Supercomputación y computación cuántica: el camino hacia la integración

Alba Cervera Lierta

La computación cuántica sigue madurando y ha llegado el momento de empezar con su despliegue a gran escala. Los centros de supercomputación se están preparando para integrar esta tecnología con los supercomputadores existentes. En España tenemos dos grandes proyectos con tal objetivo: Quantum Spain y EuroQCS.

n los últimos años hemos sido testigos de increíbles avances en el campo de las tecnologías cuánticas. Llevamos más de 40 años de evolución científica y tecnológica que han permitido que este campo dé el salto de la teoría al experimento y la implementación. En 2022 se otorgó el Nobel de Física a Clauser, Aspect y Zeilinger, científicos pioneros de la información cuántica que abrieron camino hacia la explotación de esta rama de la física para fabricar tecnología de última generación [1]. Se han realizado varios experimentos de comunicaciones cuánticas que nos permiten explorar nuevas formas de encriptación. Se han fabricado sensores ultra precisos que explotan los fenómenos cuánticos como la coherencia y el entrelazamiento para medir cantidades físicas con precisión inimaginable. Tenemos numerosos prototipos de ordenadores cuánticos que han sido capaces de ejecutar algoritmos increíblemente costos para un supercomputador tradicional. La tecnología sigue su avance y con ella nuestro conocimiento profundo de la física.

Llegados a este punto, ¿cuáles son los siguientes pasos necesarios para elevar este campo al siguiente nivel? Además de continuar con la investigación básica, las tecnologías cuánticas han alcanzado la suficiente madurez como para plantear su primer despliegue a gran escala y abrir el campo a que otras disciplinas puedan utilizarlo. España, tanto por sí misma como dentro de Europa, está dando grandes pasos en esa dirección. Tenemos entre manos grandes proyectos estratégicos que pretenden dotar al país de una infraestructura científica que incluya las comunicaciones y computación cuánticas. El Plan Complementario de Comunicaciones Cuánticas persigue la creación de una infraestructura de comunicación de alta seguridad basada en tecnologías cuánticas [2], y sus detalles darían para un artículo entero que esperamos leer pronto en esta revista. En este artículo me focalizaré en la rama de la computación cuántica, liderada por el proyecto "Quantum Spain" [3] y su extensión europea, "EuroQCS" [4].

La actualidad en computación cuántica

Desde que en 2016 la empresa norteamericana IBM presentara el acceso a sus ordenadores cuánticos en la nube [5], se han escrito innumerables artículos periodísticos sobre ordenadores cuánticos. Lo cierto es que el despliegue de una tecnología que se creía confinada en unos pocos laboratorios en el mundo levantó mucho interés y expectación,

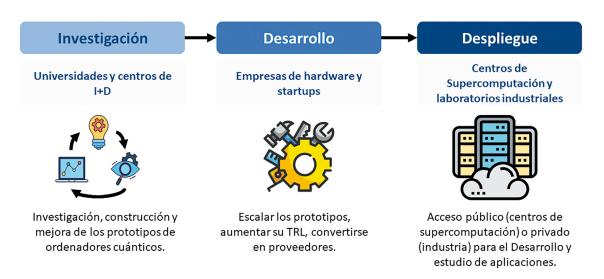
que fácilmente se pueden tornar en una sobredimensión de las capacidades reales de estas máquinas (el bien conocido "hype"). ¿Cuál es la capacidad real de los ordenadores cuánticos actuales? ¿Qué esperamos que puedan resolver?

Hoy en día se están desarrollando ordenadores cuánticos basados en diferentes tecnologías. Las más avanzadas son los superconductores, trampas de iones, átomos fríos, fotónica y los basados en tecnologías del silicio. Para cada una de estas plataformas, los ordenadores cuánticos cuentan con características muy diferentes. Los tiempos de coherencia, ratios de error de las puertas lógicas cuánticas, el número de cúbits (bits cuánticos) o la conectividad de estos son algunas de las medidas de calidad básicas en las que difieren las diferentes plataformas. Aunque para todas ellas se está investigando la mejora de estos y otros parámetros, lo cierto es que es todavía pronto para declarar a una tecnología como la ganadora.

Lo que sí tienen en común todos los ordenadores cuánticos actuales es que no son universales. Aunque su diseño implica la universalidad teórica (poder realizar un conjunto de operaciones que nos permita realizar cualquier operación unitaria), el "ruido" que tienen sus cúbits y los tiempos de coherencia limitados impiden utilizar esta universalidad. Este problema tiene solución teórica, la corrección cuántica de errores, pero todavía no tenemos ordenadores cuánticos de suficiente calidad para que esto sea posible y escalable. La nouniversalidad de los ordenadores cuánticos actuales limita las aplicaciones de estos dispositivos. Algoritmos cuánticos reconocidos como el de factorización, el de la estimación de fase o el de búsqueda requieren de esta propiedad.

¿Qué podemos hacer con los ordenadores cuánticos actuales? Lo cierto es que muchas cosas, desde entender mejor la física de su funcionamiento a buscar aplicaciones que no requieran de esta perfección computacional. Tenemos entre manos dispositivos capaces de superponer y entrelazar varios estados cuánticos de forma controlada y programable. Son un excelente campo de pruebas para explorar la física cuántica que hasta hace pocos años era inimaginable. Hay que recalcar que los ordenadores cuánticos no son puramente cuánticos: solo su hardware tiene propiedades cuánticas, su software (o su control) es clásico y se realiza desde un ordenador convencional [5]. De modo que es natural que surgiera la idea de hibridizar la computación cuántica con la convencional y explotar la parte clásica para ayudar o asistir

Fig. 1. los prototipos de ordenadores cuánticos se plantean y desarrollan en las Universidades y centros de I+D, donde la ciencia básica es fundamental para encontrar cómo mejorarlos. Luego, la industria debe ser capaz de aumentar el TRL (nivel de madurez tecnológica) de esos prototipos y fabricar ordenadores cuánticos plenamente funcionales. Por último, los centros de supercomputación pueden adquirir estos dispositivos y garantizar su acceso a todos los usuarios interesados.



a la cuántica. De esta hibridación salen, por ejemplo, los algoritmos cuánticos variacionales (VQA, en sus siglas en inglés), que se utilizan para explorar aplicaciones en simulación cuántica, "quantum machine learning", problemas de optimización, entre otros.

Por último, ¿cómo podemos utilizar estos ordenadores cuánticos? Hay dos opciones mayoritarias: o bien tienes la suerte de formar parte o colaborar con un grupo de investigación que desarrolle estos dispositivos o bien acudes a una de las empresas que ofrecen su acceso en la nube. El primer caso es excepcional y no una solución escalable a que cada vez más grupos accedan a esta tecnología. La segunda opción es la que se ha desarrollado más últimamente: gigantes como Amazon o Microsoft ofrecen acceso a varios ordenadores cuánticos en la nube mediante un sistema de subscripción que puede requerir de grandes inversiones por parte de grupos de investigación. Esto puede limitar enormemente el poder acceder sin barreras a una tecnología tan disruptiva. Por ello muy recientemente se está planteando una tercera vía: el modelo de la computación de altas prestaciones. La figura 1 muestra la cadena de desarrollo prevista para desplegar la computación cuántica siguiendo este modelo.

Computación de altas prestaciones

Las necesidades computacionales de las diferentes ramas técnicas y científicas son cada vez mayores. Con ello, los ordenadores han ido mejorando exponencialmente con los años, siguiendo la bien conocida ley empírica de Moore (el número de transistores en cada microprocesador se dobla cada dos años mediante, por ejemplo, la reducción del tamaño de cada transistor). Esta ley tiene una limitación física clara: llegará un momento en que el tamaño de los transistores no pueda reducirse más al entrar en la escala atómica, y este momento está muy cerca. Aun así, hay otras formas de extender la capacidad computacional actual, y consiste en especializarse, es decir, en diseñar chips cuya

arquitectura está adaptada para la resolución óptima de ciertos problemas. De este modo surgen multitud de unidades de procesamiento: las CPU, de propósito más general, las GPU de propósito más específico (llamadas también aceleradores), entre otros. La otra forma de extender la potencia de los ordenadores es conectando a muchos entre sí para que trabajen de un modo concurrente y en paralelo, lo que conocemos como "supercomputador".

Los supercomputadores no dejan de ser máquinas altamente sofisticadas y de propósito específico: su potencia de cálculo no es necesaria para las tareas cotidianas, como consultar el email o jugar a un videojuego. Sin embargo, su existencia es fundamental para resolver problemas con implicaciones científicas y sociales enormes. Hoy en día, la supercomputación se utiliza para modelizar el clima, prevenir fenómenos naturales catastróficos, medicina personalizada, entrenamiento de modelos de inteligencia artificial, etc. Todo ello solo es posible gracias a que el cuerpo científico y técnico experto en estas disciplinas tiene acceso a una infraestructura de supercomputación adecuada. Esto se garantiza con la existencia de los centros de supercomputación.

Los centros de supercomputación tienen como misión el mantener y operar una infraestructura de computación de altas prestaciones (HPC) y ofrecer su acceso a aquellos usuarios que lo necesiten. Para ello, están compuestos de un cuerpo técnico de operaciones cuyo objetivo es que el supercomputador esté operativo 24/7, pues cualquier fallo en la infraestructura compromete multitud de proyectos científicos.

En España tenemos la Red Española de Supercomputación (RES), formada por 14 instituciones que comparten el acceso a sus máquinas de supercomputación [6]. Mediante procesos competitivos periódicos, los usuarios interesados envían sus propuestas de proyectos y estas son evaluadas por un comité científico y técnico. Con ello, los proyectos seleccionados pueden conectarse en remo-

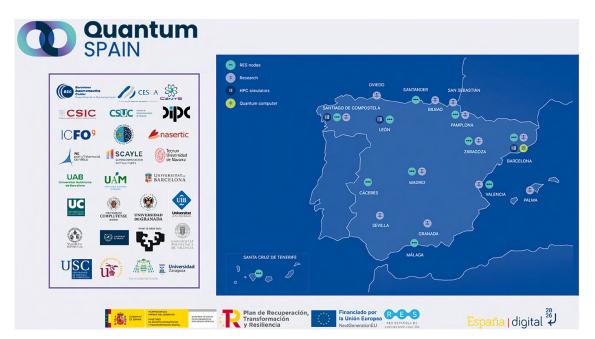


Fig. 2. Participantes de Ouantum Spain: la Red Española de Supercomputación y 14 centros de investigación especializados en algoritmia cuántica.

to a alguna de estas máquinas de HPC. El acceso es público y gratuito y el uso debe ser de interés público. Los supercomputadores son máquinas altamente costosas, tanto de adquirir como de mantener, de modo que la RES cumple su papel de Infraestructura Técnica Singular.

Este modelo de gestión y acceso a la supercomputación también se reproduce en Europa, donde tenemos actualmente la iniciativa EuroHPC-Joint Undertaking [7]. EuroHPC-JU surgió de la necesidad de que Europa tuviera máquinas de supercomputación que pudieran competir en potencia con las del resto del mundo. Su coste es cada vez más elevado, lo que hace prácticamente inviable para los estados miembros el costear por sí solos una máquina de estas características. Por ello EuroHPC-IU propone un modelo de cofinanciación, donde la Unión Europea costea el 50 % y el otro 50 % los estados miembros que apoyan los proyectos de estos supercomputadores. El acceso a todos los ordenadores de la red es compartido con EuroHPC, que garantiza su uso por parte de cualquier usuario europeo. En España acabamos de estrenar MareNostrum5, la quinta generación del supercomputador más potente del país instalado y operado por el Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS), el coordinador de la RES. Junto con los supercomputadores Leonardo (Italia) y Lumi (Finlandia) conforman los ordenadores pre-exascala europeos (capaces de ofrecer 1017 FLOPS, es decir, operaciones de coma flotante por segundo), los más potentes en Europa hasta la fecha.

Otro punto en el que la UE ha centrado sus prioridades es en la soberanía tecnológica, sobre todo aquella que concierne la industria de los semiconductores. Con la publicación del "Chips Act" [8], Europa quiere asegurarse que dejaremos de ser completamente dependientes de empresas extranjeras para suministrarnos los tan ansiados

"chips", tanto aquellos que se utilizan en electrónica cotidiana como los más avanzados para los supercomputadores. Este camino llevará tiempo en el que habrá que desandar muchos años de políticas que nos han llevado a esta dependencia, pero podemos estar a tiempo de que no nos ocurra lo mismo con las tecnologías cuánticas, ahora que el campo está todavía madurando.

El camino hacia la integración quantum-HPC

Por un lado, tenemos prototipos de ordenadores cuánticos funcionales pero todavía inmaduros para muchas aplicaciones. Por otro, tenemos máquinas de supercomputación altamente sofisticadas y con aplicaciones directas en cientos de disciplinas. ¿Cómo encajan estas dos piezas tecnológicas? Recordemos que un supercomputador son en realidad muchas unidades de procesamiento conectadas entre sí, que además pueden ser de naturaleza heterogénea. Actualmente tenemos CPU, GPU, TPU, entre otros, ¿por qué no incluir las QPU (unidades de procesamiento cuántico)? Al fin y al cabo, esta es la evolución natural del desarrollo de una nueva arquitectura de chip, que, aunque tenga un funcionamiento muy distinto a las anteriores, no deja de ser una máquina para computar que se aplicará a aquellos problemas que la necesiten. Además, muchos algoritmos cuánticos son en realidad híbridos, y necesitan de computación cuántica y clásica. Estos algoritmos podrían verse enormemente beneficiados si su parte clásica se puede ejecutar en multitud de nodos de supercomputación.

No hay que olvidar que los ordenadores cuánticos son todavía prototipos y tienen que seguir mejorando. Estudiar su física y diseño requiere en muchos casos de simulaciones muy costosas que tienen que ejecutarse en supercomputadores. De modo que se da el argumento circular de

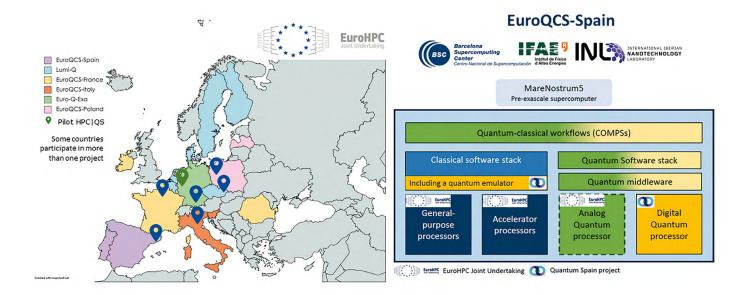


Fig. 3. Izquierda: los consorcios seleccionados por EuroHPC-JU para instalar los primeros ordenadores cuánticos de la red europea. Derecha: esquema del proyecto español EuroQCS-Spain. Dos ordenadores cuánticos (uno digital v otro analógico) se integrarán en la infraestructura de supercomputación MareNostrum5. instalada en el BSC-CNS. Esa integración ser hará mediante la extensión de los workflows de HPC desarrollados en BSC-CNS (COMPSs).

que para diseñar ordenadores cuánticos necesitamos ordenadores clásicos y que para mejorar la potencia de cálculo en algunos problemas en ordenadores actuales necesitamos conectarlos a los cuánticos. Podríamos hablar de más ejemplos en que la computación cuántica y clásica se necesitan mutuamente. Todo nos lleva a conseguir la integración entre los ordenadores cuánticos y los supercomputadores actuales.

Quantum Spain y EuroQCS-Spain

De este contexto de despliegue tecnológico, acceso público a infraestructura e integración con tecnología existente, surge el proyecto Quantum Spain, concedido a la RES y coordinado por el BSC-CNS, en el que participan 27 instituciones y dotado de 22 millones de euros de presupuesto que proviene del Plan de Recuperación Transformación y Resiliencia [3] (ver figura 2). El organismo que lo impulsó fue el anterior Ministerio de Asuntos Económicos a través de la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial.

Uno de los objetivos de Quantum Spain es el de dotar a la RES de una infraestructura de computación cuántica que complemente la actual oferta de supercomputación. De este modo, cualquier usuario interesado en utilizar un ordenador cuántico podrá acudir a la RES del mismo modo que puede utilizar los supercomputadores de la red. En estos momentos, se está llevando a cabo la instalación de este ordenador cuántico en el BSC-CNS, basado en tecnología de cúbits superconductores. La unión temporal de empresas Qilimanjaro Quantum Tech y GMV son las encargadas de proveer de este dispositivo y varias generaciones de chips, empezando por 5 cúbits y terminando por 30 cúbits en 2025. El BSC-CNS operará por completo este ordenador cuántico con su equipo técnico de operaciones, es decir, el ordenador se instala "llave en mano" y las empresas suministradoras terminarán su labor una vez se instale en el centro,

como ocurre con los supercomputadores clásicos. Este ordenador cuántico estará acompañado de la instalación de emuladores cuánticos en varios nodos de la RES (entre ellos en los centros de CESGA, SCAYLE y BSC-CNS), de modo que también se facilite la simulación de circuitos cuánticos con supercomputadores.

Otro de los objetivos de Quantum Spain es la investigación en algoritmos y aplicaciones de la computación cuántica. Para ello se cuenta con la colaboración de 14 instituciones más, aquellas que poseen grupos expertos en la algoritmia de esta tecnología. Esta colaboración va más allá de la investigación y también contribuirá a formar la siguiente generación de expertos y expertas en este campo. Con la creación de un programa de educación llamado TalentQ, se pretende fomentar y apoyar todas aquellas iniciativas de difusión y educación en computación cuántica, además de generar contenidos educativos tanto introductorios como especializados.

Con Quantum Spain, España asegura el acceso público a la computación cuántica por parte de los usuarios de nuestro país, además de fomentar el uso de esta tecnología y la investigación necesaria para que surjan más aplicaciones. Además, la tecnología cuántica suministrada es desarrollada en su totalidad en Europa, cumpliendo así con uno de los objetivos que se ha marcado la UE, la de conseguir la tan ansiada soberanía tecnológica.

Otros países de nuestro entorno tienen proyectos y estrategias similares a Quantum Spain. No ha pasado desapercibido por EuroHPC-JU que varios de estos países, incluyendo el nuestro, están tomando cartas sobre el asunto y asegurándose su independencia tecnológica con estos proyectos. De modo que decidió lanzar en 2022 un llamamiento a aquellos centros de supercomputación europeos que quisieran albergar los primeros ordenadores cuánticos de EuroHPC. El BSC-CNS, en una colaboración con el Instituto de Física de Altas Energías (IFAE) de Barcelona y el Iberian Nanotechnology

Laboratory (INL) de Portugal fue uno de los seis sitios seleccionados [4]. El BSC-CNS contará con un segundo ordenador cuántico que formará parte de la red de EuroHPC. Junto con el de Quantum Spain, ambos serán integrados en el supercomputador MareNostrum5. Eso significa que aquellos usuarios que requieran de computación híbrida, podrán acudir a nuestras máquinas a través de la RES o de EuroHPC y utilizar de forma integrada supercomputación clásica y cuántica.

El objetivo de EuroHPC es el de garantizar el acceso por parte de los europeos a computadores cuánticos hechos con tecnología también europea. Como hemos comentado al principio, existen multitud de tecnologías cuánticas en estudio. Por ello, los seis sitios seleccionados (España, Francia, Alemania, Italia, República Checa y Polonia —figura 3—) tendremos diferentes tipos de ordenadores cuánticos (trampas de iones, fotónica, superconductores y átomos fríos).

Paso a paso

Tanto Quantum Spain como los proyectos cuánticos de EuroHPC son solo una semilla que debe ser regada abundante y continuadamente en los años que vienen. Estos proyectos nos dotan por unos años de una infraestructura competitiva, pero de nada servirán si no se siguen manteniendo a largo plazo. Tampoco si la tecnología cuántica no sigue mejorando con los años. De momento, los ordenadores cuánticos que tenemos son todavía prototipos pequeños. Para alcanzar las necesidades computacionales que prometen, la tecnología debe seguir avanzando y eso solo es posible si se invierte en la ciencia básica que ha permitido llegar hasta aquí. Mientras tanto, nosotros seguiremos preparándonos para las maravillas que están por llegar.

Bibliografía

- [1] J. Adolfo de Azcárraga, En torno a los Nobel de Física de 2022. Un Nobel tan tardío como merecido y que culmina un largo debate, Revista Española de Física 36 (4), 23 (2022).
- https://www.lamoncloa.gob.es/serviciosde-[2] prensa/notasprensa/ciencia-e-innovacion/ Paginas/2022/180322-comunicacion-cuantica.aspx
- [3] https://quantumspain-project.es/
- https://eurohpc-ju.europa.eu/one-step-closereuropean-quantum-computing-eurohpc-jusigns-hosting-agreements-six-quantum-computers-2023-06-27_en
- [5] A. Cervera-Lierta y A. Pozas-Kerstjens, Computación cuántica en la nube: un laboratorio en tu portátil, Revista Española de Física 34 (1), 25 (2020).
- [6] https://www.res.es/
- https://eurohpc-ju.europa.eu/ [7]
- https://commission.europa.eu/strategy-and-policy/priorities-2019-2024/europe-fit-digital-age/ european-chips-act_es

Alba Cervera Lierta Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación, investigadora sénior y coordinadora de Quantum Spain

