Formulations et résolutions quantiques d'un problème de conception de plans de transport ferroviaire

Camille Grange[1], Valentina Pozzoli[1], François Ramond[1]

SNCF Innovation & Recherche, St-Denis, France

{ext.c.grange, valentina.pozzoli, francois.ramond}@sncf.fr

Mots-clés : *optimisation combinatoire, algorithmes quantiques, planification ferroviaire.*

1 Contexte

Longtemps resté une idée de physicien, l'ordinateur quantique promet de révolutionner la puissance de calcul disponible. Du fait de sa nature non déterministe et porteuse de nouveaux paradigmes de calcul, il bouleverse les normes classiques [1]. Ces dernières années, une accélération des avancées a opéré à la fois du côté des machines et des algorithmes, et il est attendu que la technologie quantique puisse être utilisée pour les premières applications industrielles au cours des prochains cinq à dix ans.

La résolution des problèmes d'optimisation combinatoire se confronte fréquemment aux limites des ordinateurs classiques en termes de puissance de calcul. Un compromis est souvent nécessaire entre la qualité des solutions et le temps de résolution, ce qui rend difficile les résolutions sur des instances de grande taille ou bien sur des problèmes en temps réel. C'est ce que la pratique de l'informatique quantique cherche à améliorer.

Dans ce résumé sont présentées plusieurs reformulations d'un problème d'optimisation combinatoire issu du contexte ferroviaire afin de le résoudre via plusieurs algorithmes quantiques implémentés sur différentes architectures quantiques.

2 Modélisation et reformulations

2.1 Modélisation de la conception d'un plan de transport simplifié

Le problème d'optimisation combinatoire étudié est un problème de conception de plans de transport. Il consiste, en fonction de la demande des voyageurs et des contraintes de production sur le réseau des lignes à grandes vitesses, à construire un ou des plans de transport (ensemble de trains à faire circuler, avec leurs dessertes et horaires associés) optimisant le bilan économique (i.e. la différence entre les chiffres d'affaires et les charges de production).

Ce problème est initialement formulé comme un Problème Linéaire en Nombres Entiers (PLNE). Au vu de la complexité des algorithmes quantiques et de la faible performance des ordinateurs quantiques aujourd'hui, le problème a été très significativement simplifié. Sa modélisation finale est un problème de couvertures par ensembles. Il s'agît, à partir d'une demande voyageurs à l'égard de plusieurs trains, de minimiser le nombre de trains à faire rouler, tout en satisfaisant l'intégralité de la demande.

On suppose avoir n trains disponibles et m groupes de voyageurs (voyageurs rassemblés par demande identique). On appelle $T_i, \forall i \in [\![1, n]\!]$, les variables booléennes où T_i vaut 1 si le train i est sélectionné dans le plan de transport, 0 sinon. À chaque groupe de voyageurs, on associe $G_j, \forall j \in [\![1, m]\!]$, l'ensemble des trains que le groupe j accepte de prendre. Il suffit qu'au moins un des trains de cet ensemble soit sélectionné pour que la demande du groupe soit satisfaite. Un ensemble de trains est solution de ce problème si chaque demande est satisfaite. Une solution optimale est une solution de cardinalité minimale. Mathématiquement, cela s'écrit :

$$\min \sum_{i \in [\![1,n]\!]} T_i \quad \text{s.c.} \begin{cases} \sum_{k \in G_j} T_k \geqslant 1, & \forall j \in [\![1,m]\!] \\ T_i \in \{0,1\}, & \forall i \in [\![1,n]\!] \end{cases} \tag{1}$$

2.2 Algorithmes QAOA et QAA

Quantum Approximate Optimisation Algorithm (QAOA) [2] et Quantum Adiabatic Algorithm (QAA) sont deux métaheuristiques hybrides (classique-quantique) similaires, qui se basent sur le théorème adiabatique en physique quantique. Seul le paradigme de calcul change : la première est conçue pour des ordinateurs universels à circuits quantiques tandis que la seconde tourne uniquement sur des ordinateurs à recuit quantique. Les deux algorithmes prennent en entrée un problème sous forme QUBO, c'est-à-dire un problème quadratique, sans contraintes, à variables binaires :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} x^T Q x \text{ , avec } n \in \mathbb{N} \text{ et } Q \in \mathcal{S}_{n,n}(\mathbb{R}) \tag{2}$$

La reformulation du problème 1 en QUBO a nécessité, entre autres, l'intégration des contraintes en termes de pénalités dans la fonction objectif. Des résultats ont été obtenus en ayant fait tourner ces algorithmes sur de petites instances (de l'ordre de la dizaine de variables). Le nombre de qubits limités des ordinateurs quantiques actuels ainsi que leurs performances restreintes a contraint la taille des instances, mais les résultats trouvés correspondent bien à ceux attendus et participent à une meilleure appréhension des enjeux de l'optimisation quantique.

2.3 Algorithme de Grover

L'algorithme de Grover [3] rentre dans une autre catégorie d'algorithmes : il est entièrement quantique et ne trouve pas l'optimum d'un problème mais fait une recherche dans un ensemble non ordonné. L'encodage du problème 1 réside essentiellement dans un oracle construit à même un circuit à portes quantiques. Sa reformulation nécessite des transformations basées sur la logique mathématique élémentaire, puis sur différentes techniques afin de trouver une solution dite optimale au problème de satisfaisabilité qui en découle (i.e. avec un minimum de variables égales à 1 dans la solution). Des résultats confirmant la théorie ont aussi été obtenus sur l'application du problème 1 de taille de l'ordre de quelques variables.

3 Perspectives

Tributaires de la technologie quantique actuelle, les résultats de benchmarks sont encore laborieux et peu représentatifs de la puissance de calcul quantique. Ainsi, les perspectives sont plutôt d'ordre théorique avec des vérifications sur des instances dont la taille a vocation à augmenter sous peu.
Une amélioration du modèle de conception de plans de transport ferroviaire est prévue, afin de rapprocher le plus possible le problème de sa formulation initiale classique, et donc à la réalité du terrain ferroviaire.

Références

[1] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, 2010.

[2] Edward Farhi and Jeffrey Goldstone. A Quantum Approximate Optimization Algorithm. 2014, arXiv :1411.4028v1 [quant-ph]

[3] Austin Gilliam, Stefan Woerner and Constantin Gonciulea. Grover Adaptive Search for Constrained Polynomial Binary Optimization. 2020, arXiv :1912.04088v2 [quant-ph]