

A_005

量子ビット表現と対交換戦略を用いた進化的アルゴリズム

Evolutionary Computing Using Quantum Bit Representation
and Pair Swap Strategy

中山 茂†

今別府 孝洋†

小野 智司†

Shigeru Nakayama† Takahiro Imabeppu† Satoshi Ono†

1 はじめに

近年、量子力学的原理 [1,2] や量子ビットを模倣し、進化的アルゴリズムと融合した確率的な組合せ探索アルゴリズムが提案されている [3-6]. 従来の遺伝的アルゴリズム (Classical Genetic Algorithm: CGA) [7] や免疫アルゴリズムにおいて、量子系の干渉効果を模倣した干渉交叉が提案され、巡回セールスマン問題において探索性能の改善が可能であることが示されている [3,4]. また、遺伝子として量子ビット表現を用いた量子風進化的アルゴリズム (Quantum-inspired Evolutionary Algorithm: QEA) が提案されている [5,6].

QEA は、単点探索を行う Simulated Annealing (SA) [8] と同様、1 個体を用いて探索を行うことが可能であり、大域的探索から局所探索へと自動的に移行する特徴を持つ [5]. また、大規模な問題を解くために、CGA などの多点探索アルゴリズムと同様に、複数個体を用いて解探索を行うことも可能である. QEA では、島モデル型遺伝的アルゴリズム (Island GA: IGA) [9,10] と同様に、集団内の個体を複数の部分集団 (グループ) に分け、グループ内外での移住を行う. グループ毎に個別に進化を行うことで、粗粒度の分散並列化が可能となる. その反面、グループ数や移住を行うタイミングなどのパラメータを調整しなければならない. また、ナップザック問題におけるパラメータの調整指針を統計的に得るために、大量の実験が必要であったが [5,6], 他の問題に QEA を適用する際は、問題の特性や規模を考慮したパラメータの調整指針を得るべく、同様に大量の実験を行う必要がある.

本論文では、QEA よりも単純なアルゴリズムで、調整に必要なパラメータが少ない、対交換に基づく量子風進化的アルゴリズム (Quantum-inspired Evolutionary Algorithm based on Pair Swap: QEAPS) を提案する. QEA では、集団内での最良解情報とグループ内での最良解情報を共有するのに対し、QEAPS は各世代においてランダムに選択された 2 個体間で個体最良解情報を交換する. これにより QEAPS は、集団内で多様性を維持したまま探索を行うことができ、調整すべきパラメータを QEA よりも少なくすることができる.

本論文では、0-1 ナップザック問題を用いて評価実験を行い、1 個のプロセッサを用いる場合は、QEAPS が QEA と同等以上の品質の解を、高速にかつ安定して得られ、最適解の発見率も高いことを示す. また、QEA では、重量制限を超過した個体の扱い方によって、探索性能に差が出るのに対し、QEAPS では探索性能に差がなく、よりロバスト性が高いことを示す.

2 対交換戦略を用いた進化的アルゴリズム

本論文で提案する QEAPS は、QEA [5,6] に対し、主に以下の改良を行ったアルゴリズムである.

- 1) QEA では、集団内にグループを作成するのに対し、QEAPS では集団内にグループを作成しない.
- 2) QEA では、グループ内で行う局所的移住、および集団全体で行う大域的移住を、あらかじめ設定したタイミングで行うのに対し、QEAPS では、各世代において、ランダムに選択した 2 個体間で最良解情報の交換を行う.

2.1 遺伝子表現

CGA では個体の遺伝子として、バイナリ、整数、実数、文字などの確定的な値が利用されるが、QEA および QEAPS では、遺伝子として量子ビット (Qubit) を用いる. 世代 t の個体 i は、図 1 に示すように、量子ビットのテンソル積として表現される染色体 $q_i^t = q_{i1}^t \otimes q_{i2}^t \otimes \dots \otimes q_{im}^t$ と、探索過程において発見したバイナリ列の最良解情報 (Personal Best) $b_i^t = [b_{i1}^t, b_{i2}^t, \dots, b_{im}^t]$ から構成される*. ただし、 m は 1 個体に含まれる遺伝子数である.

個体 i の評価を行う際は、染色体 q_i を観測することによって得られるバイナリ列 p_i を得る. 量子ビット q_{ij} ($j = 1, \dots, m$) は、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ とのベクトルに、それぞれの状態が観測される複素確率振幅 α_{ij}, β_{ij} ($|\alpha_{ij}|^2 + |\beta_{ij}|^2 = 1$) を係数とする確率的な重ね合わせ状態 (ベクトル和) として、同時に $|0\rangle$ と $|1\rangle$ とを持つ.

$$q_{ij} = \alpha_{ij} |0\rangle + \beta_{ij} |1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_{ij} \\ \beta_{ij} \end{bmatrix} \quad (1)$$

すなわち、 q_{ij} において $|0\rangle$ が観測される確率は $|\alpha_{ij}|^2$,

† 鹿児島大学工学部情報工学科

Department of Information and Computer Science,
Faculty of Engineering, Kagoshima University*本論文では、世代 t の個体 i における染色体を q_i^t と表すが、論文 [5,6] に倣い、世代を特に考慮する必要がない場合は添字 t を省略し、単に q_i と表す.

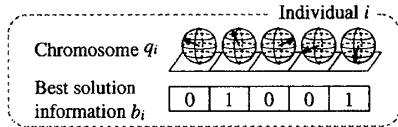


図 1: QEA および QEAPS における個体の表現

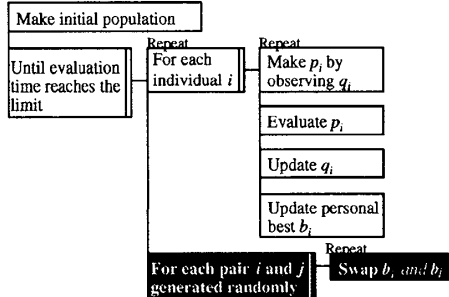


図 2: 提案する QEAPS のアルゴリズム

$|1\rangle$ が観測される確率は $|\beta_{ij}|^2$ となる。 q_i の観測によって得られる p_i に対して CGA と同様に適応度の計算を行い、個体 i の適応度とする。

2.2 処理手順

提案する QEAPS のアルゴリズムを図 2 に示す。 QEA と QEAPS で異なる処理を黒色で示している。

まず、集団内の全ての個体に対して、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ とが均等に観測されるよう、 α_{ik} と β_{ik} を $1/\sqrt{2}$ とすることで初期化を行い、均等な重ね合わせ状態を準備する。本論文では、確率振幅 α_{ik} と β_{ik} は、簡単のために実数とした。次に、あらかじめ定められた終了条件を満たすまで、以下の手順に従って個体の更新および個体内の最良解情報の交換を繰り返す。

個体更新の手順を図 3 および以下に示す。まず、 q_i を観測することで p_i を得る。 p_i に対して適応度 $f(p_i)$ を計算し、個体 i の適応度とする。

次に、個体 i が保持する最良解情報 b_i と p_i との適応度の優劣に応じて、遺伝子座毎に比較を行い、 $|0\rangle$ または $|1\rangle$ の観測確率を増減させるため、すなわち、 $|0\rangle$ の方向か $|1\rangle$ の方向かに寄せるための回転角度リスト $u_i = [\theta_{i1}, \theta_{i2}, \dots, \theta_{im}]$ を作成する。 θ_{ik} ($k = 1, \dots, m$) は表 1 に従って決定し、以下の回転行列を、ユニタリ変換として q_i に作用させる [5, 6]。

$$\begin{bmatrix} \alpha'_{ik} \\ \beta'_{ik} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{ik}) & -\sin(\theta_{ik}) \\ \sin(\theta_{ik}) & \cos(\theta_{ik}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{ik} \\ \beta_{ik} \end{bmatrix} \quad (2)$$

回転角度リスト u_i および上記の回転行列に従って q_i を更新し、 $f(p_i) > f(b_i)$ となる場合は、今回観測したバイナリ列 p_i を新たな個体の最良解 b_i とする。

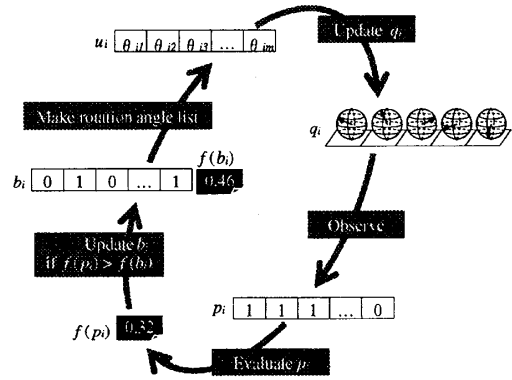


図 3: 1 個体の評価と更新

2.3 QEA での移住戦略

QEA の移住戦略には、大域的移住と局所的移住の 2 種類を含む。局所的移住は、グループ内の個体のなかで、最も適応度が高い最良解情報を、他の個体全ての最良解情報とする処理であり、各世代において各グループ毎に行う。大域的移住は、集団全体の個体のなかで、最も適応度が高い最良解情報を、他の個体全ての最良解情報とする処理であり、一定世代毎に行う。上記の 2 種類の移住により、QEA は探索の集中化を行うが、問題の特性や規模、グループ内の収束速度、および、QEA の基本的なパラメータである回転角度 [5] を考慮して、グループ数および大域的移住タイミングの 2 つのパラメータを設定しなければならない [6]。

2.4 QEAPS での対交換戦略

提案する QEAPS では、移住戦略のかわりに任意の 2 個体間で最良解情報を交換する対交換戦略を採用する。まず、集団内の全ての個体から、2 個体で 1 組の対をランダムに生成しつくす。各対において、量子ビット列の染色体には操作を行わず、最良解情報のみを交換する。

対交換の手順を以下に示す。世代 t において、最良解情報を交換する 2 個体を i, j とし、 i, j の最良解情報を b_i^t, b_j^t とする。対交換により $b_i^{t+1} = b_j^t, b_j^{t+1} = b_i^t$ となる。ここで $f(b_i^t) \geq f(b_j^t)$ と仮定する。

対交換を行うと、個体 i と比較して適応度が低かった個体 j は、 b_i^t に近づくように確率振幅が変化するため、適応度の改善が期待できる。また、世代 t よりも低い適応度の最良解情報 b_i^{t+1} を持つことになる個体 i では、次の世代 $t+1$ において、 $f(p_i^{t+1}) > f(b_i^{t+1})$ であれば b_i^{t+1} はすぐに更新される。

移住戦略は常に探索の集中化を促進することになるのに対し、対交換戦略は、個体に含まれる確率振幅が収束していない序盤では、探索の多様化を促し、確率振幅が収束する終盤において探索の集中化を促進する。量子ビットからなる染色体は、大域的探索から局所探索へ自

表 1: θ_{ik} の参照表

p_{ik}	b_{ik}	$f(p_i) > f(b_i)$	θ_{ik}			
			$\alpha_{ik}\beta_{ik} > 0$	$\alpha_{ik}\beta_{ik} < 0$	$\alpha_{ik} = 0$	$\beta_{ik} = 0$
0	1	false	θ_C	$-\theta_C$	—	$\pm\theta_C$
1	0	false	$-\theta_C$	θ_C	$\pm\theta_C$	—
		Otherwise	0	0	0	0

表 2: パラメータ設定

Parameter name	Value used	
	QEA	QEAPS
Number of individuals	10, 20, 30, ..., 100	—
Number of subpopulations g	5	—
Number of individuals in a subpopulation	2, 4, ..., 20	—
Rotation angle θ_C	0.01π	0.01π
Number of observations	1	1
Interval of global migration	100	—

動的に移行する特徴を持つが [5], 対交換戦略はその特徴をさらに強めるものであると考える。

3 評価実験

3.1 準備

0-1 ナップサック問題を用いた評価実験を行い, QEAPS と QEA との探索性能を比較した. ベンチマークとして論文 [10] に示されているナップサック問題を使用した. 品物数 N を 100 (表の最初の 100 個使用), 250 (表の最初の 250 個使用), および 500 (表の 500 個すべて使用) とし, 全品物の合計重量の 50% を重量制限とした.

個体数やグループ数 g などのパラメータは, 先行研究 [5] に従い, 表 2 のように設定した. 重量制限を超過した場合は, 以下の 3 種類の方式により対処するものとした.

Zero: 重量制限を超過した個体の適応度を 0 とする.

Penarty: 重量制限を超過した個体の適応度 f を以下の式によって求める.

$$f = \sum_{i=1}^n c_i x_i - \alpha \max \left\{ 0, \sum_{i=1}^n a_i x_i - b \right\} \quad (3)$$

ただし, c_i , a_i はそれぞれ荷物 i の価値および重量であり, $x_i \in \{0, 1\}$ は荷物 i をナップサックに入れるかを示す. b はナップサックの重量の上限を表し, $\alpha = \max_{i=1, \dots, n} \{c_i/a_i\}$ とする.

Repair: 以下の手順からなる Random repair [5] によって調整する.

- 1) 重量制限を満たすまで, 荷物を 1 個ずつランダムに選択し, ナップサックから取り除く.
- 2) 重量制限を超過するまで, ランダムに選択した荷物を 1 個ずつナップサックに追加する. 重量制限を超過した場合, 最後に追加した荷

物を取り除く.

評価基準として, 試行回数あたりの最適解発見率 $Opt[\%]$, および, 各試行において得られた最良解の適応度の平均 m_f に着目した. 探索の終了条件として, 評価回数 (適応度の計算回数) の上限を $N \times 10^3$ 回とした. 各問題において, 各方式を用いて 30 回の試行を行った.

3.2 実験結果

QEA と QEAPS のそれぞれにおいて, 重量超過時の処理および個体の総数を変化させた場合の Opt および m_f を図 4 に示す.

図 4 の Opt に着目すると, QEAPS と QEA の双方において問題サイズの増加により Opt が低下するものの, QEAPS は QEA よりも最適解発見率を大幅に改善できていることがわかる. また, 図 4 の m_f に着目すると, 全般的に, QEAPS は QEA よりも高い品質の解を発見できることがわかる.

重量超過時の対処方法による探索性能の違いに着目すると, QEA では, Repair の場合が m_f および Opt が最も高く, Penarty および Zero の場合は探索性能が低下することがわかる. これに対し QEAPS では, 個体数が 20 個以下と少ない場合には QEA と同様の傾向が見られるものの, 個体数が 30 個以上であれば, 重量超過時の対処方法に依存せず高い探索性能を示していることがわかる.

4 おわりに

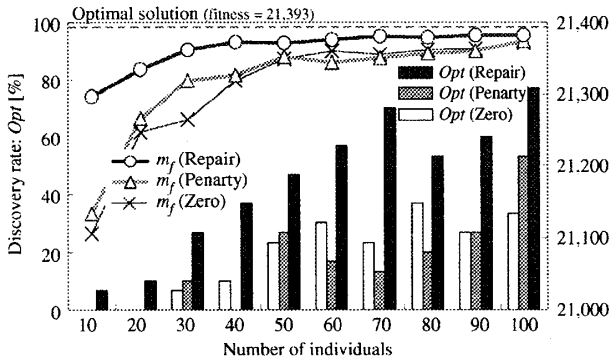
量子ビット表現の遺伝子を用いた組合せ最適化について概説し, 対交換戦略を用いる組合せ最適化アルゴリズム QEAPS を提案した. QEAPS は 2 個体間で最良解情報を入れ換える対交換を行うことで, 従来の QEA では必要であったグループ数および移住タイミングについての調整が不要となる. 対交換は, 探索の序盤においては大域的探索を, 確率振幅が収束していく探索終盤では局所探索を促すものであり, 量子ビット表現の遺伝子が持つ, 大域的探索から局所探索へと自動的に移行する特徴を強める働きがある.

0-1 ナップサック問題を用いた評価実験により, QEAPS は, QEA と比較して, 最適解発見率が高いこと, 高品質の解が品質得られること, および, 重量超過時の対処方法に依存しないことを確認した.

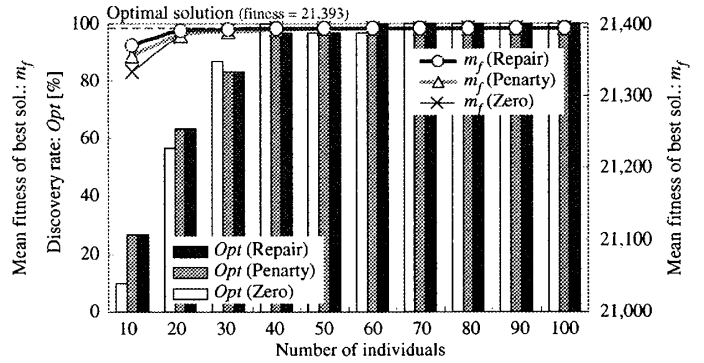
今後, より大規模な問題における探索性能の検証, 改善を行うとともに, 他の組合せ最適化問題への適用を検討し, QEAPS が有効な問題の特性を明確化する.

参考文献

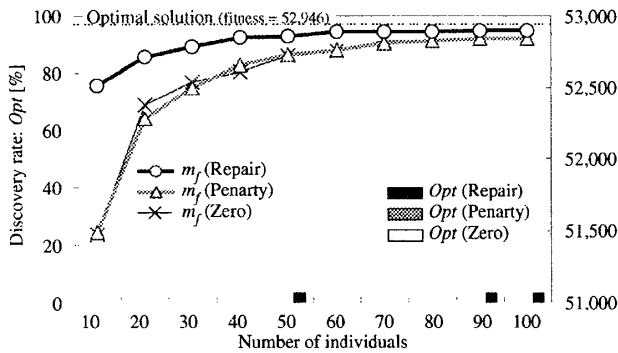
- [1] Nielsen, M. A. and Chuang, I. L.: *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. press, New York (2000).
- [2] 中山茂: 量子論理ゲートでの平方根ゲートの考察, 日本計算工学会, Vol. 7, pp. 77-82 (2005).



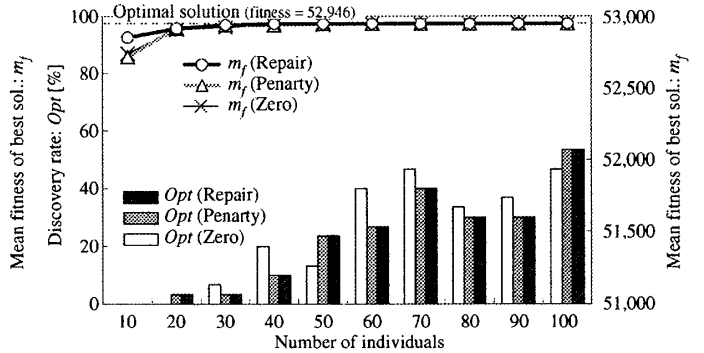
(a) Discovery rate and fitness on QEA ($N = 100$).



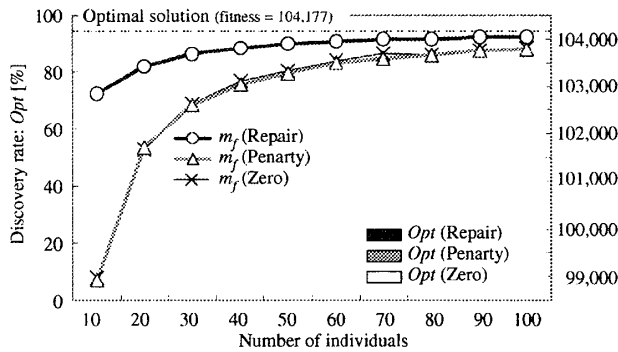
(b) Discovery rate and fitness on QEAPS ($N = 100$).



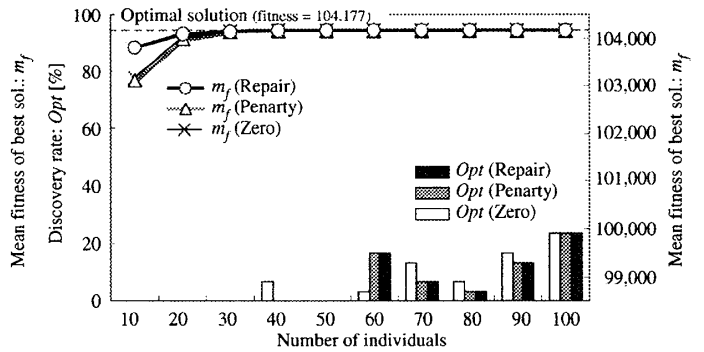
(c) Discovery rate and fitness on QEA ($N = 250$).



(d) Discovery rate and fitness on QEAPS ($N = 250$).



(e) Discovery rate and fitness on QEA ($N = 500$).



(f) Discovery rate and fitness on QEAPS ($N = 500$).

図4: QEA と QEAPS の比較

- [3] Narayanan, A. and Moore, M.: Quantum-Inspired Genetic Algorithms, *Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, pp. 61-66 (1996).
- [4] 中山茂, 飯村伊智郎, 伊藤登志也: 免疫アルゴリズムにおける量子干渉交叉法の検討, *電子情報通信学会 D-I, Vol. J-88-D-I, No. 12*, pp. 1795-1799 (2005).
- [5] Han, K.-H. and Kim, J.-H.: Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization., *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, Vol. 6, No. 6, pp. 580-593 (2002).
- [6] Han, K.-H. and Kim, J.-H.: On Setting the Parameters of QEA for Practical Applications: Some Guidelines Based on Empirical Evidence., *Genetic and evolutionary computation - GECCO 2003*, pp. 427-428 (2003).
- [7] Goldberg, D. E.: *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison Wesley, Reading (1989).
- [8] Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. and Vecchi, M. P.: Optimization by Simulated Annealing, *Science, Number 4598, 13 May 1983*, Vol. 220, 4598, pp. 671-680 (1983).
- [9] Belding, T. C.: The Distributed Genetic Algorithm Revisited, *Proceedings of the Sixth International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 114-121 (1995).
- [10] 飯村伊智郎, 池端伸哉, 中山茂: オブジェクト共有空間を用いた並列遺伝的アルゴリズムにおけるノアの箱舟戦略の検討, *情報知識学会誌*, Vol. 13, No. 2, pp. 1-7 (2003).