用于增材制造试样表面粗糙度预测的量子机器学习方法

Akshansh Mishra[1, 2*]、Vijaykumar S. Jatti[3]

[1]工业与信息工程学院，米兰理工大学，米兰，意大利

[2]首席人工智能科学家，Neural Net，印度

[3] 机械工程系，Symbiosis Institute of Technology，浦那，印度

摘要：表面粗糙度是影响增材制造部件性能和功能的关键因素。准确预测表面粗糙度对于优化制造流程和确保最终产品质量至关重要。近年来，量子计算作为解决复杂问题和构建精确预测模型的潜在方案受到关注。在本研究论文中，我们首次对三种量子算法——量子神经网络（QNN）、量子森林（Q-Forest）以及针对回归任务进行适配的变分量子分类器（VQC）——在增材制造试样表面粗糙度预测方面的表现进行了深入比较。我们采用均方误差（MSE）、平均绝对误差（MAE）和解释方差得分（EVS）作为评价指标，对这些算法的性能进行了评估。研究结果表明，Q-Forest 算法优于其他算法，其均方误差为 56.905，平均绝对误差为 7.479，解释方差得分为 0.2957。相比之下，QNN 算法的均方误差较高，为 60.840，平均绝对误差为 7.671，且解释方差得分为 -0.444，表明其可能不适用于本应用中的表面粗糙度预测。针对回归任务进行适配的 VQC 的均方误差为 59.121，平均绝对误差为 7.597，解释方差得分为 -0.0106，说明其性能也逊于 Q-Forest 算法。

关键词：量子计算；量子机器学习；增材制造；量子态

1. 引言

量子计算是一个以量子力学原理为基础的新兴领域。近年来，由于其能够彻底改变多个行业，量子计算受到了广泛关注。与使用比特将信息表示为 0 或 1 的经典计算不同，量子计算利用量子比特，借助叠加态和纠缠现象，使其能够同时处于多个状态 [1-5]。这一独特特性使量子计算机能够以远高于传统计算机的指数级速度执行复杂计算，从而为解决以往无法解决的问题创造了机会。

制造业以其精细而复杂的流程为特征，有望从量子计算的发展中显著受益。量子计算在制造业中的潜在应用涵盖广泛领域，包括优化、模拟、材料科学和预测建模。将量子计算整合到

这些领域有望显著提高效率、降低成本并提升产品质量 [6-9]。

量子计算可以通过识别最高效且最具成本效益的解决方案，优化各种制造流程，例如调度、资源分配和供应链管理。量子优化算法，如量子近似优化算法（QAOA）和量子绝热计算，有望在解决复杂的大规模问题方面超越经典优化技术。量子计算机能够比经典计算机更高效地模拟量子系统，使研究人员能够更深入地理解原子和分子层面的材料与化学物质。这种增强的理解能力可以加速新材料的发现以及尖端制造技术的开发，从而实现更可持续、更高效的生产流程。

在材料科学领域，量子计算可以通过模拟新型材料在量子层面的行为，加快具有定制化属性的新型材料的发现与设计。这可能促成强度、耐久性和能源效率更高的先进材料的创制，从而提升制造产品的整体质量 [10-13]。量子计算还可以通过为复杂问题提供更准确、更高效的解决方案，显著改善制造业中的预测建模。量子机器学习算法，例如量子神经网络（QNN）、量子森林（Q-Forest）和变分量子分类器（VQC），可用于预测表面粗糙度、机器磨损和缺陷率等关键参数，而这些参数会影响产品质量和流程效率。这些算法有望减少制造误差、缩短停机时间并优化维护计划。

在本研究中，我们首次报告了将量子机器学习算法用于确定增材制造试样表面粗糙度的实现。这一开创性方法展现了利用量子计算技术提升增材制造领域预测建模准确性和效率的潜力。

2. 量子机器学习框架

量子机器学习是一门新兴的跨学科领域，它将量子计算与机器学习相结合，旨在利用量子系统的独特属性，实现比经典计算更高效的复杂计算和优化问题求解。由于该领域仍处于起步阶段，其潜在应用广泛且多样。 要理解量子机器学习的复杂运作机制，必须了解量子比特（qubits）、量子纠缠和量子门等若干基本概念。

在量子计算中，量子比特是基本单位，可以同时处于0态和1态的叠加态中，这不同于只能处于0态或1态的经典比特。量子比特表示为图1所示基态|0和|1的复数线性组合。这一特性实现了并行性，使量子计算机能够同时处理大量信息。

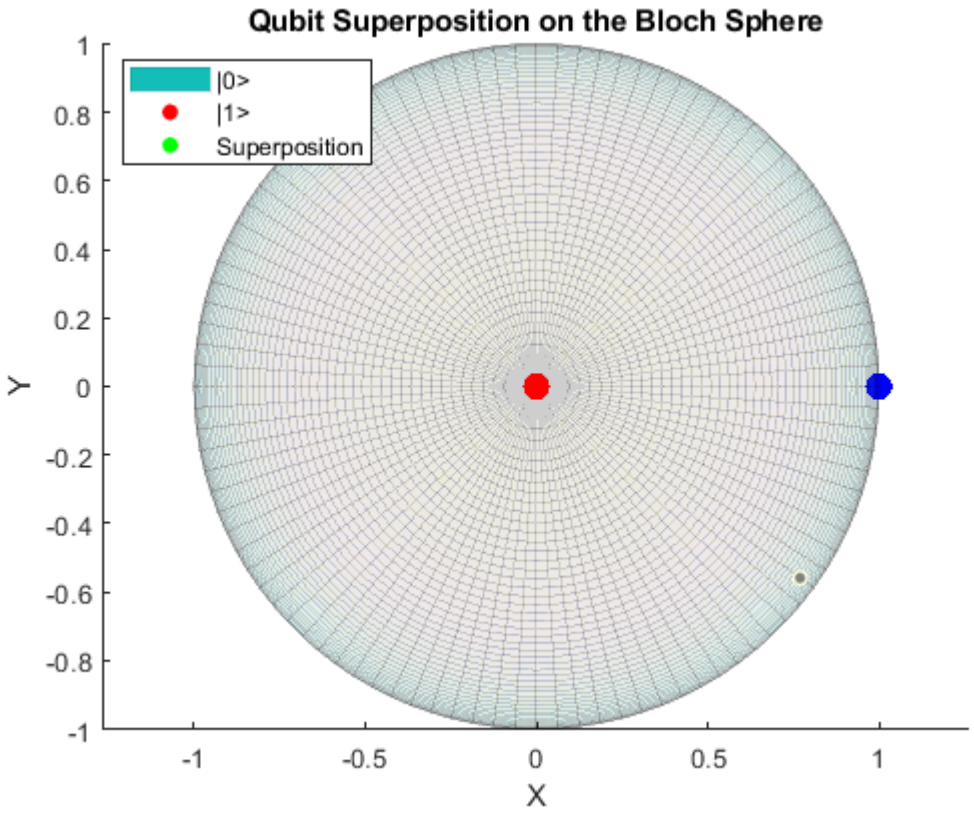


图1：量子叠加的示意图

为了用方程对此进行解释，我们考虑一个量子比特，该量子比特如方程1所示，表示为|ψ。

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (1)$$

其中，α 和β 是复系数，用于确定量子比特分别处于状态|0或|1的概率幅。量子比特处于状态|0或|1的概率分别由公式2和公式3给出。

$$P(|0) = |\alpha|^2 \quad (2)$$

$$P(|1) = |\beta|^2 \quad (3)$$

由于量子比特必须处于状态|0或|1中的一种状态，因此概率之和必须等于1，如公式4所示。

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (4)$$

量子比特的这一性质使其能够处于状态的叠加态中，并实现量子并行性。在具有 n 个量子比特的量子计算机中，可以同时存在 2^n 种不同的状态，这些状态可以

同时处理。这是因为 n量子比特系统的状态可以表示为公式 5。

$$|\psi_n\rangle = \Sigma_i \, c_i \, |i\rangle \tag{5}$$

其中 i 的取值范围为 0 到（$2^n - 1$），且 $\Sigma_i \, |c_i|^2 = 1$。

这种并行性使量子计算机能够执行经典计算机难以实现的复杂计算。

量子纠缠是一种特殊现象，当两个或更多量子比特变得错综复杂地相互连接时便会发生，使它们无法分离，如图2所示。这可以用纠缠态方程6表示。

$$|\Psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle \tag{6}$$

其中，|Ψ 为纠缠态，α 和 β 为复系数，|00 和 |11 为两个纠缠量子比特的基态。在这种情况下，一个量子比特的状态无法独立于另一个量子比特进行描述，因为测量结果的概率由组合态 |Ψ 决定。

纠缠是量子计算中的关键资源，因为它能够实现非局域关联并增强计算能力。其中一个例子是贝尔态，它是一组最大纠缠态，可以表示为方程7。

$$|\Phi+\rangle = (1/\sqrt{2})(|00\rangle + |11\rangle)$$
$$|\Phi-\rangle = (1/\sqrt{2})(|00\rangle - |11\rangle)$$
$$|\Psi+\rangle = (1/\sqrt{2})(|01\rangle + |10\rangle)$$
$$|\Psi-\rangle = (1/\sqrt{2})(|01\rangle - |10\rangle) \tag{7}$$

这些贝尔态展示了通过量子纠缠可以实现的强关联性，这种关联性可应用于各种量子算法、通信协议和量子隐形传态，从而显著提升量子系统的计算能力。

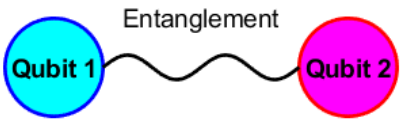


图2：量子比特之间的纠缠

作为量子电路的基础，量子门对量子比特执行操作。与经典逻辑门（例如与、或、非）类似，量子门具有可逆性，并且可以作用于图3所示的量子态叠加。

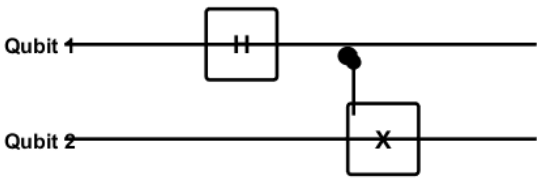


图3：包含两个量子比特的量子电路，其中Hadamard门（H）作用于量子比特1，CNOT门作用于两个量子比特

量子机器学习的详细机制如图4所示。

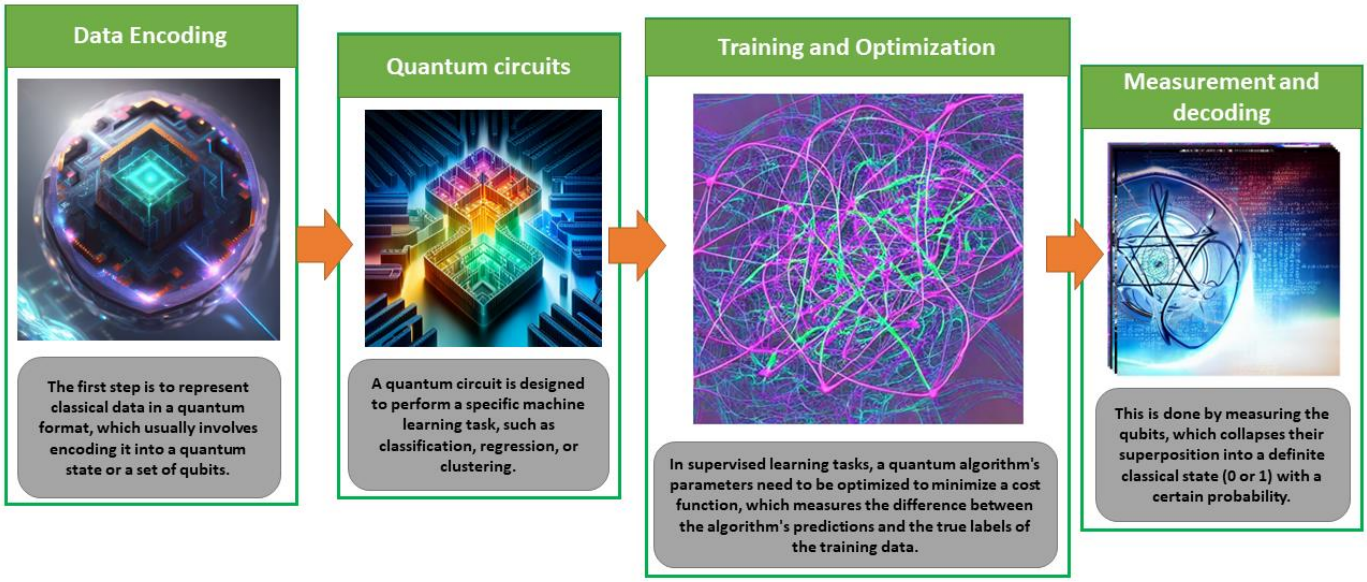


图4：量子机器学习框架

初始步骤涉及将经典数据转换为量子格式，通常是将其编码为量子态或一组量子比特。该过程采用量子特征映射或嵌入技术，将经典数据转换到高维希尔伯特空间中，使其与量子计算兼容。针对特定机器学习任务（如分类、回归或聚类），通过选择合适的量子门并按顺序排列，设计量子电路，以处理输入数据并生成所需输出。电路的结构和复杂性可能会根据问题及所需的准确度水平而有所不同。对于监督学习任务，必须优化量子算法参数，以最小化衡量算法预测结果与训练数据真实标签之间差异的成本函数。量子算法通常采用变分技术，其中经典优化算法根据量子计算机的反馈更新量子电路参数。 输入数据经过量子电路处理后，必须通过测量量子比特来提取结果，这会使其叠加态坍缩为具有特定概率的确定性经典状态（0或1）。随后对经典输出进行解码和解释，以提供有关原始问题的见解或预测。

3. 材料与方法

为保持模型的一致性，同时减少打印尺寸、材料用量和时间，采用 ASTM E8 标准几何形状，并将各项尺寸统一缩小 50%。采用响应面法（RSM）试验设计创建了 30 种不同的试验条件，每种条件均包含三个输入参数水平（见图5）。

使用 Ultimaker Cura 软件对 CAD模型进行切片，以生成 G代码（见图6）。实验使用 Creality 3D FDM打印机进行（见图7），每次打印均采用一组独特的设置，分别调整层高、填充密度、填充图案、热床温度和喷嘴温度，并使用聚乳酸（PLA）材料。研究人员创建了输入参数数据表，并使用数字游标卡尺测量每个模型与原始 CAD 文件之间的长度差异。

实验获得的数据已转换为CSV文件，随后导入Google Colab平台。该平台将用于实现三种不同的量子机器学习算法——量子神经网络（QNN）、Q-Forest和变分量子分类器（VQC），这些算法均已调整为适用于回归分析。算法的性能根据三个度量特征进行评估，即均方误差（MSE）、平均绝对误差（MAE）和解释方差得分。



图5：增材制造制备的试样

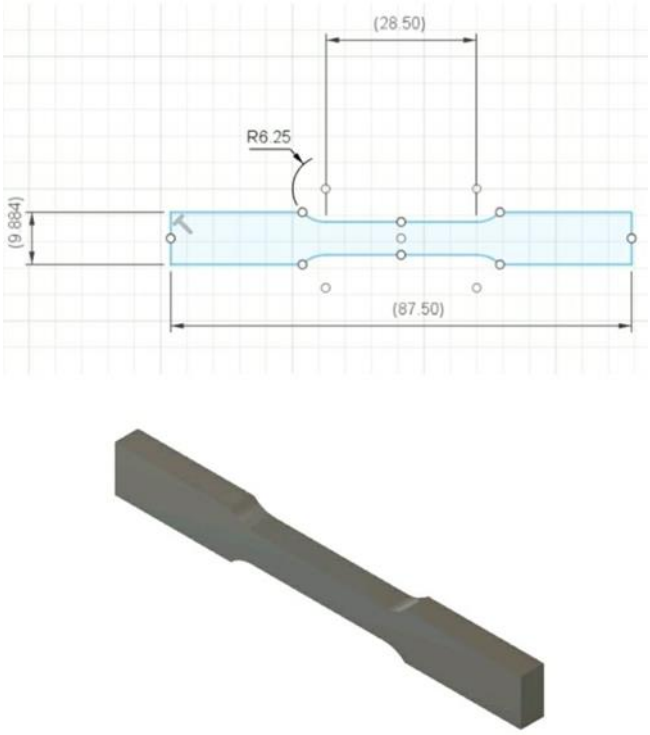


图6：试样示意图

4. 结果与讨论

通过各种输入参数组合获得的表面粗糙度测量结果如表1所示。

表1：实验结果

层高 (mm)	Wall 厚度 ess (mm)	填充密度 (%)	填充图案 n	喷嘴温度（℃）	Bed 温度（℃）	打印速度（毫米/秒 ec)	Fan 速度 (%)	表面粗糙度 s（μm）
0.1	1	50	蜂蜜 comb	200	60	120	0	6.12275
0.1	4	40	grid	205	65	120	25	6.35675
0.1	3	50	蜂蜜 comb	210	70	120	50	5.957
0.1	4	90	grid	215	75	120	75	5.92025
0.1	1	30	蜂蜜 comb	220	80	120	100	6.08775
0.15	3	80	蜂蜜 comb	200	60	60	0	6.0684
0.15	4	50	grid	205	65	60	25	9.27525
0.15	10	30	蜂蜜 comb	210	70	60	50	7.479
0.15	6	40	grid	215	75	60	75	7.557
0.15	1	10	蜂蜜 comb	220	80	60	100	8.48675
0.2	5	60	蜂蜜 comb	200	60	40	0	8.4695
0.2	4	20	grid	205	65	40	25	8.8785
0.2	5	60	蜂蜜 comb	210	70	40	50	9.415
0.2	7	40	grid	215	75	40	75	9.71375
0.2	3	60	蜂蜜 comb	220	80	40	100	10.59625
0.1	1	50	三角形	200	60	120	0	6.04925

			es					
0.1	4	40	立方体	205	65	120	25	9.262
0.1	3	50	三角形es	210	70	120	50	6.127
0.1	4	90	立方体	215	75	120	75	5.99675
0.1	1	30	三角形es	220	80	120	100	6.1485
0.15	3	80	三角形es	200	60	60	0	8.2585
0.15	4	50	立方体	205	65	60	25	8.347
0.15	10	30	三角形es	210	70	60	50	8.2385
0.15	6	40	立方体	215	75	60	75	8.23125
0.15	1	10	三角形es	220	80	60	100	8.35125
0.2	5	60	三角形es	200	60	40	0	9.072
0.2	4	20	立方体	205	65	40	25	9.23825
0.2	5	60	三角形es	210	70	40	50	9.18225
0.2	7	40	立方体	215	75	40	75	9.299
0.2	3	60	三角形es	220	80	40	100	9.382

下面各小节将分别讨论所实施算法得到的概念结果。

4.1 量子神经网络（QNN）

量子神经网络（QNN）代表了一种创新方法，将量子计算原理与经典神经网络架构相结合，从而更有效地解决复杂问题。量子神经网络（QNN）利用量子比特（qubits）作为主要信息载体，借助叠加态固有的量子特性，实现多个状态的同时表示。

量子神经网络的核心是量子层，由按顺序排列的量子门组成。这些量子门是量子计算的基本数学组成部分，负责转换量子比特态。量子门由酉矩阵表示，从而确保量子比特态的归一化得以保持。因此，量子电路由

一系列量子门构成，其整体变换由表示各个量子门的矩阵之积决定。

从数学角度来看，量子态可以表示为希尔伯特空间中的复向量，其中每个元素对应于一个不同计算基态的概率幅。由 n 个量子比特组成的量子态可表示为公式 8。

$$|\psi\rangle = \Sigma (a_i |i\rangle) \quad (8)$$

其中，i 的取值范围为 0 至 $2^n - 1$，a_i 表示复系数，$|i\rangle$表示相应的计算基态。测量状态 $|i\rangle$ 的概率由 a_i 的模的平方给出。

量子态通过量子门进行变换的过程，可以表示为矩阵-向量乘法，如公式 9 所示。

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle \quad (9)$$

在该公式中，U 表示与量子门对应的酉矩阵，$|\psi\rangle$ 表示初始状态，而 $|\psi'\rangle$ 表示应用量子门后的最终状态。

为确定量子神经网络的输出，需要在量子计算机或模拟器上执行量子电路。在当前工作中，量子电路在模拟器上执行，如图 7 所示。所得输出是关于计算基态的概率分布，随后由经典神经网络或其他经典机器学习模型进行处理，以生成最终输出。

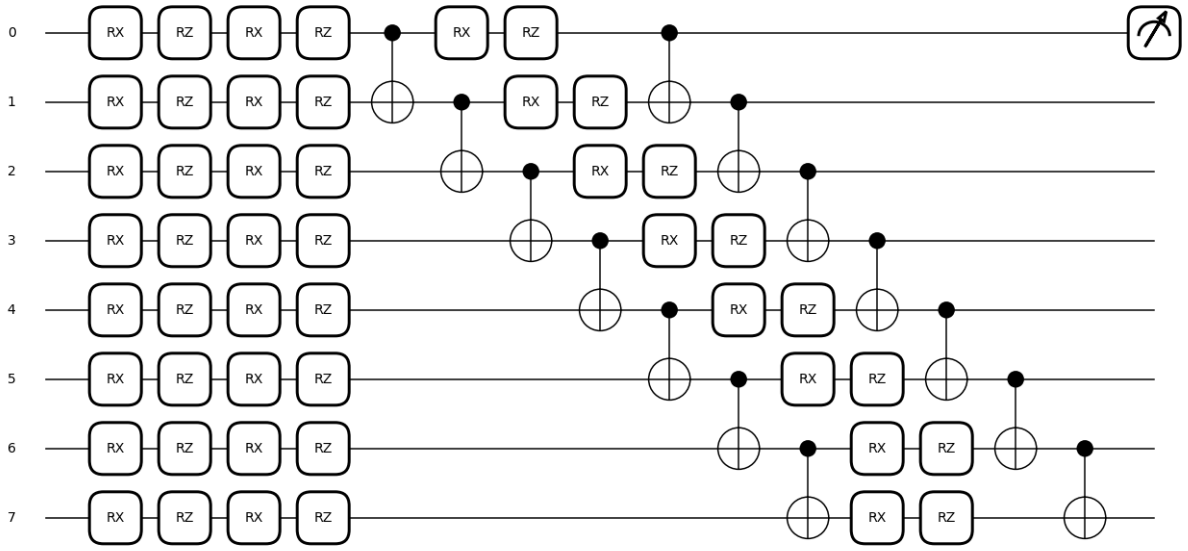


图 7：本研究中的量子电路框架

量子神经网络由函数 qnn(params, x=None) 定义，该函数接受两个参数：表示网络参数的 params，以及可选的输入特征向量 x。在量子神经网络中，通过一系列旋转门（qml.RX 和 qml.RZ）将输入特征嵌入量子态。这些旋转门作用于量子电路中的量子比特，从而有效地将经典数据编码到量子系统中。

量子层在遍历 params 数组的循环中定义。对于每一层，使用数组中的参数对量子比特应用旋转门，随后通过一系列受控非门（CNOT）在相邻量子比特之间创建纠缠。这种纠缠能够探索更大的解空间，并增强网络的表达能力。通过测量第一个量子比特上的泡利 Z 算符的期望值，可以获得量子神经网络（QNN）的输出。该期望值代表网络针对给定输入的预测结果。

成本函数 cost(params, X, y) 计算量子神经网络（QNN）的预测结果与目标值之间的均方误差（MSE）。具体而言，它遍历输入数据 X，并使用当前参数和输入特征调用 QNN 函数。随后计算预测结果与真实目标值 y 之间的均方误差，并将其作为成本值返回。

量子神经网络（QNN）的参数采用随机方式初始化，并使用 Pennylane 库提供的梯度下降优化器进行优化。优化过程执行 100 次迭代，在每一步更新参数，以最小化成本函数。最后，使用训练好的 QNN 在测试集上进行预测，并采用三个指标评估其性能：均方误差（MSE）、平均绝对误差（MAE）和解释方差得分，如表 2 所示。

表 2：量子神经网络算法获得的特征指标

MSE	MAE	解释方差得分
60.840	7.671	-0.444

如图 8 所示，解释方差得分与训练迭代次数的关系图通常用于跟踪机器学习算法在训练过程中的性能。解释方差得分是一项用于衡量模型所解释的目标变量方差比例的指标。其取值范围为 0 到 1，其中 0 表示模型无法解释任何方差，1 表示模型能够解释全部方差。解释方差得分与训练迭代次数的关系图可以帮助了解模型的学习效果以及其向解决方案收敛的情况。如果解释方差得分随着每次迭代而增加，则表明模型正在改进并从数据中学习。另一方面，如果解释方差得分趋于平稳或下降，则表明模型没有得到改进，或者可能对数据产生了过拟合。

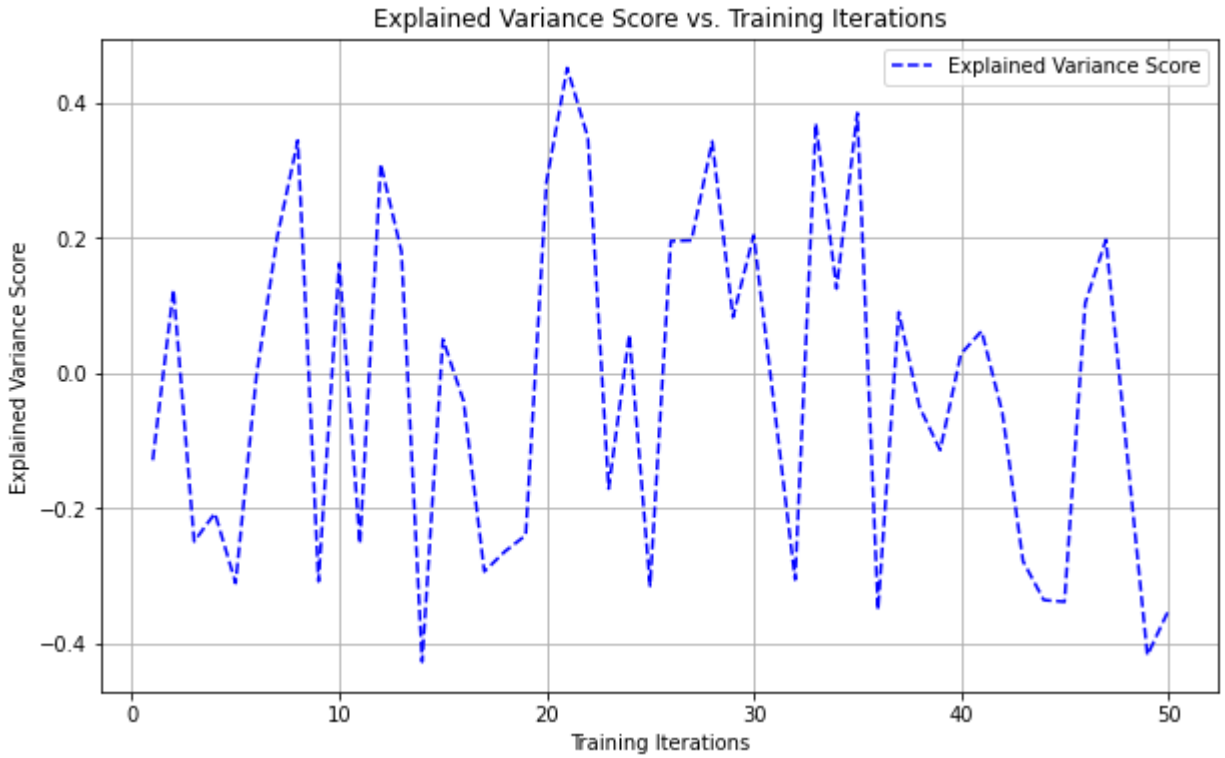


图 8：量子神经网络算法的解释方差得分与训练迭代次数的关系。

4.2 Q-Forest 算法

Q-Forest 算法是一种量子启发式方法，用于大规模数据处理中的聚类和分类任务。该算法借鉴量子力学中的量子纠缠和量子叠加等原理，从而提升效率和有效性。算法首先将经典数据转换为量子态。假设数据集包含 N 个样本和 d 个特征，每个样本表示为一个 d 维向量。随后，算法将经典数据点转换为量子态，生成数据集的量子叠加，从而能够同时处理所有数据点。如图 9 所示，算法利用距离度量计算数据点之间的成对距离，以建立数据的量子纠缠表示。这些成对距离被编码到量子态中，使纠缠态能够表示数据点之间的关系。与经典方法相比，这种编码方法使算法能够更有效地评估数据点之间的距离。

Q-Forest 算法的核心过程包括构建量子决策树，其中数据点会被递归地划分为子集，直到满足终止准则。量子决策树通过为每个节点确定最优分裂点来构建，以最小化不纯度度量。在此过程中，利用量子并行性高效地探索所有潜在的分裂点。树构建完成后，可根据新数据点的量子纠缠表示对其进行聚类或分类。

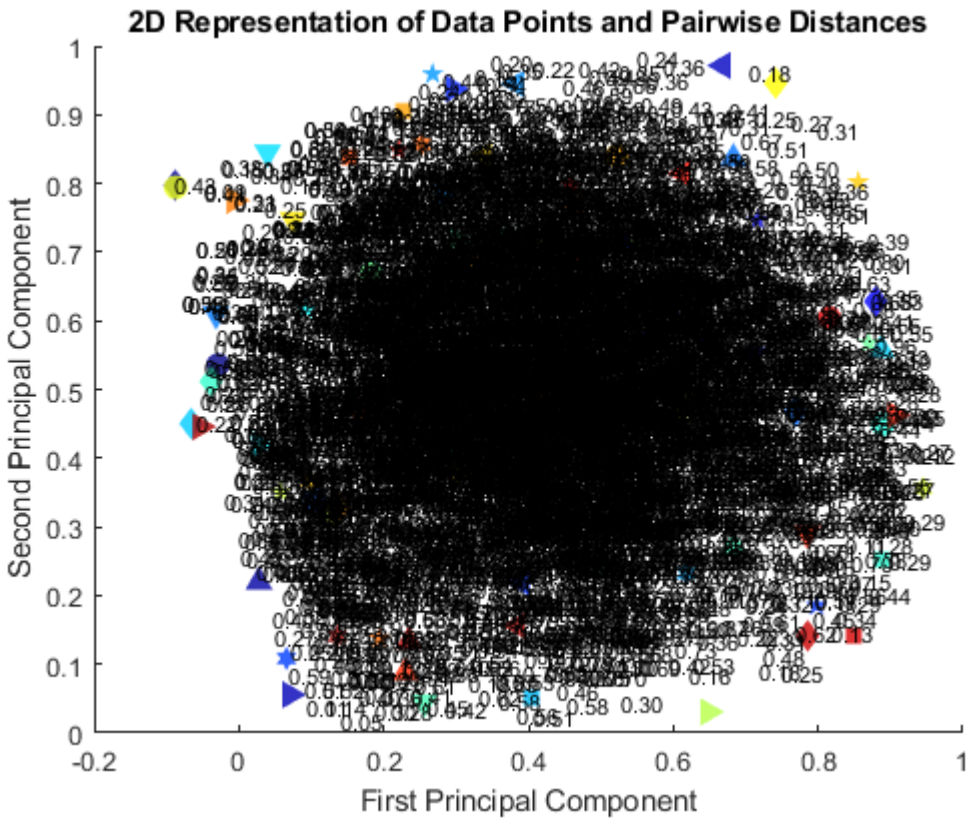


图 9：使用距离度量计算数据点之间的成对距离，以建立量子纠缠

所得的度量特征列于表3中。

表3：Q-Forest 算法的特征指标

MSE	MAE	解释方差得分
56.905	7.479	0.2957

F图 10 展示了解释方差得分随训练迭代的变化 s.

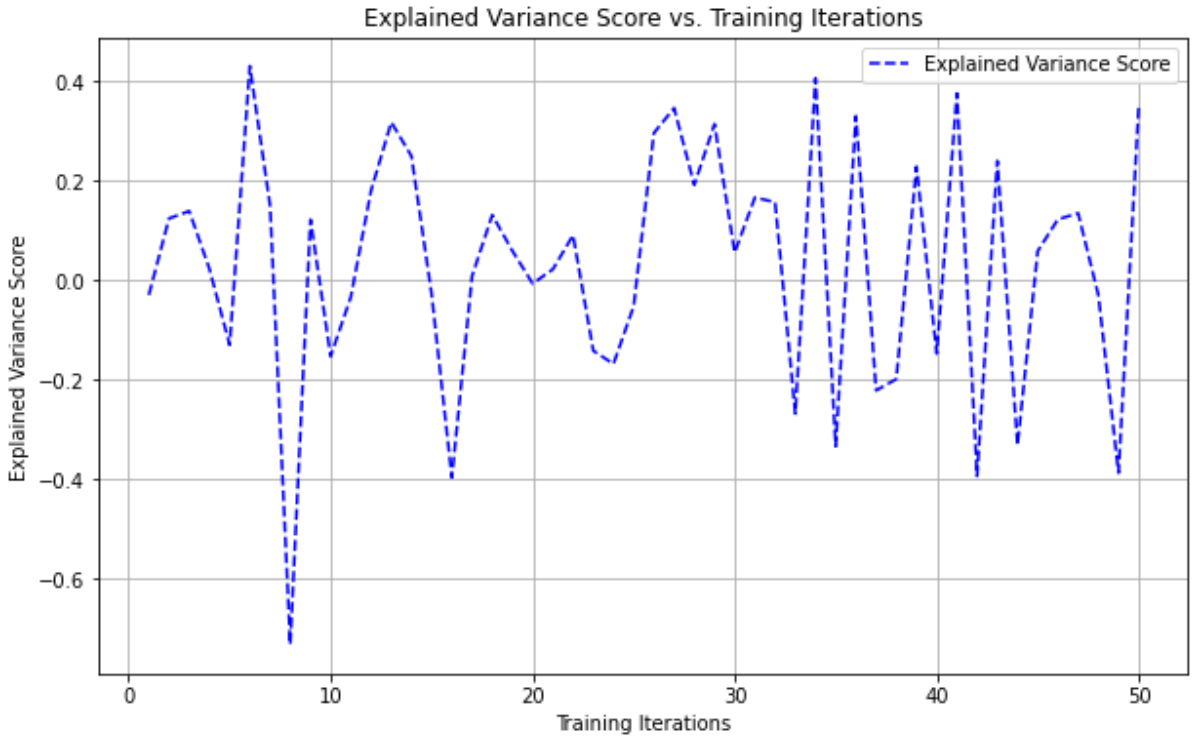


图 10：Q-Forest 算法的解释方差得分与训练迭代次数的关系

4.3 适用于回归的变分量子分类器（VQC）

适用于回归的变分量子分类器（VQC）是一种量子-经典混合机器学习算法，利用量子电路执行回归任务。在这种方法中，会制备一个参数化量子电路，其可调参数由 θ 表示。量子电路充当特征映射，将输入数据编码到高维量子态中。随后，编码后的数据由第二个参数化量子电路进行处理，该电路称为变分电路，负责执行实际的回归。变分电路的输出是一个连续值，通过测量特定可观测量的期望值获得。为了使 VQC 适用于回归，会对损失函数进行调整，以衡量预测的连续值与实际目标值之间的差异。该损失函数用于在经典优化循环中优化变分电路的参数。通过迭代更新电路参数，VQC 模型能够学习数据中的潜在模式，并具备对未见数据点进行预测的能力。

所得的度量特征如表 4 所示。

表 4：针对回归调整的变分量子分类器（VQC）获得的特征指标

MSE	MAE	解释方差得分
59.121	7.597	-0.0106

F图11显示了解释方差得分随训练迭代次数的变化 s.

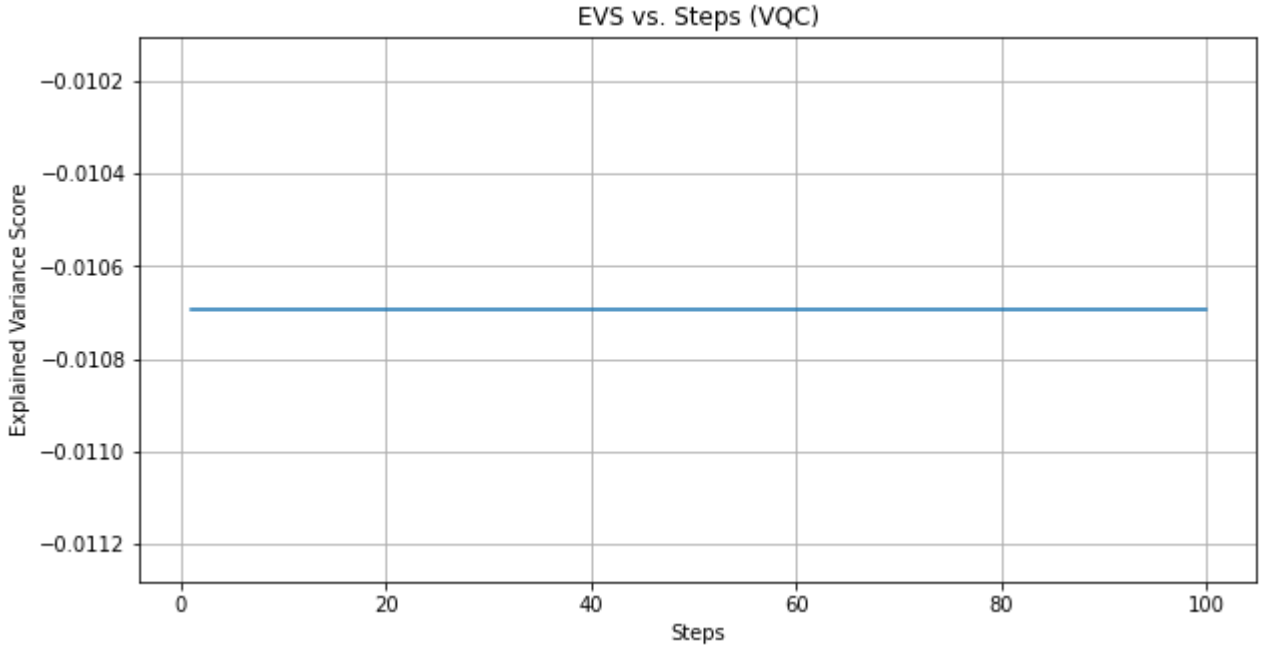


图11：适用于回归的变分量子分类器（VQC）的解释方差得分与训练迭代次数对比

图12展示了所得结果的总体比较。我们的结果表明，就均方误差和平均绝对误差而言，Q-Forest 算法优于另外两种算法。Q-Forest 的均方误差为 56.905，平均绝对误差为 7.479，而 QNN 和 VQC 算法的均方误差分别为 60.840 和 59.121，平均绝对误差分别为 7.671 和 7.597。较低的均方误差和平均绝对误差值表明模型在预测准确度方面表现更好，这说明与其他算法相比，Q-Forest 更适合这一特定的回归任务。此外，解释方差得分（解释方差分数）表明，Q-Forest 算法解释了数据总方差的 29.57%，而 QNN 和 VQC 算法的解释方差分数分别为 -44.4% 和 -1.06%。较高的解释方差得分意味着模型能够更好地解释数据集中的方差，因此，Q-Forest 算法在这一方面同样展现出更优的性能。这些发现表明，在所研究的数据集和问题背景下，与 QNN 和 VQC 算法相比，Q-Forest 算法是解决回归任务的更有效方法。然而，需要注意的是，量子算法的性能可能因具体问题、数据集和超参数设置而有所不同。因此，有必要开展进一步研究，以探讨我们的发现能否推广到不同的数据集和回归任务。此外，将这些量子算法与经典机器学习算法进行比较也很有意义，这可能有助于深入了解量子计算在回归分析领域的优势与局限性。

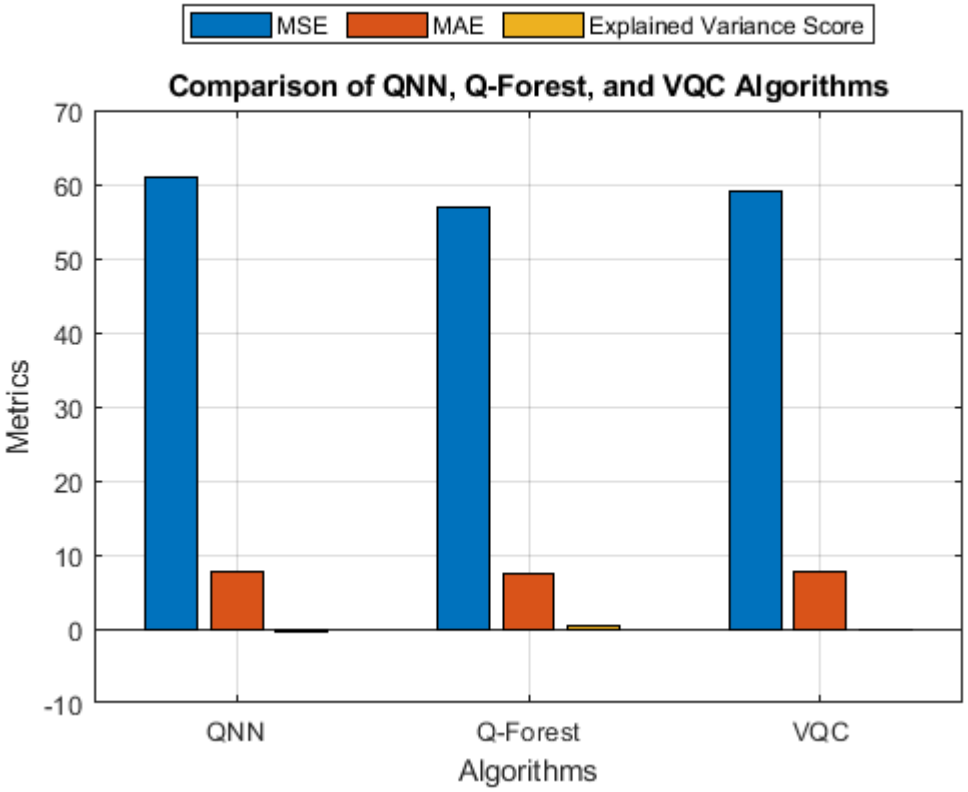


图12：所实现算法的比较

5. 结论

本研究的主要目标是比较三种针对回归任务进行调整的量子算法——量子神经网络、Q-Forest 和 VQC——在预测增材制造试样表面粗糙度方面的性能。根据我们的分析，Q-Forest 算法表现最佳，其均方误差为 56.905，平均绝对误差为 7.479，解释方差分数为 0.2957。这表明，与另外两种算法相比，Q-Forest 算法不仅能提供更准确的预测，还能解释数据集中更大比例的方差。量子神经网络算法的均方误差较高，为 60.840，平均绝对误差为 7.671，且解释方差分数为 -0.444，这表明它可能不太适合预测增材制造试样的表面粗糙度。同样，针对回归任务调整的 VQC 的均方误差为 59.121，平均绝对误差为 7.597，解释方差分数为 -0.0106，表明其性能也逊于 Q-Forest 算法。

参考文献

1. Steane, A.，1998年。量子计算。《物理学进展报告》，61(2)，第117页。2. 美国国家科学、工程与医学科学院，2019年。量子计算：进展与前景。

3. Rawat, B.、Mehra, N.、Bist, A.S.、Yusup, M. 和 Sanjaya, Y.P.A.，2022年。量子计算与人工智能：影响与可能性。ADI《近期创新期刊》，3(2)，第202-207页。4. Lubinski, T.、Johri, S.、Varosy, P.、Coleman, J.、Zhao, L.、Necaise, J.、Baldwin, C.H.、Mayer, K. 和 Proctor, T.，2023年。面向应用的性能基准。IEEE《量子工程汇刊》。5. Suzuki, Y.、Endo, S.、Fujii, K. 和 Tokunaga, Y.，2022年。量子错误缓解作为通用错误降低技术：从含噪声中等规模量子时代到容错量子计算时代的应用。PRX Quantum，3(1)，第010345页。6. Guijo, D.、Onofre, V.、Del Bimbo, G.、Mugel, S.、Estepa, D.、De Carlos, X.、Adell, A.、Lojo, A.、Bilbao, J. 和 Orus, R.，2022年。用于制造业缺陷检测的量子人工视觉。arXiv预印本 arXiv:2208.04988。7. Yonaga, K.、Miyama, M.、Ohzeki, M.、Hirano, K.、Kobayashi, H. 和 Kurokawa, T.，2022年。利用拉格朗日分解进行量子优化，以实现钢铁制造中的多工序调度。Isij International，62(9)，第1874-1880页。8. Permin, E.、Borgard, S.、Castillo Velasquez, L. 和 Pyschny, N.，2022年。利用量子计算机降低作业车间调度复杂度的简单方法。可通过 SSRN 4259131 获取。9. Zinner, M.、Dahlhausen, F.、Boehme, P.、Ehlers, J.、Bieske, L. 和 Fehring, L.，2022年。量子计算在药物研究中的制度化。《今日药物发现》，27(2)，第 378-383 页。10. Nakano, A.，2023 年。人工智能与量子计算引导的百亿亿次级量子材料模拟。《美国物理学会公报》。11. Sennane, W.、Rancic, M.、Greene-Diniz, G.、Zsolt Manrique, D.、Magnin, Y.、Cordier, P.、Llewellyn, P.、Krompiec, M.、Muñoz Ramo, D. 和 Shishenina, E.，2023年。利用量子计算对金属有机框架中的碳捕集进行建模。《美国物理学会公报》。12. Orth, P.、Mukherjee, A.、Yao, Y.X.、Huynh, A. 和 Trevisan, T.，2023 年。Hubbard 模型中非线性光学响应的量子计算模拟。《美国物理学会公报》。13. Matsuo, S. 和 Souma, S.，2023年。提出一种量子计算算法，用于求解诺伊曼边界条件下纳米尺度器件的泊松方程。《固态电子学》，200，第108547页。