



步长扰动参数会直接影响构型搜索的效率。如果取值过大，随机移动后的粒子非常容易超出边界边界，或者导致总能量出现极端增加，进而被梅特罗波利斯准则拒绝，导致算法收敛停滞；如果取值过小，系统在位形空间中的探索步伐缓慢，极易卡在局域极小值中无法翻越能量势垒。

降温因子和每个温度水平下的迭代次数共同决定了退火的速率。降温因子越贴近一，且单层循环次数越大，意味着系统有更充分的机会在特定能量面上达到热力学平衡，从而大幅降低陷入局域极小点的概率，但运算耗时也会呈线性甚至指数级上升。

初始温度的设定是能否跳出局域极小的关键。若初始设定过低，在演化起始阶段接受较差状态的概率极低，算法将蜕变为普通的贪心下降，体系会直接落入距离初始随机点最近的一个局部稳定态中。