Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms – QIEA

D.Sc. Yván Jesús Túpac Valdivia

Ciencias de la Computación
Universidad Católica San Pablo

June 19, 2012

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Una computadora quántica aplica algunos fenómenos de la mecánica quántica para realizar operaciones con datos.

Universidad Católica
San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Una computadora quántica aplica algunos fenómenos de la mecánica quántica para realizar operaciones con datos.
- Estos fenómenos permiten construir (en teoría) computadoras que obedezcan nuevas leyes más permisivas, de complejidad computacional [Spector, 2004].

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Una computadora quántica aplica algunos fenómenos de la mecánica quántica para realizar operaciones con datos.
- Estos fenómenos permiten construir (en teoría) computadoras que obedezcan nuevas leyes más permisivas, de complejidad computacional [Spector, 2004].
- La principal perspectiva de la computación quántica es el poder de procesamiento y la afirmación que "las posibilidades valen, aunque nunca ocurran".

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.
- Esta superposición se manifiesta como una combinación lineal de los estados:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{1}$$

donde:

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.
- Esta superposición se manifiesta como una combinación lineal de los estados:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{1}$$

donde:

$|\psi\rangle$ es el estado del *q-bit*.

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.
- Esta superposición se manifiesta como una combinación lineal de los estados:

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

donde:

$|\psi\rangle$ es el estado del *q-bit*.

α, β son números complejos que sirven para especificar las amplitudes de probabilidad de los correspondientes estados.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.
- Esta superposición se manifiesta como una combinación lineal de los estados:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{1}$$

donde:

$|\psi\rangle$ es el estado del *q-bit*.

α, β son números complejos que sirven para especificar las amplitudes de probabilidad de los correspondientes estados.

$|\alpha|^2$ es la probabilidad que el *q-bit* se encuentre en estado 0.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- En Computación Clásica, la mínima unidad de información es el *bit*.
- En Computación Quántica, la unidad de información es el *q-bit* que puede asumir los estados $|0\rangle, |1\rangle$, o una superposición de ambos.
- Esta superposición se manifiesta como una combinación lineal de los estados:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{1}$$

donde:

$|\psi\rangle$ es el estado del *q-bit*.

α, β son números complejos que sirven para especificar las amplitudes de probabilidad de los correspondientes estados.

$|\alpha|^2$ es la probabilidad que el *q-bit* se encuentre en estado 0.

$|\beta|^2$ es la probabilidad que el *q-bit* se encuentre en estado 1.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Cuando se observa un *q-bit*, se le trae al "nivel clásico" y su estado observado será 0 ó 1, como un *bit* clásico.

Universidad Católica
San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Cuando se observa un *q-bit*, se le trae al "nivel clásico" y su estado observado será 0 ó 1, como un *bit* clásico.
- La superposición permite un inmenso grado de paralelismo, podrían solucionarse problemas NP en tiempo P.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Computación Quántica

- Cuando se observa un *q-bit*, se le trae al "nivel clásico" y su estado observado será 0 ó 1, como un *bit* clásico.
- La superposición permite un inmenso grado de paralelismo, podrían solucionarse problemas NP en tiempo P.
- La computadora quántica es una computadora no determinística

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Algoritmos con Inspiración Quántica

La computación quántica se muestra promotedora por la capacidad de procesamiento esperada, pero existen dos problemas que impiden su uso directo:

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Algoritmos con Inspiración Quántica

La computación quántica se muestra promotedora por la capacidad de procesamiento esperada, pero existen dos problemas que impiden su uso directo:

1. Dificultad en implementar una verdadera computadora quántica.

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Algoritmos con Inspiración Quántica

La computación quántica se muestra promotedora por la capacidad de procesamiento esperada, pero existen dos problemas que impiden su uso directo:

1. Dificultad en implementar una verdadera computadora quántica.
2. Dificultad en crear algoritmos que aprovechen la capacidad de proceso de las computadoras quánticas

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Algoritmos con Inspiración Quántica

La computación quántica se muestra promotedora por la capacidad de procesamiento esperada, pero existen dos problemas que impiden su uso directo:

1. Dificultad en implementar una verdadera computadora quántica.
2. Dificultad en crear algoritmos que aprovechen la capacidad de proceso de las computadoras quánticas

Por este motivo, la comunidad académica se aboca en dos puntos

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

Algoritmos con Inspiración Quántica

La computación quántica se muestra promotedora por la capacidad de procesamiento esperada, pero existen dos problemas que impiden su uso directo:

1. Dificultad en implementar una verdadera computadora quántica.
2. Dificultad en crear algoritmos que aprovechen la capacidad de proceso de las computadoras quánticas

Por este motivo, la comunidad académica se aboca en dos puntos

- Desarrollar algoritmos que sean más eficientes en las computadoras quánticas que sus equivalentes en computación clásica.
- Desarrollar *hardware* que factibilize el uso de computadoras quánticas.

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms I

Algoritmos con Inspiración Quántica

Ante estas dificultades se propone un nuevo enfoque: **Inspiración Quántica**, que consiste en:

> Desarrollar algoritmos en computación clásica que aprovechen los paradigmas de la física quántica para mejorar su rendimiento en la resolución de problemas.

Una formulación de algoritmo con inspiración quántica debe cumplir lo siguiente:

1. Tener una representación numérica o un método para convertir en representación numérica
2. Determinar una configuración inicial
3. Definir una condición de finalización

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms II

Algoritmos con Inspiración Quántica

4. Dividir el problema en sub-problemas más simples
5. Identificar el número de universos (estados de superposición)
6. Cada sub-problema debe asociarse a un universo
7. Los cálculos deben ser independientes en cada universo
8. Debe haber alguna interacción entre universos, y ésta debe, al menos permitir hallar la solución, o ayudar a que cada sub-problema en cada universo sea capaz de encontrarla

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$

El modelo QIEA-$\mathbb{B}$ fue propuesto inicialmente por [Han and Kim, 2000, Han and Kim, 2002]

- Es un Algoritmo Evolutivo con individuos, función de evaluación y una dinámica poblacional

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$

El modelo QIEA-$\mathbb{B}$ fue propuesto inicialmente por [Han and Kim, 2000, Han and Kim, 2002]

- Es un Algoritmo Evolutivo con individuos, función de evaluación y una dinámica poblacional
- Los individuos son binarios conformados por *q-bits*

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

q-bit:

- En el individuo del modelo QIEA-$\mathbb{B}$, un *q-bit* está formado por un par de valores

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \tag{2}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

q-bit:

- En el individuo del modelo QIEA-$\mathbb{B}$, un *q-bit* está formado por un par de valores

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \tag{2}$$

en los que se cumple $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

q-bit:

- En el individuo del modelo QIEA-$\mathbb{B}$, un *q-bit* está formado por un par de valores

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \tag{2}$$

en los que se cumple $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

- Los valores $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$ representan la probabilidad de que el *q-bit* observado tenga valor 0 ó 1 respectivamente

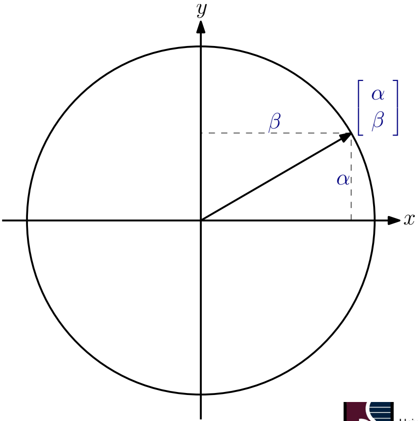
Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

q-bit:

- Se muestra la relación entre α y β que es la siguiente:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Individuo quántico:

- Un individuo quántico $\mathbf{q}_i$ está formado por una cadena de m *q-bits*

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1 & \alpha_2 & \ldots & \alpha_m \\ \beta_1 & \beta_2 & \ldots & \beta_m \end{array}\right] \tag{3}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Individuo quántico:

- Un individuo quántico $\mathbf{q}_i$ está formado por una cadena de m *q-bits*

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_m \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_m \end{array}\right] \tag{3}$$

donde también se cumple $|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2 = 1, \forall j = 1, \dots, n$,

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Individuo quántico:

- Un individuo quántico $\mathbf{q}_i$ está formado por una cadena de m *q-bits*

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_m \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_m \end{array}\right] \tag{3}$$

donde también se cumple $|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2 = 1, \forall j = 1, \dots, n$,

- Con esta definición, se logra que cada individuo quántico represente una superposición de individuos clásicos formados por n genes.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Ejemplo de individuo quántico:

- Sea $\mathbf{q}_i = \{q_1, q_2, q_3\}$ un individuo quántico con 3 *q-bit* cuyas amplitudes son:

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{array}\right] \tag{4}$$

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Ejemplo de individuo quántico:

- Sea $\mathbf{q}_i = \{q_1, q_2, q_3\}$ un individuo quántico con 3 *q-bit* cuyas amplitudes son:

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{array}\right] \tag{4}$$

  donde cada estado se representa por la amplitud de su probabilidad obtenida multiplicando las probabilidades asociadas:

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Ejemplo de individuo quántico:

- Sea $\mathbf{q}_i = \{q_1, q_2, q_3\}$ un individuo quántico con 3 *q-bit* cuyas amplitudes son:

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{array}\right] \quad (4)$$

  donde cada estado se representa por la amplitud de su probabilidad obtenida multiplicando las probabilidades asociadas:

  - Estado $(000) = \alpha_1\alpha_2\alpha_3 = \frac{1}{4}$
  - Estado $(001) = \alpha_1\alpha_2\beta_3 = \frac{\sqrt{3}}{4}$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Ejemplo de individuo quántico:

- La superposición de estados completa para este ejemplo es:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4}|000\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4}|001\rangle - \frac{1}{4}|010\rangle - \frac{\sqrt{3}}{4}|011\rangle \quad + \\ &\frac{1}{4}|100\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4}|101\rangle - \frac{1}{4}|110\rangle - \frac{\sqrt{3}}{4}|111\rangle \end{aligned} \tag{5}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Representación

Ejemplo de individuo quántico:

- La superposición de estados completa para este ejemplo es:

$$\begin{aligned}\frac{1}{4}\left|000\right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4}\left|001\right\rangle - \frac{1}{4}\left|010\right\rangle - \frac{\sqrt{3}}{4}\left|011\right\rangle \quad + \\ \frac{1}{4}\left|100\right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4}\left|101\right\rangle - \frac{1}{4}\left|110\right\rangle - \frac{\sqrt{3}}{4}\left|111\right\rangle\end{aligned} \tag{5}$$

- Esto significa que las probabilidades que representan a los estados

  $|000\rangle \quad |001\rangle \quad |010\rangle \quad |011\rangle \quad |100\rangle \quad |101\rangle \quad |110\rangle \quad |111\rangle$

  son respectivamente

  $\frac{1}{16} \quad \frac{3}{16} \quad \frac{1}{16} \quad \frac{3}{16} \quad \frac{1}{16} \quad \frac{3}{16} \quad \frac{1}{16} \quad \frac{3}{16}$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Población

- La población $\mathbf{Q}_t$ está conformada por uno o varios individuos cuánticos basados en *q-bits*

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Población

- La población $\mathbf{Q}_t$ está conformada por uno o varios individuos quánticos basados en *q-bits*
- Los *q-bits* son inicializados con valores $\alpha_i = \beta_i = \frac{1}{\sqrt{2}}$ lo que significa que para la generación inicial, las probabilidades serán iguales para todos los estados 0, 1 y con valor 0.5 .

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Actualización

- Se usa el operador *q-gate* definido como la matriz de rotación $\mathcal{U}(\cdot)$ que actualiza la población $\mathbf{Q}_t$

$$\mathcal{U}(\Delta\theta_i) = \begin{bmatrix} \cos(\Delta\theta_i) & -\sin(\Delta\theta_i) \\ \sin(\Delta\theta_i) & \cos(\Delta\theta_i) \end{bmatrix} \tag{6}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Actualización

- Se usa el operador *q-gate* definido como la matriz de rotación $\mathcal{U}(\cdot)$ que actualiza la población $\mathbf{Q}_t$

$$\mathcal{U}(\Delta\theta_i) = \begin{bmatrix} \cos(\Delta\theta_i) & -\sin(\Delta\theta_i) \\ \sin(\Delta\theta_i) & \cos(\Delta\theta_i) \end{bmatrix} \tag{6}$$

- Que es aplicado a cada columna del individuo quántico $\mathbf{q}_i$ como:

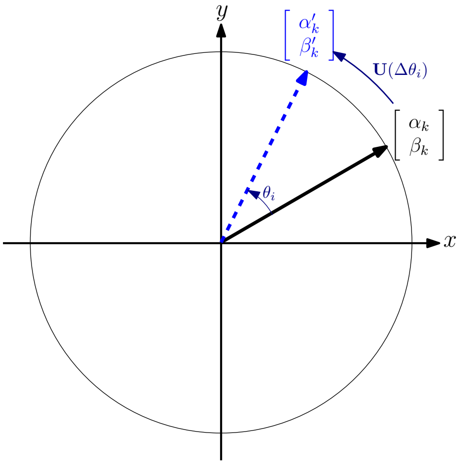
$$\begin{bmatrix} \alpha'_i \\ \beta'_i \end{bmatrix} = \mathcal{U}(\Delta\theta_i) \begin{bmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \end{bmatrix} \tag{7}$$

sin perder la característica $|\alpha'_k|^2 + |\beta'_k|^2 = 1$

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Actualización



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Algoritmo

$t = 0$
inicializa $\mathbf{Q}_t$
genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_t$
almacenar los mejores $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
while CFin $=$ *falso* **do**
  $t = t + 1$
  genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_{t-1}$
  evaluar $\mathbf{X}_t$
  operar $\mathbf{Q}_t$ usando *q-gate*
  almacenar las mejores soluciones de $\mathbf{B}_{t-1}$ y $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
  almacenar la mejor solución $\mathbf{b} \in \mathbf{B}_t$
end while

donde:

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Algoritmo

$t = 0$
inicializa $\mathbf{Q}_t$
genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_t$
almacenar los mejores $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
while CFin $=$ *falso* **do**
  $t = t + 1$
  genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_{t-1}$
  evaluar $\mathbf{X}_t$
  operar $\mathbf{Q}_t$ usando *q-gate*
  almacenar las mejores soluciones de $\mathbf{B}_{t-1}$ y $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
  almacenar la mejor solución $\mathbf{b} \in \mathbf{B}_t$
end while

donde:

$\mathbf{Q}_t$ es una población de 1 o más individuos quánticos

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Algoritmo

$t = 0$
inicializa $\mathbf{Q}_t$
genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_t$
almacenar los mejores $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
while CFin $=$ *falso* **do**
    $t = t + 1$
    genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_{t-1}$
    evaluar $\mathbf{X}_t$
    operar $\mathbf{Q}_t$ usando *q-gate*
    almacenar las mejores soluciones de $\mathbf{B}_{t-1}$ y $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
    almacenar la mejor solución $\mathbf{b} \in \mathbf{B}_t$
end while

donde:

$\mathbf{Q}_t$ es una población de 1 o más individuos quánticos

$\mathbf{X}_t$ es una población clásica

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{B}$ - Algoritmo

$t = 0$
inicializa $\mathbf{Q}_t$
genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_t$
almacenar los mejores $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
while CFin $=$ *falso* **do**
    $t = t + 1$
    genera $\mathbf{X}_t$ observando estados de $\mathbf{Q}_{t-1}$
    evaluar $\mathbf{X}_t$
    operar $\mathbf{Q}_t$ usando *q-gate*
    almacenar las mejores soluciones de $\mathbf{B}_{t-1}$ y $\mathbf{X}_t$ en $\mathbf{B}_t$
    almacenar la mejor solución $\mathbf{b} \in \mathbf{B}_t$
end while

donde:

$\mathbf{B}_t$ es una estructura que almacena los mejores individuos clásicos obtenidos durante el proceso

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ

Modelo desarrollado por [da Cruz, 2007] busca representar una superposición de estados contínuos. La inspiración de este algoritmo está en el uso de las funciones de onda.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Funciones de Onda

Punto de partida es la dualidad onda–partícula de la luz

- ¿El fotón tendrá más propiedades de partícula?
- La masa se relaciona con energía mediante la ecuación $E = mc^2$.
- Un fotón moviéndose a la velocidad de la luz c tiene una masa relativística $m = hv/c^2$.

Por lo tanto, un fotón con una masa y una velocidad tendrá un momento $p = mc = hv/c = h/\lambda$ donde λ es la longitud de onda de la luz.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Funciones de Onda

- Por el otro lado, partículas como un electrón con momento característico h/λ deben tener una longitud de onda $\lambda = h/p$ representada mediante una función de onda.
- En electromagnetismo, una onda estacionaria con longitud de onda λ propagándose hacia el lado positivo del eje x se representa por:

$$\psi(x) = e^{i2\pi x/\lambda} = \cos(2\pi x/\lambda) + i\sin(2\pi x/\lambda) \tag{8}$$

donde $i = \sqrt{-1}$.

- Reemplazando $\lambda = h/p$, se tiene la siguiente ecuación:

$$\psi(x) = e^{ipx/\hbar} \tag{9}$$

donde $\hbar = h/2\pi$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Funciones de Onda

- De la función de onda se determina la probabilidad que una partícula se encuentre en un determinado punto del espacio al intentar observarla
- La $p.d.d.$ para la ubicación de una partícula con función de onda ψ es definida por $|\psi|^2$ [Gillespie, 1974].
- En dimensión 1, una partícula con densidad de onda $\psi(x)$ tendrá una densidad de probabilidad de ser hallada en el intervalo $x + dx$ de:

$$|\psi(x)|^2 dx = \psi^* \psi dx \tag{10}$$

donde ψ^* es el conjugado complejo de ψ.

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Funciones de Onda

- En dimensión 3, la densidad de probabilidad de la partícula es $|\psi(\mathbf{x})|^2$, donde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$.
- Al integrar este valor en todo el espacio en que la partícula podría ser encontrada, se obtiene la probabilidad de encontrarla en cualquier lugar del espacio:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d\tau = 1 \qquad (11)$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Funciones de Onda

El concepto de función de onda relaciona probabilísticamente una onda con la localización de una partícula.

- A cada *observación* de una partícula, ésta asumirá diferentes valores de posición según la probabilidad de estar localizada en determinada región del espacio
- Este concepto es usado en el modelo AEIQ-ℝ para representar los valores de los individuos quánticos.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Funciones de Onda

Existen algunas propiedades que deben cumplir las funciones de onda:

1. ψ debe ser finita.
2. ψ debe ser continua.
3. ψ deve ser derivable dos veces.
4. ψ debe ser integrable en todo el espacio.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Procedimiento

$t = 0$
inicializa $\mathbf{Q}_t$ con m individuos de n genes.
while $t \leq T$ **do**
  generar $\mathbf{E}_t$ observando los individuos $\mathbf{Q}_t$
  if $t = 1$ **then**
    $\mathbf{C}_t = \mathbf{E}_t$
  else
    recombinar$(\mathbf{E}_t, \mathbf{C}_t) \rightarrow \mathbf{E}_t$
    evaluar $\mathbf{E}_t$
    seleccionar $\mathbf{C}_t \leftarrow k$ mejores individuos de $\mathbf{E}_t \cup \mathbf{C}_t$
  end if
  atualizar $\mathbf{Q}_{t+1}$ con los m mejores individuos de $\mathbf{C}_t$
  $t = t + 1$
end while

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Representación Quántica

Los individuos representan la superposición de estados posibles que un individuo quántico puede asumir. Se respeta que el conjunto de estados observables sea contínuo y no discreto como QIEA-$\mathbb{B}$.

- Sea la población de individuos quánticos $\mathbf{Q}_t = \{\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_m\}$, en la generación t,
- Cada individuo quántico $\mathbf{q}_i$ formado por n genes, $\mathbf{q}_{ij} = \{q_{i1}, \ldots, q_{in}\}$,
- Cada gene q_{ij} es formado por funciones densidades de probabilidad.
- Con esta definición, un individuo quántico puede representarse como:

$$\mathbf{q}_i = \{q_{i1} = p_{i1}(x), q_{i2} = p_{12}(x), \ldots, q_{in} = p_{in}(x)\} \qquad (12)$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Representación Quántica

Cada gen quántico q_{ij} es una variable aleatoria con función de densidad probabilística $p_{ij}(x)$ que puede ser expresada como

$$p_{ij}(x) = \psi_{ij}^{*}(x)\psi(x) \tag{13}$$

donde:

- $\psi_{ij}(x)$ es la función de onda asociada al gene quántico q_{ij} del individuo $\mathbf{q}_i$ de la población $\mathbf{Q}_t$
- $\psi_{ij}^{*}(x)$ es el conjugado complejo de la función de onda $\psi_{ij}(x)$.

No olvidar que una $p.d.f.$ debe cumplir la propiedad de normalización:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{ij}^{*}(x)\psi_{ij}(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} p_{ij}(x)\,dx = 1 \tag{14}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Representación Quántica

La $p.d.f.$ debe ser integrable en la región de dominio de las variables a ser optimizadas. Con esta condición y calculando la distribución acumulada se garantiza que se pueda generar valores en todo espacio de búsqueda $\mathbb{X}$ del problema.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Representación Quántica

Como $p.d.f.$ se puede usar una distribución uniforme $\mathbf{U}_{ij}(x) \in [l_{uj}, u_{ij}\rangle$ definida de la siguiente manera

$$p_{ij}(x) = \begin{cases} \frac{1}{u_{ij}-l_{ij}} & \text{si } l_{ij} \leq x \leq u_{ij} \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (15)$$

donde

- l_{ij} es el límite inferior del intervalo
- u_{ij} es el límite superior del intervalo para el gene quántico q_{ij} cuando es observado (cuando colapsan las superposiciones).

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Representación Quántica

Esta definición $\mathbf{U}_{ij}(x)$ respeta la propiedad de normalización de (14), y es fácil de implementar con un *random numbers generator* `rand()` escalado al intervalo $[l_{ij}, u_{ij}\rangle$ como los individuos con representación real [Michalewicz, 1996]

$$\mathbf{U}_{ij}(x) = l_{ij} + (u_{ij} - l_{ij})\mathbf{U}(x) \tag{16}$$

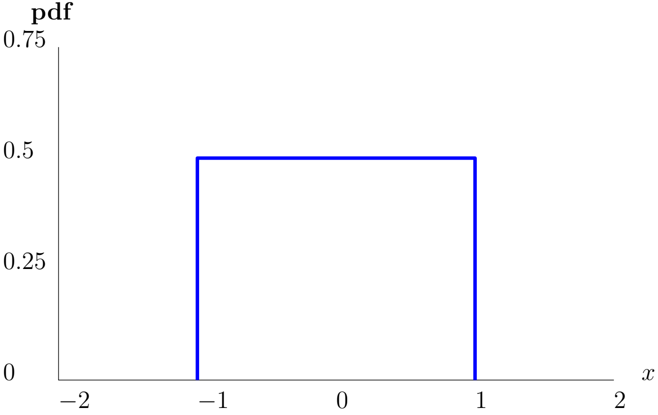
donde

$\mathbf{U}(x)$ es un generador de números aleatorios reales en $[0, 1\rangle$: $\mathbf{U}(0, 1)$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Representación Quántica

Gen quántico pulso cuadrado con límites $[l_{ij}, u_{ij}\rangle = [-1, 1\rangle$.



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Inicialización

Consiste en generar la población $\mathbf{Q}_0$ inicial de m individuos quánticos $\mathbf{q}$ en $t = 0$.

- Si $p_{ij} = \mathbf{U}_{ij}(x)$, el gene quántico q_{ij} sería representado completamente por l_{ij}, u_{ij} o el centro $\mu_{ij} = \frac{l_{ij}+u_{ij}}{2}$ más el ancho de pulso $\sigma_{ij} = u_{ij} - l_{ij}$.

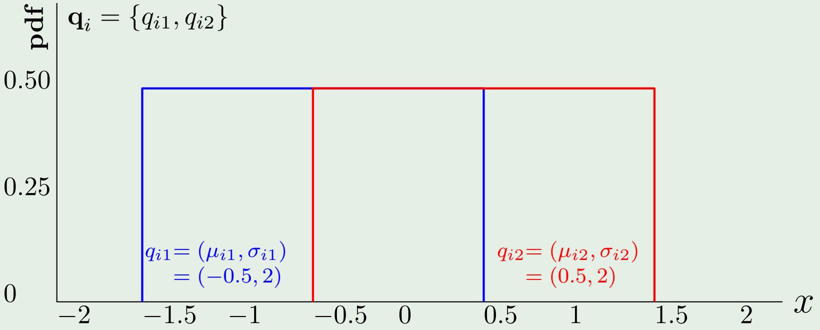
Sea el individuo quántico $\mathbf{q}_i = \{q_{i1}, q_{i2}\}$, con pulsos de ancho 2 y centros posicionados en -0.5 y 0.5

- El cromosoma quántico se puede representar usando centro y ancho de pulso como $\mathbf{q}_i = \{\mu_{i1} = -0.5, \mu_{i2} = 0.5, \sigma_{i1} = 2, \sigma_{i2} = 2\}$.
- La altura debe garantizar la propiedad de normalización de una $p.d.f.$, así, por la Eq.(15) la altura será 0.5 para ambos pulsos.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Inicialización

La figura ilustra el individuo quántico $\mathbf{q}_i = \{q_{i1}, q_{i2}\}$



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Estrategias de Inicialización

Al usar distribuciones uniformes, se puede emplear las dos siguientes estrategias de inicialización de los individuos quánticos:

1. Particionar el espacio de búsqueda con los individuos quánticos, usando genes con pulsos cuadrados de ancho $\frac{u_{ij}-l_{ij}}{m}$ donde m es el tamaño de la población de individuos quánticos y cuyos centros estén distribuidos a lo largo del dominio de las variables.
2. Inicializar todos los individuos cubriendo el dominio entero de las variables, o sea $q_{ij} = \{\mu_{ij} = \frac{l_{ij}+u_{ij}}{2}, \sigma_{ij} = u_{ij} - l_{ij}\}, \forall i, \forall j$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Estrategias de Inicialización

Al usar distribuciones uniformes, se puede emplear las dos siguientes estrategias de inicialización de los individuos quánticos:

1. Particionar el espacio de búsqueda con los individuos quánticos, usando genes con pulsos cuadrados de ancho $\frac{u_{ij}-l_{ij}}{m}$ donde m es el tamaño de la población de individuos quánticos y cuyos centros estén distribuidos a lo largo del dominio de las variables.
2. Inicializar todos los individuos cubriendo el dominio entero de las variables, o sea $q_{ij} = \{\mu_{ij} = \frac{l_{ij}+u_{ij}}{2}, \sigma_{ij} = u_{ij} - l_{ij}\}, \forall i, \forall j$

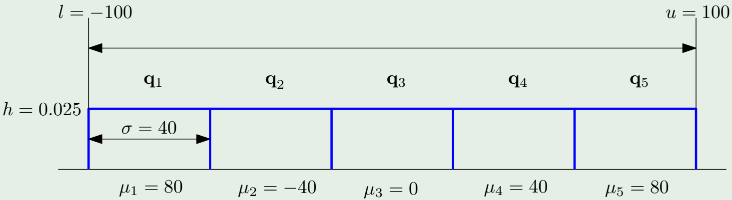
Sea la función $f(x_1, x_2)$ con dominios $x_1, x_2 \in [-100, 100]$ y sean individuos quánticos representados por pulsos cuadrados y la población quántica inicial $\mathbf{Q}_0 = \{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4, \mathbf{q}_5\}$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Estrategias de Inicialización

Con la estrategia 01, los individuos quánticos serían:

$$\mathbf{Q}_0 = \left[\begin{array}{l} \mathbf{q}_1 = \{(\mu = -80, \sigma = 40), (\mu = -80, \sigma = 40))\} \\ \mathbf{q}_2 = \{(\mu = -40, \sigma = 40), (\mu = -40, \sigma = 40))\} \\ \mathbf{q}_3 = \{(\mu = 0, \sigma = 40), (\mu = 0, \sigma = 40))\} \\ \mathbf{q}_4 = \{(\mu = 40, \sigma = 40), (\mu = 40, \sigma = 40))\} \\ \mathbf{q}_5 = \{(\mu = 80, \sigma = 40), (\mu = 80, \sigma = 40))\} \end{array} \right]$$

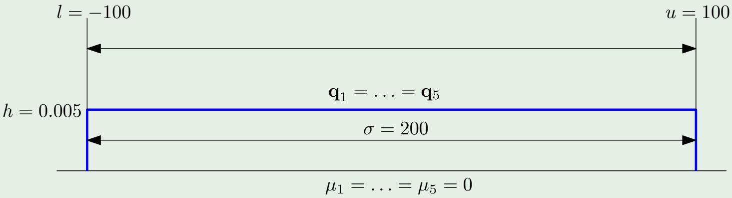


Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Estrategias de Inicialización

Con la estrategia 02, los individuos quánticos definidos de $\mathbf{Q}_0$ serían:

$$\mathbf{Q}_0 = \left[\begin{array}{l} \mathbf{q}_1 = \{(\mu = 0, \sigma = 200), (\mu = 0, \sigma = 200))\} \\ \mathbf{q}_2 = \{(\mu = 0, \sigma = 200), (\mu = 0, \sigma = 200))\} \\ \mathbf{q}_3 = \{(\mu = 0, \sigma = 200), (\mu = 0, \sigma = 200))\} \\ \mathbf{q}_4 = \{(\mu = 0, \sigma = 200), (\mu = 0, \sigma = 200))\} \\ \mathbf{q}_5 = \{(\mu = 0, \sigma = 200), (\mu = 0, \sigma = 200))\} \end{array} \right]$$



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Observación

Teniendo $\mathbf{Q}_0$, se entra al bucle principal del proceso evolutivo

- Observación de los individuos quánticos generando individuos clásicos $\mathbf{x}$ con genes $x_i \in \mathbb{R}$.
- Aplicación de las $p.d.f.$ $p_{ij}(x)$, probabilidades acumuladas P_{ij}, y un generador $\mathbf{U}(0,1)$ haciendo el procedimiento siguiente:

Generar $r \sim \mathbf{U}(x)$
Hallar x tal que

$$P_{ij}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p_{ij}(\tau)d\tau \quad (17)$$

$$x = P_{ij}^{-1}(r) \quad (18)$$

Asignar $x_{ij}(t) \in \mathbf{x}_i \leftarrow x$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Observación

- Se suele generar un individuo clásico por cada individuo quántico
- Se pueden realizar más observaciones del individuo quántico evitando preferencias por algún $\mathbf{q}_i$ definiendo la cantidad de individuos clásicos $m_c = km, \quad k \in \mathbb{N}$. Queda claro también que $m \leq m_c$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Observación

- Sea una población cuántica $\mathbf{Q}_t = \{\mathbf{q}_{1t}, \mathbf{q}_{2t}\}$ donde $\mathbf{q}_i = \{q_{i1}, q_{i2}\}$ con $p.d.f. = \mathbf{U}(\mu - \frac{\sigma}{2}, \mu + \frac{\sigma}{2})$.
- Se muestra la configuración de estos individuos en la siguiente tabla.

Indiv	**Genes**	
$\mathbf{q}_1$	$q_{11} = (\mu_{11} = -5, \sigma_{11} = 20)$	$q_{12} = (\mu_{12} = 0, \sigma_{12} = 20)$
$\mathbf{q}_2$	$q_{21} = (\mu_{21} = 5, \sigma_{21} = 20)$	$q_{22} = (\mu_{22} = 5, \sigma_{22} = 20)$

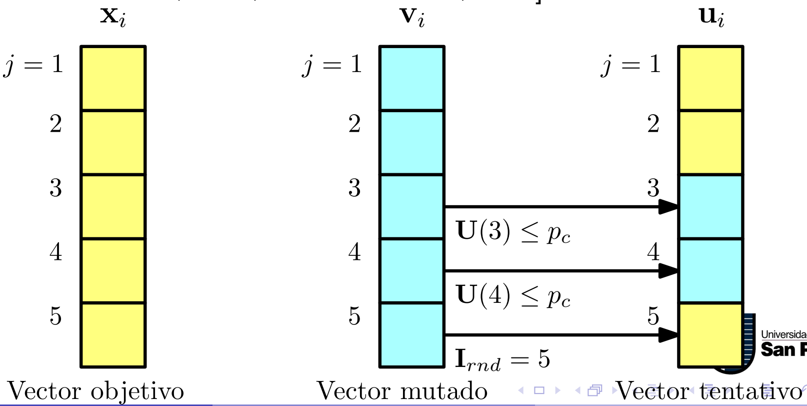
Si se usan pulsos (μ_{ij}, σ_{ij}), y una realización $r_{ij} \sim \mathbf{U}(x)$, el valor del gen clásico se obtiene por:

$$x_{mj} = r_{mj}\sigma_{ij} + \left(\mu_{ij} - \frac{\sigma_{ij}}{2}\right) \tag{19}$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Recombinación de individuos

- **Recombinación de individuos:** Hay la opción de recombinar individuos de $\mathbf{X}_t$ y $\mathbf{X}_{t-1}$. En QIEA-$\mathbb{R}$ se usa recombinación similar a la evolución diferencial [Storn and Price, 1995, Storn and Price, 1997].



Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Recombinación de individuos

- **Mutación:** Aunque es posible, no es necesario aplicar el operador de mutación ya que los individuos quánticos con su característica $v.a.$, introducen efecto *exploring* durante su observación.
- **Evaluación de los individuos:** Se aplica la función $f(\mathbf{x})$ a optimizar a los individuos clásicos $\mathbf{x}_i$ obtenidos por observación (o realización).

$$\boxed{\mathbf{Q}_t} \longrightarrow \mathbf{q}_i \xrightarrow{x \,=\, P_{ij}^{-1}(\mathbf{U}(x))} \mathbf{x}_k \longrightarrow f(\mathbf{x}_k)$$

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Gap Generacional

Una vez generada la nueva población clásica X_t, se debe decidir la estrategia de reemplazo $\mathbf{X}_{t-1} \rightarrow \mathbf{X}_t$ que puede ser:

1. Reemplazar todos los elementos de $\mathbf{X}_{t-1}$ por los nuevos X_t (estrategia extintiva).
2. Reemplazar todos los elementos de $\mathbf{X}_{t-1}$ por los nuevos X_t, manteniendo el mejor elemento $\mathbf{X}_{t-1}$ (elitismo).
3. Reemplazar los k mejores elementos de $\mathbf{X}_{t-1}$ por los k mejores de X_t (*steady state*).
4. Reemplazar los λ elementos de $\mathbf{X}_{t-1}$ por los λ mejores elementos de la unión $\mathbf{X}_{t-1} \cup X_t$ (estrategia $(\mu + \lambda)$-EE).

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$

Ya habiendo obtenido la población $\mathbf{X}_t$ se debe actualizar $\mathbf{Q}_t$ que depende de la $p.d.f.$ definida para cada $\mathbf{q}_i$. En este proceso se busca:

- Reducir el espacio de problema $\mathbb{X}$: En el modelo QIEA-$\mathbb{R}$ se reduce el tamaño de la región con probabilidad $p_{ij} > 0$.
- Detectar las regiones más promisoras de $\mathbb{X}$: Se incrementa la probabilidad de observación en la vecindad de los individuos con mejor aptitud de la población clásica.

En la primera generación, al no haber regiones promisoras conocidas, se espera que el dominio de búsqueda abarque todo $\mathbb{X}$ (con probabilidad > 0).

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$

Habiéndose detectado regiones más promisoras de $\mathbb{B}$, se puede redefinir las $p.d.f.$ para que los individuos quánticos den más posibilidades de observaciones en estas áreas. Siendo las $p.d.f. = \mathbf{U}_{ij}(x)$, la actualización puede consistir en:

- Modificar el ancho de pulsos para redicir el espacio de búsqueda
- Mover la posición del centro del pulso para ajustar el centro a los indivíduos de la población clásica.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$ – Ancho de Pulso

Se puede usar las siguientes estrategias para el ajuste de los pulsos:

- Decaimiento exponencial o lineal para alterar el ancho de pulsos
- Uso de la "regla del $1/5$" Eq(20) (Estrategias evolutivas) [Rechenberg, 1973] de la siguiente manera:
  - Si menos del 20% de la población $\mathbf{X}_t$ ofrece mejor evaluación que en $\mathbf{X}_{t-1}$ entonces disminuye la anchura σ
  - Si es más del 20%, se aumenta la anchura σ

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} \sigma_{ij}\delta & \phi < 1/5 \\ \sigma_{ij}/\delta & \phi > 1/5 \\ \sigma_{ij} & \phi = 1/5 \end{cases} \tag{20}$$

donde σ_{ij} es el ancho de gen $q_{ij} \in \mathbf{q}_i \in \mathbf{Q}_t$, $\delta \in \langle 0, 1 \rangle$ y ϕ es el porcentaje de individuos en $\mathbf{X}_t$ que cumplen el criterio.

Universidad Católica San Pablo

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$ – Posición de Pulso

Se debe decidir cuáles individuos clásicos se usarán para actualizar los pulsos de la población quántica $\mathbf{Q}_t$.

- Esta selección puede ser aleatoria, los mejores o un criterio proporcional
- Para una población quántica $\mathbf{Q}_t = \{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^{n}$ se deben escoger n individuos clásicos.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-$\mathbb{R}$ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$ – Posición de Pulso

Se debe decidir cuáles individuos clásicos se usarán para actualizar los pulsos de la población quántica $\mathbf{Q}_t$.

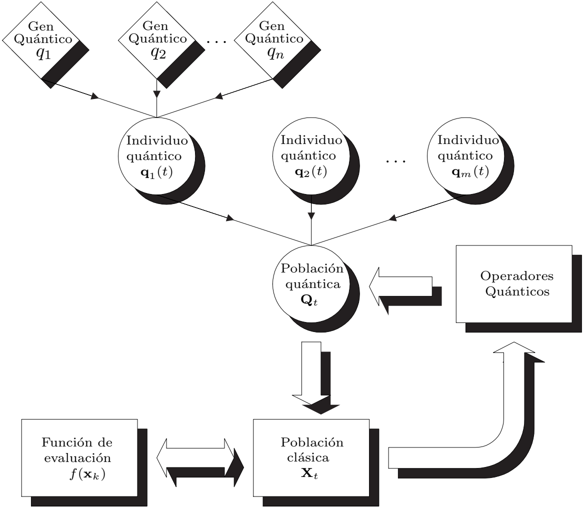
- Esta selección puede ser aleatoria, los mejores o un criterio proporcional
- Para una población quántica $\mathbf{Q}_t = \{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^{n}$ se deben escoger n individuos clásicos.

Dados los individuos, se debe definir su impacto en la población quántica:

- Usar la combinación convexa $\mu_{ij}(t+1) = \mu_{ij}(t) + \lambda(\mu_{ij}(t) - x_{ij}(t))$, donde $\lambda \in [0, 1]$.

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms

QIEA-ℝ – Actualización de $\mathbf{Q}_t$ – Posición de Pulso



Bibliografía I

da Cruz, A. A. (2007).
Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica para Problemas com Representação Numérica.
PhD thesis, Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. (In Portuguese).

Gillespie, D. T. (1974).
A quantum mechanics primer: An Elementary Introduction to the Formal Theory of Non-relativistic Quantum Mechanics.
John Wiley & Sons.

Bibliografía II

Han, K.-H. and Kim, J.-H. (2000).
Genetic quantum algorithm and its application to combinatorial optimization problem.
Proceedings of the 2000 Congress on Evolutionary Computation, 2:1354–1360.

Han, K.-H. and Kim, J.-H. (2002).
Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization.
Evolutionary Computation, IEEE Transactions on, 6(6):580–593.

Michalewicz, Z. (1996).
Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs.
Springer-Verlag, New York, third edition.

Universidad Católica San Pablo

Bibliografía III

Rechenberg, I. (1973).
Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution.
Frommann–Holzboog, Stuttgart, Alemania.

Spector, L. (2004).
Automatic Quantum Computer Programming: A Genetic Programming Approach.
Springer.

Storn, R. and Price, K. (1995).
Differential Evolution: A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces.
Technical Report TR-95-012, International Computer Science Institute, Berkeley, California.

Bibliografía IV

Storn, R. and Price, K. (1997).
Differential Evolution—A Fast and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces.
Journal of Global Optimization, 11:341–359.

Universidad Católica
San Pablo