

一种模拟绝热量子计算的适应度地形探索算法

杨国松^{1,2,3}, 王鹏^{2,3*}, 尹鑫钰²

(1. 中国科学院成都计算机应用研究所, 四川成都 610299; 2. 西南民族大学计算机科学与工程学院, 四川成都 610225;
3. 中国科学院大学计算机科学与技术学院, 北京 101408)

摘要: 将优化问题抽象成目标函数后, 目标函数和启发式优化算法的匹配程度决定了优化求解的效率. 为反映目标函数的优化特征并指导优化算法及其参数的选择, 本文模拟绝热量子计算中的多基态演化, 提出了一种适应度地形探索算法. 根据基态波函数倾向于向势能较小处收敛且收敛程度受量子效应强度影响的特性, 用目标函数编码势能场后算法引入了一个量子效应递减的多基态演化过程, 用其持续收敛的基态波函数簇反映目标函数的适应度地形. 根据量子路径积分, 算法由尺度递减的扩散蒙特卡罗(diffusion Monte Carlo, DMC)实现. 实验表明算法综合直观地反映了适应度地形的众多特征, 所得信息能直接指导后续优化, 其计算模式和启发式优化相似, 无需引入其他计算, 这为适应度地形研究引入了新的视角.

关键词: 适应度地形; 启发式优化; 绝热量子计算; 渐进量子计算; 基态演化; 扩散蒙特卡罗; 量子退火

基金项目: 国家自然科学基金(No.60702075); 四川省科技创新苗子工程项目(No.2019001)

中图分类号: TP301.6

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112(2024)04-1330-07

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20230832

A Fitness Landscape Exploration Algorithm Simulating Adiabatic Quantum Computation

YANG Guo-song^{1,2,3}, WANG Peng^{2,3*}, YIN Xin-yu²

(1. Chengdu Institute of Computer Application, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, Sichuan 610299, China;

2. School of Computer Science and Engineering, Southwest Minzu University, Chengdu, Sichuan 610225, China;

3. School of Computer Science and Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China)

Abstract: After transforming an optimization problem into an objective function, the degree of matching between the objective function and the chosen heuristic optimization algorithm determines the efficiency of the following optimization. By simulating multi-ground states evolution in adiabatic quantum computation, a fitness landscape exploration algorithm is proposed to reflect the optimization characteristics of the objective function and guide the selection of optimization algorithms and their parameters. In quantum ground state evolution, the ground state wave function of a particle tends to converge towards regions with lower potential energy, and the extent of convergence is influenced by the quantum effect strength. Using these features, we encode the potential energy field by the objective function in a multi-ground states evolution with diminishing quantum effect, and consequently the fitness landscape of the objective function is reflected by the distributions of a set of converging ground state wave function in this adiabatic evolution. Based on the quantum path integral, the algorithm is implemented using a downscaling diffusion Monte Carlo (DMC). Experiments illustrated that the algorithm comprehensively and intuitively reflected numerous features of the fitness landscape, and the obtained information could directly guide optimization thereafter. Its computational mode resembles that of heuristic optimization, as it does not introduce other computations during optimization. These features introduce a novel perspective to the study of fitness landscape.

Key words: fitness landscape; heuristic optimization; adiabatic quantum computation; ground state evolution; diffusion Monte Carlo; quantum annealing

Foundation Item(s): National Natural Science Foundation of China (No.60702075); Sichuan Science and Technology Program (No.2019001)

1 引言

用待优化的决策变量将优化问题抽象为目标函数后,启发式优化算法仅用有限的随机搜索即可深度优化问题并输出足够精确的可行解,具有很强的实用性.因此,自20世纪60年代遗传算法被逐步提出以来,各种类似算法不断涌现,形成了数十种特性和参数各异的启发式优化算法.这丰富了优化求解的选择,也对算法及其参数的选用提出了挑战.无免费午餐定理指出^[1],组合优化中若某算法对特定类型的目标函数非常高效,则它优化其他类型问题的能力可能会较弱.可见应根据问题特性选择算法和参数以确保优化效率,这也是优化求解的普遍原则.但目标函数通常很复杂,很难作出有针对性的选择.

一种解决思路是先研究目标函数的特性,再对应地选择算法和参数.适应度地形就是一个刻画目标函数特征的概念^[2],它源于生物学,最初指从基因型到其个体对自然环境的适应程度的映射^[3].后来它被用于描述演化算法中的目标函数^[4].分别用 X 、 N 和 $f(\mathbf{x})$ 表示解空间、邻域结构和目标函数,则适应度地形可由三元组 $R=(X, N, f)$ 表示.这样,优化就是在适应度地形上从初始位置向高适应度位置演进的过程,而演化路径受算法及其参数、随机因素和适应度地形影响.

早期的适应度地形研究关注崎岖性,其描述参数有自相关函数、相关长度和距离相关性等^[5,6].Vesselin等人还引入了两个信息熵分别描述地形的崎岖性和中性^[7].后来,中性网络^[8]和局部最优网络^[9]也被用来研究中性.此外,学者还提出了可演进性^[10]和上位性^[11]等概念.当前,适应度地形的探索和应用不断深入,但该领域的研究仍待完善,尚无普适的分析方法,根据问题建立合适的描述体系仍是主要研究方向^[12].

此外,已有概念多从特定角度描述适应度地形,缺乏综合反映优化特征的手段,无法直观地刻画地形全貌.它们多引入额外计算求解描述参数,难以利用优化采样获得的适应度地形信息.其实,优化算法在搜索过程中积累了大量的适应度地形信息,若将其有效利用,就可能从这些信息提炼优化问题的特征,进而指导后续优化,并克服已有方法的上述缺陷.

2 研究思路

以最小化为例,寻优点通常向 $f(\mathbf{x})$ 值更小处收敛,故这些适应度优势区域被采样的概率更大.如此大量采样后,就能用采样点的概率分布直观全面地反映适应度地形,在输出优化结果的同时,用密集的采样点分布指示适应度地形的优势区域.如图1所示,用和 $f(x)$ 负相关的标准高斯分布采样10 000次后, $f(x)$ 值越小处对应的采样点越密集,即大量采样点的分布和 $f(x)$ 的适

度地形负相关.

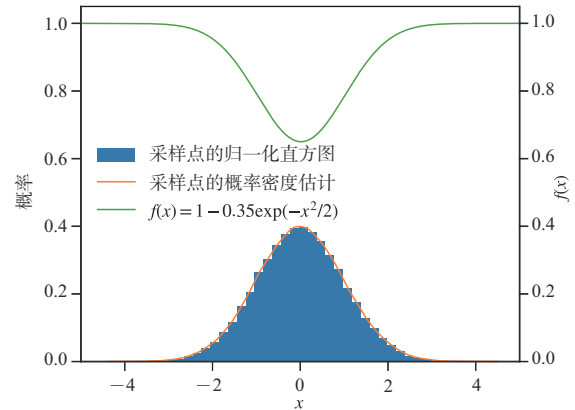


图1 大量随机采样点的分布和 $f(x)$ 的适应度地形负相关

类似地,势能场 $V(\mathbf{x})$ 中的单粒子向基态演化时,其波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 倾向于向 $V(\mathbf{x})$ 值更小处收敛,可对应地研究适应度地形.隧穿效应^[13]指出,粒子能穿过比它能量高的势垒.因此,用 $f(\mathbf{x})$ 编码 $V(\mathbf{x})$,使粒子充分隧穿势垒、遍历各极小值区域并演化至基态后,可用基态波函数 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 反映 $f(\mathbf{x})$ 的全局适应度地形.

用无量纲单位并由扩散蒙特卡罗(diffusion Monte Carlo, DMC)求解一簇 $\varphi_0(\mathbf{x})$ ^[14,15],如图2蓝色、黄色和黑色虚线所示.随着系统量子效应因粒子质量的增加不断减弱, $\varphi_0(\mathbf{x})$ 向 $V(\mathbf{x})$ 最小值汇聚的程度越来越高,故可不断削弱量子效应并用对应的 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 更细致地刻画 $f(\mathbf{x})$ 最小值的邻域地形.模拟绝热(adiabatic常译作“绝热”,但用“浸渐”更准确^[16])量子计算或量子退火^[17-19],足够缓慢地减弱量子效应使系统从初始基态演化至终态,由量子绝热定理^[20]知经过的状态均为基态.根据量子理论用启发式优化的计算模式求解一组量子效应递减的多基态演化后,即可由 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 和 $V(\mathbf{x})$ 的负相关性,用一簇收敛的 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 从全局到局部、综合直观地反映适应度地形.

3 多基态演化及其基态波函数求解

量子力学指出,微观粒子可用波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 完备地描述,而 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 可由Schrödinger方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

求解,这里 i 、 \hbar 和 m 分别为虚数单位、狄拉克常数和粒子质量.考虑一维无限深势阱 $V(x)$ 以简化讨论,则式(1)的通解为

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (2)$$

其中, $\varphi_n(x)$ 是描述系统本征态的本征函数,对应一组分离的本征能量 E_n ,一般从低到高地排列 E_n 使 $E_0 < E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$.

基态能量 E_0 是系统的最低能量, 向基态 $\varphi_0(x)$ 演化就是重塑 $\psi(x, t)$ 并最小化能量的过程. 此基态下 $\varphi_0(x)$ 非负且在 x 处发现粒子的概率与 $|\varphi_0(x)|^2$ 成正比, 故 $\varphi_0(x)$ 定性地指示了粒子的分布概率. 为最小化势能, $\varphi_0(x)$ 倾向于在 $V(x)$ 较小处取更大的值, 即 $\varphi_0(x)$ 和 $V(x)$ 有负相关趋势, 如图 2 绿色虚线所示, $\varphi_0(x)$ 分别在 $V(x)$ 的全局最小值/局部极大值/局部极小值附近取全局最大值/局部极小值/局部极大值. 不断增大粒子质量 m 以模拟量子效应递减的基态演化, 蓝色、黄色和黑色虚线对应的 $\varphi_0(x)$ 向 $V(x)$ 全局最小处持续隧穿和收敛, 不同点之间的 $V(x)$ 差值也被更大的 $\varphi_0(x)$ 差值反映. 演化中, $\varphi_0(x)$ 先从全局视角反映 $V(x)$ 的适应度地形, 再逐步向最小值区域收敛, 将刻画的重点逐步收缩到全局最小值的邻域. 终止时的量子效应越弱, $\varphi_0(x)$ 对全局最小值的逼近就越准确.

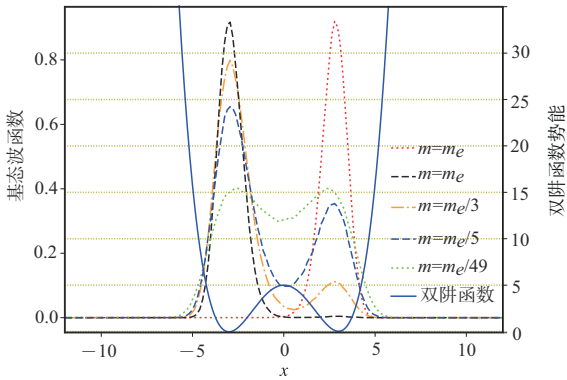


图 2 模拟中虚拟粒子的 $\varphi_0(x)$ 和势能场 $V(x)$ 负相关^[21]

但若初始时刻量子效应太弱且 $\psi(x, t)$ 分布于局部极小值附近, 如图 2 红色虚线所示, 粒子将难以隧穿势垒, $\varphi_0(x)$ 被完全限制在 $V(x)$ 的局部极小值附近并进入“局部”基态, “局部” $\varphi_0(x)$ 错误地反映了 $V(x)$ 的全局地形并把局部极小值当作全局最小值. 故应从强量子效应开始, 缓慢削弱量子效应进行量子绝热演化, 用一组量子效应递减的“全局” $\varphi_0(x)$ 反映 $V(x)$.

这和绝热量子计算机^[22,23]的原理类似, 都用目标函数 $f(x)$ 编码约束势场 $V(x)$, 故

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + f(x) \right] \psi(x, t) \quad (3)$$

这样, 适应度地形的探索问题就转化成了一个量子问题, 后续需参照启发式优化的计算模式采样求解一簇量子效应递减的全局 $\varphi_0(x)$.

式(3)是含时复微分方程, 作 Wick 转动 $\tau \rightarrow it$ 将其简化为虚时间 Schrödinger 方程^[14,24]:

$$\hbar \frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - f(x) \right] \psi(x, \tau) \quad (4)$$

直接用优化采样的模式求解式(4)很难, 故由量子

路径积分^[14,25]将其解写作方便数值模拟的积分形式 $\psi(x, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, \tau|x_0, 0) \psi(x_0, 0) dx_0$, 其中 $K(x, \tau|x_0, 0)$ 为反映概率波幅传播的虚时间传播子, $\psi(x_0, 0)$ 为初态波函数. 将从 0 到 τ 的时间段均分为 N 个 $\Delta\tau$ 微元并设 $x_N = x$, 由传播子定义及其组合规则^[13,14]:

$$K(x, \tau|x_0, 0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau} \right)^{N/2} \exp \left\{ -\frac{\Delta\tau}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\Delta\tau^2} (x_j - x_{j-1})^2 + f(x_j) \right] \right\} \quad (5)$$

$$\text{设 } P(x_n, x_{n-1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{m}{\hbar\Delta\tau}} \exp \left[-\frac{(x_n - x_{n-1})^2}{2} \frac{m}{\hbar\Delta\tau} \right],$$

由传播子定义及其组合规则^[13,14]:

$$W(x_n) = \exp \left[-f(x_n) \Delta\tau / \hbar \right], \quad \psi(x, \tau) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^N P(x_n, x_{n-1}) W(x_n) \psi(x_0, 0) \left(\prod_{j=0}^{N-1} dx_j \right) \quad (6)$$

此处扩散项 $P(x_n, x_{n-1})$ 由动能决定, 反映了路径积分中作用量的传播, 类似扩散方程中的格林函数. $P(x_n, x_{n-1})$ 是随机、非负和归一化的, 满足从 x_{n-1} 到 x_n 的高斯分布, 标准差为

$$\sigma = \sqrt{\hbar\Delta\tau/m} \quad (7)$$

且量子效应越强, σ 越大. 权重项 $W(x_n)$ 与势场 $f(x)$ 相关, 反映了 $f(x)$ 对 $\psi(x, \tau)$ 的塑造作用. 上述分析暗示演化可用大量并行的加权高斯采样 (即 DMC) 模拟^[14,24,26], 该方法符合启发式优化的计算模式且效率较高^[24,26], 故用 DMC 模拟求解.

数学上式(4)与扩散反应方程同构. 先研究高斯采样对应的扩散项^[14], 考虑一维离散时间单游离子扩散, 设每隔时间 h 测一次游离子位置, 左右扩散时每 h 时间移动距离 a . 若游离子向左右随机扩散的概率均为 α , 则其停在原处的概率为 $1 - 2\alpha$. 设 $\tau = 0$ 时游离子从原点出发, 则 $\tau = lh$ ($l \in \mathbf{Z}_+$) 时状态空间为 $\{x = 0, x = \pm a, \dots, x = \pm la\}$, 且状态间的转移概率确定. 这是一个马尔科夫链, 游离子在 $\tau + h$ 时刻的概率分布 $\rho(x, \tau + h)$ 由 $\rho(x, \tau)$ 、三种移动方式及其概率确定, 满足 $\rho(x, \tau + h) = \alpha\rho(x + a, \tau) + (1 - 2\alpha)\rho(x, \tau) + \alpha\rho(x - a, \tau)$, 整理得演化方程^[26]:

$$\rho(x, \tau + h) - \rho(x, \tau) = \alpha[\rho(x + a, \tau) - 2\rho(x, \tau) + \rho(x - a, \tau)] \quad (8)$$

取极限 $h \rightarrow 0$, 左侧为 $\lim_{h \rightarrow 0} [\rho(x, \tau + h) - \rho(x, \tau)] = \lim_{h \rightarrow 0} h[\rho(x, \tau + h) - \rho(x, \tau)]/h = h\partial\rho(x, \tau)/\partial\tau$, 右侧为

$$\lim_{h \rightarrow 0} \alpha[\rho(x + a, \tau) - 2\rho(x, \tau) + \rho(x - a, \tau)] = a^2 \alpha \frac{\partial^2 \rho(x, \tau)}{\partial x^2}, \quad \text{设}$$

$D = a^2 \alpha / h$, 得式(8)的微分形式:

$$\frac{\partial \rho(x, \tau)}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 \rho(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (9)$$

这就是扩散方程, 它也适用于高维和多游离子扩散^[26].

式(9)作为反应项 $f(x) \equiv 0$ 的扩散反应方程,用加权游走子群模拟时,由 $W(x_n)$ 定义知,游走子权重 $w_i(x) \equiv 1$ 且总数不变,游走子充分扩散后将均匀分布于给定空间.

要揭示 $f(x) \neq 0$ 时的地形,须考虑 $f(x)$ 影响的权重项 $W(x_n)$.但加入不恒为0的 $f(x)$ 并大量采样后,按 $W(x_n)$ 定义求得的权重和往往大/小于当前游走子数,DMC中权重大小取整后即游走子数,故不断增加/减少的权重和将持续增加/减少游走子数并使模拟失稳.因此在式(4)的反应项中加入试探能量或参考能量 E_T :

$$\hbar \frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [E_T - f(x)] \right\} \psi(x, \tau) \quad (10)$$

结合游走子数 $N(\tau)$ 用负反馈动态调整 $E_T(\tau)$ ^[14],可得稳定的游走子数量和分布,对应的 $E_T(\tau)$ 也将趋于稳定.记第 τ 轮迭代的采样点均值为 $E_m(\tau)$,一种典型的反馈控制律为

$$E_T(\tau) = E_m(\tau) + k_s [1 - N(\tau)/N_0] \quad (11)$$

其中, k_s 是和系统有关的正数; N_0 是期望游走子数.由 $W(x_n)$ 定义得 τ 时刻 x_i 处的权重:

$$w_i(x_i, \tau) = \exp\{[E_T(\tau) - f(x_i)] \Delta \tau / \hbar\} \quad (12)$$

对应地,式(2)变为

$$\psi(x, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x) \exp\{[E_T(\tau) - E_n] \tau / \hbar\} \quad (13)$$

在式(13)中,仅当 $E_T(\tau) \approx E_0$ 时 $\psi(x, \tau)$ 随 τ 的增加收敛到非零稳态 $c_0 \phi_0(x)$ ^[14,24],即 $\psi(x_0, 0)$ 可经一系列带权重、种群数动态调节的大规模并行高斯采样收敛到 $c_0 \phi_0(x)$, $c_0 \phi_0(x)$ 和 $\phi_0(x)$ 描述相同系统,故后文不做区分.再递减 σ 模拟递减的量子效应可得待求的 $\phi_0(x)$ 簇.

4 基于多尺度DMC的适应度地形探索算法

综上可得算法1.在输入部分,先按优化中常用的均匀分布初始化 N_0 个游走子,也可向适应度优势区域初始化更多游走子以加快收敛,如用 δ 分布(对应量子力学中的 δ 函数)将游走子都初始化为可能的最优位置.初始尺度参考 $\sigma/3\sigma$ 准则设置,在各维上可取优化区间的一半以保证隧穿强度.尺度递减律 $\sigma = s(\tau)$ 类似量子退火的退火曲线^[18],由 $f(x)$ 和地形探索需求决定.对简单的低维 $f(x)$ 可取 $N_0 = 500$ 且各稳态后尺度减半,若 $f(x)$ 复杂或探测精度要求高则应增大 N_0 并减慢递减速率.用 $\phi_0(x)$ 的稳定程度作稳态判据不方便,可用 $E_T(\tau)$ 的波动幅度取代.反馈控制律合理时 $E_T(\tau)$ 多在几十次迭代后稳定,故也可结合迭代次数粗略地认为100次后进入稳态.结束判据可由 $f(x)$ 的最大计算次数指定,也可结合 N_0 和最大

计算次数将其转换为最大迭代次数,还可由探索精度指定终止尺度并在达到该尺度的稳态后结束.

算法1 模拟绝热量子计算的 d 维适应度地形探索算法

输入:初始可行解 $x_1(0), \dots, x_{N_0}(0)$,初始尺度 $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_d)$,尺度递减律,稳态判据,结束判据

输出:各稳态的 $\phi_0(x)$

1. WHILE 结束判据(最大适应度计算次数/最大迭代次数/达到指定尺度下的 $\phi_0(x)$ 稳态)不满足
2. WHILE 当前状态不满足最新 σ 的稳态判据
3. 对每个游走子 $x_i(\tau)$ 的每个分量 $x_{ij}(\tau)$,由高斯采样 $N(x_{ij}(\tau), \sigma_j^2)$ 得 $x_{ij}(\tau+1)$
4. 求全体 $x_i(\tau+1)$ 的适应度均值 $E_m(\tau+1)$ 并由(11)得 $E_T(\tau+1)$
5. 由式(12)求各 $x_i(\tau+1)$ 的权重 $w_i(x_i, \tau+1)$
6. FOR 每个游走子 $x_i(\tau+1)$
7. IF 随机数 $u_i(\tau+1) \sim U(0, 1) > \{w_i(x_i, \tau+1)\}$ THEN $w_i(x_i, \tau+1) = [w_i(x_i, \tau+1)]$
8. ELSE $w_i(x_i, \tau+1) = [w_i(x_i, \tau+1)] + 1$
9. ENDFOR
10. IF $w_i(x_i, \tau+1) = 0$ THEN 删除 $x_i(\tau+1)$
11. ELSE 保留 $x_i(\tau+1)$ 并在 $x_i(\tau+1)$ 处复制 $\min(w_i(x_i, \tau+1) - 1, L)$ 个新游走子
12. ENDFOR
13. ENDFOR
14. 若有必要更新游走子的分布估计
15. ENDWHILE
16. 重复第3~14步,用多轮稳态结果作为当前尺度的输出后,再由尺度递减律 $\sigma = s(\tau)$ 缩减 σ
17. ENDWHILE

算法1的第3行用并行高斯采样模拟 $P(x_n, x_{n-1})$ 驱动的扩散过程以实现随机游走.为获得与 $f(x)$ 负相关的 $\phi_0(x)$,应削减/保持/增加具有大/中等/小 $f(x)$ 值的游走子以重塑分布向 $\phi_0(x)$ 收敛,故6~13行的生灭过程根据 w_i 值删除/保留/复制具有小/中等/大权重的游走子.反复扩散生灭并结合(11)动态调节 $N(\tau)$, $\psi(x, \tau)$ 和 $E_T(\tau)$ 将进入小幅波动的稳态,满足稳态判据后由(13)将此 $\psi(x, \tau)$ 视为 $\phi_0(x)$.为更好地反映地形细节,16行减小尺度 σ 模拟更弱的量子效应,重复求解得期望的 $\phi_0(x)$ 簇.

算法1类似绝热量子计算算法,很难精确预测该类随机算法的性能^[19].复杂度方面,设算法经 T 个尺度终止,第 i 个尺度迭代 I_i 次且全部迭代的 $N(\tau)$ 均值为 N_0 .对 d 维 $f(x)$,每次迭代中一维采样的时间频度最高,均值为 $T(dN_0)$,对算法有 $T((I_1 + \dots + I_T)dN_0)$,故理想情况下复杂度为 $O(d)$.算法收敛性受各尺度下的基态收敛性和 $\sigma = s(\tau)$ 影响.前者可由(13)讨论,当 $E_T(\tau) < E_1$ 时所有 $\phi_i(x)(i \geq 1)$ 随时间指数衰减且 $\phi_1(x)$ 衰减最慢,故 $E_0 < E_T(\tau) < E_1$ 时, $E_1 - E_T(\tau)$ 越大收敛越快.量子退火要求退火曲线^[18]缓减以保持基态,容许的最大速率与经历各态中的最小 $E_1 - E_0$ 值有关^[27],但算

法 1 可用更快的尺度递减律加快收敛,因为演化中相近尺度的 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 提供的地形信息相似,且 DMC 保证了模拟的稳态都是基态. 为增加算法的数值稳定性,可将多轮稳态数据用作输出,并限制最大复制个数 L (多取 $3 \leq L \leq 5$) 以防止适应度值占优的少量游走子在生灭时因 N_0 较小而抢占过大的比重并引起异常波动.

5 实验

因本算法的输出分布和适应度地形直接负相关且缺乏和算法 1 可比性强的综合性分析方法^[12],故直接用算法 1 的输出分布验证其有效性.

5.1 对称的一维连续函数

考虑定义在 $[-8, 8]$ 上的一维连续函数 Rastrigin

$$f(x) = x^2 - 10\cos(\pi x) + 10 \quad (14)$$

取 $\psi(x_0, 0) = \delta(x - 1), N_0 = 800$, 迭代 100 次得 $\varphi_0(x)$, 如图 3 蓝色虚线所示, $\varphi_0(x)$ 和 $f(x)$ 的全局适应度地形负相关, $\varphi_0(x)$ 的 5 个极大值分别对应 $f(x)$ 的 5 个局部极小值, 这反映了地形的崎岖性; $f(x)$ 值越小的极小值对应的 $\varphi_0(x)$ 值越大; $\varphi_0(x)$ 关于 $x = 0$ 对称, 刻画了 $f(x)$ 的对称性. 此外 $f(x)$ 的分段单调性也和 $\varphi_0(x)$ 契合.

减小 σ 再迭代 100 次, 新 $\varphi_0(x)$ 继续向全局最小值收敛, 模拟了 $\varphi_0(x)$ 通过隧穿向末态演化的绝热量子计算的始末状态, 新 $\varphi_0(x)$ 用极大值及其位置进一步指明了 $f(x)$ 极小值的相对大小和位置. 迭代 4 个尺度后, $\varphi_0(x)$ 完全收敛到全局最小值附近. 以上信息能从多方面指导后续优化, 如 $f(x)$ 是多模函数, 应选擅长多模优化的算法和参数; $f(x)$ 在 $x = \pm 4 \pm 2/0$ 附近有局部极小值, 初始化时应重点考虑, 尤应注意 $x = 0$ 处, 因为全局最小值可能在附近.

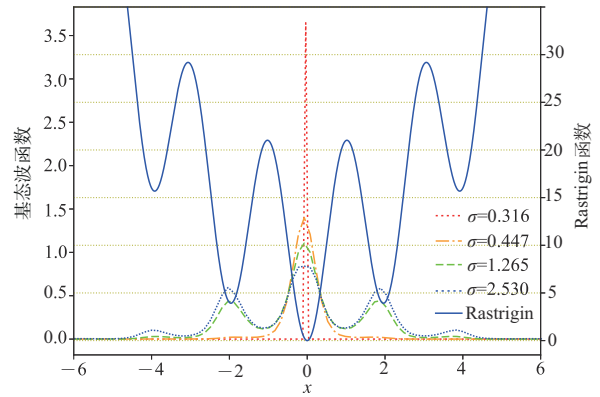
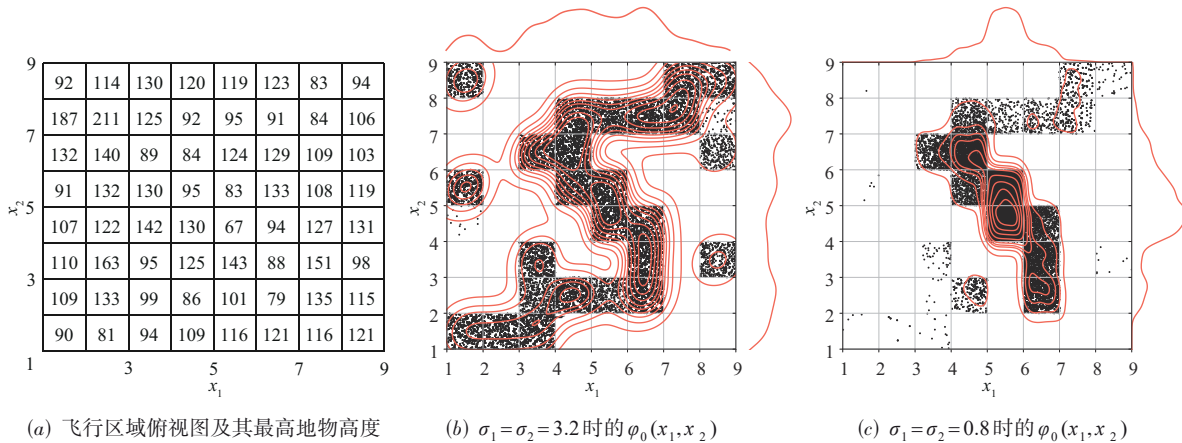


图 3 收敛的 $\varphi_0(x)$ 簇以不同尺度反映了适应度地形

5.2 适应度离散的二维函数

多旋翼无人机能垂直起降和悬停, 已在物流领域显示出巨大的潜力. 它擅长水平飞行, 但其垂直机动缓慢且能耗较大, 故一种航线设计策略是从起点垂直爬到合理高度并水平飞往终点上空后再垂直降落, 以最小化高能耗的垂直机动并将其限制在起降点附近以提高安全性. 飞行街区如图 4(a) 所示, $1 \leq x_1, x_2 \leq 9$ 内各网格最高地物的高度函数为 $h_i = f(x_1, x_2)$, 现需按前述要求设计连接点 (1, 1) 和点 (9, 9) 的航线.

设初始 $\sigma_i = 6.4, N_0 = 350$ 且最大迭代次数为 1 000, σ_i 每迭代 250 次减半且叠加各尺度后 50 次迭代的 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 作为输出. 图 4(b) 和 4(c) 的稳态分布中每个点代表一个游走子, 其分布密度由等高线和边缘的核密度估计描述. 图 4(b) 中, $\sigma_i = 3.2$ 时 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 反映了地形高度, 分布在低处更密集, 构成了一个连通始末点的区域并指示了最优水平航线. 图 4(c) 中 $\sigma_i = 0.8$ 时的分布继续向低处收敛且在航线下 $5 < x_1 < 6, 2 < x_2 < 3$ 处最稀疏, 说明该处有航线下的最高地物, 查询即得航线最低高度.



(a) 飞行区域俯视图及其最高地物高度 (b) $\sigma_1 = \sigma_2 = 3.2$ 时的 $\varphi_0(x_1, x_2)$ (c) $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.8$ 时的 $\varphi_0(x_1, x_2)$

图 4 以最高地物高度 $h_i = f(x_1, x_2)$ 为目标函数, 用算法 1 确定水平航线(b)和航线最低高度(c)

5.3 10 维连续函数

对 $-15 \leq x_1, x_2, \dots, x_{10} \leq 15$ 内的 10 维双阱函数

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{10} f_i(x_i) = \sum_{i=1}^{10} \frac{22.5(x_i^2 - 8)^2}{8^4} + 0.075x_i \quad (15)$$

设初始 $\sigma_i = 3.0$, $N_0 = 500$. 经三个 σ_i 各迭代 400 次, 并用各 σ_i 迭代的后 300 次 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 叠加刻画 $f(\mathbf{x})$ 地形.

$\sigma_i = 3.0$ 时, 图 5(a) 中 $\varphi_0(\mathbf{x})$ 用强量子效应反映了 $f(\mathbf{x})$ 的全局适应度地形: $\varphi_0(\mathbf{x})$ 和 $f(\mathbf{x})$ 负相关, 各维度的分布估计一致, 均在 $x_i = -8/0/8$ 附近取全局最大值/局部极小值/局部极大值. 这表明 $f(\mathbf{x})$ 的适应度地形崎岖且有大量局部极小值, 应选擅长多模优化的算法和参数. 初始化种群

时应考虑 $x_i = -8/8$ 处并设置合适的搜索尺度以强化这些位置的搜索. $\varphi_0(\mathbf{x})$ 还描述了 $f_i(x_i)$ 间的对称性. $\sigma = 2.0$ 时, 图 5(b) 中游走子继续一致地向 $x_i = -8$ 附近收敛, 仅第六维偏差较大. $\sigma = 1.0$ 时, 图 5(c) 中分布再次高度一致, 说明算法能修正扰动, 此外各维分布都集中于 $x_i = -8$ 附近, 以更高的精度反映了全局最小值的邻域.

这三个特性各异的目标函数从多角度表明算法能直观综合地反映适应度地形, 输出分布的优势区域指示了局部极值的位置, 可直接指导优化并输出获得的历史最优解. 利用尺度递减策略, 算法的输出分布逐步从全局收敛到潜在局部最优解的邻域, 以逐步细化的分辨率扫描最优区域.

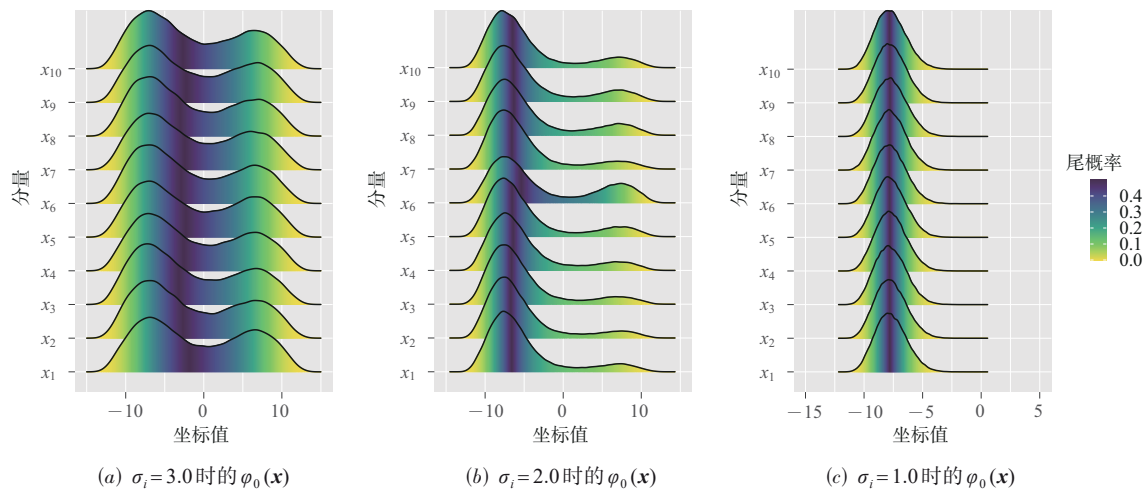


图 5 不同 σ_i 时 10 维双阱函数的 $\varphi_0(\mathbf{x})$

6 结论

受粒子基态演化和绝热量子计算的启发, 本文提出了一种适应度地形探索算法. 它将目标函数视为约束势场, 模拟了量子效应递减的多基态演化中基态波函数收敛到势能较低区域的量子行为. 该算法能为启发式优化算法及其参数选择提供先验信息, 并为适应度地形研究提供了新的思路.

参考文献

- [1] WOLPERT D H, MACREARY W G. No free lunch theorems for optimization[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 1997, 1(1): 67-82.
- [2] 李亚欣, 梁静, 岳彩通, 等. 基于适应度地形分析的进化计算研究综述[J]. 陕西师范大学学报(自然科学版), 2021, 49(5): 39-53.
- LI Y X, LIANG J, YUE C T, et al. A survey of evolutionary computing based on fitness landscape analysis[J]. Journal of Shaanxi Normal University (Natural Science Edition), 2021, 49(5): 39-53. (in Chinese)
- [3] WRIGHT S. The roles of mutation, inbreeding, crossbreeding, and selection in evolution[C]//Proceedings of the 6th International Congress on Genetics. Menasha: George Banta Publishing Company, 1932: 356-366.
- [4] KAUFFMAN S, LEVIN S. Towards a general theory of adaptive walks on rugged landscapes[J]. Journal of Theoretical Biology, 1987, 128(1): 11-45.
- [5] WEINBERGER E. Correlated and uncorrelated fitness landscapes and how to tell the difference[J]. Biological Cybernetics, 1990, 63(5): 325-336.
- [6] JONES T, FORREST S. Fitness distance correlation as a measure of problem difficulty for genetic algorithms[C]//Proceedings of the 6th International Conference on Genetic Algorithms. New York: ACM Press, 1995: 184-192.
- [7] VASSILEV V K, FOGARTY T C, MILLER J F. Smoothness, ruggedness and neutrality of fitness landscapes: From theory to application[M]//Advances in Evolutionary Computing, Natural Computing Series. Berlin: Springer, 2003: 3-44.
- [8] HARVEY I, THOMPSON A. Through the labyrinth evolu-

- tion finds a way: A silicon ridge[C]//Proceedings of the 1st International Conference on Evolvable Systems: From Biology to Hardware. Berlin: Springer, 1997: 406-422.
- [9] VEREL S, OCHOA G, TOMASSINI M. Local optima networks of NK landscapes with neutrality[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2011, 15(6): 783-797.
- [10] ALTENBERG L. The evolution of evolvability in genetic programming[M]//Advances in Genetic Programming. Cambridge: MIT Press, 1994: 47-74.
- [11] DAVIDOR Y. Epistasis variance: A viewpoint on GA-hardness[M]//Foundations of Genetic Algorithms. Amsterdam: Elsevier, 1991: 23-35.
- [12] 路辉, 周容容, 石津华, 等. 智能优化技术: 适应度地形理论及组合优化问题的应用[M]. 北京: 机械工业出版社, 2021.
- [13] 曾谨言. 量子力学[M]. 第5版. 北京: 科学出版社, 2014.
- [14] KOSZTIN I, FABER B, SCHULTEN K. Introduction to the diffusion Monte Carlo method[J]. American Journal of Physics, 1996, 64(5): 633-644.
- [15] ROTHSTEIN S M, OSPADOV E, BRUZZESE C. Introduction to fixed-node quantum Monte Carlo[M]//Mathematical Physics in Theoretical Chemistry. Amsterdam: Elsevier, 2019: 189-217.
- [16] 赵凯华. Adiabatic 的含义是怎样从“绝热”变成“无限缓慢(寢渐)”的?[J]. 物理, 2010, 39(1): 56-57.
- [17] FINNILA A B, GOMEZ M A, SEBENIK C, et al. Quantum annealing: A new method for minimizing multidimensional functions[J]. Chemical Physics Letters, 1994, 219(5): 343-348.
- [18] KADOWAKI T, NISHIMORI H. Quantum annealing in the transverse Ising model[J]. Physical Review E, 1998, 58(5): 5355-5363.
- [19] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S, et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem[J]. Science, 2001, 292(5516): 472-475.
- [20] GRIFFITHS D J, SCHROETER D F. Introduction to Quantum Mechanics[M]. 3rd edition. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.
- [21] YANG G S, WANG P, XIN G, et al. A quantum simulation method with repeatable steady-state output using massive inferior solutions[C]//Proceedings of the 19th International Conference on Intelligent Computing: Advanced Intelligent Computing Technology and Applications. Singapore: Springer Nature Singapore, 2023: 674-684.
- [22] JOHNSON M W, AMIN M H S, GILDERT S, et al. Quantum annealing with manufactured spins[J]. Nature, 2011, 473: 194-198.
- [23] MCMAHON P L, MARANDI A, HARIBARA Y, et al. A fully programmable 100-spin coherent Ising machine with all-to-all connections[J]. Science, 2016, 354(6312): 614-617.
- [24] CEPERLEY D, ALDER B. Quantum Monte Carlo[J]. Science, 1986, 231(4738): 555-560.
- [25] FEYNMAN R P, HIBBS A R, STYER D F. Quantum Mechanics and Path Integrals[M]. Emended edition. New York: Dover Publications, 2010.
- [26] THIJSEN J. Computational Physics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- [27] 张映玉, 付樟华. 绝热量子优化算法研究进展[J]. 计算机工程与科学, 2015, 37(3): 429-433.
ZHANG Y Y, FU Z H. Survey of adiabatic quantum optimization algorithms[J]. Computer Engineering and Science, 2015, 37(3): 429-433. (in Chinese)

作者简介



杨国松 男, 1989年10月生于四川广元. 中国科学院大学博士生、西南民族大学实验师. 研究方向为量子优化算法和导航制导与控制.
E-mail: yangguosong19@mails.ucas.ac.cn



王鹏 男, 1975年8月生于四川乐山. 西南民族大学教授、中国科学院大学博士生导师. 研究方向为智能优化算法和并行计算.
E-mail: pengwang@swun.edu.cn



尹鑫钰 女, 1998年8月生于山东威海. 西南民族大学本科生. 研究方向为大数据和量子优化算法.
E-mail: yinxinyu2073@163.com