

GIẢI THUẬT DI TRUYỀN: KỸ THUẬT VÀ ỨNG DỤNG

NGUYỄN THANH THỦY¹, LÊ HOÀNG THÁI²

Abstract. In this paper we shall present genetic algorithm technique that seems to be effective for solving optimization problems with non-linear target function constraints. The main idea here is simulating random search in the space of parameters, although it is not possible to prove the convergence and the convergence speed of the searching process. We propose a combination of genetic algorithm with mathematical modelling in data analysis for minimizing the error function. This solution is shown promising for solving liquid - liquid extraction problem in chemical technology.

1. GIẢI THUẬT DI TRUYỀN VÀ BÀI TOÁN TỐI ƯU HÀM NHIỀU BIẾN

1.1. Sơ đồ về giải thuật di truyền

Từ trước đến nay trong các nghiên cứu và ứng dụng tin học đã xuất hiện nhiều bài toán lý thú chưa tìm ra được phương pháp giải nhanh và hợp lý. Phần lớn đó là những bài toán tối ưu này sinh trong các ứng dụng. Để giải loại bài toán này, người ta thường phải tìm đến một thuật giải hiệu quả mà kết quả thu được chỉ là xấp xỉ tối ưu. Giải thuật di truyền (GA) là một trong những công cụ đó [1].

Ý tưởng của GA là mô phỏng những gì mà tự nhiên đã thực hiện.

Giải thuật di truyền (GA) áp dụng quá trình tiến hóa tự nhiên để giải các bài toán tối ưu trong thực tế (xuất phát từ tập các lời giải tiềm năng ban đầu, thực hiện nhiều bước lặp (tiến hóa) dưới tác động của các toán tử, để hình thành những tập hợp mới với các lời giải tốt hơn, cuối cùng hy vọng tìm được lời giải tối ưu nhất).

Cấu trúc giải thuật di truyền được thể hiện qua sơ đồ sau:

Procedure Gtditruyen;

Begin

$t = 0$

Khởi tạo lớp $P(t)$;

Dánh giá lớp $P(t)$;

While not Đk kết thúc do

Begin

$t = t + 1$;

Chọn lọc $P(t)$ từ $P(t - 1)$;

Kết hợp các cá thể của $P(t)$;

Dánh giá lớp $P(t)$;

End

End

Các thao tác cơ bản trong Giải thuật di truyền [2] cho một bài toán cụ thể bao gồm:

- Biểu diễn di truyền với những lời giải tiềm năng của bài toán;
- Tạo tập hợp lời giải ban đầu;
- Xây dựng hàm đánh giá;
- Xác định các toán tử di truyền (Lai ghép và đột biến);
- Xác định những tham số mà GA sử dụng.

1.2. Giải thuật di truyền giải bài toán tối ưu nhiều biến

1.2.1. Cách biểu diễn

Có nhiều phương pháp biểu diễn khác nhau đối với các bài toán tối ưu. Ở đây chúng ta đề cập đến hai cách biểu diễn biến sử dụng cho bài toán cực tiểu hàm f có n biến vào đã nêu trên. Mỗi lời giải tiềm năng được gọi là cá thể, nhiễm sắc thể hay vectơ các gen [1].

- *Phương pháp cổ truyền: Biểu diễn biến nhờ vectơ nhị phân*

Một chuỗi nhị phân $(0, 1)$ có chiều dài 1 bit ứng với giá trị trong khoảng $[0, 2^l]$ sẽ được ánh xạ lên các giá trị x thuộc miền xác định $[U_{\min}, U_{\max}]$ theo công thức ánh xạ:

$$x = U_{\min} + \text{decimal(string}_2\text{)} * g,$$

ở đây g là tỷ lệ co dãn của ánh xạ:

$$g = \frac{U_{\max} - U_{\min}}{2^l - 1}$$

và string_2 là biểu diễn nhị phân của x .

Ví dụ: $\text{decimal}(0001) = 1 \Rightarrow x = U_{\min} + 1 * g$

$\text{decimal}(0011) = 3 \Rightarrow x = U_{\min} + 3 * g$, ở đây ta chọn $l = 4$.

- *Phương pháp cài tiến: Biểu diễn biến nhờ vectơ các giá trị thực*

Mỗi vectơ lời giải tiềm năng được mã hóa là một vectơ số thực có cùng chiều dài.

Mỗi phần tử thuộc một miền xác định và các toán tử được thiết kế để đảm bảo yêu cầu này. Độ chính xác của phương pháp tùy thuộc vào khả năng của máy (số chữ số thập phân sau dấu phẩy).

Biểu diễn dấu phẩy động (Floating point representation, FP) có khả năng biểu diễn được các miền giá trị lớn. Hơn nữa, với biểu diễn FP, có thể dễ dàng thiết kế các công cụ đặc biệt để biểu thị những ràng buộc không thường.

Ví dụ: Giá trị miền ràng buộc:

$A_1 \in [-0,481, 0,519]; A_2 \in [-1,815, -0,815]; A_3 \in [-4,631, -3,631]; A_4 \in [-0,053, 0,053];$

Ta có thể chọn ngẫu nhiên các giá trị (A_1, A_2, A_3, A_4)

$$\begin{array}{cccc} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ -0,470 & -1,811 & -4,301 & -0,051 \end{array}$$

1.2.2. Các toán tử di truyền [1]

Ứng với từng khung gian biểu diễn khác nhau, sẽ có những lớp toán tử khác nhau:

A. Với không gian nhị phân (Biểu diễn nhờ vectơ nhị phân):

Toán tử chọn cá thể (select). Là một phiên bản mô phỏng của quá trình chọn lọc tự nhiên (trong đó mỗi cá thể được bảo lưu trong vòng sinh sản tiếp sau dựa vào giá trị hàm phù hợp của nó)

Các bước:

1. Tính tổng giá trị phù hợp T của cá thể.
2. Phát sinh ngẫu nhiên một số n , $n \in [0, T]$.
3. Xác định thành viên mà tổng dồn giá trị phù hợp $\geq n$.

Toán tử lai ghép (crossover). Giá trị đã lựa chọn xác suất lai ghép p_{cross} .

Phát sinh một số ngẫu nhiên r trong khoảng $[0, 1]$.

Nếu $r < p_{cross}$ chọn nhiễm sắc thể đó để lai ghép.

Xác định ngẫu nhiên vị trí lai ghép pos, $pos \in [1, \dots, l]$.

Từ $(b_1 b_2 \dots b_{pos} b_{pos+1} \dots b_l)$ ta có $(b_1 b_2 \dots b_{pos} c_{pos+1} \dots c_l)$.

Từ $(c_1 c_2 \dots c_{pos} c_{pos+1} \dots c_l)$ ta có $(c_1 c_2 \dots c_{pos} b_{pos+1} \dots b_l)$.

Toán tử đột biến. Giả sử P_{mu} là xác suất đột biến.

Phát sinh một số ngẫu nhiên r khoảng $[0, 1]$.

Nếu $r < p_{mu}$, tiến hành đột biến tại bit đó (chuyển đổi $1 \rightarrow 0$ hoặc ngược lại).

B. Với không gian số thực (Biểu diễn nhờ vectơ số thực):

Vì chúng xử lý trên không gian số thực, nên các toán tử chúng ta sử dụng ở đây hoàn toàn khác biệt với các toán tử di truyền cổ điển (thao tác trên các bit 0, 1).

Chúng ta gộp các toán tử vào hai lớp chuẩn: đột biến, lai ghép. Những toán tử này điều chỉnh quá trình tìm kiếm trong không gian.

Nhóm toán tử đột biến

• Đột biến đều:

Chọn ngẫu nhiên gen k (trong số các gen có thể biến đổi trong nhiễm sắc thể s đã được xác định hiện tại). Nếu $s_i^t = (A_1, \dots, A_k, \dots, A_n)$ là một nhiễm sắc thể, thì mỗi phần tử A_k có cơ hội đột biến như nhau. Kết quả của phép đột biến đều là cá thể mới $S_i^{t+1} = (A_1, \dots, A'_k, \dots, A_n)$, trong đó $1 \leq k \leq n$, và A'_k là một giá trị ngẫu nhiên minden ràng buộc $[l_k, u_k]$.

Ví dụ:

Giả sử phần tử thứ 3 A_3 của vectơ $s_3 = (0,221; -0,901; -4,361; -0,010)$ được chọn đột biến A_3 thuộc $[-4,6631, -3,631]$; do đó A'_3 sẽ được chọn ngẫu nhiên trong khoảng $[-4,631, -3,631]$; chẳng hạn $A'_3 = -4,12$.

• Đột biến không đều:

Là một trong những toán tử có nhiệm vụ điều chỉnh năng lực tiềm tàng của hệ thống. Nếu $s_i^t = (A_1, \dots, A_k, \dots, A_n)$ là một nhiễm sắc thể và phần tử A_k được chọn từ những gen có thể đột biến. Kết quả là vectơ $s_i^{t+1} = (A_1, \dots, A'_k, \dots, A_n)$, với $1 \leq k \leq n$ và

$$A'_k = \begin{cases} A_k + \Delta(t, u_k - A_k) & \text{nếu ký số ngẫu nhiên là 0} \\ A_k - \Delta(t, A_k - l_k) & \text{nếu ký số ngẫu nhiên là 1} \end{cases} \quad (1)$$

(2)

(Trong chương trình, ta đặt (1) nếu k lẻ (2) nếu k chẵn).

Hàm $\Delta(t, y)$ trả về một giá trị trong miền $[0, y]$ theo công thức:

$$\Delta(t, y) = y^*(1 - r^{(1-t/T)^b}),$$

trong đó r là một số ngẫu nhiên trong khoảng $[0, 1]$, T là thế hệ (tổng số vòng lặp), b là tham số hệ thống chỉ mức độ vectơ không đều và t là thế hệ đang khảo sát (vòng lặp hiện tại).

Ví dụ:

Giả sử phần tử thứ 2 (A_2) của vectơ $s_4 = (-0,370; -0,950; -4,071; -0,051)$ được chọn cho đột biến. Biết A_2 thuộc $[-1,816, -0,815]$.

Vì $k = 2$ chẵn nên $A'_2 = A_2 - \Delta(t, (0,950) - (-1,815)) = A_2 - \Delta(t, 0,865)$.

Giả sử $r = 0,4$; $t/T = 0,5$; $b = 2$.

$$\Delta(t, 0,865) = 0,865 * (1 - 0,4^{0,5^2}) = 0,865 * 0,6 = 0,519;$$

$$\text{do đó } A'_2 = -0,950 - 0,519 = -1,469 \in [-1,815; -0,815].$$

Nhóm toán tử lai ghép:

• Lai ghép đơn giản được xác định như sau:

Nếu $s_v^t = (v_1, \dots, v_m)$ và $s_w^t = (w_1, \dots, w_m)$ được lai ghép sau vị trí thứ k , kết quả sẽ là: $s_v^{t+1} = (v_1, \dots, v_k, w_{k+1}, \dots, w_m)$ và $s_w^{t+1} = (w_1, \dots, w_k, v_{k+1}, \dots, v_m)$.

Ví dụ:

Chọn hai nhiễm sắc thể:

$$s_5 = (-0,320; -0,930; -3,950; 0,031); s_6 = (0,351; -0,970; -4,410; -0,011).$$

Cho lai ghép sau vị trí thứ 2, ta có kết quả:

$$s'_5 = (-0,320; 0,930; -4,410; -0,011); s'_6 = (0,351; -0,970; -3,950; 0,031).$$

• Lai ghép số học đơn được xác định như sau:

Nếu $s_v^t = (v_1, \dots, v_m)$ và $s_w^t = (w_1, \dots, w_m)$ được lai ghép thì kết quả là:

$$s_v^{t+1} = (v_1, \dots, v_k', \dots, v_m) \text{ và } s_w^{t+1} = (w_1, \dots, w_k', \dots, w_m),$$

ở đó $1 \leq k \leq m$, $v_k' = a^* w_k + (1-a)^* v_k$ và $w_k' = a^* v_k + (1-a)^* w_k$, a là giá trị được xác định theo vectơ s_v và s_w . Chính xác hơn, a được chọn trong phạm vi:

$$a \in \begin{cases} [\max(\alpha, \beta), \min(\gamma, \delta)], \\ [0, 0], & \text{nếu } v_k = w_k \\ [\max(\gamma, \delta), \min(\alpha, \beta)], \end{cases}$$

trong đó

$$\alpha = (l_k - w_k)/(v_k - w_k), \beta = (u_k - v_k)/(w_k - v_k), \gamma = (l_k - v_k)/(w_k - v_k), \delta = (u_k - w_k)/(v_k - w_k).$$

Ví dụ:

Lấy hai nghiệm sắc thể:

$$s_5 = (-0,320; -0,930; -3,950; -0,031); s_6 = (0,351; -0,970; -4,410; -0,011).$$

Cho lai ghép tại vị trí thứ 3, biết A_3 thuộc $[-4,631; -3,631]$, ta có kết quả

$$\alpha = ((-4,631) - (-4,410)) / ((-3,950) - (-4,410)) = -0,48;$$

$$\beta = ((-3,631) - (-3,950)) / ((-4,410) - (-3,950)) = -0,69;$$

$$\gamma = ((-4,631) - (-3,950)) / ((-4,410) - (-3,950)) = -1,48;$$

$$\delta = ((-3,631) - (-4,410)) / ((-3,950) - (-4,410)) = 1,69.$$

$a \in [-0,48, 1,48]$. Giả sử $a = 1$, ta có

$$s'_5 = (-0,320; -0,930; -4,410; -0,031); s'_6 = (0,351; -0,970; -3,950; -0,011).$$

• Lai ghép số học toàn cục là tổ hợp tuyến tính của hai vectơ L

Nếu $s_v^t = (v_1, \dots, v_m)$ và $s_w^t = (w_1, \dots, w_m)$ được lai ghép, thì kết quả là:

$$s_v^{t+1} = a^* s_w^t + (1-a)^* s_v^t \text{ và } s_w^{t+1} = a^* s_v^t + (1-a)^* s_w^t,$$

với a là một tham số $\in [0, 1]$.

Ví dụ:

Chọn hai nghiệm sắc thể:

$$s_5 = (-0,320; -0,930; 0,031); s_6 = (0,351; -0,970; -4,410; -0,011)$$

để lai ghép; giả sử $a = 0,6$. Do vậy các phần tử của s'_5 sẽ là:

$$\text{pht1} = (0,351)*0,6 + 0,4*(-0,320) = 0,083; \text{pht2} = (-0,970)*0,6 + 0,4*(-0,930) = -0,954;$$

$$\text{pht3} = (-4,410)*0,6 + 0,4*(-3,950) = -4,226; \text{pht4} = (-0,011)*0,6 + 0,4*(0,031) = 0,006.$$

Tức là $s'_5 = (0,083; -0,954; -4,226; 0,006)$.

Các phần tử của s'_6 sẽ là:

$$\text{pht1} = (-0,320)*0,6 + 0,4*(0,351) = -0,052; \text{pht2} = (-0,930)*0,6 + 0,4*(-0,970) = -0,946;$$

$$\text{pht3} = (-3,950)*0,6 + 0,4*(-4,410) = -4,134; \text{pht4} = (0,031)*0,6 + 0,4*(-0,011) = 0,014.$$

Do vậy, $s'_6 = (-0,052; -0,946; -4,134; 0,014)$.

2. ỨNG DỤNG

Chúng tôi đã áp dụng giải thuật di truyền cho bài toán mô phỏng quá trình chiết dung môi hóa học.

Tùy hàm phi tuyến hóa học [3]

$$Y = A_1 \cdot C^{A_2} \exp(-A_3 \cdot C^{A_4} \cdot H), \quad (I)$$

với các biến vào gồm:

C là nồng độ kim loại cho vào ban đầu trước khi cân bằng;

H là nồng độ axit ban đầu;

cần ước lượng các tham số (A_1, A_2, A_3, A_4) để cực tiểu hóa hàm sai số (theo phương pháp bình phương tối thiểu tương đối) [4]

$$S = \sum_{i=1}^N [(Y_i - Y_{\text{tín}})/Y_i]^2,$$

trong đó N là số lần thí nghiệm.

Bài toán này được quy về bài toán cực tiểu hóa hàm phi tuyến bốn biến vào. Để giải nó, có thể thực hiện qua hai bước:

Bước 1. Tiền xử lý: Sử dụng kỹ thuật hồi qui để xác định miền ràng buộc ban đầu

$$[A_1^0 - \epsilon, A_1^0 + \epsilon]; [A_2^0 - \epsilon, A_2^0 + \epsilon]; [A_3^0 - \epsilon, A_3^0 + \epsilon]; [A_4^0 - \epsilon, A_4^0 + \epsilon];$$

(($A_1^0, A_2^0, A_3^0, A_4^0$) là bộ nghiệm được ước lượng từ phương trình $\{\partial S/\partial A_i = 0\}$), giá trị ϵ là hệ số biến thiên được chọn một cách phù hợp.

Bước 2: Trên cơ sở miền ràng buộc ban đầu đã được xác định, áp dụng giải thuật di truyền để tìm đến kết quả tốt hơn của bài toán.

Phân tích kết quả thử nghiệm

• **Bộ số liệu vào là kết quả từ các thí nghiệm hóa học:**

Số lần thay đổi nồng độ kim loại $N_d = 4$.

Số lần điều chỉnh nồng độ axit H ứng với nồng độ kim loại $C=0,050000$ là: 4.

Nồng độ axit H	-0,100000	-0,050000	0,000000	0,200000
----------------	-----------	-----------	----------	----------

Tỷ số Y	7,500000	2,000000	0,890000	0,050000
---------	----------	----------	----------	----------

Số lần điều chỉnh nồng độ axit H ứng với nồng độ kim loại $C = 0,100000$ là: 5

Nồng độ axit H	-0,200000	-0,150000	-0,100000	0,000000	0,200000
----------------	-----------	-----------	-----------	----------	----------

Tỷ số Y	3,390000	1,650000	1,020000	0,360000	0,030000
---------	----------	----------	----------	----------	----------

Số lần điều chỉnh nồng độ axit H ứng với nồng độ kim loại $C = 0,200000$ là: 5

Nồng độ axit H	-0,200000	-0,150000	-0,100000	0,000000	0,200000
----------------	-----------	-----------	-----------	----------	----------

Tỷ số Y	6,700000	0,520000	0,370000	0,180000	0,030000
---------	----------	----------	----------	----------	----------

Số lần điều chỉnh nồng độ axit H ứng với nồng độ kim loại $C = 0,300000$ là: 5

Nồng độ axit H	-0,200000	-0,150000	-0,100000	0,000000	0,200000
----------------	-----------	-----------	-----------	----------	----------

Tỷ số Y	0,390000	0,300000	0,230000	0,120000	0,020000
---------	----------	----------	----------	----------	----------

• Chạy thử với bộ dữ liệu trên:

+ Sử dụng phương pháp ước lượng hàm hồi qui với bộ dữ liệu trên thu được bộ tham số ban đầu (sẽ là đầu vào đối với giải thuật di truyền):

$A_1^0 = 0,019; A_2^0 = -1,315; A_3^0 = -4,131; A_4^0 = 0,447$ ứng với hàm sai số ban đầu $S = 0,690$. Sau đó, áp dụng giải thuật di truyền với $\epsilon = 0,5$ nhận được những kết quả dưới đây.

+ Áp dụng giải thuật di truyền cổ điển (không gian biểu diễn nhị phân và các toán tử di truyền cổ điển). Chọn

- Số lần sinh sản (số lần lặp) $T = 50$;
- Số lượng phần tử (chiều dài của nhiễm sắc thể): $4 * 25 = 100$ (25 bit biểu diễn 1 biến);
- Kích cỡ tập hợp (số lượng nhiễm sắc thể) $\text{pop_size} = 20$;
- Xác suất đột biến $P_{\text{mu}} = 0,08$;
- Xác suất lai ghép đơn giản $P_{\text{cross}} = 0,25$.

Sau 5 lần chạy thử, kết quả tốt nhất thu được là

$$A_1 = 0,023, A_2 = -1,223, A_3 = -4,170, A_4 = -0,436 \text{ với sai số } S = 0,671.$$

Thời gian thực hiện $t = 1$ phút 45 giây.

+ Áp dụng giải thuật di truyền cải tiến (với không gian biểu diễn là các số thực và toán tử di truyền đã được cải tiến). Biết các tham số:

- Số lần tạo sinh (số lần lặp) $T = 50$;
- Số lượng phần tử (số lượng biến hay là chiều dài của nhiễm sắc thể): 4 ;
- Kích cỡ quần thể (số lượng nhiễm sắc thể) $\text{pop_size} = 20$;
- Xác suất đột biến đều $P_{\text{mut}} = 0,08$;
- Xác suất đột biến không đều $P_{\text{mut}} = 0,07$;
- Xác suất lai ghép đơn giản $P^1_{\text{cross}} = 0,1$;
- Xác suất lai ghép số học toàn bộ $P^2_{\text{cross}} = 0,1$;
- Xác suất lai ghép số học đơn $P^3_{\text{cross}} = 0,1$;
- Tham số tinh để lai ghép số học toàn bộ $a = 0,25$;
- Tham số dùng trong đột biến không đều $b = 2,0$.

Sau 5 lần chạy thử (trên máy 386 DX), kết quả tốt nhất thu được là:

$$A_1 = 0,02, A_2 = -1,259, A_3 = -4,183, A_4 = -0,430 \text{ với sai số } S = 0,582.$$

Thời gian thực hiện $t = 10$ giây.

+ Áp dụng phương pháp gradient truyền thống thu được kết quả sau:

$$A_1 = 0,020, A_2 = 1,259, A_3 = -4,103, A_4 = -0,440 \text{ với sai số } S = 0,583.$$

Thời gian thực hiện $t = 9$ giây.

So sánh ba kết quả nhận thấy:

Về mặt thời gian, phương pháp gradient truyền thống là nhanh nhất. Song kết quả sai số đạt được từ giải thuật di truyền cải tiến là tốt nhất (gần với giá trị cực tiểu đúng). Với độ chênh lệch thời gian không đáng kể, giải thuật di truyền cải tiến đã đạt được giá trị cực tiểu hợp lý (tốt hơn so với hai phương pháp được đưa ra). Từ đó, có thể kết luận: việc cải tiến giải thuật di truyền, chuyển từ không gian biểu diễn tĩnh (kiểu nhị phân) sang không gian biểu diễn động (số thực) cũng như việc chuyển đổi các toán tử di truyền là cần thiết. Nhờ đó, hoàn toàn có thể áp dụng giải thuật di truyền để giải quyết các bài toán tối ưu trong thực tế.

3. KẾT LUẬN

Các kết quả nghiên cứu, thử nghiệm thu được cho thấy được tính khả thi khi áp dụng giải thuật di truyền để giải các bài toán tối ưu, thậm chí đối với các hàm nhiễu biến phi tuyến. Hơn nữa, chúng còn đưa ra một cách tiếp cận mới khác với những tiếp cận truyền thống trong quá trình giải quyết bài toán tối ưu. Cụ thể, với bài toán mô phỏng quá trình chiết dung môi, đã chỉ ra rằng nếu áp dụng kỹ thuật hội qui, có thể xác định được bộ tham số $(A_1^o, A_2^o, A_3^o, A_4^o)$, song đây chưa là

bộ tham số tối ưu. Giải thuật di truyền giúp ta có thể chuyển từ bộ $(A_1^0, A_2^0, A_3^0, A_4^0)$ về bộ tham số tối ưu $(A_1^*, A_2^*, A_3^*, A_4^*)$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Zbigniew Michalewicz, *Genetic Algorithms + Data Structures = Fvolution Programs*, 1992.
 - [2] Chin-Teng Lin & C.S. George Lee, *Neural Fuzzy Systems*, 1996.
 - [3] T. Sekine, *Solvent Extraction 1990, Part A*, Amstersam - Tokyo, 1992.
 - [4] Nguyễn Đình Cử và Nguyễn Cao Văn, *Giáo trình lý thuyết xác suất và thống kê toán*, Hà Nội, 1991.

Nhân bài ngày 4-11-1997

¹ Trường Đại học Bách Khoa, Hà Nội.

Trường Đại học Khoa học tự nhiên, Đại học Quốc gia Tp. Hồ Chí Minh. (tên cũ: Khoa Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh) là một trường đại học công lập, trực thuộc Bộ Giáo dục và Đào tạo, có địa chỉ tại số 22, đường Nguyễn Văn Cừ, Phường 5, Quận 5, Thành phố Hồ Chí Minh. Trường có 10 khoa, 1 trung tâm và 1 viện nghiên cứu.