.6444974353	173.0	95.0	95.0	nan	27.0	10.0
C	-41.0135869611	180.0	100.0	100.0	nan	27.0	5.9
N	-59.0840338783	155.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.7
O	-81.0773235338	159.0	90.0	90.0	nan	27.0	5.5
F	-107.1952968321	188.0	102.0	102.0	nan	27.0	6.0
Ne	-137.6240288411	171.0	95.0	95.0	nan	27.0	5.4
Na	-172.5366070968	168.0	94.0	94.0	nan	27.0	5.5
Mg	-212.0951970087	193.0	105.0	105.0	nan	27.0	6.2
Al	-256.4526263785	186.0	103.0	103.0	nan	27.0	8.1
Si	-305.7536300644	189.0	102.0	102.0	nan	27.0	6.0
P	-360.1358483534	249.0	126.0	126.0	nan	27.0	9.2
S	-419.7306400029	185.0	99.0	99.0	nan	27.0	8.2
Cl	-484.6637575215	233.0	124.0	124.0	nan	27.0	6.1
Ar	-555.0559112222	209.0	110.0	110.0	nan	27.0	5.8

Table 989: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213613591	182875.0	0.0	0.0	nan	27.0	1453.6
He	-3.0901134429	179883.0	0.0	0.0	nan	27.0	1279.0
Li	-7.9887883198	230813.0	0.0	0.0	nan	27.0	1639.7
Be	-15.7299277396	245817.0	0.0	0.0	nan	27.0	1903.7
B	-26.6444856346	226655.0	0.0	0.0	nan	27.0	1664.0
C	-41.0135592040	224708.0	0.0	0.0	nan	27.0	1861.5
N	-59.0839714007	204778.8	0.0	0.0	nan	27.0	1758.9
O	-81.0772468206	236819.0	0.0	0.0	nan	27.0	1722.3
F	-107.1952512355	313643.0	0.0	0.0	nan	27.0	2039.4
Ne	-137.6239681719	284757.0	0.0	0.0	nan	27.0	2304.8
Na	-172.5364295706	271403.0	0.0	0.0	nan	27.0	1998.1
Mg	-212.0951333384	329098.0	0.0	0.0	nan	27.0	2388.7
Al	-256.4524704808	277970.0	0.0	0.0	nan	27.0	2192.4
Si	-305.7534279330	266057.0	0.0	0.0	nan	27.0	2246.3
P	-360.1356065078	242726.0	0.0	0.0	nan	27.0	1970.7
S	-419.7304826392	287815.0	0.0	0.0	nan	27.0	2224.7
Cl	-484.6635475007	271106.0	0.0	0.0	nan	27.0	2019.3
Ar	-555.0557109622	289663.0	0.0	0.0	nan	27.0	2274.1

Table 990: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6209195627	27125.0	0.0	0.0	nan	27.0	181.5
He	-3.0804284276	27043.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.7
Li	-7.9752671063	27017.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.6
Be	-15.6822195492	27211.0	0.0	0.0	nan	27.0	167.5
B	-26.5898908848	27095.0	0.0	0.0	nan	27.0	203.9
C	-40.7305811756	27031.0	0.0	0.0	nan	27.0	203.4
N	-58.7284478601	27049.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.2
O	-80.0846457947	27237.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.0
F	-106.4811689883	27071.0	0.0	0.0	nan	27.0	186.2
Ne	-136.6802491926	27185.0	0.0	0.0	nan	27.0	184.0
Na	-171.5195031339	27037.0	0.0	0.0	nan	27.0	181.1
Mg	-209.6997769380	27073.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.3
Al	-253.8883076666	27167.0	0.0	0.0	nan	27.0	194.0
Si	-304.6515425664	27035.0	0.0	0.0	nan	27.0	191.1
P	-356.3174938329	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.4
S	-415.8156314502	27159.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.6
Cl	-482.9252108537	27271.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.9
Ar	-548.4474485669	27135.0	0.0	0.0	nan	27.0	209.7

Table 991: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213617653	27134.0	7.0	7.0	nan	27.0	170.0
He	-3.0901193370	27053.0	8.0	8.0	nan	27.0	175.6
Li	-7.9887989270	27027.0	8.0	8.0	nan	27.0	165.9
Be	-15.7299400160	27221.0	8.0	8.0	nan	27.0	161.8
B	-26.6444974392	27105.0	8.0	8.0	nan	27.0	178.5
C	-41.0134457304	27048.0	15.0	15.0	nan	27.0	163.4
N	-59.0840338663	27059.0	8.0	8.0	nan	27.0	166.2
O	-81.0773235091	27247.0	8.0	8.0	nan	27.0	167.5
F	-107.1952967621	27081.0	8.0	8.0	nan	27.0	163.6
Ne	-137.6240288727	27194.0	7.0	7.0	nan	27.0	193.9
Na	-172.5366071169	27048.0	9.0	9.0	nan	27.0	163.8
Mg	-212.0951969972	27083.0	8.0	8.0	nan	27.0	170.6
Al	-256.4526263706	27178.0	9.0	9.0	nan	27.0	179.1
Si	-305.7536301314	27045.0	8.0	8.0	nan	27.0	195.8
P	-360.1358482643	27103.0	8.0	8.0	nan	27.0	177.5
S	-419.7306399649	27175.0	14.0	14.0	nan	27.0	176.8
Cl	-484.6637575190	27281.0	8.0	8.0	nan	27.0	154.2
Ar	-555.0559112055	27146.0	9.0	9.0	nan	27.0	165.6

Table 992: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213617653	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	344.5
He	-3.0901193370	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	310.2
Li	-7.9887989270	54010.8	8.8	8.8	1.0	27.0	330.5
Be	-15.7299400159	54011.2	9.2	9.2	1.0	27.0	343.5
B	-26.6444974391	54011.8	9.8	9.8	1.0	27.0	368.9
C	-41.0135870252	54012.6	10.6	10.6	1.0	27.0	310.7
N	-59.0840338661	54013.4	11.4	11.4	1.0	27.0	345.5
O	-81.0773235087	54016.6	14.6	14.6	1.0	27.0	376.2
F	-107.1952967616	54020.8	18.8	18.8	1.0	27.0	319.5
Ne	-137.6240288719	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	359.8
Na	-172.5366071159	54013.8	11.8	11.8	1.0	27.0	363.9
Mg	-212.0951969959	54020.0	18.0	18.0	1.0	27.0	400.2
Al	-256.4526263690	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	394.8
Si	-305.7536301293	54014.2	12.2	12.2	1.0	27.0	369.2
P	-360.1358482617	54020.6	18.6	18.6	1.0	27.0	396.4
S	-419.7306399617	54023.2	21.2	21.2	1.0	27.0	344.7
Cl	-484.6637575152	54017.2	15.2	15.2	1.0	27.0	399.7
Ar	-555.0559112011	54019.8	17.8	17.8	1.0	27.0	381.5

Table 993: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213617653	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.8
He	-3.0901193370	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	8.5
Li	-7.9887989270	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.7
Be	-15.7299400160	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	5.5
B	-26.6444974392	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.8
C	-41.0135870253	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
N	-59.0840338663	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	7.3
O	-81.0773235091	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
F	-107.1952967621	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.6
Ne	-137.6240288727	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	4.1
Na	-172.5366071169	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	5.6
Mg	-212.0951969972	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	4.0
Al	-256.4526263706	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.7
Si	-305.7536301314	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
P	-360.1358482643	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	3.7
S	-419.7306399649	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	3.7
Cl	-484.6637575190	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.8
Ar	-555.0559112055	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0

Table 994: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213617653	293.0	293.0	293.0	1.0	27.0	7.1
He	-3.0901193370	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	6.4
Li	-7.9887989270	280.0	280.0	280.0	1.0	27.0	5.8
Be	-15.7299400160	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.8
B	-26.6444974392	289.0	289.0	289.0	1.0	27.0	5.4
C	-41.0135870253	286.0	286.0	286.0	1.0	27.0	5.1
N	-59.0840338663	288.0	288.0	288.0	1.0	27.0	5.4
O	-81.0773235091	294.0	294.0	294.0	1.0	27.0	5.6
F	-107.1952967621	290.0	290.0	290.0	1.0	27.0	5.8
Ne	-137.6240288727	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	4.9
Na	-172.5366071169	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.4
Mg	-212.0951969972	294.0	294.0	294.0	1.0	27.0	5.6
Al	-256.4526263706	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	6.1
Si	-305.7536301314	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.2
P	-360.1358482643	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	5.1
S	-419.7306399649	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	5.5
Cl	-484.6637575190	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.4
Ar	-555.0559112055	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.3

Table 995: trust region repeats

36.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213617653	6972.8	6972.8	6972.8	4.4	27.0	1180.8
cch second order	-0.6121446923	167.0	76.0	76.0	nan	27.0	5.6
diff evo	-0.6213613591	182875.0	0.0	0.0	nan	27.0	1453.6
direct	-0.6209195627	27125.0	0.0	0.0	nan	27.0	181.5
direct with trim	-0.6213617653	27134.0	7.0	7.0	nan	27.0	170.0
dual anneal	-0.6213617653	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	344.5
trust region	-0.6213617653	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-0.6213617653	293.0	293.0	293.0	1.0	27.0	7.1

Table 996: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901193370	5505.0	5505.0	5505.0	3.4	27.0	1377.1
cch second order	-3.0901192518	165.0	92.0	92.0	nan	27.0	8.3
diff evo	-3.0901134429	179883.0	0.0	0.0	nan	27.0	1279.0
direct	-3.0804284276	27043.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.7
direct with trim	-3.0901193370	27053.0	8.0	8.0	nan	27.0	175.6
dual anneal	-3.0901193370	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	310.2
trust region	-3.0901193370	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	8.5
trust region repeats	-3.0901193370	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	6.4

Table 997: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887989270	5254.2	5254.2	5254.2	2.8	27.0	1548.7
cch second order	-7.9887989628	166.0	90.0	90.0	nan	27.0	5.7
diff evo	-7.9887883198	230813.0	0.0	0.0	nan	27.0	1639.7
direct	-7.9752671063	27017.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.6
direct with trim	-7.9887989270	27027.0	8.0	8.0	nan	27.0	165.9
dual anneal	-7.9887989270	54010.8	8.8	8.8	1.0	27.0	330.5
trust region	-7.9887989270	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-7.9887989270	280.0	280.0	280.0	1.0	27.0	5.8

Table 998: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299400160	4900.6	4900.6	4900.6	3.0	27.0	971.0
cch second order	-15.7299399696	183.0	100.0	100.0	nan	27.0	5.9
diff evo	-15.7299277396	245817.0	0.0	0.0	nan	27.0	1903.7
direct	-15.6822195492	27211.0	0.0	0.0	nan	27.0	167.5
direct with trim	-15.7299400160	27221.0	8.0	8.0	nan	27.0	161.8
dual anneal	-15.7299400159	54011.2	9.2	9.2	1.0	27.0	343.5
trust region	-15.7299400160	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	5.5
trust region repeats	-15.7299400160	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.8

Table 999: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6444974392	5556.8	5556.8	5556.8	2.2	27.0	1421.5
cch second order	-26.6444974353	173.0	95.0	95.0	nan	27.0	10.0
diff evo	-26.6444856346	226655.0	0.0	0.0	nan	27.0	1664.0
direct	-26.5898908848	27095.0	0.0	0.0	nan	27.0	203.9
direct with trim	-26.6444974392	27105.0	8.0	8.0	nan	27.0	178.5
dual anneal	-26.6444974391	54011.8	9.8	9.8	1.0	27.0	368.9
trust region	-26.6444974392	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-26.6444974392	289.0	289.0	289.0	1.0	27.0	5.4

Table 1000: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0135870253	4524.4	4524.4	4524.4	1.6	27.0	1308.6
cch second order	-41.0135869611	180.0	100.0	100.0	nan	27.0	5.9
diff evo	-41.0135592040	224708.0	0.0	0.0	nan	27.0	1861.5
direct	-40.7305811756	27031.0	0.0	0.0	nan	27.0	203.4
direct with trim	-41.0134457304	27048.0	15.0	15.0	nan	27.0	163.4
dual anneal	-41.0135870252	54012.6	10.6	10.6	1.0	27.0	310.7
trust region	-41.0135870253	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-41.0135870253	286.0	286.0	286.0	1.0	27.0	5.1

Table 1001: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0840338663	4871.4	4871.4	4871.4	1.8	27.0	1147.9
cch second order	-59.0840338783	155.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.7
diff evo	-59.0839714007	204778.8	0.0	0.0	nan	27.0	1758.9
direct	-58.7284478601	27049.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.2
direct with trim	-59.0840338663	27059.0	8.0	8.0	nan	27.0	166.2
dual anneal	-59.0840338661	54013.4	11.4	11.4	1.0	27.0	345.5
trust region	-59.0840338663	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	7.3
trust region repeats	-59.0840338663	288.0	288.0	288.0	1.0	27.0	5.4

Table 1002: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0773235091	5878.8	5878.8	5878.8	2.8	27.0	1750.4
cch second order	-81.0773235338	159.0	90.0	90.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-81.0772468206	236819.0	0.0	0.0	nan	27.0	1722.3
direct	-80.0846457947	27237.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.0
direct with trim	-81.0773235091	27247.0	8.0	8.0	nan	27.0	167.5
dual anneal	-81.0773235087	54016.6	14.6	14.6	1.0	27.0	376.2
trust region	-81.0773235091	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-81.0773235091	294.0	294.0	294.0	1.0	27.0	5.6

Table 1003: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1952967621	4896.6	4896.6	4896.6	1.8	27.0	1341.9
cch second order	-107.1952968321	188.0	102.0	102.0	nan	27.0	6.0
diff evo	-107.1952512355	313643.0	0.0	0.0	nan	27.0	2039.4
direct	-106.4811689883	27071.0	0.0	0.0	nan	27.0	186.2
direct with trim	-107.1952967621	27081.0	8.0	8.0	nan	27.0	163.6
dual anneal	-107.1952967616	54020.8	18.8	18.8	1.0	27.0	319.5
trust region	-107.1952967621	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.6
trust region repeats	-107.1952967621	290.0	290.0	290.0	1.0	27.0	5.8

Table 1004: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6240288727	5382.6	5382.6	5382.6	2.0	27.0	1780.6
cch second order	-137.6240288411	171.0	95.0	95.0	nan	27.0	5.4
diff evo	-137.6239681719	284757.0	0.0	0.0	nan	27.0	2304.8
direct	-136.6802491926	27185.0	0.0	0.0	nan	27.0	184.0
direct with trim	-137.6240288727	27194.0	7.0	7.0	nan	27.0	193.9
dual anneal	-137.6240288719	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	359.8
trust region	-137.6240288727	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	4.1
trust region repeats	-137.6240288727	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	4.9

Table 1005: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.5366071169	4760.2	4760.2	4760.2	1.8	27.0	1525.9
cch second order	-172.5366070968	168.0	94.0	94.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-172.5364295706	271403.0	0.0	0.0	nan	27.0	1998.1
direct	-171.5195031339	27037.0	0.0	0.0	nan	27.0	181.1
direct with trim	-172.5366071169	27048.0	9.0	9.0	nan	27.0	163.8
dual anneal	-172.5366071159	54013.8	11.8	11.8	1.0	27.0	363.9
trust region	-172.5366071169	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	5.6
trust region repeats	-172.5366071169	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.4

Table 1006: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0951969972	4538.6	4538.6	4538.6	1.2	27.0	1176.9
cch second order	-212.0951970087	193.0	105.0	105.0	nan	27.0	6.2
diff evo	-212.0951333384	329098.0	0.0	0.0	nan	27.0	2388.7
direct	-209.6997769380	27073.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.3
direct with trim	-212.0951969972	27083.0	8.0	8.0	nan	27.0	170.6
dual anneal	-212.0951969959	54020.0	18.0	18.0	1.0	27.0	400.2
trust region	-212.0951969972	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-212.0951969972	294.0	294.0	294.0	1.0	27.0	5.6

Table 1007: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4526263706	5038.8	5038.8	5038.8	2.0	27.0	1433.5
cch second order	-256.4526263785	186.0	103.0	103.0	nan	27.0	8.1
diff evo	-256.4524704808	277970.0	0.0	0.0	nan	27.0	2192.4
direct	-253.8883076666	27167.0	0.0	0.0	nan	27.0	194.0
direct with trim	-256.4526263706	27178.0	9.0	9.0	nan	27.0	179.1
dual anneal	-256.4526263690	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	394.8
trust region	-256.4526263706	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-256.4526263706	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	6.1

Table 1008: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7536301314	3861.4	3861.4	3861.4	1.2	27.0	1219.8
cch second order	-305.7536300644	189.0	102.0	102.0	nan	27.0	6.0
diff evo	-305.7534279330	266057.0	0.0	0.0	nan	27.0	2246.3
direct	-304.6515425664	27035.0	0.0	0.0	nan	27.0	191.1
direct with trim	-305.7536301314	27045.0	8.0	8.0	nan	27.0	195.8
dual anneal	-305.7536301293	54014.2	12.2	12.2	1.0	27.0	369.2
trust region	-305.7536301314	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-305.7536301314	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.2

Table 1009: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1358482643	4898.4	4898.4	4898.4	1.6	27.0	1126.0
cch second order	-360.1358483534	249.0	126.0	126.0	nan	27.0	9.2
diff evo	-360.1356065078	242726.0	0.0	0.0	nan	27.0	1970.7
direct	-356.3174938329	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.4
direct with trim	-360.1358482643	27103.0	8.0	8.0	nan	27.0	177.5
dual anneal	-360.1358482617	54020.6	18.6	18.6	1.0	27.0	396.4
trust region	-360.1358482643	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-360.1358482643	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	5.1

Table 1010: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7306399649	5021.4	5021.4	5021.4	2.0	27.0	1341.2
cch second order	-419.7306400029	185.0	99.0	99.0	nan	27.0	8.2
diff evo	-419.7304826392	287815.0	0.0	0.0	nan	27.0	2224.7
direct	-415.8156314502	27159.0	0.0	0.0	nan	27.0	216.6
direct with trim	-419.7306399649	27175.0	14.0	14.0	nan	27.0	176.8
dual anneal	-419.7306399617	54023.2	21.2	21.2	1.0	27.0	344.7
trust region	-419.7306399649	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-419.7306399649	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	5.5

Table 1011: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6637575190	4683.6	4683.6	4683.6	1.8	27.0	1242.7
cch second order	-484.6637575215	233.0	124.0	124.0	nan	27.0	6.1
diff evo	-484.6635475007	271106.0	0.0	0.0	nan	27.0	2019.3
direct	-482.9252108537	27271.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.9
direct with trim	-484.6637575190	27281.0	8.0	8.0	nan	27.0	154.2
dual anneal	-484.6637575152	54017.2	15.2	15.2	1.0	27.0	399.7
trust region	-484.6637575190	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-484.6637575190	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.4

Table 1012: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0559112055	6488.8	6488.8	6488.8	2.6	27.0	1836.3
cch second order	-555.0559112222	209.0	110.0	110.0	nan	27.0	5.8
diff evo	-555.0557109622	289663.0	0.0	0.0	nan	27.0	2274.1
direct	-548.4474485669	27135.0	0.0	0.0	nan	27.0	209.7
direct with trim	-555.0559112055	27146.0	9.0	9.0	nan	27.0	165.6
dual anneal	-555.0559112011	54019.8	17.8	17.8	1.0	27.0	381.5
trust region	-555.0559112055	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-555.0559112055	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.3

Table 1013: Ar

36.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6213617653
He	basin hopping	-3.0901193370
Li	cch second order	-7.9887989628
Be	basin hopping	-15.7299400160
B	trust region	-26.6444974392
C	trust region	-41.0135870253
N	cch second order	-59.0840338783
O	cch second order	-81.0773235338
F	cch second order	-107.1952968321
Ne	trust region	-137.6240288727
Na	trust region	-172.5366071169
Mg	cch second order	-212.0951970087
Al	cch second order	-256.4526263785
Si	basin hopping	-305.7536301314
P	cch second order	-360.1358483534
S	cch second order	-419.7306400029
Cl	cch second order	-484.6637575215
Ar	cch second order	-555.0559112222

Table 1014: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.9	10.9	10.9	nan	-180.3607336161	4.6
cch second order	184.4	99.6	99.6	nan	-180.3602215559	6.6
trust region repeats	290.8	290.8	290.8	1.0	-180.3607336161	5.6
basin hopping	5168.6	5168.6	5168.6	2.2	-180.3607336161	1373.9
direct	27113.0	0.0	0.0	nan	-178.8843740861	186.6
direct with trim	27123.8	8.8	8.8	nan	-180.3607257664	171.7
dual anneal	54016.0	14.0	14.0	1.0	-180.3607336149	358.9
diff evo	253699.3	0.0	0.0	nan	-180.3606379034	1941.2

Table 1015: Average (all systems)

37　27s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

37.1　Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1016: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571180684	6422.0	6422.0	6422.0	5.2	27.0	835.4
He	-3.1805853199	4680.0	4680.0	4680.0	4.6	27.0	709.7
Li	-8.1482705768	2747.0	2747.0	2747.0	2.8	27.0	608.9
Be	-15.9682464586	3046.0	3046.0	3046.0	1.8	27.0	592.9
B	-26.9684041020	2627.4	2627.4	2627.4	1.8	27.0	656.7
C	-41.4275763289	2581.2	2581.2	2581.2	1.8	27.0	620.5
N	-59.5907776732	17861.0	17861.0	17861.0	7.0	27.0	978.2
O	-81.6780023777	15487.8	15487.8	15487.8	4.6	27.0	1013.7
F	-107.8898113319	15705.2	15705.2	15705.2	3.2	27.0	936.4
Ne	-138.4111858245	2096.8	2096.8	2096.8	2.2	27.0	629.6
Na	-173.4142362256	2438.8	2438.8	2438.8	2.0	27.0	628.0
Mg	-213.0602554007	2123.8	2123.8	2123.8	3.0	27.0	716.5
Al	-257.5012851792	2021.2	2021.2	2021.2	1.0	27.0	579.9
Si	-306.8813420179	11403.4	11403.4	11403.4	7.0	27.0	893.6
P	-361.3374063710	2261.6	2261.6	2261.6	1.2	27.0	594.1
S	-421.0002279017	2198.0	2198.0	2198.0	1.0	27.0	644.1
Cl	-485.9949923904	2161.0	2161.0	2161.0	1.2	27.0	681.8
Ar	-556.4418811781	2102.0	2102.0	2102.0	1.4	27.0	756.1

Table 1017: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-3.1805852773	194.0	104.0	104.0	nan	27.0	9.5
Li	-8.1482706385	192.0	92.0	92.0	nan	27.0	8.2
Be	-15.9682464078	180.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.8
B	-26.9684039650	187.0	101.0	101.0	nan	27.0	5.7
C	-41.4275763195	204.0	107.0	107.0	nan	27.0	8.9
N	-59.5907776990	167.0	93.0	93.0	nan	27.0	8.5
O	-81.6779994704	214.0	105.0	105.0	nan	27.0	6.4
F	-107.8898117798	225.0	114.0	114.0	nan	27.0	6.0
Ne	-138.4111857757	521.0	182.0	182.0	nan	27.0	8.1
Na	-173.4142358012	512.0	143.0	143.0	nan	27.0	14.6
Mg	-213.0602554403	576.0	152.0	152.0	nan	27.0	13.4
Al	-257.5012851159	294.0	118.0	118.0	nan	27.0	6.4
Si	-306.8813420048	254.0	121.0	121.0	nan	27.0	6.8
P	-361.3374063712	344.0	152.0	152.0	nan	27.0	7.0
S	-421.0002276008	220.0	117.0	117.0	nan	27.0	8.9
Cl	-485.9949918941	264.0	131.0	131.0	nan	27.0	6.5
Ar	-556.4418804333	211.0	109.0	109.0	nan	27.0	8.6

Table 1018: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571167305	283470.0	0.0	0.0	nan	27.0	1941.4
He	-3.1805773844	302830.0	0.0	0.0	nan	27.0	1948.5
Li	-8.1482602798	298892.0	0.0	0.0	nan	27.0	2306.9
Be	-15.9682387992	360291.2	0.0	0.0	nan	27.0	2888.4
B	-26.9683332732	285417.0	0.0	0.0	nan	27.0	2298.5
C	-41.4275400282	364608.8	0.0	0.0	nan	27.0	2651.9
N	-59.5907522298	328858.8	0.0	0.0	nan	27.0	2174.0
O	-81.6776077407	325171.0	0.0	0.0	nan	27.0	2203.2
F	-107.8896409354	266068.0	0.0	0.0	nan	27.0	1884.1
Ne	-138.4107200486	308962.5	0.0	0.0	nan	27.0	2028.4
Na	-173.4141052937	301895.0	0.0	0.0	nan	27.0	2026.0
Mg	-213.0595481389	287782.0	0.0	0.0	nan	27.0	2171.0
Al	-257.5008179646	286044.0	0.0	0.0	nan	27.0	2211.5
Si	-306.8808692613	279829.0	0.0	0.0	nan	27.0	2049.8
P	-361.3369550122	285065.0	0.0	0.0	nan	27.0	1997.0
S	-420.9993173968	298540.0	0.0	0.0	nan	27.0	2283.5
Cl	-485.9941797905	292655.0	0.0	0.0	nan	27.0	2141.5
Ar	-556.4414269544	313896.0	0.0	0.0	nan	27.0	2179.4

Table 1019: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6520980087	27257.0	0.0	0.0	nan	27.0	172.0
He	-3.1700027881	27121.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.8
Li	-8.1348690522	27231.0	0.0	0.0	nan	27.0	197.9
Be	-15.9414526404	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	169.4
B	-26.9128790467	27161.0	0.0	0.0	nan	27.0	164.2
C	-41.2175681491	27139.0	0.0	0.0	nan	27.0	172.7
N	-59.0350627490	27013.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.1
O	-79.9683085189	27297.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.5
F	-107.3363464392	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.8
Ne	-137.4830462310	27079.0	0.0	0.0	nan	27.0	188.9
Na	-170.4251509207	27097.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.1
Mg	-211.1466920304	27247.0	0.0	0.0	nan	27.0	197.3
Al	-255.5675359913	27175.0	0.0	0.0	nan	27.0	167.9
Si	-305.8822562625	27197.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.8
P	-317.2895285080	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
S	-417.2581405095	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.3
Cl	-477.6555136843	27161.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.9
Ar	-552.5979842700	27035.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.9

Table 1020: direct

438

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571180662	27265.0	6.0	6.0	nan	27.0	206.7
He	-3.1805853190	27130.0	7.0	7.0	nan	27.0	199.0
Li	-8.1479873511	27240.0	7.0	7.0	nan	27.0	178.8
Be	-15.9682464585	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	188.3
B	-26.9684039827	27170.0	7.0	7.0	nan	27.0	229.6
C	-41.4275758343	27148.0	7.0	7.0	nan	27.0	221.3
N	-59.5907772716	27206.0	191.0	191.0	nan	27.0	250.3
O	-81.6779990460	27331.0	32.0	32.0	nan	27.0	210.2
F	-107.8898113060	27180.0	23.0	23.0	nan	27.0	203.2
Ne	-138.4111858242	27092.0	11.0	11.0	nan	27.0	214.9
Na	-173.4142357511	28100.0	1001.0	1001.0	nan	27.0	203.2
Mg	-213.0602554005	27264.4	15.4	15.4	nan	27.0	216.4
Al	-257.5012851791	27187.0	10.0	10.0	nan	27.0	195.3
Si	-306.8813420041	27212.0	13.0	13.0	nan	27.0	187.5
P	-361.3374063710	27209.0	34.0	34.0	nan	27.0	223.4
S	-421.0002279017	27083.0	16.0	16.0	nan	27.0	204.0
Cl	-485.9949923904	27178.0	15.0	15.0	nan	27.0	193.4
Ar	-556.4418811780	27047.0	10.0	10.0	nan	27.0	167.8

Table 1021: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571180662	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	388.7
He	-3.1805853190	54012.4	10.4	10.4	1.0	27.0	402.2
Li	-8.1482705766	54013.4	11.4	11.4	1.0	27.0	374.9
Be	-15.9682464584	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	394.7
B	-26.9684039826	54021.4	19.4	19.4	1.0	27.0	381.8
C	-41.4275758341	54021.6	19.6	19.6	1.0	27.0	419.4
N	-59.5907772646	54128.6	126.6	126.6	1.0	27.0	411.1
O	-81.6779990453	54028.6	26.6	26.6	1.0	27.0	387.1
F	-107.8898113055	54028.6	26.6	26.6	1.0	27.0	399.0
Ne	-138.4111858234	54027.8	25.8	25.8	1.0	27.0	394.5
Na	-173.4142357545	54614.6	612.6	612.6	1.0	27.0	411.7
Mg	-213.0602553991	54026.8	24.8	24.8	1.0	27.0	398.4
Al	-257.5012851774	54029.8	27.8	27.8	1.0	27.0	420.9
Si	-306.8813420019	54027.6	25.6	25.6	1.0	27.0	424.1
P	-361.3374063683	54027.2	25.2	25.2	1.0	27.0	411.9
S	-421.0002278984	54025.8	23.8	23.8	1.0	27.0	449.7
Cl	-485.9949923865	54029.2	27.2	27.2	1.0	27.0	430.7
Ar	-556.4418811734	54032.6	30.6	30.6	1.0	27.0	447.3

Table 1022: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571180662	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	2.2
He	-3.1805853190	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.5
Li	-8.1482705767	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	4.3
Be	-15.9682464585	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	10.8
B	-26.9684039827	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.0
C	-41.4275758343	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.9
N	-59.5907772649	19.0	19.0	19.0	nan	27.0	7.1
O	-81.6779990460	24.0	24.0	24.0	nan	27.0	5.9
F	-107.8898113060	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	6.2
Ne	-138.4111858242	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	4.0
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-213.0602554005	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.0
Al	-257.5012851791	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.5
Si	-306.8813420041	24.0	24.0	24.0	nan	27.0	6.5
P	-361.3374063710	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.3
S	-421.0002279017	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.5
Cl	-485.9949923904	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.6
Ar	-556.4418811780	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	11.0

Table 1023: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571180662	219.0	219.0	219.0	1.0	27.0	4.9
He	-3.1805853190	239.0	239.0	239.0	1.0	27.0	5.8
Li	-8.1482705767	251.0	251.0	251.0	1.0	27.0	6.5
Be	-15.9682464585	262.0	262.0	262.0	1.0	27.0	5.2
B	-26.9684039831	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.3
C	-41.4275758343	273.0	273.0	273.0	1.0	27.0	5.8
N	-59.5907772757	1541.0	1541.0	1541.0	1.0	27.0	22.1
O	-81.6779990460	427.0	427.0	427.0	1.0	27.0	6.3
F	-107.8898113060	400.0	400.0	400.0	1.0	27.0	5.9
Ne	-138.4111858242	287.0	287.0	287.0	1.0	27.0	5.5
Na	-173.4142357611	1067.0	1067.0	1067.0	1.0	27.0	18.2
Mg	-213.0602554005	302.0	302.0	302.0	1.0	27.0	5.4
Al	-257.5012851791	300.0	300.0	300.0	1.0	27.0	5.7
Si	-306.8813420041	328.0	328.0	328.0	1.0	27.0	5.8
P	-361.3374063710	292.0	292.0	292.0	1.0	27.0	5.6
S	-421.0002279017	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	4.8
Cl	-485.9949923904	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.6
Ar	-556.4418811780	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.7

Table 1024: trust region repeats

37.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6571180684	6422.0	6422.0	6422.0	5.2	27.0	835.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-0.6571167305	283470.0	0.0	0.0	nan	27.0	1941.4
direct	-0.6520980087	27257.0	0.0	0.0	nan	27.0	172.0
direct with trim	-0.6571180662	27265.0	6.0	6.0	nan	27.0	206.7
dual anneal	-0.6571180662	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	388.7
trust region	-0.6571180662	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	2.2
trust region repeats	-0.6571180662	219.0	219.0	219.0	1.0	27.0	4.9

Table 1025: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805853199	4680.0	4680.0	4680.0	4.6	27.0	709.7
cch second order	-3.1805852773	194.0	104.0	104.0	nan	27.0	9.5
diff evo	-3.1805773844	302830.0	0.0	0.0	nan	27.0	1948.5
direct	-3.1700027881	27121.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.8
direct with trim	-3.1805853190	27130.0	7.0	7.0	nan	27.0	199.0
dual anneal	-3.1805853190	54012.4	10.4	10.4	1.0	27.0	402.2
trust region	-3.1805853190	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-3.1805853190	239.0	239.0	239.0	1.0	27.0	5.8

Table 1026: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1482705768	2747.0	2747.0	2747.0	2.8	27.0	608.9
cch second order	-8.1482706385	192.0	92.0	92.0	nan	27.0	8.2
diff evo	-8.1482602798	298892.0	0.0	0.0	nan	27.0	2306.9
direct	-8.1348690522	27231.0	0.0	0.0	nan	27.0	197.9
direct with trim	-8.1479873511	27240.0	7.0	7.0	nan	27.0	178.8
dual anneal	-8.1482705766	54013.4	11.4	11.4	1.0	27.0	374.9
trust region	-8.1482705767	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	4.3
trust region repeats	-8.1482705767	251.0	251.0	251.0	1.0	27.0	6.5

Table 1027: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9682464586	3046.0	3046.0	3046.0	1.8	27.0	592.9
cch second order	-15.9682464078	180.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.8
diff evo	-15.9682387992	360291.2	0.0	0.0	nan	27.0	2888.4
direct	-15.9414526404	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	169.4
direct with trim	-15.9682464585	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	188.3
dual anneal	-15.9682464584	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	394.7
trust region	-15.9682464585	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	10.8
trust region repeats	-15.9682464585	262.0	262.0	262.0	1.0	27.0	5.2

Table 1028: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9684041020	2627.4	2627.4	2627.4	1.8	27.0	656.7
cch second order	-26.9684039650	187.0	101.0	101.0	nan	27.0	5.7
diff evo	-26.9683332732	285417.0	0.0	0.0	nan	27.0	2298.5
direct	-26.9128790467	27161.0	0.0	0.0	nan	27.0	164.2
direct with trim	-26.9684039827	27170.0	7.0	7.0	nan	27.0	229.6
dual anneal	-26.9684039826	54021.4	19.4	19.4	1.0	27.0	381.8
trust region	-26.9684039827	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	6.0
trust region repeats	-26.9684039831	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.3

Table 1029: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4275763289	2581.2	2581.2	2581.2	1.8	27.0	620.5
cch second order	-41.4275763195	204.0	107.0	107.0	nan	27.0	8.9
diff evo	-41.4275400282	364608.8	0.0	0.0	nan	27.0	2651.9
direct	-41.2175681491	27139.0	0.0	0.0	nan	27.0	172.7
direct with trim	-41.4275758343	27148.0	7.0	7.0	nan	27.0	221.3
dual anneal	-41.4275758341	54021.6	19.6	19.6	1.0	27.0	419.4
trust region	-41.4275758343	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-41.4275758343	273.0	273.0	273.0	1.0	27.0	5.8

Table 1030: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5907776732	17861.0	17861.0	17861.0	7.0	27.0	978.2
cch second order	-59.5907776990	167.0	93.0	93.0	nan	27.0	8.5
diff evo	-59.5907522298	328858.8	0.0	0.0	nan	27.0	2174.0
direct	-59.0350627490	27013.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.1
direct with trim	-59.5907772716	27206.0	191.0	191.0	nan	27.0	250.3
dual anneal	-59.5907772646	54128.6	126.6	126.6	1.0	27.0	411.1
trust region	-59.5907772649	19.0	19.0	19.0	nan	27.0	7.1
trust region repeats	-59.5907772757	1541.0	1541.0	1541.0	1.0	27.0	22.1

Table 1031: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6780023777	15487.8	15487.8	15487.8	4.6	27.0	1013.7
cch second order	-81.6779994704	214.0	105.0	105.0	nan	27.0	6.4
diff evo	-81.6776077407	325171.0	0.0	0.0	nan	27.0	2203.2
direct	-79.9683085189	27297.0	0.0	0.0	nan	27.0	192.5
direct with trim	-81.6779990460	27331.0	32.0	32.0	nan	27.0	210.2
dual anneal	-81.6779990453	54028.6	26.6	26.6	1.0	27.0	387.1
trust region	-81.6779990460	24.0	24.0	24.0	nan	27.0	5.9
trust region repeats	-81.6779990460	427.0	427.0	427.0	1.0	27.0	6.3

Table 1032: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8898113319	15705.2	15705.2	15705.2	3.2	27.0	936.4
cch second order	-107.8898117798	225.0	114.0	114.0	nan	27.0	6.0
diff evo	-107.8896409354	266068.0	0.0	0.0	nan	27.0	1884.1
direct	-107.3363464392	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.8
direct with trim	-107.8898113060	27180.0	23.0	23.0	nan	27.0	203.2
dual anneal	-107.8898113055	54028.6	26.6	26.6	1.0	27.0	399.0
trust region	-107.8898113060	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	6.2
trust region repeats	-107.8898113060	400.0	400.0	400.0	1.0	27.0	5.9

Table 1033: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4111858245	2096.8	2096.8	2096.8	2.2	27.0	629.6
cch second order	-138.4111857757	521.0	182.0	182.0	nan	27.0	8.1
diff evo	-138.4107200486	308962.5	0.0	0.0	nan	27.0	2028.4
direct	-137.4830462310	27079.0	0.0	0.0	nan	27.0	188.9
direct with trim	-138.4111858242	27092.0	11.0	11.0	nan	27.0	214.9
dual anneal	-138.4111858234	54027.8	25.8	25.8	1.0	27.0	394.5
trust region	-138.4111858242	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-138.4111858242	287.0	287.0	287.0	1.0	27.0	5.5

Table 1034: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4142362256	2438.8	2438.8	2438.8	2.0	27.0	628.0
cch second order	-173.4142358012	512.0	143.0	143.0	nan	27.0	14.6
diff evo	-173.4141052937	301895.0	0.0	0.0	nan	27.0	2026.0
direct	-170.4251509207	27097.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.1
direct with trim	-173.4142357511	28100.0	1001.0	1001.0	nan	27.0	203.2
dual anneal	-173.4142357545	54614.6	612.6	612.6	1.0	27.0	411.7
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-173.4142357611	1067.0	1067.0	1067.0	1.0	27.0	18.2

Table 1035: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0602554007	2123.8	2123.8	2123.8	3.0	27.0	716.5
cch second order	-213.0602554403	576.0	152.0	152.0	nan	27.0	13.4
diff evo	-213.0595481389	287782.0	0.0	0.0	nan	27.0	2171.0
direct	-211.1466920304	27247.0	0.0	0.0	nan	27.0	197.3
direct with trim	-213.0602554005	27264.4	15.4	15.4	nan	27.0	216.4
dual anneal	-213.0602553991	54026.8	24.8	24.8	1.0	27.0	398.4
trust region	-213.0602554005	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.0
trust region repeats	-213.0602554005	302.0	302.0	302.0	1.0	27.0	5.4

Table 1036: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5012851792	2021.2	2021.2	2021.2	1.0	27.0	579.9
cch second order	-257.5012851159	294.0	118.0	118.0	nan	27.0	6.4
diff evo	-257.5008179646	286044.0	0.0	0.0	nan	27.0	2211.5
direct	-255.5675359913	27175.0	0.0	0.0	nan	27.0	167.9
direct with trim	-257.5012851791	27187.0	10.0	10.0	nan	27.0	195.3
dual anneal	-257.5012851774	54029.8	27.8	27.8	1.0	27.0	420.9
trust region	-257.5012851791	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.5
trust region repeats	-257.5012851791	300.0	300.0	300.0	1.0	27.0	5.7

Table 1037: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8813420179	11403.4	11403.4	11403.4	7.0	27.0	893.6
cch second order	-306.8813420048	254.0	121.0	121.0	nan	27.0	6.8
diff evo	-306.8808692613	279829.0	0.0	0.0	nan	27.0	2049.8
direct	-305.8822562625	27197.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.8
direct with trim	-306.8813420041	27212.0	13.0	13.0	nan	27.0	187.5
dual anneal	-306.8813420019	54027.6	25.6	25.6	1.0	27.0	424.1
trust region	-306.8813420041	24.0	24.0	24.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-306.8813420041	328.0	328.0	328.0	1.0	27.0	5.8

Table 1038: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3374063710	2261.6	2261.6	2261.6	1.2	27.0	594.1
cch second order	-361.3374063712	344.0	152.0	152.0	nan	27.0	7.0
diff evo	-361.3369550122	285065.0	0.0	0.0	nan	27.0	1997.0
direct	-317.2895285080	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
direct with trim	-361.3374063710	27209.0	34.0	34.0	nan	27.0	223.4
dual anneal	-361.3374063683	54027.2	25.2	25.2	1.0	27.0	411.9
trust region	-361.3374063710	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.3
trust region repeats	-361.3374063710	292.0	292.0	292.0	1.0	27.0	5.6

Table 1039: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-421.0002279017	2198.0	2198.0	2198.0	1.0	27.0	644.1
cch second order	-421.0002276008	220.0	117.0	117.0	nan	27.0	8.9
diff evo	-420.9993173968	298540.0	0.0	0.0	nan	27.0	2283.5
direct	-417.2581405095	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.3
direct with trim	-421.0002279017	27083.0	16.0	16.0	nan	27.0	204.0
dual anneal	-421.0002278984	54025.8	23.8	23.8	1.0	27.0	449.7
trust region	-421.0002279017	18.0	18.0	18.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-421.0002279017	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	4.8

Table 1040: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9949923904	2161.0	2161.0	2161.0	1.2	27.0	681.8
cch second order	-485.9949918941	264.0	131.0	131.0	nan	27.0	6.5
diff evo	-485.9941797905	292655.0	0.0	0.0	nan	27.0	2141.5
direct	-477.6555136843	27161.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.9
direct with trim	-485.9949923904	27178.0	15.0	15.0	nan	27.0	193.4
dual anneal	-485.9949923865	54029.2	27.2	27.2	1.0	27.0	430.7
trust region	-485.9949923904	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.6
trust region repeats	-485.9949923904	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.6

Table 1041: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4418811781	2102.0	2102.0	2102.0	1.4	27.0	756.1
cch second order	-556.4418804333	211.0	109.0	109.0	nan	27.0	8.6
diff evo	-556.4414269544	313896.0	0.0	0.0	nan	27.0	2179.4
direct	-552.5979842700	27035.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.9
direct with trim	-556.4418811780	27047.0	10.0	10.0	nan	27.0	167.8
dual anneal	-556.4418811734	54032.6	30.6	30.6	1.0	27.0	447.3
trust region	-556.4418811780	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	11.0
trust region repeats	-556.4418811780	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	5.7

Table 1042: Ar

37.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6571180684
He	basin hopping	-3.1805853199
Li	cch second order	-8.1482706385
Be	basin hopping	-15.9682464586
B	basin hopping	-26.9684041020
C	basin hopping	-41.4275763289
N	cch second order	-59.5907776990
O	basin hopping	-81.6780023777
F	cch second order	-107.8898117798
Ne	basin hopping	-138.4111858245
Na	basin hopping	-173.4142362256
Mg	cch second order	-213.0602554403
Al	basin hopping	-257.5012851792
Si	basin hopping	-306.8813420179
P	cch second order	-361.3374063712
S	basin hopping	-421.0002279017
Cl	basin hopping	-485.9949923904
Ar	basin hopping	-556.4418811781

Table 1043: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.4	15.4	15.4	nan	-181.5374920061	6.1
cch second order	279.9	120.0	120.0	nan	-191.6996754115	8.2
trust region repeats	407.7	407.7	407.7	1.0	-181.0861999931	7.2
basin hopping	5553.6	5553.6	5553.6	2.9	-181.0862002626	726.4
direct	27155.9	0.0	0.0	nan	-177.0930242111	172.8
direct with trim	27236.3	78.4	78.4	nan	-181.0861842575	205.2
dual anneal	54062.4	60.4	60.4	1.0	-181.0861999909	408.2
diff evo	303904.2	0.0	0.0	nan	-181.0858892923	2188.0

Table 1044: Average (all systems)

38   27s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

38.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1045: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661295506	5229.0	5229.0	5229.0	4.4	27.0	752.2
He	-3.2215674806	3922.4	3922.4	3922.4	3.2	27.0	679.5
Li	-8.2486156183	3593.8	3593.8	3593.8	3.6	27.0	698.6
Be	-16.1579922537	2865.8	2865.8	2865.8	1.4	27.0	663.6
B	-27.2795026431	2339.4	2339.4	2339.4	3.0	27.0	602.4
C	-41.8934857334	15510.6	15510.6	15510.6	6.2	27.0	997.4
N	-60.2461977620	1867.2	1867.2	1867.2	2.6	27.0	617.0
O	-82.5586932118	1854.2	1854.2	1854.2	2.2	27.0	607.1
F	-109.0324638209	1929.2	1929.2	1929.2	1.8	27.0	619.2
Ne	-139.8533005911	1940.8	1940.8	1940.8	2.4	27.0	658.5
Na	-175.1940547434	1989.2	1989.2	1989.2	1.6	27.0	741.0
Mg	-215.2166891826	2052.0	2052.0	2052.0	2.4	27.0	668.4
Al	-260.0738548730	2779.2	2779.2	2779.2	2.0	27.0	695.4
Si	-309.9101338062	2317.4	2317.4	2317.4	1.8	27.0	687.6
P	-364.8630323917	2820.0	2820.0	2820.0	1.8	27.0	693.7
S	-425.0637886792	2052.0	2052.0	2052.0	2.0	27.0	658.1
Cl	-490.6380470491	2021.8	2021.8	2021.8	1.8	27.0	572.3
Ar	-561.7064204050	2111.6	2111.6	2111.6	1.8	27.0	736.9

Table 1046: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661296029	173.0	89.0	89.0	nan	27.0	9.8
He	-3.2215675084	160.0	90.0	90.0	nan	27.0	7.9
Li	-8.2486155642	189.0	91.0	91.0	nan	27.0	5.6
Be	-16.1579922346	215.0	115.0	115.0	nan	27.0	8.8
B	-27.2795023228	183.0	95.0	95.0	nan	27.0	5.5
C	-41.8934853485	189.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.6
N	-60.2461986694	168.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.6
O	-82.5586932444	165.0	89.0	89.0	nan	27.0	7.9
F	-109.0324638335	202.0	108.0	108.0	nan	27.0	6.7
Ne	-139.8533005337	197.0	104.0	104.0	nan	27.0	6.4
Na	-175.1940547340	242.0	121.0	121.0	nan	27.0	10.1
Mg	-215.2166883737	282.0	128.0	128.0	nan	27.0	10.6
Al	-260.0738543417	799.0	255.0	255.0	nan	27.0	10.6
Si	-309.9101337387	317.0	143.0	143.0	nan	27.0	10.3
P	-364.8630323673	415.0	158.0	158.0	nan	27.0	10.7
S	-425.0637887377	258.0	125.0	125.0	nan	27.0	9.6
Cl	-490.6380469957	250.0	122.0	122.0	nan	27.0	6.5
Ar	-561.7064204982	221.0	118.0	118.0	nan	27.0	6.0

Table 1047: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661261730	229603.0	0.0	0.0	nan	27.0	1473.4
He	-3.2215598767	231099.0	0.0	0.0	nan	27.0	1449.1
Li	-8.2486056201	315700.0	0.0	0.0	nan	27.0	2516.1
Be	-16.1579804976	348854.0	0.0	0.0	nan	27.0	1895.2
B	-27.2794672441	304414.0	0.0	0.0	nan	27.0	2094.0
C	-41.8933989035	311003.0	0.0	0.0	nan	27.0	2233.4
N	-60.2461335243	396055.0	0.0	0.0	nan	27.0	2627.2
O	-82.5585571531	396220.0	0.0	0.0	nan	27.0	2610.1
F	-109.0322142791	320749.0	0.0	0.0	nan	27.0	2383.8
Ne	-139.8530194539	315062.0	0.0	0.0	nan	27.0	2318.4
Na	-175.1937630364	328350.0	0.0	0.0	nan	27.0	2322.0
Mg	-215.2162132669	267547.5	0.0	0.0	nan	27.0	2332.1
Al	-260.0735346638	302962.0	0.0	0.0	nan	27.0	2218.0
Si	-309.9094249501	305277.5	0.0	0.0	nan	27.0	2174.8
P	-364.8627126194	311476.0	0.0	0.0	nan	27.0	2376.1
S	-425.0633658183	306693.8	0.0	0.0	nan	27.0	2201.1
Cl	-490.6374836579	301048.0	0.0	0.0	nan	27.0	2323.2
Ar	-561.7059714981	302500.0	0.0	0.0	nan	27.0	2159.4

Table 1048: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6616500716	27291.0	0.0	0.0	nan	27.0	156.4
He	-3.2129843680	27241.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.5
Li	-8.2311632797	27199.0	0.0	0.0	nan	27.0	171.9
Be	-16.1199142850	27063.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.2
B	-27.2170924995	27047.0	0.0	0.0	nan	27.0	169.9
C	-41.6791430319	27099.0	0.0	0.0	nan	27.0	157.6
N	-59.6085452096	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.9
O	-80.5911796422	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.5
F	-108.4375030000	27117.0	0.0	0.0	nan	27.0	159.0
Ne	-138.9293480992	27179.0	0.0	0.0	nan	27.0	164.3
Na	-174.2495779953	27227.0	0.0	0.0	nan	27.0	178.8
Mg	-213.6602152491	27265.0	0.0	0.0	nan	27.0	215.4
Al	-257.7803439085	27043.0	0.0	0.0	nan	27.0	173.9
Si	-308.5478282026	27187.0	0.0	0.0	nan	27.0	194.6
P	-320.7118763416	27063.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.4
S	-421.3884700114	27259.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.1
Cl	-482.0243573950	27143.0	0.0	0.0	nan	27.0	183.8
Ar	-556.9800582840	27209.0	0.0	0.0	nan	27.0	174.5

Table 1049: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661295489	27299.0	6.0	6.0	nan	27.0	217.8
He	-3.2215674803	27250.0	7.0	7.0	nan	27.0	180.2
Li	-8.2486156182	27208.0	7.0	7.0	nan	27.0	195.2
Be	-16.1579922351	27072.0	7.0	7.0	nan	27.0	213.2
B	-27.2795023782	27057.0	8.0	8.0	nan	27.0	210.2
C	-41.8934846420	27110.0	9.0	9.0	nan	27.0	212.2
N	-60.2461977501	27164.0	9.0	9.0	nan	27.0	232.6
O	-82.5586924413	27190.0	15.0	15.0	nan	27.0	230.2
F	-109.0324629676	27129.0	10.0	10.0	nan	27.0	228.5
Ne	-139.8533005815	27189.0	8.0	8.0	nan	27.0	203.8
Na	-175.1940547435	27245.8	16.8	16.8	nan	27.0	202.2
Mg	-215.2166883021	27276.0	9.0	9.0	nan	27.0	224.3
Al	-260.0738540502	27053.0	8.0	8.0	nan	27.0	224.6
Si	-309.9101337999	27198.0	9.0	9.0	nan	27.0	231.3
P	-364.8630323859	27098.0	33.0	33.0	nan	27.0	215.1
S	-425.0637886749	27275.0	14.0	14.0	nan	27.0	230.7
Cl	-490.6380470449	27159.0	14.0	14.0	nan	27.0	225.6
Ar	-561.7064204007	27221.0	10.0	10.0	nan	27.0	221.6

Table 1050: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661295489	54013.0	11.0	11.0	1.0	27.0	446.5
He	-3.2215674803	54012.4	10.4	10.4	1.0	27.0	457.3
Li	-8.2486156182	54012.8	10.8	10.8	1.0	27.0	448.7
Be	-16.1579922351	54016.8	14.8	14.8	1.0	27.0	434.3
B	-27.2795023781	54017.0	15.0	15.0	1.0	27.0	418.7
C	-41.8934846418	54139.8	137.8	137.8	1.0	27.0	489.9
N	-60.2461977617	54016.2	14.2	14.2	1.0	27.0	441.8
O	-82.5586924409	54020.6	18.6	18.6	1.0	27.0	445.6
F	-109.0324629670	54017.8	15.8	15.8	1.0	27.0	425.7
Ne	-139.8533005902	54021.8	19.8	19.8	1.0	27.0	440.9
Na	-175.1940547338	54016.6	14.6	14.6	1.0	27.0	413.8
Mg	-215.2166883007	54027.6	25.6	25.6	1.0	27.0	413.5
Al	-260.0738540484	54024.8	22.8	22.8	1.0	27.0	369.5
Si	-309.9101337976	54031.6	29.6	29.6	1.0	27.0	427.2
P	-364.8630323830	54029.6	27.6	27.6	1.0	27.0	448.8
S	-425.0637886715	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	420.2
Cl	-490.6380470450	54034.8	32.8	32.8	1.0	27.0	424.6
Ar	-561.7064204000	54017.2	15.2	15.2	1.0	27.0	363.7

Table 1051: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661295489	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
He	-3.2215674803	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.6
Li	-8.2486156182	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.3
Be	-16.1579922351	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
B	-27.2795023782	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.5
C	-41.8934846495	161.0	161.0	161.0	nan	27.0	34.7
N	-60.2461977501	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.3
O	-82.5586924413	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.8
F	-109.0324629676	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.8
Ne	-139.8533005815	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	8.8
Na	-175.1940547349	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	7.7
Mg	-215.2166883021	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	6.8
Al	-260.0738540502	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.8
Si	-309.9101337999	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.4
P	-364.8630323859	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	5.8
S	-425.0637886749	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.7
Cl	-490.6380470449	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	4.6
Ar	-561.7064204007	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	4.1

Table 1052: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661295489	221.0	221.0	221.0	1.0	27.0	6.4
He	-3.2215674803	240.0	240.0	240.0	1.0	27.0	5.7
Li	-8.2486156182	252.0	252.0	252.0	1.0	27.0	6.1
Be	-16.1579922351	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.3
B	-27.2795023782	268.0	268.0	268.0	1.0	27.0	6.0
C	-41.8934846494	1928.0	1928.0	1928.0	1.0	27.0	28.6
N	-60.2461977620	271.0	271.0	271.0	1.0	27.0	5.6
O	-82.5586924528	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	5.3
F	-109.0324629782	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.5
Ne	-139.8533005911	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	6.0
Na	-175.1940547434	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.9
Mg	-215.2166883096	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	6.5
Al	-260.0738540569	342.0	342.0	342.0	1.0	27.0	5.4
Si	-309.9101338057	308.0	308.0	308.0	1.0	27.0	5.9
P	-364.8630323859	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.5
S	-425.0637886792	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.3
Cl	-490.6380470491	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	6.0
Ar	-561.7064204049	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	6.2

Table 1053: trust region repeats

38.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661295506	5229.0	5229.0	5229.0	4.4	27.0	752.2
cch second order	-0.6661296029	173.0	89.0	89.0	nan	27.0	9.8
diff evo	-0.6661261730	229603.0	0.0	0.0	nan	27.0	1473.4
direct	-0.6616500716	27291.0	0.0	0.0	nan	27.0	156.4
direct with trim	-0.6661295489	27299.0	6.0	6.0	nan	27.0	217.8
dual anneal	-0.6661295489	54013.0	11.0	11.0	1.0	27.0	446.5
trust region	-0.6661295489	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
trust region repeats	-0.6661295489	221.0	221.0	221.0	1.0	27.0	6.4

Table 1054: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215674806	3922.4	3922.4	3922.4	3.2	27.0	679.5
cch second order	-3.2215675084	160.0	90.0	90.0	nan	27.0	7.9
diff evo	-3.2215598767	231099.0	0.0	0.0	nan	27.0	1449.1
direct	-3.2129843680	27241.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.5
direct with trim	-3.2215674803	27250.0	7.0	7.0	nan	27.0	180.2
dual anneal	-3.2215674803	54012.4	10.4	10.4	1.0	27.0	457.3
trust region	-3.2215674803	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.6
trust region repeats	-3.2215674803	240.0	240.0	240.0	1.0	27.0	5.7

Table 1055: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2486156183	3593.8	3593.8	3593.8	3.6	27.0	698.6
cch second order	-8.2486155642	189.0	91.0	91.0	nan	27.0	5.6
diff evo	-8.2486056201	315700.0	0.0	0.0	nan	27.0	2516.1
direct	-8.2311632797	27199.0	0.0	0.0	nan	27.0	171.9
direct with trim	-8.2486156182	27208.0	7.0	7.0	nan	27.0	195.2
dual anneal	-8.2486156182	54012.8	10.8	10.8	1.0	27.0	448.7
trust region	-8.2486156182	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.3
trust region repeats	-8.2486156182	252.0	252.0	252.0	1.0	27.0	6.1

Table 1056: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1579922537	2865.8	2865.8	2865.8	1.4	27.0	663.6
cch second order	-16.1579922346	215.0	115.0	115.0	nan	27.0	8.8
diff evo	-16.1579804976	348854.0	0.0	0.0	nan	27.0	1895.2
direct	-16.1199142850	27063.0	0.0	0.0	nan	27.0	187.2
direct with trim	-16.1579922351	27072.0	7.0	7.0	nan	27.0	213.2
dual anneal	-16.1579922351	54016.8	14.8	14.8	1.0	27.0	434.3
trust region	-16.1579922351	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-16.1579922351	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.3

Table 1057: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2795026431	2339.4	2339.4	2339.4	3.0	27.0	602.4
cch second order	-27.2795023228	183.0	95.0	95.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-27.2794672441	304414.0	0.0	0.0	nan	27.0	2094.0
direct	-27.2170924995	27047.0	0.0	0.0	nan	27.0	169.9
direct with trim	-27.2795023782	27057.0	8.0	8.0	nan	27.0	210.2
dual anneal	-27.2795023781	54017.0	15.0	15.0	1.0	27.0	418.7
trust region	-27.2795023782	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.5
trust region repeats	-27.2795023782	268.0	268.0	268.0	1.0	27.0	6.0

Table 1058: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8934857334	15510.6	15510.6	15510.6	6.2	27.0	997.4
cch second order	-41.8934853485	189.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.6
diff evo	-41.8933989035	311003.0	0.0	0.0	nan	27.0	2233.4
direct	-41.6791430319	27099.0	0.0	0.0	nan	27.0	157.6
direct with trim	-41.8934846420	27110.0	9.0	9.0	nan	27.0	212.2
dual anneal	-41.8934846418	54139.8	137.8	137.8	1.0	27.0	489.9
trust region	-41.8934846495	161.0	161.0	161.0	nan	27.0	34.7
trust region repeats	-41.8934846494	1928.0	1928.0	1928.0	1.0	27.0	28.6

Table 1059: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2461977620	1867.2	1867.2	1867.2	2.6	27.0	617.0
cch second order	-60.2461986694	168.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.6
diff evo	-60.2461335243	396055.0	0.0	0.0	nan	27.0	2627.2
direct	-59.6085452096	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.9
direct with trim	-60.2461977501	27164.0	9.0	9.0	nan	27.0	232.6
dual anneal	-60.2461977617	54016.2	14.2	14.2	1.0	27.0	441.8
trust region	-60.2461977501	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.3
trust region repeats	-60.2461977620	271.0	271.0	271.0	1.0	27.0	5.6

Table 1060: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5586932118	1854.2	1854.2	1854.2	2.2	27.0	607.1
cch second order	-82.5586932444	165.0	89.0	89.0	nan	27.0	7.9
diff evo	-82.5585571531	396220.0	0.0	0.0	nan	27.0	2610.1
direct	-80.5911796422	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	185.5
direct with trim	-82.5586924413	27190.0	15.0	15.0	nan	27.0	230.2
dual anneal	-82.5586924409	54020.6	18.6	18.6	1.0	27.0	445.6
trust region	-82.5586924413	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-82.5586924528	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	5.3

Table 1061: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0324638209	1929.2	1929.2	1929.2	1.8	27.0	619.2
cch second order	-109.0324638335	202.0	108.0	108.0	nan	27.0	6.7
diff evo	-109.0322142791	320749.0	0.0	0.0	nan	27.0	2383.8
direct	-108.4375030000	27117.0	0.0	0.0	nan	27.0	159.0
direct with trim	-109.0324629676	27129.0	10.0	10.0	nan	27.0	228.5
dual anneal	-109.0324629670	54017.8	15.8	15.8	1.0	27.0	425.7
trust region	-109.0324629676	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-109.0324629782	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.5

Table 1062: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8533005911	1940.8	1940.8	1940.8	2.4	27.0	658.5
cch second order	-139.8533005337	197.0	104.0	104.0	nan	27.0	6.4
diff evo	-139.8530194539	315062.0	0.0	0.0	nan	27.0	2318.4
direct	-138.9293480992	27179.0	0.0	0.0	nan	27.0	164.3
direct with trim	-139.8533005815	27189.0	8.0	8.0	nan	27.0	203.8
dual anneal	-139.8533005902	54021.8	19.8	19.8	1.0	27.0	440.9
trust region	-139.8533005815	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	8.8
trust region repeats	-139.8533005911	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	6.0

Table 1063: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1940547434	1989.2	1989.2	1989.2	1.6	27.0	741.0
cch second order	-175.1940547340	242.0	121.0	121.0	nan	27.0	10.1
diff evo	-175.1937630364	328350.0	0.0	0.0	nan	27.0	2322.0
direct	-174.2495779953	27227.0	0.0	0.0	nan	27.0	178.8
direct with trim	-175.1940547435	27245.8	16.8	16.8	nan	27.0	202.2
dual anneal	-175.1940547338	54016.6	14.6	14.6	1.0	27.0	413.8
trust region	-175.1940547349	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	7.7
trust region repeats	-175.1940547434	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.9

Table 1064: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2166891826	2052.0	2052.0	2052.0	2.4	27.0	668.4
cch second order	-215.2166883737	282.0	128.0	128.0	nan	27.0	10.6
diff evo	-215.2162132669	267547.5	0.0	0.0	nan	27.0	2332.1
direct	-213.6602152491	27265.0	0.0	0.0	nan	27.0	215.4
direct with trim	-215.2166883021	27276.0	9.0	9.0	nan	27.0	224.3
dual anneal	-215.2166883007	54027.6	25.6	25.6	1.0	27.0	413.5
trust region	-215.2166883021	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	6.8
trust region repeats	-215.2166883096	299.0	299.0	299.0	1.0	27.0	6.5

Table 1065: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0738548730	2779.2	2779.2	2779.2	2.0	27.0	695.4
cch second order	-260.0738543417	799.0	255.0	255.0	nan	27.0	10.6
diff evo	-260.0735346638	302962.0	0.0	0.0	nan	27.0	2218.0
direct	-257.7803439085	27043.0	0.0	0.0	nan	27.0	173.9
direct with trim	-260.0738540502	27053.0	8.0	8.0	nan	27.0	224.6
dual anneal	-260.0738540484	54024.8	22.8	22.8	1.0	27.0	369.5
trust region	-260.0738540502	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.8
trust region repeats	-260.0738540569	342.0	342.0	342.0	1.0	27.0	5.4

Table 1066: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9101338062	2317.4	2317.4	2317.4	1.8	27.0	687.6
cch second order	-309.9101337387	317.0	143.0	143.0	nan	27.0	10.3
diff evo	-309.9094249501	305277.5	0.0	0.0	nan	27.0	2174.8
direct	-308.5478282026	27187.0	0.0	0.0	nan	27.0	194.6
direct with trim	-309.9101337999	27198.0	9.0	9.0	nan	27.0	231.3
dual anneal	-309.9101337976	54031.6	29.6	29.6	1.0	27.0	427.2
trust region	-309.9101337999	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.4
trust region repeats	-309.9101338057	308.0	308.0	308.0	1.0	27.0	5.9

Table 1067: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8630323917	2820.0	2820.0	2820.0	1.8	27.0	693.7
cch second order	-364.8630323673	415.0	158.0	158.0	nan	27.0	10.7
diff evo	-364.8627126194	311476.0	0.0	0.0	nan	27.0	2376.1
direct	-320.7118763416	27063.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.4
direct with trim	-364.8630323859	27098.0	33.0	33.0	nan	27.0	215.1
dual anneal	-364.8630323830	54029.6	27.6	27.6	1.0	27.0	448.8
trust region	-364.8630323859	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	5.8
trust region repeats	-364.8630323859	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.5

Table 1068: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0637886792	2052.0	2052.0	2052.0	2.0	27.0	658.1
cch second order	-425.0637887377	258.0	125.0	125.0	nan	27.0	9.6
diff evo	-425.0633658183	306693.8	0.0	0.0	nan	27.0	2201.1
direct	-421.3884700114	27259.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.1
direct with trim	-425.0637886749	27275.0	14.0	14.0	nan	27.0	230.7
dual anneal	-425.0637886715	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	420.2
trust region	-425.0637886749	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.7
trust region repeats	-425.0637886792	295.0	295.0	295.0	1.0	27.0	5.3

Table 1069: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6380470491	2021.8	2021.8	2021.8	1.8	27.0	572.3
cch second order	-490.6380469957	250.0	122.0	122.0	nan	27.0	6.5
diff evo	-490.6374836579	301048.0	0.0	0.0	nan	27.0	2323.2
direct	-482.0243573950	27143.0	0.0	0.0	nan	27.0	183.8
direct with trim	-490.6380470449	27159.0	14.0	14.0	nan	27.0	225.6
dual anneal	-490.6380470450	54034.8	32.8	32.8	1.0	27.0	424.6
trust region	-490.6380470449	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	4.6
trust region repeats	-490.6380470491	297.0	297.0	297.0	1.0	27.0	6.0

Table 1070: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7064204050	2111.6	2111.6	2111.6	1.8	27.0	736.9
cch second order	-561.7064204982	221.0	118.0	118.0	nan	27.0	6.0
diff evo	-561.7059714981	302500.0	0.0	0.0	nan	27.0	2159.4
direct	-556.9800582840	27209.0	0.0	0.0	nan	27.0	174.5
direct with trim	-561.7064204007	27221.0	10.0	10.0	nan	27.0	221.6
dual anneal	-561.7064204000	54017.2	15.2	15.2	1.0	27.0	363.7
trust region	-561.7064204007	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	4.1
trust region repeats	-561.7064204049	296.0	296.0	296.0	1.0	27.0	6.2

Table 1071: Ar

38.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6661296029
He	cch second order	-3.2215675084
Li	basin hopping	-8.2486156183
Be	basin hopping	-16.1579922537
B	basin hopping	-27.2795026431
C	basin hopping	-41.8934857334
N	cch second order	-60.2461986694
O	cch second order	-82.5586932444
F	cch second order	-109.0324638335
Ne	basin hopping	-139.8533005911
Na	direct with trim	-175.1940547435
Mg	basin hopping	-215.2166891826
Al	basin hopping	-260.0738548730
Si	basin hopping	-309.9101338062
P	basin hopping	-364.8630323917
S	cch second order	-425.0637887377
Cl	basin hopping	-490.6380470491
Ar	cch second order	-561.7064204982

Table 1072: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	20.9	20.9	20.9	nan	-182.8791091691	7.4
cch second order	256.9	118.8	118.8	nan	-182.8791093694	8.0
trust region repeats	371.6	371.6	371.6	1.0	-182.8791091738	7.1
basin hopping	3288.6	3288.6	3288.6	2.6	-182.8791094331	686.0
direct	27164.3	0.0	0.0	nan	-178.8906250486	176.3
direct with trim	27177.4	11.1	11.1	nan	-182.8791091692	216.6
dual anneal	54027.4	25.4	25.4	1.0	-182.8791091690	429.5
diff evo	310811.9	0.0	0.0	nan	-182.8788629020	2206.0

Table 1073: Average (all systems)

39 27s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

39.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1074: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241610	4866.6	4866.6	4866.6	5.0	27.0	735.8
He	-2.8183573384	3201.8	3201.8	3201.8	3.0	27.0	595.4
Li	-7.3227172850	3121.4	3121.4	3121.4	3.0	27.0	605.5
Be	-14.4841011497	2396.0	2396.0	2396.0	2.6	27.0	631.0
B	-24.6284248510	2249.2	2249.2	2249.2	2.2	27.0	593.7
C	-38.0332904943	2005.0	2005.0	2005.0	2.0	27.0	542.5
N	-54.9428848961	2025.4	2025.4	2025.4	1.0	27.0	546.3
O	-75.5766139673	1772.4	1772.4	1772.4	1.0	27.0	577.6
F	-100.1346219347	1901.6	1901.6	1901.6	1.6	27.0	569.0
Ne	-128.8015640592	1795.4	1795.4	1795.4	1.4	27.0	604.5
Na	-161.7493153011	1793.6	1793.6	1793.6	1.6	27.0	666.6
Mg	-199.1389896031	1767.2	1767.2	1767.2	1.4	27.0	634.2
Al	-241.1224908010	1796.6	1796.6	1796.6	1.2	27.0	514.2
Si	-287.8437330198	1907.6	1907.6	1907.6	1.6	27.0	565.9
P	-339.4396204951	1801.4	1801.4	1801.4	1.2	27.0	639.4
S	-396.0408476964	1834.0	1834.0	1834.0	1.0	27.0	650.5
Cl	-457.7725622545	1914.2	1914.2	1914.2	1.2	27.0	558.3
Ar	-524.7549211527	1957.2	1957.2	1957.2	1.2	27.0	612.2

Table 1075: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241027	183.0	99.0	99.0	nan	27.0	9.2
He	-2.8183573145	208.0	111.0	111.0	nan	27.0	9.4
Li	-7.3227172396	163.0	91.0	91.0	nan	27.0	5.2
Be	-14.4841011492	187.0	102.0	102.0	nan	27.0	8.1
B	-24.6284248333	184.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.4
C	-38.0332905500	161.0	89.0	89.0	nan	27.0	4.8
N	-54.9428849122	160.0	87.0	87.0	nan	27.0	8.8
O	-75.5762804244	158.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.2
F	-100.1346219303	170.0	94.0	94.0	nan	27.0	5.5
Ne	-128.8015640509	170.0	93.0	93.0	nan	27.0	7.9
Na	-161.7493153665	192.0	101.0	101.0	nan	27.0	9.8
Mg	-199.1389896556	206.0	108.0	108.0	nan	27.0	9.0
Al	-241.1224908309	165.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.3
Si	-287.8437329617	156.0	88.0	88.0	nan	27.0	9.3
P	-339.4396205158	149.0	79.0	79.0	nan	27.0	7.9
S	-396.0408476810	234.0	122.0	122.0	nan	27.0	10.6
Cl	-457.7725622365	181.0	99.0	99.0	nan	27.0	9.2
Ar	-524.7549211933	156.0	86.0	86.0	nan	27.0	8.8

Table 1076: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666234298	172315.0	0.0	0.0	nan	27.0	1172.2
He	-2.8183532647	207075.0	0.0	0.0	nan	27.0	1503.6
Li	-7.3227129665	293469.0	0.0	0.0	nan	27.0	1782.1
Be	-14.4840933038	239602.0	0.0	0.0	nan	27.0	1501.7
B	-24.6284054895	247434.0	0.0	0.0	nan	27.0	1460.1
C	-38.0332721451	299112.0	0.0	0.0	nan	27.0	1634.6
N	-54.9427812789	247445.0	0.0	0.0	nan	27.0	1786.5
O	-75.5765753483	273141.0	0.0	0.0	nan	27.0	1936.2
F	-100.1344550213	265089.0	0.0	0.0	nan	27.0	1614.6
Ne	-128.8013269220	231011.0	0.0	0.0	nan	27.0	1443.2
Na	-161.7492192526	285890.0	0.0	0.0	nan	27.0	1949.2
Mg	-199.1388241656	277376.0	0.0	0.0	nan	27.0	1534.7
Al	-241.1221804256	245377.0	0.0	0.0	nan	27.0	1650.1
Si	-287.8435194091	278102.0	0.0	0.0	nan	27.0	1732.9
P	-339.4393893596	292864.0	0.0	0.0	nan	27.0	1711.0
S	-396.0405597395	319759.0	0.0	0.0	nan	27.0	2129.9
Cl	-457.7721916476	307065.0	0.0	0.0	nan	27.0	2384.4
Ar	-524.7545078268	239126.2	0.0	0.0	nan	27.0	1699.0

Table 1077: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5661905501	27321.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.2
He	-2.8135285863	27125.0	0.0	0.0	nan	27.0	155.6
Li	-7.3117847913	27205.0	0.0	0.0	nan	27.0	175.1
Be	-14.4673202543	27073.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
B	-24.5697019647	27071.0	0.0	0.0	nan	27.0	143.4
C	-37.8775201134	27171.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.8
N	-54.5822245371	27005.0	0.0	0.0	nan	27.0	136.6
O	-75.0237801657	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	162.2
F	-99.7346243465	27235.0	0.0	0.0	nan	27.0	137.5
Ne	-126.5926729767	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	136.8
Na	-160.9921653276	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	135.0
Mg	-197.9070643028	27083.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
Al	-239.8786238011	27077.0	0.0	0.0	nan	27.0	170.5
Si	-282.8433938827	27109.0	0.0	0.0	nan	27.0	166.8
P	-335.2660504593	27045.0	0.0	0.0	nan	27.0	177.6
S	-392.5230853187	27055.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.6
Cl	-455.9806276249	27069.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.1
Ar	-521.0421733352	27039.0	0.0	0.0	nan	27.0	160.4

Table 1078: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241601	27329.0	6.0	6.0	nan	27.0	163.8
He	-2.8183573384	27133.0	6.0	6.0	nan	27.0	159.3
Li	-7.3227172850	27214.0	7.0	7.0	nan	27.0	162.7
Be	-14.4841011497	27082.0	7.0	7.0	nan	27.0	166.5
B	-24.6284248510	27080.0	7.0	7.0	nan	27.0	151.9
C	-38.0332904943	27180.0	7.0	7.0	nan	27.0	160.5
N	-54.9428848961	27015.0	8.0	8.0	nan	27.0	145.4
O	-75.5766139673	27165.0	8.0	8.0	nan	27.0	160.4
F	-100.1346219347	27245.0	8.0	8.0	nan	27.0	140.8
Ne	-128.8015640592	27041.0	12.0	12.0	nan	27.0	149.2
Na	-161.7493153011	27033.0	8.0	8.0	nan	27.0	158.6
Mg	-199.1389896031	27092.0	7.0	7.0	nan	27.0	149.5
Al	-241.1224908010	27086.0	7.0	7.0	nan	27.0	150.9
Si	-287.8437330198	27124.0	13.0	13.0	nan	27.0	162.8
P	-339.4396204951	27058.0	11.0	11.0	nan	27.0	143.5
S	-396.0408476964	27068.0	11.0	11.0	nan	27.0	154.2
Cl	-457.7725622545	27080.0	9.0	9.0	nan	27.0	149.9
Ar	-524.7549211527	27050.0	9.0	9.0	nan	27.0	159.7

Table 1079: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241601	54010.2	8.2	8.2	1.0	27.0	296.8
He	-2.8183573384	54010.6	8.6	8.6	1.0	27.0	283.5
Li	-7.3227172850	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	282.3
Be	-14.4841011497	54014.0	12.0	12.0	1.0	27.0	284.0
B	-24.6284248510	54014.4	12.4	12.4	1.0	27.0	286.7
C	-38.0332904942	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	305.5
N	-54.9428848960	54016.4	14.4	14.4	1.0	27.0	310.6
O	-75.5766139671	54015.4	13.4	13.4	1.0	27.0	285.6
F	-100.1346219344	54017.4	15.4	15.4	1.0	27.0	311.7
Ne	-128.8015640588	54019.4	17.4	17.4	1.0	27.0	312.8
Na	-161.7493153006	54025.4	23.4	23.4	1.0	27.0	307.4
Mg	-199.1389896024	54026.6	24.6	24.6	1.0	27.0	283.5
Al	-241.1224908001	54015.8	13.8	13.8	1.0	27.0	285.1
Si	-287.8437330187	54028.8	26.8	26.8	1.0	27.0	298.6
P	-339.4396204938	54020.8	18.8	18.8	1.0	27.0	308.6
S	-396.0408476948	54025.6	23.6	23.6	1.0	27.0	286.3
Cl	-457.7725622526	54028.0	26.0	26.0	1.0	27.0	266.3
Ar	-524.7549211503	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	308.0

Table 1080: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241601	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
He	-2.8183573384	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.7
Li	-7.3227172850	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.7
Be	-14.4841011497	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
B	-24.6284248510	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
C	-38.0332904943	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
N	-54.9428848961	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.6
O	-75.5766139673	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.9
F	-100.1346219347	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.5
Ne	-128.8015640592	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.5
Na	-161.7493153011	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	5.7
Mg	-199.1389896031	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.9
Al	-241.1224908010	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	10.7
Si	-287.8437330198	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	6.6
P	-339.4396204951	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	3.9
S	-396.0408476964	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.4
Cl	-457.7725622545	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.8
Ar	-524.7549211527	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.8

Table 1081: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666241601	217.0	217.0	217.0	1.0	27.0	6.4
He	-2.8183573384	234.0	234.0	234.0	1.0	27.0	6.0
Li	-7.3227172850	239.0	239.0	239.0	1.0	27.0	5.9
Be	-14.4841011497	247.0	247.0	247.0	1.0	27.0	5.2
B	-24.6284248510	256.0	256.0	256.0	1.0	27.0	4.5
C	-38.0332904943	260.0	260.0	260.0	1.0	27.0	5.5
N	-54.9428848961	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	6.1
O	-75.5766139673	269.0	269.0	269.0	1.0	27.0	5.8
F	-100.1346219347	269.0	269.0	269.0	1.0	27.0	5.7
Ne	-128.8015640592	274.0	274.0	274.0	1.0	27.0	6.4
Na	-161.7493153011	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	5.2
Mg	-199.1389896031	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.7
Al	-241.1224908010	281.0	281.0	281.0	1.0	27.0	5.4
Si	-287.8437330198	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.4
P	-339.4396204951	281.0	281.0	281.0	2.0	27.0	5.9
S	-396.0408476964	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.4
Cl	-457.7725622545	288.0	288.0	288.0	1.0	27.0	5.0
Ar	-524.7549211527	287.0	287.0	287.0	1.0	27.0	5.2

Table 1082: trust region repeats

39.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666241610	4866.6	4866.6	4866.6	5.0	27.0	735.8
cch second order	-0.5666241027	183.0	99.0	99.0	nan	27.0	9.2
diff evo	-0.5666234298	172315.0	0.0	0.0	nan	27.0	1172.2
direct	-0.5661905501	27321.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.2
direct with trim	-0.5666241601	27329.0	6.0	6.0	nan	27.0	163.8
dual anneal	-0.5666241601	54010.2	8.2	8.2	1.0	27.0	296.8
trust region	-0.5666241601	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-0.5666241601	217.0	217.0	217.0	1.0	27.0	6.4

Table 1083: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183573384	3201.8	3201.8	3201.8	3.0	27.0	595.4
cch second order	-2.8183573145	208.0	111.0	111.0	nan	27.0	9.4
diff evo	-2.8183532647	207075.0	0.0	0.0	nan	27.0	1503.6
direct	-2.8135285863	27125.0	0.0	0.0	nan	27.0	155.6
direct with trim	-2.8183573384	27133.0	6.0	6.0	nan	27.0	159.3
dual anneal	-2.8183573384	54010.6	8.6	8.6	1.0	27.0	283.5
trust region	-2.8183573384	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.7
trust region repeats	-2.8183573384	234.0	234.0	234.0	1.0	27.0	6.0

Table 1084: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3227172850	3121.4	3121.4	3121.4	3.0	27.0	605.5
cch second order	-7.3227172396	163.0	91.0	91.0	nan	27.0	5.2
diff evo	-7.3227129665	293469.0	0.0	0.0	nan	27.0	1782.1
direct	-7.3117847913	27205.0	0.0	0.0	nan	27.0	175.1
direct with trim	-7.3227172850	27214.0	7.0	7.0	nan	27.0	162.7
dual anneal	-7.3227172850	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	282.3
trust region	-7.3227172850	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.7
trust region repeats	-7.3227172850	239.0	239.0	239.0	1.0	27.0	5.9

Table 1085: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4841011497	2396.0	2396.0	2396.0	2.6	27.0	631.0
cch second order	-14.4841011492	187.0	102.0	102.0	nan	27.0	8.1
diff evo	-14.4840933038	239602.0	0.0	0.0	nan	27.0	1501.7
direct	-14.4673202543	27073.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
direct with trim	-14.4841011497	27082.0	7.0	7.0	nan	27.0	166.5
dual anneal	-14.4841011497	54014.0	12.0	12.0	1.0	27.0	284.0
trust region	-14.4841011497	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
trust region repeats	-14.4841011497	247.0	247.0	247.0	1.0	27.0	5.2

Table 1086: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6284248510	2249.2	2249.2	2249.2	2.2	27.0	593.7
cch second order	-24.6284248333	184.0	99.0	99.0	nan	27.0	5.4
diff evo	-24.6284054895	247434.0	0.0	0.0	nan	27.0	1460.1
direct	-24.5697019647	27071.0	0.0	0.0	nan	27.0	143.4
direct with trim	-24.6284248510	27080.0	7.0	7.0	nan	27.0	151.9
dual anneal	-24.6284248510	54014.4	12.4	12.4	1.0	27.0	286.7
trust region	-24.6284248510	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-24.6284248510	256.0	256.0	256.0	1.0	27.0	4.5

Table 1087: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332904943	2005.0	2005.0	2005.0	2.0	27.0	542.5
cch second order	-38.0332905500	161.0	89.0	89.0	nan	27.0	4.8
diff evo	-38.0332721451	299112.0	0.0	0.0	nan	27.0	1634.6
direct	-37.8775201134	27171.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.8
direct with trim	-38.0332904943	27180.0	7.0	7.0	nan	27.0	160.5
dual anneal	-38.0332904942	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	305.5
trust region	-38.0332904943	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-38.0332904943	260.0	260.0	260.0	1.0	27.0	5.5

Table 1088: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9428848961	2025.4	2025.4	2025.4	1.0	27.0	546.3
cch second order	-54.9428849122	160.0	87.0	87.0	nan	27.0	8.8
diff evo	-54.9427812789	247445.0	0.0	0.0	nan	27.0	1786.5
direct	-54.5822245371	27005.0	0.0	0.0	nan	27.0	136.6
direct with trim	-54.9428848961	27015.0	8.0	8.0	nan	27.0	145.4
dual anneal	-54.9428848960	54016.4	14.4	14.4	1.0	27.0	310.6
trust region	-54.9428848961	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.6
trust region repeats	-54.9428848961	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	6.1

Table 1089: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5766139673	1772.4	1772.4	1772.4	1.0	27.0	577.6
cch second order	-75.5762804244	158.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.2
diff evo	-75.5765753483	273141.0	0.0	0.0	nan	27.0	1936.2
direct	-75.0237801657	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	162.2
direct with trim	-75.5766139673	27165.0	8.0	8.0	nan	27.0	160.4
dual anneal	-75.5766139671	54015.4	13.4	13.4	1.0	27.0	285.6
trust region	-75.5766139673	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.9
trust region repeats	-75.5766139673	269.0	269.0	269.0	1.0	27.0	5.8

Table 1090: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1346219347	1901.6	1901.6	1901.6	1.6	27.0	569.0
cch second order	-100.1346219303	170.0	94.0	94.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-100.1344550213	265089.0	0.0	0.0	nan	27.0	1614.6
direct	-99.7346243465	27235.0	0.0	0.0	nan	27.0	137.5
direct with trim	-100.1346219347	27245.0	8.0	8.0	nan	27.0	140.8
dual anneal	-100.1346219344	54017.4	15.4	15.4	1.0	27.0	311.7
trust region	-100.1346219347	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-100.1346219347	269.0	269.0	269.0	1.0	27.0	5.7

Table 1091: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8015640592	1795.4	1795.4	1795.4	1.4	27.0	604.5
cch second order	-128.8015640509	170.0	93.0	93.0	nan	27.0	7.9
diff evo	-128.8013269220	231011.0	0.0	0.0	nan	27.0	1443.2
direct	-126.5926729767	27027.0	0.0	0.0	nan	27.0	136.8
direct with trim	-128.8015640592	27041.0	12.0	12.0	nan	27.0	149.2
dual anneal	-128.8015640588	54019.4	17.4	17.4	1.0	27.0	312.8
trust region	-128.8015640592	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-128.8015640592	274.0	274.0	274.0	1.0	27.0	6.4

Table 1092: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7493153011	1793.6	1793.6	1793.6	1.6	27.0	666.6
cch second order	-161.7493153665	192.0	101.0	101.0	nan	27.0	9.8
diff evo	-161.7492192526	285890.0	0.0	0.0	nan	27.0	1949.2
direct	-160.9921653276	27023.0	0.0	0.0	nan	27.0	135.0
direct with trim	-161.7493153011	27033.0	8.0	8.0	nan	27.0	158.6
dual anneal	-161.7493153006	54025.4	23.4	23.4	1.0	27.0	307.4
trust region	-161.7493153011	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	5.7
trust region repeats	-161.7493153011	277.0	277.0	277.0	1.0	27.0	5.2

Table 1093: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1389896031	1767.2	1767.2	1767.2	1.4	27.0	634.2
cch second order	-199.1389896556	206.0	108.0	108.0	nan	27.0	9.0
diff evo	-199.1388241656	277376.0	0.0	0.0	nan	27.0	1534.7
direct	-197.9070643028	27083.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.3
direct with trim	-199.1389896031	27092.0	7.0	7.0	nan	27.0	149.5
dual anneal	-199.1389896024	54026.6	24.6	24.6	1.0	27.0	283.5
trust region	-199.1389896031	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-199.1389896031	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.7

Table 1094: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1224908010	1796.6	1796.6	1796.6	1.2	27.0	514.2
cch second order	-241.1224908309	165.0	89.0	89.0	nan	27.0	5.3
diff evo	-241.1221804256	245377.0	0.0	0.0	nan	27.0	1650.1
direct	-239.8786238011	27077.0	0.0	0.0	nan	27.0	170.5
direct with trim	-241.1224908010	27086.0	7.0	7.0	nan	27.0	150.9
dual anneal	-241.1224908001	54015.8	13.8	13.8	1.0	27.0	285.1
trust region	-241.1224908010	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	10.7
trust region repeats	-241.1224908010	281.0	281.0	281.0	1.0	27.0	5.4

Table 1095: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8437330198	1907.6	1907.6	1907.6	1.6	27.0	565.9
cch second order	-287.8437329617	156.0	88.0	88.0	nan	27.0	9.3
diff evo	-287.8435194091	278102.0	0.0	0.0	nan	27.0	1732.9
direct	-282.8433938827	27109.0	0.0	0.0	nan	27.0	166.8
direct with trim	-287.8437330198	27124.0	13.0	13.0	nan	27.0	162.8
dual anneal	-287.8437330187	54028.8	26.8	26.8	1.0	27.0	298.6
trust region	-287.8437330198	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	6.6
trust region repeats	-287.8437330198	279.0	279.0	279.0	1.0	27.0	5.4

Table 1096: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4396204951	1801.4	1801.4	1801.4	1.2	27.0	639.4
cch second order	-339.4396205158	149.0	79.0	79.0	nan	27.0	7.9
diff evo	-339.4393893596	292864.0	0.0	0.0	nan	27.0	1711.0
direct	-335.2660504593	27045.0	0.0	0.0	nan	27.0	177.6
direct with trim	-339.4396204951	27058.0	11.0	11.0	nan	27.0	143.5
dual anneal	-339.4396204938	54020.8	18.8	18.8	1.0	27.0	308.6
trust region	-339.4396204951	16.0	16.0	16.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-339.4396204951	281.0	281.0	281.0	2.0	27.0	5.9

Table 1097: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0408476964	1834.0	1834.0	1834.0	1.0	27.0	650.5
cch second order	-396.0408476810	234.0	122.0	122.0	nan	27.0	10.6
diff evo	-396.0405597395	319759.0	0.0	0.0	nan	27.0	2129.9
direct	-392.5230853187	27055.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.6
direct with trim	-396.0408476964	27068.0	11.0	11.0	nan	27.0	154.2
dual anneal	-396.0408476948	54025.6	23.6	23.6	1.0	27.0	286.3
trust region	-396.0408476964	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.4
trust region repeats	-396.0408476964	283.0	283.0	283.0	1.0	27.0	5.4

Table 1098: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7725622545	1914.2	1914.2	1914.2	1.2	27.0	558.3
cch second order	-457.7725622365	181.0	99.0	99.0	nan	27.0	9.2
diff evo	-457.7721916476	307065.0	0.0	0.0	nan	27.0	2384.4
direct	-455.9806276249	27069.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.1
direct with trim	-457.7725622545	27080.0	9.0	9.0	nan	27.0	149.9
dual anneal	-457.7725622526	54028.0	26.0	26.0	1.0	27.0	266.3
trust region	-457.7725622545	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	6.8
trust region repeats	-457.7725622545	288.0	288.0	288.0	1.0	27.0	5.0

Table 1099: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7549211527	1957.2	1957.2	1957.2	1.2	27.0	612.2
cch second order	-524.7549211933	156.0	86.0	86.0	nan	27.0	8.8
diff evo	-524.7545078268	239126.2	0.0	0.0	nan	27.0	1699.0
direct	-521.0421733352	27039.0	0.0	0.0	nan	27.0	160.4
direct with trim	-524.7549211527	27050.0	9.0	9.0	nan	27.0	159.7
dual anneal	-524.7549211503	54023.6	21.6	21.6	1.0	27.0	308.0
trust region	-524.7549211527	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	3.8
trust region repeats	-524.7549211527	287.0	287.0	287.0	1.0	27.0	5.2

Table 1100: Ar

39.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.5666241610
He	basin hopping	-2.8183573384
Li	trust region repeats	-7.3227172850
Be	basin hopping	-14.4841011497
B	basin hopping	-24.6284248510
C	cch second order	-38.0332905500
N	cch second order	-54.9428849122
O	basin hopping	-75.5766139673
F	basin hopping	-100.1346219347
Ne	basin hopping	-128.8015640592
Na	cch second order	-161.7493153665
Mg	cch second order	-199.1389896556
Al	cch second order	-241.1224908309
Si	basin hopping	-287.8437330198
P	cch second order	-339.4396205158
S	basin hopping	-396.0408476964
Cl	basin hopping	-457.7725622545
Ar	cch second order	-524.7549211933

Table 1101: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.4	12.4	12.4	nan	-169.7317600255	5.6
cch second order	176.8	95.9	95.9	nan	-169.7317414971	7.7
trust region repeats	265.6	265.6	265.6	1.1	-169.7317600255	5.6
basin hopping	2228.1	2228.1	2228.1	1.8	-169.7317600256	602.4
direct	27104.9	0.0	0.0	nan	-168.3318073521	155.9
direct with trim	27115.3	8.4	8.4	nan	-169.7317600255	155.0
dual anneal	54018.7	16.7	16.7	1.0	-169.7317600249	294.6
diff evo	262291.8	0.0	0.0	nan	-169.7316106109	1701.4

Table 1102: Average (all systems)

40   27s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

40.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264649	647.0	647.0	0.0	nan	27.0	5.5
He	-1.4774504857	1011.0	1011.0	0.0	nan	27.0	8.0
Li	-4.1054249195	1031.0	1031.0	0.0	nan	27.0	11.1
Be	-8.4921855167	1025.0	1025.0	0.0	nan	27.0	8.0
B	-14.9258823559	998.0	998.0	0.0	nan	27.0	7.6
C	-23.6568737165	964.0	964.0	0.0	nan	27.0	12.8
N	-34.9084341572	920.0	920.0	0.0	nan	27.0	12.7
O	-48.8832258688	804.0	804.0	0.0	nan	27.0	7.0
F	-65.7675706942	812.0	812.0	0.0	nan	27.0	6.9
Ne	-85.7344455052	817.0	817.0	0.0	nan	27.0	9.9
Na	-108.9456773458	999.0	999.0	0.0	nan	27.0	11.9
Mg	-135.5536076866	1013.0	1013.0	0.0	nan	27.0	7.8
Al	-165.7023888083	1022.0	1022.0	0.0	nan	27.0	4.7
Si	-199.5290161414	1024.0	1024.0	0.0	nan	27.0	7.8
P	-237.1641656525	1022.0	1022.0	0.0	nan	27.0	8.1
S	-278.7328837693	1020.0	1020.0	0.0	nan	27.0	7.9
Cl	-324.3551634864	1013.0	1013.0	0.0	nan	27.0	8.0
Ar	-374.1464310670	1014.0	1014.0	0.0	nan	27.0	7.6

Table 1103: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264842	6298.6	6298.6	6298.6	5.2	27.0	860.5
He	-1.4774504907	3023.6	3023.6	3023.6	2.2	27.0	719.6
Li	-4.1054249303	2674.4	2674.4	2674.4	2.6	27.0	709.9
Be	-8.4921855237	2002.2	2002.2	2002.2	1.2	27.0	650.8
B	-14.9258823604	2086.0	2086.0	2086.0	1.4	27.0	645.2
C	-23.6568737199	1878.6	1878.6	1878.6	1.2	27.0	605.8
N	-34.9084341605	1982.2	1982.2	1982.2	2.0	27.0	613.6
O	-48.8832258772	1878.6	1878.6	1878.6	1.8	27.0	667.8
F	-65.7675707073	1741.2	1741.2	1741.2	1.4	27.0	633.0
Ne	-85.7344455226	1762.4	1762.4	1762.4	1.2	27.0	658.1
Na	-108.9456773654	1762.0	1762.0	1762.0	1.0	27.0	540.2
Mg	-135.5536077122	1758.0	1758.0	1758.0	1.2	27.0	560.9
Al	-165.7023888421	1731.6	1731.6	1731.6	1.0	27.0	530.2
Si	-199.5290161864	1741.2	1741.2	1741.2	1.0	27.0	607.6
P	-237.1641657123	1722.6	1722.6	1722.6	1.2	27.0	599.8
S	-278.7328838486	1735.0	1735.0	1735.0	1.0	27.0	607.6
Cl	-324.3551635908	1759.4	1759.4	1759.4	1.2	27.0	636.0
Ar	-374.1464312034	1737.2	1737.2	1737.2	1.0	27.0	584.6

Table 1104: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264367	181.0	83.0	83.0	nan	27.0	5.5
He	-1.4774504915	215.0	115.0	115.0	nan	27.0	6.0
Li	-4.1054248753	179.0	93.0	93.0	nan	27.0	4.9
Be	-8.4921856567	161.0	88.0	88.0	nan	27.0	7.6
B	-14.9258823662	165.0	93.0	93.0	nan	27.0	5.7
C	-23.6568738132	164.0	93.0	93.0	nan	27.0	5.4
N	-34.9084342799	138.0	77.0	77.0	nan	27.0	8.9
O	-48.8832258165	196.0	109.0	109.0	nan	27.0	5.5
F	-65.7675707307	204.0	113.0	113.0	nan	27.0	9.5
Ne	-85.7344456472	232.0	115.0	115.0	nan	27.0	6.2
Na	-108.9456772427	218.0	116.0	116.0	nan	27.0	10.1
Mg	-135.5536077124	186.0	98.0	98.0	nan	27.0	7.7
Al	-165.7023888106	217.0	119.0	119.0	nan	27.0	9.6
Si	-199.5290160411	239.0	125.0	125.0	nan	27.0	6.2
P	-237.1641657541	237.0	124.0	124.0	nan	27.0	10.4
S	-278.7328839667	249.0	124.0	124.0	nan	27.0	6.3
Cl	-324.3551636474	277.0	132.0	132.0	nan	27.0	10.8
Ar	-374.1464311228	231.0	118.0	118.0	nan	27.0	9.7

Table 1105: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618259295	153747.0	0.0	0.0	nan	27.0	891.0
He	-1.4774476948	186593.0	0.0	0.0	nan	27.0	1013.3
Li	-4.1054224356	187572.0	0.0	0.0	nan	27.0	1086.2
Be	-8.4921806981	178299.0	0.0	0.0	nan	27.0	995.1
B	-14.9258753092	190971.0	0.0	0.0	nan	27.0	1306.7
C	-23.6568593769	181170.0	0.0	0.0	nan	27.0	1264.9
N	-34.9084278296	197373.0	0.0	0.0	nan	27.0	1105.2
O	-48.8832125748	217019.0	0.0	0.0	nan	27.0	1427.3
F	-65.7675684145	235620.0	0.0	0.0	nan	27.0	1316.2
Ne	-85.7344127079	198924.0	0.0	0.0	nan	27.0	1163.8
Na	-108.9456193595	210507.0	0.0	0.0	nan	27.0	1406.3
Mg	-135.5535029295	203830.0	0.0	0.0	nan	27.0	1361.3
Al	-165.7023366347	203401.0	0.0	0.0	nan	27.0	1058.7
Si	-199.5289737320	247060.0	0.0	0.0	nan	27.0	1391.8
P	-237.1640732884	185812.0	0.0	0.0	nan	27.0	1210.5
S	-278.7327687719	180895.0	0.0	0.0	nan	27.0	995.2
Cl	-324.3549268677	183986.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.5
Ar	-374.1462668536	213675.0	0.0	0.0	nan	27.0	1410.6

Table 1106: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618162042	26105.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.7
He	-1.4774046247	26159.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.5
Li	-4.1049930809	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	174.5
Be	-8.4909448464	27187.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.3
B	-14.8966957148	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.1
C	-23.6134422667	27059.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.4
N	-34.7652898163	27097.0	0.0	0.0	nan	27.0	134.4
O	-48.7406467770	27081.0	0.0	0.0	nan	27.0	145.1
F	-65.3621137178	27175.0	0.0	0.0	nan	27.0	178.4
Ne	-85.3821245422	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	147.7
Na	-108.8092336361	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	159.1
Mg	-135.4654974586	27029.0	0.0	0.0	nan	27.0	153.9
Al	-165.3760495492	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	157.9
Si	-198.7441420045	27239.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.2
P	-236.3200587078	27227.0	0.0	0.0	nan	27.0	170.5
S	-278.2875511070	27015.0	0.0	0.0	nan	27.0	146.5
Cl	-323.7633692093	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.0
Ar	-373.8170963788	27233.0	0.0	0.0	nan	27.0	139.4

Table 1107: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264821	26112.0	5.0	5.0	nan	27.0	152.5
He	-1.4774504905	26166.0	5.0	5.0	nan	27.0	180.8
Li	-4.1054249303	27072.0	5.0	5.0	nan	27.0	167.8
Be	-8.4921855237	27194.0	5.0	5.0	nan	27.0	152.3
B	-14.9258823604	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	203.5
C	-23.6568737199	27067.0	6.0	6.0	nan	27.0	170.8
N	-34.9084341605	27105.0	6.0	6.0	nan	27.0	169.9
O	-48.8832258772	27089.0	6.0	6.0	nan	27.0	180.2
F	-65.7675707073	27183.0	6.0	6.0	nan	27.0	185.5
Ne	-85.7344455226	27163.0	6.0	6.0	nan	27.0	163.9
Na	-108.9456773654	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	184.7
Mg	-135.5536077122	27037.0	6.0	6.0	nan	27.0	167.7
Al	-165.7023888421	27161.0	6.0	6.0	nan	27.0	146.2
Si	-199.5290161863	27247.0	6.0	6.0	nan	27.0	154.9
P	-237.1641657123	27236.0	7.0	7.0	nan	27.0	138.6
S	-278.7328838485	27023.0	6.0	6.0	nan	27.0	152.4
Cl	-324.3551635908	27182.0	7.0	7.0	nan	27.0	167.0
Ar	-374.1464312034	27241.0	6.0	6.0	nan	27.0	167.2

Table 1108: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264821	54009.2	7.2	7.2	1.0	27.0	362.9
He	-1.4774504905	54010.4	8.4	8.4	1.0	27.0	385.6
Li	-4.1054249303	54010.2	8.2	8.2	1.0	27.0	382.5
Be	-8.4921855237	54011.4	9.4	9.4	1.0	27.0	354.5
B	-14.9258823604	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	360.2
C	-23.6568737199	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	383.2
N	-34.9084341605	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	357.7
O	-48.8832258771	54012.8	10.8	10.8	1.0	27.0	367.8
F	-65.7675707072	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	353.6
Ne	-85.7344455226	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	375.3
Na	-108.9456773653	54013.8	11.8	11.8	1.0	27.0	381.4
Mg	-135.5536077121	54011.2	9.2	9.2	1.0	27.0	339.3
Al	-165.7023888420	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	344.9
Si	-199.5290161862	54017.0	15.0	15.0	1.0	27.0	378.6
P	-237.1641657121	54014.8	12.8	12.8	1.0	27.0	371.3
S	-278.7328838483	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	381.5
Cl	-324.3551635904	54020.2	18.2	18.2	1.0	27.0	408.8
Ar	-374.1464312030	54014.8	12.8	12.8	1.0	27.0	367.4

Table 1109: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264821	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	5.1
He	-1.4774504905	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	6.8
Li	-4.1054249303	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	6.5
Be	-8.4921855237	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
B	-14.9258823604	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.3
C	-23.6568737199	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
N	-34.9084341605	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	4.0
O	-48.8832258772	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	7.0
F	-65.7675707073	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
Ne	-85.7344455226	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.9
Na	-108.9456773654	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	6.0
Mg	-135.5536077122	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	7.0
Al	-165.7023888421	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.0
Si	-199.5290161863	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
P	-237.1641657123	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.6
S	-278.7328838485	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0
Cl	-324.3551635908	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	4.1
Ar	-374.1464312034	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0

Table 1110: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618264821	219.0	219.0	219.0	1.0	27.0	5.6
He	-1.4774504905	227.0	227.0	227.0	1.0	27.0	5.9
Li	-4.1054249303	227.0	227.0	227.0	1.0	27.0	5.8
Be	-8.4921855237	225.0	225.0	225.0	1.0	27.0	4.8
B	-14.9258823604	233.0	233.0	233.0	1.0	27.0	5.7
C	-23.6568737199	241.0	241.0	241.0	2.0	27.0	5.0
N	-34.9084341605	240.0	240.0	240.0	2.0	27.0	5.3
O	-48.8832258772	242.0	242.0	242.0	1.0	27.0	5.0
F	-65.7675707073	248.0	248.0	248.0	1.0	27.0	5.6
Ne	-85.7344455226	250.0	250.0	250.0	1.0	27.0	5.3
Na	-108.9456773654	253.0	253.0	253.0	1.0	27.0	5.4
Mg	-135.5536077122	257.0	257.0	257.0	1.0	27.0	5.3
Al	-165.7023888421	259.0	259.0	259.0	1.0	27.0	5.0
Si	-199.5290161863	260.0	260.0	260.0	1.0	27.0	4.7
P	-237.1641657123	257.0	257.0	257.0	1.0	27.0	4.7
S	-278.7328838485	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.4
Cl	-324.3551635908	262.0	262.0	262.0	1.0	27.0	5.3
Ar	-374.1464312034	265.0	265.0	265.0	1.0	27.0	5.3

Table 1111: trust region repeats

40.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618264649	647.0	647.0	0.0	nan	27.0	5.5
basin hopping	-0.2618264842	6298.6	6298.6	6298.6	5.2	27.0	860.5
cch second order	-0.2618264367	181.0	83.0	83.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-0.2618259295	153747.0	0.0	0.0	nan	27.0	891.0
direct	-0.2618162042	26105.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.7
direct with trim	-0.2618264821	26112.0	5.0	5.0	nan	27.0	152.5
dual anneal	-0.2618264821	54009.2	7.2	7.2	1.0	27.0	362.9
trust region	-0.2618264821	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	5.1
trust region repeats	-0.2618264821	219.0	219.0	219.0	1.0	27.0	5.6

Table 1112: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774504857	1011.0	1011.0	0.0	nan	27.0	8.0
basin hopping	-1.4774504907	3023.6	3023.6	3023.6	2.2	27.0	719.6
cch second order	-1.4774504915	215.0	115.0	115.0	nan	27.0	6.0
diff evo	-1.4774476948	186593.0	0.0	0.0	nan	27.0	1013.3
direct	-1.4774046247	26159.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.5
direct with trim	-1.4774504905	26166.0	5.0	5.0	nan	27.0	180.8
dual anneal	-1.4774504905	54010.4	8.4	8.4	1.0	27.0	385.6
trust region	-1.4774504905	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	6.8
trust region repeats	-1.4774504905	227.0	227.0	227.0	1.0	27.0	5.9

Table 1113: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054249195	1031.0	1031.0	0.0	nan	27.0	11.1
basin hopping	-4.1054249303	2674.4	2674.4	2674.4	2.6	27.0	709.9
cch second order	-4.1054248753	179.0	93.0	93.0	nan	27.0	4.9
diff evo	-4.1054224356	187572.0	0.0	0.0	nan	27.0	1086.2
direct	-4.1049930809	27065.0	0.0	0.0	nan	27.0	174.5
direct with trim	-4.1054249303	27072.0	5.0	5.0	nan	27.0	167.8
dual anneal	-4.1054249303	54010.2	8.2	8.2	1.0	27.0	382.5
trust region	-4.1054249303	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	6.5
trust region repeats	-4.1054249303	227.0	227.0	227.0	1.0	27.0	5.8

Table 1114: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921855167	1025.0	1025.0	0.0	nan	27.0	8.0
basin hopping	-8.4921855237	2002.2	2002.2	2002.2	1.2	27.0	650.8
cch second order	-8.4921856567	161.0	88.0	88.0	nan	27.0	7.6
diff evo	-8.4921806981	178299.0	0.0	0.0	nan	27.0	995.1
direct	-8.4909448464	27187.0	0.0	0.0	nan	27.0	163.3
direct with trim	-8.4921855237	27194.0	5.0	5.0	nan	27.0	152.3
dual anneal	-8.4921855237	54011.4	9.4	9.4	1.0	27.0	354.5
trust region	-8.4921855237	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-8.4921855237	225.0	225.0	225.0	1.0	27.0	4.8

Table 1115: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258823559	998.0	998.0	0.0	nan	27.0	7.6
basin hopping	-14.9258823604	2086.0	2086.0	2086.0	1.4	27.0	645.2
cch second order	-14.9258823662	165.0	93.0	93.0	nan	27.0	5.7
diff evo	-14.9258753092	190971.0	0.0	0.0	nan	27.0	1306.7
direct	-14.8966957148	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	180.1
direct with trim	-14.9258823604	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	203.5
dual anneal	-14.9258823604	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	360.2
trust region	-14.9258823604	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.3
trust region repeats	-14.9258823604	233.0	233.0	233.0	1.0	27.0	5.7

Table 1116: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568737165	964.0	964.0	0.0	nan	27.0	12.8
basin hopping	-23.6568737199	1878.6	1878.6	1878.6	1.2	27.0	605.8
cch second order	-23.6568738132	164.0	93.0	93.0	nan	27.0	5.4
diff evo	-23.6568593769	181170.0	0.0	0.0	nan	27.0	1264.9
direct	-23.6134422667	27059.0	0.0	0.0	nan	27.0	149.4
direct with trim	-23.6568737199	27067.0	6.0	6.0	nan	27.0	170.8
dual anneal	-23.6568737199	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	383.2
trust region	-23.6568737199	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-23.6568737199	241.0	241.0	241.0	2.0	27.0	5.0

Table 1117: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9084341572	920.0	920.0	0.0	nan	27.0	12.7
basin hopping	-34.9084341605	1982.2	1982.2	1982.2	2.0	27.0	613.6
cch second order	-34.9084342799	138.0	77.0	77.0	nan	27.0	8.9
diff evo	-34.9084278296	197373.0	0.0	0.0	nan	27.0	1105.2
direct	-34.7652898163	27097.0	0.0	0.0	nan	27.0	134.4
direct with trim	-34.9084341605	27105.0	6.0	6.0	nan	27.0	169.9
dual anneal	-34.9084341605	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	357.7
trust region	-34.9084341605	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-34.9084341605	240.0	240.0	240.0	2.0	27.0	5.3

Table 1118: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8832258688	804.0	804.0	0.0	nan	27.0	7.0
basin hopping	-48.8832258772	1878.6	1878.6	1878.6	1.8	27.0	667.8
cch second order	-48.8832258165	196.0	109.0	109.0	nan	27.0	5.5
diff evo	-48.8832125748	217019.0	0.0	0.0	nan	27.0	1427.3
direct	-48.7406467770	27081.0	0.0	0.0	nan	27.0	145.1
direct with trim	-48.8832258772	27089.0	6.0	6.0	nan	27.0	180.2
dual anneal	-48.8832258771	54012.8	10.8	10.8	1.0	27.0	367.8
trust region	-48.8832258772	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	7.0
trust region repeats	-48.8832258772	242.0	242.0	242.0	1.0	27.0	5.0

Table 1119: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7675706942	812.0	812.0	0.0	nan	27.0	6.9
basin hopping	-65.7675707073	1741.2	1741.2	1741.2	1.4	27.0	633.0
cch second order	-65.7675707307	204.0	113.0	113.0	nan	27.0	9.5
diff evo	-65.7675684145	235620.0	0.0	0.0	nan	27.0	1316.2
direct	-65.3621137178	27175.0	0.0	0.0	nan	27.0	178.4
direct with trim	-65.7675707073	27183.0	6.0	6.0	nan	27.0	185.5
dual anneal	-65.7675707072	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	353.6
trust region	-65.7675707073	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-65.7675707073	248.0	248.0	248.0	1.0	27.0	5.6

Table 1120: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7344455052	817.0	817.0	0.0	nan	27.0	9.9
basin hopping	-85.7344455226	1762.4	1762.4	1762.4	1.2	27.0	658.1
cch second order	-85.7344456472	232.0	115.0	115.0	nan	27.0	6.2
diff evo	-85.7344127079	198924.0	0.0	0.0	nan	27.0	1163.8
direct	-85.3821245422	27155.0	0.0	0.0	nan	27.0	147.7
direct with trim	-85.7344455226	27163.0	6.0	6.0	nan	27.0	163.9
dual anneal	-85.7344455226	54012.2	10.2	10.2	1.0	27.0	375.3
trust region	-85.7344455226	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-85.7344455226	250.0	250.0	250.0	1.0	27.0	5.3

Table 1121: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9456773458	999.0	999.0	0.0	nan	27.0	11.9
basin hopping	-108.9456773654	1762.0	1762.0	1762.0	1.0	27.0	540.2
cch second order	-108.9456772427	218.0	116.0	116.0	nan	27.0	10.1
diff evo	-108.9456193595	210507.0	0.0	0.0	nan	27.0	1406.3
direct	-108.8092336361	27203.0	0.0	0.0	nan	27.0	159.1
direct with trim	-108.9456773654	27211.0	6.0	6.0	nan	27.0	184.7
dual anneal	-108.9456773653	54013.8	11.8	11.8	1.0	27.0	381.4
trust region	-108.9456773654	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	6.0
trust region repeats	-108.9456773654	253.0	253.0	253.0	1.0	27.0	5.4

Table 1122: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5536076866	1013.0	1013.0	0.0	nan	27.0	7.8
basin hopping	-135.5536077122	1758.0	1758.0	1758.0	1.2	27.0	560.9
cch second order	-135.5536077124	186.0	98.0	98.0	nan	27.0	7.7
diff evo	-135.5535029295	203830.0	0.0	0.0	nan	27.0	1361.3
direct	-135.4654974586	27029.0	0.0	0.0	nan	27.0	153.9
direct with trim	-135.5536077122	27037.0	6.0	6.0	nan	27.0	167.7
dual anneal	-135.5536077121	54011.2	9.2	9.2	1.0	27.0	339.3
trust region	-135.5536077122	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	7.0
trust region repeats	-135.5536077122	257.0	257.0	257.0	1.0	27.0	5.3

Table 1123: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7023888083	1022.0	1022.0	0.0	nan	27.0	4.7
basin hopping	-165.7023888421	1731.6	1731.6	1731.6	1.0	27.0	530.2
cch second order	-165.7023888106	217.0	119.0	119.0	nan	27.0	9.6
diff evo	-165.7023366347	203401.0	0.0	0.0	nan	27.0	1058.7
direct	-165.3760495492	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	157.9
direct with trim	-165.7023888421	27161.0	6.0	6.0	nan	27.0	146.2
dual anneal	-165.7023888420	54014.6	12.6	12.6	1.0	27.0	344.9
trust region	-165.7023888421	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.0
trust region repeats	-165.7023888421	259.0	259.0	259.0	1.0	27.0	5.0

Table 1124: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5290161414	1024.0	1024.0	0.0	nan	27.0	7.8
basin hopping	-199.5290161864	1741.2	1741.2	1741.2	1.0	27.0	607.6
cch second order	-199.5290160411	239.0	125.0	125.0	nan	27.0	6.2
diff evo	-199.5289737320	247060.0	0.0	0.0	nan	27.0	1391.8
direct	-198.7441420045	27239.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.2
direct with trim	-199.5290161863	27247.0	6.0	6.0	nan	27.0	154.9
dual anneal	-199.5290161862	54017.0	15.0	15.0	1.0	27.0	378.6
trust region	-199.5290161863	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-199.5290161863	260.0	260.0	260.0	1.0	27.0	4.7

Table 1125: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1641656525	1022.0	1022.0	0.0	nan	27.0	8.1
basin hopping	-237.1641657123	1722.6	1722.6	1722.6	1.2	27.0	599.8
cch second order	-237.1641657541	237.0	124.0	124.0	nan	27.0	10.4
diff evo	-237.1640732884	185812.0	0.0	0.0	nan	27.0	1210.5
direct	-236.3200587078	27227.0	0.0	0.0	nan	27.0	170.5
direct with trim	-237.1641657123	27236.0	7.0	7.0	nan	27.0	138.6
dual anneal	-237.1641657121	54014.8	12.8	12.8	1.0	27.0	371.3
trust region	-237.1641657123	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	6.6
trust region repeats	-237.1641657123	257.0	257.0	257.0	1.0	27.0	4.7

Table 1126: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7328837693	1020.0	1020.0	0.0	nan	27.0	7.9
basin hopping	-278.7328838486	1735.0	1735.0	1735.0	1.0	27.0	607.6
cch second order	-278.7328839667	249.0	124.0	124.0	nan	27.0	6.3
diff evo	-278.7327687719	180895.0	0.0	0.0	nan	27.0	995.2
direct	-278.2875511070	27015.0	0.0	0.0	nan	27.0	146.5
direct with trim	-278.7328838485	27023.0	6.0	6.0	nan	27.0	152.4
dual anneal	-278.7328838483	54013.2	11.2	11.2	1.0	27.0	381.5
trust region	-278.7328838485	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-278.7328838485	261.0	261.0	261.0	1.0	27.0	5.4

Table 1127: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3551634864	1013.0	1013.0	0.0	nan	27.0	8.0
basin hopping	-324.3551635908	1759.4	1759.4	1759.4	1.2	27.0	636.0
cch second order	-324.3551636474	277.0	132.0	132.0	nan	27.0	10.8
diff evo	-324.3549268677	183986.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.5
direct	-323.7633692093	27173.0	0.0	0.0	nan	27.0	152.0
direct with trim	-324.3551635908	27182.0	7.0	7.0	nan	27.0	167.0
dual anneal	-324.3551635904	54020.2	18.2	18.2	1.0	27.0	408.8
trust region	-324.3551635908	11.0	11.0	11.0	nan	27.0	4.1
trust region repeats	-324.3551635908	262.0	262.0	262.0	1.0	27.0	5.3

Table 1128: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1464310670	1014.0	1014.0	0.0	nan	27.0	7.6
basin hopping	-374.1464312034	1737.2	1737.2	1737.2	1.0	27.0	584.6
cch second order	-374.1464311228	231.0	118.0	118.0	nan	27.0	9.7
diff evo	-374.1462668536	213675.0	0.0	0.0	nan	27.0	1410.6
direct	-373.8170963788	27233.0	0.0	0.0	nan	27.0	139.4
direct with trim	-374.1464312034	27241.0	6.0	6.0	nan	27.0	167.2
dual anneal	-374.1464312030	54014.8	12.8	12.8	1.0	27.0	367.4
trust region	-374.1464312034	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	4.0
trust region repeats	-374.1464312034	265.0	265.0	265.0	1.0	27.0	5.3

Table 1129: Ar

40.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.2618264842
He	cch second order	-1.4774504915
Li	basin hopping	-4.1054249303
Be	cch second order	-8.4921856567
B	cch second order	-14.9258823662
C	cch second order	-23.6568738132
N	cch second order	-34.9084342799
O	basin hopping	-48.8832258772
F	cch second order	-65.7675707307
Ne	cch second order	-85.7344456472
Na	basin hopping	-108.9456773654
Mg	cch second order	-135.5536077124
Al	basin hopping	-165.7023888421
Si	basin hopping	-199.5290161864
P	cch second order	-237.1641657541
S	cch second order	-278.7328839667
Cl	cch second order	-324.3551636474
Ar	basin hopping	-374.1464312034

Table 1130: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	10.2	10.2	10.2	nan	-117.3523696798	5.1
cch second order	204.9	107.5	107.5	nan	-117.3523696895	7.6
trust region repeats	245.9	245.9	245.9	1.1	-117.3523696798	5.3
acevedo	953.1	953.1	0.0	nan	-117.3523696468	8.5
basin hopping	2181.9	2181.9	2181.9	1.6	-117.3523696799	635.1
direct	27031.0	0.0	0.0	nan	-117.0932483135	157.5
direct with trim	27038.9	5.9	5.9	nan	-117.3523696798	167.0
dual anneal	54013.1	11.1	11.1	1.0	-117.3523696796	369.8
diff evo	197580.8	0.0	0.0	nan	-117.3523167449	1189.7

Table 1131: Average (all systems)

41 27s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

41.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1132: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340394	5565.0	5565.0	5565.0	5.6	27.0	856.8
He	-2.7236396029	2431.2	2431.2	2431.2	2.0	27.0	651.1
Li	-8.5258245106	1938.2	1938.2	1938.2	1.2	27.0	501.0
Be	-19.3528890966	1859.6	1859.6	1859.6	1.4	27.0	498.7
B	-36.7291366575	1726.8	1726.8	1726.8	1.0	27.0	525.2
C	-62.1695441703	1757.6	1757.6	1757.6	1.6	27.0	479.0
N	-97.1827209557	1683.0	1683.0	1683.0	1.0	27.0	465.7
O	-143.2725946025	1685.4	1685.4	1685.4	1.0	27.0	437.1
F	-201.9394767363	1923.0	1923.0	1923.0	1.4	27.0	553.2
Ne	-274.6807854896	1700.2	1700.2	1700.2	2.0	27.0	529.3
Na	-362.9915603413	1759.0	1759.0	1759.0	1.2	27.0	583.9
Mg	-468.3648444879	1748.2	1748.2	1748.2	1.0	27.0	528.1
Al	-592.2919770356	1733.2	1733.2	1733.2	1.0	27.0	468.4
Si	-736.2628223089	1724.8	1724.8	1724.8	1.2	27.0	611.6
P	-901.7659532506	1778.0	1778.0	1778.0	1.8	27.0	554.9
S	-1090.2888007526	1723.6	1723.6	1723.6	1.6	27.0	503.9
Cl	-1303.3177766896	1947.0	1947.0	1947.0	1.0	27.0	577.6
Ar	-1542.3417769649	2755.4	2755.4	2755.4	1.6	27.0	703.1

Table 1133: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065339999	195.0	108.0	108.0	nan	27.0	8.2
He	-2.7236398916	188.0	107.0	107.0	nan	27.0	5.9
Li	-8.5258241005	214.0	117.0	117.0	nan	27.0	6.5
Be	-19.3528905372	283.0	153.0	153.0	nan	27.0	6.8
B	-36.7291347788	322.0	168.0	168.0	nan	27.0	7.2
C	-62.1695431662	746.0	364.0	364.0	nan	27.0	10.9
N	-97.1827172783	447.0	241.0	241.0	nan	27.0	8.5
O	-143.2725970727	496.0	283.0	283.0	nan	27.0	14.9
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1134: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065337411	176396.0	0.0	0.0	nan	27.0	1246.5
He	-2.7236369983	177595.0	0.0	0.0	nan	27.0	1124.6
Li	-8.5258163359	219505.0	0.0	0.0	nan	27.0	1518.8
Be	-19.3528814145	165814.0	0.0	0.0	nan	27.0	1054.2
B	-36.7291019818	167486.0	0.0	0.0	nan	27.0	1211.8
C	-62.1695189910	155760.0	0.0	0.0	nan	27.0	830.2
N	-97.1826747753	173822.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.7
O	-143.2724892911	154726.0	0.0	0.0	nan	27.0	957.9
F	-201.9393840916	181797.0	0.0	0.0	nan	27.0	1415.8
Ne	-274.6805292135	163757.0	0.0	0.0	nan	27.0	1048.8
Na	-362.9914906116	178926.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.2
Mg	-468.3643583005	165308.0	0.0	0.0	nan	27.0	1106.6
Al	-592.2915903650	145618.0	0.0	0.0	nan	27.0	959.0
Si	-736.2620856906	144452.0	0.0	0.0	nan	27.0	830.7
P	-901.7656419355	148973.0	0.0	0.0	nan	27.0	907.8
S	-1090.2880543367	155991.0	0.0	0.0	nan	27.0	962.4
Cl	-1303.3172215448	142098.0	0.0	0.0	nan	27.0	920.9
Ar	-1542.3374095580	162437.0	0.0	0.0	nan	27.0	1080.4

Table 1135: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065326314	25275.0	0.0	0.0	nan	27.0	146.7
He	-2.7228144184	27087.0	0.0	0.0	nan	27.0	143.6
Li	-8.5254965044	27051.0	0.0	0.0	nan	27.0	162.6
Be	-19.3511997450	27059.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.5
B	-36.7285136856	25863.0	0.0	0.0	nan	27.0	142.6
C	-62.1681700249	27089.0	0.0	0.0	nan	27.0	155.4
N	-97.1528192631	27055.0	0.0	0.0	nan	27.0	131.0
O	-143.2462786823	27135.0	0.0	0.0	nan	27.0	153.9
F	-201.9037294631	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	128.5
Ne	-274.5792629080	27285.0	0.0	0.0	nan	27.0	154.7
Na	-362.9821145694	27101.0	0.0	0.0	nan	27.0	166.5
Mg	-468.3361385016	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.9
Al	-592.2174283598	27115.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.5
Si	-736.1271095241	24323.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.2
P	-901.5527545052	25553.0	0.0	0.0	nan	27.0	138.0
S	-1090.0147945601	27193.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.6
Cl	-1303.1916478359	27137.0	0.0	0.0	nan	27.0	145.0
Ar	-1542.2093893362	26417.0	0.0	0.0	nan	27.0	151.0

Table 1136: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340389	25281.0	4.0	4.0	nan	27.0	148.8
He	-2.7236396028	27097.0	8.0	8.0	nan	27.0	162.3
Li	-8.5258245105	27058.0	5.0	5.0	nan	27.0	157.5
Be	-19.3528758837	27067.0	6.0	6.0	nan	27.0	177.3
B	-36.7291366575	25870.0	5.0	5.0	nan	27.0	141.9
C	-62.1695441702	27098.0	7.0	7.0	nan	27.0	148.2
N	-97.1827209557	27063.0	6.0	6.0	nan	27.0	165.0
O	-143.2725946025	27143.0	6.0	6.0	nan	27.0	147.8
F	-201.9394767363	27101.0	6.0	6.0	nan	27.0	165.8
Ne	-274.6807854505	27293.0	6.0	6.0	nan	27.0	144.4
Na	-362.9915603413	27110.0	7.0	7.0	nan	27.0	151.5
Mg	-468.3648444879	27161.0	6.0	6.0	nan	27.0	179.9
Al	-592.2919770356	27123.0	6.0	6.0	nan	27.0	143.1
Si	-736.2628223089	24331.0	6.0	6.0	nan	27.0	153.8
P	-901.7659282396	25561.0	6.0	6.0	nan	27.0	141.1
S	-1090.2888006594	27201.0	6.0	6.0	nan	27.0	128.1
Cl	-1303.3126752909	27145.0	6.0	6.0	nan	27.0	156.3
Ar	-1542.3383776302	26431.0	12.0	12.0	nan	27.0	156.0

Table 1137: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340388	54010.0	8.0	8.0	1.0	27.0	394.8
He	-2.7236396028	54009.8	7.8	7.8	1.0	27.0	320.7
Li	-8.5258245105	54010.0	8.0	8.0	1.0	27.0	377.5
Be	-19.3528890965	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	381.0
B	-36.7291366570	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	376.1
C	-62.1695441689	54015.4	13.4	13.4	1.0	27.0	370.9
N	-97.1827209525	54015.0	13.0	13.0	1.0	27.0	347.2
O	-143.2725945957	54016.0	14.0	14.0	1.0	27.0	387.5
F	-201.9394767231	54016.4	14.4	14.4	1.0	27.0	344.4
Ne	-274.6807854264	54017.4	15.4	15.4	1.0	27.0	379.1
Na	-362.9915602999	54021.8	19.8	19.8	1.0	27.0	376.0
Mg	-468.3648444199	54019.4	17.4	17.4	1.0	27.0	362.0
Al	-592.2919769282	54023.0	21.0	21.0	1.0	27.0	323.5
Si	-736.2628221449	54022.4	20.4	20.4	1.0	27.0	363.5
P	-901.7659530070	54023.8	21.8	21.8	1.0	27.0	364.8
S	-1090.2888003065	54025.2	23.2	23.2	1.0	27.0	355.0
Cl	-1303.3177761895	54035.6	33.6	33.6	1.0	27.0	349.5
Ar	-1542.3383769352	54068.8	66.8	66.8	1.0	27.0	371.5

Table 1138: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340388	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	3.9
He	-2.7236396028	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.4
Li	-8.5258245105	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
Be	-19.3528890966	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
B	-36.7291366575	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.9
C	-62.1695441702	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	7.0
N	-97.1827209557	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.9
O	-143.2725946025	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	6.6
F	-201.9394767363	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.8
Ne	-274.6807854896	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	10.6
Na	-362.9915603413	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	4.1
Mg	-468.3648444879	19.0	19.0	19.0	nan	27.0	6.7
Al	-592.2919770355	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	13.0
Si	-736.2628223089	22.0	22.0	22.0	nan	27.0	8.9
P	-901.7659532506	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	10.1
S	-1090.2888006594	22.0	22.0	22.0	nan	27.0	9.3
Cl	-1303.3177766896	35.0	35.0	35.0	nan	27.0	9.3
Ar	-1542.3383776302	26.0	26.0	26.0	nan	27.0	10.3

Table 1139: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340388	140.0	140.0	140.0	1.0	27.0	5.4
He	-2.7236396029	178.0	178.0	178.0	1.0	27.0	5.5
Li	-8.5258245105	199.0	199.0	199.0	1.0	27.0	6.3
Be	-19.3528890966	184.0	184.0	184.0	1.0	27.0	5.2
B	-36.7291366575	203.0	203.0	203.0	1.0	27.0	6.3
C	-62.1695441703	254.0	254.0	254.0	1.0	27.0	5.7
N	-97.1827209557	221.0	221.0	221.0	2.0	27.0	5.8
O	-143.2725946025	259.0	259.0	259.0	1.0	27.0	7.2
F	-201.9394767363	266.0	266.0	266.0	1.0	27.0	6.5
Ne	-274.6807854505	301.0	301.0	301.0	1.0	27.0	9.3
Na	-362.9915603413	328.0	328.0	328.0	1.0	27.0	7.3
Mg	-468.3648444879	358.0	358.0	358.0	1.0	27.0	9.0
Al	-592.2919770355	394.0	394.0	394.0	1.0	27.0	9.0
Si	-736.2628223089	399.0	399.0	399.0	1.0	27.0	9.4
P	-901.7659532506	435.0	435.0	435.0	1.0	27.0	9.3
S	-1090.2888006594	468.0	468.0	468.0	1.0	27.0	9.2
Cl	-1303.3177766896	679.0	679.0	679.0	2.0	27.0	10.0
Ar	-1542.3383776302	1250.0	1250.0	1250.0	1.0	27.0	18.6

Table 1140: trust region repeats

41.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065340394	5565.0	5565.0	5565.0	5.6	27.0	856.8
cch second order	-0.4065339999	195.0	108.0	108.0	nan	27.0	8.2
diff evo	-0.4065337411	176396.0	0.0	0.0	nan	27.0	1246.5
direct	-0.4065326314	25275.0	0.0	0.0	nan	27.0	146.7
direct with trim	-0.4065340389	25281.0	4.0	4.0	nan	27.0	148.8
dual anneal	-0.4065340388	54010.0	8.0	8.0	1.0	27.0	394.8
trust region	-0.4065340388	8.0	8.0	8.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-0.4065340388	140.0	140.0	140.0	1.0	27.0	5.4

Table 1141: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236396029	2431.2	2431.2	2431.2	2.0	27.0	651.1
cch second order	-2.7236398916	188.0	107.0	107.0	nan	27.0	5.9
diff evo	-2.7236369983	177595.0	0.0	0.0	nan	27.0	1124.6
direct	-2.7228144184	27087.0	0.0	0.0	nan	27.0	143.6
direct with trim	-2.7236396028	27097.0	8.0	8.0	nan	27.0	162.3
dual anneal	-2.7236396028	54009.8	7.8	7.8	1.0	27.0	320.7
trust region	-2.7236396028	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	5.4
trust region repeats	-2.7236396029	178.0	178.0	178.0	1.0	27.0	5.5

Table 1142: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5258245106	1938.2	1938.2	1938.2	1.2	27.0	501.0
cch second order	-8.5258241005	214.0	117.0	117.0	nan	27.0	6.5
diff evo	-8.5258163359	219505.0	0.0	0.0	nan	27.0	1518.8
direct	-8.5254965044	27051.0	0.0	0.0	nan	27.0	162.6
direct with trim	-8.5258245105	27058.0	5.0	5.0	nan	27.0	157.5
dual anneal	-8.5258245105	54010.0	8.0	8.0	1.0	27.0	377.5
trust region	-8.5258245105	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	6.2
trust region repeats	-8.5258245105	199.0	199.0	199.0	1.0	27.0	6.3

Table 1143: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3528890966	1859.6	1859.6	1859.6	1.4	27.0	498.7
cch second order	-19.3528905372	283.0	153.0	153.0	nan	27.0	6.8
diff evo	-19.3528814145	165814.0	0.0	0.0	nan	27.0	1054.2
direct	-19.3511997450	27059.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.5
direct with trim	-19.3528758837	27067.0	6.0	6.0	nan	27.0	177.3
dual anneal	-19.3528890965	54011.6	9.6	9.6	1.0	27.0	381.0
trust region	-19.3528890966	9.0	9.0	9.0	nan	27.0	3.7
trust region repeats	-19.3528890966	184.0	184.0	184.0	1.0	27.0	5.2

Table 1144: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7291366575	1726.8	1726.8	1726.8	1.0	27.0	525.2
cch second order	-36.7291347788	322.0	168.0	168.0	nan	27.0	7.2
diff evo	-36.7291019818	167486.0	0.0	0.0	nan	27.0	1211.8
direct	-36.7285136856	25863.0	0.0	0.0	nan	27.0	142.6
direct with trim	-36.7291366575	25870.0	5.0	5.0	nan	27.0	141.9
dual anneal	-36.7291366570	54012.0	10.0	10.0	1.0	27.0	376.1
trust region	-36.7291366575	10.0	10.0	10.0	nan	27.0	3.9
trust region repeats	-36.7291366575	203.0	203.0	203.0	1.0	27.0	6.3

Table 1145: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1695441703	1757.6	1757.6	1757.6	1.6	27.0	479.0
cch second order	-62.1695431662	746.0	364.0	364.0	nan	27.0	10.9
diff evo	-62.1695189910	155760.0	0.0	0.0	nan	27.0	830.2
direct	-62.1681700249	27089.0	0.0	0.0	nan	27.0	155.4
direct with trim	-62.1695441702	27098.0	7.0	7.0	nan	27.0	148.2
dual anneal	-62.1695441689	54015.4	13.4	13.4	1.0	27.0	370.9
trust region	-62.1695441702	12.0	12.0	12.0	nan	27.0	7.0
trust region repeats	-62.1695441703	254.0	254.0	254.0	1.0	27.0	5.7

Table 1146: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1827209557	1683.0	1683.0	1683.0	1.0	27.0	465.7
cch second order	-97.1827172783	447.0	241.0	241.0	nan	27.0	8.5
diff evo	-97.1826747753	173822.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.7
direct	-97.1528192631	27055.0	0.0	0.0	nan	27.0	131.0
direct with trim	-97.1827209557	27063.0	6.0	6.0	nan	27.0	165.0
dual anneal	-97.1827209525	54015.0	13.0	13.0	1.0	27.0	347.2
trust region	-97.1827209557	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.9
trust region repeats	-97.1827209557	221.0	221.0	221.0	2.0	27.0	5.8

Table 1147: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2725946025	1685.4	1685.4	1685.4	1.0	27.0	437.1
cch second order	-143.2725970727	496.0	283.0	283.0	nan	27.0	14.9
diff evo	-143.2724892911	154726.0	0.0	0.0	nan	27.0	957.9
direct	-143.2462786823	27135.0	0.0	0.0	nan	27.0	153.9
direct with trim	-143.2725946025	27143.0	6.0	6.0	nan	27.0	147.8
dual anneal	-143.2725945957	54016.0	14.0	14.0	1.0	27.0	387.5
trust region	-143.2725946025	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	6.6
trust region repeats	-143.2725946025	259.0	259.0	259.0	1.0	27.0	7.2

Table 1148: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9394767363	1923.0	1923.0	1923.0	1.4	27.0	553.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-201.9393840916	181797.0	0.0	0.0	nan	27.0	1415.8
direct	-201.9037294631	27093.0	0.0	0.0	nan	27.0	128.5
direct with trim	-201.9394767363	27101.0	6.0	6.0	nan	27.0	165.8
dual anneal	-201.9394767231	54016.4	14.4	14.4	1.0	27.0	344.4
trust region	-201.9394767363	13.0	13.0	13.0	nan	27.0	5.8
trust region repeats	-201.9394767363	266.0	266.0	266.0	1.0	27.0	6.5

Table 1149: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6807854896	1700.2	1700.2	1700.2	2.0	27.0	529.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-274.6805292135	163757.0	0.0	0.0	nan	27.0	1048.8
direct	-274.5792629080	27285.0	0.0	0.0	nan	27.0	154.7
direct with trim	-274.6807854505	27293.0	6.0	6.0	nan	27.0	144.4
dual anneal	-274.6807854264	54017.4	15.4	15.4	1.0	27.0	379.1
trust region	-274.6807854896	14.0	14.0	14.0	nan	27.0	10.6
trust region repeats	-274.6807854505	301.0	301.0	301.0	1.0	27.0	9.3

Table 1150: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9915603413	1759.0	1759.0	1759.0	1.2	27.0	583.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-362.9914906116	178926.0	0.0	0.0	nan	27.0	1011.2
direct	-362.9821145694	27101.0	0.0	0.0	nan	27.0	166.5
direct with trim	-362.9915603413	27110.0	7.0	7.0	nan	27.0	151.5
dual anneal	-362.9915602999	54021.8	19.8	19.8	1.0	27.0	376.0
trust region	-362.9915603413	15.0	15.0	15.0	nan	27.0	4.1
trust region repeats	-362.9915603413	328.0	328.0	328.0	1.0	27.0	7.3

Table 1151: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3648444879	1748.2	1748.2	1748.2	1.0	27.0	528.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-468.3643583005	165308.0	0.0	0.0	nan	27.0	1106.6
direct	-468.3361385016	27153.0	0.0	0.0	nan	27.0	158.9
direct with trim	-468.3648444879	27161.0	6.0	6.0	nan	27.0	179.9
dual anneal	-468.3648444199	54019.4	17.4	17.4	1.0	27.0	362.0
trust region	-468.3648444879	19.0	19.0	19.0	nan	27.0	6.7
trust region repeats	-468.3648444879	358.0	358.0	358.0	1.0	27.0	9.0

Table 1152: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2919770356	1733.2	1733.2	1733.2	1.0	27.0	468.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-592.2915903650	145618.0	0.0	0.0	nan	27.0	959.0
direct	-592.2174283598	27115.0	0.0	0.0	nan	27.0	168.5
direct with trim	-592.2919770356	27123.0	6.0	6.0	nan	27.0	143.1
dual anneal	-592.2919769282	54023.0	21.0	21.0	1.0	27.0	323.5
trust region	-592.2919770355	17.0	17.0	17.0	nan	27.0	13.0
trust region repeats	-592.2919770355	394.0	394.0	394.0	1.0	27.0	9.0

Table 1153: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2628223089	1724.8	1724.8	1724.8	1.2	27.0	611.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-736.2620856906	144452.0	0.0	0.0	nan	27.0	830.7
direct	-736.1271095241	24323.0	0.0	0.0	nan	27.0	150.2
direct with trim	-736.2628223089	24331.0	6.0	6.0	nan	27.0	153.8
dual anneal	-736.2628221449	54022.4	20.4	20.4	1.0	27.0	363.5
trust region	-736.2628223089	22.0	22.0	22.0	nan	27.0	8.9
trust region repeats	-736.2628223089	399.0	399.0	399.0	1.0	27.0	9.4

Table 1154: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7659532506	1778.0	1778.0	1778.0	1.8	27.0	554.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-901.7656419355	148973.0	0.0	0.0	nan	27.0	907.8
direct	-901.5527545052	25553.0	0.0	0.0	nan	27.0	138.0
direct with trim	-901.7659282396	25561.0	6.0	6.0	nan	27.0	141.1
dual anneal	-901.7659530070	54023.8	21.8	21.8	1.0	27.0	364.8
trust region	-901.7659532506	21.0	21.0	21.0	nan	27.0	10.1
trust region repeats	-901.7659532506	435.0	435.0	435.0	1.0	27.0	9.3

Table 1155: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2888007526	1723.6	1723.6	1723.6	1.6	27.0	503.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1090.2880543367	155991.0	0.0	0.0	nan	27.0	962.4
direct	-1090.0147945601	27193.0	0.0	0.0	nan	27.0	165.6
direct with trim	-1090.2888006594	27201.0	6.0	6.0	nan	27.0	128.1
dual anneal	-1090.2888003065	54025.2	23.2	23.2	1.0	27.0	355.0
trust region	-1090.2888006594	22.0	22.0	22.0	nan	27.0	9.3
trust region repeats	-1090.2888006594	468.0	468.0	468.0	1.0	27.0	9.2

Table 1156: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3177766896	1947.0	1947.0	1947.0	1.0	27.0	577.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1303.3172215448	142098.0	0.0	0.0	nan	27.0	920.9
direct	-1303.1916478359	27137.0	0.0	0.0	nan	27.0	145.0
direct with trim	-1303.3126752909	27145.0	6.0	6.0	nan	27.0	156.3
dual anneal	-1303.3177761895	54035.6	33.6	33.6	1.0	27.0	349.5
trust region	-1303.3177766896	35.0	35.0	35.0	nan	27.0	9.3
trust region repeats	-1303.3177766896	679.0	679.0	679.0	2.0	27.0	10.0

Table 1157: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3417769649	2755.4	2755.4	2755.4	1.6	27.0	703.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1542.3374095580	162437.0	0.0	0.0	nan	27.0	1080.4
direct	-1542.2093893362	26417.0	0.0	0.0	nan	27.0	151.0
direct with trim	-1542.3383776302	26431.0	12.0	12.0	nan	27.0	156.0
dual anneal	-1542.3383769352	54068.8	66.8	66.8	1.0	27.0	371.5
trust region	-1542.3383776302	26.0	26.0	26.0	nan	27.0	10.3
trust region repeats	-1542.3383776302	1250.0	1250.0	1250.0	1.0	27.0	18.6

Table 1158: Ar

41.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.4065340394
He	cch second order	-2.7236398916
Li	basin hopping	-8.5258245106
Be	cch second order	-19.3528905372
B	basin hopping	-36.7291366575
C	trust region repeats	-62.1695441703
N	basin hopping	-97.1827209557
O	cch second order	-143.2725970727
F	basin hopping	-201.9394767363
Ne	basin hopping	-274.6807854896
Na	basin hopping	-362.9915603413
Mg	trust region	-468.3648444879
Al	basin hopping	-592.2919770356
Si	basin hopping	-736.2628223089
P	basin hopping	-901.7659532506
S	basin hopping	-1090.2888007526
Cl	trust region repeats	-1303.3177766896
Ar	basin hopping	-1542.3417769649

Table 1159: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	16.0	16.0	16.0	nan	-435.8114032369	7.3
cch second order	361.4	192.6	192.6	nan	-46.2953601031	8.6
trust region repeats	362.0	362.0	362.0	1.1	-435.8114032347	8.1
basin hopping	2080.0	2080.0	2080.0	1.6	-435.8115920941	557.1
direct	26665.8	0.0	0.0	nan	-435.7453441399	151.6
direct with trim	26674.1	6.3	6.3	nan	-435.8111177001	153.8
dual anneal	54020.8	18.8	18.8	1.0	-435.8114031113	363.6
diff evo	165581.2	0.0	0.0	nan	-435.8111343987	1066.6

Table 1160: Average (all systems)

42 34s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

42.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1161: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	-121.2362770606	20142.0	20142.0	20142.0	1.0	34.0	2891.8
F	-155.6475934468	18449.0	18449.0	18449.0	5.0	34.0	3314.3
Ne	-208.4251807289	18468.3	18468.3	18468.3	1.7	34.0	3118.3
Na	-270.4906320020	18592.3	18592.3	18592.3	1.7	34.0	2934.1
Mg	-333.4266682941	16464.2	16464.2	16464.2	1.0	34.0	2432.3
Al	-399.5221698954	15508.6	15508.6	15508.6	1.2	34.0	2668.9
Si	-476.8273279383	15392.2	15392.2	15392.2	1.2	34.0	2590.0
P	-566.1680056239	15038.8	15038.8	15038.8	1.0	34.0	2452.6
S	-663.7654554305	13254.4	13254.4	13254.4	1.0	34.0	2031.8
Cl	-752.4153778088	14190.0	14190.0	14190.0	1.0	34.0	2255.0
Ar	-876.9595020292	13025.8	13025.8	13025.8	1.0	34.0	2068.7

Table 1162: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6206538722	260.0	130.0	130.0	nan	34.0	11.1
He	-2.7447047162	282.0	138.0	138.0	nan	34.0	16.8
Li	-3.9584582793	613.0	330.0	330.0	nan	34.0	15.5
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-42.0229444527	336.0	163.0	163.0	nan	34.0	11.9
N	-58.1450486391	312.0	158.0	158.0	nan	34.0	18.2
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-105.8421759296	332.0	170.0	170.0	nan	34.0	17.5
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-171.3743148243	452.0	228.0	228.0	nan	34.0	12.8
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	-251.2978609421	799.0	430.0	430.0	nan	34.0	26.0
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-353.7976790953	438.0	214.0	214.0	nan	34.0	12.3
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	-463.2567411253	422.0	221.0	221.0	nan	34.0	12.3
Ar	-539.7699363377	283.0	145.0	145.0	nan	34.0	11.2

Table 1163: cch second order

497

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1164: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7314174406	34281.0	0.0	0.0	nan	34.0	301.2
He	-3.4555283019	34025.0	0.0	0.0	nan	34.0	293.6
Li	-8.7725253445	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.4
Be	-17.0756408938	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	307.7
B	-29.1687489257	34273.0	0.0	0.0	nan	34.0	331.7
C	-43.9255097686	34251.0	0.0	0.0	nan	34.0	315.4
N	-63.6684657883	34069.0	0.0	0.0	nan	34.0	331.3
O	-86.9030986368	34331.0	0.0	0.0	nan	34.0	338.9
F	-114.2783167455	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	354.5
Ne	-138.8012603510	34183.0	0.0	0.0	nan	34.0	352.0
Na	-173.3697311119	34193.0	0.0	0.0	nan	34.0	327.1
Mg	-219.1599033633	34201.0	0.0	0.0	nan	34.0	351.9
Al	-263.9689166995	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	329.2
Si	-304.4377627969	34199.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.6
P	-348.1935846025	34177.0	0.0	0.0	nan	34.0	308.8
S	-451.6992695037	34229.0	0.0	0.0	nan	34.0	322.0
Cl	-523.2252314839	34153.0	0.0	0.0	nan	34.0	275.4
Ar	-572.5164217154	34239.0	0.0	0.0	nan	34.0	326.1

Table 1165: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1166: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9305025472	80014.0	12012.0	12012.0	12.0	34.0	3003.2
He	-4.3572523612	70504.5	2502.5	2502.5	2.5	34.0	905.2
Li	-12.2932169923	70132.0	2130.0	2130.0	2.4	34.0	1118.0
Be	-24.0209511357	70337.7	2335.7	2335.7	2.3	34.0	1169.2
B	-40.5189941285	69472.2	1470.2	1470.2	1.5	34.0	1015.6
C	-63.7761591885	74152.4	6150.4	6150.4	7.8	34.0	1926.5
N	-90.7124255494	71231.8	3229.8	3229.8	4.0	34.0	1142.4
O	-125.0315373073	71189.7	3187.7	3187.7	4.3	34.0	1388.1
F	-161.7761437133	73257.5	5255.5	5255.5	8.5	34.0	1747.1
Ne	-217.0905551510	70647.7	2645.7	2645.7	3.7	34.0	1345.4
Na	-268.6174781723	69957.5	1955.5	1955.5	3.5	34.0	815.4
Mg	-328.8211383506	91267.0	23265.0	23265.0	31.0	34.0	1900.5
Al	-399.2119888116	70567.5	2565.5	2565.5	4.5	34.0	1332.9
Si	-485.4598450019	70473.3	2471.3	2471.3	6.0	34.0	1161.6
P	-554.0984352760	72450.0	4448.0	4448.0	13.0	34.0	2425.3
S	-655.2219640778	72160.0	4158.0	4158.0	13.5	34.0	1454.4
Cl	-752.7196040633	72101.0	4099.0	4099.0	14.0	34.0	1214.4
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1167: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-164.3386326357	188.0	188.0	188.0	nan	34.0	31.9
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-265.0588137758	214.0	214.0	214.0	nan	34.0	69.3
Mg	-330.6114829221	281.0	281.0	281.0	nan	34.0	77.3
Al	-389.9153187152	543.0	543.0	543.0	nan	34.0	172.7
Si	-476.1852059512	141.0	141.0	141.0	nan	34.0	40.9
P	-568.3544884493	139.0	139.0	139.0	nan	34.0	25.3
S	-660.4592022079	126.0	126.0	126.0	nan	34.0	22.1
Cl	-741.3180554780	137.0	137.0	137.0	nan	34.0	25.4
Ar	-812.6634301209	313.0	313.0	313.0	nan	34.0	58.3

Table 1168: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Li	-12.2420994958	1951.0	1951.0	1951.0	1.0	34.0	119.5
Be	-23.9270638709	3669.0	3669.0	3669.0	8.0	34.0	128.5
B	-41.3354406262	3118.0	3118.0	3118.0	8.0	34.0	125.0
C	-62.9991542261	2875.0	2875.0	2875.0	1.0	34.0	109.5
N	-92.6279437026	7658.0	7658.0	7658.0	16.0	34.0	153.5
O	-126.5848749840	6612.0	6612.0	6612.0	1.0	34.0	153.0
F	-167.7072801286	4996.0	4996.0	4996.0	11.0	34.0	185.2
Ne	-215.1958492933	5924.0	5924.0	5924.0	14.0	34.0	124.7
Na	-274.9592263310	6993.0	6993.0	6993.0	18.0	34.0	113.8
Mg	-335.7529506557	5418.0	5418.0	5418.0	20.0	34.0	92.4
Al	-410.6091730636	4546.0	4546.0	4546.0	17.0	34.0	87.0
Si	-486.1223669811	5827.0	5827.0	5827.0	20.0	34.0	94.6
P	-579.1977299835	7431.0	7431.0	7431.0	18.0	34.0	124.3
S	-676.0643707204	4978.0	4978.0	4978.0	1.0	34.0	94.3
Cl	-778.6645938207	4293.0	4293.0	4293.0	18.0	34.0	72.9
Ar	-887.9167141720	4527.0	4527.0	4527.0	19.0	34.0	78.1

Table 1169: trust region repeats

42.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-0.6206538722	260.0	130.0	130.0	nan	34.0	11.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.7314174406	34281.0	0.0	0.0	nan	34.0	301.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-0.9305025472	80014.0	12012.0	12012.0	12.0	34.0	3003.2
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1170: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-2.7447047162	282.0	138.0	138.0	nan	34.0	16.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.4555283019	34025.0	0.0	0.0	nan	34.0	293.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-4.3572523612	70504.5	2502.5	2502.5	2.5	34.0	905.2
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1171: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-3.9584582793	613.0	330.0	330.0	nan	34.0	15.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.7725253445	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-12.2932169923	70132.0	2130.0	2130.0	2.4	34.0	1118.0
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-12.2420994958	1951.0	1951.0	1951.0	1.0	34.0	119.5

Table 1172: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-17.0756408938	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	307.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-24.0209511357	70337.7	2335.7	2335.7	2.3	34.0	1169.2
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-23.9270638709	3669.0	3669.0	3669.0	8.0	34.0	128.5

Table 1173: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-29.1687489257	34273.0	0.0	0.0	nan	34.0	331.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-40.5189941285	69472.2	1470.2	1470.2	1.5	34.0	1015.6
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-41.3354406262	3118.0	3118.0	3118.0	8.0	34.0	125.0

Table 1174: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-42.0229444527	336.0	163.0	163.0	nan	34.0	11.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-43.9255097686	34251.0	0.0	0.0	nan	34.0	315.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-63.7761591885	74152.4	6150.4	6150.4	7.8	34.0	1926.5
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-62.9991542261	2875.0	2875.0	2875.0	1.0	34.0	109.5

Table 1175: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-58.1450486391	312.0	158.0	158.0	nan	34.0	18.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-63.6684657883	34069.0	0.0	0.0	nan	34.0	331.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-90.7124255494	71231.8	3229.8	3229.8	4.0	34.0	1142.4
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-92.6279437026	7658.0	7658.0	7658.0	16.0	34.0	153.5

Table 1176: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-121.2362770606	20142.0	20142.0	20142.0	1.0	34.0	2891.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-86.9030986368	34331.0	0.0	0.0	nan	34.0	338.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-125.0315373073	71189.7	3187.7	3187.7	4.3	34.0	1388.1
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-126.5848749840	6612.0	6612.0	6612.0	1.0	34.0	153.0

Table 1177: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-155.6475934468	18449.0	18449.0	18449.0	5.0	34.0	3314.3
cch second order	-105.8421759296	332.0	170.0	170.0	nan	34.0	17.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-114.2783167455	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	354.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-161.7761437133	73257.5	5255.5	5255.5	8.5	34.0	1747.1
trust region	-164.3386326357	188.0	188.0	188.0	nan	34.0	31.9
trust region repeats	-167.7072801286	4996.0	4996.0	4996.0	11.0	34.0	185.2

Table 1178: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-208.4251807289	18468.3	18468.3	18468.3	1.7	34.0	3118.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-138.8012603510	34183.0	0.0	0.0	nan	34.0	352.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-217.0905551510	70647.7	2645.7	2645.7	3.7	34.0	1345.4
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-215.1958492933	5924.0	5924.0	5924.0	14.0	34.0	124.7

Table 1179: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-270.4906320020	18592.3	18592.3	18592.3	1.7	34.0	2934.1
cch second order	-171.3743148243	452.0	228.0	228.0	nan	34.0	12.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-173.3697311119	34193.0	0.0	0.0	nan	34.0	327.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-268.6174781723	69957.5	1955.5	1955.5	3.5	34.0	815.4
trust region	-265.0588137758	214.0	214.0	214.0	nan	34.0	69.3
trust region repeats	-274.9592263310	6993.0	6993.0	6993.0	18.0	34.0	113.8

Table 1180: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-333.4266682941	16464.2	16464.2	16464.2	1.0	34.0	2432.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-219.1599033633	34201.0	0.0	0.0	nan	34.0	351.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-328.8211383506	91267.0	23265.0	23265.0	31.0	34.0	1900.5
trust region	-330.6114829221	281.0	281.0	281.0	nan	34.0	77.3
trust region repeats	-335.7529506557	5418.0	5418.0	5418.0	20.0	34.0	92.4

Table 1181: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-399.5221698954	15508.6	15508.6	15508.6	1.2	34.0	2668.9
cch second order	-251.2978609421	799.0	430.0	430.0	nan	34.0	26.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-263.9689166995	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	329.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-399.2119888116	70567.5	2565.5	2565.5	4.5	34.0	1332.9
trust region	-389.9153187152	543.0	543.0	543.0	nan	34.0	172.7
trust region repeats	-410.6091730636	4546.0	4546.0	4546.0	17.0	34.0	87.0

Table 1182: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-476.8273279383	15392.2	15392.2	15392.2	1.2	34.0	2590.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-304.4377627969	34199.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-485.4598450019	70473.3	2471.3	2471.3	6.0	34.0	1161.6
trust region	-476.1852059512	141.0	141.0	141.0	nan	34.0	40.9
trust region repeats	-486.1223669811	5827.0	5827.0	5827.0	20.0	34.0	94.6

Table 1183: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-566.1680056239	15038.8	15038.8	15038.8	1.0	34.0	2452.6
cch second order	-353.7976790953	438.0	214.0	214.0	nan	34.0	12.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-348.1935846025	34177.0	0.0	0.0	nan	34.0	308.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-554.0984352760	72450.0	4448.0	4448.0	13.0	34.0	2425.3
trust region	-568.3544884493	139.0	139.0	139.0	nan	34.0	25.3
trust region repeats	-579.1977299835	7431.0	7431.0	7431.0	18.0	34.0	124.3

Table 1184: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-663.7654554305	13254.4	13254.4	13254.4	1.0	34.0	2031.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-451.6992695037	34229.0	0.0	0.0	nan	34.0	322.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-655.2219640778	72160.0	4158.0	4158.0	13.5	34.0	1454.4
trust region	-660.4592022079	126.0	126.0	126.0	nan	34.0	22.1
trust region repeats	-676.0643707204	4978.0	4978.0	4978.0	1.0	34.0	94.3

Table 1185: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-752.4153778088	14190.0	14190.0	14190.0	1.0	34.0	2255.0
cch second order	-463.2567411253	422.0	221.0	221.0	nan	34.0	12.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-523.2252314839	34153.0	0.0	0.0	nan	34.0	275.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-752.7196040633	72101.0	4099.0	4099.0	14.0	34.0	1214.4
trust region	-741.3180554780	137.0	137.0	137.0	nan	34.0	25.4
trust region repeats	-778.6645938207	4293.0	4293.0	4293.0	18.0	34.0	72.9

Table 1186: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-876.9595020292	13025.8	13025.8	13025.8	1.0	34.0	2068.7
cch second order	-539.7699363377	283.0	145.0	145.0	nan	34.0	11.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-572.5164217154	34239.0	0.0	0.0	nan	34.0	326.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-812.6634301209	313.0	313.0	313.0	nan	34.0	58.3
trust region repeats	-887.9167141720	4527.0	4527.0	4527.0	19.0	34.0	78.1

Table 1187: Ar

42.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	dual anneal	-0.9305025472
He	dual anneal	-4.3572523612
Li	dual anneal	-12.2932169923
Be	dual anneal	-24.0209511357
B	trust region repeats	-41.3354406262
C	dual anneal	-63.7761591885
N	trust region repeats	-92.6279437026
O	trust region repeats	-126.5848749840
F	trust region repeats	-167.7072801286
Ne	dual anneal	-217.0905551510
Na	trust region repeats	-274.9592263310
Mg	trust region repeats	-335.7529506557
Al	trust region repeats	-410.6091730636
Si	trust region repeats	-486.1223669811
P	trust region repeats	-579.1977299835
S	trust region repeats	-676.0643707204
Cl	trust region repeats	-778.6645938207
Ar	trust region repeats	-887.9167141720

Table 1188: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	411.7	211.5	211.5	nan	-181.1664107467	15.1
trust region repeats	4489.8	4489.8	4489.8	10.7	-323.2441770035	116.0
basin hopping	16229.6	16229.6	16229.6	1.5	-438.6258354780	2614.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	34203.3	0.0	0.0	nan	-186.8528518597	319.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	231.3	231.3	231.3	nan	-489.8782922507	58.1
dual anneal	72936.2	4934.2	4934.2	7.9	-246.1563642252	1474.4

Table 1189: Average (all systems)

43 34s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

43.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1190: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-14.1879275786	19306.0	19306.0	19306.0	8.8	34.0	2181.5
He	-47.7946623725	18106.4	18106.4	18106.4	4.2	34.0	2098.0
Li	-98.3675947426	17725.0	17725.0	17725.0	5.0	34.0	2022.7
Be	-163.1486387008	18124.5	18124.5	18124.5	5.5	34.0	2128.1
B	-244.0335472766	17542.6	17542.6	17542.6	5.0	34.0	2257.6
C	-340.5786550513	15649.6	15649.6	15649.6	5.2	34.0	1689.9
N	-449.5300662815	16987.4	16987.4	16987.4	2.8	34.0	2184.7
O	-581.1281095836	16412.8	16412.8	16412.8	5.2	34.0	2136.5
F	-734.3654305302	13639.4	13639.4	13639.4	3.8	34.0	1860.2
Ne	-900.5512867102	15986.8	15986.8	15986.8	5.8	34.0	2166.7
Na	-1090.3296025854	14788.8	14788.8	14788.8	4.0	34.0	2100.1
Mg	-1284.9986464668	15256.4	15256.4	15256.4	5.0	34.0	1830.6
Al	-1503.2500755521	15230.6	15230.6	15230.6	5.0	34.0	2059.3
Si	-1751.1555885485	13103.4	13103.4	13103.4	3.6	34.0	1881.3
P	-2000.2176576749	13499.2	13499.2	13499.2	4.6	34.0	1929.0
S	-2258.1441470315	13113.4	13113.4	13113.4	4.2	34.0	1714.9
Cl	-2558.2514429729	12910.2	12910.2	12910.2	5.0	34.0	1795.2
Ar	-2856.5939881357	12818.0	12818.0	12818.0	4.2	34.0	1738.5

Table 1191: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6559922405	298.0	147.0	147.0	nan	34.0	11.0
He	-3.3485619883	293.0	146.0	146.0	nan	34.0	18.2
Li	-11.0405214989	580.0	290.0	290.0	nan	34.0	15.4
Be	-19.2715429940	305.0	157.0	157.0	nan	34.0	12.1
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-44.3609574656	505.0	254.0	254.0	nan	34.0	15.1
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	-86.4711651402	611.0	345.0	345.0	nan	34.0	17.4
F	-112.8397215772	446.0	225.0	225.0	nan	34.0	22.8
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-200.5805507890	269.0	135.0	135.0	nan	34.0	17.7
Mg	-1150.4796462349	407.0	187.0	187.0	nan	34.0	12.4
Al	-1285.8473828098	813.0	422.0	422.0	nan	34.0	32.2
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-1577.0321186314	299.0	152.0	152.0	nan	34.0	18.5
S	-1787.2505754513	325.0	157.0	157.0	nan	34.0	12.0
Cl	-514.7618601539	280.0	142.0	142.0	nan	34.0	18.2
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1192: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1193: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.4627970241	34091.0	0.0	0.0	nan	34.0	397.0
He	-7.8618754227	34145.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.8
Li	-15.6351209390	34055.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.6
Be	-29.0045870793	34109.0	0.0	0.0	nan	34.0	397.9
B	-46.4200775527	34197.0	0.0	0.0	nan	34.0	348.8
C	-73.9979247554	34179.0	0.0	0.0	nan	34.0	374.9
N	-101.6889184595	34053.0	0.0	0.0	nan	34.0	365.9
O	-109.3850373361	34111.0	0.0	0.0	nan	34.0	383.7
F	-166.4065362026	34133.0	0.0	0.0	nan	34.0	396.4
Ne	-200.8076627154	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	408.6
Na	-245.5904143971	34061.0	0.0	0.0	nan	34.0	348.8
Mg	-323.8086343386	34157.0	0.0	0.0	nan	34.0	372.3
Al	-378.6624255774	34033.0	0.0	0.0	nan	34.0	332.2
Si	-444.8056632327	34243.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.9
P	-475.8194583718	34031.0	0.0	0.0	nan	34.0	393.2
S	-590.1830569796	34285.0	0.0	0.0	nan	34.0	350.5
Cl	-624.1655035363	34017.0	0.0	0.0	nan	34.0	338.1
Ar	-735.6472667651	34053.0	0.0	0.0	nan	34.0	422.1

Table 1194: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1195: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-43.4455585830	76386.0	8384.0	8384.0	11.0	34.0	2387.2
Li	-46.6760881162	71392.0	3390.0	3390.0	10.0	34.0	1308.8
Be	-151.7894726197	75208.0	7206.0	7206.0	14.0	34.0	2108.8
B	-229.7404097121	78699.0	10697.0	10697.0	24.0	34.0	2798.1
C	-297.7456377906	69570.0	1568.0	1568.0	2.0	34.0	985.5
N	-397.8802319438	73802.0	5800.0	5800.0	18.0	34.0	2573.2
O	-499.7828460139	73241.0	5239.0	5239.0	11.0	34.0	1416.2
F	-622.7718615427	71646.0	3644.0	3644.0	9.0	34.0	1715.2
Ne	-847.0877589235	72516.0	4514.0	4514.0	8.0	34.0	2676.9
Na	-904.8225079620	69830.0	1828.0	1828.0	9.0	34.0	771.0
Mg	-1185.3639981301	74058.0	6056.0	6056.0	23.5	34.0	2167.1
Al	-1257.5498829500	69003.0	1001.0	1001.0	1.0	34.0	1197.5
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-1647.9066233348	69211.0	1209.0	1209.0	3.0	34.0	1360.2
S	-2018.3947481954	75492.0	7490.0	7490.0	40.0	34.0	3546.5
Cl	-2311.4631189464	70789.7	2787.7	2787.7	11.7	34.0	1994.3
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1196: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	-4.9725006510	52.0	52.0	52.0	nan	34.0	20.2
Li	-82.2772651017	441.0	441.0	441.0	nan	34.0	96.4
Be	-140.9454630973	151.0	151.0	151.0	nan	34.0	35.3
B	-210.8727228025	91.0	91.0	91.0	nan	34.0	48.3
C	-292.7377565081	172.0	172.0	172.0	nan	34.0	38.7
N	-441.6418821917	181.0	181.0	181.0	nan	34.0	54.5
O	-565.4638916828	362.0	362.0	362.0	nan	34.0	120.2
F	-702.2032971220	180.0	180.0	180.0	nan	34.0	96.9
Ne	-864.5563017371	279.0	279.0	279.0	nan	34.0	78.3
Na	-1029.4970048105	142.0	142.0	142.0	nan	34.0	36.3
Mg	-720.4001522962	56.0	56.0	56.0	nan	34.0	16.5
Al	-1241.6922955931	77.0	77.0	77.0	nan	34.0	27.5
Si	-1461.3678962379	153.0	153.0	153.0	nan	34.0	68.0
P	-1811.6275035117	62.0	62.0	62.0	nan	34.0	28.1
S	-2073.2475084238	88.0	88.0	88.0	nan	34.0	22.2
Cl	-2361.9037426842	112.0	112.0	112.0	nan	34.0	48.7
Ar	-2294.2406389371	56.0	56.0	56.0	nan	34.0	15.0

Table 1197: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	-46.2395177807	3462.0	3462.0	3462.0	1.0	34.0	140.1
Li	-97.1254067242	3221.0	3221.0	3221.0	1.0	34.0	64.9
Be	-163.0815766587	2309.0	2309.0	2309.0	1.0	34.0	86.6
B	-243.6727818368	3528.0	3528.0	3528.0	18.0	34.0	54.0
C	-339.7083796553	2427.0	2427.0	2427.0	17.0	34.0	46.9
N	-450.6545932314	2703.0	2703.0	2703.0	19.0	34.0	47.4
O	-574.4701083652	3435.0	3435.0	3435.0	19.0	34.0	50.8
F	-706.5180781239	2913.0	2913.0	2913.0	16.0	34.0	47.1
Ne	-878.9026519309	2182.0	2182.0	2182.0	19.0	34.0	39.8
Na	-1089.9443690045	2957.0	2957.0	2957.0	20.0	34.0	45.4
Mg	-1291.1303639680	2972.0	2972.0	2972.0	18.0	34.0	42.3
Al	-1513.5494018889	3028.0	3028.0	3028.0	20.0	34.0	52.1
Si	-1759.1446818213	2720.0	2720.0	2720.0	19.0	34.0	44.9
P	-2016.0441658877	2677.0	2677.0	2677.0	19.0	34.0	40.3
S	-2280.5808439553	2874.0	2874.0	2874.0	20.0	34.0	43.9
Cl	-2564.3126703804	2264.0	2264.0	2264.0	16.0	34.0	36.0
Ar	-2866.6219382751	2593.0	2593.0	2593.0	20.0	34.0	35.3

Table 1198: trust region repeats

43.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.1879275786	19306.0	19306.0	19306.0	8.8	34.0	2181.5
cch second order	-0.6559922405	298.0	147.0	147.0	nan	34.0	11.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1.4627970241	34091.0	0.0	0.0	nan	34.0	397.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1199: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-47.7946623725	18106.4	18106.4	18106.4	4.2	34.0	2098.0
cch second order	-3.3485619883	293.0	146.0	146.0	nan	34.0	18.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.8618754227	34145.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-43.4455585830	76386.0	8384.0	8384.0	11.0	34.0	2387.2
trust region	-4.9725006510	52.0	52.0	52.0	nan	34.0	20.2
trust region repeats	-46.2395177807	3462.0	3462.0	3462.0	1.0	34.0	140.1

Table 1200: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-98.3675947426	17725.0	17725.0	17725.0	5.0	34.0	2022.7
cch second order	-11.0405214989	580.0	290.0	290.0	nan	34.0	15.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.6351209390	34055.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-46.6760881162	71392.0	3390.0	3390.0	10.0	34.0	1308.8
trust region	-82.2772651017	441.0	441.0	441.0	nan	34.0	96.4
trust region repeats	-97.1254067242	3221.0	3221.0	3221.0	1.0	34.0	64.9

Table 1201: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-163.1486387008	18124.5	18124.5	18124.5	5.5	34.0	2128.1
cch second order	-19.2715429940	305.0	157.0	157.0	nan	34.0	12.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-29.0045870793	34109.0	0.0	0.0	nan	34.0	397.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-151.7894726197	75208.0	7206.0	7206.0	14.0	34.0	2108.8
trust region	-140.9454630973	151.0	151.0	151.0	nan	34.0	35.3
trust region repeats	-163.0815766587	2309.0	2309.0	2309.0	1.0	34.0	86.6

Table 1202: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-244.0335472766	17542.6	17542.6	17542.6	5.0	34.0	2257.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-46.4200775527	34197.0	0.0	0.0	nan	34.0	348.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-229.7404097121	78699.0	10697.0	10697.0	24.0	34.0	2798.1
trust region	-210.8727228025	91.0	91.0	91.0	nan	34.0	48.3
trust region repeats	-243.6727818368	3528.0	3528.0	3528.0	18.0	34.0	54.0

Table 1203: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-340.5786550513	15649.6	15649.6	15649.6	5.2	34.0	1689.9
cch second order	-44.3609574656	505.0	254.0	254.0	nan	34.0	15.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-73.9979247554	34179.0	0.0	0.0	nan	34.0	374.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-297.7456377906	69570.0	1568.0	1568.0	2.0	34.0	985.5
trust region	-292.7377565081	172.0	172.0	172.0	nan	34.0	38.7
trust region repeats	-339.7083796553	2427.0	2427.0	2427.0	17.0	34.0	46.9

Table 1204: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-449.5300662815	16987.4	16987.4	16987.4	2.8	34.0	2184.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-101.6889184595	34053.0	0.0	0.0	nan	34.0	365.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-397.8802319438	73802.0	5800.0	5800.0	18.0	34.0	2573.2
trust region	-441.6418821917	181.0	181.0	181.0	nan	34.0	54.5
trust region repeats	-450.6545932314	2703.0	2703.0	2703.0	19.0	34.0	47.4

Table 1205: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-581.1281095836	16412.8	16412.8	16412.8	5.2	34.0	2136.5
cch second order	-86.4711651402	611.0	345.0	345.0	nan	34.0	17.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-109.3850373361	34111.0	0.0	0.0	nan	34.0	383.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-499.7828460139	73241.0	5239.0	5239.0	11.0	34.0	1416.2
trust region	-565.4638916828	362.0	362.0	362.0	nan	34.0	120.2
trust region repeats	-574.4701083652	3435.0	3435.0	3435.0	19.0	34.0	50.8

Table 1206: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-734.3654305302	13639.4	13639.4	13639.4	3.8	34.0	1860.2
cch second order	-112.8397215772	446.0	225.0	225.0	nan	34.0	22.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-166.4065362026	34133.0	0.0	0.0	nan	34.0	396.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-622.7718615427	71646.0	3644.0	3644.0	9.0	34.0	1715.2
trust region	-702.2032971220	180.0	180.0	180.0	nan	34.0	96.9
trust region repeats	-706.5180781239	2913.0	2913.0	2913.0	16.0	34.0	47.1

Table 1207: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-900.5512867102	15986.8	15986.8	15986.8	5.8	34.0	2166.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-200.8076627154	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	408.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-847.0877589235	72516.0	4514.0	4514.0	8.0	34.0	2676.9
trust region	-864.5563017371	279.0	279.0	279.0	nan	34.0	78.3
trust region repeats	-878.9026519309	2182.0	2182.0	2182.0	19.0	34.0	39.8

Table 1208: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.3296025854	14788.8	14788.8	14788.8	4.0	34.0	2100.1
cch second order	-200.5805507890	269.0	135.0	135.0	nan	34.0	17.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-245.5904143971	34061.0	0.0	0.0	nan	34.0	348.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-904.8225079620	69830.0	1828.0	1828.0	9.0	34.0	771.0
trust region	-1029.4970048105	142.0	142.0	142.0	nan	34.0	36.3
trust region repeats	-1089.9443690045	2957.0	2957.0	2957.0	20.0	34.0	45.4

Table 1209: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1284.9986464668	15256.4	15256.4	15256.4	5.0	34.0	1830.6
cch second order	-1150.4796462349	407.0	187.0	187.0	nan	34.0	12.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-323.8086343386	34157.0	0.0	0.0	nan	34.0	372.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-1185.3639981301	74058.0	6056.0	6056.0	23.5	34.0	2167.1
trust region	-720.4001522962	56.0	56.0	56.0	nan	34.0	16.5
trust region repeats	-1291.1303639680	2972.0	2972.0	2972.0	18.0	34.0	42.3

Table 1210: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1503.2500755521	15230.6	15230.6	15230.6	5.0	34.0	2059.3
cch second order	-1285.8473828098	813.0	422.0	422.0	nan	34.0	32.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-378.6624255774	34033.0	0.0	0.0	nan	34.0	332.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-1257.5498829500	69003.0	1001.0	1001.0	1.0	34.0	1197.5
trust region	-1241.6922955931	77.0	77.0	77.0	nan	34.0	27.5
trust region repeats	-1513.5494018889	3028.0	3028.0	3028.0	20.0	34.0	52.1

Table 1211: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1751.1555885485	13103.4	13103.4	13103.4	3.6	34.0	1881.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-444.8056632327	34243.0	0.0	0.0	nan	34.0	391.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-1461.3678962379	153.0	153.0	153.0	nan	34.0	68.0
trust region repeats	-1759.1446818213	2720.0	2720.0	2720.0	19.0	34.0	44.9

Table 1212: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2000.2176576749	13499.2	13499.2	13499.2	4.6	34.0	1929.0
cch second order	-1577.0321186314	299.0	152.0	152.0	nan	34.0	18.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-475.8194583718	34031.0	0.0	0.0	nan	34.0	393.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-1647.9066233348	69211.0	1209.0	1209.0	3.0	34.0	1360.2
trust region	-1811.6275035117	62.0	62.0	62.0	nan	34.0	28.1
trust region repeats	-2016.0441658877	2677.0	2677.0	2677.0	19.0	34.0	40.3

Table 1213: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2258.1441470315	13113.4	13113.4	13113.4	4.2	34.0	1714.9
cch second order	-1787.2505754513	325.0	157.0	157.0	nan	34.0	12.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-590.1830569796	34285.0	0.0	0.0	nan	34.0	350.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-2018.3947481954	75492.0	7490.0	7490.0	40.0	34.0	3546.5
trust region	-2073.2475084238	88.0	88.0	88.0	nan	34.0	22.2
trust region repeats	-2280.5808439553	2874.0	2874.0	2874.0	20.0	34.0	43.9

Table 1214: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2558.2514429729	12910.2	12910.2	12910.2	5.0	34.0	1795.2
cch second order	-514.7618601539	280.0	142.0	142.0	nan	34.0	18.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-624.1655035363	34017.0	0.0	0.0	nan	34.0	338.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-2311.4631189464	70789.7	2787.7	2787.7	11.7	34.0	1994.3
trust region	-2361.9037426842	112.0	112.0	112.0	nan	34.0	48.7
trust region repeats	-2564.3126703804	2264.0	2264.0	2264.0	16.0	34.0	36.0

Table 1215: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2856.5939881357	12818.0	12818.0	12818.0	4.2	34.0	1738.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-735.6472667651	34053.0	0.0	0.0	nan	34.0	422.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-2294.2406389371	56.0	56.0	56.0	nan	34.0	15.0
trust region repeats	-2866.6219382751	2593.0	2593.0	2593.0	20.0	34.0	35.3

Table 1216: Ar

43.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-14.1879275786
He	basin hopping	-47.7946623725
Li	basin hopping	-98.3675947426
Be	basin hopping	-163.1486387008
B	basin hopping	-244.0335472766
C	basin hopping	-340.5786550513
N	trust region repeats	-450.6545932314
O	basin hopping	-581.1281095836
F	basin hopping	-734.3654305302
Ne	basin hopping	-900.5512867102
Na	basin hopping	-1090.3296025854
Mg	trust region repeats	-1291.1303639680
Al	trust region repeats	-1513.5494018889
Si	trust region repeats	-1759.1446818213
P	trust region repeats	-2016.0441658877
S	trust region repeats	-2280.5808439553
Cl	trust region repeats	-2564.3126703804
Ar	trust region repeats	-2866.6219382751

Table 1217: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	417.8	212.2	212.2	nan	-522.6108151519	17.2
trust region repeats	2681.4	2681.4	2681.4	14.7	-1110.6883252640	54.0
basin hopping	15566.7	15566.7	15566.7	4.8	-1048.7015037664	1987.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	34117.7	0.0	0.0	nan	-253.9640533714	378.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	156.2	156.2	156.2	nan	-958.8028131405	50.1
dual anneal	72722.9	4720.9	4720.9	13.0	-830.8280496510	1933.8

Table 1218: Average (all systems)

44   34s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

44.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1219: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618912	16103.0	16103.0	16103.0	15.8	34.0	2386.4
He	-3.0901195926	14911.8	14911.8	14911.8	13.8	34.0	2594.1
Li	-7.9887993504	14784.0	14784.0	14784.0	11.3	34.0	3294.3
Be	-15.7299406485	13574.0	13574.0	13574.0	9.3	34.0	2812.6
B	-26.6444983396	14545.5	14545.5	14545.5	9.0	34.0	2677.0
C	-41.0135882920	12985.0	12985.0	12985.0	8.0	34.0	2948.5
N	-59.0840356647	12983.7	12983.7	12983.7	9.7	34.0	2453.3
O	-81.0773261046	12407.3	12407.3	12407.3	8.3	34.0	2469.8
F	-107.1953005560	11808.8	11808.8	11808.8	8.8	34.0	2286.7
Ne	-137.6240344416	11709.3	11709.3	11709.3	8.3	34.0	2716.5
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-212.0952087796	16148.0	16148.0	16148.0	10.0	34.0	3385.6
Al	-256.4526431858	15463.0	15463.0	15463.0	10.3	34.0	3082.2
Si	-305.7536537549	13688.0	13688.0	13688.0	8.2	34.0	2784.4
P	-360.1358809191	12772.8	12772.8	12772.8	9.5	34.0	2753.4
S	-419.7306843905	10712.3	10712.3	10712.3	7.3	34.0	2840.2
Cl	-484.6638170454	8780.0	8780.0	8780.0	5.0	34.0	2706.3
Ar	-555.0559898319	9674.5	9674.5	9674.5	7.0	34.0	2354.2

Table 1220: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618940	175.0	91.0	91.0	nan	34.0	16.3
He	-3.0901195427	170.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.3
Li	-7.9887993671	245.0	120.0	120.0	nan	34.0	16.9
Be	-15.7299406093	233.0	120.0	120.0	nan	34.0	14.7
B	-26.6444984107	266.0	128.0	128.0	nan	34.0	14.9
C	-41.0135883519	225.0	103.0	103.0	nan	34.0	5.9
N	-59.0840357486	239.0	97.0	97.0	nan	34.0	14.7
O	-81.0773261747	167.0	95.0	95.0	nan	34.0	14.0
F	-107.1953005642	167.0	95.0	95.0	nan	34.0	13.8
Ne	-137.6240345175	190.0	105.0	105.0	nan	34.0	16.1
Na	-172.5366151991	208.0	113.0	113.0	nan	34.0	18.0
Mg	-212.0952087616	199.0	102.0	102.0	nan	34.0	9.8
Al	-256.4526432094	333.0	169.0	169.0	nan	34.0	16.8
Si	-305.7536537810	291.0	154.0	154.0	nan	34.0	16.0
P	-360.1358809564	287.0	149.0	149.0	nan	34.0	16.6
S	-419.7306843789	321.0	165.0	165.0	nan	34.0	18.6
Cl	-484.6638170200	321.0	166.0	166.0	nan	34.0	20.2
Ar	-555.0559898587	350.0	182.0	182.0	nan	34.0	7.1

Table 1221: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1222: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6202730426	34403.0	0.0	0.0	nan	34.0	329.4
He	-3.0779821460	34331.0	0.0	0.0	nan	34.0	359.5
Li	-7.9611002130	34055.0	0.0	0.0	nan	34.0	341.5
Be	-15.6714247480	34111.0	0.0	0.0	nan	34.0	362.8
B	-26.5224740900	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.4
C	-40.9721562384	34059.0	0.0	0.0	nan	34.0	358.5
N	-58.7269404848	34233.0	0.0	0.0	nan	34.0	356.0
O	-80.6999019107	34277.0	0.0	0.0	nan	34.0	330.8
F	-104.9227851001	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	317.0
Ne	-136.5217335587	34131.0	0.0	0.0	nan	34.0	327.8
Na	-171.7892926810	34299.0	0.0	0.0	nan	34.0	290.1
Mg	-211.1910033980	34307.0	0.0	0.0	nan	34.0	328.9
Al	-254.1936535896	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	328.2
Si	-305.1344824308	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	353.2
P	-355.2513799297	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	333.5
S	-414.7894351926	34221.0	0.0	0.0	nan	34.0	313.1
Cl	-483.2709067987	34263.0	0.0	0.0	nan	34.0	325.0
Ar	-548.6354727903	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.2

Table 1223: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618911	34413.0	8.0	8.0	nan	34.0	288.6
He	-3.0901195925	34341.0	8.0	8.0	nan	34.0	293.4
Li	-7.9887993504	34065.0	8.0	8.0	nan	34.0	283.6
Be	-15.7299406484	34121.0	8.0	8.0	nan	34.0	269.8
B	-26.6444983395	34327.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.9
C	-41.0135882918	34069.0	8.0	8.0	nan	34.0	272.4
N	-59.0840356646	34243.0	8.0	8.0	nan	34.0	293.6
O	-81.0773261045	34287.0	8.0	8.0	nan	34.0	269.8
F	-107.1953005557	34132.0	13.0	13.0	nan	34.0	271.9
Ne	-137.6240344415	34141.0	8.0	8.0	nan	34.0	272.1
Na	-172.5366152586	34311.0	10.0	10.0	nan	34.0	271.3
Mg	-212.0952087796	34317.0	8.0	8.0	nan	34.0	311.9
Al	-256.4526431858	34175.0	8.0	8.0	nan	34.0	296.1
Si	-305.7536537549	34325.0	8.0	8.0	nan	34.0	295.4
P	-360.1358809190	34238.0	11.0	11.0	nan	34.0	271.3
S	-419.7306843905	34236.0	13.0	13.0	nan	34.0	272.5
Cl	-484.6638170453	34274.0	9.0	9.0	nan	34.0	273.4
Ar	-555.0559898318	34118.0	9.0	9.0	nan	34.0	253.0

Table 1224: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618911	68011.8	9.8	9.8	1.0	34.0	618.5
He	-3.0901195925	68011.8	9.8	9.8	1.0	34.0	673.9
Li	-7.9887993503	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	634.8
Be	-15.7299406483	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	549.1
B	-26.6444983394	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	457.2
C	-41.0135882915	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	536.8
N	-59.0840356642	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	550.3
O	-81.0773261040	68015.0	13.0	13.0	1.0	34.0	617.7
F	-107.1953005550	68015.8	13.8	13.8	1.0	34.0	577.2
Ne	-137.6240344405	68017.8	15.8	15.8	1.0	34.0	547.1
Na	-172.5366152573	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	501.7
Mg	-212.0952087779	68015.6	13.6	13.6	1.0	34.0	547.0
Al	-256.4526431836	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	622.6
Si	-305.7536537521	68016.2	14.2	14.2	1.0	34.0	594.8
P	-360.1358809157	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	576.8
S	-419.7306843864	68024.0	22.0	22.0	1.0	34.0	556.9
Cl	-484.6638170404	68022.8	20.8	20.8	1.0	34.0	587.7
Ar	-555.0559898260	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	581.1

Table 1225: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618912	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.0
He	-3.0901195925	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.4
Li	-7.9887993504	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
Be	-15.7299406484	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	11.8
B	-26.6444983395	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	14.2
C	-41.0135882918	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.0
N	-59.0840356646	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	12.6
O	-81.0773261045	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.1
F	-107.1953005557	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.3
Ne	-137.6240344415	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	5.7
Na	-172.5366152586	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	9.8
Mg	-212.0952087796	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
Al	-256.4526431858	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
Si	-305.7536537549	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
P	-360.1358809190	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	13.2
S	-419.7306843905	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	10.5
Cl	-484.6638170453	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	10.4
Ar	-555.0559898319	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.2

Table 1226: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618911	341.0	341.0	341.0	1.0	34.0	10.4
He	-3.0901195925	266.0	266.0	266.0	1.0	34.0	10.8
Li	-7.9887993504	281.0	281.0	281.0	1.0	34.0	9.7
Be	-15.7299406484	292.0	292.0	292.0	1.0	34.0	9.9
B	-26.6444983395	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	10.2
C	-41.0135882918	294.0	294.0	294.0	1.0	34.0	9.5
N	-59.0840356646	292.0	292.0	292.0	1.0	34.0	10.2
O	-81.0773261045	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	9.8
F	-107.1953005557	296.0	296.0	296.0	2.0	34.0	9.6
Ne	-137.6240344415	298.0	298.0	298.0	1.0	34.0	9.3
Na	-172.5366152586	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.2
Mg	-212.0952087796	299.0	299.0	299.0	1.0	34.0	9.4
Al	-256.4526431858	301.0	301.0	301.0	1.0	34.0	9.5
Si	-305.7536537549	294.0	294.0	294.0	1.0	34.0	9.4
P	-360.1358809190	299.0	299.0	299.0	2.0	34.0	10.1
S	-419.7306843905	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	9.7
Cl	-484.6638170453	300.0	300.0	300.0	2.0	34.0	10.3
Ar	-555.0559898318	300.0	300.0	300.0	1.0	34.0	9.4

Table 1227: trust region repeats

44.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213618912	16103.0	16103.0	16103.0	15.8	34.0	2386.4
cch second order	-0.6213618940	175.0	91.0	91.0	nan	34.0	16.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6202730426	34403.0	0.0	0.0	nan	34.0	329.4
direct with trim	-0.6213618911	34413.0	8.0	8.0	nan	34.0	288.6
dual anneal	-0.6213618911	68011.8	9.8	9.8	1.0	34.0	618.5
trust region	-0.6213618912	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.0
trust region repeats	-0.6213618911	341.0	341.0	341.0	1.0	34.0	10.4

Table 1228: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901195926	14911.8	14911.8	14911.8	13.8	34.0	2594.1
cch second order	-3.0901195427	170.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.0779821460	34331.0	0.0	0.0	nan	34.0	359.5
direct with trim	-3.0901195925	34341.0	8.0	8.0	nan	34.0	293.4
dual anneal	-3.0901195925	68011.8	9.8	9.8	1.0	34.0	673.9
trust region	-3.0901195925	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.4
trust region repeats	-3.0901195925	266.0	266.0	266.0	1.0	34.0	10.8

Table 1229: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887993504	14784.0	14784.0	14784.0	11.3	34.0	3294.3
cch second order	-7.9887993671	245.0	120.0	120.0	nan	34.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.9611002130	34055.0	0.0	0.0	nan	34.0	341.5
direct with trim	-7.9887993504	34065.0	8.0	8.0	nan	34.0	283.6
dual anneal	-7.9887993503	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	634.8
trust region	-7.9887993504	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-7.9887993504	281.0	281.0	281.0	1.0	34.0	9.7

Table 1230: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299406485	13574.0	13574.0	13574.0	9.3	34.0	2812.6
cch second order	-15.7299406093	233.0	120.0	120.0	nan	34.0	14.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.6714247480	34111.0	0.0	0.0	nan	34.0	362.8
direct with trim	-15.7299406484	34121.0	8.0	8.0	nan	34.0	269.8
dual anneal	-15.7299406483	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	549.1
trust region	-15.7299406484	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	11.8
trust region repeats	-15.7299406484	292.0	292.0	292.0	1.0	34.0	9.9

Table 1231: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6444983396	14545.5	14545.5	14545.5	9.0	34.0	2677.0
cch second order	-26.6444984107	266.0	128.0	128.0	nan	34.0	14.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.5224740900	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.4
direct with trim	-26.6444983395	34327.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.9
dual anneal	-26.6444983394	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	457.2
trust region	-26.6444983395	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	14.2
trust region repeats	-26.6444983395	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	10.2

Table 1232: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0135882920	12985.0	12985.0	12985.0	8.0	34.0	2948.5
cch second order	-41.0135883519	225.0	103.0	103.0	nan	34.0	5.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-40.9721562384	34059.0	0.0	0.0	nan	34.0	358.5
direct with trim	-41.0135882918	34069.0	8.0	8.0	nan	34.0	272.4
dual anneal	-41.0135882915	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	536.8
trust region	-41.0135882918	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.0
trust region repeats	-41.0135882918	294.0	294.0	294.0	1.0	34.0	9.5

Table 1233: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0840356647	12983.7	12983.7	12983.7	9.7	34.0	2453.3
cch second order	-59.0840357486	239.0	97.0	97.0	nan	34.0	14.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-58.7269404848	34233.0	0.0	0.0	nan	34.0	356.0
direct with trim	-59.0840356646	34243.0	8.0	8.0	nan	34.0	293.6
dual anneal	-59.0840356642	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	550.3
trust region	-59.0840356646	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	12.6
trust region repeats	-59.0840356646	292.0	292.0	292.0	1.0	34.0	10.2

Table 1234: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0773261046	12407.3	12407.3	12407.3	8.3	34.0	2469.8
cch second order	-81.0773261747	167.0	95.0	95.0	nan	34.0	14.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-80.6999019107	34277.0	0.0	0.0	nan	34.0	330.8
direct with trim	-81.0773261045	34287.0	8.0	8.0	nan	34.0	269.8
dual anneal	-81.0773261040	68015.0	13.0	13.0	1.0	34.0	617.7
trust region	-81.0773261045	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.1
trust region repeats	-81.0773261045	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	9.8

Table 1235: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1953005560	11808.8	11808.8	11808.8	8.8	34.0	2286.7
cch second order	-107.1953005642	167.0	95.0	95.0	nan	34.0	13.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-104.9227851001	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	317.0
direct with trim	-107.1953005557	34132.0	13.0	13.0	nan	34.0	271.9
dual anneal	-107.1953005550	68015.8	13.8	13.8	1.0	34.0	577.2
trust region	-107.1953005557	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-107.1953005557	296.0	296.0	296.0	2.0	34.0	9.6

Table 1236: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6240344416	11709.3	11709.3	11709.3	8.3	34.0	2716.5
cch second order	-137.6240345175	190.0	105.0	105.0	nan	34.0	16.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-136.5217335587	34131.0	0.0	0.0	nan	34.0	327.8
direct with trim	-137.6240344415	34141.0	8.0	8.0	nan	34.0	272.1
dual anneal	-137.6240344405	68017.8	15.8	15.8	1.0	34.0	547.1
trust region	-137.6240344415	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	5.7
trust region repeats	-137.6240344415	298.0	298.0	298.0	1.0	34.0	9.3

Table 1237: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-172.5366151991	208.0	113.0	113.0	nan	34.0	18.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-171.7892926810	34299.0	0.0	0.0	nan	34.0	290.1
direct with trim	-172.5366152586	34311.0	10.0	10.0	nan	34.0	271.3
dual anneal	-172.5366152573	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	501.7
trust region	-172.5366152586	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	9.8
trust region repeats	-172.5366152586	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.2

Table 1238: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0952087796	16148.0	16148.0	16148.0	10.0	34.0	3385.6
cch second order	-212.0952087616	199.0	102.0	102.0	nan	34.0	9.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-211.1910033980	34307.0	0.0	0.0	nan	34.0	328.9
direct with trim	-212.0952087796	34317.0	8.0	8.0	nan	34.0	311.9
dual anneal	-212.0952087779	68015.6	13.6	13.6	1.0	34.0	547.0
trust region	-212.0952087796	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-212.0952087796	299.0	299.0	299.0	1.0	34.0	9.4

Table 1239: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4526431858	15463.0	15463.0	15463.0	10.3	34.0	3082.2
cch second order	-256.4526432094	333.0	169.0	169.0	nan	34.0	16.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-254.1936535896	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	328.2
direct with trim	-256.4526431858	34175.0	8.0	8.0	nan	34.0	296.1
dual anneal	-256.4526431836	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	622.6
trust region	-256.4526431858	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-256.4526431858	301.0	301.0	301.0	1.0	34.0	9.5

Table 1240: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7536537549	13688.0	13688.0	13688.0	8.2	34.0	2784.4
cch second order	-305.7536537810	291.0	154.0	154.0	nan	34.0	16.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-305.1344824308	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	353.2
direct with trim	-305.7536537549	34325.0	8.0	8.0	nan	34.0	295.4
dual anneal	-305.7536537521	68016.2	14.2	14.2	1.0	34.0	594.8
trust region	-305.7536537549	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-305.7536537549	294.0	294.0	294.0	1.0	34.0	9.4

Table 1241: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1358809191	12772.8	12772.8	12772.8	9.5	34.0	2753.4
cch second order	-360.1358809564	287.0	149.0	149.0	nan	34.0	16.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-355.2513799297	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	333.5
direct with trim	-360.1358809190	34238.0	11.0	11.0	nan	34.0	271.3
dual anneal	-360.1358809157	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	576.8
trust region	-360.1358809190	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	13.2
trust region repeats	-360.1358809190	299.0	299.0	299.0	2.0	34.0	10.1

Table 1242: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7306843905	10712.3	10712.3	10712.3	7.3	34.0	2840.2
cch second order	-419.7306843789	321.0	165.0	165.0	nan	34.0	18.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-414.7894351926	34221.0	0.0	0.0	nan	34.0	313.1
direct with trim	-419.7306843905	34236.0	13.0	13.0	nan	34.0	272.5
dual anneal	-419.7306843864	68024.0	22.0	22.0	1.0	34.0	556.9
trust region	-419.7306843905	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	10.5
trust region repeats	-419.7306843905	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	9.7

Table 1243: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6638170454	8780.0	8780.0	8780.0	5.0	34.0	2706.3
cch second order	-484.6638170200	321.0	166.0	166.0	nan	34.0	20.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-483.2709067987	34263.0	0.0	0.0	nan	34.0	325.0
direct with trim	-484.6638170453	34274.0	9.0	9.0	nan	34.0	273.4
dual anneal	-484.6638170404	68022.8	20.8	20.8	1.0	34.0	587.7
trust region	-484.6638170453	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	10.4
trust region repeats	-484.6638170453	300.0	300.0	300.0	2.0	34.0	10.3

Table 1244: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0559898319	9674.5	9674.5	9674.5	7.0	34.0	2354.2
cch second order	-555.0559898587	350.0	182.0	182.0	nan	34.0	7.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-548.6354727903	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.2
direct with trim	-555.0559898318	34118.0	9.0	9.0	nan	34.0	253.0
dual anneal	-555.0559898260	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	581.1
trust region	-555.0559898319	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.2
trust region repeats	-555.0559898318	300.0	300.0	300.0	1.0	34.0	9.4

Table 1245: Ar

44.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6213618940
He	basin hopping	-3.0901195926
Li	cch second order	-7.9887993671
Be	basin hopping	-15.7299406485
B	cch second order	-26.6444984107
C	cch second order	-41.0135883519
N	cch second order	-59.0840357486
O	cch second order	-81.0773261747
F	cch second order	-107.1953005642
Ne	cch second order	-137.6240345175
Na	direct with trim	-172.5366152586
Mg	trust region	-212.0952087796
Al	cch second order	-256.4526432094
Si	cch second order	-305.7536537810
P	cch second order	-360.1358809564
S	basin hopping	-419.7306843905
Cl	basin hopping	-484.6638170454
Ar	cch second order	-555.0559898587

Table 1246: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	243.7	124.6	124.6	nan	-180.3607499081	14.7
basin hopping	13120.6	13120.6	13120.6	9.4	-180.8209931052	2738.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.7	10.7	10.7	nan	-180.3607498914	10.7
trust region repeats	296.2	296.2	296.2	1.2	-180.3607498914	9.8
direct	34218.7	0.0	0.0	nan	-178.8862443524	331.3
direct with trim	34229.6	8.9	8.9	nan	-180.3607498914	280.7
dual anneal	68015.5	13.5	13.5	1.0	-180.3607498898	573.9

Table 1247: Average (all systems)

45   34s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

45.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1248: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571190985	13408.2	13408.2	13408.2	12.4	34.0	1174.8
He	-3.1805896586	10934.0	10934.0	10934.0	8.2	34.0	1171.3
Li	-8.1482789385	9804.0	9804.0	9804.0	8.8	34.0	986.2
Be	-15.9682587722	8314.2	8314.2	8314.2	7.6	34.0	841.2
B	-26.9684198995	7768.8	7768.8	7768.8	6.6	34.0	826.5
C	-41.4275951404	7407.6	7407.6	7407.6	7.0	34.0	716.1
N	-59.5908014903	7059.2	7059.2	7059.2	7.0	34.0	691.2
O	-81.6780253098	4464.8	4464.8	4464.8	4.6	34.0	656.6
F	-107.8898418043	5523.0	5523.0	5523.0	4.4	34.0	620.3
Ne	-138.4112216499	4775.0	4775.0	4775.0	6.6	34.0	737.9
Na	-173.4142785640	4982.2	4982.2	4982.2	11.2	34.0	620.4
Mg	-213.0603075210	4040.8	4040.8	4040.8	3.0	34.0	577.1
Al	-257.5013497339	3759.6	3759.6	3759.6	2.8	34.0	674.5
Si	-306.8814230412	3804.4	3804.4	3804.4	2.6	34.0	671.4
P	-361.3375090106	3470.2	3470.2	3470.2	2.2	34.0	585.7
S	-421.0003584930	4192.6	4192.6	4192.6	2.8	34.0	695.2
Cl	-485.9951586809	2679.6	2679.6	2679.6	1.4	34.0	605.4
Ar	-556.4420924947	4013.2	4013.2	4013.2	2.8	34.0	668.5

Table 1249: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191028	199.0	97.0	97.0	nan	34.0	10.7
He	-3.1805896851	237.0	115.0	115.0	nan	34.0	17.2
Li	-8.1482789093	212.0	99.0	99.0	nan	34.0	15.2
Be	-15.9682587624	211.0	111.0	111.0	nan	34.0	17.1
B	-26.9684199391	170.0	94.0	94.0	nan	34.0	10.5
C	-41.4275951378	216.0	117.0	117.0	nan	34.0	16.2
N	-59.5907999830	183.0	93.0	93.0	nan	34.0	16.5
O	-81.6780252760	172.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.2
F	-107.8898418044	185.0	91.0	91.0	nan	34.0	16.7
Ne	-138.4112216662	193.0	106.0	106.0	nan	34.0	10.6
Na	-173.4142785093	203.0	108.0	108.0	nan	34.0	11.1
Mg	-213.0603075227	301.0	155.0	155.0	nan	34.0	10.8
Al	-257.5013497419	186.0	102.0	102.0	nan	34.0	9.1
Si	-306.8814230414	177.0	97.0	97.0	nan	34.0	15.4
P	-361.3375090496	190.0	102.0	102.0	nan	34.0	17.1
S	-421.0003584836	229.0	116.0	116.0	nan	34.0	16.9
Cl	-485.9951586714	204.0	106.0	106.0	nan	34.0	17.2
Ar	-556.4420924331	210.0	114.0	114.0	nan	34.0	16.3

Table 1250: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1251: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6563725608	34217.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.9
He	-3.1684050354	34105.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.7
Li	-8.1381216032	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	269.8
Be	-15.8842130435	34253.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.0
B	-26.8361079966	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	262.3
C	-41.3528688776	34287.0	0.0	0.0	nan	34.0	295.5
N	-59.1273790844	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.0
O	-81.3309554765	34075.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.1
F	-106.2704857536	34229.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.9
Ne	-136.2294767189	34279.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.3
Na	-172.8298483923	34177.0	0.0	0.0	nan	34.0	295.3
Mg	-210.7561652076	34067.0	0.0	0.0	nan	34.0	290.7
Al	-255.4603507640	34207.0	0.0	0.0	nan	34.0	273.2
Si	-304.4155605161	34017.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.1
P	-358.0501992732	34125.0	0.0	0.0	nan	34.0	274.9
S	-417.2106206806	34045.0	0.0	0.0	nan	34.0	269.6
Cl	-484.8929711255	34045.0	0.0	0.0	nan	34.0	270.4
Ar	-476.3958257885	34083.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.5

Table 1252: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571190984	34225.0	6.0	6.0	nan	34.0	335.8
He	-3.1805896509	34115.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.0
Li	-8.1482789384	34325.0	6.0	6.0	nan	34.0	292.1
Be	-15.9682587488	34265.0	10.0	10.0	nan	34.0	312.6
B	-26.9684198994	34171.0	8.0	8.0	nan	34.0	322.1
C	-41.4275951403	34296.0	7.0	7.0	nan	34.0	324.0
N	-59.5907999234	34176.0	9.0	9.0	nan	34.0	318.5
O	-81.6780253097	34088.0	11.0	11.0	nan	34.0	332.9
F	-107.8898418042	34246.0	15.0	15.0	nan	34.0	316.0
Ne	-138.4112216496	34292.0	11.0	11.0	nan	34.0	335.8
Na	-173.4142785640	34192.0	13.0	13.0	nan	34.0	315.3
Mg	-213.0603075208	34077.0	8.0	8.0	nan	34.0	323.3
Al	-257.5013497338	34217.0	8.0	8.0	nan	34.0	332.6
Si	-306.8814230412	34027.0	8.0	8.0	nan	34.0	357.9
P	-361.3375090106	34137.0	10.0	10.0	nan	34.0	291.7
S	-421.0003584929	34061.0	14.0	14.0	nan	34.0	293.8
Cl	-485.9951586809	34056.0	9.0	9.0	nan	34.0	333.6
Ar	-556.4420924947	34123.0	38.0	38.0	nan	34.0	323.5

Table 1253: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571190984	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	653.4
He	-3.1805896508	68012.8	10.8	10.8	1.0	34.0	669.6
Li	-8.1482789384	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	581.7
Be	-15.9682587487	68013.8	11.8	11.8	1.0	34.0	653.1
B	-26.9684198993	68014.6	12.6	12.6	1.0	34.0	689.6
C	-41.4275951401	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	626.1
N	-59.5907999231	68019.8	17.8	17.8	1.0	34.0	687.5
O	-81.6780253092	68016.0	14.0	14.0	1.0	34.0	717.5
F	-107.8898418035	68019.6	17.6	17.6	1.0	34.0	684.3
Ne	-138.4112216486	68017.0	15.0	15.0	1.0	34.0	697.5
Na	-173.4142785626	68021.0	19.0	19.0	1.0	34.0	664.9
Mg	-213.0603075191	68023.6	21.6	21.6	1.0	34.0	705.0
Al	-257.5013497316	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	700.0
Si	-306.8814230384	68028.6	26.6	26.6	1.0	34.0	683.4
P	-361.3375090071	68022.4	20.4	20.4	1.0	34.0	718.9
S	-421.0003584887	68034.4	32.4	32.4	1.0	34.0	653.5
Cl	-485.9951586758	68016.6	14.6	14.6	1.0	34.0	712.3
Ar	-556.4420924886	68026.4	24.4	24.4	1.0	34.0	611.3

Table 1254: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571190984	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.6
He	-3.1805896508	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	12.8
Li	-8.1482789384	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	16.3
Be	-15.9682587487	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
B	-26.9684198994	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.8
C	-41.4275951403	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	13.1
N	-59.5907999234	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	8.3
O	-81.6780253097	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.8
F	-107.8898418042	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.5
Ne	-138.4112216496	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
Na	-173.4142785640	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.5
Mg	-213.0603075208	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	12.2
Al	-257.5013497338	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	11.8
Si	-306.8814230412	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	7.8
P	-361.3375090106	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	13.3
S	-421.0003584929	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	6.9
Cl	-485.9951586809	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	6.7
Ar	-556.4420924947	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	12.1

Table 1255: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571190984	230.0	230.0	230.0	1.0	34.0	9.3
He	-3.1805896508	244.0	244.0	244.0	1.0	34.0	9.9
Li	-8.1482789384	253.0	253.0	253.0	1.0	34.0	11.1
Be	-15.9682587487	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	9.3
B	-26.9684198994	404.0	404.0	404.0	2.0	34.0	12.4
C	-41.4275951403	268.0	268.0	268.0	1.0	34.0	9.2
N	-59.5907999234	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	11.0
O	-81.6780253097	278.0	278.0	278.0	1.0	34.0	9.8
F	-107.8898418043	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.5
Ne	-138.4112216496	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.5
Na	-173.4142785640	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	8.9
Mg	-213.0603075208	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	9.4
Al	-257.5013497338	289.0	289.0	289.0	1.0	34.0	9.3
Si	-306.8814230412	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.1
P	-361.3375090106	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	10.0
S	-421.0003584929	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	10.2
Cl	-485.9951586809	298.0	298.0	298.0	1.0	34.0	10.4
Ar	-556.4420924947	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	8.7

Table 1256: trust region repeats

45.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6571190985	13408.2	13408.2	13408.2	12.4	34.0	1174.8
cch second order	-0.6571191028	199.0	97.0	97.0	nan	34.0	10.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6563725608	34217.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.9
direct with trim	-0.6571190984	34225.0	6.0	6.0	nan	34.0	335.8
dual anneal	-0.6571190984	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	653.4
trust region	-0.6571190984	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.6
trust region repeats	-0.6571190984	230.0	230.0	230.0	1.0	34.0	9.3

Table 1257: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805896586	10934.0	10934.0	10934.0	8.2	34.0	1171.3
cch second order	-3.1805896851	237.0	115.0	115.0	nan	34.0	17.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.1684050354	34105.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.7
direct with trim	-3.1805896509	34115.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.0
dual anneal	-3.1805896508	68012.8	10.8	10.8	1.0	34.0	669.6
trust region	-3.1805896508	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-3.1805896508	244.0	244.0	244.0	1.0	34.0	9.9

Table 1258: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1482789385	9804.0	9804.0	9804.0	8.8	34.0	986.2
cch second order	-8.1482789093	212.0	99.0	99.0	nan	34.0	15.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.1381216032	34317.0	0.0	0.0	nan	34.0	269.8
direct with trim	-8.1482789384	34325.0	6.0	6.0	nan	34.0	292.1
dual anneal	-8.1482789384	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	581.7
trust region	-8.1482789384	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	16.3
trust region repeats	-8.1482789384	253.0	253.0	253.0	1.0	34.0	11.1

Table 1259: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9682587722	8314.2	8314.2	8314.2	7.6	34.0	841.2
cch second order	-15.9682587624	211.0	111.0	111.0	nan	34.0	17.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.8842130435	34253.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.0
direct with trim	-15.9682587488	34265.0	10.0	10.0	nan	34.0	312.6
dual anneal	-15.9682587487	68013.8	11.8	11.8	1.0	34.0	653.1
trust region	-15.9682587487	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-15.9682587487	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	9.3

Table 1260: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9684198995	7768.8	7768.8	7768.8	6.6	34.0	826.5
cch second order	-26.9684199391	170.0	94.0	94.0	nan	34.0	10.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.8361079966	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	262.3
direct with trim	-26.9684198994	34171.0	8.0	8.0	nan	34.0	322.1
dual anneal	-26.9684198993	68014.6	12.6	12.6	1.0	34.0	689.6
trust region	-26.9684198994	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.8
trust region repeats	-26.9684198994	404.0	404.0	404.0	2.0	34.0	12.4

Table 1261: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4275951404	7407.6	7407.6	7407.6	7.0	34.0	716.1
cch second order	-41.4275951378	216.0	117.0	117.0	nan	34.0	16.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-41.3528688776	34287.0	0.0	0.0	nan	34.0	295.5
direct with trim	-41.4275951403	34296.0	7.0	7.0	nan	34.0	324.0
dual anneal	-41.4275951401	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	626.1
trust region	-41.4275951403	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	13.1
trust region repeats	-41.4275951403	268.0	268.0	268.0	1.0	34.0	9.2

Table 1262: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5908014903	7059.2	7059.2	7059.2	7.0	34.0	691.2
cch second order	-59.5907999830	183.0	93.0	93.0	nan	34.0	16.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-59.1273790844	34165.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.0
direct with trim	-59.5907999234	34176.0	9.0	9.0	nan	34.0	318.5
dual anneal	-59.5907999231	68019.8	17.8	17.8	1.0	34.0	687.5
trust region	-59.5907999234	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	8.3
trust region repeats	-59.5907999234	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	11.0

Table 1263: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6780253098	4464.8	4464.8	4464.8	4.6	34.0	656.6
cch second order	-81.6780252760	172.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-81.3309554765	34075.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.1
direct with trim	-81.6780253097	34088.0	11.0	11.0	nan	34.0	332.9
dual anneal	-81.6780253092	68016.0	14.0	14.0	1.0	34.0	717.5
trust region	-81.6780253097	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.8
trust region repeats	-81.6780253097	278.0	278.0	278.0	1.0	34.0	9.8

Table 1264: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8898418043	5523.0	5523.0	5523.0	4.4	34.0	620.3
cch second order	-107.8898418044	185.0	91.0	91.0	nan	34.0	16.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-106.2704857536	34229.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.9
direct with trim	-107.8898418042	34246.0	15.0	15.0	nan	34.0	316.0
dual anneal	-107.8898418035	68019.6	17.6	17.6	1.0	34.0	684.3
trust region	-107.8898418042	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.5
trust region repeats	-107.8898418043	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.5

Table 1265: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4112216499	4775.0	4775.0	4775.0	6.6	34.0	737.9
cch second order	-138.4112216662	193.0	106.0	106.0	nan	34.0	10.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-136.2294767189	34279.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.3
direct with trim	-138.4112216496	34292.0	11.0	11.0	nan	34.0	335.8
dual anneal	-138.4112216486	68017.0	15.0	15.0	1.0	34.0	697.5
trust region	-138.4112216496	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
trust region repeats	-138.4112216496	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.5

Table 1266: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4142785640	4982.2	4982.2	4982.2	11.2	34.0	620.4
cch second order	-173.4142785093	203.0	108.0	108.0	nan	34.0	11.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-172.8298483923	34177.0	0.0	0.0	nan	34.0	295.3
direct with trim	-173.4142785640	34192.0	13.0	13.0	nan	34.0	315.3
dual anneal	-173.4142785626	68021.0	19.0	19.0	1.0	34.0	664.9
trust region	-173.4142785640	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.5
trust region repeats	-173.4142785640	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	8.9

Table 1267: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0603075210	4040.8	4040.8	4040.8	3.0	34.0	577.1
cch second order	-213.0603075227	301.0	155.0	155.0	nan	34.0	10.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-210.7561652076	34067.0	0.0	0.0	nan	34.0	290.7
direct with trim	-213.0603075208	34077.0	8.0	8.0	nan	34.0	323.3
dual anneal	-213.0603075191	68023.6	21.6	21.6	1.0	34.0	705.0
trust region	-213.0603075208	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	12.2
trust region repeats	-213.0603075208	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	9.4

Table 1268: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5013497339	3759.6	3759.6	3759.6	2.8	34.0	674.5
cch second order	-257.5013497419	186.0	102.0	102.0	nan	34.0	9.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-255.4603507640	34207.0	0.0	0.0	nan	34.0	273.2
direct with trim	-257.5013497338	34217.0	8.0	8.0	nan	34.0	332.6
dual anneal	-257.5013497316	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	700.0
trust region	-257.5013497338	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	11.8
trust region repeats	-257.5013497338	289.0	289.0	289.0	1.0	34.0	9.3

Table 1269: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8814230412	3804.4	3804.4	3804.4	2.6	34.0	671.4
cch second order	-306.8814230414	177.0	97.0	97.0	nan	34.0	15.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-304.4155605161	34017.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.1
direct with trim	-306.8814230412	34027.0	8.0	8.0	nan	34.0	357.9
dual anneal	-306.8814230384	68028.6	26.6	26.6	1.0	34.0	683.4
trust region	-306.8814230412	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	7.8
trust region repeats	-306.8814230412	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.1

Table 1270: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3375090106	3470.2	3470.2	3470.2	2.2	34.0	585.7
cch second order	-361.3375090496	190.0	102.0	102.0	nan	34.0	17.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-358.0501992732	34125.0	0.0	0.0	nan	34.0	274.9
direct with trim	-361.3375090106	34137.0	10.0	10.0	nan	34.0	291.7
dual anneal	-361.3375090071	68022.4	20.4	20.4	1.0	34.0	718.9
trust region	-361.3375090106	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	13.3
trust region repeats	-361.3375090106	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	10.0

Table 1271: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-421.0003584930	4192.6	4192.6	4192.6	2.8	34.0	695.2
cch second order	-421.0003584836	229.0	116.0	116.0	nan	34.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-417.2106206806	34045.0	0.0	0.0	nan	34.0	269.6
direct with trim	-421.0003584929	34061.0	14.0	14.0	nan	34.0	293.8
dual anneal	-421.0003584887	68034.4	32.4	32.4	1.0	34.0	653.5
trust region	-421.0003584929	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	6.9
trust region repeats	-421.0003584929	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	10.2

Table 1272: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9951586809	2679.6	2679.6	2679.6	1.4	34.0	605.4
cch second order	-485.9951586714	204.0	106.0	106.0	nan	34.0	17.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-484.8929711255	34045.0	0.0	0.0	nan	34.0	270.4
direct with trim	-485.9951586809	34056.0	9.0	9.0	nan	34.0	333.6
dual anneal	-485.9951586758	68016.6	14.6	14.6	1.0	34.0	712.3
trust region	-485.9951586809	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	6.7
trust region repeats	-485.9951586809	298.0	298.0	298.0	1.0	34.0	10.4

Table 1273: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4420924947	4013.2	4013.2	4013.2	2.8	34.0	668.5
cch second order	-556.4420924331	210.0	114.0	114.0	nan	34.0	16.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-476.3958257885	34083.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.5
direct with trim	-556.4420924947	34123.0	38.0	38.0	nan	34.0	323.5
dual anneal	-556.4420924886	68026.4	24.4	24.4	1.0	34.0	611.3
trust region	-556.4420924947	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	12.1
trust region repeats	-556.4420924947	295.0	295.0	295.0	1.0	34.0	8.7

Table 1274: Ar

45.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6571191028
He	cch second order	-3.1805896851
Li	basin hopping	-8.1482789385
Be	basin hopping	-15.9682587722
B	cch second order	-26.9684199391
C	basin hopping	-41.4275951404
N	basin hopping	-59.5908014903
O	basin hopping	-81.6780253098
F	cch second order	-107.8898418044
Ne	cch second order	-138.4112216662
Na	basin hopping	-173.4142785640
Mg	cch second order	-213.0603075227
Al	cch second order	-257.5013497419
Si	cch second order	-306.8814230414
P	cch second order	-361.3375090496
S	basin hopping	-421.0003584930
Cl	basin hopping	-485.9951586809
Ar	direct with trim	-556.4420924947

Table 1275: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	204.3	106.2	106.2	nan	-181.0862570955	14.4
basin hopping	6133.4	6133.4	6133.4	5.7	-181.0862571834	751.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.4	13.4	13.4	nan	-181.0862570945	10.3
trust region repeats	283.4	283.4	283.4	1.1	-181.0862570946	9.9
direct	34158.6	0.0	0.0	nan	-175.5003293277	283.5
direct with trim	34171.6	11.1	11.1	nan	-181.0862570946	319.6
dual anneal	68019.4	17.4	17.4	1.0	-181.0862570929	672.7

Table 1276: Average (all systems)

46　34s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

46.1　Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1277: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304392	12398.6	12398.6	12398.6	10.6	34.0	1081.3
He	-3.2215715302	11587.8	11587.8	11587.8	9.0	34.0	1015.3
Li	-8.2486236802	11124.6	11124.6	11124.6	9.2	34.0	842.8
Be	-16.1580042952	8929.2	8929.2	8929.2	7.6	34.0	890.8
B	-27.2795181908	8153.4	8153.4	8153.4	6.8	34.0	764.0
C	-41.8935040140	7186.4	7186.4	7186.4	12.4	34.0	821.2
N	-60.2462206986	6495.2	6495.2	6495.2	4.6	34.0	841.9
O	-82.5587192602	5182.6	5182.6	5182.6	3.6	34.0	776.3
F	-109.0324943589	5269.6	5269.6	5269.6	4.0	34.0	646.3
Ne	-139.8533377391	4182.6	4182.6	4182.6	5.2	34.0	640.8
Na	-175.1940994559	4633.4	4633.4	4633.4	9.6	34.0	629.7
Mg	-215.2167431029	3569.2	3569.2	3569.2	3.0	34.0	579.0
Al	-260.0739223012	4291.8	4291.8	4291.8	3.0	34.0	642.1
Si	-309.9102198638	3723.4	3723.4	3723.4	2.8	34.0	742.4
P	-364.8631417791	3702.4	3702.4	3702.4	2.0	34.0	640.6
S	-425.0639282356	3808.4	3808.4	3808.4	2.6	34.0	572.9
Cl	-490.6382251152	2805.4	2805.4	2805.4	1.6	34.0	566.6
Ar	-561.7066470219	3650.4	3650.4	3650.4	2.4	34.0	662.5

Table 1278: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304844	303.0	149.0	149.0	nan	34.0	17.9
He	-3.2215715183	183.0	99.0	99.0	nan	34.0	13.8
Li	-8.2486236530	334.0	154.0	154.0	nan	34.0	18.5
Be	-16.1580043223	173.0	94.0	94.0	nan	34.0	15.7
B	-27.2795182431	185.0	84.0	84.0	nan	34.0	10.4
C	-41.8935040161	217.0	115.0	115.0	nan	34.0	17.4
N	-60.2462206433	189.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.1
O	-82.5587192501	187.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.6
F	-109.0324943121	148.0	84.0	84.0	nan	34.0	8.8
Ne	-139.8533377918	217.0	108.0	108.0	nan	34.0	9.6
Na	-175.1940993929	352.0	170.0	170.0	nan	34.0	11.1
Mg	-215.2167431535	188.0	100.0	100.0	nan	34.0	10.8
Al	-260.0739223300	198.0	105.0	105.0	nan	34.0	15.9
Si	-309.9102198430	210.0	113.0	113.0	nan	34.0	9.8
P	-364.8631418175	180.0	98.0	98.0	nan	34.0	10.4
S	-425.0639283002	318.0	160.0	160.0	nan	34.0	15.8
Cl	-490.6382251256	173.0	90.0	90.0	nan	34.0	16.3
Ar	-561.7066469677	199.0	104.0	104.0	nan	34.0	16.8

Table 1279: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1280: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6651744343	34089.0	0.0	0.0	nan	34.0	265.5
He	-3.2136645016	34185.0	0.0	0.0	nan	34.0	303.9
Li	-8.2269525369	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.0
Be	-16.0218769371	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	294.2
B	-27.1632367156	34209.0	0.0	0.0	nan	34.0	301.1
C	-41.8430865596	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	303.8
N	-59.7515492095	34271.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.0
O	-82.2220808273	34191.0	0.0	0.0	nan	34.0	292.3
F	-107.4798661263	34013.0	0.0	0.0	nan	34.0	285.0
Ne	-137.6179278812	34095.0	0.0	0.0	nan	34.0	293.5
Na	-174.0861987821	34305.0	0.0	0.0	nan	34.0	296.4
Mg	-214.3586495509	34169.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.2
Al	-258.2160768546	34125.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.0
Si	-307.4540174213	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	288.1
P	-361.5839732601	34189.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.7
S	-421.2477935742	34003.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.3
Cl	-489.2010821361	34167.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.5
Ar	-558.5243267859	34127.0	0.0	0.0	nan	34.0	310.7

Table 1281: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304380	34097.0	6.0	6.0	nan	34.0	354.8
He	-3.2215715300	34194.0	7.0	7.0	nan	34.0	373.3
Li	-8.2486236800	34305.0	6.0	6.0	nan	34.0	362.6
Be	-16.1580042942	34119.0	10.0	10.0	nan	34.0	314.3
B	-27.2795181907	34219.0	8.0	8.0	nan	34.0	354.3
C	-41.8935040140	34172.0	9.0	9.0	nan	34.0	329.5
N	-60.2462206984	34283.0	10.0	10.0	nan	34.0	347.5
O	-82.5587192601	34204.0	11.0	11.0	nan	34.0	361.6
F	-109.0324943582	34033.4	18.4	18.4	nan	34.0	369.6
Ne	-139.8533377390	34108.0	11.0	11.0	nan	34.0	347.5
Na	-175.1940994558	34318.0	11.0	11.0	nan	34.0	320.1
Mg	-215.2167431029	34179.0	8.0	8.0	nan	34.0	363.4
Al	-260.0739223006	34135.0	8.0	8.0	nan	34.0	363.2
Si	-309.9102198637	34311.0	12.0	12.0	nan	34.0	349.2
P	-364.8631417791	34201.0	10.0	10.0	nan	34.0	288.8
S	-425.0639282356	34020.0	15.0	15.0	nan	34.0	340.5
Cl	-490.6382251152	34178.0	9.0	9.0	nan	34.0	365.0
Ar	-561.7066470219	34137.0	8.0	8.0	nan	34.0	353.1

Table 1282: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304380	68014.8	12.8	12.8	1.2	34.0	611.1
He	-3.2215715300	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	588.9
Li	-8.2486236800	68013.4	11.4	11.4	1.0	34.0	610.8
Be	-16.1580042942	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	596.5
B	-27.2795181905	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	634.5
C	-41.8935040138	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	630.2
N	-60.2462206981	68019.4	17.4	17.4	1.0	34.0	647.5
O	-82.5587192596	68020.0	18.0	18.0	1.0	34.0	629.6
F	-109.0324943573	68028.8	26.8	26.8	1.0	34.0	593.4
Ne	-139.8533377379	68018.6	16.6	16.6	1.0	34.0	700.5
Na	-175.1940994544	68018.4	16.4	16.4	1.0	34.0	544.3
Mg	-215.2167431010	68026.8	24.8	24.8	1.0	34.0	601.0
Al	-260.0739222982	68021.6	19.6	19.6	1.0	34.0	648.6
Si	-309.9102198607	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	557.9
P	-364.8631417754	68026.0	24.0	24.0	1.0	34.0	508.1
S	-425.0639282311	68030.8	28.8	28.8	1.0	34.0	582.8
Cl	-490.6382251097	68023.4	21.4	21.4	1.0	34.0	619.6
Ar	-561.7066470155	68030.4	28.4	28.4	1.0	34.0	550.4

Table 1283: dual anneal

547

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304380	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
He	-3.2215715300	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.6
Li	-8.2486236800	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	18.5
Be	-16.1580042942	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.9
B	-27.2795181907	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.6
C	-41.8935040140	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	8.3
N	-60.2462206984	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.8
O	-82.5587192601	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.6
F	-109.0324943581	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	10.2
Ne	-139.8533377389	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	6.6
Na	-175.1940994559	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.0
Mg	-215.2167431029	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	8.0
Al	-260.0739223006	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	7.7
Si	-309.9102198637	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	8.4
P	-364.8631417791	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.7
S	-425.0639282356	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	10.4
Cl	-490.6382251152	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	6.7
Ar	-561.7066470219	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	16.9

Table 1284: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661304380	1173.0	1173.0	1173.0	1.0	34.0	32.1
He	-3.2215715300	254.0	254.0	254.0	1.0	34.0	11.5
Li	-8.2486236800	252.0	252.0	252.0	1.0	34.0	10.0
Be	-16.1580042942	258.0	258.0	258.0	1.0	34.0	10.3
B	-27.2795181907	266.0	266.0	266.0	1.0	34.0	9.2
C	-41.8935040140	273.0	273.0	273.0	1.0	34.0	9.6
N	-60.2462206984	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	10.0
O	-82.5587192601	278.0	278.0	278.0	1.0	34.0	10.1
F	-109.0324943581	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	9.5
Ne	-139.8533377389	281.0	281.0	281.0	1.0	34.0	9.8
Na	-175.1940994559	282.0	282.0	282.0	2.0	34.0	9.5
Mg	-215.2167431029	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	9.9
Al	-260.0739223006	291.0	291.0	291.0	1.0	34.0	9.8
Si	-309.9102198637	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.5
P	-364.8631417791	296.0	296.0	296.0	1.0	34.0	8.3
S	-425.0639282356	296.0	296.0	296.0	1.0	34.0	10.0
Cl	-490.6382251152	297.0	297.0	297.0	1.0	34.0	10.0
Ar	-561.7066470219	301.0	301.0	301.0	1.0	34.0	9.6

Table 1285: trust region repeats

46.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661304392	12398.6	12398.6	12398.6	10.6	34.0	1081.3
cch second order	-0.6661304844	303.0	149.0	149.0	nan	34.0	17.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6651744343	34089.0	0.0	0.0	nan	34.0	265.5
direct with trim	-0.6661304380	34097.0	6.0	6.0	nan	34.0	354.8
dual anneal	-0.6661304380	68014.8	12.8	12.8	1.2	34.0	611.1
trust region	-0.6661304380	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-0.6661304380	1173.0	1173.0	1173.0	1.0	34.0	32.1

Table 1286: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215715302	11587.8	11587.8	11587.8	9.0	34.0	1015.3
cch second order	-3.2215715183	183.0	99.0	99.0	nan	34.0	13.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.2136645016	34185.0	0.0	0.0	nan	34.0	303.9
direct with trim	-3.2215715300	34194.0	7.0	7.0	nan	34.0	373.3
dual anneal	-3.2215715300	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	588.9
trust region	-3.2215715300	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.6
trust region repeats	-3.2215715300	254.0	254.0	254.0	1.0	34.0	11.5

Table 1287: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2486236802	11124.6	11124.6	11124.6	9.2	34.0	842.8
cch second order	-8.2486236530	334.0	154.0	154.0	nan	34.0	18.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.2269525369	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.0
direct with trim	-8.2486236800	34305.0	6.0	6.0	nan	34.0	362.6
dual anneal	-8.2486236800	68013.4	11.4	11.4	1.0	34.0	610.8
trust region	-8.2486236800	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	18.5
trust region repeats	-8.2486236800	252.0	252.0	252.0	1.0	34.0	10.0

Table 1288: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1580042952	8929.2	8929.2	8929.2	7.6	34.0	890.8
cch second order	-16.1580043223	173.0	94.0	94.0	nan	34.0	15.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-16.0218769371	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	294.2
direct with trim	-16.1580042942	34119.0	10.0	10.0	nan	34.0	314.3
dual anneal	-16.1580042942	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	596.5
trust region	-16.1580042942	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.9
trust region repeats	-16.1580042942	258.0	258.0	258.0	1.0	34.0	10.3

Table 1289: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2795181908	8153.4	8153.4	8153.4	6.8	34.0	764.0
cch second order	-27.2795182431	185.0	84.0	84.0	nan	34.0	10.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-27.1632367156	34209.0	0.0	0.0	nan	34.0	301.1
direct with trim	-27.2795181907	34219.0	8.0	8.0	nan	34.0	354.3
dual anneal	-27.2795181905	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	634.5
trust region	-27.2795181907	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.6
trust region repeats	-27.2795181907	266.0	266.0	266.0	1.0	34.0	9.2

Table 1290: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8935040140	7186.4	7186.4	7186.4	12.4	34.0	821.2
cch second order	-41.8935040161	217.0	115.0	115.0	nan	34.0	17.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-41.8430865596	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	303.8
direct with trim	-41.8935040140	34172.0	9.0	9.0	nan	34.0	329.5
dual anneal	-41.8935040138	68014.8	12.8	12.8	1.0	34.0	630.2
trust region	-41.8935040140	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	8.3
trust region repeats	-41.8935040140	273.0	273.0	273.0	1.0	34.0	9.6

Table 1291: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2462206986	6495.2	6495.2	6495.2	4.6	34.0	841.9
cch second order	-60.2462206433	189.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-59.7515492095	34271.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.0
direct with trim	-60.2462206984	34283.0	10.0	10.0	nan	34.0	347.5
dual anneal	-60.2462206981	68019.4	17.4	17.4	1.0	34.0	647.5
trust region	-60.2462206984	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-60.2462206984	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	10.0

Table 1292: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5587192602	5182.6	5182.6	5182.6	3.6	34.0	776.3
cch second order	-82.5587192501	187.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-82.2220808273	34191.0	0.0	0.0	nan	34.0	292.3
direct with trim	-82.5587192601	34204.0	11.0	11.0	nan	34.0	361.6
dual anneal	-82.5587192596	68020.0	18.0	18.0	1.0	34.0	629.6
trust region	-82.5587192601	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.6
trust region repeats	-82.5587192601	278.0	278.0	278.0	1.0	34.0	10.1

Table 1293: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0324943589	5269.6	5269.6	5269.6	4.0	34.0	646.3
cch second order	-109.0324943121	148.0	84.0	84.0	nan	34.0	8.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-107.4798661263	34013.0	0.0	0.0	nan	34.0	285.0
direct with trim	-109.0324943582	34033.4	18.4	18.4	nan	34.0	369.6
dual anneal	-109.0324943573	68028.8	26.8	26.8	1.0	34.0	593.4
trust region	-109.0324943581	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	10.2
trust region repeats	-109.0324943581	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	9.5

Table 1294: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8533377391	4182.6	4182.6	4182.6	5.2	34.0	640.8
cch second order	-139.8533377918	217.0	108.0	108.0	nan	34.0	9.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-137.6179278812	34095.0	0.0	0.0	nan	34.0	293.5
direct with trim	-139.8533377390	34108.0	11.0	11.0	nan	34.0	347.5
dual anneal	-139.8533377379	68018.6	16.6	16.6	1.0	34.0	700.5
trust region	-139.8533377389	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	6.6
trust region repeats	-139.8533377389	281.0	281.0	281.0	1.0	34.0	9.8

Table 1295: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1940994559	4633.4	4633.4	4633.4	9.6	34.0	629.7
cch second order	-175.1940993929	352.0	170.0	170.0	nan	34.0	11.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-174.0861987821	34305.0	0.0	0.0	nan	34.0	296.4
direct with trim	-175.1940994558	34318.0	11.0	11.0	nan	34.0	320.1
dual anneal	-175.1940994544	68018.4	16.4	16.4	1.0	34.0	544.3
trust region	-175.1940994559	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.0
trust region repeats	-175.1940994559	282.0	282.0	282.0	2.0	34.0	9.5

Table 1296: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2167431029	3569.2	3569.2	3569.2	3.0	34.0	579.0
cch second order	-215.2167431535	188.0	100.0	100.0	nan	34.0	10.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-214.3586495509	34169.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.2
direct with trim	-215.2167431029	34179.0	8.0	8.0	nan	34.0	363.4
dual anneal	-215.2167431010	68026.8	24.8	24.8	1.0	34.0	601.0
trust region	-215.2167431029	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	8.0
trust region repeats	-215.2167431029	285.0	285.0	285.0	1.0	34.0	9.9

Table 1297: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0739223012	4291.8	4291.8	4291.8	3.0	34.0	642.1
cch second order	-260.0739223300	198.0	105.0	105.0	nan	34.0	15.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-258.2160768546	34125.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.0
direct with trim	-260.0739223006	34135.0	8.0	8.0	nan	34.0	363.2
dual anneal	-260.0739222982	68021.6	19.6	19.6	1.0	34.0	648.6
trust region	-260.0739223006	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	7.7
trust region repeats	-260.0739223006	291.0	291.0	291.0	1.0	34.0	9.8

Table 1298: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9102198638	3723.4	3723.4	3723.4	2.8	34.0	742.4
cch second order	-309.9102198430	210.0	113.0	113.0	nan	34.0	9.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-307.4540174213	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	288.1
direct with trim	-309.9102198637	34311.0	12.0	12.0	nan	34.0	349.2
dual anneal	-309.9102198607	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	557.9
trust region	-309.9102198637	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	8.4
trust region repeats	-309.9102198637	293.0	293.0	293.0	1.0	34.0	9.5

Table 1299: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8631417791	3702.4	3702.4	3702.4	2.0	34.0	640.6
cch second order	-364.8631418175	180.0	98.0	98.0	nan	34.0	10.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-361.5839732601	34189.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.7
direct with trim	-364.8631417791	34201.0	10.0	10.0	nan	34.0	288.8
dual anneal	-364.8631417754	68026.0	24.0	24.0	1.0	34.0	508.1
trust region	-364.8631417791	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.7
trust region repeats	-364.8631417791	296.0	296.0	296.0	1.0	34.0	8.3

Table 1300: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0639282356	3808.4	3808.4	3808.4	2.6	34.0	572.9
cch second order	-425.0639283002	318.0	160.0	160.0	nan	34.0	15.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-421.2477935742	34003.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.3
direct with trim	-425.0639282356	34020.0	15.0	15.0	nan	34.0	340.5
dual anneal	-425.0639282311	68030.8	28.8	28.8	1.0	34.0	582.8
trust region	-425.0639282356	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	10.4
trust region repeats	-425.0639282356	296.0	296.0	296.0	1.0	34.0	10.0

Table 1301: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6382251152	2805.4	2805.4	2805.4	1.6	34.0	566.6
cch second order	-490.6382251256	173.0	90.0	90.0	nan	34.0	16.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-489.2010821361	34167.0	0.0	0.0	nan	34.0	286.5
direct with trim	-490.6382251152	34178.0	9.0	9.0	nan	34.0	365.0
dual anneal	-490.6382251097	68023.4	21.4	21.4	1.0	34.0	619.6
trust region	-490.6382251152	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	6.7
trust region repeats	-490.6382251152	297.0	297.0	297.0	1.0	34.0	10.0

Table 1302: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7066470219	3650.4	3650.4	3650.4	2.4	34.0	662.5
cch second order	-561.7066469677	199.0	104.0	104.0	nan	34.0	16.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-558.5243267859	34127.0	0.0	0.0	nan	34.0	310.7
direct with trim	-561.7066470219	34137.0	8.0	8.0	nan	34.0	353.1
dual anneal	-561.7066470155	68030.4	28.4	28.4	1.0	34.0	550.4
trust region	-561.7066470219	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	16.9
trust region repeats	-561.7066470219	301.0	301.0	301.0	1.0	34.0	9.6

Table 1303: Ar

46.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6661304844
He	basin hopping	-3.2215715302
Li	basin hopping	-8.2486236802
Be	cch second order	-16.1580043223
B	cch second order	-27.2795182431
C	cch second order	-41.8935040161
N	basin hopping	-60.2462206986
O	basin hopping	-82.5587192602
F	basin hopping	-109.0324943589
Ne	cch second order	-139.8533377918
Na	basin hopping	-175.1940994559
Mg	cch second order	-215.2167431535
Al	cch second order	-260.0739223300
Si	basin hopping	-309.9102198638
P	cch second order	-364.8631418175
S	cch second order	-425.0639283002
Cl	cch second order	-490.6382251256
Ar	basin hopping	-561.7066470219

Table 1304: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	219.7	111.9	111.9	nan	-182.8791695092	14.0
basin hopping	6149.7	6149.7	6149.7	5.6	-182.8791695046	742.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.1	13.1	13.1	nan	-182.8791695043	10.2
trust region repeats	329.4	329.4	329.4	1.1	-182.8791695043	11.0
direct	34166.7	0.0	0.0	nan	-181.6043074497	295.9
direct with trim	34178.5	9.9	9.9	nan	-182.8791695043	347.7
dual anneal	68020.2	18.2	18.2	1.0	-182.8791695025	603.1

Table 1305: Average (all systems)

47   34s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

47.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1306: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247104	11003.2	11003.2	11003.2	12.0	34.0	1107.8
He	-2.8183587332	9626.6	9626.6	9626.6	7.4	34.0	1061.0
Li	-7.3227196302	8093.6	8093.6	8093.6	8.4	34.0	880.5
Be	-14.4841044423	9196.6	9196.6	9196.6	12.2	34.0	867.4
B	-24.6284290645	8700.8	8700.8	8700.8	6.2	34.0	753.2
C	-38.0332956150	6188.4	6188.4	6188.4	5.4	34.0	828.6
N	-54.9428909513	6165.2	6165.2	6165.2	5.6	34.0	656.2
O	-75.5766210466	7093.8	7093.8	7093.8	5.8	34.0	713.2
F	-100.1346302120	5460.8	5460.8	5460.8	3.4	34.0	665.2
Ne	-128.8015738152	5750.4	5750.4	5750.4	4.6	34.0	755.2
Na	-161.7493269484	5553.8	5553.8	5553.8	4.6	34.0	763.3
Mg	-199.1390037139	3737.6	3737.6	3737.6	3.2	34.0	578.9
Al	-241.1225121073	4358.4	4358.4	4358.4	3.4	34.0	656.8
Si	-287.8437545692	4786.6	4786.6	4786.6	4.2	34.0	650.0
P	-339.4396528967	4343.0	4343.0	4343.0	4.4	34.0	513.6
S	-396.0408817080	3913.2	3913.2	3913.2	3.0	34.0	599.7
Cl	-457.7726051566	3620.2	3620.2	3620.2	2.8	34.0	602.3
Ar	-524.7549752185	3039.6	3039.6	3039.6	3.0	34.0	583.0

Table 1307: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247149	197.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.6
He	-2.8183586839	188.0	100.0	100.0	nan	34.0	16.8
Li	-7.3227196411	275.0	133.0	133.0	nan	34.0	17.0
Be	-14.4841044659	198.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.4
B	-24.6284290712	154.0	87.0	87.0	nan	34.0	16.1
C	-38.0332955824	180.0	97.0	97.0	nan	34.0	16.6
N	-54.9428909686	161.0	84.0	84.0	nan	34.0	13.6
O	-75.5766209818	140.0	79.0	79.0	nan	34.0	25.3
F	-100.1346301918	139.0	75.0	75.0	nan	34.0	8.8
Ne	-128.8015737749	150.0	84.0	84.0	nan	34.0	16.0
Na	-161.7493270158	146.0	81.0	81.0	nan	34.0	14.7
Mg	-199.1390036528	197.0	104.0	104.0	nan	34.0	16.5
Al	-241.1225080663	182.0	98.0	98.0	nan	34.0	14.8
Si	-287.8437545435	179.0	96.0	96.0	nan	34.0	14.4
P	-339.4396475080	168.0	93.0	93.0	nan	34.0	13.3
S	-396.0408816331	192.0	104.0	104.0	nan	34.0	13.8
Cl	-457.7726052324	209.0	109.0	109.0	nan	34.0	16.9
Ar	-524.7549752944	198.0	106.0	106.0	nan	34.0	16.8

Table 1308: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1309: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5660619216	34009.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.8
He	-2.8098243718	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	278.2
Li	-7.3125509249	34217.0	0.0	0.0	nan	34.0	305.2
Be	-14.4568602154	34185.0	0.0	0.0	nan	34.0	283.5
B	-24.3725418889	34021.0	0.0	0.0	nan	34.0	231.3
C	-37.9860278545	34133.0	0.0	0.0	nan	34.0	313.4
N	-54.1850909238	34003.0	0.0	0.0	nan	34.0	263.7
O	-74.9930907594	34327.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.8
F	-98.8974120787	34369.0	0.0	0.0	nan	34.0	259.3
Ne	-128.0491509034	34247.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.4
Na	-159.9459728743	34101.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.9
Mg	-198.3362815920	34263.0	0.0	0.0	nan	34.0	258.3
Al	-239.7458558561	34261.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.7
Si	-283.9653149774	34287.0	0.0	0.0	nan	34.0	263.3
P	-334.9578265485	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	299.5
S	-392.0866331786	34211.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.4
Cl	-456.6832731338	34289.0	0.0	0.0	nan	34.0	300.9
Ar	-520.9852568197	34077.0	0.0	0.0	nan	34.0	288.6

Table 1310: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247100	34016.0	5.0	5.0	nan	34.0	266.3
He	-2.8183587332	34323.0	6.0	6.0	nan	34.0	200.1
Li	-7.3227196302	34227.0	8.0	8.0	nan	34.0	253.4
Be	-14.4841044421	34194.0	7.0	7.0	nan	34.0	271.1
B	-24.6284290644	34034.0	11.0	11.0	nan	34.0	266.7
C	-38.0332956149	34143.0	8.0	8.0	nan	34.0	250.7
N	-54.9428909512	34018.0	13.0	13.0	nan	34.0	264.8
O	-75.5766210465	34339.0	10.0	10.0	nan	34.0	254.9
F	-100.1346302119	34382.0	11.0	11.0	nan	34.0	290.2
Ne	-128.8015738151	34256.0	7.0	7.0	nan	34.0	254.5
Na	-161.7493269483	34115.0	12.0	12.0	nan	34.0	252.1
Mg	-199.1390037139	34276.2	11.2	11.2	nan	34.0	254.6
Al	-241.1225081379	34270.0	7.0	7.0	nan	34.0	248.5
Si	-287.8437545690	34301.0	12.0	12.0	nan	34.0	269.5
P	-339.4396475028	34120.0	11.0	11.0	nan	34.0	266.1
S	-396.0408817079	34226.0	13.0	13.0	nan	34.0	254.1
Cl	-457.7726051566	34301.0	10.0	10.0	nan	34.0	249.6
Ar	-524.7549752184	34089.0	10.0	10.0	nan	34.0	245.2

Table 1311: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247100	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	597.8
He	-2.8183587332	68011.0	9.0	9.0	1.0	34.0	616.6
Li	-7.3227196301	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	496.1
Be	-14.4841044420	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	541.1
B	-24.6284290643	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	533.3
C	-38.0332956147	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	556.2
N	-54.9428909510	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	561.9
O	-75.5766210463	68016.2	14.2	14.2	1.0	34.0	599.5
F	-100.1346302116	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	562.0
Ne	-128.8015738146	68022.8	20.8	20.8	1.0	34.0	545.2
Na	-161.7493269476	68014.2	12.2	12.2	1.0	34.0	404.4
Mg	-199.1390037130	68020.2	18.2	18.2	1.0	34.0	546.5
Al	-241.1225081367	68027.6	25.6	25.6	1.0	34.0	563.5
Si	-287.8437545676	68027.6	25.6	25.6	1.0	34.0	531.8
P	-339.4396475010	68023.4	21.4	21.4	1.0	34.0	550.0
S	-396.0408817057	68025.8	23.8	23.8	1.0	34.0	596.0
Cl	-457.7726051539	68025.0	23.0	23.0	1.0	34.0	594.9
Ar	-524.7549752153	68026.2	24.2	24.2	1.0	34.0	531.8

Table 1312: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247100	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	16.2
He	-2.8183587332	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.8
Li	-7.3227196302	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.2
Be	-14.4841044421	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	12.9
B	-24.6284290644	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.9
C	-38.0332956149	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	6.8
N	-54.9428909511	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.1
O	-75.5766210465	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.3
F	-100.1346302119	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	14.9
Ne	-128.8015738151	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	6.8
Na	-161.7493269483	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.4
Mg	-199.1390037139	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	7.2
Al	-241.1225081379	20.0	20.0	20.0	nan	34.0	7.4
Si	-287.8437545690	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	7.2
P	-339.4396475028	21.0	21.0	21.0	nan	34.0	10.1
S	-396.0408817079	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	7.5
Cl	-457.7726051566	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	7.6
Ar	-524.7549752184	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	15.2

Table 1313: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247100	213.0	213.0	213.0	1.0	34.0	8.6
He	-2.8183587332	238.0	238.0	238.0	1.0	34.0	10.4
Li	-7.3227196302	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	9.8
Be	-14.4841044421	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	9.8
B	-24.6284290644	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	9.1
C	-38.0332956149	262.0	262.0	262.0	1.0	34.0	10.1
N	-54.9428909511	262.0	262.0	262.0	2.0	34.0	9.3
O	-75.5766210465	275.0	275.0	275.0	1.0	34.0	10.3
F	-100.1346302119	273.0	273.0	273.0	1.0	34.0	10.6
Ne	-128.8015738151	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	9.5
Na	-161.7493269483	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.9
Mg	-199.1390037139	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	9.5
Al	-241.1225081379	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	9.4
Si	-287.8437545690	282.0	282.0	282.0	1.0	34.0	9.7
P	-339.4396475028	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	10.3
S	-396.0408817079	286.0	286.0	286.0	1.0	34.0	9.0
Cl	-457.7726051566	288.0	288.0	288.0	1.0	34.0	9.0
Ar	-524.7549752184	288.0	288.0	288.0	1.0	34.0	10.4

Table 1314: trust region repeats

47.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666247104	11003.2	11003.2	11003.2	12.0	34.0	1107.8
cch second order	-0.5666247149	197.0	88.0	88.0	nan	34.0	15.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.5660619216	34009.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.8
direct with trim	-0.5666247100	34016.0	5.0	5.0	nan	34.0	266.3
dual anneal	-0.5666247100	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	597.8
trust region	-0.5666247100	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	16.2
trust region repeats	-0.5666247100	213.0	213.0	213.0	1.0	34.0	8.6

Table 1315: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183587332	9626.6	9626.6	9626.6	7.4	34.0	1061.0
cch second order	-2.8183586839	188.0	100.0	100.0	nan	34.0	16.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.8098243718	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	278.2
direct with trim	-2.8183587332	34323.0	6.0	6.0	nan	34.0	200.1
dual anneal	-2.8183587332	68011.0	9.0	9.0	1.0	34.0	616.6
trust region	-2.8183587332	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-2.8183587332	238.0	238.0	238.0	1.0	34.0	10.4

Table 1316: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3227196302	8093.6	8093.6	8093.6	8.4	34.0	880.5
cch second order	-7.3227196411	275.0	133.0	133.0	nan	34.0	17.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.3125509249	34217.0	0.0	0.0	nan	34.0	305.2
direct with trim	-7.3227196302	34227.0	8.0	8.0	nan	34.0	253.4
dual anneal	-7.3227196301	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	496.1
trust region	-7.3227196302	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	7.2
trust region repeats	-7.3227196302	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	9.8

Table 1317: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4841044423	9196.6	9196.6	9196.6	12.2	34.0	867.4
cch second order	-14.4841044659	198.0	94.0	94.0	nan	34.0	16.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.4568602154	34185.0	0.0	0.0	nan	34.0	283.5
direct with trim	-14.4841044421	34194.0	7.0	7.0	nan	34.0	271.1
dual anneal	-14.4841044420	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	541.1
trust region	-14.4841044421	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	12.9
trust region repeats	-14.4841044421	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	9.8

Table 1318: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6284290645	8700.8	8700.8	8700.8	6.2	34.0	753.2
cch second order	-24.6284290712	154.0	87.0	87.0	nan	34.0	16.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-24.3725418889	34021.0	0.0	0.0	nan	34.0	231.3
direct with trim	-24.6284290644	34034.0	11.0	11.0	nan	34.0	266.7
dual anneal	-24.6284290643	68012.0	10.0	10.0	1.0	34.0	533.3
trust region	-24.6284290644	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.9
trust region repeats	-24.6284290644	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	9.1

Table 1319: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332956150	6188.4	6188.4	6188.4	5.4	34.0	828.6
cch second order	-38.0332955824	180.0	97.0	97.0	nan	34.0	16.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-37.9860278545	34133.0	0.0	0.0	nan	34.0	313.4
direct with trim	-38.0332956149	34143.0	8.0	8.0	nan	34.0	250.7
dual anneal	-38.0332956147	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	556.2
trust region	-38.0332956149	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-38.0332956149	262.0	262.0	262.0	1.0	34.0	10.1

Table 1320: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9428909513	6165.2	6165.2	6165.2	5.6	34.0	656.2
cch second order	-54.9428909686	161.0	84.0	84.0	nan	34.0	13.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-54.1850909238	34003.0	0.0	0.0	nan	34.0	263.7
direct with trim	-54.9428909512	34018.0	13.0	13.0	nan	34.0	264.8
dual anneal	-54.9428909510	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	561.9
trust region	-54.9428909511	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.1
trust region repeats	-54.9428909511	262.0	262.0	262.0	2.0	34.0	9.3

Table 1321: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5766210466	7093.8	7093.8	7093.8	5.8	34.0	713.2
cch second order	-75.5766209818	140.0	79.0	79.0	nan	34.0	25.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-74.9930907594	34327.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.8
direct with trim	-75.5766210465	34339.0	10.0	10.0	nan	34.0	254.9
dual anneal	-75.5766210463	68016.2	14.2	14.2	1.0	34.0	599.5
trust region	-75.5766210465	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.3
trust region repeats	-75.5766210465	275.0	275.0	275.0	1.0	34.0	10.3

Table 1322: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1346302120	5460.8	5460.8	5460.8	3.4	34.0	665.2
cch second order	-100.1346301918	139.0	75.0	75.0	nan	34.0	8.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-98.8974120787	34369.0	0.0	0.0	nan	34.0	259.3
direct with trim	-100.1346302119	34382.0	11.0	11.0	nan	34.0	290.2
dual anneal	-100.1346302116	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	562.0
trust region	-100.1346302119	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	14.9
trust region repeats	-100.1346302119	273.0	273.0	273.0	1.0	34.0	10.6

Table 1323: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8015738152	5750.4	5750.4	5750.4	4.6	34.0	755.2
cch second order	-128.8015737749	150.0	84.0	84.0	nan	34.0	16.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-128.0491509034	34247.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.4
direct with trim	-128.8015738151	34256.0	7.0	7.0	nan	34.0	254.5
dual anneal	-128.8015738146	68022.8	20.8	20.8	1.0	34.0	545.2
trust region	-128.8015738151	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-128.8015738151	274.0	274.0	274.0	1.0	34.0	9.5

Table 1324: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7493269484	5553.8	5553.8	5553.8	4.6	34.0	763.3
cch second order	-161.7493270158	146.0	81.0	81.0	nan	34.0	14.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-159.9459728743	34101.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.9
direct with trim	-161.7493269483	34115.0	12.0	12.0	nan	34.0	252.1
dual anneal	-161.7493269476	68014.2	12.2	12.2	1.0	34.0	404.4
trust region	-161.7493269483	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	12.4
trust region repeats	-161.7493269483	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	10.9

Table 1325: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1390037139	3737.6	3737.6	3737.6	3.2	34.0	578.9
cch second order	-199.1390036528	197.0	104.0	104.0	nan	34.0	16.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-198.3362815920	34263.0	0.0	0.0	nan	34.0	258.3
direct with trim	-199.1390037139	34276.2	11.2	11.2	nan	34.0	254.6
dual anneal	-199.1390037130	68020.2	18.2	18.2	1.0	34.0	546.5
trust region	-199.1390037139	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	7.2
trust region repeats	-199.1390037139	279.0	279.0	279.0	1.0	34.0	9.5

Table 1326: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1225121073	4358.4	4358.4	4358.4	3.4	34.0	656.8
cch second order	-241.1225080663	182.0	98.0	98.0	nan	34.0	14.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-239.7458558561	34261.0	0.0	0.0	nan	34.0	309.7
direct with trim	-241.1225081379	34270.0	7.0	7.0	nan	34.0	248.5
dual anneal	-241.1225081367	68027.6	25.6	25.6	1.0	34.0	563.5
trust region	-241.1225081379	20.0	20.0	20.0	nan	34.0	7.4
trust region repeats	-241.1225081379	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	9.4

Table 1327: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8437545692	4786.6	4786.6	4786.6	4.2	34.0	650.0
cch second order	-287.8437545435	179.0	96.0	96.0	nan	34.0	14.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-283.9653149774	34287.0	0.0	0.0	nan	34.0	263.3
direct with trim	-287.8437545690	34301.0	12.0	12.0	nan	34.0	269.5
dual anneal	-287.8437545676	68027.6	25.6	25.6	1.0	34.0	531.8
trust region	-287.8437545690	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	7.2
trust region repeats	-287.8437545690	282.0	282.0	282.0	1.0	34.0	9.7

Table 1328: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4396528967	4343.0	4343.0	4343.0	4.4	34.0	513.6
cch second order	-339.4396475080	168.0	93.0	93.0	nan	34.0	13.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-334.9578265485	34107.0	0.0	0.0	nan	34.0	299.5
direct with trim	-339.4396475028	34120.0	11.0	11.0	nan	34.0	266.1
dual anneal	-339.4396475010	68023.4	21.4	21.4	1.0	34.0	550.0
trust region	-339.4396475028	21.0	21.0	21.0	nan	34.0	10.1
trust region repeats	-339.4396475028	280.0	280.0	280.0	1.0	34.0	10.3

Table 1329: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0408817080	3913.2	3913.2	3913.2	3.0	34.0	599.7
cch second order	-396.0408816331	192.0	104.0	104.0	nan	34.0	13.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-392.0866331786	34211.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.4
direct with trim	-396.0408817079	34226.0	13.0	13.0	nan	34.0	254.1
dual anneal	-396.0408817057	68025.8	23.8	23.8	1.0	34.0	596.0
trust region	-396.0408817079	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	7.5
trust region repeats	-396.0408817079	286.0	286.0	286.0	1.0	34.0	9.0

Table 1330: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7726051566	3620.2	3620.2	3620.2	2.8	34.0	602.3
cch second order	-457.7726052324	209.0	109.0	109.0	nan	34.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-456.6832731338	34289.0	0.0	0.0	nan	34.0	300.9
direct with trim	-457.7726051566	34301.0	10.0	10.0	nan	34.0	249.6
dual anneal	-457.7726051539	68025.0	23.0	23.0	1.0	34.0	594.9
trust region	-457.7726051566	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	7.6
trust region repeats	-457.7726051566	288.0	288.0	288.0	1.0	34.0	9.0

Table 1331: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7549752185	3039.6	3039.6	3039.6	3.0	34.0	583.0
cch second order	-524.7549752944	198.0	106.0	106.0	nan	34.0	16.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-520.9852568197	34077.0	0.0	0.0	nan	34.0	288.6
direct with trim	-524.7549752184	34089.0	10.0	10.0	nan	34.0	245.2
dual anneal	-524.7549752153	68026.2	24.2	24.2	1.0	34.0	531.8
trust region	-524.7549752184	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	15.2
trust region repeats	-524.7549752184	288.0	288.0	288.0	1.0	34.0	10.4

Table 1332: Ar

47.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.5666247149
He	basin hopping	-2.8183587332
Li	cch second order	-7.3227196411
Be	cch second order	-14.4841044659
B	cch second order	-24.6284290712
C	basin hopping	-38.0332956150
N	cch second order	-54.9428909686
O	basin hopping	-75.5766210466
F	basin hopping	-100.1346302120
Ne	basin hopping	-128.8015738152
Na	cch second order	-161.7493270158
Mg	basin hopping	-199.1390037139
Al	basin hopping	-241.1225121073
Si	basin hopping	-287.8437545692
P	basin hopping	-339.4396528967
S	basin hopping	-396.0408817080
Cl	cch second order	-457.7726052324
Ar	cch second order	-524.7549752944

Table 1333: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	180.7	95.1	95.1	nan	-169.7317750568	15.8
basin hopping	6146.2	6146.2	6146.2	5.5	-169.7317755855	735.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.1	13.1	13.1	nan	-169.7317750652	9.4
trust region repeats	267.4	267.4	267.4	1.1	-169.7317750652	9.8
direct	34190.1	0.0	0.0	nan	-168.3519459346	279.1
direct with trim	34201.7	9.6	9.6	nan	-169.7317750652	256.2
dual anneal	68018.7	16.7	16.7	1.0	-169.7317750644	551.6

Table 1334: Average (all systems)

48   34s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

48.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266188	681.0	681.0	0.0	nan	34.0	15.3
He	-1.4774505601	949.0	949.0	0.0	nan	34.0	17.5
Li	-4.1054250280	999.0	999.0	0.0	nan	34.0	17.6
Be	-8.4921856845	989.0	989.0	0.0	nan	34.0	12.2
B	-14.9258826071	951.0	951.0	0.0	nan	34.0	12.1
C	-23.6568740724	875.0	875.0	0.0	nan	34.0	19.9
N	-34.9084346360	783.0	783.0	0.0	nan	34.0	18.1
O	-48.8832264955	834.0	834.0	0.0	nan	34.0	16.3
F	-65.7675714861	837.0	837.0	0.0	nan	34.0	11.4
Ne	-85.7344464831	832.0	832.0	0.0	nan	34.0	16.4
Na	-108.9456785286	830.0	830.0	0.0	nan	34.0	15.8
Mg	-135.5536091029	961.0	961.0	0.0	nan	34.0	19.6
Al	-165.7023904802	970.0	970.0	0.0	nan	34.0	17.6
Si	-199.5290180952	983.0	983.0	0.0	nan	34.0	19.9
P	-237.1641679161	985.0	985.0	0.0	nan	34.0	12.3
S	-278.7328863728	966.0	966.0	0.0	nan	34.0	17.7
Cl	-324.3551664627	988.0	988.0	0.0	nan	34.0	17.3
Ar	-374.1464344516	975.0	975.0	0.0	nan	34.0	12.7

Table 1335: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266318	10786.2	10786.2	10786.2	8.8	34.0	1170.2
He	-1.4774505705	8801.6	8801.6	8801.6	9.4	34.0	995.8
Li	-4.1054250324	7839.6	7839.6	7839.6	6.6	34.0	971.5
Be	-8.4921856959	7096.2	7096.2	7096.2	5.6	34.0	1003.7
B	-14.9258826180	7137.0	7137.0	7137.0	7.6	34.0	861.1
C	-23.6568740825	5460.0	5460.0	5460.0	4.6	34.0	613.5
N	-34.9084346487	6252.0	6252.0	6252.0	5.0	34.0	732.6
O	-48.8832265091	4935.2	4935.2	4935.2	3.6	34.0	858.2
F	-65.7675715047	4933.4	4933.4	4933.4	4.4	34.0	721.1
Ne	-85.7344578968	4657.6	4657.6	4657.6	4.0	34.0	721.1
Na	-108.9456785695	4077.8	4077.8	4077.8	4.0	34.0	879.5
Mg	-135.5536091603	3444.0	3444.0	3444.0	4.2	34.0	665.6
Al	-165.7023905645	3714.0	3714.0	3714.0	3.8	34.0	810.3
Si	-199.5290182166	3463.6	3463.6	3463.6	2.6	34.0	665.3
P	-237.1641680875	3483.6	3483.6	3483.6	3.4	34.0	667.4
S	-278.7328866104	2996.0	2996.0	2996.0	2.2	34.0	551.8
Cl	-324.3551667857	2640.4	2640.4	2640.4	1.6	34.0	620.1
Ar	-374.1464348839	3256.4	3256.4	3256.4	2.8	34.0	582.5

Table 1336: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266440	172.0	87.0	87.0	nan	34.0	8.8
He	-1.4774505676	189.0	93.0	93.0	nan	34.0	9.0
Li	-4.1054249123	177.0	96.0	96.0	nan	34.0	16.6
Be	-8.4921857023	205.0	108.0	108.0	nan	34.0	9.3
B	-14.9258827558	209.0	106.0	106.0	nan	34.0	9.3
C	-23.6568742403	186.0	95.0	95.0	nan	34.0	9.0
N	-34.9084347581	196.0	98.0	98.0	nan	34.0	9.1
O	-48.8832263646	170.0	88.0	88.0	nan	34.0	9.2
F	-65.7675713649	165.0	85.0	85.0	nan	34.0	14.9
Ne	-85.7344463910	171.0	88.0	88.0	nan	34.0	8.8
Na	-108.9456784945	181.0	93.0	93.0	nan	34.0	9.0
Mg	-135.5536091349	165.0	91.0	91.0	nan	34.0	8.9
Al	-165.7023904344	158.0	83.0	83.0	nan	34.0	8.7
Si	-199.5290182878	168.0	90.0	90.0	nan	34.0	8.9
P	-237.1641679988	209.0	99.0	99.0	nan	34.0	13.8
S	-278.7328865266	224.0	110.0	110.0	nan	34.0	16.3
Cl	-324.3551668750	282.0	114.0	114.0	nan	34.0	9.9
Ar	-374.1464350764	222.0	108.0	108.0	nan	34.0	10.0

Table 1337: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1338: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618217734	34425.0	0.0	0.0	nan	34.0	284.0
He	-1.4772049178	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.7
Li	-4.1048383854	34033.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.0
Be	-8.4914127833	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	251.8
B	-14.9222553859	34325.0	0.0	0.0	nan	34.0	285.0
C	-23.6265154682	34095.0	0.0	0.0	nan	34.0	237.0
N	-34.8390384291	34277.0	0.0	0.0	nan	34.0	310.1
O	-48.8016799066	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.8
F	-65.7112363030	34219.0	0.0	0.0	nan	34.0	320.7
Ne	-85.5498355795	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	251.2
Na	-108.4240450376	34199.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.3
Mg	-135.4210423330	34035.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.2
Al	-165.5222914894	34253.0	0.0	0.0	nan	34.0	283.2
Si	-199.0966647369	34193.0	0.0	0.0	nan	34.0	302.7
P	-236.8782451780	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	318.5
S	-278.5071720118	34299.0	0.0	0.0	nan	34.0	300.9
Cl	-323.8977698859	34157.0	0.0	0.0	nan	34.0	333.0
Ar	-373.8290389729	34083.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.2

Table 1339: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266318	34432.0	5.0	5.0	nan	34.0	324.2
He	-1.4774505703	34264.0	5.0	5.0	nan	34.0	306.6
Li	-4.1054250312	34040.0	5.0	5.0	nan	34.0	309.6
Be	-8.4921856954	34232.0	5.0	5.0	nan	34.0	287.0
B	-14.9258826179	34333.0	6.0	6.0	nan	34.0	219.8
C	-23.6568740825	34104.0	7.0	7.0	nan	34.0	292.3
N	-34.9084346486	34286.0	7.0	7.0	nan	34.0	229.1
O	-48.8832265090	34305.0	6.0	6.0	nan	34.0	312.1
F	-65.7675715047	34227.0	6.0	6.0	nan	34.0	264.1
Ne	-85.7344465104	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	307.8
Na	-108.9456785694	34207.0	6.0	6.0	nan	34.0	295.7
Mg	-135.5536091603	34043.0	6.0	6.0	nan	34.0	284.2
Al	-165.7023905645	34262.0	7.0	7.0	nan	34.0	288.0
Si	-199.5290182165	34203.0	8.0	8.0	nan	34.0	321.1
P	-237.1641680875	34169.0	6.0	6.0	nan	34.0	276.2
S	-278.7328866103	34307.0	6.0	6.0	nan	34.0	294.4
Cl	-324.3551667857	34166.0	7.0	7.0	nan	34.0	254.8
Ar	-374.1464348839	34093.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.0

Table 1340: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266318	68009.4	7.4	7.4	1.0	34.0	570.4
He	-1.4774505703	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	616.5
Li	-4.1054250312	68010.8	8.8	8.8	1.0	34.0	606.0
Be	-8.4921856954	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	554.0
B	-14.9258826179	68011.2	9.2	9.2	1.0	34.0	609.1
C	-23.6568740824	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	500.4
N	-34.9084346486	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	595.3
O	-48.8832265090	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	624.2
F	-65.7675715046	68013.0	11.0	11.0	1.0	34.0	608.6
Ne	-85.7344465104	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	610.1
Na	-108.9456785693	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	554.3
Mg	-135.5536091601	68012.8	10.8	10.8	1.0	34.0	592.3
Al	-165.7023905643	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	659.7
Si	-199.5290182163	68016.6	14.6	14.6	1.0	34.0	593.4
P	-237.1641680872	68015.6	13.6	13.6	1.0	34.0	649.6
S	-278.7328866099	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	577.7
Cl	-324.3551667853	68020.0	18.0	18.0	1.0	34.0	572.6
Ar	-374.1464348833	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	621.3

Table 1341: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266318	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.9
He	-1.4774505703	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
Li	-4.1054250312	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	10.4
Be	-8.4921856954	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	14.7
B	-14.9258826179	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.3
C	-23.6568740824	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.8
N	-34.9084346486	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.6
O	-48.8832265090	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.7
F	-65.7675715047	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.9
Ne	-85.7344465104	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.7
Na	-108.9456785694	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	9.3
Mg	-135.5536091603	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
Al	-165.7023905645	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
Si	-199.5290182165	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	11.8
P	-237.1641680875	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.7
S	-278.7328866103	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	8.6
Cl	-324.3551667857	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	7.3
Ar	-374.1464348839	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	7.0

Table 1342: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266319	232.0	232.0	232.0	1.0	34.0	9.1
He	-1.4774505703	234.0	234.0	234.0	1.0	34.0	8.8
Li	-4.1054250312	232.0	232.0	232.0	1.0	34.0	8.2
Be	-8.4921856954	231.0	231.0	231.0	1.0	34.0	8.7
B	-14.9258826179	239.0	239.0	239.0	1.0	34.0	9.4
C	-23.6568740824	241.0	241.0	241.0	1.0	34.0	9.4
N	-34.9084346486	241.0	241.0	241.0	1.0	34.0	8.4
O	-48.8832265090	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	9.0
F	-65.7675715047	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	7.9
Ne	-85.7344465104	253.0	253.0	253.0	1.0	34.0	8.9
Na	-108.9456785694	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	8.7
Mg	-135.5536091603	257.0	257.0	257.0	1.0	34.0	8.6
Al	-165.7023905645	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	8.7
Si	-199.5290182165	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	8.8
P	-237.1641680875	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	9.2
S	-278.7328866103	261.0	261.0	261.0	1.0	34.0	9.0
Cl	-324.3551667857	262.0	262.0	262.0	1.0	34.0	8.8
Ar	-374.1464348839	264.0	264.0	264.0	1.0	34.0	9.4

Table 1343: trust region repeats

48.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618266188	681.0	681.0	0.0	nan	34.0	15.3
basin hopping	-0.2618266318	10786.2	10786.2	10786.2	8.8	34.0	1170.2
cch second order	-0.2618266440	172.0	87.0	87.0	nan	34.0	8.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.2618217734	34425.0	0.0	0.0	nan	34.0	284.0
direct with trim	-0.2618266318	34432.0	5.0	5.0	nan	34.0	324.2
dual anneal	-0.2618266318	68009.4	7.4	7.4	1.0	34.0	570.4
trust region	-0.2618266318	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	10.9
trust region repeats	-0.2618266319	232.0	232.0	232.0	1.0	34.0	9.1

Table 1344: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774505601	949.0	949.0	0.0	nan	34.0	17.5
basin hopping	-1.4774505705	8801.6	8801.6	8801.6	9.4	34.0	995.8
cch second order	-1.4774505676	189.0	93.0	93.0	nan	34.0	9.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1.4772049178	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.7
direct with trim	-1.4774505703	34264.0	5.0	5.0	nan	34.0	306.6
dual anneal	-1.4774505703	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	616.5
trust region	-1.4774505703	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-1.4774505703	234.0	234.0	234.0	1.0	34.0	8.8

Table 1345: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054250280	999.0	999.0	0.0	nan	34.0	17.6
basin hopping	-4.1054250324	7839.6	7839.6	7839.6	6.6	34.0	971.5
cch second order	-4.1054249123	177.0	96.0	96.0	nan	34.0	16.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-4.1048383854	34033.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.0
direct with trim	-4.1054250312	34040.0	5.0	5.0	nan	34.0	309.6
dual anneal	-4.1054250312	68010.8	8.8	8.8	1.0	34.0	606.0
trust region	-4.1054250312	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	10.4
trust region repeats	-4.1054250312	232.0	232.0	232.0	1.0	34.0	8.2

Table 1346: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921856845	989.0	989.0	0.0	nan	34.0	12.2
basin hopping	-8.4921856959	7096.2	7096.2	7096.2	5.6	34.0	1003.7
cch second order	-8.4921857023	205.0	108.0	108.0	nan	34.0	9.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.4914127833	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	251.8
direct with trim	-8.4921856954	34232.0	5.0	5.0	nan	34.0	287.0
dual anneal	-8.4921856954	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	554.0
trust region	-8.4921856954	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	14.7
trust region repeats	-8.4921856954	231.0	231.0	231.0	1.0	34.0	8.7

Table 1347: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258826071	951.0	951.0	0.0	nan	34.0	12.1
basin hopping	-14.9258826180	7137.0	7137.0	7137.0	7.6	34.0	861.1
cch second order	-14.9258827558	209.0	106.0	106.0	nan	34.0	9.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.9222553859	34325.0	0.0	0.0	nan	34.0	285.0
direct with trim	-14.9258826179	34333.0	6.0	6.0	nan	34.0	219.8
dual anneal	-14.9258826179	68011.2	9.2	9.2	1.0	34.0	609.1
trust region	-14.9258826179	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.3
trust region repeats	-14.9258826179	239.0	239.0	239.0	1.0	34.0	9.4

Table 1348: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568740724	875.0	875.0	0.0	nan	34.0	19.9
basin hopping	-23.6568740825	5460.0	5460.0	5460.0	4.6	34.0	613.5
cch second order	-23.6568742403	186.0	95.0	95.0	nan	34.0	9.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-23.6265154682	34095.0	0.0	0.0	nan	34.0	237.0
direct with trim	-23.6568740825	34104.0	7.0	7.0	nan	34.0	292.3
dual anneal	-23.6568740824	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	500.4
trust region	-23.6568740824	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-23.6568740824	241.0	241.0	241.0	1.0	34.0	9.4

Table 1349: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9084346360	783.0	783.0	0.0	nan	34.0	18.1
basin hopping	-34.9084346487	6252.0	6252.0	6252.0	5.0	34.0	732.6
cch second order	-34.9084347581	196.0	98.0	98.0	nan	34.0	9.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-34.8390384291	34277.0	0.0	0.0	nan	34.0	310.1
direct with trim	-34.9084346486	34286.0	7.0	7.0	nan	34.0	229.1
dual anneal	-34.9084346486	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	595.3
trust region	-34.9084346486	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	11.6
trust region repeats	-34.9084346486	241.0	241.0	241.0	1.0	34.0	8.4

Table 1350: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8832264955	834.0	834.0	0.0	nan	34.0	16.3
basin hopping	-48.8832265091	4935.2	4935.2	4935.2	3.6	34.0	858.2
cch second order	-48.8832263646	170.0	88.0	88.0	nan	34.0	9.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-48.8016799066	34297.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.8
direct with trim	-48.8832265090	34305.0	6.0	6.0	nan	34.0	312.1
dual anneal	-48.8832265090	68013.2	11.2	11.2	1.0	34.0	624.2
trust region	-48.8832265090	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.7
trust region repeats	-48.8832265090	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	9.0

Table 1351: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7675714861	837.0	837.0	0.0	nan	34.0	11.4
basin hopping	-65.7675715047	4933.4	4933.4	4933.4	4.4	34.0	721.1
cch second order	-65.7675713649	165.0	85.0	85.0	nan	34.0	14.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-65.7112363030	34219.0	0.0	0.0	nan	34.0	320.7
direct with trim	-65.7675715047	34227.0	6.0	6.0	nan	34.0	264.1
dual anneal	-65.7675715046	68013.0	11.0	11.0	1.0	34.0	608.6
trust region	-65.7675715047	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.9
trust region repeats	-65.7675715047	243.0	243.0	243.0	1.0	34.0	7.9

Table 1352: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7344464831	832.0	832.0	0.0	nan	34.0	16.4
basin hopping	-85.7344578968	4657.6	4657.6	4657.6	4.0	34.0	721.1
cch second order	-85.7344463910	171.0	88.0	88.0	nan	34.0	8.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-85.5498355795	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	251.2
direct with trim	-85.7344465104	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	307.8
dual anneal	-85.7344465104	68014.0	12.0	12.0	1.0	34.0	610.1
trust region	-85.7344465104	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	6.7
trust region repeats	-85.7344465104	253.0	253.0	253.0	1.0	34.0	8.9

Table 1353: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9456785286	830.0	830.0	0.0	nan	34.0	15.8
basin hopping	-108.9456785695	4077.8	4077.8	4077.8	4.0	34.0	879.5
cch second order	-108.9456784945	181.0	93.0	93.0	nan	34.0	9.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-108.4240450376	34199.0	0.0	0.0	nan	34.0	287.3
direct with trim	-108.9456785694	34207.0	6.0	6.0	nan	34.0	295.7
dual anneal	-108.9456785693	68013.6	11.6	11.6	1.0	34.0	554.3
trust region	-108.9456785694	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	9.3
trust region repeats	-108.9456785694	256.0	256.0	256.0	1.0	34.0	8.7

Table 1354: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5536091029	961.0	961.0	0.0	nan	34.0	19.6
basin hopping	-135.5536091603	3444.0	3444.0	3444.0	4.2	34.0	665.6
cch second order	-135.5536091349	165.0	91.0	91.0	nan	34.0	8.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-135.4210423330	34035.0	0.0	0.0	nan	34.0	312.2
direct with trim	-135.5536091603	34043.0	6.0	6.0	nan	34.0	284.2
dual anneal	-135.5536091601	68012.8	10.8	10.8	1.0	34.0	592.3
trust region	-135.5536091603	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
trust region repeats	-135.5536091603	257.0	257.0	257.0	1.0	34.0	8.6

Table 1355: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7023904802	970.0	970.0	0.0	nan	34.0	17.6
basin hopping	-165.7023905645	3714.0	3714.0	3714.0	3.8	34.0	810.3
cch second order	-165.7023904344	158.0	83.0	83.0	nan	34.0	8.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-165.5222914894	34253.0	0.0	0.0	nan	34.0	283.2
direct with trim	-165.7023905645	34262.0	7.0	7.0	nan	34.0	288.0
dual anneal	-165.7023905643	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	659.7
trust region	-165.7023905645	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	10.5
trust region repeats	-165.7023905645	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	8.7

Table 1356: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5290180952	983.0	983.0	0.0	nan	34.0	19.9
basin hopping	-199.5290182166	3463.6	3463.6	3463.6	2.6	34.0	665.3
cch second order	-199.5290182878	168.0	90.0	90.0	nan	34.0	8.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-199.0966647369	34193.0	0.0	0.0	nan	34.0	302.7
direct with trim	-199.5290182165	34203.0	8.0	8.0	nan	34.0	321.1
dual anneal	-199.5290182163	68016.6	14.6	14.6	1.0	34.0	593.4
trust region	-199.5290182165	12.0	12.0	12.0	nan	34.0	11.8
trust region repeats	-199.5290182165	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	8.8

Table 1357: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1641679161	985.0	985.0	0.0	nan	34.0	12.3
basin hopping	-237.1641680875	3483.6	3483.6	3483.6	3.4	34.0	667.4
cch second order	-237.1641679988	209.0	99.0	99.0	nan	34.0	13.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-236.8782451780	34161.0	0.0	0.0	nan	34.0	318.5
direct with trim	-237.1641680875	34169.0	6.0	6.0	nan	34.0	276.2
dual anneal	-237.1641680872	68015.6	13.6	13.6	1.0	34.0	649.6
trust region	-237.1641680875	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	11.7
trust region repeats	-237.1641680875	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	9.2

Table 1358: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7328863728	966.0	966.0	0.0	nan	34.0	17.7
basin hopping	-278.7328866104	2996.0	2996.0	2996.0	2.2	34.0	551.8
cch second order	-278.7328865266	224.0	110.0	110.0	nan	34.0	16.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-278.5071720118	34299.0	0.0	0.0	nan	34.0	300.9
direct with trim	-278.7328866103	34307.0	6.0	6.0	nan	34.0	294.4
dual anneal	-278.7328866099	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	577.7
trust region	-278.7328866103	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	8.6
trust region repeats	-278.7328866103	261.0	261.0	261.0	1.0	34.0	9.0

Table 1359: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3551664627	988.0	988.0	0.0	nan	34.0	17.3
basin hopping	-324.3551667857	2640.4	2640.4	2640.4	1.6	34.0	620.1
cch second order	-324.3551668750	282.0	114.0	114.0	nan	34.0	9.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-323.8977698859	34157.0	0.0	0.0	nan	34.0	333.0
direct with trim	-324.3551667857	34166.0	7.0	7.0	nan	34.0	254.8
dual anneal	-324.3551667853	68020.0	18.0	18.0	1.0	34.0	572.6
trust region	-324.3551667857	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	7.3
trust region repeats	-324.3551667857	262.0	262.0	262.0	1.0	34.0	8.8

Table 1360: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1464344516	975.0	975.0	0.0	nan	34.0	12.7
basin hopping	-374.1464348839	3256.4	3256.4	3256.4	2.8	34.0	582.5
cch second order	-374.1464350764	222.0	108.0	108.0	nan	34.0	10.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-373.8290389729	34083.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.2
direct with trim	-374.1464348839	34093.0	8.0	8.0	nan	34.0	292.0
dual anneal	-374.1464348833	68012.4	10.4	10.4	1.0	34.0	621.3
trust region	-374.1464348839	13.0	13.0	13.0	nan	34.0	7.0
trust region repeats	-374.1464348839	264.0	264.0	264.0	1.0	34.0	9.4

Table 1361: Ar

48.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.2618266440
He	basin hopping	-1.4774505705
Li	basin hopping	-4.1054250324
Be	cch second order	-8.4921857023
B	cch second order	-14.9258827558
C	cch second order	-23.6568742403
N	cch second order	-34.9084347581
O	basin hopping	-48.8832265091
F	basin hopping	-65.7675715047
Ne	basin hopping	-85.7344578968
Na	basin hopping	-108.9456785695
Mg	basin hopping	-135.5536091603
Al	basin hopping	-165.7023905645
Si	cch second order	-199.5290182878
P	basin hopping	-237.1641680875
S	basin hopping	-278.7328866104
Cl	cch second order	-324.3551668750
Ar	cch second order	-374.1464350764

Table 1362: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
cch second order	191.6	96.2	96.2	nan	-117.3523709183	10.5
acevedo	910.4	910.4	0.0	nan	-117.3523708379	16.1
basin hopping	5276.4	5276.4	5276.4	4.7	-117.3523715594	782.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	10.8	10.8	10.8	nan	-117.3523709267	9.8
trust region repeats	248.3	248.3	248.3	1.0	-117.3523709267	8.8
direct	34199.1	0.0	0.0	nan	-117.1867838099	293.1
direct with trim	34207.3	6.2	6.2	nan	-117.3523709267	286.6
dual anneal	68013.4	11.4	11.4	1.0	-117.3523709265	595.3

Table 1363: Average (all systems)

49   34s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

49.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1364: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340882	9291.8	9291.8	9291.8	8.0	34.0	1213.8
He	-2.7236398000	6405.0	6405.0	6405.0	6.2	34.0	971.4
Li	-8.5258250255	4840.4	4840.4	4840.4	7.4	34.0	857.5
Be	-19.3528901712	4087.0	4087.0	4087.0	4.2	34.0	911.7
B	-36.7291386072	3635.2	3635.2	3635.2	2.6	34.0	733.0
C	-62.1695473785	3422.0	3422.0	3422.0	2.4	34.0	755.7
N	-97.1827258286	2887.2	2887.2	2887.2	2.2	34.0	638.4
O	-143.2726016965	2497.2	2497.2	2497.2	2.2	34.0	688.4
F	-201.9394867121	2112.6	2112.6	2112.6	1.6	34.0	601.9
Ne	-274.6807989053	1987.0	1987.0	1987.0	1.0	34.0	461.3
Na	-362.9915779086	2016.4	2016.4	2016.4	1.6	34.0	608.5
Mg	-468.3648670668	2031.0	2031.0	2031.0	1.2	34.0	590.8
Al	-592.2920056785	2032.6	2032.6	2032.6	1.0	34.0	660.0
Si	-736.2628581654	2004.4	2004.4	2004.4	1.0	34.0	675.9
P	-901.7659974549	2060.6	2060.6	2060.6	1.0	34.0	608.4
S	-1090.2888543489	2011.6	2011.6	2011.6	1.2	34.0	559.7
Cl	-1303.3178410056	2219.2	2219.2	2219.2	1.2	34.0	587.8
Ar	-1542.3384543016	2047.0	2047.0	2047.0	1.0	34.0	443.1

Table 1365: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340350	200.0	102.0	102.0	nan	34.0	15.0
He	-2.7236399946	207.0	104.0	104.0	nan	34.0	9.2
Li	-8.5258243477	259.0	143.0	143.0	nan	34.0	17.1
Be	-19.3528912654	270.0	149.0	149.0	nan	34.0	10.6
B	-36.7291387756	332.0	182.0	182.0	nan	34.0	18.5
C	-62.1695453935	398.0	211.0	211.0	nan	34.0	18.9
N	-97.1827273174	453.0	247.0	247.0	nan	34.0	11.6
O	-143.2726020161	525.0	285.0	285.0	nan	34.0	14.1
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1366: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1367: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065289065	31133.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.7
He	-2.7235188446	34485.0	0.0	0.0	nan	34.0	254.1
Li	-8.5256387136	34233.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.6
Be	-19.3514227363	29421.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.8
B	-36.7264158476	34405.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.0
C	-62.1496980625	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.9
N	-97.1654950774	34469.0	0.0	0.0	nan	34.0	296.3
O	-143.2520645961	34273.0	0.0	0.0	nan	34.0	256.6
F	-201.8816820361	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.3
Ne	-274.6320938161	34341.0	0.0	0.0	nan	34.0	292.9
Na	-362.9322820821	34341.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.6
Mg	-468.3453133620	34131.0	0.0	0.0	nan	34.0	281.1
Al	-592.1758955118	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	268.0
Si	-736.1462512953	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.4
P	-901.5380258330	34127.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.8
S	-1090.0632296196	34047.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.4
Cl	-1303.2586146590	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	324.6
Ar	-1542.0751547471	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.7

Table 1368: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340880	31140.0	5.0	5.0	nan	34.0	233.9
He	-2.7236397998	34496.0	9.0	9.0	nan	34.0	264.4
Li	-8.5258191722	34242.0	7.0	7.0	nan	34.0	296.0
Be	-19.3528653743	29429.0	6.0	6.0	nan	34.0	267.0
B	-36.7291386071	34412.0	5.0	5.0	nan	34.0	240.5
C	-62.1695473785	34323.0	6.0	6.0	nan	34.0	224.7
N	-97.1827217568	34482.0	11.0	11.0	nan	34.0	269.0
O	-143.2726016965	34281.0	6.0	6.0	nan	34.0	284.4
F	-201.9394867121	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	248.3
Ne	-274.6807989053	34349.0	6.0	6.0	nan	34.0	278.8
Na	-362.9915779086	34349.0	6.0	6.0	nan	34.0	292.6
Mg	-468.3648670668	34139.0	6.0	6.0	nan	34.0	287.0
Al	-592.2920056785	34265.0	6.0	6.0	nan	34.0	277.2
Si	-736.2628581654	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	264.9
P	-901.7659974549	34135.0	6.0	6.0	nan	34.0	249.9
S	-1090.2888543489	34055.0	6.0	6.0	nan	34.0	294.8
Cl	-1303.3178410056	34238.0	11.0	11.0	nan	34.0	306.0
Ar	-1542.3384543016	34125.0	6.0	6.0	nan	34.0	263.7

Table 1369: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340880	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	633.6
He	-2.7236397998	68010.4	8.4	8.4	1.0	34.0	634.7
Li	-8.5258250254	68010.8	8.8	8.8	1.0	34.0	538.0
Be	-19.3528901710	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	641.0
B	-36.7291386064	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	618.9
C	-62.1695473767	68013.8	11.8	11.8	1.0	34.0	551.6
N	-97.1827258243	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	575.5
O	-143.2726016875	68016.0	14.0	14.0	1.0	34.0	623.3
F	-201.9394866947	68017.8	15.8	15.8	1.0	34.0	541.8
Ne	-274.6807988736	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	613.7
Na	-362.9915778541	68018.6	16.6	16.6	1.0	34.0	535.5
Mg	-468.3648669774	68022.2	20.2	20.2	1.0	34.0	583.7
Al	-592.2920055374	68021.8	19.8	19.8	1.0	34.0	613.4
Si	-736.2628579498	68023.2	21.2	21.2	1.0	34.0	593.2
P	-901.7659971347	68025.8	23.8	23.8	1.0	34.0	554.8
S	-1090.2888538850	68027.4	25.4	25.4	1.0	34.0	602.8
Cl	-1303.3178403482	68036.6	34.6	34.6	1.0	34.0	649.4
Ar	-1542.3384533879	68030.8	28.8	28.8	1.0	34.0	554.1

Table 1370: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340880	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	6.9
He	-2.7236398000	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.8
Li	-8.5258250255	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	12.8
Be	-19.3528901712	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.8
B	-36.7291386071	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	7.0
C	-62.1695473785	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.2
N	-97.1827258286	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.1
O	-143.2726016965	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	13.2
F	-201.9394867121	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	7.4
Ne	-274.6807989053	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	10.6
Na	-362.9915779086	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	15.0
Mg	-468.3648670668	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	15.6
Al	-592.2920056785	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	10.2
Si	-736.2628581654	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	7.0
P	-901.7659974549	21.0	21.0	21.0	nan	34.0	22.9
S	-1090.2888543489	22.0	22.0	22.0	nan	34.0	17.2
Cl	-1303.3178410056	30.0	30.0	30.0	nan	34.0	9.6
Ar	-1542.3384543016	26.0	26.0	26.0	nan	34.0	7.7

Table 1371: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340882	156.0	156.0	156.0	1.0	34.0	9.4
He	-2.7236397998	185.0	185.0	185.0	1.0	34.0	11.3
Li	-8.5258250255	216.0	216.0	216.0	1.0	34.0	10.5
Be	-19.3528901712	195.0	195.0	195.0	1.0	34.0	10.0
B	-36.7291386071	203.0	203.0	203.0	1.0	34.0	9.7
C	-62.1695473785	213.0	213.0	213.0	1.0	34.0	10.1
N	-97.1827258286	226.0	226.0	226.0	2.0	34.0	10.6
O	-143.2726016965	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	12.0
F	-201.9394867121	269.0	269.0	269.0	1.0	34.0	11.5
Ne	-274.6807989053	302.0	302.0	302.0	1.0	34.0	12.0
Na	-362.9915779086	339.0	339.0	339.0	1.0	34.0	12.3
Mg	-468.3648670668	357.0	357.0	357.0	1.0	34.0	13.1
Al	-592.2920056785	390.0	390.0	390.0	1.0	34.0	14.0
Si	-736.2628581654	421.0	421.0	421.0	1.0	34.0	14.8
P	-901.7659974549	458.0	458.0	458.0	1.0	34.0	13.0
S	-1090.2888543489	484.0	484.0	484.0	1.0	34.0	16.0
Cl	-1303.3178410056	633.0	633.0	633.0	1.0	34.0	15.6
Ar	-1542.3384543016	575.0	575.0	575.0	1.0	34.0	17.5

Table 1372: trust region repeats

49.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065340882	9291.8	9291.8	9291.8	8.0	34.0	1213.8
cch second order	-0.4065340350	200.0	102.0	102.0	nan	34.0	15.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.4065289065	31133.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.7
direct with trim	-0.4065340880	31140.0	5.0	5.0	nan	34.0	233.9
dual anneal	-0.4065340880	68010.0	8.0	8.0	1.0	34.0	633.6
trust region	-0.4065340880	8.0	8.0	8.0	nan	34.0	6.9
trust region repeats	-0.4065340882	156.0	156.0	156.0	1.0	34.0	9.4

Table 1373: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236398000	6405.0	6405.0	6405.0	6.2	34.0	971.4
cch second order	-2.7236399946	207.0	104.0	104.0	nan	34.0	9.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.7235188446	34485.0	0.0	0.0	nan	34.0	254.1
direct with trim	-2.7236397998	34496.0	9.0	9.0	nan	34.0	264.4
dual anneal	-2.7236397998	68010.4	8.4	8.4	1.0	34.0	634.7
trust region	-2.7236398000	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-2.7236397998	185.0	185.0	185.0	1.0	34.0	11.3

Table 1374: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5258250255	4840.4	4840.4	4840.4	7.4	34.0	857.5
cch second order	-8.5258243477	259.0	143.0	143.0	nan	34.0	17.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.5256387136	34233.0	0.0	0.0	nan	34.0	297.6
direct with trim	-8.5258191722	34242.0	7.0	7.0	nan	34.0	296.0
dual anneal	-8.5258250254	68010.8	8.8	8.8	1.0	34.0	538.0
trust region	-8.5258250255	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	12.8
trust region repeats	-8.5258250255	216.0	216.0	216.0	1.0	34.0	10.5

Table 1375: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3528901712	4087.0	4087.0	4087.0	4.2	34.0	911.7
cch second order	-19.3528912654	270.0	149.0	149.0	nan	34.0	10.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-19.3514227363	29421.0	0.0	0.0	nan	34.0	272.8
direct with trim	-19.3528653743	29429.0	6.0	6.0	nan	34.0	267.0
dual anneal	-19.3528901710	68012.2	10.2	10.2	1.0	34.0	641.0
trust region	-19.3528901712	9.0	9.0	9.0	nan	34.0	6.8
trust region repeats	-19.3528901712	195.0	195.0	195.0	1.0	34.0	10.0

Table 1376: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7291386072	3635.2	3635.2	3635.2	2.6	34.0	733.0
cch second order	-36.7291387756	332.0	182.0	182.0	nan	34.0	18.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-36.7264158476	34405.0	0.0	0.0	nan	34.0	271.0
direct with trim	-36.7291386071	34412.0	5.0	5.0	nan	34.0	240.5
dual anneal	-36.7291386064	68014.4	12.4	12.4	1.0	34.0	618.9
trust region	-36.7291386071	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	7.0
trust region repeats	-36.7291386071	203.0	203.0	203.0	1.0	34.0	9.7

Table 1377: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1695473785	3422.0	3422.0	3422.0	2.4	34.0	755.7
cch second order	-62.1695453935	398.0	211.0	211.0	nan	34.0	18.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-62.1496980625	34315.0	0.0	0.0	nan	34.0	276.9
direct with trim	-62.1695473785	34323.0	6.0	6.0	nan	34.0	224.7
dual anneal	-62.1695473767	68013.8	11.8	11.8	1.0	34.0	551.6
trust region	-62.1695473785	10.0	10.0	10.0	nan	34.0	9.2
trust region repeats	-62.1695473785	213.0	213.0	213.0	1.0	34.0	10.1

Table 1378: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1827258286	2887.2	2887.2	2887.2	2.2	34.0	638.4
cch second order	-97.1827273174	453.0	247.0	247.0	nan	34.0	11.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-97.1654950774	34469.0	0.0	0.0	nan	34.0	296.3
direct with trim	-97.1827217568	34482.0	11.0	11.0	nan	34.0	269.0
dual anneal	-97.1827258243	68015.2	13.2	13.2	1.0	34.0	575.5
trust region	-97.1827258286	11.0	11.0	11.0	nan	34.0	7.1
trust region repeats	-97.1827258286	226.0	226.0	226.0	2.0	34.0	10.6

Table 1379: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2726016965	2497.2	2497.2	2497.2	2.2	34.0	688.4
cch second order	-143.2726020161	525.0	285.0	285.0	nan	34.0	14.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-143.2520645961	34273.0	0.0	0.0	nan	34.0	256.6
direct with trim	-143.2726016965	34281.0	6.0	6.0	nan	34.0	284.4
dual anneal	-143.2726016875	68016.0	14.0	14.0	1.0	34.0	623.3
trust region	-143.2726016965	14.0	14.0	14.0	nan	34.0	13.2
trust region repeats	-143.2726016965	260.0	260.0	260.0	1.0	34.0	12.0

Table 1380: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9394867121	2112.6	2112.6	2112.6	1.6	34.0	601.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-201.8816820361	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.3
direct with trim	-201.9394867121	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	248.3
dual anneal	-201.9394866947	68017.8	15.8	15.8	1.0	34.0	541.8
trust region	-201.9394867121	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	7.4
trust region repeats	-201.9394867121	269.0	269.0	269.0	1.0	34.0	11.5

Table 1381: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6807989053	1987.0	1987.0	1987.0	1.0	34.0	461.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-274.6320938161	34341.0	0.0	0.0	nan	34.0	292.9
direct with trim	-274.6807989053	34349.0	6.0	6.0	nan	34.0	278.8
dual anneal	-274.6807988736	68021.2	19.2	19.2	1.0	34.0	613.7
trust region	-274.6807989053	16.0	16.0	16.0	nan	34.0	10.6
trust region repeats	-274.6807989053	302.0	302.0	302.0	1.0	34.0	12.0

Table 1382: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9915779086	2016.4	2016.4	2016.4	1.6	34.0	608.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-362.9322820821	34341.0	0.0	0.0	nan	34.0	291.6
direct with trim	-362.9915779086	34349.0	6.0	6.0	nan	34.0	292.6
dual anneal	-362.9915778541	68018.6	16.6	16.6	1.0	34.0	535.5
trust region	-362.9915779086	15.0	15.0	15.0	nan	34.0	15.0
trust region repeats	-362.9915779086	339.0	339.0	339.0	1.0	34.0	12.3

Table 1383: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3648670668	2031.0	2031.0	2031.0	1.2	34.0	590.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-468.3453133620	34131.0	0.0	0.0	nan	34.0	281.1
direct with trim	-468.3648670668	34139.0	6.0	6.0	nan	34.0	287.0
dual anneal	-468.3648669774	68022.2	20.2	20.2	1.0	34.0	583.7
trust region	-468.3648670668	18.0	18.0	18.0	nan	34.0	15.6
trust region repeats	-468.3648670668	357.0	357.0	357.0	1.0	34.0	13.1

Table 1384: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2920056785	2032.6	2032.6	2032.6	1.0	34.0	660.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-592.1758955118	34257.0	0.0	0.0	nan	34.0	268.0
direct with trim	-592.2920056785	34265.0	6.0	6.0	nan	34.0	277.2
dual anneal	-592.2920055374	68021.8	19.8	19.8	1.0	34.0	613.4
trust region	-592.2920056785	17.0	17.0	17.0	nan	34.0	10.2
trust region repeats	-592.2920056785	390.0	390.0	390.0	1.0	34.0	14.0

Table 1385: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2628581654	2004.4	2004.4	2004.4	1.0	34.0	675.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-736.1462512953	34051.0	0.0	0.0	nan	34.0	321.4
direct with trim	-736.2628581654	34059.0	6.0	6.0	nan	34.0	264.9
dual anneal	-736.2628579498	68023.2	21.2	21.2	1.0	34.0	593.2
trust region	-736.2628581654	19.0	19.0	19.0	nan	34.0	7.0
trust region repeats	-736.2628581654	421.0	421.0	421.0	1.0	34.0	14.8

Table 1386: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7659974549	2060.6	2060.6	2060.6	1.0	34.0	608.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-901.5380258330	34127.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.8
direct with trim	-901.7659974549	34135.0	6.0	6.0	nan	34.0	249.9
dual anneal	-901.7659971347	68025.8	23.8	23.8	1.0	34.0	554.8
trust region	-901.7659974549	21.0	21.0	21.0	nan	34.0	22.9
trust region repeats	-901.7659974549	458.0	458.0	458.0	1.0	34.0	13.0

Table 1387: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2888543489	2011.6	2011.6	2011.6	1.2	34.0	559.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1090.0632296196	34047.0	0.0	0.0	nan	34.0	298.4
direct with trim	-1090.2888543489	34055.0	6.0	6.0	nan	34.0	294.8
dual anneal	-1090.2888538850	68027.4	25.4	25.4	1.0	34.0	602.8
trust region	-1090.2888543489	22.0	22.0	22.0	nan	34.0	17.2
trust region repeats	-1090.2888543489	484.0	484.0	484.0	1.0	34.0	16.0

Table 1388: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3178410056	2219.2	2219.2	2219.2	1.2	34.0	587.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1303.2586146590	34225.0	0.0	0.0	nan	34.0	324.6
direct with trim	-1303.3178410056	34238.0	11.0	11.0	nan	34.0	306.0
dual anneal	-1303.3178403482	68036.6	34.6	34.6	1.0	34.0	649.4
trust region	-1303.3178410056	30.0	30.0	30.0	nan	34.0	9.6
trust region repeats	-1303.3178410056	633.0	633.0	633.0	1.0	34.0	15.6

Table 1389: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3384543016	2047.0	2047.0	2047.0	1.0	34.0	443.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1542.0751547471	34117.0	0.0	0.0	nan	34.0	311.7
direct with trim	-1542.3384543016	34125.0	6.0	6.0	nan	34.0	263.7
dual anneal	-1542.3384533879	68030.8	28.8	28.8	1.0	34.0	554.1
trust region	-1542.3384543016	26.0	26.0	26.0	nan	34.0	7.7
trust region repeats	-1542.3384543016	575.0	575.0	575.0	1.0	34.0	17.5

Table 1390: Ar

49.3　Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.4065340882
He	cch second order	-2.7236399946
Li	basin hopping	-8.5258250255
Be	cch second order	-19.3528912654
B	cch second order	-36.7291387756
C	basin hopping	-62.1695473785
N	cch second order	-97.1827273174
O	cch second order	-143.2726020161
F	basin hopping	-201.9394867121
Ne	basin hopping	-274.6807989053
Na	basin hopping	-362.9915779086
Mg	trust region	-468.3648670668
Al	basin hopping	-592.2920056785
Si	basin hopping	-736.2628581654
P	basin hopping	-901.7659974549
S	basin hopping	-1090.2888543489
Cl	basin hopping	-1303.3178410056
Ar	basin hopping	-1542.3384543016

Table 1391: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	330.5	177.9	177.9	nan	-46.2953628932	14.4
basin hopping	3199.3	3199.3	3199.3	2.6	-435.8114246746	698.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.7	15.7	15.7	nan	-435.8114246746	10.7
trust region repeats	326.8	326.8	326.8	1.1	-435.8114246746	12.4
direct	33801.2	0.0	0.0	nan	-435.7416292082	287.7
direct with trim	33809.9	6.7	6.7	nan	-435.8114227456	269.0
dual anneal	68019.3	17.3	17.3	1.0	-435.8114245123	592.2

Table 1392: Average (all systems)

50 42s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

50.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1393: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	-157.7342179619	21021.0	21021.0	21021.0	1.0	42.0	3449.7
C	-248.6854121414	20523.0	20523.0	20523.0	1.0	42.0	3107.3
N	-363.4470320388	20757.0	20757.0	20757.0	5.0	42.0	3019.9
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	-866.6951319047	20825.0	20825.0	20825.0	4.0	42.0	2742.6
Na	-1118.3031851848	20031.0	20031.0	20031.0	1.0	42.0	2651.4
Mg	-1378.3356046711	20645.7	20645.7	20645.7	3.3	42.0	3012.2
Al	-1676.4513049044	20563.3	20563.3	20563.3	3.0	42.0	2896.8
Si	-2013.8583192573	19300.0	19300.0	19300.0	1.3	42.0	2685.4
P	-2405.8731000298	19708.5	19708.5	19708.5	1.0	42.0	2878.7
S	-2829.6072557358	19685.8	19685.8	19685.8	1.0	42.0	2413.9
Cl	-3261.3368773404	19872.4	19872.4	19872.4	1.0	42.0	2792.6
Ar	-3769.4338688146	19257.5	19257.5	19257.5	1.0	42.0	2669.7

Table 1394: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6187291022	317.0	153.0	153.0	nan	42.0	30.4
He	-3.4177448300	387.0	186.0	186.0	nan	42.0	30.6
Li	-6.4991887578	3070.0	1572.0	1572.0	nan	42.0	113.7
Be	-15.8159223981	3967.0	2018.0	2018.0	nan	42.0	142.0
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-40.9230953459	399.0	199.0	199.0	nan	42.0	30.0
N	-59.8430287923	533.0	256.0	256.0	nan	42.0	38.4
O	-79.3399369342	596.0	286.0	286.0	nan	42.0	37.3
F	-108.4543933537	506.0	249.0	249.0	nan	42.0	39.3
Ne	-135.3081058991	444.0	218.0	218.0	nan	42.0	34.1
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-215.0490861314	419.0	211.0	211.0	nan	42.0	35.2
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-298.3005855430	676.0	328.0	328.0	nan	42.0	37.5
P	-349.7820794485	6375.0	3210.0	3210.0	nan	42.0	192.9
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1395: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1396: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7321969199	42257.0	0.0	0.0	nan	42.0	637.4
He	-3.6591401575	42075.0	0.0	0.0	nan	42.0	496.8
Li	-9.1409545393	42377.0	0.0	0.0	nan	42.0	595.7
Be	-17.5709820961	42209.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.1
B	-30.4756088843	42037.0	0.0	0.0	nan	42.0	587.2
C	-44.0871679257	42251.0	0.0	0.0	nan	42.0	576.7
N	-65.0741616224	42379.0	0.0	0.0	nan	42.0	607.8
O	-85.1580642210	42173.0	0.0	0.0	nan	42.0	529.6
F	-115.2123636891	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	601.0
Ne	-149.4046214136	42213.0	0.0	0.0	nan	42.0	592.2
Na	-180.9917375211	42359.0	0.0	0.0	nan	42.0	568.0
Mg	-227.3462288239	42105.0	0.0	0.0	nan	42.0	601.1
Al	-301.5662221287	42031.0	0.0	0.0	nan	42.0	562.2
Si	-314.9596382180	42195.0	0.0	0.0	nan	42.0	588.7
P	-365.7571744943	42121.0	0.0	0.0	nan	42.0	583.5
S	-427.2031729220	42243.0	0.0	0.0	nan	42.0	628.5
Cl	-483.1456599494	42025.0	0.0	0.0	nan	42.0	597.2
Ar	-605.0430309221	42021.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.5

Table 1397: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1398: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-293.2267348792	96565.0	12563.0	12563.0	13.0	42.0	3037.1
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-1637.2029906565	87423.0	3421.0	3421.0	8.0	42.0	2356.7
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1399: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-674.2824709678	321.0	321.0	321.0	nan	42.0	111.7
Ne	-873.2943572033	304.0	304.0	304.0	nan	42.0	127.5
Na	-1050.5029274137	240.0	240.0	240.0	nan	42.0	107.0
Mg	-1382.5821004941	410.0	410.0	410.0	nan	42.0	117.6
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-2012.8870645684	555.0	555.0	555.0	nan	42.0	207.2
P	-2391.7589172171	256.0	256.0	256.0	nan	42.0	72.2
S	-2800.5258938868	139.0	139.0	139.0	nan	42.0	58.2
Cl	-3237.6887064091	270.0	270.0	270.0	nan	42.0	140.5
Ar	-3740.0738220221	253.0	253.0	253.0	nan	42.0	76.6

Table 1400: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Li	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Be	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
B	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
C	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
N	-365.6686497521	1407.0	1407.0	1407.0	1.0	42.0	268.3
O	-508.8208999124	2369.0	2369.0	2369.0	5.0	42.0	112.1
F	-679.8390442121	2157.0	2157.0	2157.0	1.0	42.0	100.6
Ne	-883.2327930097	4804.0	4804.0	4804.0	1.0	42.0	124.1
Na	-1113.6528315380	4437.0	4437.0	4437.0	14.0	42.0	97.0
Mg	-1386.0715271788	5336.0	5336.0	5336.0	16.0	42.0	97.0
Al	-1692.4099474206	5224.0	5224.0	5224.0	17.0	42.0	112.3
Si	-2029.9861284104	6163.0	6163.0	6163.0	20.0	42.0	110.5
P	-2412.7009936296	5544.0	5544.0	5544.0	19.0	42.0	104.8
S	-2830.9922147663	4589.0	4589.0	4589.0	1.0	42.0	83.3
Cl	-3297.3500258533	6026.0	6026.0	6026.0	18.0	42.0	104.3
Ar	-3802.0758591697	4446.0	4446.0	4446.0	19.0	42.0	73.8

Table 1401: trust region repeats

50.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-0.6187291022	317.0	153.0	153.0	nan	42.0	30.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.7321969199	42257.0	0.0	0.0	nan	42.0	637.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1402: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-3.4177448300	387.0	186.0	186.0	nan	42.0	30.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.6591401575	42075.0	0.0	0.0	nan	42.0	496.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1403: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-6.4991887578	3070.0	1572.0	1572.0	nan	42.0	113.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-9.1409545393	42377.0	0.0	0.0	nan	42.0	595.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1404: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-15.8159223981	3967.0	2018.0	2018.0	nan	42.0	142.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-17.5709820961	42209.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1405: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-157.7342179619	21021.0	21021.0	21021.0	1.0	42.0	3449.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-30.4756088843	42037.0	0.0	0.0	nan	42.0	587.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1406: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-248.6854121414	20523.0	20523.0	20523.0	1.0	42.0	3107.3
cch second order	-40.9230953459	399.0	199.0	199.0	nan	42.0	30.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-44.0871679257	42251.0	0.0	0.0	nan	42.0	576.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1407: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-363.4470320388	20757.0	20757.0	20757.0	5.0	42.0	3019.9
cch second order	-59.8430287923	533.0	256.0	256.0	nan	42.0	38.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-65.0741616224	42379.0	0.0	0.0	nan	42.0	607.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-293.2267348792	96565.0	12563.0	12563.0	13.0	42.0	3037.1
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-365.6686497521	1407.0	1407.0	1407.0	1.0	42.0	268.3

Table 1408: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-79.3399369342	596.0	286.0	286.0	nan	42.0	37.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-85.1580642210	42173.0	0.0	0.0	nan	42.0	529.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-508.8208999124	2369.0	2369.0	2369.0	5.0	42.0	112.1

Table 1409: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-108.4543933537	506.0	249.0	249.0	nan	42.0	39.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-115.2123636891	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	601.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-674.2824709678	321.0	321.0	321.0	nan	42.0	111.7
trust region repeats	-679.8390442121	2157.0	2157.0	2157.0	1.0	42.0	100.6

Table 1410: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-866.6951319047	20825.0	20825.0	20825.0	4.0	42.0	2742.6
cch second order	-135.3081058991	444.0	218.0	218.0	nan	42.0	34.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-149.4046214136	42213.0	0.0	0.0	nan	42.0	592.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-873.2943572033	304.0	304.0	304.0	nan	42.0	127.5
trust region repeats	-883.2327930097	4804.0	4804.0	4804.0	1.0	42.0	124.1

Table 1411: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1118.3031851848	20031.0	20031.0	20031.0	1.0	42.0	2651.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-180.9917375211	42359.0	0.0	0.0	nan	42.0	568.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-1050.5029274137	240.0	240.0	240.0	nan	42.0	107.0
trust region repeats	-1113.6528315380	4437.0	4437.0	4437.0	14.0	42.0	97.0

Table 1412: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1378.3356046711	20645.7	20645.7	20645.7	3.3	42.0	3012.2
cch second order	-215.0490861314	419.0	211.0	211.0	nan	42.0	35.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-227.3462288239	42105.0	0.0	0.0	nan	42.0	601.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-1382.5821004941	410.0	410.0	410.0	nan	42.0	117.6
trust region repeats	-1386.0715271788	5336.0	5336.0	5336.0	16.0	42.0	97.0

Table 1413: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1676.4513049044	20563.3	20563.3	20563.3	3.0	42.0	2896.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-301.5662221287	42031.0	0.0	0.0	nan	42.0	562.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-1692.4099474206	5224.0	5224.0	5224.0	17.0	42.0	112.3

Table 1414: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2013.8583192573	19300.0	19300.0	19300.0	1.3	42.0	2685.4
cch second order	-298.3005855430	676.0	328.0	328.0	nan	42.0	37.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-314.9596382180	42195.0	0.0	0.0	nan	42.0	588.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-1637.2029906565	87423.0	3421.0	3421.0	8.0	42.0	2356.7
trust region	-2012.8870645684	555.0	555.0	555.0	nan	42.0	207.2
trust region repeats	-2029.9861284104	6163.0	6163.0	6163.0	20.0	42.0	110.5

Table 1415: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2405.8731000298	19708.5	19708.5	19708.5	1.0	42.0	2878.7
cch second order	-349.7820794485	6375.0	3210.0	3210.0	nan	42.0	192.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-365.7571744943	42121.0	0.0	0.0	nan	42.0	583.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-2391.7589172171	256.0	256.0	256.0	nan	42.0	72.2
trust region repeats	-2412.7009936296	5544.0	5544.0	5544.0	19.0	42.0	104.8

Table 1416: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2829.6072557358	19685.8	19685.8	19685.8	1.0	42.0	2413.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-427.2031729220	42243.0	0.0	0.0	nan	42.0	628.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-2800.5258938868	139.0	139.0	139.0	nan	42.0	58.2
trust region repeats	-2830.9922147663	4589.0	4589.0	4589.0	1.0	42.0	83.3

Table 1417: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3261.3368773404	19872.4	19872.4	19872.4	1.0	42.0	2792.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-483.1456599494	42025.0	0.0	0.0	nan	42.0	597.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-3237.6887064091	270.0	270.0	270.0	nan	42.0	140.5
trust region repeats	-3297.3500258533	6026.0	6026.0	6026.0	18.0	42.0	104.3

Table 1418: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3769.4338688146	19257.5	19257.5	19257.5	1.0	42.0	2669.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-605.0430309221	42021.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-3740.0738220221	253.0	253.0	253.0	nan	42.0	76.6
trust region repeats	-3802.0758591697	4446.0	4446.0	4446.0	19.0	42.0	73.8

Table 1419: Ar

50.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct	-0.7321969199
He	direct	-3.6591401575
Li	direct	-9.1409545393
Be	direct	-17.5709820961
B	basin hopping	-157.7342179619
C	basin hopping	-248.6854121414
N	trust region repeats	-365.6686497521
O	trust region repeats	-508.8208999124
F	trust region repeats	-679.8390442121
Ne	trust region repeats	-883.2327930097
Na	basin hopping	-1118.3031851848
Mg	trust region repeats	-1386.0715271788
Al	trust region repeats	-1692.4099474206
Si	trust region repeats	-2029.9861284104
P	trust region repeats	-2412.7009936296
S	trust region repeats	-2830.9922147663
Cl	trust region repeats	-3297.3500258533
Ar	trust region repeats	-3802.0758591697

Table 1420: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	1474.1	740.5	740.5	nan	-109.4459913780	63.5
trust region repeats	2916.8	2916.8	2916.8	7.7	-1750.2334095711	115.7
basin hopping	20182.5	20182.5	20182.5	2.0	-1674.1467758321	2860.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	42179.4	0.0	0.0	nan	-190.3626736916	581.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	305.3	305.3	305.3	nan	-2018.1773622425	113.2
dual anneal	91994.0	7992.0	7992.0	10.5	-965.2148627679	2696.9

Table 1421: Average (all systems)

51   42s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

51.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1422: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	-599.0339338018	21021.0	21021.0	21021.0	6.5	42.0	2911.7
Be	-998.3022943324	20975.3	20975.3	20975.3	5.0	42.0	3219.7
B	-1481.6474199202	20764.0	20764.0	20764.0	3.5	42.0	2634.3
C	-2127.5684035914	20983.3	20983.3	20983.3	5.7	42.0	2925.6
N	-2897.2393836295	21008.3	21008.3	21008.3	5.7	42.0	2357.5
O	-3780.9882919900	19120.7	19120.7	19120.7	4.7	42.0	2516.2
F	-4775.6017164521	20675.0	20675.0	20675.0	1.3	42.0	2404.0
Ne	-5886.5465568519	20635.5	20635.5	20635.5	4.0	42.0	2942.0
Na	-7120.6354794895	20235.2	20235.2	20235.2	4.8	42.0	2589.2
Mg	-8457.1768843742	20357.4	20357.4	20357.4	3.8	42.0	2824.8
Al	-9912.9804032484	20241.5	20241.5	20241.5	4.0	42.0	2875.7
Si	-11514.3859591207	20116.0	20116.0	20116.0	4.8	42.0	2788.8
P	-13252.2717762428	19868.8	19868.8	19868.8	5.2	42.0	2847.2
S	-15101.5441372168	20250.7	20250.7	20250.7	4.0	42.0	2545.6
Cl	-17078.4354227764	20439.0	20439.0	20439.0	5.3	42.0	2831.2
Ar	-19176.4820696200	21021.0	21021.0	21021.0	4.8	42.0	2377.1

Table 1423: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5802092796	269.0	134.0	134.0	nan	42.0	19.8
He	-4.4323402332	452.0	216.0	216.0	nan	42.0	36.7
Li	-392.0574347498	4959.0	2508.0	2508.0	nan	42.0	191.5
Be	-871.9881479248	3452.0	1758.0	1758.0	nan	42.0	88.7
B	-1352.1725825513	664.0	325.0	325.0	nan	42.0	43.4
C	-51.9399038726	428.0	209.0	209.0	nan	42.0	36.5
N	-2543.9910227985	1719.0	889.0	889.0	nan	42.0	79.6
O	-3411.9965348251	2447.0	1239.0	1239.0	nan	42.0	95.2
F	-109.1266583338	5178.0	2625.0	2625.0	nan	42.0	177.6
Ne	-5774.0104320643	4721.0	2390.0	2390.0	nan	42.0	97.5
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	-232.6790380286	30179.0	15125.0	15125.0	nan	42.0	658.6
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1424: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1425: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-3.7637374068	42059.0	0.0	0.0	nan	42.0	671.6
He	-13.9074412771	42289.0	0.0	0.0	nan	42.0	633.8
Li	-28.3944327801	42181.0	0.0	0.0	nan	42.0	613.9
Be	-39.3880164147	42301.0	0.0	0.0	nan	42.0	743.0
B	-64.8463255529	42045.0	0.0	0.0	nan	42.0	692.1
C	-92.2893476422	42021.0	0.0	0.0	nan	42.0	665.4
N	-125.6711861191	42065.0	0.0	0.0	nan	42.0	574.9
O	-153.7173391058	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	688.7
F	-234.9544260118	42291.0	0.0	0.0	nan	42.0	590.1
Ne	-279.3627318505	42023.0	0.0	0.0	nan	42.0	660.6
Na	-391.7847049688	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	692.6
Mg	-422.7875554601	42057.0	0.0	0.0	nan	42.0	625.6
Al	-463.4639105871	42055.0	0.0	0.0	nan	42.0	744.2
Si	-585.5242245970	42373.0	0.0	0.0	nan	42.0	729.7
P	-673.0949504921	42141.0	0.0	0.0	nan	42.0	625.1
S	-784.1186142061	42153.0	0.0	0.0	nan	42.0	580.7
Cl	-830.7553177679	42187.0	0.0	0.0	nan	42.0	619.6
Ar	-868.6845195057	42201.0	0.0	0.0	nan	42.0	653.1

Table 1426: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1427: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	-1473.7220806959	86004.0	2002.0	2002.0	2.0	42.0	2782.0
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1428: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	-4574.9769510579	278.0	278.0	278.0	nan	42.0	121.2
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	-7057.4121845339	303.0	303.0	303.0	nan	42.0	64.9
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	-9933.6811202776	337.0	337.0	337.0	nan	42.0	69.9
Si	-11398.9062613295	356.0	356.0	356.0	nan	42.0	99.8
P	-13083.4739525135	420.0	420.0	420.0	nan	42.0	172.6
S	-14358.7050633167	167.0	167.0	167.0	nan	42.0	39.4
Cl	-16792.4101966256	243.0	243.0	243.0	nan	42.0	116.7
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1429: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Li	-565.1942374786	885.0	885.0	885.0	1.0	42.0	353.0
Be	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
B	-1459.4679757292	377.0	377.0	377.0	1.0	42.0	75.6
C	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
N	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
O	-3779.5993464848	2538.0	2538.0	2538.0	9.0	42.0	113.5
F	-4771.7578114808	3629.0	3629.0	3629.0	13.0	42.0	92.8
Ne	-5854.1419376014	3468.0	3468.0	3468.0	13.0	42.0	87.9
Na	-7116.8529874553	4215.0	4215.0	4215.0	16.0	42.0	75.3
Mg	-8456.2774133652	2798.0	2798.0	2798.0	15.0	42.0	72.2
Al	-9863.7994010345	3566.0	3566.0	3566.0	15.0	42.0	77.6
Si	-11499.2486964924	3569.0	3569.0	3569.0	15.0	42.0	91.7
P	-13187.4005825979	3650.0	3650.0	3650.0	13.0	42.0	105.8
S	-14919.9180527198	1945.0	1945.0	1945.0	8.0	42.0	76.0
Cl	-16844.1558807048	4576.0	4576.0	4576.0	13.0	42.0	160.7
Ar	-18813.8267475144	3357.0	3357.0	3357.0	12.0	42.0	79.5

Table 1430: trust region repeats

51.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-0.5802092796	269.0	134.0	134.0	nan	42.0	19.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.7637374068	42059.0	0.0	0.0	nan	42.0	671.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1431: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-4.4323402332	452.0	216.0	216.0	nan	42.0	36.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-13.9074412771	42289.0	0.0	0.0	nan	42.0	633.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1432: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-599.0339338018	21021.0	21021.0	21021.0	6.5	42.0	2911.7
cch second order	-392.0574347498	4959.0	2508.0	2508.0	nan	42.0	191.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-28.3944327801	42181.0	0.0	0.0	nan	42.0	613.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-565.1942374786	885.0	885.0	885.0	1.0	42.0	353.0

Table 1433: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-998.3022943324	20975.3	20975.3	20975.3	5.0	42.0	3219.7
cch second order	-871.9881479248	3452.0	1758.0	1758.0	nan	42.0	88.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-39.3880164147	42301.0	0.0	0.0	nan	42.0	743.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1434: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1481.6474199202	20764.0	20764.0	20764.0	3.5	42.0	2634.3
cch second order	-1352.1725825513	664.0	325.0	325.0	nan	42.0	43.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-64.8463255529	42045.0	0.0	0.0	nan	42.0	692.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	-1473.7220806959	86004.0	2002.0	2002.0	2.0	42.0	2782.0
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-1459.4679757292	377.0	377.0	377.0	1.0	42.0	75.6

Table 1435: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2127.5684035914	20983.3	20983.3	20983.3	5.7	42.0	2925.6
cch second order	-51.9399038726	428.0	209.0	209.0	nan	42.0	36.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-92.2893476422	42021.0	0.0	0.0	nan	42.0	665.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1436: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2897.2393836295	21008.3	21008.3	21008.3	5.7	42.0	2357.5
cch second order	-2543.9910227985	1719.0	889.0	889.0	nan	42.0	79.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-125.6711861191	42065.0	0.0	0.0	nan	42.0	574.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1437: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3780.9882919900	19120.7	19120.7	19120.7	4.7	42.0	2516.2
cch second order	-3411.9965348251	2447.0	1239.0	1239.0	nan	42.0	95.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-153.7173391058	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	688.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-3779.5993464848	2538.0	2538.0	2538.0	9.0	42.0	113.5

Table 1438: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-4775.6017164521	20675.0	20675.0	20675.0	1.3	42.0	2404.0
cch second order	-109.1266583338	5178.0	2625.0	2625.0	nan	42.0	177.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-234.9544260118	42291.0	0.0	0.0	nan	42.0	590.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-4574.9769510579	278.0	278.0	278.0	nan	42.0	121.2
trust region repeats	-4771.7578114808	3629.0	3629.0	3629.0	13.0	42.0	92.8

Table 1439: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-5886.5465568519	20635.5	20635.5	20635.5	4.0	42.0	2942.0
cch second order	-5774.0104320643	4721.0	2390.0	2390.0	nan	42.0	97.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-279.3627318505	42023.0	0.0	0.0	nan	42.0	660.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-5854.1419376014	3468.0	3468.0	3468.0	13.0	42.0	87.9

Table 1440: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7120.6354794895	20235.2	20235.2	20235.2	4.8	42.0	2589.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-391.7847049688	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	692.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-7057.4121845339	303.0	303.0	303.0	nan	42.0	64.9
trust region repeats	-7116.8529874553	4215.0	4215.0	4215.0	16.0	42.0	75.3

Table 1441: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8457.1768843742	20357.4	20357.4	20357.4	3.8	42.0	2824.8
cch second order	-232.6790380286	30179.0	15125.0	15125.0	nan	42.0	658.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-422.7875554601	42057.0	0.0	0.0	nan	42.0	625.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-8456.2774133652	2798.0	2798.0	2798.0	15.0	42.0	72.2

Table 1442: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-9912.9804032484	20241.5	20241.5	20241.5	4.0	42.0	2875.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-463.4639105871	42055.0	0.0	0.0	nan	42.0	744.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-9933.6811202776	337.0	337.0	337.0	nan	42.0	69.9
trust region repeats	-9863.7994010345	3566.0	3566.0	3566.0	15.0	42.0	77.6

Table 1443: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-11514.3859591207	20116.0	20116.0	20116.0	4.8	42.0	2788.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-585.5242245970	42373.0	0.0	0.0	nan	42.0	729.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-11398.9062613295	356.0	356.0	356.0	nan	42.0	99.8
trust region repeats	-11499.2486964924	3569.0	3569.0	3569.0	15.0	42.0	91.7

Table 1444: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-13252.2717762428	19868.8	19868.8	19868.8	5.2	42.0	2847.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-673.0949504921	42141.0	0.0	0.0	nan	42.0	625.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-13083.4739525135	420.0	420.0	420.0	nan	42.0	172.6
trust region repeats	-13187.4005825979	3650.0	3650.0	3650.0	13.0	42.0	105.8

Table 1445: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15101.5441372168	20250.7	20250.7	20250.7	4.0	42.0	2545.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-784.1186142061	42153.0	0.0	0.0	nan	42.0	580.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-14358.7050633167	167.0	167.0	167.0	nan	42.0	39.4
trust region repeats	-14919.9180527198	1945.0	1945.0	1945.0	8.0	42.0	76.0

Table 1446: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-17078.4354227764	20439.0	20439.0	20439.0	5.3	42.0	2831.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-830.7553177679	42187.0	0.0	0.0	nan	42.0	619.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	-16792.4101966256	243.0	243.0	243.0	nan	42.0	116.7
trust region repeats	-16844.1558807048	4576.0	4576.0	4576.0	13.0	42.0	160.7

Table 1447: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19176.4820696200	21021.0	21021.0	21021.0	4.8	42.0	2377.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-868.6845195057	42201.0	0.0	0.0	nan	42.0	653.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	-18813.8267475144	3357.0	3357.0	3357.0	12.0	42.0	79.5

Table 1448: Ar

51.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct	-3.7637374068
He	direct	-13.9074412771
Li	basin hopping	-599.0339338018
Be	basin hopping	-998.3022943324
B	basin hopping	-1481.6474199202
C	basin hopping	-2127.5684035914
N	basin hopping	-2897.2393836295
O	basin hopping	-3780.9882919900
F	basin hopping	-4775.6017164521
Ne	basin hopping	-5886.5465568519
Na	basin hopping	-7120.6354794895
Mg	basin hopping	-8457.1768843742
Al	trust region	-9933.6811202776
Si	basin hopping	-11514.3859591207
P	basin hopping	-13252.2717762428
S	basin hopping	-15101.5441372168
Cl	basin hopping	-17078.4354227764
Ar	basin hopping	-19176.4820696200

Table 1449: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	2142.9	2142.9	2142.9	8.3	-9010.1262362045	112.4
cch second order	4951.6	2492.5	2492.5	nan	-1340.4522095147	138.6
basin hopping	20482.0	20482.0	20482.0	4.6	-7760.0525082911	2724.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	42161.1	0.0	0.0	nan	-336.4727100970	655.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	300.6	300.6	300.6	nan	-11028.5093899507	97.8
dual anneal	86004.0	2002.0	2002.0	2.0	-1473.7220806959	2782.0

Table 1450: Average (all systems)

52 42s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

52.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1451: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619140	19333.0	19333.0	19333.0	20.0	42.0	2625.3
He	-3.0901196376	19841.0	19841.0	19841.0	19.0	42.0	2919.5
Li	-7.9887994134	19952.5	19952.5	19952.5	14.5	42.0	3326.1
Be	-15.7299407347	18857.0	18857.0	18857.0	8.0	42.0	3475.9
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	-81.0773265300	18773.5	18773.5	18773.5	12.0	42.0	3465.0
F	-107.1953012533	19201.5	19201.5	19201.5	9.5	42.0	2870.1
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	-305.7536595085	19634.0	19634.0	19634.0	12.0	42.0	1871.1
P	-360.1358890319	17084.0	17084.0	17084.0	16.0	42.0	2188.4
S	-419.7306955916	18280.0	18280.0	18280.0	11.0	42.0	3412.5
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	-555.0560100478	17963.0	17963.0	17963.0	14.0	42.0	3151.9

Table 1452: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213618811	190.0	85.0	85.0	nan	42.0	28.2
He	-3.0901197252	204.0	108.0	108.0	nan	42.0	29.1
Li	-7.9887991867	366.0	122.0	122.0	nan	42.0	28.9
Be	-15.7299407801	170.0	93.0	93.0	nan	42.0	26.5
B	-26.6444983735	173.0	90.0	90.0	nan	42.0	30.8
C	-41.0135884612	226.0	113.0	113.0	nan	42.0	30.0
N	-59.0840358403	219.0	103.0	103.0	nan	42.0	24.9
O	-81.0773264413	218.0	97.0	97.0	nan	42.0	28.5
F	-107.1953012382	221.0	104.0	104.0	nan	42.0	31.1
Ne	-137.6240355235	191.0	89.0	89.0	nan	42.0	28.7
Na	-172.5366171104	220.0	103.0	103.0	nan	42.0	26.2
Mg	-212.0952113808	240.0	120.0	120.0	nan	42.0	30.3
Al	-256.4526471465	209.0	109.0	109.0	nan	42.0	29.2
Si	-305.7536595053	234.0	118.0	118.0	nan	42.0	30.1
P	-360.1358890557	190.0	99.0	99.0	nan	42.0	31.2
S	-419.7306955779	228.0	114.0	114.0	nan	42.0	26.6
Cl	-484.6638322008	237.0	123.0	123.0	nan	42.0	26.9
Ar	-555.0560099543	187.0	100.0	100.0	nan	42.0	26.8

Table 1453: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1454: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6195091476	42173.0	0.0	0.0	nan	42.0	456.5
He	-3.0840857282	42187.0	0.0	0.0	nan	42.0	587.0
Li	-7.9750214874	42059.0	0.0	0.0	nan	42.0	552.0
Be	-15.6869657995	42191.0	0.0	0.0	nan	42.0	503.5
B	-26.5361707223	42415.0	0.0	0.0	nan	42.0	529.3
C	-40.7314686727	42445.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.5
N	-58.6609050036	42411.0	0.0	0.0	nan	42.0	503.4
O	-80.5760075939	42355.0	0.0	0.0	nan	42.0	468.6
F	-106.1429835815	42353.0	0.0	0.0	nan	42.0	479.6
Ne	-136.6995082379	42157.0	0.0	0.0	nan	42.0	510.8
Na	-170.4740137989	42377.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.4
Mg	-210.4739041772	42221.0	0.0	0.0	nan	42.0	521.6
Al	-254.1918314191	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	543.0
Si	-302.1038453581	42263.0	0.0	0.0	nan	42.0	444.4
P	-357.0741020880	42239.0	0.0	0.0	nan	42.0	550.7
S	-414.2253330947	42313.0	0.0	0.0	nan	42.0	540.0
Cl	-479.9451115752	42241.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.1
Ar	-551.2686153495	42035.0	0.0	0.0	nan	42.0	526.1

Table 1455: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619139	42183.0	8.0	8.0	nan	42.0	463.1
He	-3.0901196375	42197.0	8.0	8.0	nan	42.0	525.9
Li	-7.9887994135	42069.0	8.0	8.0	nan	42.0	535.4
Be	-15.7299407350	42204.4	11.4	11.4	nan	42.0	565.9
B	-26.6444984559	42425.0	8.0	8.0	nan	42.0	532.1
C	-41.0135884594	42455.0	8.0	8.0	nan	42.0	532.8
N	-59.0840359258	42423.0	10.0	10.0	nan	42.0	549.1
O	-81.0773265300	42366.0	9.0	9.0	nan	42.0	545.5
F	-107.1953012533	42363.0	8.0	8.0	nan	42.0	510.5
Ne	-137.6240355658	42168.0	9.0	9.0	nan	42.0	534.8
Na	-172.5366170231	42391.0	12.0	12.0	nan	42.0	516.0
Mg	-212.0952114691	42231.0	8.0	8.0	nan	42.0	494.5
Al	-256.4526471710	42127.0	8.0	8.0	nan	42.0	505.6
Si	-305.7536595082	42273.0	8.0	8.0	nan	42.0	471.4
P	-359.7467206498	42266.8	25.8	25.8	nan	42.0	503.5
S	-419.7306955916	42328.0	13.0	13.0	nan	42.0	511.3
Cl	-484.6631831453	42252.0	9.0	9.0	nan	42.0	440.2
Ar	-555.0560100478	42045.0	8.0	8.0	nan	42.0	533.7

Table 1456: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619139	84012.0	10.0	10.0	1.0	42.0	1166.2
He	-3.0901196375	84012.0	10.0	10.0	1.0	42.0	1117.0
Li	-7.9887994135	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1276.3
Be	-15.7299407346	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	1157.5
B	-26.6444984557	84012.6	10.6	10.6	1.0	42.0	1234.3
C	-41.0135884592	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1147.9
N	-59.0840359255	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	1124.1
O	-81.0773265295	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	1063.0
F	-107.1953012526	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	1304.3
Ne	-137.6240355649	84018.6	16.6	16.6	1.0	42.0	1123.2
Na	-172.5366170218	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1194.0
Mg	-212.0952114674	84019.0	17.0	17.0	1.0	42.0	1124.2
Al	-256.4526471688	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1082.9
Si	-305.7536595056	84019.2	17.2	17.2	1.0	42.0	1197.5
P	-360.1358890286	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1190.7
S	-419.7306955876	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1233.8
Cl	-484.6638322164	84024.0	22.0	22.0	1.0	42.0	1031.2
Ar	-555.0560100421	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1072.8

Table 1457: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619139	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	23.6
He	-3.0901196376	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.3
Li	-7.9887994135	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	26.3
Be	-15.7299407350	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	24.3
B	-26.6444984559	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	26.5
C	-41.0135884594	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	20.2
N	-59.0840359258	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.2
O	-81.0773265300	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.3
F	-107.1953012533	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	22.4
Ne	-137.6240355658	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	22.7
Na	-172.5366170231	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	30.3
Mg	-212.0952114691	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	21.0
Al	-256.4526471710	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	23.8
Si	-305.7536595082	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	20.8
P	-360.1358890319	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	23.6
S	-419.7306955916	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	23.5
Cl	-484.6638322212	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	23.8
Ar	-555.0560100478	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	22.9

Table 1458: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619140	416.0	416.0	416.0	1.0	42.0	21.1
He	-3.0901196375	274.0	274.0	274.0	1.0	42.0	19.1
Li	-7.9887994135	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.9
Be	-15.7299407347	293.0	293.0	293.0	1.0	42.0	18.5
B	-26.6444984559	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	19.3
C	-41.0135884594	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	18.4
N	-59.0840359258	290.0	290.0	290.0	1.0	42.0	17.6
O	-81.0773265300	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	19.7
F	-107.1953012533	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	17.1
Ne	-137.6240355658	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	17.5
Na	-172.5366170231	297.0	297.0	297.0	1.0	42.0	17.2
Mg	-212.0952114691	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.5
Al	-256.4526471710	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	19.1
Si	-305.7536595082	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	19.5
P	-360.1358890319	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	18.9
S	-419.7306955916	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	18.8
Cl	-484.6638322212	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.2
Ar	-555.0560100478	301.0	301.0	301.0	1.0	42.0	19.3

Table 1459: trust region repeats

52.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213619140	19333.0	19333.0	19333.0	20.0	42.0	2625.3
cch second order	-0.6213618811	190.0	85.0	85.0	nan	42.0	28.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6195091476	42173.0	0.0	0.0	nan	42.0	456.5
direct with trim	-0.6213619139	42183.0	8.0	8.0	nan	42.0	463.1
dual anneal	-0.6213619139	84012.0	10.0	10.0	1.0	42.0	1166.2
trust region	-0.6213619139	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	23.6
trust region repeats	-0.6213619140	416.0	416.0	416.0	1.0	42.0	21.1

Table 1460: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901196376	19841.0	19841.0	19841.0	19.0	42.0	2919.5
cch second order	-3.0901197252	204.0	108.0	108.0	nan	42.0	29.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.0840857282	42187.0	0.0	0.0	nan	42.0	587.0
direct with trim	-3.0901196375	42197.0	8.0	8.0	nan	42.0	525.9
dual anneal	-3.0901196375	84012.0	10.0	10.0	1.0	42.0	1117.0
trust region	-3.0901196376	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.3
trust region repeats	-3.0901196375	274.0	274.0	274.0	1.0	42.0	19.1

Table 1461: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887994134	19952.5	19952.5	19952.5	14.5	42.0	3326.1
cch second order	-7.9887991867	366.0	122.0	122.0	nan	42.0	28.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.9750214874	42059.0	0.0	0.0	nan	42.0	552.0
direct with trim	-7.9887994135	42069.0	8.0	8.0	nan	42.0	535.4
dual anneal	-7.9887994135	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1276.3
trust region	-7.9887994135	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	26.3
trust region repeats	-7.9887994135	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.9

Table 1462: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299407347	18857.0	18857.0	18857.0	8.0	42.0	3475.9
cch second order	-15.7299407801	170.0	93.0	93.0	nan	42.0	26.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.6869657995	42191.0	0.0	0.0	nan	42.0	503.5
direct with trim	-15.7299407350	42204.4	11.4	11.4	nan	42.0	565.9
dual anneal	-15.7299407346	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	1157.5
trust region	-15.7299407350	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	24.3
trust region repeats	-15.7299407347	293.0	293.0	293.0	1.0	42.0	18.5

Table 1463: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-26.6444983735	173.0	90.0	90.0	nan	42.0	30.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.5361707223	42415.0	0.0	0.0	nan	42.0	529.3
direct with trim	-26.6444984559	42425.0	8.0	8.0	nan	42.0	532.1
dual anneal	-26.6444984557	84012.6	10.6	10.6	1.0	42.0	1234.3
trust region	-26.6444984559	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	26.5
trust region repeats	-26.6444984559	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	19.3

Table 1464: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-41.0135884612	226.0	113.0	113.0	nan	42.0	30.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-40.7314686727	42445.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.5
direct with trim	-41.0135884594	42455.0	8.0	8.0	nan	42.0	532.8
dual anneal	-41.0135884592	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1147.9
trust region	-41.0135884594	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	20.2
trust region repeats	-41.0135884594	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	18.4

Table 1465: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-59.0840358403	219.0	103.0	103.0	nan	42.0	24.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-58.6609050036	42411.0	0.0	0.0	nan	42.0	503.4
direct with trim	-59.0840359258	42423.0	10.0	10.0	nan	42.0	549.1
dual anneal	-59.0840359255	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	1124.1
trust region	-59.0840359258	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.2
trust region repeats	-59.0840359258	290.0	290.0	290.0	1.0	42.0	17.6

Table 1466: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0773265300	18773.5	18773.5	18773.5	12.0	42.0	3465.0
cch second order	-81.0773264413	218.0	97.0	97.0	nan	42.0	28.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-80.5760075939	42355.0	0.0	0.0	nan	42.0	468.6
direct with trim	-81.0773265300	42366.0	9.0	9.0	nan	42.0	545.5
dual anneal	-81.0773265295	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	1063.0
trust region	-81.0773265300	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.3
trust region repeats	-81.0773265300	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	19.7

Table 1467: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1953012533	19201.5	19201.5	19201.5	9.5	42.0	2870.1
cch second order	-107.1953012382	221.0	104.0	104.0	nan	42.0	31.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-106.1429835815	42353.0	0.0	0.0	nan	42.0	479.6
direct with trim	-107.1953012533	42363.0	8.0	8.0	nan	42.0	510.5
dual anneal	-107.1953012526	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	1304.3
trust region	-107.1953012533	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	22.4
trust region repeats	-107.1953012533	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	17.1

Table 1468: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-137.6240355235	191.0	89.0	89.0	nan	42.0	28.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-136.6995082379	42157.0	0.0	0.0	nan	42.0	510.8
direct with trim	-137.6240355658	42168.0	9.0	9.0	nan	42.0	534.8
dual anneal	-137.6240355649	84018.6	16.6	16.6	1.0	42.0	1123.2
trust region	-137.6240355658	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	22.7
trust region repeats	-137.6240355658	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	17.5

Table 1469: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-172.5366171104	220.0	103.0	103.0	nan	42.0	26.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-170.4740137989	42377.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.4
direct with trim	-172.5366170231	42391.0	12.0	12.0	nan	42.0	516.0
dual anneal	-172.5366170218	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1194.0
trust region	-172.5366170231	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	30.3
trust region repeats	-172.5366170231	297.0	297.0	297.0	1.0	42.0	17.2

Table 1470: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-212.0952113808	240.0	120.0	120.0	nan	42.0	30.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-210.4739041772	42221.0	0.0	0.0	nan	42.0	521.6
direct with trim	-212.0952114691	42231.0	8.0	8.0	nan	42.0	494.5
dual anneal	-212.0952114674	84019.0	17.0	17.0	1.0	42.0	1124.2
trust region	-212.0952114691	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	21.0
trust region repeats	-212.0952114691	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.5

Table 1471: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-256.4526471465	209.0	109.0	109.0	nan	42.0	29.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-254.1918314191	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	543.0
direct with trim	-256.4526471710	42127.0	8.0	8.0	nan	42.0	505.6
dual anneal	-256.4526471688	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1082.9
trust region	-256.4526471710	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	23.8
trust region repeats	-256.4526471710	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	19.1

Table 1472: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7536595085	19634.0	19634.0	19634.0	12.0	42.0	1871.1
cch second order	-305.7536595053	234.0	118.0	118.0	nan	42.0	30.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-302.1038453581	42263.0	0.0	0.0	nan	42.0	444.4
direct with trim	-305.7536595082	42273.0	8.0	8.0	nan	42.0	471.4
dual anneal	-305.7536595056	84019.2	17.2	17.2	1.0	42.0	1197.5
trust region	-305.7536595082	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	20.8
trust region repeats	-305.7536595082	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	19.5

Table 1473: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1358890319	17084.0	17084.0	17084.0	16.0	42.0	2188.4
cch second order	-360.1358890557	190.0	99.0	99.0	nan	42.0	31.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-357.0741020880	42239.0	0.0	0.0	nan	42.0	550.7
direct with trim	-359.7467206498	42266.8	25.8	25.8	nan	42.0	503.5
dual anneal	-360.1358890286	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1190.7
trust region	-360.1358890319	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	23.6
trust region repeats	-360.1358890319	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	18.9

Table 1474: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7306955916	18280.0	18280.0	18280.0	11.0	42.0	3412.5
cch second order	-419.7306955779	228.0	114.0	114.0	nan	42.0	26.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-414.2253330947	42313.0	0.0	0.0	nan	42.0	540.0
direct with trim	-419.7306955916	42328.0	13.0	13.0	nan	42.0	511.3
dual anneal	-419.7306955876	84017.0	15.0	15.0	1.0	42.0	1233.8
trust region	-419.7306955916	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	23.5
trust region repeats	-419.7306955916	299.0	299.0	299.0	1.0	42.0	18.8

Table 1475: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-484.6638322008	237.0	123.0	123.0	nan	42.0	26.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-479.9451115752	42241.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.1
direct with trim	-484.6631831453	42252.0	9.0	9.0	nan	42.0	440.2
dual anneal	-484.6638322164	84024.0	22.0	22.0	1.0	42.0	1031.2
trust region	-484.6638322212	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	23.8
trust region repeats	-484.6638322212	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	18.2

Table 1476: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0560100478	17963.0	17963.0	17963.0	14.0	42.0	3151.9
cch second order	-555.0560099543	187.0	100.0	100.0	nan	42.0	26.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-551.2686153495	42035.0	0.0	0.0	nan	42.0	526.1
direct with trim	-555.0560100478	42045.0	8.0	8.0	nan	42.0	533.7
dual anneal	-555.0560100421	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1072.8
trust region	-555.0560100478	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	22.9
trust region repeats	-555.0560100478	301.0	301.0	301.0	1.0	42.0	19.3

Table 1477: Ar

52.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	trust region repeats	-0.6213619140
He	cch second order	-3.0901197252
Li	direct with trim	-7.9887994135
Be	cch second order	-15.7299407801
B	trust region	-26.6444984559
C	cch second order	-41.0135884612
N	direct with trim	-59.0840359258
O	basin hopping	-81.0773265300
F	basin hopping	-107.1953012533
Ne	trust region	-137.6240355658
Na	cch second order	-172.5366171104
Mg	trust region	-212.0952114691
Al	trust region	-256.4526471710
Si	basin hopping	-305.7536595085
P	cch second order	-360.1358890557
S	basin hopping	-419.7306955916
Cl	trust region	-484.6638322212
Ar	basin hopping	-555.0560100478

Table 1478: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	217.9	105.0	105.0	nan	-180.3607538546	28.5
basin hopping	18892.0	18892.0	18892.0	13.6	-185.6379103663	2930.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	11.5	11.5	11.5	nan	-180.3607538863	23.6
trust region repeats	301.8	301.8	301.8	1.0	-180.3607538863	18.7
direct	42252.9	0.0	0.0	nan	-178.6927434908	514.0
direct with trim	42264.8	10.0	10.0	nan	-180.3390973609	515.1
dual anneal	84015.8	13.8	13.8	1.0	-180.3607538847	1157.8

Table 1479: Average (all systems)

53 42s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

53.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1480: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191630	18653.6	18653.6	18653.6	17.4	42.0	1810.9
He	-3.1805896552	18027.6	18027.6	18027.6	17.6	42.0	1766.8
Li	-8.1482821576	17269.4	17269.4	17269.4	16.8	42.0	1572.4
Be	-15.9682587263	17274.2	17274.2	17274.2	16.6	42.0	1599.6
B	-26.9684200602	15672.0	15672.0	15672.0	14.0	42.0	1553.7
C	-41.4275956760	15769.4	15769.4	15769.4	15.6	42.0	1557.5
N	-59.5908087086	14776.2	14776.2	14776.2	13.4	42.0	1468.9
O	-81.6780654748	14523.2	14523.2	14523.2	15.0	42.0	1336.6
F	-107.8898976647	14430.0	14430.0	14430.0	13.0	42.0	1419.5
Ne	-138.4112273232	14196.6	14196.6	14196.6	13.8	42.0	1542.8
Na	-173.4142873419	12643.0	12643.0	12643.0	11.8	42.0	1380.2
Mg	-213.0603221595	12598.2	12598.2	12598.2	11.4	42.0	1292.9
Al	-257.5013680194	13055.6	13055.6	13055.6	11.8	42.0	1316.3
Si	-306.8814487658	10948.8	10948.8	10948.8	11.8	42.0	1277.5
P	-361.3375445094	11643.2	11643.2	11643.2	12.6	42.0	1241.4
S	-421.0004066421	11238.6	11238.6	11238.6	12.8	42.0	1247.6
Cl	-485.9952229760	11261.4	11261.4	11261.4	13.6	42.0	1188.8
Ar	-556.4421887207	10000.6	10000.6	10000.6	9.2	42.0	1272.5

Table 1481: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191469	206.0	94.0	94.0	nan	42.0	16.9
He	-3.1805896445	164.0	83.0	83.0	nan	42.0	24.0
Li	-8.1482788753	197.0	104.0	104.0	nan	42.0	18.1
Be	-15.9682587185	225.0	101.0	101.0	nan	42.0	18.3
B	-26.9684200977	216.0	103.0	103.0	nan	42.0	17.2
C	-41.4275957162	170.0	91.0	91.0	nan	42.0	17.0
N	-59.5908010560	223.0	104.0	104.0	nan	42.0	19.1
O	-81.6780274063	216.0	95.0	95.0	nan	42.0	19.4
F	-107.8898453791	190.0	95.0	95.0	nan	42.0	16.9
Ne	-138.4112272581	200.0	109.0	109.0	nan	42.0	17.2
Na	-173.4142871801	240.0	124.0	124.0	nan	42.0	17.8
Mg	-213.0603202921	271.0	142.0	142.0	nan	42.0	20.9
Al	-257.5013680636	181.0	98.0	98.0	nan	42.0	29.2
Si	-306.8814487812	267.0	121.0	121.0	nan	42.0	20.6
P	-361.3375444656	307.0	136.0	136.0	nan	42.0	22.0
S	-421.0004066479	288.0	132.0	132.0	nan	42.0	18.6
Cl	-485.9952230251	280.0	138.0	138.0	nan	42.0	21.8
Ar	-556.4421771306	259.0	120.0	120.0	nan	42.0	26.7

Table 1482: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1483: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6561820239	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	544.4
He	-3.1738405267	42457.0	0.0	0.0	nan	42.0	520.4
Li	-8.1289101908	42147.0	0.0	0.0	nan	42.0	567.3
Be	-15.9365761950	42351.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.3
B	-26.8893919623	42401.0	0.0	0.0	nan	42.0	569.3
C	-40.8378182904	42261.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.3
N	-59.0507851955	42009.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.8
O	-81.1680827917	42255.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.6
F	-106.3783066776	42129.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.7
Ne	-136.9557607194	42249.0	0.0	0.0	nan	42.0	455.5
Na	-172.1238686905	42231.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.4
Mg	-209.9353040048	42103.0	0.0	0.0	nan	42.0	514.0
Al	-255.9369646148	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	545.6
Si	-262.6069146797	42219.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.0
P	-358.9082406877	42095.0	0.0	0.0	nan	42.0	471.7
S	-414.1113533365	42273.0	0.0	0.0	nan	42.0	498.8
Cl	-418.7152035381	42057.0	0.0	0.0	nan	42.0	477.3
Ar	-476.0482953760	42033.0	0.0	0.0	nan	42.0	494.2

Table 1484: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191629	42125.0	6.0	6.0	nan	42.0	610.7
He	-3.1805896548	42465.0	6.0	6.0	nan	42.0	632.6
Li	-8.1482788796	42156.0	7.0	7.0	nan	42.0	641.2
Be	-15.9682587262	42359.0	6.0	6.0	nan	42.0	586.2
B	-26.9684200601	42411.0	8.0	8.0	nan	42.0	588.3
C	-41.4275956759	42276.0	13.0	13.0	nan	42.0	624.7
N	-59.5908010852	42023.0	12.0	12.0	nan	42.0	550.9
O	-81.6780274415	42265.0	8.0	8.0	nan	42.0	576.9
F	-107.8898453794	42143.0	12.0	12.0	nan	42.0	641.6
Ne	-138.4112273142	42263.0	12.0	12.0	nan	42.0	537.6
Na	-173.4142871846	42243.0	10.0	10.0	nan	42.0	613.7
Mg	-213.0603202376	42116.0	11.0	11.0	nan	42.0	550.2
Al	-257.5013680193	42309.0	8.0	8.0	nan	42.0	582.5
Si	-306.8814487655	42254.0	33.0	33.0	nan	42.0	654.1
P	-361.3375445094	42109.0	12.0	12.0	nan	42.0	595.7
S	-421.0004066420	42289.0	14.0	14.0	nan	42.0	611.8
Cl	-485.9952229760	42094.0	35.0	35.0	nan	42.0	637.1
Ar	-556.4421771366	42072.0	37.0	37.0	nan	42.0	630.0

Table 1485: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191629	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	911.1
He	-3.1805896548	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	1098.7
Li	-8.1482788796	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1107.7
Be	-15.9682587261	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	1010.6
B	-26.9684200599	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	925.3
C	-41.4275956757	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	979.2
N	-59.5908010848	84017.2	15.2	15.2	1.0	42.0	1043.5
O	-81.6780274410	84020.0	18.0	18.0	1.0	42.0	882.1
F	-107.8898453787	84014.8	12.8	12.8	1.0	42.0	1142.5
Ne	-138.4112273132	84023.2	21.2	21.2	1.0	42.0	991.0
Na	-173.4142871833	84023.6	21.6	21.6	1.0	42.0	1001.9
Mg	-213.0603202359	84019.8	17.8	17.8	1.0	42.0	1136.8
Al	-257.5013680171	84023.4	21.4	21.4	1.0	42.0	1059.2
Si	-306.8814487628	84021.8	19.8	19.8	1.0	42.0	996.0
P	-361.3375445060	84024.0	22.0	22.0	1.0	42.0	1165.5
S	-421.0004066379	84021.6	19.6	19.6	1.0	42.0	818.3
Cl	-485.9952229710	84023.0	21.0	21.0	1.0	42.0	886.8
Ar	-556.4421771307	84034.2	32.2	32.2	1.0	42.0	915.2

Table 1486: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191629	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	18.5
He	-3.1805896548	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	17.9
Li	-8.1482788796	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.3
Be	-15.9682587262	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	15.2
B	-26.9684200601	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	27.9
C	-41.4275956759	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	15.8
N	-59.5908010851	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	13.7
O	-81.6780274415	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	14.5
F	-107.8898453794	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.4
Ne	-138.4112273142	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	28.3
Na	-173.4142871846	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	13.4
Mg	-213.0603202376	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	13.4
Al	-257.5013680193	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	21.7
Si	-306.8814487655	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	15.1
P	-361.3375445094	21.0	21.0	21.0	nan	42.0	25.3
S	-421.0004066420	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	13.7
Cl	-485.9952229760	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	15.1
Ar	-556.4421771366	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	15.4

Table 1487: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191630	237.0	237.0	237.0	1.0	42.0	20.2
He	-3.1805896549	262.0	262.0	262.0	1.0	42.0	19.6
Li	-8.1482788797	249.0	249.0	249.0	1.0	42.0	18.2
Be	-15.9682587262	258.0	258.0	258.0	1.0	42.0	17.5
B	-26.9684200602	264.0	264.0	264.0	1.0	42.0	17.2
C	-41.4275956759	277.0	277.0	277.0	1.0	42.0	21.2
N	-59.5908010851	270.0	270.0	270.0	1.0	42.0	17.9
O	-81.6780274416	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	18.1
F	-107.8898453794	280.0	280.0	280.0	1.0	42.0	18.8
Ne	-138.4112273142	284.0	284.0	284.0	1.0	42.0	17.8
Na	-173.4142871846	284.0	284.0	284.0	1.0	42.0	20.6
Mg	-213.0603202376	287.0	287.0	287.0	1.0	42.0	19.9
Al	-257.5013680193	289.0	289.0	289.0	1.0	42.0	16.0
Si	-306.8814487655	291.0	291.0	291.0	1.0	42.0	18.3
P	-361.3375445094	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	16.7
S	-421.0004066420	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	19.0
Cl	-485.9952229760	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	18.4
Ar	-556.4421771366	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	16.3

Table 1488: trust region repeats

53.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6571191630	18653.6	18653.6	18653.6	17.4	42.0	1810.9
cch second order	-0.6571191469	206.0	94.0	94.0	nan	42.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6561820239	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	544.4
direct with trim	-0.6571191629	42125.0	6.0	6.0	nan	42.0	610.7
dual anneal	-0.6571191629	84013.2	11.2	11.2	1.0	42.0	911.1
trust region	-0.6571191629	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	18.5
trust region repeats	-0.6571191630	237.0	237.0	237.0	1.0	42.0	20.2

Table 1489: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805896552	18027.6	18027.6	18027.6	17.6	42.0	1766.8
cch second order	-3.1805896445	164.0	83.0	83.0	nan	42.0	24.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.1738405267	42457.0	0.0	0.0	nan	42.0	520.4
direct with trim	-3.1805896548	42465.0	6.0	6.0	nan	42.0	632.6
dual anneal	-3.1805896548	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	1098.7
trust region	-3.1805896548	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	17.9
trust region repeats	-3.1805896549	262.0	262.0	262.0	1.0	42.0	19.6

Table 1490: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1482821576	17269.4	17269.4	17269.4	16.8	42.0	1572.4
cch second order	-8.1482788753	197.0	104.0	104.0	nan	42.0	18.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.1289101908	42147.0	0.0	0.0	nan	42.0	567.3
direct with trim	-8.1482788796	42156.0	7.0	7.0	nan	42.0	641.2
dual anneal	-8.1482788796	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1107.7
trust region	-8.1482788796	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.3
trust region repeats	-8.1482788797	249.0	249.0	249.0	1.0	42.0	18.2

Table 1491: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9682587263	17274.2	17274.2	17274.2	16.6	42.0	1599.6
cch second order	-15.9682587185	225.0	101.0	101.0	nan	42.0	18.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.9365761950	42351.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.3
direct with trim	-15.9682587262	42359.0	6.0	6.0	nan	42.0	586.2
dual anneal	-15.9682587261	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	1010.6
trust region	-15.9682587262	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	15.2
trust region repeats	-15.9682587262	258.0	258.0	258.0	1.0	42.0	17.5

Table 1492: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9684200602	15672.0	15672.0	15672.0	14.0	42.0	1553.7
cch second order	-26.9684200977	216.0	103.0	103.0	nan	42.0	17.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.8893919623	42401.0	0.0	0.0	nan	42.0	569.3
direct with trim	-26.9684200601	42411.0	8.0	8.0	nan	42.0	588.3
dual anneal	-26.9684200599	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	925.3
trust region	-26.9684200601	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	27.9
trust region repeats	-26.9684200602	264.0	264.0	264.0	1.0	42.0	17.2

Table 1493: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4275956760	15769.4	15769.4	15769.4	15.6	42.0	1557.5
cch second order	-41.4275957162	170.0	91.0	91.0	nan	42.0	17.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-40.8378182904	42261.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.3
direct with trim	-41.4275956759	42276.0	13.0	13.0	nan	42.0	624.7
dual anneal	-41.4275956757	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	979.2
trust region	-41.4275956759	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	15.8
trust region repeats	-41.4275956759	277.0	277.0	277.0	1.0	42.0	21.2

Table 1494: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5908087086	14776.2	14776.2	14776.2	13.4	42.0	1468.9
cch second order	-59.5908010560	223.0	104.0	104.0	nan	42.0	19.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-59.0507851955	42009.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.8
direct with trim	-59.5908010852	42023.0	12.0	12.0	nan	42.0	550.9
dual anneal	-59.5908010848	84017.2	15.2	15.2	1.0	42.0	1043.5
trust region	-59.5908010851	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	13.7
trust region repeats	-59.5908010851	270.0	270.0	270.0	1.0	42.0	17.9

Table 1495: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6780654748	14523.2	14523.2	14523.2	15.0	42.0	1336.6
cch second order	-81.6780274063	216.0	95.0	95.0	nan	42.0	19.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-81.1680827917	42255.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.6
direct with trim	-81.6780274415	42265.0	8.0	8.0	nan	42.0	576.9
dual anneal	-81.6780274410	84020.0	18.0	18.0	1.0	42.0	882.1
trust region	-81.6780274415	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	14.5
trust region repeats	-81.6780274416	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	18.1

Table 1496: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8898976647	14430.0	14430.0	14430.0	13.0	42.0	1419.5
cch second order	-107.8898453791	190.0	95.0	95.0	nan	42.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-106.3783066776	42129.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.7
direct with trim	-107.8898453794	42143.0	12.0	12.0	nan	42.0	641.6
dual anneal	-107.8898453787	84014.8	12.8	12.8	1.0	42.0	1142.5
trust region	-107.8898453794	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.4
trust region repeats	-107.8898453794	280.0	280.0	280.0	1.0	42.0	18.8

Table 1497: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4112273232	14196.6	14196.6	14196.6	13.8	42.0	1542.8
cch second order	-138.4112272581	200.0	109.0	109.0	nan	42.0	17.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-136.9557607194	42249.0	0.0	0.0	nan	42.0	455.5
direct with trim	-138.4112273142	42263.0	12.0	12.0	nan	42.0	537.6
dual anneal	-138.4112273132	84023.2	21.2	21.2	1.0	42.0	991.0
trust region	-138.4112273142	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	28.3
trust region repeats	-138.4112273142	284.0	284.0	284.0	1.0	42.0	17.8

Table 1498: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4142873419	12643.0	12643.0	12643.0	11.8	42.0	1380.2
cch second order	-173.4142871801	240.0	124.0	124.0	nan	42.0	17.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-172.1238686905	42231.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.4
direct with trim	-173.4142871846	42243.0	10.0	10.0	nan	42.0	613.7
dual anneal	-173.4142871833	84023.6	21.6	21.6	1.0	42.0	1001.9
trust region	-173.4142871846	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	13.4
trust region repeats	-173.4142871846	284.0	284.0	284.0	1.0	42.0	20.6

Table 1499: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0603221595	12598.2	12598.2	12598.2	11.4	42.0	1292.9
cch second order	-213.0603202921	271.0	142.0	142.0	nan	42.0	20.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-209.9353040048	42103.0	0.0	0.0	nan	42.0	514.0
direct with trim	-213.0603202376	42116.0	11.0	11.0	nan	42.0	550.2
dual anneal	-213.0603202359	84019.8	17.8	17.8	1.0	42.0	1136.8
trust region	-213.0603202376	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	13.4
trust region repeats	-213.0603202376	287.0	287.0	287.0	1.0	42.0	19.9

Table 1500: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5013680194	13055.6	13055.6	13055.6	11.8	42.0	1316.3
cch second order	-257.5013680636	181.0	98.0	98.0	nan	42.0	29.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-255.9369646148	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	545.6
direct with trim	-257.5013680193	42309.0	8.0	8.0	nan	42.0	582.5
dual anneal	-257.5013680171	84023.4	21.4	21.4	1.0	42.0	1059.2
trust region	-257.5013680193	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	21.7
trust region repeats	-257.5013680193	289.0	289.0	289.0	1.0	42.0	16.0

Table 1501: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8814487658	10948.8	10948.8	10948.8	11.8	42.0	1277.5
cch second order	-306.8814487812	267.0	121.0	121.0	nan	42.0	20.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-262.6069146797	42219.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.0
direct with trim	-306.8814487655	42254.0	33.0	33.0	nan	42.0	654.1
dual anneal	-306.8814487628	84021.8	19.8	19.8	1.0	42.0	996.0
trust region	-306.8814487655	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	15.1
trust region repeats	-306.8814487655	291.0	291.0	291.0	1.0	42.0	18.3

Table 1502: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3375445094	11643.2	11643.2	11643.2	12.6	42.0	1241.4
cch second order	-361.3375444656	307.0	136.0	136.0	nan	42.0	22.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-358.9082406877	42095.0	0.0	0.0	nan	42.0	471.7
direct with trim	-361.3375445094	42109.0	12.0	12.0	nan	42.0	595.7
dual anneal	-361.3375445060	84024.0	22.0	22.0	1.0	42.0	1165.5
trust region	-361.3375445094	21.0	21.0	21.0	nan	42.0	25.3
trust region repeats	-361.3375445094	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	16.7

Table 1503: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-421.0004066421	11238.6	11238.6	11238.6	12.8	42.0	1247.6
cch second order	-421.0004066479	288.0	132.0	132.0	nan	42.0	18.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-414.1113533365	42273.0	0.0	0.0	nan	42.0	498.8
direct with trim	-421.0004066420	42289.0	14.0	14.0	nan	42.0	611.8
dual anneal	-421.0004066379	84021.6	19.6	19.6	1.0	42.0	818.3
trust region	-421.0004066420	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	13.7
trust region repeats	-421.0004066420	295.0	295.0	295.0	1.0	42.0	19.0

Table 1504: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9952229760	11261.4	11261.4	11261.4	13.6	42.0	1188.8
cch second order	-485.9952230251	280.0	138.0	138.0	nan	42.0	21.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-418.7152035381	42057.0	0.0	0.0	nan	42.0	477.3
direct with trim	-485.9952229760	42094.0	35.0	35.0	nan	42.0	637.1
dual anneal	-485.9952229710	84023.0	21.0	21.0	1.0	42.0	886.8
trust region	-485.9952229760	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	15.1
trust region repeats	-485.9952229760	294.0	294.0	294.0	1.0	42.0	18.4

Table 1505: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4421887207	10000.6	10000.6	10000.6	9.2	42.0	1272.5
cch second order	-556.4421771306	259.0	120.0	120.0	nan	42.0	26.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-476.0482953760	42033.0	0.0	0.0	nan	42.0	494.2
direct with trim	-556.4421771366	42072.0	37.0	37.0	nan	42.0	630.0
dual anneal	-556.4421771307	84034.2	32.2	32.2	1.0	42.0	915.2
trust region	-556.4421771366	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	15.4
trust region repeats	-556.4421771366	300.0	300.0	300.0	1.0	42.0	16.3

Table 1506: Ar

53.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6571191630
He	basin hopping	-3.1805896552
Li	basin hopping	-8.1482821576
Be	basin hopping	-15.9682587263
B	cch second order	-26.9684200977
C	cch second order	-41.4275957162
N	basin hopping	-59.5908087086
O	basin hopping	-81.6780654748
F	basin hopping	-107.8898976647
Ne	basin hopping	-138.4112273232
Na	basin hopping	-173.4142873419
Mg	basin hopping	-213.0603221595
Al	cch second order	-257.5013680636
Si	cch second order	-306.8814487812
P	basin hopping	-361.3375445094
S	cch second order	-421.0004066479
Cl	cch second order	-485.9952230251
Ar	basin hopping	-556.4421887207

Table 1507: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	227.8	110.6	110.6	nan	-181.0862743825	20.1
basin hopping	14110.1	14110.1	14110.1	13.8	-181.0862807636	1435.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.6	13.6	13.6	nan	-181.0862743806	18.0
trust region repeats	278.3	278.3	278.3	1.0	-181.0862743806	18.4
direct	42204.8	0.0	0.0	nan	-169.3089888612	517.0
direct with trim	42220.7	13.9	13.9	nan	-181.0862743806	603.7
dual anneal	84019.4	17.4	17.4	1.0	-181.0862743790	1004.0

Table 1508: Average (all systems)

54   42s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

54.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1509: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305130	18440.8	18440.8	18440.8	17.8	42.0	1795.7
He	-3.2215788605	18072.0	18072.0	18072.0	17.4	42.0	1749.9
Li	-8.2486237601	16957.4	16957.4	16957.4	16.0	42.0	1723.1
Be	-16.1580042535	16099.4	16099.4	16099.4	14.2	42.0	1572.9
B	-27.2795373701	15717.8	15717.8	15717.8	14.6	42.0	1549.9
C	-41.8935044858	16297.2	16297.2	16297.2	16.4	42.0	1619.0
N	-60.2462323241	15694.0	15694.0	15694.0	14.6	42.0	1421.0
O	-82.5587397170	13486.4	13486.4	13486.4	12.8	42.0	1331.7
F	-109.0324979069	15003.6	15003.6	15003.6	14.4	42.0	1435.8
Ne	-139.8533434513	13853.8	13853.8	13853.8	11.6	42.0	1322.9
Na	-175.1941082483	12430.2	12430.2	12430.2	11.6	42.0	1289.6
Mg	-215.2167561835	13126.8	13126.8	13126.8	12.4	42.0	1368.4
Al	-260.0739412266	11786.8	11786.8	11786.8	10.6	42.0	1172.5
Si	-309.9102466131	12545.8	12545.8	12545.8	12.4	42.0	1356.0
P	-364.8631788218	10376.4	10376.4	10376.4	9.4	42.0	1181.0
S	-425.0639786127	10950.4	10950.4	10950.4	9.6	42.0	1109.6
Cl	-490.6382925229	11212.8	11212.8	11212.8	10.8	42.0	1136.4
Ar	-561.7067359011	9645.0	9645.0	9645.0	9.8	42.0	983.7

Table 1510: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305278	230.0	92.0	92.0	nan	42.0	20.7
He	-3.2215715030	182.0	89.0	89.0	nan	42.0	21.2
Li	-8.2486236202	175.0	89.0	89.0	nan	42.0	17.5
Be	-16.1580042264	222.0	106.0	106.0	nan	42.0	18.2
B	-27.2795182556	205.0	106.0	106.0	nan	42.0	21.8
C	-41.8935045441	157.0	86.0	86.0	nan	42.0	17.7
N	-60.2462217955	216.0	105.0	105.0	nan	42.0	16.5
O	-82.5587212992	187.0	91.0	91.0	nan	42.0	16.6
F	-109.0324979186	203.0	89.0	89.0	nan	42.0	19.8
Ne	-139.8533434038	208.0	109.0	109.0	nan	42.0	26.5
Na	-175.1941082898	216.0	116.0	116.0	nan	42.0	20.9
Mg	-215.2167561666	227.0	119.0	119.0	nan	42.0	20.9
Al	-260.0739412487	239.0	121.0	121.0	nan	42.0	18.4
Si	-309.9102466391	176.0	96.0	96.0	nan	42.0	16.9
P	-364.8631788804	218.0	109.0	109.0	nan	42.0	29.8
S	-425.0639786003	210.0	91.0	91.0	nan	42.0	20.0
Cl	-490.6382924747	252.0	113.0	113.0	nan	42.0	19.5
Ar	-561.7067359342	290.0	117.0	117.0	nan	42.0	20.9

Table 1511: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1512: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6650954590	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	466.8
He	-3.2076436450	42389.0	0.0	0.0	nan	42.0	522.5
Li	-8.2276976105	42451.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.4
Be	-16.1272372095	42055.0	0.0	0.0	nan	42.0	480.6
B	-27.1897207244	42275.0	0.0	0.0	nan	42.0	547.5
C	-41.1420535972	42333.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.2
N	-59.5371641824	42347.0	0.0	0.0	nan	42.0	534.1
O	-81.6178797567	42099.0	0.0	0.0	nan	42.0	513.3
F	-107.6078136855	42261.0	0.0	0.0	nan	42.0	564.9
Ne	-138.3528941626	42259.0	0.0	0.0	nan	42.0	536.1
Na	-173.8362824910	42033.0	0.0	0.0	nan	42.0	542.1
Mg	-213.3985114382	42243.0	0.0	0.0	nan	42.0	527.1
Al	-258.3926939106	42341.0	0.0	0.0	nan	42.0	556.2
Si	-266.9340937126	42287.0	0.0	0.0	nan	42.0	517.3
P	-361.7922558650	42251.0	0.0	0.0	nan	42.0	485.2
S	-419.2062019949	42229.0	0.0	0.0	nan	42.0	511.2
Cl	-423.4200974538	42149.0	0.0	0.0	nan	42.0	538.6
Ar	-481.4126169625	42283.0	0.0	0.0	nan	42.0	505.7

Table 1513: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305130	42307.0	6.0	6.0	nan	42.0	651.8
He	-3.2215715507	42398.0	7.0	7.0	nan	42.0	644.7
Li	-8.2482623199	42461.0	8.0	8.0	nan	42.0	710.6
Be	-16.1580042534	42064.0	7.0	7.0	nan	42.0	633.8
B	-27.2795183079	42285.0	8.0	8.0	nan	42.0	548.0
C	-41.8935044857	42349.0	14.0	14.0	nan	42.0	683.8
N	-60.0621989932	43350.0	1001.0	1001.0	nan	42.0	1016.6
O	-82.5587213290	42108.0	7.0	7.0	nan	42.0	641.7
F	-109.0324979068	42274.0	11.0	11.0	nan	42.0	543.2
Ne	-139.8533434508	42280.0	19.0	19.0	nan	42.0	697.3
Na	-175.1941082482	42045.0	10.0	10.0	nan	42.0	659.7
Mg	-215.2167561832	42253.0	8.0	8.0	nan	42.0	621.0
Al	-260.0739412264	42351.0	8.0	8.0	nan	42.0	691.9
Si	-309.9102466128	42323.0	34.0	34.0	nan	42.0	638.0
P	-364.8631788218	42264.0	11.0	11.0	nan	42.0	598.3
S	-425.0639786127	42244.0	13.0	13.0	nan	42.0	643.7
Cl	-490.6382925227	42187.0	36.0	36.0	nan	42.0	663.5
Ar	-561.7067359010	42321.2	36.2	36.2	nan	42.0	606.1

Table 1514: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305130	84013.0	11.0	11.0	1.0	42.0	1276.6
He	-3.2215715507	84012.4	10.4	10.4	1.0	42.0	1218.7
Li	-8.2486236255	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1140.8
Be	-16.1580042533	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	1067.0
B	-27.2795183078	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1224.4
C	-41.8935044855	84017.8	15.8	15.8	1.0	42.0	1179.4
N	-60.2462217874	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1241.4
O	-82.5587213285	84021.4	19.4	19.4	1.0	42.0	1200.1
F	-109.0324979061	84015.2	13.2	13.2	1.0	42.0	1220.6
Ne	-139.8533434498	84015.2	13.2	13.2	1.0	42.0	1156.9
Na	-175.1941082468	84026.4	24.4	24.4	1.0	42.0	1121.9
Mg	-215.2167561814	84028.6	26.6	26.6	1.0	42.0	1265.6
Al	-260.0739412241	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	1323.6
Si	-309.9102466099	84019.6	17.6	17.6	1.0	42.0	1314.6
P	-364.8631788182	84030.6	28.6	28.6	1.0	42.0	1296.8
S	-425.0639786083	84027.2	25.2	25.2	1.0	42.0	1218.0
Cl	-490.6382925174	84024.4	22.4	22.4	1.0	42.0	1203.3
Ar	-561.7067358947	84021.0	19.0	19.0	1.0	42.0	1281.7

Table 1515: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305130	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.1
He	-3.2215715507	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.6
Li	-8.2486236255	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	13.1
Be	-16.1580042534	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	13.3
B	-27.2795183079	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	21.1
C	-41.8935044857	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	21.0
N	-60.2462217878	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	18.8
O	-82.5587213290	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.2
F	-109.0324979068	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.9
Ne	-139.8533434508	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.2
Na	-175.1941082482	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	20.3
Mg	-215.2167561832	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	15.2
Al	-260.0739412264	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	14.2
Si	-309.9102466128	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	15.3
P	-364.8631788218	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	22.8
S	-425.0639786127	19.0	19.0	19.0	nan	42.0	15.9
Cl	-490.6382925227	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	23.9
Ar	-561.7067359010	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	21.0

Table 1516: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305130	220.0	220.0	220.0	1.0	42.0	20.0
He	-3.2215715507	253.0	253.0	253.0	2.0	42.0	20.2
Li	-8.2486236255	249.0	249.0	249.0	1.0	42.0	19.3
Be	-16.1580042535	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.6
B	-27.2795183080	268.0	268.0	268.0	1.0	42.0	20.2
C	-41.8935044857	269.0	269.0	269.0	1.0	42.0	17.7
N	-60.2462217878	275.0	275.0	275.0	1.0	42.0	17.4
O	-82.5587213290	283.0	283.0	283.0	1.0	42.0	20.3
F	-109.0324979068	288.0	288.0	288.0	1.0	42.0	19.5
Ne	-139.8533434508	280.0	280.0	280.0	1.0	42.0	20.5
Na	-175.1941082482	285.0	285.0	285.0	2.0	42.0	17.5
Mg	-215.2167561832	287.0	287.0	287.0	1.0	42.0	18.1
Al	-260.0739412264	291.0	291.0	291.0	1.0	42.0	20.3
Si	-309.9102466128	290.0	290.0	290.0	1.0	42.0	19.4
P	-364.8631788218	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	18.9
S	-425.0639786127	297.0	297.0	297.0	1.0	42.0	17.4
Cl	-490.6382925227	296.0	296.0	296.0	1.0	42.0	17.1
Ar	-561.7067359010	298.0	298.0	298.0	1.0	42.0	21.4

Table 1517: trust region repeats

54.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661305130	18440.8	18440.8	18440.8	17.8	42.0	1795.7
cch second order	-0.6661305278	230.0	92.0	92.0	nan	42.0	20.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6650954590	42299.0	0.0	0.0	nan	42.0	466.8
direct with trim	-0.6661305130	42307.0	6.0	6.0	nan	42.0	651.8
dual anneal	-0.6661305130	84013.0	11.0	11.0	1.0	42.0	1276.6
trust region	-0.6661305130	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.1
trust region repeats	-0.6661305130	220.0	220.0	220.0	1.0	42.0	20.0

Table 1518: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215788605	18072.0	18072.0	18072.0	17.4	42.0	1749.9
cch second order	-3.2215715030	182.0	89.0	89.0	nan	42.0	21.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.2076436450	42389.0	0.0	0.0	nan	42.0	522.5
direct with trim	-3.2215715507	42398.0	7.0	7.0	nan	42.0	644.7
dual anneal	-3.2215715507	84012.4	10.4	10.4	1.0	42.0	1218.7
trust region	-3.2215715507	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.6
trust region repeats	-3.2215715507	253.0	253.0	253.0	2.0	42.0	20.2

Table 1519: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2486237601	16957.4	16957.4	16957.4	16.0	42.0	1723.1
cch second order	-8.2486236202	175.0	89.0	89.0	nan	42.0	17.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.2276976105	42451.0	0.0	0.0	nan	42.0	516.4
direct with trim	-8.2482623199	42461.0	8.0	8.0	nan	42.0	710.6
dual anneal	-8.2486236255	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1140.8
trust region	-8.2486236255	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	13.1
trust region repeats	-8.2486236255	249.0	249.0	249.0	1.0	42.0	19.3

Table 1520: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1580042535	16099.4	16099.4	16099.4	14.2	42.0	1572.9
cch second order	-16.1580042264	222.0	106.0	106.0	nan	42.0	18.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-16.1272372095	42055.0	0.0	0.0	nan	42.0	480.6
direct with trim	-16.1580042534	42064.0	7.0	7.0	nan	42.0	633.8
dual anneal	-16.1580042533	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	1067.0
trust region	-16.1580042534	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	13.3
trust region repeats	-16.1580042535	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.6

Table 1521: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2795373701	15717.8	15717.8	15717.8	14.6	42.0	1549.9
cch second order	-27.2795182556	205.0	106.0	106.0	nan	42.0	21.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-27.1897207244	42275.0	0.0	0.0	nan	42.0	547.5
direct with trim	-27.2795183079	42285.0	8.0	8.0	nan	42.0	548.0
dual anneal	-27.2795183078	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	1224.4
trust region	-27.2795183079	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	21.1
trust region repeats	-27.2795183080	268.0	268.0	268.0	1.0	42.0	20.2

Table 1522: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8935044858	16297.2	16297.2	16297.2	16.4	42.0	1619.0
cch second order	-41.8935045441	157.0	86.0	86.0	nan	42.0	17.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-41.1420535972	42333.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.2
direct with trim	-41.8935044857	42349.0	14.0	14.0	nan	42.0	683.8
dual anneal	-41.8935044855	84017.8	15.8	15.8	1.0	42.0	1179.4
trust region	-41.8935044857	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	21.0
trust region repeats	-41.8935044857	269.0	269.0	269.0	1.0	42.0	17.7

Table 1523: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2462323241	15694.0	15694.0	15694.0	14.6	42.0	1421.0
cch second order	-60.2462217955	216.0	105.0	105.0	nan	42.0	16.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-59.5371641824	42347.0	0.0	0.0	nan	42.0	534.1
direct with trim	-60.0621989932	43350.0	1001.0	1001.0	nan	42.0	1016.6
dual anneal	-60.2462217874	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1241.4
trust region	-60.2462217878	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	18.8
trust region repeats	-60.2462217878	275.0	275.0	275.0	1.0	42.0	17.4

Table 1524: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5587397170	13486.4	13486.4	13486.4	12.8	42.0	1331.7
cch second order	-82.5587212992	187.0	91.0	91.0	nan	42.0	16.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-81.6178797567	42099.0	0.0	0.0	nan	42.0	513.3
direct with trim	-82.5587213290	42108.0	7.0	7.0	nan	42.0	641.7
dual anneal	-82.5587213285	84021.4	19.4	19.4	1.0	42.0	1200.1
trust region	-82.5587213290	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.2
trust region repeats	-82.5587213290	283.0	283.0	283.0	1.0	42.0	20.3

Table 1525: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0324979069	15003.6	15003.6	15003.6	14.4	42.0	1435.8
cch second order	-109.0324979186	203.0	89.0	89.0	nan	42.0	19.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-107.6078136855	42261.0	0.0	0.0	nan	42.0	564.9
direct with trim	-109.0324979068	42274.0	11.0	11.0	nan	42.0	543.2
dual anneal	-109.0324979061	84015.2	13.2	13.2	1.0	42.0	1220.6
trust region	-109.0324979068	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.9
trust region repeats	-109.0324979068	288.0	288.0	288.0	1.0	42.0	19.5

Table 1526: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8533434513	13853.8	13853.8	13853.8	11.6	42.0	1322.9
cch second order	-139.8533434038	208.0	109.0	109.0	nan	42.0	26.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-138.3528941626	42259.0	0.0	0.0	nan	42.0	536.1
direct with trim	-139.8533434508	42280.0	19.0	19.0	nan	42.0	697.3
dual anneal	-139.8533434498	84015.2	13.2	13.2	1.0	42.0	1156.9
trust region	-139.8533434508	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.2
trust region repeats	-139.8533434508	280.0	280.0	280.0	1.0	42.0	20.5

Table 1527: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1941082483	12430.2	12430.2	12430.2	11.6	42.0	1289.6
cch second order	-175.1941082898	216.0	116.0	116.0	nan	42.0	20.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-173.8362824910	42033.0	0.0	0.0	nan	42.0	542.1
direct with trim	-175.1941082482	42045.0	10.0	10.0	nan	42.0	659.7
dual anneal	-175.1941082468	84026.4	24.4	24.4	1.0	42.0	1121.9
trust region	-175.1941082482	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	20.3
trust region repeats	-175.1941082482	285.0	285.0	285.0	2.0	42.0	17.5

Table 1528: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2167561835	13126.8	13126.8	13126.8	12.4	42.0	1368.4
cch second order	-215.2167561666	227.0	119.0	119.0	nan	42.0	20.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-213.3985114382	42243.0	0.0	0.0	nan	42.0	527.1
direct with trim	-215.2167561832	42253.0	8.0	8.0	nan	42.0	621.0
dual anneal	-215.2167561814	84028.6	26.6	26.6	1.0	42.0	1265.6
trust region	-215.2167561832	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	15.2
trust region repeats	-215.2167561832	287.0	287.0	287.0	1.0	42.0	18.1

Table 1529: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0739412266	11786.8	11786.8	11786.8	10.6	42.0	1172.5
cch second order	-260.0739412487	239.0	121.0	121.0	nan	42.0	18.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-258.3926939106	42341.0	0.0	0.0	nan	42.0	556.2
direct with trim	-260.0739412264	42351.0	8.0	8.0	nan	42.0	691.9
dual anneal	-260.0739412241	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	1323.6
trust region	-260.0739412264	13.0	13.0	13.0	nan	42.0	14.2
trust region repeats	-260.0739412264	291.0	291.0	291.0	1.0	42.0	20.3

Table 1530: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9102466131	12545.8	12545.8	12545.8	12.4	42.0	1356.0
cch second order	-309.9102466391	176.0	96.0	96.0	nan	42.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-266.9340937126	42287.0	0.0	0.0	nan	42.0	517.3
direct with trim	-309.9102466128	42323.0	34.0	34.0	nan	42.0	638.0
dual anneal	-309.9102466099	84019.6	17.6	17.6	1.0	42.0	1314.6
trust region	-309.9102466128	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	15.3
trust region repeats	-309.9102466128	290.0	290.0	290.0	1.0	42.0	19.4

Table 1531: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8631788218	10376.4	10376.4	10376.4	9.4	42.0	1181.0
cch second order	-364.8631788804	218.0	109.0	109.0	nan	42.0	29.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-361.7922558650	42251.0	0.0	0.0	nan	42.0	485.2
direct with trim	-364.8631788218	42264.0	11.0	11.0	nan	42.0	598.3
dual anneal	-364.8631788182	84030.6	28.6	28.6	1.0	42.0	1296.8
trust region	-364.8631788218	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	22.8
trust region repeats	-364.8631788218	292.0	292.0	292.0	1.0	42.0	18.9

Table 1532: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0639786127	10950.4	10950.4	10950.4	9.6	42.0	1109.6
cch second order	-425.0639786003	210.0	91.0	91.0	nan	42.0	20.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-419.2062019949	42229.0	0.0	0.0	nan	42.0	511.2
direct with trim	-425.0639786127	42244.0	13.0	13.0	nan	42.0	643.7
dual anneal	-425.0639786083	84027.2	25.2	25.2	1.0	42.0	1218.0
trust region	-425.0639786127	19.0	19.0	19.0	nan	42.0	15.9
trust region repeats	-425.0639786127	297.0	297.0	297.0	1.0	42.0	17.4

Table 1533: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6382925229	11212.8	11212.8	11212.8	10.8	42.0	1136.4
cch second order	-490.6382924747	252.0	113.0	113.0	nan	42.0	19.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-423.4200974538	42149.0	0.0	0.0	nan	42.0	538.6
direct with trim	-490.6382925227	42187.0	36.0	36.0	nan	42.0	663.5
dual anneal	-490.6382925174	84024.4	22.4	22.4	1.0	42.0	1203.3
trust region	-490.6382925227	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	23.9
trust region repeats	-490.6382925227	296.0	296.0	296.0	1.0	42.0	17.1

Table 1534: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7067359011	9645.0	9645.0	9645.0	9.8	42.0	983.7
cch second order	-561.7067359342	290.0	117.0	117.0	nan	42.0	20.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-481.4126169625	42283.0	0.0	0.0	nan	42.0	505.7
direct with trim	-561.7067359010	42321.2	36.2	36.2	nan	42.0	606.1
dual anneal	-561.7067358947	84021.0	19.0	19.0	1.0	42.0	1281.7
trust region	-561.7067359010	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	21.0
trust region repeats	-561.7067359010	298.0	298.0	298.0	1.0	42.0	21.4

Table 1535: Ar

54.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6661305278
He	basin hopping	-3.2215788605
Li	basin hopping	-8.2486237601
Be	trust region repeats	-16.1580042535
B	basin hopping	-27.2795373701
C	cch second order	-41.8935045441
N	basin hopping	-60.2462323241
O	basin hopping	-82.5587397170
F	cch second order	-109.0324979186
Ne	basin hopping	-139.8533434513
Na	cch second order	-175.1941082898
Mg	basin hopping	-215.2167561835
Al	cch second order	-260.0739412487
Si	cch second order	-309.9102466391
P	cch second order	-364.8631788804
S	basin hopping	-425.0639786127
Cl	basin hopping	-490.6382925229
Ar	cch second order	-561.7067359342

Table 1536: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	211.8	102.4	102.4	nan	-182.8791875182	20.2
basin hopping	13983.1	13983.1	13983.1	13.1	-182.8791905985	1395.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.3	13.3	13.3	nan	-182.8791875189	17.6
trust region repeats	276.7	276.7	276.7	1.1	-182.8791875189	19.1
direct	42254.7	0.0	0.0	nan	-171.2259974367	519.3
direct with trim	42325.8	69.1	69.1	nan	-182.8689439577	660.8
dual anneal	84019.4	17.4	17.4	1.0	-182.8791875171	1219.5

Table 1537: Average (all systems)

55 42s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

55.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1538: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666264168	17421.2	17421.2	17421.2	17.2	42.0	1843.6
He	-2.8183587474	17840.0	17840.0	17840.0	18.4	42.0	1640.0
Li	-7.3227196622	16494.2	16494.2	16494.2	15.0	42.0	1507.2
Be	-14.4841045092	16678.4	16678.4	16678.4	15.8	42.0	1521.3
B	-24.6284292558	16679.4	16679.4	16679.4	14.8	42.0	1516.3
C	-38.0332958342	14604.6	14604.6	14604.6	12.6	42.0	1433.2
N	-54.9428913149	13039.2	13039.2	13039.2	11.6	42.0	1507.4
O	-75.5766216292	13588.8	13588.8	13588.8	11.8	42.0	1425.3
F	-100.1346311201	16090.8	16090.8	16090.8	14.0	42.0	1581.8
Ne	-128.8015825540	14858.0	14858.0	14858.0	13.8	42.0	1413.0
Na	-161.7493475945	13217.2	13217.2	13217.2	13.6	42.0	1426.7
Mg	-199.1407689543	12666.8	12666.8	12666.8	13.6	42.0	1310.0
Al	-241.1225124294	12468.6	12468.6	12468.6	14.4	42.0	1225.6
Si	-287.8437605914	14011.8	14011.8	14011.8	16.2	42.0	1333.8
P	-339.4396558292	13429.4	13429.4	13429.4	15.0	42.0	1256.8
S	-396.0408929735	12246.8	12246.8	12246.8	16.6	42.0	1266.9
Cl	-457.7726202089	11571.6	11571.6	11571.6	16.0	42.0	1349.4
Ar	-524.7550130867	11191.6	11191.6	11191.6	17.2	42.0	1360.3

Table 1539: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247419	164.0	87.0	87.0	nan	42.0	24.9
He	-2.8183587787	178.0	89.0	89.0	nan	42.0	17.0
Li	-7.3227197091	214.0	105.0	105.0	nan	42.0	29.4
Be	-14.4841045229	219.0	111.0	111.0	nan	42.0	18.0
B	-24.6284292020	181.0	94.0	94.0	nan	42.0	25.6
C	-38.0332958012	148.0	83.0	83.0	nan	42.0	16.5
N	-54.9428913023	164.0	88.0	88.0	nan	42.0	17.1
O	-75.5766216626	200.0	107.0	107.0	nan	42.0	16.9
F	-100.1346311234	230.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.6
Ne	-128.8015752714	265.0	142.0	142.0	nan	42.0	19.2
Na	-161.7493289776	294.0	145.0	145.0	nan	42.0	20.4
Mg	-199.1390067119	275.0	140.0	140.0	nan	42.0	19.4
Al	-241.1225123637	232.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.6
Si	-287.8437606047	339.0	170.0	170.0	nan	42.0	19.7
P	-339.4396557749	282.0	148.0	148.0	nan	42.0	31.8
S	-396.0408929738	263.0	139.0	139.0	nan	42.0	19.2
Cl	-457.7726201639	291.0	147.0	147.0	nan	42.0	19.6
Ar	-524.7549951028	223.0	118.0	118.0	nan	42.0	29.2

Table 1540: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1541: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5663958872	42183.0	0.0	0.0	nan	42.0	548.5
He	-2.8127111725	42079.0	0.0	0.0	nan	42.0	424.2
Li	-7.3086196677	42409.0	0.0	0.0	nan	42.0	540.6
Be	-14.4677843274	42405.0	0.0	0.0	nan	42.0	507.2
B	-24.5353732750	42431.0	0.0	0.0	nan	42.0	535.4
C	-37.8170546644	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.6
N	-54.6959059401	42239.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.3
O	-75.2768688353	42091.0	0.0	0.0	nan	42.0	519.9
F	-99.0441447561	42249.0	0.0	0.0	nan	42.0	533.3
Ne	-128.1591854729	42325.0	0.0	0.0	nan	42.0	483.2
Na	-159.9685418706	42179.0	0.0	0.0	nan	42.0	531.2
Mg	-197.6213486496	42445.0	0.0	0.0	nan	42.0	511.9
Al	-239.6505136088	42097.0	0.0	0.0	nan	42.0	475.4
Si	-286.2595948485	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	518.4
P	-336.9089512622	42189.0	0.0	0.0	nan	42.0	524.0
S	-391.8815405238	42319.0	0.0	0.0	nan	42.0	556.9
Cl	-373.6731914186	42301.0	0.0	0.0	nan	42.0	560.9
Ar	-418.9602142217	42149.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.4

Table 1542: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247193	42190.0	5.0	5.0	nan	42.0	491.5
He	-2.8183587474	42087.0	6.0	6.0	nan	42.0	523.1
Li	-7.3227196611	42418.0	7.0	7.0	nan	42.0	562.9
Be	-14.4841045092	42414.0	7.0	7.0	nan	42.0	538.5
B	-24.6284291902	42441.0	8.0	8.0	nan	42.0	552.2
C	-38.0332958341	42427.0	8.0	8.0	nan	42.0	444.8
N	-54.9428913149	42250.0	9.0	9.0	nan	42.0	551.7
O	-75.5699462982	42108.0	15.0	15.0	nan	42.0	524.9
F	-100.1346311201	42260.0	9.0	9.0	nan	42.0	487.8
Ne	-128.8015751974	42334.0	7.0	7.0	nan	42.0	455.9
Na	-161.7493290065	42194.0	13.0	13.0	nan	42.0	457.3
Mg	-199.0367972413	42463.6	16.6	16.6	nan	42.0	566.3
Al	-241.1225124294	42107.0	8.0	8.0	nan	42.0	473.6
Si	-287.8437605914	42130.8	11.8	11.8	nan	42.0	505.1
P	-339.4396558073	42202.0	11.0	11.0	nan	42.0	489.2
S	-396.0408929735	42337.0	16.0	16.0	nan	42.0	458.3
Cl	-457.7726202089	42336.2	33.2	33.2	nan	42.0	516.4
Ar	-524.7549950496	42185.0	34.0	34.0	nan	42.0	402.7

Table 1543: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247193	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	804.5
He	-2.8183587474	84021.4	19.4	19.4	1.2	42.0	927.1
Li	-7.3227196611	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	990.1
Be	-14.4841045092	84015.4	13.4	13.4	1.0	42.0	957.1
B	-24.6284291901	84013.4	11.4	11.4	1.0	42.0	978.5
C	-38.0332958340	84014.0	12.0	12.0	1.0	42.0	970.6
N	-54.9428913147	84020.0	18.0	18.0	1.0	42.0	860.8
O	-75.5766216289	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	1054.7
F	-100.1346311197	84018.2	16.2	16.2	1.0	42.0	940.4
Ne	-128.8015751969	84017.2	15.2	15.2	1.0	42.0	1017.2
Na	-161.7493290058	84021.8	19.8	19.8	1.0	42.0	1007.4
Mg	-199.1390067145	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	864.3
Al	-241.1225124283	84223.2	221.2	221.2	1.0	42.0	996.4
Si	-287.8437605900	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	998.3
P	-339.4396558056	84017.8	15.8	15.8	1.0	42.0	999.1
S	-396.0408929714	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	837.2
Cl	-457.7726202063	84026.0	24.0	24.0	1.0	42.0	856.7
Ar	-524.7549950466	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	865.8

Table 1544: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247193	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	13.9
He	-2.8183587474	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.1
Li	-7.3227196611	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.9
Be	-14.4841045092	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	21.2
B	-24.6284291902	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	14.3
C	-38.0332958341	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	13.3
N	-54.9428913149	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	14.2
O	-75.5766216292	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	20.1
F	-100.1346311201	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.5
Ne	-128.8015751974	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	28.6
Na	-161.7493290065	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	14.7
Mg	-199.1390067154	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.1
Al	-241.1225124294	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	26.1
Si	-287.8437605914	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	14.6
P	-339.4396558073	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	17.7
S	-396.0408929735	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	16.4
Cl	-457.7726202089	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	17.6
Ar	-524.7549950496	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	14.8

Table 1545: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247193	224.0	224.0	224.0	1.0	42.0	22.3
He	-2.8183587474	233.0	233.0	233.0	1.0	42.0	19.1
Li	-7.3227196611	253.0	253.0	253.0	2.0	42.0	17.8
Be	-14.4841045092	247.0	247.0	247.0	1.0	42.0	21.0
B	-24.6284291902	255.0	255.0	255.0	1.0	42.0	20.4
C	-38.0332958341	263.0	263.0	263.0	1.0	42.0	18.0
N	-54.9428913149	269.0	269.0	269.0	1.0	42.0	19.8
O	-75.5766216292	272.0	272.0	272.0	1.0	42.0	19.9
F	-100.1346311201	274.0	274.0	274.0	1.0	42.0	20.8
Ne	-128.8015751974	277.0	277.0	277.0	2.0	42.0	17.0
Na	-161.7493290065	288.0	288.0	288.0	2.0	42.0	19.3
Mg	-199.1390067154	282.0	282.0	282.0	1.0	42.0	21.3
Al	-241.1225124294	279.0	279.0	279.0	1.0	42.0	18.1
Si	-287.8437605914	282.0	282.0	282.0	1.0	42.0	19.1
P	-339.4396558073	281.0	281.0	281.0	1.0	42.0	20.0
S	-396.0408929735	293.0	293.0	293.0	1.0	42.0	19.2
Cl	-457.7726202089	313.0	313.0	313.0	1.0	42.0	17.2
Ar	-524.7549950496	326.0	326.0	326.0	1.0	42.0	18.9

Table 1546: trust region repeats

55.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666264168	17421.2	17421.2	17421.2	17.2	42.0	1843.6
cch second order	-0.5666247419	164.0	87.0	87.0	nan	42.0	24.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.5663958872	42183.0	0.0	0.0	nan	42.0	548.5
direct with trim	-0.5666247193	42190.0	5.0	5.0	nan	42.0	491.5
dual anneal	-0.5666247193	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	804.5
trust region	-0.5666247193	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	13.9
trust region repeats	-0.5666247193	224.0	224.0	224.0	1.0	42.0	22.3

Table 1547: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183587474	17840.0	17840.0	17840.0	18.4	42.0	1640.0
cch second order	-2.8183587787	178.0	89.0	89.0	nan	42.0	17.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.8127111725	42079.0	0.0	0.0	nan	42.0	424.2
direct with trim	-2.8183587474	42087.0	6.0	6.0	nan	42.0	523.1
dual anneal	-2.8183587474	84021.4	19.4	19.4	1.2	42.0	927.1
trust region	-2.8183587474	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.1
trust region repeats	-2.8183587474	233.0	233.0	233.0	1.0	42.0	19.1

Table 1548: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3227196622	16494.2	16494.2	16494.2	15.0	42.0	1507.2
cch second order	-7.3227197091	214.0	105.0	105.0	nan	42.0	29.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.3086196677	42409.0	0.0	0.0	nan	42.0	540.6
direct with trim	-7.3227196611	42418.0	7.0	7.0	nan	42.0	562.9
dual anneal	-7.3227196611	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	990.1
trust region	-7.3227196611	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	15.9
trust region repeats	-7.3227196611	253.0	253.0	253.0	2.0	42.0	17.8

Table 1549: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4841045092	16678.4	16678.4	16678.4	15.8	42.0	1521.3
cch second order	-14.4841045229	219.0	111.0	111.0	nan	42.0	18.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.4677843274	42405.0	0.0	0.0	nan	42.0	507.2
direct with trim	-14.4841045092	42414.0	7.0	7.0	nan	42.0	538.5
dual anneal	-14.4841045092	84015.4	13.4	13.4	1.0	42.0	957.1
trust region	-14.4841045092	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	21.2
trust region repeats	-14.4841045092	247.0	247.0	247.0	1.0	42.0	21.0

Table 1550: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6284292558	16679.4	16679.4	16679.4	14.8	42.0	1516.3
cch second order	-24.6284292020	181.0	94.0	94.0	nan	42.0	25.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-24.5353732750	42431.0	0.0	0.0	nan	42.0	535.4
direct with trim	-24.6284291902	42441.0	8.0	8.0	nan	42.0	552.2
dual anneal	-24.6284291901	84013.4	11.4	11.4	1.0	42.0	978.5
trust region	-24.6284291902	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	14.3
trust region repeats	-24.6284291902	255.0	255.0	255.0	1.0	42.0	20.4

Table 1551: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332958342	14604.6	14604.6	14604.6	12.6	42.0	1433.2
cch second order	-38.0332958012	148.0	83.0	83.0	nan	42.0	16.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-37.8170546644	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.6
direct with trim	-38.0332958341	42427.0	8.0	8.0	nan	42.0	444.8
dual anneal	-38.0332958340	84014.0	12.0	12.0	1.0	42.0	970.6
trust region	-38.0332958341	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	13.3
trust region repeats	-38.0332958341	263.0	263.0	263.0	1.0	42.0	18.0

Table 1552: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9428913149	13039.2	13039.2	13039.2	11.6	42.0	1507.4
cch second order	-54.9428913023	164.0	88.0	88.0	nan	42.0	17.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-54.6959059401	42239.0	0.0	0.0	nan	42.0	537.3
direct with trim	-54.9428913149	42250.0	9.0	9.0	nan	42.0	551.7
dual anneal	-54.9428913147	84020.0	18.0	18.0	1.0	42.0	860.8
trust region	-54.9428913149	11.0	11.0	11.0	nan	42.0	14.2
trust region repeats	-54.9428913149	269.0	269.0	269.0	1.0	42.0	19.8

Table 1553: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5766216292	13588.8	13588.8	13588.8	11.8	42.0	1425.3
cch second order	-75.5766216626	200.0	107.0	107.0	nan	42.0	16.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-75.2768688353	42091.0	0.0	0.0	nan	42.0	519.9
direct with trim	-75.5699462982	42108.0	15.0	15.0	nan	42.0	524.9
dual anneal	-75.5766216289	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	1054.7
trust region	-75.5766216292	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	20.1
trust region repeats	-75.5766216292	272.0	272.0	272.0	1.0	42.0	19.9

Table 1554: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1346311201	16090.8	16090.8	16090.8	14.0	42.0	1581.8
cch second order	-100.1346311234	230.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-99.0441447561	42249.0	0.0	0.0	nan	42.0	533.3
direct with trim	-100.1346311201	42260.0	9.0	9.0	nan	42.0	487.8
dual anneal	-100.1346311197	84018.2	16.2	16.2	1.0	42.0	940.4
trust region	-100.1346311201	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.5
trust region repeats	-100.1346311201	274.0	274.0	274.0	1.0	42.0	20.8

Table 1555: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8015825540	14858.0	14858.0	14858.0	13.8	42.0	1413.0
cch second order	-128.8015752714	265.0	142.0	142.0	nan	42.0	19.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-128.1591854729	42325.0	0.0	0.0	nan	42.0	483.2
direct with trim	-128.8015751974	42334.0	7.0	7.0	nan	42.0	455.9
dual anneal	-128.8015751969	84017.2	15.2	15.2	1.0	42.0	1017.2
trust region	-128.8015751974	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	28.6
trust region repeats	-128.8015751974	277.0	277.0	277.0	2.0	42.0	17.0

Table 1556: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7493475945	13217.2	13217.2	13217.2	13.6	42.0	1426.7
cch second order	-161.7493289776	294.0	145.0	145.0	nan	42.0	20.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-159.9685418706	42179.0	0.0	0.0	nan	42.0	531.2
direct with trim	-161.7493290065	42194.0	13.0	13.0	nan	42.0	457.3
dual anneal	-161.7493290058	84021.8	19.8	19.8	1.0	42.0	1007.4
trust region	-161.7493290065	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	14.7
trust region repeats	-161.7493290065	288.0	288.0	288.0	2.0	42.0	19.3

Table 1557: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1407689543	12666.8	12666.8	12666.8	13.6	42.0	1310.0
cch second order	-199.1390067119	275.0	140.0	140.0	nan	42.0	19.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-197.6213486496	42445.0	0.0	0.0	nan	42.0	511.9
direct with trim	-199.0367972413	42463.6	16.6	16.6	nan	42.0	566.3
dual anneal	-199.1390067145	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	864.3
trust region	-199.1390067154	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.1
trust region repeats	-199.1390067154	282.0	282.0	282.0	1.0	42.0	21.3

Table 1558: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1225124294	12468.6	12468.6	12468.6	14.4	42.0	1225.6
cch second order	-241.1225123637	232.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-239.6505136088	42097.0	0.0	0.0	nan	42.0	475.4
direct with trim	-241.1225124294	42107.0	8.0	8.0	nan	42.0	473.6
dual anneal	-241.1225124283	84223.2	221.2	221.2	1.0	42.0	996.4
trust region	-241.1225124294	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	26.1
trust region repeats	-241.1225124294	279.0	279.0	279.0	1.0	42.0	18.1

Table 1559: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8437605914	14011.8	14011.8	14011.8	16.2	42.0	1333.8
cch second order	-287.8437606047	339.0	170.0	170.0	nan	42.0	19.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-286.2595948485	42117.0	0.0	0.0	nan	42.0	518.4
direct with trim	-287.8437605914	42130.8	11.8	11.8	nan	42.0	505.1
dual anneal	-287.8437605900	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	998.3
trust region	-287.8437605914	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	14.6
trust region repeats	-287.8437605914	282.0	282.0	282.0	1.0	42.0	19.1

Table 1560: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4396558292	13429.4	13429.4	13429.4	15.0	42.0	1256.8
cch second order	-339.4396557749	282.0	148.0	148.0	nan	42.0	31.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-336.9089512622	42189.0	0.0	0.0	nan	42.0	524.0
direct with trim	-339.4396558073	42202.0	11.0	11.0	nan	42.0	489.2
dual anneal	-339.4396558056	84017.8	15.8	15.8	1.0	42.0	999.1
trust region	-339.4396558073	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	17.7
trust region repeats	-339.4396558073	281.0	281.0	281.0	1.0	42.0	20.0

Table 1561: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0408929735	12246.8	12246.8	12246.8	16.6	42.0	1266.9
cch second order	-396.0408929738	263.0	139.0	139.0	nan	42.0	19.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-391.8815405238	42319.0	0.0	0.0	nan	42.0	556.9
direct with trim	-396.0408929735	42337.0	16.0	16.0	nan	42.0	458.3
dual anneal	-396.0408929714	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	837.2
trust region	-396.0408929735	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	16.4
trust region repeats	-396.0408929735	293.0	293.0	293.0	1.0	42.0	19.2

Table 1562: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7726202089	11571.6	11571.6	11571.6	16.0	42.0	1349.4
cch second order	-457.7726201639	291.0	147.0	147.0	nan	42.0	19.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-373.6731914186	42301.0	0.0	0.0	nan	42.0	560.9
direct with trim	-457.7726202089	42336.2	33.2	33.2	nan	42.0	516.4
dual anneal	-457.7726202063	84026.0	24.0	24.0	1.0	42.0	856.7
trust region	-457.7726202089	18.0	18.0	18.0	nan	42.0	17.6
trust region repeats	-457.7726202089	313.0	313.0	313.0	1.0	42.0	17.2

Table 1563: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7550130867	11191.6	11191.6	11191.6	17.2	42.0	1360.3
cch second order	-524.7549951028	223.0	118.0	118.0	nan	42.0	29.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-418.9602142217	42149.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.4
direct with trim	-524.7549950496	42185.0	34.0	34.0	nan	42.0	402.7
dual anneal	-524.7549950466	84020.8	18.8	18.8	1.0	42.0	865.8
trust region	-524.7549950496	20.0	20.0	20.0	nan	42.0	14.8
trust region repeats	-524.7549950496	326.0	326.0	326.0	1.0	42.0	18.9

Table 1564: Ar

55.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.5666264168
He	cch second order	-2.8183587787
Li	cch second order	-7.3227197091
Be	cch second order	-14.4841045229
B	basin hopping	-24.6284292558
C	basin hopping	-38.0332958342
N	basin hopping	-54.9428913149
O	cch second order	-75.5766216626
F	cch second order	-100.1346311234
Ne	basin hopping	-128.8015825540
Na	basin hopping	-161.7493475945
Mg	basin hopping	-199.1407689543
Al	basin hopping	-241.1225124294
Si	cch second order	-287.8437606047
P	basin hopping	-339.4396558292
S	cch second order	-396.0408929738
Cl	basin hopping	-457.7726202089
Ar	basin hopping	-524.7550130867

Table 1565: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	231.2	119.3	119.3	nan	-169.7317791549	21.2
basin hopping	14338.8	14338.8	14338.8	14.9	-169.7318795951	1439.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.2	13.2	13.2	nan	-169.7317791503	17.4
trust region repeats	272.8	272.8	272.8	1.2	-169.7317791503	19.4
direct	42256.9	0.0	0.0	nan	-158.3115522446	520.1
direct with trim	42271.4	12.5	12.5	nan	-169.7257299944	500.1
dual anneal	84029.7	27.7	27.7	1.0	-169.7317791494	940.3

Table 1566: Average (all systems)

56 42s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

56.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266265	694.0	694.0	0.0	nan	42.0	36.2
He	-1.4774505672	690.0	690.0	0.0	nan	42.0	31.9
Li	-4.1054250367	981.0	981.0	0.0	nan	42.0	35.4
Be	-8.4921856944	978.0	978.0	0.0	nan	42.0	32.3
B	-14.9258826183	922.0	922.0	0.0	nan	42.0	20.6
C	-23.6568740846	814.0	814.0	0.0	nan	42.0	16.8
N	-34.9084346521	861.0	861.0	0.0	nan	42.0	33.4
O	-48.8832265122	926.0	926.0	0.0	nan	42.0	21.6
F	-65.7675715049	907.0	907.0	0.0	nan	42.0	23.0
Ne	-85.7344465041	866.0	866.0	0.0	nan	42.0	22.9
Na	-108.9456785520	855.0	855.0	0.0	nan	42.0	34.8
Mg	-135.5536091261	864.0	864.0	0.0	nan	42.0	21.1
Al	-165.7023905070	1027.0	1027.0	0.0	nan	42.0	36.1
Si	-199.5290181241	951.0	951.0	0.0	nan	42.0	21.3
P	-237.1641679474	1048.0	1048.0	0.0	nan	42.0	32.1
S	-278.7328864061	973.0	973.0	0.0	nan	42.0	35.4
Cl	-324.3551664979	1069.0	1069.0	0.0	nan	42.0	32.6
Ar	-374.1464344884	1095.0	1095.0	0.0	nan	42.0	22.5

Table 1567: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266412	17426.8	17426.8	17426.8	14.2	42.0	1879.7
He	-1.4774513655	15355.4	15355.4	15355.4	14.8	42.0	1662.3
Li	-4.1054339937	14302.8	14302.8	14302.8	12.6	42.0	1577.2
Be	-8.4921857060	13732.0	13732.0	13732.0	15.4	42.0	1565.0
B	-14.9258826314	13941.0	13941.0	13941.0	12.0	42.0	1604.9
C	-23.6568740980	12839.2	12839.2	12839.2	11.0	42.0	1620.4
N	-34.9084463675	13035.4	13035.4	13035.4	12.2	42.0	1784.9
O	-48.8832265311	12733.2	12733.2	12733.2	10.4	42.0	1510.9
F	-65.7675715326	11519.6	11519.6	11519.6	10.0	42.0	1273.8
Ne	-85.7344465456	13397.8	13397.8	13397.8	11.8	42.0	1500.2
Na	-108.9456877016	11647.0	11647.0	11647.0	8.2	42.0	1228.2
Mg	-135.5536297702	11650.2	11650.2	11650.2	9.2	42.0	1396.6
Al	-165.7026492463	11446.8	11446.8	11446.8	9.0	42.0	1532.1
Si	-199.5290183226	10471.6	10471.6	10471.6	9.0	42.0	1268.3
P	-237.1641682291	10295.6	10295.6	10295.6	7.6	42.0	1599.8
S	-278.7328867956	10648.6	10648.6	10648.6	8.6	42.0	1337.2
Cl	-324.3551670283	9739.8	9739.8	9739.8	8.0	42.0	1332.1
Ar	-374.1464351997	10956.0	10956.0	10956.0	8.6	42.0	1273.8

Table 1568: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266507	215.0	106.0	106.0	nan	42.0	17.2
He	-1.4774505788	214.0	116.0	116.0	nan	42.0	26.9
Li	-4.1054249234	158.0	81.0	81.0	nan	42.0	27.3
Be	-8.4921857035	201.0	99.0	99.0	nan	42.0	17.5
B	-14.9258827661	226.0	115.0	115.0	nan	42.0	29.8
C	-23.6568742540	236.0	102.0	102.0	nan	42.0	29.6
N	-34.9084347746	212.0	103.0	103.0	nan	42.0	33.6
O	-48.8832263845	184.0	92.0	92.0	nan	42.0	18.6
F	-65.7675713897	182.0	87.0	87.0	nan	42.0	32.9
Ne	-85.7344464229	203.0	93.0	93.0	nan	42.0	27.0
Na	-108.9456785365	211.0	100.0	100.0	nan	42.0	29.0
Mg	-135.5536091908	202.0	99.0	99.0	nan	42.0	26.2
Al	-165.7023905095	190.0	88.0	88.0	nan	42.0	17.4
Si	-199.5290183887	222.0	101.0	101.0	nan	42.0	28.9
P	-237.1641681336	209.0	105.0	105.0	nan	42.0	26.8
S	-278.7328867056	219.0	111.0	111.0	nan	42.0	17.0
Cl	-324.3551671105	207.0	105.0	105.0	nan	42.0	17.8
Ar	-374.1464353833	211.0	108.0	108.0	nan	42.0	18.2

Table 1569: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1570: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618160238	42091.0	0.0	0.0	nan	42.0	491.2
He	-1.4765581527	42177.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.3
Li	-4.1048430031	42333.0	0.0	0.0	nan	42.0	520.9
Be	-8.4735898412	42375.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.0
B	-14.8817827507	42233.0	0.0	0.0	nan	42.0	420.4
C	-23.6268871548	42339.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.2
N	-34.8833319039	42181.0	0.0	0.0	nan	42.0	445.4
O	-48.8212459367	42183.0	0.0	0.0	nan	42.0	526.9
F	-65.5920414487	42433.0	0.0	0.0	nan	42.0	487.3
Ne	-85.5868372463	42071.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.1
Na	-108.7640552494	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	507.1
Mg	-135.1091550087	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	523.4
Al	-165.4252674942	42291.0	0.0	0.0	nan	42.0	522.4
Si	-199.3649594976	42125.0	0.0	0.0	nan	42.0	538.4
P	-236.8844116724	42321.0	0.0	0.0	nan	42.0	484.6
S	-277.7582608789	42041.0	0.0	0.0	nan	42.0	542.2
Cl	-323.4509353764	42405.0	0.0	0.0	nan	42.0	514.2
Ar	-373.2341543798	42207.0	0.0	0.0	nan	42.0	523.6

Table 1571: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266412	42100.0	7.0	7.0	nan	42.0	523.1
He	-1.4774505797	42185.0	6.0	6.0	nan	42.0	492.8
Li	-4.1054250407	42340.0	5.0	5.0	nan	42.0	524.1
Be	-8.4921857060	42383.0	6.0	6.0	nan	42.0	576.9
B	-14.9258826314	42242.0	7.0	7.0	nan	42.0	524.6
C	-23.6568740979	42347.0	6.0	6.0	nan	42.0	571.0
N	-34.9084346667	42189.0	6.0	6.0	nan	42.0	575.8
O	-48.8832265308	42191.0	6.0	6.0	nan	42.0	567.5
F	-65.7675715318	42445.4	10.4	10.4	nan	42.0	593.5
Ne	-85.7344465452	42079.0	6.0	6.0	nan	42.0	621.7
Na	-108.9456786147	42426.0	7.0	7.0	nan	42.0	552.0
Mg	-135.5536092201	42426.0	7.0	7.0	nan	42.0	579.1
Al	-165.7023906441	42300.0	7.0	7.0	nan	42.0	544.6
Si	-199.5290183224	42133.0	6.0	6.0	nan	42.0	595.1
P	-237.1641682280	42330.0	7.0	7.0	nan	42.0	627.1
S	-278.7328867955	42049.0	6.0	6.0	nan	42.0	512.8
Cl	-324.3551670279	42414.0	7.0	7.0	nan	42.0	550.9
Ar	-374.1464351981	42216.0	7.0	7.0	nan	42.0	580.4

Table 1572: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266412	84010.2	8.2	8.2	1.0	42.0	802.5
He	-1.4774505797	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	1087.9
Li	-4.1054250407	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	805.3
Be	-8.4921857060	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	1071.9
B	-14.9258826314	84012.2	10.2	10.2	1.0	42.0	930.8
C	-23.6568740979	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	891.7
N	-34.9084346666	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	985.7
O	-48.8832265308	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1024.0
F	-65.7675715318	84011.8	9.8	9.8	1.0	42.0	984.0
Ne	-85.7344465451	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	960.9
Na	-108.9456786146	84013.8	11.8	11.8	1.0	42.0	1000.4
Mg	-135.5536092200	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	957.8
Al	-165.7023906439	84013.8	11.8	11.8	1.0	42.0	960.7
Si	-199.5290183222	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	1086.2
P	-237.1641682277	84013.0	11.0	11.0	1.0	42.0	1001.4
S	-278.7328867951	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	886.2
Cl	-324.3551670275	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	881.4
Ar	-374.1464351975	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1119.9

Table 1573: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266412	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	25.4
He	-1.4774505797	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	13.4
Li	-4.1054250407	8.0	8.0	8.0	nan	42.0	23.6
Be	-8.4921857060	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	14.7
B	-14.9258826314	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.5
C	-23.6568740979	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.5
N	-34.9084346667	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	11.9
O	-48.8832265313	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.5
F	-65.7675715318	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.7
Ne	-85.7344465452	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.4
Na	-108.9456786147	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	13.4
Mg	-135.5536092201	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	28.6
Al	-165.7023906441	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	34.9
Si	-199.5290183224	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	25.9
P	-237.1641682280	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	21.3
S	-278.7328867955	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	24.2
Cl	-324.3551657300	26.0	26.0	26.0	nan	42.0	23.3
Ar	-374.1464351981	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	14.5

Table 1574: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266412	246.0	246.0	246.0	1.0	42.0	19.1
He	-1.4774505797	244.0	244.0	244.0	1.0	42.0	20.3
Li	-4.1054250407	235.0	235.0	235.0	1.0	42.0	18.6
Be	-8.4921857060	264.0	264.0	264.0	1.0	42.0	18.7
B	-14.9258826314	248.0	248.0	248.0	1.0	42.0	18.0
C	-23.6568740979	242.0	242.0	242.0	2.0	42.0	19.5
N	-34.9084346667	241.0	241.0	241.0	2.0	42.0	19.4
O	-48.8832265308	241.0	241.0	241.0	2.0	42.0	18.2
F	-65.7675715318	248.0	248.0	248.0	1.0	42.0	18.3
Ne	-85.7344465452	258.0	258.0	258.0	2.0	42.0	18.1
Na	-108.9456786147	253.0	253.0	253.0	1.0	42.0	18.8
Mg	-135.5536092201	262.0	262.0	262.0	2.0	42.0	18.1
Al	-165.7023906441	259.0	259.0	259.0	1.0	42.0	20.1
Si	-199.5290183224	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.6
P	-237.1641682280	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	21.3
S	-278.7328867955	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.3
Cl	-324.3551670279	261.0	261.0	261.0	1.0	42.0	21.3
Ar	-374.1464351981	263.0	263.0	263.0	1.0	42.0	18.7

Table 1575: trust region repeats

56.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618266265	694.0	694.0	0.0	nan	42.0	36.2
basin hopping	-0.2618266412	17426.8	17426.8	17426.8	14.2	42.0	1879.7
cch second order	-0.2618266507	215.0	106.0	106.0	nan	42.0	17.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.2618160238	42091.0	0.0	0.0	nan	42.0	491.2
direct with trim	-0.2618266412	42100.0	7.0	7.0	nan	42.0	523.1
dual anneal	-0.2618266412	84010.2	8.2	8.2	1.0	42.0	802.5
trust region	-0.2618266412	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	25.4
trust region repeats	-0.2618266412	246.0	246.0	246.0	1.0	42.0	19.1

Table 1576: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774505672	690.0	690.0	0.0	nan	42.0	31.9
basin hopping	-1.4774513655	15355.4	15355.4	15355.4	14.8	42.0	1662.3
cch second order	-1.4774505788	214.0	116.0	116.0	nan	42.0	26.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1.4765581527	42177.0	0.0	0.0	nan	42.0	557.3
direct with trim	-1.4774505797	42185.0	6.0	6.0	nan	42.0	492.8
dual anneal	-1.4774505797	84011.6	9.6	9.6	1.0	42.0	1087.9
trust region	-1.4774505797	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	13.4
trust region repeats	-1.4774505797	244.0	244.0	244.0	1.0	42.0	20.3

Table 1577: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054250367	981.0	981.0	0.0	nan	42.0	35.4
basin hopping	-4.1054339937	14302.8	14302.8	14302.8	12.6	42.0	1577.2
cch second order	-4.1054249234	158.0	81.0	81.0	nan	42.0	27.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-4.1048430031	42333.0	0.0	0.0	nan	42.0	520.9
direct with trim	-4.1054250407	42340.0	5.0	5.0	nan	42.0	524.1
dual anneal	-4.1054250407	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	805.3
trust region	-4.1054250407	8.0	8.0	8.0	nan	42.0	23.6
trust region repeats	-4.1054250407	235.0	235.0	235.0	1.0	42.0	18.6

Table 1578: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921856944	978.0	978.0	0.0	nan	42.0	32.3
basin hopping	-8.4921857060	13732.0	13732.0	13732.0	15.4	42.0	1565.0
cch second order	-8.4921857035	201.0	99.0	99.0	nan	42.0	17.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.4735898412	42375.0	0.0	0.0	nan	42.0	481.0
direct with trim	-8.4921857060	42383.0	6.0	6.0	nan	42.0	576.9
dual anneal	-8.4921857060	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	1071.9
trust region	-8.4921857060	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	14.7
trust region repeats	-8.4921857060	264.0	264.0	264.0	1.0	42.0	18.7

Table 1579: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258826183	922.0	922.0	0.0	nan	42.0	20.6
basin hopping	-14.9258826314	13941.0	13941.0	13941.0	12.0	42.0	1604.9
cch second order	-14.9258827661	226.0	115.0	115.0	nan	42.0	29.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.8817827507	42233.0	0.0	0.0	nan	42.0	420.4
direct with trim	-14.9258826314	42242.0	7.0	7.0	nan	42.0	524.6
dual anneal	-14.9258826314	84012.2	10.2	10.2	1.0	42.0	930.8
trust region	-14.9258826314	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.5
trust region repeats	-14.9258826314	248.0	248.0	248.0	1.0	42.0	18.0

Table 1580: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568740846	814.0	814.0	0.0	nan	42.0	16.8
basin hopping	-23.6568740980	12839.2	12839.2	12839.2	11.0	42.0	1620.4
cch second order	-23.6568742540	236.0	102.0	102.0	nan	42.0	29.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-23.6268871548	42339.0	0.0	0.0	nan	42.0	512.2
direct with trim	-23.6568740979	42347.0	6.0	6.0	nan	42.0	571.0
dual anneal	-23.6568740979	84012.8	10.8	10.8	1.0	42.0	891.7
trust region	-23.6568740979	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.5
trust region repeats	-23.6568740979	242.0	242.0	242.0	2.0	42.0	19.5

Table 1581: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9084346521	861.0	861.0	0.0	nan	42.0	33.4
basin hopping	-34.9084463675	13035.4	13035.4	13035.4	12.2	42.0	1784.9
cch second order	-34.9084347746	212.0	103.0	103.0	nan	42.0	33.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-34.8833319039	42181.0	0.0	0.0	nan	42.0	445.4
direct with trim	-34.9084346667	42189.0	6.0	6.0	nan	42.0	575.8
dual anneal	-34.9084346666	84014.6	12.6	12.6	1.0	42.0	985.7
trust region	-34.9084346667	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	11.9
trust region repeats	-34.9084346667	241.0	241.0	241.0	2.0	42.0	19.4

Table 1582: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8832265122	926.0	926.0	0.0	nan	42.0	21.6
basin hopping	-48.8832265311	12733.2	12733.2	12733.2	10.4	42.0	1510.9
cch second order	-48.8832263845	184.0	92.0	92.0	nan	42.0	18.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-48.8212459367	42183.0	0.0	0.0	nan	42.0	526.9
direct with trim	-48.8832265308	42191.0	6.0	6.0	nan	42.0	567.5
dual anneal	-48.8832265308	84013.6	11.6	11.6	1.0	42.0	1024.0
trust region	-48.8832265313	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	14.5
trust region repeats	-48.8832265308	241.0	241.0	241.0	2.0	42.0	18.2

Table 1583: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7675715049	907.0	907.0	0.0	nan	42.0	23.0
basin hopping	-65.7675715326	11519.6	11519.6	11519.6	10.0	42.0	1273.8
cch second order	-65.7675713897	182.0	87.0	87.0	nan	42.0	32.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-65.5920414487	42433.0	0.0	0.0	nan	42.0	487.3
direct with trim	-65.7675715318	42445.4	10.4	10.4	nan	42.0	593.5
dual anneal	-65.7675715318	84011.8	9.8	9.8	1.0	42.0	984.0
trust region	-65.7675715318	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	23.7
trust region repeats	-65.7675715318	248.0	248.0	248.0	1.0	42.0	18.3

Table 1584: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7344465041	866.0	866.0	0.0	nan	42.0	22.9
basin hopping	-85.7344465456	13397.8	13397.8	13397.8	11.8	42.0	1500.2
cch second order	-85.7344464229	203.0	93.0	93.0	nan	42.0	27.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-85.5868372463	42071.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.1
direct with trim	-85.7344465452	42079.0	6.0	6.0	nan	42.0	621.7
dual anneal	-85.7344465451	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	960.9
trust region	-85.7344465452	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	23.4
trust region repeats	-85.7344465452	258.0	258.0	258.0	2.0	42.0	18.1

Table 1585: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9456785520	855.0	855.0	0.0	nan	42.0	34.8
basin hopping	-108.9456877016	11647.0	11647.0	11647.0	8.2	42.0	1228.2
cch second order	-108.9456785365	211.0	100.0	100.0	nan	42.0	29.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-108.7640552494	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	507.1
direct with trim	-108.9456786147	42426.0	7.0	7.0	nan	42.0	552.0
dual anneal	-108.9456786146	84013.8	11.8	11.8	1.0	42.0	1000.4
trust region	-108.9456786147	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	13.4
trust region repeats	-108.9456786147	253.0	253.0	253.0	1.0	42.0	18.8

Table 1586: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5536091261	864.0	864.0	0.0	nan	42.0	21.1
basin hopping	-135.5536297702	11650.2	11650.2	11650.2	9.2	42.0	1396.6
cch second order	-135.5536091908	202.0	99.0	99.0	nan	42.0	26.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-135.1091550087	42417.0	0.0	0.0	nan	42.0	523.4
direct with trim	-135.5536092201	42426.0	7.0	7.0	nan	42.0	579.1
dual anneal	-135.5536092200	84015.0	13.0	13.0	1.0	42.0	957.8
trust region	-135.5536092201	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	28.6
trust region repeats	-135.5536092201	262.0	262.0	262.0	2.0	42.0	18.1

Table 1587: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7023905070	1027.0	1027.0	0.0	nan	42.0	36.1
basin hopping	-165.7026492463	11446.8	11446.8	11446.8	9.0	42.0	1532.1
cch second order	-165.7023905095	190.0	88.0	88.0	nan	42.0	17.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-165.4252674942	42291.0	0.0	0.0	nan	42.0	522.4
direct with trim	-165.7023906441	42300.0	7.0	7.0	nan	42.0	544.6
dual anneal	-165.7023906439	84013.8	11.8	11.8	1.0	42.0	960.7
trust region	-165.7023906441	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	34.9
trust region repeats	-165.7023906441	259.0	259.0	259.0	1.0	42.0	20.1

Table 1588: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5290181241	951.0	951.0	0.0	nan	42.0	21.3
basin hopping	-199.5290183226	10471.6	10471.6	10471.6	9.0	42.0	1268.3
cch second order	-199.5290183887	222.0	101.0	101.0	nan	42.0	28.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-199.3649594976	42125.0	0.0	0.0	nan	42.0	538.4
direct with trim	-199.5290183224	42133.0	6.0	6.0	nan	42.0	595.1
dual anneal	-199.5290183222	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	1086.2
trust region	-199.5290183224	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	25.9
trust region repeats	-199.5290183224	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.6

Table 1589: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1641679474	1048.0	1048.0	0.0	nan	42.0	32.1
basin hopping	-237.1641682291	10295.6	10295.6	10295.6	7.6	42.0	1599.8
cch second order	-237.1641681336	209.0	105.0	105.0	nan	42.0	26.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-236.8844116724	42321.0	0.0	0.0	nan	42.0	484.6
direct with trim	-237.1641682280	42330.0	7.0	7.0	nan	42.0	627.1
dual anneal	-237.1641682277	84013.0	11.0	11.0	1.0	42.0	1001.4
trust region	-237.1641682280	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	21.3
trust region repeats	-237.1641682280	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	21.3

Table 1590: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7328864061	973.0	973.0	0.0	nan	42.0	35.4
basin hopping	-278.7328867956	10648.6	10648.6	10648.6	8.6	42.0	1337.2
cch second order	-278.7328867056	219.0	111.0	111.0	nan	42.0	17.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-277.7582608789	42041.0	0.0	0.0	nan	42.0	542.2
direct with trim	-278.7328867955	42049.0	6.0	6.0	nan	42.0	512.8
dual anneal	-278.7328867951	84014.4	12.4	12.4	1.0	42.0	886.2
trust region	-278.7328867955	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	24.2
trust region repeats	-278.7328867955	260.0	260.0	260.0	1.0	42.0	18.3

Table 1591: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3551664979	1069.0	1069.0	0.0	nan	42.0	32.6
basin hopping	-324.3551670283	9739.8	9739.8	9739.8	8.0	42.0	1332.1
cch second order	-324.3551671105	207.0	105.0	105.0	nan	42.0	17.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-323.4509353764	42405.0	0.0	0.0	nan	42.0	514.2
direct with trim	-324.3551670279	42414.0	7.0	7.0	nan	42.0	550.9
dual anneal	-324.3551670275	84015.8	13.8	13.8	1.0	42.0	881.4
trust region	-324.3551657300	26.0	26.0	26.0	nan	42.0	23.3
trust region repeats	-324.3551670279	261.0	261.0	261.0	1.0	42.0	21.3

Table 1592: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1464344884	1095.0	1095.0	0.0	nan	42.0	22.5
basin hopping	-374.1464351997	10956.0	10956.0	10956.0	8.6	42.0	1273.8
cch second order	-374.1464353833	211.0	108.0	108.0	nan	42.0	18.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-373.2341543798	42207.0	0.0	0.0	nan	42.0	523.6
direct with trim	-374.1464351981	42216.0	7.0	7.0	nan	42.0	580.4
dual anneal	-374.1464351975	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1119.9
trust region	-374.1464351981	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	14.5
trust region repeats	-374.1464351981	263.0	263.0	263.0	1.0	42.0	18.7

Table 1593: Ar

56.3　Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.2618266507
He	basin hopping	-1.4774513655
Li	basin hopping	-4.1054339937
Be	basin hopping	-8.4921857060
B	cch second order	-14.9258827661
C	cch second order	-23.6568742540
N	basin hopping	-34.9084463675
O	trust region	-48.8832265313
F	basin hopping	-65.7675715326
Ne	basin hopping	-85.7344465456
Na	basin hopping	-108.9456877016
Mg	basin hopping	-135.5536297702
Al	basin hopping	-165.7026492463
Si	cch second order	-199.5290183887
P	basin hopping	-237.1641682291
S	basin hopping	-278.7328867956
Cl	cch second order	-324.3551671105
Ar	cch second order	-374.1464353833

Table 1594: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
cch second order	205.7	100.6	100.6	nan	-117.3523709893	24.5
acevedo	917.8	917.8	0.0	nan	-117.3523708583	28.3
basin hopping	12507.7	12507.7	12507.7	10.7	-117.3523882059	1497.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.2	12.2	12.2	nan	-117.3523709292	21.3
trust region repeats	252.5	252.5	252.5	1.3	-117.3523710012	19.1
direct	42257.8	0.0	0.0	nan	-117.0944518344	505.4
direct with trim	42266.4	6.6	6.6	nan	-117.3523710012	561.8
dual anneal	84013.7	11.7	11.7	1.0	-117.3523710011	968.8

Table 1595: Average (all systems)

57   42s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

57.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1596: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340974	15253.8	15253.8	15253.8	15.2	42.0	1886.8
He	-2.7236398092	11850.4	11850.4	11850.4	9.2	42.0	1506.6
Li	-8.5258250343	9787.6	9787.6	9787.6	7.4	42.0	1494.2
Be	-19.3528901917	10135.0	10135.0	10135.0	6.8	42.0	1560.8
B	-36.7292851193	7651.4	7651.4	7651.4	5.0	42.0	1295.5
C	-62.1695474291	6565.8	6565.8	6565.8	4.4	42.0	1267.8
N	-97.1827259097	6012.0	6012.0	6012.0	3.6	42.0	1191.0
O	-143.2726018232	5208.4	5208.4	5208.4	4.0	42.0	1126.2
F	-201.9394869081	4548.2	4548.2	4548.2	3.4	42.0	1026.1
Ne	-274.6807992074	4344.0	4344.0	4344.0	3.2	42.0	1206.9
Na	-362.9915783678	3472.8	3472.8	3472.8	2.0	42.0	863.0
Mg	-468.3648677460	3117.4	3117.4	3117.4	2.0	42.0	874.2
Al	-592.2920066838	3037.2	3037.2	3037.2	1.6	42.0	782.5
Si	-736.2628596225	2834.0	2834.0	2834.0	1.8	42.0	832.8
P	-901.7659995355	2693.8	2693.8	2693.8	1.2	42.0	715.9
S	-1090.2888572712	2765.0	2765.0	2765.0	1.4	42.0	786.8
Cl	-1303.3178450488	2571.2	2571.2	2571.2	1.4	42.0	812.7
Ar	-1542.3384598223	2518.0	2518.0	2518.0	1.4	42.0	836.0

Table 1597: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340446	252.0	102.0	102.0	nan	42.0	17.6
He	-2.7236399971	213.0	109.0	109.0	nan	42.0	17.7
Li	-8.5258243515	217.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.7
Be	-19.3528912805	276.0	150.0	150.0	nan	42.0	31.6
B	-36.7291388043	352.0	182.0	182.0	nan	42.0	33.1
C	-62.1695454306	454.0	215.0	215.0	nan	42.0	22.5
N	-97.1827273747	586.0	295.0	295.0	nan	42.0	36.3
O	-143.2726021263	513.0	288.0	288.0	nan	42.0	24.6
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1598: cch second order

677

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1599: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065277000	42191.0	0.0	0.0	nan	42.0	498.4
He	-2.7234974124	42395.0	0.0	0.0	nan	42.0	551.4
Li	-8.5235387815	42163.0	0.0	0.0	nan	42.0	513.0
Be	-19.3481083152	42083.0	0.0	0.0	nan	42.0	486.4
B	-36.7214185523	42023.0	0.0	0.0	nan	42.0	496.5
C	-62.1581271015	42227.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.9
N	-97.1697903993	42407.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.8
O	-143.2491870098	42433.0	0.0	0.0	nan	42.0	549.5
F	-201.9116953653	42225.0	0.0	0.0	nan	42.0	477.1
Ne	-274.6339605049	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	530.7
Na	-362.8791397482	42459.0	0.0	0.0	nan	42.0	487.7
Mg	-468.2641615899	42093.0	0.0	0.0	nan	42.0	493.8
Al	-592.2105855934	42469.0	0.0	0.0	nan	42.0	442.6
Si	-736.1238399789	42349.0	0.0	0.0	nan	42.0	457.0
P	-901.6068502307	42195.0	0.0	0.0	nan	42.0	435.4
S	-1090.1397969936	42053.0	0.0	0.0	nan	42.0	457.2
Cl	-1303.1188715818	42505.0	0.0	0.0	nan	42.0	558.1
Ar	-1542.0975546427	42381.0	0.0	0.0	nan	42.0	517.5

Table 1600: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340974	42198.0	5.0	5.0	nan	42.0	583.1
He	-2.7236398091	42402.0	5.0	5.0	nan	42.0	456.2
Li	-8.5258250342	42170.0	5.0	5.0	nan	42.0	582.0
Be	-19.3528901917	42090.0	5.0	5.0	nan	42.0	512.8
B	-36.7291386400	42030.0	5.0	5.0	nan	42.0	498.9
C	-62.1695474291	42241.0	12.0	12.0	nan	42.0	538.0
N	-97.1827259097	42415.0	6.0	6.0	nan	42.0	527.9
O	-143.2726018232	42440.0	5.0	5.0	nan	42.0	558.0
F	-201.9394869081	42233.0	6.0	6.0	nan	42.0	526.3
Ne	-274.6807992074	42166.0	5.0	5.0	nan	42.0	562.5
Na	-362.9915783678	42467.0	6.0	6.0	nan	42.0	477.1
Mg	-468.3648677460	42101.0	6.0	6.0	nan	42.0	582.4
Al	-592.2920066838	42477.0	6.0	6.0	nan	42.0	538.4
Si	-736.2628596224	42360.0	9.0	9.0	nan	42.0	498.0
P	-901.7619751535	42204.0	7.0	7.0	nan	42.0	469.2
S	-1090.2888572712	42061.0	6.0	6.0	nan	42.0	583.1
Cl	-1303.3178450488	42513.0	6.0	6.0	nan	42.0	488.3
Ar	-1542.3384598223	42389.0	6.0	6.0	nan	42.0	492.6

Table 1601: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340973	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	944.0
He	-2.7236398091	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	1045.7
Li	-8.5258250342	84012.2	10.2	10.2	1.0	42.0	971.0
Be	-19.3528901915	84012.6	10.6	10.6	1.0	42.0	1049.1
B	-36.7291386394	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1081.6
C	-62.1695474273	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1050.0
N	-97.1827259056	84017.4	15.4	15.4	1.0	42.0	1044.1
O	-143.2726018145	84016.8	14.8	14.8	1.0	42.0	1072.0
F	-201.9394868912	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	843.2
Ne	-274.6807991766	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	1043.1
Na	-362.9915783150	84019.2	17.2	17.2	1.0	42.0	942.4
Mg	-468.3648676593	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	974.5
Al	-592.2920065470	84023.4	21.4	21.4	1.0	42.0	867.6
Si	-736.2628594134	84026.0	24.0	24.0	1.0	42.0	896.4
P	-901.7659992250	84027.6	25.6	25.6	1.0	42.0	917.3
S	-1090.2888568213	84029.4	27.4	27.4	1.0	42.0	884.3
Cl	-1303.3178444113	84028.8	26.8	26.8	1.0	42.0	882.8
Ar	-1542.3384589363	84031.2	29.2	29.2	1.0	42.0	1034.7

Table 1602: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340973	8.0	8.0	8.0	nan	42.0	14.6
He	-2.7236398091	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.8
Li	-8.5258250342	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	21.5
Be	-19.3528901917	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.5
B	-36.7291386400	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.0
C	-62.1695474291	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	22.0
N	-97.1827259097	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	24.2
O	-143.2726018232	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	16.7
F	-201.9394869081	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	16.9
Ne	-274.6807992074	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	17.3
Na	-362.9915783678	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	14.3
Mg	-468.3648677460	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	41.5
Al	-592.2920066838	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	16.9
Si	-736.2628596225	19.0	19.0	19.0	nan	42.0	15.0
P	-901.7659995355	21.0	21.0	21.0	nan	42.0	28.3
S	-1090.2888572712	22.0	22.0	22.0	nan	42.0	29.5
Cl	-1303.3178450488	24.0	24.0	24.0	nan	42.0	17.4
Ar	-1542.3384598223	26.0	26.0	26.0	nan	42.0	30.1

Table 1603: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340973	168.0	168.0	168.0	1.0	42.0	17.7
He	-2.7236398091	181.0	181.0	181.0	1.0	42.0	19.3
Li	-8.5258250343	220.0	220.0	220.0	1.0	42.0	19.5
Be	-19.3528901917	205.0	205.0	205.0	1.0	42.0	22.2
B	-36.7291386400	202.0	202.0	202.0	1.0	42.0	21.4
C	-62.1695474291	211.0	211.0	211.0	1.0	42.0	19.8
N	-97.1827259097	246.0	246.0	246.0	1.0	42.0	21.0
O	-143.2726018232	252.0	252.0	252.0	1.0	42.0	21.5
F	-201.9394869081	279.0	279.0	279.0	1.0	42.0	21.7
Ne	-274.6807992074	308.0	308.0	308.0	1.0	42.0	21.7
Na	-362.9915783678	321.0	321.0	321.0	1.0	42.0	20.8
Mg	-468.3648677460	352.0	352.0	352.0	1.0	42.0	23.0
Al	-592.2920066838	388.0	388.0	388.0	1.0	42.0	24.3
Si	-736.2628596225	446.0	446.0	446.0	1.0	42.0	23.7
P	-901.7659995355	472.0	472.0	472.0	1.0	42.0	25.8
S	-1090.2888572712	513.0	513.0	513.0	1.0	42.0	25.1
Cl	-1303.3178450488	553.0	553.0	553.0	1.0	42.0	23.9
Ar	-1542.3384598223	615.0	615.0	615.0	1.0	42.0	25.4

Table 1604: trust region repeats

57.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065340974	15253.8	15253.8	15253.8	15.2	42.0	1886.8
cch second order	-0.4065340446	252.0	102.0	102.0	nan	42.0	17.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.4065277000	42191.0	0.0	0.0	nan	42.0	498.4
direct with trim	-0.4065340974	42198.0	5.0	5.0	nan	42.0	583.1
dual anneal	-0.4065340973	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	944.0
trust region	-0.4065340973	8.0	8.0	8.0	nan	42.0	14.6
trust region repeats	-0.4065340973	168.0	168.0	168.0	1.0	42.0	17.7

Table 1605: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236398092	11850.4	11850.4	11850.4	9.2	42.0	1506.6
cch second order	-2.7236399971	213.0	109.0	109.0	nan	42.0	17.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.7234974124	42395.0	0.0	0.0	nan	42.0	551.4
direct with trim	-2.7236398091	42402.0	5.0	5.0	nan	42.0	456.2
dual anneal	-2.7236398091	84011.0	9.0	9.0	1.0	42.0	1045.7
trust region	-2.7236398091	9.0	9.0	9.0	nan	42.0	14.8
trust region repeats	-2.7236398091	181.0	181.0	181.0	1.0	42.0	19.3

Table 1606: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5258250343	9787.6	9787.6	9787.6	7.4	42.0	1494.2
cch second order	-8.5258243515	217.0	117.0	117.0	nan	42.0	18.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.5235387815	42163.0	0.0	0.0	nan	42.0	513.0
direct with trim	-8.5258250342	42170.0	5.0	5.0	nan	42.0	582.0
dual anneal	-8.5258250342	84012.2	10.2	10.2	1.0	42.0	971.0
trust region	-8.5258250342	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	21.5
trust region repeats	-8.5258250343	220.0	220.0	220.0	1.0	42.0	19.5

Table 1607: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3528901917	10135.0	10135.0	10135.0	6.8	42.0	1560.8
cch second order	-19.3528912805	276.0	150.0	150.0	nan	42.0	31.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-19.3481083152	42083.0	0.0	0.0	nan	42.0	486.4
direct with trim	-19.3528901917	42090.0	5.0	5.0	nan	42.0	512.8
dual anneal	-19.3528901915	84012.6	10.6	10.6	1.0	42.0	1049.1
trust region	-19.3528901917	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.5
trust region repeats	-19.3528901917	205.0	205.0	205.0	1.0	42.0	22.2

Table 1608: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7292851193	7651.4	7651.4	7651.4	5.0	42.0	1295.5
cch second order	-36.7291388043	352.0	182.0	182.0	nan	42.0	33.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-36.7214185523	42023.0	0.0	0.0	nan	42.0	496.5
direct with trim	-36.7291386400	42030.0	5.0	5.0	nan	42.0	498.9
dual anneal	-36.7291386394	84014.2	12.2	12.2	1.0	42.0	1081.6
trust region	-36.7291386400	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	21.0
trust region repeats	-36.7291386400	202.0	202.0	202.0	1.0	42.0	21.4

Table 1609: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1695474291	6565.8	6565.8	6565.8	4.4	42.0	1267.8
cch second order	-62.1695454306	454.0	215.0	215.0	nan	42.0	22.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-62.1581271015	42227.0	0.0	0.0	nan	42.0	541.9
direct with trim	-62.1695474291	42241.0	12.0	12.0	nan	42.0	538.0
dual anneal	-62.1695474273	84016.0	14.0	14.0	1.0	42.0	1050.0
trust region	-62.1695474291	10.0	10.0	10.0	nan	42.0	22.0
trust region repeats	-62.1695474291	211.0	211.0	211.0	1.0	42.0	19.8

Table 1610: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1827259097	6012.0	6012.0	6012.0	3.6	42.0	1191.0
cch second order	-97.1827273747	586.0	295.0	295.0	nan	42.0	36.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-97.1697903993	42407.0	0.0	0.0	nan	42.0	499.8
direct with trim	-97.1827259097	42415.0	6.0	6.0	nan	42.0	527.9
dual anneal	-97.1827259056	84017.4	15.4	15.4	1.0	42.0	1044.1
trust region	-97.1827259097	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	24.2
trust region repeats	-97.1827259097	246.0	246.0	246.0	1.0	42.0	21.0

Table 1611: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2726018232	5208.4	5208.4	5208.4	4.0	42.0	1126.2
cch second order	-143.2726021263	513.0	288.0	288.0	nan	42.0	24.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-143.2491870098	42433.0	0.0	0.0	nan	42.0	549.5
direct with trim	-143.2726018232	42440.0	5.0	5.0	nan	42.0	558.0
dual anneal	-143.2726018145	84016.8	14.8	14.8	1.0	42.0	1072.0
trust region	-143.2726018232	12.0	12.0	12.0	nan	42.0	16.7
trust region repeats	-143.2726018232	252.0	252.0	252.0	1.0	42.0	21.5

Table 1612: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9394869081	4548.2	4548.2	4548.2	3.4	42.0	1026.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-201.9116953653	42225.0	0.0	0.0	nan	42.0	477.1
direct with trim	-201.9394869081	42233.0	6.0	6.0	nan	42.0	526.3
dual anneal	-201.9394868912	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	843.2
trust region	-201.9394869081	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	16.9
trust region repeats	-201.9394869081	279.0	279.0	279.0	1.0	42.0	21.7

Table 1613: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6807992074	4344.0	4344.0	4344.0	3.2	42.0	1206.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-274.6339605049	42159.0	0.0	0.0	nan	42.0	530.7
direct with trim	-274.6807992074	42166.0	5.0	5.0	nan	42.0	562.5
dual anneal	-274.6807991766	84018.8	16.8	16.8	1.0	42.0	1043.1
trust region	-274.6807992074	14.0	14.0	14.0	nan	42.0	17.3
trust region repeats	-274.6807992074	308.0	308.0	308.0	1.0	42.0	21.7

Table 1614: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9915783678	3472.8	3472.8	3472.8	2.0	42.0	863.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-362.8791397482	42459.0	0.0	0.0	nan	42.0	487.7
direct with trim	-362.9915783678	42467.0	6.0	6.0	nan	42.0	477.1
dual anneal	-362.9915783150	84019.2	17.2	17.2	1.0	42.0	942.4
trust region	-362.9915783678	15.0	15.0	15.0	nan	42.0	14.3
trust region repeats	-362.9915783678	321.0	321.0	321.0	1.0	42.0	20.8

Table 1615: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3648677460	3117.4	3117.4	3117.4	2.0	42.0	874.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-468.2641615899	42093.0	0.0	0.0	nan	42.0	493.8
direct with trim	-468.3648677460	42101.0	6.0	6.0	nan	42.0	582.4
dual anneal	-468.3648676593	84022.4	20.4	20.4	1.0	42.0	974.5
trust region	-468.3648677460	16.0	16.0	16.0	nan	42.0	41.5
trust region repeats	-468.3648677460	352.0	352.0	352.0	1.0	42.0	23.0

Table 1616: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2920066838	3037.2	3037.2	3037.2	1.6	42.0	782.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-592.2105855934	42469.0	0.0	0.0	nan	42.0	442.6
direct with trim	-592.2920066838	42477.0	6.0	6.0	nan	42.0	538.4
dual anneal	-592.2920065470	84023.4	21.4	21.4	1.0	42.0	867.6
trust region	-592.2920066838	17.0	17.0	17.0	nan	42.0	16.9
trust region repeats	-592.2920066838	388.0	388.0	388.0	1.0	42.0	24.3

Table 1617: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2628596225	2834.0	2834.0	2834.0	1.8	42.0	832.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-736.1238399789	42349.0	0.0	0.0	nan	42.0	457.0
direct with trim	-736.2628596224	42360.0	9.0	9.0	nan	42.0	498.0
dual anneal	-736.2628594134	84026.0	24.0	24.0	1.0	42.0	896.4
trust region	-736.2628596225	19.0	19.0	19.0	nan	42.0	15.0
trust region repeats	-736.2628596225	446.0	446.0	446.0	1.0	42.0	23.7

Table 1618: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7659995355	2693.8	2693.8	2693.8	1.2	42.0	715.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-901.6068502307	42195.0	0.0	0.0	nan	42.0	435.4
direct with trim	-901.7619751535	42204.0	7.0	7.0	nan	42.0	469.2
dual anneal	-901.7659992250	84027.6	25.6	25.6	1.0	42.0	917.3
trust region	-901.7659995355	21.0	21.0	21.0	nan	42.0	28.3
trust region repeats	-901.7659995355	472.0	472.0	472.0	1.0	42.0	25.8

Table 1619: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2888572712	2765.0	2765.0	2765.0	1.4	42.0	786.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1090.1397969936	42053.0	0.0	0.0	nan	42.0	457.2
direct with trim	-1090.2888572712	42061.0	6.0	6.0	nan	42.0	583.1
dual anneal	-1090.2888568213	84029.4	27.4	27.4	1.0	42.0	884.3
trust region	-1090.2888572712	22.0	22.0	22.0	nan	42.0	29.5
trust region repeats	-1090.2888572712	513.0	513.0	513.0	1.0	42.0	25.1

Table 1620: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3178450488	2571.2	2571.2	2571.2	1.4	42.0	812.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1303.1188715818	42505.0	0.0	0.0	nan	42.0	558.1
direct with trim	-1303.3178450488	42513.0	6.0	6.0	nan	42.0	488.3
dual anneal	-1303.3178444113	84028.8	26.8	26.8	1.0	42.0	882.8
trust region	-1303.3178450488	24.0	24.0	24.0	nan	42.0	17.4
trust region repeats	-1303.3178450488	553.0	553.0	553.0	1.0	42.0	23.9

Table 1621: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3384598223	2518.0	2518.0	2518.0	1.4	42.0	836.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1542.0975546427	42381.0	0.0	0.0	nan	42.0	517.5
direct with trim	-1542.3384598223	42389.0	6.0	6.0	nan	42.0	492.6
dual anneal	-1542.3384589363	84031.2	29.2	29.2	1.0	42.0	1034.7
trust region	-1542.3384598223	26.0	26.0	26.0	nan	42.0	30.1
trust region repeats	-1542.3384598223	615.0	615.0	615.0	1.0	42.0	25.4

Table 1622: Ar

57.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct with trim	-0.4065340974
He	cch second order	-2.7236399971
Li	basin hopping	-8.5258250343
Be	cch second order	-19.3528912805
B	basin hopping	-36.7292851193
C	basin hopping	-62.1695474291
N	cch second order	-97.1827273747
O	cch second order	-143.2726021263
F	basin hopping	-201.9394869081
Ne	basin hopping	-274.6807992074
Na	basin hopping	-362.9915783678
Mg	basin hopping	-468.3648677460
Al	basin hopping	-592.2920066838
Si	basin hopping	-736.2628596225
P	basin hopping	-901.7659995355
S	basin hopping	-1090.2888572712
Cl	trust region repeats	-1303.3178450488
Ar	basin hopping	-1542.3384598223

Table 1623: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	357.9	182.2	182.2	nan	-46.2953629262	25.3
basin hopping	5798.1	5798.1	5798.1	4.2	-435.8114338682	1114.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.1	15.1	15.1	nan	-435.8114257304	21.3
trust region repeats	329.6	329.6	329.6	1.0	-435.8114257304	22.1
direct	42267.2	0.0	0.0	nan	-435.7381473056	499.7
direct with trim	42275.4	6.2	6.2	nan	-435.8112021536	526.4
dual anneal	84019.8	17.8	17.8	1.0	-435.8114255731	974.7

Table 1624: Average (all systems)

58   52s 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

58.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1625: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1626: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1627: cch second order

689

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1628: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8011133239	52049.0	0.0	0.0	nan	52.0	1080.9
He	-4.2929512226	52151.0	0.0	0.0	nan	52.0	1027.8
Li	-9.5767472271	52009.0	0.0	0.0	nan	52.0	981.2
Be	-22.5114974793	52403.0	0.0	0.0	nan	52.0	988.8
B	-32.8446673057	52025.0	0.0	0.0	nan	52.0	1056.6
C	-49.8580016565	52009.0	0.0	0.0	nan	52.0	1126.4
N	-83.5809777074	52125.0	0.0	0.0	nan	52.0	1098.4
O	-112.8798403427	52257.0	0.0	0.0	nan	52.0	1220.6
F	-125.7508972984	52385.0	0.0	0.0	nan	52.0	1091.2
Ne	-159.7114120858	52357.0	0.0	0.0	nan	52.0	1096.5
Na	-224.9263122501	52223.0	0.0	0.0	nan	52.0	1252.2
Mg	-240.2481767546	52371.0	0.0	0.0	nan	52.0	1131.4
Al	-346.2807322652	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1135.6
Si	-394.7852388152	52189.0	0.0	0.0	nan	52.0	1091.8
P	-505.6246912259	52067.0	0.0	0.0	nan	52.0	1180.9
S	-582.6101324973	52197.0	0.0	0.0	nan	52.0	1209.6
Cl	-695.8774532925	52029.0	0.0	0.0	nan	52.0	1067.0
Ar	-711.9226555525	52251.0	0.0	0.0	nan	52.0	1077.2

Table 1629: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1630: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1631: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1632: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Li	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Be	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
B	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
C	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
N	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
O	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
F	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Ne	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Na	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Mg	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Al	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Si	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
P	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
S	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Cl	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Ar	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1633: trust region repeats

58.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.8011133239	52049.0	0.0	0.0	nan	52.0	1080.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1634: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-4.2929512226	52151.0	0.0	0.0	nan	52.0	1027.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1635: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-9.5767472271	52009.0	0.0	0.0	nan	52.0	981.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1636: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-22.5114974793	52403.0	0.0	0.0	nan	52.0	988.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1637: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-32.8446673057	52025.0	0.0	0.0	nan	52.0	1056.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1638: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-49.8580016565	52009.0	0.0	0.0	nan	52.0	1126.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1639: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-83.5809777074	52125.0	0.0	0.0	nan	52.0	1098.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1640: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-112.8798403427	52257.0	0.0	0.0	nan	52.0	1220.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1641: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-125.7508972984	52385.0	0.0	0.0	nan	52.0	1091.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1642: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-159.7114120858	52357.0	0.0	0.0	nan	52.0	1096.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1643: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-224.9263122501	52223.0	0.0	0.0	nan	52.0	1252.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1644: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-240.2481767546	52371.0	0.0	0.0	nan	52.0	1131.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1645: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-346.2807322652	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1135.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1646: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-394.7852388152	52189.0	0.0	0.0	nan	52.0	1091.8
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1647: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-505.6246912259	52067.0	0.0	0.0	nan	52.0	1180.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1648: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-582.6101324973	52197.0	0.0	0.0	nan	52.0	1209.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1649: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-695.8774532925	52029.0	0.0	0.0	nan	52.0	1067.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1650: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-711.9226555525	52251.0	0.0	0.0	nan	52.0	1077.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1651: Ar

58.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct	-0.8011133239
He	direct	-4.2929512226
Li	direct	-9.5767472271
Be	direct	-22.5114974793
B	direct	-32.8446673057
C	direct	-49.8580016565
N	direct	-83.5809777074
O	direct	-112.8798403427
F	direct	-125.7508972984
Ne	direct	-159.7114120858
Na	direct	-224.9263122501
Mg	direct	-240.2481767546
Al	direct	-346.2807322652
Si	direct	-394.7852388152
P	direct	-505.6246912259
S	direct	-582.6101324973
Cl	direct	-695.8774532925
Ar	direct	-711.9226555525

Table 1652: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	52188.6	0.0	0.0	nan	-239.1157499057	1106.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1653: Average (all systems)

59   52s 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

59.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1654: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1655: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1656: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1657: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-6.5817431667	52223.0	0.0	0.0	nan	52.0	1214.6
He	-31.8487950997	52275.0	0.0	0.0	nan	52.0	1287.4
Li	-33.3185820463	52331.0	0.0	0.0	nan	52.0	1294.5
Be	-110.2581692061	52277.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.0
B	-111.2160311872	52309.0	0.0	0.0	nan	52.0	1347.5
C	-149.0467834792	52101.0	0.0	0.0	nan	52.0	1275.3
N	-161.3790604720	52207.0	0.0	0.0	nan	52.0	1343.0
O	-346.7589368370	52119.0	0.0	0.0	nan	52.0	1089.9
F	-368.4883148027	52385.0	0.0	0.0	nan	52.0	1182.7
Ne	-528.7449417667	52371.0	0.0	0.0	nan	52.0	1293.9
Na	-484.8901445224	52205.0	0.0	0.0	nan	52.0	1271.2
Mg	-651.0114654046	52191.0	0.0	0.0	nan	52.0	1340.7
Al	-746.0278373605	52439.0	0.0	0.0	nan	52.0	1379.0
Si	-854.4024817170	52237.0	0.0	0.0	nan	52.0	1409.9
P	-975.3710794202	52487.0	0.0	0.0	nan	52.0	1319.2
S	-1119.0470400652	52377.0	0.0	0.0	nan	52.0	1266.5
Cl	-1333.9954437663	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1333.4
Ar	-2144.4522917616	52109.0	0.0	0.0	nan	52.0	1232.0

Table 1658: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1659: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1660: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1661: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
He	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Li	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Be	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
B	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
C	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
N	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
O	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
F	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Ne	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Na	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Mg	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Al	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Si	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
P	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
S	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Cl	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan
Ar	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1662: trust region repeats

59.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-6.5817431667	52223.0	0.0	0.0	nan	52.0	1214.6
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1663: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-31.8487950997	52275.0	0.0	0.0	nan	52.0	1287.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1664: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-33.3185820463	52331.0	0.0	0.0	nan	52.0	1294.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1665: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-110.2581692061	52277.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1666: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-111.2160311872	52309.0	0.0	0.0	nan	52.0	1347.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1667: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-149.0467834792	52101.0	0.0	0.0	nan	52.0	1275.3
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1668: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-161.3790604720	52207.0	0.0	0.0	nan	52.0	1343.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1669: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-346.7589368370	52119.0	0.0	0.0	nan	52.0	1089.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1670: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-368.4883148027	52385.0	0.0	0.0	nan	52.0	1182.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1671: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-528.7449417667	52371.0	0.0	0.0	nan	52.0	1293.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1672: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-484.8901445224	52205.0	0.0	0.0	nan	52.0	1271.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1673: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-651.0114654046	52191.0	0.0	0.0	nan	52.0	1340.7
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1674: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-746.0278373605	52439.0	0.0	0.0	nan	52.0	1379.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1675: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-854.4024817170	52237.0	0.0	0.0	nan	52.0	1409.9
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1676: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-975.3710794202	52487.0	0.0	0.0	nan	52.0	1319.2
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1677: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1119.0470400652	52377.0	0.0	0.0	nan	52.0	1266.5
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1678: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1333.9954437663	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1333.4
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1679: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2144.4522917616	52109.0	0.0	0.0	nan	52.0	1232.0
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	nan	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1680: Ar

59.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	direct	-6.5817431667
He	direct	-31.8487950997
Li	direct	-33.3185820463
Be	direct	-110.2581692061
B	direct	-111.2160311872
C	direct	-149.0467834792
N	direct	-161.3790604720
O	direct	-346.7589368370
F	direct	-368.4883148027
Ne	direct	-528.7449417667
Na	direct	-484.8901445224
Mg	direct	-651.0114654046
Al	direct	-746.0278373605
Si	direct	-854.4024817170
P	direct	-975.3710794202
S	direct	-1119.0470400652
Cl	direct	-1333.9954437663
Ar	direct	-2144.4522917616

Table 1681: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	52276.1	0.0	0.0	nan	-564.2688412267	1288.1
direct with trim	nan	nan	nan	nan	nan	nan
dual anneal	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region repeats	0.0	0.0	0.0	1.0	nan	nan

Table 1682: Average (all systems)

60   52s 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

60.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1683: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619090	20030.0	20030.0	20030.0	7.0	52.0	3446.4
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1684: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619094	188.0	86.0	86.0	nan	52.0	59.6
He	-3.0901196136	202.0	108.0	108.0	nan	52.0	37.3
Li	-7.9887994490	299.0	142.0	142.0	nan	52.0	46.8
Be	-15.7299408081	309.0	120.0	120.0	nan	52.0	56.5
B	-26.6444985886	297.0	129.0	129.0	nan	52.0	38.4
C	-41.0135887604	277.0	141.0	141.0	nan	52.0	56.5
N	-59.0840366422	240.0	115.0	115.0	nan	52.0	54.9
O	-81.0773280686	269.0	139.0	139.0	nan	52.0	64.2
F	-107.1953039392	236.0	122.0	122.0	nan	52.0	59.1
Ne	-137.6240402182	376.0	187.0	187.0	nan	52.0	58.1
Na	-172.5366245060	376.0	175.0	175.0	nan	52.0	49.3
Mg	-212.0952231026	407.0	174.0	174.0	nan	52.0	60.2
Al	-256.4526644747	494.0	221.0	221.0	nan	52.0	46.3
Si	-305.7536846587	479.0	225.0	225.0	nan	52.0	65.4
P	-360.1359245980	544.0	245.0	245.0	nan	52.0	64.9
S	-419.7307448781	513.0	239.0	239.0	nan	52.0	67.0
Cl	-484.6638992023	515.0	234.0	234.0	nan	52.0	70.8
Ar	-555.0560993518	699.0	258.0	258.0	nan	52.0	70.6

Table 1685: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1686: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6208700022	52619.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.0
He	-3.0870141183	52091.0	0.0	0.0	nan	52.0	1162.3
Li	-7.9722410884	52463.0	0.0	0.0	nan	52.0	1172.9
Be	-15.7171562450	52389.0	0.0	0.0	nan	52.0	1087.4
B	-26.6058579557	52335.0	0.0	0.0	nan	52.0	976.4
C	-40.7158627116	52339.0	0.0	0.0	nan	52.0	1062.7
N	-58.8794512574	52301.0	0.0	0.0	nan	52.0	1145.1
O	-80.5981949272	52359.0	0.0	0.0	nan	52.0	984.8
F	-105.8653847413	52449.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.9
Ne	-136.5958530961	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1060.0
Na	-171.8415025234	52015.0	0.0	0.0	nan	52.0	1042.6
Mg	-210.2135841870	52107.0	0.0	0.0	nan	52.0	1150.5
Al	-254.7578641889	52313.0	0.0	0.0	nan	52.0	1217.1
Si	-304.4314578388	52397.0	0.0	0.0	nan	52.0	1112.6
P	-356.7871969091	52433.0	0.0	0.0	nan	52.0	1000.4
S	-416.1419054162	52097.0	0.0	0.0	nan	52.0	1248.2
Cl	-475.7490459610	52467.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.4
Ar	-551.9659049272	52173.0	0.0	0.0	nan	52.0	1207.7

Table 1687: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619090	52631.0	10.0	10.0	nan	52.0	1094.8
He	-3.0901196406	52101.0	8.0	8.0	nan	52.0	1099.8
Li	-7.9887994383	52478.0	13.0	13.0	nan	52.0	1133.1
Be	-15.7299407995	52399.0	8.0	8.0	nan	52.0	1083.0
B	-26.6444986189	52345.0	8.0	8.0	nan	52.0	1161.0
C	-41.0135888358	52349.0	8.0	8.0	nan	52.0	1123.6
N	-59.0840367157	52312.0	9.0	9.0	nan	52.0	932.4
O	-81.0773122473	52370.0	9.0	9.0	nan	52.0	1037.0
F	-107.1953039894	52464.0	13.0	13.0	nan	52.0	992.0
Ne	-137.6240402010	52340.0	11.0	11.0	nan	52.0	1034.7
Na	-172.5366245022	52026.0	9.0	9.0	nan	52.0	1002.2
Mg	-212.0952230544	52119.0	10.0	10.0	nan	52.0	945.1
Al	-256.4526645063	52327.0	12.0	12.0	nan	52.0	1016.6
Si	-305.7536846896	52409.8	10.8	10.8	nan	52.0	1038.3
P	-360.1359246838	52448.0	13.0	13.0	nan	52.0	1009.5
S	-419.7307449495	52113.0	14.0	14.0	nan	52.0	1033.3
Cl	-484.6638992198	52484.2	15.2	15.2	nan	52.0	1055.8
Ar	-555.0560994153	52191.0	16.0	16.0	nan	52.0	1098.2

Table 1688: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619090	100011.8	10.8	10.8	1.0	52.0	1922.8
He	-3.0901196406	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	1859.4
Li	-7.9887994383	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	1933.1
Be	-15.7299407994	100015.4	14.4	14.4	1.0	52.0	1997.0
B	-26.6444986188	100014.2	13.2	13.2	1.0	52.0	1721.8
C	-41.0135888356	100015.4	14.4	14.4	1.0	52.0	1849.6
N	-59.0840367154	100013.2	12.2	12.2	1.0	52.0	1801.1
O	-81.0773280527	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	1726.6
F	-107.1953039886	100016.4	15.4	15.4	1.0	52.0	2059.5
Ne	-137.6240401999	100019.0	18.0	18.0	1.0	52.0	1872.1
Na	-172.5366245008	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	1986.6
Mg	-212.0952230525	100020.4	19.4	19.4	1.0	52.0	1734.9
Al	-256.4526645040	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	1964.3
Si	-305.7536846867	100023.0	22.0	22.0	1.0	52.0	1972.7
P	-360.1359246803	100020.8	19.8	19.8	1.0	52.0	2160.3
S	-419.7307449452	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	1883.9
Cl	-484.6638992145	100022.2	21.2	21.2	1.0	52.0	1925.3
Ar	-555.0560994091	100024.0	23.0	23.0	1.0	52.0	2007.9

Table 1689: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619090	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	48.9
He	-3.0901196406	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	38.6
Li	-7.9887994383	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	43.5
Be	-15.7299407995	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.2
B	-26.6444986189	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	47.3
C	-41.0135888358	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.0
N	-59.0840367157	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	47.2
O	-81.0773280532	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	44.8
F	-107.1953039894	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	47.1
Ne	-137.6240402010	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	44.7
Na	-172.5366245022	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	46.9
Mg	-212.0952230544	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	40.4
Al	-256.4526645063	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	31.9
Si	-305.7536846896	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	46.1
P	-360.1359246838	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	46.3
S	-419.7307449495	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	48.8
Cl	-484.6638992197	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	50.8
Ar	-555.0560994154	24.0	24.0	24.0	nan	52.0	65.0

Table 1690: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213619090	390.0	390.0	390.0	1.0	52.0	45.6
He	-3.0901196406	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	43.0
Li	-7.9887994383	281.0	281.0	281.0	1.0	52.0	46.4
Be	-15.7299407995	301.0	301.0	301.0	2.0	52.0	43.8
B	-26.6444986189	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	42.6
C	-41.0135888358	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	40.5
N	-59.0840367157	295.0	295.0	295.0	1.0	52.0	42.9
O	-81.0773280532	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	42.1
F	-107.1953039894	299.0	299.0	299.0	2.0	52.0	44.3
Ne	-137.6240402010	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	41.3
Na	-172.5366245022	302.0	302.0	302.0	2.0	52.0	40.1
Mg	-212.0952230544	299.0	299.0	299.0	1.0	52.0	42.6
Al	-256.4526645063	302.0	302.0	302.0	1.0	52.0	43.8
Si	-305.7536846896	301.0	301.0	301.0	1.0	52.0	40.3
P	-360.1359246838	296.0	296.0	296.0	1.0	52.0	39.0
S	-419.7307449495	306.0	306.0	306.0	2.0	52.0	37.4
Cl	-484.6638992198	306.0	306.0	306.0	1.0	52.0	40.7
Ar	-555.0560994154	319.0	319.0	319.0	1.0	52.0	41.9

Table 1691: trust region repeats

60.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213619090	20030.0	20030.0	20030.0	7.0	52.0	3446.4
cch second order	-0.6213619094	188.0	86.0	86.0	nan	52.0	59.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6208700022	52619.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.0
direct with trim	-0.6213619090	52631.0	10.0	10.0	nan	52.0	1094.8
dual anneal	-0.6213619090	100011.8	10.8	10.8	1.0	52.0	1922.8
trust region	-0.6213619090	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	48.9
trust region repeats	-0.6213619090	390.0	390.0	390.0	1.0	52.0	45.6

Table 1692: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-3.0901196136	202.0	108.0	108.0	nan	52.0	37.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.0870141183	52091.0	0.0	0.0	nan	52.0	1162.3
direct with trim	-3.0901196406	52101.0	8.0	8.0	nan	52.0	1099.8
dual anneal	-3.0901196406	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	1859.4
trust region	-3.0901196406	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	38.6
trust region repeats	-3.0901196406	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	43.0

Table 1693: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-7.9887994490	299.0	142.0	142.0	nan	52.0	46.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.9722410884	52463.0	0.0	0.0	nan	52.0	1172.9
direct with trim	-7.9887994383	52478.0	13.0	13.0	nan	52.0	1133.1
dual anneal	-7.9887994383	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	1933.1
trust region	-7.9887994383	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	43.5
trust region repeats	-7.9887994383	281.0	281.0	281.0	1.0	52.0	46.4

Table 1694: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-15.7299408081	309.0	120.0	120.0	nan	52.0	56.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.7171562450	52389.0	0.0	0.0	nan	52.0	1087.4
direct with trim	-15.7299407995	52399.0	8.0	8.0	nan	52.0	1083.0
dual anneal	-15.7299407994	100015.4	14.4	14.4	1.0	52.0	1997.0
trust region	-15.7299407995	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.2
trust region repeats	-15.7299407995	301.0	301.0	301.0	2.0	52.0	43.8

Table 1695: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-26.6444985886	297.0	129.0	129.0	nan	52.0	38.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.6058579557	52335.0	0.0	0.0	nan	52.0	976.4
direct with trim	-26.6444986189	52345.0	8.0	8.0	nan	52.0	1161.0
dual anneal	-26.6444986188	100014.2	13.2	13.2	1.0	52.0	1721.8
trust region	-26.6444986189	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	47.3
trust region repeats	-26.6444986189	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	42.6

Table 1696: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-41.0135887604	277.0	141.0	141.0	nan	52.0	56.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-40.7158627116	52339.0	0.0	0.0	nan	52.0	1062.7
direct with trim	-41.0135888358	52349.0	8.0	8.0	nan	52.0	1123.6
dual anneal	-41.0135888356	100015.4	14.4	14.4	1.0	52.0	1849.6
trust region	-41.0135888358	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.0
trust region repeats	-41.0135888358	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	40.5

Table 1697: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-59.0840366422	240.0	115.0	115.0	nan	52.0	54.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-58.8794512574	52301.0	0.0	0.0	nan	52.0	1145.1
direct with trim	-59.0840367157	52312.0	9.0	9.0	nan	52.0	932.4
dual anneal	-59.0840367154	100013.2	12.2	12.2	1.0	52.0	1801.1
trust region	-59.0840367157	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	47.2
trust region repeats	-59.0840367157	295.0	295.0	295.0	1.0	52.0	42.9

Table 1698: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-81.0773280686	269.0	139.0	139.0	nan	52.0	64.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-80.5981949272	52359.0	0.0	0.0	nan	52.0	984.8
direct with trim	-81.0773122473	52370.0	9.0	9.0	nan	52.0	1037.0
dual anneal	-81.0773280527	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	1726.6
trust region	-81.0773280532	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	44.8
trust region repeats	-81.0773280532	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	42.1

Table 1699: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-107.1953039392	236.0	122.0	122.0	nan	52.0	59.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-105.8653847413	52449.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.9
direct with trim	-107.1953039894	52464.0	13.0	13.0	nan	52.0	992.0
dual anneal	-107.1953039886	100016.4	15.4	15.4	1.0	52.0	2059.5
trust region	-107.1953039894	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	47.1
trust region repeats	-107.1953039894	299.0	299.0	299.0	2.0	52.0	44.3

Table 1700: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-137.6240402182	376.0	187.0	187.0	nan	52.0	58.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-136.5958530961	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1060.0
direct with trim	-137.6240402010	52340.0	11.0	11.0	nan	52.0	1034.7
dual anneal	-137.6240401999	100019.0	18.0	18.0	1.0	52.0	1872.1
trust region	-137.6240402010	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	44.7
trust region repeats	-137.6240402010	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	41.3

Table 1701: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-172.5366245060	376.0	175.0	175.0	nan	52.0	49.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-171.8415025234	52015.0	0.0	0.0	nan	52.0	1042.6
direct with trim	-172.5366245022	52026.0	9.0	9.0	nan	52.0	1002.2
dual anneal	-172.5366245008	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	1986.6
trust region	-172.5366245022	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	46.9
trust region repeats	-172.5366245022	302.0	302.0	302.0	2.0	52.0	40.1

Table 1702: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-212.0952231026	407.0	174.0	174.0	nan	52.0	60.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-210.2135841870	52107.0	0.0	0.0	nan	52.0	1150.5
direct with trim	-212.0952230544	52119.0	10.0	10.0	nan	52.0	945.1
dual anneal	-212.0952230525	100020.4	19.4	19.4	1.0	52.0	1734.9
trust region	-212.0952230544	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	40.4
trust region repeats	-212.0952230544	299.0	299.0	299.0	1.0	52.0	42.6

Table 1703: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-256.4526644747	494.0	221.0	221.0	nan	52.0	46.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-254.7578641889	52313.0	0.0	0.0	nan	52.0	1217.1
direct with trim	-256.4526645063	52327.0	12.0	12.0	nan	52.0	1016.6
dual anneal	-256.4526645040	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	1964.3
trust region	-256.4526645063	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	31.9
trust region repeats	-256.4526645063	302.0	302.0	302.0	1.0	52.0	43.8

Table 1704: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-305.7536846587	479.0	225.0	225.0	nan	52.0	65.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-304.4314578388	52397.0	0.0	0.0	nan	52.0	1112.6
direct with trim	-305.7536846896	52409.8	10.8	10.8	nan	52.0	1038.3
dual anneal	-305.7536846867	100023.0	22.0	22.0	1.0	52.0	1972.7
trust region	-305.7536846896	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	46.1
trust region repeats	-305.7536846896	301.0	301.0	301.0	1.0	52.0	40.3

Table 1705: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-360.1359245980	544.0	245.0	245.0	nan	52.0	64.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-356.7871969091	52433.0	0.0	0.0	nan	52.0	1000.4
direct with trim	-360.1359246838	52448.0	13.0	13.0	nan	52.0	1009.5
dual anneal	-360.1359246803	100020.8	19.8	19.8	1.0	52.0	2160.3
trust region	-360.1359246838	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	46.3
trust region repeats	-360.1359246838	296.0	296.0	296.0	1.0	52.0	39.0

Table 1706: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-419.7307448781	513.0	239.0	239.0	nan	52.0	67.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-416.1419054162	52097.0	0.0	0.0	nan	52.0	1248.2
direct with trim	-419.7307449495	52113.0	14.0	14.0	nan	52.0	1033.3
dual anneal	-419.7307449452	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	1883.9
trust region	-419.7307449495	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	48.8
trust region repeats	-419.7307449495	306.0	306.0	306.0	2.0	52.0	37.4

Table 1707: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-484.6638992023	515.0	234.0	234.0	nan	52.0	70.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-475.7490459610	52467.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.4
direct with trim	-484.6638992198	52484.2	15.2	15.2	nan	52.0	1055.8
dual anneal	-484.6638992145	100022.2	21.2	21.2	1.0	52.0	1925.3
trust region	-484.6638992197	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	50.8
trust region repeats	-484.6638992198	306.0	306.0	306.0	1.0	52.0	40.7

Table 1708: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	-555.0560993518	699.0	258.0	258.0	nan	52.0	70.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-551.9659049272	52173.0	0.0	0.0	nan	52.0	1207.7
direct with trim	-555.0560994153	52191.0	16.0	16.0	nan	52.0	1098.2
dual anneal	-555.0560994091	100024.0	23.0	23.0	1.0	52.0	2007.9
trust region	-555.0560994154	24.0	24.0	24.0	nan	52.0	65.0
trust region repeats	-555.0560994154	319.0	319.0	319.0	1.0	52.0	41.9

Table 1709: Ar

60.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6213619094
He	trust region	-3.0901196406
Li	cch second order	-7.9887994490
Be	cch second order	-15.7299408081
B	trust region	-26.6444986189
C	trust region repeats	-41.0135888358
N	direct with trim	-59.0840367157
O	cch second order	-81.0773280686
F	trust region repeats	-107.1953039894
Ne	cch second order	-137.6240402182
Na	cch second order	-172.5366245060
Mg	cch second order	-212.0952231026
Al	trust region repeats	-256.4526645063
Si	trust region repeats	-305.7536846896
P	trust region	-360.1359246838
S	trust region repeats	-419.7307449495
Cl	direct with trim	-484.6638992198
Ar	trust region repeats	-555.0560994154

Table 1710: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	373.3	170.0	170.0	nan	-180.3607712650	57.0
basin hopping	20030.0	20030.0	20030.0	7.0	-0.6213619090	3446.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.3	13.3	13.3	nan	-180.3607712901	45.7
trust region repeats	304.2	304.2	304.2	1.2	-180.3607712901	42.1
direct	52315.2	0.0	0.0	nan	-178.8081304497	1122.5
direct with trim	52328.2	10.9	10.9	nan	-180.3607704120	1049.5
dual anneal	100017.2	16.2	16.2	1.0	-180.3607712884	1909.9

Table 1711: Average (all systems)

61   52s 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

61.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1712: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191680	19894.8	19894.8	19894.8	20.2	52.0	2859.2
He	-3.1805897268	19969.8	19969.8	19969.8	20.8	52.0	2875.4
Li	-8.1482789971	19965.8	19965.8	19965.8	20.6	52.0	2916.7
Be	-15.9682590130	19984.2	19984.2	19984.2	20.0	52.0	2989.6
B	-26.9684207486	20014.4	20014.4	20014.4	20.4	52.0	2902.2
C	-41.4275972296	20030.0	20030.0	20030.0	20.4	52.0	2839.6
N	-59.5908043200	19658.6	19658.6	19658.6	21.0	52.0	2561.9
O	-81.6780336376	19964.6	19964.6	19964.6	20.4	52.0	2490.8
F	-107.8898564828	19990.2	19990.2	19990.2	20.8	52.0	2726.3
Ne	-138.4112460966	19811.0	19811.0	19811.0	20.8	52.0	2702.1
Na	-173.4143174605	19865.4	19865.4	19865.4	20.8	52.0	2541.7
Mg	-213.0603670999	19228.0	19228.0	19228.0	19.6	52.0	2661.8
Al	-257.5014380996	19553.4	19553.4	19553.4	19.0	52.0	2688.0
Si	-306.8815505195	19613.8	19613.8	19613.8	19.8	52.0	2726.4
P	-361.3377001161	19167.0	19167.0	19167.0	19.8	52.0	2604.7
S	-421.0006059870	19342.6	19342.6	19342.6	18.4	52.0	2553.2
Cl	-485.9954935446	19512.6	19512.6	19512.6	19.4	52.0	2615.7
Ar	-556.4425380486	19552.2	19552.2	19552.2	19.8	52.0	2489.8

Table 1713: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191718	221.0	100.0	100.0	nan	52.0	55.7
He	-3.1805896531	226.0	119.0	119.0	nan	52.0	55.8
Li	-8.1482790277	614.0	273.0	273.0	nan	52.0	71.4
Be	-15.9682590321	338.0	173.0	173.0	nan	52.0	61.6
B	-26.9684207473	244.0	118.0	118.0	nan	52.0	59.8
C	-41.4275972697	197.0	99.0	99.0	nan	52.0	60.3
N	-59.5908043572	181.0	88.0	88.0	nan	52.0	57.3
O	-81.6780336198	206.0	108.0	108.0	nan	52.0	42.3
F	-107.8898564699	159.0	87.0	87.0	nan	52.0	35.2
Ne	-138.4112461030	201.0	108.0	108.0	nan	52.0	58.3
Na	-173.4143174472	218.0	115.0	115.0	nan	52.0	62.3
Mg	-213.0603670898	260.0	116.0	116.0	nan	52.0	64.7
Al	-257.5014380358	210.0	111.0	111.0	nan	52.0	56.4
Si	-306.8815504805	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	54.4
P	-361.3376884925	221.0	116.0	116.0	nan	52.0	55.9
S	-421.0006059848	171.0	92.0	92.0	nan	52.0	38.1
Cl	-485.9954935737	216.0	107.0	107.0	nan	52.0	40.3
Ar	-556.4425380139	233.0	120.0	120.0	nan	52.0	37.0

Table 1714: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1715: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6552099950	52649.0	0.0	0.0	nan	52.0	1142.0
He	-3.1759393921	52295.0	0.0	0.0	nan	52.0	1309.0
Li	-8.1426743326	52249.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.1
Be	-15.9534309044	52141.0	0.0	0.0	nan	52.0	1292.8
B	-26.8485157142	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1074.0
C	-41.2280265458	52289.0	0.0	0.0	nan	52.0	1045.1
N	-59.4361897922	52253.0	0.0	0.0	nan	52.0	1319.9
O	-81.3292838768	52289.0	0.0	0.0	nan	52.0	1286.6
F	-106.6365042575	52425.0	0.0	0.0	nan	52.0	1273.4
Ne	-137.7405760533	52227.0	0.0	0.0	nan	52.0	1250.3
Na	-172.9047776297	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.1
Mg	-210.8184407783	52259.0	0.0	0.0	nan	52.0	1149.0
Al	-255.7046666653	52303.0	0.0	0.0	nan	52.0	1324.3
Si	-262.5776715777	52099.0	0.0	0.0	nan	52.0	1274.7
P	-312.0319802377	52283.0	0.0	0.0	nan	52.0	1290.0
S	-374.5130961007	52423.0	0.0	0.0	nan	52.0	1316.4
Cl	-479.2078630563	52367.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.9
Ar	-475.8714946970	52491.0	0.0	0.0	nan	52.0	1096.3

Table 1716: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6570130073	52666.0	15.0	15.0	nan	52.0	1251.3
He	-3.1805896985	52303.0	6.0	6.0	nan	52.0	1310.6
Li	-8.1482789971	52258.0	7.0	7.0	nan	52.0	1314.3
Be	-15.9682590130	52149.0	6.0	6.0	nan	52.0	1250.9
B	-26.9684207486	52337.0	8.0	8.0	nan	52.0	1372.5
C	-41.4275972296	52303.0	12.0	12.0	nan	52.0	1188.1
N	-59.5908043132	52263.0	8.0	8.0	nan	52.0	1292.7
O	-81.6780336376	52302.8	11.8	11.8	nan	52.0	1371.9
F	-107.8898564828	52442.0	15.0	15.0	nan	52.0	1167.5
Ne	-138.4112460966	52243.0	14.0	14.0	nan	52.0	1264.3
Na	-173.4142968506	52420.2	63.2	63.2	nan	52.0	1269.0
Mg	-213.0603670999	52279.0	18.0	18.0	nan	52.0	1209.8
Al	-257.5014380996	52316.0	11.0	11.0	nan	52.0	1467.6
Si	-306.8815505193	52140.4	39.4	39.4	nan	52.0	1337.0
P	-361.3376885274	52319.2	34.2	34.2	nan	52.0	1335.6
S	-421.0006059870	52455.8	30.8	30.8	nan	52.0	1192.2
Cl	-485.9954935446	52385.0	16.0	16.0	nan	52.0	1161.2
Ar	-556.4425380484	52530.0	37.0	37.0	nan	52.0	1196.8

Table 1717: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191680	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	2234.7
He	-3.1805896985	100012.2	11.2	11.2	1.0	52.0	2145.0
Li	-8.1482789970	100013.2	12.2	12.2	1.0	52.0	1996.4
Be	-15.9682590129	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	1857.6
B	-26.9684207485	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2139.6
C	-41.4275972293	100014.8	13.8	13.8	1.0	52.0	1831.6
N	-59.5908043129	100217.8	216.8	216.8	1.2	52.0	2396.5
O	-81.6780336370	100017.2	16.2	16.2	1.0	52.0	1878.4
F	-107.8898564821	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	2066.7
Ne	-138.4112460955	100020.2	19.2	19.2	1.0	52.0	1985.1
Na	-173.4143174591	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	2060.8
Mg	-213.0603670980	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	2106.9
Al	-257.5014380971	100027.2	26.2	26.2	1.0	52.0	1905.2
Si	-306.8815505162	100024.6	23.6	23.6	1.0	52.0	2195.3
P	-361.3376885237	100019.4	18.4	18.4	1.0	52.0	1901.7
S	-421.0006059824	100027.0	26.0	26.0	1.0	52.0	2200.5
Cl	-485.9954935391	100020.2	19.2	19.2	1.0	52.0	2187.5
Ar	-556.4425380419	100017.4	16.4	16.4	1.0	52.0	2099.7

Table 1718: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191680	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	36.2
He	-3.1805896985	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	34.3
Li	-8.1482789971	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	51.1
Be	-15.9682590130	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.9
B	-26.9684207486	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	48.4
C	-41.4275972296	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	31.4
N	-59.5908043132	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	31.1
O	-81.6780336376	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	30.8
F	-107.8898564828	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	31.8
Ne	-138.4112460966	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	33.7
Na	-173.4143174605	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	32.1
Mg	-213.0603670999	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	34.9
Al	-257.5014380996	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	50.9
Si	-306.8815505193	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	51.9
P	-361.3376885274	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	52.7
S	-421.0006059870	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	60.0
Cl	-485.9954935446	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	49.9
Ar	-556.4425380484	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	50.3

Table 1719: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571191680	227.0	227.0	227.0	1.0	52.0	41.4
He	-3.1805896985	252.0	252.0	252.0	1.0	52.0	37.8
Li	-8.1482789971	817.0	817.0	817.0	2.0	52.0	51.3
Be	-15.9682590130	281.0	281.0	281.0	1.0	52.0	40.9
B	-26.9684207486	264.0	264.0	264.0	1.0	52.0	41.7
C	-41.4275972296	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	37.4
N	-59.5908043132	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	38.2
O	-81.6780336376	282.0	282.0	282.0	1.0	52.0	40.4
F	-107.8898564828	285.0	285.0	285.0	1.0	52.0	49.5
Ne	-138.4112460966	283.0	283.0	283.0	1.0	52.0	39.3
Na	-173.4143174605	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	41.7
Mg	-213.0603670999	287.0	287.0	287.0	1.0	52.0	37.3
Al	-257.5014380996	302.0	302.0	302.0	1.0	52.0	39.9
Si	-306.8815505193	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	50.0
P	-361.3376885274	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	41.4
S	-421.0006059870	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	40.7
Cl	-485.9954935446	296.0	296.0	296.0	1.0	52.0	39.7
Ar	-556.4425380484	302.0	302.0	302.0	2.0	52.0	39.1

Table 1720: trust region repeats

61.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6571191680	19894.8	19894.8	19894.8	20.2	52.0	2859.2
cch second order	-0.6571191718	221.0	100.0	100.0	nan	52.0	55.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6552099950	52649.0	0.0	0.0	nan	52.0	1142.0
direct with trim	-0.6570130073	52666.0	15.0	15.0	nan	52.0	1251.3
dual anneal	-0.6571191680	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	2234.7
trust region	-0.6571191680	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	36.2
trust region repeats	-0.6571191680	227.0	227.0	227.0	1.0	52.0	41.4

Table 1721: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805897268	19969.8	19969.8	19969.8	20.8	52.0	2875.4
cch second order	-3.1805896531	226.0	119.0	119.0	nan	52.0	55.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.1759393921	52295.0	0.0	0.0	nan	52.0	1309.0
direct with trim	-3.1805896985	52303.0	6.0	6.0	nan	52.0	1310.6
dual anneal	-3.1805896985	100012.2	11.2	11.2	1.0	52.0	2145.0
trust region	-3.1805896985	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	34.3
trust region repeats	-3.1805896985	252.0	252.0	252.0	1.0	52.0	37.8

Table 1722: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1482789971	19965.8	19965.8	19965.8	20.6	52.0	2916.7
cch second order	-8.1482790277	614.0	273.0	273.0	nan	52.0	71.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.1426743326	52249.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.1
direct with trim	-8.1482789971	52258.0	7.0	7.0	nan	52.0	1314.3
dual anneal	-8.1482789970	100013.2	12.2	12.2	1.0	52.0	1996.4
trust region	-8.1482789971	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	51.1
trust region repeats	-8.1482789971	817.0	817.0	817.0	2.0	52.0	51.3

Table 1723: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9682590130	19984.2	19984.2	19984.2	20.0	52.0	2989.6
cch second order	-15.9682590321	338.0	173.0	173.0	nan	52.0	61.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-15.9534309044	52141.0	0.0	0.0	nan	52.0	1292.8
direct with trim	-15.9682590130	52149.0	6.0	6.0	nan	52.0	1250.9
dual anneal	-15.9682590129	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	1857.6
trust region	-15.9682590130	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.9
trust region repeats	-15.9682590130	281.0	281.0	281.0	1.0	52.0	40.9

Table 1724: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9684207486	20014.4	20014.4	20014.4	20.4	52.0	2902.2
cch second order	-26.9684207473	244.0	118.0	118.0	nan	52.0	59.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-26.8485157142	52327.0	0.0	0.0	nan	52.0	1074.0
direct with trim	-26.9684207486	52337.0	8.0	8.0	nan	52.0	1372.5
dual anneal	-26.9684207485	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2139.6
trust region	-26.9684207486	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	48.4
trust region repeats	-26.9684207486	264.0	264.0	264.0	1.0	52.0	41.7

Table 1725: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4275972296	20030.0	20030.0	20030.0	20.4	52.0	2839.6
cch second order	-41.4275972697	197.0	99.0	99.0	nan	52.0	60.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-41.2280265458	52289.0	0.0	0.0	nan	52.0	1045.1
direct with trim	-41.4275972296	52303.0	12.0	12.0	nan	52.0	1188.1
dual anneal	-41.4275972293	100014.8	13.8	13.8	1.0	52.0	1831.6
trust region	-41.4275972296	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	31.4
trust region repeats	-41.4275972296	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	37.4

Table 1726: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5908043200	19658.6	19658.6	19658.6	21.0	52.0	2561.9
cch second order	-59.5908043572	181.0	88.0	88.0	nan	52.0	57.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-59.4361897922	52253.0	0.0	0.0	nan	52.0	1319.9
direct with trim	-59.5908043132	52263.0	8.0	8.0	nan	52.0	1292.7
dual anneal	-59.5908043129	100217.8	216.8	216.8	1.2	52.0	2396.5
trust region	-59.5908043132	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	31.1
trust region repeats	-59.5908043132	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	38.2

Table 1727: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6780336376	19964.6	19964.6	19964.6	20.4	52.0	2490.8
cch second order	-81.6780336198	206.0	108.0	108.0	nan	52.0	42.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-81.3292838768	52289.0	0.0	0.0	nan	52.0	1286.6
direct with trim	-81.6780336376	52302.8	11.8	11.8	nan	52.0	1371.9
dual anneal	-81.6780336370	100017.2	16.2	16.2	1.0	52.0	1878.4
trust region	-81.6780336376	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	30.8
trust region repeats	-81.6780336376	282.0	282.0	282.0	1.0	52.0	40.4

Table 1728: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8898564828	19990.2	19990.2	19990.2	20.8	52.0	2726.3
cch second order	-107.8898564699	159.0	87.0	87.0	nan	52.0	35.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-106.6365042575	52425.0	0.0	0.0	nan	52.0	1273.4
direct with trim	-107.8898564828	52442.0	15.0	15.0	nan	52.0	1167.5
dual anneal	-107.8898564821	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	2066.7
trust region	-107.8898564828	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	31.8
trust region repeats	-107.8898564828	285.0	285.0	285.0	1.0	52.0	49.5

Table 1729: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4112460966	19811.0	19811.0	19811.0	20.8	52.0	2702.1
cch second order	-138.4112461030	201.0	108.0	108.0	nan	52.0	58.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-137.7405760533	52227.0	0.0	0.0	nan	52.0	1250.3
direct with trim	-138.4112460966	52243.0	14.0	14.0	nan	52.0	1264.3
dual anneal	-138.4112460955	100020.2	19.2	19.2	1.0	52.0	1985.1
trust region	-138.4112460966	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	33.7
trust region repeats	-138.4112460966	283.0	283.0	283.0	1.0	52.0	39.3

Table 1730: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4143174605	19865.4	19865.4	19865.4	20.8	52.0	2541.7
cch second order	-173.4143174472	218.0	115.0	115.0	nan	52.0	62.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-172.9047776297	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.1
direct with trim	-173.4142968506	52420.2	63.2	63.2	nan	52.0	1269.0
dual anneal	-173.4143174591	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	2060.8
trust region	-173.4143174605	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	32.1
trust region repeats	-173.4143174605	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	41.7

Table 1731: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0603670999	19228.0	19228.0	19228.0	19.6	52.0	2661.8
cch second order	-213.0603670898	260.0	116.0	116.0	nan	52.0	64.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-210.8184407783	52259.0	0.0	0.0	nan	52.0	1149.0
direct with trim	-213.0603670999	52279.0	18.0	18.0	nan	52.0	1209.8
dual anneal	-213.0603670980	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	2106.9
trust region	-213.0603670999	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	34.9
trust region repeats	-213.0603670999	287.0	287.0	287.0	1.0	52.0	37.3

Table 1732: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.5014380996	19553.4	19553.4	19553.4	19.0	52.0	2688.0
cch second order	-257.5014380358	210.0	111.0	111.0	nan	52.0	56.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-255.7046666653	52303.0	0.0	0.0	nan	52.0	1324.3
direct with trim	-257.5014380996	52316.0	11.0	11.0	nan	52.0	1467.6
dual anneal	-257.5014380971	100027.2	26.2	26.2	1.0	52.0	1905.2
trust region	-257.5014380996	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	50.9
trust region repeats	-257.5014380996	302.0	302.0	302.0	1.0	52.0	39.9

Table 1733: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8815505195	19613.8	19613.8	19613.8	19.8	52.0	2726.4
cch second order	-306.8815504805	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	54.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-262.5776715777	52099.0	0.0	0.0	nan	52.0	1274.7
direct with trim	-306.8815505193	52140.4	39.4	39.4	nan	52.0	1337.0
dual anneal	-306.8815505162	100024.6	23.6	23.6	1.0	52.0	2195.3
trust region	-306.8815505193	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	51.9
trust region repeats	-306.8815505193	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	50.0

Table 1734: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3377001161	19167.0	19167.0	19167.0	19.8	52.0	2604.7
cch second order	-361.3376884925	221.0	116.0	116.0	nan	52.0	55.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-312.0319802377	52283.0	0.0	0.0	nan	52.0	1290.0
direct with trim	-361.3376885274	52319.2	34.2	34.2	nan	52.0	1335.6
dual anneal	-361.3376885237	100019.4	18.4	18.4	1.0	52.0	1901.7
trust region	-361.3376885274	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	52.7
trust region repeats	-361.3376885274	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	41.4

Table 1735: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-421.0006059870	19342.6	19342.6	19342.6	18.4	52.0	2553.2
cch second order	-421.0006059848	171.0	92.0	92.0	nan	52.0	38.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-374.5130961007	52423.0	0.0	0.0	nan	52.0	1316.4
direct with trim	-421.0006059870	52455.8	30.8	30.8	nan	52.0	1192.2
dual anneal	-421.0006059824	100027.0	26.0	26.0	1.0	52.0	2200.5
trust region	-421.0006059870	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	60.0
trust region repeats	-421.0006059870	297.0	297.0	297.0	1.0	52.0	40.7

Table 1736: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9954935446	19512.6	19512.6	19512.6	19.4	52.0	2615.7
cch second order	-485.9954935737	216.0	107.0	107.0	nan	52.0	40.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-479.2078630563	52367.0	0.0	0.0	nan	52.0	1305.9
direct with trim	-485.9954935446	52385.0	16.0	16.0	nan	52.0	1161.2
dual anneal	-485.9954935391	100020.2	19.2	19.2	1.0	52.0	2187.5
trust region	-485.9954935446	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	49.9
trust region repeats	-485.9954935446	296.0	296.0	296.0	1.0	52.0	39.7

Table 1737: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4425380486	19552.2	19552.2	19552.2	19.8	52.0	2489.8
cch second order	-556.4425380139	233.0	120.0	120.0	nan	52.0	37.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-475.8714946970	52491.0	0.0	0.0	nan	52.0	1096.3
direct with trim	-556.4425380484	52530.0	37.0	37.0	nan	52.0	1196.8
dual anneal	-556.4425380419	100017.4	16.4	16.4	1.0	52.0	2099.7
trust region	-556.4425380484	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	50.3
trust region repeats	-556.4425380484	302.0	302.0	302.0	2.0	52.0	39.1

Table 1738: Ar

61.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6571191718
He	basin hopping	-3.1805897268
Li	cch second order	-8.1482790277
Be	cch second order	-15.9682590321
B	trust region repeats	-26.9684207486
C	cch second order	-41.4275972697
N	cch second order	-59.5908043572
O	direct with trim	-81.6780336376
F	direct with trim	-107.8898564828
Ne	cch second order	-138.4112461030
Na	basin hopping	-173.4143174605
Mg	basin hopping	-213.0603670999
Al	basin hopping	-257.5014380996
Si	basin hopping	-306.8815505195
P	basin hopping	-361.3377001161
S	basin hopping	-421.0006059870
Cl	cch second order	-485.9954935737
Ar	basin hopping	-556.4425380486

Table 1739: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	239.6	119.7	119.7	nan	-181.0863446983	53.7
basin hopping	19728.8	19728.8	19728.8	20.1	-181.0863453498	2708.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	14.4	14.4	14.4	nan	-181.0863447040	42.1
trust region repeats	313.3	313.3	313.3	1.1	-181.0863447040	41.5
direct	52318.0	0.0	0.0	nan	-168.0431300893	1233.9
direct with trim	52339.6	19.6	19.6	nan	-181.0863376612	1275.2
dual anneal	100029.2	28.2	28.2	1.0	-181.0863447022	2066.1

Table 1740: Average (all systems)

62   52s 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

62.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1741: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305171	19922.7	19922.7	19922.7	20.3	52.0	2726.2
He	-3.2215715934	19960.6	19960.6	19960.6	20.6	52.0	3077.9
Li	-8.2486237462	20027.8	20027.8	20027.8	21.0	52.0	2904.0
Be	-16.1580144252	19652.6	19652.6	19652.6	20.4	52.0	2753.9
B	-27.2795190369	19872.6	19872.6	19872.6	20.6	52.0	2624.3
C	-41.8935061330	19749.6	19749.6	19749.6	20.0	52.0	2567.4
N	-60.2462252101	19783.8	19783.8	19783.8	20.2	52.0	2468.4
O	-82.5587278953	19973.0	19973.0	19973.0	21.0	52.0	2770.7
F	-109.0325096695	20031.0	20031.0	20031.0	21.0	52.0	2590.8
Ne	-139.8533633430	19728.6	19728.6	19728.6	20.8	52.0	2420.3
Na	-175.1941710407	19518.0	19518.0	19518.0	21.0	52.0	2408.1
Mg	-215.2168057972	19935.2	19935.2	19935.2	20.8	52.0	2626.8
Al	-260.0740154133	19811.2	19811.2	19811.2	20.2	52.0	2457.2
Si	-309.9103543204	20019.8	20019.8	20019.8	20.8	52.0	2571.8
P	-364.8633312568	19487.4	19487.4	19487.4	19.8	52.0	2262.3
S	-425.0641895968	19679.0	19679.0	19679.0	19.6	52.0	2133.0
Cl	-490.6385788760	19226.0	19226.0	19226.0	19.0	52.0	2516.2
Ar	-561.7071178529	19563.4	19563.4	19563.4	19.6	52.0	2466.9

Table 1742: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305542	254.0	113.0	113.0	nan	52.0	57.5
He	-3.2215715900	241.0	122.0	122.0	nan	52.0	56.9
Li	-8.2486237271	433.0	199.0	199.0	nan	52.0	64.4
Be	-16.1580045021	401.0	199.0	199.0	nan	52.0	75.3
B	-27.2795190360	283.0	129.0	129.0	nan	52.0	65.8
C	-41.8935061959	195.0	101.0	101.0	nan	52.0	38.6
N	-60.2462252040	194.0	106.0	106.0	nan	52.0	54.5
O	-82.5587278622	201.0	111.0	111.0	nan	52.0	37.1
F	-109.0325096338	215.0	114.0	114.0	nan	52.0	38.3
Ne	-139.8533633934	224.0	114.0	114.0	nan	52.0	61.5
Na	-175.1941402772	334.0	148.0	148.0	nan	52.0	70.7
Mg	-215.2168058103	311.0	117.0	117.0	nan	52.0	57.6
Al	-260.0740154115	198.0	104.0	104.0	nan	52.0	55.4
Si	-309.9103543666	189.0	103.0	103.0	nan	52.0	53.7
P	-364.8633312150	201.0	105.0	105.0	nan	52.0	54.9
S	-425.0641895460	210.0	111.0	111.0	nan	52.0	54.9
Cl	-490.6385788588	193.0	103.0	103.0	nan	52.0	40.2
Ar	-561.7071178133	246.0	120.0	120.0	nan	52.0	38.8

Table 1743: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1744: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6644809914	52163.0	0.0	0.0	nan	52.0	1259.9
He	-3.2168594352	52029.0	0.0	0.0	nan	52.0	1215.5
Li	-8.2392151387	52447.0	0.0	0.0	nan	52.0	1192.9
Be	-16.1494573347	52443.0	0.0	0.0	nan	52.0	1195.3
B	-27.1457170216	52375.0	0.0	0.0	nan	52.0	1017.4
C	-41.3455760854	52035.0	0.0	0.0	nan	52.0	1238.0
N	-60.0924667650	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1240.1
O	-82.2232143784	52437.0	0.0	0.0	nan	52.0	1366.4
F	-107.8471495961	52121.0	0.0	0.0	nan	52.0	1307.0
Ne	-139.0506714478	52135.0	0.0	0.0	nan	52.0	1246.1
Na	-174.6765655677	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1326.3
Mg	-213.0956081958	52337.0	0.0	0.0	nan	52.0	1169.5
Al	-258.3613186680	52113.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.0
Si	-265.1086317488	52465.0	0.0	0.0	nan	52.0	1325.9
P	-315.7949842772	52473.0	0.0	0.0	nan	52.0	1232.0
S	-377.4958640930	52443.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.2
Cl	-484.2313921700	52393.0	0.0	0.0	nan	52.0	1201.9
Ar	-481.3864495473	52287.0	0.0	0.0	nan	52.0	1190.2

Table 1745: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305171	52173.0	8.0	8.0	nan	52.0	1369.0
He	-3.2215715934	52037.8	6.8	6.8	nan	52.0	1273.1
Li	-8.2486237462	52457.6	8.6	8.6	nan	52.0	1409.2
Be	-16.1580045548	52451.2	6.2	6.2	nan	52.0	1285.6
B	-27.2795190369	52394.4	17.4	17.4	nan	52.0	1418.2
C	-41.8935061330	52049.0	12.0	12.0	nan	52.0	1363.5
N	-60.2462252101	52364.0	7.0	7.0	nan	52.0	1224.3
O	-82.5587278953	52451.0	12.0	12.0	nan	52.0	1205.5
F	-109.0325096695	52137.0	14.0	14.0	nan	52.0	1324.2
Ne	-139.8051238971	53138.0	1001.0	1001.0	nan	52.0	1707.4
Na	-175.1941403065	52309.0	10.0	10.0	nan	52.0	1368.5
Mg	-215.2168057970	52354.2	15.2	15.2	nan	52.0	1266.9
Al	-260.0740154132	52127.0	12.0	12.0	nan	52.0	1382.0
Si	-309.9103543204	52502.6	35.6	35.6	nan	52.0	1294.0
P	-364.8633312568	52508.0	33.0	33.0	nan	52.0	1365.9
S	-425.0641895968	52474.0	29.0	29.0	nan	52.0	1408.5
Cl	-490.0630341515	53396.0	1001.0	1001.0	nan	52.0	1837.6
Ar	-561.7071178528	52331.2	42.2	42.2	nan	52.0	1292.2

Table 1746: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305171	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2428.6
He	-3.2215715934	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2358.8
Li	-8.2486237462	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	2181.0
Be	-16.1580045547	100015.6	14.6	14.6	1.0	52.0	2360.4
B	-27.2795190368	100014.6	13.6	13.6	1.0	52.0	2434.9
C	-41.8935061328	100013.0	12.0	12.0	1.0	52.0	2312.4
N	-60.2462252097	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	2471.7
O	-82.5587278947	100015.0	14.0	14.0	1.0	52.0	2274.8
F	-109.0325096686	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2307.1
Ne	-139.8533633418	100023.0	22.0	22.0	1.0	52.0	2376.2
Na	-175.1941403050	100021.2	20.2	20.2	1.0	52.0	2276.7
Mg	-215.2168057950	100030.4	29.4	29.4	1.0	52.0	2389.8
Al	-260.0740154107	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2465.6
Si	-309.9103543171	100019.4	18.4	18.4	1.0	52.0	2359.2
P	-364.8633312528	100024.8	23.8	23.8	1.0	52.0	2222.3
S	-425.0641895919	100024.4	23.4	23.4	1.0	52.0	2217.6
Cl	-490.6385788701	100024.6	23.6	23.6	1.0	52.0	2121.7
Ar	-561.7071178459	100024.0	23.0	23.0	1.0	52.0	2238.4

Table 1747: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305171	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	35.1
He	-3.2215715934	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	34.6
Li	-8.2486237462	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.6
Be	-16.1580045548	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.7
B	-27.2795190369	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	50.8
C	-41.8935061330	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	47.9
N	-60.2462252101	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	52.3
O	-82.5587278953	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	32.1
F	-109.0325096695	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.5
Ne	-139.8533633430	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	47.6
Na	-175.1941403065	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	30.9
Mg	-215.2168057970	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	31.3
Al	-260.0740154132	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	47.0
Si	-309.9103543204	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	53.5
P	-364.8633312568	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	34.1
S	-425.0641895968	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	51.9
Cl	-490.6385788760	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	30.1
Ar	-561.7071178528	22.0	22.0	22.0	nan	52.0	57.0

Table 1748: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661305171	222.0	222.0	222.0	1.0	52.0	40.5
He	-3.2215715934	248.0	248.0	248.0	1.0	52.0	40.1
Li	-8.2486237462	261.0	261.0	261.0	1.0	52.0	40.8
Be	-16.1580045548	261.0	261.0	261.0	1.0	52.0	44.0
B	-27.2795190369	266.0	266.0	266.0	1.0	52.0	41.9
C	-41.8935061330	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	36.4
N	-60.2462252101	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	40.9
O	-82.5587278953	285.0	285.0	285.0	1.0	52.0	42.0
F	-109.0325096695	292.0	292.0	292.0	1.0	52.0	39.8
Ne	-139.8533633430	308.0	308.0	308.0	1.0	52.0	44.7
Na	-175.1941403065	289.0	289.0	289.0	1.0	52.0	39.0
Mg	-215.2168057970	294.0	294.0	294.0	1.0	52.0	42.1
Al	-260.0740154132	289.0	289.0	289.0	1.0	52.0	40.1
Si	-309.9103543204	291.0	291.0	291.0	1.0	52.0	40.1
P	-364.8633312568	293.0	293.0	293.0	1.0	52.0	41.3
S	-425.0641895968	300.0	300.0	300.0	1.0	52.0	43.7
Cl	-490.6385788760	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	46.4
Ar	-561.7071178528	299.0	299.0	299.0	1.0	52.0	44.0

Table 1749: trust region repeats

62.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661305171	19922.7	19922.7	19922.7	20.3	52.0	2726.2
cch second order	-0.6661305542	254.0	113.0	113.0	nan	52.0	57.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.6644809914	52163.0	0.0	0.0	nan	52.0	1259.9
direct with trim	-0.6661305171	52173.0	8.0	8.0	nan	52.0	1369.0
dual anneal	-0.6661305171	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2428.6
trust region	-0.6661305171	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	35.1
trust region repeats	-0.6661305171	222.0	222.0	222.0	1.0	52.0	40.5

Table 1750: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215715934	19960.6	19960.6	19960.6	20.6	52.0	3077.9
cch second order	-3.2215715900	241.0	122.0	122.0	nan	52.0	56.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-3.2168594352	52029.0	0.0	0.0	nan	52.0	1215.5
direct with trim	-3.2215715934	52037.8	6.8	6.8	nan	52.0	1273.1
dual anneal	-3.2215715934	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2358.8
trust region	-3.2215715934	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	34.6
trust region repeats	-3.2215715934	248.0	248.0	248.0	1.0	52.0	40.1

Table 1751: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2486237462	20027.8	20027.8	20027.8	21.0	52.0	2904.0
cch second order	-8.2486237271	433.0	199.0	199.0	nan	52.0	64.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.2392151387	52447.0	0.0	0.0	nan	52.0	1192.9
direct with trim	-8.2486237462	52457.6	8.6	8.6	nan	52.0	1409.2
dual anneal	-8.2486237462	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	2181.0
trust region	-8.2486237462	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.6
trust region repeats	-8.2486237462	261.0	261.0	261.0	1.0	52.0	40.8

Table 1752: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1580144252	19652.6	19652.6	19652.6	20.4	52.0	2753.9
cch second order	-16.1580045021	401.0	199.0	199.0	nan	52.0	75.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-16.1494573347	52443.0	0.0	0.0	nan	52.0	1195.3
direct with trim	-16.1580045548	52451.2	6.2	6.2	nan	52.0	1285.6
dual anneal	-16.1580045547	100015.6	14.6	14.6	1.0	52.0	2360.4
trust region	-16.1580045548	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.7
trust region repeats	-16.1580045548	261.0	261.0	261.0	1.0	52.0	44.0

Table 1753: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2795190369	19872.6	19872.6	19872.6	20.6	52.0	2624.3
cch second order	-27.2795190360	283.0	129.0	129.0	nan	52.0	65.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-27.1457170216	52375.0	0.0	0.0	nan	52.0	1017.4
direct with trim	-27.2795190369	52394.4	17.4	17.4	nan	52.0	1418.2
dual anneal	-27.2795190368	100014.6	13.6	13.6	1.0	52.0	2434.9
trust region	-27.2795190369	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	50.8
trust region repeats	-27.2795190369	266.0	266.0	266.0	1.0	52.0	41.9

Table 1754: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8935061330	19749.6	19749.6	19749.6	20.0	52.0	2567.4
cch second order	-41.8935061959	195.0	101.0	101.0	nan	52.0	38.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-41.3455760854	52035.0	0.0	0.0	nan	52.0	1238.0
direct with trim	-41.8935061330	52049.0	12.0	12.0	nan	52.0	1363.5
dual anneal	-41.8935061328	100013.0	12.0	12.0	1.0	52.0	2312.4
trust region	-41.8935061330	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	47.9
trust region repeats	-41.8935061330	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	36.4

Table 1755: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2462252101	19783.8	19783.8	19783.8	20.2	52.0	2468.4
cch second order	-60.2462252040	194.0	106.0	106.0	nan	52.0	54.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-60.0924667650	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1240.1
direct with trim	-60.2462252101	52364.0	7.0	7.0	nan	52.0	1224.3
dual anneal	-60.2462252097	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	2471.7
trust region	-60.2462252101	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	52.3
trust region repeats	-60.2462252101	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	40.9

Table 1756: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5587278953	19973.0	19973.0	19973.0	21.0	52.0	2770.7
cch second order	-82.5587278622	201.0	111.0	111.0	nan	52.0	37.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-82.2232143784	52437.0	0.0	0.0	nan	52.0	1366.4
direct with trim	-82.5587278953	52451.0	12.0	12.0	nan	52.0	1205.5
dual anneal	-82.5587278947	100015.0	14.0	14.0	1.0	52.0	2274.8
trust region	-82.5587278953	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	32.1
trust region repeats	-82.5587278953	285.0	285.0	285.0	1.0	52.0	42.0

Table 1757: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0325096695	20031.0	20031.0	20031.0	21.0	52.0	2590.8
cch second order	-109.0325096338	215.0	114.0	114.0	nan	52.0	38.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-107.8471495961	52121.0	0.0	0.0	nan	52.0	1307.0
direct with trim	-109.0325096695	52137.0	14.0	14.0	nan	52.0	1324.2
dual anneal	-109.0325096686	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2307.1
trust region	-109.0325096695	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.5
trust region repeats	-109.0325096695	292.0	292.0	292.0	1.0	52.0	39.8

Table 1758: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8533633430	19728.6	19728.6	19728.6	20.8	52.0	2420.3
cch second order	-139.8533633934	224.0	114.0	114.0	nan	52.0	61.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-139.0506714478	52135.0	0.0	0.0	nan	52.0	1246.1
direct with trim	-139.8051238971	53138.0	1001.0	1001.0	nan	52.0	1707.4
dual anneal	-139.8533633418	100023.0	22.0	22.0	1.0	52.0	2376.2
trust region	-139.8533633430	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	47.6
trust region repeats	-139.8533633430	308.0	308.0	308.0	1.0	52.0	44.7

Table 1759: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1941710407	19518.0	19518.0	19518.0	21.0	52.0	2408.1
cch second order	-175.1941402772	334.0	148.0	148.0	nan	52.0	70.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-174.6765655677	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1326.3
direct with trim	-175.1941403065	52309.0	10.0	10.0	nan	52.0	1368.5
dual anneal	-175.1941403050	100021.2	20.2	20.2	1.0	52.0	2276.7
trust region	-175.1941403065	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	30.9
trust region repeats	-175.1941403065	289.0	289.0	289.0	1.0	52.0	39.0

Table 1760: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2168057972	19935.2	19935.2	19935.2	20.8	52.0	2626.8
cch second order	-215.2168058103	311.0	117.0	117.0	nan	52.0	57.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-213.0956081958	52337.0	0.0	0.0	nan	52.0	1169.5
direct with trim	-215.2168057970	52354.2	15.2	15.2	nan	52.0	1266.9
dual anneal	-215.2168057950	100030.4	29.4	29.4	1.0	52.0	2389.8
trust region	-215.2168057970	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	31.3
trust region repeats	-215.2168057970	294.0	294.0	294.0	1.0	52.0	42.1

Table 1761: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0740154133	19811.2	19811.2	19811.2	20.2	52.0	2457.2
cch second order	-260.0740154115	198.0	104.0	104.0	nan	52.0	55.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-258.3613186680	52113.0	0.0	0.0	nan	52.0	1155.0
direct with trim	-260.0740154132	52127.0	12.0	12.0	nan	52.0	1382.0
dual anneal	-260.0740154107	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2465.6
trust region	-260.0740154132	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	47.0
trust region repeats	-260.0740154132	289.0	289.0	289.0	1.0	52.0	40.1

Table 1762: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9103543204	20019.8	20019.8	20019.8	20.8	52.0	2571.8
cch second order	-309.9103543666	189.0	103.0	103.0	nan	52.0	53.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-265.1086317488	52465.0	0.0	0.0	nan	52.0	1325.9
direct with trim	-309.9103543204	52502.6	35.6	35.6	nan	52.0	1294.0
dual anneal	-309.9103543171	100019.4	18.4	18.4	1.0	52.0	2359.2
trust region	-309.9103543204	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	53.5
trust region repeats	-309.9103543204	291.0	291.0	291.0	1.0	52.0	40.1

Table 1763: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8633312568	19487.4	19487.4	19487.4	19.8	52.0	2262.3
cch second order	-364.8633312150	201.0	105.0	105.0	nan	52.0	54.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-315.7949842772	52473.0	0.0	0.0	nan	52.0	1232.0
direct with trim	-364.8633312568	52508.0	33.0	33.0	nan	52.0	1365.9
dual anneal	-364.8633312528	100024.8	23.8	23.8	1.0	52.0	2222.3
trust region	-364.8633312568	20.0	20.0	20.0	nan	52.0	34.1
trust region repeats	-364.8633312568	293.0	293.0	293.0	1.0	52.0	41.3

Table 1764: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0641895968	19679.0	19679.0	19679.0	19.6	52.0	2133.0
cch second order	-425.0641895460	210.0	111.0	111.0	nan	52.0	54.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-377.4958640930	52443.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.2
direct with trim	-425.0641895968	52474.0	29.0	29.0	nan	52.0	1408.5
dual anneal	-425.0641895919	100024.4	23.4	23.4	1.0	52.0	2217.6
trust region	-425.0641895968	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	51.9
trust region repeats	-425.0641895968	300.0	300.0	300.0	1.0	52.0	43.7

Table 1765: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6385788760	19226.0	19226.0	19226.0	19.0	52.0	2516.2
cch second order	-490.6385788588	193.0	103.0	103.0	nan	52.0	40.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-484.2313921700	52393.0	0.0	0.0	nan	52.0	1201.9
direct with trim	-490.0630341515	53396.0	1001.0	1001.0	nan	52.0	1837.6
dual anneal	-490.6385788701	100024.6	23.6	23.6	1.0	52.0	2121.7
trust region	-490.6385788760	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	30.1
trust region repeats	-490.6385788760	298.0	298.0	298.0	1.0	52.0	46.4

Table 1766: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.7071178529	19563.4	19563.4	19563.4	19.6	52.0	2466.9
cch second order	-561.7071178133	246.0	120.0	120.0	nan	52.0	38.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-481.3864495473	52287.0	0.0	0.0	nan	52.0	1190.2
direct with trim	-561.7071178528	52331.2	42.2	42.2	nan	52.0	1292.2
dual anneal	-561.7071178459	100024.0	23.0	23.0	1.0	52.0	2238.4
trust region	-561.7071178528	22.0	22.0	22.0	nan	52.0	57.0
trust region repeats	-561.7071178528	299.0	299.0	299.0	1.0	52.0	44.0

Table 1767: Ar

62.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6661305542
He	direct with trim	-3.2215715934
Li	basin hopping	-8.2486237462
Be	basin hopping	-16.1580144252
B	trust region	-27.2795190369
C	cch second order	-41.8935061959
N	direct with trim	-60.2462252101
O	trust region repeats	-82.5587278953
F	basin hopping	-109.0325096695
Ne	cch second order	-139.8533633934
Na	basin hopping	-175.1941710407
Mg	cch second order	-215.2168058103
Al	basin hopping	-260.0740154133
Si	cch second order	-309.9103543666
P	basin hopping	-364.8633312568
S	basin hopping	-425.0641895968
Cl	basin hopping	-490.6385788760
Ar	basin hopping	-561.7071178529

Table 1768: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	251.3	123.3	123.3	nan	-182.8792619443	54.2
basin hopping	19774.6	19774.6	19774.6	20.4	-182.8792642069	2574.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	14.7	14.7	14.7	nan	-182.8792619510	44.1
trust region repeats	280.9	280.9	280.9	1.0	-182.8792619510	41.5
direct	52297.1	0.0	0.0	nan	-169.7847568035	1225.9
direct with trim	52425.3	126.2	126.2	nan	-182.8446072749	1377.5
dual anneal	100018.9	17.9	17.9	1.0	-182.8792619491	2322.1

Table 1769: Average (all systems)

63 52s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

63.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1770: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247151	19985.2	19985.2	19985.2	20.2	52.0	2645.2
He	-2.8183587462	19903.2	19903.2	19903.2	20.4	52.0	2839.8
Li	-7.3227196702	19746.0	19746.0	19746.0	19.8	52.0	2881.5
Be	-14.4841045521	19870.2	19870.2	19870.2	21.0	52.0	2612.7
B	-24.6284293223	19911.0	19911.0	19911.0	20.8	52.0	2698.2
C	-38.0333096585	19628.8	19628.8	19628.8	19.8	52.0	2368.6
N	-54.9429026023	19839.2	19839.2	19839.2	20.2	52.0	2666.3
O	-75.5766502605	19780.6	19780.6	19780.6	20.6	52.0	2707.1
F	-100.1346336750	19932.4	19932.4	19932.4	20.0	52.0	2525.0
Ne	-128.8015795471	19460.4	19460.4	19460.4	20.8	52.0	2716.3
Na	-161.7493360457	19625.4	19625.4	19625.4	20.2	52.0	2342.9
Mg	-199.1390176395	19892.4	19892.4	19892.4	19.8	52.0	2378.2
Al	-241.1225287957	19293.2	19293.2	19293.2	20.2	52.0	2386.8
Si	-287.8437843866	19491.6	19491.6	19491.6	19.8	52.0	2480.7
P	-339.4396895201	19456.6	19456.6	19456.6	19.8	52.0	2597.6
S	-396.0409396743	19128.4	19128.4	19128.4	18.4	52.0	2342.7
Cl	-457.7726836342	19781.8	19781.8	19781.8	20.2	52.0	2722.9
Ar	-524.7550892530	19705.6	19705.6	19705.6	19.6	52.0	2612.3

Table 1771: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247338	205.0	94.0	94.0	nan	52.0	60.5
He	-2.8183587655	197.0	101.0	101.0	nan	52.0	59.6
Li	-7.3227196952	372.0	179.0	179.0	nan	52.0	66.7
Be	-14.4841045316	263.0	135.0	135.0	nan	52.0	62.4
B	-24.6284292903	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	38.0
C	-38.0332961677	194.0	96.0	96.0	nan	52.0	36.9
N	-54.9428920537	214.0	100.0	100.0	nan	52.0	39.5
O	-75.5766230126	185.0	99.0	99.0	nan	52.0	38.2
F	-100.1346337103	235.0	120.0	120.0	nan	52.0	61.4
Ne	-128.8015795612	222.0	120.0	120.0	nan	52.0	62.8
Na	-161.7493360546	255.0	133.0	133.0	nan	52.0	67.9
Mg	-199.1390175821	242.0	128.0	128.0	nan	52.0	62.4
Al	-241.1225287784	264.0	137.0	137.0	nan	52.0	59.3
Si	-287.8437844550	252.0	129.0	129.0	nan	52.0	46.5
P	-339.4396894514	271.0	143.0	143.0	nan	52.0	47.5
S	-396.0409397455	240.0	125.0	125.0	nan	52.0	41.5
Cl	-457.7726835682	313.0	163.0	163.0	nan	52.0	44.1
Ar	-524.7550797339	284.0	131.0	131.0	nan	52.0	42.5

Table 1772: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1773: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5655413075	52195.0	0.0	0.0	nan	52.0	1247.5
He	-2.8165333499	52501.0	0.0	0.0	nan	52.0	1212.3
Li	-7.3148935991	52491.0	0.0	0.0	nan	52.0	1249.7
Be	-14.4692664796	52035.0	0.0	0.0	nan	52.0	1285.4
B	-24.5623810393	52019.0	0.0	0.0	nan	52.0	1156.6
C	-37.8172350781	52053.0	0.0	0.0	nan	52.0	1170.3
N	-54.7054872582	52155.0	0.0	0.0	nan	52.0	1205.4
O	-75.2689912842	52075.0	0.0	0.0	nan	52.0	1192.2
F	-99.2871262216	52077.0	0.0	0.0	nan	52.0	1105.3
Ne	-128.1844632700	52021.0	0.0	0.0	nan	52.0	1185.1
Na	-161.3159516753	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1230.8
Mg	-197.5658733002	52453.0	0.0	0.0	nan	52.0	1221.6
Al	-240.0241086254	52545.0	0.0	0.0	nan	52.0	1286.0
Si	-286.9484443914	52147.0	0.0	0.0	nan	52.0	1163.5
P	-336.6503078446	52173.0	0.0	0.0	nan	52.0	1180.6
S	-393.9325766017	52099.0	0.0	0.0	nan	52.0	927.9
Cl	-453.6703211154	52493.0	0.0	0.0	nan	52.0	986.9
Ar	-426.3041382381	52321.0	0.0	0.0	nan	52.0	955.7

Table 1774: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5665067928	52213.0	16.0	16.0	nan	52.0	993.5
He	-2.8183587462	52510.8	7.8	7.8	nan	52.0	1136.8
Li	-7.3227196702	52500.0	7.0	7.0	nan	52.0	1005.0
Be	-14.4841045521	52044.0	7.0	7.0	nan	52.0	1059.6
B	-24.6284293223	52028.0	7.0	7.0	nan	52.0	880.4
C	-38.0332961647	52064.0	9.0	9.0	nan	52.0	1151.5
N	-54.9428920336	52164.0	7.0	7.0	nan	52.0	1088.7
O	-75.5766230389	52087.6	10.6	10.6	nan	52.0	1176.3
F	-100.1346336750	52089.0	10.0	10.0	nan	52.0	1205.5
Ne	-128.8015795471	52033.0	10.0	10.0	nan	52.0	1159.9
Na	-161.7493360457	52365.0	8.0	8.0	nan	52.0	1143.4
Mg	-199.1390176395	52465.8	10.8	10.8	nan	52.0	1052.6
Al	-241.1225287957	52562.8	15.8	15.8	nan	52.0	1057.5
Si	-287.8437843865	52161.0	12.0	12.0	nan	52.0	889.3
P	-339.4396895201	52185.0	10.0	10.0	nan	52.0	1098.0
S	-396.0409396743	52112.2	11.2	11.2	nan	52.0	1171.8
Cl	-457.7726836342	52510.4	15.4	15.4	nan	52.0	999.4
Ar	-524.7550796932	52353.0	30.0	30.0	nan	52.0	952.8

Table 1775: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247151	100010.0	9.0	9.0	1.0	52.0	2398.3
He	-2.8183587462	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2442.3
Li	-7.3227196702	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2483.3
Be	-14.4841045521	100011.2	10.2	10.2	1.0	52.0	2368.6
B	-24.6284293222	100013.8	12.8	12.8	1.0	52.0	2409.1
C	-38.0332961646	100016.6	15.6	15.6	1.0	52.0	2602.9
N	-54.9428920334	100014.8	13.8	13.8	1.0	52.0	2482.3
O	-75.5766230386	100014.4	13.4	13.4	1.0	52.0	2457.2
F	-100.1346336746	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2276.5
Ne	-128.8015795465	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2209.8
Na	-161.7493360449	100016.4	15.4	15.4	1.0	52.0	2180.8
Mg	-199.1390176385	100020.0	19.0	19.0	1.0	52.0	2314.5
Al	-241.1225287945	100017.8	16.8	16.8	1.0	52.0	2257.7
Si	-287.8437843850	100022.0	21.0	21.0	1.0	52.0	2496.9
P	-339.4396895182	100015.8	14.8	14.8	1.0	52.0	2242.3
S	-396.0409396720	100021.0	20.0	20.0	1.0	52.0	2321.6
Cl	-457.7726836314	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2286.5
Ar	-524.7550796899	100016.8	15.8	15.8	1.0	52.0	2605.7

Table 1776: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247151	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	33.4
He	-2.8183587462	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.6
Li	-7.3227196702	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.5
Be	-14.4841045521	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	53.0
B	-24.6284293223	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	52.3
C	-38.0332961647	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	53.1
N	-54.9428920336	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	53.6
O	-75.5766222180	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.4
F	-100.1346336750	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.8
Ne	-128.8015795471	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	56.1
Na	-161.7493360457	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	47.3
Mg	-199.1390176395	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	54.4
Al	-241.1225287957	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	49.8
Si	-287.8437843865	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	62.3
P	-339.4396895201	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	36.2
S	-396.0409396743	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	31.4
Cl	-457.7726836342	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	35.6
Ar	-524.7550796932	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	35.5

Table 1777: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666247151	226.0	226.0	226.0	1.0	52.0	38.6
He	-2.8183587462	235.0	235.0	235.0	1.0	52.0	42.0
Li	-7.3227196702	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	42.9
Be	-14.4841045521	254.0	254.0	254.0	1.0	52.0	39.6
B	-24.6284293223	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	33.5
C	-38.0332961647	273.0	273.0	273.0	1.0	52.0	39.6
N	-54.9428920336	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	45.3
O	-75.5766230389	269.0	269.0	269.0	1.0	52.0	39.1
F	-100.1346336750	274.0	274.0	274.0	1.0	52.0	43.3
Ne	-128.8015795471	283.0	283.0	283.0	1.0	52.0	38.3
Na	-161.7493360457	278.0	278.0	278.0	1.0	52.0	46.0
Mg	-199.1390176395	280.0	280.0	280.0	1.0	52.0	41.0
Al	-241.1225287957	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	38.9
Si	-287.8437843865	289.0	289.0	289.0	2.0	52.0	41.4
P	-339.4396895201	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	41.7
S	-396.0409396743	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	41.3
Cl	-457.7726836342	290.0	290.0	290.0	1.0	52.0	43.0
Ar	-524.7550796932	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	37.6

Table 1778: trust region repeats

63.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666247151	19985.2	19985.2	19985.2	20.2	52.0	2645.2
cch second order	-0.5666247338	205.0	94.0	94.0	nan	52.0	60.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.5655413075	52195.0	0.0	0.0	nan	52.0	1247.5
direct with trim	-0.5665067928	52213.0	16.0	16.0	nan	52.0	993.5
dual anneal	-0.5666247151	100010.0	9.0	9.0	1.0	52.0	2398.3
trust region	-0.5666247151	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	33.4
trust region repeats	-0.5666247151	226.0	226.0	226.0	1.0	52.0	38.6

Table 1779: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183587462	19903.2	19903.2	19903.2	20.4	52.0	2839.8
cch second order	-2.8183587655	197.0	101.0	101.0	nan	52.0	59.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.8165333499	52501.0	0.0	0.0	nan	52.0	1212.3
direct with trim	-2.8183587462	52510.8	7.8	7.8	nan	52.0	1136.8
dual anneal	-2.8183587462	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2442.3
trust region	-2.8183587462	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.6
trust region repeats	-2.8183587462	235.0	235.0	235.0	1.0	52.0	42.0

Table 1780: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3227196702	19746.0	19746.0	19746.0	19.8	52.0	2881.5
cch second order	-7.3227196952	372.0	179.0	179.0	nan	52.0	66.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-7.3148935991	52491.0	0.0	0.0	nan	52.0	1249.7
direct with trim	-7.3227196702	52500.0	7.0	7.0	nan	52.0	1005.0
dual anneal	-7.3227196702	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2483.3
trust region	-7.3227196702	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.5
trust region repeats	-7.3227196702	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	42.9

Table 1781: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4841045521	19870.2	19870.2	19870.2	21.0	52.0	2612.7
cch second order	-14.4841045316	263.0	135.0	135.0	nan	52.0	62.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.4692664796	52035.0	0.0	0.0	nan	52.0	1285.4
direct with trim	-14.4841045521	52044.0	7.0	7.0	nan	52.0	1059.6
dual anneal	-14.4841045521	100011.2	10.2	10.2	1.0	52.0	2368.6
trust region	-14.4841045521	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	53.0
trust region repeats	-14.4841045521	254.0	254.0	254.0	1.0	52.0	39.6

Table 1782: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6284293223	19911.0	19911.0	19911.0	20.8	52.0	2698.2
cch second order	-24.6284292903	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	38.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-24.5623810393	52019.0	0.0	0.0	nan	52.0	1156.6
direct with trim	-24.6284293223	52028.0	7.0	7.0	nan	52.0	880.4
dual anneal	-24.6284293222	100013.8	12.8	12.8	1.0	52.0	2409.1
trust region	-24.6284293223	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	52.3
trust region repeats	-24.6284293223	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	33.5

Table 1783: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0333096585	19628.8	19628.8	19628.8	19.8	52.0	2368.6
cch second order	-38.0332961677	194.0	96.0	96.0	nan	52.0	36.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-37.8172350781	52053.0	0.0	0.0	nan	52.0	1170.3
direct with trim	-38.0332961647	52064.0	9.0	9.0	nan	52.0	1151.5
dual anneal	-38.0332961646	100016.6	15.6	15.6	1.0	52.0	2602.9
trust region	-38.0332961647	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	53.1
trust region repeats	-38.0332961647	273.0	273.0	273.0	1.0	52.0	39.6

Table 1784: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9429026023	19839.2	19839.2	19839.2	20.2	52.0	2666.3
cch second order	-54.9428920537	214.0	100.0	100.0	nan	52.0	39.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-54.7054872582	52155.0	0.0	0.0	nan	52.0	1205.4
direct with trim	-54.9428920336	52164.0	7.0	7.0	nan	52.0	1088.7
dual anneal	-54.9428920334	100014.8	13.8	13.8	1.0	52.0	2482.3
trust region	-54.9428920336	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	53.6
trust region repeats	-54.9428920336	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	45.3

Table 1785: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5766502605	19780.6	19780.6	19780.6	20.6	52.0	2707.1
cch second order	-75.5766230126	185.0	99.0	99.0	nan	52.0	38.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-75.2689912842	52075.0	0.0	0.0	nan	52.0	1192.2
direct with trim	-75.5766230389	52087.6	10.6	10.6	nan	52.0	1176.3
dual anneal	-75.5766230386	100014.4	13.4	13.4	1.0	52.0	2457.2
trust region	-75.5766222180	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.4
trust region repeats	-75.5766230389	269.0	269.0	269.0	1.0	52.0	39.1

Table 1786: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1346336750	19932.4	19932.4	19932.4	20.0	52.0	2525.0
cch second order	-100.1346337103	235.0	120.0	120.0	nan	52.0	61.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-99.2871262216	52077.0	0.0	0.0	nan	52.0	1105.3
direct with trim	-100.1346336750	52089.0	10.0	10.0	nan	52.0	1205.5
dual anneal	-100.1346336746	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2276.5
trust region	-100.1346336750	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	55.8
trust region repeats	-100.1346336750	274.0	274.0	274.0	1.0	52.0	43.3

Table 1787: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8015795471	19460.4	19460.4	19460.4	20.8	52.0	2716.3
cch second order	-128.8015795612	222.0	120.0	120.0	nan	52.0	62.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-128.1844632700	52021.0	0.0	0.0	nan	52.0	1185.1
direct with trim	-128.8015795471	52033.0	10.0	10.0	nan	52.0	1159.9
dual anneal	-128.8015795465	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2209.8
trust region	-128.8015795471	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	56.1
trust region repeats	-128.8015795471	283.0	283.0	283.0	1.0	52.0	38.3

Table 1788: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7493360457	19625.4	19625.4	19625.4	20.2	52.0	2342.9
cch second order	-161.7493360546	255.0	133.0	133.0	nan	52.0	67.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-161.3159516753	52355.0	0.0	0.0	nan	52.0	1230.8
direct with trim	-161.7493360457	52365.0	8.0	8.0	nan	52.0	1143.4
dual anneal	-161.7493360449	100016.4	15.4	15.4	1.0	52.0	2180.8
trust region	-161.7493360457	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	47.3
trust region repeats	-161.7493360457	278.0	278.0	278.0	1.0	52.0	46.0

Table 1789: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1390176395	19892.4	19892.4	19892.4	19.8	52.0	2378.2
cch second order	-199.1390175821	242.0	128.0	128.0	nan	52.0	62.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-197.5658733002	52453.0	0.0	0.0	nan	52.0	1221.6
direct with trim	-199.1390176395	52465.8	10.8	10.8	nan	52.0	1052.6
dual anneal	-199.1390176385	100020.0	19.0	19.0	1.0	52.0	2314.5
trust region	-199.1390176395	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	54.4
trust region repeats	-199.1390176395	280.0	280.0	280.0	1.0	52.0	41.0

Table 1790: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1225287957	19293.2	19293.2	19293.2	20.2	52.0	2386.8
cch second order	-241.1225287784	264.0	137.0	137.0	nan	52.0	59.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-240.0241086254	52545.0	0.0	0.0	nan	52.0	1286.0
direct with trim	-241.1225287957	52562.8	15.8	15.8	nan	52.0	1057.5
dual anneal	-241.1225287945	100017.8	16.8	16.8	1.0	52.0	2257.7
trust region	-241.1225287957	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	49.8
trust region repeats	-241.1225287957	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	38.9

Table 1791: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8437843866	19491.6	19491.6	19491.6	19.8	52.0	2480.7
cch second order	-287.8437844550	252.0	129.0	129.0	nan	52.0	46.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-286.9484443914	52147.0	0.0	0.0	nan	52.0	1163.5
direct with trim	-287.8437843865	52161.0	12.0	12.0	nan	52.0	889.3
dual anneal	-287.8437843850	100022.0	21.0	21.0	1.0	52.0	2496.9
trust region	-287.8437843865	18.0	18.0	18.0	nan	52.0	62.3
trust region repeats	-287.8437843865	289.0	289.0	289.0	2.0	52.0	41.4

Table 1792: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4396895201	19456.6	19456.6	19456.6	19.8	52.0	2597.6
cch second order	-339.4396894514	271.0	143.0	143.0	nan	52.0	47.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-336.6503078446	52173.0	0.0	0.0	nan	52.0	1180.6
direct with trim	-339.4396895201	52185.0	10.0	10.0	nan	52.0	1098.0
dual anneal	-339.4396895182	100015.8	14.8	14.8	1.0	52.0	2242.3
trust region	-339.4396895201	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	36.2
trust region repeats	-339.4396895201	284.0	284.0	284.0	1.0	52.0	41.7

Table 1793: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0409396743	19128.4	19128.4	19128.4	18.4	52.0	2342.7
cch second order	-396.0409397455	240.0	125.0	125.0	nan	52.0	41.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-393.9325766017	52099.0	0.0	0.0	nan	52.0	927.9
direct with trim	-396.0409396743	52112.2	11.2	11.2	nan	52.0	1171.8
dual anneal	-396.0409396720	100021.0	20.0	20.0	1.0	52.0	2321.6
trust region	-396.0409396743	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	31.4
trust region repeats	-396.0409396743	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	41.3

Table 1794: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7726836342	19781.8	19781.8	19781.8	20.2	52.0	2722.9
cch second order	-457.7726835682	313.0	163.0	163.0	nan	52.0	44.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-453.6703211154	52493.0	0.0	0.0	nan	52.0	986.9
direct with trim	-457.7726836342	52510.4	15.4	15.4	nan	52.0	999.4
dual anneal	-457.7726836314	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2286.5
trust region	-457.7726836342	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	35.6
trust region repeats	-457.7726836342	290.0	290.0	290.0	1.0	52.0	43.0

Table 1795: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7550892530	19705.6	19705.6	19705.6	19.6	52.0	2612.3
cch second order	-524.7550797339	284.0	131.0	131.0	nan	52.0	42.5
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-426.3041382381	52321.0	0.0	0.0	nan	52.0	955.7
direct with trim	-524.7550796932	52353.0	30.0	30.0	nan	52.0	952.8
dual anneal	-524.7550796899	100016.8	15.8	15.8	1.0	52.0	2605.7
trust region	-524.7550796932	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	35.5
trust region repeats	-524.7550796932	288.0	288.0	288.0	1.0	52.0	37.6

Table 1796: Ar

63.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.5666247338
He	cch second order	-2.8183587655
Li	cch second order	-7.3227196952
Be	basin hopping	-14.4841045521
B	basin hopping	-24.6284293223
C	basin hopping	-38.0333096585
N	basin hopping	-54.9429026023
O	basin hopping	-75.5766502605
F	cch second order	-100.1346337103
Ne	cch second order	-128.8015795612
Na	cch second order	-161.7493360546
Mg	direct with trim	-199.1390176395
Al	basin hopping	-241.1225287957
Si	cch second order	-287.8437844550
P	basin hopping	-339.4396895201
S	cch second order	-396.0409397455
Cl	basin hopping	-457.7726836342
Ar	basin hopping	-524.7550892530

Table 1797: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	244.7	124.3	124.3	nan	-169.7317956051	52.1
basin hopping	19690.7	19690.7	19690.7	20.1	-169.7317989832	2584.7
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.5	13.5	13.5	nan	-169.7317955574	47.5
trust region repeats	270.8	270.8	270.8	1.1	-169.7317956030	40.7
direct	52233.8	0.0	0.0	nan	-163.4113133711	1164.6
direct with trim	52247.1	11.4	11.4	nan	-169.7317890518	1067.9
dual anneal	100015.9	14.9	14.9	1.0	-169.7317956021	2379.8

Table 1798: Average (all systems)

64   52s 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

64.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266218	695.0	695.0	0.0	nan	52.0	69.5
He	-1.4774505625	686.0	686.0	0.0	nan	52.0	57.8
Li	-4.1054250320	1002.0	1002.0	0.0	nan	52.0	65.3
Be	-8.4921856898	1117.0	1117.0	0.0	nan	52.0	79.9
B	-14.9258826137	928.0	928.0	0.0	nan	52.0	76.4
C	-23.6568740804	833.0	833.0	0.0	nan	52.0	62.5
N	-34.9084346482	918.0	918.0	0.0	nan	52.0	60.9
O	-48.8832265087	947.0	947.0	0.0	nan	52.0	66.6
F	-65.7675715024	909.0	909.0	0.0	nan	52.0	64.0
Ne	-85.7344465037	925.0	925.0	0.0	nan	52.0	64.1
Na	-108.9456785546	1155.0	1155.0	0.0	nan	52.0	64.2
Mg	-135.5536091324	1504.0	1504.0	0.0	nan	52.0	73.9
Al	-165.7023905171	1136.0	1136.0	0.0	nan	52.0	67.4
Si	-199.5290181413	2849.0	2849.0	0.0	nan	52.0	142.6
P	-237.1641679740	4416.0	4416.0	0.0	nan	52.0	173.7
S	-278.7328864456	1560.0	1560.0	0.0	nan	52.0	84.6
Cl	-324.3551665537	1581.0	1581.0	0.0	nan	52.0	109.2
Ar	-374.1464345653	9611.0	9611.0	0.0	nan	52.0	289.4

Table 1799: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266340	19697.5	19697.5	19697.5	20.0	52.0	3132.0
He	-1.4774505723	19393.6	19393.6	19393.6	19.4	52.0	2771.7
Li	-4.1054250346	18803.8	18803.8	18803.8	18.2	52.0	2479.0
Be	-8.4921857026	18956.2	18956.2	18956.2	18.2	52.0	2462.5
B	-14.9258826252	18579.4	18579.4	18579.4	17.4	52.0	2593.2
C	-23.6568740938	18439.4	18439.4	18439.4	18.2	52.0	2596.7
N	-34.9084346676	18293.6	18293.6	18293.6	17.4	52.0	2429.6
O	-48.8832305877	18537.6	18537.6	18537.6	18.8	52.0	2960.3
F	-65.7675715574	18320.8	18320.8	18320.8	17.8	52.0	2529.5
Ne	-85.7348322743	18341.6	18341.6	18341.6	17.6	52.0	2508.3
Na	-108.9457425862	18156.8	18156.8	18156.8	16.4	52.0	2712.0
Mg	-135.5538225375	18214.0	18214.0	18214.0	17.8	52.0	2581.2
Al	-165.7023908548	18432.8	18432.8	18432.8	17.2	52.0	2390.2
Si	-199.5290186353	17851.4	17851.4	17851.4	16.0	52.0	2545.0
P	-237.1641686776	17641.8	17641.8	17641.8	18.0	52.0	2560.8
S	-278.7329298267	18241.8	18241.8	18241.8	18.0	52.0	2582.6
Cl	-324.3551678929	18158.4	18158.4	18158.4	16.6	52.0	2583.0
Ar	-374.1464364018	17809.4	17809.4	17809.4	15.8	52.0	2674.7

Table 1800: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266518	172.0	85.0	85.0	nan	52.0	52.2
He	-1.4774505706	218.0	103.0	103.0	nan	52.0	54.6
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	-8.4921857224	240.0	121.0	121.0	nan	52.0	62.6
B	-14.9258827608	176.0	94.0	94.0	nan	52.0	54.9
C	-23.6568742432	187.0	99.0	99.0	nan	52.0	53.9
N	-34.9084347660	172.0	95.0	95.0	nan	52.0	60.2
O	-48.8832263839	170.0	94.0	94.0	nan	52.0	57.2
F	-65.7675714037	157.0	87.0	87.0	nan	52.0	50.0
Ne	-85.7344464605	211.0	96.0	96.0	nan	52.0	57.9
Na	-108.9456786100	189.0	97.0	97.0	nan	52.0	61.3
Mg	-135.5536093168	190.0	100.0	100.0	nan	52.0	54.8
Al	-165.7023907095	183.0	96.0	96.0	nan	52.0	60.6
Si	-199.5290186907	182.0	95.0	95.0	nan	52.0	53.0
P	-237.1641685729	180.0	98.0	98.0	nan	52.0	53.3
S	-278.7328873258	202.0	105.0	105.0	nan	52.0	56.8
Cl	-324.3551679653	222.0	109.0	109.0	nan	52.0	56.9
Ar	-374.1464365373	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	59.1

Table 1801: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1802: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618064752	52053.0	0.0	0.0	nan	52.0	994.8
He	-1.4770960647	52305.0	0.0	0.0	nan	52.0	1157.7
Li	-4.1044124972	52445.0	0.0	0.0	nan	52.0	1115.8
Be	-8.4913293257	52219.0	0.0	0.0	nan	52.0	1152.9
B	-14.9159381213	52383.0	0.0	0.0	nan	52.0	1247.3
C	-23.6244490938	52123.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.8
N	-34.8499260984	52161.0	0.0	0.0	nan	52.0	1158.8
O	-48.8566938937	52411.0	0.0	0.0	nan	52.0	1098.1
F	-65.7342833568	52101.0	0.0	0.0	nan	52.0	901.0
Ne	-85.6656473485	52235.0	0.0	0.0	nan	52.0	1252.4
Na	-108.7729391548	52279.0	0.0	0.0	nan	52.0	1126.8
Mg	-135.4605774296	52477.0	0.0	0.0	nan	52.0	1127.9
Al	-165.3909819824	52417.0	0.0	0.0	nan	52.0	1117.5
Si	-199.2405989706	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.5
P	-237.0018633452	52133.0	0.0	0.0	nan	52.0	1270.0
S	-277.9924847815	52393.0	0.0	0.0	nan	52.0	1172.5
Cl	-323.6597667435	52323.0	0.0	0.0	nan	52.0	1217.7
Ar	-373.4356287570	52285.0	0.0	0.0	nan	52.0	1130.4

Table 1803: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266339	52061.0	6.0	6.0	nan	52.0	970.4
He	-1.4774419525	52315.0	8.0	8.0	nan	52.0	857.0
Li	-4.1054214283	52454.0	7.0	7.0	nan	52.0	1023.5
Be	-8.4921857026	52228.6	7.6	7.6	nan	52.0	968.0
B	-14.9258826252	52391.0	6.0	6.0	nan	52.0	864.4
C	-23.6568740938	52131.0	6.0	6.0	nan	52.0	1038.7
N	-34.9084346676	52169.0	6.0	6.0	nan	52.0	1064.4
O	-48.8832265407	52419.0	6.0	6.0	nan	52.0	944.6
F	-65.7675715567	52109.0	6.0	6.0	nan	52.0	843.2
Ne	-85.7344465937	52244.0	7.0	7.0	nan	52.0	1014.4
Na	-108.9456786991	52287.0	6.0	6.0	nan	52.0	929.7
Mg	-135.5536093569	52485.4	6.4	6.4	nan	52.0	1113.2
Al	-165.7023908548	52425.2	6.2	6.2	nan	52.0	1027.3
Si	-199.5290186350	52306.0	7.0	7.0	nan	52.0	1018.3
P	-237.1641608177	52143.0	8.0	8.0	nan	52.0	1155.0
S	-278.7328874260	52401.0	6.0	6.0	nan	52.0	1049.0
Cl	-324.3551678929	52332.0	7.0	7.0	nan	52.0	1021.4
Ar	-374.1464363623	52293.0	6.0	6.0	nan	52.0	1014.2

Table 1804: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266339	100009.8	8.8	8.8	1.0	52.0	2140.9
He	-1.4774505723	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2202.4
Li	-4.1054250346	100015.0	14.0	14.0	1.0	52.0	2357.5
Be	-8.4921857026	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2361.0
B	-14.9258826252	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	1804.3
C	-23.6568740938	100010.6	9.6	9.6	1.0	52.0	2099.3
N	-34.9084346675	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2297.5
O	-48.8832265407	100013.8	12.8	12.8	1.0	52.0	2370.4
F	-65.7675715566	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2321.8
Ne	-85.7344465936	100211.4	210.4	210.4	1.2	52.0	2229.2
Na	-108.9456786990	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2235.2
Mg	-135.5536093567	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2362.1
Al	-165.7023908546	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	2099.9
Si	-199.5290186348	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	2028.1
P	-237.1641686773	100012.2	11.2	11.2	1.0	52.0	2146.6
S	-278.7328874256	100016.8	15.8	15.8	1.0	52.0	1934.6
Cl	-324.3551678924	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	1899.9
Ar	-374.1464363617	100017.2	16.2	16.2	1.0	52.0	1954.0

Table 1805: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266339	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.8
He	-1.4774505723	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	52.6
Li	-4.1054250346	8.0	8.0	8.0	nan	52.0	53.0
Be	-8.4921857026	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.2
B	-14.9258826252	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	43.5
C	-23.6568740938	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	49.1
N	-34.9084346676	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	48.6
O	-48.8832265407	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	33.1
F	-65.7675708023	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	32.8
Ne	-85.7344465937	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.9
Na	-108.9456786991	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.1
Mg	-135.5536093569	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	52.2
Al	-165.7023908548	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	62.4
Si	-199.5290186350	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	50.4
P	-237.1641686776	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	45.9
S	-278.7328874260	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	45.6
Cl	-324.3551601585	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	36.8
Ar	-374.1464363623	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	57.5

Table 1806: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618266340	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	36.1
He	-1.4774505723	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	43.2
Li	-4.1054250346	300.0	300.0	300.0	1.0	52.0	45.3
Be	-8.4921857026	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	41.7
B	-14.9258826252	234.0	234.0	234.0	1.0	52.0	39.2
C	-23.6568740938	244.0	244.0	244.0	2.0	52.0	38.6
N	-34.9084346676	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	46.0
O	-48.8832265407	244.0	244.0	244.0	1.0	52.0	39.2
F	-65.7675715567	247.0	247.0	247.0	1.0	52.0	37.2
Ne	-85.7344465937	250.0	250.0	250.0	1.0	52.0	43.4
Na	-108.9456786991	258.0	258.0	258.0	2.0	52.0	39.5
Mg	-135.5536093569	259.0	259.0	259.0	1.0	52.0	39.4
Al	-165.7023908548	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	41.2
Si	-199.5290186350	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	38.3
P	-237.1641686776	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	38.6
S	-278.7328874260	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	41.2
Cl	-324.3551678929	263.0	263.0	263.0	1.0	52.0	41.3
Ar	-374.1464363623	267.0	267.0	267.0	1.0	52.0	41.5

Table 1807: trust region repeats

64.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618266218	695.0	695.0	0.0	nan	52.0	69.5
basin hopping	-0.2618266340	19697.5	19697.5	19697.5	20.0	52.0	3132.0
cch second order	-0.2618266518	172.0	85.0	85.0	nan	52.0	52.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.2618064752	52053.0	0.0	0.0	nan	52.0	994.8
direct with trim	-0.2618266339	52061.0	6.0	6.0	nan	52.0	970.4
dual anneal	-0.2618266339	100009.8	8.8	8.8	1.0	52.0	2140.9
trust region	-0.2618266339	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.8
trust region repeats	-0.2618266340	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	36.1

Table 1808: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774505625	686.0	686.0	0.0	nan	52.0	57.8
basin hopping	-1.4774505723	19393.6	19393.6	19393.6	19.4	52.0	2771.7
cch second order	-1.4774505706	218.0	103.0	103.0	nan	52.0	54.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1.4770960647	52305.0	0.0	0.0	nan	52.0	1157.7
direct with trim	-1.4774419525	52315.0	8.0	8.0	nan	52.0	857.0
dual anneal	-1.4774505723	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2202.4
trust region	-1.4774505723	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	52.6
trust region repeats	-1.4774505723	277.0	277.0	277.0	1.0	52.0	43.2

Table 1809: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054250320	1002.0	1002.0	0.0	nan	52.0	65.3
basin hopping	-4.1054250346	18803.8	18803.8	18803.8	18.2	52.0	2479.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-4.1044124972	52445.0	0.0	0.0	nan	52.0	1115.8
direct with trim	-4.1054214283	52454.0	7.0	7.0	nan	52.0	1023.5
dual anneal	-4.1054250346	100015.0	14.0	14.0	1.0	52.0	2357.5
trust region	-4.1054250346	8.0	8.0	8.0	nan	52.0	53.0
trust region repeats	-4.1054250346	300.0	300.0	300.0	1.0	52.0	45.3

Table 1810: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921856898	1117.0	1117.0	0.0	nan	52.0	79.9
basin hopping	-8.4921857026	18956.2	18956.2	18956.2	18.2	52.0	2462.5
cch second order	-8.4921857224	240.0	121.0	121.0	nan	52.0	62.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.4913293257	52219.0	0.0	0.0	nan	52.0	1152.9
direct with trim	-8.4921857026	52228.6	7.6	7.6	nan	52.0	968.0
dual anneal	-8.4921857026	100012.6	11.6	11.6	1.0	52.0	2361.0
trust region	-8.4921857026	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	46.2
trust region repeats	-8.4921857026	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	41.7

Table 1811: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258826137	928.0	928.0	0.0	nan	52.0	76.4
basin hopping	-14.9258826252	18579.4	18579.4	18579.4	17.4	52.0	2593.2
cch second order	-14.9258827608	176.0	94.0	94.0	nan	52.0	54.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-14.9159381213	52383.0	0.0	0.0	nan	52.0	1247.3
direct with trim	-14.9258826252	52391.0	6.0	6.0	nan	52.0	864.4
dual anneal	-14.9258826252	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	1804.3
trust region	-14.9258826252	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	43.5
trust region repeats	-14.9258826252	234.0	234.0	234.0	1.0	52.0	39.2

Table 1812: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568740804	833.0	833.0	0.0	nan	52.0	62.5
basin hopping	-23.6568740938	18439.4	18439.4	18439.4	18.2	52.0	2596.7
cch second order	-23.6568742432	187.0	99.0	99.0	nan	52.0	53.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-23.6244490938	52123.0	0.0	0.0	nan	52.0	1187.8
direct with trim	-23.6568740938	52131.0	6.0	6.0	nan	52.0	1038.7
dual anneal	-23.6568740938	100010.6	9.6	9.6	1.0	52.0	2099.3
trust region	-23.6568740938	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	49.1
trust region repeats	-23.6568740938	244.0	244.0	244.0	2.0	52.0	38.6

Table 1813: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9084346482	918.0	918.0	0.0	nan	52.0	60.9
basin hopping	-34.9084346676	18293.6	18293.6	18293.6	17.4	52.0	2429.6
cch second order	-34.9084347660	172.0	95.0	95.0	nan	52.0	60.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-34.8499260984	52161.0	0.0	0.0	nan	52.0	1158.8
direct with trim	-34.9084346676	52169.0	6.0	6.0	nan	52.0	1064.4
dual anneal	-34.9084346675	100011.4	10.4	10.4	1.0	52.0	2297.5
trust region	-34.9084346676	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	48.6
trust region repeats	-34.9084346676	243.0	243.0	243.0	1.0	52.0	46.0

Table 1814: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8832265087	947.0	947.0	0.0	nan	52.0	66.6
basin hopping	-48.8832305877	18537.6	18537.6	18537.6	18.8	52.0	2960.3
cch second order	-48.8832263839	170.0	94.0	94.0	nan	52.0	57.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-48.8566938937	52411.0	0.0	0.0	nan	52.0	1098.1
direct with trim	-48.8832265407	52419.0	6.0	6.0	nan	52.0	944.6
dual anneal	-48.8832265407	100013.8	12.8	12.8	1.0	52.0	2370.4
trust region	-48.8832265407	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	33.1
trust region repeats	-48.8832265407	244.0	244.0	244.0	1.0	52.0	39.2

Table 1815: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7675715024	909.0	909.0	0.0	nan	52.0	64.0
basin hopping	-65.7675715574	18320.8	18320.8	18320.8	17.8	52.0	2529.5
cch second order	-65.7675714037	157.0	87.0	87.0	nan	52.0	50.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-65.7342833568	52101.0	0.0	0.0	nan	52.0	901.0
direct with trim	-65.7675715567	52109.0	6.0	6.0	nan	52.0	843.2
dual anneal	-65.7675715566	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2321.8
trust region	-65.7675708023	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	32.8
trust region repeats	-65.7675715567	247.0	247.0	247.0	1.0	52.0	37.2

Table 1816: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7344465037	925.0	925.0	0.0	nan	52.0	64.1
basin hopping	-85.7348322743	18341.6	18341.6	18341.6	17.6	52.0	2508.3
cch second order	-85.7344464605	211.0	96.0	96.0	nan	52.0	57.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-85.6656473485	52235.0	0.0	0.0	nan	52.0	1252.4
direct with trim	-85.7344465937	52244.0	7.0	7.0	nan	52.0	1014.4
dual anneal	-85.7344465936	100211.4	210.4	210.4	1.2	52.0	2229.2
trust region	-85.7344465937	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.9
trust region repeats	-85.7344465937	250.0	250.0	250.0	1.0	52.0	43.4

Table 1817: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9456785546	1155.0	1155.0	0.0	nan	52.0	64.2
basin hopping	-108.9457425862	18156.8	18156.8	18156.8	16.4	52.0	2712.0
cch second order	-108.9456786100	189.0	97.0	97.0	nan	52.0	61.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-108.7729391548	52279.0	0.0	0.0	nan	52.0	1126.8
direct with trim	-108.9456786991	52287.0	6.0	6.0	nan	52.0	929.7
dual anneal	-108.9456786990	100014.0	13.0	13.0	1.0	52.0	2235.2
trust region	-108.9456786991	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.1
trust region repeats	-108.9456786991	258.0	258.0	258.0	2.0	52.0	39.5

Table 1818: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5536091324	1504.0	1504.0	0.0	nan	52.0	73.9
basin hopping	-135.5538225375	18214.0	18214.0	18214.0	17.8	52.0	2581.2
cch second order	-135.5536093168	190.0	100.0	100.0	nan	52.0	54.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-135.4605774296	52477.0	0.0	0.0	nan	52.0	1127.9
direct with trim	-135.5536093569	52485.4	6.4	6.4	nan	52.0	1113.2
dual anneal	-135.5536093567	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	2362.1
trust region	-135.5536093569	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	52.2
trust region repeats	-135.5536093569	259.0	259.0	259.0	1.0	52.0	39.4

Table 1819: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7023905171	1136.0	1136.0	0.0	nan	52.0	67.4
basin hopping	-165.7023908548	18432.8	18432.8	18432.8	17.2	52.0	2390.2
cch second order	-165.7023907095	183.0	96.0	96.0	nan	52.0	60.6
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-165.3909819824	52417.0	0.0	0.0	nan	52.0	1117.5
direct with trim	-165.7023908548	52425.2	6.2	6.2	nan	52.0	1027.3
dual anneal	-165.7023908546	100012.4	11.4	11.4	1.0	52.0	2099.9
trust region	-165.7023908548	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	62.4
trust region repeats	-165.7023908548	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	41.2

Table 1820: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5290181413	2849.0	2849.0	0.0	nan	52.0	142.6
basin hopping	-199.5290186353	17851.4	17851.4	17851.4	16.0	52.0	2545.0
cch second order	-199.5290186907	182.0	95.0	95.0	nan	52.0	53.0
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-199.2405989706	52297.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.5
direct with trim	-199.5290186350	52306.0	7.0	7.0	nan	52.0	1018.3
dual anneal	-199.5290186348	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	2028.1
trust region	-199.5290186350	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	50.4
trust region repeats	-199.5290186350	262.0	262.0	262.0	1.0	52.0	38.3

Table 1821: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1641679740	4416.0	4416.0	0.0	nan	52.0	173.7
basin hopping	-237.1641686776	17641.8	17641.8	17641.8	18.0	52.0	2560.8
cch second order	-237.1641685729	180.0	98.0	98.0	nan	52.0	53.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-237.0018633452	52133.0	0.0	0.0	nan	52.0	1270.0
direct with trim	-237.1641608177	52143.0	8.0	8.0	nan	52.0	1155.0
dual anneal	-237.1641686773	100012.2	11.2	11.2	1.0	52.0	2146.6
trust region	-237.1641686776	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	45.9
trust region repeats	-237.1641686776	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	38.6

Table 1822: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7328864456	1560.0	1560.0	0.0	nan	52.0	84.6
basin hopping	-278.7329298267	18241.8	18241.8	18241.8	18.0	52.0	2582.6
cch second order	-278.7328873258	202.0	105.0	105.0	nan	52.0	56.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-277.9924847815	52393.0	0.0	0.0	nan	52.0	1172.5
direct with trim	-278.7328874260	52401.0	6.0	6.0	nan	52.0	1049.0
dual anneal	-278.7328874256	100016.8	15.8	15.8	1.0	52.0	1934.6
trust region	-278.7328874260	13.0	13.0	13.0	nan	52.0	45.6
trust region repeats	-278.7328874260	260.0	260.0	260.0	1.0	52.0	41.2

Table 1823: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3551665537	1581.0	1581.0	0.0	nan	52.0	109.2
basin hopping	-324.3551678929	18158.4	18158.4	18158.4	16.6	52.0	2583.0
cch second order	-324.3551679653	222.0	109.0	109.0	nan	52.0	56.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-323.6597667435	52323.0	0.0	0.0	nan	52.0	1217.7
direct with trim	-324.3551678929	52332.0	7.0	7.0	nan	52.0	1021.4
dual anneal	-324.3551678924	100015.2	14.2	14.2	1.0	52.0	1899.9
trust region	-324.3551601585	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	36.8
trust region repeats	-324.3551678929	263.0	263.0	263.0	1.0	52.0	41.3

Table 1824: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1464345653	9611.0	9611.0	0.0	nan	52.0	289.4
basin hopping	-374.1464364018	17809.4	17809.4	17809.4	15.8	52.0	2674.7
cch second order	-374.1464365373	197.0	104.0	104.0	nan	52.0	59.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-373.4356287570	52285.0	0.0	0.0	nan	52.0	1130.4
direct with trim	-374.1464363623	52293.0	6.0	6.0	nan	52.0	1014.2
dual anneal	-374.1464363617	100017.2	16.2	16.2	1.0	52.0	1954.0
trust region	-374.1464363623	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	57.5
trust region repeats	-374.1464363623	267.0	267.0	267.0	1.0	52.0	41.5

Table 1825: Ar

64.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.2618266518
He	basin hopping	-1.4774505723
Li	trust region repeats	-4.1054250346
Be	cch second order	-8.4921857224
B	cch second order	-14.9258827608
C	cch second order	-23.6568742432
N	cch second order	-34.9084347660
O	basin hopping	-48.8832305877
F	basin hopping	-65.7675715574
Ne	basin hopping	-85.7348322743
Na	basin hopping	-108.9457425862
Mg	basin hopping	-135.5538225375
Al	basin hopping	-165.7023908548
Si	cch second order	-199.5290186907
P	basin hopping	-237.1641686776
S	basin hopping	-278.7329298267
Cl	cch second order	-324.3551679653
Ar	cch second order	-374.1464365373

Table 1826: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
cch second order	191.1	98.7	98.7	nan	-124.0139562760	56.4
acevedo	1820.7	1820.7	0.0	nan	-117.3523708693	92.9
basin hopping	18437.2	18437.2	18437.2	17.7	-117.3524106201	2616.3
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.2	12.2	12.2	nan	-117.3523707465	46.0
trust region repeats	257.5	257.5	257.5	1.1	-117.3523712181	40.6
direct	52280.0	0.0	0.0	nan	-117.1631346356	1147.8
direct with trim	52288.6	6.6	6.6	nan	-117.3523701022	995.4
dual anneal	100024.4	23.4	23.4	1.0	-117.3523712179	2158.0

Table 1827: Average (all systems)

65   52s 1.0xLDA X+1.00xVW KE

65.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1828: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340904	19206.0	19206.0	19206.0	18.8	52.0	3173.8
He	-2.7236839075	17472.6	17472.6	17472.6	16.0	52.0	2647.0
Li	-8.5258521761	16077.0	16077.0	16077.0	13.0	52.0	2339.7
Be	-19.3532082729	14467.2	14467.2	14467.2	9.0	52.0	2267.9
B	-36.7306501527	13880.6	13880.6	13880.6	9.4	52.0	2035.1
C	-62.1695548749	11739.0	11739.0	11739.0	7.0	52.0	2329.6
N	-97.1827259705	11349.0	11349.0	11349.0	6.4	52.0	2225.1
O	-143.2726618742	11435.4	11435.4	11435.4	6.4	52.0	2229.0
F	-201.9396345937	9940.2	9940.2	9940.2	5.2	52.0	2111.6
Ne	-274.6808755910	9843.0	9843.0	9843.0	4.4	52.0	2056.3
Na	-362.9915793124	8643.8	8643.8	8643.8	3.4	52.0	1882.9
Mg	-468.3648693352	8907.0	8907.0	8907.0	5.0	52.0	1948.7
Al	-592.2920092359	7993.4	7993.4	7993.4	3.6	52.0	1709.9
Si	-736.2628635882	7778.4	7778.4	7778.4	4.2	52.0	1696.2
P	-901.7660055120	6830.0	6830.0	6830.0	3.2	52.0	1579.8
S	-1090.2888660436	6921.2	6921.2	6921.2	2.6	52.0	1580.7
Cl	-1303.3178576306	7045.6	7045.6	7045.6	2.8	52.0	1766.3
Ar	-1542.3384774996	6357.6	6357.6	6357.6	1.8	52.0	1733.1

Table 1829: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340378	220.0	112.0	112.0	nan	52.0	39.9
He	-2.7236400010	241.0	111.0	111.0	nan	52.0	63.2
Li	-8.5258243682	310.0	155.0	155.0	nan	52.0	63.1
Be	-19.3528912728	314.0	154.0	154.0	nan	52.0	58.1
B	-36.7291388019	395.0	196.0	196.0	nan	52.0	64.4
C	-62.1695454492	382.0	212.0	212.0	nan	52.0	70.4
N	-97.1827274500	457.0	247.0	247.0	nan	52.0	74.8
O	-143.2726022713	526.0	290.0	290.0	nan	52.0	77.4
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1830: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1831: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065285756	52731.0	0.0	0.0	nan	52.0	1302.9
He	-2.7231535671	52175.0	0.0	0.0	nan	52.0	1277.2
Li	-8.5254619567	52179.0	0.0	0.0	nan	52.0	1215.7
Be	-19.3524663589	52137.0	0.0	0.0	nan	52.0	1139.8
B	-36.7251209758	52209.0	0.0	0.0	nan	52.0	1115.5
C	-62.1576631309	52333.0	0.0	0.0	nan	52.0	1299.2
N	-97.1692703727	52169.0	0.0	0.0	nan	52.0	1235.4
O	-143.2405572535	52049.0	0.0	0.0	nan	52.0	1086.8
F	-201.9078528115	52547.0	0.0	0.0	nan	52.0	1228.9
Ne	-274.6152681322	52007.0	0.0	0.0	nan	52.0	1332.8
Na	-362.9301409365	52203.0	0.0	0.0	nan	52.0	1326.6
Mg	-468.3179183251	52331.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.5
Al	-592.1817107606	52271.0	0.0	0.0	nan	52.0	1309.8
Si	-736.1418386071	52537.0	0.0	0.0	nan	52.0	1063.6
P	-901.6260939475	52349.0	0.0	0.0	nan	52.0	1082.4
S	-1090.0781544535	52059.0	0.0	0.0	nan	52.0	1201.3
Cl	-1303.1055976811	52057.0	0.0	0.0	nan	52.0	1033.4
Ar	-1542.0750294968	52615.0	0.0	0.0	nan	52.0	1226.7

Table 1832: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340904	52738.4	5.4	5.4	nan	52.0	1173.7
He	-2.7236381648	52183.0	6.0	6.0	nan	52.0	1105.0
Li	-8.5258250359	52186.6	5.6	5.6	nan	52.0	1104.3
Be	-19.3528901879	52144.0	5.0	5.0	nan	52.0	1093.3
B	-36.7291278800	52217.0	6.0	6.0	nan	52.0	1105.9
C	-62.1695357314	52341.0	6.0	6.0	nan	52.0	999.1
N	-97.1827259705	52177.0	6.0	6.0	nan	52.0	1160.8
O	-143.2726019626	52057.0	6.0	6.0	nan	52.0	942.2
F	-201.9394871921	52555.0	6.0	6.0	nan	52.0	1073.6
Ne	-274.6807997464	52015.0	6.0	6.0	nan	52.0	1125.3
Na	-362.9915793120	52211.0	6.0	6.0	nan	52.0	1107.5
Mg	-468.3648693351	52339.0	6.0	6.0	nan	52.0	942.1
Al	-592.2918563708	52285.2	12.2	12.2	nan	52.0	1125.0
Si	-736.2628635882	52545.0	6.0	6.0	nan	52.0	1125.0
P	-901.7660055120	52357.4	6.4	6.4	nan	52.0	1074.6
S	-1090.2888660436	52067.0	6.0	6.0	nan	52.0	1062.9
Cl	-1303.3178576305	52065.0	6.0	6.0	nan	52.0	1067.0
Ar	-1542.3381388620	52626.0	9.0	9.0	nan	52.0	1151.4

Table 1833: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340904	100013.0	12.0	12.0	1.0	52.0	2145.0
He	-2.7236398036	100010.8	9.8	9.8	1.0	52.0	2096.8
Li	-8.5258250359	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	1942.2
Be	-19.3528901877	100011.0	10.0	10.0	1.0	52.0	1721.7
B	-36.7291386424	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	1791.2
C	-62.1695474478	100014.2	13.2	13.2	1.0	52.0	2200.9
N	-97.1827259660	100016.0	15.0	15.0	1.0	52.0	1868.3
O	-143.2726019531	100016.6	15.6	15.6	1.0	52.0	2271.1
F	-201.9394871736	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	1973.8
Ne	-274.6807997129	100021.2	20.2	20.2	1.0	52.0	2032.3
Na	-362.9915792544	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	1985.5
Mg	-468.3648692406	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2189.6
Al	-592.2920090864	100022.6	21.6	21.6	1.0	52.0	1972.1
Si	-736.2628633599	100024.2	23.2	23.2	1.0	52.0	2411.3
P	-901.7660051730	100027.2	26.2	26.2	1.0	52.0	1719.9
S	-1090.2888655524	100027.8	26.8	26.8	1.0	52.0	2139.7
Cl	-1303.3178569344	100028.8	27.8	27.8	1.0	52.0	2203.8
Ar	-1542.3384765320	100036.4	35.4	35.4	1.0	52.0	1893.0

Table 1834: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340904	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	53.9
He	-2.7236398036	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.7
Li	-8.5258250359	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	54.6
Be	-19.3528901879	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	53.2
B	-36.7291386431	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	47.3
C	-62.1695474497	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.8
N	-97.1827259705	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	54.1
O	-143.2726019626	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	59.4
F	-201.9394871921	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	35.1
Ne	-274.6807997464	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	55.9
Na	-362.9915793120	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	54.4
Mg	-468.3648693351	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	53.8
Al	-592.2920092358	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	53.8
Si	-736.2628635882	19.0	19.0	19.0	nan	52.0	62.2
P	-901.7660055120	21.0	21.0	21.0	nan	52.0	57.1
S	-1090.2888660436	22.0	22.0	22.0	nan	52.0	48.8
Cl	-1303.3178576305	33.0	33.0	33.0	nan	52.0	63.5
Ar	-1542.3384774996	26.0	26.0	26.0	nan	52.0	83.1

Table 1835: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065340904	180.0	180.0	180.0	1.0	52.0	40.5
He	-2.7236398036	200.0	200.0	200.0	1.0	52.0	41.7
Li	-8.5258250359	224.0	224.0	224.0	1.0	52.0	46.5
Be	-19.3528901879	208.0	208.0	208.0	1.0	52.0	39.4
B	-36.7291386431	202.0	202.0	202.0	1.0	52.0	42.9
C	-62.1695474497	207.0	207.0	207.0	1.0	52.0	41.2
N	-97.1827259705	271.0	271.0	271.0	1.0	52.0	44.8
O	-143.2726019626	263.0	263.0	263.0	1.0	52.0	46.6
F	-201.9394871921	282.0	282.0	282.0	1.0	52.0	44.4
Ne	-274.6807997464	320.0	320.0	320.0	1.0	52.0	45.4
Na	-362.9915793120	330.0	330.0	330.0	1.0	52.0	40.3
Mg	-468.3648693352	367.0	367.0	367.0	1.0	52.0	42.4
Al	-592.2920092358	401.0	401.0	401.0	1.0	52.0	49.4
Si	-736.2628635882	446.0	446.0	446.0	1.0	52.0	45.2
P	-901.7660055120	498.0	498.0	498.0	2.0	52.0	48.0
S	-1090.2888660436	515.0	515.0	515.0	1.0	52.0	40.8
Cl	-1303.3178576324	674.0	674.0	674.0	1.0	52.0	49.4
Ar	-1542.3384774996	603.0	603.0	603.0	1.0	52.0	48.8

Table 1836: trust region repeats

65.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065340904	19206.0	19206.0	19206.0	18.8	52.0	3173.8
cch second order	-0.4065340378	220.0	112.0	112.0	nan	52.0	39.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-0.4065285756	52731.0	0.0	0.0	nan	52.0	1302.9
direct with trim	-0.4065340904	52738.4	5.4	5.4	nan	52.0	1173.7
dual anneal	-0.4065340904	100013.0	12.0	12.0	1.0	52.0	2145.0
trust region	-0.4065340904	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	53.9
trust region repeats	-0.4065340904	180.0	180.0	180.0	1.0	52.0	40.5

Table 1837: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236839075	17472.6	17472.6	17472.6	16.0	52.0	2647.0
cch second order	-2.7236400010	241.0	111.0	111.0	nan	52.0	63.2
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-2.7231535671	52175.0	0.0	0.0	nan	52.0	1277.2
direct with trim	-2.7236381648	52183.0	6.0	6.0	nan	52.0	1105.0
dual anneal	-2.7236398036	100010.8	9.8	9.8	1.0	52.0	2096.8
trust region	-2.7236398036	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	32.7
trust region repeats	-2.7236398036	200.0	200.0	200.0	1.0	52.0	41.7

Table 1838: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5258521761	16077.0	16077.0	16077.0	13.0	52.0	2339.7
cch second order	-8.5258243682	310.0	155.0	155.0	nan	52.0	63.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-8.5254619567	52179.0	0.0	0.0	nan	52.0	1215.7
direct with trim	-8.5258250359	52186.6	5.6	5.6	nan	52.0	1104.3
dual anneal	-8.5258250359	100013.4	12.4	12.4	1.0	52.0	1942.2
trust region	-8.5258250359	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	54.6
trust region repeats	-8.5258250359	224.0	224.0	224.0	1.0	52.0	46.5

Table 1839: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3532082729	14467.2	14467.2	14467.2	9.0	52.0	2267.9
cch second order	-19.3528912728	314.0	154.0	154.0	nan	52.0	58.1
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-19.3524663589	52137.0	0.0	0.0	nan	52.0	1139.8
direct with trim	-19.3528901879	52144.0	5.0	5.0	nan	52.0	1093.3
dual anneal	-19.3528901877	100011.0	10.0	10.0	1.0	52.0	1721.7
trust region	-19.3528901879	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	53.2
trust region repeats	-19.3528901879	208.0	208.0	208.0	1.0	52.0	39.4

Table 1840: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7306501527	13880.6	13880.6	13880.6	9.4	52.0	2035.1
cch second order	-36.7291388019	395.0	196.0	196.0	nan	52.0	64.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-36.7251209758	52209.0	0.0	0.0	nan	52.0	1115.5
direct with trim	-36.7291278800	52217.0	6.0	6.0	nan	52.0	1105.9
dual anneal	-36.7291386424	100012.8	11.8	11.8	1.0	52.0	1791.2
trust region	-36.7291386431	9.0	9.0	9.0	nan	52.0	47.3
trust region repeats	-36.7291386431	202.0	202.0	202.0	1.0	52.0	42.9

Table 1841: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1695548749	11739.0	11739.0	11739.0	7.0	52.0	2329.6
cch second order	-62.1695454492	382.0	212.0	212.0	nan	52.0	70.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-62.1576631309	52333.0	0.0	0.0	nan	52.0	1299.2
direct with trim	-62.1695357314	52341.0	6.0	6.0	nan	52.0	999.1
dual anneal	-62.1695474478	100014.2	13.2	13.2	1.0	52.0	2200.9
trust region	-62.1695474497	10.0	10.0	10.0	nan	52.0	52.8
trust region repeats	-62.1695474497	207.0	207.0	207.0	1.0	52.0	41.2

Table 1842: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1827259705	11349.0	11349.0	11349.0	6.4	52.0	2225.1
cch second order	-97.1827274500	457.0	247.0	247.0	nan	52.0	74.8
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-97.1692703727	52169.0	0.0	0.0	nan	52.0	1235.4
direct with trim	-97.1827259705	52177.0	6.0	6.0	nan	52.0	1160.8
dual anneal	-97.1827259660	100016.0	15.0	15.0	1.0	52.0	1868.3
trust region	-97.1827259705	11.0	11.0	11.0	nan	52.0	54.1
trust region repeats	-97.1827259705	271.0	271.0	271.0	1.0	52.0	44.8

Table 1843: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2726618742	11435.4	11435.4	11435.4	6.4	52.0	2229.0
cch second order	-143.2726022713	526.0	290.0	290.0	nan	52.0	77.4
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-143.2405572535	52049.0	0.0	0.0	nan	52.0	1086.8
direct with trim	-143.2726019626	52057.0	6.0	6.0	nan	52.0	942.2
dual anneal	-143.2726019531	100016.6	15.6	15.6	1.0	52.0	2271.1
trust region	-143.2726019626	12.0	12.0	12.0	nan	52.0	59.4
trust region repeats	-143.2726019626	263.0	263.0	263.0	1.0	52.0	46.6

Table 1844: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9396345937	9940.2	9940.2	9940.2	5.2	52.0	2111.6
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-201.9078528115	52547.0	0.0	0.0	nan	52.0	1228.9
direct with trim	-201.9394871921	52555.0	6.0	6.0	nan	52.0	1073.6
dual anneal	-201.9394871736	100018.4	17.4	17.4	1.0	52.0	1973.8
trust region	-201.9394871921	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	35.1
trust region repeats	-201.9394871921	282.0	282.0	282.0	1.0	52.0	44.4

Table 1845: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6808755910	9843.0	9843.0	9843.0	4.4	52.0	2056.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-274.6152681322	52007.0	0.0	0.0	nan	52.0	1332.8
direct with trim	-274.6807997464	52015.0	6.0	6.0	nan	52.0	1125.3
dual anneal	-274.6807997129	100021.2	20.2	20.2	1.0	52.0	2032.3
trust region	-274.6807997464	14.0	14.0	14.0	nan	52.0	55.9
trust region repeats	-274.6807997464	320.0	320.0	320.0	1.0	52.0	45.4

Table 1846: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9915793124	8643.8	8643.8	8643.8	3.4	52.0	1882.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-362.9301409365	52203.0	0.0	0.0	nan	52.0	1326.6
direct with trim	-362.9915793120	52211.0	6.0	6.0	nan	52.0	1107.5
dual anneal	-362.9915792544	100019.2	18.2	18.2	1.0	52.0	1985.5
trust region	-362.9915793120	15.0	15.0	15.0	nan	52.0	54.4
trust region repeats	-362.9915793120	330.0	330.0	330.0	1.0	52.0	40.3

Table 1847: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3648693352	8907.0	8907.0	8907.0	5.0	52.0	1948.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-468.3179183251	52331.0	0.0	0.0	nan	52.0	1231.5
direct with trim	-468.3648693351	52339.0	6.0	6.0	nan	52.0	942.1
dual anneal	-468.3648692406	100020.6	19.6	19.6	1.0	52.0	2189.6
trust region	-468.3648693351	16.0	16.0	16.0	nan	52.0	53.8
trust region repeats	-468.3648693352	367.0	367.0	367.0	1.0	52.0	42.4

Table 1848: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2920092359	7993.4	7993.4	7993.4	3.6	52.0	1709.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-592.1817107606	52271.0	0.0	0.0	nan	52.0	1309.8
direct with trim	-592.2918563708	52285.2	12.2	12.2	nan	52.0	1125.0
dual anneal	-592.2920090864	100022.6	21.6	21.6	1.0	52.0	1972.1
trust region	-592.2920092358	17.0	17.0	17.0	nan	52.0	53.8
trust region repeats	-592.2920092358	401.0	401.0	401.0	1.0	52.0	49.4

Table 1849: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2628635882	7778.4	7778.4	7778.4	4.2	52.0	1696.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-736.1418386071	52537.0	0.0	0.0	nan	52.0	1063.6
direct with trim	-736.2628635882	52545.0	6.0	6.0	nan	52.0	1125.0
dual anneal	-736.2628633599	100024.2	23.2	23.2	1.0	52.0	2411.3
trust region	-736.2628635882	19.0	19.0	19.0	nan	52.0	62.2
trust region repeats	-736.2628635882	446.0	446.0	446.0	1.0	52.0	45.2

Table 1850: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7660055120	6830.0	6830.0	6830.0	3.2	52.0	1579.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-901.6260939475	52349.0	0.0	0.0	nan	52.0	1082.4
direct with trim	-901.7660055120	52357.4	6.4	6.4	nan	52.0	1074.6
dual anneal	-901.7660051730	100027.2	26.2	26.2	1.0	52.0	1719.9
trust region	-901.7660055120	21.0	21.0	21.0	nan	52.0	57.1
trust region repeats	-901.7660055120	498.0	498.0	498.0	2.0	52.0	48.0

Table 1851: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2888660436	6921.2	6921.2	6921.2	2.6	52.0	1580.7
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1090.0781544535	52059.0	0.0	0.0	nan	52.0	1201.3
direct with trim	-1090.2888660436	52067.0	6.0	6.0	nan	52.0	1062.9
dual anneal	-1090.2888655524	100027.8	26.8	26.8	1.0	52.0	2139.7
trust region	-1090.2888660436	22.0	22.0	22.0	nan	52.0	48.8
trust region repeats	-1090.2888660436	515.0	515.0	515.0	1.0	52.0	40.8

Table 1852: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3178576306	7045.6	7045.6	7045.6	2.8	52.0	1766.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1303.1055976811	52057.0	0.0	0.0	nan	52.0	1033.4
direct with trim	-1303.3178576305	52065.0	6.0	6.0	nan	52.0	1067.0
dual anneal	-1303.3178569344	100028.8	27.8	27.8	1.0	52.0	2203.8
trust region	-1303.3178576305	33.0	33.0	33.0	nan	52.0	63.5
trust region repeats	-1303.3178576324	674.0	674.0	674.0	1.0	52.0	49.4

Table 1853: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3384774996	6357.6	6357.6	6357.6	1.8	52.0	1733.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
direct	-1542.0750294968	52615.0	0.0	0.0	nan	52.0	1226.7
direct with trim	-1542.3381388620	52626.0	9.0	9.0	nan	52.0	1151.4
dual anneal	-1542.3384765320	100036.4	35.4	35.4	1.0	52.0	1893.0
trust region	-1542.3384774996	26.0	26.0	26.0	nan	52.0	83.1
trust region repeats	-1542.3384774996	603.0	603.0	603.0	1.0	52.0	48.8

Table 1854: Ar

65.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.4065340904
He	basin hopping	-2.7236839075
Li	basin hopping	-8.5258521761
Be	basin hopping	-19.3532082729
B	basin hopping	-36.7306501527
C	basin hopping	-62.1695548749
N	cch second order	-97.1827274500
O	basin hopping	-143.2726618742
F	basin hopping	-201.9396345937
Ne	basin hopping	-274.6808755910
Na	basin hopping	-362.9915793124
Mg	basin hopping	-468.3648693352
Al	basin hopping	-592.2920092359
Si	basin hopping	-736.2628635882
P	basin hopping	-901.7660055120
S	basin hopping	-1090.2888660436
Cl	trust region repeats	-1303.3178576324
Ar	basin hopping	-1542.3384774996

Table 1855: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
cch second order	355.6	184.6	184.6	nan	-46.2953629565	63.9
basin hopping	10882.6	10882.6	10882.6	6.8	-435.8115505367	2072.9
diff evo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	15.6	15.6	15.6	nan	-435.8114287911	54.2
trust region repeats	343.9	343.9	343.9	1.1	-435.8114287912	44.3
direct	52275.4	0.0	0.0	nan	-435.7377681857	1206.1
direct with trim	52283.9	6.4	6.4	nan	-435.8114001454	1085.5
dual anneal	100019.7	18.7	18.7	1.0	-435.8114286193	2031.0

Table 1856: Average (all systems)

66   ets 1.0xLDA X+1.00xCONJB86A

66.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1857: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6998526657	4171.4	4171.4	4171.4	20.8	19.0	688.3
He	-3.2276839865	5583.8	5583.8	5583.8	19.6	19.0	602.5
Li	-8.2982867775	6902.0	6902.0	6902.0	12.6	19.0	634.3
Be	-16.5444448266	6545.8	6545.8	6545.8	6.2	19.0	752.8
B	-26.6416637869	4626.4	4626.4	4626.4	3.2	19.0	631.9
C	-41.0175014535	4575.0	4575.0	4575.0	1.2	19.0	798.2
N	-61.7856940820	3846.0	3846.0	3846.0	1.2	19.0	611.5
O	-80.5162688282	3005.4	3005.4	3005.4	1.6	19.0	560.8
F	-107.4412069184	2795.0	2795.0	2795.0	1.0	19.0	555.1
Ne	-127.4089404606	2391.4	2391.4	2391.4	1.0	19.0	404.9
Na	-175.8862721405	2378.6	2378.6	2378.6	1.0	19.0	493.1
Mg	-212.2374575374	1956.2	1956.2	1956.2	1.0	19.0	405.6
Al	-252.1047591625	1880.4	1880.4	1880.4	1.0	19.0	386.2
Si	-304.1141600176	2072.4	2072.4	2072.4	1.0	19.0	433.0
P	-368.8987936475	1857.8	1857.8	1857.8	1.0	19.0	374.3
S	-429.3386534142	1757.4	1757.4	1757.4	1.0	19.0	376.4
Cl	-495.1423117336	1707.6	1707.6	1707.6	1.0	19.0	375.0
Ar	-566.4433338199	1810.0	1810.0	1810.0	1.0	19.0	397.7

Table 1858: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6283294355	329.0	163.0	163.0	nan	19.0	3.0
He	-2.9372462355	241.0	122.0	122.0	nan	19.0	2.6
Li	-8.6336656141	341.0	170.0	170.0	nan	19.0	9.2
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	-42.8966446358	429.0	208.0	208.0	nan	19.0	11.2
N	-59.7129969770	364.0	178.0	178.0	nan	19.0	3.1
O	-81.4048732649	325.0	169.0	169.0	nan	19.0	9.5
F	-107.2191215693	370.0	181.0	181.0	nan	19.0	3.3
Ne	-136.6842299176	464.0	215.0	215.0	nan	19.0	11.0
Na	-157.5384231351	412.0	201.0	201.0	nan	19.0	10.0
Mg	-216.4449427168	325.0	162.0	162.0	nan	19.0	3.0
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-366.7993651531	696.0	354.0	354.0	nan	19.0	15.5
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	-493.3606408353	255.0	131.0	131.0	nan	19.0	2.6
Ar	-566.4433338106	453.0	217.0	217.0	nan	19.0	11.0

Table 1859: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7332048632	264950.4	0.0	0.0	nan	19.0	1950.5
He	-3.4306916776	373900.8	0.0	0.0	nan	19.0	2753.3
Li	-8.6605849066	369220.8	0.0	0.0	nan	19.0	2771.9
Be	-16.8091375609	206255.4	0.0	0.0	nan	19.0	1600.8
B	-28.1939197344	204763.0	0.0	0.0	nan	19.0	1354.6
C	-43.0986349443	183046.5	0.0	0.0	nan	19.0	795.2
N	-61.7836781736	113232.6	0.0	0.0	nan	19.0	898.6
O	-84.4399474643	68493.8	0.0	0.0	nan	19.0	563.7
F	-111.0130492034	61534.2	0.0	0.0	nan	19.0	371.9
Ne	-142.4198469090	63757.2	0.0	0.0	nan	19.0	503.0
Na	-177.1129989459	68320.2	0.0	0.0	nan	19.0	539.7
Mg	-218.4258017930	96228.6	0.0	0.0	nan	19.0	735.8
Al	-263.5780366256	72196.8	0.0	0.0	nan	19.0	568.1
Si	-313.6900373470	83569.2	0.0	0.0	nan	19.0	684.2
P	-368.8968391184	68047.2	0.0	0.0	nan	19.0	544.8
S	-429.3376283414	84029.4	0.0	0.0	nan	19.0	664.2
Cl	-495.1413228066	121570.8	0.0	0.0	nan	19.0	867.7
Ar	-566.4422388896	106267.2	0.0	0.0	nan	19.0	850.8

Table 1860: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7076440755	19031.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.7
He	-3.2241245302	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.9
Li	-8.0639663582	16969.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.8
Be	-15.5415227876	18601.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.6
B	-27.6782320856	17393.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
C	-41.2059813335	17789.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.4
N	-58.3853950170	15615.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.2
O	-80.7464021211	17147.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.9
F	-108.9930021859	18171.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.7
Ne	-136.8212177519	18061.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.5
Na	-161.6439056194	18065.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.1
Mg	-213.8973646403	19035.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.5
Al	-256.4315588224	18065.0	0.0	0.0	nan	19.0	117.3
Si	-304.3907798779	17221.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.5
P	-363.5632827296	17667.0	0.0	0.0	nan	19.0	117.9
S	-422.0854814166	18499.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
Cl	-488.5040403243	16385.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.4
Ar	-523.6813869461	16349.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.3

Table 1861: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6910477882	19048.0	15.0	15.0	nan	19.0	90.8
He	-3.3122292582	19226.0	69.0	69.0	nan	19.0	143.2
Li	-8.3243623544	16985.0	14.0	14.0	nan	19.0	112.9
Be	-16.3378126477	18670.0	67.0	67.0	nan	19.0	126.3
B	-27.3858747578	17419.0	24.0	24.0	nan	19.0	98.6
C	-42.3941576587	17826.0	35.0	35.0	nan	19.0	103.6
N	-61.7856940820	15673.0	56.0	56.0	nan	19.0	96.0
O	-82.4491492275	17192.0	43.0	43.0	nan	19.0	118.9
F	-109.9690470449	18188.0	15.0	15.0	nan	19.0	93.9
Ne	-136.0798036210	18096.2	33.2	33.2	nan	19.0	101.7
Na	-159.8044761464	18101.0	34.0	34.0	nan	19.0	113.0
Mg	-216.6841989100	19048.0	11.0	11.0	nan	19.0	107.2
Al	-250.0360279828	18083.0	16.0	16.0	nan	19.0	112.2
Si	-305.6881439982	17237.0	14.0	14.0	nan	19.0	97.0
P	-359.1780573355	17689.0	20.0	20.0	nan	19.0	85.3
S	-427.7906809116	18525.0	24.0	24.0	nan	19.0	103.5
Cl	-495.1423117336	16405.0	18.0	18.0	nan	19.0	95.3
Ar	-509.8426483696	16387.8	36.8	36.8	nan	19.0	98.3

Table 1862: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7212698332	42044.0	4042.0	4042.0	36.0	19.0	933.2
He	-3.3755015420	38626.8	624.8	624.8	4.5	19.0	458.3
Li	-8.5779822994	38376.2	374.2	374.2	7.0	19.0	289.8
Be	-16.7770443954	38654.2	652.2	652.2	26.4	19.0	380.7
B	-28.0550989425	38139.2	137.2	137.2	3.0	19.0	282.3
C	-43.1000755075	38379.4	377.4	377.4	9.6	19.0	296.8
N	-61.6859768636	38151.2	149.2	149.2	3.4	19.0	219.9
O	-84.4416036395	38374.8	372.8	372.8	11.6	19.0	306.1
F	-111.2607238579	38281.6	279.6	279.6	12.2	19.0	269.3
Ne	-142.1008262172	38162.4	160.4	160.4	4.0	19.0	277.4
Na	-178.0913684215	38393.6	391.6	391.6	17.4	19.0	300.5
Mg	-218.0184184266	38106.0	104.0	104.0	5.0	19.0	235.1
Al	-263.5793249092	38104.6	102.6	102.6	4.0	19.0	244.3
Si	-309.4238341534	38104.2	102.2	102.2	3.8	19.0	263.7
P	-367.5466425322	38512.2	510.2	510.2	36.0	19.0	248.7
S	-426.8127623044	38649.6	647.6	647.6	43.8	19.0	265.8
Cl	-495.1423117022	38623.8	621.8	621.8	37.4	19.0	261.9
Ar	-566.4433337854	38188.4	186.4	186.4	8.6	19.0	215.9

Table 1863: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6704454878	90.0	90.0	90.0	nan	19.0	42.9
He	-3.0330803160	91.0	91.0	91.0	nan	19.0	30.8
Li	-7.7141046363	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	5.9
Be	-16.4235208182	46.0	46.0	46.0	nan	19.0	14.7
B	-25.4095416373	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	7.9
C	-41.3815143490	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	8.5
N	-60.4095941038	26.0	26.0	26.0	nan	19.0	8.1
O	-81.6742710353	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	3.4
F	-103.4333886203	67.0	67.0	67.0	nan	19.0	6.9
Ne	-142.4216489044	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	7.3
Na	-165.2951057745	35.0	35.0	35.0	nan	19.0	4.6
Mg	-213.3304720040	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	2.6
Al	-250.2799446735	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	5.0
Si	-299.3933360408	40.0	40.0	40.0	nan	19.0	13.5
P	-363.7206200959	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.7
S	-423.1156273371	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	4.8
Cl	-495.1423117336	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.7
Ar	-532.5670092639	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	4.6

Table 1864: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7120540510	1741.0	1741.0	1741.0	20.0	19.0	20.5
He	-3.4279758072	1149.0	1149.0	1149.0	18.0	19.0	15.0
Li	-8.5814808143	752.0	752.0	752.0	20.0	19.0	7.0
Be	-16.7816684969	803.0	803.0	803.0	18.0	19.0	8.7
B	-28.1730393792	557.0	557.0	557.0	11.0	19.0	6.4
C	-43.1000755140	494.0	494.0	494.0	11.0	19.0	5.2
N	-61.6859768711	397.0	397.0	397.0	7.0	19.0	4.7
O	-84.4416036493	394.0	394.0	394.0	8.0	19.0	4.4
F	-111.0151824107	614.0	614.0	614.0	14.0	19.0	7.2
Ne	-142.1008262302	495.0	495.0	495.0	7.0	19.0	5.3
Na	-177.7102171188	365.0	365.0	365.0	6.0	19.0	4.1
Mg	-218.4273747351	407.0	407.0	407.0	8.0	19.0	4.7
Al	-263.5793249297	542.0	542.0	542.0	9.0	19.0	4.5
Si	-313.6904412470	553.0	553.0	553.0	12.0	19.0	5.5
P	-368.8987936475	440.0	440.0	440.0	10.0	19.0	4.8
S	-429.3386534142	523.0	523.0	523.0	11.0	19.0	5.5
Cl	-495.1423117336	406.0	406.0	406.0	10.0	19.0	4.5
Ar	-566.4433338199	576.0	576.0	576.0	6.0	19.0	5.0

Table 1865: trust region repeats

66.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6998526657	4171.4	4171.4	4171.4	20.8	19.0	688.3
cch second order	-0.6283294355	329.0	163.0	163.0	nan	19.0	3.0
diff evo	-0.7332048632	264950.4	0.0	0.0	nan	19.0	1950.5
direct	-0.7076440755	19031.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.7
direct with trim	-0.6910477882	19048.0	15.0	15.0	nan	19.0	90.8
dual anneal	-0.7212698332	42044.0	4042.0	4042.0	36.0	19.0	933.2
trust region	-0.6704454878	90.0	90.0	90.0	nan	19.0	42.9
trust region repeats	-0.7120540510	1741.0	1741.0	1741.0	20.0	19.0	20.5

Table 1866: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2276839865	5583.8	5583.8	5583.8	19.6	19.0	602.5
cch second order	-2.9372462355	241.0	122.0	122.0	nan	19.0	2.6
diff evo	-3.4306916776	373900.8	0.0	0.0	nan	19.0	2753.3
direct	-3.2241245302	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.9
direct with trim	-3.3122292582	19226.0	69.0	69.0	nan	19.0	143.2
dual anneal	-3.3755015420	38626.8	624.8	624.8	4.5	19.0	458.3
trust region	-3.0330803160	91.0	91.0	91.0	nan	19.0	30.8
trust region repeats	-3.4279758072	1149.0	1149.0	1149.0	18.0	19.0	15.0

Table 1867: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2982867775	6902.0	6902.0	6902.0	12.6	19.0	634.3
cch second order	-8.6336656141	341.0	170.0	170.0	nan	19.0	9.2
diff evo	-8.6605849066	369220.8	0.0	0.0	nan	19.0	2771.9
direct	-8.0639663582	16969.0	0.0	0.0	nan	19.0	103.8
direct with trim	-8.3243623544	16985.0	14.0	14.0	nan	19.0	112.9
dual anneal	-8.5779822994	38376.2	374.2	374.2	7.0	19.0	289.8
trust region	-7.7141046363	62.0	62.0	62.0	nan	19.0	5.9
trust region repeats	-8.5814808143	752.0	752.0	752.0	20.0	19.0	7.0

Table 1868: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.5444448266	6545.8	6545.8	6545.8	6.2	19.0	752.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-16.8091375609	206255.4	0.0	0.0	nan	19.0	1600.8
direct	-15.5415227876	18601.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.6
direct with trim	-16.3378126477	18670.0	67.0	67.0	nan	19.0	126.3
dual anneal	-16.7770443954	38654.2	652.2	652.2	26.4	19.0	380.7
trust region	-16.4235208182	46.0	46.0	46.0	nan	19.0	14.7
trust region repeats	-16.7816684969	803.0	803.0	803.0	18.0	19.0	8.7

Table 1869: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6416637869	4626.4	4626.4	4626.4	3.2	19.0	631.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-28.1939197344	204763.0	0.0	0.0	nan	19.0	1354.6
direct	-27.6782320856	17393.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
direct with trim	-27.3858747578	17419.0	24.0	24.0	nan	19.0	98.6
dual anneal	-28.0550989425	38139.2	137.2	137.2	3.0	19.0	282.3
trust region	-25.4095416373	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	7.9
trust region repeats	-28.1730393792	557.0	557.0	557.0	11.0	19.0	6.4

Table 1870: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0175014535	4575.0	4575.0	4575.0	1.2	19.0	798.2
cch second order	-42.8966446358	429.0	208.0	208.0	nan	19.0	11.2
diff evo	-43.0986349443	183046.5	0.0	0.0	nan	19.0	795.2
direct	-41.2059813335	17789.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.4
direct with trim	-42.3941576587	17826.0	35.0	35.0	nan	19.0	103.6
dual anneal	-43.1000755075	38379.4	377.4	377.4	9.6	19.0	296.8
trust region	-41.3815143490	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	8.5
trust region repeats	-43.1000755140	494.0	494.0	494.0	11.0	19.0	5.2

Table 1871: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-61.7856940820	3846.0	3846.0	3846.0	1.2	19.0	611.5
cch second order	-59.7129969770	364.0	178.0	178.0	nan	19.0	3.1
diff evo	-61.7836781736	113232.6	0.0	0.0	nan	19.0	898.6
direct	-58.3853950170	15615.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.2
direct with trim	-61.7856940820	15673.0	56.0	56.0	nan	19.0	96.0
dual anneal	-61.6859768636	38151.2	149.2	149.2	3.4	19.0	219.9
trust region	-60.4095941038	26.0	26.0	26.0	nan	19.0	8.1
trust region repeats	-61.6859768711	397.0	397.0	397.0	7.0	19.0	4.7

Table 1872: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-80.5162688282	3005.4	3005.4	3005.4	1.6	19.0	560.8
cch second order	-81.4048732649	325.0	169.0	169.0	nan	19.0	9.5
diff evo	-84.4399474643	68493.8	0.0	0.0	nan	19.0	563.7
direct	-80.7464021211	17147.0	0.0	0.0	nan	19.0	119.9
direct with trim	-82.4491492275	17192.0	43.0	43.0	nan	19.0	118.9
dual anneal	-84.4416036395	38374.8	372.8	372.8	11.6	19.0	306.1
trust region	-81.6742710353	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	3.4
trust region repeats	-84.4416036493	394.0	394.0	394.0	8.0	19.0	4.4

Table 1873: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.4412069184	2795.0	2795.0	2795.0	1.0	19.0	555.1
cch second order	-107.2191215693	370.0	181.0	181.0	nan	19.0	3.3
diff evo	-111.0130492034	61534.2	0.0	0.0	nan	19.0	371.9
direct	-108.9930021859	18171.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.7
direct with trim	-109.9690470449	18188.0	15.0	15.0	nan	19.0	93.9
dual anneal	-111.2607238579	38281.6	279.6	279.6	12.2	19.0	269.3
trust region	-103.4333886203	67.0	67.0	67.0	nan	19.0	6.9
trust region repeats	-111.0151824107	614.0	614.0	614.0	14.0	19.0	7.2

Table 1874: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-127.4089404606	2391.4	2391.4	2391.4	1.0	19.0	404.9
cch second order	-136.6842299176	464.0	215.0	215.0	nan	19.0	11.0
diff evo	-142.4198469090	63757.2	0.0	0.0	nan	19.0	503.0
direct	-136.8212177519	18061.0	0.0	0.0	nan	19.0	108.5
direct with trim	-136.0798036210	18096.2	33.2	33.2	nan	19.0	101.7
dual anneal	-142.1008262172	38162.4	160.4	160.4	4.0	19.0	277.4
trust region	-142.4216489044	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	7.3
trust region repeats	-142.1008262302	495.0	495.0	495.0	7.0	19.0	5.3

Table 1875: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.8862721405	2378.6	2378.6	2378.6	1.0	19.0	493.1
cch second order	-157.5384231351	412.0	201.0	201.0	nan	19.0	10.0
diff evo	-177.1129989459	68320.2	0.0	0.0	nan	19.0	539.7
direct	-161.6439056194	18065.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.1
direct with trim	-159.8044761464	18101.0	34.0	34.0	nan	19.0	113.0
dual anneal	-178.0913684215	38393.6	391.6	391.6	17.4	19.0	300.5
trust region	-165.2951057745	35.0	35.0	35.0	nan	19.0	4.6
trust region repeats	-177.7102171188	365.0	365.0	365.0	6.0	19.0	4.1

Table 1876: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.2374575374	1956.2	1956.2	1956.2	1.0	19.0	405.6
cch second order	-216.4449427168	325.0	162.0	162.0	nan	19.0	3.0
diff evo	-218.4258017930	96228.6	0.0	0.0	nan	19.0	735.8
direct	-213.8973646403	19035.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.5
direct with trim	-216.6841989100	19048.0	11.0	11.0	nan	19.0	107.2
dual anneal	-218.0184184266	38106.0	104.0	104.0	5.0	19.0	235.1
trust region	-213.3304720040	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	2.6
trust region repeats	-218.4273747351	407.0	407.0	407.0	8.0	19.0	4.7

Table 1877: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-252.1047591625	1880.4	1880.4	1880.4	1.0	19.0	386.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-263.5780366256	72196.8	0.0	0.0	nan	19.0	568.1
direct	-256.4315588224	18065.0	0.0	0.0	nan	19.0	117.3
direct with trim	-250.0360279828	18083.0	16.0	16.0	nan	19.0	112.2
dual anneal	-263.5793249092	38104.6	102.6	102.6	4.0	19.0	244.3
trust region	-250.2799446735	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	5.0
trust region repeats	-263.5793249297	542.0	542.0	542.0	9.0	19.0	4.5

Table 1878: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-304.1141600176	2072.4	2072.4	2072.4	1.0	19.0	433.0
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-313.6900373470	83569.2	0.0	0.0	nan	19.0	684.2
direct	-304.3907798779	17221.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.5
direct with trim	-305.6881439982	17237.0	14.0	14.0	nan	19.0	97.0
dual anneal	-309.4238341534	38104.2	102.2	102.2	3.8	19.0	263.7
trust region	-299.3933360408	40.0	40.0	40.0	nan	19.0	13.5
trust region repeats	-313.6904412470	553.0	553.0	553.0	12.0	19.0	5.5

Table 1879: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-368.8987936475	1857.8	1857.8	1857.8	1.0	19.0	374.3
cch second order	-366.7993651531	696.0	354.0	354.0	nan	19.0	15.5
diff evo	-368.8968391184	68047.2	0.0	0.0	nan	19.0	544.8
direct	-363.5632827296	17667.0	0.0	0.0	nan	19.0	117.9
direct with trim	-359.1780573355	17689.0	20.0	20.0	nan	19.0	85.3
dual anneal	-367.5466425322	38512.2	510.2	510.2	36.0	19.0	248.7
trust region	-363.7206200959	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.7
trust region repeats	-368.8987936475	440.0	440.0	440.0	10.0	19.0	4.8

Table 1880: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-429.3386534142	1757.4	1757.4	1757.4	1.0	19.0	376.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-429.3376283414	84029.4	0.0	0.0	nan	19.0	664.2
direct	-422.0854814166	18499.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
direct with trim	-427.7906809116	18525.0	24.0	24.0	nan	19.0	103.5
dual anneal	-426.8127623044	38649.6	647.6	647.6	43.8	19.0	265.8
trust region	-423.1156273371	18.0	18.0	18.0	nan	19.0	4.8
trust region repeats	-429.3386534142	523.0	523.0	523.0	11.0	19.0	5.5

Table 1881: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-495.1423117336	1707.6	1707.6	1707.6	1.0	19.0	375.0
cch second order	-493.3606408353	255.0	131.0	131.0	nan	19.0	2.6
diff evo	-495.1413228066	121570.8	0.0	0.0	nan	19.0	867.7
direct	-488.5040403243	16385.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.4
direct with trim	-495.1423117336	16405.0	18.0	18.0	nan	19.0	95.3
dual anneal	-495.1423117022	38623.8	621.8	621.8	37.4	19.0	261.9
trust region	-495.1423117336	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.7
trust region repeats	-495.1423117336	406.0	406.0	406.0	10.0	19.0	4.5

Table 1882: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-566.4433338199	1810.0	1810.0	1810.0	1.0	19.0	397.7
cch second order	-566.4433338106	453.0	217.0	217.0	nan	19.0	11.0
diff evo	-566.4422388896	106267.2	0.0	0.0	nan	19.0	850.8
direct	-523.6813869461	16349.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.3
direct with trim	-509.8426483696	16387.8	36.8	36.8	nan	19.0	98.3
dual anneal	-566.4433337854	38188.4	186.4	186.4	8.6	19.0	215.9
trust region	-532.5670092639	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	4.6
trust region repeats	-566.4433338199	576.0	576.0	576.0	6.0	19.0	5.0

Table 1883: Ar

66.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	diff evo	-0.7332048632
He	diff evo	-3.4306916776
Li	diff evo	-8.6605849066
Be	diff evo	-16.8091375609
B	diff evo	-28.1939197344
C	trust region repeats	-43.1000755140
N	direct with trim	-61.7856940820
O	trust region repeats	-84.4416036493
F	dual anneal	-111.2607238579
Ne	trust region	-142.4216489044
Na	dual anneal	-178.0913684215
Mg	trust region repeats	-218.4273747351
Al	trust region repeats	-263.5793249297
Si	trust region repeats	-313.6904412470
P	trust region repeats	-368.8987936475
S	basin hopping	-429.3386534142
Cl	trust region	-495.1423117336
Ar	trust region repeats	-566.4433338199

Table 1884: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	37.1	37.1	37.1	nan	-179.1897520462	10.1
cch second order	384.9	190.1	190.1	nan	-172.3618317924	7.3
trust region repeats	622.7	622.7	622.7	11.4	-185.1805741039	6.8
basin hopping	3325.7	3325.7	3325.7	4.2	-182.0970714033	526.8
direct	17734.3	0.0	0.0	nan	-178.6425160346	120.4
direct with trim	17766.6	30.3	30.3	nan	-178.4942068793	105.4
dual anneal	38548.5	546.5	546.5	15.2	-184.7307832963	319.4
diff evo	144965.8	0.0	0.0	nan	-185.1781999614	1056.6

Table 1885: Average (all systems)

67   ets 1.0xLDA X+1.00xCONJPW91

67.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1886: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-1.0093295143	3330.2	3330.2	3330.2	20.4	19.0	475.6
He	-4.0964115135	2847.0	2847.0	2847.0	19.0	19.0	402.1
Li	-9.5928998202	2878.4	2878.4	2878.4	16.0	19.0	400.7
Be	-18.3202088906	2662.2	2662.2	2662.2	8.8	19.0	311.4
B	-30.7242646240	3028.8	3028.8	3028.8	1.2	19.0	381.5
C	-45.4390030229	4395.0	4395.0	4395.0	2.6	19.0	576.1
N	-63.7977123029	3263.2	3263.2	3263.2	1.2	19.0	445.0
O	-87.9985561493	3091.2	3091.2	3091.2	1.0	19.0	493.2
F	-112.7906203160	2240.2	2240.2	2240.2	1.2	19.0	377.6
Ne	-147.0813942527	1946.6	1946.6	1946.6	1.0	19.0	314.4
Na	-183.3802573319	1862.0	1862.0	1862.0	1.0	19.0	358.1
Mg	-219.2241121251	1422.8	1422.8	1422.8	1.0	19.0	292.8
Al	-262.8314853830	1410.2	1410.2	1410.2	1.0	19.0	304.7
Si	-317.6227516523	1438.6	1438.6	1438.6	1.0	19.0	275.1
P	-375.7938941145	1414.2	1414.2	1414.2	1.0	19.0	221.3
S	-420.8386281313	1410.6	1410.6	1410.6	1.0	19.0	217.4
Cl	-485.5368857467	1388.8	1388.8	1388.8	1.0	19.0	257.9
Ar	-567.1418304074	1250.6	1250.6	1250.6	1.0	19.0	255.9

Table 1887: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7554639109	298.0	153.0	153.0	nan	19.0	10.5
He	-3.5088292039	289.0	145.0	145.0	nan	19.0	9.3
Li	-9.2638824203	234.0	121.0	121.0	nan	19.0	8.3
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	-62.0960417907	351.0	177.0	177.0	nan	19.0	9.7
O	-85.2154172955	356.0	174.0	174.0	nan	19.0	10.4
F	-91.1820339845	346.0	169.0	169.0	nan	19.0	9.7
Ne	-140.0158983833	252.0	133.0	133.0	nan	19.0	8.9
Na	-176.3501153017	398.0	195.0	195.0	nan	19.0	11.1
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	-271.3337626386	341.0	166.0	166.0	nan	19.0	9.7
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	-373.0609462445	731.0	382.0	382.0	nan	19.0	16.5
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	-555.3293295595	377.0	183.0	183.0	nan	19.0	10.3

Table 1888: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9238299738	311051.0	0.0	0.0	nan	19.0	2240.2
He	-3.9396827464	533988.0	0.0	0.0	nan	19.0	3473.2
Li	-9.8542354819	217483.5	0.0	0.0	nan	19.0	1717.2
Be	-18.1918774319	74100.0	0.0	0.0	nan	19.0	633.6
B	-30.7224868154	125665.8	0.0	0.0	nan	19.0	939.2
C	-46.3302050329	100698.0	0.0	0.0	nan	19.0	755.1
N	-65.6550919144	180160.5	0.0	0.0	nan	19.0	1471.3
O	-88.7938704043	125229.0	0.0	0.0	nan	19.0	1057.0
F	-116.3721444380	93724.8	0.0	0.0	nan	19.0	745.5
Ne	-147.8277222784	116742.6	0.0	0.0	nan	19.0	1043.9
Na	-184.7212205558	132841.8	0.0	0.0	nan	19.0	1090.5
Mg	-225.4088727684	74731.8	0.0	0.0	nan	19.0	682.7
Al	-271.7172571160	123575.4	0.0	0.0	nan	19.0	988.5
Si	-322.5572493119	98693.4	0.0	0.0	nan	19.0	732.2
P	-378.0922493684	92079.0	0.0	0.0	nan	19.0	722.4
S	-439.5370405289	134986.8	0.0	0.0	nan	19.0	1114.3
Cl	-505.9060803060	142981.8	0.0	0.0	nan	19.0	1080.7
Ar	-577.6726349418	115798.8	0.0	0.0	nan	19.0	920.9

Table 1889: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7960529837	18089.0	0.0	0.0	nan	19.0	127.1
He	-3.4250370393	17641.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.8
Li	-8.7146997929	16885.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.7
Be	-16.5935842937	17571.0	0.0	0.0	nan	19.0	136.3
B	-27.5720236385	16043.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.9
C	-42.6430239039	17639.0	0.0	0.0	nan	19.0	146.1
N	-60.0786231542	16085.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.3
O	-82.6679480518	16671.0	0.0	0.0	nan	19.0	123.2
F	-107.4864362620	18791.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.1
Ne	-141.8412374614	16769.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
Na	-166.1486418490	17587.0	0.0	0.0	nan	19.0	135.1
Mg	-202.8432015153	16621.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.0
Al	-261.4534094106	17811.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.6
Si	-306.8341752822	19047.0	0.0	0.0	nan	19.0	143.9
P	-359.8235469839	17057.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.6
S	-431.6392485926	18221.0	0.0	0.0	nan	19.0	134.1
Cl	-487.6882192278	17181.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
Ar	-492.5986753772	16395.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.5

Table 1890: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9567800478	18148.6	57.6	57.6	nan	19.0	137.1
He	-3.6860487891	17661.0	18.0	18.0	nan	19.0	140.5
Li	-9.4852908401	16942.2	55.2	55.2	nan	19.0	111.5
Be	-17.9609699315	17591.0	18.0	18.0	nan	19.0	153.9
B	-29.3400843521	16108.4	63.4	63.4	nan	19.0	130.2
C	-46.3313093339	17678.6	37.6	37.6	nan	19.0	162.5
N	-61.5809234230	16112.0	25.0	25.0	nan	19.0	119.9
O	-88.0564372712	16716.4	43.4	43.4	nan	19.0	145.6
F	-116.1415736181	18831.8	38.8	38.8	nan	19.0	139.0
Ne	-148.2933431874	16783.0	12.0	12.0	nan	19.0	119.9
Na	-170.9986079401	17615.4	26.4	26.4	nan	19.0	127.6
Mg	-212.4704890554	16651.0	28.0	28.0	nan	19.0	113.9
Al	-266.6778968041	17834.0	21.0	21.0	nan	19.0	141.0
Si	-309.1076484728	19079.0	30.0	30.0	nan	19.0	143.7
P	-364.0899306547	17078.4	19.4	19.4	nan	19.0	122.4
S	-439.5388499664	18271.8	48.8	48.8	nan	19.0	148.2
Cl	-501.9612034770	17204.0	21.0	21.0	nan	19.0	117.6
Ar	-538.1623017199	16428.2	31.2	31.2	nan	19.0	115.0

Table 1891: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9155311670	38050.2	48.2	48.2	1.0	19.0	301.2
He	-4.0310576486	38052.6	50.6	50.6	1.0	19.0	301.0
Li	-9.5786705504	38030.8	28.8	28.8	1.0	19.0	286.8
Be	-18.6377733470	38095.4	93.4	93.4	2.2	19.0	305.8
B	-30.0816224671	38026.0	24.0	24.0	1.0	19.0	291.7
C	-45.9854175634	38044.0	42.0	42.0	1.2	19.0	273.4
N	-64.9362697693	38081.4	79.4	79.4	2.6	19.0	356.6
O	-87.6196942281	38071.6	69.6	69.6	2.0	19.0	368.6
F	-116.1415735821	38059.2	57.2	57.2	1.8	19.0	344.6
Ne	-147.5986448496	38084.4	82.4	82.4	2.2	19.0	358.1
Na	-183.3802572858	38090.4	88.4	88.4	3.2	19.0	336.4
Mg	-223.6117092048	38082.8	80.8	80.8	2.0	19.0	300.5
Al	-267.6530625912	38042.2	40.2	40.2	1.2	19.0	335.7
Si	-322.5590815494	38038.4	36.4	36.4	1.2	19.0	279.6
P	-378.4590584153	39313.8	1311.8	1311.8	48.6	19.0	462.1
S	-439.5388498720	38126.6	124.6	124.6	5.4	19.0	308.6
Cl	-505.9073825062	38120.4	118.4	118.4	5.6	19.0	299.1
Ar	-577.6751464282	38070.4	68.4	68.4	2.4	19.0	285.4

Table 1892: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9324703422	35.0	35.0	35.0	nan	19.0	13.3
He	-3.9095970935	52.0	52.0	52.0	nan	19.0	18.2
Li	-9.2752482595	63.0	63.0	63.0	nan	19.0	20.3
Be	-18.6176042787	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	12.3
B	-28.2530799180	36.0	36.0	36.0	nan	19.0	5.2
C	-44.6228888328	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	10.5
N	-62.9474717973	43.0	43.0	43.0	nan	19.0	9.4
O	-85.7354284696	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	5.1
F	-112.7906203160	41.0	41.0	41.0	nan	19.0	12.3
Ne	-144.5163329092	42.0	42.0	42.0	nan	19.0	11.1
Na	-172.6360978254	30.0	30.0	30.0	nan	19.0	9.4
Mg	-219.2241121251	49.0	49.0	49.0	nan	19.0	16.5
Al	-268.4115705547	28.0	28.0	28.0	nan	19.0	9.6
Si	-317.7397393839	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	8.3
P	-375.7938941145	36.0	36.0	36.0	nan	19.0	5.1
S	-432.9029615942	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	6.9
Cl	-504.2691857457	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.1
Ar	-576.3107925965	29.0	29.0	29.0	nan	19.0	5.2

Table 1893: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.9487029892	1154.0	1154.0	1154.0	18.0	19.0	15.0
He	-3.9801196802	1008.0	1008.0	1008.0	19.0	19.0	12.4
Li	-9.8377841311	792.0	792.0	792.0	18.0	19.0	8.3
Be	-18.6176042787	779.0	779.0	779.0	19.0	19.0	8.1
B	-30.5862276775	736.0	736.0	736.0	16.0	19.0	8.7
C	-46.3313093339	672.0	672.0	672.0	16.0	19.0	7.7
N	-65.6574405995	602.0	602.0	602.0	17.0	19.0	7.8
O	-88.8756106450	658.0	658.0	658.0	17.0	19.0	6.0
F	-116.3729856194	504.0	504.0	504.0	16.0	19.0	5.7
Ne	-148.2933431874	646.0	646.0	646.0	15.0	19.0	4.9
Na	-184.7226993459	588.0	588.0	588.0	13.0	19.0	7.4
Mg	-225.8170671773	472.0	472.0	472.0	11.0	19.0	4.2
Al	-271.7189507809	494.0	494.0	494.0	7.0	19.0	5.1
Si	-322.5590816295	513.0	513.0	513.0	12.0	19.0	6.4
P	-378.4590585023	469.0	469.0	469.0	10.0	19.0	5.6
S	-439.5388499664	467.0	467.0	467.0	8.0	19.0	6.4
Cl	-505.9073826081	523.0	523.0	523.0	9.0	19.0	5.3
Ar	-577.6751465378	449.0	449.0	449.0	9.0	19.0	4.7

Table 1894: trust region repeats

67.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1.0093295143	3330.2	3330.2	3330.2	20.4	19.0	475.6
cch second order	-0.7554639109	298.0	153.0	153.0	nan	19.0	10.5
diff evo	-0.9238299738	311051.0	0.0	0.0	nan	19.0	2240.2
direct	-0.7960529837	18089.0	0.0	0.0	nan	19.0	127.1
direct with trim	-0.9567800478	18148.6	57.6	57.6	nan	19.0	137.1
dual anneal	-0.9155311670	38050.2	48.2	48.2	1.0	19.0	301.2
trust region	-0.9324703422	35.0	35.0	35.0	nan	19.0	13.3
trust region repeats	-0.9487029892	1154.0	1154.0	1154.0	18.0	19.0	15.0

Table 1895: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-4.0964115135	2847.0	2847.0	2847.0	19.0	19.0	402.1
cch second order	-3.5088292039	289.0	145.0	145.0	nan	19.0	9.3
diff evo	-3.9396827464	533988.0	0.0	0.0	nan	19.0	3473.2
direct	-3.4250370393	17641.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.8
direct with trim	-3.6860487891	17661.0	18.0	18.0	nan	19.0	140.5
dual anneal	-4.0310576486	38052.6	50.6	50.6	1.0	19.0	301.0
trust region	-3.9095970935	52.0	52.0	52.0	nan	19.0	18.2
trust region repeats	-3.9801196802	1008.0	1008.0	1008.0	19.0	19.0	12.4

Table 1896: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-9.5928998202	2878.4	2878.4	2878.4	16.0	19.0	400.7
cch second order	-9.2638824203	234.0	121.0	121.0	nan	19.0	8.3
diff evo	-9.8542354819	217483.5	0.0	0.0	nan	19.0	1717.2
direct	-8.7146997929	16885.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.7
direct with trim	-9.4852908401	16942.2	55.2	55.2	nan	19.0	111.5
dual anneal	-9.5786705504	38030.8	28.8	28.8	1.0	19.0	286.8
trust region	-9.2752482595	63.0	63.0	63.0	nan	19.0	20.3
trust region repeats	-9.8377841311	792.0	792.0	792.0	18.0	19.0	8.3

Table 1897: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-18.3202088906	2662.2	2662.2	2662.2	8.8	19.0	311.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-18.1918774319	74100.0	0.0	0.0	nan	19.0	633.6
direct	-16.5935842937	17571.0	0.0	0.0	nan	19.0	136.3
direct with trim	-17.9609699315	17591.0	18.0	18.0	nan	19.0	153.9
dual anneal	-18.6377733470	38095.4	93.4	93.4	2.2	19.0	305.8
trust region	-18.6176042787	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	12.3
trust region repeats	-18.6176042787	779.0	779.0	779.0	19.0	19.0	8.1

Table 1898: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-30.7242646240	3028.8	3028.8	3028.8	1.2	19.0	381.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-30.7224868154	125665.8	0.0	0.0	nan	19.0	939.2
direct	-27.5720236385	16043.0	0.0	0.0	nan	19.0	131.9
direct with trim	-29.3400843521	16108.4	63.4	63.4	nan	19.0	130.2
dual anneal	-30.0816224671	38026.0	24.0	24.0	1.0	19.0	291.7
trust region	-28.2530799180	36.0	36.0	36.0	nan	19.0	5.2
trust region repeats	-30.5862276775	736.0	736.0	736.0	16.0	19.0	8.7

Table 1899: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-45.4390030229	4395.0	4395.0	4395.0	2.6	19.0	576.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-46.3302050329	100698.0	0.0	0.0	nan	19.0	755.1
direct	-42.6430239039	17639.0	0.0	0.0	nan	19.0	146.1
direct with trim	-46.3313093339	17678.6	37.6	37.6	nan	19.0	162.5
dual anneal	-45.9854175634	38044.0	42.0	42.0	1.2	19.0	273.4
trust region	-44.6228888328	32.0	32.0	32.0	nan	19.0	10.5
trust region repeats	-46.3313093339	672.0	672.0	672.0	16.0	19.0	7.7

Table 1900: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-63.7977123029	3263.2	3263.2	3263.2	1.2	19.0	445.0
cch second order	-62.0960417907	351.0	177.0	177.0	nan	19.0	9.7
diff evo	-65.6550919144	180160.5	0.0	0.0	nan	19.0	1471.3
direct	-60.0786231542	16085.0	0.0	0.0	nan	19.0	114.3
direct with trim	-61.5809234230	16112.0	25.0	25.0	nan	19.0	119.9
dual anneal	-64.9362697693	38081.4	79.4	79.4	2.6	19.0	356.6
trust region	-62.9474717973	43.0	43.0	43.0	nan	19.0	9.4
trust region repeats	-65.6574405995	602.0	602.0	602.0	17.0	19.0	7.8

Table 1901: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-87.9985561493	3091.2	3091.2	3091.2	1.0	19.0	493.2
cch second order	-85.2154172955	356.0	174.0	174.0	nan	19.0	10.4
diff evo	-88.7938704043	125229.0	0.0	0.0	nan	19.0	1057.0
direct	-82.6679480518	16671.0	0.0	0.0	nan	19.0	123.2
direct with trim	-88.0564372712	16716.4	43.4	43.4	nan	19.0	145.6
dual anneal	-87.6196942281	38071.6	69.6	69.6	2.0	19.0	368.6
trust region	-85.7354284696	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	5.1
trust region repeats	-88.8756106450	658.0	658.0	658.0	17.0	19.0	6.0

Table 1902: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-112.7906203160	2240.2	2240.2	2240.2	1.2	19.0	377.6
cch second order	-91.1820339845	346.0	169.0	169.0	nan	19.0	9.7
diff evo	-116.3721444380	93724.8	0.0	0.0	nan	19.0	745.5
direct	-107.4864362620	18791.0	0.0	0.0	nan	19.0	130.1
direct with trim	-116.1415736181	18831.8	38.8	38.8	nan	19.0	139.0
dual anneal	-116.1415735821	38059.2	57.2	57.2	1.8	19.0	344.6
trust region	-112.7906203160	41.0	41.0	41.0	nan	19.0	12.3
trust region repeats	-116.3729856194	504.0	504.0	504.0	16.0	19.0	5.7

Table 1903: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-147.0813942527	1946.6	1946.6	1946.6	1.0	19.0	314.4
cch second order	-140.0158983833	252.0	133.0	133.0	nan	19.0	8.9
diff evo	-147.8277222784	116742.6	0.0	0.0	nan	19.0	1043.9
direct	-141.8412374614	16769.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
direct with trim	-148.2933431874	16783.0	12.0	12.0	nan	19.0	119.9
dual anneal	-147.5986448496	38084.4	82.4	82.4	2.2	19.0	358.1
trust region	-144.5163329092	42.0	42.0	42.0	nan	19.0	11.1
trust region repeats	-148.2933431874	646.0	646.0	646.0	15.0	19.0	4.9

Table 1904: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-183.3802573319	1862.0	1862.0	1862.0	1.0	19.0	358.1
cch second order	-176.3501153017	398.0	195.0	195.0	nan	19.0	11.1
diff evo	-184.7212205558	132841.8	0.0	0.0	nan	19.0	1090.5
direct	-166.1486418490	17587.0	0.0	0.0	nan	19.0	135.1
direct with trim	-170.9986079401	17615.4	26.4	26.4	nan	19.0	127.6
dual anneal	-183.3802572858	38090.4	88.4	88.4	3.2	19.0	336.4
trust region	-172.6360978254	30.0	30.0	30.0	nan	19.0	9.4
trust region repeats	-184.7226993459	588.0	588.0	588.0	13.0	19.0	7.4

Table 1905: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-219.2241121251	1422.8	1422.8	1422.8	1.0	19.0	292.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-225.4088727684	74731.8	0.0	0.0	nan	19.0	682.7
direct	-202.8432015153	16621.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.0
direct with trim	-212.4704890554	16651.0	28.0	28.0	nan	19.0	113.9
dual anneal	-223.6117092048	38082.8	80.8	80.8	2.0	19.0	300.5
trust region	-219.2241121251	49.0	49.0	49.0	nan	19.0	16.5
trust region repeats	-225.8170671773	472.0	472.0	472.0	11.0	19.0	4.2

Table 1906: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-262.8314853830	1410.2	1410.2	1410.2	1.0	19.0	304.7
cch second order	-271.3337626386	341.0	166.0	166.0	nan	19.0	9.7
diff evo	-271.7172571160	123575.4	0.0	0.0	nan	19.0	988.5
direct	-261.4534094106	17811.0	0.0	0.0	nan	19.0	126.6
direct with trim	-266.6778968041	17834.0	21.0	21.0	nan	19.0	141.0
dual anneal	-267.6530625912	38042.2	40.2	40.2	1.2	19.0	335.7
trust region	-268.4115705547	28.0	28.0	28.0	nan	19.0	9.6
trust region repeats	-271.7189507809	494.0	494.0	494.0	7.0	19.0	5.1

Table 1907: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-317.6227516523	1438.6	1438.6	1438.6	1.0	19.0	275.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-322.5572493119	98693.4	0.0	0.0	nan	19.0	732.2
direct	-306.8341752822	19047.0	0.0	0.0	nan	19.0	143.9
direct with trim	-309.1076484728	19079.0	30.0	30.0	nan	19.0	143.7
dual anneal	-322.5590815494	38038.4	36.4	36.4	1.2	19.0	279.6
trust region	-317.7397393839	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	8.3
trust region repeats	-322.5590816295	513.0	513.0	513.0	12.0	19.0	6.4

Table 1908: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-375.7938941145	1414.2	1414.2	1414.2	1.0	19.0	221.3
cch second order	-373.0609462445	731.0	382.0	382.0	nan	19.0	16.5
diff evo	-378.0922493684	92079.0	0.0	0.0	nan	19.0	722.4
direct	-359.8235469839	17057.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.6
direct with trim	-364.0899306547	17078.4	19.4	19.4	nan	19.0	122.4
dual anneal	-378.4590584153	39313.8	1311.8	1311.8	48.6	19.0	462.1
trust region	-375.7938941145	36.0	36.0	36.0	nan	19.0	5.1
trust region repeats	-378.4590585023	469.0	469.0	469.0	10.0	19.0	5.6

Table 1909: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.8386281313	1410.6	1410.6	1410.6	1.0	19.0	217.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-439.5370405289	134986.8	0.0	0.0	nan	19.0	1114.3
direct	-431.6392485926	18221.0	0.0	0.0	nan	19.0	134.1
direct with trim	-439.5388499664	18271.8	48.8	48.8	nan	19.0	148.2
dual anneal	-439.5388498720	38126.6	124.6	124.6	5.4	19.0	308.6
trust region	-432.9029615942	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	6.9
trust region repeats	-439.5388499664	467.0	467.0	467.0	8.0	19.0	6.4

Table 1910: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.5368857467	1388.8	1388.8	1388.8	1.0	19.0	257.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-505.9060803060	142981.8	0.0	0.0	nan	19.0	1080.7
direct	-487.6882192278	17181.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.8
direct with trim	-501.9612034770	17204.0	21.0	21.0	nan	19.0	117.6
dual anneal	-505.9073825062	38120.4	118.4	118.4	5.6	19.0	299.1
trust region	-504.2691857457	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-505.9073826081	523.0	523.0	523.0	9.0	19.0	5.3

Table 1911: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-567.1418304074	1250.6	1250.6	1250.6	1.0	19.0	255.9
cch second order	-555.3293295595	377.0	183.0	183.0	nan	19.0	10.3
diff evo	-577.6726349418	115798.8	0.0	0.0	nan	19.0	920.9
direct	-492.5986753772	16395.0	0.0	0.0	nan	19.0	113.5
direct with trim	-538.1623017199	16428.2	31.2	31.2	nan	19.0	115.0
dual anneal	-577.6751464282	38070.4	68.4	68.4	2.4	19.0	285.4
trust region	-576.3107925965	29.0	29.0	29.0	nan	19.0	5.2
trust region repeats	-577.6751465378	449.0	449.0	449.0	9.0	19.0	4.7

Table 1912: Ar

67.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-1.0093295143
He	basin hopping	-4.0964115135
Li	diff evo	-9.8542354819
Be	dual anneal	-18.6377733470
B	basin hopping	-30.7242646240
C	direct with trim	-46.3313093339
N	trust region repeats	-65.6574405995
O	trust region repeats	-88.8756106450
F	trust region repeats	-116.3729856194
Ne	direct with trim	-148.2933431874
Na	trust region repeats	-184.7226993459
Mg	trust region repeats	-225.8170671773
Al	trust region repeats	-271.7189507809
Si	trust region repeats	-322.5590816295
P	trust region repeats	-378.4590585023
S	direct with trim	-439.5388499664
Cl	trust region repeats	-505.9073826081
Ar	trust region repeats	-577.6751465378

Table 1913: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	35.0	35.0	35.0	nan	-187.7160608976	10.2
cch second order	361.2	181.6	181.6	nan	-160.7374291576	10.4
trust region repeats	640.3	640.3	640.3	13.9	-190.8832980383	7.2
basin hopping	2293.4	2293.4	2293.4	4.5	-186.2900136277	353.4
direct	17339.1	0.0	0.0	nan	-177.8248769344	127.3
direct with trim	17374.2	33.0	33.0	nan	-184.7133160491	132.8
dual anneal	38137.8	135.8	135.8	4.8	-190.2394890570	321.9
diff evo	155251.8	0.0	0.0	nan	-190.7902084119	1189.4

Table 1914: Average (all systems)

68 ets 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

68.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1915: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570042	1532.2	1532.2	1532.2	3.0	19.0	315.5
He	-3.0901072072	1529.6	1529.6	1529.6	2.6	19.0	342.9
Li	-7.9887757638	1586.8	1586.8	1586.8	2.8	19.0	385.8
Be	-15.7299002686	1624.2	1624.2	1624.2	2.4	19.0	375.3
B	-26.6444313861	1626.6	1626.6	1626.6	1.8	19.0	537.7
C	-41.0134777433	1695.4	1695.4	1695.4	2.0	19.0	492.1
N	-59.0838535753	1746.8	1746.8	1746.8	2.8	19.0	363.0
O	-81.0770292558	1823.2	1823.2	1823.2	1.2	19.0	468.4
F	-107.1948256030	7081.6	7081.6	7081.6	3.4	19.0	536.3
Ne	-137.6232919794	6740.0	6740.0	6740.0	3.6	19.0	533.9
Na	-172.5356127902	3849.4	3849.4	3849.4	3.4	19.0	407.1
Mg	-212.0936002234	3240.8	3240.8	3240.8	3.0	19.0	430.6
Al	-256.4503621521	2980.6	2980.6	2980.6	2.8	19.0	590.2
Si	-305.7501964564	3175.8	3175.8	3175.8	2.8	19.0	541.2
P	-360.1310799762	3353.2	3353.2	3353.2	3.0	19.0	464.9
S	-419.7241418327	8697.4	8697.4	8697.4	4.2	19.0	669.2
Cl	-484.6550532045	7378.8	7378.8	7378.8	5.0	19.0	469.3
Ar	-555.0444333070	5906.2	5906.2	5906.2	3.2	19.0	601.3

Table 1916: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570878	176.0	84.0	84.0	nan	19.0	6.0
He	-3.0901072501	198.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.8
Li	-7.9887757151	243.0	114.0	114.0	nan	19.0	7.2
Be	-15.7299001847	205.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.5
B	-26.6444313916	234.0	120.0	120.0	nan	19.0	8.3
C	-41.0134776505	304.0	142.0	142.0	nan	19.0	8.0
N	-59.0838536165	692.0	187.0	187.0	nan	19.0	11.5
O	-81.0770292417	210.0	103.0	103.0	nan	19.0	7.0
F	-107.1948253807	246.0	121.0	121.0	nan	19.0	7.6
Ne	-137.6232917394	285.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.6
Na	-172.5354832243	281.0	118.0	118.0	nan	19.0	7.3
Mg	-212.0935267319	341.0	131.0	131.0	nan	19.0	9.1
Al	-256.4502040217	274.0	120.0	120.0	nan	19.0	7.4
Si	-305.7501956708	271.0	123.0	123.0	nan	19.0	7.5
P	-360.1310787546	272.0	127.0	127.0	nan	19.0	8.4
S	-419.7241408556	256.0	122.0	122.0	nan	19.0	7.5
Cl	-484.6550527159	293.0	135.0	135.0	nan	19.0	7.8
Ar	-555.0444331708	296.0	121.0	121.0	nan	19.0	8.2

Table 1917: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213567476	20974.2	0.0	0.0	nan	19.0	138.1
He	-3.0901068440	25591.8	0.0	0.0	nan	19.0	168.9
Li	-7.9887737429	29374.8	0.0	0.0	nan	19.0	220.4
Be	-15.7298939731	28337.4	0.0	0.0	nan	19.0	200.8
B	-26.6444209352	33969.0	0.0	0.0	nan	19.0	265.8
C	-41.0134697670	33524.4	0.0	0.0	nan	19.0	261.2
N	-59.0838314402	30396.6	0.0	0.0	nan	19.0	212.3
O	-81.0770122179	34296.6	0.0	0.0	nan	19.0	242.5
F	-107.1948085308	37970.4	0.0	0.0	nan	19.0	270.6
Ne	-137.6232616897	34164.0	0.0	0.0	nan	19.0	238.0
Na	-172.5354583437	41878.2	0.0	0.0	nan	19.0	299.8
Mg	-212.0934646513	42221.4	0.0	0.0	nan	19.0	318.8
Al	-256.4501197211	43555.2	0.0	0.0	nan	19.0	275.2
Si	-305.7501323526	41191.8	0.0	0.0	nan	19.0	281.9
P	-360.1309386203	62166.0	0.0	0.0	nan	19.0	457.2
S	-419.7240289613	42455.4	0.0	0.0	nan	19.0	311.5
Cl	-484.6548619109	41269.8	0.0	0.0	nan	19.0	277.2
Ar	-555.0443134016	54100.8	0.0	0.0	nan	19.0	370.5

Table 1918: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6195997921	16631.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.5
He	-3.0634528640	18113.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
Li	-7.9527735842	18271.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.2
Be	-15.6898238132	17159.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.0
B	-26.5781293241	18909.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
C	-40.7313816241	16889.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.9
N	-58.8817607647	15341.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.5
O	-79.7833099734	19149.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.2
F	-106.4186814437	16731.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.9
Ne	-136.3284487744	17359.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.4
Na	-171.6666491429	18841.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.9
Mg	-208.3260935518	17819.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.6
Al	-253.6879749952	19105.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.5
Si	-301.0507660712	17953.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.8
P	-356.5921037148	17021.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.4
S	-415.1671716397	18341.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.9
Cl	-482.4989506940	15951.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.9
Ar	-542.2472843567	15249.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.5

Table 1919: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570042	16639.0	6.0	6.0	nan	19.0	134.4
He	-3.0901072071	18121.0	6.0	6.0	nan	19.0	125.8
Li	-7.9887757637	18281.0	8.0	8.0	nan	19.0	125.5
Be	-15.7299002685	17168.0	7.0	7.0	nan	19.0	134.0
B	-26.6444313861	19151.2	240.2	240.2	nan	19.0	193.4
C	-41.0134276145	16909.0	18.0	18.0	nan	19.0	138.3
N	-59.0838535753	15352.0	9.0	9.0	nan	19.0	122.7
O	-81.0770292558	19166.0	15.0	15.0	nan	19.0	151.9
F	-107.1948254539	16761.0	28.0	28.0	nan	19.0	136.7
Ne	-137.6232916744	17392.0	31.0	31.0	nan	19.0	117.6
Na	-172.5354832259	18857.4	14.4	14.4	nan	19.0	126.3
Mg	-212.0935268109	17847.0	26.0	26.0	nan	19.0	126.4
Al	-256.4502040645	19133.0	26.0	26.0	nan	19.0	139.3
Si	-305.7501956642	17969.0	14.0	14.0	nan	19.0	125.7
P	-360.1310788300	17038.8	15.8	15.8	nan	19.0	121.6
S	-419.7241409127	18356.0	13.0	13.0	nan	19.0	111.4
Cl	-484.6550527615	15974.4	21.4	21.4	nan	19.0	95.8
Ar	-555.0444331389	15283.0	32.0	32.0	nan	19.0	99.7

Table 1920: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570042	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	262.5
He	-3.0901072071	38012.4	10.4	10.4	1.0	19.0	243.4
Li	-7.9887757637	38012.4	10.4	10.4	1.0	19.0	269.6
Be	-15.7299002685	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	270.6
B	-26.6444313860	38016.2	14.2	14.2	1.0	19.0	226.5
C	-41.0134777431	38017.8	15.8	15.8	1.0	19.0	252.8
N	-59.0838535750	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	259.5
O	-81.0770292553	38021.0	19.0	19.0	1.0	19.0	271.7
F	-107.1948254532	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	300.2
Ne	-137.6232916735	38031.0	29.0	29.0	1.0	19.0	298.2
Na	-172.5354832247	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	266.9
Mg	-212.0935268093	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	241.1
Al	-256.4502040625	38103.8	101.8	101.8	1.0	19.0	246.1
Si	-305.7501956616	38020.2	18.2	18.2	1.0	19.0	273.7
P	-360.1310788269	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	237.8
S	-419.7241409089	38030.6	28.6	28.6	1.0	19.0	259.0
Cl	-484.6550527570	38034.6	32.6	32.6	1.0	19.0	300.9
Ar	-555.0444331334	38039.8	37.8	37.8	1.0	19.0	263.2

Table 1921: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570042	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.0
He	-3.0901072071	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	9.5
Li	-7.9887757637	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.1
Be	-15.7299002685	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
B	-26.6444313861	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
C	-41.0134777433	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.0
N	-59.0838535753	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	5.2
O	-81.0770292558	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	7.2
F	-107.1948254539	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	4.5
Ne	-137.6232916744	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	4.8
Na	-172.5354832259	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.2
Mg	-212.0935268109	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	13.3
Al	-256.4502040645	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	4.9
Si	-305.7501956642	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
P	-360.1310788300	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	4.4
S	-419.7241409127	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.1
Cl	-484.6550527615	34.0	34.0	34.0	nan	19.0	4.8
Ar	-555.0444331389	34.0	34.0	34.0	nan	19.0	8.5

Table 1922: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6213570042	965.0	965.0	965.0	2.0	19.0	15.5
He	-3.0901072071	257.0	257.0	257.0	2.0	19.0	3.3
Li	-7.9887757637	241.0	241.0	241.0	2.0	19.0	3.2
Be	-15.7299002686	258.0	258.0	258.0	1.0	19.0	3.0
B	-26.6444313861	251.0	251.0	251.0	2.0	19.0	3.1
C	-41.0134777433	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.2
N	-59.0838535753	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	2.5
O	-81.0770292558	353.0	353.0	353.0	2.0	19.0	3.1
F	-107.1948254539	357.0	357.0	357.0	2.0	19.0	3.3
Ne	-137.6232916745	363.0	363.0	363.0	2.0	19.0	3.6
Na	-172.5354832259	407.0	407.0	407.0	2.0	19.0	3.8
Mg	-212.0935268109	367.0	367.0	367.0	2.0	19.0	3.5
Al	-256.4502040645	384.0	384.0	384.0	1.0	19.0	3.5
Si	-305.7501956642	537.0	537.0	537.0	2.0	19.0	7.8
P	-360.1310788300	429.0	429.0	429.0	1.0	19.0	3.5
S	-419.7241409127	567.0	567.0	567.0	2.0	19.0	4.6
Cl	-484.6550527615	418.0	418.0	418.0	2.0	19.0	3.6
Ar	-555.0444331389	383.0	383.0	383.0	1.0	19.0	3.9

Table 1923: trust region repeats

68.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6213570042	1532.2	1532.2	1532.2	3.0	19.0	315.5
cch second order	-0.6213570878	176.0	84.0	84.0	nan	19.0	6.0
diff evo	-0.6213567476	20974.2	0.0	0.0	nan	19.0	138.1
direct	-0.6195997921	16631.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.5
direct with trim	-0.6213570042	16639.0	6.0	6.0	nan	19.0	134.4
dual anneal	-0.6213570042	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	262.5
trust region	-0.6213570042	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-0.6213570042	965.0	965.0	965.0	2.0	19.0	15.5

Table 1924: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.0901072072	1529.6	1529.6	1529.6	2.6	19.0	342.9
cch second order	-3.0901072501	198.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.8
diff evo	-3.0901068440	25591.8	0.0	0.0	nan	19.0	168.9
direct	-3.0634528640	18113.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.2
direct with trim	-3.0901072071	18121.0	6.0	6.0	nan	19.0	125.8
dual anneal	-3.0901072071	38012.4	10.4	10.4	1.0	19.0	243.4
trust region	-3.0901072071	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	9.5
trust region repeats	-3.0901072071	257.0	257.0	257.0	2.0	19.0	3.3

Table 1925: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.9887757638	1586.8	1586.8	1586.8	2.8	19.0	385.8
cch second order	-7.9887757151	243.0	114.0	114.0	nan	19.0	7.2
diff evo	-7.9887737429	29374.8	0.0	0.0	nan	19.0	220.4
direct	-7.9527735842	18271.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.2
direct with trim	-7.9887757637	18281.0	8.0	8.0	nan	19.0	125.5
dual anneal	-7.9887757637	38012.4	10.4	10.4	1.0	19.0	269.6
trust region	-7.9887757637	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-7.9887757637	241.0	241.0	241.0	2.0	19.0	3.2

Table 1926: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.7299002686	1624.2	1624.2	1624.2	2.4	19.0	375.3
cch second order	-15.7299001847	205.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.5
diff evo	-15.7298939731	28337.4	0.0	0.0	nan	19.0	200.8
direct	-15.6898238132	17159.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.0
direct with trim	-15.7299002685	17168.0	7.0	7.0	nan	19.0	134.0
dual anneal	-15.7299002685	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	270.6
trust region	-15.7299002685	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-15.7299002686	258.0	258.0	258.0	1.0	19.0	3.0

Table 1927: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.6444313861	1626.6	1626.6	1626.6	1.8	19.0	537.7
cch second order	-26.6444313916	234.0	120.0	120.0	nan	19.0	8.3
diff evo	-26.6444209352	33969.0	0.0	0.0	nan	19.0	265.8
direct	-26.5781293241	18909.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.3
direct with trim	-26.6444313861	19151.2	240.2	240.2	nan	19.0	193.4
dual anneal	-26.6444313860	38016.2	14.2	14.2	1.0	19.0	226.5
trust region	-26.6444313861	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-26.6444313861	251.0	251.0	251.0	2.0	19.0	3.1

Table 1928: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.0134777433	1695.4	1695.4	1695.4	2.0	19.0	492.1
cch second order	-41.0134776505	304.0	142.0	142.0	nan	19.0	8.0
diff evo	-41.0134697670	33524.4	0.0	0.0	nan	19.0	261.2
direct	-40.7313816241	16889.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.9
direct with trim	-41.0134276145	16909.0	18.0	18.0	nan	19.0	138.3
dual anneal	-41.0134777431	38017.8	15.8	15.8	1.0	19.0	252.8
trust region	-41.0134777433	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-41.0134777433	287.0	287.0	287.0	1.0	19.0	3.2

Table 1929: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.0838535753	1746.8	1746.8	1746.8	2.8	19.0	363.0
cch second order	-59.0838536165	692.0	187.0	187.0	nan	19.0	11.5
diff evo	-59.0838314402	30396.6	0.0	0.0	nan	19.0	212.3
direct	-58.8817607647	15341.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.5
direct with trim	-59.0838535753	15352.0	9.0	9.0	nan	19.0	122.7
dual anneal	-59.0838535750	38019.8	17.8	17.8	1.0	19.0	259.5
trust region	-59.0838535753	23.0	23.0	23.0	nan	19.0	5.2
trust region repeats	-59.0838535753	277.0	277.0	277.0	1.0	19.0	2.5

Table 1930: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.0770292558	1823.2	1823.2	1823.2	1.2	19.0	468.4
cch second order	-81.0770292417	210.0	103.0	103.0	nan	19.0	7.0
diff evo	-81.0770122179	34296.6	0.0	0.0	nan	19.0	242.5
direct	-79.7833099734	19149.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.2
direct with trim	-81.0770292558	19166.0	15.0	15.0	nan	19.0	151.9
dual anneal	-81.0770292553	38021.0	19.0	19.0	1.0	19.0	271.7
trust region	-81.0770292558	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	7.2
trust region repeats	-81.0770292558	353.0	353.0	353.0	2.0	19.0	3.1

Table 1931: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.1948256030	7081.6	7081.6	7081.6	3.4	19.0	536.3
cch second order	-107.1948253807	246.0	121.0	121.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-107.1948085308	37970.4	0.0	0.0	nan	19.0	270.6
direct	-106.4186814437	16731.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.9
direct with trim	-107.1948254539	16761.0	28.0	28.0	nan	19.0	136.7
dual anneal	-107.1948254532	38022.0	20.0	20.0	1.0	19.0	300.2
trust region	-107.1948254539	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-107.1948254539	357.0	357.0	357.0	2.0	19.0	3.3

Table 1932: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-137.6232919794	6740.0	6740.0	6740.0	3.6	19.0	533.9
cch second order	-137.6232917394	285.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-137.6232616897	34164.0	0.0	0.0	nan	19.0	238.0
direct	-136.3284487744	17359.0	0.0	0.0	nan	19.0	95.4
direct with trim	-137.6232916744	17392.0	31.0	31.0	nan	19.0	117.6
dual anneal	-137.6232916735	38031.0	29.0	29.0	1.0	19.0	298.2
trust region	-137.6232916744	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	4.8
trust region repeats	-137.6232916745	363.0	363.0	363.0	2.0	19.0	3.6

Table 1933: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-172.5356127902	3849.4	3849.4	3849.4	3.4	19.0	407.1
cch second order	-172.5354832243	281.0	118.0	118.0	nan	19.0	7.3
diff evo	-172.5354583437	41878.2	0.0	0.0	nan	19.0	299.8
direct	-171.6666491429	18841.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.9
direct with trim	-172.5354832259	18857.4	14.4	14.4	nan	19.0	126.3
dual anneal	-172.5354832247	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	266.9
trust region	-172.5354832259	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-172.5354832259	407.0	407.0	407.0	2.0	19.0	3.8

Table 1934: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-212.0936002234	3240.8	3240.8	3240.8	3.0	19.0	430.6
cch second order	-212.0935267319	341.0	131.0	131.0	nan	19.0	9.1
diff evo	-212.0934646513	42221.4	0.0	0.0	nan	19.0	318.8
direct	-208.3260935518	17819.0	0.0	0.0	nan	19.0	109.6
direct with trim	-212.0935268109	17847.0	26.0	26.0	nan	19.0	126.4
dual anneal	-212.0935268093	38026.2	24.2	24.2	1.0	19.0	241.1
trust region	-212.0935268109	38.0	38.0	38.0	nan	19.0	13.3
trust region repeats	-212.0935268109	367.0	367.0	367.0	2.0	19.0	3.5

Table 1935: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-256.4503621521	2980.6	2980.6	2980.6	2.8	19.0	590.2
cch second order	-256.4502040217	274.0	120.0	120.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-256.4501197211	43555.2	0.0	0.0	nan	19.0	275.2
direct	-253.6879749952	19105.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.5
direct with trim	-256.4502040645	19133.0	26.0	26.0	nan	19.0	139.3
dual anneal	-256.4502040625	38103.8	101.8	101.8	1.0	19.0	246.1
trust region	-256.4502040645	27.0	27.0	27.0	nan	19.0	4.9
trust region repeats	-256.4502040645	384.0	384.0	384.0	1.0	19.0	3.5

Table 1936: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-305.7501964564	3175.8	3175.8	3175.8	2.8	19.0	541.2
cch second order	-305.7501956708	271.0	123.0	123.0	nan	19.0	7.5
diff evo	-305.7501323526	41191.8	0.0	0.0	nan	19.0	281.9
direct	-301.0507660712	17953.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.8
direct with trim	-305.7501956642	17969.0	14.0	14.0	nan	19.0	125.7
dual anneal	-305.7501956616	38020.2	18.2	18.2	1.0	19.0	273.7
trust region	-305.7501956642	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-305.7501956642	537.0	537.0	537.0	2.0	19.0	7.8

Table 1937: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-360.1310799762	3353.2	3353.2	3353.2	3.0	19.0	464.9
cch second order	-360.1310787546	272.0	127.0	127.0	nan	19.0	8.4
diff evo	-360.1309386203	62166.0	0.0	0.0	nan	19.0	457.2
direct	-356.5921037148	17021.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.4
direct with trim	-360.1310788300	17038.8	15.8	15.8	nan	19.0	121.6
dual anneal	-360.1310788269	38022.8	20.8	20.8	1.0	19.0	237.8
trust region	-360.1310788300	25.0	25.0	25.0	nan	19.0	4.4
trust region repeats	-360.1310788300	429.0	429.0	429.0	1.0	19.0	3.5

Table 1938: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-419.7241418327	8697.4	8697.4	8697.4	4.2	19.0	669.2
cch second order	-419.7241408556	256.0	122.0	122.0	nan	19.0	7.5
diff evo	-419.7240289613	42455.4	0.0	0.0	nan	19.0	311.5
direct	-415.1671716397	18341.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.9
direct with trim	-419.7241409127	18356.0	13.0	13.0	nan	19.0	111.4
dual anneal	-419.7241409089	38030.6	28.6	28.6	1.0	19.0	259.0
trust region	-419.7241409127	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-419.7241409127	567.0	567.0	567.0	2.0	19.0	4.6

Table 1939: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-484.6550532045	7378.8	7378.8	7378.8	5.0	19.0	469.3
cch second order	-484.6550527159	293.0	135.0	135.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-484.6548619109	41269.8	0.0	0.0	nan	19.0	277.2
direct	-482.4989506940	15951.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.9
direct with trim	-484.6550527615	15974.4	21.4	21.4	nan	19.0	95.8
dual anneal	-484.6550527570	38034.6	32.6	32.6	1.0	19.0	300.9
trust region	-484.6550527615	34.0	34.0	34.0	nan	19.0	4.8
trust region repeats	-484.6550527615	418.0	418.0	418.0	2.0	19.0	3.6

Table 1940: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-555.0444333070	5906.2	5906.2	5906.2	3.2	19.0	601.3
cch second order	-555.0444331708	296.0	121.0	121.0	nan	19.0	8.2
diff evo	-555.0443134016	54100.8	0.0	0.0	nan	19.0	370.5
direct	-542.2472843567	15249.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.5
direct with trim	-555.0444331389	15283.0	32.0	32.0	nan	19.0	99.7
dual anneal	-555.0444331334	38039.8	37.8	37.8	1.0	19.0	263.2
trust region	-555.0444331389	34.0	34.0	34.0	nan	19.0	8.5
trust region repeats	-555.0444331389	383.0	383.0	383.0	1.0	19.0	3.9

Table 1941: Ar

68.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6213570878
He	cch second order	-3.0901072501
Li	basin hopping	-7.9887757638
Be	basin hopping	-15.7299002686
B	cch second order	-26.6444313916
C	basin hopping	-41.0134777433
N	cch second order	-59.0838536165
O	basin hopping	-81.0770292558
F	basin hopping	-107.1948256030
Ne	basin hopping	-137.6232919794
Na	basin hopping	-172.5356127902
Mg	basin hopping	-212.0936002234
Al	basin hopping	-256.4503621521
Si	basin hopping	-305.7501964564
P	basin hopping	-360.1310799762
S	basin hopping	-419.7241418327
Cl	basin hopping	-484.6550532045
Ar	basin hopping	-555.0444333070

Table 1942: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	20.8	20.8	20.8	nan	-180.3583980412	5.5
cch second order	282.1	121.6	121.6	nan	-180.3583980224	7.8
trust region repeats	394.5	394.5	394.5	1.7	-180.3583980412	4.3
basin hopping	3642.7	3642.7	3642.7	2.9	-180.3584183183	473.6
direct	17490.7	0.0	0.0	nan	-178.1824642291	99.7
direct with trim	17522.2	29.5	29.5	nan	-180.3583952562	129.2
diff evo	37635.4	0.0	0.0	nan	-180.3583474362	267.3
dual anneal	38026.7	24.7	24.7	1.0	-180.3583980396	263.5

Table 1943: Average (all systems)

69 ets 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

69.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1944: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135300	1525.2	1525.2	1525.2	1.4	19.0	250.8
He	-3.1805846506	1370.0	1370.0	1370.0	1.6	19.0	345.2
Li	-8.1482688052	1370.4	1370.4	1370.4	2.0	19.0	302.5
Be	-15.9682351358	2580.8	2580.8	2580.8	2.6	19.0	377.8
B	-26.9683629016	1432.0	1432.0	1432.0	1.8	19.0	289.7
C	-41.4274794608	1444.0	1444.0	1444.0	1.6	19.0	349.1
N	-59.5905825179	1462.4	1462.4	1462.4	1.2	19.0	318.3
O	-81.6776401851	1486.8	1486.8	1486.8	1.0	19.0	316.8
F	-107.8891924874	1531.6	1531.6	1531.6	1.4	19.0	259.7
Ne	-138.4101726271	1583.4	1583.4	1583.4	1.6	19.0	295.9
Na	-173.4126461899	1621.8	1621.8	1621.8	1.4	19.0	340.6
Mg	-213.0578480973	1671.2	1671.2	1671.2	1.2	19.0	414.6
Al	-257.4977506053	1729.6	1729.6	1729.6	1.2	19.0	333.4
Si	-306.8762907144	1795.4	1795.4	1795.4	1.2	19.0	332.8
P	-361.3303498430	1828.0	1828.0	1828.0	1.2	19.0	417.9
S	-420.9905754175	1907.8	1907.8	1907.8	2.8	19.0	416.4
Cl	-485.9820300695	1907.2	1907.2	1907.2	2.2	19.0	432.7
Ar	-556.4247589478	1897.4	1897.4	1897.4	1.4	19.0	407.4

Table 1945: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135784	203.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.9
He	-3.1805846080	205.0	105.0	105.0	nan	19.0	6.7
Li	-8.1482687531	204.0	93.0	93.0	nan	19.0	5.2
Be	-15.9682334703	218.0	104.0	104.0	nan	19.0	5.5
B	-26.9683628098	256.0	116.0	116.0	nan	19.0	7.2
C	-41.4274795017	260.0	115.0	115.0	nan	19.0	8.2
N	-59.5905824859	190.0	101.0	101.0	nan	19.0	5.7
O	-81.6776401910	178.0	99.0	99.0	nan	19.0	6.4
F	-107.8891924244	211.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.8
Ne	-138.4188242677	504.0	228.0	228.0	nan	19.0	8.4
Na	-173.4214150659	469.0	216.0	216.0	nan	19.0	9.5
Mg	-213.0578480474	242.0	125.0	125.0	nan	19.0	7.3
Al	-257.4977505692	205.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.4
Si	-306.8762889415	283.0	144.0	144.0	nan	19.0	6.5
P	-361.3303498407	211.0	114.0	114.0	nan	19.0	5.6
S	-420.9905754131	452.0	217.0	217.0	nan	19.0	10.4
Cl	-485.9820300905	484.0	230.0	230.0	nan	19.0	10.0
Ar	-556.4247588926	178.0	97.0	97.0	nan	19.0	7.0

Table 1946: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571132942	32955.0	0.0	0.0	nan	19.0	197.7
He	-3.1805835878	55465.8	0.0	0.0	nan	19.0	371.7
Li	-8.1482664535	86985.6	0.0	0.0	nan	19.0	578.0
Be	-15.9682310834	72649.2	0.0	0.0	nan	19.0	500.9
B	-26.9683588661	86143.2	0.0	0.0	nan	19.0	589.9
C	-41.4274713605	84544.2	0.0	0.0	nan	19.0	592.7
N	-59.5902519739	35302.8	0.0	0.0	nan	19.0	268.9
O	-81.6773338802	38711.4	0.0	0.0	nan	19.0	275.2
F	-107.8890721871	47026.2	0.0	0.0	nan	19.0	210.2
Ne	-138.4101022070	42572.4	0.0	0.0	nan	19.0	303.1
Na	-173.4125785705	52603.2	0.0	0.0	nan	19.0	360.3
Mg	-213.0575231776	44577.0	0.0	0.0	nan	19.0	262.3
Al	-257.4975778099	52642.2	0.0	0.0	nan	19.0	412.7
Si	-306.8761504665	67321.8	0.0	0.0	nan	19.0	496.3
P	-361.3301952744	49834.2	0.0	0.0	nan	19.0	347.7
S	-420.9904881359	50559.6	0.0	0.0	nan	19.0	371.4
Cl	-485.9818296862	48960.6	0.0	0.0	nan	19.0	304.7
Ar	-556.4245180470	52821.6	0.0	0.0	nan	19.0	344.0

Table 1947: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6525983397	15823.0	0.0	0.0	nan	19.0	91.4
He	-3.1711450845	19165.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
Li	-8.1098576103	18557.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.5
Be	-15.9293694389	17157.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
B	-26.8940927199	18093.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.6
C	-41.1590471736	17399.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.2
N	-58.8806482039	17997.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.2
O	-78.4096291572	16697.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.7
F	-106.7108000365	18145.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.9
Ne	-137.2806427569	17115.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.4
Na	-169.7810281808	16837.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.2
Mg	-209.5780082808	17265.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.0
Al	-251.9436987280	18015.0	0.0	0.0	nan	19.0	122.4
Si	-302.6404464076	16955.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.2
P	-358.3730871965	16587.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.3
S	-417.3214656546	17993.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.9
Cl	-481.9174525652	16061.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.4
Ar	-478.3491136491	17493.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.9

Table 1948: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135286	15832.0	7.0	7.0	nan	19.0	85.9
He	-3.1805846505	19173.0	6.0	6.0	nan	19.0	122.7
Li	-8.1482688050	18566.0	7.0	7.0	nan	19.0	118.2
Be	-15.9682334271	17183.0	24.0	24.0	nan	19.0	113.3
B	-26.9674012036	18102.0	7.0	7.0	nan	19.0	105.1
C	-41.4274794608	17408.0	7.0	7.0	nan	19.0	94.4
N	-59.5905825179	18009.0	10.0	10.0	nan	19.0	115.2
O	-81.6776401851	16715.0	16.0	16.0	nan	19.0	102.5
F	-107.8891924873	18155.0	8.0	8.0	nan	19.0	116.1
Ne	-138.4101726271	17129.0	12.0	12.0	nan	19.0	112.0
Na	-173.4126458029	16851.0	12.0	12.0	nan	19.0	111.2
Mg	-213.0578480973	17278.0	11.0	11.0	nan	19.0	85.2
Al	-257.4977506053	18031.0	14.0	14.0	nan	19.0	109.2
Si	-306.8762889982	16967.0	10.0	10.0	nan	19.0	98.7
P	-361.3303498429	16599.0	10.0	10.0	nan	19.0	99.9
S	-420.9905754175	18007.0	12.0	12.0	nan	19.0	115.1
Cl	-485.9820225654	16072.0	9.0	9.0	nan	19.0	113.0
Ar	-556.4247589478	17533.0	38.0	38.0	nan	19.0	104.9

Table 1949: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135286	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	227.2
He	-3.1805846505	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	217.5
Li	-8.1482688050	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	248.9
Be	-15.9682334269	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	265.3
B	-26.9683628094	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	270.0
C	-41.4274794606	38017.2	15.2	15.2	1.0	19.0	247.9
N	-59.5905825176	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	242.5
O	-81.6776401846	38020.4	18.4	18.4	1.0	19.0	258.0
F	-107.8891924866	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	229.7
Ne	-138.4101726262	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	190.1
Na	-173.4126458017	38031.2	29.2	29.2	1.0	19.0	289.8
Mg	-213.0578480957	38023.2	21.2	21.2	1.0	19.0	241.9
Al	-257.4977506033	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	223.3
Si	-306.8762889957	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	238.4
P	-361.3303498398	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	208.5
S	-420.9905754137	38029.2	27.2	27.2	1.0	19.0	219.7
Cl	-485.9820300649	38024.6	22.6	22.6	1.0	19.0	264.9
Ar	-556.4247589425	38032.0	30.0	30.0	1.0	19.0	213.2

Table 1950: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135286	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
He	-3.1805846506	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
Li	-8.1482688050	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.2
Be	-15.9682334270	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	4.1
B	-26.9683628096	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.3
C	-41.4274794608	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.6
N	-59.5905825179	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
O	-81.6776392552	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.9
F	-107.8891924873	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.3
Ne	-138.4101726271	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.7
Na	-173.4126458029	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.3
Mg	-213.0578480973	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.6
Al	-257.4977506053	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	8.8
Si	-306.8762889982	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.2
P	-361.3303498429	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.0
S	-420.9905754175	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	6.5
Cl	-485.9820300694	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.6
Ar	-556.4247589478	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.2

Table 1951: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6571135287	209.0	209.0	209.0	1.0	19.0	4.1
He	-3.1805846507	227.0	227.0	227.0	1.0	19.0	3.6
Li	-8.1482688050	233.0	233.0	233.0	1.0	19.0	3.8
Be	-15.9682334271	536.0	536.0	536.0	2.0	19.0	4.3
B	-26.9683629017	247.0	247.0	247.0	1.0	19.0	3.4
C	-41.4274794608	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.0
N	-59.5905825179	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.3
O	-81.6776401851	256.0	256.0	256.0	1.0	19.0	3.3
F	-107.8891924873	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.1
Ne	-138.4101726271	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.3
Na	-173.4126458029	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.3
Mg	-213.0578480973	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.1
Al	-257.4977506053	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.2
Si	-306.8762907144	272.0	272.0	272.0	2.0	19.0	3.2
P	-361.3303498429	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.4
S	-420.9905754175	274.0	274.0	274.0	1.0	19.0	3.5
Cl	-485.9820300694	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.0
Ar	-556.4247589478	273.0	273.0	273.0	1.0	19.0	3.1

Table 1952: trust region repeats

69.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6571135300	1525.2	1525.2	1525.2	1.4	19.0	250.8
cch second order	-0.6571135784	203.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-0.6571132942	32955.0	0.0	0.0	nan	19.0	197.7
direct	-0.6525983397	15823.0	0.0	0.0	nan	19.0	91.4
direct with trim	-0.6571135286	15832.0	7.0	7.0	nan	19.0	85.9
dual anneal	-0.6571135286	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	227.2
trust region	-0.6571135286	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-0.6571135287	209.0	209.0	209.0	1.0	19.0	4.1

Table 1953: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.1805846506	1370.0	1370.0	1370.0	1.6	19.0	345.2
cch second order	-3.1805846080	205.0	105.0	105.0	nan	19.0	6.7
diff evo	-3.1805835878	55465.8	0.0	0.0	nan	19.0	371.7
direct	-3.1711450845	19165.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
direct with trim	-3.1805846505	19173.0	6.0	6.0	nan	19.0	122.7
dual anneal	-3.1805846505	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	217.5
trust region	-3.1805846506	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-3.1805846507	227.0	227.0	227.0	1.0	19.0	3.6

Table 1954: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.1482688052	1370.4	1370.4	1370.4	2.0	19.0	302.5
cch second order	-8.1482687531	204.0	93.0	93.0	nan	19.0	5.2
diff evo	-8.1482664535	86985.6	0.0	0.0	nan	19.0	578.0
direct	-8.1098576103	18557.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.5
direct with trim	-8.1482688050	18566.0	7.0	7.0	nan	19.0	118.2
dual anneal	-8.1482688050	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	248.9
trust region	-8.1482688050	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-8.1482688050	233.0	233.0	233.0	1.0	19.0	3.8

Table 1955: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-15.9682351358	2580.8	2580.8	2580.8	2.6	19.0	377.8
cch second order	-15.9682334703	218.0	104.0	104.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-15.9682310834	72649.2	0.0	0.0	nan	19.0	500.9
direct	-15.9293694389	17157.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
direct with trim	-15.9682334271	17183.0	24.0	24.0	nan	19.0	113.3
dual anneal	-15.9682334269	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	265.3
trust region	-15.9682334270	24.0	24.0	24.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-15.9682334271	536.0	536.0	536.0	2.0	19.0	4.3

Table 1956: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-26.9683629016	1432.0	1432.0	1432.0	1.8	19.0	289.7
cch second order	-26.9683628098	256.0	116.0	116.0	nan	19.0	7.2
diff evo	-26.9683588661	86143.2	0.0	0.0	nan	19.0	589.9
direct	-26.8940927199	18093.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.6
direct with trim	-26.9674012036	18102.0	7.0	7.0	nan	19.0	105.1
dual anneal	-26.9683628094	38014.0	12.0	12.0	1.0	19.0	270.0
trust region	-26.9683628096	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-26.9683629017	247.0	247.0	247.0	1.0	19.0	3.4

Table 1957: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.4274794608	1444.0	1444.0	1444.0	1.6	19.0	349.1
cch second order	-41.4274795017	260.0	115.0	115.0	nan	19.0	8.2
diff evo	-41.4274713605	84544.2	0.0	0.0	nan	19.0	592.7
direct	-41.1590471736	17399.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.2
direct with trim	-41.4274794608	17408.0	7.0	7.0	nan	19.0	94.4
dual anneal	-41.4274794606	38017.2	15.2	15.2	1.0	19.0	247.9
trust region	-41.4274794608	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	3.6
trust region repeats	-41.4274794608	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.0

Table 1958: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-59.5905825179	1462.4	1462.4	1462.4	1.2	19.0	318.3
cch second order	-59.5905824859	190.0	101.0	101.0	nan	19.0	5.7
diff evo	-59.5902519739	35302.8	0.0	0.0	nan	19.0	268.9
direct	-58.8806482039	17997.0	0.0	0.0	nan	19.0	111.2
direct with trim	-59.5905825179	18009.0	10.0	10.0	nan	19.0	115.2
dual anneal	-59.5905825176	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	242.5
trust region	-59.5905825179	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-59.5905825179	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.3

Table 1959: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-81.6776401851	1486.8	1486.8	1486.8	1.0	19.0	316.8
cch second order	-81.6776401910	178.0	99.0	99.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-81.6773338802	38711.4	0.0	0.0	nan	19.0	275.2
direct	-78.4096291572	16697.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.7
direct with trim	-81.6776401851	16715.0	16.0	16.0	nan	19.0	102.5
dual anneal	-81.6776401846	38020.4	18.4	18.4	1.0	19.0	258.0
trust region	-81.6776392552	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.9
trust region repeats	-81.6776401851	256.0	256.0	256.0	1.0	19.0	3.3

Table 1960: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-107.8891924874	1531.6	1531.6	1531.6	1.4	19.0	259.7
cch second order	-107.8891924244	211.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-107.8890721871	47026.2	0.0	0.0	nan	19.0	210.2
direct	-106.7108000365	18145.0	0.0	0.0	nan	19.0	112.9
direct with trim	-107.8891924873	18155.0	8.0	8.0	nan	19.0	116.1
dual anneal	-107.8891924866	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	229.7
trust region	-107.8891924873	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-107.8891924873	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.1

Table 1961: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-138.4101726271	1583.4	1583.4	1583.4	1.6	19.0	295.9
cch second order	-138.4188242677	504.0	228.0	228.0	nan	19.0	8.4
diff evo	-138.4101022070	42572.4	0.0	0.0	nan	19.0	303.1
direct	-137.2806427569	17115.0	0.0	0.0	nan	19.0	107.4
direct with trim	-138.4101726271	17129.0	12.0	12.0	nan	19.0	112.0
dual anneal	-138.4101726262	38017.6	15.6	15.6	1.0	19.0	190.1
trust region	-138.4101726271	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.7
trust region repeats	-138.4101726271	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.3

Table 1962: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-173.4126461899	1621.8	1621.8	1621.8	1.4	19.0	340.6
cch second order	-173.4214150659	469.0	216.0	216.0	nan	19.0	9.5
diff evo	-173.4125785705	52603.2	0.0	0.0	nan	19.0	360.3
direct	-169.7810281808	16837.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.2
direct with trim	-173.4126458029	16851.0	12.0	12.0	nan	19.0	111.2
dual anneal	-173.4126458017	38031.2	29.2	29.2	1.0	19.0	289.8
trust region	-173.4126458029	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-173.4126458029	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.3

Table 1963: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-213.0578480973	1671.2	1671.2	1671.2	1.2	19.0	414.6
cch second order	-213.0578480474	242.0	125.0	125.0	nan	19.0	7.3
diff evo	-213.0575231776	44577.0	0.0	0.0	nan	19.0	262.3
direct	-209.5780082808	17265.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.0
direct with trim	-213.0578480973	17278.0	11.0	11.0	nan	19.0	85.2
dual anneal	-213.0578480957	38023.2	21.2	21.2	1.0	19.0	241.9
trust region	-213.0578480973	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.6
trust region repeats	-213.0578480973	262.0	262.0	262.0	1.0	19.0	3.1

Table 1964: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-257.4977506053	1729.6	1729.6	1729.6	1.2	19.0	333.4
cch second order	-257.4977505692	205.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-257.4975778099	52642.2	0.0	0.0	nan	19.0	412.7
direct	-251.9436987280	18015.0	0.0	0.0	nan	19.0	122.4
direct with trim	-257.4977506053	18031.0	14.0	14.0	nan	19.0	109.2
dual anneal	-257.4977506033	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	223.3
trust region	-257.4977506053	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	8.8
trust region repeats	-257.4977506053	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.2

Table 1965: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-306.8762907144	1795.4	1795.4	1795.4	1.2	19.0	332.8
cch second order	-306.8762889415	283.0	144.0	144.0	nan	19.0	6.5
diff evo	-306.8761504665	67321.8	0.0	0.0	nan	19.0	496.3
direct	-302.6404464076	16955.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.2
direct with trim	-306.8762889982	16967.0	10.0	10.0	nan	19.0	98.7
dual anneal	-306.8762889957	38024.0	22.0	22.0	1.0	19.0	238.4
trust region	-306.8762889982	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.2
trust region repeats	-306.8762907144	272.0	272.0	272.0	2.0	19.0	3.2

Table 1966: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-361.3303498430	1828.0	1828.0	1828.0	1.2	19.0	417.9
cch second order	-361.3303498407	211.0	114.0	114.0	nan	19.0	5.6
diff evo	-361.3301952744	49834.2	0.0	0.0	nan	19.0	347.7
direct	-358.3730871965	16587.0	0.0	0.0	nan	19.0	90.3
direct with trim	-361.3303498429	16599.0	10.0	10.0	nan	19.0	99.9
dual anneal	-361.3303498398	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	208.5
trust region	-361.3303498429	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-361.3303498429	269.0	269.0	269.0	1.0	19.0	3.4

Table 1967: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-420.9905754175	1907.8	1907.8	1907.8	2.8	19.0	416.4
cch second order	-420.9905754131	452.0	217.0	217.0	nan	19.0	10.4
diff evo	-420.9904881359	50559.6	0.0	0.0	nan	19.0	371.4
direct	-417.3214656546	17993.0	0.0	0.0	nan	19.0	93.9
direct with trim	-420.9905754175	18007.0	12.0	12.0	nan	19.0	115.1
dual anneal	-420.9905754137	38029.2	27.2	27.2	1.0	19.0	219.7
trust region	-420.9905754175	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	6.5
trust region repeats	-420.9905754175	274.0	274.0	274.0	1.0	19.0	3.5

Table 1968: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-485.9820300695	1907.2	1907.2	1907.2	2.2	19.0	432.7
cch second order	-485.9820300905	484.0	230.0	230.0	nan	19.0	10.0
diff evo	-485.9818296862	48960.6	0.0	0.0	nan	19.0	304.7
direct	-481.9174525652	16061.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.4
direct with trim	-485.9820225654	16072.0	9.0	9.0	nan	19.0	113.0
dual anneal	-485.9820300649	38024.6	22.6	22.6	1.0	19.0	264.9
trust region	-485.9820300694	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.6
trust region repeats	-485.9820300694	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	3.0

Table 1969: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-556.4247589478	1897.4	1897.4	1897.4	1.4	19.0	407.4
cch second order	-556.4247588926	178.0	97.0	97.0	nan	19.0	7.0
diff evo	-556.4245180470	52821.6	0.0	0.0	nan	19.0	344.0
direct	-478.3491136491	17493.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.9
direct with trim	-556.4247589478	17533.0	38.0	38.0	nan	19.0	104.9
dual anneal	-556.4247589425	38032.0	30.0	30.0	1.0	19.0	213.2
trust region	-556.4247589478	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	3.2
trust region repeats	-556.4247589478	273.0	273.0	273.0	1.0	19.0	3.1

Table 1970: Ar

69.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.6571135784
He	trust region repeats	-3.1805846507
Li	basin hopping	-8.1482688052
Be	basin hopping	-15.9682351358
B	trust region repeats	-26.9683629017
C	cch second order	-41.4274795017
N	basin hopping	-59.5905825179
O	cch second order	-81.6776401910
F	basin hopping	-107.8891924874
Ne	cch second order	-138.4188242677
Na	cch second order	-173.4214150659
Mg	basin hopping	-213.0578480973
Al	trust region repeats	-257.4977506053
Si	trust region repeats	-306.8762907144
P	basin hopping	-361.3303498430
S	basin hopping	-420.9905754175
Cl	cch second order	-485.9820300905
Ar	basin hopping	-556.4247589478

Table 1971: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	13.6	13.6	13.6	nan	-181.0827709639	4.7
trust region repeats	270.6	270.6	270.6	1.1	-181.0827711160	3.4
cch second order	275.2	134.5	134.5	nan	-181.0837388306	7.3
basin hopping	1674.7	1674.7	1674.7	1.6	-181.0827712326	344.5
direct	17408.6	0.0	0.0	nan	-174.8390072880	98.0
direct with trim	17422.8	12.2	12.2	nan	-181.0827171761	106.8
dual anneal	38020.9	18.9	18.9	1.0	-181.0827710141	238.7
diff evo	55648.7	0.0	0.0	nan	-181.0826470034	377.1

Table 1972: Average (all systems)

70 ets 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

70.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 1973: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661239853	1502.8	1502.8	1502.8	1.0	19.0	351.4
He	-3.2215657714	1302.0	1302.0	1302.0	1.2	19.0	312.3
Li	-8.2486131429	1406.8	1406.8	1406.8	2.0	19.0	380.2
Be	-16.1579783672	1403.0	1403.0	1403.0	2.4	19.0	353.7
B	-27.2794590974	1424.8	1424.8	1424.8	3.4	19.0	328.5
C	-41.8933820200	1446.0	1446.0	1446.0	1.8	19.0	336.1
N	-60.2459883339	1443.6	1443.6	1443.6	1.4	19.0	364.3
O	-82.5583035985	1526.2	1526.2	1526.2	1.4	19.0	318.8
F	-109.0317887219	1538.4	1538.4	1538.4	2.2	19.0	348.6
Ne	-139.8521922526	1619.0	1619.0	1619.0	1.0	19.0	542.8
Na	-175.1923107932	1614.4	1614.4	1614.4	1.2	19.0	471.1
Mg	-215.2140422164	1671.0	1671.0	1671.0	1.2	19.0	350.9
Al	-260.0699643557	1715.4	1715.4	1715.4	1.2	19.0	381.8
Si	-309.9045673834	1759.4	1759.4	1759.4	1.6	19.0	494.8
P	-364.8552511151	1793.6	1793.6	1793.6	1.0	19.0	318.7
S	-425.0531393830	1827.6	1827.6	1827.6	1.0	19.0	467.3
Cl	-490.6237439174	1952.8	1952.8	1952.8	1.6	19.0	411.4
Ar	-561.6875190410	1946.2	1946.2	1946.2	1.0	19.0	522.2

Table 1974: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661013927	270.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.2
He	-3.2215657217	255.0	109.0	109.0	nan	19.0	7.8
Li	-8.2486131737	191.0	96.0	96.0	nan	19.0	6.4
Be	-16.1579783257	242.0	117.0	117.0	nan	19.0	7.4
B	-27.2794590419	299.0	140.0	140.0	nan	19.0	8.9
C	-41.8933820025	236.0	124.0	124.0	nan	19.0	7.7
N	-60.2459883404	158.0	81.0	81.0	nan	19.0	6.4
O	-82.5583036219	184.0	89.0	89.0	nan	19.0	6.7
F	-109.0403934455	472.0	217.0	217.0	nan	19.0	11.2
Ne	-139.8609273876	534.0	221.0	221.0	nan	19.0	11.7
Na	-166.8810751007	379.0	187.0	187.0	nan	19.0	10.1
Mg	-215.2140422536	226.0	113.0	113.0	nan	19.0	7.3
Al	-260.0699632318	213.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.1
Si	-309.9045658310	381.0	176.0	176.0	nan	19.0	9.5
P	-364.8552510948	344.0	155.0	155.0	nan	19.0	8.7
S	-425.0531393648	268.0	122.0	122.0	nan	19.0	7.7
Cl	-490.6237411305	422.0	199.0	199.0	nan	19.0	10.6
Ar	-561.6875190106	264.0	119.0	119.0	nan	19.0	8.0

Table 1975: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661237012	34156.2	0.0	0.0	nan	19.0	242.0
He	-3.2215650954	66682.2	0.0	0.0	nan	19.0	422.2
Li	-8.2486115747	77493.0	0.0	0.0	nan	19.0	574.3
Be	-16.1579717452	66300.0	0.0	0.0	nan	19.0	430.6
B	-27.2794506826	67836.6	0.0	0.0	nan	19.0	455.1
C	-41.8933381828	60941.4	0.0	0.0	nan	19.0	457.7
N	-60.2459717311	66424.8	0.0	0.0	nan	19.0	528.2
O	-82.5580871058	43765.8	0.0	0.0	nan	19.0	309.4
F	-109.0313883870	38337.0	0.0	0.0	nan	19.0	266.7
Ne	-139.8521143369	47244.6	0.0	0.0	nan	19.0	379.3
Na	-175.1921659755	39850.2	0.0	0.0	nan	19.0	276.4
Mg	-215.2138901198	42057.6	0.0	0.0	nan	19.0	290.2
Al	-260.0697918430	51378.6	0.0	0.0	nan	19.0	361.4
Si	-309.9044008303	46527.0	0.0	0.0	nan	19.0	356.6
P	-364.8550448899	50076.0	0.0	0.0	nan	19.0	357.9
S	-425.0528886975	47119.8	0.0	0.0	nan	19.0	293.9
Cl	-490.6236870327	49834.2	0.0	0.0	nan	19.0	373.5
Ar	-561.6870586784	44241.6	0.0	0.0	nan	19.0	294.3

Table 1976: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6614643616	12113.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.0
He	-3.2154929222	18453.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.3
Li	-8.1963368580	17933.0	0.0	0.0	nan	19.0	134.5
Be	-16.0083113786	16453.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.6
B	-27.2349530466	17639.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.7
C	-41.6248591404	17429.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.1
N	-59.3462777857	17705.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.7
O	-79.4801822532	17847.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.1
F	-107.8672887109	18531.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.1
Ne	-138.9053646672	16905.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
Na	-171.4982492574	16385.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.3
Mg	-211.9419494104	17523.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.3
Al	-252.9770524680	18045.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.4
Si	-306.4450485734	17715.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.9
P	-361.8287945412	16943.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.2
S	-421.3248651097	18177.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.1
Cl	-486.5665359554	16341.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.1
Ar	-483.5787768252	16799.0	0.0	0.0	nan	19.0	120.7

Table 1977: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6659987612	12121.0	6.0	6.0	nan	19.0	85.8
He	-3.2215657712	18461.0	6.0	6.0	nan	19.0	90.4
Li	-8.2486131427	17941.0	6.0	6.0	nan	19.0	103.8
Be	-16.1579782956	16461.0	6.0	6.0	nan	19.0	105.7
B	-27.2794589828	17650.0	9.0	9.0	nan	19.0	109.9
C	-41.8933820199	17438.0	7.0	7.0	nan	19.0	107.4
N	-60.2459883339	17715.0	8.0	8.0	nan	19.0	95.9
O	-82.5583035985	17865.0	16.0	16.0	nan	19.0	115.6
F	-109.0317887219	18550.8	17.8	17.8	nan	19.0	99.0
Ne	-139.8521922526	16916.0	9.0	9.0	nan	19.0	102.2
Na	-175.1923105849	16398.0	11.0	11.0	nan	19.0	107.5
Mg	-215.2140422164	17538.0	13.0	13.0	nan	19.0	125.3
Al	-260.0699632925	18060.6	13.6	13.6	nan	19.0	108.9
Si	-309.9045658849	17726.0	9.0	9.0	nan	19.0	108.4
P	-364.8552511151	16955.0	10.0	10.0	nan	19.0	86.2
S	-425.0531393830	18190.0	11.0	11.0	nan	19.0	77.1
Cl	-490.6237411057	16352.0	9.0	9.0	nan	19.0	88.5
Ar	-561.6875190410	16839.8	38.8	38.8	nan	19.0	108.9

Table 1978: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661239845	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	244.7
He	-3.2215657712	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	257.2
Li	-8.2486131427	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	247.3
Be	-16.1579782956	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	245.7
B	-27.2794589827	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	261.9
C	-41.8933820197	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	262.2
N	-60.2459883335	38021.4	19.4	19.4	1.0	19.0	233.9
O	-82.5583035979	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	243.2
F	-109.0317887212	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	247.2
Ne	-139.8521922516	38019.4	17.4	17.4	1.0	19.0	254.3
Na	-175.1923105835	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	259.7
Mg	-215.2140422146	38029.0	27.0	27.0	1.0	19.0	224.5
Al	-260.0699632904	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	264.8
Si	-309.9045658822	38029.6	27.6	27.6	1.0	19.0	256.6
P	-364.8552511118	38031.8	29.8	29.8	1.0	19.0	217.9
S	-425.0531393790	38031.6	29.6	29.6	1.0	19.0	290.8
Cl	-490.6237411010	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	251.8
Ar	-561.6875222824	38025.8	23.8	23.8	1.0	19.0	227.5

Table 1979: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661239845	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.9
He	-3.2215657712	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.0
Li	-8.2486131427	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.3
Be	-16.1579782956	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.8
B	-27.2794589828	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.6
C	-41.8933820199	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
N	-60.2459883339	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.2
O	-82.5583035985	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.2
F	-109.0317887219	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.2
Ne	-139.8521922526	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	4.2
Na	-175.1923105849	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.6
Mg	-215.2140422164	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.5
Al	-260.0699632925	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.1
Si	-309.9045658849	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	12.5
P	-364.8552511151	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.5
S	-425.0531393830	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.4
Cl	-490.6237411057	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.2
Ar	-561.6875190409	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.1

Table 1980: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6661239845	207.0	207.0	207.0	1.0	19.0	3.8
He	-3.2215657712	226.0	226.0	226.0	1.0	19.0	3.2
Li	-8.2486131428	234.0	234.0	234.0	1.0	19.0	3.2
Be	-16.1579782956	240.0	240.0	240.0	1.0	19.0	3.6
B	-27.2794590974	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.4
C	-41.8933820199	247.0	247.0	247.0	1.0	19.0	2.8
N	-60.2459883339	253.0	253.0	253.0	1.0	19.0	3.5
O	-82.5583035985	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.2
F	-109.0317887219	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	3.3
Ne	-139.8521922526	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.5
Na	-175.1923105849	259.0	259.0	259.0	1.0	19.0	3.1
Mg	-215.2140422164	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.2
Al	-260.0699632925	265.0	265.0	265.0	1.0	19.0	3.5
Si	-309.9045658849	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	3.2
P	-364.8552511151	267.0	267.0	267.0	1.0	19.0	3.3
S	-425.0531393830	270.0	270.0	270.0	2.0	19.0	3.1
Cl	-490.6237411057	269.0	269.0	269.0	2.0	19.0	3.2
Ar	-561.6875190409	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.1

Table 1981: trust region repeats

70.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.6661239853	1502.8	1502.8	1502.8	1.0	19.0	351.4
cch second order	-0.6661013927	270.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.2
diff evo	-0.6661237012	34156.2	0.0	0.0	nan	19.0	242.0
direct	-0.6614643616	12113.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.0
direct with trim	-0.6659987612	12121.0	6.0	6.0	nan	19.0	85.8
dual anneal	-0.6661239845	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	244.7
trust region	-0.6661239845	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.9
trust region repeats	-0.6661239845	207.0	207.0	207.0	1.0	19.0	3.8

Table 1982: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-3.2215657714	1302.0	1302.0	1302.0	1.2	19.0	312.3
cch second order	-3.2215657217	255.0	109.0	109.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-3.2215650954	66682.2	0.0	0.0	nan	19.0	422.2
direct	-3.2154929222	18453.0	0.0	0.0	nan	19.0	118.3
direct with trim	-3.2215657712	18461.0	6.0	6.0	nan	19.0	90.4
dual anneal	-3.2215657712	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	257.2
trust region	-3.2215657712	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-3.2215657712	226.0	226.0	226.0	1.0	19.0	3.2

Table 1983: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.2486131429	1406.8	1406.8	1406.8	2.0	19.0	380.2
cch second order	-8.2486131737	191.0	96.0	96.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-8.2486115747	77493.0	0.0	0.0	nan	19.0	574.3
direct	-8.1963368580	17933.0	0.0	0.0	nan	19.0	134.5
direct with trim	-8.2486131427	17941.0	6.0	6.0	nan	19.0	103.8
dual anneal	-8.2486131427	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	247.3
trust region	-8.2486131427	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-8.2486131428	234.0	234.0	234.0	1.0	19.0	3.2

Table 1984: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-16.1579783672	1403.0	1403.0	1403.0	2.4	19.0	353.7
cch second order	-16.1579783257	242.0	117.0	117.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-16.1579717452	66300.0	0.0	0.0	nan	19.0	430.6
direct	-16.0083113786	16453.0	0.0	0.0	nan	19.0	115.6
direct with trim	-16.1579782956	16461.0	6.0	6.0	nan	19.0	105.7
dual anneal	-16.1579782956	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	245.7
trust region	-16.1579782956	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-16.1579782956	240.0	240.0	240.0	1.0	19.0	3.6

Table 1985: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-27.2794590974	1424.8	1424.8	1424.8	3.4	19.0	328.5
cch second order	-27.2794590419	299.0	140.0	140.0	nan	19.0	8.9
diff evo	-27.2794506826	67836.6	0.0	0.0	nan	19.0	455.1
direct	-27.2349530466	17639.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.7
direct with trim	-27.2794589828	17650.0	9.0	9.0	nan	19.0	109.9
dual anneal	-27.2794589827	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	261.9
trust region	-27.2794589828	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.6
trust region repeats	-27.2794590974	244.0	244.0	244.0	1.0	19.0	3.4

Table 1986: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-41.8933820200	1446.0	1446.0	1446.0	1.8	19.0	336.1
cch second order	-41.8933820025	236.0	124.0	124.0	nan	19.0	7.7
diff evo	-41.8933381828	60941.4	0.0	0.0	nan	19.0	457.7
direct	-41.6248591404	17429.0	0.0	0.0	nan	19.0	121.1
direct with trim	-41.8933820199	17438.0	7.0	7.0	nan	19.0	107.4
dual anneal	-41.8933820197	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	262.2
trust region	-41.8933820199	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-41.8933820199	247.0	247.0	247.0	1.0	19.0	2.8

Table 1987: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-60.2459883339	1443.6	1443.6	1443.6	1.4	19.0	364.3
cch second order	-60.2459883404	158.0	81.0	81.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-60.2459717311	66424.8	0.0	0.0	nan	19.0	528.2
direct	-59.3462777857	17705.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.7
direct with trim	-60.2459883339	17715.0	8.0	8.0	nan	19.0	95.9
dual anneal	-60.2459883335	38021.4	19.4	19.4	1.0	19.0	233.9
trust region	-60.2459883339	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-60.2459883339	253.0	253.0	253.0	1.0	19.0	3.5

Table 1988: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-82.5583035985	1526.2	1526.2	1526.2	1.4	19.0	318.8
cch second order	-82.5583036219	184.0	89.0	89.0	nan	19.0	6.7
diff evo	-82.5580871058	43765.8	0.0	0.0	nan	19.0	309.4
direct	-79.4801822532	17847.0	0.0	0.0	nan	19.0	110.1
direct with trim	-82.5583035985	17865.0	16.0	16.0	nan	19.0	115.6
dual anneal	-82.5583035979	38013.6	11.6	11.6	1.0	19.0	243.2
trust region	-82.5583035985	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-82.5583035985	255.0	255.0	255.0	1.0	19.0	3.2

Table 1989: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-109.0317887219	1538.4	1538.4	1538.4	2.2	19.0	348.6
cch second order	-109.0403934455	472.0	217.0	217.0	nan	19.0	11.2
diff evo	-109.0313883870	38337.0	0.0	0.0	nan	19.0	266.7
direct	-107.8672887109	18531.0	0.0	0.0	nan	19.0	105.1
direct with trim	-109.0317887219	18550.8	17.8	17.8	nan	19.0	99.0
dual anneal	-109.0317887212	38013.2	11.2	11.2	1.0	19.0	247.2
trust region	-109.0317887219	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-109.0317887219	254.0	254.0	254.0	1.0	19.0	3.3

Table 1990: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-139.8521922526	1619.0	1619.0	1619.0	1.0	19.0	542.8
cch second order	-139.8609273876	534.0	221.0	221.0	nan	19.0	11.7
diff evo	-139.8521143369	47244.6	0.0	0.0	nan	19.0	379.3
direct	-138.9053646672	16905.0	0.0	0.0	nan	19.0	96.2
direct with trim	-139.8521922526	16916.0	9.0	9.0	nan	19.0	102.2
dual anneal	-139.8521922516	38019.4	17.4	17.4	1.0	19.0	254.3
trust region	-139.8521922526	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-139.8521922526	257.0	257.0	257.0	1.0	19.0	3.5

Table 1991: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-175.1923107932	1614.4	1614.4	1614.4	1.2	19.0	471.1
cch second order	-166.8810751007	379.0	187.0	187.0	nan	19.0	10.1
diff evo	-175.1921659755	39850.2	0.0	0.0	nan	19.0	276.4
direct	-171.4982492574	16385.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.3
direct with trim	-175.1923105849	16398.0	11.0	11.0	nan	19.0	107.5
dual anneal	-175.1923105835	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	259.7
trust region	-175.1923105849	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.6
trust region repeats	-175.1923105849	259.0	259.0	259.0	1.0	19.0	3.1

Table 1992: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-215.2140422164	1671.0	1671.0	1671.0	1.2	19.0	350.9
cch second order	-215.2140422536	226.0	113.0	113.0	nan	19.0	7.3
diff evo	-215.2138901198	42057.6	0.0	0.0	nan	19.0	290.2
direct	-211.9419494104	17523.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.3
direct with trim	-215.2140422164	17538.0	13.0	13.0	nan	19.0	125.3
dual anneal	-215.2140422146	38029.0	27.0	27.0	1.0	19.0	224.5
trust region	-215.2140422164	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-215.2140422164	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	3.2

Table 1993: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-260.0699643557	1715.4	1715.4	1715.4	1.2	19.0	381.8
cch second order	-260.0699632318	213.0	112.0	112.0	nan	19.0	7.1
diff evo	-260.0697918430	51378.6	0.0	0.0	nan	19.0	361.4
direct	-252.9770524680	18045.0	0.0	0.0	nan	19.0	101.4
direct with trim	-260.0699632925	18060.6	13.6	13.6	nan	19.0	108.9
dual anneal	-260.0699632904	38028.8	26.8	26.8	1.0	19.0	264.8
trust region	-260.0699632925	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-260.0699632925	265.0	265.0	265.0	1.0	19.0	3.5

Table 1994: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-309.9045673834	1759.4	1759.4	1759.4	1.6	19.0	494.8
cch second order	-309.9045658310	381.0	176.0	176.0	nan	19.0	9.5
diff evo	-309.9044008303	46527.0	0.0	0.0	nan	19.0	356.6
direct	-306.4450485734	17715.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.9
direct with trim	-309.9045658849	17726.0	9.0	9.0	nan	19.0	108.4
dual anneal	-309.9045658822	38029.6	27.6	27.6	1.0	19.0	256.6
trust region	-309.9045658849	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	12.5
trust region repeats	-309.9045658849	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	3.2

Table 1995: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-364.8552511151	1793.6	1793.6	1793.6	1.0	19.0	318.7
cch second order	-364.8552510948	344.0	155.0	155.0	nan	19.0	8.7
diff evo	-364.8550448899	50076.0	0.0	0.0	nan	19.0	357.9
direct	-361.8287945412	16943.0	0.0	0.0	nan	19.0	100.2
direct with trim	-364.8552511151	16955.0	10.0	10.0	nan	19.0	86.2
dual anneal	-364.8552511118	38031.8	29.8	29.8	1.0	19.0	217.9
trust region	-364.8552511151	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-364.8552511151	267.0	267.0	267.0	1.0	19.0	3.3

Table 1996: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-425.0531393830	1827.6	1827.6	1827.6	1.0	19.0	467.3
cch second order	-425.0531393648	268.0	122.0	122.0	nan	19.0	7.7
diff evo	-425.0528886975	47119.8	0.0	0.0	nan	19.0	293.9
direct	-421.3248651097	18177.0	0.0	0.0	nan	19.0	106.1
direct with trim	-425.0531393830	18190.0	11.0	11.0	nan	19.0	77.1
dual anneal	-425.0531393790	38031.6	29.6	29.6	1.0	19.0	290.8
trust region	-425.0531393830	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	4.4
trust region repeats	-425.0531393830	270.0	270.0	270.0	2.0	19.0	3.1

Table 1997: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-490.6237439174	1952.8	1952.8	1952.8	1.6	19.0	411.4
cch second order	-490.6237411305	422.0	199.0	199.0	nan	19.0	10.6
diff evo	-490.6236870327	49834.2	0.0	0.0	nan	19.0	373.5
direct	-486.5665359554	16341.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.1
direct with trim	-490.6237411057	16352.0	9.0	9.0	nan	19.0	88.5
dual anneal	-490.6237411010	38026.6	24.6	24.6	1.0	19.0	251.8
trust region	-490.6237411057	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-490.6237411057	269.0	269.0	269.0	2.0	19.0	3.2

Table 1998: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-561.6875190410	1946.2	1946.2	1946.2	1.0	19.0	522.2
cch second order	-561.6875190106	264.0	119.0	119.0	nan	19.0	8.0
diff evo	-561.6870586784	44241.6	0.0	0.0	nan	19.0	294.3
direct	-483.5787768252	16799.0	0.0	0.0	nan	19.0	120.7
direct with trim	-561.6875190410	16839.8	38.8	38.8	nan	19.0	108.9
dual anneal	-561.6875222824	38025.8	23.8	23.8	1.0	19.0	227.5
trust region	-561.6875190409	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-561.6875190409	275.0	275.0	275.0	1.0	19.0	3.1

Table 1999: Ar

70.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.6661239853
He	basin hopping	-3.2215657714
Li	cch second order	-8.2486131737
Be	basin hopping	-16.1579783672
B	trust region repeats	-27.2794590974
C	basin hopping	-41.8933820200
N	cch second order	-60.2459883404
O	cch second order	-82.5583036219
F	cch second order	-109.0403934455
Ne	cch second order	-139.8609273876
Na	basin hopping	-175.1923107932
Mg	cch second order	-215.2140422536
Al	basin hopping	-260.0699643557
Si	basin hopping	-309.9045673834
P	basin hopping	-364.8552511151
S	basin hopping	-425.0531393830
Cl	basin hopping	-490.6237439174
Ar	dual anneal	-561.6875222824

Table 2000: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	12.9	12.9	12.9	nan	-182.8753293182	4.8
trust region repeats	252.5	252.5	252.5	1.1	-182.8753293245	3.3
cch second order	296.6	138.3	138.3	nan	-182.4145560817	8.3
basin hopping	1605.2	1605.2	1605.2	1.5	-182.8753296387	391.9
direct	17163.1	0.0	0.0	nan	-176.5945446258	106.3
direct with trim	17176.6	11.5	11.5	nan	-182.8753223613	101.5
dual anneal	38020.7	18.7	18.7	1.0	-182.8753294970	249.5
diff evo	52237.0	0.0	0.0	nan	-182.8751972561	370.5

Table 2001: Average (all systems)

71   ets 1.0xLDA X+1.00xTF KE+0.20xVW KE

71.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 2002: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666231866	1509.2	1509.2	1509.2	2.4	19.0	291.8
He	-2.8183542972	1342.2	1342.2	1342.2	3.0	19.0	346.9
Li	-7.3227095970	1328.4	1328.4	1328.4	2.8	19.0	307.9
Be	-14.4840846198	1341.0	1341.0	1341.0	1.6	19.0	311.8
B	-24.6283935908	1341.2	1341.2	1341.2	1.6	19.0	369.4
C	-38.0332344160	1355.0	1355.0	1355.0	1.0	19.0	288.3
N	-54.9427944061	1362.2	1362.2	1362.2	2.2	19.0	272.8
O	-75.5764691969	1693.2	1693.2	1693.2	4.6	19.0	412.9
F	-100.1343968405	1502.8	1502.8	1502.8	1.4	19.0	436.4
Ne	-128.8012227667	2065.2	2065.2	2065.2	1.4	19.0	299.6
Na	-161.7488095284	1432.0	1432.0	1432.0	2.0	19.0	338.2
Mg	-199.1382559621	1453.8	1453.8	1453.8	1.6	19.0	315.7
Al	-241.1214478061	1469.0	1469.0	1469.0	1.4	19.0	384.8
Si	-287.8422778451	1503.4	1503.4	1503.4	1.6	19.0	394.3
P	-339.4376254846	1483.4	1483.4	1483.4	1.4	19.0	396.4
S	-396.0381566300	1506.6	1506.6	1506.6	1.8	19.0	364.7
Cl	-457.7689863752	1568.0	1568.0	1568.0	1.4	19.0	355.9
Ar	-524.7502349587	1561.2	1561.2	1561.2	1.6	19.0	443.6

Table 2003: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666232048	158.0	85.0	85.0	nan	19.0	6.7
He	-2.8183543406	199.0	103.0	103.0	nan	19.0	6.9
Li	-7.3227092570	227.0	94.0	94.0	nan	19.0	6.9
Be	-14.4840838475	190.0	89.0	89.0	nan	19.0	6.2
B	-24.6283923885	211.0	106.0	106.0	nan	19.0	6.8
C	-38.0332344277	157.0	88.0	88.0	nan	19.0	6.4
N	-54.9427925219	168.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.5
O	-75.5764691560	155.0	86.0	86.0	nan	19.0	6.0
F	-100.1343968635	276.0	92.0	92.0	nan	19.0	7.2
Ne	-128.8012227216	206.0	107.0	107.0	nan	19.0	6.3
Na	-161.7488094515	202.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.7
Mg	-199.1382530732	251.0	115.0	115.0	nan	19.0	7.4
Al	-241.1214447835	197.0	107.0	107.0	nan	19.0	6.9
Si	-287.8422747035	227.0	120.0	120.0	nan	19.0	6.5
P	-339.4376221842	195.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.8
S	-396.0381566190	233.0	113.0	113.0	nan	19.0	7.4
Cl	-457.7689863590	192.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.9
Ar	-524.7502349829	173.0	94.0	94.0	nan	19.0	6.4

Table 2004: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666228845	30131.4	0.0	0.0	nan	19.0	200.8
He	-2.8183537985	46901.4	0.0	0.0	nan	19.0	337.1
Li	-7.3227079906	67563.6	0.0	0.0	nan	19.0	417.1
Be	-14.4840780381	48087.0	0.0	0.0	nan	19.0	308.4
B	-24.6283821081	62907.0	0.0	0.0	nan	19.0	405.2
C	-38.0331909164	39124.8	0.0	0.0	nan	19.0	225.7
N	-54.9427072896	50146.2	0.0	0.0	nan	19.0	309.4
O	-75.5764426739	36472.8	0.0	0.0	nan	19.0	198.2
F	-100.1343466014	42580.2	0.0	0.0	nan	19.0	289.0
Ne	-128.8011737571	37861.2	0.0	0.0	nan	19.0	272.0
Na	-161.7486830549	39592.8	0.0	0.0	nan	19.0	276.8
Mg	-199.1381502356	38633.4	0.0	0.0	nan	19.0	253.1
Al	-241.1212898075	46090.2	0.0	0.0	nan	19.0	256.8
Si	-287.8421188530	40770.6	0.0	0.0	nan	19.0	248.1
P	-339.4375278660	41503.8	0.0	0.0	nan	19.0	230.3
S	-396.0379928175	44194.8	0.0	0.0	nan	19.0	262.0
Cl	-457.7688640503	39936.0	0.0	0.0	nan	19.0	234.4
Ar	-524.7500808069	40201.2	0.0	0.0	nan	19.0	249.6

Table 2005: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5659199060	16301.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.9
He	-2.8105226259	16661.0	0.0	0.0	nan	19.0	86.7
Li	-7.3037425159	17171.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.9
Be	-14.4571439953	18389.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.8
B	-24.5813569373	17731.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.7
C	-37.8865802956	17713.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.1
N	-54.2028412503	17873.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.8
O	-75.2682635773	19079.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.6
F	-99.4018899496	17475.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.2
Ne	-128.1334742008	18111.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.9
Na	-158.5042602629	16765.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.8
Mg	-195.9642035556	16409.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.9
Al	-239.6562962950	17367.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
Si	-286.3200809338	16987.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.9
P	-336.7443005578	17975.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.9
S	-392.2309816272	17053.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
Cl	-453.6617571807	16059.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.5
Ar	-427.8253733483	16111.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9

Table 2006: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666231864	16308.0	5.0	5.0	nan	19.0	80.4
He	-2.8183542731	16671.0	8.0	8.0	nan	19.0	81.1
Li	-7.3227091918	17180.0	7.0	7.0	nan	19.0	74.7
Be	-14.4840838071	18398.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.8
B	-24.6283924068	17740.0	7.0	7.0	nan	19.0	99.0
C	-38.0332344160	17724.0	9.0	9.0	nan	19.0	104.4
N	-54.9427925973	17885.0	10.0	10.0	nan	19.0	71.8
O	-75.5764691969	19102.0	21.0	21.0	nan	19.0	97.9
F	-100.1343968405	17489.0	12.0	12.0	nan	19.0	94.8
Ne	-128.8012227667	18148.0	35.0	35.0	nan	19.0	115.3
Na	-161.7488068449	16780.0	13.0	13.0	nan	19.0	70.3
Mg	-199.1382531018	16423.0	12.0	12.0	nan	19.0	66.3
Al	-241.1214447859	17379.0	10.0	10.0	nan	19.0	77.3
Si	-287.8422778451	16999.0	10.0	10.0	nan	19.0	77.5
P	-339.4376254846	17988.0	11.0	11.0	nan	19.0	90.6
S	-396.0381532146	17063.0	8.0	8.0	nan	19.0	89.4
Cl	-457.7689828511	16070.0	9.0	9.0	nan	19.0	78.7
Ar	-524.7502313357	16142.0	29.0	29.0	nan	19.0	88.0

Table 2007: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666231863	38011.0	9.0	9.0	1.0	19.0	229.7
He	-2.8183542971	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	201.3
Li	-7.3227091918	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	234.7
Be	-14.4840838071	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	217.9
B	-24.6283924067	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	235.4
C	-38.0332344159	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	189.0
N	-54.9427925972	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	224.5
O	-75.5764691967	38032.6	30.6	30.6	1.0	19.0	186.0
F	-100.1343968401	38062.4	60.4	60.4	1.0	19.0	212.6
Ne	-128.8012227662	38028.6	26.6	26.6	1.0	19.0	209.3
Na	-161.7488068442	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	235.8
Mg	-199.1382531009	38025.0	23.0	23.0	1.0	19.0	242.5
Al	-241.1214447848	38027.0	25.0	25.0	1.0	19.0	236.8
Si	-287.8422746789	38018.6	16.6	16.6	1.0	19.0	226.3
P	-339.4376221868	38019.4	17.4	17.4	1.0	19.0	214.4
S	-396.0381532125	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	203.4
Cl	-457.7689828486	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	188.5
Ar	-524.7502313328	38020.0	18.0	18.0	1.0	19.0	222.4

Table 2008: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666231863	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.2
He	-2.8183542731	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.1
Li	-7.3227091919	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.3
Be	-14.4840838071	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.1
B	-24.6283924068	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.1
C	-38.0332344160	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.9
N	-54.9427925973	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.3
O	-75.5764691969	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	4.4
F	-100.1343968405	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.4
Ne	-128.8012227667	54.0	54.0	54.0	nan	19.0	9.0
Na	-161.7488068449	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.9
Mg	-199.1382531018	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	9.3
Al	-241.1214447859	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	3.8
Si	-287.8422746803	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	12.8
P	-339.4376221885	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.4
S	-396.0381532146	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	4.1
Cl	-457.7689828511	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
Ar	-524.7502313357	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.5

Table 2009: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5666231864	209.0	209.0	209.0	1.0	19.0	3.6
He	-2.8183542732	216.0	216.0	216.0	1.0	19.0	3.2
Li	-7.3227091919	230.0	230.0	230.0	1.0	19.0	3.6
Be	-14.4840846198	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	3.2
B	-24.6283935908	235.0	235.0	235.0	2.0	19.0	3.2
C	-38.0332344160	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.3
N	-54.9427925973	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	3.3
O	-75.5764691969	1239.0	1239.0	1239.0	2.0	19.0	17.6
F	-100.1343968405	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	3.2
Ne	-128.8012958291	833.0	833.0	833.0	3.0	19.0	7.6
Na	-161.7488095284	262.0	262.0	262.0	2.0	19.0	3.5
Mg	-199.1382559621	263.0	263.0	263.0	2.0	19.0	3.6
Al	-241.1214478061	261.0	261.0	261.0	2.0	19.0	3.0
Si	-287.8422778451	258.0	258.0	258.0	2.0	19.0	3.4
P	-339.4376221885	261.0	261.0	261.0	1.0	19.0	3.6
S	-396.0381532146	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.1
Cl	-457.7689828511	265.0	265.0	265.0	1.0	19.0	3.3
Ar	-524.7502313357	267.0	267.0	267.0	1.0	19.0	3.3

Table 2010: trust region repeats

71.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.5666231866	1509.2	1509.2	1509.2	2.4	19.0	291.8
cch second order	-0.5666232048	158.0	85.0	85.0	nan	19.0	6.7
diff evo	-0.5666228845	30131.4	0.0	0.0	nan	19.0	200.8
direct	-0.5659199060	16301.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.9
direct with trim	-0.5666231864	16308.0	5.0	5.0	nan	19.0	80.4
dual anneal	-0.5666231863	38011.0	9.0	9.0	1.0	19.0	229.7
trust region	-0.5666231863	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.2
trust region repeats	-0.5666231864	209.0	209.0	209.0	1.0	19.0	3.6

Table 2011: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.8183542972	1342.2	1342.2	1342.2	3.0	19.0	346.9
cch second order	-2.8183543406	199.0	103.0	103.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-2.8183537985	46901.4	0.0	0.0	nan	19.0	337.1
direct	-2.8105226259	16661.0	0.0	0.0	nan	19.0	86.7
direct with trim	-2.8183542731	16671.0	8.0	8.0	nan	19.0	81.1
dual anneal	-2.8183542971	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	201.3
trust region	-2.8183542731	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-2.8183542732	216.0	216.0	216.0	1.0	19.0	3.2

Table 2012: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-7.3227095970	1328.4	1328.4	1328.4	2.8	19.0	307.9
cch second order	-7.3227092570	227.0	94.0	94.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-7.3227079906	67563.6	0.0	0.0	nan	19.0	417.1
direct	-7.3037425159	17171.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.9
direct with trim	-7.3227091918	17180.0	7.0	7.0	nan	19.0	74.7
dual anneal	-7.3227091918	38013.4	11.4	11.4	1.0	19.0	234.7
trust region	-7.3227091919	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-7.3227091919	230.0	230.0	230.0	1.0	19.0	3.6

Table 2013: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-14.4840846198	1341.0	1341.0	1341.0	1.6	19.0	311.8
cch second order	-14.4840838475	190.0	89.0	89.0	nan	19.0	6.2
diff evo	-14.4840780381	48087.0	0.0	0.0	nan	19.0	308.4
direct	-14.4571439953	18389.0	0.0	0.0	nan	19.0	87.8
direct with trim	-14.4840838071	18398.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.8
dual anneal	-14.4840838071	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	217.9
trust region	-14.4840838071	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-14.4840846198	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	3.2

Table 2014: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-24.6283935908	1341.2	1341.2	1341.2	1.6	19.0	369.4
cch second order	-24.6283923885	211.0	106.0	106.0	nan	19.0	6.8
diff evo	-24.6283821081	62907.0	0.0	0.0	nan	19.0	405.2
direct	-24.5813569373	17731.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.7
direct with trim	-24.6283924068	17740.0	7.0	7.0	nan	19.0	99.0
dual anneal	-24.6283924067	38017.4	15.4	15.4	1.0	19.0	235.4
trust region	-24.6283924068	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-24.6283935908	235.0	235.0	235.0	2.0	19.0	3.2

Table 2015: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-38.0332344160	1355.0	1355.0	1355.0	1.0	19.0	288.3
cch second order	-38.0332344277	157.0	88.0	88.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-38.0331909164	39124.8	0.0	0.0	nan	19.0	225.7
direct	-37.8865802956	17713.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.1
direct with trim	-38.0332344160	17724.0	9.0	9.0	nan	19.0	104.4
dual anneal	-38.0332344159	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	189.0
trust region	-38.0332344160	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	3.9
trust region repeats	-38.0332344160	245.0	245.0	245.0	1.0	19.0	3.3

Table 2016: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-54.9427944061	1362.2	1362.2	1362.2	2.2	19.0	272.8
cch second order	-54.9427925219	168.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.5
diff evo	-54.9427072896	50146.2	0.0	0.0	nan	19.0	309.4
direct	-54.2028412503	17873.0	0.0	0.0	nan	19.0	81.8
direct with trim	-54.9427925973	17885.0	10.0	10.0	nan	19.0	71.8
dual anneal	-54.9427925972	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	224.5
trust region	-54.9427925973	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-54.9427925973	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	3.3

Table 2017: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-75.5764691969	1693.2	1693.2	1693.2	4.6	19.0	412.9
cch second order	-75.5764691560	155.0	86.0	86.0	nan	19.0	6.0
diff evo	-75.5764426739	36472.8	0.0	0.0	nan	19.0	198.2
direct	-75.2682635773	19079.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.6
direct with trim	-75.5764691969	19102.0	21.0	21.0	nan	19.0	97.9
dual anneal	-75.5764691967	38032.6	30.6	30.6	1.0	19.0	186.0
trust region	-75.5764691969	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	4.4
trust region repeats	-75.5764691969	1239.0	1239.0	1239.0	2.0	19.0	17.6

Table 2018: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-100.1343968405	1502.8	1502.8	1502.8	1.4	19.0	436.4
cch second order	-100.1343968635	276.0	92.0	92.0	nan	19.0	7.2
diff evo	-100.1343466014	42580.2	0.0	0.0	nan	19.0	289.0
direct	-99.4018899496	17475.0	0.0	0.0	nan	19.0	94.2
direct with trim	-100.1343968405	17489.0	12.0	12.0	nan	19.0	94.8
dual anneal	-100.1343968401	38062.4	60.4	60.4	1.0	19.0	212.6
trust region	-100.1343968405	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	4.4
trust region repeats	-100.1343968405	263.0	263.0	263.0	1.0	19.0	3.2

Table 2019: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-128.8012227667	2065.2	2065.2	2065.2	1.4	19.0	299.6
cch second order	-128.8012227216	206.0	107.0	107.0	nan	19.0	6.3
diff evo	-128.8011737571	37861.2	0.0	0.0	nan	19.0	272.0
direct	-128.1334742008	18111.0	0.0	0.0	nan	19.0	99.9
direct with trim	-128.8012227667	18148.0	35.0	35.0	nan	19.0	115.3
dual anneal	-128.8012227662	38028.6	26.6	26.6	1.0	19.0	209.3
trust region	-128.8012227667	54.0	54.0	54.0	nan	19.0	9.0
trust region repeats	-128.8012958291	833.0	833.0	833.0	3.0	19.0	7.6

Table 2020: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-161.7488095284	1432.0	1432.0	1432.0	2.0	19.0	338.2
cch second order	-161.7488094515	202.0	95.0	95.0	nan	19.0	6.7
diff evo	-161.7486830549	39592.8	0.0	0.0	nan	19.0	276.8
direct	-158.5042602629	16765.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.8
direct with trim	-161.7488068449	16780.0	13.0	13.0	nan	19.0	70.3
dual anneal	-161.7488068442	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	235.8
trust region	-161.7488068449	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	3.9
trust region repeats	-161.7488095284	262.0	262.0	262.0	2.0	19.0	3.5

Table 2021: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-199.1382559621	1453.8	1453.8	1453.8	1.6	19.0	315.7
cch second order	-199.1382530732	251.0	115.0	115.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-199.1381502356	38633.4	0.0	0.0	nan	19.0	253.1
direct	-195.9642035556	16409.0	0.0	0.0	nan	19.0	89.9
direct with trim	-199.1382531018	16423.0	12.0	12.0	nan	19.0	66.3
dual anneal	-199.1382531009	38025.0	23.0	23.0	1.0	19.0	242.5
trust region	-199.1382531018	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	9.3
trust region repeats	-199.1382559621	263.0	263.0	263.0	2.0	19.0	3.6

Table 2022: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-241.1214478061	1469.0	1469.0	1469.0	1.4	19.0	384.8
cch second order	-241.1214447835	197.0	107.0	107.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-241.1212898075	46090.2	0.0	0.0	nan	19.0	256.8
direct	-239.6562962950	17367.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.2
direct with trim	-241.1214447859	17379.0	10.0	10.0	nan	19.0	77.3
dual anneal	-241.1214447848	38027.0	25.0	25.0	1.0	19.0	236.8
trust region	-241.1214447859	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	3.8
trust region repeats	-241.1214478061	261.0	261.0	261.0	2.0	19.0	3.0

Table 2023: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-287.8422778451	1503.4	1503.4	1503.4	1.6	19.0	394.3
cch second order	-287.8422747035	227.0	120.0	120.0	nan	19.0	6.5
diff evo	-287.8421188530	40770.6	0.0	0.0	nan	19.0	248.1
direct	-286.3200809338	16987.0	0.0	0.0	nan	19.0	98.9
direct with trim	-287.8422778451	16999.0	10.0	10.0	nan	19.0	77.5
dual anneal	-287.8422746789	38018.6	16.6	16.6	1.0	19.0	226.3
trust region	-287.8422746803	22.0	22.0	22.0	nan	19.0	12.8
trust region repeats	-287.8422778451	258.0	258.0	258.0	2.0	19.0	3.4

Table 2024: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-339.4376254846	1483.4	1483.4	1483.4	1.4	19.0	396.4
cch second order	-339.4376221842	195.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.8
diff evo	-339.4375278660	41503.8	0.0	0.0	nan	19.0	230.3
direct	-336.7443005578	17975.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.9
direct with trim	-339.4376254846	17988.0	11.0	11.0	nan	19.0	90.6
dual anneal	-339.4376221868	38019.4	17.4	17.4	1.0	19.0	214.4
trust region	-339.4376221885	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	7.4
trust region repeats	-339.4376221885	261.0	261.0	261.0	1.0	19.0	3.6

Table 2025: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-396.0381566300	1506.6	1506.6	1506.6	1.8	19.0	364.7
cch second order	-396.0381566190	233.0	113.0	113.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-396.0379928175	44194.8	0.0	0.0	nan	19.0	262.0
direct	-392.2309816272	17053.0	0.0	0.0	nan	19.0	102.5
direct with trim	-396.0381532146	17063.0	8.0	8.0	nan	19.0	89.4
dual anneal	-396.0381532125	38023.6	21.6	21.6	1.0	19.0	203.4
trust region	-396.0381532146	20.0	20.0	20.0	nan	19.0	4.1
trust region repeats	-396.0381532146	264.0	264.0	264.0	1.0	19.0	3.1

Table 2026: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-457.7689863752	1568.0	1568.0	1568.0	1.4	19.0	355.9
cch second order	-457.7689863590	192.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.9
diff evo	-457.7688640503	39936.0	0.0	0.0	nan	19.0	234.4
direct	-453.6617571807	16059.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.5
direct with trim	-457.7689828511	16070.0	9.0	9.0	nan	19.0	78.7
dual anneal	-457.7689828486	38021.2	19.2	19.2	1.0	19.0	188.5
trust region	-457.7689828511	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-457.7689828511	265.0	265.0	265.0	1.0	19.0	3.3

Table 2027: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-524.7502349587	1561.2	1561.2	1561.2	1.6	19.0	443.6
cch second order	-524.7502349829	173.0	94.0	94.0	nan	19.0	6.4
diff evo	-524.7500808069	40201.2	0.0	0.0	nan	19.0	249.6
direct	-427.8253733483	16111.0	0.0	0.0	nan	19.0	76.9
direct with trim	-524.7502313357	16142.0	29.0	29.0	nan	19.0	88.0
dual anneal	-524.7502313328	38020.0	18.0	18.0	1.0	19.0	222.4
trust region	-524.7502313357	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-524.7502313357	267.0	267.0	267.0	1.0	19.0	3.3

Table 2028: Ar

71.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.5666232048
He	cch second order	-2.8183543406
Li	basin hopping	-7.3227095970
Be	basin hopping	-14.4840846198
B	trust region repeats	-24.6283935908
C	cch second order	-38.0332344277
N	basin hopping	-54.9427944061
O	basin hopping	-75.5764691969
F	cch second order	-100.1343968635
Ne	trust region repeats	-128.8012958291
Na	basin hopping	-161.7488095284
Mg	trust region repeats	-199.1382559621
Al	trust region repeats	-241.1214478061
Si	trust region repeats	-287.8422778451
P	basin hopping	-339.4376254846
S	basin hopping	-396.0381566300
Cl	basin hopping	-457.7689863752
Ar	cch second order	-524.7502349829

Table 2029: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	16.4	16.4	16.4	nan	-169.7307804270	5.4
cch second order	200.9	99.5	99.5	nan	-169.7307811603	6.7
trust region repeats	335.8	335.8	335.8	1.4	-169.7307852485	4.4
basin hopping	1489.9	1489.9	1489.9	1.9	-169.7307820838	351.7
direct	17290.6	0.0	0.0	nan	-163.0843882786	90.7
direct with trim	17304.9	12.4	12.4	nan	-169.7307807859	85.1
dual anneal	38022.0	20.0	20.0	1.0	-169.7307804275	217.2
diff evo	44038.8	0.0	0.0	nan	-169.7307063083	276.3

Table 2030: Average (all systems)

72   ets 1.0xLDA X+1.00xTF KE+1.00xVW KE

72.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245214	703.0	703.0	0.0	nan	19.0	8.3
He	-1.4774410088	706.0	706.0	0.0	nan	19.0	8.5
Li	-4.1054067466	989.0	989.0	0.0	nan	19.0	9.4
Be	-8.4921566738	970.0	970.0	0.0	nan	19.0	9.2
B	-14.9258397086	920.0	920.0	0.0	nan	19.0	8.3
C	-23.6568136571	806.0	806.0	0.0	nan	19.0	8.2
N	-34.9083528430	858.0	858.0	0.0	nan	19.0	7.7
O	-48.8831192804	878.0	878.0	0.0	nan	19.0	7.7
F	-65.7674346340	874.0	874.0	0.0	nan	19.0	7.7
Ne	-85.7342755802	860.0	860.0	0.0	nan	19.0	7.8
Na	-108.9454689311	848.0	848.0	0.0	nan	19.0	7.6
Mg	-135.5533558955	857.0	857.0	0.0	nan	19.0	7.7
Al	-165.7020884392	914.0	914.0	0.0	nan	19.0	7.8
Si	-199.5286616271	942.0	942.0	0.0	nan	19.0	8.0
P	-237.1637510075	953.0	953.0	0.0	nan	19.0	7.9
S	-278.7324025282	956.0	956.0	0.0	nan	19.0	8.0
Cl	-324.3546086379	954.0	954.0	0.0	nan	19.0	7.9
Ar	-374.1457949827	949.0	949.0	0.0	nan	19.0	7.9

Table 2031: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245252	1423.2	1423.2	1423.2	1.2	19.0	434.0
He	-1.4774410241	1333.8	1333.8	1333.8	1.2	19.0	482.3
Li	-4.1054067751	1322.4	1322.4	1322.4	1.0	19.0	448.7
Be	-8.4921567062	1291.0	1291.0	1291.0	1.2	19.0	437.5
B	-14.9258397421	1313.6	1313.6	1313.6	1.0	19.0	467.3
C	-23.6568136916	1319.8	1319.8	1319.8	1.6	19.0	479.9
N	-34.9083528772	1341.6	1341.6	1341.6	1.0	19.0	451.9
O	-48.8831193148	1324.8	1324.8	1324.8	1.2	19.0	463.6
F	-65.7674346687	1334.0	1334.0	1334.0	1.2	19.0	429.9
Ne	-85.7342756155	1313.2	1313.2	1313.2	1.2	19.0	388.7
Na	-108.9454689673	1504.4	1504.4	1504.4	1.2	19.0	481.6
Mg	-135.5533559319	1347.4	1347.4	1347.4	1.4	19.0	440.8
Al	-165.7020884748	1335.0	1335.0	1335.0	1.8	19.0	477.8
Si	-199.5286616628	1314.4	1314.4	1314.4	1.4	19.0	440.5
P	-237.1637510436	1313.2	1313.2	1313.2	1.4	19.0	439.4
S	-278.7324025649	1319.8	1319.8	1319.8	1.4	19.0	434.7
Cl	-324.3546086752	1343.0	1343.0	1343.0	1.0	19.0	426.2
Ar	-374.1457950209	1322.0	1322.0	1322.0	1.0	19.0	460.2

Table 2032: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245322	787.0	224.0	224.0	nan	19.0	10.5
He	-1.4774410106	240.0	127.0	127.0	nan	19.0	8.2
Li	-4.1054067224	179.0	99.0	99.0	nan	19.0	7.8
Be	-8.4921567184	164.0	87.0	87.0	nan	19.0	7.6
B	-14.9258396371	160.0	91.0	91.0	nan	19.0	7.6
C	-23.6568136986	147.0	82.0	82.0	nan	19.0	7.6
N	-34.9083528540	164.0	87.0	87.0	nan	19.0	7.6
O	-48.8831194033	178.0	88.0	88.0	nan	19.0	7.6
F	-65.7674346296	168.0	92.0	92.0	nan	19.0	7.8
Ne	-85.7342755787	153.0	86.0	86.0	nan	19.0	7.8
Na	-108.9454690301	156.0	88.0	88.0	nan	19.0	7.8
Mg	-135.5533557698	171.0	91.0	91.0	nan	19.0	7.9
Al	-165.7020883386	165.0	90.0	90.0	nan	19.0	7.5
Si	-199.5286614946	207.0	97.0	97.0	nan	19.0	8.0
P	-237.1637511717	205.0	105.0	105.0	nan	19.0	7.9
S	-278.7324024844	326.0	126.0	126.0	nan	19.0	8.7
Cl	-324.3546088623	236.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.9
Ar	-374.1457951031	245.0	116.0	116.0	nan	19.0	8.1

Table 2033: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618243106	22120.8	0.0	0.0	nan	19.0	108.3
He	-1.4774406017	24694.8	0.0	0.0	nan	19.0	142.6
Li	-4.1054058992	23345.4	0.0	0.0	nan	19.0	137.3
Be	-8.4921551807	26520.0	0.0	0.0	nan	19.0	154.9
B	-14.9258249873	22916.4	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
C	-23.6568049736	23423.4	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
N	-34.9083403605	23891.4	0.0	0.0	nan	19.0	140.9
O	-48.8831075722	25123.8	0.0	0.0	nan	19.0	141.8
F	-65.7674235294	23758.8	0.0	0.0	nan	19.0	138.3
Ne	-85.7342456439	24952.2	0.0	0.0	nan	19.0	146.8
Na	-108.9454370802	28337.4	0.0	0.0	nan	19.0	160.6
Mg	-135.5533132658	28345.2	0.0	0.0	nan	19.0	169.1
Al	-165.7020712609	26098.8	0.0	0.0	nan	19.0	150.8
Si	-199.5286299454	29523.0	0.0	0.0	nan	19.0	171.0
P	-237.1637041424	30303.0	0.0	0.0	nan	19.0	175.2
S	-278.7323468631	26013.0	0.0	0.0	nan	19.0	149.4
Cl	-324.3545091634	31644.6	0.0	0.0	nan	19.0	188.6
Ar	-374.1457033618	26091.0	0.0	0.0	nan	19.0	145.3

Table 2034: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2617746208	19229.0	0.0	0.0	nan	19.0	88.2
He	-1.4769234899	16643.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7
Li	-4.1037148625	19041.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.4
Be	-8.4892546124	17079.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.6
B	-14.8931494934	16681.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.6
C	-23.5978824533	16993.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.3
N	-34.7554522137	16791.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.4
O	-48.7594528561	16593.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.4
F	-65.6806072567	16313.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.1
Ne	-85.6058599380	16113.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.7
Na	-108.2170556875	16545.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.8
Mg	-135.0158885946	16849.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
Al	-165.2693763569	16703.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.1
Si	-199.2487248405	15667.0	0.0	0.0	nan	19.0	69.1
P	-236.8893808287	15217.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.1
S	-278.4387812728	19109.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.1
Cl	-321.3138709965	15409.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.9
Ar	-371.0180735053	16035.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7

Table 2035: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245249	19242.0	11.0	11.0	nan	19.0	85.2
He	-1.4774410238	16650.0	5.0	5.0	nan	19.0	79.3
Li	-4.1054067750	19051.0	8.0	8.0	nan	19.0	77.0
Be	-8.4921567061	17087.0	6.0	6.0	nan	19.0	74.2
B	-14.9258397420	16689.0	6.0	6.0	nan	19.0	75.5
C	-23.6568136915	17001.0	6.0	6.0	nan	19.0	95.7
N	-34.9083528772	16800.0	7.0	7.0	nan	19.0	69.0
O	-48.8831193147	16602.0	7.0	7.0	nan	19.0	69.3
F	-65.7674346686	16321.0	6.0	6.0	nan	19.0	93.6
Ne	-85.7342756154	16122.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.5
Na	-108.9454689672	16553.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.3
Mg	-135.5533559319	16858.0	7.0	7.0	nan	19.0	66.8
Al	-165.7020884747	16711.0	6.0	6.0	nan	19.0	78.4
Si	-199.5286616628	15676.0	7.0	7.0	nan	19.0	71.3
P	-237.1631792674	15228.0	9.0	9.0	nan	19.0	60.8
S	-278.7323995004	19118.0	7.0	7.0	nan	19.0	81.8
Cl	-324.3546086752	15418.0	7.0	7.0	nan	19.0	64.6
Ar	-374.1457950209	16045.0	8.0	8.0	nan	19.0	71.2

Table 2036: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245249	38011.6	9.6	9.6	1.0	19.0	177.9
He	-1.4774410238	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	172.1
Li	-4.1054067749	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	151.0
Be	-8.4921567061	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	157.1
B	-14.9258397420	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	143.0
C	-23.6568136915	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	163.1
N	-34.9083528771	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	162.2
O	-48.8831193147	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	154.2
F	-65.7674346685	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	173.1
Ne	-85.7342756153	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	177.8
Na	-108.9454689671	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	180.6
Mg	-135.5533559318	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	206.1
Al	-165.7020884745	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	196.2
Si	-199.5286616625	38018.0	16.0	16.0	1.0	19.0	176.5
P	-237.1637510433	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	188.2
S	-278.7324025645	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	174.3
Cl	-324.3546086747	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	199.6
Ar	-374.1457950203	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	164.4

Table 2037: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245249	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.5
He	-1.4774410238	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.4
Li	-4.1054067749	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	6.3
Be	-8.4921567061	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.4
B	-14.9258397420	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.3
C	-23.6568136915	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.4
N	-34.9083528772	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.3
O	-48.8831193147	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.3
F	-65.7674346686	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.3
Ne	-85.7342756154	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	6.4
Na	-108.9454689672	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
Mg	-135.5533559319	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.5
Al	-165.7020884747	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
Si	-199.5286616628	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	6.5
P	-237.1637510436	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
S	-278.7324025649	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	6.3
Cl	-324.3546086752	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.4
Ar	-374.1457950209	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.4

Table 2038: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2618245251	236.0	236.0	236.0	1.0	19.0	3.2
He	-1.4774410238	213.0	213.0	213.0	2.0	19.0	4.0
Li	-4.1054067750	218.0	218.0	218.0	1.0	19.0	3.3
Be	-8.4921567061	211.0	211.0	211.0	2.0	19.0	3.5
B	-14.9258397420	223.0	223.0	223.0	1.0	19.0	2.8
C	-23.6568136915	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.1
N	-34.9083528771	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.0
O	-48.8831193147	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	3.4
F	-65.7674346686	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	2.8
Ne	-85.7342756154	237.0	237.0	237.0	1.0	19.0	3.1
Na	-108.9454689672	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	3.1
Mg	-135.5533559319	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	3.2
Al	-165.7020884747	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	2.8
Si	-199.5286616628	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	2.8
P	-237.1637510436	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	2.8
S	-278.7324025649	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	2.9
Cl	-324.3546086752	246.0	246.0	246.0	1.0	19.0	2.9
Ar	-374.1457950209	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.2

Table 2039: trust region repeats

72.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2618245214	703.0	703.0	0.0	nan	19.0	8.3
basin hopping	-0.2618245252	1423.2	1423.2	1423.2	1.2	19.0	434.0
cch second order	-0.2618245322	787.0	224.0	224.0	nan	19.0	10.5
diff evo	-0.2618243106	22120.8	0.0	0.0	nan	19.0	108.3
direct	-0.2617746208	19229.0	0.0	0.0	nan	19.0	88.2
direct with trim	-0.2618245249	19242.0	11.0	11.0	nan	19.0	85.2
dual anneal	-0.2618245249	38011.6	9.6	9.6	1.0	19.0	177.9
trust region	-0.2618245249	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.5
trust region repeats	-0.2618245251	236.0	236.0	236.0	1.0	19.0	3.2

Table 2040: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4774410088	706.0	706.0	0.0	nan	19.0	8.5
basin hopping	-1.4774410241	1333.8	1333.8	1333.8	1.2	19.0	482.3
cch second order	-1.4774410106	240.0	127.0	127.0	nan	19.0	8.2
diff evo	-1.4774406017	24694.8	0.0	0.0	nan	19.0	142.6
direct	-1.4769234899	16643.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7
direct with trim	-1.4774410238	16650.0	5.0	5.0	nan	19.0	79.3
dual anneal	-1.4774410238	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	172.1
trust region	-1.4774410238	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-1.4774410238	213.0	213.0	213.0	2.0	19.0	4.0

Table 2041: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1054067466	989.0	989.0	0.0	nan	19.0	9.4
basin hopping	-4.1054067751	1322.4	1322.4	1322.4	1.0	19.0	448.7
cch second order	-4.1054067224	179.0	99.0	99.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-4.1054058992	23345.4	0.0	0.0	nan	19.0	137.3
direct	-4.1037148625	19041.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.4
direct with trim	-4.1054067750	19051.0	8.0	8.0	nan	19.0	77.0
dual anneal	-4.1054067749	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	151.0
trust region	-4.1054067749	8.0	8.0	8.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-4.1054067750	218.0	218.0	218.0	1.0	19.0	3.3

Table 2042: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4921566738	970.0	970.0	0.0	nan	19.0	9.2
basin hopping	-8.4921567062	1291.0	1291.0	1291.0	1.2	19.0	437.5
cch second order	-8.4921567184	164.0	87.0	87.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-8.4921551807	26520.0	0.0	0.0	nan	19.0	154.9
direct	-8.4892546124	17079.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.6
direct with trim	-8.4921567061	17087.0	6.0	6.0	nan	19.0	74.2
dual anneal	-8.4921567061	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	157.1
trust region	-8.4921567061	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-8.4921567061	211.0	211.0	211.0	2.0	19.0	3.5

Table 2043: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9258397086	920.0	920.0	0.0	nan	19.0	8.3
basin hopping	-14.9258397421	1313.6	1313.6	1313.6	1.0	19.0	467.3
cch second order	-14.9258396371	160.0	91.0	91.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-14.9258249873	22916.4	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
direct	-14.8931494934	16681.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.6
direct with trim	-14.9258397420	16689.0	6.0	6.0	nan	19.0	75.5
dual anneal	-14.9258397420	38012.6	10.6	10.6	1.0	19.0	143.0
trust region	-14.9258397420	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-14.9258397420	223.0	223.0	223.0	1.0	19.0	2.8

Table 2044: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6568136571	806.0	806.0	0.0	nan	19.0	8.2
basin hopping	-23.6568136916	1319.8	1319.8	1319.8	1.6	19.0	479.9
cch second order	-23.6568136986	147.0	82.0	82.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-23.6568049736	23423.4	0.0	0.0	nan	19.0	132.4
direct	-23.5978824533	16993.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.3
direct with trim	-23.6568136915	17001.0	6.0	6.0	nan	19.0	95.7
dual anneal	-23.6568136915	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	163.1
trust region	-23.6568136915	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-23.6568136915	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.1

Table 2045: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.9083528430	858.0	858.0	0.0	nan	19.0	7.7
basin hopping	-34.9083528772	1341.6	1341.6	1341.6	1.0	19.0	451.9
cch second order	-34.9083528540	164.0	87.0	87.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-34.9083403605	23891.4	0.0	0.0	nan	19.0	140.9
direct	-34.7554522137	16791.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.4
direct with trim	-34.9083528772	16800.0	7.0	7.0	nan	19.0	69.0
dual anneal	-34.9083528771	38016.4	14.4	14.4	1.0	19.0	162.2
trust region	-34.9083528772	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-34.9083528771	221.0	221.0	221.0	1.0	19.0	3.0

Table 2046: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8831192804	878.0	878.0	0.0	nan	19.0	7.7
basin hopping	-48.8831193148	1324.8	1324.8	1324.8	1.2	19.0	463.6
cch second order	-48.8831194033	178.0	88.0	88.0	nan	19.0	7.6
diff evo	-48.8831075722	25123.8	0.0	0.0	nan	19.0	141.8
direct	-48.7594528561	16593.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.4
direct with trim	-48.8831193147	16602.0	7.0	7.0	nan	19.0	69.3
dual anneal	-48.8831193147	38011.8	9.8	9.8	1.0	19.0	154.2
trust region	-48.8831193147	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-48.8831193147	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	3.4

Table 2047: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7674346340	874.0	874.0	0.0	nan	19.0	7.7
basin hopping	-65.7674346687	1334.0	1334.0	1334.0	1.2	19.0	429.9
cch second order	-65.7674346296	168.0	92.0	92.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-65.7674235294	23758.8	0.0	0.0	nan	19.0	138.3
direct	-65.6806072567	16313.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.1
direct with trim	-65.7674346686	16321.0	6.0	6.0	nan	19.0	93.6
dual anneal	-65.7674346685	38011.4	9.4	9.4	1.0	19.0	173.1
trust region	-65.7674346686	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-65.7674346686	232.0	232.0	232.0	1.0	19.0	2.8

Table 2048: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.7342755802	860.0	860.0	0.0	nan	19.0	7.8
basin hopping	-85.7342756155	1313.2	1313.2	1313.2	1.2	19.0	388.7
cch second order	-85.7342755787	153.0	86.0	86.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-85.7342456439	24952.2	0.0	0.0	nan	19.0	146.8
direct	-85.6058599380	16113.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.7
direct with trim	-85.7342756154	16122.0	7.0	7.0	nan	19.0	73.5
dual anneal	-85.7342756153	38014.2	12.2	12.2	1.0	19.0	177.8
trust region	-85.7342756154	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-85.7342756154	237.0	237.0	237.0	1.0	19.0	3.1

Table 2049: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9454689311	848.0	848.0	0.0	nan	19.0	7.6
basin hopping	-108.9454689673	1504.4	1504.4	1504.4	1.2	19.0	481.6
cch second order	-108.9454690301	156.0	88.0	88.0	nan	19.0	7.8
diff evo	-108.9454370802	28337.4	0.0	0.0	nan	19.0	160.6
direct	-108.2170556875	16545.0	0.0	0.0	nan	19.0	75.8
direct with trim	-108.9454689672	16553.0	6.0	6.0	nan	19.0	91.3
dual anneal	-108.9454689671	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	180.6
trust region	-108.9454689672	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-108.9454689672	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	3.1

Table 2050: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5533558955	857.0	857.0	0.0	nan	19.0	7.7
basin hopping	-135.5533559319	1347.4	1347.4	1347.4	1.4	19.0	440.8
cch second order	-135.5533557698	171.0	91.0	91.0	nan	19.0	7.9
diff evo	-135.5533132658	28345.2	0.0	0.0	nan	19.0	169.1
direct	-135.0158885946	16849.0	0.0	0.0	nan	19.0	73.3
direct with trim	-135.5533559319	16858.0	7.0	7.0	nan	19.0	66.8
dual anneal	-135.5533559318	38014.4	12.4	12.4	1.0	19.0	206.1
trust region	-135.5533559319	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.5
trust region repeats	-135.5533559319	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	3.2

Table 2051: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.7020884392	914.0	914.0	0.0	nan	19.0	7.8
basin hopping	-165.7020884748	1335.0	1335.0	1335.0	1.8	19.0	477.8
cch second order	-165.7020883386	165.0	90.0	90.0	nan	19.0	7.5
diff evo	-165.7020712609	26098.8	0.0	0.0	nan	19.0	150.8
direct	-165.2693763569	16703.0	0.0	0.0	nan	19.0	80.1
direct with trim	-165.7020884747	16711.0	6.0	6.0	nan	19.0	78.4
dual anneal	-165.7020884745	38012.8	10.8	10.8	1.0	19.0	196.2
trust region	-165.7020884747	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-165.7020884747	239.0	239.0	239.0	1.0	19.0	2.8

Table 2052: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.5286616271	942.0	942.0	0.0	nan	19.0	8.0
basin hopping	-199.5286616628	1314.4	1314.4	1314.4	1.4	19.0	440.5
cch second order	-199.5286614946	207.0	97.0	97.0	nan	19.0	8.0
diff evo	-199.5286299454	29523.0	0.0	0.0	nan	19.0	171.0
direct	-199.2487248405	15667.0	0.0	0.0	nan	19.0	69.1
direct with trim	-199.5286616628	15676.0	7.0	7.0	nan	19.0	71.3
dual anneal	-199.5286616625	38018.0	16.0	16.0	1.0	19.0	176.5
trust region	-199.5286616628	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	6.5
trust region repeats	-199.5286616628	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	2.8

Table 2053: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.1637510075	953.0	953.0	0.0	nan	19.0	7.9
basin hopping	-237.1637510436	1313.2	1313.2	1313.2	1.4	19.0	439.4
cch second order	-237.1637511717	205.0	105.0	105.0	nan	19.0	7.9
diff evo	-237.1637041424	30303.0	0.0	0.0	nan	19.0	175.2
direct	-236.8893808287	15217.0	0.0	0.0	nan	19.0	61.1
direct with trim	-237.1631792674	15228.0	9.0	9.0	nan	19.0	60.8
dual anneal	-237.1637510433	38013.0	11.0	11.0	1.0	19.0	188.2
trust region	-237.1637510436	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-237.1637510436	241.0	241.0	241.0	1.0	19.0	2.8

Table 2054: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.7324025282	956.0	956.0	0.0	nan	19.0	8.0
basin hopping	-278.7324025649	1319.8	1319.8	1319.8	1.4	19.0	434.7
cch second order	-278.7324024844	326.0	126.0	126.0	nan	19.0	8.7
diff evo	-278.7323468631	26013.0	0.0	0.0	nan	19.0	149.4
direct	-278.4387812728	19109.0	0.0	0.0	nan	19.0	92.1
direct with trim	-278.7323995004	19118.0	7.0	7.0	nan	19.0	81.8
dual anneal	-278.7324025645	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	174.3
trust region	-278.7324025649	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	6.3
trust region repeats	-278.7324025649	243.0	243.0	243.0	1.0	19.0	2.9

Table 2055: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.3546086379	954.0	954.0	0.0	nan	19.0	7.9
basin hopping	-324.3546086752	1343.0	1343.0	1343.0	1.0	19.0	426.2
cch second order	-324.3546088623	236.0	111.0	111.0	nan	19.0	7.9
diff evo	-324.3545091634	31644.6	0.0	0.0	nan	19.0	188.6
direct	-321.3138709965	15409.0	0.0	0.0	nan	19.0	79.9
direct with trim	-324.3546086752	15418.0	7.0	7.0	nan	19.0	64.6
dual anneal	-324.3546086747	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	199.6
trust region	-324.3546086752	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-324.3546086752	246.0	246.0	246.0	1.0	19.0	2.9

Table 2056: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.1457949827	949.0	949.0	0.0	nan	19.0	7.9
basin hopping	-374.1457950209	1322.0	1322.0	1322.0	1.0	19.0	460.2
cch second order	-374.1457951031	245.0	116.0	116.0	nan	19.0	8.1
diff evo	-374.1457033618	26091.0	0.0	0.0	nan	19.0	145.3
direct	-371.0180735053	16035.0	0.0	0.0	nan	19.0	77.7
direct with trim	-374.1457950209	16045.0	8.0	8.0	nan	19.0	71.2
dual anneal	-374.1457950203	38016.6	14.6	14.6	1.0	19.0	164.4
trust region	-374.1457950209	14.0	14.0	14.0	nan	19.0	6.4
trust region repeats	-374.1457950209	248.0	248.0	248.0	1.0	19.0	3.2

Table 2057: Ar

72.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	cch second order	-0.2618245322
He	basin hopping	-1.4774410241
Li	basin hopping	-4.1054067751
Be	cch second order	-8.4921567184
B	basin hopping	-14.9258397421
C	cch second order	-23.6568136986
N	basin hopping	-34.9083528772
O	cch second order	-48.8831194033
F	basin hopping	-65.7674346687
Ne	basin hopping	-85.7342756155
Na	cch second order	-108.9454690301
Mg	basin hopping	-135.5533559319
Al	basin hopping	-165.7020884748
Si	basin hopping	-199.5286616628
P	cch second order	-237.1637511717
S	basin hopping	-278.7324025649
Cl	cch second order	-324.3546088623
Ar	cch second order	-374.1457951031

Table 2058: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	11.3	11.3	11.3	nan	-117.3521554045	6.4
cch second order	225.1	104.8	104.8	nan	-117.3521553911	8.0
trust region repeats	232.2	232.2	232.2	1.1	-117.3521554045	3.1
acevedo	885.4	885.4	0.0	nan	-117.3521553724	8.1
basin hopping	1339.8	1339.8	1339.8	1.2	-117.3521554045	449.2
direct	16833.9	0.0	0.0	nan	-116.8352902155	76.2
direct with trim	16842.9	7.0	7.0	nan	-117.3521234689	76.6
diff evo	25950.2	0.0	0.0	nan	-117.3521271190	149.2
dual anneal	38013.9	11.9	11.9	1.0	-117.3521554043	173.2

Table 2059: Average (all systems)

73 ets 1.0xLDA X+1.00xVW KE

73.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
He	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Li	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Be	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
B	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
C	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
N	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
O	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 2060: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274439	1638.2	1638.2	1638.2	1.6	19.0	366.5
He	-2.7236069471	1276.0	1276.0	1276.0	1.4	19.0	371.5
Li	-8.5257264122	1280.0	1280.0	1280.0	2.8	19.0	341.0
Be	-19.3526918265	1269.6	1269.6	1269.6	1.0	19.0	321.5
B	-36.7287640803	1249.2	1249.2	1249.2	1.4	19.0	288.8
C	-62.1689200857	1283.2	1283.2	1283.2	1.0	19.0	288.0
N	-97.1817872650	1277.8	1277.8	1277.8	1.2	19.0	330.2
O	-143.2712530184	1316.8	1316.8	1316.8	1.2	19.0	410.4
F	-201.9375787649	1276.6	1276.6	1276.6	1.0	19.0	395.1
Ne	-274.6781747860	1282.6	1282.6	1282.6	1.0	19.0	328.8
Na	-362.9881039254	1320.6	1320.6	1320.6	1.2	19.0	467.4
Mg	-468.3604230180	1296.6	1296.6	1296.6	1.6	19.0	273.8
Al	-592.2864509411	1311.8	1311.8	1311.8	1.8	19.0	274.2
Si	-736.2560020612	1301.0	1301.0	1301.0	1.4	19.0	324.4
P	-901.7575899291	1302.8	1302.8	1302.8	1.6	19.0	333.3
S	-1090.2785970655	13773.4	13773.4	13773.4	3.0	19.0	537.3
Cl	-1303.3054081657	1469.8	1469.8	1469.8	1.0	19.0	421.9
Ar	-1542.3235143850	1438.8	1438.8	1438.8	1.8	19.0	329.5

Table 2061: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274089	167.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.3
He	-2.7236073974	183.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.0
Li	-8.5257266724	273.0	145.0	145.0	nan	19.0	7.4
Be	-19.3526917342	367.0	187.0	187.0	nan	19.0	8.4
B	-36.7287641469	330.0	175.0	175.0	nan	19.0	8.2
C	-62.1689172662	578.0	278.0	278.0	nan	19.0	8.6
N	-97.1817851953	499.0	274.0	274.0	nan	19.0	10.0
O	-143.2712492508	499.0	279.0	279.0	nan	19.0	11.7
F	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ne	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Na	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Mg	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Al	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Si	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
P	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
S	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Cl	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
Ar	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan

Table 2062: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065271091	21730.8	0.0	0.0	nan	19.0	140.0
He	-2.7236062366	22963.2	0.0	0.0	nan	19.0	143.3
Li	-8.5257240807	21598.2	0.0	0.0	nan	19.0	136.8
Be	-19.3526877065	21387.6	0.0	0.0	nan	19.0	126.4
B	-36.7287557091	22698.0	0.0	0.0	nan	19.0	150.4
C	-62.1689028309	21886.8	0.0	0.0	nan	19.0	133.8
N	-97.1817634937	22136.4	0.0	0.0	nan	19.0	141.4
O	-143.2712275665	20677.8	0.0	0.0	nan	19.0	130.2
F	-201.9375304358	20350.2	0.0	0.0	nan	19.0	132.2
Ne	-274.6781180948	22308.0	0.0	0.0	nan	19.0	140.5
Na	-362.9880113449	22081.8	0.0	0.0	nan	19.0	127.3
Mg	-468.3602844205	19461.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.1
Al	-592.2863659621	19601.4	0.0	0.0	nan	19.0	120.0
Si	-736.2558176631	19843.2	0.0	0.0	nan	19.0	121.0
P	-901.7574829683	19921.2	0.0	0.0	nan	19.0	118.8
S	-1090.2783509168	21372.0	0.0	0.0	nan	19.0	140.3
Cl	-1303.3051712759	22347.0	0.0	0.0	nan	19.0	123.2
Ar	-1542.3233246937	21442.2	0.0	0.0	nan	19.0	128.2

Table 2063: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065260549	15395.0	0.0	0.0	nan	19.0	74.0
He	-2.7227520389	14883.0	0.0	0.0	nan	19.0	72.2
Li	-8.5254148437	19021.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
Be	-19.3525951315	14847.0	0.0	0.0	nan	19.0	69.0
B	-36.7284510965	19059.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.3
C	-62.1570296184	18055.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.9
N	-97.1772106207	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.5
O	-143.2230082831	15095.0	0.0	0.0	nan	19.0	68.6
F	-201.8693475253	14263.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.8
Ne	-274.6743878674	12601.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.4
Na	-362.9865835782	19171.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.1
Mg	-468.2163291897	14647.0	0.0	0.0	nan	19.0	63.3
Al	-592.2784817794	14625.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.6
Si	-736.0762080595	15103.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.9
P	-901.6137714672	14009.0	0.0	0.0	nan	19.0	65.8
S	-1089.9270677919	14085.0	0.0	0.0	nan	19.0	66.9
Cl	-1303.2918409825	13953.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.8
Ar	-1542.2612294633	13961.0	0.0	0.0	nan	19.0	62.7

Table 2064: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274438	15402.0	5.0	5.0	nan	19.0	64.6
He	-2.7236069470	14890.0	5.0	5.0	nan	19.0	69.2
Li	-8.5257263559	19028.0	5.0	5.0	nan	19.0	93.5
Be	-19.3526918265	14854.0	5.0	5.0	nan	19.0	67.1
B	-36.7287640803	19068.0	7.0	7.0	nan	19.0	91.9
C	-62.1689200856	18063.0	6.0	6.0	nan	19.0	86.0
N	-97.1817872650	19162.0	5.0	5.0	nan	19.0	85.5
O	-143.2712530184	15104.0	7.0	7.0	nan	19.0	58.7
F	-201.9375787649	14271.0	6.0	6.0	nan	19.0	68.2
Ne	-274.6781747860	12610.0	7.0	7.0	nan	19.0	59.4
Na	-362.9881039254	19179.0	6.0	6.0	nan	19.0	99.5
Mg	-468.3604230180	14655.0	6.0	6.0	nan	19.0	69.2
Al	-592.2864509411	14633.0	6.0	6.0	nan	19.0	61.8
Si	-736.2560019419	15111.0	6.0	6.0	nan	19.0	71.6
P	-901.7575895846	14017.0	6.0	6.0	nan	19.0	64.1
S	-1090.2785967841	14191.0	104.0	104.0	nan	19.0	80.0
Cl	-1303.3054081657	13966.0	11.0	11.0	nan	19.0	59.1
Ar	-1542.3235143850	13973.0	10.0	10.0	nan	19.0	72.0

Table 2065: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274438	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	211.6
He	-2.7236069470	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	200.2
Li	-8.5257264121	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	211.8
Be	-19.3526918263	38011.0	9.0	9.0	1.0	19.0	202.3
B	-36.7287640687	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	233.7
C	-62.1689200839	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	209.9
N	-97.1817872608	38015.2	13.2	13.2	1.0	19.0	224.7
O	-143.2712530095	38015.4	13.4	13.4	1.0	19.0	212.7
F	-201.9375787475	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	197.0
Ne	-274.6781747545	38016.8	14.8	14.8	1.0	19.0	185.5
Na	-362.9881038714	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	209.8
Mg	-468.3604229294	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	210.8
Al	-592.2864508013	38020.8	18.8	18.8	1.0	19.0	180.1
Si	-736.2560017285	38024.8	22.8	22.8	1.0	19.0	183.8
P	-901.7575892679	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	196.8
S	-1090.2785963257	38132.2	130.2	130.2	1.0	19.0	186.7
Cl	-1303.3054075166	38030.8	28.8	28.8	1.0	19.0	199.2
Ar	-1542.3235134835	38032.2	30.2	30.2	1.0	19.0	195.1

Table 2066: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274438	7.0	7.0	7.0	nan	19.0	3.5
He	-2.7236069470	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.8
Li	-8.5257263559	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
Be	-19.3526918265	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.8
B	-36.7287640694	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.3
C	-62.1689200856	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.9
N	-97.1817872650	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	15.4
O	-143.2712530184	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	8.3
F	-201.9375787649	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	5.4
Ne	-274.6781747860	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.6
Na	-362.9881039254	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.0
Mg	-468.3604230180	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	9.0
Al	-592.2864509411	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	8.6
Si	-736.2560019419	19.0	19.0	19.0	nan	19.0	9.6
P	-901.7575895845	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	4.5
S	-1090.2785967841	127.0	127.0	127.0	nan	19.0	32.8
Cl	-1303.3054081657	31.0	31.0	31.0	nan	19.0	9.2
Ar	-1542.3235143850	28.0	28.0	28.0	nan	19.0	7.5

Table 2067: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.4065274438	169.0	169.0	169.0	1.0	19.0	3.5
He	-2.7236069470	177.0	177.0	177.0	2.0	19.0	3.8
Li	-8.5257264122	210.0	210.0	210.0	2.0	19.0	2.8
Be	-19.3526918265	200.0	200.0	200.0	1.0	19.0	3.1
B	-36.7287640803	225.0	225.0	225.0	1.0	19.0	3.5
C	-62.1689200857	242.0	242.0	242.0	2.0	19.0	3.7
N	-97.1817872650	234.0	234.0	234.0	1.0	19.0	3.9
O	-143.2712530184	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	5.2
F	-201.9375787649	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	5.1
Ne	-274.6781747860	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	5.0
Na	-362.9881039254	307.0	307.0	307.0	2.0	19.0	4.5
Mg	-468.3604230180	342.0	342.0	342.0	2.0	19.0	4.7
Al	-592.2864509411	378.0	378.0	378.0	1.0	19.0	6.9
Si	-736.2560019419	409.0	409.0	409.0	1.0	19.0	7.3
P	-901.7575895846	432.0	432.0	432.0	1.0	19.0	6.3
S	-1090.2785967841	2350.0	2350.0	2350.0	1.0	19.0	30.6
Cl	-1303.3054081657	593.0	593.0	593.0	1.0	19.0	9.2
Ar	-1542.3235143850	581.0	581.0	581.0	1.0	19.0	10.9

Table 2068: trust region repeats

73.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-0.4065274439	1638.2	1638.2	1638.2	1.6	19.0	366.5
cch second order	-0.4065274089	167.0	89.0	89.0	nan	19.0	5.3
diff evo	-0.4065271091	21730.8	0.0	0.0	nan	19.0	140.0
direct	-0.4065260549	15395.0	0.0	0.0	nan	19.0	74.0
direct with trim	-0.4065274438	15402.0	5.0	5.0	nan	19.0	64.6
dual anneal	-0.4065274438	38010.0	8.0	8.0	1.0	19.0	211.6
trust region	-0.4065274438	7.0	7.0	7.0	nan	19.0	3.5
trust region repeats	-0.4065274438	169.0	169.0	169.0	1.0	19.0	3.5

Table 2069: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-2.7236069471	1276.0	1276.0	1276.0	1.4	19.0	371.5
cch second order	-2.7236073974	183.0	104.0	104.0	nan	19.0	6.0
diff evo	-2.7236062366	22963.2	0.0	0.0	nan	19.0	143.3
direct	-2.7227520389	14883.0	0.0	0.0	nan	19.0	72.2
direct with trim	-2.7236069470	14890.0	5.0	5.0	nan	19.0	69.2
dual anneal	-2.7236069470	38010.4	8.4	8.4	1.0	19.0	200.2
trust region	-2.7236069470	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	6.8
trust region repeats	-2.7236069470	177.0	177.0	177.0	2.0	19.0	3.8

Table 2070: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-8.5257264122	1280.0	1280.0	1280.0	2.8	19.0	341.0
cch second order	-8.5257266724	273.0	145.0	145.0	nan	19.0	7.4
diff evo	-8.5257240807	21598.2	0.0	0.0	nan	19.0	136.8
direct	-8.5254148437	19021.0	0.0	0.0	nan	19.0	84.2
direct with trim	-8.5257263559	19028.0	5.0	5.0	nan	19.0	93.5
dual anneal	-8.5257264121	38015.0	13.0	13.0	1.0	19.0	211.8
trust region	-8.5257263559	9.0	9.0	9.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-8.5257264122	210.0	210.0	210.0	2.0	19.0	2.8

Table 2071: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-19.3526918265	1269.6	1269.6	1269.6	1.0	19.0	321.5
cch second order	-19.3526917342	367.0	187.0	187.0	nan	19.0	8.4
diff evo	-19.3526877065	21387.6	0.0	0.0	nan	19.0	126.4
direct	-19.3525951315	14847.0	0.0	0.0	nan	19.0	69.0
direct with trim	-19.3526918265	14854.0	5.0	5.0	nan	19.0	67.1
dual anneal	-19.3526918263	38011.0	9.0	9.0	1.0	19.0	202.3
trust region	-19.3526918265	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	2.8
trust region repeats	-19.3526918265	200.0	200.0	200.0	1.0	19.0	3.1

Table 2072: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-36.7287640803	1249.2	1249.2	1249.2	1.4	19.0	288.8
cch second order	-36.7287641469	330.0	175.0	175.0	nan	19.0	8.2
diff evo	-36.7287557091	22698.0	0.0	0.0	nan	19.0	150.4
direct	-36.7284510965	19059.0	0.0	0.0	nan	19.0	78.3
direct with trim	-36.7287640803	19068.0	7.0	7.0	nan	19.0	91.9
dual anneal	-36.7287640687	38012.0	10.0	10.0	1.0	19.0	233.7
trust region	-36.7287640694	10.0	10.0	10.0	nan	19.0	4.3
trust region repeats	-36.7287640803	225.0	225.0	225.0	1.0	19.0	3.5

Table 2073: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-62.1689200857	1283.2	1283.2	1283.2	1.0	19.0	288.0
cch second order	-62.1689172662	578.0	278.0	278.0	nan	19.0	8.6
diff evo	-62.1689028309	21886.8	0.0	0.0	nan	19.0	133.8
direct	-62.1570296184	18055.0	0.0	0.0	nan	19.0	82.9
direct with trim	-62.1689200856	18063.0	6.0	6.0	nan	19.0	86.0
dual anneal	-62.1689200839	38014.6	12.6	12.6	1.0	19.0	209.9
trust region	-62.1689200856	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	6.9
trust region repeats	-62.1689200857	242.0	242.0	242.0	2.0	19.0	3.7

Table 2074: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-97.1817872650	1277.8	1277.8	1277.8	1.2	19.0	330.2
cch second order	-97.1817851953	499.0	274.0	274.0	nan	19.0	10.0
diff evo	-97.1817634937	22136.4	0.0	0.0	nan	19.0	141.4
direct	-97.1772106207	19155.0	0.0	0.0	nan	19.0	71.5
direct with trim	-97.1817872650	19162.0	5.0	5.0	nan	19.0	85.5
dual anneal	-97.1817872608	38015.2	13.2	13.2	1.0	19.0	224.7
trust region	-97.1817872650	11.0	11.0	11.0	nan	19.0	15.4
trust region repeats	-97.1817872650	234.0	234.0	234.0	1.0	19.0	3.9

Table 2075: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-143.2712530184	1316.8	1316.8	1316.8	1.2	19.0	410.4
cch second order	-143.2712492508	499.0	279.0	279.0	nan	19.0	11.7
diff evo	-143.2712275665	20677.8	0.0	0.0	nan	19.0	130.2
direct	-143.2230082831	15095.0	0.0	0.0	nan	19.0	68.6
direct with trim	-143.2712530184	15104.0	7.0	7.0	nan	19.0	58.7
dual anneal	-143.2712530095	38015.4	13.4	13.4	1.0	19.0	212.7
trust region	-143.2712530184	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	8.3
trust region repeats	-143.2712530184	260.0	260.0	260.0	1.0	19.0	5.2

Table 2076: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-201.9375787649	1276.6	1276.6	1276.6	1.0	19.0	395.1
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-201.9375304358	20350.2	0.0	0.0	nan	19.0	132.2
direct	-201.8693475253	14263.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.8
direct with trim	-201.9375787649	14271.0	6.0	6.0	nan	19.0	68.2
dual anneal	-201.9375787475	38015.8	13.8	13.8	1.0	19.0	197.0
trust region	-201.9375787649	12.0	12.0	12.0	nan	19.0	5.4
trust region repeats	-201.9375787649	270.0	270.0	270.0	1.0	19.0	5.1

Table 2077: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-274.6781747860	1282.6	1282.6	1282.6	1.0	19.0	328.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-274.6781180948	22308.0	0.0	0.0	nan	19.0	140.5
direct	-274.6743878674	12601.0	0.0	0.0	nan	19.0	60.4
direct with trim	-274.6781747860	12610.0	7.0	7.0	nan	19.0	59.4
dual anneal	-274.6781747545	38016.8	14.8	14.8	1.0	19.0	185.5
trust region	-274.6781747860	13.0	13.0	13.0	nan	19.0	4.6
trust region repeats	-274.6781747860	280.0	280.0	280.0	1.0	19.0	5.0

Table 2078: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-362.9881039254	1320.6	1320.6	1320.6	1.2	19.0	467.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-362.9880113449	22081.8	0.0	0.0	nan	19.0	127.3
direct	-362.9865835782	19171.0	0.0	0.0	nan	19.0	104.1
direct with trim	-362.9881039254	19179.0	6.0	6.0	nan	19.0	99.5
dual anneal	-362.9881038714	38018.2	16.2	16.2	1.0	19.0	209.8
trust region	-362.9881039254	15.0	15.0	15.0	nan	19.0	4.0
trust region repeats	-362.9881039254	307.0	307.0	307.0	2.0	19.0	4.5

Table 2079: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-468.3604230180	1296.6	1296.6	1296.6	1.6	19.0	273.8
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-468.3602844205	19461.0	0.0	0.0	nan	19.0	125.1
direct	-468.2163291897	14647.0	0.0	0.0	nan	19.0	63.3
direct with trim	-468.3604230180	14655.0	6.0	6.0	nan	19.0	69.2
dual anneal	-468.3604229294	38018.4	16.4	16.4	1.0	19.0	210.8
trust region	-468.3604230180	16.0	16.0	16.0	nan	19.0	9.0
trust region repeats	-468.3604230180	342.0	342.0	342.0	2.0	19.0	4.7

Table 2080: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-592.2864509411	1311.8	1311.8	1311.8	1.8	19.0	274.2
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-592.2863659621	19601.4	0.0	0.0	nan	19.0	120.0
direct	-592.2784817794	14625.0	0.0	0.0	nan	19.0	83.6
direct with trim	-592.2864509411	14633.0	6.0	6.0	nan	19.0	61.8
dual anneal	-592.2864508013	38020.8	18.8	18.8	1.0	19.0	180.1
trust region	-592.2864509411	17.0	17.0	17.0	nan	19.0	8.6
trust region repeats	-592.2864509411	378.0	378.0	378.0	1.0	19.0	6.9

Table 2081: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-736.2560020612	1301.0	1301.0	1301.0	1.4	19.0	324.4
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-736.2558176631	19843.2	0.0	0.0	nan	19.0	121.0
direct	-736.0762080595	15103.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.9
direct with trim	-736.2560019419	15111.0	6.0	6.0	nan	19.0	71.6
dual anneal	-736.2560017285	38024.8	22.8	22.8	1.0	19.0	183.8
trust region	-736.2560019419	19.0	19.0	19.0	nan	19.0	9.6
trust region repeats	-736.2560019419	409.0	409.0	409.0	1.0	19.0	7.3

Table 2082: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-901.7575899291	1302.8	1302.8	1302.8	1.6	19.0	333.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-901.7574829683	19921.2	0.0	0.0	nan	19.0	118.8
direct	-901.6137714672	14009.0	0.0	0.0	nan	19.0	65.8
direct with trim	-901.7575895846	14017.0	6.0	6.0	nan	19.0	64.1
dual anneal	-901.7575892679	38024.2	22.2	22.2	1.0	19.0	196.8
trust region	-901.7575895845	21.0	21.0	21.0	nan	19.0	4.5
trust region repeats	-901.7575895846	432.0	432.0	432.0	1.0	19.0	6.3

Table 2083: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1090.2785970655	13773.4	13773.4	13773.4	3.0	19.0	537.3
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1090.2783509168	21372.0	0.0	0.0	nan	19.0	140.3
direct	-1089.9270677919	14085.0	0.0	0.0	nan	19.0	66.9
direct with trim	-1090.2785967841	14191.0	104.0	104.0	nan	19.0	80.0
dual anneal	-1090.2785963257	38132.2	130.2	130.2	1.0	19.0	186.7
trust region	-1090.2785967841	127.0	127.0	127.0	nan	19.0	32.8
trust region repeats	-1090.2785967841	2350.0	2350.0	2350.0	1.0	19.0	30.6

Table 2084: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1303.3054081657	1469.8	1469.8	1469.8	1.0	19.0	421.9
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1303.3051712759	22347.0	0.0	0.0	nan	19.0	123.2
direct	-1303.2918409825	13953.0	0.0	0.0	nan	19.0	67.8
direct with trim	-1303.3054081657	13966.0	11.0	11.0	nan	19.0	59.1
dual anneal	-1303.3054075166	38030.8	28.8	28.8	1.0	19.0	199.2
trust region	-1303.3054081657	31.0	31.0	31.0	nan	19.0	9.2
trust region repeats	-1303.3054081657	593.0	593.0	593.0	1.0	19.0	9.2

Table 2085: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
basin hopping	-1542.3235143850	1438.8	1438.8	1438.8	1.8	19.0	329.5
cch second order	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan
diff evo	-1542.3233246937	21442.2	0.0	0.0	nan	19.0	128.2
direct	-1542.2612294633	13961.0	0.0	0.0	nan	19.0	62.7
direct with trim	-1542.3235143850	13973.0	10.0	10.0	nan	19.0	72.0
dual anneal	-1542.3235134835	38032.2	30.2	30.2	1.0	19.0	195.1
trust region	-1542.3235143850	28.0	28.0	28.0	nan	19.0	7.5
trust region repeats	-1542.3235143850	581.0	581.0	581.0	1.0	19.0	10.9

Table 2086: Ar

73.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.4065274439
He	cch second order	-2.7236073974
Li	cch second order	-8.5257266724
Be	basin hopping	-19.3526918265
B	cch second order	-36.7287641469
C	basin hopping	-62.1689200857
N	basin hopping	-97.1817872650
O	basin hopping	-143.2712530184
F	basin hopping	-201.9375787649
Ne	basin hopping	-274.6781747860
Na	trust region	-362.9881039254
Mg	basin hopping	-468.3604230180
Al	basin hopping	-592.2864509411
Si	basin hopping	-736.2560020612
P	basin hopping	-901.7575899291
S	basin hopping	-1090.2785970655
Cl	basin hopping	-1303.3054081657
Ar	basin hopping	-1542.3235143850

Table 2087: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
acevedo	nan	nan	nan	nan	nan	nan
trust region	21.0	21.0	21.0	nan	-435.8072844060	8.2
cch second order	362.0	191.4	191.4	nan	-46.2949086340	8.2
trust region repeats	425.5	425.5	425.5	1.3	-435.8072844097	6.7
basin hopping	2020.3	2020.3	2020.3	1.5	-435.8072844512	355.8
direct	15662.7	0.0	0.0	nan	-435.7493464107	72.4
direct with trim	15676.5	11.8	11.8	nan	-435.8072844066	73.4
diff evo	21322.6	0.0	0.0	nan	-435.8072029172	132.2
dual anneal	38024.3	22.3	22.3	1.0	-435.8072842488	202.9

Table 2088: Average (all systems)

74 Averaged over basis sets and functionals

74.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.2615067579	775.1	775.1	0.0	nan	26.4	17.8
He	-1.4762220414	910.6	910.6	0.0	nan	26.4	16.6
Li	-4.1027631459	1035.6	1035.6	0.0	nan	26.4	17.9
Be	-8.4873987755	1044.1	1044.1	0.0	nan	26.4	18.4
B	-14.9182074298	998.1	998.1	0.0	nan	26.4	16.5
C	-23.6455115361	944.6	944.6	0.0	nan	26.4	16.0
N	-34.8925506651	944.3	944.3	0.0	nan	26.4	17.3
O	-48.8619561298	940.2	940.2	0.0	nan	26.4	15.7
F	-65.7400272699	936.8	936.8	0.0	nan	26.4	15.3
Ne	-85.6997256914	944.6	944.6	0.0	nan	26.4	16.0
Na	-108.9028669548	993.8	993.8	0.0	nan	26.4	17.4
Mg	-135.5017817879	1052.3	1052.3	0.0	nan	26.4	17.2
Al	-165.6406107246	1037.8	1037.8	0.0	nan	26.4	17.6
Si	-199.4563359502	1223.2	1223.2	0.0	nan	26.4	25.0
P	-237.0796189666	1405.0	1405.0	0.0	nan	26.4	28.8
S	-278.6354911581	1070.6	1070.6	0.0	nan	26.4	19.6
Cl	-324.2439306002	1074.2	1074.2	0.0	nan	26.4	21.6
Ar	-374.0203493568	1979.7	1979.7	0.0	nan	26.4	40.6

Table 2089: acevedo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.8245264447	6841.9	6841.9	6841.9	8.8	25.1	1042.1
He	-3.7149983175	5962.4	5962.4	5962.4	7.9	24.7	934.9
Li	-18.1019902240	5887.1	5887.1	5887.1	6.8	25.0	925.5
Be	-32.7537116998	5757.0	5757.0	5757.0	5.1	25.0	890.7
B	-54.1605299085	5660.5	5660.5	5660.5	4.3	25.0	881.2
C	-81.3076059638	5580.9	5580.9	5580.9	4.1	25.0	876.5
N	-115.0343233441	5465.8	5465.8	5465.8	4.0	25.0	847.2
O	-148.8490404687	5680.2	5680.2	5680.2	4.0	25.1	889.4
F	-194.4304697651	5407.6	5407.6	5407.6	3.7	25.1	842.4
Ne	-258.1902908217	5210.2	5210.2	5210.2	3.7	25.1	858.6
Na	-324.8789523456	4849.4	4849.4	4849.4	3.5	25.0	808.9
Mg	-393.5276513864	4885.2	4885.2	4885.2	3.4	25.1	823.8
Al	-474.4533752889	4861.3	4861.3	4861.3	3.3	25.1	823.9
Si	-560.5288410239	5082.1	5082.1	5082.1	3.5	25.3	840.6
P	-660.8154041078	4820.2	4820.2	4820.2	3.5	25.3	829.4
S	-769.1438209069	5012.2	5012.2	5012.2	3.4	25.3	816.8
Cl	-893.5561406594	4554.6	4554.6	4554.6	3.3	25.1	804.4
Ar	-1017.6820946541	4746.5	4746.5	4746.5	3.4	25.3	824.9

Table 2090: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5736471668	210.2	102.6	102.6	nan	25.7	12.6
He	-2.8947712272	209.5	109.3	109.3	nan	25.7	13.0
Li	-13.1117849728	359.1	183.6	183.6	nan	25.3	16.9
Be	-27.9740254347	358.5	185.9	185.9	nan	25.8	16.8
B	-47.4734620354	255.3	133.2	133.2	nan	25.6	13.7
C	-41.4986327016	251.7	131.3	131.3	nan	26.0	13.4
N	-97.3686881658	279.8	145.1	145.1	nan	25.8	14.7
O	-137.3263616008	292.8	154.7	154.7	nan	26.5	14.9
F	-100.1113137132	319.7	164.1	164.1	nan	26.2	16.2
Ne	-236.2163852008	322.1	162.7	162.7	nan	26.3	15.8
Na	-160.3555302091	243.6	122.3	122.3	nan	26.2	14.7
Mg	-216.0836569520	792.5	395.5	395.5	nan	26.2	25.8
Al	-258.7912878517	263.7	133.7	133.7	nan	26.1	14.1
Si	-284.5819837286	252.5	128.3	128.3	nan	27.2	14.4
P	-360.9879976475	374.9	189.6	189.6	nan	26.5	17.7
S	-419.8364928447	252.0	127.6	127.6	nan	26.2	13.3
Cl	-455.0234584626	247.0	125.1	125.1	nan	26.5	13.2
Ar	-519.0606617474	252.2	127.9	127.9	nan	25.6	12.8

Table 2091: cch second order

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6177732788	86721.6	0.0	0.0	nan	18.0	577.9
He	-3.0303110872	86906.2	0.0	0.0	nan	18.0	560.2
Li	-7.9413284759	87824.2	0.0	0.0	nan	18.0	609.2
Be	-15.7831589349	78782.1	0.0	0.0	nan	18.0	526.7
B	-27.2352707209	77104.0	0.0	0.0	nan	18.0	514.3
C	-42.5584469266	79941.5	0.0	0.0	nan	18.1	512.1
N	-62.1738989625	71140.7	0.0	0.0	nan	18.0	479.6
O	-86.5202702851	71723.5	0.0	0.0	nan	18.0	475.2
F	-115.9416542441	78076.0	0.0	0.0	nan	18.1	509.5
Ne	-150.8704674276	63991.0	0.0	0.0	nan	18.0	433.1
Na	-191.5754205199	65253.9	0.0	0.0	nan	18.0	439.8
Mg	-238.1034752955	66580.6	0.0	0.0	nan	18.0	466.9
Al	-291.4278454433	63806.2	0.0	0.0	nan	18.0	435.2
Si	-351.2284571591	64965.2	0.0	0.0	nan	18.0	435.3
P	-418.2012990571	65222.8	0.0	0.0	nan	18.0	445.4
S	-492.6477259039	65196.6	0.0	0.0	nan	18.0	439.7
Cl	-574.2873187668	66971.0	0.0	0.0	nan	18.0	461.3
Ar	-662.5883885821	77880.9	0.0	0.0	nan	18.1	521.7

Table 2092: diff evo

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.7267203662	24695.2	0.0	0.0	nan	26.4	284.6
He	-3.5730633014	25076.2	0.0	0.0	nan	26.4	291.1
Li	-8.5099154744	25158.6	0.0	0.0	nan	26.4	292.1
Be	-17.3681677933	25082.6	0.0	0.0	nan	26.4	288.1
B	-28.7525698841	25483.5	0.0	0.0	nan	26.4	282.9
C	-44.5338012958	25088.8	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
N	-64.2696219022	25059.0	0.0	0.0	nan	26.4	289.2
O	-90.4513969728	25507.8	0.0	0.0	nan	26.4	287.9
F	-120.2360498408	25367.5	0.0	0.0	nan	26.4	285.2
Ne	-156.7028978022	24993.3	0.0	0.0	nan	26.4	290.0
Na	-197.0654589952	25154.3	0.0	0.0	nan	26.4	293.4
Mg	-244.7470413715	25149.5	0.0	0.0	nan	26.4	291.8
Al	-298.4069443668	25114.6	0.0	0.0	nan	26.4	296.0
Si	-355.9835964087	25200.8	0.0	0.0	nan	26.4	291.2
P	-422.8249604042	25069.9	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
S	-498.9922155628	25268.4	0.0	0.0	nan	26.4	289.6
Cl	-582.8367938669	25184.6	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
Ar	-672.3486980722	25001.5	0.0	0.0	nan	26.4	283.1

Table 2093: direct

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5936260522	23093.5	44.6	44.6	nan	25.0	260.6
He	-2.9509410224	23500.4	35.9	35.9	nan	25.0	254.4
Li	-7.8491784600	23576.2	24.2	24.2	nan	25.0	260.8
Be	-15.6486307501	23484.9	23.4	23.4	nan	25.0	255.7
B	-26.9346096437	23931.9	21.9	21.9	nan	25.0	254.4
C	-42.0424431578	23446.2	20.3	20.3	nan	24.9	255.0
N	-61.7232558894	23486.6	39.9	39.9	nan	25.0	261.1
O	-85.5047161484	23963.5	21.9	21.9	nan	25.0	258.4
F	-114.8186293597	23814.0	19.6	19.6	nan	25.0	252.5
Ne	-150.0597125657	23341.0	32.1	32.1	nan	24.9	261.4
Na	-189.6360429051	23575.2	30.2	30.2	nan	25.0	253.3
Mg	-237.0611448357	23502.7	14.7	14.7	nan	24.9	249.1
Al	-289.1761314113	23516.7	16.1	16.1	nan	25.0	258.2
Si	-349.4379955935	23615.6	14.3	14.3	nan	25.0	254.4
P	-416.2575791140	23418.1	18.5	18.5	nan	24.9	252.9
S	-492.6033969755	23686.8	19.5	19.5	nan	25.0	256.2
Cl	-575.4210690567	23615.8	29.3	29.3	nan	25.0	257.3
Ar	-665.3594142053	23397.0	19.1	19.1	nan	25.0	249.5

Table 2094: direct with trim

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5907864592	50376.8	499.9	499.9	2.7	25.1	619.0
He	-3.5638434008	50391.2	329.5	329.5	2.0	25.2	594.3
Li	-3.6954009966	50451.2	331.6	331.6	2.4	25.2	568.5
Be	-17.8452648805	50524.7	405.1	405.1	2.7	25.2	605.5
B	-51.3252647874	50968.0	357.4	357.4	2.0	25.5	600.7
C	-46.6729858253	50344.2	224.6	224.6	2.1	25.2	546.4
N	-70.8709729456	51054.3	443.7	443.7	2.9	25.5	617.2
O	-93.4583603274	50325.4	205.8	205.8	2.2	25.2	553.3
F	-124.5247860754	50321.5	201.9	201.9	1.9	25.2	556.3
Ne	-162.6662268243	50268.8	149.3	149.3	1.6	25.2	554.6
Na	-203.7924564342	50224.7	105.1	105.1	1.7	25.2	513.2
Mg	-254.5824824697	50592.4	472.8	472.8	2.2	25.2	560.7
Al	-308.6588174408	50268.6	149.0	149.0	2.3	25.2	546.8
Si	-374.1915121650	50480.9	126.0	126.0	1.5	25.4	558.2
P	-441.1065801382	50264.7	145.2	145.2	2.7	25.2	549.4
S	-520.5772038536	50341.2	221.6	221.6	2.8	25.2	559.9
Cl	-607.1392942332	50348.4	228.8	228.8	4.3	25.2	548.2
Ar	-669.9610346228	49644.2	66.6	66.6	2.4	25.0	507.2

Table 2095: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.5953033519	20.5	20.5	20.5	nan	25.0	12.8
He	-2.9503625193	28.1	28.1	28.1	nan	25.1	14.2
Li	-8.8533355382	32.6	32.6	32.6	nan	25.1	16.2
Be	-17.5018098452	18.8	18.8	18.8	nan	25.1	11.8
B	-29.6898770247	23.2	23.2	23.2	nan	25.1	13.6
C	-45.8161210635	34.1	34.1	34.1	nan	25.1	15.2
N	-67.4791536472	24.1	24.1	24.1	nan	25.1	13.2
O	-93.1221415897	23.8	23.8	23.8	nan	25.1	12.5
F	-196.3733195848	32.9	32.9	32.9	nan	25.7	15.5
Ne	-171.3332391489	25.0	25.0	25.0	nan	25.4	13.9
Na	-316.2891086738	31.2	31.2	31.2	nan	25.7	15.0
Mg	-262.6717892951	32.7	32.7	32.7	nan	25.5	15.1
Al	-445.6437494396	35.4	35.4	35.4	nan	25.5	16.8
Si	-550.8019520144	37.4	37.4	37.4	nan	25.7	17.6
P	-649.2276414247	35.9	35.9	35.9	nan	25.7	16.9
S	-750.7612970835	26.9	26.9	26.9	nan	25.7	12.6
Cl	-874.2118709175	29.8	29.8	29.8	nan	25.7	15.0
Ar	-737.0778593286	28.9	28.9	28.9	nan	25.5	14.0

Table 2096: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H	-0.6101951241	582.3	582.3	582.3	3.4	25.0	17.4
He	-3.6762815981	545.9	545.9	545.9	3.7	25.1	16.3
Li	-17.3334644094	582.1	582.1	582.1	3.9	25.5	20.8
Be	-18.1042467215	567.6	567.6	567.6	3.9	25.2	15.5
B	-51.3469426384	501.3	501.3	501.3	3.9	25.5	14.9
C	-47.3160488721	536.4	536.4	536.4	3.9	25.2	14.2
N	-72.8687013985	610.0	610.0	610.0	4.0	25.5	18.6
O	-153.1694965144	608.3	608.3	608.3	4.0	25.7	16.8
F	-200.2651319465	607.4	607.4	607.4	4.1	25.7	17.1
Ne	-254.8461535255	626.0	626.0	626.0	4.1	25.7	15.8
Na	-318.6530389615	670.8	670.8	670.8	4.4	25.7	15.4
Mg	-389.8654509773	618.8	618.8	618.8	4.2	25.7	14.9
Al	-469.2247564311	609.8	609.8	609.8	4.2	25.7	15.0
Si	-559.1016423620	663.0	663.0	663.0	4.4	25.7	15.9
P	-657.2930382353	650.8	650.8	650.8	4.2	25.7	15.7
S	-763.9972552591	612.2	612.2	612.2	3.5	25.7	14.9
Cl	-881.5430746293	632.3	632.3	632.3	4.1	25.7	15.8
Ar	-1008.4580278960	609.4	609.4	609.4	4.0	25.7	14.4

Table 2097: trust region repeats

74.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-0.2615067579	775.1	775.1	0.0	nan	26.4	17.8
basin hopping	-0.8245264447	6841.9	6841.9	6841.9	8.8	25.1	1042.1
cch second order	-0.5736471668	210.2	102.6	102.6	nan	25.7	12.6
diff evo	-0.6177732788	86721.6	0.0	0.0	nan	18.0	577.9
direct	-0.7267203662	24695.2	0.0	0.0	nan	26.4	284.6
direct with trim	-0.5936260522	23093.5	44.6	44.6	nan	25.0	260.6
dual anneal	-0.5907864592	50376.8	499.9	499.9	2.7	25.1	619.0
trust region	-0.5953033519	20.5	20.5	20.5	nan	25.0	12.8
trust region repeats	-0.6101951241	582.3	582.3	582.3	3.4	25.0	17.4

Table 2098: H

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-1.4762220414	910.6	910.6	0.0	nan	26.4	16.6
basin hopping	-3.7149983175	5962.4	5962.4	5962.4	7.9	24.7	934.9
cch second order	-2.8947712272	209.5	109.3	109.3	nan	25.7	13.0
diff evo	-3.0303110872	86906.2	0.0	0.0	nan	18.0	560.2
direct	-3.5730633014	25076.2	0.0	0.0	nan	26.4	291.1
direct with trim	-2.9509410224	23500.4	35.9	35.9	nan	25.0	254.4
dual anneal	-3.5638434008	50391.2	329.5	329.5	2.0	25.2	594.3
trust region	-2.9503625193	28.1	28.1	28.1	nan	25.1	14.2
trust region repeats	-3.6762815981	545.9	545.9	545.9	3.7	25.1	16.3

Table 2099: He

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-4.1027631459	1035.6	1035.6	0.0	nan	26.4	17.9
basin hopping	-18.1019902240	5887.1	5887.1	5887.1	6.8	25.0	925.5
cch second order	-13.1117849728	359.1	183.6	183.6	nan	25.3	16.9
diff evo	-7.9413284759	87824.2	0.0	0.0	nan	18.0	609.2
direct	-8.5099154744	25158.6	0.0	0.0	nan	26.4	292.1
direct with trim	-7.8491784600	23576.2	24.2	24.2	nan	25.0	260.8
dual anneal	-3.6954009966	50451.2	331.6	331.6	2.4	25.2	568.5
trust region	-8.8533355382	32.6	32.6	32.6	nan	25.1	16.2
trust region repeats	-17.3334644094	582.1	582.1	582.1	3.9	25.5	20.8

Table 2100: Li

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-8.4873987755	1044.1	1044.1	0.0	nan	26.4	18.4
basin hopping	-32.7537116998	5757.0	5757.0	5757.0	5.1	25.0	890.7
cch second order	-27.9740254347	358.5	185.9	185.9	nan	25.8	16.8
diff evo	-15.7831589349	78782.1	0.0	0.0	nan	18.0	526.7
direct	-17.3681677933	25082.6	0.0	0.0	nan	26.4	288.1
direct with trim	-15.6486307501	23484.9	23.4	23.4	nan	25.0	255.7
dual anneal	-17.8452648805	50524.7	405.1	405.1	2.7	25.2	605.5
trust region	-17.5018098452	18.8	18.8	18.8	nan	25.1	11.8
trust region repeats	-18.1042467215	567.6	567.6	567.6	3.9	25.2	15.5

Table 2101: Be

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-14.9182074298	998.1	998.1	0.0	nan	26.4	16.5
basin hopping	-54.1605299085	5660.5	5660.5	5660.5	4.3	25.0	881.2
cch second order	-47.4734620354	255.3	133.2	133.2	nan	25.6	13.7
diff evo	-27.2352707209	77104.0	0.0	0.0	nan	18.0	514.3
direct	-28.7525698841	25483.5	0.0	0.0	nan	26.4	282.9
direct with trim	-26.9346096437	23931.9	21.9	21.9	nan	25.0	254.4
dual anneal	-51.3252647874	50968.0	357.4	357.4	2.0	25.5	600.7
trust region	-29.6898770247	23.2	23.2	23.2	nan	25.1	13.6
trust region repeats	-51.3469426384	501.3	501.3	501.3	3.9	25.5	14.9

Table 2102: B

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-23.6455115361	944.6	944.6	0.0	nan	26.4	16.0
basin hopping	-81.3076059638	5580.9	5580.9	5580.9	4.1	25.0	876.5
cch second order	-41.4986327016	251.7	131.3	131.3	nan	26.0	13.4
diff evo	-42.5584469266	79941.5	0.0	0.0	nan	18.1	512.1
direct	-44.5338012958	25088.8	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
direct with trim	-42.0424431578	23446.2	20.3	20.3	nan	24.9	255.0
dual anneal	-46.6729858253	50344.2	224.6	224.6	2.1	25.2	546.4
trust region	-45.8161210635	34.1	34.1	34.1	nan	25.1	15.2
trust region repeats	-47.3160488721	536.4	536.4	536.4	3.9	25.2	14.2

Table 2103: C

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-34.8925506651	944.3	944.3	0.0	nan	26.4	17.3
basin hopping	-115.0343233441	5465.8	5465.8	5465.8	4.0	25.0	847.2
cch second order	-97.3686881658	279.8	145.1	145.1	nan	25.8	14.7
diff evo	-62.1738989625	71140.7	0.0	0.0	nan	18.0	479.6
direct	-64.2696219022	25059.0	0.0	0.0	nan	26.4	289.2
direct with trim	-61.7232558894	23486.6	39.9	39.9	nan	25.0	261.1
dual anneal	-70.8709729456	51054.3	443.7	443.7	2.9	25.5	617.2
trust region	-67.4791536472	24.1	24.1	24.1	nan	25.1	13.2
trust region repeats	-72.8687013985	610.0	610.0	610.0	4.0	25.5	18.6

Table 2104: N

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-48.8619561298	940.2	940.2	0.0	nan	26.4	15.7
basin hopping	-148.8490404687	5680.2	5680.2	5680.2	4.0	25.1	889.4
cch second order	-137.3263616008	292.8	154.7	154.7	nan	26.5	14.9
diff evo	-86.5202702851	71723.5	0.0	0.0	nan	18.0	475.2
direct	-90.4513969728	25507.8	0.0	0.0	nan	26.4	287.9
direct with trim	-85.5047161484	23963.5	21.9	21.9	nan	25.0	258.4
dual anneal	-93.4583603274	50325.4	205.8	205.8	2.2	25.2	553.3
trust region	-93.1221415897	23.8	23.8	23.8	nan	25.1	12.5
trust region repeats	-153.1694965144	608.3	608.3	608.3	4.0	25.7	16.8

Table 2105: O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-65.7400272699	936.8	936.8	0.0	nan	26.4	15.3
basin hopping	-194.4304697651	5407.6	5407.6	5407.6	3.7	25.1	842.4
cch second order	-100.1113137132	319.7	164.1	164.1	nan	26.2	16.2
diff evo	-115.9416542441	78076.0	0.0	0.0	nan	18.1	509.5
direct	-120.2360498408	25367.5	0.0	0.0	nan	26.4	285.2
direct with trim	-114.8186293597	23814.0	19.6	19.6	nan	25.0	252.5
dual anneal	-124.5247860754	50321.5	201.9	201.9	1.9	25.2	556.3
trust region	-196.3733195848	32.9	32.9	32.9	nan	25.7	15.5
trust region repeats	-200.2651319465	607.4	607.4	607.4	4.1	25.7	17.1

Table 2106: F

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-85.6997256914	944.6	944.6	0.0	nan	26.4	16.0
basin hopping	-258.1902908217	5210.2	5210.2	5210.2	3.7	25.1	858.6
cch second order	-236.2163852008	322.1	162.7	162.7	nan	26.3	15.8
diff evo	-150.8704674276	63991.0	0.0	0.0	nan	18.0	433.1
direct	-156.7028978022	24993.3	0.0	0.0	nan	26.4	290.0
direct with trim	-150.0597125657	23341.0	32.1	32.1	nan	24.9	261.4
dual anneal	-162.6662268243	50268.8	149.3	149.3	1.6	25.2	554.6
trust region	-171.3332391489	25.0	25.0	25.0	nan	25.4	13.9
trust region repeats	-254.8461535255	626.0	626.0	626.0	4.1	25.7	15.8

Table 2107: Ne

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-108.9028669548	993.8	993.8	0.0	nan	26.4	17.4
basin hopping	-324.8789523456	4849.4	4849.4	4849.4	3.5	25.0	808.9
cch second order	-160.3555302091	243.6	122.3	122.3	nan	26.2	14.7
diff evo	-191.5754205199	65253.9	0.0	0.0	nan	18.0	439.8
direct	-197.0654589952	25154.3	0.0	0.0	nan	26.4	293.4
direct with trim	-189.6360429051	23575.2	30.2	30.2	nan	25.0	253.3
dual anneal	-203.7924564342	50224.7	105.1	105.1	1.7	25.2	513.2
trust region	-316.2891086738	31.2	31.2	31.2	nan	25.7	15.0
trust region repeats	-318.6530389615	670.8	670.8	670.8	4.4	25.7	15.4

Table 2108: Na

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-135.5017817879	1052.3	1052.3	0.0	nan	26.4	17.2
basin hopping	-393.5276513864	4885.2	4885.2	4885.2	3.4	25.1	823.8
cch second order	-216.0836569520	792.5	395.5	395.5	nan	26.2	25.8
diff evo	-238.1034752955	66580.6	0.0	0.0	nan	18.0	466.9
direct	-244.7470413715	25149.5	0.0	0.0	nan	26.4	291.8
direct with trim	-237.0611448357	23502.7	14.7	14.7	nan	24.9	249.1
dual anneal	-254.5824824697	50592.4	472.8	472.8	2.2	25.2	560.7
trust region	-262.6717892951	32.7	32.7	32.7	nan	25.5	15.1
trust region repeats	-389.8654509773	618.8	618.8	618.8	4.2	25.7	14.9

Table 2109: Mg

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-165.6406107246	1037.8	1037.8	0.0	nan	26.4	17.6
basin hopping	-474.4533752889	4861.3	4861.3	4861.3	3.3	25.1	823.9
cch second order	-258.7912878517	263.7	133.7	133.7	nan	26.1	14.1
diff evo	-291.4278454433	63806.2	0.0	0.0	nan	18.0	435.2
direct	-298.4069443668	25114.6	0.0	0.0	nan	26.4	296.0
direct with trim	-289.1761314113	23516.7	16.1	16.1	nan	25.0	258.2
dual anneal	-308.6588174408	50268.6	149.0	149.0	2.3	25.2	546.8
trust region	-445.6437494396	35.4	35.4	35.4	nan	25.5	16.8
trust region repeats	-469.2247564311	609.8	609.8	609.8	4.2	25.7	15.0

Table 2110: Al

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-199.4563359502	1223.2	1223.2	0.0	nan	26.4	25.0
basin hopping	-560.5288410239	5082.1	5082.1	5082.1	3.5	25.3	840.6
cch second order	-284.5819837286	252.5	128.3	128.3	nan	27.2	14.4
diff evo	-351.2284571591	64965.2	0.0	0.0	nan	18.0	435.3
direct	-355.9835964087	25200.8	0.0	0.0	nan	26.4	291.2
direct with trim	-349.4379955935	23615.6	14.3	14.3	nan	25.0	254.4
dual anneal	-374.1915121650	50480.9	126.0	126.0	1.5	25.4	558.2
trust region	-550.8019520144	37.4	37.4	37.4	nan	25.7	17.6
trust region repeats	-559.1016423620	663.0	663.0	663.0	4.4	25.7	15.9

Table 2111: Si

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-237.0796189666	1405.0	1405.0	0.0	nan	26.4	28.8
basin hopping	-660.8154041078	4820.2	4820.2	4820.2	3.5	25.3	829.4
cch second order	-360.9879976475	374.9	189.6	189.6	nan	26.5	17.7
diff evo	-418.2012990571	65222.8	0.0	0.0	nan	18.0	445.4
direct	-422.8249604042	25069.9	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
direct with trim	-416.2575791140	23418.1	18.5	18.5	nan	24.9	252.9
dual anneal	-441.1065801382	50264.7	145.2	145.2	2.7	25.2	549.4
trust region	-649.2276414247	35.9	35.9	35.9	nan	25.7	16.9
trust region repeats	-657.2930382353	650.8	650.8	650.8	4.2	25.7	15.7

Table 2112: P

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-278.6354911581	1070.6	1070.6	0.0	nan	26.4	19.6
basin hopping	-769.1438209069	5012.2	5012.2	5012.2	3.4	25.3	816.8
cch second order	-419.8364928447	252.0	127.6	127.6	nan	26.2	13.3
diff evo	-492.6477259039	65196.6	0.0	0.0	nan	18.0	439.7
direct	-498.9922155628	25268.4	0.0	0.0	nan	26.4	289.6
direct with trim	-492.6033969755	23686.8	19.5	19.5	nan	25.0	256.2
dual anneal	-520.5772038536	50341.2	221.6	221.6	2.8	25.2	559.9
trust region	-750.7612970835	26.9	26.9	26.9	nan	25.7	12.6
trust region repeats	-763.9972552591	612.2	612.2	612.2	3.5	25.7	14.9

Table 2113: S

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-324.2439306002	1074.2	1074.2	0.0	nan	26.4	21.6
basin hopping	-893.5561406594	4554.6	4554.6	4554.6	3.3	25.1	804.4
cch second order	-455.0234584626	247.0	125.1	125.1	nan	26.5	13.2
diff evo	-574.2873187668	66971.0	0.0	0.0	nan	18.0	461.3
direct	-582.8367938669	25184.6	0.0	0.0	nan	26.4	288.3
direct with trim	-575.4210690567	23615.8	29.3	29.3	nan	25.0	257.3
dual anneal	-607.1392942332	50348.4	228.8	228.8	4.3	25.2	548.2
trust region	-874.2118709175	29.8	29.8	29.8	nan	25.7	15.0
trust region repeats	-881.5430746293	632.3	632.3	632.3	4.1	25.7	15.8

Table 2114: Cl

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
acevedo	-374.0203493568	1979.7	1979.7	0.0	nan	26.4	40.6
basin hopping	-1017.6820946541	4746.5	4746.5	4746.5	3.4	25.3	824.9
cch second order	-519.0606617474	252.2	127.9	127.9	nan	25.6	12.8
diff evo	-662.5883885821	77880.9	0.0	0.0	nan	18.1	521.7
direct	-672.3486980722	25001.5	0.0	0.0	nan	26.4	283.1
direct with trim	-665.3594142053	23397.0	19.1	19.1	nan	25.0	249.5
dual anneal	-669.9610346228	49644.2	66.6	66.6	2.4	25.0	507.2
trust region	-737.0778593286	28.9	28.9	28.9	nan	25.5	14.0
trust region repeats	-1008.4580278960	609.4	609.4	609.4	4.0	25.7	14.4

Table 2115: Ar

74.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H	basin hopping	-0.8245264447
He	basin hopping	-3.7149983175
Li	basin hopping	-18.1019902240
Be	basin hopping	-32.7537116998
B	basin hopping	-54.1605299085
C	basin hopping	-81.3076059638
N	basin hopping	-115.0343233441
O	trust region repeats	-153.1694965144
F	trust region repeats	-200.2651319465
Ne	basin hopping	-258.1902908217
Na	basin hopping	-324.8789523456
Mg	basin hopping	-393.5276513864
Al	basin hopping	-474.4533752889
Si	basin hopping	-560.5288410239
P	basin hopping	-660.8154041078
S	basin hopping	-769.1438209069
Cl	basin hopping	-893.5561406594
Ar	basin hopping	-1017.6820946541

Table 2116: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	29.0	29.0	29.0	nan	-290.0222184161	14.5
cch second order	307.6	156.8	156.8	nan	-187.7372300924	15.2
trust region repeats	601.9	601.9	601.9	4.0	-325.9818304167	16.1
acevedo	1072.8	1072.8	0.0	nan	-117.3092697190	19.7
basin hopping	5348.1	5348.1	5348.1	4.4	-333.4418759628	864.5
direct with trim	23553.7	24.7	24.7	nan	-206.8376953970	255.8
direct	25147.6	0.0	0.0	nan	-211.5738840934	289.0
dual anneal	50399.5	259.1	259.1	2.4	-219.7346263267	564.4
diff evo	73227.1	0.0	0.0	nan	-207.3740283929	491.3

Table 2117: Average (all systems)

Molecules

75   def2 1.0xLDA X+1.00xERNZERHOF KE

75.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1559634481	1247.8	1247.8	1247.8	3.2	12.0	3783.9
H2O	-78.0118680648	3652.0	3652.0	3652.0	2.6	48.0	24546.5
HF	-102.6545160881	2751.8	2751.8	2751.8	1.4	42.0	12534.2
Li2	-15.1582215354	6105.2	6105.2	6105.2	7.6	28.0	22684.8
LiH	-8.1696998673	1999.2	1999.2	1999.2	7.4	20.0	7000.4

Table 2118: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1559634496	24013.0	9.0	9.0	1.0	12.0	32161.5
H2O	-78.0118680495	102236.6	5256.2	5256.2	489.2	48.0	283186.1
HF	-102.6545160844	90941.8	5853.4	5853.4	543.2	42.0	168881.1
Li2	-15.1582215425	56024.4	20.4	20.4	1.0	28.0	93905.6
LiH	-8.1696992292	40025.2	20.8	20.8	1.2	20.0	57571.6

Table 2119: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1559634480	10.0	10.0	10.0	1.0	12.0	23.5
H2O	-78.0118680648	14.0	14.0	14.0	1.0	48.0	62.9
HF	-102.6545160881	15.0	15.0	15.0	1.0	42.0	47.3
Li2	-15.1582215354	11.0	11.0	11.0	1.0	28.0	27.4
LiH	-8.1696998673	12.0	12.0	12.0	1.0	20.0	21.7

Table 2120: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1559634480	217.0	217.0	217.0	2.0	12.0	32.4
H2O	-78.0118680648	313.0	313.0	313.0	1.0	48.0	100.3
HF	-102.6545160881	305.0	305.0	305.0	1.0	42.0	64.2
Li2	-15.1582215354	323.0	323.0	323.0	1.0	28.0	56.5
LiH	-8.1696998673	268.0	268.0	268.0	1.0	20.0	41.0

Table 2121: trust region repeats

75.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-1.1559634481	1247.8	1247.8	1247.8	3.2	12.0	3783.9
dual anneal	-1.1559634496	24013.0	9.0	9.0	1.0	12.0	32161.5
trust region	-1.1559634480	10.0	10.0	10.0	1.0	12.0	23.5
trust region repeats	-1.1559634480	217.0	217.0	217.0	2.0	12.0	32.4

Table 2122: H2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-78.0118680648	3652.0	3652.0	3652.0	2.6	48.0	24546.5
dual anneal	-78.0118680495	102236.6	5256.2	5256.2	489.2	48.0	283186.1
trust region	-78.0118680648	14.0	14.0	14.0	1.0	48.0	62.9
trust region repeats	-78.0118680648	313.0	313.0	313.0	1.0	48.0	100.3

Table 2123: H2O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-102.6545160881	2751.8	2751.8	2751.8	1.4	42.0	12534.2
dual anneal	-102.6545160844	90941.8	5853.4	5853.4	543.2	42.0	168881.1
trust region	-102.6545160881	15.0	15.0	15.0	1.0	42.0	47.3
trust region repeats	-102.6545160881	305.0	305.0	305.0	1.0	42.0	64.2

Table 2124: HF

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-15.1582215354	6105.2	6105.2	6105.2	7.6	28.0	22684.8
dual anneal	-15.1582215425	56024.4	20.4	20.4	1.0	28.0	93905.6
trust region	-15.1582215354	11.0	11.0	11.0	1.0	28.0	27.4
trust region repeats	-15.1582215354	323.0	323.0	323.0	1.0	28.0	56.5

Table 2125: Li2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-8.1696998673	1999.2	1999.2	1999.2	7.4	20.0	7000.4
dual anneal	-8.1696992292	40025.2	20.8	20.8	1.2	20.0	57571.6
trust region	-8.1696998673	12.0	12.0	12.0	1.0	20.0	21.7
trust region repeats	-8.1696998673	268.0	268.0	268.0	1.0	20.0	41.0

Table 2126: LiH

75.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H2	dual anneal	-1.1559634496
H2O	basin hopping	-78.0118680648
HF	trust region repeats	-102.6545160881
Li2	dual anneal	-15.1582215425
LiH	basin hopping	-8.1696998673

Table 2127: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	12.4	12.4	12.4	1.0	-41.0300538007	36.6
trust region repeats	285.2	285.2	285.2	1.2	-41.0300538007	58.9
basin hopping	3151.2	3151.2	3151.2	4.4	-41.0300538007	14109.9
dual anneal	62648.2	2232.0	2232.0	207.1	-41.0300536711	127141.2

Table 2128: Average (all systems)

76 def2 1.0xLDA X+1.00xOL1 KE

76.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1998282625	1169.4	1169.4	1169.4	5.4	12.0	2616.6
H2O	-78.0687087467	4015.4	4015.4	4015.4	12.2	48.0	18083.9
HF	-102.6722218785	3310.8	3310.8	3310.8	7.6	42.0	9498.3
Li2	-15.3053944987	6710.0	6710.0	6710.0	8.0	28.0	14482.9
LiH	-8.2692088862	2860.8	2860.8	2860.8	10.2	20.0	5583.7

Table 2129: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1998282642	24011.0	7.0	7.0	1.0	12.0	21379.3
H2O	-78.0687087350	96111.6	104.0	104.0	2.8	48.0	141216.4
HF	-102.6722218756	84037.8	33.4	33.4	1.2	42.0	89898.0
Li2	-15.3053945004	56621.4	617.4	617.4	1.0	28.0	48902.4
LiH	-8.2692084035	40078.2	74.2	74.2	1.0	20.0	31239.9

Table 2130: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1998282625	9.0	9.0	9.0	1.0	12.0	21.1
H2O	-78.0687087467	17.0	17.0	17.0	1.0	48.0	84.2
HF	-102.6722218785	12.0	12.0	12.0	1.0	42.0	37.5
Li2	-15.3053944987	9.0	9.0	9.0	1.0	28.0	23.3
LiH	-8.2692088862	11.0	11.0	11.0	1.0	20.0	20.7

Table 2131: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1998282625	180.0	180.0	180.0	1.0	12.0	22.0
H2O	-78.0687087467	296.0	296.0	296.0	1.0	48.0	72.0
HF	-102.6722218785	322.0	322.0	322.0	1.0	42.0	56.6
Li2	-15.3053944987	303.0	303.0	303.0	1.0	28.0	40.5
LiH	-8.2692088862	1048.0	1048.0	1048.0	2.0	20.0	95.7

Table 2132: trust region repeats

76.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-1.1998282625	1169.4	1169.4	1169.4	5.4	12.0	2616.6
dual anneal	-1.1998282642	24011.0	7.0	7.0	1.0	12.0	21379.3
trust region	-1.1998282625	9.0	9.0	9.0	1.0	12.0	21.1
trust region repeats	-1.1998282625	180.0	180.0	180.0	1.0	12.0	22.0

Table 2133: H2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-78.0687087467	4015.4	4015.4	4015.4	12.2	48.0	18083.9
dual anneal	-78.0687087350	96111.6	104.0	104.0	2.8	48.0	141216.4
trust region	-78.0687087467	17.0	17.0	17.0	1.0	48.0	84.2
trust region repeats	-78.0687087467	296.0	296.0	296.0	1.0	48.0	72.0

Table 2134: H2O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-102.6722218785	3310.8	3310.8	3310.8	7.6	42.0	9498.3
dual anneal	-102.6722218756	84037.8	33.4	33.4	1.2	42.0	89898.0
trust region	-102.6722218785	12.0	12.0	12.0	1.0	42.0	37.5
trust region repeats	-102.6722218785	322.0	322.0	322.0	1.0	42.0	56.6

Table 2135: HF

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-15.3053944987	6710.0	6710.0	6710.0	8.0	28.0	14482.9
dual anneal	-15.3053945004	56621.4	617.4	617.4	1.0	28.0	48902.4
trust region	-15.3053944987	9.0	9.0	9.0	1.0	28.0	23.3
trust region repeats	-15.3053944987	303.0	303.0	303.0	1.0	28.0	40.5

Table 2136: Li2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-8.2692088862	2860.8	2860.8	2860.8	10.2	20.0	5583.7
dual anneal	-8.2692084035	40078.2	74.2	74.2	1.0	20.0	31239.9
trust region	-8.2692088862	11.0	11.0	11.0	1.0	20.0	20.7
trust region repeats	-8.2692088862	1048.0	1048.0	1048.0	2.0	20.0	95.7

Table 2137: LiH

76.3 Best methods summary

system	best method	best energy
H2	dual anneal	-1.1998282642
H2O	trust region	-78.0687087467
HF	basin hopping	-102.6722218785
Li2	dual anneal	-15.3053945004
LiH	trust region repeats	-8.2692088862

Table 2138: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	11.6	11.6	11.6	1.0	-41.1030724545	37.3
trust region repeats	429.8	429.8	429.8	1.2	-41.1030724545	57.4
basin hopping	3613.3	3613.3	3613.3	8.7	-41.1030724545	10053.1
dual anneal	60172.0	167.2	167.2	1.4	-41.1030723558	66527.2

Table 2139: Average (all systems)

77 def2 1.0xLDA X+1.00xPERDEW KE

77.1 Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.2126893320	1320.6	1320.6	1320.6	6.2	12.0	4241.7
H2O	-78.7410104820	4303.0	4303.0	4303.0	11.4	48.0	32230.0
HF	-103.5416874328	3220.8	3220.8	3220.8	6.8	42.0	15425.4
Li2	-15.4538736478	7688.2	7688.2	7688.2	7.8	28.0	30168.3
LiH	-8.3499836572	2640.4	2640.4	2640.4	9.8	20.0	9204.4

Table 2140: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.2126893339	24011.0	7.0	7.0	1.0	12.0	33409.1
H2O	-78.7410104701	96049.2	43.6	43.6	1.8	48.0	279729.2
HF	-103.5416874298	84016.8	12.8	12.8	1.0	42.0	153509.2
Li2	-15.4538736491	56610.6	606.6	606.6	1.0	28.0	93487.0
LiH	-8.3499829607	40083.4	79.0	79.0	1.2	20.0	58018.8

Table 2141: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.2126893320	9.0	9.0	9.0	1.0	12.0	21.6
H2O	-78.7410104820	17.0	17.0	17.0	1.0	48.0	67.9
HF	-103.5416874328	12.0	12.0	12.0	1.0	42.0	37.5
Li2	-15.4538736478	9.0	9.0	9.0	1.0	28.0	24.0
LiH	-8.3499834605	15.0	15.0	15.0	1.0	20.0	32.4

Table 2142: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.2126893320	180.0	180.0	180.0	1.0	12.0	27.6
H2O	-78.7410104820	384.0	384.0	384.0	1.0	48.0	116.8
HF	-103.5416874328	333.0	333.0	333.0	1.0	42.0	72.5
Li2	-15.4538736478	278.0	278.0	278.0	1.0	28.0	48.8
LiH	-8.3499836572	895.0	895.0	895.0	1.0	20.0	120.5

Table 2143: trust region repeats

897

77.2 Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-1.2126893320	1320.6	1320.6	1320.6	6.2	12.0	4241.7
dual anneal	-1.2126893339	24011.0	7.0	7.0	1.0	12.0	33409.1
trust region	-1.2126893320	9.0	9.0	9.0	1.0	12.0	21.6
trust region repeats	-1.2126893320	180.0	180.0	180.0	1.0	12.0	27.6

Table 2144: H2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-78.7410104820	4303.0	4303.0	4303.0	11.4	48.0	32230.0
dual anneal	-78.7410104701	96049.2	43.6	43.6	1.8	48.0	279729.2
trust region	-78.7410104820	17.0	17.0	17.0	1.0	48.0	67.9
trust region repeats	-78.7410104820	384.0	384.0	384.0	1.0	48.0	116.8

Table 2145: H2O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-103.5416874328	3220.8	3220.8	3220.8	6.8	42.0	15425.4
dual anneal	-103.5416874298	84016.8	12.8	12.8	1.0	42.0	153509.2
trust region	-103.5416874328	12.0	12.0	12.0	1.0	42.0	37.5
trust region repeats	-103.5416874328	333.0	333.0	333.0	1.0	42.0	72.5

Table 2146: HF

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-15.4538736478	7688.2	7688.2	7688.2	7.8	28.0	30168.3
dual anneal	-15.4538736491	56610.6	606.6	606.6	1.0	28.0	93487.0
trust region	-15.4538736478	9.0	9.0	9.0	1.0	28.0	24.0
trust region repeats	-15.4538736478	278.0	278.0	278.0	1.0	28.0	48.8

Table 2147: Li2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-8.3499836572	2640.4	2640.4	2640.4	9.8	20.0	9204.4
dual anneal	-8.3499829607	40083.4	79.0	79.0	1.2	20.0	58018.8
trust region	-8.3499834605	15.0	15.0	15.0	1.0	20.0	32.4
trust region repeats	-8.3499836572	895.0	895.0	895.0	1.0	20.0	120.5

Table 2148: LiH

77.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H2	dual anneal	-1.2126893339
H2O	trust region	-78.7410104820
HF	trust region	-103.5416874328
Li2	dual anneal	-15.4538736491
LiH	trust region repeats	-8.3499836572

Table 2149: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	12.4	12.4	12.4	1.0	-41.4598488710	36.6
trust region repeats	414.0	414.0	414.0	1.0	-41.4598489104	77.2
basin hopping	3834.6	3834.6	3834.6	8.4	-41.4598489104	18254.0
dual anneal	60154.2	149.8	149.8	1.2	-41.4598487687	123630.7

Table 2150: Average (all systems)

78   Averaged over basis sets and functionals

78.1   Methods

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1894936809	1245.9	1245.9	1245.9	4.9	12.0	3547.4
H2O	-78.2738624312	3990.1	3990.1	3990.1	8.7	48.0	24953.4
HF	-102.9561417998	3094.5	3094.5	3094.5	5.3	42.0	12485.9
Li2	-15.3058298940	6834.5	6834.5	6834.5	7.8	28.0	22445.3
LiH	-8.2629641369	2500.1	2500.1	2500.1	9.1	20.0	7262.9

Table 2151: basin hopping

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1894936826	24011.7	7.7	7.7	1.0	12.0	28983.3
H2O	-78.2738624182	98132.5	1801.3	1801.3	164.6	48.0	234710.6
HF	-102.9561417966	86332.1	1966.5	1966.5	181.8	42.0	137429.4
Li2	-15.3058298973	56418.8	414.8	414.8	1.0	28.0	78765.0
LiH	-8.2629635312	40062.3	58.0	58.0	1.1	20.0	48943.4

Table 2152: dual anneal

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1894936809	9.3	9.3	9.3	1.0	12.0	22.0
H2O	-78.2738624312	16.0	16.0	16.0	1.0	48.0	71.6
HF	-102.9561417998	13.0	13.0	13.0	1.0	42.0	40.8
Li2	-15.3058298940	9.7	9.7	9.7	1.0	28.0	24.9
LiH	-8.2629640713	12.7	12.7	12.7	1.0	20.0	24.9

Table 2153: trust region

system	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
H2	-1.1894936809	192.3	192.3	192.3	1.3	12.0	27.3
H2O	-78.2738624312	331.0	331.0	331.0	1.0	48.0	96.3
HF	-102.9561417998	320.0	320.0	320.0	1.0	42.0	64.4
Li2	-15.3058298940	301.3	301.3	301.3	1.0	28.0	48.6
LiH	-8.2629641369	737.0	737.0	737.0	1.3	20.0	85.7

Table 2154: trust region repeats

78.2   Systems

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-1.1894936809	1245.9	1245.9	1245.9	4.9	12.0	3547.4
dual anneal	-1.1894936826	24011.7	7.7	7.7	1.0	12.0	28983.3
trust region	-1.1894936809	9.3	9.3	9.3	1.0	12.0	22.0
trust region repeats	-1.1894936809	192.3	192.3	192.3	1.3	12.0	27.3

Table 2155: H2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-78.2738624312	3990.1	3990.1	3990.1	8.7	48.0	24953.4
dual anneal	-78.2738624182	98132.5	1801.3	1801.3	164.6	48.0	234710.6
trust region	-78.2738624312	16.0	16.0	16.0	1.0	48.0	71.6
trust region repeats	-78.2738624312	331.0	331.0	331.0	1.0	48.0	96.3

Table 2156: H2O

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-102.9561417998	3094.5	3094.5	3094.5	5.3	42.0	12485.9
dual anneal	-102.9561417966	86332.1	1966.5	1966.5	181.8	42.0	137429.4
trust region	-102.9561417998	13.0	13.0	13.0	1.0	42.0	40.8
trust region repeats	-102.9561417998	320.0	320.0	320.0	1.0	42.0	64.4

Table 2157: HF

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-15.3058298940	6834.5	6834.5	6834.5	7.8	28.0	22445.3
dual anneal	-15.3058298973	56418.8	414.8	414.8	1.0	28.0	78765.0
trust region	-15.3058298940	9.7	9.7	9.7	1.0	28.0	24.9
trust region repeats	-15.3058298940	301.3	301.3	301.3	1.0	28.0	48.6

Table 2158: Li2

method	energy	e evals	g evals	h evals	unique sols	basis size	time
basin hopping	-8.2629641369	2500.1	2500.1	2500.1	9.1	20.0	7262.9
dual anneal	-8.2629635312	40062.3	58.0	58.0	1.1	20.0	48943.4
trust region	-8.2629640713	12.7	12.7	12.7	1.0	20.0	24.9
trust region repeats	-8.2629641369	737.0	737.0	737.0	1.3	20.0	85.7

Table 2159: LiH

78.3   Best methods summary

system	best method	best energy
H2	dual anneal	-1.1894936826
H2O	basin hopping	-78.2738624312
HF	basin hopping	-102.9561417998
Li2	dual anneal	-15.3058298973
LiH	trust region repeats	-8.2629641369

Table 2160: Lowest-energy methods for each system

method	av. E evals	av. G evals	av. H evals	av. N. sols	av. E	av. time
trust region	12.1	12.1	12.1	1.0	-41.1976583754	36.9
trust region repeats	376.3	376.3	376.3	1.1	-41.1976583886	64.5
basin hopping	3533.0	3533.0	3533.0	7.2	-41.1976583886	14139.0
dual anneal	60991.5	849.7	849.7	69.9	-41.1976582652	105766.4

Table 2161: Average (all systems)