

https://periodicos.utfpr.edu.br/rbfta

Algoritmo quântico variacional aplicado em um modelo simplificado para otimização de custos em planejamento florestal

RESUMO

A expectativa atrelada à superioridade no desempenho e na segurança dos computadores quânticos em relação às suas contrapartes clássicas vem fomentando cada vez mais o interesse de pesquisadores e do público geral neste tema. Embora a possibilidade de surgirem computadores quânticos que operam em larga escala nos próximos anos seja remota, o desenvolvimento recente dos dispositivos conhecidos como NISQ (*Noisy Intermediate-scale Quantum*) fomentou o interesse em investigar algoritmos que podem apresentar algum tipo de vantagem quântica nestas máquinas. Com base neste propósito, apresentamos neste trabalho um estudo do uso do VQE (*Variational Quantum Eigensolver*) para resolver um modelo sintético relacionado com a otimização de custos no plantio florestal. Os resultados obtidos através dos otimizadores selecionados e da plataforma QISKIT (IBM) comprovam a viabilidade teórica do uso destas ferramentas no âmbito da demonstração de provas de conceito, desde que a escolha da forma variacional do *ansatz* seja compatível com o problema abordado.

PALAVRAS-CHAVE: Planejamento de Silvicultura; Otimização binária; Variational Quantum Eigensolver.

Rodrigo Bloot

rgbloot@gmail.com orcid.org/0000-0001-6504-5718 Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, Paraná, Brasil.

Raphael Fortes Infante Gomes fortesrphael1@gmail.com orcid.org/0000-0002-7199-6533 Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, Paraná, Brasil.

Arnaldo Satoru Gunzi asgunzi@klabin.com.br orcid.org/0009-0002-1376-1725 Klabin SA, São Paulo, Brasil.



INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, a pesquisa e o desenvolvimento dos protótipos de computadores quânticos de escala intermediária - cuja tradução vem de *Noisy Intermediate-scale Quantum* (NISQ: Preskill, J.,2018) - acelerou a produção de dispositivos capazes de manipular bits quânticos em processos computacionais (Feynman, 2012; Roukes, 2008). Com o avanço da tecnologia e devido ao acúmulo crescente de erros nas respectivas operações, surge a necessidade de ampliar o estudo e a adaptação de algoritmos que sejam compatíveis com estes dispositivos. Neste contexto, alguns algoritmos quânticos que possuem vantagens teóricas em comparação às respectivas contrapartes clássicas já foram reproduzidos com sucesso, como os modelos apresentados por David Deutsch em 1985 e 1992 (sendo o último em colaboração com Richard Jozsa).

Com base nesta premissa, existe a expectativa de que determinados algoritmos quânticos possam ser utilizados como uma alternativa para solucionar problemas no contexto específico dos modelos de plantio florestal, desde que os primeiros apresentem um tempo de execução viável e permitam gerar resultados mais robustos. No entanto, a viabilidade de produzir computadores quânticos com uma capacidade funcional significativa ainda está longe de ser concretizada.

Todavia, por mais que o campo de atuação destes protótipos esteja limitado, o panorama atual gera oportunidades promissoras para testar estes algoritmos através de simuladores em cenários nos quais o interesse consiste em validar os conceitos associados aos respectivos modelos. Neste sentido, é importante analisar problemas atrelados a propostas interessantes que já possuam resultados bem estabelecidos, para que o desempenho das técnicas de computação quântica apresentadas ao longo dos últimos anos possa ser comparada diretamente com o desempenho obtido através das ferramentas computacionais contemporâneas.

Munidos deste propósito, analisaremos o desempenho de um algoritmo quântico variacional aplicado a um problema de modelagem de custos no plantio florestal. Para esta finalidade, abordaremos um problema sintético simplificado (que pode ser escalado posteriormente) para compreender e comparar os resultados obtidos na plataforma QISKIT (Javadi-Abhari *et. al.*,2004) com soluções clássicas bem definidas. Neste caso, o modelo será construído com base em hipóteses simplificadas do problema real, onde a respectiva solução é previamente determinada.

Desse modo, a estratégia para solucioná-lo consistirá em aplicar um processo de otimização linear com variáveis de decisão binárias. O objetivo principal desta abordagem reside em compreender a estrutura do algoritmo ao longo do procedimento, visando futuramente escalar o número de variáveis e aplicar as ferramentas variacionais em dispositivos reais. Por este motivo, exploraremos o modelo através de simuladores quânticos, com a finalidade de prover uma compreensão detalhada de todos os aspectos que envolvem a análise do problema escolhido.

O trabalho foi estruturado de acordo com as seguintes etapas: introduziremos o problema de modo a obter um modelo sintético controlado,

cujos detalhes serão discutidos na seção seguinte. Na sequência, descrevemos brevemente o algoritmo variacional selecionado para resolver o problema-alvo. Em seguida, mostraremos como relacionar o problema linear com sua contraparte física, onde a última é expressa por um Hamiltoniano do tipo Ising (Lucas, A., 2014). Os testes desta prova de conceito foram realizados no simulador QASM com o objetivo de analisar e validar a convergência para o resultado exato. Por fim, estabeleceremos uma comparação entre os métodos, finalizando o trabalho com as discussões e as subsequentes conclusões.

MODELO SINTÉTICO SIMPLIFICADO

A proposta de minimizar os custos de plantio na silvicultura baseia-se na análise de variáveis de decisão binárias que consistem em plantar ou não um certo gênero de madeira em determinados blocos, considerando as respectivas restrições de ordem operacionais. Assim, as decisões são aprovadas de acordo com o número de blocos disponíveis de espécies dos gêneros *Eucalyptus* e *Pinus*, que devem ser plantadas de acordo com um horizonte de planejamento específico.

Em cenários realistas, o total de variáveis de decisão é fruto da multiplicação entre os números de blocos, espécies e o período de tempo decorrido no processo. Desse modo, a grandeza destes parâmetros pode atingir uma escala na ordem de milhões para circunstâncias extremas, restringindo severamente as chances de determinar as soluções ótimas do problema com técnicas convencionais. Alguns exemplos que se enquadram neste quesito estão relacionados à minimização de custos e à maximização da produtividade associada ao plantio das espécies adequadas.

A planilha de custos para este modelo pode ser gerada através de um préprocessamento com informações internas que incluem a produtividade de espécies por bloco, as distâncias entre os blocos e as fazendas, a sazonalidade, dentre outros fatores. Não consideramos todos os aspectos por ora, uma vez que o objetivo consiste em obter a otimização de um problema linear expresso por uma função objetivo que possui uma série de restrições. A **Figura 1** apresenta uma descrição simplificada desta estrutura para um modelo descrito por um conjunto reduzido de parâmetros específicos. Neste caso, as planilhas de custos por bloco, espécie e período foram geradas com informações sobre as condições dos blocos, as distâncias destes em relação à fábrica e outras características implícitas no pré-processamento.

Por sua vez, os custos de plantio estão relacionados aos tipos de gêneros (*Eucalyptus* ou *Pinus*), blocos e períodos de tempo considerados no horizonte de planejamento, cujas variáveis são descritas pelos respectivos conjuntos dados por $I = \{1,2\}, J = \{1,2,3,4\} e K = \{1,2\}$. Além disso, introduzimos uma variável de decisão binária denotada por x_{ijk} , que indicará a decisão de plantar ($x_{ijk} = 1$) ou não ($x_{ijk} = 0$) uma determinada espécie. Como os custos do processo também estão atrelados a estes parâmetros, vamos descrevê-los através do coeficiente com C_{ijk} com $i \in I, j \in J$ e $k \in K$. Desse modo, nosso propósito consiste em minimizar a função objetivo que representa o custo total dada por



$$C_{total} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{4} \sum_{k=1}^{2} C_{ijk} x_{ijk} \,. \tag{1}$$

Figura 1 – Estrutura esquemática indicando a quantidade de blocos, produtos e o horizonte de planejamento para o exemplo que descreve o modelo sintético. Após a etapa de pré-processamento, obtém-se as planilhas de custo relacionadas aos parâmetros de decisão. O padrão de cores adotado nesta figura será mantido para as próximas imagens, onde as combinações de cinza e azul estão relacionadas ao tempo decorrido em cada período, enquanto as legendas em verde e amarelo indicam a madeira dos gêneros escolhidos para os respectivos plantios.





Com base nestas definições, incorporamos uma série de restrições para o problema em questão, a fim de obedecer aos procedimentos de plantio sem desconsiderar fatores essenciais como contratos e outros atributos. Ao mesmo tempo, incluímos o horizonte de planejamentos previamente estabelecido, uma vez que a restrição imposta por

$$\sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{4} a_j \, x_{ijk} = a_k, \tag{2}$$

garante que o total de plantio (em hectares) para cada produto (i) e bloco (j) satisfaz uma quantidade fixa de uma forma bastante restrita para K=1,2. Nos períodos específicos de plantio, podemos avaliar as restrições quando o horizonte de planejamento possui outros índices além dos explicitados na **Equação 2;** entretanto, não será necessário introduzir considerações adicionais na formulação do modelo simplificado abordado neste trabalho.

Ademais, observe que cada parâmetro a_j (ha) está relacionado com a área do respectivo bloco j. Assim, visando otimizar o uso racional dos blocos, introduzimos restrições sobre o plantio de cada produto por um determinado bloco j para que o primeiro seja plantado apenas uma vez ao longo de todo o horizonte de planejamento. Esta condição é expressa pela seguinte relação

$$\sum_{i=1}^{2} \sum_{k=1}^{2} x_{ijk} \le 1, \tag{3}$$

para j = 1, 2, 3, 4.



Além disso, com o intuito de garantir que em determinados períodos de *K* alguns produtos de *I* de não serão atribuídos a nenhum bloco de *J* (por motivos que podem ser de ordem climática ou de sazonalidade, por exemplo), a seguinte restrição deve ser considerada:

$$\sum_{i \in I_I} x_{ijk} = 0, \tag{4}$$

onde $J_l \subset J$ para algum subconjunto contido no conjunto de blocos.

Por fim, vamos considerar uma restrição adicional em que os produtos serão alocados para o plantio somente se a operação estiver liberada em algum bloco *j* para um determinado período *k*. Para o caso do modelo sintético supracitado, esta condição foi incorporada em relação ao segundo bloco (*j* = 2) para um período de tempo k = 1, cuja forma algébrica é dada por

$$x_{121} + x_{221} = 0. (5)$$

Logo, a proposta de minimizar os custos do plantio florestal consiste em formular um problema de otimização linear binário com severas restrições e um número elevado de variáveis de decisão para representar cenários realísticos. Nestas circunstâncias, as soluções baseadas em *solvers* do tipo *Mixed-Integer Programming* (MIP) são utilizadas para resolver o problema através de interfaces como Aimms, Excel e Pyomo. Para os modelos de larga escala que representam cenários reais, os *solvers* CPLEX e GUROBI destacam-se como os mais utilizados dentre aqueles que são baseados em ferramentas da literatura (Land *et al.*, 1960).

ALGORITMOS QUÂNTICOS HÍBRIDOS

Os métodos baseados em algoritmos quânticos variacionais são considerados atualmente como os mais adequados para explorar os recursos de dispositivos NISQ na busca de resultados que demonstrem vantagens quânticas (Cerezo *et al.*, 2021a). Estes algoritmos utilizam a estrutura de um processador quântico através de uma *Quantum Processing Unit* (QPU), que opera em conjunto com CPUs clássicas.

Neste contexto, nosso foco será direcionado para o método introduzido por Peruzzo et al. (2014) denominado de *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), visto que o mesmo pode ser aplicado em uma gama considerável de problemas distintos (Albino *et al.*, 2023). O VQE possui como característica básica o uso de uma forma variacional do tipo *ansatz*, que depende intrinsecamente de um determinado parâmetro β .

Desse modo, o procedimento consiste em determinar o valor de β_* que minimiza a função $g(\beta)$, a qual é definida em termos dos valores esperados do Hamiltoniano \mathcal{H} que define o problema de acordo com o roteiro apresentado na **Figura 2.**



Figura 2 – Estrutura geral do algoritmo VQE.

Fonte: Autoria própria.

A etapa referente ao procedimento de otimização é realizada por uma CPU clássica, e o processo pode ser efetuado com base em técnicas que utilizam derivadas da função objetivo (do tipo gradiente) ou puramente heurísticas. Os valores dos parâmetros são atualizados continuamente até que o algoritmo minimize o problema de otimização irrestrita definido previamente, cujo resultado coincide com o menor valor esperado de \mathcal{H} . A construção dos circuitos variacionais segue a estrutura da teoria canônica da computação quântica, cujos detalhes podem ser consultados em Mermin, N. D. (2007).

FORMULAÇÃO DO TIPO QUBO E SUA RELAÇÃO COM O HAMILTONIANO DE ISING

Na seção anterior, discorremos sobre a necessidade de analisar a expressão do Hamiltoniano associado ao problema de interesse para aplicar o VQE. Logo, precisamos construir uma função associada ao problema de otimização linear binária cujo menor autovalor coincida com o valor mínimo do problema original.

Para este fim, seguiremos o roteiro ilustrado na **Figura 3** e converteremos a formulação inicial para um modelo binário quadrático irrestrito do tipo QUBO (do inglês "*Quadratic Unconstrained Binary Optimization*").

Na sequência, definiremos um Hamiltoniano de Ising que possua as características desejadas para obter a solução do problema. A conversão de um problema linear binário com restrições para o modelo QUBO pode ser realizada através dos procedimentos e exemplos discutidos em Glover, F. (2022).





Figura 3 – Fluxograma estabelecido para solucionar problemas binários utilizando algoritmos quânticos variacionais.

Fonte: Autoria própria.

No presente trabalho, adaptamos as referidas técnicas utilizando as penalidades equivalentes para formular um problema irrestrito, cuja descrição simplificada do método é descrita por Krzyzanowski *et al.* (2023). A **Tabela 1** exibe alguns exemplos da relação entre esta classe de equivalências.

Tabela 1 – Relação entre as restrições e suas respectivas penalidades para modelos prédeterminados. As variáveis $x_1 e x_2$ são variáveis binárias nestes casos ilustrativos.

RESTRIÇÃO	PENALIDADE EQUIVALENTE
$x_1 + x_2 \le 1$	$P(x_1 x_2)$
$x_1 + x_2 \ge 1$	$P(1-x_1-x_2+x_1x_2)$
$x_1 + x_2 = 1$	$P(1-x_1-x_2+2x_1x_2)$
	Fonte: (Glover, 2022).

Com base nas referências supracitadas e aliado ao uso de ferramentas de otimização bem estabelecidas (Ribeiro *et al.*, 2013), podemos converter o problema restrito em um modelo de minimização irrestrita através da condição

$$\min z = C_{total}(x) + Ph(x), \qquad (6)$$

onde P > 0 deve atingir um valor grande o suficiente para que a introdução da penalização preserve a solução mínima do problema original. Desse modo, a expressão dada pela **Equação 6** será utilizada para representar um Hamiltoniano de Ising, o qual pode ser expresso em função dos operadores de Pauli **Z e I**



(Mermin, N. D., 2007). Na modelagem de problemas de otimização binários como o nosso, o Hamiltoniano não contém os demais operadores de Pauli (**X** e **Y**) em sua expressão. Um exemplo didático que discute esta transformação também pode ser consultado em Krzyzanowski *et al.* (2023).

A fim de ilustrar este procedimento e elucidar o cálculo dos valores de $g(\beta)$, vamos analisar um exemplo simplificado: considere um Hamiltoniano descrito por uma matriz diagonal 4x4 e expresso por $\mathcal{H}=\mathbf{Z}\otimes\mathbf{Z}$, onde o símbolo \otimes denota o referido produto tensorial. Considere ainda que o estado $|\psi(\beta)\rangle$ pode ser expresso como um sistema arbitrário de dois níveis:

$$|\psi\rangle = \alpha_1|00\rangle + \alpha_2|01\rangle + \alpha_3|10\rangle + \alpha_4|11\rangle. \qquad (\alpha_i \in \mathbb{C})$$
(7)

Como $|\psi\rangle$ está relacionado com o ansatz definido em conformidade com o diagrama exibido na **Figura 2**, os valores esperados do Hamiltoniano dependem diretamente das amplitudes $|\alpha_i|^2$ (i = 1, 2, 3, 4), as quais são obtidas através das medidas realizadas na última etapa do circuito quântico. Logo, visto que $\mathcal{H}=\mathbf{Z}\otimes\mathbf{Z}$ é uma matriz diagonal, o cálculo do respectivo valor esperado resulta em

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi>=|\alpha_1|^2-|\alpha_2|^2-|\alpha_3|^2+|\alpha_4|^2.$$
 (8)

No problema abordado neste trabalho, $x \in um$ vetor que possui 16 variáveis binárias, isto é, $x_f \in \{0,1\}$ para cada índice $f \in \{1,...16\}$, enquanto a função h(x) corresponde ao somatório das penalidades equivalentes às restrições dadas pelas **Equações 1 a 5**. Por sua vez, \mathcal{H} requer 16 qubits para o cálculo dos valores esperados (cuja expressão contém 15 produtos tensoriais). Logo, a dimensão da matriz do Hamiltoniano de Ising associado ao modelo QUBO do respectivo problema é de $2^{16} \times 2^{16}$. No caso deste operador, a transformação dos QUBO's dados no Apêndice (**Figuras 13 e 14**) obedece as regras abaixo :

$$F(1) \to I \otimes I \otimes \ldots \otimes I , \qquad (9)$$

$$F(x_i) \to I \otimes \ldots \otimes \left[\frac{I-Z}{2}\right]_i \otimes I \otimes \ldots \otimes I$$
, (10)

$$F(x_i x_j) \to I \otimes \ldots \otimes \left[\frac{I-Z}{2}\right]_i \otimes I \otimes \ldots \otimes I \otimes \left[\frac{I-Z}{2}\right]_j \otimes I \otimes \ldots \otimes I.$$
(11)

Sob estas transformações, o Operador Matricial que representa o QUBO na formulação do tipo Ising é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = \sum_{i} J_{i}F(x_{i}) + \sum_{i,j} J_{ij}F(x_{i}x_{j}) + WF(1).$$
(12)

Na expressão acima, J_i , $J_{ij} e W$ são os coeficientes numéricos nas expressões do QUBO dadas no Apêndice e os operadores I e Z são definidos por

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} .$$
(13)

É necessário ressaltar que a simulação deste procedimento através da plataforma QISKIT exige que o usuário esteja atento a algumas peculiaridades do sistema ao interpretar os resultados. Para este exemplo, o cálculo dos valores esperados demanda o processamento simultâneo de 2¹⁶ amplitudes.



Se utilizarmos notebooks convencionais para efetuar todos os cálculos, a construção da matriz pode requerer o uso de uma quantia de memória que muitas vezes não pode ser acessada nestes dispositivos. Por este motivo, a escolha de simuladores exatos baseados em matrizes pode não ser indicada para resolver esta classe de problemas com mais de 15 qubits. Consequentemente, a vantagem de se utilizar um Hamiltoniano de Ising consiste na facilidade de implementar o código sem a necessidade de recorrer às transformações matriciais, como nos cenários em que \mathcal{H} é expresso por outras combinações além dos operadores \mathbf{Z} e I. Nesse caso, os valores das amplitudes na **Equação 8** são obtidos através das medidas realizadas nos circuitos, como ilustrado na **Figura 4**.

Figura 4 – Histograma ilustrativo indicando o valor obtido através das amplitudes de estado (2 qubits), as quais são utilizadas no cálculo dos valores esperados para cada configuração da função de onda. No caso do problema alvo teremos 65.536 (16 qubits) amplitudes no histograma e o VQE vai realçar as amplitudes que correspondem a *''string''* solução do problema.



Fonte: Autoria própria.

EXPERIMENTOS NO SIMULADOR

Nesta seção, apresentaremos os valores e os métodos selecionados para simular o problema. Com o propósito de comparar os resultados deste processo, iniciaremos a análise com um otimizador clássico baseado no método SIMPLEX (Dantzig, 1951) para investigar o modelo com suas respectivas restrições. Este resultado também será comparado com a solução clássica do modelo QUBO obtida com a técnica heurística denominada Evolução Diferencial (STORN and PRICE, 1997), ou simplesmente DE (do inglês "Differential Evolution").

Para isso, consideramos quatro blocos com áreas totais (em hectares) idênticas e fixadas em $a_k = 4$ (ha), $\forall k$ tal que $a_j = 2$ (ha), $\forall j$, e custos como mostra a planilha de descrita na **Figura 5**. No caso da formulação em QUBO do problema alvo (Apêndice) fazemos a simplificação de notação

 $(\square_{111}, \square_{211}, \square_{121}, \square_{221}, \square_{131}, \square_{231}, \cdots, \square_{142}, \square_{242}) \rightarrow (\square_{1}, \square_{2}, \square_{3}, \square_{4}, \square_{5}, \square_{6}, \cdots, \square_{15}, \square_{16}).$

x ₁₁₁	x ₂₁₁	x ₁₂₁	x ₂₂₁	x ₁₃₁	x ₂₃₁	x ₁₄₁	x ₂₄₁
C ₁₁₁	C ₂₁₁	C ₁₂₁	C ₂₂₁	C ₁₃₁	C ₂₃₁	C ₁₄₁	C ₂₄₁
x ₁₁₂	x ₂₁₂	x ₁₂₂	x ₂₂₂	x ₁₃₂	x ₂₃₂	X ₁₄₂	x ₂₄₂
C ₁₁₂	C ₂₁₂	C ₁₂₂	C ₂₂₂	C ₁₃₂	C ₂₃₂	C ₁₄₂	C ₂₄₂
x ₁₁₁	x ₂₁₁	x ₁₂₁	x ₂₂₁	x ₁₃₁	x ₂₃₁	x ₁₄₁	x ₂₄₁
R\$ 10	R\$ 60	R\$ 40	R\$ 10	R\$ 20	R\$ 19	R\$ 103	R\$ 24
X ₁₁₂	X ₂₁₂	X ₁₂₂	x ₂₂₂ R\$ 32	X ₁₃₂ P\$ 10	X ₂₃₂	X ₁₄₂	Х ₂₄₂ Рс 10
R\$ 8	RŞ 10	KŞ 50		N\$ 10	RŞ 14	KŞ 120	

Figura 5 – Variáveis de decisão e valores hipotéticos de custos associados aos índices *i*, *j* e *k*.

Fonte: Autoria própria.

A **Figura 6** ilustra a resposta obtida com o SIMPLEX para o caso que não inclui a condição imposta pela **Equação 5**, onde $C_{total} = R$ \$ 40 representa o valor mínimo do custo total. Conforme indicado na tabela de decisões, a resposta dada pela *string* é igual a 100100000001001. Se a condição dada pela **Equação 5** for incluída no modelo, o método fornece os dados apresentados na **Figura 7**. Nesse caso, o custo mínimo encontrado é de $C_{total} = R$ \$ 69, e a resposta fornecida pela *string* é igual a 10000100010001.

Figura 6 – Conjunto de decisões que devem ser adotadas para minimizar o custo do modelo que não inclui a restrição imposta pela **Equação 5**. A solução final foi obtida através do método SIMPLEX.

			Tabe	ela de deci	sões			
Período	Bloco 01		Bloco 02		Bloco 03		Bloco 04	
1	1	0	0	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1	0	0	1

Fonte: Autoria própria.

Figura 7 – Conjunto de decisões que devem ser adotadas para minimizar o custo do modelo considerando todas as restrições propostas para o problema. A solução final foi obtida através do método SIMPLEX.

			Tabe	ela de deci	sões			
Período	Bloco 01		Bloco 02		Bloco 03		Bloco 04	
1	1	0	0	0	0	1	0	0
2	0	0	1	0	0	0	0	1

Fonte: Autoria própria.

Prosseguiremos com a análise da convergência desse modelo utilizando o DE. O método introduzido por Storn e Price (1997) é baseado em uma heurística



clássica e segue a estrutura dos algoritmos genéticos, cujo propósito consiste em adaptar as soluções parciais mais eficazes após um determinado número de iterações a partir de uma "população" de vetores inicial dada aleatoriamente. Visto que sua estrutura foi projetada para encontrar mínimos globais em problemas com variáveis contínuas e discretas, utilizaremos o DE para obter as soluções dos dois cenários apresentados nas respectivas versões do modelo QUBO em sua versão discreta binária. Adicionalmente, a introdução deste teste consiste em provar que o valor mínimo fornecido pela **Equação 6** é idêntico ao obtido no problema de otimização com restrições pelo SIMPLEX.



Figura 8 – Curva obtida pelo método DE para o primeiro cenário. O resultado final converge para o custo mínimo de R\$ 40,00.





Fonte: Autoria própria.

As **Figuras 8 e 9** exibem as curvas de convergência quando os valores máximos da população (referente ao método DE e não com as espécies de *Eucalyptus* e *Pinus*) e do número de gerações são iguais a 100, e os resultados obtidos para cada caso são representados pelas *strings* de decisões dadas respectivamente por [100100000001001] e [10000100010000



1]. Como esperado, ambos coincidem com os valores de decisão fornecidos pelo método SIMPLEX.

Seguiremos com a discussão dos resultados obtidos na otimização do problema com o VQE através do simulador QASM. Embora o último não explicite as funções de onda processadas durante a execução do código (como o STATEVECTOR), sua estrutura permite obter soluções similares as fornecidas pelo respectivo hardware quântico. Em paralelo, escolhemos utilizar o otimizador clássico COBYLA (Powell, (1994)) com um valor inicial aleatório para o parâmetro β (que pode ser um vetor), já que este simulador não processa o cálculo de gradientes ao determinar a função objetivo.

A forma variacional selecionada para o *ansatz* utiliza como base um circuito que possui 48 parâmetros com topologia (configuração fixa do circuito com variação somente dos parâmetros) $U_1(\beta^{(1)})$, como ilustrado na **Figura 10**. Embora esta estrutura não seja profunda o suficiente para determinar a resposta esperada, suas respectivas camadas foram reproduzidas cinco vezes ao longo do experimento. Além disso, repetimos as duas primeiras na última etapa, gerando um total de 272 parâmetros a serem otimizados. Observe que os operadores usados são os de rotação dados por (convencionando $\Im = \sqrt{-1}$)

$$R_{x}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\Im sen\frac{\theta}{2} \\ -\Im sen\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} e R_{y}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -sen\frac{\theta}{2} \\ sen\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}.$$
 (13)

Figura 10 - Estrutura compacta do ansatz utilizado nas simulações. O circuito real contém repetições deste bloco com um número consideravelmente superior de parâmetros.



Fonte: Autoria própria.

Para o experimento que não inclui a restrição imposta pela **Equação 5**, utilizamos o referido *ansatz* e o otimizador COBYLA com uma penalidade de P = 40, efetuando um máximo de doze mil iterações. Neste caso, o método convergiu para $C_{total} = R$ \$ 40,2930. O estado com o maior número de medidas

R. Bras. Fís. Tecnol. Apl., Ponta Grossa, v. 11, n. 1, p. 19-39, jun. 2024.



(equivalente a 1024 execuções) nas simulações com o parâmetro β_* é dado por |100100000001001>, coincidindo com a resposta fornecida pelo método SIMPLEX (**Figura 11**). Desse modo, podemos considerar que o desempenho do *ansatz* para esse exemplo foi satisfatório, uma vez que a convergência para valores muito próximos à resposta correta foi alcançada na maioria das inicializações aleatórias.





Fonte: Autoria própria.

Na sequência, mantivemos o *ansatz* e a penalidade de P = 40 para analisar o comportamento do circuito sob a influência da **Equação 5**. Porém, a adição dessa restrição não melhora a convergência quando os dados iniciais são testados com valores aleatórios. Nesse caso, o método convergiu para um valor próximo ao exato para um valor de parâmetro inicial aleatório e o mesmo número máximo de iterações aplicado no caso anterior, resultando em $C_{total} = R$ \$ 70,2441. Já o estado com o maior número de medidas nas simulações realizadas com o parâmetro β_* é dado por |100001000010001>, cujo resultado difere do valor exato obtido nas simulações com o SIMPLEX e o DE (**Figura 12**).

Portanto, a inclusão de uma restrição adicional reduziu consideravelmente a eficiência do *ansatz* para o modelo expandido, e a convergência esperada não foi alcançada mesmo com a adição de iterações no otimizador clássico com parâmetros iniciais aleatórios. Todavia, não é possível afirmar diretamente que a referida estrutura determina univocamente o desempenho do algoritmo, uma vez que uma parte dos cálculos foi efetuada pelo otimizador COBYLA. Outrossim, a escolha de um circuito constituído apenas de rotações R_y e 272 parâmetros apresenta uma convergência com resultados similares aos ilustrados na **Figura 12** para $C_{total} = R$ \$ 73.



Figura 12 - Histograma gerado no segundo experimento com a convergência do VQE. O resultado final é dado por $C_{total} = R$ \$ 70,2441. Embora o valor encontrado seja relativamente próximo do correto, a inclusão de uma restrição adicional reduziu a eficiência do ansatz, já que a adição de iterações com parâmetros iniciais aleatórios não forneceu a convergência esperada.



Fonte: Autoria própria.

DISCUSSÃO

Os resultados obtidos com o VQE forneceram uma aproximação para os valores que otimizam a solução do problema. Sob o aspecto da validação de uma prova de conceito, podemos dizer que a escolha deste algoritmo variacional foi adequada para analisar o modelo abordado.

Para o primeiro cenário, a heurística convergiu satisfatoriamente para a resposta correta e forneceu uma *string* idêntica à prevista pelo método clássico. Além disso, o valor mínimo calculado neste exemplo é semelhante ao obtido pelos métodos SIMPLEX e DE.

Em seguida, mantivemos a estrutura do *ansatz* e as configurações anteriores para o otimizador COBYLA a fim de analisar a convergência da forma variacional selecionada. Embora o resultado determinado pelo método seja próximo ao obtido pelos demais *solvers* (SIMPLEX e DE), a resposta da *string* difere do respectivo valor exato. Por conseguinte, a introdução de restrições no modelo QUBO pode influenciar os resultados do *ansatz* escolhido.

Visto que o foco deste trabalho consiste em validar a possibilidade de solucionar o problema de plantio florestal através do modelo proposto, a análise referente ao tempo de execução dos códigos pode ser investigada em trabalhos futuros, assim como a escolha de alternativas mais eficientes em relação à estrutura do *ansatz*.

Outros aspectos que podem ser explorados englobam as etapas de estagnação da convergência que ocorrem à medida que o número de qubits inseridos no sistema aumenta, assim como a profundidade do circuito que define o *ansatz*. Este fenômeno (vide Cerezo *et al.* (2021b)) é conhecido como "platô estéril" (adaptado da terminologia original de "*barren plateaus*"), e acredita-se que o fenômeno seja intrínseco aos circuitos variacionais que possuem uma topologia fixa com parâmetros variáveis.

A influência destes efeitos precisa ser considerada em modelos que possuem escalas elevadas, onde o circuito variacional pode conter um número abundante de mínimos locais que dificultam a busca pelo valor mínimo global. No entanto, a dificuldade de se obter uma convergência adequada no exemplo anterior indica que o fenômeno também pode se manifestar em escalas menores. Nesse caso, quando o desempenho do *ansatz* é afetado pela introdução de restrições adicionais ao problema, o mesmo deve ser substituído por uma estrutura mais eficiente.

CONCLUSÃO

No presente trabalho, avaliamos a viabilidade de utilizar o algoritmo quântico híbrido denominado de VQE em um modelo sintético de planejamento de silvicultura. Os exemplos abordados confirmam esta hipótese nas simulações em ambientes que possuem poucos qubits. No entanto, não é possível ainda saber se o VQE pode ser utilizado em cenários que contenham um número elevado de variáveis de decisões, devido à influência do fenômeno conhecido como platô estéril. Observamos que o VQE apresentou um comportamento um pouco mais resiliente em relação à estagnação da convergência para a configuração de circuito adotada no primeiro exemplo com um resultado satisfatório.

Por outro lado, a introdução de restrições através de termos adicionais ao modelo QUBO pode impactar a performance do *ansatz* escolhido, demandando a elaboração de uma nova estrutura à medida que outras condições são incorporadas aos respectivos modelos. Em paralelo, seria interessante testar outras técnicas de otimização na etapa clássica de processamento de dados, incluindo a versão para espaços de busca contínuos (que são perfeitamente adaptados para a busca de valores ótimos globais) do método DE o que será feito em trabalhos futuros e em conjunto com ferramentas como as apresentadas em Ximing *et al.* (2024).

Futuramente, pretendemos avaliar as dificuldades atrelada à possibilidade de escalar e testar metodologias que exploram a topologia de circuitos com estruturas variáveis, visando compará-las com o VQE (cuja topologia mantém-se fixa à medida que os parâmetros são alterados) e outras técnicas. Além de aplicar as estratégias evolutivas com a abordagem proposta em Lukas *et al.* (2022), exploraremos as ferramentas variacionais de circuitos com topologia fixa com termos contra-adiabáticos que não utilizam otimizadores clássicos para treinar os parâmetros de acordo com a proposta introduzida por Cadavid *et al.* (2024).



APÊNDICE

Apresentamos neste apêndice as formas explícitas do modelo QUBO que representam as respectivas funções objetivo exploradas neste trabalho, conforme ilustrado nas **Figuras 13 e 14**. Se as estruturas permanecerem fixas, as ferramentas clássicas apresentadas na proposta podem ser utilizadas para determinar a solução do problema selecionado como um *"benchmark"*. Nesse contexto, a formulação do método DE deve ser adaptada para a versão discreta, uma vez que as variáveis estão expressas na forma binária. Para utilizar o VQE, estas expressões do tipo QUBO devem ser convertidas para um modelo associado a um Hamiltoniano de Ising (o qual é expresso através de produtos tensoriais dos operadores de Pauli).

Figura 13 - Forma explícita do modelo QUBO para o primeiro cenário que não inclui a restrição adicional imposta pela **Equação 5**.

def	objective_function(solucao):
	x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11, x12, x13, x14, x15, x16 = solucao
	return (160*x1 + 40*x1*x10 + 360*x1*x2 + 320*x1*x3 + 320*x1*x4 + 320*x1*x5
+	320*x1*x6 + 320*x1*x7 + 320*x1*x8 + 40*x1*x9 + 160*x10 + 320*x10*x11
+	320*x10*x12 + 320*x10*x13 + 320*x10*x14 + 320*x10*x15 + 320*x10*x16
+	160*x11 + 360*x11*x12 + 320*x11*x13 + 320*x11*x14 + 320*x11*x15
+	320*x11*x16 + 160*x12 + 320*x12*x13 + 320*x12*x14 + 320*x12*x15
+	320*x12*x16 + 160*x13 + 360*x13*x14 + 320*x13*x15 + 320*x13*x16
+	160*x14 + 320*x14*x15 + 320*x14*x16 + 160*x15 + 360*x15*x16 + 160*x16
+	40*x2*x10 + 160*x2 + 320*x2*x3 + 320*x2*x4 + 320*x2*x5 + 320*x2*x6
+	320*x2*x7 + 320*x2*x8 + 40*x2*x9 + 40*x3*x11 + 40*x3*x12 + 160*x3
+	360*x3*x4 + 320*x3*x5 + 320*x3*x6 + 400*x3*x7 + 320*x3*x8 + 40*x4*x11
+	40*x4*x12 + 160*x4 + 320*x4*x5 + 320*x4*x6 + 320*x4*x7 + 320*x4*x8
+	40*x5*x13 + 40*x5*x14 + 160*x5 + 360*x5*x6 + 320*x5*x7 + 320*x5*x8
+	40*x6*x13 + 40*x6*x14 + 160*x6 + 320*x6*x7 + 320*x6*x8 + 80*x7*x15
+	160*x7 + 360*x7*x8 + 40*x8*x15 + 40*x8*x16 + 160*x8 + 360*x9*x10
+	320*x9*x11 + 320*x9*x12 + 320*x9*x13 + 320*x9*x14 + 320*x9*x15 + 320*x9*x16
+	160*x9 - 630*x1 - 630*x10 - 610*x11 - 608*x12 - 630*x13 - 626*x14
-	520*x15 - 630*x16 - 580*x2 - 560*x3 - 630*x4 - 620*x5 - 621*x6 - 497*x7
	616*x8 - 632*x9 + 1280

Fonte: Autoria própria.

Figura 14 - Forma explícita do QUBO para o segundo cenário considerando todas as restrições propostas para o problema.

```
def objective_function(solucao):
x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11, x12, x13, x14, x15, x16 = solucao
return (160*x1 + 40*x1*x10 + 360*x1*x2 + 320*x1*x3 + 320*x1*x4 + 320*x1*x5
        + 320*x1*x6 + 320*x1*x7 + 320*x1*x8 + 40*x1*x9 + 160*x10 + 320*x10*x11
        + 320*x10*x12 + 320*x10*x13 + 320*x10*x14 + 320*x10*x15 + 320*x10*x16
        + 160*x11 + 360*x11*x12 + 320*x11*x13 + 320*x11*x14 + 320*x11*x15
        + 320*x11*x16 + 160*x12 + 320*x12*x13 + 320*x12*x14 + 320*x12*x15
        + 320*x12*x16 + 160*x13 + 360*x13*x14 + 320*x13*x15 + 320*x13*x16
       + 160*x14 + 320*x14*x15 + 320*x14*x16 + 160*x15 + 360*x15*x16 + 160*x16
        + 40*x2*x10 + 160*x2 + 320*x2*x3 + 320*x2*x4 + 320*x2*x5 + 320*x2*x6
       + 320*x2*x7 + 320*x2*x8 + 40*x2*x9 + 40*x3*x11 + 40*x3*x12 + 160*x3
       + 440*x3*x4 + 320*x3*x5 + 320*x3*x6 + 400*x3*x7 + 320*x3*x8 + 40*x4*x11
        + 40*x4*x12 + 160*x4 + 320*x4*x5 + 320*x4*x6 + 320*x4*x7 + 320*x4*x8
       + 40*x5*x13 + 40*x5*x14 + 160*x5 + 360*x5*x6 + 320*x5*x7 + 320*x5*x8
        + 40*x6*x13 + 40*x6*x14 + 160*x6 + 320*x6*x7 + 320*x6*x8 + 80*x7*x15
       + 160*x7 + 360*x7*x8 + 40*x8*x15 + 40*x8*x16 + 160*x8 + 360*x9*x10
       + 320*x9*x11 + 320*x9*x12 + 320*x9*x13 + 320*x9*x14 + 320*x9*x15 + 320*x9*x16
       + 160*x9 - 630*x1 - 630*x10 - 610*x11 - 608*x12 - 630*x13 - 626*x14
        - 520*x15 - 630*x16 - 580*x2 - 520*x3 - 590*x4 - 620*x5 - 621*x6 - 497*x7
       - 616*x8 - 632*x9 + 1280)
```

Fonte: Autoria própria.

Variational quantum algorithm applied in a simplified cost optimization model in forestry planning

ABSTRACT

The expectation associated with the superior performance and security of quantum computers in relation to their classical counterparts has increasingly fueled the interest of researchers and the general public in this topic. Although the possibility of quantum computers operating on a large scale emerging in the coming years is remote, the recent development of devices known as NISQ (Noisy Intermediate-scale Quantum) has fostered interest in investigating algorithms that may present some type of quantum advantage in these machines. Based on this purpose, in this work we present a study of the use of VQE (Variational Quantum Eigensolver) to solve a synthetic model related to cost optimization in forest planting. The results obtained through the selected optimizers and the QISKIT platform (IBM) prove the theoretical feasibility of using these tools in the scope of demonstrating proofs of concept, as long as the choice of the variational form of the ansatz is compatible with the problem addressed.

KEY WORDS: Forestry Planning; Binary optimization; Variational Quantum Eigensolver.

Algoritmo cuántico variacional aplicado en un modelo simplificado de optimización de costos en planificación forestal

RESUMEN

La expectativa relacionada con el rendimiento y la seguridad superiores de los ordenadores cuánticos en relación con sus homólogos clásicos ha alimentado cada vez más el interés de los investigadores y del público en general por este tema. Aunque la posibilidad de que en los próximos años surjan ordenadores cuánticos operando a gran escala es remota, el reciente desarrollo de dispositivos conocidos como NISQ (Noisy Intermediate-scale Quantum) ha fomentado el interés por investigar algoritmos que puedan presentar algún tipo de ventaja cuántica en estos máquinas. Con base en este propósito, en este trabajo presentamos un estudio del uso de VQE (Variational Quantum Eigensolver) para resolver un modelo sintético relacionado con la optimización de costos en el plantado forestal. Los resultados obtenidos a través de los optimizadores seleccionados y la plataforma QISKIT (IBM) demuestran la viabilidad teórica de utilizar estas herramientas en el ámbito de la demostración de pruebas de concepto, siempre que la elección de la forma variacional del ansatz sea compatible con el problema abordado.

PALABRAS CLAVE: Planificación forestal; Optimización binaria; *Variational Quantum Eigensolver*.



AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao programa IBMQ Experience por desenvolver e fornecer o acesso aos simuladores, bem como aos tutoriais abertos disponíveis através do QISKit-SDK. Este trabalho foi possível graças ao apoio da Klabin-UNILA por meio da FEESC Projeto nº 22122.

REFERÊNCIAS

ALBINO, A. S; BLOOT, R; GOMES, R. F. I. Variable ansatz applied to spectral operator decomposition in a physical superconducting quantum device. Quantum Information Processing, v.22, p.233, 2023.

CADAVID A G. et al. **Bias field digitized counter-adiabatic quantum optimization**. arXiv2505.13898, 2024.

CEREZO, M. et al. Variational Quantum Algorithms. Nature Reviews Physics, v.3, p.625, 2021a.

CEREZO, M. et al. **Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits**. Nature Communications, v.12, p.1791, 2021b.

DANTZIG, G.B. "Linear Programming" in Problems for the Numerical Analysis of the Future, Proceedings of Symposium on Modern Calculating Machinery and Numerical Methods. National Bureau of Standards, USA, v.1, n.15, p.18–21, 1951.

DEUTSCH, D. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. Proc. Royal Soc. Lond. 400, 97–117, 1985.

DEUTSCH, D., JOSZA, R. **Rapid solution of problems by quantum computation**. Proc. Royal Soc. Lond. 439, 553–558, 1992.

GLOVER, F; KOCHENBERGER, G; DU, Y. Quantum Bridge Analytics I: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models. Annals of Operations Research, v.314, p.141,2022.

FEYNMAN, R.P. **There's plenty of room at the bottom: An invitation to enter a new field of physics**. In Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology, 3rd ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2012.

JAVADI-ABHARI et al. Quantum computing with Qiskit. arXiv.2405.08810, 2024.



LAND, A. H. and DOIG, A. G. **An automatic method of solving discrete programming problems**. Econometrica, 28(1):497–520,1960.

LUCAS, A. Ising Formulation of many NP Problems. Frontiers in Physics, v.2, 2014.

LUKAS, F. et al. **Quantum Circuit Evolution on NISQ device**s. arXiv:2012.13453, 2022.

KRZYZANOWSKI, G.; BLOOT, R; ALBINO, A. S. Soluções de algumas instâncias do problema do caixeiro viajante por meio do método variacional de Rayleigh-Ritz aplicado na plataforma IBMQ. In: Anais do IV Congresso Brasileiro Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia, 2023, Online.

MERMIN, N. D. Quantum Computer Science An Introduction. Cambridge University Press. New York, NY, USA, 2007.

PERUZZO, A. et al. A Variational quantum eigenvalue solver on a photonic quantum processor. Nature Communications, 2014.

POWELL, M. J. D. "A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation," Advances in Optimization and Numerical Analysis, 51-67 (1994).

PRESKILL, J. Quantum Computing in the NISQ era and beyond. Quantum, 2:79,2018.

RIBEIRO, A. A; KARAS, E. W. Otimização Contínua: Aspectos teóricos e computacionais, Cengage learning, 2013.

ROUKES, M. **Espaço suficiente lá embaixo.** Scientific American Brasil. Edição Especial: Nanotecnologia, Número 22, Pág. 6-13, Editora Duetto, 2008.

STORN, R.M and PRICE, K. **Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces**. Journal of Global. Optimization, 11, 341–359, 1997.

XIMING, W. et al. Variational Quantum Circuit Decoupling. Physical Review Letters, 2024.



Recebido: 30 de maio de 2024. Aprovado: 19 de setembro de 2024.

DOI:

Como citar: BLOOT, R; GOMES, R F I; GUNZI, A S, Algoritmo quântico variacional aplicado em um modelo simplificado para otimização de custos em planejamento florestal, Revista Brasileira de Física Tecnológica Aplicada, Ponta Grossa, v. 11, n. 1, p. 19-39, jun. 2024.

Contato: Rodrigo Bloot: rgbloot@gmail.com

Direito autoral: Este artigo está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.

