

量子ビット表現に基づく整数型遺伝子における 順列解釈法に関する探索性能分析

森山 賀文^{1,a)} 飯村 伊智郎^{2,b)} 大野 友嗣^{1,c)} 中山 茂^{3,d)}

概要：個体の遺伝子に量子ビット表現を用いた Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm は、従来の遺伝的アルゴリズムに比べて優れた探索性能を有することが、0-1 ナップザック問題を対象とした先行研究で報告されている。また、整数ナップザック問題を対象とした実験結果から、量子ビット表現を用いた遺伝子列の観測結果であるビット列を純バイナリコードと解釈した整数型遺伝子表現法は、従来のバイナリ型遺伝子表現法よりも優れた探索性能を有することが示されている。しかしながら、遺伝子に量子ビット表現を用いる性質上、順列を解とする組合せ最適化問題を容易に取り扱うことができない。そこで本研究では、これまでに量子ビット表現を用いた遺伝子表現法の適用範囲の拡張を目的として二つの順列解釈法を提案してきた。本稿では、提案した二つの順列解釈法を用いた計算機実験を行い、得られた実験結果から探索性能の分析を行った結果を述べる。

Search Performance Analysis According to Interpretation Methods for Dealing with Permutation on Integer-Type Gene-Coding Method based on Quantum Bit Representation

YOSHIFUMI MORIYAMA^{1,a)} ICHIRO IIMURA^{2,b)} TOMOTSUGU OHNO^{1,c)} SHIGERU NAKAYAMA^{3,d)}

Abstract: Quantum-inspired Evolutionary Algorithm (QEA) and QEA with Pair-Swap strategy (QEAPS), each gene is represented by a quantum bit (qubit) in both algorithms, have shown superior search performance than Classical Genetic Algorithm in 0-1 knapsack problem. And then, in the experimental result using integer knapsack problem, a novel integer-type gene-coding method that can obtain an integer value as an observation result by assigning multiple qubits in a gene locus, have shown superior search performance than conventional binary-type gene-coding method. However, the gene-coding method cannot deal with permutation easily. Therefore, we have proposed two interpretation methods which can deal with permutation, in order to expand the gene-coding method based on the qubit representation. This paper has shown the results of computer experiment using the proposed interpretation methods, and has described the results of analysis.

¹ 有明工業高等専門学校
National Institute of Technology, Ariake College, 150
Higashihagio-machi, Omuta, Fukuoka, 836-8585 Japan
² 熊本県立大学
Prefectural University of Kumamoto, 3-1-100 Tsukide,
Higashi-ku, Kumamoto, 862-8502 Japan
³ 鹿児島大学名誉教授
Emeritus Professor, Kagoshima University, 1-21-40 Kori-
moto, Kagoshima, 890-0065 Japan
a) yosifumi@ariake-nct.ac.jp
b) iimura@pu-kumamoto.ac.jp
c) e47207@ga.ariake-nct.ac.jp
d) shignaka@gmail.com

1. はじめに

個体の遺伝子に量子ビットを模倣した表現(量子ビット表現)を用いた Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm (QEA) は、従来の遺伝的アルゴリズム (Classical Genetic Algorithm: CGA) [1] と比較して、少ない個体数かつより短時間で解を発見できることが 0-1 ナップザック問題 (0-1 Knapsack Problem: 0-1KP) を対象とした先行研究で報告されている [2], [3]。また、QEA における移住処理を対交換 (Pair Swap) 処理に変更することで、グループ

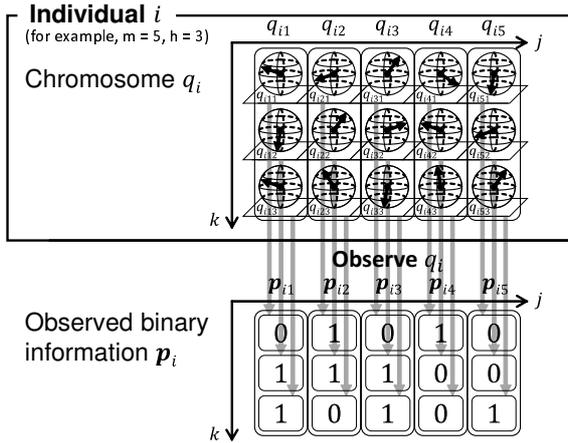


図 1 遺伝子の量子ビット表現とその観測結果

Fig. 1 Gene-coding method based on qubit representation and the observed binary information.

数および大域的移住間隔の二つのパラメータを不要とした Quantum-inspired Evolutionary Algorithm based on Pair Swap (QEAPS) は, 0-1KP を用いた実験の結果, QEA よりも少ない個体数で早く最適解に到達できることが示されている [4], [5].

また, Han らや中山らの先行研究における量子ビット表現の適用範囲拡張を目的として提案された整数型遺伝子表現法は, 整数値を扱う組合せ最適化問題である整数ナップザック問題 (Integer Knapsack Problem: IKP) を対象とした実験において, IKP を単純に 0-1KP に変換して従来のバイナリ型遺伝子表現法を適用するよりも, 短時間で同等以上の優れた解を発見できる [6], [7]. しかしながら, 遺伝子に量子ビット表現を用いる性質上, 順列を解とする組合せ最適化問題を容易に取り扱うことができない. そこで本研究では, 量子ビット表現を用いた遺伝子表現法の適用範囲の拡張を目的として, 量子ビット表現に基づく整数型遺伝子表現法における順列解釈法を提案してきた.

本稿では, これまでに提案した二つの順列解釈法を用いて, 順列を解とする巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem: TSP) を対象とした計算機実験を行い, 実験結果から二つの順列解釈法の探索性能を分析する.

2. 量子ビット表現を用いた個体による解探索

ここでは, 個体の遺伝子に量子ビット表現を用いる QEA および QEAPS の解探索手順について述べる. まず, 個体にコーディングする遺伝子の量子ビット表現について説明する. 次に, 量子ビット表現に基づく, 0-1KP のようなバイナリ値の並びを解とする組合せ最適化問題を取り扱えるバイナリ型遺伝子表現法および, IKP のような整数値の並びを解とする組合せ最適化問題を取り扱える整数型遺伝子表現法について説明する. その後, QEA および QEAPS の処理手順について説明する.

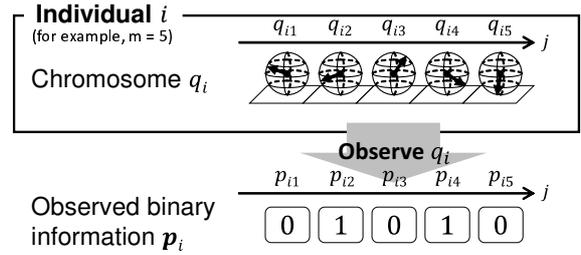


図 2 バイナリ値の並びを解とするバイナリ型遺伝子表現法

Fig. 2 Binary-type gene-coding method for solving binary optimization problems.

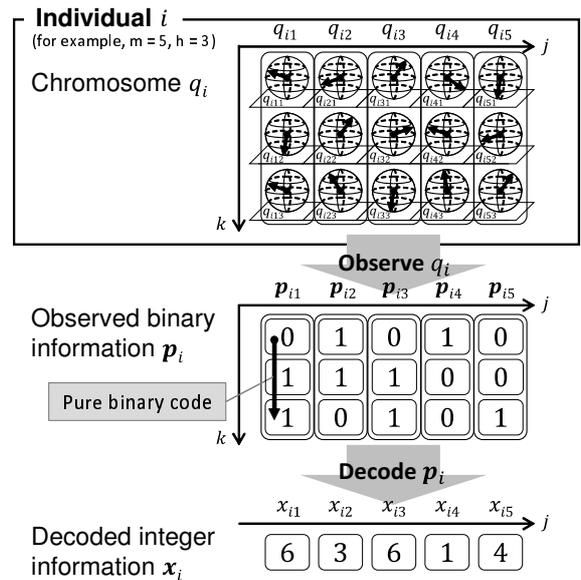


図 3 整数値の並びを解とする整数型遺伝子表現法

Fig. 3 Integer-type gene-coding method for solving integer optimization problems.

2.1 遺伝子の量子ビット表現

図 1 に量子ビット表現を用いてコーディングされた個体の遺伝子とその観測結果を示す. 個体 i の染色体 q_i は, $q_i = q_{i1} \otimes q_{i2} \otimes \dots \otimes q_{im}$ ($j = 1, 2, \dots, m$) と記述される. 個体 i の遺伝子座 j には h 個の量子ビットが配置され, 遺伝子座 j における遺伝子 q_{ij} は $q_{ij} = q_{ij1} \otimes q_{ij2} \otimes \dots \otimes q_{ijh}$ ($k = 1, 2, \dots, h$) と記述される. それぞれの量子ビット q_{ijk} が観測されると, 状態 $|0\rangle$ および $|1\rangle$ が観測される確率振幅 α_{ijk} , β_{ijk} にしたがって, バイナリ情報 p_{ijk} がそれぞれ得られる. ただし, 各量子ビット q_{ijk} は, 次式で表される.

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

ここで, $|\alpha_{ijk}|^2$ は $|0\rangle$ が観測される確率, $|\beta_{ijk}|^2$ は $|1\rangle$ が観測される確率であり, $|\alpha_{ijk}|^2 + |\beta_{ijk}|^2 = 1$ に規格化される.

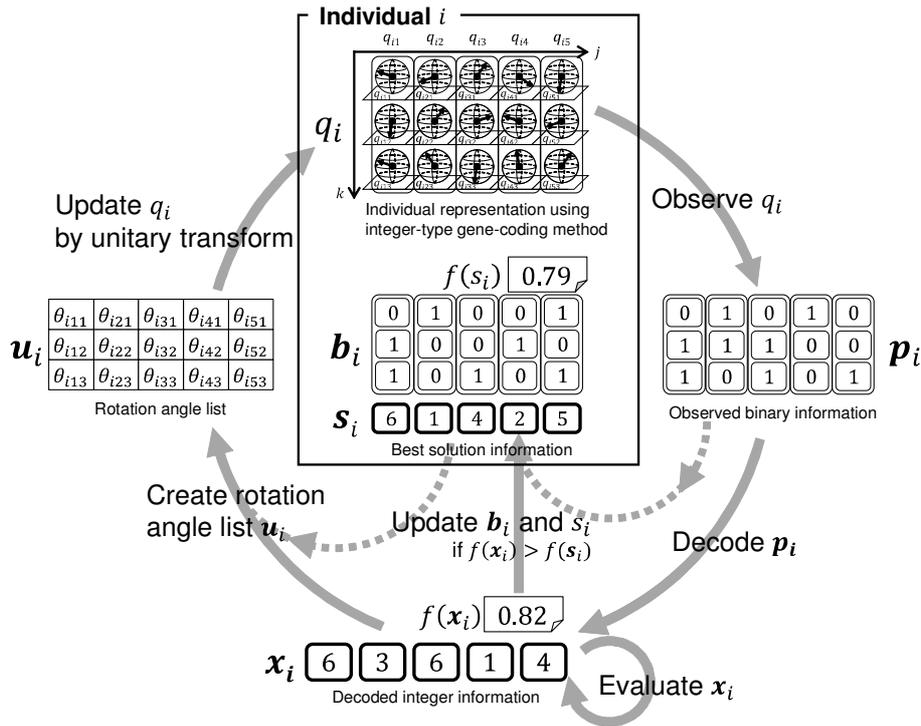


図 4 整数値を解とする IKP における一個体による探索サイクル

Fig. 4 Update cycle of an individual in IKP.

2.2 量子ビット表現に基づくバイナリ型遺伝子表現法

図 2 に示すように、バイナリ型遺伝子表現法 [2], [3] では $h = 1$ とし、各遺伝子座 j には一つの量子ビットが配置される。そのため、各遺伝子座 j の量子ビットを観測することで得られるバイナリ情報 p_{ij} は、1 ビットのバイナリ値となる。バイナリ値の並び p_i がそのまま解となり、染色体 q_i の適応度 $f(p_i)$ は、バイナリ情報 p_i をもとに、CGA と同じように評価される。

2.3 量子ビット表現に基づく整数型遺伝子表現法

整数型遺伝子表現法 [6], [7] では、一つの遺伝子座 j に対して複数の量子ビットを配置し、観測結果として得られるビット列を復号することで整数値を得ている。そのイメージを図 3 に示す。整数型遺伝子表現法では、各遺伝子座 j に配置された量子ビット列 q_{ij} を観測することで得られる h ビットのバイナリ配列 $p_{ij} = [p_{ij1}, p_{ij2}, \dots, p_{ijh}]^T$ を純バイナリコードと解釈することで一つの整数値 x_{ij} を得る。例えば、ビット列 “110” をデコードすることで整数値 “6” が得られる。ビット列 p_{ij} を復号することで得られた整数値 x_{ij} の並びが、解 $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}]$ となる。染色体 q_i の適応度 $f(x_i)$ は、整数情報 x_i をもとに、CGA と同じように評価され、量子ビット表現を用いても整数値を必要とする組合せ最適化問題を解くことができる。

表 1 IKP における回転角度 θ_{ijk} の参照表

Table 1 Lookup table of the rotation angle θ_{ijk} in IKP.

p_{ijk}	b_{ijk}	$f(x_i) > f(s_i)$	θ_{ijk} (for unitary transform)			
			$\alpha_{ij}\beta_{ijk}$	$\alpha_{ijk}\beta_{ijk}$	α_{ijk}	β_{ijk}
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

2.4 IKP における QEA および QEAPS の処理手順

ここでは、整数型遺伝子表現法で表現された個体を用いて、QEA および QEAPS の処理手順の概要を説明する。図 4 は、整数型遺伝子表現を用いた一個体の探索過程を示したものである。なお、 $h = 1$ とし各遺伝子座に一つの量子ビットを配置する、つまり整数情報 x_{ij} が取り得る値をバイナリ値に限定し、また $x_i = p_i$, $b_i = s_i$ とみなすことで、バイナリ型遺伝子表現法を用いた場合の探索サイクルと同様となる。

個体 i は量子ビット表現された染色体 q_i と、それまでの探索で得られた最良解のバイナリ情報 b_i および整数情報 s_i を保持する。まず、個体 i が保持する q_i を観測することで確率振幅に従ったバイナリ情報 p_i を得る。この p_i を復号化することで整数情報 x_i が得られる。このとき、得られた解 x_i が実行可能解でない場合には、 p_i および x_i を実行可能解へと修正する必要がある [7]。

次に、得られた整数情報 x_i を用いて、評価値 $f(x_i)$ を

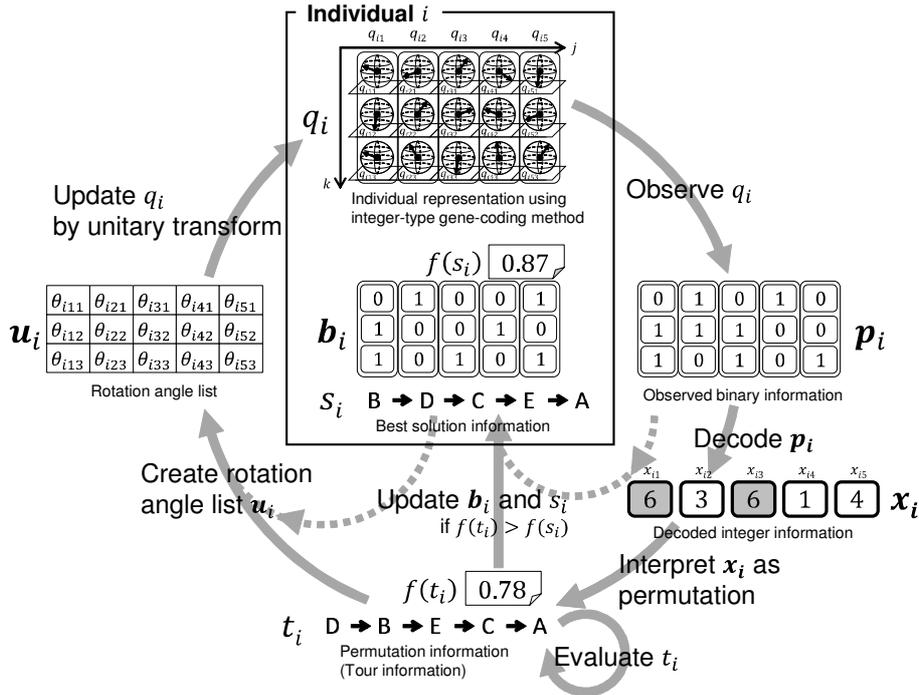


図 5 順列を解とする TSP における一個体による探索サイクル
Fig. 5 Update cycle of an individual in TSP.

計算する．得られた解 x_i がこれまでに得られた最良解 s_i よりも優れている場合には，最良解情報 b_i および s_i をそれぞれ p_i および x_i で更新する．ただし，得られた解を実行可能解へと修正した場合には，修正後のバイナリ情報 p_i および整数情報 x_i で，最良解情報 b_i および s_i をそれぞれ更新する．

得られた解 x_i よりも最良解 s_i の方が優れている場合，得られた解のバイナリ情報 p_i がより最良解のバイナリ情報 b_i に近づくように，量子ビット q_i を回転角度リスト u_i に基づいたユニタリ変換により更新する．回転角度リスト u_i は表 1 に従って作成され，ユニタリ変換は次式で表される．

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

その後，各個体が持つ最良解情報を他の個体へ伝達する手段として，QEA ではサブ母集団単位での 1 世代毎の局所的移住と，母集団単位での一定世代間隔の大域的移住処理を用い [2], [3]，QEAPS では 1 世代毎の対交換処理を用いる [4], [5]．

3. 整数型遺伝子表現法における順列解釈法

ここでは，整数型遺伝子表現法を用いることで得られた整数配列を順列と解釈する，筆者らが提案した二つの手法を概説する．まず，TSP を対象問題とした探索の流れを説明し，その後，二つの順列解釈法の詳細について述べる．

表 2 TSP における回転角度 θ_{ijk} の参照表

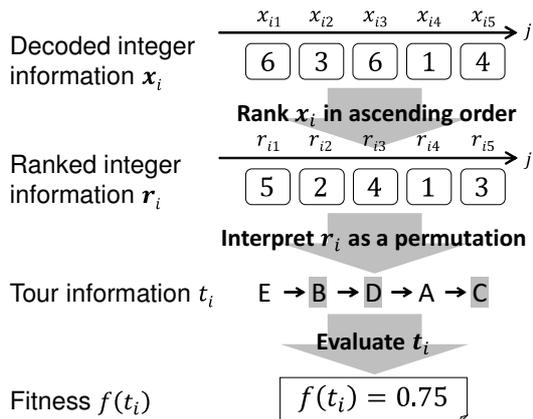
Table 2 Lookup table of the rotation angle θ_{ijk} in TSP.

p_{ijk}	b_{ijk}	$f(t_i) > f(s_i)$	θ_{ijk} (for unitary transform)			
			$\alpha_{ijk}\beta_{ijk}$	$\alpha_{ijk}\beta_{ijk}$	α_{ijk}	β_{ijk}
		> 0	> 0	< 0	$= 0$	$= 0$
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

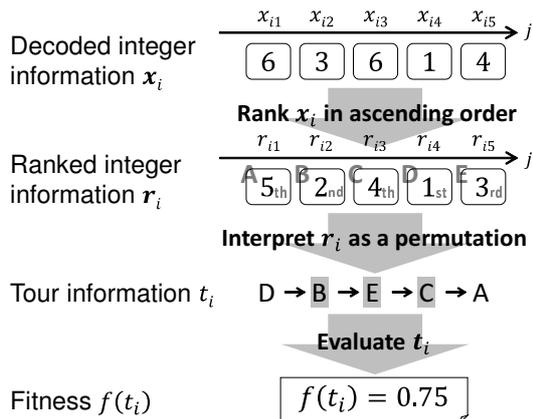
3.1 TSP における QEA および QEAPS の処理の流れ

図 5 は，TSP における一個体の探索過程を示したものである．個体 i は整数型遺伝子表現法を用いて表現された染色体 q_i と，それまでの探索で得られた最良解のバイナリ情報 b_i および順列情報 s_i を保持する．まず，個体 i が保持する q_i を観測することで確率振幅に従ったバイナリ情報 p_i を得る．この p_i を復号化することで整数情報 x_i が得られる．ここで整数情報 x_i には，図 5 における x_{i1} および x_{i3} の整数値 “6” のように，重複する値や遺伝子数の上限 m を超える値が存在する場合がある．そのため，TSP を対象とする場合には x_i を単純には順列として扱えない．そこで，次節に示す順列解釈法を用いて x_i を順列情報 t_i へと変換する．

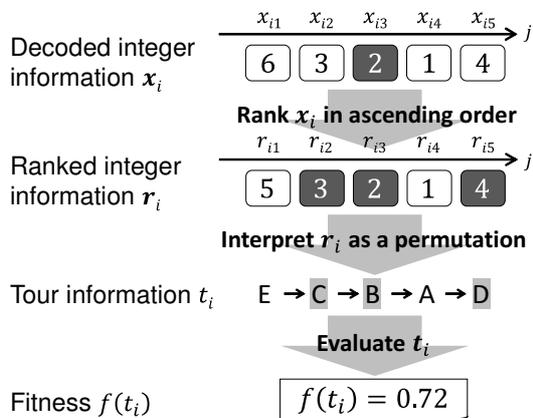
次に，得られた順列情報 t_i を用いて評価値 $f(t_i)$ を計算する．得られた解 t_i がこれまでに得られた最良解 s_i よりも優れている場合には，最良解情報 b_i および s_i をそれぞれ p_i および t_i で更新する．その後，得られた解 t_i よりも最良解 s_i の方が優れている場合，表 2 に従って作成された



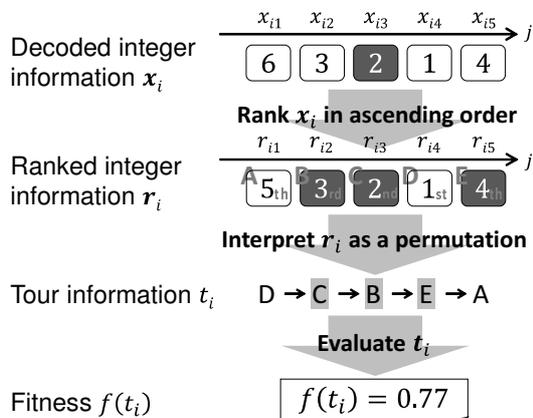
(a) Example 1.



(a) Example 1.



(b) Example 2.



(b) Example 2.

図 6 順列解釈法 \mathcal{I}_1 の解釈手順

Fig. 6 Interpretation process using \mathcal{I}_1

図 7 順列解釈法 \mathcal{I}_2 の解釈手順

Fig. 7 Interpretation process using \mathcal{I}_2

回転角度リスト u_i および、式 (2) で示したユニタリ変換によって、量子ビット q_i の更新を行う。

さらに各個体が持つ最良解情報は、IKP の場合と同様、QEA では二つの移住処理を用いて、QEAPS では対交換処理を用いて他の個体へと伝達される。

3.2 順列解釈法

前述の通り、先行研究における整数型遺伝子表現法では、単純には順列を取り扱うことができない。そこで本研究では、これまでに順列を解とする TSP を対象問題として、整数型遺伝子表現法を用いることで得られる整数情報 x_i を順列へと変換する順列解釈法を提案してきた。以下に解釈手順の詳細を述べる。

基数に基づく順列解釈法 \mathcal{I}_1 図 6 に整数情報 x_i から順列情報 t_i へと解釈する過程を示す。まず、量子ビット q_i の観測結果 b_i から、整数型遺伝子表現法にしたがい整

数情報 x_i を得る。次に、得られた整数情報 x_i から、重複を許さず昇順の順位情報 r_i を求める。その後、順位情報 r_{ij} を j 番目に訪問する都市 $c_{r_{ij}}$ と解釈し、都市 c_1 の都市名を“ A ”，都市 c_2 の都市名を“ B ”，都市 c_3 の都市名を“ C ”，…とすることで巡回路 t_i を得る。例えば図 6(a) の場合、1 番目に訪問する都市 $c_{r_{i1}}$ は c_5 (都市名“ E ”)，2 番目に訪問する都市 $c_{r_{i2}}$ は c_2 (都市名“ B ”)，3 番目に訪問する都市 $c_{r_{i3}}$ は c_4 (都市名“ D ”)，…となり、巡回路 $t_i = E \rightarrow B \rightarrow D \rightarrow A \rightarrow C$ が得られる。

序数に基づく順列解釈法 \mathcal{I}_2 図 7 に整数情報 x_i から順列情報 t_i へと解釈する過程を示す。前述の \mathcal{I}_1 同様、整数型遺伝子表現法を用いることで得られた整数情報 x_i から、重複を許さず昇順の順位情報 r_i を求める。その後、順位情報 r_{ij} を都市 c_j の訪問順と解釈することで、巡回路 t_i を得る。

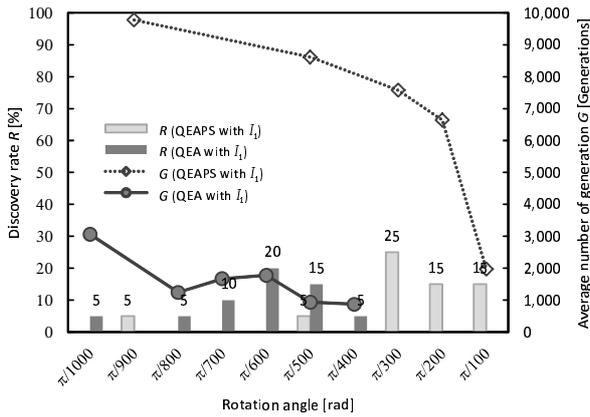


図 8 I_1 を用いた実験結果

Fig. 8 Experimental result in the case of I_1 .

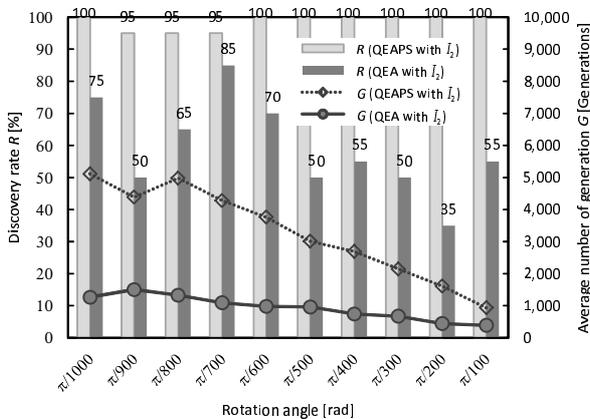


図 9 I_2 を用いた実験結果

Fig. 9 Experimental result in the case of I_2 .

例えば図 7(a) の場合、都市 c_1 (都市名 “A”) の訪問順は 5 番目、都市 c_2 (都市名 “B”) の訪問順は 2 番目、都市 c_3 (都市名 “C”) の訪問順は 4 番目、... となり、巡回路 $t_i = D \rightarrow B \rightarrow E \rightarrow C \rightarrow A$ が得られる。

4. 評価実験および考察

本研究では提案した順列解釈法の探索性能を分析するため、手始めに比較的小規模の小さい TSPLIB*1 のベンチマーク問題である burma14 (都市数: 14, 最短巡回路: $A \rightarrow B \rightarrow N \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow L \rightarrow G \rightarrow M \rightarrow H \rightarrow K \rightarrow I \rightarrow J$, 最短巡回路長: 3,323) を用い、計算機実験を行った。

解探索アルゴリズムには、提案する順列解釈法 I_1, I_2 を実装した QEA および QEAPS を用いた。このとき、遺伝子数の上限 (都市数) $m = 14$ であり、各遺伝子座の量子ビット数 $h = \text{ceil}(\log_2 14) = 4$ となる。QEA, QEAPS 共通のパラメータである個体数を 100 個体、進化の終了条件としての適応度 (巡回路長) の評価回数を 1,000,000 回とし、QEA 特有のパラメータであるグループ数を 5 個、大

*1 <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>

域的移住間隔を 100 世代とした。また、ユニタリ変換時の回転角度 θ_C [rad] を $\theta_C = \{ \pi/1000, \pi/900, \pi/800, \pi/700, \pi/600, \pi/500, \pi/400, \pi/300, \pi/200, \pi/100 \}$ [rad] と変化させて、それぞれ 20 回の試行を行った。

図 8 は順列解釈法 I_1 を用いた実験結果であり、図 9 は順列解釈法 I_2 を用いた実験結果である。20 回の試行の中で最適解を発見できた試行の割合 R を棒グラフで、最適解を発見できた試行における最適解発見までに要した世代数の平均値 G を折線グラフで表している。

アルゴリズムとして QEA および QEAPS を用いたいずれの場合も、順列解釈法として I_2 を用いた方が、 I_1 と比較して、より高い確率で最適解が得られていることが分かる。順列解釈法 I_1 を用いた場合、進化の過程で、例えば図 6 のように、 x_{i3} の値が “6” から “2” へと変更されると、順位が変動する都市 t_2, t_3, t_5 がそれぞれ B, D, C (図 6(a)) から C, B, D (図 6(b)) へと、都市の並びとは無関係に再配置される。一方、順列解釈法 I_2 は、図 6 と同じく、図 7 における x_{i3} の値が “6” から “2” へと変更された場合でも、 x_{i3} に対応する都市 C の訪問順が 2 番目へとシフトされるだけで、順位が変動するその他の都市 B, E の並びは適切に保持される。そのため、順列解釈法 I_2 は I_1 よりも優れた都市の並び (building block) を適切に保持でき、解を優位に探索できたと考えられる。

平均最適解発見世代数 G は回転角度が大きくなるほど短くなっている。また回転角度は、最適解発見率 R の観点から判断すると、QEA では $\theta_C = \{ \pi/700, \pi/600 \}$ [rad] 付近、QEAPS では $\theta_C = \{ \pi/300, \pi/200, \pi/100 \}$ [rad] 付近が適しており、最適な回転角度はアルゴリズムによって異なることが分かる。

5. おわりに

本研究で提案した整数型遺伝子表現法における順列解釈法を用いることで、比較的小規模な TSP ではあるが、QEAPS においては高確率で最適解を得ることができた。今後は、規模の大きな TSP へ適用することで提案する順列解釈法の特徴を詳細に検証し、またより適切な遺伝子表現法について検討していく予定である。

謝辞 本研究は、科研費 (25330265) の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] D. E. Goldberg: *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley, Reading, MA (1989).
- [2] K.-H. Han and J.-H. Kim: Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization, *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, Vol. 6, No. 6, pp. 580–593 (2002).
- [3] K.-H. Han and J.-H. Kim: 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).
- [4] S. Nakayama, T. Imabeppu, and S. Ono: Pair swap strategy in quantum-inspired evolutionary algorithm, *Genetic and Evolutionary Computation — GECCO 2006*, Late Breaking Paper, Seattle, Washington, USA (2006).
 - [5] 中山茂, 今別府孝洋, 小野智司, 飯村伊智郎: 量子風進化的アルゴリズムにおける対交換戦略の検討, *信学論 D*, Vol. J89-D, No. 9, pp. 2134–2139 (2006).
 - [6] I. Iimura, Y. Moriyama, and S. Nakayama: Integer-type gene-coding method based on quantum bit representation in quantum-inspired evolutionary algorithm: Application to integer knapsack problem, *J. Signal Processing*, Vol. 16, No. 6, pp. 495–502 (2012).
 - [7] 飯村伊智郎, 森山賀文, 中山茂: 観測後ビット列の復号処理の違いによる整数型遺伝子の量子ビット表現法に関する探索性能分析, *情処学論*, Vol. 55, No. 2, pp. 1110–1115 (2014).