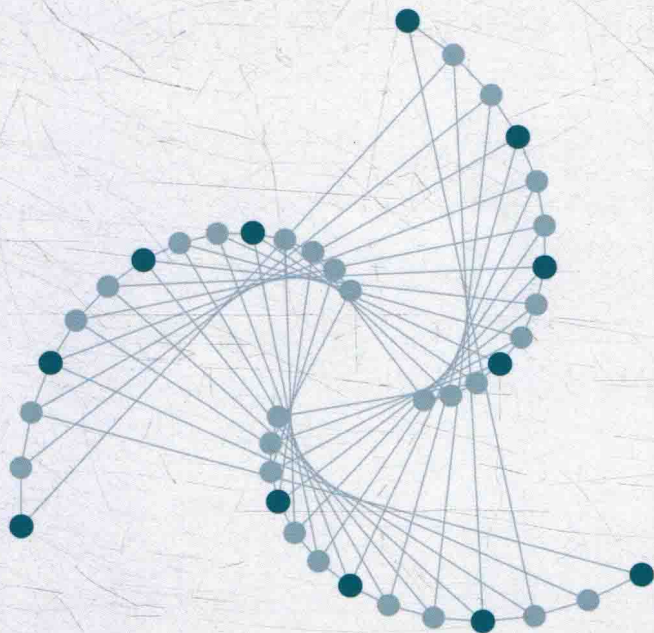


Multi-scale Quantum
Harmonic Oscillator Algorithm

多尺度量子谐振子 优化算法

王鹏 黄焱 李波 谢干河◎著



中国工信出版集团

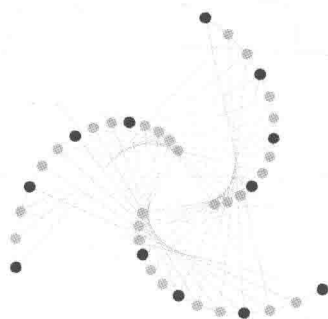


人民邮电出版社
POSTS & TELECOM PRESS

Multi-scale Quantum
Harmonic Oscillator Algorithm

多尺度量子谐振子 优化算法

王鹏 黄焱 李波 谢千河◎著



人民邮电出版社
北京

图书在版编目 (C I P) 数据

多尺度量子谐振子优化算法 / 王鹏等著. -- 北京 :
人民邮电出版社, 2016.9
ISBN 978-7-115-42791-5

I. ①多… II. ①王… III. ①量子—谐振子—最优化
算法—研究 IV. ①0413

中国版本图书馆CIP数据核字 (2016) 第180262号

内 容 提 要

本书以作者在自然计算领域的研究成果为基础, 全面、系统地介绍了一种基于量子谐振子物理模型的新的智能优化算法——MQHOA 算法, 该算法的物理模型明确、算法结构简单, 无需复杂的初始条件设定和参数设置。将 MQHOA 算法用于求解函数优化问题和组合优化问题, 并对算法的物理模型、迭代收敛性和并行性进行理论分析和实验验证。

全书共 7 章, 每章都包含了作者近年的科研成果。本书可作为自然计算算法、人工智能领域开发人员和技术人员的参考书。

◆ 著 王 鹏 黄 焱 李 波 谢千河

责任编辑 邢建春

责任印制 彭志环

◆ 人民邮电出版社出版发行 北京市丰台区成寿寺路 11 号

邮编 100164 电子邮件 315@ptpress.com.cn

网址 <http://www.ptpress.com.cn>

北京天宇星印刷厂印刷

◆ 开本: 880×1230 1/32

印张: 5.25

2016 年 9 月第 1 版

字数: 142 千字

2016 年 9 月北京第 1 次印刷

定价: 49.00 元

读者服务热线: (010) 81055488 印装质量热线: (010) 81055316

反盗版热线: (010) 81055315



前言

Preface

大自然内在结构的美妙一直在召唤着研究智能算法的学者，人工神经网络算法、遗传算法、模拟退火算法、蚁群算法都是向大自然学习的结果。自然界内在精巧的结构所形成的隐含并行计算能力，甚至创造了人类这种高等生物。20 世纪初一群人类历史上最为聪明的科学家如爱因斯坦、玻尔、薛定鄂等共同促成了量子力学这一揭示大自然最深层奥秘理论的诞生，由牛顿所缔造的确定性的世界观被彻底击碎，大自然向人类展现出了一个由不确定性的概率机制所统治的世界，并证明了由不确定性所形成的强大信息处理能力。寻找新的同时具有良好的性能、简洁的结构和完备的数学模型的智能算法是智能算法学者一直在追求的目标。量子力学的基本理论模型为智能算法的研究者提供了取之不尽的思想源泉，量子力学完备的理论框架解决了不少以自然界为模型的智能算法缺乏理论工具的问题。

西南民族大学计算机科学与技术学院并行计算实验室长期以来一直关注量子算法及并行计算这一研究领域。2013 年通过类比量子谐振子运动的物理含义与优化问题之间的对应关系，并根据量子谐



振子波函数的概率解释,提出了一种新的运行于经典计算机系统的量子优化算法:多尺度量子谐振子优化算法(Multi-scale Quantum Harmonic Oscillator Algorithm, MQHOA),本书的主要内容就是对2013年所提出的MQHOA算法的介绍,算法的详细代码见附录A。

同时笔者认为必须尽可能完全地与量子物理模型相吻合才能构造出性能更好的算法,2016年通过引入能级稳定过程对MQHOA算法进行了一次重大的改进,使算法的性能得到了巨大的提升,并使算法的收敛过程与物理模型实现了更好的吻合,算法的主观控制参数减少为一个。新算法的内容在本书第1章中有详细介绍,更为详细的研究内容将在后续的著作中做介绍,但仅从算法应用的角度本书的第1章所介绍的内容已可满足需求,改进算法的详细代码见附录B。

本书的章节安排如下。

第1章为绪论。首先介绍了本书的相关研究背景,然后分析自然计算和量子谐振子算法的研究现状。最后介绍MQHOA算法的最新研究进展。通过引入能级稳定过程,改进的MQHOA算法包括3个基本迭代收敛过程:能级稳定过程、能级降低过程和尺度降低过程,算法的收敛过程与物理模型更加吻合。

第2章介绍了优化问题的建模基本方法,对涉及的TSP优化问题建模方法和聚类中心点优化问题的建模方法进行介绍,并对数据中心需量费用优化问题进行建模、求解。

第3章介绍MQHOA算法的算法流程和物理模型。首先介绍MQHOA算法的基本流程以及算法的数学描述,然后从与经典谐振子物理模型的对应关系、与量子谐振子物理模型的对应关系、波函数、量子隧道效应、测不准关系5个方面对MQHOA算法的物理模型进行介绍。



第4章将MQHOA算法用于求解函数优化问题。首先介绍了多尺度优化函数二进信息采样模型、同一尺度下的量子谐振子搜索聚焦模型,通过实验确定群体参数和采样参数的取值,然后对二维函数和高维函数使用MQHOA算法进行优化,并通过频率变换加速含高频成分函数的收敛进程。

第5章将MQHOA算法用于求解组合优化问题。采用两组城市排列之间的不同位置个数作为函数的自变量,按照这种方法生成邻域解空间,对组合优化问题进行建模,通过对TSP标准测试数据和规则分布的TSP数据进行实验,测试MQHOA算法的性能。

第6章介绍MQHOA算法的迭代收敛特性。首先介绍MQHOA算法收敛过程的物理模型,通过实验验证群体参数和采样参数对算法收敛性的影响,然后对算法的QHO收敛过程和M收敛过程进行理论分析和实验验证。

第7章对MQHOA算法的并行性进行分析。首先介绍MQHOA算法的流程和运行时间,证明MQHOA算法的迭代运算必须串行执行、迭代运算内的采样运算可以并行运行,提出MQHOA算法的3种并行化粒度,通过实验对算法并行性进行分析。

本书的写作由笔者与淮阴师范学院黄焱博士等共同完成,并得到西南民族大学计算机科学与技术学院谈文蓉院长和成都信息工程大学安俊秀教授的大力支持,在此表示衷心的感谢。

作为一种新的智能算法,其不足之处肯定还非常多,大量的理论问题还需要解决,在不同应用领域的应用效果还有待检验。由于基础薄弱,希望能得到更多学者的帮助,有任何的问题需要讨论或需要索取算法源代码请联系:Email: yunzjs@163.com 或QQ群: 432636392。

本书中的研究内容得到了以下基金的资助:



《信号的量子模型及量子去噪算法研究》，国家自然科学基金(60702075)；

《多尺度量子谐振子算法在多目标问题中的应用研究》，2015年模式识别与智能信息处理四川省高校重点实验室开放基金(MSSB-2015-9)；

《量子理论在构建并行机群及算法物理模型中的应用研究》，四川省青年自然科学基金前期资助(09ZQ026-068)；

《时序数据的量子模型构建及量子数据挖掘算法研究》，四川省教育厅自然科学重点项目(07ZA014)。

王鹏

2016年6月25日于西南民族大学并行计算实验室

目 录



Contents

第 1 章 绪论	1
1.1 背景知识	1
1.2 自然计算的研究现状	3
1.3 MQHOA 算法的研究现状	8
1.4 MQHOA 算法的最新研究进展	11
第 2 章 优化问题的建模方法	20
2.1 最优化问题	20
2.2 MQHOA 算法求解 TSP 优化问题的建模方法	21
2.3 MQHOA 算法求解聚类中心点优化问题的建模方法	21
2.4 数据中心需量费用优化问题的建模与求解	23
第 3 章 MQHOA 算法的提出	41
3.1 MQHOA 算法流程和数学描述	41
3.1.1 MQHOA 算法的基本流程	41



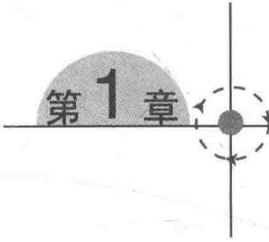
3.1.2	MQHOA 算法流程的数学描述	45
3.2	MQHOA 算法的物理模型	46
3.2.1	MQHOA 算法与经典谐振子物理模型的对应关系	46
3.2.2	MQHOA 算法与量子谐振子物理模型的对应关系	48
3.2.3	波函数	51
3.2.4	量子隧道效应	51
3.2.5	测不准原理	52
3.3	MQHOA、QPSO 和 SA 算法性能的实验对比	54
第 4 章	MQHOA 算法求解函数优化问题	58
4.1	引言	58
4.2	高维函数优化问题的多尺度量子谐振子模型	59
4.2.1	多尺度优化函数二进信息采样模型	59
4.2.2	同一尺度下的量子谐振子搜索聚焦模型	61
4.3	多尺度量子谐振子算法实验分析	62
4.3.1	确定实验中的群体参数 k 和采样参数 m	63
4.3.2	二维函数实验	63
4.3.3	高维函数实验	63
4.3.4	通过频率变换加速含高频成分函数的收敛进程	65
第 5 章	MQHOA 算法求解组合优化问题	68
5.1	引言	68
5.2	组合优化问题的定义	69
5.3	MQHOA 算法求解 TSP 问题的原理及过程	69



5.3.1	量子谐振子波函数所描述的收敛过程	69
5.3.2	多尺度量子谐振子算法的基本收敛过程	70
5.3.3	MQHOA 算法求解 TSP 问题的基本过程	71
5.4	实验结果及讨论	73
5.4.1	MQHOA 算法求解 TSP 标准测试数据	73
5.4.2	MQHOA 算法求解规则分布的 TSP 问题	77
5.4.3	MQHOA 算法求解 TSP 问题的收敛特性分析	78
第 6 章	MQHOA 算法的迭代收敛特性	80
6.1	MQHOA 算法收敛过程和参数选择	80
6.1.1	MQHOA 算法的收敛过程	80
6.1.2	k 、 m 参数的选择对算法收敛性的影响	81
6.2	MQHOA 算法的 QHO 收敛过程研究	84
6.2.1	QHO 收敛过程的收敛性分析	84
6.2.2	QHO 收敛过程中的波函数收敛定理	85
6.2.3	QHO 收敛过程中的能量变化	88
6.2.4	QHO 收敛过程中的测不准关系	90
6.2.5	QHO 收敛过程的波函数特性	93
6.3	MQHOA 算法的 M 收敛过程研究	95
6.3.1	M 收敛过程分析	95
6.3.2	M 收敛过程实验	96
第 7 章	MQHOA 算法的并行性研究	99
7.1	引言	99



7.2	MQHOA 算法的运行时间分析	100
7.3	MQHOA 算法的并行化特性	101
7.3.1	MQHOA 算法的并行方法	101
7.3.2	MQHOA 算法的 3 种并行粒度	102
7.3.3	根据采样参数选择 MQHOA 算法的并行粒度	105
7.4	MQHOA-P 算法的运行流程	106
7.5	MQHOA-P 算法的并行化性能分析	106
7.6	MQHOA-P 算法的实验验证	108
附录 A	MQHOA 算法核心代码	112
附录 B	具有能级稳定过程的 MQHOA 算法的 Matlab 代码	121
附录 C	主要的函数优化测试函数	126
参考文献		147



第 1 章

Chapter 1

绪 论

1.1 背景知识

“阿尔法狗”战胜了人类棋王，引发了全球范围内对人工智能的大讨论。自然计算是人工智能的有效实施模式，大自然的信息处理机制是自然计算不断发展的本源，为人工智能的发展提供源源不断的动力。自然计算（Nature-inspired Computation, NIC）是指以自然界的功能、特点和作用机制为基础，研究蕴含丰富的信息处理机制，抽取相应的计算模型，设计相应的算法，并在各领域加以应用^[1]。

自然计算涉及的学科领域众多，包含上百种算法类型，近年来不断有新的自然计算算法涌现出来，自然算法的启发源包含物理模型启发源、化学类启发源、生命类系统启发源、生物群类启发源、生态系统类启发源、社会文化类启发源等。

利用物理模型构造优化算法是一种非常有效的算法构造方法，其中最著名的优化算法是基于 1953 年提出的 Metropolis 选择准则^[2]构造的模拟退火算法（Simulated Annealing, SA）^[3]，后来 Kirkpatrick 等将其成功地应用于组合优化问题^[4, 5]，SA 算法通过多次等温迭代使算法达到低温条件下的平衡态。但模拟退火算法计算时间较长，



控制参数较多, 并且对参数敏感, 其参数的变化本身就是一个需要进行研究的课题^[6], 所以在实际应用时多与其他优化算法结合使用。基于量子理论的退火算法——量子退火算法 (Quantum Annealing, QA) 20 世纪 90 年代被提出^[7], 引起了物理学界和计算机科学界的广泛关注, 文献[8]分析了量子退火算法在 DMC (Diffusion Monte Carlo) 过程中通过量子隧道效应跳出局部最优区域的过程, 对于量子隧道效应的利用是不少量子算法实现全局优化的重要方法。文献[9]对比了经典退火算法和量子退火算法对谐振子势能、双阱势能和抛物线势能函数的优化性能。文献[10]利用 Ising 模型这一描述相互作用粒子最简单的模型, 利用材料在温度降低后系统从混乱到有序, 在外加磁场的作用下呈现出顺磁性这一原理构造优化算法。量子波函数的概率解释与优化算法随机求解过程的相似性, 使基于量子物理模型的优化算法成为未来构造新的优化算法的一个重要研究方向, 量子退火算法利用了量子波函数的概率特性, 物理模型较为完备但模型的数学过程复杂, 算法实现困难, 算法实际性能也未能得到有效的证实^[11], 所以应用并不广泛^[12]。近年还出现了一种新的量子粒子群算法 (Quantum-behaved Particle Swarm Optimization, QPSO)^[13,14], 该算法利用 δ 势阱下的量子波函数构造粒子进化公式, 通过不断减小特征长度逐步实现局域化的新解采样从而达到算法收敛的目的, 该算法需要人为指定迭代次数, 并且由于使用的 δ 势阱对应的波函数收敛速度过快对算法求解精度造成了影响。文献[15]使用了谐振子势阱构造算法, 算法并未有效利用量子谐振子的波函数完整模型, 对于多个函数的测试表明算法的性能稳定性和精度都不高。

依据谐振子物理模型及量子谐振子波函数的概率解释, 本书构造了一种新的全局优化算法——多尺度量子谐振子算法 (Multi-scale Quantum Harmonic Oscillate Algorithm, MQHOA), 对其求解函数优化、组合优化问题的性能进行研究, 并分析其物理模型、收敛性和并行性。



1.2 自然计算的研究现状

1. 按照启发源

按照启发源对自然计算进行如下分类^[1]。

(1) 基于物理模型启发源的自然计算算法包含模拟退火算法、量子计算、光子计算、混沌优化、云计算模型算法等。

(2) 基于化学类启发源的自然计算算法包含化学反应计算、分子计算等。

(3) 基于生命类系统启发源的自然计算算法包含进化计算、差分进化、神经计算、免疫计算、内分泌计算、元胞自动机、膜计算、DNA 计算、蛋白质计算等。

(4) 基于生物群类启发源的自然计算算法包含蚁群算法、粒子群算法、蜂群算法、鱼群算法、细菌觅食算法、群搜索算法、细菌群驱药性算法、搜索者优化算法等。

(5) 基于生态系统类启发源的自然计算算法包含生物地理学优化算法、自组织迁移算法、人口迁移算法等。

(6) 基于社会文化类启发源的自然计算算法包含形式语言、模糊计算、计算动词理论、文化算法、Memetic 计算、多主体系统、社会认知算法、情感计算等。

这些算法的思想启发源、提出时间、提出者和代表性论文如表 1.1 所示^[1]。

表 1.1 自然计算算法

算法名称	思想启发源	提出时间 (年)	提出者	文献
遗传算法	模拟达尔文的遗传选择和自然淘汰的生物进化过程	1975	John Holland	[16]
差分进化	模拟自然界生物进化机制, 基于种群内的个体差异度生成临时个体, 通过随机重组进化	1997	Storn R	[17]
分布估计算法	将自然进化算法和构造性数学分析方法相结合	1996	Muhlenbein H	[18]



续表

算法名称	思想启发源	提出时间 (年)	提出者	文献
RBF 网络	人类大脑皮层中神经细胞对外界反应的局部调节	1987	Powell M	[19]
自组织映射	自组织特征映射网络	1981	Kohonen T	[20]
模拟退火算法	模拟物理退火的原理	1983	Kirkpatrick S	[21]
蚁群算法	蚂蚁觅食行为,通过正反馈和分布式协作来寻找最优路径	1991	Dorigo M	[22]
粒子群算法	鸟群运动模型	1995	James Kennedy	[23]
蜂群算法	模拟蜜蜂的繁殖和采蜜行为	1991	Dorigo M	[24]
鱼群算法	模拟鱼群的觅食行为	2002	李晓磊	[25]
群搜索优化	自然界群居动物寻找生存资源的群体行为	2006	He S	[26]
搜寻者优化算法	模拟人群搜索行为	2010	Dai C H	[27]
细菌觅食算法	基于 Ecoli 大肠杆菌在人体肠道内吞噬食物的行为	2002	Passino K M	[28]
细菌群驱药性算法	细菌群驱药性运动	2005	李威武等	[29]
DNA 计算	模拟生物分子结构并借助于分子生物技术进行计算	1994	Adleman L M	[30]
膜计算	从生命细胞在分层结构中处理化合物的方式抽象出计算模型	1998	Paun G	[31]
复杂自适应计算	经济、生态、神经系统及计算机网络等系统的行为	1994	John Holland	[32]
人工免疫系统	借鉴自然免疫系统机制来模拟免疫学功能、原理和模型	1998	Dipankar Dasgupta	[33]
人工内分泌系统	基于人体内分泌系统的信息处理机制	2003	Mark Neal 和 Jon Timmis	[34]
生物地理学优化	模拟生物种群在栖息地的分布、迁移和灭绝规律	2008	Dan Simon	[35]
自组织迁移算法	社会环境下群体的自组织行为	2000	Ivan Zelinka	[36]
人口迁移算法	模拟人口迁移机制	2003	周永华	[37]
量子计算	量子态的叠加、纠缠等特性,量子并行计算	1994	Shor P	[38]
		1996	Grove L	[39]
Memetic 算法	拉马克主义的文化进化	1989	Moscato P	[40]
文化算法	拉马克主义的文化进化	1994	Reynolds G	[41]



续表

算法名称	思想启发源	提出时间 (年份)	提出者	文献
社会认知优化	社会认知理论	2002	Xie X F	[42]
情感计算	赋予计算机情感能量	1997	Picard R W	[43]
MQHOA 算法	量子谐振子运动的物理含义、 量子谐振子波函数的概率解释	2013	王鹏	[44,45]

2. 按照搜索策略

按照算法的搜索策略可以将搜索算法分为盲目搜索和启发式搜索^[46]两种类型。盲目搜索是指按照预先设定好的搜索策略进行搜索,并且不根据搜索过程中获得的中间信息更改控制策略;反之成为启发式搜索。盲目搜索包含深度优先搜索、广度优先搜索、代价优先搜索等;启发式搜索包含爬山算法、模拟退火算法、粒子群算法、蚁群算法等。

下面简要介绍本书用到的比较算法:模拟退火算法和粒子群算法。

(1) 模拟退火算法

模拟退火算法的基本思想源自固体退火,是一种基于概率的算法,先将固体的温度升至足够高,然后再使其温度缓慢下降。升温时,固体内部粒子随温升变为无序状态,内能增大,而温度下降时粒子逐渐趋于有序状态,在每个温度都达到平衡态,最后在常温时达到基态,内能减为最小。

模拟退火算法引进了一定的随机因素,可以以一定的概率接受比当前解更差的解,这样可以有效避免出现贪心算法陷入局部最优解的问题,以一定的概率跳出局部最优区域,求得获得全局最优解。

经典模拟退火算法的基本流程如下。

随机产生一个初始解 x_0 , 计算目标函数值 $E(x_0)$;

设置初始温度 $T(0)$;

Do while $T(i) > T_{\min}$

for $j=1, \dots, k$



对当前最优解 x_{best} 按照某一邻域函数生成一组新解 x_{new} ，计算新的目标函数值 $E(x_{\text{new}})$ ，并计算目标函数值的增量 $\Delta E = E(x_{\text{new}}) - E(x_{\text{best}})$

if $\Delta E < 0$, $x_{\text{best}} = x_{\text{new}}$
 else $p = \exp(-\Delta E / T(i))$
 if $c = \text{random}[0,1] < p$, $x_{\text{best}} = x_{\text{new}}$; else $x_{\text{best}} = x_{\text{best}}$

End for

$i = i + 1$;

End Do

可以看出，温度越高出现降温的概率越大，温度越低出现降低的概率越小。初始温度越高获得高质量解的概率越大，但花费的时间增加，因此，初始温度的选择需要折衷考虑优化质量和优化效率。

其中，状态转移概率一般采用如下 Metropolis 准则

$$p = \begin{cases} 1, & E(x_{\text{new}}) < E(x_{\text{old}}) \\ \exp\left(-\frac{E(x_{\text{new}}) - E(x_{\text{old}})}{T}\right), & E(x_{\text{new}}) \geq E(x_{\text{old}}) \end{cases} \quad (1.1)$$

冷却进度表是指从某一高温状态 T_0 向低温状态冷却时的降温管理表，经典模拟退火算法的降温方式为 $T(t) = \frac{T_0}{\lg(1+t)}$ ，快速模拟退

火算法的降温方式为 $T(t) = \frac{T_0}{1+t}$ [47]。

模拟退火算法适合用于求解 TSP 问题，其主要步骤如下。

Step1: 产生一条新的遍历路径 $P(i+1)$ ，计算路径 $P(i+1)$ 的长度 $L(P(i+1))$ 。

Step2: 若 $L(P(i+1)) < L(P(i))$ ，则接受 $P(i+1)$ 作为新的路径，否则以模拟退火的那个概率接受 $P(i+1)$ ，然后降温。

Step3: 重复 Step1 和 Step2 直到满足退出条件。

其中，产生新的遍历路径的方法有很多，如可以随机选择 2 个