量子克隆遗传算法*)

李阳阳　焦李成
(西安电子科技大学智能信息处理研究所　西安 710071)

摘　要　遗传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着收敛速度慢、早熟等问题,使得其结果极不稳定。本文将遗传算法和量子理论相结合并利用免疫系统中所特有的克隆算子,针对0/1背包问题,提出了一种改进的进化算法——量子克隆遗传算法(QCA)。它能有效地避免早熟,且具有收敛速度快的特点。

关键词　遗传算法,量子克隆遗传算法,0/1背包

Quantum Clonal Genetic Algorithms

LI Yang-Yang　JIAO Li-Cheng
(School of Electronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071)

Abstract　Genetic algorithm is an effective algorithm in solving the optimizing problem, but it has some disadvantages in the application, such as slow converging speed and prematurity. In this paper, an improved evolutionary algorithm, cal ed the quantum clonal genetic algorithms (QCA), is proposed based on the combining of quantum theory with genetic theory and with the main mechanisms of clone. QCA can availably solve 0/1 knapsack problem and it has better diversity and the converging speed than the classical genetic algorithms.

Keywords　Genetic algorithm, Quantum conal genetic algorithm, 0/1 knapsack

1　引言

进化计算是一种仿生计算。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。我们所熟悉的遗传算法(Genetic Algorithms)[1],它通过模拟达尔文的"优胜劣汰,适者生存"的原理鼓励好的个体,通过模拟孟德尔的遗传变异理论在进化过程中保持好的个体,同时寻找更好的个体,由此来模仿一切生命与智能的产生与进化过程[2,3]。理论上已经证明:进化算法能从概率的意义上以随机的方式寻求到问题的最优解;但在实际应用当中,随着问题的复杂和海量的数据量,也出现了一些不尽人意的情况,主要表现在:计算后期解的多样性差,极易造成早熟、收敛速度慢等缺点。为克服上述缺点,关键是构造性能良好的进化算法。

量子力学是20世纪物理学最惊心动魄的发现之一,量子计算是物理理论与计算机的成功结合。在量子体系中,一位的信息位不再是经典的1比特,而是由两个本征态的任意叠加态所构成,即称之为量子比特位(qubit)。例如一个 n 位二进制的串在量子体系中就可同时表示 2^n 个信息,而量子计算机对每个叠加分量(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,给出量子计算的结果,这种计算称之为量子并行计算[4]。正是量子的并行性使得原来传统计算机无法解决的复杂问题以惊人的速度得以解决。但在量子计算机尚未构成的情况下,为了充分利用量子计算的高效并行性,本文借用了量子计算中的量子编码,继承了免疫克隆策略[5]中的克隆算子,将二者相结合,提出了量子克隆遗传算法,并将其应用于0/1背包问题上。与传统进化算法相比较,它具有收敛速度快、寻优能力强的特点。

2　基本概念

2.1　量子比特

我们知道,经典计算机的存储单元是比特,它只有两种状态:或者为0,或者为1。而量子计算机最基本的存储单元是量子比特(qubit),它是任何一个有二维 Hilbert 态空间的量子体系,它的态空间有两个基,记为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$[4]。与经典计算机中的比特不同的是,量子比特的态可以为任意叠加的态:$\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$,其中 α 和 β 为满足归一化条件 $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$ 的任意复数,且称之为概率幅,其平方表示在任何基态出现的概率。由此可得到:如果有 n 位的量子位,可同时表示 2^n 个状态(即 2^n 个信息),因而在对量子比特计算时,一次运算相当于对 2^n 个状态同时操作,这就是量子并行性的由来。所以,一个量子比特所包含的信息要比经典的比特多。

2.2　量子编码

遗传算法的常用编码方式有二进制、十进制和符号编码。在量子克隆遗传算法中,采用了一种特殊的编码方式——量子比特编码,即用一对复数来表示一个量子比特,这也正是此算法高效性的所在。一个具有 m 个量子比特位的系统(即为一个量子个体)可以描述为

$$\begin{pmatrix}\alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_m\\ \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_m\end{pmatrix} \tag{1}$$

*)本课题得到国家自然科学基金(60372045)、国家"九七三"重点基础研究发展规划项目基金(2001CB309403)和高等学校博士学科点专项科研基金(项目编号:20030701013)资助。**李阳阳**　博士研究生,研究方向为量子进化计算、人工免疫系统、数据挖掘、模式识别;**焦李成**　博士,教授,博士生导师,研究方向为进化计算、神经网络、子波理论、数据挖掘。

其中，如前所述，α_i 和 β_i 要满足归一化条件。这种表示方法可以表征任意的线性叠加态，例如一个具有如下三对概率幅的 3 量子比特系统：

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \tag{2}$$

则系统的状态可以表示为

$$\frac{1}{2\sqrt{2}}|000\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|001\rangle+\frac{1}{2\sqrt{2}}|100\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|101\rangle \tag{3}$$

上式表示状态$|000\rangle$，$|001\rangle$，$|100\rangle$，$|101\rangle$出现的概率分别是$\frac{1}{8}$，$\frac{3}{8}$，$\frac{1}{8}$，$\frac{3}{8}$。由此我们很清楚地看到一个 3 量子比特系统表示了四个状态叠加的信息，即它同时表示出四个状态的信息。

因此通过使用量子比特个体增加了算法的解的多样性。如在上例中，一个量子个体足以表示四个状态，而在传统进化算法中至少需要四个个体(000)，(001)，(100)，(101)来表示；同时此算法也具有好的收敛性，随着 α,β 趋于 1 或 0，量子比特个体收敛于一个状态，这时多样性消失，算法收敛。

2.3 克隆算子

如前所述，进化算法在解决优化问题时虽具有简单、通用、鲁棒性等特点，但在搜索后期由于其算法的盲目性和随机性，就会出现退化早熟现象。为了防止这类现象的发生，就是要增大优良个体的比例，减少坏个体的不良影响，即利用有用信息来指导进化。基于此，杜海峰等人提出了免疫克隆策略算法[5]，算法中主要提出了克隆算子，包括三个步骤：克隆、克隆变异和克隆选择。其抗体群的状态转移情况可以表示成如下的随机过程：

$$C_s: A(k)\xrightarrow{clone}A'(k)\xrightarrow{mutation}A''(k)\xrightarrow{selection}A(k+1)$$

值得说明的是：抗原、抗体、抗原和抗体之间的亲合度分别对应优化问题的目标函数和各种约束条件、优化解、解与目标函数的匹配程度。克隆算子就是依据抗体与抗原的亲合度函数 $f(*)$，将解空间中的一个点 $a_i(k)\in A(k)$分裂成了 q_i 个相同的点$a'_i(k)\in A''(k)$，经过克隆变异和克隆选择后获得新的抗体。其实质是在一代进化中，在候选解的附近，根据亲合度的大小，产生一个变异解的群体，从而扩大搜索范围。

很显然，在克隆算子中，为了保持解的多样性而扩大空间搜索范围，采取对父代进行克隆复制的策略，其解空间变大是以计算时间增长为代价的，由于采用量子编码具有量子并行运算的特点，因此，本文将二者相结合，提出了量子克隆遗传算法，即一种解决 0/1 背包问题行之有效的快速方法。

3 量子克隆遗传算法(QCA)

3.1 算法描述

本算法采用量子比特个体。由于量子个体携带了多个个体的信息，对量子个体进行进化操作，程序的额外开销少。下面给出算法的具体步骤：

①初始化进化代数：$t=0$；

②初始化种群 $Q(t)$：$\alpha_i^t=\frac{1}{\sqrt{2}}$；(初始时以等概率出现)

③克隆 $Q(t)$生成 $Q'(t)$；

④对 $Q'(t)$进行量子变异生成 $Q''(t)$；

⑤通过选择压缩 $Q''(t)$生成 $Q(t+1)$；

⑥评价种群 $Q(t+1)$的亲合度，保存最优解；

⑦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；

⑧$t=t+1$，转到③。

值得指出的是，本算法中克隆采取的是按一定比例复制，克隆选择是在克隆群体中选择亲合度最好的保留下来，并且要保证经选择后群体规模与克隆前一样。在本算法中，对于 0/1 背包问题亲合度采用目标函数值来度量。计算种群 Q 的亲合度采取如下方法：其中 $Q(t)$为量子个体种群，设 $P(t)$为二进制个体种群，在第 t 代中 $P(t)=\{x_1^t,x_2^t,\cdots,x_n^t\}$，每个二进制解 $x_j^t(j=1,2,\cdots,n)$是长度为 m 的二进制串，它是以$|\alpha_i^t|$或$|\beta_i|^2(i=1,2,\cdots,m)$为概率选择得到的。具体操作如下：随机产生一个$[0,1]$数，若它大于$|\alpha_i^t|^2$，取值 1，否则取值 0。很显然，采用量子比特个体，使得一个 m 位的二进制串(个体)在没通过观察之前，携带了 2^m 个个体的信息，这既保持了群体的多样性，又加快了收敛速度(量子的并行性)。

3.2 量子变异

在本文中另一值得指出的是变异策略，更新的方法有三种：①传统意义上的交叉、变异操作；②随机产生概率幅值；③根据量子的叠加特性和量子跃迁的理论，运用一些合适的量子门[5]变换来产生新的 $Q(t)$。这里我们使用一种特殊的方式——量子旋转门，定义如下：

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

表示量子旋转门，旋转变异的角度 θ 可由表 1 得到。

表 1 变异角 θ(二值编码)

x_i	$best_i$	$f(x)\leqslant f(best)$	$\Delta\theta_i$	$s(\alpha_i\beta_i)$			
				$\alpha_i\beta_i>0$	$\alpha_i\beta_i<0$	$\alpha_i=0$	$\beta_i=0$
0	0	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	0.015π	-1	$+1$	±1	0
1	0	假	0.015π	-1	$+1$	±1	0
1	0	真	0.015π	$+1$	-1	0	±1
1	1	假	0.015π	$+1$	-1	0	±1
1	1	真	0.015π	$+1$	-1	0	±1

其中 x_i 为当前个体的第 i 位；$best_i$ 为当前的最优个体的第 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。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个体呢？下面我们画一个直观的图(图 1)来说明旋转量子门的构造。

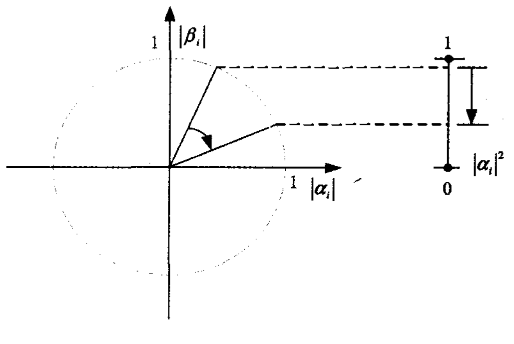


图 1 旋转量子门示意图

如当 $x_i=0, best_i=1, f(x)\geqslant f(best)$ 时，为使当前解收敛到一个具有更高适应度的个体，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。上面所述的旋转变换仅是量子变换中的一种，我们针对不同的问题可以采用不同的量子变换，也可以根据需要设计自己的幺正变换（所有量子门都要是幺正变换的）[4]。对于非二进制编码问题，则要构造不同的观察方式，而变异角度的产生与此相类似，这里不再详细讨论。

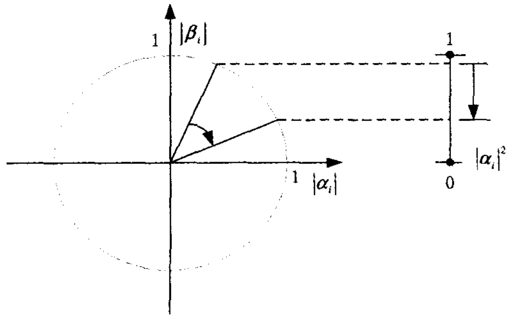


图 1　旋转量子门示意图

4　仿真实验

背包问题[2]是一个典型的组合优化问题，描述如下：假设有价值 $c_i>0$ 与重量 $W_i>0(i=1,2,\cdots,n)$，已知的 N 件物品和一个最大容量为 $V>0$ 的背包，如何选择哪些物品装入该背包可在背包的容量约束限制之内装入的物品总价值最大？

在下面的试验中，试验一我们设 $V=1000, N=50$，N 件物品的价值 C 与重量 W 为：

C=[220 208 198 192 180 180 165 162 160 158 155 130 125 122 120 118 115 110 105 101 100 100 98 96 95 90 88 82 80 77 75 73 72 70 69 66 65 63 60 58 56 50 30 20 15 10 8 5 3 1]

W=[80 82 85 70 72 70 66 50 55 25 50 55 40 48 50 32 22 60 30 32 40 38 35 32 25 28 30 22 50 30 45 30 60 50 20 65 20 25 30 10 20 25 15 10 10 10 4 4 2 1]

试验二参见文[2]第三章例 3.2，$V=6666, N=100$。使用本文算法和混合遗传算法(HGA)及贪心算法相比较。在混合遗传算法中，假设种群大小为 100，最大终止代数为 500，变异和交叉概率分别为 0.0088、0.88，本算法采用量子旋转门变异种群大小为 10，其他参数相同。我们采用上述参数独立进行 20 次试验，表 2 和表 3 给出使用不同进化算法的统计结果。

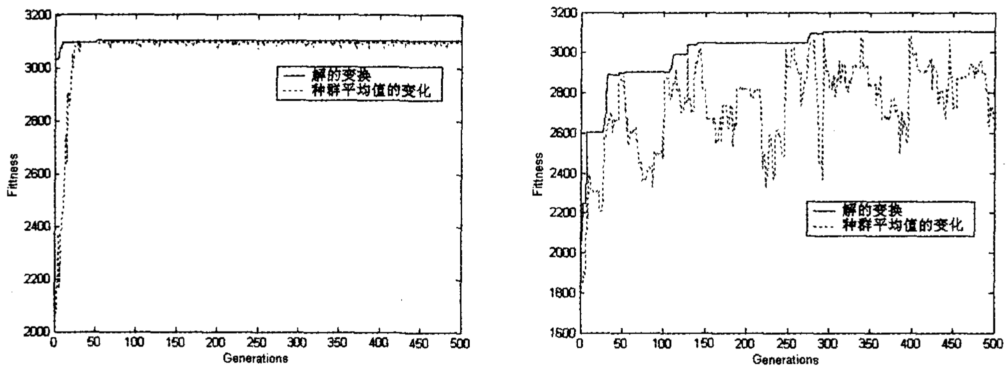
表 2（试验一）　20 次独立试验的统计结果

算法	出现最优解的代数	找到最优解次数	求解结果（总价值/总重量）
QCA	10	20	3103/1000
HGA	230	8	3103/1000
贪心算法	\	\	3077/999

表 3（试验二）　20 次独立试验的统计结果

算法	出现最优解的代数	找到最优解次数	求解结果（总价值）
QCA	11	20	6666
HGA	24	14	6666
贪心算法	\	\	6659

图 2 给出（试验一）一次运行结果的收敛曲线。



(a) QCA　　(b) HGA

图 2　收敛性能比较

从图 2 可以看到：采用如上所述的量子个体进行进化算法，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，量子个体已经以概率 1 取最优解。由于采用量子个体，因此我们只需少数的种群个数（本算法只使用了 10 个个体）其寻优能力比其他算法（HGA 中使用 100 个个体）显著，这样相对的性能代价比高。

结论　本文采用量子比特个体并与人工免疫系统中的克隆算子相结合提出了一种新颖的学习算法—量子克隆遗传算法。通过理论分析与仿真试验表明：该算法与传统的进化算法相比，保持了解的多样性，有效克服了早熟问题，而且收敛速度快。

参 考 文 献

1　Rosenfeld A. Digital Picture Processing[M]. New York: Academic Press, 1976

2　陈国良，王煦法，庄镇泉，等. 遗传算法及其应用[M]. 人民邮电出版社，1997

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

4　戴葵，宋辉，刘芸，等. 量子信息技术引论[M]. 国防科技大学出版社，2001

5　Du H F, Jiao LC. Clonal Operator Antibody Clone Algorithms [A]. In: Proceedings of 2002 International Conference on Machine Learning and Cybernetics. New York: IEEE, 2002, 1:506～510