

Quantum-Inspired Differential Evolutionにおける 突然変異操作の検討

A study on mutation operator of Quantum-Inspired Differential Evolution

高森 貴大 串田 淳一 原 章 高濱 徹行

Takahiro Takamori Jun-ichi Kushida Akira Hara Tetsuyuki Takahama

広島市立大学大学院情報科学研究科知能工学専攻

Email:ttakamori @ ints.info.hiroshima-cu.ac.jp、 {kusida,ahara,takahama} @ hirosshima-cu.ac.jp

Abstract—Differential evolution (DE) is a population based algorithm like genetic algorithms using similar operators; crossover, mutation and selection. It is proposed by Storn and Price in 1995, and can solve optimization problem over continuous spaces. Recently the Quantum-Inspired differential Evolution(QDE) has been proposed for solving discrete optimization problem. In this paper, we propose new mutation operators and observation strategy of q-bit. To verify the search performance of these method in QDE, we conduct evaluation experiment using some knapsack problems.

I. はじめに

交叉、突然変異、淘汰を経て解を探索する遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms;GA) と同様の構造を持つ進化的アルゴリズム Differential Evolution (DE) はその操作の特徴から実数値空間を対象とした探索手法である。通常の DE ではバイナリ値空間の問題を解くことができなかった。それに対し、近年バイナリ空間に DE を適用するための様々な手法が提案されている [1][2]。中でも量子力学的操作を応用した DE として Quantum-Inspired Differential Evolution (QDE) が提案されている [3]。QDE では遺伝子として量子ビット表現を用いることでバイナリ数値空間に適用できるようになっている。

DE の解探索性能は、遺伝オペレータやそれらのパラメータに大きく依存することが知られている。QDE のアルゴリズムの構成も DE と同様である為、本研究では進化戦略における突然変異オペレータの検討を行う。また、QDE では解候補が Q ビットを観測して生成されるため、解候補を複数回観測することでも探索の効率に影響すると考えられる。そこで本研究では線形ランキングに基づいた観測回数制御法を提案する。

本研究では評価実験としてよく知られた組み合わせ最適化問題であるナップサック問題を用い、提案する各手法と個体の遺伝子に量子ビット表現を用いた進化的アルゴリズムの代表である Quantum-Inspired

Evolutionary Algorithm(QEA) を比較し、QDE における突然変異操作および観測回数の検討を行う。

II. DIFFERENTIAL EVOLUTION

DE は、実数空間における最適化アルゴリズムである。DE にはいくつかの形式が提案されており、DE/base/num/cross と表記される。“base”は基本ベクトルとなる親の選択方法の指定を、“num”は基本ベクトルを変化させるための差分ベクトルの個数を、“cross”は子個体を生成するために用いる交叉方法をそれぞれ指定する。DE のアルゴリズムを以下に示す。

1. 世代ランダムに個体を N 個生成し集団 $P(t) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ を形成
2. 個体の関数値を計算
3. 子個体の生成
各親個体 \mathbf{x}^p に対して以下を行う
 - (1) $\mathbf{x}^{r1}, \mathbf{x}^{r2}, \mathbf{x}^{r3}$ の選択
 - (2) 変異ベクトル \mathbf{v} の生成
 - (3) 変異ベクトル \mathbf{v} と親個体 \mathbf{x}^p を交叉し、子個体 \mathbf{x}^{child} を生成
4. 子個体 \mathbf{x}^{child} と親個体 \mathbf{x}^p の関数値を比較して、 \mathbf{x}^{child} の関数値の方が良ければ、置き換えを行う
5. 終了条件を満たしていない場合、3. に戻る

DE における子個体の生成は親個体 \mathbf{x}^p と式 (1) で生成される変異ベクトル \mathbf{v} を遺伝子単位で交叉させることで行われる。

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}^{r1} + F(\mathbf{x}^{r2} - \mathbf{x}^{r3}) \quad (1)$$

式 (1) の $\mathbf{x}^{r1}, \mathbf{x}^{r2}, \mathbf{x}^{r3}$ は条件 $r1 \neq r2 \neq r3 \neq p$ のもとで選択される。 \mathbf{x}^{r1} はベースベクトル、 $(\mathbf{x}^{r2} - \mathbf{x}^{r3})$ は差分ベクトルと呼ばれる。パラメータ F は、差分ベクトルの伸縮を意味するスケールングファクタである。交叉の方法には exponential crossover (指数交叉) や binomial crossover (二項交叉) などがある。

III. 量子風進化的アルゴリズム

A. QEA

1) QEA の遺伝子表現: 量子ビットに対応する、QEA における最小単位は Q ビットと呼ばれ、以下のように記述される。

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (2)$$

ここで、 α, β は一般に複素数であり、それぞれの状態が観測される複素確率変動を表す。|0> が観測される確率は $|\alpha|^2$ 、|1> が観測される確率は $|\beta|^2$ となる。観測される状態はこのいずれかとなるため、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ である。

QEA における個体は、以下のような n 個の Q ビットの列を染色体として持つ。

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \\ \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_n \end{array} \right] \quad (3)$$

ただし、 $|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2 = 1, j = 1, 2, \dots, n$ である。

2) QEA のアルゴリズム: QEA の個体は、Q ビット個体と呼ばれ、適合度、Q ビット列、Q ビット列から観測された解、各個体における最良解情報の 4 種類の情報を持つ。

Q ビット列 (Q-bit string)

Q ビット列は進化的アルゴリズムにおける染色体に対応し、Q ビットが遺伝子に対応する。第 i 個体 \mathbf{q}_i は、個体数を N 、次元数 n をとして以下のように記述できる。

$$\mathbf{q}_i = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_{i1} & \alpha_{i2} & \cdots & \alpha_{in} \\ \beta_{i1} & \beta_{i2} & \cdots & \beta_{in} \end{array} \right], i = 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

ただし、 $|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2 = 1, j = 1, 2, \dots, n$ である。最小化問題に対する QEA の概要を以下に示す。

1) 初期化

各個体において、|0> と |1> が均等に観測されるように個体を生成して均等な重ね合わせ状態を準備し、初期 Q ビット列集合 $Q = \{\mathbf{q}_i\}$ を構成する。

2) 観測

各 Q ビット列 $Q = \{\mathbf{q}_i\}$ に対して、Q ビットの確率振動に従って観測を行い、初期観測状態の集合 $P = \{\mathbf{x}_i\}$ を構成する。QEA では 0 から 1 までの一様乱数 r を発生させ、 $r \leq |\alpha_{ij}|^2$ の場合に 0 が、 $r > |\alpha_{ij}|^2$ の場合に 1 が観測されたものとする。

3) 評価

得られたバイナリ列 \mathbf{x}_i に対して適合度 $f(\mathbf{x}_i)$ を算出することで、個体 i の適合度を求める。

4) 最良解情報の設定

観測結果を最良解とする、すなわち、 $\mathbf{b}_i = \mathbf{x}_i$ とする。最適解情報の初期集合を $B = \{\mathbf{b}_i\}$ とする。

表 I
Q ビット更新における θ の回転角

x_{ij}	b_{ij}	$f(\mathbf{x}_i) \geq f(\mathbf{b}_i)$	回転角
0	1	false	$\Delta\theta$
1	0	false	$-\Delta\theta$
otherwise			0

5) 終了判定

終了条件を満たしたら終了する。

6) 観測

2) と同様

7) 評価

3) と同様

8) Q ゲートによる Q ビットの更新

バイナリ列 \mathbf{x}_i と最良解情報 \mathbf{b}_i を遺伝子座標毎に比較し、Q ゲートを用いて Q ビットを変更し、Q ビット列集合 Q を更新する。 $\Delta\theta_{ij}, j = 1, \dots, n$ は、以下の回転行列で表されるユニタリ変換として \mathbf{q}_i に作用する。

$$\begin{bmatrix} \alpha'_{ij} \\ \beta'_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\Delta\theta_{ij}) & -\sin(\Delta\theta_{ij}) \\ \sin(\Delta\theta_{ij}) & \cos(\Delta\theta_{ij}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{ij} \\ \beta_{ij} \end{bmatrix} \quad (5)$$

ここで、一般に $\Delta\theta_{ij}$ は、表 I を参照して決定する。

文献 [4] によると $\Delta\theta_{ij}$ は 0.001π から 0.05π までの値が適当であるとされる。

9) 最良解情報の更新

$f(\mathbf{x}_i) \geq f(\mathbf{b}_i)$ ならば、観測したバイナリ列 \mathbf{x}_i を新たな個体の最良解 \mathbf{b}_i とし、最良解情報 B を更新する。

10) 移住

最適解集合 B の最良解を \mathbf{b} とする。大域的な移住条件を満たせば、 \mathbf{b} を各個体の最良解 \mathbf{b}_i に移住させる。局所的な移住条件を満たせば、個体グループ間で最適解情報 \mathbf{b}_i を交換することにより、局所的に移住させる。

11) 5. に戻る

B. QDE

QDE では Q ビット個体の更新に Q ゲートではなく差分操作を用いる。QDE は、Q ビットの個体の集団を維持する。世代 t で $Q(t) = \{\mathbf{q}_1^t, \mathbf{q}_2^t, \dots, \mathbf{q}_N^t\}$ と表現する。ここで N は集団の大きさ、 \mathbf{q}_i^t は Q ビット個体で次のように定義される。

$$\mathbf{q}_i^t = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \alpha_{i,1}^t & \alpha_{i,2}^t & \cdots & \alpha_{i,n}^t \\ \beta_{i,1}^t & \beta_{i,2}^t & \cdots & \beta_{i,n}^t \end{array} \right] \quad (6)$$

突然変異オペレータは次式で表現される。

$$\mathbf{v}_{i,j}^t = \alpha_{r1,j}^t + F(\alpha_{r2,j}^t - \alpha_{r3,j}^t) \quad (7)$$

ここで $i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, n$, である。整数 $r1, r2, r3$ は $[1, N]$ の範囲で $i \neq r1 \neq r2 \neq r3$ とな

るようにランダムに選択される。 F は一般に $[0, 2]$ の範囲で設定される。本研究では $v_{i,j}^t$ が 1 を超えた場合は $v_{i,j}^t = 1$ とし、0 を下回った場合 $v_{i,j}^t = 0$ としている。

交叉オペレータは DE における exponential crossover と同様で、次のように表現される。

$$\alpha'_{i,j} = \begin{cases} v_{i,j}^t & \text{if } (\text{rand}_j[0, 1] \leq CR) \text{ or } (j = j_{\text{rand}}) \\ \alpha_{i,j}^t, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (8)$$

ここで $CR \in [0, 1]$, j_{rand} は $\in [1, N]$ のランダムな整数である。

β の値は α から算出される。

よって新たな Q ビット個体は次式のようになる。

$$\mathbf{q}'_i = \begin{bmatrix} \alpha'_{i,1} & \alpha'_{i,2} & \cdots & \alpha'_{i,n} \\ \beta'_{i,1} & \beta'_{i,2} & \cdots & \beta'_{i,n} \end{bmatrix} \quad (9)$$

新しいバイナリ列 \mathbf{u}_i^t は \mathbf{q}'_i の各 Q ビットの状態を観測することで得られる。世代 t の観測集団は $X(t) = \{\mathbf{x}_1^t, \dots, \mathbf{x}_N^t\}$ で表され、新しい観測ベクトルは $U(t) = (\mathbf{u}_1^t, \dots, \mathbf{u}_N^t)$ で表せる。

もし $f(\mathbf{u}_i^t) > f(\mathbf{x}_i^t)$ であるならば $\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{u}_i^t$, $\mathbf{q}_i^{t+1} = \mathbf{q}'_i$ とする。

IV. 提案探索戦略

A. 突然変異操作

本研究では式 (7) における $r1$ の選択方法として従来の rand 戦略に加えて、p-best 戦略、線形ランキング戦略 [5][6] の戦略を用いて実験を行う。

1) p-best 戦略

全体のなかで関数値の良い 100p% の個体のうちからランダムで選択する。

2) 線形ランキング戦略

個体集団内においてランク付けを行い、ランクに応じた確率で選択確率を決定する。個体 x_k のランクを r_k ($r_k = 1, 2, \dots, N$) とすると選択確率は p_k は次のようになる。

$$p_k = \frac{1}{N} (\eta^+ - (\eta^+ - \eta^-) \frac{r_k - 1}{N - 1}) \quad (10)$$

ここで $\eta^- = 2 - \eta^+$ である。 η^+ は最大期待値で、最良個体が平均的個体より何倍選択されるかを指定する、区間 $[1.0, 2.0]$ の数で指定する。この値が 1 に近いほど各個体は均等に選択される。

B. 観測回数の変化

QDE における新たな探索戦略として生成したバイナリ列の観測回数を個体毎に変化させることにより個体の進化を効率的に行うことを提案する。これにより良好な解を持つ個体の進化を促進するとともに、全体の多様性の維持ができると考えられる。

本研究では IV-A 節で述べた線形ランキング戦略に基づいて Stochastic Universal Sampling (SUS) [7] と呼ばれる方法でを用いる。ルーレットを作成し針の初期位置を $[0, 1/N]$ の範囲でランダムに決めた後に針の位置を $1/N$ だけ動かすことで各個体の観測回数を変化させ

るという方法を用いた。これにより各世代の評価回数は変化することなく、最良個体の各世代の平均観測回数はおおよそ η^+ 回観測されることになる。

V. 実験

A. 問題

本研究では QDE における進化戦略の有用性を比較するために組み合わせ問題であるナップサック問題をテスト問題として用いて実験を行う。傾向の異なるナップサック問題として、以下の 2 種類のナップサック問題のデータをそれぞれ 10 ずつ用意する。

- 無相関: アイテム i の容量 s_i と価値 v_i を区間 $[1, s]$ の一様分布に従う乱数によって生成したデータ。
- 弱相関: 価値 s_i を区間 $[1, s]$ の一様分布に従う乱数によって生成し、容量 v_i を区間 $[s_i - r, s_i + r]$ の一様乱数により生成したデータ。 r の値は $r = s_i/2$ とする。

なおすべての問題において $s = 1000$ 、アイテム数は 50、ナップサックの容量 B は、全アイテムの容量の総和の半分としている。また容量の制約条件を満たさない個体に対するペナルティとして、適合度を 0 にするという最も単純な制約を用いた。

B. 実験設定

今回の実験で用いたパラメータを次の表 II に示す。ここで η_{mutation}^+ は突然変異操作における線形ランキングのパラメータを示しており、 η_{observe}^+ は観測回数の変化における線形ランキングのパラメータを示している。各パラメータは事前実験を行い設定している。

表 II
DE と QDE のパラメータ

	QEA	QDE
次元数	50	
世代数	2000	
評価回数	100000	
試行回数	10	
個体数	50	
$\Delta \theta$	0.001 π	/
グループ数	10	/
局所的移住間隔	1	/
大域的移住間隔	100	/
CR	/	0.4
スケールリングファクタ	/	1.0
優良個体割合	/	0.1
η_{mutation}^+	/	2.0
η_{observe}^+	/	1.9

C. 実験結果

表 III に無相関データにおける結果と弱相関なデータにおける結果、およびそれら二つの結果の平均値をそれぞれ示す。表には動的計画法を用いて求めた最適値に対する 10 回の試行の平均値の割合と 10 回の試行のうち最良解に達した試行数を示した。また図 1 に無相関データ/prob1 における各手法の各個体の解の推移

を、図 2 に弱相関データ/probl1 における各手法の各個体の解の推移をそれぞれ示す。

表 III
両方のデータにおける結果の比較

	種類	QEA	QDE/観測回数一定			QDE/観測回数変化		
			rand	p-best	rank	rand	p-best	rank
無相関	関数値	99.9652	99.9212	99.9822	99.9854	99.974	99.9919	99.9921
	正答数	8.2	7.0	8.8	8.8	8.0	9.5	9.2
弱相関	関数値	99.8884	99.3683	99.9266	99.6957	99.4701	99.9249	99.7289
	正答数	3.4	0.1	4.1	0.9	0.1	4.6	1.4
平均	関数値	99.9268	99.64475	99.9544	99.8406	99.72205	99.9584	99.8605
	正答数	5.8	3.05	6.45	4.85	4.05	7.05	5.3

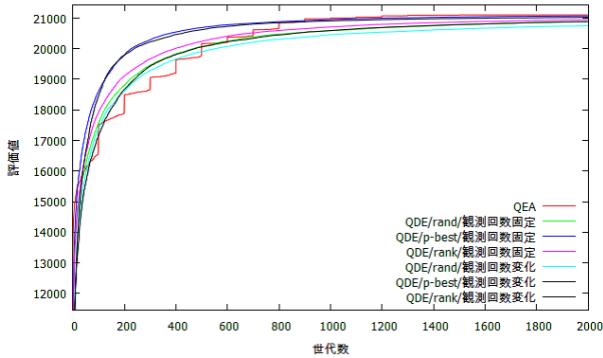


図 1. 無相関データ (probl1) における各手法の解の推移

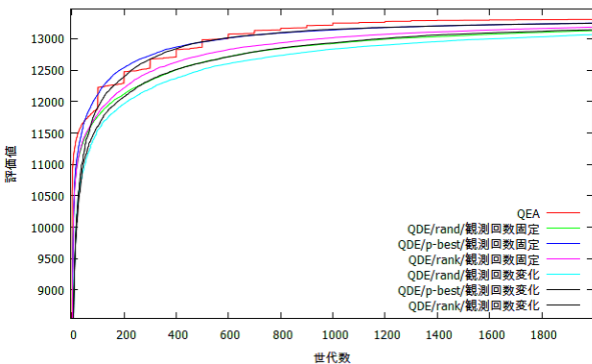


図 2. 弱相関データ (probl1) における各手法の解の推移

VI. 考察

V の結果より、無相関データに対しては QDE/線形ランキング/観測回数変化が、弱相関データに対しては QDE/p-best/観測回数固定が最も良い結果となっており、2つのデータの平均では、QDE/p-best/観測回数変化が観測回数の変化を導入していない場合をわずかに上回っている。また QDE/random では用いたものはどちらのデータでも良好な結果を残していない。

このような結果になった理由としては random 戦略では良好な解を観測しやすい Q ビット列が作成されるかが不確定であり、新たな Q ビットが良好な解を観測できず Q ビットの収束が遅くなる傾向がある。それに

対し p-best 戦略では良好な個体をベースベクトルに設定することで良好な解を観測しやすい Q ビットが作成され、より良い解の探索が行われやすくなる為と考えられる。

次に観測回数を変化させた結果と変化させてない場合を比較すると弱相関なデータにおける p-best 戦略を除いて、観測回数を変化させた場合が変化させてない場合よりも良い結果を残している。図から観測回数を変化させた QDE と変化させていない物と比較すると、良い結果を残した QDE/p-best では探索の序盤は少し下回るが終盤では同じくらいか上回る結果となっている。探索の序盤では観測回数が少ない個体のため全体の平均では劣る結果となるが、観測回数の少ない個体は進化するとき大きく進化することになるため、少し探索が進むと変化させていない物に全体的な結果が追い付いている為このようになったと考えられる。結果として QDE において観測回数を変化させることは若干の改善があったといえる。

VII. おわりに

本研究では QDE において突然変異操作に random, p-best, 線形ランキングの 3 種類の戦略と線形ランキングに基づく観測回数の変化を用いる方法を提案した。提案手法を QEA の結果と比較した。その結果、観測回数を変化させた突然変異操作に p-best 戦略を用いたものが最もよい結果を残した。

今後の課題として初期収束の問題や、交叉への異なる手法の検討があげられる。

参考文献

- [1] A.P.Engelbrecht, G.Pa.para “Binary Differential Evolution Strategies”, Proc. of 2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp.1942-1947 (2007)
- [2] G.Pampar, A.Engelbrecht, and N.Franken, “Binary Differential Evolution”, Proc. of 2006 IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp.1873-1879(2006)
- [3] Haijun Su, Yupu Yang “Quantum-inspired differential evolution for binary optimization”, Proc. of IEEE Fourth international Conference on Natural Computation, pp.341-346(2008)
- [4] 中山 茂, 今別府 孝洋, 小野 智司 “量子風進化アルゴリズムの研究”, 情報処理学会 研究報告, pp.57-63(2007)
- [5] J.E.baker “Adaptive selection methods for genetic algorithms”, Proc. of 1985 First International Conference on Genetic Algorithms and their Applications, Pittsburgh, USA, pp.101-111 (July 1985)
- [6] T.Back, F.Hoffmeister “Extended selection mechanisms in genetic algorithms”, Proc. of 1991 Fourth International Conference on Genetic Algorithms and their Applications, San Diego, USA, pp.92-99 (July 1991)
- [7] Xiaoli Xiao, Min Huang “Hierarchic Genetic Algorithm For Designated Multinodes Routing”, Proc. of 2009 Second International Symposium on Electronic Commerce and Security(Volume:1) pp.479 - 483 (May 2009)

問い合わせ先

〒 731-3194

広島市安佐南区大塚東三丁目 4 番 1 号

広島市立大学大学院情報科学研究科知能工学専攻
高森 貴大