

文章编号:1005-3085(2006)02-0235-12

量子进化算法*

杨淑媛, 焦李成, 刘 芳

(西安电子科技大学智能信息处理研究所, 西安 710071)

摘 要: 进化算法是解决优化问题的一种有效方法,但在实际应用中也存在收敛速度慢、早熟等问题,大大影响了其应用效果。本文将进化算法和量子理论结合,提出一种新的理论框架-量子进化理论及其学习算法。算法借鉴量子理论,采用量子染色体的表示形式,能使一个染色体同时表示多个状态;模拟量子坍塌的随机观察能带来丰富的种群;同时构造具有量子特点的交叉变异算子,能在防止算法早熟的同时使算法更快收敛。本文不仅从理论上证明了这一理论框架的全局收敛性,仿真计算也表明了此算法的优越性。

关键词: 量子染色体; 概率; 进化; 收敛

分类号: AMS(2000) 92B99

中图分类号: TP181

文献标识码: A

1 引言

依照达尔文的自然选择和孟德尔的遗传变异理论,生物的进化是通过繁殖、变异、竞争和选择来实现的,进化算法(Evolutionary Algorithms—EA)就是建立在上述生物模型基础上的一种随机搜索技术。它起源于 Holland 提出的遗传算法(Genetic Algorithms—GA)^[1],Fogel 对于优化模型提出的进化规划(Evolutionary Programming—EP)^[2]以及 Rechenberg 和 Schwefel 用于数值优化问题的进化策略(Evolutionary Strategies—ES)^[3]。理论上已经证明:它们均能从概率的意义上以随机的方式寻求到问题的最优解。但将 EA 用于各种实际问题后,也出现了一些不尽人意之处,主要表现在:容易产生早熟,收敛速度慢,局部寻优能力差等。这是自然进化和生命现象的不可知性的结果,也是 EA 最明显的缺陷之一——收敛难问题(包括收敛速度慢和未成熟收敛)。可以看出:EA 之所以能使个体得到进化,首先是采用选择操作选出比较好的个体,使个体逐渐趋于最优,同时采用交叉变异等进化操作,通过它们的破坏性影响保证产生新的个体,从而生成更好的个体,更重要的是可以维持群体的多样性,即 EA 总是在追求群体的收敛性和个体的多样性之间的平衡。若选择压力不足,则算法的收敛速度慢,若选择压力太大,个体的多样性又不够,算法易陷入局部最优。

分析可以发现:EA 没有利用进化中未成熟优良子群体所提供的信息,因而收敛速度很慢。事实证明:在进化中引入好的引导机制可以增强算法的智能性,提高搜索效率。现有 EA 的许多改进工作也正是致力于这一方面,它们主要是针对特定问题,采用启发式知识来人为的指导 and 约束进化,这依赖于设计者对问题的认识程度,也将算法复杂化。21世纪科学技术的发展愈加开放,学科间的联系也日益紧密,我们能否借鉴其它学科的知识,应用一种更自然的机制,来描述进化过程,从而更高效的解决计算科学中的问题呢?下面我们就借鉴物理学中的量子理论来研究进化算法。

收稿日期:2003-06-02. 作者简介:杨淑媛(1978年10月生),女,博士,讲师,研究方向:智能信息处理。

*基金项目:博士点基金(20030701013)。

人类在发掘生物进化机制,进行“仿生”研究的同时,也受物理学的启发而萌发了“拟物”的思想。二者相互渗透、取长补短,产生了许多成功的理论,模拟退火算法就是由物理学推动发展的动力系统得到生物进化思想完善的产物^[4]。量子力学是20世纪最惊心动魄的发现之一,它为信息科学在下个世纪的发展提供了新的原理和方法。由于量子硬件实现的难度,量子计算机还不能在短期内实现,但是它对人类思维和学习方法所带来的革命性作用以及量子计算所特有的性质对经典理论的冲击,都是不可忽略的。我们能否将量子理论运用到经典的算法中去,通过对经典的表示作一些调整,使其具有量子理论的优点,从而进行一些类量子的计算来实现更为有效的算法呢?基于上述讨论,本文将进化算法与量子理论相结合,提出一种新的理论框架-量子进化理论及其学习算法。它基于量子计算的概念和理论,使用量子比特编码染色体。由于量子的概率幅表示,一个量子染色体可以同时表示多个状态的信息。因此,模拟量子坍塌的随机观察可带来更丰富的种群。量子染色体的变异能使当前最优个体的信息能够很容易的用来控制变异,使种群以大概率向着优良模式进化,加快收敛。另外,受量子干扰启发的量子全干扰交叉能够比传统进化算子更好的克服早熟现象的发生。

2 量子进化算法

2.1 量子染色体

在量子信息论中,信息的载体不再是经典的比特,而是一个一般的二态量子体系—它可以是一个二能级的原子或离子,也可以是一个自旋为1/2的粒子或具有两个偏振方向的光子,所有这些体系,均被称为量子比特(Qubit);区别于经典比特,量子比特可以处于0、1两个本征态的任意叠加状态,而且对量子比特的操作过程中,两态的叠加振幅可以相互干涉,这就是量子相干性;量子计算机对每一个叠加分量(本征态)实现的变换相当于一种经典计算,所有这些经典计算同时完成,并按一定的概率振幅叠加起来,给出量子计算的计算结果,这种计算称为量子并行计算^[5]。一个量子比特的状态可以取值0或1,其状态可以表示为:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1)$$

其中复数 α, β 代表相应状态出现的概率, $|\alpha|^2, |\beta|^2$ 分别表示量子比特处于状态0和1的概率,满足 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。EA 常用编码方式有二进制编码、十进制编码和符号编码。在量子进化算法中(Quantum Evolutionary Algorithm—QEA),使用一种新颖的基于量子比特的编码方式,即用一对复数定义一个量子比特位。一个具有 m 个量子比特位的系统可以描述为:

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_m \\ \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_m \end{array} \right], \quad (2)$$

其中 $|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2 = 1 (i = 1, \dots, m)$ 。这种表示方法可以表征任意的线性叠加态,例如一个具有如下概率幅的3量子比特系统:

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{array} \right], \quad (3)$$

则系统的状态可以表示为:

$$\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}|000\rangle + \frac{3}{4\sqrt{2}}|001\rangle + \frac{1}{4\sqrt{2}}|010\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}|011\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}|100\rangle + \frac{3}{4\sqrt{2}}|101\rangle + \frac{1}{4\sqrt{2}}|110\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}|111\rangle. \quad (4)$$

上面结果表示状态 $|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle$ 出现的概率分别为 $3/32, 9/32, 1/32, 3/32, 3/32, 9/32, 1/32, 3/32$, 即这个3量子比特系统表示了8个状态叠加的信息; 而且随着趋于1或0, 量子染色体收敛于一个状态, 这时多样性消失, 算法收敛。

2.2 算法描述

QEA 是一种和 EA 类似的概率算法, 种群由量子染色体构成, 在第 t 代的种群为 $Q(t) = \{q_1^t, q_2^t, \dots, q_n^t\}$, 其中 n 为种群大小; m 为量子染色体的长度; q_j^t 为定义如下的染色体:

$$q_j^t = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1^t & \alpha_2^t & \cdots & \alpha_m^t \\ \beta_1^t & \beta_2^t & \cdots & \beta_m^t \end{array} \right], \quad j = 1, 2, L, n. \quad (5)$$

下面给出 QEA 的一般步骤:

- ① 进化代数初始化: $T = 0$;
- ② 初始化种群 $Q(t)$;
- ③ 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$;
- ④ 个体交叉、变异操作, 生成新的 $P(t)$; (一般可以省略)
- ⑤ 评价群体 $P(t)$ 的适应度, 保存最优解;
- ⑥ 停机条件判断: 当满足停机条件时, 输出当前最优个体, 算法结束, 否则继续;
- ⑦ 更新 $Q(t)$, $T = T + 1$, 转到③;

由以上描述可以看出: QEA 与 EA 的不同仅仅在于增加了③和⑦这两步。③表示通过观察 $Q(t)$ 的状态, 产生一组解 $P(t) = \{x_1^t, x_2^t, \dots, x_n^t\}$, 每个长为 m 的普通解 x_j^t ($j=1, \dots, n$) 是由量子概率幅 ($i=1, \dots, m$) 得到的。如在二进制情况下的观察过程可以是: 产生一个属于 $[0, 1]$ 的随机数, 若它大于 $|\alpha_i^t|^2$, x 中相应的位取1, 否则取0; 在⑦中, 可以采用不同的策略来进化 $Q(t)$, 例如随机产生; 采用传统进化操作, 还可以根据量子的叠加特性和量子变迁的理论, 运用一些合适的量子门变换来产生新的 $Q(t)$, 但由于概率归一化的条件, 变换矩阵必须是酉正矩阵。常用的量子变换矩阵有: 异或门、旋转门和 Hadamard 变换门等[6]。

2.3 进化机理分析

一个好的优化算法在处理利用积累信息和探索未知空间之间的矛盾时必须采用折中的策略, 既利用积累信息搜索当前空间, 又要兼顾对未知空间的搜索; 既要加快算法的收敛速度, 还要克服早熟现象。那么针对这些矛盾, QEA 采用了什么策略呢? 首先, 在搜索过程中, QEA 通过选择使具有较高适应度的个体不断增多, 并且模拟量子坍塌, 执行状态观察产生新的个体, 不断探索未知空间, 像 EA 那样, 使搜索过程得到最大的积累收益。其次, QEA 采用量子染色体的表示形式, 使一个染色体上同时携带多个状态的信息, 是状态观察带来丰富种群的基础; 再次, QEA 对量子染色体采用一种“智能”变异的策略来引导进化, 使种群以大概率向着优良模式进化, 另外, QEA 模拟量子的相干特性构造了一种新的交叉算子—“全干扰交叉”, 用来克服进化后期的早熟。

2.3.1 量子变异—加快收敛

和普通编码方式不同, QEA 中的量子染色体是一种概率表示, 因此对概率的交叉是没有物理意义的, 所以交叉是作用于量子染色体的唯一遗传算子, 首先给出下面两种量子变异。

●量子变异1: EA 中通常的变异操作是一种随机变动, 没有有效利用进化过程中产生的信息。下面方法针对二值问题, 它由当前最优解反推出一个指导量子染色体, 然后在它的周围随机散布量子染色体作为下一代的量子种群, 有点类似于概率遗传算法, 但是操作却简单的多, 简单描述为:

$$Q_{guide}(t) = \alpha \times P_{currentbest}(t) + (1 - \alpha) \times (1 - P_{currentbest}(t)), \quad (6)$$

$$Q(t+1) = Q_{guide}(t) + b \times \text{normrnd}(0, 1), \quad (7)$$

其中 $P_{currentbest}(t)$ 为第 t 代时得到的最优个体; $Q_{guide}(t)$ 为指导量子染色体; a 为 $P_{currentbest}$ 的影响因子; b 为量子变异的方差。显而易见, 采用2.2所述的观察方式, 为得到染色体 $P=(1\ 1\ 0\ 0\ 1)$, 只需令量子染色体 Q 为 $(0\ 0\ 1\ 1\ 0)$, 即 $Q = \bar{P}$ 。如果 P 是全局最优解, 则种群中的量子染色体越接近 Q , 得到最优解的概率越大。 a 的值越小, 量子种群受 $Q_{guide}(t)$ 的影响越大; 当 $a=0$ 时, 观察 $Q_{guide}(t)$ 将以概率1得到 P 。一般取 $a \in [0.1, 0.5], b \in [0.05, 0.15]$ 。

●量子变异2: 在量子理论中, 状态间的转移是通过量子门变换矩阵实现的, 我们发现: 用量子旋转门的旋转角度同样也可表征量子染色体中的变异操作。可以设计下面的变异算子:

$$U(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad (8)$$

表示量子旋转门, 旋转变异的角度 $\Delta\theta$ 可由表1得到。

表 1: 变异角度

x_i	$best_i$	$f(x) > f(best)$	$\Delta\theta_i$	$\alpha_i\beta_i > 0$	$\alpha_i\beta_i < 0$	$\alpha_i = 0$	$\beta_i = 0$
0	0	假	0	0	0	0	0
0	0	真	0	0	0	0	0
0	1	假	0	0	0	0	0
0	1	真	0.01π	-1	1	± 1	0
1	0	假	0.01π	-1	1	± 1	0
1	0	真	0.01π	1	-1	0	± 1
1	1	假	0.01π	1	-1	0	± 1
1	1	真	0.01π	1	-1	0	± 1

其中 x_i 为当前染色体的第 i 位; $best_i$ 为当前的最优染色体的第 i 位; $f(x)$ 为适应度函数, $\Delta\theta_i$ 为旋转角度的大小, 控制算法收敛的速度; 表格中最后一列控制旋转角度的方向, 保证算法的收敛。为什么这种旋转量子门能够保证算法很快收敛到具有更高适应度的染色体呢? 下面用一个直观的图说明量子旋转门的构造。例如当 $x_i = 0, best_i = 1, f(x) > f(best)$ 时, 为使当前解收敛到一个具有更高适应度的染色体, 应增大当前解取1的概率, 即要使 α_i^2 变大, 则若 (α_i, β_i) 在第一、三象限, θ 应向顺时针方向旋转; 若 (α_i, β_i) 在第二、四象限, θ 应向逆时针方向旋转, 如图1所示。此外我们还可以构造其他变异算子, 例如采用或设计其他量子变换门等。

2.3.2 量子交叉—克服早熟

交叉是 EA 的另一种搜索最优解的手段, 通常采用的交叉操作如单点交叉、多点交叉、均匀交叉、算术交叉等, 它们的共同点是限制在两个个体之间, 当交叉的两个个体相同时, 它们都不再奏效。在这里, 我们使用量子的相干特性构造一种新的交叉操作-“全干扰交叉”。在这种交叉操作中, 种群中的所有染色体均参与交叉。若种群数为5, 染色体长为9, 表2示出其中的一种具体操作: 它是一种按对角线重新排列组合的交叉方式, 其中每个大写字母代表交叉后的一个新染色体, 如 A(1)-A(2) ... A(9), 我们称这样的交叉方式为“全干扰交叉”。

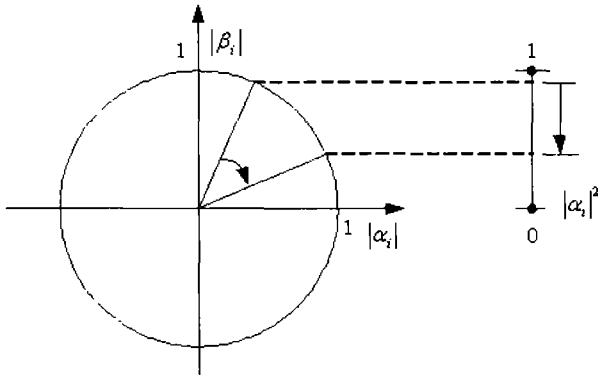


图1: 量子门旋转示意图

表 2: 全干扰交叉

1	A(1)	E(2)	D(3)	C(4)	B(5)	A(6)	E(7)	D(8)	C(9)
2	B(1)	A(2)	E(3)	D(4)	C(5)	B(6)	A(7)	E(8)	D(9)
3	C(1)	B(2)	A(3)	E(4)	D(5)	C(6)	B(7)	A(8)	E(9)
4	D(1)	C(2)	B(3)	A(4)	E(5)	D(6)	C(7)	B(8)	A(9)
5	E(1)	D(2)	C(3)	B(4)	A(5)	E(6)	D(7)	C(8)	B(9)

上面仅给出一种方式，我们还可以采用不同的方法产生“交叉基因位”来实施交叉。这种量子交叉可以充分利用种群中的尽可能多的染色体的信息，改进普通交叉的局部性与片面性，在种群进化出现早熟时，它能够产生新的个体，给进化过程注入新的动力。这种交叉操作借鉴的是量子的相干特性，可以克服普通染色体在进化后期的早熟现象。

2.4 量子进化算法的结构框架

类似于 EA，我们将 QEA 也分为量子遗传算法、量子进化规划和量子进化策略。

2.4.1 量子遗传算法（Quantum Genetic Algorithm-QGA）

从1975年 GA 的通用理论框架由密西根大学教授 John.H.Halland 首次建立以来，GA 已经在自然与社会现象模拟、工程计算等方面得到了广泛的应用[7-9]。QGA 可以描述为：

- ① 进化代数初始化： $t=0$ ；
- ② 初始化种群 $Q(t)$ ；
- ③ 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$ ：随机产生一个 $[0,1]$ 间的数，若它大于 $|\alpha_i|^2$ ，取1，否则取0；
- ④ 个体交叉、变异操作，生成新的 $P(t)$ ；（一般可省或仅用量子交叉。）
- ⑤ 评价群体 $P(t)$ 的适应度，选择操作；
- ⑥ 停机条件判断：当满足停机条件时，输出当前最优个体，否则继续；
- ⑦ 更新 $Q(t)$ ， $t=t+1$ ，转到③；

2.4.2 量子进化规划(Quantum Evolutionary Programming-QEP)

EP 对生物进化过程的模拟是着眼于物种的进化过程[10]，不使用个体重组算子，所以，变异是 EP 唯一的搜索最优个体的方法，最常用的是高斯变异算子。假设群体中某一个个

体 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 经过变异后得到 $X' = \{x'_1, x'_2, \dots, x'_n\}$, 则新个体的组成元素是:

$$x'_i = x_i + \sigma_i \cdot N_i(0, 1), \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (9)$$

$$\sigma_i = \sqrt{\beta_i \cdot F(x) + \gamma_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (10)$$

其中 $N_i(0, 1)$ 表示对每个下标 i 都重新取值的均值为0, 方差为1的正态分布随机变量, 系数 β_i, γ_i 是特定的参数, 根据特定的优化任务调整。可以证明: 若采用高斯变异和联赛选择产生后代, EP 可以渐进收敛到问题的全局最优解。它的缺点是进化求优的时间一般很长。在这里我们采用如下的量子变异算子。

表 3: 量子变异

$x_i > best_i$	$x_i = best_i$	$x_i < best_i$	$f(x) \geq f(best)$	$\Delta\theta_i$
假	假	真	假	-0.01π
假	假	真	真	-0.001π
假	真	假	真	$\pm 0.01\pi$
真	假	假	假	0.01π
真	假	假	真	0.001π

其中 $x_i, best_i$ 分别为当前染色体和当前最优染色体; $f(x)$ 为适应度函数; $\Delta\theta_i$ 为旋转角。对于实数编码问题, 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$ 的操作是: 对染色体 q 的每一个基因位, 实施 $x'_i = floor(q_i^t \times 10) + 1, (m \geq i \geq 1)$, 而对于其他形式的编码问题, 我们只要将量子染色体的幅度变换到所求解的问题区间, 即需要构造不同的观察方式, 而变异角度的产生与此类似。QEP 可以描述为:

① 根据求解的精度确定搜索空间的维数, 假设搜索空间 Ω 是一个 n 维空间, 于此相对应, 搜索点就是一个 n 维向量, 然后随机生成初始种群 $Q(t)$;

② 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$ (根据编码采用不同的观察方式:)

③ 对 $P(t)$ 进行进化操作; (可省。)

④ 对当前的父代群体进行变异操作得 $Q'(t)$, 由 $Q'(t)$ 生成新个体 $P'(t)$;

⑤ 计算当前第 t 代父本种群的适应度, 联赛选择, 其过程描述如下:

5.1 u 个 β 父代个体 $P(t)$ 和它经过变异后所产生的 u 个子代个体合并在一起, 组成一个含有 $2u$ 个个体的个体集合 $\{P(t) \cup P'(t)\}$ 。

5.2 对这个个体集合中的每一个个体 $\{P(t) \cup P'(t)\}$, 从这个个体集合中随机选取其他 q 个个体 (其中 $q \geq 1$ 是选择运算的参数), 比较这 q 个个体和个体 X_k 之间适应度的大小, 把其中适应度比 X_k 的适应度还要高的个体的数目作为 X_k 的得分 W_k 。

5.3 按个体集合 $\{P(t) \cup P'(t)\}$ 中每一个个体得分 W_k 的大小对全部 $2u$ 个个体做降序排列, 选择前 u 个个体作为进化过程中的下一代群体 $P(t+1)$ 的个体集合。这样, 每代群体中的最好个体总能够确保被保留到下一代去。

⑥ 判断停机条件, $Q(t) = Q'(t)$, $t=t+1$, 转至②。

2.4.3 量子进化策略(Quantum Evolutionary Strategies-QES)

20世纪60年代, 柏林理工大学的 Rechenberg 和 Schwefel 等先驱在对生物的进化的研究成果进行分析与理解的基础上, 借鉴其相关内容和知识, 特别是遗传进化方面的理论与概念, 针对处理流体动力学中弯管形态的优化问题, 提出并发展了一种新的优化算法—进化策略[11]。其中组成进化群体的每一个个体表示成两部分, 一部分是可以取连续值的向量, 另一部分是一个微小的变动量。这个变动量通常由步长 $\sigma \in R^n$ (态分布的标准方差) 确定, 即群体中的每一个个体 X 都可以表示为 $X = \{x, \sigma\}$; 但是实际上影响变异操作的不仅仅是变动量的大小, 还有变动量的方向-回转角, 它可以用来调整个体进行变异操作时变异量的方向, 回转角有时在某些问题中比步长具有更重要的地位。因此人们提出一种更合理的个体表示: $X = \{x, \sigma, \alpha\}$, 回转角 $\alpha \in R^{n(n-1)/2}$ 代表正态分布时的协方差。假设群体中某一个个体 $X = \{x, \sigma\}$ 经过变异后得到的一个新个体是 $X' = \{x', \sigma', \alpha'\}$, 则新个体的组成元素是:

$$\sigma'_i = \sigma_i \cdot \exp[\tau \cdot N(0, 1) + \tau' \cdot N_i(0, 1)] (i = 1, 2, \dots, n), \quad (11)$$

$$x'_i = x_i + \alpha'_i \cdot N(0, \sigma'_i) (i = 1, 2, \dots, n), \quad (12)$$

其中 τ 和 τ' 分别表示变异操作时的整体步长和个体步长。QES 的详细描述如下[12]:

① 将搜索空间转化为一个 n 维实数空间, 于此相对应, 搜索点就是一个 n 维向量 $x \in R^n$, 随机初始化种群 $Q(t)$;

② 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$, 根据不同问题采用不同的观察方式;

③ 对 $P(t)$ 进行进化操作: (可省。)

④ 对当前的父代群体进行进化操作得 $Q'(t)$, 由 $Q'(t)$ 生成新个体 $P'(t)$;

⑤ 评价群体 $Q(t)$ 的适应度, 确定性选择, 采用量子交叉。

QES 中常用的选择操作主要有两种: 一种是从 λ 个父代个体中选择出 u ($1 \leq u \leq \lambda$) 个适应度最高的个体, 将它们保留到子代中, 称之为 (u, λ) -QES; 另一种是从 u 个父代个体和它所产生的个子代个体合并在一起, 并从这合并而成的个子代个体中选取 u 个适应度最高个体, 将它们保留到子代中, 叫做 $(u+\lambda)$ -QES, 可以任取一种。由于在 QES 中, 选择运算是按照一种确定的方式来进行的, 每次都是从当前群体中选出一个或几个适应度最高的个体保留到下一代个体中, 容易产生早熟, 因此这里采用量子交叉操作。

⑥ 判断停机条件, $Q(t) = Q'(t)$, $t=t+1$, 并转至②。

2.5 量子进化算法的收敛性

定理1 设 P 为一 n 阶可归约矩阵:

$$P = \begin{bmatrix} C & 0 \\ R & T \end{bmatrix}, \quad (13)$$

其中 C 是一个 $m \times m$ 的基本随机矩阵, 而且 $R, T \neq 0$, 则

$$P^\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} P^k = \lim_{k \rightarrow \infty} \begin{bmatrix} C^k & 0 \\ \sum_{i=0}^{k-1} T^i R C^{k-i} & T^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C^\infty & 0 \\ R^\infty & 0 \end{bmatrix} \quad (14)$$

是一稳定随机矩阵, 且 $\Pi^\infty = \Pi^{(0)} P^\infty$ 与初始分布 $\Pi^{(0)}$ 无关, 并且有下列不等式成立:

$$\Pi_i^\infty > 0 (1 \leq i \leq m), \Pi_i^\infty = 0 (m \leq i \leq n). \quad (15)$$

定理2 QEA 是全局收敛的。为了研究 EA 的全局收敛性, 已经提出了很多分析模型^[13]。1990年 Eiben 提出 EA 的一种抽象表示, 将进化过程定义为马尔可夫链, 利用转移概率矩阵相乘来进行状态的变换, 分析得出 EA 收敛到最优解的条件。QEA 与 EA 类似, 仅多出了由 Q 生成 P 和变异 Q 的过程。我们以二值问题为例讨论 QEA 的收敛性。假设染色体长度为 L , 种群规模为 N , 对于染色体的取值是离散的 0、1 的 GA, 种群所在的状态空间大小是 2^{NL} , 而对于 QEA, 由于 Q 的取值是连续的, 理论上种群所在的状态空间是无限的, 但因实际运算中 Q 是有限精度的, 设其维数为 v , 则种群所在的状态空间大小则为 v^{NL} 。算法的状态转换过程可用如下的 Markov 链来描述:

$$Q_k \longrightarrow (P_k \longrightarrow P'_k \longrightarrow P''_k) \longrightarrow Q_{k+1}. \quad (16)$$

算法的整个过程可表示为:

$$\begin{aligned} \pi^{(t+1)} &= \pi^{(t)} \times C_1 M_1 S_1 U, \\ U &= F(p^{(t)}), \\ p^{(t)} &= q^{(t)} M_q, \\ q^{(t+1)} &= q^{(t)} \times C_2 M_2 S_2, \end{aligned} \quad (17)$$

设中间种群的规模为 \hat{N} , 则种群和中间种群所在的状态空间分别为 $\{0, 1\}^{NL}$ 、 $\{0, 1\}^{\hat{N}L}$, 算法的状态转移矩阵可用交叉、变异、选择矩阵 C 、 M 、 S 来表示, 其中 C 、 M 、 S 分别为 $2^{NL} \times 2^{\hat{N}L}$ 、 $2^{\hat{N}L} \times 2^{\hat{N}L}$ 、 $2^{\hat{N}L} \times 2^{NL}$ 阶随机矩阵, 由交叉选择算子的含义可知:

$$C = \begin{bmatrix} I_{2^L \times 2^L} & 0 \\ C_1 & C_2 \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} I_{2^L \times 2^L} & 0 \\ S_1 & S_2 \end{bmatrix}. \quad (18)$$

其中 $q^{(t)}$ 为 $1 \times v^{NL}$ 维的量子染色体的概率分布向量, $p^{(t)}$ 、 $\pi^{(t)}$, 均为 $1 \times 2^{(N+1)L}$ 维的普通染色体的概率分布向量, M_q 为量子染色体生成普通染色体的 $v^{NL} \times 2^{NL}$ 维的概率转移矩阵; C_2, M_2, S_2 均为 $v^{NL} \times v^{NL}$ 维随机矩阵, C_1, M_1, S_1, U 为 $2^{(N+1)L} \times 2^{(N+1)L}$ 阶的块对角矩阵。讨论解空间 $\{0, 1\}^{(N+1)L}$ (为讨论的方便, 我们令 $\hat{N} = N$), 此时每一状态均由 $N+1$ 个串长 L 的个体组成, 第一个个体被称为超个体, 只起标志、记录作用, 不参与进化。状态空间中状态依次为 $X_1, \dots, X_{2^{NL}}$, $\{0, 1\}^L$ 中的个体按适应度大小排列为: x_1, \dots, x_{2^L} , 则经过遗传算子的作用, 空间 $\{0, 1\}^{(N+1)L}$ 中的状态 (x_i, X_m) 变为状态 (x_j, X_n) 的概率由矩阵 $P' = C_1 M_1 S_1$ 确定, 其中 C_1, M_1, S_1 分别为块 C 、 M 、 S 组成的块对角矩阵:

$$C_1 = \begin{bmatrix} C & & & \\ & C & & \\ & & \ddots & \\ & & & C \end{bmatrix}, \quad M_1 = \begin{bmatrix} M & & & \\ & M & & \\ & & \ddots & \\ & & & M \end{bmatrix}, \quad S_1 = \begin{bmatrix} S & & & \\ & S & & \\ & & \ddots & \\ & & & S \end{bmatrix}. \quad (19)$$

由于经算法中的“最优保持”后, 如果当代产生的最优个体优于超个体, 则用当前最优个体代替超个体, 否则保持不变, 所以我们引入 $2^{(N+1)L} \times 2^{(N+1)L}$ 阶随机矩阵 U 来表示这种升级运

算, 其中矩阵 U 的每行仅有一个元素为1, 其余元素均为0, 它可表示为:

$$U = \begin{bmatrix} U_{11} & & & \\ U_{21} & U_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ U_{2^L,1} & U_{2^L,2} & \cdots & U_{2^L,2^L} \end{bmatrix}. \quad (20)$$

则算法的状态转移矩阵为:

$$P^+ = P' \cdot U = C_1 M_1 S_1 U = \begin{bmatrix} CMSU_{11} & & & \\ CMSU_{21} & CMSU_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ CMSU_{2^L,1} & CMSU_{2^L,2} & \cdots & CMSU_{2^L,2^L} \end{bmatrix}. \quad (21)$$

以上过程均与 GA 类似, 不同的是, 这里的升级运算 U 不仅受 P 自身进化过程的影响, 而且受到 Q 的作用, 当通过新的 Q 产生的 P 中出现了优于当前代的超个体的解时, 便更新超个体。因为 CMS 为一正的随机矩阵, 由上文知: U_{11} 为 $I_{2^{NL} \times 2^{NL}}$ (I 代表单位阵), U_{ii} 是至少一对角元为0的下三角阵, 则:

$$CMSU_{11} = CMS > 0, \begin{bmatrix} CMSU_{21} \\ \vdots \\ CMSU_{2^L,1} \end{bmatrix} \neq 0, \begin{bmatrix} CMSU_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots \\ CMSU_{2^L,1} & \cdots & CMSU_{2^L,2^L} \end{bmatrix} \neq 0. \quad (22)$$

从而由定理1知: $\lim_{n \rightarrow +\infty} (P^+)^n$ 存在, 而且 $\lim_{n \rightarrow +\infty} (P^+)^n = (p_1, p_2, \cdots, p_{2^L}, 0, \cdots, 0)$ 与初始分布向量 $\Pi^{(0)}$ 的初值无关。因为已知 $\{0, 1\}^{(N+1)L}$ 中前 2^L 个状态的第一个个体均为取全局最优值的个体 x_1 , 若记 p'_i 为 t 时刻算法处于状态 i 的概率, 并且记 A 为其中适应度最高的个体为 x_1 的所有状态的集合, 则 $p(f_t = f^*) = \sum_{i \in A} p'_i$, 从而 $\lim_{n \rightarrow +\infty} p(f_t = f^*) = p_1 + \cdots + p_{2^L} = 1$, 即此时算法是收敛的。

3 仿真实验

背包问题是一个典型的组合优化问题, 描述如下: 假设有价值 C_i 与重量 W_i 已知的 N 件物品和一个最大容重为 V 的背包, 选择哪些物品装入该背包可在其容量约束限制之内装入物品的总价值最大? 我们先以 $N = 8, V = 45$ 为例, 考察 QEA 的性能。首先用一个二进制串代表问题的一个可能解, 染色体的每个基因位可能的取值为1和0, 1代表将该物品装入, 0代表不将该物品装入。问题归结于在 $28=256$ 种装入方式中找到满足要求且装入物品的总价值最大的一种。256种装入方式的总重量如图2所示。满足条件的有7个个体, 只有一个最优解 $-V = 45, C = 32$ 。设最大终止代数1000, GA 的变异和交叉概率分别为0.7、0.1, QEA 中省略普通染色体的进化, 量子染色体采用变异策略1, 为检验文中提出的变异策略的有效性, 我们给出了不使用量子变异, 而是随机产生量子染色体的算法的结果, 在这里, 姑且称之为 QA。图3给出了100次试验的平均结果。

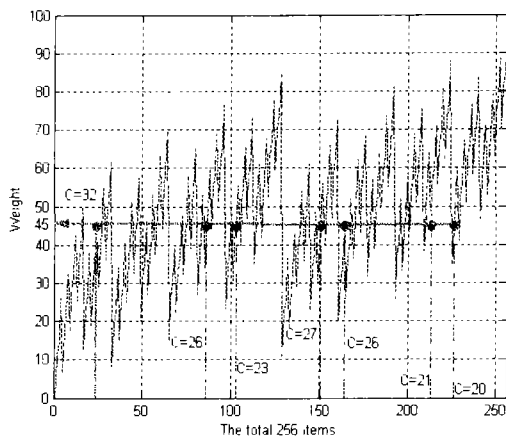


图2: 256种可能装入的重量

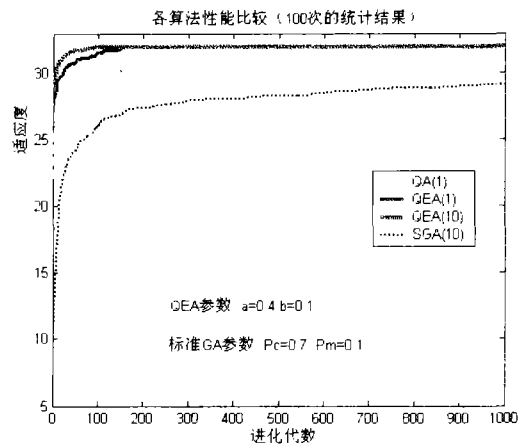
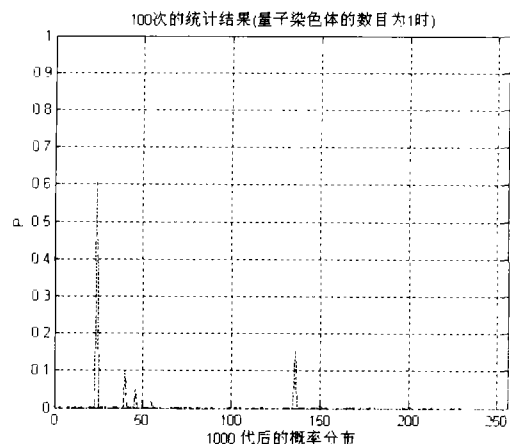
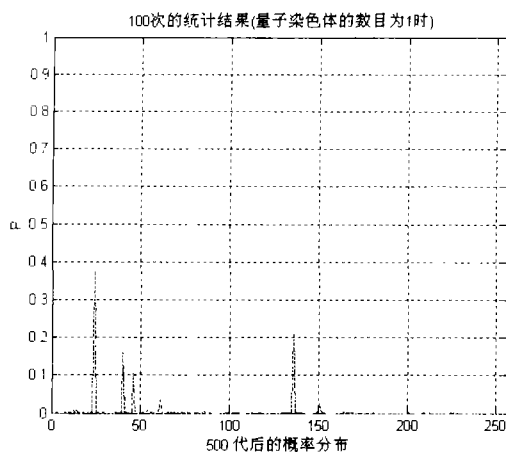


图3: 进化1000代的结果

图中括号后的数字代表种群的大小。我们以量子染色体数目为1为例, 观察量子染色体的变化: 开始量子染色体各基因位的幅度值是相等的, 即所有可能的个体以相同的概率出现, 期望最后最优个体以概率1出现, 图4分别给出了进化不同代后个体出现概率的统计结果。考虑 $m=50$, $V=1000$, 采用量子变异策略2的情况。在 GA 和混合遗传算法 (HGA) 中, 假设种群大小为80, 最大终止代数为500, 变异和交叉的概率分别为0.7、0.1。表4给出了50次试验不同算法的结果。观察量子进化算法的最大值, 最小值和平均值的收敛曲线可以看到: 对于上述背包问题采用如前所述的 QEA, 当进化到第11代时, 已出现最优解3103/1000, 而且种群集中在3096/999, 3098/998, 3093/997, 3095/996等周围。当进化到第50代时, 最优解在种群中的比例已占到半数以上, 当进化到第100代时, 量子染色体已经以概率1取最优解。



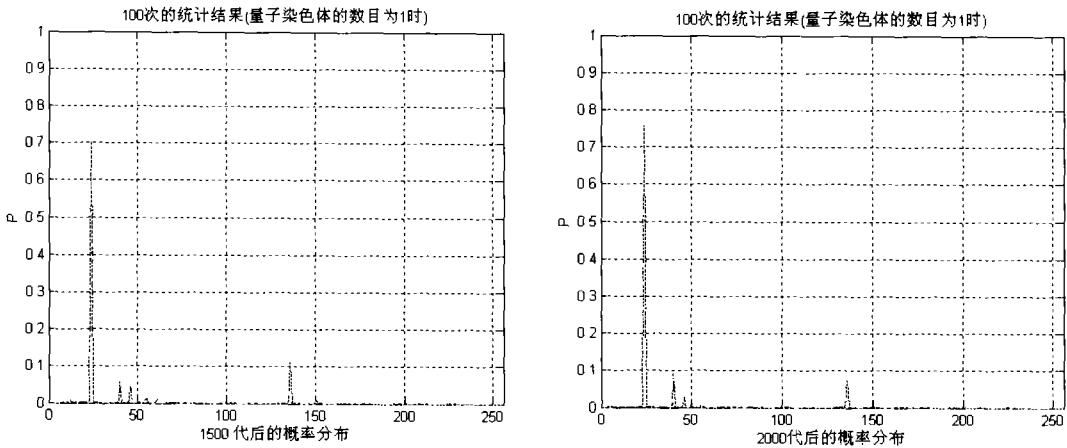


图4: 500代,1000代,1500代,2000代后的个体出现概率

表 4: 算法结果对比

算法	最优解出现的代数	出现优于贪心解的代数	总价值/总重量
GA	1379	132	3077/999
HGA	183	45	3103/1000
QEA	11	2	3103/1000
贪心算法	0	0	3036/996

4 结论

本文在借鉴量子理论和分析进化算法缺点的基础上，提出一种将量子理论与进化理论相结合的量子进化算法框架，算法引入量子比特来编码染色体，构造了量子进化算子—量子变异和量子交叉，并证明了其全局收敛性。对应于进化算法，本文详细给出了该框架之下的三个算法—量子遗传算法、量子进化规划和量子进化策略。理论分析和仿真结果都表明：此算法收敛速度快，种群多样性好，能有效克服早熟现象，类似的结果在国内外还未见报导。

参考文献:

[1] Holland J H. Genetic algorithms and classifier systems: foundations and their applications[C]// Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms. Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum Associates, 1987:82-89

[2] Fogel L J, Owens A J, Walsh M J. Artificial Intelligence Through Simulated Evolution[M]. Chichester: John Wiley, 1966

[3] Klockgether J, Schwefel H P. Two-phase nozzle and hollow core jet experiments[C]// Elliott D. (eds.) Proc 11th Symp Engineering Aspects of Magneto hydrodynamics. Pasadena CA: California Institute of Technology, March 24-26, 1970:141-148

[4] 张讲社, 徐宗本, 梁怡. 整体退火遗传算法及其收敛充要条件[J]. 中国科学 (E辑), 1997,27(2):154-164

- [5] 王安民. 计算的量子飞跃[J]. 物理, 2000,29(6):351-357
- [6] Hey T. Quantum Computing: An Introduction[J]. Computing & Control Engineering Journal. 1999,10(3):105-112
- [7] Alen Varsek. Tanja Urbancic, Bodgan Filipic, Genetic algorithms in controller design and tuning[J]. IEEE Trans S M C. 1993,23(5):1330-1339
- [8] Miller G. Todd P, Hedge S. Designing neural networks using genetic algorithm[C]// Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms and Their applications. D J Schaffer, Ed. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann. 1989:360-369
- [9] Goldberg D E. Genetic algorithm in search, optimization, and machine learning[M]. MA: Addison-Wesley. Reading, MA. 1989
- [10] Fogel D B. Asymptotic convergency properties of genetic algorithms and evolutionary programming: analysis and experiments[J]. Cybernetic and Systems: An Int J, 1994,25(3):389-407
- [11] Klockgether J, Schwefel H P. Two-phase nozzle and hollow core jet experiments[C]// Elliott D.(eds.) Proc 11th Symp Engineering Aspects of Magneto hydrodynamics. Pasadena CA: California Institute of Technology, March 24-26, 1970:141-148
- [12] 杨淑媛, 刘芳, 焦李成. “量子进化策略” [J]. 电子学报, 第12A期, 第29卷, 2001年12月
- [13] Nix A E. Vose M D. Modeling genetic algorithms with Markov chains[J]. Ann Math Artif Intell, 1992,5:79-88

The Quantum Evolutionary Algorithm

YANG Shu-yuan, JIAO Li-cheng, LIU Fang

(Institute of Intelligent Information Processing, Xidian University, Xi'an 710071)

Abstract: A novel kind of algorithm, called the quantum evolutionary algorithms-QEA, is proposed by combining quantum theory with evolutionary theory. It is a kind of evolutionary algorithm with the form of quantum chromosome, the random observation which simulates the quantum collapse can bring diverse individuals, and the evolutionary operators characterized by quantum mechanism are introduced to speed up convergence and to avoid prematurity. The paper not only proves the global convergence of QEA, but also provides simulation experiments to prove its superiority over its counterpart.

Keywords: quantum chromosome; probability; evolution; convergence