57º SBPO
SIMPÓSIO BRASILEIRO DE PESQUISA OPERACIONAL
Gramado • RS
DE 5 A 9 DE OUTUBRO DE 2025

OTIMIZAÇÃO DA REDE DE DISTRIBUIÇÃO DE HIDROGÊNIO VERDE NO NORDESTE BRASILEIRO UTILIZANDO ALGORITMO QUÂNTICO

Vitoria Milena Alves Bezerra[a,b]
vitoria.milena@ufpe.br
Isis Didier Lins[a,b]
isis.lins@ufpe.br
Lavínia Maria Mendes Araújo[a,b]
lavinia.mendes@ufpe.br

[a]Centro de Estudos e Ensaios em Risco e Modelagem Ambiental (CEERMA)
[b]Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)

RESUMO

A crescente demanda por fontes de energia limpa tem impulsionado o interesse pelo hidrogênio verde (H_2V), produzido por eletrólise utilizando energia renovável. Nesse contexto, o Nordeste brasileiro, com elevado potencial de geração eólica e solar, destaca-se como um polo estratégico para a produção e distribuição de H_2V. Este estudo propõe a aplicação de algoritmos de otimização quântica para resolver o problema de localização de instalações (p-medianas) em instâncias de rede de distribuição de H_2V na região. O problema foi resolvido por meio do *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA), a partir de simulador quântico, utilizando os otimizadores COBYLA e SPSA. A pesquisa busca avaliar a viabilidade do uso da computação quântica na otimização logística dessa cadeia de suprimentos. Por fim, os resultados obtidos indicam o potencial desses métodos para aplicações na indústria de energia, apesar das atuais limitações de escalabilidade dos métodos quânticos.

PALAVRAS CHAVE. Otimização quântica. Hidrogênio verde. Rede de distribuição.

Tópicos: SE-QPO, OQ.

ABSTRACT

The growing demand for clean energy sources has driven interest in green hydrogen (GH_2), produced via electrolysis using renewable energy. In this context, Northeastern Brazil, with its high wind and solar potential, stands out as a strategic hub for GH_2 production and distribution. This study proposes the use of quantum optimization algorithms to solve the facility location problem (p-median) for the GH_2 distribution network in the region. The model was solved using the Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA), with COBYLA and SPSA optimizers. The research aims to assess the feasibility of quantum computing for logistical optimization within this supply chain. The results highlight the potential of quantum optimization methods for real-world applications in the energy sector, despite current limitations in hardware scalability.

KEYWORDS. Quantum optimization. Green hydrogen. Distribution network.

Paper topics: SE-QPO, QO.

1. Introdução

O avanço na busca por soluções energéticas sustentáveis tem intensificado o interesse global pelo hidrogênio verde (H_2V), obtido via eletrólise da água alimentada por fontes renováveis [Kazi et al. 2021]. Dentre as regiões brasileiras, o Nordeste se destaca pelo seu elevado potencial de geração eólica e solar, o que o posiciona estrategicamente como um polo promissor para a produção e distribuição de H_2V [Derse et al. 2020].

No entanto, a implementação de uma infraestrutura eficiente para a distribuição do hidrogênio verde impõe desafios logísticos significativos, incluindo a seleção de pontos estratégicos para a instalação de centros de distribuição [Derse et al. 2020]. Essa configuração pode ser formalizada como um problema de localização de instalações, que pode ser modelado com um problema de p-medianas, para determinar os melhores pontos para instalação de unidades de distribuição, de forma a minimizar a distância total entre essas unidades e os centros consumidores [Arenales et al. 2007; Lima et al 2024].

Na literatura, diversas abordagens são adotadas para otimizar a Cadeia de Suprimento de Hidrogênio, refletindo sua complexidade estrutural [Parolin et al. 2022]. Entre elas, destacam-se os Modelos de Programação Linear Inteira Mista (MILP), amplamente usados no planejamento logístico [Lima et al. 2024]. No entanto, a computação quântica (CQ) tem se consolidado como uma alternativa promissora para a resolução de problemas de otimização combinatória, uma vez que seus algoritmos exploram princípios da mecânica quântica capazes de lidar com a complexidade inerente a esse tipo de problema.

Este trabalho propõe a aplicação de algoritmos de otimização quântica na resolução do problema das p-medianas, com foco na otimização da rede de distribuição de H_2V no Nordeste brasileiro. Para isso, serão testadas instâncias com dados de diferentes capitais do Nordeste, modeladas no formato *Quadratic Unconstrained Binary Optimization* (QUBO) e resolvidas por meio do *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA), com os otimizadores *Constrained Optimization by Linear Approximations* (COBYLA) e *Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation* (SPSA). O objetivo é avaliar a viabilidade e o potencial da CQ como ferramenta de apoio à transição energética e ao fortalecimento da economia do H_2V no Brasil.

2. Metodologia

Este estudo está estruturado em duas etapas metodológicas principais: (1) a transformação do problema de p-medianas em uma formulação do tipo QUBO; e (2) a aplicação do QAOA para resolver o problema formulado, por meio de simulador quântico, utilizando a biblioteca Qiskit da IBM como ferramenta computacional.

Como as variáveis do modelo já eram binárias por natureza, o principal desafio consistiu em incorporar as restrições clássicas do problema como penalidades na função objetivo, de forma a atender à estrutura binária e quadrática exigida pela formulação QUBO — modelo compatível com algoritmos de otimização quântica [Wang e Kleinberg 2009]. Assim, neste trabalho, adotou-se a formulação do problema de localização de facilidades exposta nas Equações (1)-(5).

$$Min \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n-1} D_i \cdot d_{i,j} \cdot x_{i,j} \quad \text{(função objetivo: custo total)} \quad (1)$$

$$\sum_{j=0, j\neq i}^{n-1} x_{i,j} + y_i = 1 \,, \forall i \in \{0, \dots, n-1\} \quad \text{(exclusividade funcional da localização)} \quad (2)$$

$$x_{i,j} \leq y_i, \forall i \neq j \quad \text{(dependência da existência de instalação)} \quad (3)$$

$$\sum_{j=0}^{n-1} y_j = p \quad \text{(número fixo de instalações)} \quad (4)$$

$$x_{i,j} \in \{0,1\}, y_i \in \{0,1\}, , \forall i, j \quad \text{(natureza das variáveis de decisão)} \quad (5)$$

Esta formulação, baseada na proposta de Lima et al. [2024], visa otimizar a alocação de instalações para distribuição de H_2V entre n cidades, considerando a abertura de p instalações. O modelo utiliza variáveis binárias $x_{i,j}$ para indicar se a cidade i é atendida por uma instalação na cidade j, e y_i para indicar se a cidade i abriga uma instalação. Embora ainda não incorpore restrições de capacidade, a abordagem foca em minimizar o custo total de transporte, assumindo que esse custo aumenta proporcionalmente à demanda anual D_i da cidade e à distância $d_{i,j}$ entre

ela e a instalação que a atende. Dessa forma, o modelo adota um critério realista para avaliar a viabilidade da rede de distribuição de H_2V, com foco na alocação eficiente e economia logística.

Os testes foram realizados com dados geográficos e de demanda de sete capitais do Nordeste: Salvador, Fortaleza, Recife, Natal, Teresina, João Pessoa e Maceió, com distâncias euclidianas estimadas a partir de coordenadas geográficas. As cidades foram selecionadas com base em representatividade regional e tamanho populacional e estão expostas na Tabela 1. As demandas foram obtidas de Lima et al. [2024], que considerou população, frota veicular, penetração de mercado e consumo médio de hidrogênio nas localizações descritas.

Cidades	Fortaleza	Salvador	Recife	Natal	Teresina	João Pessoa	Maceió
Latitude	-3,7275	-12,9747	-8,0500	-5,7833	-5,0949	-7,1200	-9,6658
Longitude	-38,5275	-38,4767	-34,9000	-35,2000	-42,8042	-34,8800	-35,7350
Demanda	24.039,75	20.435,56	17.307,13	9.527,00	9.364,52	7.503,90	6.731,44

Tabela 1: Dados sobre as cidades utilizadas.
Fonte: Lima et. al [2024].

Com base nas sete capitais nordestinas selecionadas, foram definidas duas instâncias de teste, agrupando-as em dois subconjuntos de forma que o número total de bits quânticos (*qubits*) necessários à modelagem não excedesse o máximo permitido no simulador quântico QASM (*Quantum Assembly*) da biblioteca Qiskit, desenvolvida pela IBM. A divisão também considera uma analogia com a capacidade de fornecimento de H_2V, separando as cidades conforme os níveis de demanda, como uma forma preliminar de avaliar a viabilidade da rede, mesmo sem a imposição explícita de restrições de capacidade. Com isso, serão abordadas estas duas instâncias:

- **Instância 1 (Demandas $\geq$ 10.000):** Fortaleza, Salvador, Recife;
- **Instância 2 (Demandas $\leq$ 10.000):** Natal, Teresina, João Pessoa e Maceió.

Na segunda etapa, o modelo foi resolvido com o algoritmo QAOA, que utiliza o princípio variacional para aproximar soluções de problemas de otimização, minimizando a energia esperada de um estado fundamental [Blekos et al 2023]. Ao receber as instâncias no formato QUBO, cria-se um circuito quântico representando o problema, onde os parâmetros inicializados são ajustados iterativamente usando algoritmos clássicos de otimização como o COBYLA e o SPSA, que foram selecionados com base na eficiência em experimentos anteriores. Para cada instância, são avaliadas métricas como: tempo médio de execução, custo médio da solução e comportamento do algoritmo frente à variação da quantidade de instalações (p).

3. Resultados

Os resultados foram obtidos com o uso do algoritmo QAOA de uma camada, considerando três estratégias de inicialização dos parâmetros: aleatória, LHS (*Latin Hypercube Sampling*) e ponto fixo (vetor com valores 0,5), considerando 30 iterações para cada estratégia de inicialização. Na Instância 1, composta por três cidades, a formulação do problema exigiu 9 *qubits.* Já na Instância 2, com quatro cidades, foram necessários 16 *qubits*, o que evidencia o aumento da complexidade computacional com a ampliação do número de locais. Esse crescimento está diretamente relacionado ao tamanho da matriz de alocação, que representa quais pontos de demanda são atribuídos a quais instalações abertas e determina o número de variáveis binárias necessárias na modelagem, consequentemente, *qubits*.

Os resultados desse estudo consideram exclusivamente os custos de transporte, desconsiderando os custos de construção das instalações. Assim, os valores apresentados refletem apenas o custo logístico da distribuição do H_2V, com base nas distâncias e demanda das cidades. Na Instância 1 (maiores demandas), para $p = 1$, o custo ótimo foi de 260.035 u.m., com uma instalação em Recife atendendo Salvador e Fortaleza. Para $p = 2$, o custo reduziu-se para 97.665 u.m., com centros em Salvador e Fortaleza, e Recife atendida por Fortaleza. Na Instância 2, para $p = 1$, o custo foi de 156.415 u.m., com Natal atendendo Teresina, São Luís e João Pessoa. Para $p = 2$, o custo caiu para 33.250 u.m., com centros em Natal (atendendo João Pessoa) e Teresina (atendendo São Luís). Com $p = 3$, o custo total foi de 10.313,88 u.m., com instalações em Natal, Teresina e São Luís, sendo João Pessoa atendida por Natal. O desempenho do QAOA nessas instâncias é apresentado nas Tabelas 2 e 3, incluindo os valores médios, os respectivos desvios padrão e a convergência em relação ao valor ótimo encontrado.

		INSTÂNCIA 1					
		COBYLA			SPSA		
		Custo	Tempo	Conver.	Custo	Tempo	Conver.
ALE	$p = 1$	260.035 ± 0	0,50s ± 0,02s	100,00%	260.035 ± 0	2,18s ± 0,08s	100,00%
	$p = 2$	97.665 ± 0	0,47s ± 0,02s	100,00%	97.665 ± 0	2,11s ± 0,04s	100,00%
LHS	$p = 1$	260.035 ± 0	0,47s ± 0,02s	100,00%	260.035± 0	2,08s ± 0,03s	100,00%
	$p = 2$	97.665 ± 0	0,47s ± 0,01s	100,00%	97.665 ± 0	2,07s ± 0,03s	100,00%
PF	$p = 1$	260.035 ± 0	0,46s ± 0,01s	100,00%	260.035 ± 0	2,05s ± 0,03s	100,00%
	$p = 2$	97.665 ± 0	0,45s ± 0,01s	100,00%	97.665± 0	2,07s ± 0,04s	100,00%
		INSTÂNCIA 2					
		COBYLA			SPSA		
		Custo	Tempo	Conver.	Custo	Tempo	Conver.
ALE	$p = 1$	201.068 ± 237.507	58,23s ± 5,71s	96,67%	156.412 ± 0	324,23s ± 3,12s	100,00%
	$p = 2$	81.867 ± 248.012	59,72s ± 6,21s	83,33%	33.784± 1.243	322,71s ± 5,89s	83,33%
	$p = 3$	15.476 ± 17.048	60,21s ± 4,39s	83,33%	11.596 ± 3.831	323,97s ± 3,96s	83,33%
LHS	$p = 1$	179.859 ± 113.344	58,42s ± 4,70s	83,33%	178.474 ± 113.130	318,43s ± 6,46s	76,67%
	$p = 2$	58.312 ± 132.509	58,90s ± 6,36s	83,33%	604.454 ± 3.074.994	325,01s ± 6,26s	93,33%
	$p = 3$	582.624 ± 3.068.064	60,34s ± 3,29s	76,67%	10.827± 2.303	326,73s ± 4,02s	93,33%
PF	$p = 1$	156.415 ± 0	63,35s ± 0,45s	100,00%	156.927 ± 2.538	321,80s ± 4,12s	90,00%
	$p = 2$	36.031 ± 0	56,78s ± 0,30s	00,00%	33.343 ± 499	326,41s ± 5,29s	96,67%
	$p = 3$	10.315 ± 0	59,98s ± 0,42s	100,00%	580.379 ± 3.067.552	329,47s ± 3,17s	93,33%

Tabela 2: Resultados das Instâncias 1 e 2.

Os resultados mostram que o QAOA teve bom desempenho geral. Na Instância 1, ambos os otimizadores foram rápidos e precisos, enquanto na Instância 2 o SPSA se mostrou mais estável, porém mais lento, e o COBYLA apresentou maior variabilidade. Essa diferença de convergência entre as instâncias se deve ao maior número de *qubits*, que aumenta a complexidade e limita a coerência na computação quântica atual, ainda em desenvolvimento e investigação.

4. Conclusões

Os resultados obtidos demonstram que, apesar das limitações atuais da CQ, os algoritmos quânticos apresentam um potencial de aplicação em cadeias de suprimentos. Os experimentos com o QAOA, embora realizados em simuladores e com instâncias de menor escala, mostraram desempenho promissor. O otimizador COBYLA destacou-se pelo menor tempo de execução, enquanto o SPSA, apesar de usar mais tempo, apresentou maior estabilidade em instâncias maiores.

Este estudo contribui de maneira significativa para as pesquisas sobre a aplicação de computação quântica em problemas práticos de otimização, ao apontar para o potencial da CQ em problemas logísticos dentro do setor energético. Nesse sentido, futuras pesquisas podem explorar a inclusão de restrições adicionais, como capacidades e custos fixos, a fim de tornar o modelo mais alinhado com a realidade. Além disso, no campo dos avanços em CQ, testar o impacto de ruídos nos resultados e avaliar o desempenho do modelo em computadores quânticos reais da IBM.

5. Agradecimentos

Os autores agradecem às seguintes agências brasileiras de fomento à pesquisa pelo apoio financeiro: à CAPES (001), ao CNPq (409701/2022-0, 308924/2021-5, 310892/2022-8, 402761/2023-5), à FAPESP e ao Programa de Recursos Humanos 38 da ANP (24/10387-4).

Referências

Arenalles, M. N.; Armentano, V. A.; Morabito, R.; Luna, H. P. L. (2007). Pesquisa operacional para cursos de engenharia. 2nd ed. Rio de Janeiro: Elsevier.

Blekos, K., Brand, D., Ceschini, A., Chou, C.-H., Li, R.-H., Pandya, K., & Summer, A. (2023). A Review on Quantum Approximate Optimization Algorithm and its Variants. Disponível em: https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.09198.

Derse, O., Göçmen, E., Yılmaz, E., & Erol, R. (2020). A mathematical programming model for facility location optimization of hydrogen production from renewable energy sources. Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects, 44:6648–6659. Doi: https://doi.org/10.1080/15567036.2020.1812769.

Kazi, M.K., Eljack, F., El-Halwagi, M. M. & Haouari, M. (2021). Green hydrogen for industrial sector decarbonization: Costs and impacts on hydrogen economy in Qatar. Computers & Chemical Engineering, 145:107144. Doi: https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.107144.

Lima, M.V.S.; Villarim, A.M.A.; Lins, I.D.; Souto Maior, C.B.; Moura, M.C. (2024). Determinação de locais ótimos de produção de hidrogênio verde no Nordeste do Brasil. In: Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás. 2024, Balneário Camboriú.

Parolin, F., Colbertaldo, P. & Campanari, S. (2022). Development of a multi-modality hydrogen delivery infrastructure: An optimization model for design and operation. Energy Conversion and Management, 266: 115650. Doi: https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.115650.

Wang, D., & Kleinberg, R. (2009). Analyzing quadratic unconstrained binary optimization problems via multicommodity flows. Discrete Applied Mathematics, 157(18), 3746–3753. https://doi.org/10.1016/j.dam.2009.07.009.