

T5.1. Informe de Casos de Uso Ponderados

Ibermática – Quantumi3b

[15/07/2023]



*Unha maneira
de facer Europa.*



Fondos Europeos



Despregamento dunha infraestrutura baseada en tecnoloxías cuánticas da información que permita impulsar a I+D+i en Galicia.

Apoiar a transición cara a una economía dixital.

Operación financiada pola Unión Europea, a través do FONDO EUROPEO DE DESENVOLVEMENTO REXIONAL (FEDER) como parte da resposta da Unión á pandemia da COVID-19

Baixo a licenca [CC-BY-SA]

DATA	AUTOR	CAMBIOS	VERSIÓN
18/09/2023	Ibermática	Inicial	1

Tabla de contenidos

1. Objetivo y alcance del proyecto.....	7
Aspectos generales	7
Objetivos del proyecto.....	8
Especificación Funcional y Técnica	9
Seminario de Formación Inicial.....	9
Metodología propuesta	11
Enfoque de ideación de los casos de uso del proyecto.....	11
Casos de Uso.....	14
Ranking de Casos de uso por distintos KPIs.	24
Ranking por Porcentaje de Impacto Industrial:.....	24
Ranking por Probabilidad de Éxito de Mayor a Menor:.....	24

Lista de figuras

Figura 1. Metodología QRISP-DM aplicada en el proyecto.....	12
Figura 2. Métricas de avance en metodología Qunatum-OPs.	13

Lista de Tablas

Tabla 1. Listado de posibles casos de uso.	23
---	----

Lista de acrónimos

PUBO	<i>Polynomial Unconstrained Binary Optimization</i>
QUBO	<i>Quadratic Unconstrained Binary Optimization</i>
VQE	<i>Variational Quantum Eigensolver</i>
QAOA	<i>Quantum Approximate Optimization Algorithm</i>
KPI	<i>Key performance indicator</i>
QRISP-DM	<i>Cross-industry standard process for Quantum Computing</i>

1. Objetivo y alcance del proyecto

Aspectos generales

La Agencia Gallega de Innovación y el CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia) firman un CONVENIO DE COLABORACIÓN ENTRE UNA AGENCIA DE INNOVACIÓN GALEGA Y CENTRO TECNOLÓGICO DE LA FUNDACIÓN PÚBLICA GALEGA DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA PARA REGULAR LAS CONDICIONES DE LAS AYUDAS DESTINADAS AL DESPLIEGUE DE UNA INFRAESTRUCTURA BASADA EN TECNOLOGÍAS CUÁNTICAS DE INFORMACIÓN QUE PERMITE IMPULSAR LA I+D+I EN GALICIA, SUSCEPTIBLE DE FINANCIACIÓN POR LA UNIÓN EUROPEA EN EL MARCO DEL EJE REACT UE DEL PROGRAMA OPERATIVO FEDER GALICIA 2014-2020, COMO PARTE DE LA RESPUESTA DE LA UNIÓN EUROPEA A LA PANDEMIA DEL COVID-19. El Acuerdo se centra en dotar a la comunidad investigadora de una infraestructura avanzada para el desarrollo de la Computación Cuántica, aunque podría incorporar elementos de otras tecnologías cuántica, sin que esa sea su actividad principal.

La presente licitación se centra en la investigación de la computación cuántica tal como se implementa, buscando mejorar las interfaces de acceso a la misma, entender qué problemas de interés para que los sectores estratégicos gallegos puedan beneficiarse de este nuevo paradigma y, por último, desarrollar un conjunto de programas (benchmarks) que permitan comparar diferentes ordenadores cuánticos y evaluar su evolución (por ejemplo, para poder disponer de más datos adecuado en la futura compra de esta infraestructura).

La relevancia de resolver problemas de optimización, especialmente la optimización combinatoria (PUBO/QUBO), radica en que son soluciones que tienen una gran aplicabilidad en sectores estratégicos como la logística, el transporte, la energía o las finanzas. Claramente, es uno de los contextos en dónde la computación cuántica puede presentar una ventaja en comparación con la computación clásica, principalmente, en entornos de sistemas de simulación cuántica distribuidos y/o paralelizados. La posibilidad de utilizar las técnicas de paralelización desarrolladas en el CESGA, aplicadas, además, en el nuevo ordenador cuántico, es sumamente interesante desde un punto de vista de investigación y de aplicación. El CESGA está muy interesado en evaluar estos algoritmos, pero no tenía el conocimiento ni el personal adecuado para hacerlo.

Por otro lado, el Instituto Ibermática de Innovación (i3b a partir de ahora), lleva varios años trabajando en sistemas de optimización sobre sistemas combinatorios, tanto en computadores cuánticos del tipo “annealers”, tanto en computadores de propósito general basados en puertas cuánticas, y en sistemas de inspiración cuántica (simuladores y sistemas basados en Tensor Networks), aplicando estas técnicas tanto en proyectos de investigación, como de innovación, y en sistemas productivos en clientes finales.

Para lograr estos objetivos, i3b, en colaboración con los investigadores del CESGA, se ha conformado un equipo de trabajo, en el que se ha abordado el reto de idear, modelizar, desarrollar, evaluar y desplegar un caso de uso, o varios, de optimización, con interés industrial, desde distintos prismas de resolución y algoritmia. Esta solución se ha pautado en base a la metodología QRISP-DM, desarrollada por i3b, para la ideación, y especificación funcional de la solución, así como en la definición de los KPIs de control del proyecto, así como en la metodología Quantum-OPS, de despliegue de dichas soluciones en un entorno simulado de proceso industrial.

Objetivos del proyecto

El objetivo principal del proyecto se centra en la selección, ponderación y elección de un caso, o varios, de interés industrial que puedan ser formulados como un problema tipo QUBO o PUBO, según sea el caso. Posteriormente deberá traducir este problema PUBO/QUBO en un algoritmo QAOA cuántico para poder ejecutarse en una computadora cuántica de puertas, de propósito general. La investigación incluirá técnicas utilizadas por el grupo de computación cuántica del CESGA. En primer lugar, se compararán varias técnicas de optimización y, en segundo lugar, se estudiará la viabilidad de utilizar técnicas de división de circuitos, en una estrategia “map-reduce” cuántica, que permita distribuir/paralelizar la ejecución de los circuitos de forma escalable.

Para llevar a cabo el proyecto, se han modelizado y aplicado varias técnicas de optimización, sobre los circuitos generados en base a la matemática de optimización seleccionada (maximizando o minimizando alguna función, en base a una serie de restricciones), y, en segundo lugar, se ha estudiado la viabilidad de utilizar técnicas de división de circuitos.

Especificación Funcional y Técnica

De cara a analizar los posibles casos de uso de aplicación, en primer lugar, es necesario convergir a un único vocabulario y semántica de contexto, y alinear los conocimientos del equipo de CESGA y el equipo de Ibermática. Para ello, se ha realizado un seminario inicial sobre metodologías de optimización en sistemas de puertas cuánticas.

Seminario de Formación Inicial.

La estrategia de i3b siempre ha sido incorporar el conocimiento adquirido por los investigadores en los proyectos a sus colaboradores. De esta forma, en este proyecto, se incorporará un seminario de formación sobre los algoritmos de optimización cuánticos, a nivel de modelado matemático, implementación, despliegue y evaluación.

En este seminario se ha explicado cómo estos conjuntos de algoritmos cuánticos están orientados a buscar la mejor solución a un determinado problema entre un conjunto de soluciones, como encontrar un mínimo, por ejemplo. Se considera que las aproximaciones cuánticas pueden abordar algunos de estos problemas que son intratables con las aproximaciones clásicas o que lo pueden hacer con una considerable mejora de velocidad. Se analizarán algunas aproximaciones como:

- El Recocido Cuántico (Quantum Annealing), que es uno de los métodos habituales en sistemas cuánticos para encontrar la solución óptima de problemas que implican un gran número de soluciones, aprovechando las propiedades específicas de la física cuántica. Son sistemas con menos ruido que los sistemas con puertas cuánticas, por lo que pueden disponer de más qubits y soportar problemas con mayor número de parámetros. Si se puede formular un problema en la forma de un hamiltoniano cuántico, el estado fundamental o de menor energía codifica la(s) solución(es) del problema.
- El Polynomial Unconstrained Binary Optimization, PUBO, se ha convertido en un modelo unificado para formular una amplia gama de problemas de optimización combinatoria para este tipo de técnicas de annealing, como los de flujos en red, programación de tareas, corte máximo, cobertura de vértices y otros problemas de ciencia de grafos y gestión. Los problemas de optimización se pueden definir por un conjunto de variables, la función

objetivo y las restricciones. El término "Binary" se refiere a que esta formulación utiliza variables que solo pueden tomar dos valores. Unconstrained se refiere a que no necesariamente todas las restricciones se pueden satisfacer: penaliza las soluciones que violan las restricciones, pero puede proporcionar soluciones que lo hagan. El término Polynomial significa que la función objetivo es un polinomio de las variables.

- El Quadratic Unconstrained Binary Optimization, QUBO, es un subconjunto de PUBO donde el orden del polinomio es 2, es decir, no puede incluir nada más que términos lineales y términos cuadráticos por pares. Para convertir problemas con variables discretas en problemas con variables binarias y puedan formularse con PUBO/QUBO para su optimización en annealers se deben codificar. Algunos métodos son su conversión directa a binario, el método "one hot" o "domain wall".

Como el objetivo del proyecto es la recodificación de estos modelos a modelos ejecutados en sistemas de circuitos cuánticos, se analizarán estas aproximaciones, en concreto:

- El Variational Quantum Eigensolver, VQE, es uno de estos algoritmos híbridos cuántico-clásico. Su objetivo es encontrar un límite superior del valor propio más bajo de un hamiltoniano dado. Se usa un dispositivo cuántico para evaluar esta energía y una computadora clásica para elegir cómo mejorar los parámetros de modo que la energía sea menor en la próxima iteración cuántica. La idea del VQE es usar una computadora cuántica para una sola cosa: obtener el valor de energía para un conjunto dado de parámetros. Todo lo demás sucede en una computadora clásica.
- El Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) es otra de estas técnicas, subconjunto de las anteriores, y especialmente orientada a problemas de optimización combinatoria. Se prepara un estado cuántico de acuerdo con un conjunto de parámetros variacionales en las puertas del circuito del procesador cuántico (que se pueden limitar) y se optimizan estos parámetros continuos por una computadora clásica realimentándolos al circuito y utilizando las salidas de medición para su ajuste. Con las iteraciones (u orden del algoritmo) se va ajustando la solución aproximada al problema de optimización. Su uso, por tanto, es aconsejable para casos de uso que no requieran precisión total.

Se han realizado una serie de sesiones de formación, organizadas de la siguiente manera:

1. Introducción del equipo y del tipo de problemas.
2. Plataformas utilizadas por Ibermática.
3. Problemas QUBO.
4. Generalización PUBO y PUDO.
5. Técnicas de posible aplicación.
6. QAOA: Casos de Uso en el equipo.
7. Casos de uso en el estado del arte.

La documentación de dicha formación se ha entregado y está disponible en el espacio del equipo: [Diapositivas](#)

Metodología propuesta

Enfoque de ideación de los casos de uso del proyecto

De cara a facilitar las tareas de ideación y conceptualización de los casos de uso en optimización industrial, y en base al conocimiento de Ibermática sobre la aplicabilidad de los mismos en entornos industriales en proyectos de innovación, como Q4Real o proyectos reales en clientes como la ONCE, en este informe se muestra la ponderación de los casos de uso seleccionados, con ciertos KPIs sobre interés, riesgos, implementación, y ROI de los posibles casos de aplicación industrial de los sistemas de optimización, como base de partida a la selección del caso o casos de uso. Para asegurar que el proyecto se realiza de forma adecuada, y con una calidad objetiva, I3b aplica la metodología QRISP-DM a la implantación de los proyectos cuánticos. QRISP-DM es una metodología de desarrollo de sistemas y modelos cuánticos que permite el aseguramiento de la calidad técnica. Los datos deben ser extraídos, depurados y preparados para su uso e interpretación. Este método se divide en 6 fases: conocimiento del negocio, conocimiento de los datos, preparación de los datos, modelización, evaluación y desarrollo.

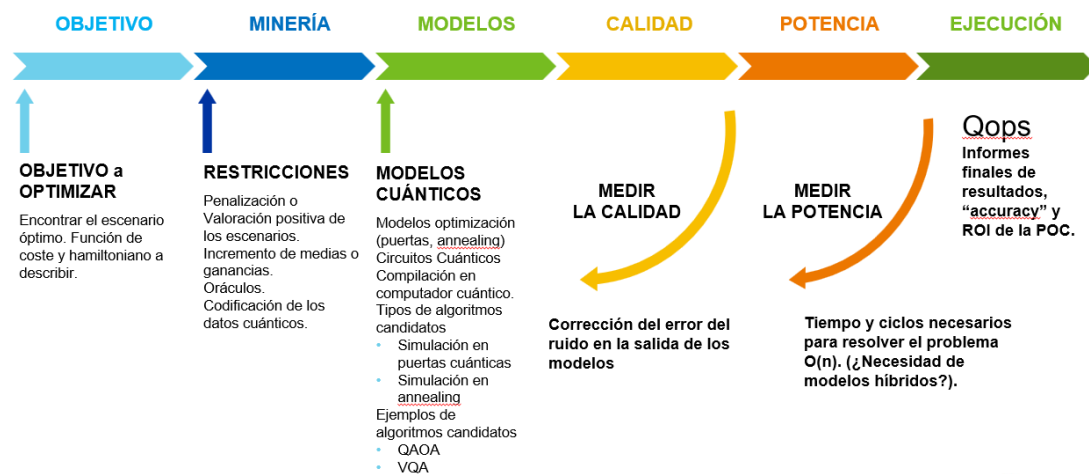


Figura 1. Metodología QRISP-DM aplicada en el proyecto.

Los enfoques de desarrollo del software cuántico deben ser, de manera similar al clásico, lo más iterativos, incrementales y ágiles posible para proporcionar la entrega de valor de los desarrollos. Por ello, se aplicará una metodología ágil "scrum" en el desarrollo del proyecto, y su despliegue en producción, mediante metodología "Quantum-OPS".

	Métricas sobre Objetivos (Conocimiento del negocio)
	Métricas sobre Recursos (Conocimiento de los datos)
	Indicadores de avance en el proyecto (Hitos de control analíticos)
	Métricas de Rendimiento (Modelado)
	Métricas de Evolución Productiva (Despliegue)

Figura 2. Métricas de avance en metodología Qunatum-OPs.

La metodología QRISP-DM persigue que, en todo momento del proyecto se vayan evaluando una serie de métricas que aseguren que el proyecto, desde las primeras semanas del mismo, aseguren los objetivos funcionales, técnicos y de ROI pactados con CESGA.

Casos de Uso.

La idea es aplicar los métodos matemáticos PUBO y PUDO a una generación de la notación QUBO, a casos lo más realistas posibles, manteniendo las propiedades de esté, pero llevándolo de un mayor número de interacciones y con una notación más sencilla y directa.

Algunos casos de uso en la literatura aplican esta idea, por ejemplo, en casos de resolución de modelado de Plegado de Proteínas, problemas de estructura electrónica, análisis de rutas, o "bin-packing", entre otros. De cara a poder seleccionar un caso de uso de una manera más cuantitativa, se analizan distintos casos, ponderándolos por impacto en el contexto industrial, coste en jornadas de desarrollo, aproximadas, y probabilidad de éxito.

A continuación, se detallan los casos de uso.

CASO DE APLICACIÓN	DESCRIPCIÓN	KPIS DE INTERÉS	RIESGOS	IMPLEMENTACIÓN	ROI	REALISMO	PLATAFORMA	IMPACTO INDUSTRIAL	COSTE (JORNADAS)	PROBABILIDAD DE IMPLANTACIÓN
OPTIMIZACIÓN DE ENERGÍA	Optimización de la distribución de energía en redes eléctricas.	Reducción de pérdidas en la red, mejora en la eficiencia energética y optimización de la carga.	Interrupciones en el suministro eléctrico, variaciones inesperadas en la demanda.	Análisis de datos de consumo, modelado de la red eléctrica.	Reducción de costos operativos y mejora en la eficiencia energética.	Moderado	IBM Quantum, Rigetti	70	115	55
OPTIMIZACIÓN DE PERSONAL	Optimización de horarios y asignación de tareas para el personal.	Maximización de la productividad, reducción del tiempo de inactividad y mejora en la	Cambios inesperados en la disponibilidad del personal, errores en la programación.	Integración con sistemas de gestión de recursos humanos, análisis de datos.	Aumento de la productividad y satisfacción del personal.	Moderado	Google Quantum	65	125	50

		satisfacción del personal.								
OPTIMIZACIÓN DE TRÁFICO	Optimizació n del flujo de tráfico en ciudades y áreas urbanas.	Reducción de la congestión del tráfico, minimizació n del tiempo de viaje y mejora en la seguridad vial.	Cambios inesperados en las condiciones del tráfico, errores en la información de tráfico en tiempo real.	Análisis de datos de tráfico en tiempo real, simulaciones de flujo de tráfico.	Reducción de congestión y mejora en la seguridad vial.	Moderad o	IBM Quantum, IonQ	60	130	45
OPTIMIZACIÓN DE PUBLICIDAD	Optimizació n de campañas publicitarias en línea y en redes sociales.	Maximizació n del retorno de inversión, aumento de las conversione s y optimización	Cambios en las tendencias del mercado, cambios en los algoritmos de plataformas publicitarias.	Análisis de datos de comportamiento del usuario, modelado de audiencia.	Aumento de las conversione s y retorno de inversión en publicidad.	Moderad o	Rigetti, D- Wave	55	135	40

		del presupuesto publicitario.								
OPTIMIZACIÓN DE INVENTARIO	Optimizació n de niveles de inventario y reposición de productos.	Reducción de costos de inventario, prevención de exceso de inventario y mejora en la disponibilida d de productos.	Cambios inesperados en la demanda, errores en las predicciones de ventas.	Análisis de datos de ventas, integración con sistemas de gestión de inventario.	Reducción de costos y mejora en la disponibilida d de productos.	Moderad o	IBM Quantum, Google Quantum	70	120	50
OPTIMIZACIÓN DE RECURSOS DE TI	Optimizació n de recursos de tecnología de la información (TI).	Reducción de costos de TI, mejora en la eficiencia operativa y optimización del uso de recursos de	Interrupciones inesperadas en los sistemas, errores en la configuración de hardware o software.	Análisis de carga de trabajo, modelado de infraestructura de TI.	Reducción de costos operativos y mejora en la eficiencia de TI.	Moderad o	IBM Quantum, Rigetti	65	125	45

		hardware y software.								
OPTIMIZACIÓN DE CADENAS DE SUMINISTRO GLOBALES	Optimización de la cadena de suministro en entornos globales.	Reducción de costos logísticos, mejora en la coordinación global y optimización de inventarios a nivel internacional.	Interrupciones en el transporte internacional, cambios en regulaciones aduaneras.	Integración con sistemas de gestión de cadena de suministro global, análisis de datos internacionales.	Reducción de costos y mejora en la coordinación global.	Moderado	Google Quantum	60	130	40
OPTIMIZACIÓN DE FLOTA DE VEHÍCULOS	Optimización de la flota de vehículos en empresas de transporte.	Reducción de costos de combustible, optimización de rutas y mantenimiento	Variaciones inesperadas en las condiciones del vehículo, errores en los datos de telemetría.	Integración con sistemas de gestión de flotas, análisis de datos de telemetría.	Reducción de costos operativos y mejora en la eficiencia de la flota.	Moderado	IBM Quantum, IonQ	65	120	45

		preventivo de vehículos.								
OPTIMIZACIÓN DE REDES SOCIALES	Optimización del contenido y horarios de publicaciones en redes sociales.	Maximización del alcance, interacción y conversión a través de plataformas de redes sociales.	Cambios en los algoritmos de redes sociales, variaciones inesperadas en el comportamiento del usuario.	Análisis de datos de comportamiento del usuario en redes sociales, modelado de audiencia.	Aumento en el alcance y la interacción en redes sociales.	Moderado	Rigetti, D-Wave			
PLANIFICACIÓN DE PRODUCCIÓN	Optimización de la producción para satisfacer la demanda.	Cumplimiento de plazos de entrega, eficiencia en el uso de recursos y minimización de costos	Cambios inesperados en la demanda, errores en la estimación de tiempos de producción.	Integración con sistemas de gestión de producción, análisis de datos históricos.	Cumplimiento de plazos y reducción de costos de producción.	Moderado	IBM Quantum, Rigetti	80	210,000	65

		de producción.								
GESTIÓN DE INVENTARIO	Optimizació n de niveles de inventario y rotación de existencias.	Reducción de costos de inventario, prevención de obsolescenci a y mejora en la disponibilida d de productos.	Cambios inesperados en la demanda, variaciones en los tiempos de entrega de proveedores.	Integración con sistemas de gestión de inventario, análisis de datos de ventas.	Reducción de costos y mejora en la disponibilida d de productos.	Moderad o	Google Quantum	65	230,000	50
OPTIMIZACIÓN DE CADENAS DE SUMINISTRO	Optimizació n de la cadena de suministro en tiempo real.	Reducción de costos logísticos, mejora en la coordinación y optimización de inventarios	Interrupciones en el transporte, cambios inesperados en la demanda en diferentes	Integración en tiempo real con sistemas de gestión de cadena de suministro, análisis de datos en tiempo real.	Reducción de costos y mejora en la coordinación de la cadena.	Moderad o	IBM Quantum, IonQ	60	240,000	45

		a lo largo de la cadena.	puntos de la cadena.							
PLANIFICACIÓN DE DEMANDA	Predicción y planificación de la demanda de productos.	Mejora en la precisión de las previsiones, reducción de exceso de inventario y optimización de la cadena de suministro.	Cambios en el comportamiento del consumidor, errores en los datos históricos de ventas.	Análisis avanzado de datos de ventas, modelado predictivo de la demanda.	Precisión en las previsiones y reducción de exceso de inventario.	Moderado	Google Quantum	60	260,000	35
	Optimización de la asignación de tareas y trabajos a empleados.	Aumento de la productividad, reducción del tiempo de inactividad y mejora en la	Cambios inesperados en la disponibilidad del personal, errores en la programación.	Integración con sistemas de gestión de recursos humanos, análisis de datos.	Aumento de la productividad y satisfacción del personal.	Moderado	IBM Quantum, Rigetti	75	210,000	55



		satisfacción del personal.								
APLANAMIENTO DE DEMANDA EN PRODUCCIÓN	Aplanamiento de la demanda para evitar picos de producción.	Reducción de costos de producción, optimización de la utilización de recursos y mejora en la planificación de producción.	Cambios inesperados en la demanda, errores en la predicción de la demanda.	Integración con sistemas de gestión de producción, análisis de datos de demanda.	Reducción de costos y mejora en la planificación de producción.	Moderado	Google Quantum	65	230,000	50
ASIGNACIÓN DE RUTAS DE ENTREGA	Optimización de rutas de entrega para reducir costos y tiempo.	Reducción de costos operativos, mejora en la eficiencia del transporte y cumplimiento	Cambios inesperados en el tráfico, errores en la estimación de tiempos de entrega.	Análisis de datos de tráfico en tiempo real, simulaciones de rutas de entrega.	Reducción de costos operativos y cumplimiento de plazos de entrega.	Moderado	IBM Quantum, IonQ	60	240,000	45



		o de plazos de entrega.								
--	--	-------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--

Tabla 1. Listado de posibles casos de uso.

Ranking de Casos de uso por distintos KPIs.

Ranking por Porcentaje de Impacto Industrial:

1. "Optimización de Producción" (Impacto Industrial: 80)
2. "Optimización de Energía" (Impacto Industrial: 70)
3. "Optimización de Personal" (Impacto Industrial: 65)
4. "Optimización de Cadenas de Suministro Globales" (Impacto Industrial: 60)
5. "Optimización de Flota de Vehículos" (Impacto Industrial: 65)
6. "Optimización de Inventarios" (Impacto Industrial: 70)
7. "Optimización de Recursos de TI" (Impacto Industrial: 65)
8. "Optimización de Redes Sociales" (Impacto Industrial: 55)
9. "Optimización de Publicidad" (Impacto Industrial: 55)
10. "Optimización de Tráfico" (Impacto Industrial: 60)
11. "Asignación de Trabajos" (Impacto Industrial: 75)
12. "Aplanamiento de Demanda en Producción" (Impacto Industrial: 65)
13. "Asignación de Rutas de Entrega" (Impacto Industrial: 60)

Ranking por Probabilidad de Éxito de Mayor a Menor:

1. "Optimización de Producción" (Probabilidad de Implantación: 65%)
2. "Optimización de Personal" (Probabilidad de Implantación: 50%)
3. "Optimización de Tráfico" (Probabilidad de Implantación: 45%)
4. "Optimización de Publicidad" (Probabilidad de Implantación: 40%)
5. "Optimización de Inventarios" (Probabilidad de Implantación: 50%)
6. "Optimización de Recursos de TI" (Probabilidad de Implantación: 45%)
7. "Optimización de Cadenas de Suministro Globales" (Probabilidad de Implantación: 40%)
8. "Optimización de Flota de Vehículos" (Probabilidad de Implantación: 45%)
9. "Optimización de Redes Sociales" (Probabilidad de Implantación: N/A)
10. "Asignación de Trabajos" (Probabilidad de Implantación: 55%)
11. "Aplanamiento de Demanda en Producción" (Probabilidad de Implantación: 50%)

12. "Asignación de Rutas de Entrega" (Probabilidad de Implantación: 45%)

En base a estos resultados preliminares, se decide abordar el caso de uso de "Optimización de Producción", denominado en la literatura ***Job-Shop Scheduling Problem*** (JSP, JSSP). Reseñar que, en caso de uso similares, Ibermática los está implantando en entornos productivos, en concreto, los casos:

- "Optimización de Producción"
- "Optimización de Personal"
- "Asignación de Trabajos"
- "Aplanamiento de Demanda en Producción"