# 基于量子进化算法的神经网络及应用

杨 妍,俞金寿
YANG Yan,YU Jin-shou

华东理工大学 信息科学与工程学院,上海 200237
College of Information Science and Engineering,East China University of Science and Technology,Shanghai 200237,China
E-mail:yy00011@163.com

**YANG Yan,YU Jin-shou.Neural network based on quantum-inspired evolutionary algorithm and application.Computer Engineering and Applications,2007,43(26):206-208.**

**Abstract**: This paper proposes quantum-inspired genetic algorithm and neural network based on quantum-inspired genetic algorithm and its application in modeling for the acrylonitrile industrial process.Modeling of neural network based on quantum-inspired genetic algorithm has fast convergent speed and high model accuracy.
**Key words**: quantum;evolutionary algorithm;neural network;application

**摘 要**:研究了量子进化算法,并将其与神经网络相融合,提出了基于量子进化算法的神经网络学习算法,然后将其应用于工业过程丙烯腈收率建模,结果表明量子进化神经网络建模具有较快的收敛速度和较高的模型精度,可以满足工业中要求丙烯腈收率误差不超过1%的要求。
**关键词**:量子;进化算法;神经网络;应用
**文章编号**:1002-8331(2007)26-0206-03 **文献标识码**:A **中图分类号**:TP273

## 1 引言

人工神经网络[1]是近些年来迅速发展起来的人工智能科学的一个分支,神经网络由于其特有的大规模并行结构、信息的分布式存储和并行处理特点,使其具有良好的自组织性和容错性等。目前神经网络结构主要靠经验和试凑来确定,需要过多的人工参与和经历耗时的误差调整过程并且容易陷入局部最优解以及对初始条件过于敏感和收敛速度缓慢[2]。但是,如果算法具备适合的初始条件和适当的网络结构,那么它就能充分发挥优势而出色完成各项事务。随便给出初始条件和随意猜测网络结构的情形,都会导致迟缓的、繁杂的训练过程。理论研究和仿真实验都充分证明了太大的网络结构容易造成泛化性差而太小的网络结构则造成精度低。因此,网络结构的合理设计一直是神经网络研究领域的一项重要内容。目前,对于网络结构设计已提出了一些方法,例如:(1)规则化:主要通过训练和比较不同网络结构,然后按实际要求对每一网络进行性能评价(输出误差、结构复杂性、泛化能力等),从中挑选性能最好的网络。(2)增枝方法:增长方法又称构造方法,在开始时构造一个小规模的网络结构,在训练过程中,针对实际问题,根据网络性能要求逐步增加其结构复杂性,直至满足性能要求。(3)修剪方法:该方法亦称析构方法,与增长构造方法相反,在开始时构造一个含有冗余结点的大规模网络结构,然后在训练的过程中逐步删除那些不必要的结点和权值,起始时的大规模网络保证能较快地完成训练,降低对初始条件的敏感性,然后通过修剪降低网络的复杂性,提高泛化能力。

但是,增枝法或修剪法极易陷入结构的局部极小点[1],且其搜索空间也只是整个结构空间中一个极小的子空间。因此,由上述方法难以得到优化合理的网络结构。网络结构优化设计可形式化为一结构空间的优化问题。该空间中每一点代表一结构。给定结构的性能判据,则在结构空间中将形成一结构性能曲面,结构的优化设计即为探索该曲面最高点的优化过程。显然,进化计算可以用于优化设计神经网络结构。

进化算法[3]是一种模拟生物进化过程的优化算法,进化算法具有良好的全局搜索能力和无需误差函数的梯度信息可以接近最优解。进化算法与神经网络的融合已经越来越受到人们的关注,并已形成了一种新颖的进化神经网络研究领域[4]。虽然进化算法是有较强的鲁棒性的全局并行搜索方法,但局部搜索能力却不强,进化过程中容易过早收敛。为了提高算法的整体搜索能力,人们提出了各种算法对进化算法进行了改进。Narayanan 等提出了量子进化算法(QEA)[7],该算法使用量子染色体编码以及量子门进行种群更新,有效地解决了进化算法中存在的过早收敛和染色体丢失问题。采用量子进化算法对神经网络的结构进行优化,可以使神经网络模型具有较好的性能。

本文研究了将量子进化算法与神经网络相融合的基于量子进化算法的神经网络学习算法,然后将其应用于工业过程丙烯腈收率建模,结果表明基量子进化神经网络建模具有较快的收敛速度和较高的模型精度,可以满足工业中要求丙烯腈收率

**作者简介**:杨妍(1975-),女,博士研究生,研究领域为智能计算及应用;俞金寿(1939-),男,教授,博士生导师,研究领域为工业过程的建模、仿真、优化与控制等。

误差不超过1%的要求。

## 2　量子进化算法

### 2.1　量子计算

量子计算[5]与传统意义上的计算有着质的不同,它的特点主要体现在量子态的叠加(Superposition)以及干涉(Interference)等性质上,许多计算上的优势如量子并行(Quantum Parallelism)等皆由此产生。在量子计算机中,基本的存储单元是一个量子位(Oubit),一个简单的量子位是一个双态系统,量子比特不仅可以处于0或1的两个状态之一,且更一般的可以处于两个状态的任意叠加形式。量子计算的一个主要原理[6]就是:使构成叠加态的各个基态通过量子门的作用发生干涉,从而改变它们之间的相对相位。若量子系统处于基态的线性叠加的状态,则系统为相干的,当一个相干的系统和它周围的环境发生相互作用(测量)时,线性叠加就会消失,这个过程称之为消相干。Grover量子算法就主要利用了这一量子机制。量子计算的一次运算可产生$2^n$个运算结果,相当于常规计算机$2^n$次操作,这种计算称为量子并行计算。

### 2.2　量子进化算法

量子驱动的进化算法(简称为量子进化算法)[7]是量子计算与进化算法相融合的产物。它以量子计算的一些概念和理论为基础,用量子位编码来表示染色体,并利用量子门实现染色体的更新操作,具有全局寻优能力强的特点,从而实现了目标的优化求解。

#### 2.2.1　量子比特

在量子进化算法中,最小的信息单元为一个量子位一量子比特。它的状态可以取或,其状态可以表示为:

$$\langle\psi|=\alpha\langle 0|+\beta\langle 1| \tag{1}$$

其中$\alpha,\beta$为代表相应状态出现概率的两个复数分别表示量子比特处于状态和状态的概率。

#### 2.2.2　量子染色体

量子进化算法(QEA)建立在量子的态矢量表述基础上,将量子比特的几率幅表示应用于染色体的编码,使得一条染色体可以表达多个态的叠加,种群由量子染色体构成,在第$t$代的染色体种群为$Q(t)=\{q_1^t,q_2^t,\cdots,q_n^t\}$,其中$n$为种群大小,$t$为进化代数,$m$为染色体的比特数,$q_j^t$为定义为如下的染色体:

$$q_j^t=\begin{bmatrix}\alpha_1^t & \alpha_2^t & \cdots & \alpha_m^t\\ \beta_1^t & \beta_2^t & \cdots & \beta_m^t\end{bmatrix},j=1,\cdots,n \tag{2}$$

QEA通过观察$Q(t)$的状态,产生一组普通解$P(t)$,其中$Q(t)$为量子染色体种群,$P(t)$为二进制染色体种群,在第$t$代中$P(t)=\{x_1^t,x_2^t,\cdots,x_n^t\}$每个二进制解$x_j^t(j=1,2,\cdots,n)$是长度为$m$的二进制串$(x_1x_2\cdots x_m)$,对量子比特幅模拟量子坍塌得到的。与传统进化算法采用交叉、变异等遗传操作来保持种群的多样性相比,QEA采用量子门变换产生新的$Q(t)$来保持种群的多样性[8]。由于概率归一化条件的要求,量子门变换矩阵必须是酉正矩阵,常用的量子变换矩阵有量子旋转门:

$$\boldsymbol{U}(\Delta\theta_i)=\begin{bmatrix}\cos(\Delta\theta_i) & -\sin(\Delta\theta_i)\\ \sin(\Delta\theta_i) & \cos(\Delta\theta_i)\end{bmatrix} \tag{3}$$

量子交叉是基于量子的相干性构造的一种新的交叉方式—“全干扰交叉”,即种群中的所有染色体均参与交叉。量子交叉操作改进了普通交叉的局部性与片面性,在种群进化出现早熟时,它能够产生新的个体,克服普通染色体在进化后期的早熟现象。

## 3　基于量子进化算法的神经网络学习算法

要确定一个神经网络,必须设计出网络的结构和算法。网络结构的进化设计包括结构个体的染色体表达方式设计和进化方法的选取。在基于量子进化算法的神经网络学习算法中,结构个体染色体表达主要使用直接编码,由量子进化算法优化网络结构。BP训练权值,以利用两者的收敛特性,减少遗传编码长度,提高优化速度,获得最终解。

### 3.1　量子进化算法的神经网络中的个体表达方式

量子进化算法的神经网络中结构个体染色体表达主要使用直接编码策略。

网络结构的直接编码,就是网络的拓扑结构可由一联接矩阵表示,将联结矩阵的行或列串接形成结构个体的染色体。如一$N\times N$矩阵$\boldsymbol{C}=(c_{ij})_{N\times N}$表达一个有$N$个节点的网络结构。其中$c_{ij}$表示从节点$i$到节点$j$的联结。$c_{ij}=1$表示节点间有联结;$c_{ij}=0$表示节点间无联结。联结矩阵与网络结构间是一一对应关系。网络结构的直接编码在实现上直观,且染色体中包含的结构信息较完备,结构的进化更加精确细微,易于进化出优质紧凑的网络结构。由于适应度函数的定义不受可微或连续等条件限制,因此可基于信息理论或统计理论引入各种性能判据,以提高结构进化质量。

### 3.2　评价函数

由于性能越好的染色体其适应度函数值越高,因此适应度函数定义为

$$fitness=\frac{1}{E} \tag{4}$$

其中,$E$为训练集中全部样本的实际输出$y_{pi}$与目标输出$t_{pi}$之间的均方误差,如下式所示:

$$E=\frac{1}{2MN}\sum_{p=1}^{M}\sum_{i=1}^{N}(t_{pi}-y_{pi})^2 \tag{5}$$

其中,$M$代表训练集中的样本数,$N$代表输出神经元个数。

### 3.3　量子进化神经网络算法的步骤

首先采用量子进化初步确定适合的网络可行结构,再采用BP算法训练确定此特定的网络结构权重数值,使其针对测试集达到误差最小。并将此误差作为评价函数中所引用的误差值。当符合终止条件时,算法结束。

基于量子进化算法神经网络算法的步骤如下:

(1)用直接编码的方法进行编码。随机产生个结构,对每个结构进行编码,每个编码个体对应一个结构。初始化种群$Q(t)$,然后由$Q(t)$生成$P(t)$进行解码,使每一个连接对应染色体中的一位,生成的染色体的相应位为“1”时,表示节点间有连接,为“0”时,表示节点间没有连接。

(2)BP算法训练所有的网络个体,并计算每个个体的适应度。

(3)选择若干适应度最大的个体,直接遗传给下一代。

(4)利用量子交叉和量子变异等算子对当前一代群体进行遗传操作,产生下一代群体。

(5)重复步骤(2),(3)和(4),使初始确定的编码值不断进化,直到训练目标符合要求为止。

通过以上步骤,可实现量子进化神经网络算法。

## 4 算法性能测试

Parity 是测试前向神经网络性能常用的评价标准。在 Parity 问题中,当输入模式中 1 的个数为奇数时输出值为 1,否则输出值为 0。为了测试量子进化神经网络的性能,本文以 Parity-3bit 为例,并且用 BP 神经网络作为对比,验证了量子进化神经网络算法的有效性。

在本次测试中,算法的最大迭代次数为 100。量子进化神经网络的的种群规模为 30,网络误差小于 0.001,所求得最优的网络结构 3-3-1。BP 神经网络在误差精度小于 0.001 时求得的最优网络结构为 3-5-1。

BP 神经网络误差训练如图 1 所示。量子进化神经网络的误差训练如图 2 所示。测试结果显示出量子进化神经网络算法收敛速度较快,性能较好。

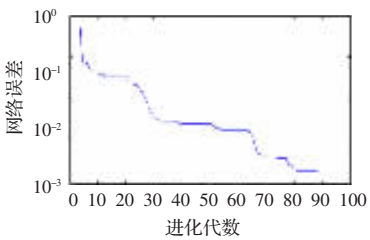


图 1 BP 神经网络误差训练图

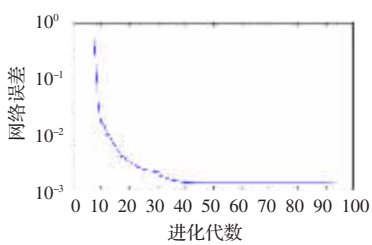


图 2 量子进化神经网络误差训练图

## 5 量子进化神经网络在丙烯腈收率建模中的应用

在丙烯腈装置的生产过程中,丙烯腈的收率是一个关键指标,及时、准确地测量产品中丙烯腈的收率是进行丙烯腈装置先进控制的关键。在实际生产中,常用人工采样分析的方法得到丙烯腈的收率,通常情况下从采样到分析得到最终的结果要经过几个小时的时间;即使不计较价格的昂贵与维护保养的复杂性而采用在线分析仪,其存在的测量滞后也难满足生产的要求,因此有必要建立丙烯腈收率的模型,这也是先进控制实施的关键环节。

本论文以上海石化某厂年丙烯腈生产装置为背景,建立丙烯腈收率模型。由于丙烯腈生产中在催化剂确定之后,原料的配比、反应温度、反应压力、接触时间、空塔线速等条件对丙烯腈收率的影响较大,因此选用反应压力 $x_1$、中段温度 $x_2$、纯丙烯量 $x_3$、空比 $x_4$、氨比 $x_5$、反应线速 $x_6$、触媒量 $x_7$ 作为模型的 7 个辅助变量。模型的输出信号为丙烯腈收率。

通过对原始数据进行 $3\sigma$ 准则、7 点最优线性滤波、归一化处理后得到 291 组数据,将 291 组数据分为 2 份,241 组作为训练样本,用来训练神经网络,另外 50 组作为测试样本,用于检验模型的效果。先使用 BP 神经网络建模,即凭借先前经验构造具有不同隐层节点的若干网络,分别进行训练,然后按实际要求对每一网络进行性能评价,从中挑选性能最好的网络。实验表明 7-23-1 结构的三层 BP 网建模效果较好。采用量子进化神经网络建模时,最大迭代次数 $Gen_{max}$=1 000,种群规模 $N$=30,变异概率 $Pm$=0.08,交叉概率 $P$=0.5,旋转角 $r$=0.16 πrad,BP 算法控制参数集中在$\eta \in \{0.5,0.35\}$,$\alpha \in \{0.7,0.6\}$,初始权值范围 $\in \{\pm 0.5,\pm 0.25\}$,经过量子进化算法的优化设计,最后得到的 7-15-1 网络模型。量子进化神经网络模型与 BP 神经网络的性能对比见表 1。

表 1 BP 神经网络模型与量子进化神经网络模型训练与测试对比

| | 训练样本平均相对误差/% | 检测样本平均相对误差/% |
|---|---|---|
| BP 神经网络 | 0.64 | 0.62 |
| 量子进化神经网络 | 0.49 | 0.43 |

由图 3 可知,采用量子进化神经网络建立的软测量模型具有较好的泛化能力和较高的模型精度,可以满足工业中要求丙烯腈收率误差不超过 1%的要求。

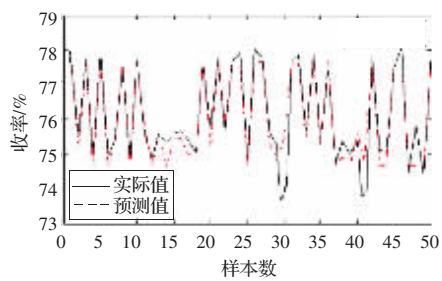


图 3 量子进化神经网络模型实际值和预测值对比

## 6 结束语

量子进化算法可以减少寻优的计算复杂度,具有收致速度快、寻优能力强等优点。将量子进化算法与神经网络相融合的量子进化神经网络算法应用于丙烯腈收率建模中,实验表明量子进化神经网络模型具有较快的收敛速度和较高的模型精度。

(收稿日期:2007 年 1 月)

## 参考文献:

[1] Haykin S.Neural networks:a comprehensive foundation[M].New York:Macmillan,1994.

[2] White H.Learning in artificial neural networks:a statistical perspective[C]//Neural Computation.Cambridge,MA:MIT Press,1989,1(4):425-464.

[3] 云庆夏.进化算法[M].北京:冶金工业出版社,2000.

[4] 唐春明.进化神经网络的研究进展[J].系统工程与电子技术,2001,23(10):93-97.

[5] Shor P W.Algorithms for quantum computation:discrete logarithms and factoring[C]//Proceeding of the Annual Symposium on Foundations of Computer Science,1994:20-26.

[6] Martin Plenio B.Basic of quantum computation[J].Process in Quantum Electronics,1998.

[7] Narayanan A,Moore M.Quantum-inspired genetic algorithm[C]//Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation,1999:61-66.

[8] Han K H,Kim J H.Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization[J].IEEE Trans on Evolutionary Comprtion,2002,6(6):580-593.