Computação Quântica e Otimização Combinatória: O problema de p-medianas

Roberval Gonçalves Moreira Filho
Universidade Federal de São Paulo
Avenida Cesare Mansueto Giulio Lattes, 1201 - Jardim Santa Ines I, São José dos Campos - SP,
roberval.filho@unifesp.br

Davi Juliano Ferreira Alves
Universidade Federal de São Paulo
Avenida Cesare Mansueto Giulio Lattes, 1201 - Jardim Santa Ines I, São José dos Campos - SP,
davijulianoalves@gmail.com

Luiz Leduíno de Salles Neto
Universidade Federal de São Paulo
Avenida Cesare Mansueto Giulio Lattes, 1201 - Jardim Santa Ines I, São José dos Campos - SP,
luiz.leduino@unifesp.br

RESUMO

Este artigo aborda o problema de localização de facilidades, especificamente o problema de P-Medianas. O objetivo é escolher pontos em um mapa para minimizar a distância total de viagem ponderada pela demanda. Foram utilizadas modelagens clássicas e Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO). O modelo QUBO foi executado em um computador clássico e em um simulador de computador quântico. O GurobiPy foi usado para resolver o modelo clássico e o Qiskit para o computador quântico. De 4 instâncias testadas, apenas uma teve disparidade em relação ao tempo e disposição das cidades. A simulação do computador quântico suportou apenas 3 cidades. Para aumentar o número de qibits e repetições, o simulador do computador quântico leva aproximadamente 8 horas.

PALAVRAS CHAVE. P-Medianas, QUBO, computador quântico.

Outras aplicações em OR

ABSTRACT

This article addresses the facility location problem, specifically the P-Median problem. The goal is to choose points on a map to minimize the total weighted travel distance by demand. Classic and Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) models were used. The QUBO model was run on a classic computer and on a quantum computer simulator. GurobiPy was used to solve the classic model and Qiskit for the quantum computer. Of 4 instances tested, only one had disparity in relation to time and disposition of cities. The quantum computer simulation supported only 3 cities. To increase the number of qubits and repetitions, the quantum computer simulator takes approximately 8 hours.

KEYWORDS. P-Medians, QUBO, quantum computer.

Other applications in PO

1. Introdução e descrição do problema

O problema de P-Medianas, de acordo com Daskin e Maass [2015], consiste em localizar p centros de modo a minimizar a distância total de viagem ponderada pela demanda dos vértices e pela demanda dos centros. O problema de P-Medianas é um dos vários problemas clássicos de localização que também incluem os problemas de localização de instalações capacitadas e não capacitadas, os problemas de P-Centros, os problemas de cobertura e problemas de anti-cobertura. Kariv e Hakimi [1979] prova que o problema de P-Medianas é um problema NP-Difícil (De acordo com Rosário et al. [2002], são problemas para os quais não se conhecem algoritmos polinomiais capazes de obter a solução exata) para qualquer grafo. O problema de P-Medianas introduz diversos problemas de localização de facilidades (Alves [2022]).

De acordo com Pedroso et al. [2019], o clássico problema de localização de facilidades consiste em escolher o melhor entre os locais potenciais, sujeito a restrições que exigem que as demandas em vários pontos deverão ser atendidas pelas instalações estabelecidas.

Dentro dos problemas de localização de facilidades, há diversos problemas que se enquadram na classe. Entretanto, este estudo abordará um problema em específico: o problema de P-Medianas. De acordo com Rosário et al. [2002], as primeiras formulações do problema das P-Medianas foram apresentadas em Hakimi [1964], onde foram demonstrados dois teoremas fundamentais para a obtenção de soluções para o problema das P-Medianas.

Os objetivos principais são elaborar uma modelagem QUBO(Quadratic Unconstrained Binary Optimization) e comparar os resultados com os resultados encontrados na literatura, bem como as formulações clássicas e variações.

2. Metodologia

A metodologia deste trabalho consiste em entender o problema, selecionar instâncias e revisar técnicas de solução existentes. As formulações QUBO foram desenvolvidas e executadas com instâncias da literatura. Por fim, o desempenho das formulações foi comparado com resultados oriundos das instâncias sintéticas.

2.1. Método exato

O objetivo desse nosso modelo é minimizar a soma dos gastos necessários para os veículos disponíveis realizarem as entregas de todos os produtos. Seja $d_{i,j}$ uma constante que define a distância entre a cidade i e a cidade j e $x_{i,j}$ uma variável binária que define se o trajeto entre a cidade i e j faz parte do resultado, nosso objetivo é minimizar a função:

$$\min \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} d_{i,j} x_{i,j} \tag{1}$$

Já as restrições que devem ser satisfeitas são as seguintes:

- Restrições que garantem que cada vértice esteja conectado com pelo menos um centro:

$$\sum_{i=1}^{n} x_{i,j} = 1, \quad \text{para cada } j \in N \tag{2}$$

- Restrições que garantem a existência de exatamente p localizações de facilidades:

$$\sum_{i=1}^{n} x_{i,i} = p \tag{3}$$

- Restrições que garantem que cada ponto j deve ser estritamente alocado a uma facilidade i:

$$x_{ij} \leq x_{ii} \quad i, j \in N \tag{4}$$

- Restrições que garantem que o problema é um problema de programação linear 0-1, correspondendo as restrições de integralidade.

$$x_{ij} \in \{0, 1\} \quad i, j \in N \tag{5}$$

Essa é a descrição do modelo, implementado em `Python`, usando a biblioteca `gurobipy`.

2.2. Método QUBO

Um modelo QUBO não tem restrições e pode ser obtido a partir de um modelo clássico através de técnicas como a transformação de inequações em penalizações na função objetivo (Glover et al. [2022]). O objetivo do modelo QUBO é minimizar a soma das distâncias entre os vértices e as facilidades, verificada pela penalização das restrições.

$$\min \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{i,j}x_{i,j} + L(\sum_{j\in N}((1-\sum_{k=1}^{n} x_{k,j})^2)) + L((p-\sum_{i=1}^{n} x_{i,i})^2) + L(\sum_{i,j\in N}(x_{i,j} - x_{i,j}x_{i,i})) \tag{6}$$

O Método QUBO, foi executado no Qiskit, que de acordo com IBM [2021], é um simulador de computadores quânticos desenvolvido pela IBM para melhor aproximar do verdadeiro computador quântico, gerando uma experiência de desenvolvimento e preparação para a tecnologia quântica. Para resolver esse modelo, foi utilizado o algoritmo quântico de Grover [1996].

3. Resultados

Nesta seção, são apresentados resultados do modelo exato e do modelo QUBO em instâncias sintéticas no computador clássico e no simulador Qiskit de computador quântico. As instâncias combinam subconjuntos de cidades e facilidades. Os tempos de execução no computador clássico são mostrados na Tabela 1 e os resultados na Tabela 2.

	Clássico (s)	QUBO (s)
(5,1)	0,104	0,113
(10,2)	0,214	0,300
(20,4)	0,209	1693,156

Tabela 1: Resultados computacionais para os modelos Clássico e QUBO

	Cidades (Clássico)	Cidades (QUBO)	FO (Clássico)	FO (QUBO)
(5,1)	2	2	10,9301065	10,9301065
(10,2)	2, 8	2, 8	15,0551998	15,0551998
(20,4)	2, 4, 13, 19	2, 9, 10, 17	27,0001599	27,0000381

Tabela 2: Resultados do problema para os modelos Clássico e o QUBO.

Para o modelo QUBO dentro do Qiskit (IBM [2021]), ele conseguiu executar apenas até 3 variáveis, ou seja, em uma redução da primeira instância para 3 cidades. Devido ao limite de variáveis do simulador, não foi possível executar para 4 cidades ou mais. Iterando entre qbits e repetições dentro do algoritmo, há a Tabela 3 que apresenta os resultados dentro do Qiskit (IBM [2021]).

Execução	Qbits	Repetições	FO	Tempo (s)
1	5	1	112,79	6,484
2	9	1	69,63	50,228
3	5	2	43,16	84,376
6	5	3	53,16	651,062
9	7	5	20,0	27.783,182

Tabela 3: Resultados do problema para o modelo QUBO dentro do Qiskit (IBM [2021])

4. Conclusão

O trabalho cumpriu a proposta de testar as formulações clássica e QUBO no computador clássico e no simulador do computador quântico. A comparação com a literatura não foi possível devido aos tempos computacionais e à baixa quantidade de variáveis aceitas no Qiskit. Apesar do tempo elevado do Qiskit para execução dos problemas, ele gerou bons resultados quando houveram mais qubits.

Comparando o resultado obtido pelo modelo clássico com os resultados obtidos pela modelagem QUBO, vemos que os resultados obtidos pelo modelo clássico ainda são superiores e com um tempo de processamento ainda menor, exceto para uma instância. Dentre os três métodos utilizados, a modelagem clássica ainda permanece com sua soberania. Em trabalhos futuros, gostaríamos de melhorar a abrangência das instâncias e adicionar centros de backup dentro das p medianas como no P-Next Center Problem (Alves [2022]).

Os autores gostariam de agradecer á Fundação de Amparo á Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP-Brasil) [números de financiamento 2021/03269-7].

Referências

Alves, D. J. F. (2022). Meta-heurística brkga-ql aplicada ao problema de p-próximo centro.

Daskin, M. S. e Maass, K. L. (2015). The p-median problem. In *Location science*, p. 21–45. Springer.

Glover, F., Kochenberger, G., Hennig, R., e Du, Y. (2022). Quantum bridge analytics i: a tutorial on formulating and using qubo models. *Annals of Operations Research*, p. 1–43.

Grover, L. K. (1996). A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, p. 212–219.

Hakimi, S. L. (1964). Optimum locations of switching centers and the absolute centers and medians of a graph. *Operations research*, 12(3):450–459.

IBM (2021). Qiskit: An open-source framework for quantum computing.

Kariv, O. e Hakimi, S. L. (1979). An algorithmic approach to network location problems. ii: The p-medians. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 37(3):539–560. ISSN 00361399. URL `http://www.jstor.org/stable/2100911`.

Pedroso, J. P., Rais, A., Kubo, M., e Murama, M. (2019). Mathematical optimization documentation.

Rosário, R., Carnieri, C., e Steiner, M. T. A. (2002). Proposta de solução para o problema das p-medianas na localização de unidades de saúde 24 horas. *XXII ENEGEP*.