

# 基于多量子滤波器的 QCNN 算法预测 厌氧消化性能



董玉民\*, 侯 栋, 耿馨雨, 胡万斌

(重庆师范大学计算机与信息科学学院 重庆 沙坪坝区 401331)

**【摘要】**厌氧消化是可再生能源生产中一种具有前景的技术, 沼气是由有机废物通过厌氧消化产生的生物能源, 预测厌氧消化产生的沼气产量并进行管控是必要的。设计了一种具有短期记忆的多量子滤波器量子卷积神经网络, 利用参数化变分量子电路接受数据“时间窗”以模拟短期记忆, 并在多量子滤波结构中舍弃过多的线路迭代和参数数量使其具有更高的表达性。在量子线路框架中, 设计了最优的卷积、池化层线路, 能够更好地提取特征因子中的隐藏状态; 同时对废物管理数据进行严格的预处理, 通过指数平滑去除特征中趋势和季节性。该算法的精度达到了 83.30%, 比 CNN 模型精度提升了 8%, RMSE 和 MAE 值也均优于 ANN、KNN、CNN 等经典模型。

**关键词** 厌氧消化; 多量子滤波器; 短期记忆; 变分量子电路

**中图分类号** TP389.1 **文献标志码** A **doi**:10.12178/1001-0548.2022268

## QCNN Algorithm Based on Multi-Quantum Filter to Predict Anaerobic Digestion Performance

DONG Yumin\*, HOU Dong, GENG Xinyu, and HU Wanbin

(School of Computer and Information Science, Chongqing Normal University Shapingba Chongqing 401331)

**Abstract** Anaerobic digestion is a promising technology in the production of renewable energy, in which biogas is the biological energy generated by anaerobic digestion of organic waste. It is necessary to predict and control biogas yield from anaerobic digestion. A multi-quantum filter quantum convolutional neural network with short-term memory is designed. The designed network utilizes the parameterized variational quantum circuit to accept the data 'time window' so as to simulate the short-term memory, and discards too much circuit iteration and parameter number of the multi-quantum filter to make the filter more expressive. In the quantum circuit framework, the optimal convolution and pooling layer circuits are designed to better extract the hidden states in the feature factors. At the same time, the waste management data are strictly preprocessed, and the trend and seasonality in the characteristics are removed by exponential smoothing. The accuracy of the proposed algorithm reaches 83.30%, which is 8% higher than that of the convolutional neural network model (CNN). The root mean square error (RMSE) and mean absolute error (MAE) values are also better than those of artificial neural network (ANN), K-nearest neighbor (KNN) and CNN classical models.

**Key words** anaerobic digestion; multi-quantum filter; short term memory; variational quantum circuit

近年来, 利用厌氧消化生产生物能源成为一种趋势, 越来越多的废物管理厂利用厌氧消化分解有机废物来生产甲烷<sup>[1]</sup>。由于甲烷的可燃性可以用来产生热能和电能, 因此利用厌氧消化生产生物能源具有巨大的潜力<sup>[2]</sup>。但厌氧消化是一个复杂的过程, 多样的有机物被厌氧微生物分解成甲烷和硫化

氢等产物, 所以需要对该问题进行数学建模。机器学习算法的兴起<sup>[3]</sup>和量子计算领域的发展<sup>[4-5]</sup>为创建一个精确的沼气预测模型提供了可能。机器学习方法有助于在大规模维度空间的数据中提取信息, 新兴的量子算法具有计算效率高的优势, 因此机器学习与量子计算的结合是一种趋势。

收稿日期: 2022-08-02; 修回日期: 2022-08-23

基金项目: 国家自然科学基金(61772295, 61572270); 重庆市教委科学技术研究项目(KJZD-M202000501); 重庆市技术创新与应用发展项目(cstc2020jcsxlyjsAX0002); 重庆市技术预见与制度创新项目(cstc2021jsyj-yzysbAX0011)

作者简介: 董玉民(1966-), 男, 博士, 教授, 主要从事量子计算方面的研究。

\*通信作者: 董玉民, E-mail: dym@cqnu.edu.cn

为了稳定甲烷的产量, 必须对厌氧消化过程进行建模, 预警调控对系统的运行非常重要。目前对于厌氧消化的建模主要分为线性回归模型和神经网络模型, 但线性回归模型仅对具有线性关系的体系有好的预测效果。传统的神经网络模型如卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 具有训练时间慢、准确率低等问题, 因此本文开发了一种多量子滤波器量子卷积神经网络 (quantum convolutional neural network, QCNN)。在计算效率上由于量子态的叠加与并行计算能力的存在, 使得量子计算比经典计算具有更高的优势, 同时又结合了量子计算和 CNN 的优点, 表现出更优异的性能。量子机器学习领域最早可追溯到 1995 年, 文献 [6] 最先提出量子神经计算的概念。随后几年又涌现了其他的量子神经网络, 如文献 [7] 提出的基于点神经网络模型, 文献 [8] 提出量子细胞神经网络, 文献 [9] 提出的使用量子叠加态表示网络。其中, 卷积神经网络 (CNN) 是人工神经网络的一个子集, 由一系列卷积层和池化层组成, 用于收集权重和偏差进行预测, 对给定的数据集进行预测<sup>[10]</sup>。卷积神经网络的输入是 2D 矩阵, 修改它们接受一维输入可以用来回归<sup>[11]</sup>; 文献 [12] 使用机器学习算法模型, 通过微生物群落组成预测类型; 目前经典的算法有神经网络<sup>[13]</sup>、支持向量机<sup>[14]</sup>、随机森林<sup>[15]</sup>和 KNN<sup>[16]</sup>等, 可以在回归或分类模型中实现预测。遗传算法自 20 世纪以来已经应用于各种领域<sup>[17-19]</sup>, 文献 [20] 使用 GA (genetic algorithm) 不仅优化了甲烷生产效率, 还确定了厌氧消化的最佳操作时间<sup>[20]</sup>; 文献 [21] 利用 GA 对乳制品废水进行预测, 利用 GA 减少影响参数。蚁群算法利用化学信息素轨迹解决优化问题<sup>[22-24]</sup>, 文献 [25] 通过 ACO (ant colony optimization) 连续优化实现了污水污泥和食品废物共消化的最佳基质组成, 模拟结果使沼气产量最大化; 文献 [26] 将 ACO 用于牛粪共消化的参数选择, 应用于流程建模和流量预测。此外, 输入特征的选择对厌氧消化过程也能产生很大影响。本文提出的模型消除了时间序列数据存在的趋势和季节性偏差的影响, 使数据保持平稳, 验证了量子体系回归模型预测沼气产量的可行性。

本文实现了一种多量子滤波器的混合量子经典卷积神经网络, 旨在完成以下目标: 1) 对时间序列数据进行严格的预处理并进行数据类型转换, 满足 QCNN 模型输入; 2) 提出一种改进的 QCNN 模型, 模拟输入特征的短期记忆, 接受类似的数据时

间窗模拟短期记忆, 提升预测时间序列数据的性能; 3) 对量子体系模型评估, 实验证明模型的预测效果。

## 1 相关工作

### 1.1 量子计算

和经典的比特相似, 量子计算的基本单位叫做量子比特, 量子比特的状态描述了其具有的属性<sup>[27]</sup>。传统的经典比特用 0、1 表示, 在量子计算理论中, 用狄拉克符号表示:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

量子比特处于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  之间, 称为量子叠加态:  $|\phi\rangle = a_1|0\rangle + a_2|1\rangle$ ,  $a_1$ 、 $a_2$  叫做振幅, 并且满足  $a_1^2 + a_2^2 = 1$ 。当  $a_1$ 、 $a_2$  任意一个为 0 时, 变成了构成向量空间的正交基。其中, 任意一个态都可以写作基在复数空间的线性组合, 即:

$$|\phi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (2)$$

量子逻辑门是实现量子变换的关键, 可以通过对量子态应用一系列量子逻辑门实现变换, 也可以描述为希尔伯特空间上的幺正算符, 下面介绍几种常用的量子门。

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

XX (或 Ising) 类的门有坐标 CAN(t, 0, 0), 这构成了威尔室的前缘。这包括身份和 CNOT 门, 如式 (4) 所示:

$$XX(t) = e^{-i\frac{\pi}{2}tX \otimes X} =$$

$$\begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\pi}{2}t\right) & 0 & 0 & -i\sin\left(\frac{\pi}{2}t\right) \\ 0 & \cos\left(\frac{\pi}{2}t\right) & -i\sin\left(\frac{\pi}{2}t\right) & 0 \\ 0 & -i\sin\left(\frac{\pi}{2}t\right) & \cos\left(\frac{\pi}{2}t\right) & 0 \\ -i\sin\left(\frac{\pi}{2}t\right) & 0 & 0 & \cos\left(\frac{\pi}{2}t\right) \end{bmatrix} =$$

$$\text{CAN}(t, 0, 0) \quad (4)$$

XX 门是两个 X 门的张量积, 所谓的张量积, 也就是假如给我们两个独立的量子位, 一个为状态  $\psi = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ , 另一个为状态  $\phi = \begin{bmatrix} \gamma \\ \delta \end{bmatrix}$ , 相应的两个量子位状态由张量积 (或矢量的 Kronecker 积) 确定, 其定义如式 (5) 所示:

$$\psi \otimes \phi = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \gamma \\ \delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \begin{bmatrix} \gamma \\ \delta \end{bmatrix} \\ \beta \begin{bmatrix} \gamma \\ \delta \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha\gamma \\ \alpha\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{bmatrix} \quad (5)$$

所以 XX 门如式 (6) 所示:

$$X \otimes X = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

### 1.2 经典卷积神经网络

CNN 是把一个个的神经元以一定的拓扑结构

连接起来的网络, 组合成更高效的网络架构。经典的 CNN(如图 1 所示) 由三部分组成: 卷积层、池化层和全连接层, 各层神经元以宽、高、深度三维排列。在该架构中, 将 CNN 应用于多变量时间序列回归。CNN 的输出权重传递到 MLP(multi-layer perception) 中, 并用于沼气产量估计。沼气的特征作为卷积层的输入, 并且在最后的卷积之后, 将特征图连接成一个平坦向量, 作为沼气产量估计的 MLP 输入。训练模型使用 Adam 优化器反向传播, 采用 LeakyRelu 激活函数进行评估, 再从卷积算子、偏差项和连续层的特征映射来获得输出。

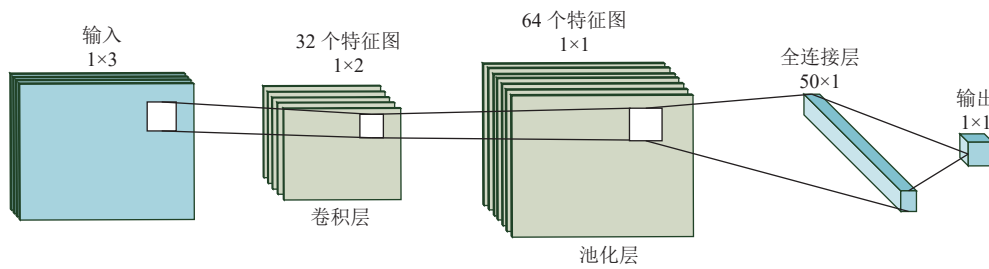


图 1 经典卷积神经网络模型

$$z_j^l = \text{lrelu}(z_j^l) \quad (7)$$

$$z_j^l = \sum_i x_i^{l-1} \odot k_{ij}^l + b_j^l \quad (8)$$

式中,  $x_i^{l-1}$  和  $x_j^l$  分别是卷积滤波器的输入和输出;  $\odot$  表示卷积算子;  $k$  表示卷积核;  $b$  表示偏差项;  $\text{lrelu}()$  表示 LeakyRelu 函数;  $z_j^l$  表示 LeakyRelu 的输入。

## 2 QCNN 算法

### 2.1 量子数据编码

对于 QCNN 模型, 需要将输入数据  $X$  编码成量子态,  $X \rightarrow \mathcal{H}$  也就是执行量子特征映射,  $\mathcal{H}$  是希尔伯特空间, 对于量子计算这种映射是必须的。量子位编码将一个数据点  $x_i$  编码到单个量子位中, 即  $|\phi(x_i)\rangle = \cos\left(\frac{x_i}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{x_i}{2}\right)|1\rangle$ , 其中,  $i=1, 2, \dots, N$ 。量子编码将  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$  的输入数据编码到  $N$  个量子比特中, 如式 (9) 所示:

$$U_\phi(x) : x \in \mathbb{R}^N \rightarrow |\phi(x)\rangle = \otimes_{i=1}^N \left( \cos\left(\frac{x_i}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{x_i}{2}\right)|1\rangle \right) \quad (9)$$

通过沿  $X$  轴和  $Y$  轴旋转将输入特征编码。状态准备酉算子  $S_{x_j} = \otimes_{i=1}^N U_i$  由式 (10) 给出:

$$U_i := \begin{bmatrix} \cos(x_j^{(i)}) & -\sin(x_j^{(i)}) \\ \sin(x_j^{(i)}) & \cos(x_j^{(i)}) \end{bmatrix} \quad (10)$$

如图 2 所示, 将  $t-2$ 、 $t-1$  和  $t$  处的输入特征量分别在  $X$  轴和  $Y$  轴上旋转, 应用一系列  $R_x$  和  $R_y$  变换。每根导线接受一个输入量子位, 把输入数据转换成量子态的旋转角度,  $R_x$  和  $R_y$  分别表示单量子位绕  $X$ 、 $Y$  轴旋转角度  $\alpha$ , 如式 (11) 所示:

$$R_x(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$R_y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (11)$$

### 2.2 量子卷积、池化

转换后的量子态输入向量进入量子卷积, 进行一系列的么正变换。两个相邻量子位之间应用量子卷积  $U^c$  提取特征, 通过卷积电路寻找信息的隐藏状态, 卷积层由不同的单量子门和双量子门组合形成,  $U^p$  为量子池化。如图 3 所示,  $U^c$  和  $U^p$  分别是一组最优的参数化量子电路。在单量子旋转门  $\{R_i = R(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)\}$  中, 分别沿  $X$ 、 $Y$  和  $Z$  轴旋转角度  $(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$ , 其中, 更新旋转门的参数是随机的, 并会在基于共轭梯度法的迭代优化中更新参数。池化层  $U^p$  对量子位应用量子门, 但只追踪一个量子位, 降低特征映射的维数, 从而减少量子系统的尺寸, 最后测量期望值。

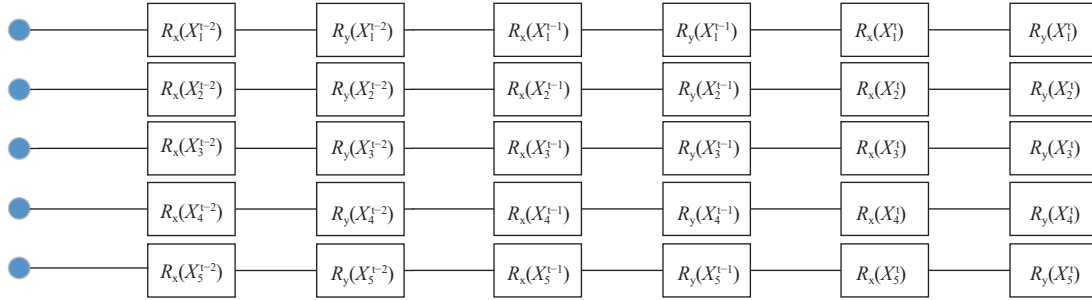


图 2 时间窗 QCNN 模型的密集角编码量子电路

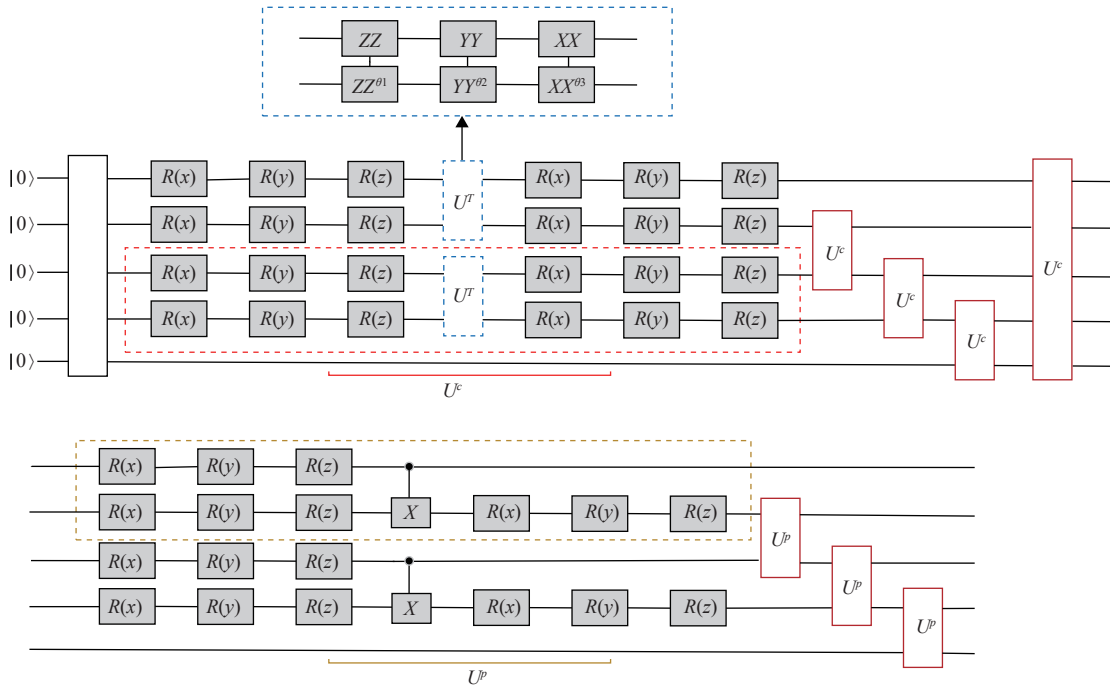


图 3 时间窗 QCNN 模型的卷积池化层量子电路

单比特的参数化量子门如式 (12) 所示:

$$\begin{cases} X^t \simeq R_X(\pi t) = e^{-i\frac{\pi}{2}tX} \\ Y^t \simeq R_Y(\pi t) = e^{-i\frac{\pi}{2}tY} \\ Z^t \simeq R_Z(\pi t) = e^{-i\frac{\pi}{2}tZ} \end{cases} \quad (12)$$

两比特的参数化量子门如式 (13) 所示:

$$\begin{cases} U_{XX}(t) \simeq e^{-i\frac{\pi}{2}tX \otimes X} \\ U_{YY}(t) \simeq e^{-i\frac{\pi}{2}tY \otimes Y} \\ U_{ZZ}(t) \simeq e^{-i\frac{\pi}{2}tZ \otimes Z} \end{cases} \quad (13)$$

图 3 中的  $U^T$  是一个典型的规范门  $U_{CAN}$ :

$$U_{CAN} = \exp\left(-i\frac{\pi}{2}(t_x X \otimes X + t_y Y \otimes Y + t_z Z \otimes Z)\right) \quad (14)$$

### 2.3 多滤波 QCNN

通过研究输入特征的自相关周期, 分析得输入特征  $n$  的时间窗口为 3, 将 3 天的“时间窗”数据提供给模型, 作为输入特征的短期记忆。每个电路代表  $t=t-2$ 、 $t=t-1$ 、 $t=t$  处的离散数据点, 这些电路被堆叠并作为 QCNN 的输入。为了给模型提供历

史数据, 通过串联  $t=t-2$ 、 $t=t-1$ 、 $t$  输入的电路构建更大的量子电路。

考虑到电路深度和整体电路表达性, 不必使用量子卷积使量子位数降低到一个, 可以选择一到两轮量子卷积并将结果输入到经典网络。如表 1 所示, 单量子滤波器 QCNN 整体电路包含 63 个参数, 比较高的电路深度和较多的可变参数数量可能会导致更大的噪声。本文设计了多量子滤波器 QCNN, 结合量子的并行计算能力和神经网络的处理信息能力, 能达到更好的效果。卷积运算涉及在相邻量子位之间应用量子逻辑门, 池运算通过测量量子位或应用多个量子位门来降低量子模型维数。卷积层和池化层依次应用, 减少量子系统的维度空间。模型舍弃过多的电路迭代, 只采取一轮迭代, 应用 21 个可变参数数量, 并将 3 个量子滤波器的输入分别传递到全连接神经网络以获得 MSE(mean square error), 从而优化参数。也就是在所有位上

应用读出量子比特  $Z$ , 然后衔接全神经网络,  $Z$  轴变换用于测量量子比特的量子态, 并获得模型对产生的沼气的估计期望值。模型用微分器作为量子梯度下降函数, 并使用 Adam 优化器估计 QCNN 参数进行模型训练。在适度的经典辅助下, 能实现更好的效果。多滤波器 QCNN 模型如图 4 所示。

表 1 单量子滤波器和多量子滤波器 QCNN 模型对比

Type	滤波器	参数数量
单量子滤波器 QCNN	1	63
多量子滤波器 QCNN	3	21

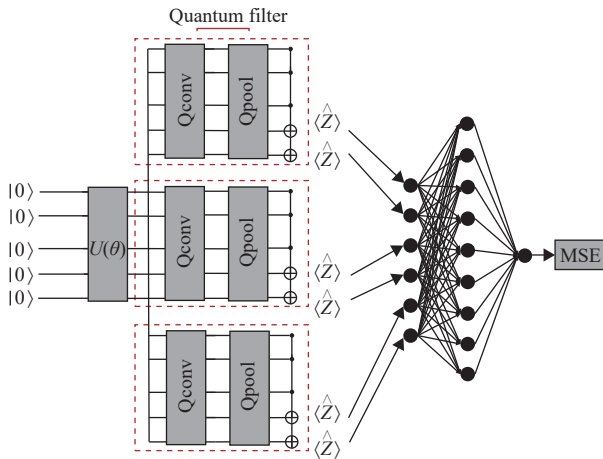


图 4 多量子滤波器 QCNN 模型: 编码层、变分层和经典层

如图 4 所示, 在量子门的作用下, 辅助比特与其他量子比特相连, 用辅助量子比特寄存变换结果。其测量为非线性变换, 相当于激活函数作用。在  $P$  个量子比特展开的  $o = 2^P$  维希尔伯特空间中, 量子态  $|\psi_X\rangle$  向  $|\psi_W\rangle$  上投影, 其中,  $|\psi_X\rangle$  是携带权重向量  $W_i$  的量子态, 就得到了变换结果  $z = \langle \psi_X | \psi_W \rangle$ , 然后通过  $U(\theta)$  将  $Z$  编码到基底  $|t\rangle$  上, 如式 (15) 所示:

$$U(\theta)|\psi_X\rangle = \sum_{j=0}^n c_j|t\rangle \quad (15)$$

把  $z = \langle \psi_X | \psi_W \rangle$  编码到  $o$  维的希尔伯特空间的基底  $|11\dots\rangle$  上, 即  $U(\theta)|\psi_X\rangle$  与  $|11\dots\rangle$  共线, 如式 (16) 所示:

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} W_1 & W_2 & \dots & W_o \end{pmatrix} \quad (16)$$

酉矩阵  $U(\theta)$  不是唯一的, 可以选择不同的量子电路获取更好的效果, 因此如何选取电路也是一个重点研究方向。

参数化量子电路是一种神经网络的新范式, 和权重矩阵不同, 以量子门的相位  $\theta$  作为训练参数, 经过 PQC (parameterized quantum circuits) 的酉变换  $U(\theta)$ , 读出量子比特获得一个期望值  $f(\theta)$ 。对于数据

集  $\{x_i, y_i\}$ , 经过量子编码后得到量子态  $|\psi_X\rangle$ , 再经过参数化量子电路得到期望值  $f(\theta)$ , 对  $f(\theta)$  进行观测, 测量结果与  $y_i$  的均方误差 (MSE) 作为损失函数  $L(\theta)$ 。在  $\theta$  的更新公式中, 要选取适当的  $\eta$ , 否则无法进行快速的收敛, 如果  $\eta$  过大会使迭代后的参数  $\theta'_k$  进入下一个周期, 对于不同深度的电路, 也就是电路参数规模, 要求不同的参数  $\eta$ :

$$\begin{cases} f(\theta_k) = \langle \psi_X | U_G^\dagger(\theta_k) Y U_G(\theta_k) | \psi_X \rangle \\ L(\theta_k) = \frac{1}{n} \sum_k |y^{(k)} - f(\theta_k)|^2 \\ \theta'_k = \theta_k + \eta \frac{\partial f(\theta_k)}{\partial \theta_k} \end{cases} \quad (17)$$

$U_G(\theta_k)$  是上面提到的参数化量子门, 其中量子门  $U_G(\theta_k) = e^{-i\theta_k G}$ ;  $Y$  为测量算符, 如果希望期望值测量结果为 0, 那么可令  $Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 。因为  $U_G(\theta_k)$  是酉矩阵和厄米阵:

$$U_G(\theta_k) = e^{-i\theta_k G} = I \cos(\theta_k) - iG \sin(\theta_k) \quad (18)$$

对  $U_G(\theta_k)$  进行求导可得:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta_k} [I \cos(\theta_k) - iG \sin(\theta_k)] &= -I \sin(\theta_k) - iG \cos(\theta_k) = \\ -iG [I \cos(\theta_k) - iG^{-1} \sin(\theta_k)] &= -iG U_G \end{aligned} \quad (19)$$

对整个电路求导得:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} &= \langle \psi | [iG] U_G^\dagger(\theta_k) Y U_G(\theta_k) | \psi \rangle + \\ &\langle \psi | U_G^\dagger(\theta_k) Y [-iG] U_G(\theta_k) | \psi \rangle = \\ &\frac{1}{2} \langle \psi | U_G^\dagger(\theta_k) (I + iG) Y U_G(\theta_k) (I - iG) | \psi \rangle - \\ &\frac{1}{2} \langle \psi | U_G^\dagger(\theta_k) (I - iG) Y U_G(\theta_k) (I + iG) | \psi \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

式 (20) 完全展开为 8 项, 其中 4 项能相互抵消, 经过变换上式又可变为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} &= \langle \psi | U_G^\dagger\left(\theta + \frac{\pi}{4}\right) Y U_G\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) | \psi \rangle = \\ &f\left(\theta + \frac{\pi}{4}\right) - f\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (21)$$

具体来说, 在量子池化层中所用到的规范门  $U^T$ , 也就是  $U_{CAN}$ 。由于双量子门最少需要 15 个参数, 求梯度的话需要执行很多次原电路, 可以表示为:

$$\frac{d}{d\theta} f(\theta) = \sum_{i=1,15} \frac{\partial}{\partial t_i} f_{CAN}(t_1, t_2, \dots, t_{15}) \frac{dt_i}{d\theta} \quad (22)$$

其中, 参数更新公式如下:

$$\theta'_k = \theta_k + \eta \frac{\partial f(\theta_k)}{\partial \theta_k} \quad (23)$$

## 2.4 算法步骤

根据收集到的厌氧消化过程数据参数与其特性,并结合式(17)的模型更新规则,模型处理数据流程如下(如图5):

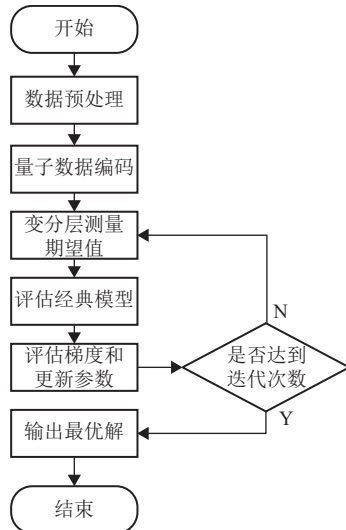


图5 算法流程图

1) 将时间序列数据进行严格的预处理,包括随机森林插补缺失值和指数平滑,解决数据不可控的无规则变动影响;

2) 将经典数据转换为量子态的数据编码到 QCNN 模型,数据经过酉运算量子操作后测量期望值;

3) 在基于 Adam 优化器的迭代优化过程中更新参数。通过使用量子旋转角更新策略,调整量子概率幅;

4) 如果迭代次数达到最大迭代次数,则退出循环,输出最优解。否则转到步骤 2),继续循环;

5) 输出最终的评价指标和预测值;

6) 结束训练。

## 3 QCNN 实验分析

### 3.1 数据预处理

实验所用数据取自伦敦帝国理工学院项目公开的数据集<sup>[28]</sup>,提供了废物管理设施的化学成分和产生沼气的的数据。数据跨度为 28 个月(851 天),如表 2 所示。数据集由 27 个特征组成,其记录了废物管理设施内储罐的日常化学成分。为确保在预处理期间将最小的噪声引入到特征,需要去除稀疏度大和相关性低的特征,稀疏度表示了数据的稀疏程度。在分析了数据的稀疏程度后,本文从 27 个输入特征中提取了 5 个关键输入特征。实验基于 Python3.8 环境开发,其中 Tensorflow 库用于开发经典模型, Tensorflow Quantum 和 Cirq 库开发量子模型。其中 20 个月的数据用作训练数据,验证数据和测试数据分别为 4 个月。

这些特征是浓缩初级污泥(TPS)、浓缩废活性污泥(TWAS)的  $Q_{in}$ 、DS% 和 VS%,以及消化污泥(DS)的  $Q_{out}$ 、DS% 和 VS%。在无氧条件下,厌氧细菌将有机物分解为  $CH_4$ 、 $H_2S$  等能源,实验数据如表 2 所示。数据经过平滑处理和插补缺失值处理后得到的数据集特征图如图 6 所示。

表 2 厌氧消化过程数据参数

parameter units	Primary sludge Thickened			Primary sludge			Thickened waste activated sludge			Digested sludge		
	$Q\ m^3/d$	DS %	VS %	$Q1\ m^3/d$	DS %	VS %	$QIN\ m^3/d$	DS %	VS %	$QOUT\ m^3/d$	DS %	VS %
1	1 197.0	0.18	60.00	199.50	2.01	89.13	241.50	5.01	87.25	428.00	2.09	77.85
2	924.30	0.57	81.81	170.00	2.91	91.30	194.00	5.48	82.17	354.00	1.88	77.41
3	925.68	0.45	72.71	199.50	3.17	91.22	193.50	5.36	84.78	383.00	2.05	75.51
4	811.30	0.39	80.00	245.50	4.49	84.20	324.50	2.08	76.70	392.00	2.92	73.52
5	839.23	0.25	83.30	266.50	3.15	85.50	324.00	2.05	78.30	349.00	2.05	78.30

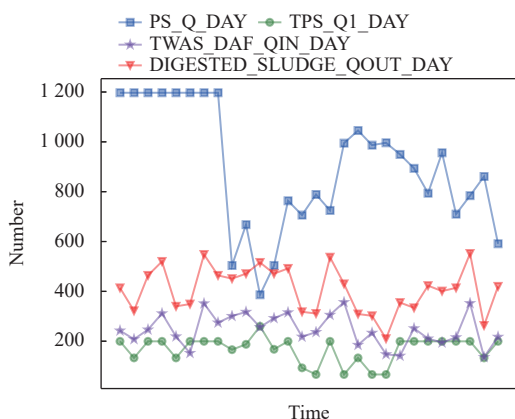


图 6 处理后的数据集特征图(包括浓缩初级污泥(TPS)、浓缩废活性污泥(TWAS)等特征)

### 3.2 预测结果分析

本文设计了 4 个主要的模型来预测沼气排放量。1) BP 网络模型(ANN)<sup>[29]</sup>,BP 网络作为一种多层前馈神经网络,通过反向传播不断调整各层的权重和偏置,达到预测产气量的目的。2) 带时间窗的卷积神经网络(CNN),接受长度为  $n$  的输入特征, $n$  是观测的自相关周期,向模型提供短期记忆。3) K-近邻算法模型(KNN)<sup>[12]</sup>,是一种机器学习方法,可以应用于消化性能的回归和分类模型中。4) 多量子滤波器 QCNN 模型(QCNN),在量子卷积神经网络模型基础上加了量子滤波器,并在卷积池化

层设计了最优的电路。其中引入 CNN 模型能体现出量子算法的优势, 为了能更好体现出这种优势, 还引入了 ANN、KNN 模型。实验分析部分采用 CNN、ANN、KNN、QCNN 来分别表示这 4 种模型, 下面将详细讨论这些模型的性能差异。

通过观察图 7~图 10, 将验证集的预测值和真实值进行比较。其中 QCNN 模型预测精度最好, 预测值和实际值大部分吻合, 模型 KNN 和 CNN 次之, 模型 ANN 表现最差, 预测值均高于实际值, 模型 QCNN 可以对甲烷产量进行相当准确的预测。由于 ANN 模型输入过多的输入变量, 导致训练时间过大, 带来了较大的全局误差, 最后导致精度不足。其中 CNN 模型也取得了不错的效果, 但相对于 KNN 模型来说准确度较低, 这是由于较大的偏差和异常值导致了精度不足。

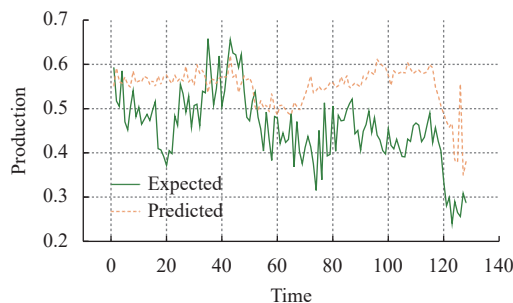


图 7 ANN 模型中实际甲烷产量和预测甲烷产量比较

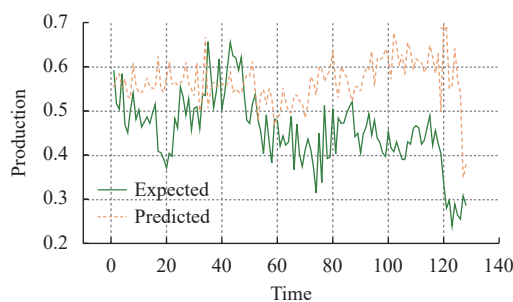


图 8 CNN 模型中实际甲烷产量和预测甲烷产量比较

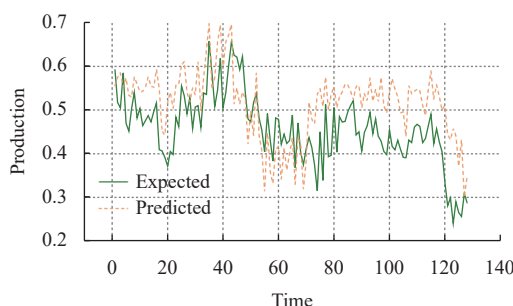


图 9 KNN 模型中实际甲烷产量和预测甲烷产量比较

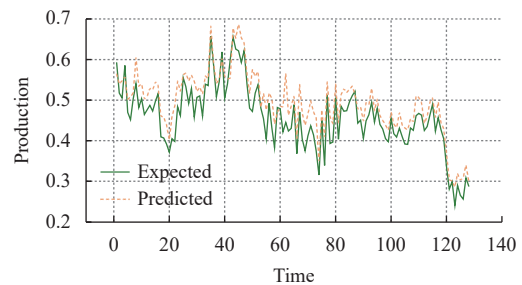


图 10 QCNN 模型中实际甲烷产量和预测甲烷产量比较

模型能够取得良好的精度在于本文对数据集进行了预处理, 通过指数平滑去除高的噪声, 消除数据间的差异; 并通过随机森林插补数据缺失值, 从而增加数据的完整性。并且多量子滤波器结构可以让模型不易陷入局部最优。

为了更好对比模型的性能, 还设计了离散数据模型和时间窗数据模型, 离散数据缺乏短期记忆, 不能良好的捕捉数据趋势。而时间窗数据能够捕捉数据开始和结束时候的沼气产量趋势。如图 11 所示, Discrete 数据下的 ACCURACY 和 KAPPA 值均小于 Time-window 数据。CNN 模型在 Discrete 数据上的 KAPPA 值小于 Time-window 数据下的 KAPPA 值近 0.04, 精确度也低了将近 8%; QCNN 模型在 Discrete 数据上的 ACCURACY 也小了将近 6%, KAPPA 值降低了将近 0.2。CNN 和 QCNN 模型在 ACCURACY 和 KAPPA 值表现上都出现了不同程度的下降。

如表 3 所示, 量子信息编码增加了量子体系结构的变换, 改变了原始 RMSE 和 MAE 的规模, 记录了 RMSE% 和 MAE% 误差指标。对于类似的体系结构, QCNN 模型性能优于其他模型。MAPE 和 MAE 值均优于其他经典模型, ACCURACY 值为 83.308%, KNN 的 ACCURACY 值为 80.4%, CNN 为 77.26%, ANN 为 74.72%。与经典的 CNN 模型和 KNN 算法相比, QCNN 能更准确预测沼气的趋势。更好的性能归因于 QCNN 的结构, 多量子滤波的模型结构产生了更低的噪声, 卷积层和池化层高效的线路组合更易提取信息中的隐藏状态。同时在适度的经典辅助下, 得到了更优异的性能。ANFIS<sup>[30]</sup> 是目前不错的预测模型, 其 RMSE 和 MAE 值分别为 3.986 和 0.673, 这些指标被本文模型击败。因此, QCNN 被认为是以上算法模型中最好的模型。

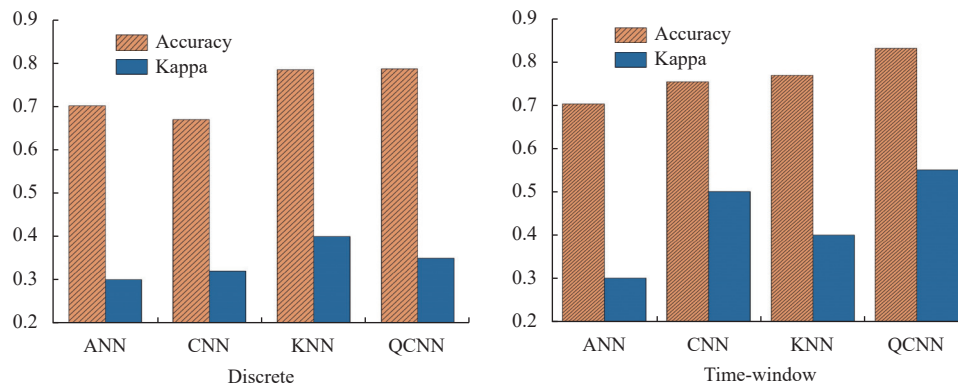


图 11 Discrete 和 Time-window 情况下的 ACCURACY 值和 KAPPA 值对比

表 3 模型性能对比

type		MAPE	ACCURACY	RMSE	RMSE%	MAE	MAE%
ANN	In-SampleOut-Sample	0.3090.173	69.3674.72	0.5550.325	33.03022.460	0.4310.117	27.37017.210
CNN	In-SampleOut-Sample	0.3230.227	75.3277.26	0.4180.125	33.03020.450	0.2980.096	11.01015.880
KNN	In-SampleOut-Sample	0.2820.200	78.5080.40	0.1430.323	19.67123.453	0.3240.112	19.65023.430
QCNN	In-SampleOut-Sample	0.1820.132	85.1883.30	0.1520.114	15.44021.108	0.1280.090	28.23416.412

## 4 结束语

本文提出一个改进的 QCNN 模型, 使用小数据子集作为输入特征的短期记忆, 准确地预测了沼气产量。在改进的 QCNN 体系结构上建立量子多变量时间序列预测模型, 相比 CNN 与 KNN, 准确度分别提升了 8% 与 3.3%。因此, 探索结合经典网络和量子计算的方式开发 QCNN 模型, 可以提供更高的精度。未来研究主要集中在增加数据量和结合其他优化算法两方面, 以更好地提高厌氧消化预测的准确性并减少训练成本。

### 参 考 文 献

- [1] APPELS L, BAEYENS J, J DEGRÈVE, et al. Principles and potential of the anaerobic digestion of waste-activated sludge[J]. *Progress in Energy & Combustion Science*, 2008, 34(6): 755-781.
- [2] WARD A J, HOBBS P J, HOLLIMAN P J, et al. Optimisation of the anaerobic digestion of agricultural resources[J]. *Bioresource Technology*, 2008, 99(17): 7928-7940.
- [3] GOLBERG D E. Genetic algorithms in search, Optimization, and Machine Learning[J]. Addison Wesley, 1989(102): 36.
- [4] 张仕斌, 黄曦, 昌燕, 等. 大数据环境下量子机器学习的研究进展及发展趋势[J]. *电子科技大学学报*, 2021, 50(6): 802-819.  
ZHANG S B, HUANG X, CHANG Y, et al. Research progress and perspectives of quantum machine learning in big data environment[J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology*, 2021, 50(6): 802-819.
- [5] FLURIN E, MARTIN L S, HACOHEEN-GOURGY S, et al. Using a recurrent neural network to reconstruct quantum dynamics of a superconducting qubit from physical observations[J]. *Physical Review X*, 2020, 10(1): 011006.
- [6] KAK S C. Quantum neural computing[J]. *Advances in imaging and electron physics*, 1995, 94: 259-313.
- [7] BEHRMAN E C, NIEMEL J, STECK J E, et al. A quantum dot neural network[C]//*Proceedings of the 4th Workshop on Physics of Computation*. Boston: Boston University, 1996: 22-24.
- [8] TOTH G, LENT C S, TOUGAW P D, et al. Quantum cellular neural networks[J]. *Superlattices & Microstructures*, 2000, 20(4): 473-478.
- [9] DAN V, MARTINEZ T. An artificial neuron with quantum mechanical properties[M]. Vienna: Springer, 1997: 482-485.
- [10] ZHANG X, HE K, BAO Y. Error-feedback stochastic modeling strategy for time series forecasting with convolutional neural networks[J]. *Neurocomputing*, 2021, 459: 234-248.
- [11] CHEN S, HE H. Stock prediction using convolutional neural network[C]//*IOP Conference: Materials Science and Engineering*. [S. l.]: IOP, 2018, 435: 012026.
- [12] WANG L, LONG F, LIAO W, et al. Prediction of anaerobic digestion performance and identification of critical operational parameters using machine learning algorithms[J]. *Bioresource Technology*, 2019, 298: 122495.
- [13] KHAJEHEI H, AHMADI A, SOLEIMANMEIGOUNI I, et al. Prediction of track geometry degradation using artificial neural network: a case study[J]. *International Journal of Rail Transportation*, 2022, 10(1): 24-43.
- [14] ZHANG R D, ZHANG X G. Support vector machine prediction modeling for automobile ownership[J]. *Journal*



- of Computer and Communications, 2022, 10(6): 37-43.
- [15] TU Y S, LIN T A, HAO T S, et al. Classification tree and random forest based prediction models on molecular autofluorescence[J]. Abstr Pap Am Chem S, 2013, 245: 1155.
- [16] TANG Z Y, CAO H D, XU Y Y, et al. Overall survival time prediction for glioblastoma using multimodal deep KNN[J]. Physics in Medicine and Biology, 2022, 67(13): 5011.
- [17] CHEN P, XU L, TANG Q, et al. Research on prediction model of tractor sound quality based on genetic algorithm[J]. Applied Acoustics, 2022, 185: 108411.
- [18] MOTA B, ALBERGARIA M, PEREIRA H, et al. Climatization and luminosity optimization of buildings using genetic algorithm, random forest, and regression models[J]. Energy Informatics, 2021, 4(2): 1-18.
- [19] MIRNATEGHI E, MOSALLAM A S. Multi-criteria optimization of energy-efficient cementitious sandwich panels building systems using genetic algorithm[J]. Energies, 2021, 14(18): 6001.
- [20] WOLF C, MCLOONE S, BONGARDS M. Biogas Plant Control and Optimization Using Computational Intelligence Methods[J]. AT-AUTOM, 2009, 57(12): 638-649.
- [21] VIJAYABHANU R, RAJINIKANTH R. Improving the efficiency of the prediction system for anaerobic wastewater treatment process using Genetic Algorithm[J]. Australian Journal of Basic and Applied Sciences. 2013, 7(10): 119-126.
- [22] CHAOUCH S, MOUSSA A, BEN MARZOUG I. Colour recipe prediction using ant colony algorithm: principle of resolution and analysis of performances[J]. Coloration Technology, 2019, 135(5): 349-360.
- [23] WANG J F, WU X L. Personalized original ecotourism route recommendation based on ant colony algorithm[J]. Wireless Communications and Mobile Computing, 2022: 6783567.
- [24] WU J, FAN M J, LIU Y, et al. A hybrid ant colony algorithm for the winner determination problem[J]. Mathematical Biosciences and Engineering, 2022, 19(3): 3202-3222.
- [25] VERDAGUER M, MOLINOS-SENANTE M, POCH M. Optimal management of substrates in anaerobic co-digestion: An ant colony algorithm approach[J]. Waste Management, 2016, 50: 49-54.
- [26] VENKATESWARLU2 E J S. Evaluation of anaerobic biofilm reactor kinetic parameters using ant colony optimization[J]. Environmental Engineering Science, 2013, 30(9): 527-535.
- [27] HORVAT S, GAO X, DAKIĆ B. Universal quantum computation via quantum controlled classical operations[J]. Journal of Physics A:Mathematical and Theoretical, 2022, 55(7): 075301.
- [28] LAKSHIT D. Multi-variate regression for time series waste-to-energy anaerobic digestion data on quantum architecture[DB/OL]. [2021-08-01]. [https://github.com/Rawdatas/raw\\_data](https://github.com/Rawdatas/raw_data).
- [29] GUO R X, ZOU D X, LIU Y P. A predictive model for combined anaerobic digestion gas production based on an artificial neural network[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science), 2021, 48(1): 17-24.
- [30] RAMACHANDRAN A, RUSTUM R, ADELOYE A J. Review of anaerobic digestion modeling and optimization using nature-inspired techniques[J]. Processes, 2019, 7(12): 953.

编辑 蒋晓