بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه یزد

دانشکده ریاضی

گروه علوم کامپیوتر

پایان‌نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

علوم کامپیوتر- محاسبات علمی

محاسبه مقادیر ویژه و بردارهای ویژه یک ماتریس متقارن حقیقی با استفاده از الگوریتم ژنتیک

استاد راهنما:

دکتر سید ابوالفضل شاهزاده فاضلی

استاد مشاور:

دکتر محمدرضا هوشمند اصل

پژوهش و نگارش:

سید حسن امیری

مهر ۱۳۹۱

کلّیه‌ي حقوق مادّي مرتبط بر نتايج مطالعات، ابتکارات و نوآوري‌هاي ناشی از تحقيق موضوع اين پايان‌نامه متعلّق به دانشگاه یزد است.

تقدیم به

پدرم

مادرم

برادرم

خواهرم

که در تمامی مراحل زندگی، همواره یار و یاورم بودند...

سپاسگزاری

سپاس خدای را که مرا به راه دانش رهنمون شد و هموست که فرصت شاگردی اساتید گرامی را بر من ارزانی داشت تا چراغی بر تاریکی جهلم باشند.

از استاد بزرگوارم، جناب آقای دکتر سید ابوالفضل شاهزاده فاضلی، استاد راهنمای این پژوهش، که افق های جدیدی بر پنجره ی ذهنم گشودند، سپاسگزارم و رهنمودهای ایشان را ارج می نهم.

از جناب آقای دکتر محمدرضا هوشمند اصل که زحمت مطالعه و مشاوره این پایان نامه را تقبل فرمودند تقدیر و تشکر می کنم.

چکیده

در بسیاری از کاربردهای عملی که نیاز به محاسبه‌ی مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی می‌باشد، تنها محاسبه‌ی تعداد کمی از مقادیر ویژه، شامل کوچکترین یا بزرگترین مقدار ویژه مورد نیاز است. در این پایان‌نامه مسئله‌ی محاسبه‌ی مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی، به مسئله‌ی بهینه‌سازی تبدیل می‌گردد. سپس با استفاده از الگوریتم ژنتیک به حل آن پرداخته می‌شود. ابتدا الگوریتم ژنتیک، برای محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه و بردار ویژه‌ی متناظر آن به‌کار برده می‌شود. سپس الگوریتم، به‌منظور محاسبه‌ی m مقدار ویژه و بردار ویژه شامل کوچکترین مقدار ویژه به‌طور همزمان تغییر داده می‌شود. شرط متعامد نرمال بودن بردارهای ویژه‌ی ماتریس متقارن حقیقی را می‌توان به دو روش برآورده نمود. روش اول، اعمال این شرط به عنوان یک محدودیت به تابع هدف مسئله‌ی بهینه‌سازی و روش دوم استفاده از الگوریتم متعامدسازی گرام-اشمیت است. پس از پیاده‌سازی هر یک از الگوریتم‌های بیان شده، به بررسی پیاده‌سازی موازی الگوریتم محاسبه‌ی m مقدار ویژه به‌طور همزمان به‌منظور به‌دست آوردن نقطه تعادل موازی پرداخته می‌شود. در پایان، پس از تعریف یک عملگر جدید، زمان مورد نیاز برای محاسبه‌ی m مقدار ویژه به‌طور همزمان با استفاده از الگوریتم ژنتیک شامل این عملگر، با زمان مورد نیاز برای محاسبه‌ی m مقدار ویژه با استفاده از الگوریتم ژنتیک فاقد این عملگر، مقایسه می‌شود.

فهرست مطالب

پیشگفتار 1

1 تعاریف اولیه و پیش‌نیازهای ریاضی و پردازش موازی 3

1.1 پیش‌نیازهای ریاضی 4

2.1 پردازش موازی 8

2 الگوریتم ژنتیک 11

1.2 الگوریتم ژنتیک 12

1.1.2 مقدمه 12

2.1.2 تاریخچه 12

3.1.2 الگوریتم ژنتیک چیست؟ 15

4.1.2 مفاهیم کلیدی 16

5.1.2 ساختار کلی الگوریتم ژنتیک 17

6.1.2 اجزای اصلی الگوریتم ژنتیک 20

7.1.2 جمعیت اولیه 20

8.1.2 تابع هدف و تابع برازش 22

9.1.2 مقیاس گذاری برازش 22

10.1.2 عملگر انتخاب 24

11.1.2 عملگر تقاطع 27

12.1.2 عملگر جهش 29

۱۳.۱.۲ جایگزینی و انتخاب نسل جدید ۳۱
۱۴.۱.۲ نخبه‌گرایی ۳۱
۱۵.۱.۲ عملگرهای پیشرفته ۳۲
۱۶.۱.۲ قیدها و محدودیت‌ها ۳۳
۱۷.۱.۲ شرط توقف ۳۳
۱۸.۱.۲ همگرایی الگوریتم ژنتیک ۳۴

۳ یافتن مقادیر ویژه با استفاده از الگوریتم ژنتیک ۳۷
۱.۳ مقدمه ۳۸
۲.۳ محاسبه‌ی m مقدار ویژه به‌صورت متوالی ۳۸
۱.۲.۳ محاسبه کوچکترین مقدار ویژه ۳۸
۲.۲.۳ مقادیر ویژه‌ی مراتب بالاتر ۴۳
۳.۳ محاسبه همزمان m مقدار ویژه ۴۶
۱.۳.۳ تابع هدف دارای محدودیت تعامد ۴۶
۲.۳.۳ کروموزوم‌های دارای محدودیت تعامد ۴۹

۴ پیاده‌سازی و نتایج ۵۱
۱.۴ مقدمه ۵۲
۲.۴ محاسبه m مقدار ویژه، به‌صورت متوالی ۵۳
۳.۴ محاسبه‌ی m مقدار ویژه، به‌صورت همزمان ۵۹
۱.۳.۴ محاسبه‌ی m مقدار ویژه، با اعمال محدودیت بر روی تابع هدف ۵۹
۲.۳.۴ محاسبه‌ی m مقدار ویژه با اعمال محدودیت بر روی کروموزوم‌ها ۶۴
۴.۴ پیاده‌سازی موازی ۶۷
۵.۴ بهبود عملکرد الگوریتم ۷۰
۱.۵.۴ عملگر مهاجرت ۷۰

کتاب نامه ۹۰

لیست تصاویر

۱.۲ نمودار گردشی الگوریتم ژنتیک ۱۹

۱.۳ نمودار گردشی الگوریتم ژنتیک برای محاسبه m مقدار ویژه به‌صورت متوالی. ۴۴

۲.۳ نمودار گردشی الگوریتم ژنتیک برای محاسبه‌ی m مقدار ویژه به‌صورت همزمان. ۴۷

۱.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۴

۲.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۵

۳.۴ روند همگرایی در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۵

۴.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H_p با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۶

۵.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H_p با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۶

۶.۴ روند همگرایی در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H_p با بعد $n = ۳۰$ با روش متوالی. ۵۷

۷.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد $n = ۳۰$ ساخته شده با روش دوم. ۵۷

۸.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد $n = ۳۰$ ساخته شده با روش دوم. ۵۸

۹.۴ روند همگرایی در محاسبه‌ی کوچکترین مقدار ویژه‌ی H با بعد ۳۰ $= n$ ساخته شده با روش دوم. ۵۸
۱۰.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت تعامد در تابع هدف. ۶۱
۱۱.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت تعامد در تابع هدف. ۶۲
۱۲.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش م . . . ۶۲
۱۳.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت تعامد در تابع هدف. ۶۳
۱۴.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت ب ۶۴
۱۵.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها. ۶۶
۱۶.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها. ۶۶
۱۷.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه‌ی H با بعد ۱۰۰ $= n$ و روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها. ۶۷
۱۸.۴ زمان محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه بر حسب تعداد پردازنده‌های استفاده شده در ماتریس با بعد ۱۰ $= n$. ۶۹
۱۹.۴ زمان محاسبه‌ی ۳ مقدار ویژه بر حسب تعداد پردازنده‌های استفاده شده در ماتریس با بعد ۱۰ $= n$. ۶۹
۲۰.۴ زمان محاسبه‌ی ۵ مقدار ویژه بر حسب تعداد پردازنده‌های استفاده شده در ماتریس با بعد ۱۰ $= n$. ۷۰
۲۱.۴ نمودار گردشی الگوریتم ژنتیک همراه با عملگر مهاجرت. ۷۱
۲۲.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت. ۷۳

۲۳.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها
و عملگر مهاجرت. ۷۳
۲۴.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۵ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها
و عملگر مهاجرت. ۷۴
۲۵.۴ تغییرات تابع برازش در محاسبه‌ی ۱۰ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها
و عملگر مهاجرت. ۷۴
۲۶.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۱ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها و
عملگر مهاجرت. ۷۵
۲۷.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۲ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها و
عملگر مهاجرت. ۷۵
۲۸.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۵ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها و
عملگر مهاجرت. ۷۶
۲۹.۴ میزان خطا در محاسبه‌ی ۱۰ مقدار ویژه، با محدودیت بر روی کروموزم‌ها و
عملگر مهاجرت. ۷۶

لیست جداول

۱.۴ مقادیر اختصاص داده شده به پارامترهای الگوریتم ژنتیک در محاسبه‌ی متوالی مقادیر ویژه. ۵۴
۲.۴ مقادیر ویژه‌ی محاسبه شده به‌صورت متوالی و مقادیر ویژه‌ی واقعی ماتریس H با بعد $n = ۳۰$. ۵۹
۳.۴ مقادیر اختصاص داده شده به پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی همزمان. ۶۰
۴.۴ کارایی روش محدودیت تعامد در تابع هدف در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۳۰$. ۶۳
۵.۴ کارایی روش محدودیت تعامد در کروموزم‌ها در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۳۰$. ۶۵
۶.۴ مقادیر ویژه‌ی محاسبه شده به‌صورت همزمان و مقادیر ویژه‌ی واقعی ماتریس H با بعد $n = ۳۰$. ۶۵
۷.۴ کارایی روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۳۰$. ۷۷
۸.۴ کارایی روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۵۰$. ۷۷
۹.۴ کارایی روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۱۰۰$. ۷۷
۱۰.۴ کارایی روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۲۵۰$. ۷۸

۱۱.۴ کارایی روش محدودیت بر روی کروموزم‌ها و عملگر مهاجرت در محاسبه‌ی m مقدار ویژه‌ی ماتریس کپ با بعد $n = ۵۰۰$. ۷۸

پیشگفتار

محاسبه‌ی مقادیر ویژه و بردارهای ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی یکی از مباحث مهم در جبرخطی است که در حوزه‌های گوناگونی از علم و صنعت مطرح می‌شود. در اغلب موارد، نیازی به محاسبه‌ی تمامی مقادیر ویژه و بردارهای ویژه‌ی ماتریس متقارن حقیقی H نیست. بلکه هدف، یافتن تعداد کمی از مقادیر ویژه، شامل کوچکترین(بزرگترین) مقدار ویژه و بردارهای ویژه‌ی متناظر آن‌ها است.

روش‌های متفاوتی برای محاسبه‌ی مقادیر ویژه‌ی ماتریس متقارن حقیقی H بیان شده است [۴، ۵، ۲۷، ۳۶] . هر یک از این روش‌ها دارای مشکلاتی مانند: ناپایداری عددی [۱] ، وابسته بودن به نوع خاصی از ماتریس‌های متقارن و یا ناتوانی در محاسبه‌ی تعداد دلخواهی از مقادیر ویژه می‌باشند.

یکی از راه‌های حل مسئله‌ی مقادیر ویژه، تبدیل آن به مسئله‌ی بهینه‌سازی است. پس از تبدیل مسئله‌ی محاسبه‌ی مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی به مسئله‌ی بهینه‌سازی، می‌توان با استفاده از یک روش جستجوی کارآمد، در جستجوی عدد اسکالر λ و بردار x بود به‌گونه‌ای که در معادله

$$Hx = \lambda x$$

صدق کنند. روش‌های بهینه‌سازی تکاملی[۱] مانند الگوریتم شبیه‌سازی تبرید[۲] [۱۷، ۱۸]، الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات[۳] [۱۴، ۲۸]، الگوریتم بهینه‌سازی کلونی مورچگان[۴] [۳، ۲۶] و الگوریتم

[۱] Evolutionary

[۲] Simulated Annealing Algorithm

[۳] Particle Swarm Optimization Algorithm

[۴] Ant Colony Optimization Algorithm

ژنتیک[1] [۱۰، ۱۲] از روش‌های کارآمد جستجوی تصادفی در فضای جواب مسئله می‌باشند که به‌نظر می‌آید با استفاده از آن‌ها می‌توان تعداد دلخواهی از مقادیر ویژه را بدون تحمیل کردن قیدهای اضافی بر ماتریس H محاسبه نمود.

تاریخچه

نندی[2] و همکاران در سال ۲۰۰۲ برای اولین بار روشی را برای محاسبه‌ی متوالی مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی، با استفاده از الگوریتم ژنتیک بیان کردند [۲۱] . همچنین آن‌ها در سال ۲۰۰۴ با تلفیق توابع پیوندی[3] به الگوریتم قبلی خود، میزان خطای محاسبه را به طور چشم‌گیری کاهش دادند [۲۲] . آن‌ها در سال ۲۰۱۱ علاوه بر بهبود روش محاسبه‌ی متوالی مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن، روشی برای محاسبه‌ی m مقدار ویژه ، به طور همزمان ارائه کردند [۲۴].

ساختار تحقیق

در این پایان نامه سعی می‌شود با استفاده از الگوریتم ژنتیک، تعداد دلخواهی از مقادیر ویژه‌ی یک ماتریس متقارن حقیقی محاسبه گردد.
در فصل اول تعاریف اولیه و پیش‌نیازهای ریاضی و پردازش موازی که در این پایان‌نامه مورد استفاده قرار می‌گیرند، بیان می‌شود. در فصل دوم به بیان تعاریف و عملگرهای مورد نیاز در الگوریتم ژنتیک پرداخته می‌شود. فصل سوم به روش محاسبه‌ی m مقدار ویژه و بردارهای ویژه‌ی متناظر آن با استفاده از الگوریتم ژنتیک به دو صورت متوالی و همزمان اختصاص داده شده است. نتایج حاصل از پیاده‌سازی روش‌های مطرح شده، در فصل چهارم آورده شده است.

[1] Genetic Algorithm

[2] Nandy

[3] Hybrid Function

فصل ۱

تعاریف اولیه و پیش‌نیازهای ریاضی و پردازش موازی

۱.۱ پیش‌نیازهای ریاضی

برای بیان مطالب این بخش، از مراجع [۶، ۹، ۳۱، ۳۶] استفاده شده است.

تعریف ۱.۱.۱ فرض کنید A یک ماتریس $n \times n$ باشد. آن‌گاه اسکالر λ یک مقدار ویژه[1] A است، اگر یک بردار مخالف صفر x یافت شود به‌قسمی‌که

$$Ax = \lambda x$$

یا

$$\mathbf{det}(A - \lambda \mathbb{I}) = 0.$$

همچنین بردار x یک بردار ویژه‌ی راست[2] (یا فقط یک بردار ویژه) A وابسته به مقدار ویژه‌ی λ نامیده می‌شود. به (λ, x) یک جفت ویژه‌ی A گفته می‌شود.

تعریف ۲.۱.۱ یک ماتریس مختلط مربعی A یک ماتریس هرمیتی[3] است، اگر و فقط اگر

$$A^\star = A$$

که در آن $A^\star$ ترانهاده مزدوج[4] ماتریس A است. یعنی

$$A^\star = (\overline{A})^T$$

اگر A حقیقی باشد در این صورت

$$A^\star = A^T$$

تعریف ۳.۱.۱ فرض کنید $U = \{u_1, u_2, \ldots, u_k\}$ زیر مجموعه‌ای از فضای برداری V روی یک میدان F باشد. گسترده[5] U، با $\mathbf{span}\ U$ نمایش داده می‌شود و به‌صورت مجموعه‌ی همه ترکیبات خطی بردارهای U تعریف می‌شود. یعنی

$$\mathbf{span}\ U = \{c_1 u_1 + \cdots + c_k u_k \ : \ c_i \in F \ , \ v_i \in U\}.$$

[1] Eigenvalue

[2] Eigenvector

[3] Hermitian Matrix

[4] Conjugate Transpose

[5] Span

تعریف ۴.۱.۱ فرض کنید U ماتریسی مربعی و مختلط باشد که در رابطه‌ی

$$U^{\star}U = UU^{\star} = \mathbb{I}$$

صدق کند. در این صورت U را ماتریس یکانی[۱] می‌نامند.

تعریف ۵.۱.۱ در فضای برداری $\mathbb{R}^n$، بردارهای $u = (u_۱, u_۲, \dots, u_n)$ و $v = (v_۱, v_۲, \dots, v_n)$ را متعامد[۲] می‌نامند، اگر حاصل‌ضرب داخلی آن‌ها برابر صفر باشد. یعنی

$$(u, v) = u_۱v_۱ + u_۲v_۲ + \cdots + u_nv_n = ۰.$$

تعریف ۶.۱.۱ فرض کنید A ماتریسی $n \times n$ است و $v_۱, v_۲, \dots, v_n$ بردارهای سطر اول تا n ام آن می‌باشند. ماتریس A را متعامد یکّه[۳] می‌نامند اگر مجموعه‌ی $\{v_۱, v_۲, \dots, v_n\}$ متعامد یکّه باشد. یعنی به ازای هر $i = ۱, ۲, \dots, n\ ,\ j = ۱, ۲, \dots, n$

$$(v_i, v_j) = \begin{cases} ۱ & \text{اگر } i = j \\ ۰ & \text{اگر } i \neq j \end{cases}$$

قضیه ۱.۱.۱ (مثلث سازی شور[۴]) برای هر ماتریس مختلط A ، یک ماتریس یکانی U وجود دارد به‌قسمی‌که ماتریس T که

$$U^{\star}AU = T$$

یک ماتریس بالا مثلثی باشد. مقادیر ویژه‌ی A عناصر قطری T هستند.

اثبات : به مرجع [۶] مراجعه شود. □

قضیه ۲.۱.۱ فرض کنید A یک ماتریس هرمیتی باشد. آن‌گاه

۱. ماتریس یکانی U وجود دارد به‌قسمی‌که

$$U^{\star}AU = D$$

یک ماتریس قطری است.

[۱] Unitary

[۲] Orthogonal

[۳] Orthonormal

[۴] Schur triangulation

۲. مقادیر ویژه‌ی A حقیقی هستند.

۳. بردارهای ویژه‌ی A می‌توانند طوری انتخاب شوند که متعامد یکّه باشند.

اثبات : (۱): بنابر قضیه‌ی مثلثی سازی شور داریم

$$U^{\star}AU = T$$

که در آن T یک ماتریس مثلثی است. مشاهده می‌شود که

$$(U^{\star}AU)^{\star} = T^{\star}$$

یا

$$U^{\star}A^{\star}U = T^{\star}$$

یا

$$U^{\star}AU = T^{\star} \qquad (\text{چون } A^{\star} = A)$$

یا

$$T = T^{\star}$$

این نشان می‌دهد که T هرمیتی است. چون T مثلثی و هرمیتی است، پس باید یک ماتریس قطری باشد.

(۲): چون مقادیر ویژه‌ی A عناصر قطری ماتریس T هستند و عناصر قطری یک ماتریس هرمیتی باید حقیقی باشند، نتیجه می‌شود که مقادیر ویژه‌ی A حقیقی هستند.

(۳): ستون‌های U توسط $u_۱$ تا u_n نمایش داده می‌شود. سپس از

$$U^{\star}AU = D$$

داریم:

$$AU = UD$$

بنابراین از:

$$A(u_۱, u_۲, \dots, u_n) = (u_۱, u_۲, \dots, u_n).\mathbf{diag}(d_۱, d_۲, \dots, d_n)$$

ملاحظه می‌شود که u_i ها بردارهای ویژه‌ی A نظیر مقدار ویژه‌ی d_i ها هستند. چون U یک ماتریس یکانی است، بردارهای ویژه‌ی $u_۱, u_۲, \dots, u_n$ متعامد یکّه هستند [۶]. □