量子进化策略

杨淑媛,刘 芳,焦李成
(西安电子科技大学国家雷达信号处理实验室,陕西西安 710071)

摘 要: 本文将进化策略和量子理论相结合,提出一种新的学习算法—量子进化策略(Quantum Evolutionary Strategies)算法.它是一种基于量子计算的概念和理论(诸如量子比特和量子叠加态)的进化策略算法,在这一算法中,采用量子编码来表征染色体,使用量子变异实现染色体的进化.由于量子变异中融入了当前最优解的信息,同时采用"全干扰交叉"操作克服早熟现象的发生,因此它比传统进化策略具有更快的收敛速度和全局寻优的能力.本文不仅从理论上证明了它的全局收敛性,而且仿真计算也表明了此算法的优越性.

关键词: 进化算法; 量子编码; 量子变异; 量子进化策略
中图分类号: TN957 **文献标识码**: A **文章编号**: 0372-2112 (2001) 12A-1873-05

The Quantum Evolutionary Strategies

YANG Shu-yuan, LIU Fang, JIAO Li-cheng
(Key Lab for Radar Processing, Xidian Univ., Xi'an, Shaanxi 710071, China)

Abstract: In this paper, a novel kind of algorithm, the quantum evolutionary strategies-QES, is proposed based on the combination of quantum theory and evolutionary theory. It is a kind of evolutionary strategies with the form of quantum chromosome, whose core lies on the concept and principles of quantum computing, such as qubits and superposition of states. By using qubit mutation, we can make full use of the information of the currently best individual to perform the next search, and use whole interference to avoid prematurity, so it has rapid convergence and good global search capacity. The paper not only proves the global convergence of the QES, but some simulated experimentats are given to prove its superiority to other algorithms.

Key words: quantum evolutionary strategies; quantum chromosome; convergence

1 引言

进化计算是一类模拟生物进化过程与机制求解问题的自组织、自适应人工智能技术.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、选择来实现的,进化算法就是建立在上述生物模型基础上的随机搜索技术.它起源于 60 年代对于机器学习问题发展的遗传算法(Genetic Algorithms)[1], I. Rechenberg 和 H. P. Schwefel 用于数值优化问题的进化策略(Evolutionary Strategies)[2,3]以及 L. J. Fogel 对于优化模型系统所提出的进化规划(Evolutionary Programming)[4].

进化策略是 60 年代由德国的 I. Rechenberg 和 H. P. Schwefel 开发出来的一种优化算法,它最初是为了求解多峰值非线性函数的最优化问题而提出的,目前已在许多工程问题上得到不同程度的应用.早期的进化策略仅作用于两个个体,后来人们从实践应用的角度出发,开始不断对其进行改进与补充,提出了两个较为成熟的进化策略算法——(μ,λ)-ES 和$(\mu+\lambda)$-ES.这两种算法都是针对多个父本和多个子本的,即由 μ 个父本通过交叉和变异算子产生 λ 个子本,并且在具体数值上满足:$1\le\mu\le\lambda$.但是,两者在选择操作和执行过程上都存在着差别.具体而言,在选择方面,前者表示从 λ 个子本中选择出用以组成下一代群体的 μ 个父本,而后者表示从父本与子本的并集中选择出下一代群体的 μ 个父本;在执行过程方面,前者可以通过一个自适应过程来在线学习进化步长以提高应变能力,而后者能够保证群体中最优个体的性能单调提高[6,7].作为进化算法的一个分支,进化策略与进化规划的主要区别大致体现在以下两个方面:第一,在编码结构方面,进化规划是将种群类比为编码结构,而进化策略则是把个体类比为编码结构.所以,前者无需再通过选择操作来产生新的候选解,而后者还要进行这一操作.第二,在竞争与选择方面,进化规划需要通过适当的选择机制,从父代和当前子代中选取优胜者组成下一代群体;而进化策略则是通过一种确定性选择,按适应值的大小,直接将当前优秀个体和父代最佳个体保留到下一代中.

分析进化策略不难发现:变异和交叉算子是在一定条件下,随机地、没有指导地对个体进行修正,但是在变异过程中却忽略了一个重要信息——当前最优个体的信息.因此,它在

收稿日期:2001-06-11;修回日期:2001-10-17
基金项目:国家自然科学基金(No. 60073053),国家"863"计划资助项目

为群体中的个体提供了进化机会的同时,也不可避免地产生了退化的可能.另外,进化策略中的选择操作是按照确定的方式进行的,每次都是从群体中选取最好的几个个体,将它们保留到子代中,它的主要缺点是很容易使整个群体陷入相同的局部极值点,导致进化算法中常常出现的早熟现象.为缩短进化求优的时间和避免早熟现象的发生,我们设计量子门变异来进化种群,把当前最优解的信息用于控制量子的变异;并利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,它的目的就是充分利用种群中的所有染色体的信息,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.

本文基于量子计算的概念和理论,将进化理论[8,9]与量子理论[10]相结合,提出一种新的算法—量子进化策略(QES)算法.算法使用量子比特编码染色体,用量子门变异来进化种群,把当前最优解的信息用于控制量子的变异,从而使种群以大概率向着适应度高的模式进化,同时采用“全干扰交叉”克服早熟现象的发生.因此它比传统进化策略具有更快的收敛速度和全局寻优的能力.下面我们详细讨论量子进化策略算法.

2 量子进化策略

2.1 进化策略

六十年代,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(Evolution Strategies),并收到了良好的效果,目前它已在许多工程问题上得到不同程度的应用.

在进化策略算法中,组成进化群体的每一个个体都是由两部分组成的,其中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.通常的,这个变动量由步长 $\sigma \in R^n$(正态分布的标准方差)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即步长,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,在有些问题中,有时回转角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 $X=\{x,\sigma,\alpha\}$ 经过变异运算后得到的一个新个体是 $X'=\{x',\sigma',\alpha'\}$,则新个体的组成元素是:

$$\sigma_i' = \sigma_i \exp[\tau N(0,1) + \tau' N_i(0,1)],\ (i=1,2,\cdots,n) \quad (1)$$

$$x_i' = x_i + \alpha_i' N(0,\sigma_i'),\ (i=1,2,\cdots,n) \quad (2)$$

式中 $N(0,1)$ 表示均值为 0,方差为 1 的正态分布随机向量,τ 和 τ 是算子集参数,分别表示变异操作时的整体步长和个体步长.

2.2 量子比特染色体的编码方式

进化算法的常用编码方式有二进制编码、十进制编码和符号编码.在量子进化策略中,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:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \Lambda & \alpha_m \\ \beta_1 & \beta_2 & \Lambda & \beta_m \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 $|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2 = 1\ (i=1,2,\cdots,m)$.

2.3 量子变异

标准进化策略中采用的变异操作都是随机地、没有指导地对个体进行修正,进化过程带有随机扰动性,因而收敛速度很慢.在量子算法中,信息处理的过程是通过量子态的幺正变换过程来实现的,我们把它运用到经典的算法中,使用量子比特编码染色体,通过量子变异实现种群的进化.

旋转量子门是量子变换门的一种,通过量子门的旋转来进化种群,可以在变异中加入最优个体的信息来引导进化,从而加快算法的收敛.对于二值编码问题,我们可以设计下面这种量子变异算子来加快进化求优的速度.

$$\text{令}\ U(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad (4)$$

表示量子旋转门,旋转变异的角度 θ 可查表 1 得到.由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$ 的具体过程是:随机产生一个 $[0,1]$ 数,若它大于概率幅的平方,取值 1,否则,取值 0.

表 1

x_i	$best_i$	$f(x) \geq f(\text{best})$	$\Delta\theta_i$	$s(\alpha_i\beta_i)$			
				$\alpha_i\beta_i>0$	$\alpha_i\beta_i<0$	$\alpha_i=0$	$\beta_i=0$
0	0	false	0	0	0	0	0
0	0	true	0	0	0	0	0
	1	false	0	0	0	0	0
0	1	true	0.05π	-1	+1	±1	0
1	0	false	0.01π	-1	+1	±1	0
1	0	true	0.025π	+1	-1	0	±1
1	1	false	0.005π	+1	-1	0	±1
1	1	true	0.025π	+1	-1	0	±1

在表中 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;$s(\alpha_i\beta_i)$ 为旋转角度的方向,保证算法的收敛.下面我们画一个直观的图来说明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.例如当 $x_i=0$,$best_i=1$,$f(x) \geq f(best)$ 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 0 的概率,即要使 $|\alpha_i|^2$ 变大,那么如果 (α_i,β_i) 在第一、三象限,θ 应向顺时针方向旋转;如果 (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.

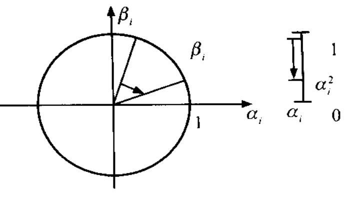

图 1

上述的旋转变换仅仅是经典量子变换的一种,针对具体问题,我们可以应用不同的量子变换,也可根据需要设计自己的幺正变换矩阵.需要指出的是:由于概率归一化条件的要求,量子变异算子—量子门变换矩阵必须是可逆的归一化矩

阵 ——幺正矩阵,需要满足 $U^* U = UU^* = 1$(U^*为 U 的共轭转置矩阵). 在算法中常用的量子变换门有:异或门、受控异或门、旋转门和 Hadamard 变换门等[10].

对于进化策略中的实数空间上的优化问题,首先将搜索空间按一定规则 f 映射到区间[0,1]中:对于任一 $x_i \in [\alpha_i, \beta_i]$ 经过 $f(x_i) = \frac{x_i - \alpha_i}{\beta_i - \alpha_i}$ 映射后,则有 $f(x_i) \in [0,1]$. 那么一个量子比特位就代表了搜索空间的一个可行解,一个具有 m 个量子比特位的染色体就代表了一个具有 m 个个体的种群. 表 2 给出实数空间上的一种比较通用的旋转变异角 θ.

表 2

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

在表 2 中,x_i 为当前染色体,$best_i$ 为当前的最优染色体;$f(x)$为适应度函数,$\Delta\theta_i$ 为旋转角度,控制算法收敛的速度,其取值与求解的具体问题有关. 由 $Q(t)$ 生成 $P(t)$ 的具体操作是:记 $\lambda_i = \frac{f_{\max} - f(x)}{f_{\max} - f_{\min}}$,随机产生一个[0,1]数,若它大于概率幅 λ_i^2,进行变异,否则不进行变异. 变异操作描述为:随机产生一个$[0, \Delta\theta_i]$的 θ

$$Q(t+1) = U(\theta) \times Q(t) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \times Q(t) \tag{5}$$

2.4 量子交叉

交叉是进化策略的另一种搜索最优解的手段. 在算法中,我们可以采用一些交叉操作,如单点交叉、多点交叉、均匀交叉、算术交叉等. 但是,这些交叉都是限制在两个个体之间的交叉. 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 3 示出其中的一种具体操作.

表 3

染色体(ABCDEFGHI)									
1	B1	E1	G1	I1	A1	D1	H1	F1	C1
2	I2	C2	B2	F2	E2	D2	A2	G2	H2
3	D3	B3	A3	H3	I3	C3	F3	E3	G3
4	A4	F4	D4	E4	H4	C4	B4	G4	I4
5	F5	I5	G5	B5	E5	C5	D5	H5	A5

表 3 所示的交叉过程是按对角线重新排列组合,其中,每种颜色代表交叉得到的一个新的染色体,如 B1 - C2 - A3 - E4 - E5 - D1 - A2 - E3 - I4 为交叉后的一个新染色体,我们称之为“全干扰交叉”. 上文仅给出一种方式,我们还可以采用不同方法产生“交叉基因位”.“全干扰交叉”的目的就是充分利用种群中的所有染色体的信息,改进普通交叉的局部性与片面性. 这种交叉方法同样可以应用到普通染色体的进化中去,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. 例如,当种群中所有染色体均陷入一个局部极值点时,普通的交叉已经不可能生成新的个体,而使用随机生成交叉点的全干扰交叉却依然奏效. 这种交叉操作借鉴的是量子的相干特性,比传统的交叉操作在克服早熟问题上具有更好的特性.

2.5 量子进化策略(QES)

基于上述讨论,量子进化策略算法描述如下:

算法:量子进化策略

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评价群体 $P(t)$ 的适应度,选出最优解并保存;

⑤更新 $Q(t)$;交叉操作得到 $Q'(t)$;

变异操作得到 $Q''(t)$;

⑥由 $Q''(t)$ 生成 $P'(t)$;

⑦个体选择、复制操作:$(u, \lambda) - QES$ 或 $(u + \lambda) - QES$;

⑧停机条件判断:当条件不满足时,转到 ⑤;否则输出当前最优个体,算法结束.

它的详细描述如下:

(1) 个体表示方法. 在量子进化策略中,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 $x \in R^n$.

(2) 适应度评价. 设定每个个体的适应度就等于其对应的目标函数值,不再对所求优化问题的目标函数值进行任何处理变换,即 $F(X) = f(x)$;这主要是因为量子进化策略中的选择运算是按照一种确定的方式来进行的缘故,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,这里只有个体适应度大小的比较运算,而无算术运算,所以对个体适应度的正负并无要求.

(3) 变异算子. 在量子进化策略中,变异操作是产生新个体的主要方法. 我们使用如前所述的量子门变换进行变异.

(4) 选择算子. 在量子进化策略中,选择操作是按照确定的方式进行的. 目前进化策略中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(目标函数值较大)的个体,将它们保留到子代中,这种选择方法叫做$(u, \lambda) - ES$ 进化策略;另一种是从 u 个父代个体和它所产生的 λ 个子代个体合并在一起,并从这合并而成的 $u + \lambda$ 个子代个体中选取 u 个父代个体和它所产生的 λ 个子代个体合并在一起,并从这合并而成的 $u + \lambda$ 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,这种选择方法叫做$(u + \lambda) - ES$ 进化策略,在本算法中,与此对应,我们称之为$(u, \lambda) - QES$ 进化策略和$(u + \lambda) - QES$ 进化策略.

(5) 交叉算子. 在进化策略中交叉是一种次要操作,在这里,我们采用量子的“全干扰交叉”操作.

2.6 量子进化策略的全局收敛性

定义 1　严格覆盖的变异分布 ——令 $Z \in \Re^n$ 为随机向量,$S = diag(s_1, s_2, \cdots, s_n)$ 为满秩对角阵,满足$|S| = 1$,$s_i \geq s_{\min} > 0$,T 为任意正交矩阵,σ为在正实数子集变化的变量,即变异中的策略参数. 若变异量 $\Delta Z = \sigma TSZ$,则称变异分布是

严格覆盖的.

定理 1 对于有界非凸函数,假定它受非零度量下限约束.如果进化算法满足如下条件:

①采用进化选择

②采用置换重组

③变异分布保持严格覆盖

那么这种自适应进化算法具有全局收敛性[11].

定理 2 量子进化策略算法是全局收敛的

证明 因为:①量子进化策略算法采用的是(μ,λ) - ES 和$(\mu+\lambda)$ - ES 的进化选择方法;

②量子进化策略算法采用"全干扰交叉"变异算子进行置换重组操作;

③量子变异中所用的变换矩阵均是正交矩阵,这种变异分布是严格覆盖的,即量子变异算子是严格覆盖的;

所以:量子进化策略算法是全局收敛的.

3 仿真试验

3.1 量子进化策略算法求解函数极大值点

进化算法是求解函数极值点的一种有效方法,我们以式(6)所示的函数优化为例,考查 QES 算法的搜索性能.我们考虑二进制编码的情况.

问题描述:设函数 $$f(x)=10+\frac{\sin(1/x)}{(x-0.16)^2+0.1} \quad (6)$$

在(0,1)内求 x_{max}使下式成立:

$$f(x_{max})\geq f(x),\ \forall x\in(0,1) \quad (7)$$

假设在区间(0,1)内有 256 个点,采用二进制编码,染色体长度为 8.首先我们分别用传统的进化算法和量子进化策略算法来求解.两种算法中均设种群大小为 10,最大进化代数 125,传统的进化算法交叉和变异概率分别为:0.7 和 0.1.量子进化策略中,我们采用的是$(\mu,2\mu)$的选择.结果表明:它们均可以找到全局最优解 0.128125,其中对应的决策变量为 00000100,对应的最大函数值为 19.88748818688806,但是在图中可以看到:传统的进化算法在第 20 代时,可以找到全局最优解;而量子进化策略算法在进化到第 3 代时,就可以找到全局最优解.

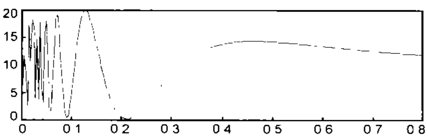

图 2 六峰驼背函数

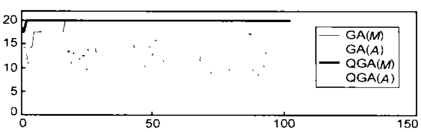

图 3 收敛速度曲线

当区间内有 1024 个点时,染色体长度为 10.最大函数值为 19.89447483337296,量子进化算法在进化到第 7 代时就找到此最大函数值,其中对应的决策变量为 0000010100,而传统的进化算法则仅找到一个局部最优解 19.83843902608065.当区间内点的数目增多时,量子进化策略算法找到全局最优解的代数也随之增加(当区间内有 1024 个点时,全局最优解首次出现的代数为 47),而传统的进化算法几乎不可能找到全局最优解.

3.2 量子进化策略算法求解函数极小值点

我们再来看一例使用量子进化策略求解函数极小点的问题.函数表示为:

$$f(x,y)=25\cos(6x+5)\cos(6y+5) \quad (8)$$

它是一个多峰值函数,在其定义域[-10,10]内有多个局部最小点,如图 4 所示.求解此函数最小点的问题描述为:

在区间 $x\in[-10,10]$, $y\in[-10,10]$内寻找最小值点(x_{min},y_{min}),使下式成立:

$$f(x_{min},y_{min})\leq f(x,y),\ \forall x\in[-10,10],\ y\in[-10,10] \quad (9)$$

我们仍用二进制编码求解此问题.为考察全干扰交叉的效果,与前面所不同的是,我们不实施量子门的旋转变换,而是采用高斯变异,即产生一组服从高斯分布的随机数作为新的量子染色体的概率幅,交叉采用全干扰交叉.在如上定义的取值区间上,函数的最小值为 -24.59014268335651,对应的决策变量为 01001101.实验中,设种群大小为 10,最大进化代数为 500.在传统进化算法中,交叉和变异的概率分别为:0.7 和 0.1,选择为无条件的最优保持操作.在量子算法中,对量子染色体依次执行观察、评价、记录最优、更新操作.比较各算法中,得到如下结果:

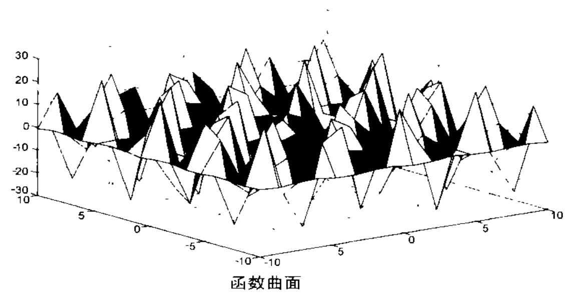

图 4

表 4

	20 次实验中找到全局最优解的次数	找到的最优解、次数及对应函数值			最优解首次出现的平均次数	一次运行的时间(s)
传统进化算法	0	01000001	20	-24.45850367047541	13	0.049
量子算法	13	11011011	3	-24.46633670362169	167.33	0.028
		01000001	4	-24.45850367047541	235.75	
		01001101	13	-24.59014268335651	126	
量子进化策略	20	01001101	20	-24.59014268335651	14.75	0.034

由上面结果可以看到:量子进化策略和其他算法相比,找到最优解的次数大大减小,迭代所需的时间增加有限,求优性能的提高是显著的.

4 结论与讨论

本文基于量子理论中的量子比特的概念,引入量子比特来编码染色体,借用进化算法的形式,提出一种将量子理论与

进化理论相结合的量子进化策略算法(Genetic Quantum Algorithm),并证明了其全局收敛性.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.

参考文献:

[1] Holland J H. Genetic algorithms and classifier systems:foundations and their applications [A]. Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms [C]. 1987:82 - 89.

[2] Rechenberg I. Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach PrinzISien der biologischen Evolution [M]. Frommann-Holzboog,Stuttgart,1973.

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

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

[5] Rechenberg I. Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach PrinzISien der biologischen Evolution [M]. Frommann-Holzboog,Stuttgart,1973.

[6] Schwefel H P. Evolution and Optimum Seeking. Sixth Generation Computer Technology Series [M]. Wiley,New York,1995.

[7] Back T,Hoffmeister F,Schwefel H P. A Survey of Evolution Strategies [A]. In Belew R. and Booker L. (eds.) Proceedings of the Forth International Conference on Genetic Algorithms [C],Morgan Kaufmann Publishers,San Mateo,CA,1991:2 - 9.

[8] 周明,孙树栋编著.遗传算法原理及应用[M].国防工业出版社,1999.

[9] 陈国良,王熙法,庄镇泉,王东生.遗传算法及其应用[M].人民邮电出版社,1997.

[10] 王安民.计算的量子飞跃[J].大学物理,2000,6.

[11] 李孝安.进化神经网络理论及方法研究[D].西北工业大学,2000.

作者简介:

杨淑媛 女.1978 年生于山东省.现为西安电子科技大学在读博士生.主要研究领域包括:人工神经网络、进化算法等.

刘 芳 女.1963 年生于北京市.现为西安电子科技大学副教授.主要研究领域包括:网络信息处理与模式识别等.

焦李成 男,1959 年生于陕西省.现为西安电子科技大学研究生院常务副院长、教授、博士生导师.主要研究领域包括:非线性理论、人工神经网络、子波理论与应用进化算法、数据挖掘与多用户检测等.