به نام خدا

جستجوی ساختارهای پایدار و شبه‌پایدار مواد با استفاده از الگوریتم فرگشتی (تکاملی)

حجت قلی‌زاده

gholizadeh@ph.iut.ac.ir

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده‌ی فیزیک

گروه ماده‌ی چگال محاسباتی

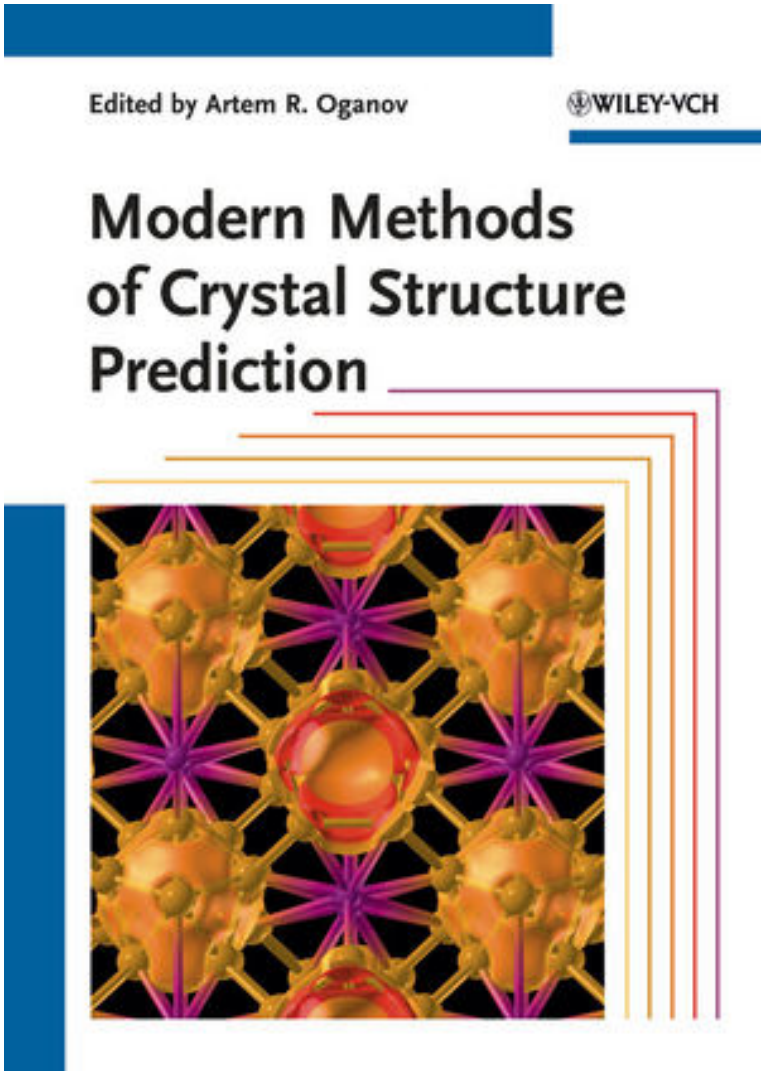
https://qsm.iut.ac.ir/

دومین کارگاه یادگیری ماشینی: کاربردها در ماده‌ی چگال

۱۱ تا ۱۳ مهرماه ۱۳۹۷

دانشکده‌ی فیزیک دانشگاه تهران

برای مطالعه‌ی بیشتر در زمینه‌ی **جستجوی ساختارهای پایدار و شبه‌پایدار مواد** می‌توانید به کتاب زیر و مراجع ذکر شده در آن مراجعه کنید:



عناوین

1. مقدمه
   - اهمیت موضوع
   - پایه‌ی نظری
   - مروری بر کارهای انجام شده
2. الگوریتم فرگشتی
   - مفاهیم
   - نحوه‌ی اجرا
   - جمعیت
   - تابع شناسه
   - دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
   - عملگرهای دگرگونی
3. نکات تکنیکی
   - زبان برنامه‌نویسی

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

ساختار اتمی ماده را می‌توان با استفاده از روش‌های تجربی اندازه گرفت.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

ساختار اتمی ماده را می‌توان با استفاده از روش‌های تجربی اندازه گرفت.

محدودیت‌های اندازه‌گیری:

1. برای اندازه‌گیری نمونه‌ای از ماده‌ی مورد نظر لازم است.
2. شرایط اندازه‌گیری محدود است.
3. هزینه‌ی اندازه‌گیری نسبتاً بالا است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

ساختار اتمی ماده را می‌توان با استفاده از روش‌های تجربی اندازه گرفت.

محدودیت‌های اندازه‌گیری:

1. برای اندازه‌گیری نمونه‌ای از ماده‌ی مورد نظر لازم است.
2. شرایط اندازه‌گیری محدود است.
3. هزینه‌ی اندازه‌گیری نسبتاً بالا است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

ساختار اتمی ماده را می‌توان با استفاده از روش‌های تجربی اندازه گرفت.

محدودیت‌های اندازه‌گیری:

1. برای اندازه‌گیری نمونه‌ای از ماده‌ی مورد نظر لازم است.
2. شرایط اندازه‌گیری محدود است.
3. هزینه‌ی اندازه‌گیری نسبتاً بالا است.

مقدمه: اهمیت موضوع

ساختار اتمی از مهم‌ترین و مطلوب‌ترین داده‌ها درباره‌ی هر ماده‌ی جامد است.

ساختار اتمی ماده را می‌توان با استفاده از روش‌های تجربی اندازه گرفت.

محدودیت‌های اندازه‌گیری:

1. برای اندازه‌گیری نمونه‌ای از ماده‌ی مورد نظر لازم است.
2. شرایط اندازه‌گیری محدود است.
3. هزینه‌ی اندازه‌گیری نسبتاً بالا است.

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

مقدمه: پایه‌ی نظری

از دیدگاه نظری، پایدارترین ساختار یک ماده، ساختار با کمترین انرژی آزاد گیبس است.

$$\text{انرژی آزاد گیبس} \equiv G(p,T) = U + pV - TS.$$

مقدمه: پایه‌ی نظری

از دیدگاه نظری، پایدارترین ساختار یک ماده، ساختار با کمترین انرژی آزاد گیبس است.

$$\text{انرژی آزاد گیبس} \equiv G(p,T) = U + pV - TS.$$

انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است.

$$G \equiv G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots, \boldsymbol{r}_n) \equiv \text{تابعی از } 3n \text{ متغیر}$$

مقدمه: پایه‌ی نظری

از دیدگاه نظری، پایدارترین ساختار یک ماده، ساختار با کمترین انرژی آزاد گیبس است.

$$\text{انرژی آزاد گیبس} \equiv G(p,T) = U + pV - TS.$$

انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است.

$$G \equiv G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots, \boldsymbol{r}_n) \equiv \text{تابعی از } 3n \text{ متغیر}$$

مسأله‌ی پیدا کردن ساختار پایدار یک جامد در واقع معادل است با مسأله‌ی پیدا کردن کمینه‌ی مطلق تابع بس‌متغیره‌ی انرژی آزاد آن. در دمای صفر کلوین، انرژی آزاد با انرژی کل سیستم برابر است.

مقدمه: پایه‌ی نظری

از دیدگاه نظری، پایدارترین ساختار یک ماده، ساختار با کمترین انرژی آزاد گیبس است.

$$\text{انرژی آزاد گیبس} \equiv G(p,T) = U + pV - TS.$$

انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است.

$$G \equiv G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots, \boldsymbol{r}_n) \equiv \text{تابعی از } 3n \text{ متغیر}$$

مسأله‌ی پیدا کردن ساختار پایدار یک جامد در واقع معادل است با مسأله‌ی پیدا کردن کمینه‌ی مطلق تابع **بس‌متغیره‌ی** انرژی آزاد آن. در دمای صفر کلوین، انرژی آزاد با انرژی کل سیستم برابر است.

مقدمه: پایه‌ی نظری

از دیدگاه نظری، پایدارترین ساختار یک ماده، ساختار با کمترین انرژی آزاد گیبس است.

$$\text{انرژی آزاد گیبس} \equiv G(p,T) = U + pV - TS.$$

انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است.

$$G \equiv G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots, \boldsymbol{r}_n) \equiv \text{تابعی از } 3n \text{ متغیر}$$

مسأله‌ی پیدا کردن ساختار پایدار یک جامد در واقع معادل است با مسأله‌ی پیدا کردن کمینه‌ی مطلق تابع **بس‌متغیره‌ی** انرژی آزاد آن. در دمای صفر کلوین، انرژی آزاد با انرژی کل سیستم برابر است.

یکی از رسوایی‌های ادامه‌دار در علوم طبیعی این است که، در حالت عمومی، پیش‌بینی ساختار حتی ساده‌ترین جامدات بلوری صرفاً با دانستن ترکیب شیمیایی آن‌ها غیرممکن است.

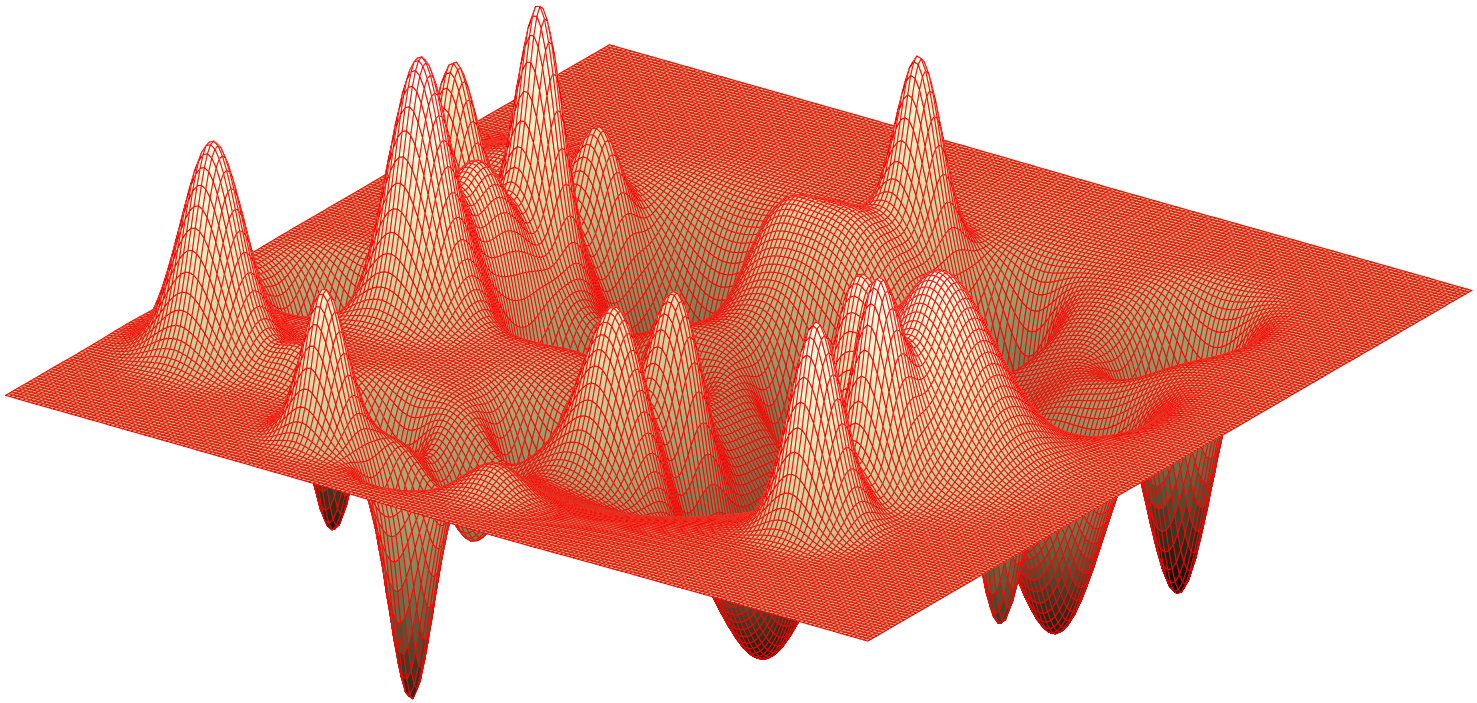
J. Maddox, Crystals from first principles, *Nature* **335**, 201 (1988)

مقدمه: سطح انرژی بورن–اپنهایمر

تابع انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است و معمولاً با نام سطح انرژی بورن–اپنهایمر شناخته می‌شود. هر نقطه بر روی این سطح متناظر است با یک پیکربندی اتمی. ساختارهای پایدار و شبه‌پایدار یک جامد به ترتیب با کمینه‌های مطلق (سراسری) و محلی (موضعی) این سطح متناظرند.

مقدمه: سطح انرژی بورن–اپنهایمر

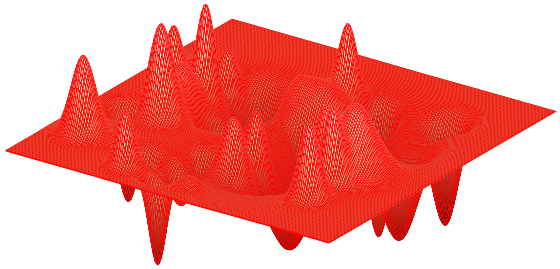
تابع انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است و معمولاً با نام سطح انرژی بورن–اپنهایمر شناخته می‌شود. هر نقطه بر روی این سطح متناظر است با یک پیکربندی اتمی. ساختارهای پایدار و شبه‌پایدار یک جامد به ترتیب با کمینه‌های مطلق (سراسری) و محلی (موضعی) این سطح متناظرند.



شکل: طرحی خیالی از یک سطح انرژی بورن–اپنهایمر فرضی برای دو متغیر مستقل

مقدمه: سطح انرژی بورن–اپنهایمر

تابع انرژی آزاد یک ساختار اتمی تابعی از پیکربندی اتم‌های آن است و معمولاً با نام سطح انرژی بورن–اپنهایمر شناخته می‌شود. هر نقطه بر روی این سطح متناظر است با یک پیکربندی اتمی. ساختارهای پایدار و شبه‌پایدار یک جامد به ترتیب با کمینه‌های مطلق (سراسری) و محلی (موضعی) این سطح متناظرند.



در یک بلور با N اتم در یاخته، تعداد متغیرهای مستقل سطح انرژی بورن–اپنهایمر برابر است با $۳(N+۱)$. از سوی دیگر، تعداد پیکربندی‌های اتمی بسیار زیاد است و با افزایش تعداد اتم‌ها و یا تعداد انواع اتمی در یاخته به شدت افزایش می‌یابد. به عنوان مثال، تعداد پیکربندی‌ها برای یک عنصر A (یک ترکیب دو عنصری AB) با ۱۰ اتم در یاخته از مرتبه‌ی $۱۰^{۱۱}$ ($۱۰^{۱۴}$)، با ۲۰ اتم در یاخته از مرتبه‌ی $۱۰^{۲۵}$ ($۱۰^{۳۰}$)، و با ۳۰ اتم در یاخته از مرتبه‌ی $۱۰^{۳۹}$ ($۱۰^{۴۷}$) براورد می‌شود. واضح است که محاسبه‌ی انرژی آزاد در تمام نقاط فضای متغیرهای آن، جز برای ساختارهای ساده با حداکثر ۵ اتم در یاخته، غیرممکن است (Artem R. Oganov and Colin W. Glass 2006).

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در دمای صفر کلوین، انرژی آزاد با انرژی کل سیستم برابر است. روش‌های محاسبه‌ی انرژی کل یک پیکربندی اتمی به دو دسته‌ی عمده تقسیم می‌شوند:

1. **روش‌های کوانتومی ابتدابه‌ساکن:**
   - مزیت اصلی این دسته از روش‌ها در دقت نتایج آن‌ها است.
   - از سوی دیگر، اجرای آن‌ها ممکن است به طور محسوسی زمان‌بر و محدودکننده باشد.
   - به ویژه، این روش‌ها برای تهیه‌ی نتایج قابل استناد و نیز سنجش اعتبار سایر روش‌ها مناسبند.

2. **روش‌های میدان نیرو (force field):**
   - مزیت اصلی این دسته از روش‌ها در سرعت اجرای آن‌ها است.
   - در عین حال باید آن‌ها را با احتیاط به کار برد، زیرا دقت آن‌ها به شدت وابسته به کیفیت پارامترهای تعریف کننده‌ی برهم‌کنش‌های بین‌اتمی است.
   - به ویژه، این روش‌ها برای مطالعه‌ی ساختارهای بزرگ، و نیز برای آزمایش نرم‌افزار و آموزش مناسبند.

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در این‌جا برای محاسبه‌ی انرژی کل پیکربندی‌های اتمی از ساده‌ترین روش میدان نیرو استفاده می‌کنیم: پتانسیل بین اتمی لنارد جونز:

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در این‌جا برای محاسبه‌ی انرژی کل پیکربندی‌های اتمی از ساده‌ترین روش میدان نیرو استفاده می‌کنیم: پتانسیل بین اتمی لنارد جونز:

$$V_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = ۴\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}$$

$$\equiv \varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - ۲\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}, \quad r_{ij}^{*} = ۲^{۱/۶}\sigma_{ij} \approx ۱/۱۲۲۴۶۲\sigma_{ij}.$$

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در این‌جا برای محاسبه‌ی انرژی کل پیکربندی‌های اتمی از ساده‌ترین روش میدان نیرو استفاده می‌کنیم: پتانسیل بین اتمی لنارد جونز:

$$V_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = ۴\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}$$

$$\equiv \varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - ۲\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}, \quad r_{ij}^{*} = ۲^{۱/۶}\sigma_{ij} \approx ۱/۱۲۲۴۶۲\sigma_{ij}.$$

$$\boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = -\boldsymbol{\nabla}_i V_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = \left(۱۲\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - \left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}\frac{۱}{r_{ij}}\right)\boldsymbol{\nabla}_i r_{ij}.$$

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در این‌جا برای محاسبه‌ی انرژی کل پیکربندی‌های اتمی از ساده‌ترین روش میدان نیرو استفاده می‌کنیم: پتانسیل بین اتمی لنارد جونز:

$$V_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = ۴\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}$$

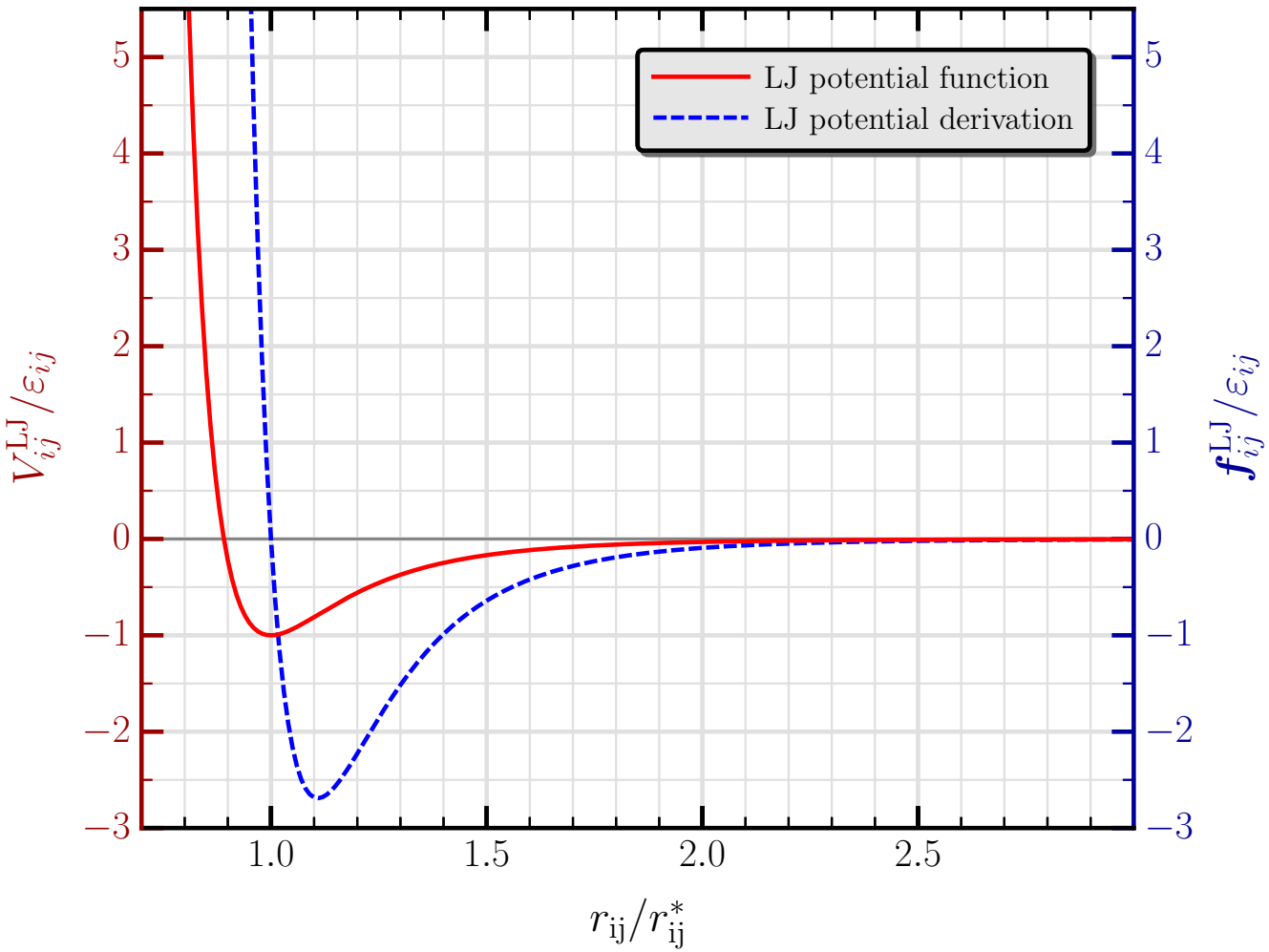
$$\equiv \varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - ۲\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}, \quad r_{ij}^{*} = ۲^{۱/۶}\sigma_{ij} \approx ۱/۱۲۲۴۶۲\sigma_{ij}.$$

$$\boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = -\boldsymbol{\nabla}_i V_{ij}^{\mathrm{LJ}}(r_{ij}) = \left(۱۲\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۱۲} - \left(\frac{r_{ij}^{*}}{r_{ij}}\right)^{۶}\right\}\frac{۱}{r_{ij}}\right)\boldsymbol{\nabla}_i r_{ij}.$$

برای واهلش نیروها، از الگوریتم بهینه‌سازی L-BFGS-B که کمینه‌سازی مقید را پشتیبانی می‌کند، استفاده می‌کنیم. این الگوریتم به تابع انرژی و مشتق آن نیاز دارد.

مقدمه: محاسبه‌ی سطح انرژی بورن–اپنهایمر

در این‌جا برای محاسبه‌ی انرژی کل پیکربندی‌های اتمی از ساده‌ترین روش میدان نیرو استفاده می‌کنیم: پتانسیل بین اتمی لنارد جونز:



عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

روش‌های انتخاب ساختارهای محتمل:

1. آگاهی از ساختار پایدار مواد مشابه
2. شهود

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

روش‌های انتخاب ساختارهای محتمل:

1. آگاهی از ساختار پایدار مواد مشابه
2. شهود

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

روش‌های انتخاب ساختارهای محتمل:

1. آگاهی از ساختار پایدار مواد مشابه
2. شهود

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

روش‌های انتخاب ساختارهای محتمل:

1. آگاهی از ساختار پایدار مواد مشابه
2. شهود

در این رهیافت، کاوش داده‌های موجود نقشی اساسی دارد. بنابراین، مشکل اصلی وقتی بروز می‌کند که هیچ گونه آگاهی و یا شهود قبلی درباره‌ی ساختار پایدار یک ماده وجود نداشته باشد.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

رهیافت عمومی برای پیدا کردن ساختار پایدار یک ماده عبارت است از مقایسه‌ی انرژی آزاد تعدادی از ساختارهایی که برای آن ماده محتمل به نظر می‌رسند.

ابزارهای در دست ما برای انجام این مقایسه مشتمل بر مجموعه‌ای متنوع از روش‌های عددی با قابلیت محاسبه‌ی انرژی تشکیل پیکربندی‌های اتمی است. مثال‌هایی از این بسته‌های محاسباتی عبارتند از GULP، LAMMPS، Quantum-ESPRESSO، و FHI-aims.

روش‌های انتخاب ساختارهای محتمل:

1. آگاهی از ساختار پایدار مواد مشابه
2. شهود

در این رهیافت، کاوش داده‌های موجود نقشی اساسی دارد. بنابراین، مشکل اصلی وقتی بروز می‌کند که هیچ گونه آگاهی و یا شهود قبلی درباره‌ی ساختار پایدار یک ماده وجود نداشته باشد.

خوشبختانه، برای پیدا کردن کمینه‌ی مطلق انرژی آزاد، محاسبه‌ی آن در تمام نقاط فضای متغیرهایش لازم نیست، بلکه کافی است ناحیه‌های مناسبی از این فضا کاوش شود.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

روش‌های موجود برای پیدا کردن کمینه‌ی مطلق انرژی آزاد به طور عمومی به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱. روش‌هایی که لزوماً کاوش را از یک نقطه‌ی نسبتاً خوب شروع کرده و به دنبال نقاط بهتر و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) می‌گردند:
   - واهلش ساختارهای تصادفی
   - پرش کمینه‌ها
   - پرش حوزه‌ها
   - تبرید شبیه‌سازی شده
   - متادینامیک

۲. روش‌هایی که چندان به نقطه‌ی شروع وابسته نیستند، بلکه به صورت مرحله به مرحله دسته‌ای از نقاط انتخابی در فضای متغیرهای مسأله را بهبود داده و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) را پیدا می‌کنند:
   - الگوریتم‌های فرگشتی: بررسی هم‌زمان مجموعه‌ای از نقاط فضای متغیرهای مسأله، به جای بررسی یک نقطه‌ی تنها از این فضا.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

روش‌های موجود برای پیدا کردن کمینه‌ی مطلق انرژی آزاد به طور عمومی به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱. روش‌هایی که لزوماً کاوش را از یک نقطه‌ی نسبتاً خوب شروع کرده و به دنبال نقاط بهتر و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) می‌گردند:
   - واهلش ساختارهای تصادفی
   - پرش کمینه‌ها
   - پرش حوزه‌ها
   - تبرید شبیه‌سازی شده
   - متادینامیک

۲. روش‌هایی که چندان به نقطه‌ی شروع وابسته نیستند، بلکه به صورت مرحله به مرحله دسته‌ای از نقاط انتخابی در فضای متغیرهای مسأله را بهبود داده و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) را پیدا می‌کنند:
   - الگوریتم‌های فرگشتی: بررسی هم‌زمان مجموعه‌ای از نقاط فضای متغیرهای مسأله، به جای بررسی یک نقطه‌ی تنها از این فضا.

مقدمه: مروری بر کارهای انجام شده

روش‌های موجود برای پیدا کردن کمینه‌ی مطلق انرژی آزاد به طور عمومی به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱. روش‌هایی که لزوماً کاوش را از یک نقطه‌ی نسبتاً خوب شروع کرده و به دنبال نقاط بهتر و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) می‌گردند:
   - واهلش ساختارهای تصادفی
   - پرش کمینه‌ها
   - پرش حوزه‌ها
   - تبرید شبیه‌سازی شده
   - متادینامیک

۲. روش‌هایی که چندان به نقطه‌ی شروع وابسته نیستند، بلکه به صورت مرحله به مرحله دسته‌ای از نقاط انتخابی در فضای متغیرهای مسأله را بهبود داده و در نهایت بهترین نقطه (کمینه‌ی مطلق) را پیدا می‌کنند:
   - الگوریتم‌های فرگشتی: بررسی هم‌زمان مجموعه‌ای از نقاط فضای متغیرهای مسأله، به جای بررسی یک نقطه‌ی تنها از این فضا.

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

الگوریتم فرگشتی از فرآیند فرگشت (تکامل) در طبیعت الهام گرفته است.

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

الگوریتم فرگشتی از فرآیند فرگشت (تکامل) در طبیعت الهام گرفته است.

در طبیعت، فرآیند فرگشت شامل مراحل زیر است:

۱. از بین افراد جمعیت حاضر، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای تولید مثل و انتقال ویژگی‌هایشان به نسل بعد خواهند داشت.

۲. در فرآیند تولید مثل، بخش عمده‌ای از ویژگی‌های والدین بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌شود و بخشی دیگر توسط دو دسته از عوامل دچار تحول می‌شود:
   - اختلاط ویژگی‌های موجود به واسطه‌ی ترکیب صفات دو والد (پدر و مادر)
   - پیدایش ویژگی‌های جدید به واسطه‌ی جهش‌های ژنی

۳. از بین فرزندان متولد شده، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای رسیدن به سن تولید مثل دارند.

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

الگوریتم فرگشتی از فرآیند فرگشت (تکامل) در طبیعت الهام گرفته است.

در طبیعت، فرآیند فرگشت شامل مراحل زیر است:

۱. از بین افراد جمعیت حاضر، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای تولید مثل و انتقال ویژگی‌هایشان به نسل بعد خواهند داشت.

۲. در فرآیند تولید مثل، بخش عمده‌ای از ویژگی‌های والدین بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌شود و بخشی دیگر توسط دو دسته از عوامل دچار تحول می‌شود:
   - اختلاط ویژگی‌های موجود به واسطه‌ی ترکیب صفات دو والد (پدر و مادر)
   - پیدایش ویژگی‌های جدید به واسطه‌ی جهش‌های ژنی

۳. از بین فرزندان متولد شده، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای رسیدن به سن تولید مثل دارند.

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

الگوریتم فرگشتی از فرآیند فرگشت (تکامل) در طبیعت الهام گرفته است.

در طبیعت، فرآیند فرگشت شامل مراحل زیر است:

۱. از بین افراد جمعیت حاضر، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای تولید مثل و انتقال ویژگی‌هایشان به نسل بعد خواهند داشت.

۲. در فرآیند تولید مثل، بخش عمده‌ای از ویژگی‌های والدین بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌شود و بخشی دیگر توسط دو دسته از عوامل دچار تحول می‌شود:
   - اختلاط ویژگی‌های موجود به واسطه‌ی ترکیب صفات دو والد (پدر و مادر)
   - پیدایش ویژگی‌های جدید به واسطه‌ی جهش‌های ژنی

۳. از بین فرزندان متولد شده، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای رسیدن به سن تولید مثل دارند.

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

الگوریتم فرگشتی از فرآیند فرگشت (تکامل) در طبیعت الهام گرفته است.

در طبیعت، فرآیند فرگشت شامل مراحل زیر است:

۱. از بین افراد جمعیت حاضر، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای تولید مثل و انتقال ویژگی‌هایشان به نسل بعد خواهند داشت.

۲. در فرآیند تولید مثل، بخش عمده‌ای از ویژگی‌های والدین بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌شود و بخشی دیگر توسط دو دسته از عوامل دچار تحول می‌شود:
   - اختلاط ویژگی‌های موجود به واسطه‌ی ترکیب صفات دو والد (پدر و مادر)
   - پیدایش ویژگی‌های جدید به واسطه‌ی جهش‌های ژنی

۳. از بین فرزندان متولد شده، بهترین‌ها (دارای بیش‌ترین سازگاری) شانس بالاتری برای رسیدن به سن تولید مثل دارند.

الگوریتم فرگشتی: مفاهیم

مفاهیم الگوریتم فرگشتی:

فرد: هر نقطه در فضای جستجو

جمعیت: مجموعه‌ای از نقاط در فضای جستجو که الگوریتم فرگشتی به‌طور هم‌زمان آن‌ها را بررسی می‌کند

شناسه: تابعی که میزان تشابه (یا تفاوت) دو فرد را به صورت کمّی مشخص می‌کند

نسل: هر دور در حلقه‌ی اجرای الگوریتم فرگشتی

والدین: زیرمجموعه‌ای از افراد جمعیت نسل حاضر که برای تولید جمعیت نسل بعد انتخاب می‌شوند

فرزندان: زیرمجموعه‌ای از افراد جمعیت نسل بعد که با اِعمال عملگرهای تکثیر بر روی والدین تولید می‌شوند

دسته‌بندی: فرایندی که طی آن افراد جمعیت نسل حاضر بر اساس کیفیت‌شان برای یکی از اهداف زیر دسته‌بندی می‌شوند:

- **بقا:** فردی از جمعیت نسل حاضر بدون تغییر در جمعیت نسل بعد باقی می‌ماند (زنده می‌ماند)
- **زادآوری:** فردی از جمعیت نسل حاضر فرزندانی را با حفظ پاره‌ای از ویژگی‌های خود در جمعیت نسل بعد پدید می‌آورد
- **مرگ:** فردی از جمعیت نسل حاضر بدون برجا گذاشتن هیچ فرزندی از چرخه حذف می‌شود (می‌میرد)

وراثت: فرایندی که طی آن پاره‌ای از ویژگی‌های والدین به فرزندان آن‌ها منتقل می‌شود

جهش: فرایندی که طی آن ویژگی‌های جدیدی در افراد جمعیت ایجاد می‌شود

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

۱. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
۲. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
۳. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

۱. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
۲. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
۳. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

۱. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
۲. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
۳. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

۱. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
۲. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
۳. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

نکات مهم:

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

1. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
2. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
3. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

نکات مهم:

1. جمعیت اولیه معمولاً به روش تصادفی اما با اعمال قیدها و ملاحظات مبتنی بر دانش قبلی، تجربه، و شهود، ایجاد می‌گردد.
2. با اجرای الگوریتم، جمعیت نسل به نسل تغییر می‌یابد، به نحوی که در هر نسل بهترین افراد جمعیت از بهترین افراد جمعیت نسل قبل بهتر می‌شوند، یا حداقل با آن‌ها معادل می‌مانند.
3. تغییر نسل‌ها تا زمانی که شرایط پایان یافتن الگوریتم محقق شود، ادامه می‌یابد.

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

1. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
2. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
3. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

نکات مهم:

1. جمعیت اولیه معمولاً به روش تصادفی اما با اعمال قیدها و ملاحظات مبتنی بر دانش قبلی، تجربه، و شهود، ایجاد می‌گردد.
2. با اجرای الگوریتم، جمعیت نسل به نسل تغییر می‌یابد، به نحوی که در هر نسل بهترین افراد جمعیت از بهترین افراد جمعیت نسل قبل بهتر می‌شوند، یا حداقل با آن‌ها معادل می‌مانند.
3. تغییر نسل‌ها تا زمانی که شرایط پایان یافتن الگوریتم محقق شود، ادامه می‌یابد.

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

1. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
2. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
3. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

نکات مهم:

1. جمعیت اولیه معمولاً به روش تصادفی اما با اعمال قیدها و ملاحظات مبتنی بر دانش قبلی، تجربه، و شهود، ایجاد می‌گردد.
2. با اجرای الگوریتم، جمعیت نسل به نسل تغییر می‌یابد، به نحوی که در هر نسل بهترین افراد جمعیت از بهترین افراد جمعیت نسل قبل بهتر می‌شوند، یا حداقل با آن‌ها معادل می‌مانند.
3. تغییر نسل‌ها تا زمانی که شرایط پایان یافتن الگوریتم محقق شود، ادامه می‌یابد.

الگوریتم فرگشتی: نحوه‌ی اجرا

هر چرخه از اجرای الگوریتم فرگشتی شامل مراحل زیر است:

1. محاسبه‌ی تابع برازش برای تمامی افراد جمعیت
2. دسته‌بندی افراد جمعیت برای بقا، تولید مثل، یا مرگ بر اساس مقدار تابع برازش آن‌ها
3. تولید فرزندان (برای نسل بعد) از طریق اعمال عملگرهای مختلف وراثت و جهش بر روی والدان

نکات مهم:

1. جمعیت اولیه معمولاً به روش تصادفی اما با اعمال قیدها و ملاحظات مبتنی بر دانش قبلی، تجربه، و شهود، ایجاد می‌گردد.
2. با اجرای الگوریتم، جمعیت نسل به نسل تغییر می‌یابد، به نحوی که در هر نسل بهترین افراد جمعیت از بهترین افراد جمعیت نسل قبل بهتر می‌شوند، یا حداقل با آن‌ها معادل می‌مانند.
3. تغییر نسل‌ها تا زمانی که شرایط پایان یافتن الگوریتم محقق شود، ادامه می‌یابد.

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:
   - در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:

- در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
- در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
- در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:
   - در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:
   - در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:
   - در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

الگوریتم فرگشتی: جمعیت

نکات مهم در مدیریت جمعیت:

۱. بهتر است جمعیت اولیه به صورت ترکیبی از دو بخش، یک بخش تصادفی و یک بخش منتخب (با توجه به دانش قبلی، یا تجربه و شهود)، فراهم شود.

۲. برای تمامی ساختارها، مجموعه‌ای از قیود فیزیکی (قیود سخت) باید برقرار باشد:
   - در تمام مراحل اجرای الگوریتم، فاصله‌ی بین هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از یک مقدار مشخص باشد. حتی می‌توان این قید را بهبود داد: فاصله‌ی هیچ دو اتمی در ساختار نباید کوتاه‌تر از جمع شعاع‌های آن‌ها باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، طول هیچ یک از بردارهای شبکه (ابعاد یاخته) نباید کمتر از یک مقدار مشخص باشد. این مقدار مشخص می‌تواند قطر بزرگ‌ترین اتم ساختار باشد.
   - در سیستم‌های تناوبی، زاویه‌ی بین هیچ دو بردار شبکه‌ای نباید خیلی کوچک یا خیلی بزرگ باشد. همین شرط باید برای زاویه‌ی بین هر بردار شبکه و قطر متوازی‌الاضلاع تعریف شده توسط دو بردار شبکه‌ی دیگر نیز برقرار باشد. به عبارت دقیق‌تر، همواره می‌توان بردارهای شبکه را به نحوی انتخاب کرد که زاویه‌ی بین هر دو بردار شبکه بین 60° و 120° باشد.

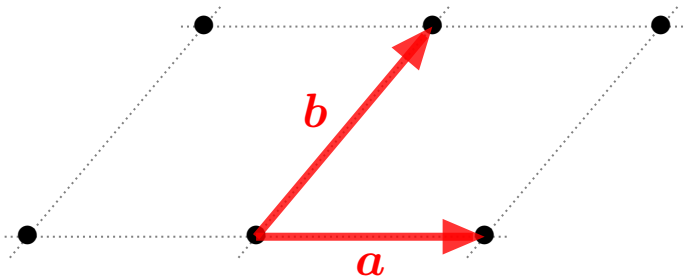
۳. در تمام مراحل اجرای الگوریتم، باید از در نظر گرفتن دوباره‌ی ساختارهایی که در مراحل قبل بررسی شده‌اند، خودداری شود (قید یکتایی).

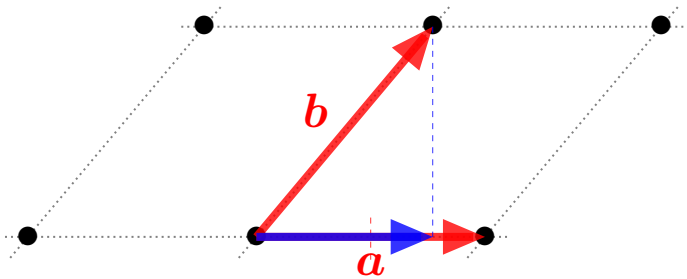
الگوریتم فرگشتی: انتخاب بردار شبکه‌ی مناسب

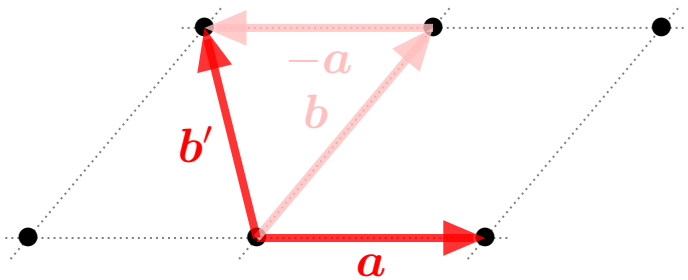
دو بردار شبکه‌ی $\boldsymbol{a}$ و $\boldsymbol{b}$ را در نظر بگیرید، به طوری که $\boldsymbol{b}$ از $\boldsymbol{a}$ کوتاه‌تر نباشد. حال، در صورتی که بزرگی تصویر بردار $\boldsymbol{b}$ در راستای بردار $\boldsymbol{a}$ از نصف طول بردار $\boldsymbol{a}$ بزرگ‌تر باشد، بردار $\boldsymbol{b}$ با

$$\boldsymbol{b}' = \boldsymbol{b} - \mathrm{ceil}\left(|\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}|/|\boldsymbol{a}|^{۲}\right)\cdot \mathrm{sign}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{a}$$

جایگزین می‌گردد، که در آن برای هر عدد حقیقی x، مقدار تابع $\mathrm{ceil}(x)$ عبارت است از کوچک‌ترین عدد صحیح بزرگ‌تر از x یا برابر با x.







عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

الگوریتم فرگشتی: معرفی تابع شناسه

با استفاده از یک تابع شناسه‌ی ساختار، می‌توان ساختارهای تکراری را شناسایی و آن‌ها را از جمعیت حذف کرد.

ویژگی‌های مورد انتظار از یک تابع شناسه‌ی ایده‌آل:

۱. صرفاً مبتنی بر خود ساختار (پیکربندی اتم‌ها) باشد، نه ویژگی‌های آن مانند انرژی و ...
۲. مستقل از نمایش باشد:
   - نسبت به انتخاب یاخته حساس نباشد.
   - با چرخش، انعکاس، و جابه‌جایی کل ساختار در دستگاه مختصات، تغییر نکند.
۳. نسبت به تغییر ترتیب (جایگشت) اتم‌های غیرهم‌نوع حساس باشد.
۴. در برابر خطاهای عددی کوچک پایدار باشد.
۵. معیاری کمّی از میزان شباهت یا تفاوت ساختارها را فراهم کند.

با الهام از نحوه‌ی محاسبه‌ی تابع توزیع شعاعی (radial distribution function)، می‌توان به سادگی یک تابع شناسه‌ی ساختار محاسبه کرد که تقریباً همه‌ی نیازهای مورد انتظار ذکر شده را برآورده می‌کند.

الگوریتم فرگشتی: محاسبه‌ی تابع شناسه

تابع شناسه‌ی ساختار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

الگوریتم فرگشتی: محاسبه‌ی تابع شناسه

تابع شناسه‌ی ساختار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F_{\mathrm{A,B}}(R) = \alpha \sum_{\mathrm{A}_i} \sum_{\mathrm{B}_j \neq \mathrm{A}_i} \frac{\delta(R - R_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j})}{R^{۲}_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j}} - ۱,$$

$$\delta(x - x_۰) \approx \frac{۱}{\sigma_{\mathrm{fingerprint}}\sqrt{۲\pi}} e^{-\frac{(x-x_۰)^{۲}}{۲\sigma^{۲}_{\mathrm{fingerprint}}}}.$$

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{A,B}} \equiv \Big(F_{\mathrm{A,B}}(R_۰),\, F_{\mathrm{A,B}}(R_۱),\, \ldots,\, F_{\mathrm{A,B}}(R_i),\, \ldots,\, F_{\mathrm{A,B}}(R_n)\Big), \quad R_i = i \times \Delta, \quad n = \frac{R_{\max}}{\Delta}.$$

$$\boldsymbol{F} = \Big(\boldsymbol{F}_{\mathrm{A,B}};\quad \boldsymbol{F}_{\mathrm{A,C}};\quad \boldsymbol{F}_{\mathrm{B,C}}\Big)$$

الگوریتم فرگشتی: محاسبه‌ی تابع شناسه

تابع شناسه‌ی ساختار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F_{\mathrm{A,B}}(R) = \alpha \sum_{\mathrm{A}_i} \sum_{\mathrm{B}_j \neq \mathrm{A}_i} \frac{\delta(R - R_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j})}{R^{۲}_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j}} - ۱,$$

$$\delta(x - x_۰) \approx \frac{۱}{\sigma_{\mathrm{fingerprint}}\sqrt{۲\pi}} e^{-\frac{(x-x_۰)^۲}{۲\sigma^۲_{\mathrm{fingerprint}}}}.$$

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{A,B}} \equiv \Big(F_{\mathrm{A,B}}(R_۰),\, F_{\mathrm{A,B}}(R_۱),\, \ldots,\, F_{\mathrm{A,B}}(R_i),\, \ldots,\, F_{\mathrm{A,B}}(R_n)\Big), \quad R_i = i \times \Delta, \quad n = \frac{R_{\max}}{\Delta}.$$

$$\boldsymbol{F} = \Big(\boldsymbol{F}_{\mathrm{A,B}};\quad \boldsymbol{F}_{\mathrm{A,C}};\quad \boldsymbol{F}_{\mathrm{B,C}}\Big)$$

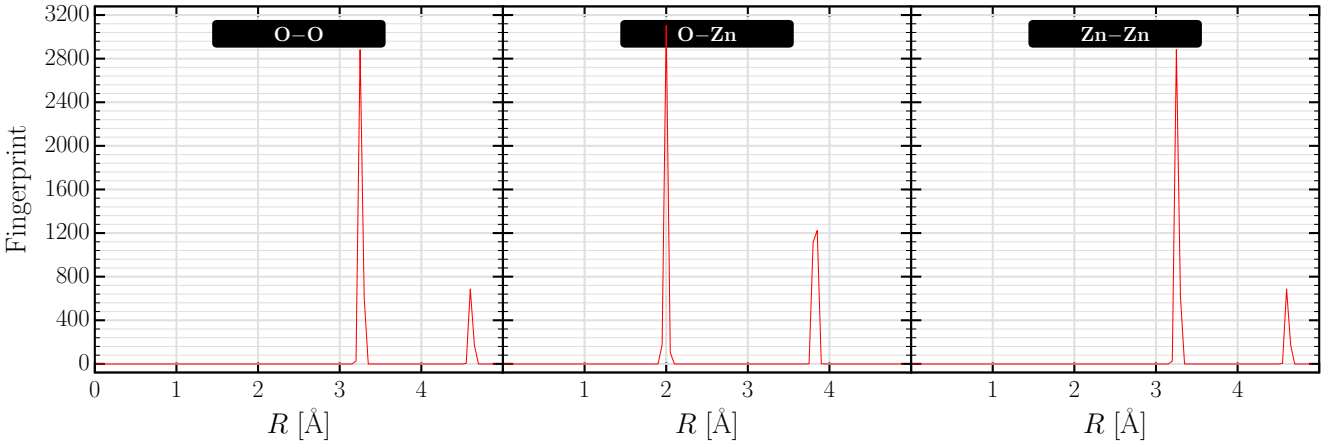
برای تعیین میزان شباهت یا مغایرت دو ساختار دلخواه i و j، فاصله‌ی کسینوسی بین شناسه‌های آن‌ها به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

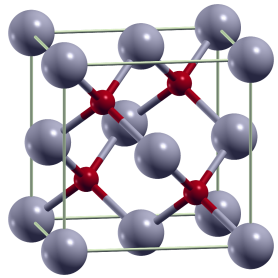
$$d_{ij} \equiv \frac{۱}{۲}\left(۱ - \frac{\boldsymbol{F}_i \cdot \boldsymbol{F}_j}{\|\boldsymbol{F}_i\|\,\|\boldsymbol{F}_j\|}\right) = \frac{۱}{۲}\left(۱ - \frac{\boldsymbol{F}_i \cdot \boldsymbol{F}_j}{\sqrt{\boldsymbol{F}_i \cdot \boldsymbol{F}_i}\sqrt{\boldsymbol{F}_j \cdot \boldsymbol{F}_j}}\right), \quad \Rightarrow \quad ۰ \leq d_{ij} \leq ۱.$$

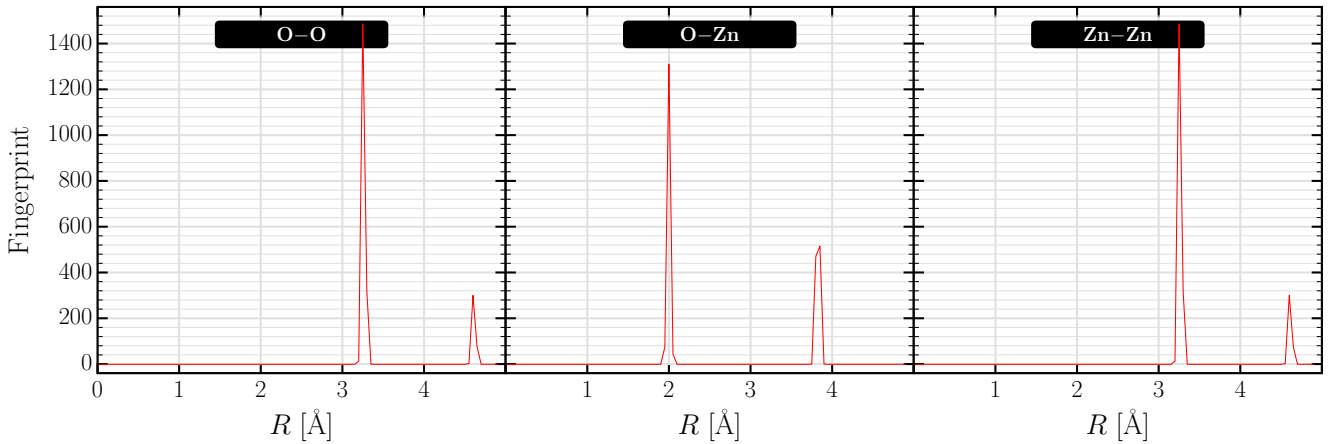
برای دو ساختار کاملاً یکسان، کمیت d برابر با صفر به دست می‌آید. برای حذف اثر خطاهای گرد کردن، معمولاً برای $d < \epsilon$ دو ساختار را یکسان در نظر می‌گیریم.

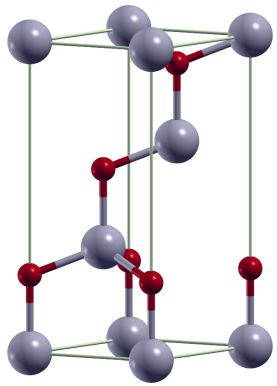
الگوریتم فرگشتی: تابع شناسه

شناسه‌ی ساختار محاسبه شده برای بلور اکسید روی در ساختار زینک‌بلِند:



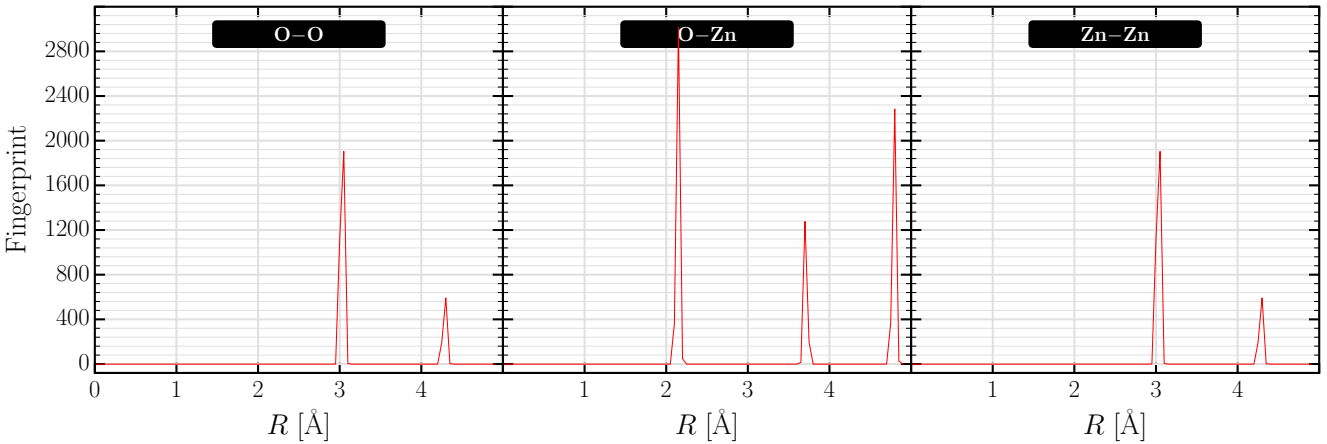


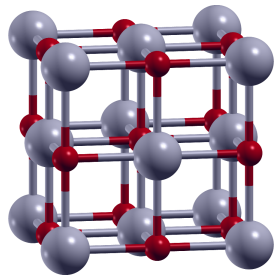


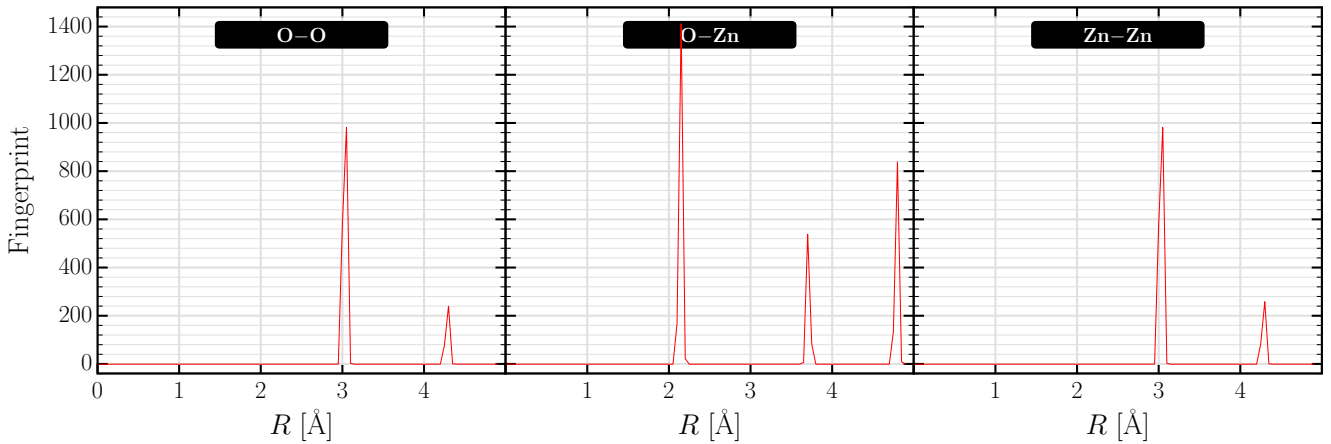


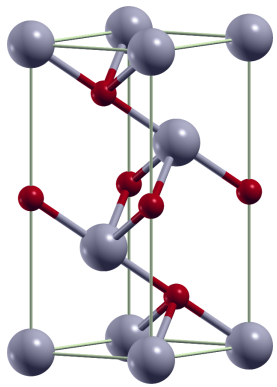
الگوریتم فرگشتی: تابع شناسه

شناسه‌ی ساختار محاسبه شده برای بلور اکسید روی در ساختار سنگ نمک:









عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: دسته‌بندی

پس از محاسبه‌ی کمیت برازش (انرژی) برای تمامی ساختارهای نسل حاضر، این ساختارها بر اساس برازش‌شان دسته‌بندی می‌شوند:

۱. کسری از ساختارهای با بدترین برازش (بالاترین انرژی) حذف می‌شوند (می‌میرند).
۲. ساختارهای باقی‌مانده می‌توانند در فرآیند تولید مثل شرکت کنند.
۳. از ساختارهای باقی‌مانده، تعدادی با بهترین برازش بدون هیچ تغییری به نسل بعد منتقل می‌شوند (زنده می‌مانند).

الگوریتم فرگشتی: انتخاب ساختارهای والد

۱. انتخاب ساختارهای والد بر اساس کمیت برازش آن‌ها انجام می‌گیرد، بدین معنی که شانس هر ساختار برای انتخاب شدن به طور مستقیم با میزان کمیت برازش آن (قرینه‌ی انرژی ساختار) متناسب است.

۲. معمولاً فرایند انتخاب با به چرخش در آوردن یک چرخ رولت (roulette wheel) که در آن هر قطاع به یک ساختار اختصاص یافته و زاویه‌ی مرکزی آن متناسب با میزان برازش آن ساختار است، متناظر گرفته می‌شود.

۳. برنامه‌نویسی فرایند انتخاب لزوماً نیازمند استفاده از مفهوم چرخ رولت نیست:

$$w_j = \frac{1}{\sum_i^N \exp\left(-\frac{E_i - E_{\min}}{\Delta E}\right)} \exp\left(-\frac{E_j - E_{\min}}{\Delta E}\right).$$

الگوریتم فرگشتی: انتخاب ساختارهای والد

۱. انتخاب ساختارهای والد بر اساس کمیت برازش آن‌ها انجام می‌گیرد، بدین معنی که شانس هر ساختار برای انتخاب شدن به طور مستقیم با میزان کمیت برازش آن (قرینه‌ی انرژی ساختار) متناسب است.

۲. معمولاً فرایند انتخاب با به چرخش در آوردن یک چرخ رولت (roulette wheel) که در آن هر قطاع به یک ساختار اختصاص یافته و زاویه‌ی مرکزی آن متناسب با میزان برازش آن ساختار است، متناظر گرفته می‌شود.

۳. برنامه‌نویسی فرایند انتخاب لزوماً نیازمند استفاده از مفهوم چرخ رولت نیست:

$$w_j = \frac{1}{\sum_i^N \exp\left(-\frac{E_i - E_{\min}}{\Delta E}\right)} \exp\left(-\frac{E_j - E_{\min}}{\Delta E}\right).$$

الگوریتم فرگشتی: انتخاب ساختارهای والد

۱. انتخاب ساختارهای والد بر اساس کمیت برازش آن‌ها انجام می‌گیرد، بدین معنی که شانس هر ساختار برای انتخاب شدن به طور مستقیم با میزان کمیت برازش آن (قرینه‌ی انرژی ساختار) متناسب است.

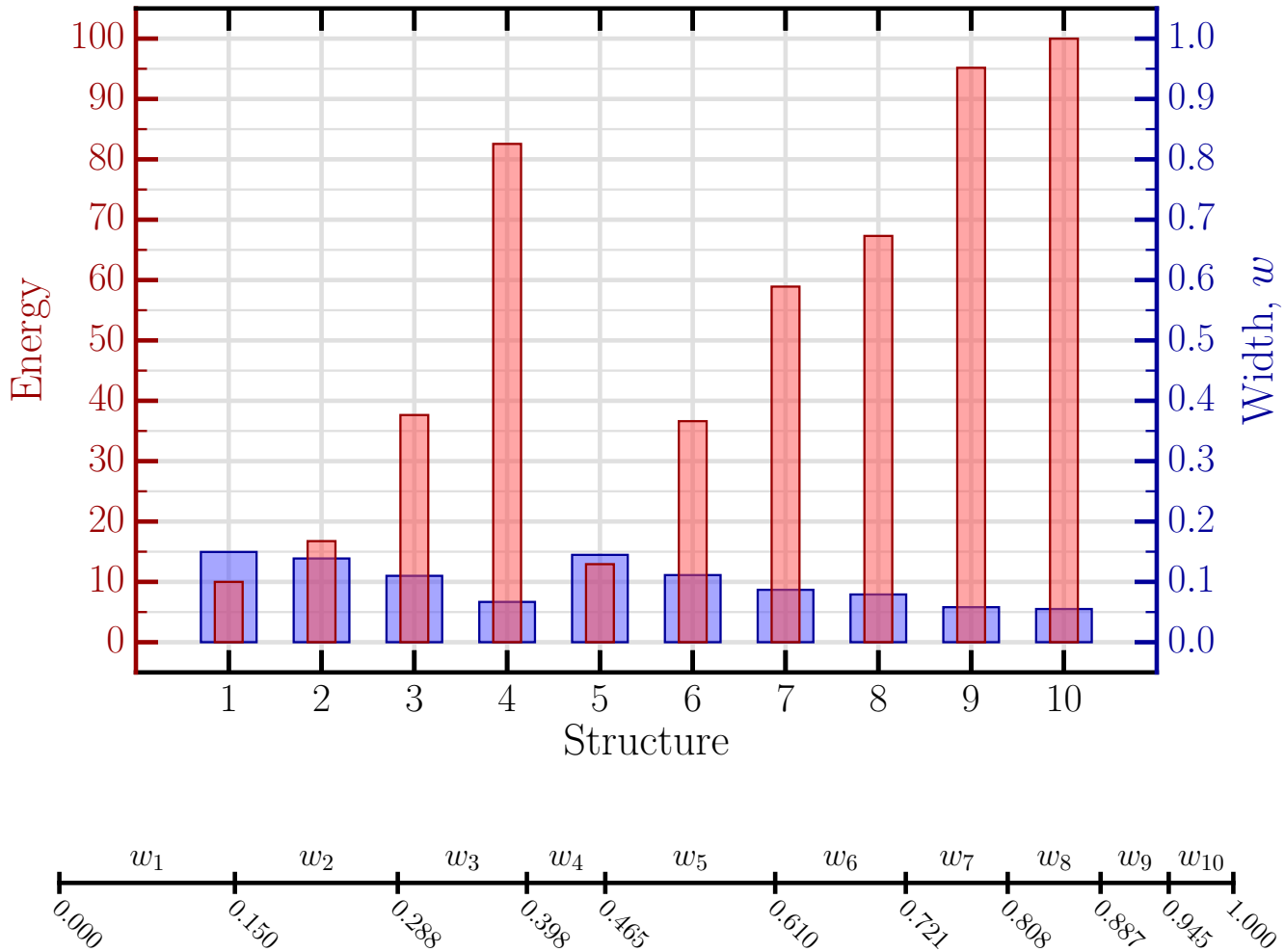
۲. معمولاً فرایند انتخاب با به چرخش در آوردن یک چرخ رولت (roulette wheel) که در آن هر قطاع به یک ساختار اختصاص یافته و زاویه‌ی مرکزی آن متناسب با میزان برازش آن ساختار است، متناظر گرفته می‌شود.

۳. برنامه‌نویسی فرایند انتخاب لزوماً نیازمند استفاده از مفهوم چرخ رولت نیست:

$$w_j = \frac{1}{\sum_i^N \exp\left(-\frac{E_i - E_{\min}}{\Delta E}\right)} \exp\left(-\frac{E_j - E_{\min}}{\Delta E}\right).$$

الگوریتم فرگشتی: انتخاب ساختارهای والد

$$w_j = \frac{1}{\sum_i^N \exp\left(-\frac{E_i - E_{\min}}{\Delta E}\right)} \exp\left(-\frac{E_j - E_{\min}}{\Delta E}\right).$$



عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

الگوریتم فرگشتی: عملگرهای دگرگونی

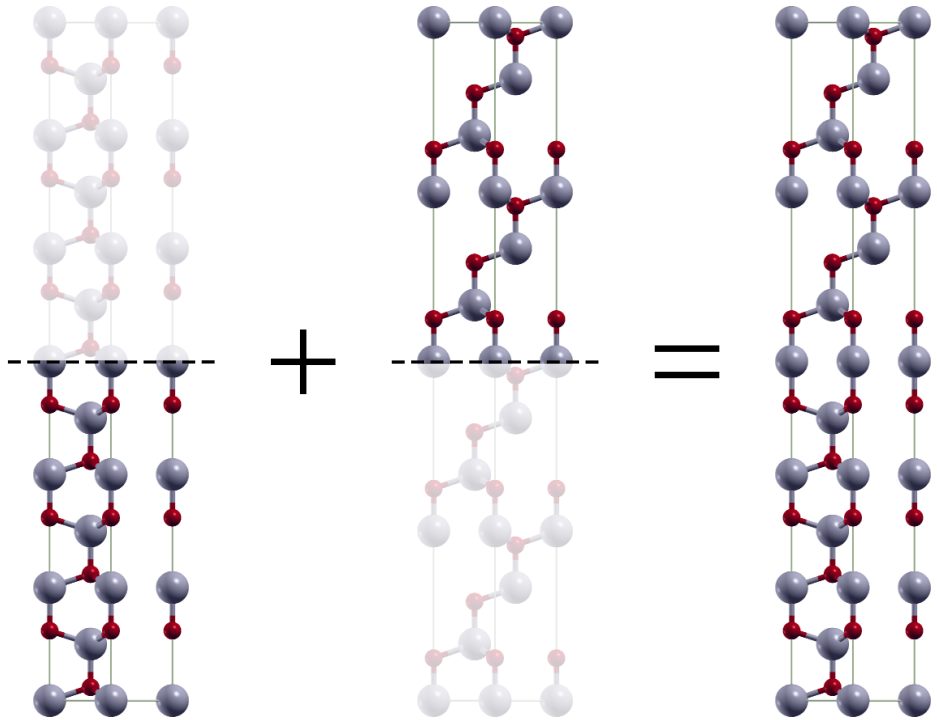
عملگرهای دگرگونی:

الگوریتم فرگشتی: عملگرهای دگرگونی

عملگرهای دگرگونی:

عملگرهای وراثت: ویژگی‌های والدین را بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌کنند. بدین ترتیب، باعث حفظ ویژگی‌های خوب جمعیت از نسلی به نسل بعد می‌شوند.

- برش
- برش و چرخش



الگوریتم فرگشتی: عملگرهای دگرگونی

عملگرهای دگرگونی:

عملگرهای وراثت: ویژگی‌های والدین را بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌کنند. بدین ترتیب، باعث حفظ ویژگی‌های خوب جمعیت از نسلی به نسل بعد می‌شوند.

- برش
- برش و چرخش

الگوریتم فرگشتی: عملگرهای دگرگونی

عملگرهای دگرگونی:

عملگرهای وراثت: ویژگی‌های والدین را بدون تغییر به فرزندان منتقل می‌کنند. بدین ترتیب، باعث حفظ ویژگی‌های خوب جمعیت از نسلی به نسل بعد می‌شوند.

- برش
- برش و چرخش

عملگرهای جهش: تغییرات جدیدی را در افراد جمعیت ایجاد می‌کنند. بدین ترتیب، به تنوع جمعیت می‌افزایند و امکان ظهور افراد برتر را فراهم می‌کنند.

- جهش شبکه
- جایگشت اتم
- جهش نرم

عناوین

۱ مقدمه
- اهمیت موضوع
- پایه‌ی نظری
- مروری بر کارهای انجام شده

۲ الگوریتم فرگشتی
- مفاهیم
- نحوه‌ی اجرا
- جمعیت
- تابع شناسه
- دسته‌بندی و انتخاب ساختارهای والد
- عملگرهای دگرگونی

۳ نکات تکنیکی
- زبان برنامه‌نویسی

نکات تکنیکی: زبان برنامه‌نویسی

با توجه به طبیعت این نرم‌افزار که عمدتاً جنبه‌ی مدیریت اجرا دارد، زبان پایتون برای برنامه‌نویسی این پروژه کاملاً مناسب است، زیرا:

نکات تکنیکی: زبان برنامه‌نویسی

با توجه به طبیعت این نرم‌افزار که عمدتاً جنبه‌ی مدیریت اجرا دارد، زبان پایتون برای برنامه‌نویسی این پروژه کاملاً مناسب است، زیرا:

1. پایتون یک زبان مفسری سطح بالا با امکان برنامه‌نویسی شیءگرا است. علاوه بر دستور زبان بسیار ساده و گویا، این زبان دارای امکانات بسیار مفیدی مانند انواع متنوع داده، کتابخانه‌های آماده و بسیار مجهز در زمینه‌های مختلف، و پشتیبانی خوب و گسترده است.

نکات تکنیکی: زبان برنامه‌نویسی

با توجه به طبیعت این نرم‌افزار که عمدتاً جنبه‌ی مدیریت اجرا دارد، زبان پایتون برای برنامه‌نویسی این پروژه کاملاً مناسب است، زیرا:

1. پایتون یک زبان مفسری سطح بالا با امکان برنامه‌نویسی شیءگرا است. علاوه بر دستور زبان بسیار ساده و گویا، این زبان دارای امکانات بسیار مفیدی مانند انواع متنوع داده، کتابخانه‌های آماده و بسیار مجهز در زمینه‌های مختلف، و پشتیبانی خوب و گسترده است.
2. پروژه‌ی حاضر مستلزم مدیریت تعداد بسیار زیادی وظیفه از قبیل فراخوانی نرم‌افزارهای محاسباتی، ساخت پرونده‌های ورودی آن‌ها، و جمع‌آوری نتایج از پرونده‌های خروجی آن‌ها است. کتابخانه‌های مدیریت اجرا، مدیریت پرونده، ویرایش پرونده، استخراج داده از پرونده، تحلیل داده، و رسم نمودار، همگی در پایتون فراهم هستند.

نکات تکنیکی: زبان برنامه‌نویسی

با توجه به طبیعت این نرم‌افزار که عمدتاً جنبه‌ی مدیریت اجرا دارد، زبان پایتون برای برنامه‌نویسی این پروژه کاملاً مناسب است، زیرا:

۱. پایتون یک زبان مفسری سطح بالا با امکان برنامه‌نویسی شیءگرا است. علاوه بر دستور زبان بسیار ساده و گویا، این زبان دارای امکانات بسیار مفیدی مانند انواع متنوع داده، کتابخانه‌های آماده و بسیار مجهز در زمینه‌های مختلف، و پشتیبانی خوب و گسترده است.

۲. پروژه‌ی حاضر مستلزم مدیریت تعداد بسیار زیادی وظیفه از قبیل فراخوانی نرم‌افزارهای محاسباتی، ساخت پرونده‌های ورودی آن‌ها، و جمع‌آوری نتایج از پرونده‌های خروجی آن‌ها است. کتابخانه‌های مدیریت اجرا، مدیریت پرونده، ویرایش پرونده، استخراج داده از پرونده، تحلیل داده، و رسم نمودار، همگی در پایتون فراهم هستند.

۳. پایتون رایگان، و استفاده از آن برای همگان آزاد است.

نکات تکنیکی: زبان برنامه‌نویسی

با توجه به طبیعت این نرم‌افزار که عمدتاً جنبه‌ی مدیریت اجرا دارد، زبان پایتون برای برنامه‌نویسی این پروژه کاملاً مناسب است، زیرا:

1. پایتون یک زبان مفسری سطح بالا با امکان برنامه‌نویسی شیءگرا است. علاوه بر دستور زبان بسیار ساده و گویا، این زبان دارای امکانات بسیار مفیدی مانند انواع متنوع داده، کتابخانه‌های آماده و بسیار مجهز در زمینه‌های مختلف، و پشتیبانی خوب و گسترده است.
2. پروژه‌ی حاضر مستلزم مدیریت تعداد بسیار زیادی وظیفه از قبیل فراخوانی نرم‌افزارهای محاسباتی، ساخت پرونده‌های ورودی آن‌ها، و جمع‌آوری نتایج از پرونده‌های خروجی آن‌ها است. کتابخانه‌های مدیریت اجرا، مدیریت پرونده، ویرایش پرونده، استخراج داده از پرونده، تحلیل داده، و رسم نمودار، همگی در پایتون فراهم هستند.
3. پایتون رایگان، و استفاده از آن برای همگان آزاد است.
4. پایتون به آسانی قابل نصب بر روی تمامی توزیع‌های متداول سیستم‌های عامل لینوکس و یونیکس است.

با آرزوی موفقیت...