# 一种解决组合优化问题的量子遗传算法 QGA

熊　焰,陈欢欢,苗付友,王行甫
(中国科学技术大学计算机科学技术系,安徽合肥 230027)

**摘　要**: 本文在量子变异的基础上,提出了一种解决组合优化问题的量子遗传算法 QGA,它融合了遗传量子算法 GQA 和经典遗传算法的优点,只用一个个体就可在很短的时间内搜索到最优解,并针对一个典型的组合优化问题——0/1 背包问题进行了对比实验,实验结果表明本文所提出的量子遗传算法 QGA 优于传统遗传算法和遗传量子算法 GQA.

**关键词**: 量子计算; 遗传算法; 遗传量子算法; 量子遗传算法
**中图分类号**: TP393　　**文献标识码**: A　　**文章编号**: 0372-2112 (2004) 11-1855-04

## A Quantum Genetic Algorithm to Solve Combinatorial Optimization Problem

XIONG Yan, CHEN Huan-huan, MIAO Fu-you, WANG Xing-fu
(*Dept. of Computer Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui* 230027, *China*)

Abstract: Based on quantum mutation, a quantum genetic algorithm (QGA) to solve combinatorial optimization problem is proposed. It has good features of genetic quantum algorithm (GQA) and traditional genetic algorithm, which can obtain the best solution with one chromosome in a short time. Comparing experiments have been conducted on a typical combinatorial optimization problem ——0/1 knapsack problem. Experimental results have shown that the proposed quantum genetic algorithm is superior to genetic quantum algorithm and traditional genetic algorithm on performance.

Key words: quantum computation; genetic algorithm; genetic quantum algorithm; quantum genetic algorithm

## 1　引言

量子计算是一种新兴的计算模式,是量子理论与信息论和计算机科学相结合的产物,它利用量子系统的叠加性、并行性和量子纠缠等特性实现比经典计算更为高效的计算模式[1]. 遗传算法是一种模拟自然界物种进化机制的启发式搜索算法,但是经典的遗传算法在处理某些问题时计算量过大,对有些问题难以找到最优解. 这就促使人们尝试将量子理论与遗传算法相结合,以实现更加高效、快捷的遗传算法. 目前,世界上对量子遗传算法的研究较少,其代表性研究如下: Ajit Narayanan 和 Mark Moore 等人在 1996 年将量子多宇宙的概念引入遗传算法,提出了量子衍生遗传算法(Quantum-inspired genetic algorithms)[3],并成功地用它解决了 TSP 问题. 基于多宇宙概念的量子衍生遗传算法从其算法机理上看很像是一种隔离小生境遗传算法,利用多个种群的并行搜索,增大搜索的范围,利用种群之间的联合交叉,实现种群之间信息的交流,将多个种群各自分散的搜索联系起来,从整体上提高算法搜索的效率. 基于量子多宇宙概念的遗传算法本质上仍属于常规遗传算法的范畴,它并没有用到量子计算中的一些概念,如叠加态的应用,所以说它与量子计算的差距还很大.

Kuk-Hyun Han 等人在 2000 年提出了一种遗传量子算法(Genetic Quantum Algorithm ——GQA)[4,5],他将量子的态矢量表达引入遗传编码,利用量子旋转门实现染色体基因的调整,使得该算法将来在量子计算机上执行成为可能,并且给出了一种基因调整策略,并以此策略实现了 0/1 背包问题的求解,结果其性能要优于传统的遗传算法.

Kuk-Hyun Han 的遗传量子算法(GQA)实际上是一种概率演化算法,在算法中没有采用任何遗传操作,因为他认为该算法染色体的多态性表达已经能够保证算法具有足够的多样性,同时具有开发能力和探索能力,因而,不再需要有交叉和变异. 但是,对于一些多峰函数优化问题,该算法仍然容易陷入局部最优[6].

本文在量子变异的基础上,提出了一种解决组合优化问题的量子遗传算法 QGA,它融合了遗传量子算法 GQA 和经典遗传算法的优点,采用量子比特编码染色体和量子旋转门实现染色体的调整,从而为将来在量子计算机上运行提供了必要条件. 通过引入量子变异的操作,将一个染色体作为一个独立的解空间进行演化,在很短的时间内可以搜索到最优解. 通过对 0/1 背包问题的对比实验,证明了量子遗传算法 QGA 要比传统遗传算法以及遗传量子算法 GQA 优越.

收稿日期:2002-12-12;修回日期:2004-09-10
基金项目:中科院创新基金(No. CXIJ - 91);国家 863 计划(No. 2002AA121066)

## 2 量子计算的基本概念

在量子计算机中,充当信息存储单元的物理介质是一个双态量子系统,称为量子比特(qubit),比如一个双能级系统或具有两个自旋态的电子、质子等.为了叙述方便,通常把自旋 $h/2$ 的电子作为量子比特.量子比特与经典比特不同之处就在于它可以同时处在两个量子态的叠加态中,例如:

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

$$(\alpha,\beta)\text{是两个复常数,满足}|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{2}$$

其中$|0>$和$|1>$分别表示自旋向下和自旋向上态.所以一个量子比特可同时包含态$|0>$和$|1>$的信息.若干个量子比特的有序集合构成一个量子寄存器.一个二位量子寄存器有 4 个独立的态矢量$|00>$,$|01>$,$|10>$,$|11>$,它们组成四维矢量空间,因此,它可以同时包含这 4 个态的信息.类似地,三位量子寄存器的态矢量组成 8 维矢量空间.一般,一个 $L$ 位量子寄存器态矢量张起 $2^L$ 维矢量空间,因而可以存贮 $2^L$ 个不同的经典信息.

对量子比特进行最简单的幺正操作称为基本量子门.任何复杂的幺正操作,都可通过量子门的"完备集合"来组合实现.而一个量子门的"完备集合"可以由少数几个基本量子门组成.现在已经证明[2],为了对量子态执行任意幺正变换,只要能够实现对单个量子比特在 Hilbert 空间中的任意转动和一对量子比特间的控制转动操作就足够了,比如一个 NOT 门和一个一位门就足以构成这样的集合.如果记一个量子比特的两个态分别为 $|0> = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 和 $|1> = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$(称为基态),量子 NOT 门执行的运算可以由下面的幺正矩阵来表示:

$$U_{NOT} = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$$

在 $L$ 位的量子寄存器中存储了 $2^L$ 个经典态.由于可以存储不同经典态的叠加态,量子计算机对叠加态的演化就是对其中各个叠加成分的演化.也就是说,对一个叠加态的演化就是对 $2^L$ 个态进行演化,这就是量子计算中的高度并行性.

## 3 我们提出的量子遗传算法 QGA(Quantum Genetic Algorithm)

遗传算法具有很好的全局搜索性能在于采用了有效的遗传操作(选择、交叉、变异),通过选择实现了优胜劣汰,使得算法始终朝着最优解演化,通过交叉,实现个体间的信息交换,加速最优解的发现,通过变异,一方面实现更加精细的搜索,另一方面拓宽搜索范围,维持种群的多样性.

在我们提出的遗传量子算法 GQA 中,一个染色体即包含了所有可能的解,它融合了遗传量子算法 GQA 和经典遗传算法的优点,通过引入量子变异的操作,将一个染色体作为一个独立的解空间进行演化,因而可在短时间内搜索到最优解.

### 3.1 编码

我们知道在量子态中一个 $m$ 位的量子编码可以表达 $2^m$ 个态,如果 $m$ 为 100,则代表解空间的态为 $2^{100}$,这已经是一个很大的数了.在求解 0/1 背包问题中,由于编码比较简单,所以,采用单个体编码即可以解决问题,不需要采用多个个体.在其他问题的求解中,由于每个基因可能存在多种状态,所以,必须采用多量子比特编码,但仍然可以利用单量子旋转门实现量子比特状态的调整,其计算复杂度的增长与编码长度成线性关系.此外,采用这种编码方案具有很高的通用性,因为从理论上说任何数值最终都要以一定的精度转换成量子比特的表示,并且,任何复杂的幺正变化最终都可以分解为简单的量子门来实现.因此,我们采用单个个体的量子比特编码,见下图.

$$q' = \left(\begin{array}{c|c|c|c}\alpha'_1 & \alpha'_2 & L & \alpha'_m\\ \beta'_1 & \beta'_2 & L & \beta'_m\end{array}\right)$$

其中,$q$ 代表第 $t$ 代个体的染色体,$m$ 为染色体的基因个数.

### 3.2 量子变异

量子计算的一个重要特点是并行性,在我们提出的量子遗传算法 QGA 中,这种并行性是体现在个体的并行演化上.对染色体的任何操作就是同时对其所表示的整个解空间进行操作,因而,量子遗传算法 QGA 中的遗传操作不像传统遗传算法那样针对确定解的操作,而是满足并行性,即它对所有解同时具有相同的意义,所以,在我们的 QGA 算法中没有采用量子交叉的思想.由于 Kuk-Hyun Han 的 GQA 算法在求解某些多峰函数优化问题时容易陷入局部最优,因而,我们引入了一种量子变异操作以改善量子遗传算法的性能.在传统遗传算法中,变异的作用并不是非常大,其意义主要在于阻止未成熟收敛和提供算法局部搜索能力.

由于量子变异要同时满足量子并行性要求和遗传算法中对变异操作的定义,所以,我们定义了一种较简单的单量子比特变异操作,但是其方法可进一步推广到多量子比特的情形,单量子比特变异的方法如下:

(1) 对每一代的个体随机确定一个变异位.

(2) 将该位量子比特的几率幅$(\alpha_i,\beta_i)$位置对调,即完成该量子比特的变异操作.

将量子比特的几率幅$(\alpha_i,\beta_i)$对的位置进行对调,实际上是更改了该量子比特态叠加的状态,使得原来倾向于坍缩到状态"1"的变为倾向于坍缩到状态"0",或者相反.显然,该变异操作对染色体的所有叠加态均同时有效.

### 3.3 算法描述

带量子变异的量子遗传算法 QGA 的描述如下:

(1) 初始化个体 $q^{t_0}$.

(2) 对这个个体 $q^{t_0}$实施 $k(k=1,2,\cdots)$次测量,得到 $k$ 个确定解$\{p_1^{t_0}, p_2^{t_0}, K, p_k^{t_0}\}$,对它们进行适应度评估,取其中最佳适应度个体作为该个体下一步演化的目标值.

(3) While 非结束状态 do.

(4) Begin

(a) $t = t+1$;

(b) 对个体 $q^{t-1}$实施一次测量,得到一个确定解 $p^{t-1}$;

(c) 对此个体的确定解进行适应度评估,得到其适应度值,将它与该个体当前的目标值进行比较,按照一定的调整策略,利用旋转门 $U(t)$实施对个体 $q^{t-1}$调整,得到新个体 $q^t$.

(d) 如果新解的适应度值大于该个体当前的目标值,以新解作为该个体下一步演化的目标,否则,保持当前目标不变.

(e) 实施量子变异操作.

(5) End

在第 2 步中对初始个体实施 $k$ 次测量的目的,是为个体的演化提供一个尽可能好的初始演化目标,$k$ 的取值视具体情况而定,但不宜太大,以免增加计算消耗,一般取 10 以内的自然数.

### 3.4　量子旋转门旋转角的选择策略

个体的调整是通过量子旋转门实现的,或者说在量子遗传算法 QGA 中,旋转门是最终实现演化操作的执行机构,旋转门的工作原理如下:

$$\begin{pmatrix}\alpha_i\\ \beta_i\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta_i) & -\sin(\theta_i)\\ \sin(\theta_i) & \cos(\theta_i)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_i\\ \beta_i\end{pmatrix}$$

其中,$(\alpha_i, \beta_i)$ 为染色体中的第 $i$ 个量子比特,$\theta_i = s(\alpha_i\beta_i)\Delta\theta_i$,$S(\alpha_i, \beta_i)$ 和 $\Delta\theta_i$ 的值根据某一策略事先确定,以表格的形式提供查询.

**表 1　旋转角选择策略**

| $x_i$ | $b_i$ | $f(x) \geq f(b)$ | $\Delta\theta_i$ | $S(\alpha_i, \beta_i)$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | $\alpha_i\beta_i < 0$ | $\alpha_i\beta_i < 0$ | $\alpha_i = 0$ | $\beta_i = 0$ |
| 0 | 0 | False | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | True | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | False | Delta | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | True | Delta | -1 | +1 | ±1 | 0 |
| 1 | 0 | False | Delta | -1 | +1 | ±1 | 0 |
| 1 | 0 | True | Delta | +1 | -1 | 0 | ±1 |
| 1 | 1 | False | 0 | +1 | -1 | 0 | ±1 |
| 1 | 1 | True | 0 | +1 | -1 | 0 | ±1 |

其中,Delta 为每次调整的角步长,对正常调整可以取不同的步长,同时 Delta 的取值取决于不同的问题,以达到控制演化速度的目的.该调整策略的思想就是将个体 $q$ 当前测量值的适应度 $f(x_i)$ 与该个体当前目标值的适应度 $f(b_i)$ 进行比较,如果 $f(x_i) > f(b_i)$,则调整 $q$ 中相应位量子比特 $(x_i \neq b_i)$,使得几率幅向着有利于 $x_i$ 出现的方向演化;反之,如果 $f(x_i) < f(b_i)$,则调整 $q$ 中相应位量子比特 $(x_i \neq b_i)$,使得几率幅向着有利于 $b_i$ 出现的方向演化.

## 4　对比试验分析

为了充分考察和比较传统遗传算法、Kuk-Hyun Han 遗传量子算法 GQA 和本文带量子变异的量子遗传算法 QGA 的性能,试验通过求解 0/1 背包问题来对这三个算法进行性能比较的.

经典背包问题在求最大利润时大多采用惩戒(penalty)函数,修复函数(repair function)的方法.在本试验中传统遗传算法采用惩戒函数的方法.在图 1 中,我们比较了传统遗传算法和我们提出的 QGA 算法,它们各自演化了 100 代,从图中可以看出传统遗传算法在大约第 14 代取得最优值,而 QGA 在第 6 代就取得最优解.虽然它们的运行时间相差不多,但 QGA 算法的搜索效率比传统遗传算法有了较大的提高.

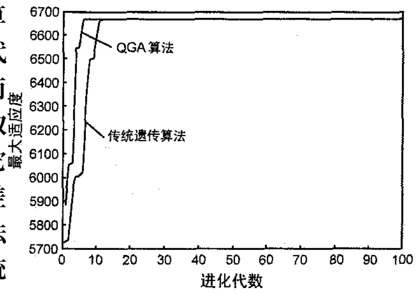


图 1　传统遗传算法和 QGA 算法的比较

在 GQA 的算法中,种群的大小 $n$ 取 10,而在 QGA 中,一开始的循环次数 $k$ 取 10.从图 2 中可以看出 GQA 和 QGA 的收敛速度大体相同.虽然 QGA 只有一个个体,但是在进入循环之前它已经进行了 10 次观察,所以在程序的收敛速度上大体相同.但是 GQA 的运行时间和所需的空间大约是 QGA 的 10 倍.运行时间分别为 74.6380s 和 696.2230s.如果问题的规模进一步扩大的话,计算时间相差会很大.从上面的时间可以看出虽然 QGA 只用了一个个体,但它的搜索效率并没有下降,反而节省了大量的时间.

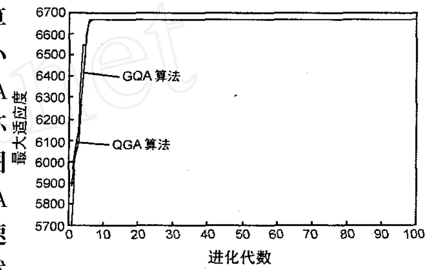


图 2　GQA 算法与 QGA 算法的比较

图 3 给出了单独引入变异操作后,对 GQA 算法性能的影响,图中分别给出了变异概率为 10%和 30%时的输出结果,虽然引入变异操作在处理多峰函数时可以有效地使 GQA 算法跳出局部最优并逐渐向最优解靠近.但是如果取的过大不但不能提高算法的优化能力,反而会使其性能有所降低,这是因为当最优点所处的峰比较陡时,太多的变异使得算法的跳跃性太大,而无法收敛于最优点处.

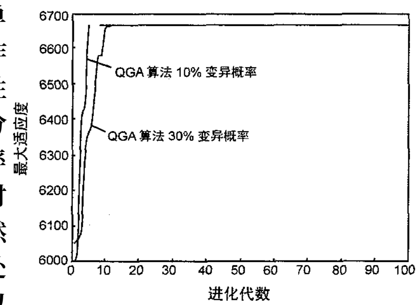


图 3　变异操作对 GQA 算法性能的影响

## 5　结论

本文提出了一个量子遗传算法 QGA,它融合了遗传量子算法 GQA 和经典遗传算法的优点,采用量子比特编码染色体和量子旋转门实现染色体的调整,从而为将来在量子计算机上运行提供了必要条件.通过将一个染色体作为一个独立的解空间进行演化,引入量子变异的操作,使得算法搜索性能较

传统遗传算法以及遗传量子算法 GQA 在性能上有很大的提高.通过对 0/1 背包问题的对比实验,证明了该算法的优越性.

## 参考文献:


[1] John Preskill. Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation [C]. USA: California Institute of Technology, 1998.

[2] DiVincenzo D P. Two-bit gates are universal for quantum computation [J]. Phys, Rev. A, 1995, 51(2): 1015 - 1022.

[3] Narayanan A, Moore M. Quantum inspired genetic algorithms[A]. Proceedings of the 1996 IEEE International Conference on Evolutionary Computation (ICEC96) [C]. USA: IEEE Press, 1996. 61 - 66.

[4] Kuk-Hyun Han, Jong-Hwan Kim. Genetic quantum algorithm and its application to combinatorial optimization problem[A]. Proceedings of the 2000 IEEE Congress on Evolutionary Computation[C]. USA: IEEE Press, 2000. 1354 - 1360.

[5] Kuk-Hyun Han, Kui-Hong Park, Ci-Ho Lee, Jong-Hwan Kim. Parallel quantum-inspired genetic algorithm for combinatorial optimization problem[A]. Proceedings of the 2001 Congress on Evolutionary Computation [C]. USA: IEEE Press, 2001. 1422 - 1429.

[6] 李斌. 金融时间序列数据挖掘关键算法研究(第六章)[D]. 安徽合肥:中国科技大学,1998.


## 作者简介:


**熊 焰** 男,1960 年 8 月出生于安徽合肥,留美博士后、教授、博士生导师,研究方向为分布式处理、移动计算、移动通信、计算机网络及信息安全.

**陈欢欢** 男,1981 年 6 月出生于安徽蚌埠,硕士研究生,研究方向为移动密码学和量子信息处理.

**苗付友** 男,1973 年 5 月出生于河南驻马店,硕士、讲师,研究方向为计算机网络以及移动计算.

**王行甫** 男,1964 年 9 月出生于江苏徐州,副教授,研究方向为网络安全与数据库技术.