

Programación GPGPU y Computación Cuántica

Procesamiento de Datos a Gran Escala

José Antonio Álvarez Ocete
Francisco Javier Sáez Maldonado

2 de noviembre de 2021

Índice

1. Parte 1: Programación GPGPU	2
1.1. Recursos de la GPU	2
1.2. Suma de 2 vectores	4
1.2.1. Suma de dos enteros	4
1.2.2. Paralelizando	6
1.2.3. Preguntas	9
1.3. <i>NUMBLOCK</i> bloques y <i>NUMTHREADS</i> hilos	10
1.4. Suma de 2 matrices	11
1.5. Stencil1d: Estudiar el efecto de la memoria compartida	11
2. Parte 2: Programación con QisKit: (Computación cuántica)	11
2.1. Puertas Cuánticas	11
2.2. Generación de números aleatorios con un Computador Cuántico	15
2.3. Entrelazamiento	18
2.4. Sumador de 2 qbits	20
3. Ejercicios opcionales de la práctica 2	23
3.1. Teleportación cuántica	23
3.2. El algoritmo de Grover	25

TODO: completar intro

Dividiremos esta práctica en 2 partes fundamentales.

1. En la primera, se concentrará en realizar diversas pruebas con los elementos más básicos de la programación en CUDA.
2. En la segunda, TODO!!!!!!!!!!!!

1. Parte 1: Programación GPGPU

1.1. Recursos de la GPU

Ejercicio 1

TODO: Completar

Para programar en GPU, el primer paso que debemos dar es conocer las características (y por tanto, los recursos) que el dispositivo del que disponemos nos ofrece. En este caso práctico, vamos a realizar las pruebas utilizando [Google Colaboratory](#). Google pone a disposición del usuario tanto GPUs como TPUs que son más que suficientes para realizar algunas pruebas.

Lo primero que haremos es estudiar qué recursos tiene el equipo que nos ofrece Google. la GPU que nos ofrecen desde Google. Podemos ejecutar el comando `lscpu` para obtener información sobre el modelo de CPU que tenemos. El resultado nos muestra que tenemos un procesador *Intel(R) Xeon(R) CPU @ 2.30GHz* de 64 bits. Además, si ejecutamos `free -kh` vemos que tenemos los siguientes recursos disponibles:

	total	used	free	shared	buff/cache	available	
Mem:	12G	571M	9.9G	1.2M	2.2G	11G	
Swap:	0B	0B	0B				

Como vemos, tenemos 12Gb de memoria prácticamente disponibles. Ahora, queremos comprobar también los recursos GPU que tenemos disponibles, sabiendo que hemos activado el entorno de Colaboratory para que tenga GPU. Verificamos las tarjetas gráficas que tenemos utilizando la orden `nvidia-smi`. Obtenemos el resultado siguiente:

```

Fri Oct 29 14:57:32 2021
+-----+
| NVIDIA-SMI 495.29.05      Driver Version: 460.32.03      CUDA Version: 11.2      |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| GPU  Name          Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |
| Fan  Temp  Perf    Pwr:Usage/Cap|      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |
|                               |                  |              MIG M. |
+=====+=====+=====+=====+=====+=====+
|   0   Tesla K80           Off   | 00000000:00:04.0 Off |                    0 |
| N/A   48C    P8      30W / 149W |      0MiB / 11441MiB |      0%      Default |
|                               |                  |                    N/A |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+

+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| Processes:                                                       |
| GPU  GI    CI          PID    Type    Process name                      GPU Memory |
|      ID    ID                                   Usage          |
+=====+=====+=====+=====+=====+=====+
| No running processes found                                     |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+

```

Como vemos, en **esta conexión al servidor** se nos ha proporcionado una *Nvidia Tesla K80*. Hacemos hincapié en que es en esta conexión porque en Google Colaboratory se asigna una GPU que esté disponible en ese momento, por lo que en otra ejecución podríamos obtener otra de capacidades de computación similares.

Además de eso, se nos indica que tenemos como driver instalado la versión 11.2 de CUDA. Sin embargo, hemos comprobado que la versión de ejecución de CUDA no es la misma de dos maneras distintas. Primeramente, si hacemos `!nvcc --version` ya se nos indica por primera vez lo siguiente:

```

Cuda compilation tools, release 11.1, V11.1.105
Build cuda_11.1.TC455_06.29190527_0

```

Además de eso, podemos compilar el ejemplo que tenemos en `/usr/local/cuda/samples/1_Uilities/deviceQuery/` usando el `makefile` proporcionado y, al ejecutar el ejemplo, obtenemos la siguiente salida (mostramos un resumen de la misma debido a su extensión):

```

Device 0: "Tesla K80"
  CUDA Driver Version / Runtime Version      11.2 / 11.1
  ...
  Total amount of constant memory:           65536 bytes
  Total amount of shared memory per block:   49152 bytes
  Total shared memory per multiprocessor:    114688 bytes
  Total number of registers available per block: 65536
  Warp size:                                32
  Maximum number of threads per multiprocessor: 2048
  Maximum number of threads per block:       1024
  Max dimension size of a thread block (x,y,z): (1024, 1024, 64)
  Max dimension size of a grid size    (x,y,z): (2147483647, 65535, 65535)
  ...

```

Como datos a destacar, vemos que tenemos 65536 registros disponibles por bloque, con un tamaño de Warp de 32 y con un máximo número de hilos por bloque de 1024. Estos datos tendrán implicaciones a la hora de hacer ejecuciones. Además, viendo la dimensión máxima de un grid en la tripla que se nos ofrece, obtenemos que el número máximo de bloque es 65535.

1.2. Suma de 2 vectores

Ejercicio 2

TODO: Completar

Construiremos en varias etapas un programa en CUDA que realiza la suma de dos vectores.

1.2.1. Suma de dos enteros

Comenzamos con un ejemplo sencillo de cálculo de una suma de enteros usando CUDA. El código está proporcionado en el cuaderno de enunciado de la práctica. Explicamos brevemente el código para entender mejor las preguntas:

```
__global__ void add(int *a, int *b, int *c) {  
    *c = *a + *b;  
}
```

Este bloque implementa la función suma de dos enteros que se pasan como un puntero. Se almacena el valor de la suma en un tercer puntero que se pasa a la función.

```
// host copies of variables a, b & c  
int a, b, c;  
  
// device copies of variables a, b & c  
int *d_a, *d_b, *d_c;  
  
int size = sizeof(int);  
// Allocate space for device copies of a, b, c  
cudaMalloc((void **)&d_a, size);  
cudaMalloc((void **)&d_b, size);  
cudaMalloc((void **)&d_c, size);  
// Setup input values  
c = 0;  
a = 3;  
b = 5;
```

En este bloque se hace la declaración de variables. Se hacen tres variables, luego se declaran punteros a tres variables y se declara un entero `size` que tiene como valor el tamaño de un entero. A continuación, se declaran en CUDA punteros (usando los tres punteros declarados anteriormente) de tamaño `size`. Por último, se le da valor a los enteros para poder sumarlos.

```
// Copy inputs to device
cudaMemcpy(d_a, &a, size, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_b, &b, size, cudaMemcpyHostToDevice);

// Launch add() kernel on GPU
add<<<1,1>>>(d_a, d_b, d_c);
```

En este fragmento, primero se copia a la memoria de la GPU las referencias a los enteros que hemos inicializado anteriormente, es decir, ahora en la memoria de CUDA los punteros inicializados en cuda apuntan a la misma posición de memoria que tiene en el disco los valores que se quieren sumar. Se usa el valor `cudaMemcpyHostToDevice` del enumerado `cudaMemcpyKind` que indica que el valor irá desde el Host (el equipo) al Device (la GPU). A continuación, se realiza la operación suma `add<<<1,1>>>` indicándole que se haga con 1 bloque y 1 hebra.

```
// Copy result back to host
cudaError_t err = cudaMemcpy(&c, d_c, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
if(err!=cudaSuccess)
    printf("CUDA error copying to Host: %s\n", cudaGetErrorString(err));

printf("result is %d\n", c);
// Cleanup
cudaFree(d_a);
cudaFree(d_b);
cudaFree(d_c);
```

En este último código, se hace apuntar el puntero que tiene el resultado en la GPU al puntero que tiene la memoria del dispositivo, guardando si ha habido algún error. Ahora, se usa otro valor del enumerado: `cudaMemcpyDeviceToHost`, que indica que el valor vaya desde la GPU al equipo. Finalmente, se liberan de la GPU los espacios reservados para los punteros. El resultado de la ejecución es el esperado.

```
!./sumald
```

```
result is 8
```

Si comprobamos el perfil de ejecución, vemos el siguiente resultado:

```
==229== NVPROF is profiling process 229, command: ./sumald
==229== Warning: Auto boost enabled on device 0. Profiling results may be inconsistent.
result is 8
==229== Profiling application: ./sumald
==229== Profiling result:
```

	Type	Time(%)	Time	Calls	Avg	Min	Max	Name
GPU activities:		37.50%	3.7440us	2	1.8720us	1.5040us	2.2400us	[CUDA memcpy HtoD]
		36.54%	3.6480us	1	3.6480us	3.6480us	3.6480us	add(int*, int*, int*)
		25.96%	2.5920us	1	2.5920us	2.5920us	2.5920us	[CUDA memcpy DtoH]
API calls:		99.56%	270.53ms	3	90.177ms	2.6620us	270.52ms	cudaMalloc
		0.21%	565.39us	1	565.39us	565.39us	565.39us	cuDeviceTotalMem
		0.12%	321.01us	101	3.1780us	210ns	140.66us	cuDeviceGetAttribute

0.06%	171.37us	3	57.124us	5.6250us	152.77us	cudaFree
0.02%	60.590us	3	20.196us	11.684us	25.788us	cudaMemcpy
0.01%	32.193us	1	32.193us	32.193us	32.193us	cuDeviceGetName
0.01%	24.277us	1	24.277us	24.277us	24.277us	cudaLaunchKernel
0.00%	5.0420us	1	5.0420us	5.0420us	5.0420us	cuDeviceGetPCIBusId
0.00%	1.9970us	3	665ns	186ns	1.0810us	cuDeviceGetCount
0.00%	1.5280us	2	764ns	401ns	1.1270us	cuDeviceGet
0.00%	420ns	1	420ns	420ns	420ns	cuDeviceGetUuid

Como vemos, tenemos una única llamada a la función `add`, 3 llamadas a la función `cudaMalloc` y otras tres para copiar las referencias usando `cudaMemcpy`. Podemos observar en esta primera ejecución cómo se hacen 101 llamadas a `cuDeviceGetAttribute`, que nos devuelve un valor que se almacena en la memoria de la GPU.

1.2.2. Paralelizando

Sumando vectores

El objetivo ahora será modificar el código actual para que la suma de vectores se realice según los bloques y las hebras que se le indiquen. En particular, queremos modificar el número de hebras para que se puedan paralelizar las operaciones. Comenzamos cambiando el número de hebras a 512. Podemos apreciar en el código de la suma un cambio:

```
__global__ void add(int *a, int *b, int *c) {
    /*c = *a + *b;
    c[blockIdx.x] = a[blockIdx.x] + b[blockIdx.x];
}
```

Ahora, accedemos al valor `blockIdx.x` de cada uno de los punteros para realizar la suma. Esto es importante pues ahora queremos que cada operación la realice un bloque. Generalizamos el programa anterior para que sume vectores del mismo tamaño, elemento a elemento.

```
int *a, *b, *c;           // host copies of variables a, b & c
int *d_a, *d_b, *d_c;    // device copies of variables a, b & c
int size = N * sizeof(int);
// Allocate space for host copies of a, b, c   Setup input values
a = (int *) malloc(size);
b = (int *) malloc(size);
c = (int *) malloc(size);
// Setup input values
for( int i = 0; i < N; i++ ){
    a[i] = i;
    b[i] = N-i;
    c[i] = 0;
}
```

Como vemos, la inicialización de los valores es diferente. Ahora necesitamos dejar espacio en el disco que tenga tamaño: el tamaño del vector por lo que ocupa un entero. Entonces, la inicialización se hace en un bucle `for`.

```
cudaMalloc((void **)&d_a, size);
cudaMalloc((void **)&d_b, size);
```

```

cudaMalloc((void **)&d_c, size);
// Copy inputs to device
cudaMemcpy(d_a, a, size, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_b, b, size, cudaMemcpyHostToDevice);

```

Se reservan en memoria espacio para los vectores y se copian a la GPU usando la misma función, solo que asignando más espacio mediante el parámetro `size`.

```

// Launch add() kernel on GPU Se lanzan N bloques de 1 Thread.
add<<<N,1>>>(d_a, d_b, d_c);

```

Se realiza la operación suma entre los dos vectores. Llamándola de la forma `add<<<N,M>>>` estamos indicando que queremos realizar la operación usando N bloques y M hebras. En este caso concreto, estaríamos diciendo que se haga la operación con $N = 512$ (definido como variable del programa) bloques y 1 hebra.

El resultado final del programa es el siguiente:

```

valor a[0] es 0
valor b[0] es 512
resultado c[0] es 512
valor a[2] es 2
valor b[2] es 510
resultado c[2] es 512

```

Como podemos ver, todo parece estar ocurriendo en orden. Añadimos un bucle `for` que comprueba si todos los valores del vector `c` valen lo mismo, y lo imprime por pantalla:

```

bool res = 1;
for(int i = 0; i < N; i++)
    if(c[i] != N)
        res = 0;

printf("Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false):%d\n",res);
...
Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): 1

```

Como vemos, el resultado es correcto. Vemos el perfil de ejecución en este caso:

```

==1891== NVPROF is profiling process 1891, command: ./suma2dvector
==1891== Warning: Auto boost enabled on device 0. Profiling results may be inconsistent.
valor a[0] es 0
valor b[0] es 512
resultado c[0] es 512
valor a[2] es 2
valor b[2] es 510
resultado c[2] es 512
Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): 1
==1891== Profiling application: ./suma2dvector
==1891== Profiling result:
      Type  Time(%)      Time       Calls         Avg         Min         Max    Name

```

GPU:	40.98%	5.0880us	1	5.0880us	5.0880us	5.0880us	add(int*, int*, int*)
	37.63%	4.6720us	2	2.3360us	2.0160us	2.6560us	[CUDA memcpy HtoD]
	21.39%	2.6560us	1	2.6560us	2.6560us	2.6560us	[CUDA memcpy DtoH]
API calls:	99.49%	190.44ms	3	63.479ms	2.2440us	190.43ms	cudaMalloc
	0.28%	529.05us	1	529.05us	529.05us	529.05us	cuDeviceTotalMem
	0.10%	199.48us	101	1.9750us	145ns	87.079us	cuDeviceGetAttribute
	0.07%	134.29us	3	44.764us	3.2210us	115.10us	cudaFree
	0.03%	56.462us	3	18.820us	11.545us	25.237us	cudaMemcpy
	0.01%	26.486us	1	26.486us	26.486us	26.486us	cuDeviceGetName
	0.01%	25.925us	1	25.925us	25.925us	25.925us	cudaLaunchKernel
	0.00%	5.9010us	1	5.9010us	5.9010us	5.9010us	cuDeviceGetPCIBusId
	0.00%	1.7020us	3	567ns	162ns	876ns	cuDeviceGetCount
	0.00%	1.2500us	2	625ns	233ns	1.0170us	cuDeviceGet
	0.00%	385ns	1	385ns	385ns	385ns	cuDeviceGetUuid

Como vemos, de nuevo tenemos una única llamada a la función `add`. No se observa una diferencia apreciable entre el tiempo de ejecución de esta llamada en este caso y en el anterior. Tampoco en el resto de operaciones que se hacen en la GPU.

1 Bloque - N Threads

El objetivo será usar la modificación del programa que utiliza en un solo bloque N hebras para paralelizar la ejecución. Habíamos definido antes $N = 512$ para usar ese número de bloques. Ahora, se redefine como $N = 1024$ para usar este número de hebras (que vimos en la descripción de la GPU que es el número máximo).

Al igual que en el caso anterior, la función suma cambia:

```
__global__ void add(int *a, int *b, int *c) {
    c[threadIdx.x] = a[threadIdx.x] + b[threadIdx.x];
}
```

Como vemos, ahora se accede al índice de la hebra usando `threadIdx.x`. Otro cambio que se debe hacer claramente es que la función `add` se llame de la forma:

```
// Launch add() kernel on GPU Se lanzan 1 bloques de N Threads.
add<<<1,N>>>>(d_a, d_b, d_c);
```

Volvemos a mostrar el resultado de la ejecución de este nuevo programa.

```
valor a[10] es 10
valor b[10] es 1014
resultado c[10] es 1024
valor a[0] es 0
valor b[0] es 1024
resultado c[0] es 1024
Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): 1
```

Se aprecia que todos los resultados son correctos. Se pide de nuevo que se compare el perfil de ejecución con los anteriores, pero no se aprecia ninguna diferencia significativa en los resultados.

1.2.3. Preguntas

1. Pruebe a lanzar diferente número de Threads (con un solo 1 bloque) ¿Cual son los valores máximos y mínimos de número de theads por bloque en esta GPU?

Estos valores mínimos ya se podían observar cuando ejecutábamos el programa `deviceQuery`. En él, aparecía que el número máximo de threads por bloque era 1024. Ya hemos mostrado que, en el caso de ejecutarlo con este número los resultados son correctos.

```
add<<<1,1025>>>(d_a, d_b, d_c);
...
valor a[10] es 10
valor b[10] es 1014
resultado c[10] es 0
valor a[0] es 0
valor b[0] es 1024
resultado c[0] es 0
Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): 0
```

Como vemos, en este caso no se calculan bien los valores aunque estén bien inicializados y por tanto la operación falla. De hecho, hemos comprobado que para todo número diferente de 1024, esta operación falla. Esto además tiene sentido pues recordamos que en la suma estamos accediendo al índice de la hebra, por lo que no tendremos suficientes índices de hebras para acceder a todos los elementos del vector. Además, hemos comprobado cuántos elementos se suman correctamente cambiando el bucle de comprobación de la siguiente forma:

```
bool res = 1;
int well = 0;
for(int i = 0; i < N; i++)
    if(c[i] == N) {
        well +=1;
    }
res = well == N;
printf("Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): %d\n", res);
printf("Numero de elementos sumados correctamente: %d\n", well);
```

Se comprueba que, para cualquier $n < N$, el número de elementos correctamente sumados es justamente n . Por ejemplo, en el caso $n = 3$:

```
add<<<1,3>>>(d_a, d_b, d_c);
...
Todos los valores de c valen lo mismo (1 true, 0 false): 0
Numero de elementos sumados correctamente: 3
```

2. Pruebe a lanzar diferente número de bloques (con un solo thread) ¿Cual son los valores máximos y mínimos de número de bloques en esta GPU?

1.3. *NUMBLOCK* bloques y *NUMTHREADS* hilos

Pretendemos ahora lanzar $NUMBLOCK \in \mathbb{N}$ bloques por $NUMTHREAD \in \mathbb{N}$ hilos. Lo primero que debemos hacer es cambiar la función suma para que se pueda acceder en cada hebra al elemento correspondiente. Recordamos que una matriz $N \times M$ se puede representar como un vector de NM posiciones. Si quisiésemos acceder a la posición z de un vector utilizando bloques y hebras, debemos descomponer ese z como

$$z = n * i + j$$

donde n será el tamaño de bloque, i el número de bloque en el que está el elemento y j la hebra que tendrá que manejarlo. Podemos realizar esto en la nueva función `add` que redefinimos, usando como $n = blockDim.x$, $i = blockIdx.x$ y $j = threadIdx.x$:

```
__global__ void add(int *a, int *b, int *c) {  
    int index = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;  
    c[index] = a[index] + b[index];  
}
```

Ahora, debemos también definir los nuevos tamaños de bloque y de número de hebras. Debemos adecuar este tamaño al tamaño de nuestro vector. Llamemos N al tamaño del vector (o matriz vectorizada) que queremos sumar. Sea NT el número de hebras. Supongamos que queremos dividir este trabajo para que cada hebra realice (si es posible) una única operación. Se podría pensar a priori que el número de bloques que necesitamos para realizar nuestra operación es:

$$NB = \frac{N}{NT}.$$

Sin embargo, Esta división podría no ser entera al no ser N múltiplo de NT . En esos casos, no podríamos acceder a todos los elementos de nuestro vector y no tendríamos por tanto un resultado correcto. Es por ello que debemos considerar entonces como número óptimo de bloques:

$$NB = \frac{N + NT - 1}{NT} = \frac{N}{NT} + 1 - \frac{1}{NT}.$$

Si aplicamos la función parte entera a este número, obtendríamos K como valor. En el código proporcionado, tenemos el tamaño del vector fijo $N = 1024^2$ y el número de hebras por bloque $NT = 512$, resultando en una división exacta $NB = 2048$. Así, se puede llamar directamente a la función `add` del siguiente modo:

```
add<<<N/THREADS_PER_BLOCK, THREADS_PER_BLOCK>>>>(d_a, d_b, d_c);
```

Ejercicio 3

Qué ocurre cuando se aumenta N ?

Con el código actual si aumentamos N , el cociente no será exacto y tendremos algunos datos que no podremos procesar, los dejaremos fuera de la cuenta. Por ello, debemos actualizar el código para que se calcule bien el número de bloques que necesitamos según el número de hebras que hemos establecido:

```
add<<<(N + THREADS_PER_BLOCK - 1)/THREADS_PER_BLOCK, THREADS_PER_BLOCK>>>(d_a, d_b,
```

esta presentación de la documentación de CUDA

```
#define N (1024*1024)
#define THREADS_PER_BLOCK 512
```

1.4. Suma de 2 matrices

1.5. Stencil1d: Estudiar el efecto de la memoria compartida

Ejercicio 4

TODO: Completar

2. Parte 2: Programación con QisKit: (Computación cuántica)

Para esta parte de la práctica utilizaremos el [Quantum Composer de IBM](#). Puesto que el tenemos un número limitado de procesos a ejecutar (únicamente 5) veremos los resultados en el simulador sin llegar a medirlo en muchos casos.

2.1. Puertas Cuánticas

Ejercicio 5

Compruebe el funcionamiento de diferentes puertas cuánticas de 1 y 2 qubits.

Puerta NOT

La única operación no trivial aplicable sobre un único bit es la negación: la puerta NOT. De la misma forma, es natural preguntarse cuál es el equivalente a la puerta NOT en el mundo cuántico. Dado que un qubit está descrito por dos amplitudes α y β :

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

la puerta NOT será un intercambio entre las posiciones de estas amplitudes, obteniéndose así:

$$|\varphi\rangle = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle.$$

La matriz unitaria que describe esta transformación es sencilla:

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Vemos la implementación de esta puerta en el Quantum Composer de IBM:

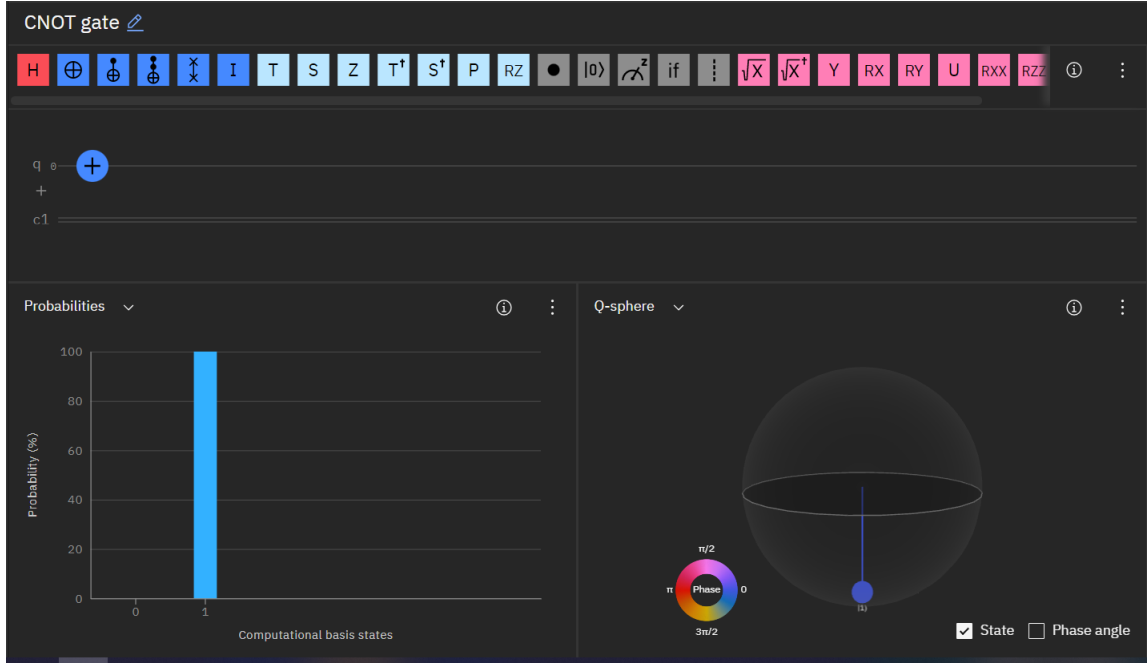


Figura 1: Circuito con puerta de NOT

Recordemos que en el Quantum Composer de IBM todos los qubits empiezan siempre en el estado $|0\rangle$. Tras aplicarlo a nuestro qubit una puerta X obtendremos $|1\rangle$.

Puerta Hadamard

Finalmente presentamos la puerta de Hadamard para un único bit. Está descrita por la siguiente matriz unitaria:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Uno de sus usos más comunes es la superposición de qubits. Si aplicamos esta puerta al estado $|0\rangle$ obtenemos el estado de Bell:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = |+\rangle$$

Mientras que si se la aplicamos al estado $|1\rangle$ obtenemos:

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = |-\rangle$$

Que también supone una superposición exacta de $|0\rangle$ y $|1\rangle$ puesto que $|1/\sqrt{2}|^2 = |-1/\sqrt{2}|^2 = 1/2$.

Podemos estudiar el comportamiento de esta puerta utilizando el Quantum Composer de IBM:

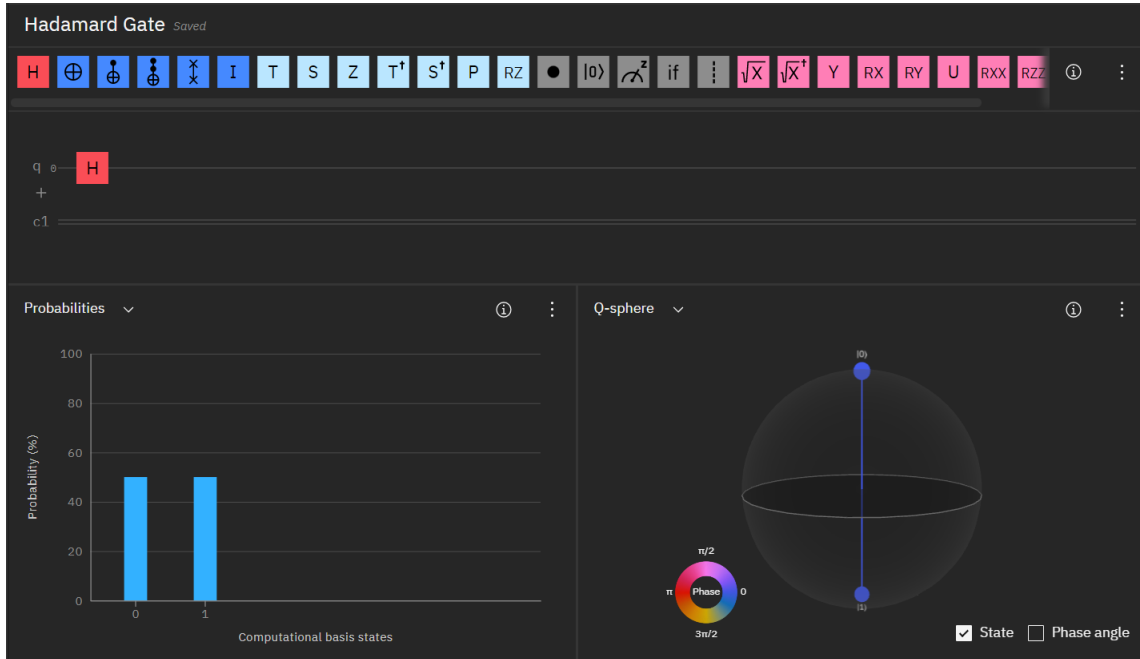


Figura 2: Circuito con puerta de Hadamard

Mirando tanto la [esfera de Bloch](#) como las probabilidades vemos que tenemos la misma probabilidad de medir 0 y 1.

Puertas de Pauli

Un conjunto particularmente relevante de puertas son las descritas por las matrices de Pauli:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Ya conocemos la matriz X , descrita también como la puerta NOT cuántica.

Puertas de fase

La puerta $\pi/8$, normalmente descrita por la letra T , es una *puerta de fase*. Las puertas de fase son un tipo especial de puertas cuánticas que llevan $|0\rangle \mapsto |0\rangle$ y $|1\rangle \mapsto e^{i\phi}|1\rangle$, donde ϕ es un ángulo de giro. El término $e^{i\phi}$ se denomina *fase* y no afecta a los resultados de las mediciones 0 y 1. En particular, la puerta T cumple $\phi = \pi/4$, y la puerta Z de Pauli es una puerta fase con $\phi = \pi/2$:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}; \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{2}} = -1 \end{pmatrix}$$

En computación clásica, uno de los resultados básicos más relevante es que cualquier función booleana puede describirse utilizando únicamente las puertas clásicas AND, OR y NOT. De la misma forma, en computación cuántica se obtiene siguiente resultado

Teorema. *Toda matriz unitaria puede aproximarse con una combinación de puertas Hadamard, CNOT y $\pi/8$.*

Esto es, todo circuito cuántico puede describirse utilizando únicamente dichas puertas.

Puerta CNOT

Pasamos a estudiar la única puerta de dos qubits que comentaremos en este apartado y que ya ha aparecido en la explicación anterior: la puerta Controlled-NOT, o simplemente CNOT. Esta transformación queda descrita por la siguiente matriz unitaria:

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Esta puerta mapea $|q_1\rangle|q_0\rangle \mapsto |q_1 \oplus q_0\rangle|q_0\rangle$. Vemos su funcionamiento.

Figura 3: Circuito con puerta CNOT

Si le aplicamos la puerta CNOT a $|+\rangle|0\rangle$ obtenemos el estado $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. Esto es: si el estado q_0 era inicialmente un 0, no cambiará el estado q_1 . Por otro lado, si el estado q_0 era inicialmente un 1, el qubit q_1 cambiará a 1. Explicaremos este circuito en profundidad en la sección 2.3.

Puerta Toffoli

Finalmente, explicamos una única puerta de más de dos qubits: la puerta de Toffoli o puerta CCNOT. Esta puerta será necesaria para el sumador de dos qubits de la sección 2.4 y será sencilla de entender una vez comprendida la puerta anterior. Queda descrita por la siguiente matriz unitaria:

$$CCNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Y mapea $|q_2\rangle|q_1\rangle|q_0\rangle \mapsto |q_2 \oplus (q_0 \wedge q_1)\rangle|q_1\rangle|q_0\rangle$. Es decir, altera el último qubit si y sólo si los dos primeros son 1. Veremos un ejemplo de uso de esta puerta en la sección 2.4.

2.2. Generación de números aleatorios con un Computador Cuántico

Ejercicio 6

Utilizando las puertas Hadamard que sean necesarias, implemente un generador de números aleatorios de 8bit.
Analice los resultados y represente su comportamiento para comprobar si los números son realmente aleatorios.

Sabemos que utilizando la puerta de Hadarmad H explicada en el apartado anterior ponemos un qubit $|0\rangle$ en superposición:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

Si ahora medimos este qubit obtendremos $|0\rangle$ con probabilidad $|1/\sqrt{2}|^2 = 1/2$, y $|1\rangle$ con probabilidad $1/2$. Esto es, hemos creado un generador de bits aleatorios utilizando un único qubit. Para crear un generador de 3 bits utilizaremos un sistema de 3 qubits. Inicialmente en el estado $|000\rangle$, aplicaremos una puerta Hadamard a cada qubit de forma independiente, poniendo así cada qubit en superposición:

$$\hat{H}_8|00000000\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^8}}(|00000000\rangle + |00000001\rangle + \dots + |11111111\rangle)$$

Donde la puerta H_8 transformación de Hadamard para ocho qubits. Se puede definir recursivamente de la siguiente forma:

$$H_m = H_1 \otimes H_{m-1}; \quad H_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Pasamos a realizar un estudio empírico del circuito diseñado. Lo implementamos utilizando el Quantum Composer de IBM:

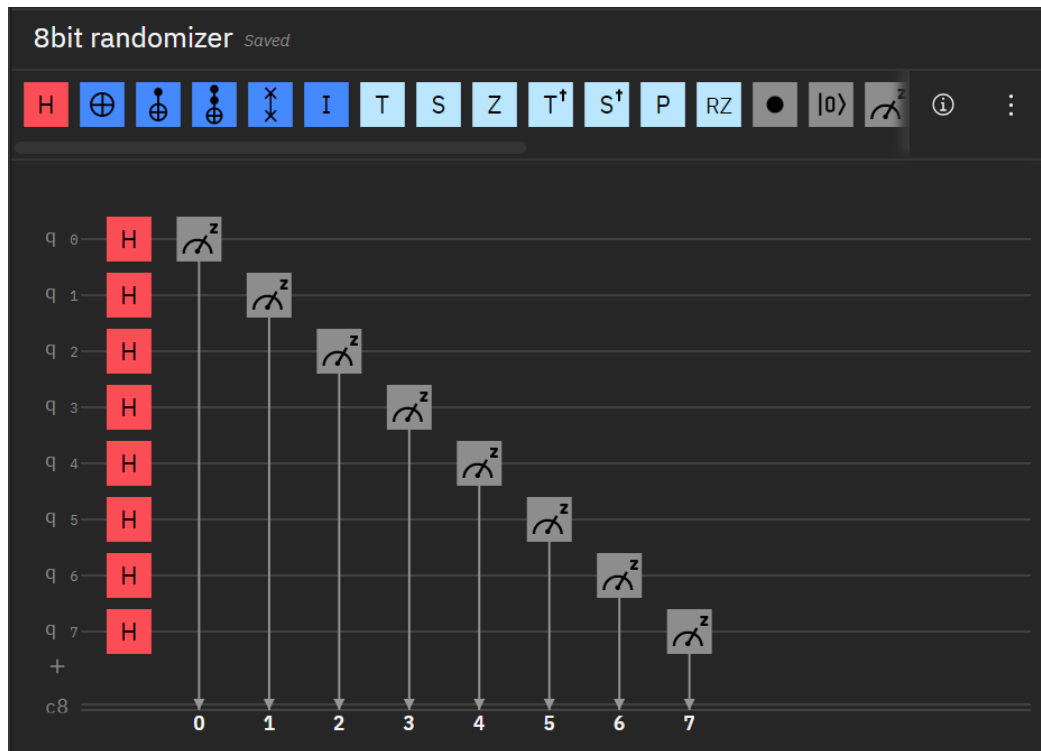


Figura 4: Circuito randomizador de 8 bits.

Este simple circuito cuántico pone todos los qubits en superposición y después mide el resultado. Ejecutamos el experimento en el simulador del ordenador cuántico de IBM, obteniendo los siguientes resultados:

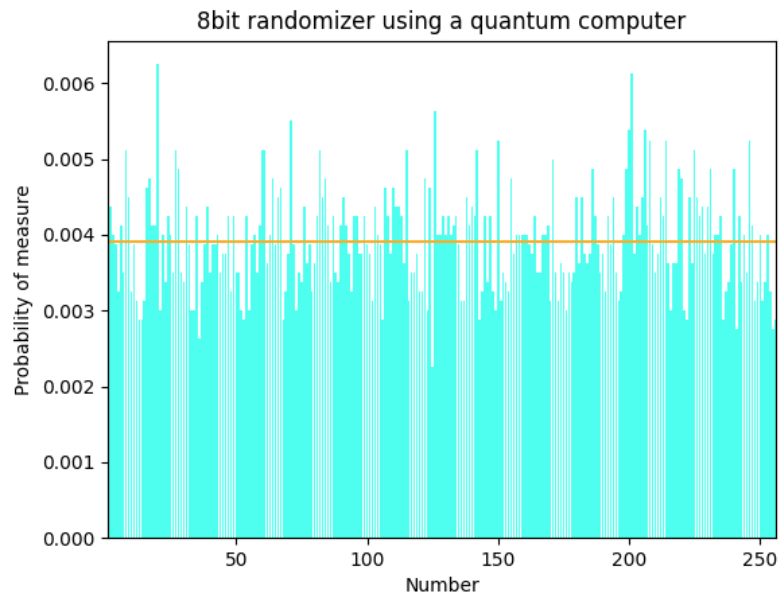


Figura 5: Resultados de la simulación con 8000 ejecuciones

Estas mediciones han de aproximarse a una uniforme de parámetro $1/256$. Podemos apreciar en la gráfica como los resultados son cercanos a este valor pero distan mucho de definir claramente una uniforme. Podemos comparar estos resultados con la generación de números aleatorios utilizando *scipy* en nuestra propia máquina:

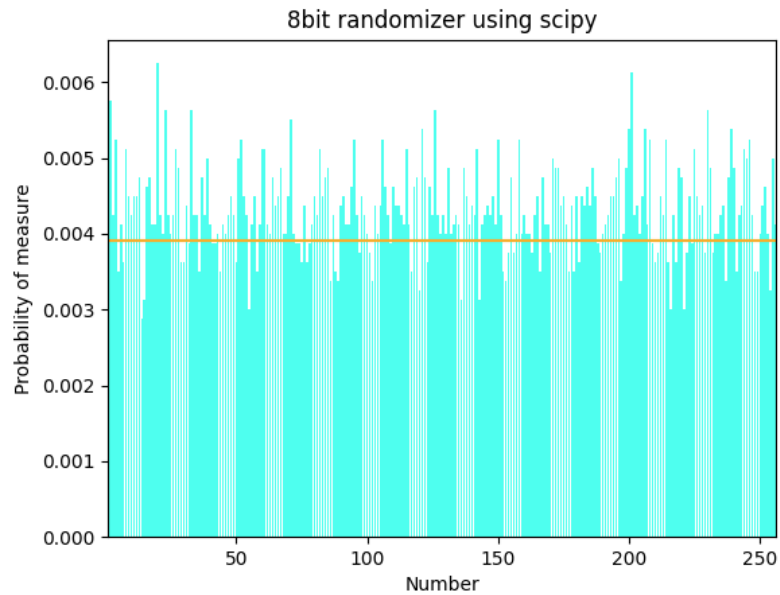


Figura 6: Resultados de la simulación con 8000 ejecuciones

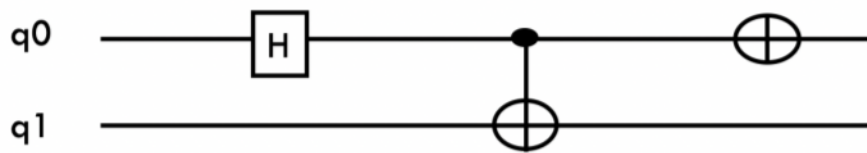
Comparando ambas gráficas podemos apreciar como la generación de números se acerca a

la distribución uniforme mencionada pero en ambas estamos relativamente lejos del modelo teórico. Tras ver los resultados de esta generación utilizando *scipy* podemos asegurar que el generador utilizando el Quantum Composer de IBM obtiene números aleatorios razonablemente aleatorizados.

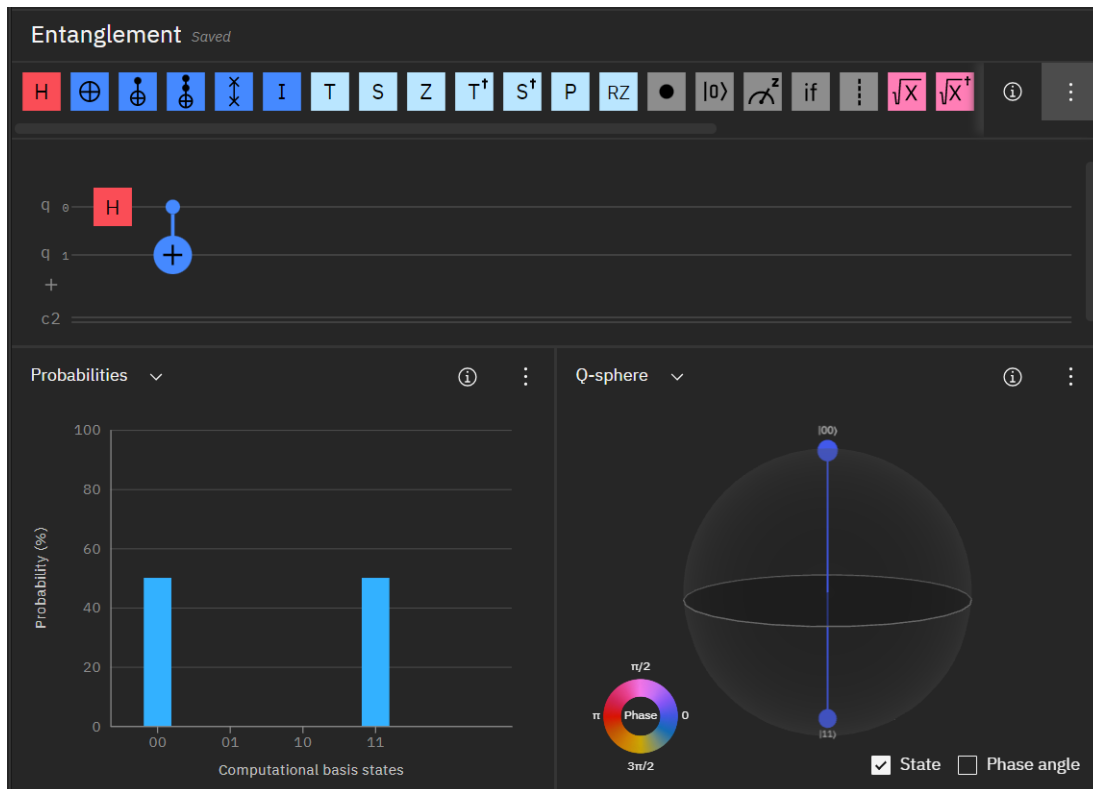
2.3. Entrelazamiento

Ejercicio 7

Explica el funcionamiento del siguiente circuito cuántico:



Comenzaremos estudiando un circuito ligeramente más sencillo que también produce entrelazamiento cuántico:



Conociendo ya la puerta de Hadamard, sabemos que el resultado tras la aplicación de dicha puerta al estado $|0\rangle$ será $|+\rangle$. Utilizando a continuación la puerta CNOT, como el estado de

control tiene la misma probabilidad de ser $|0\rangle$ que $|1\rangle$, el segundo qubit tendrá la misma probabilidad de tener dichos valores. Analíticamente:

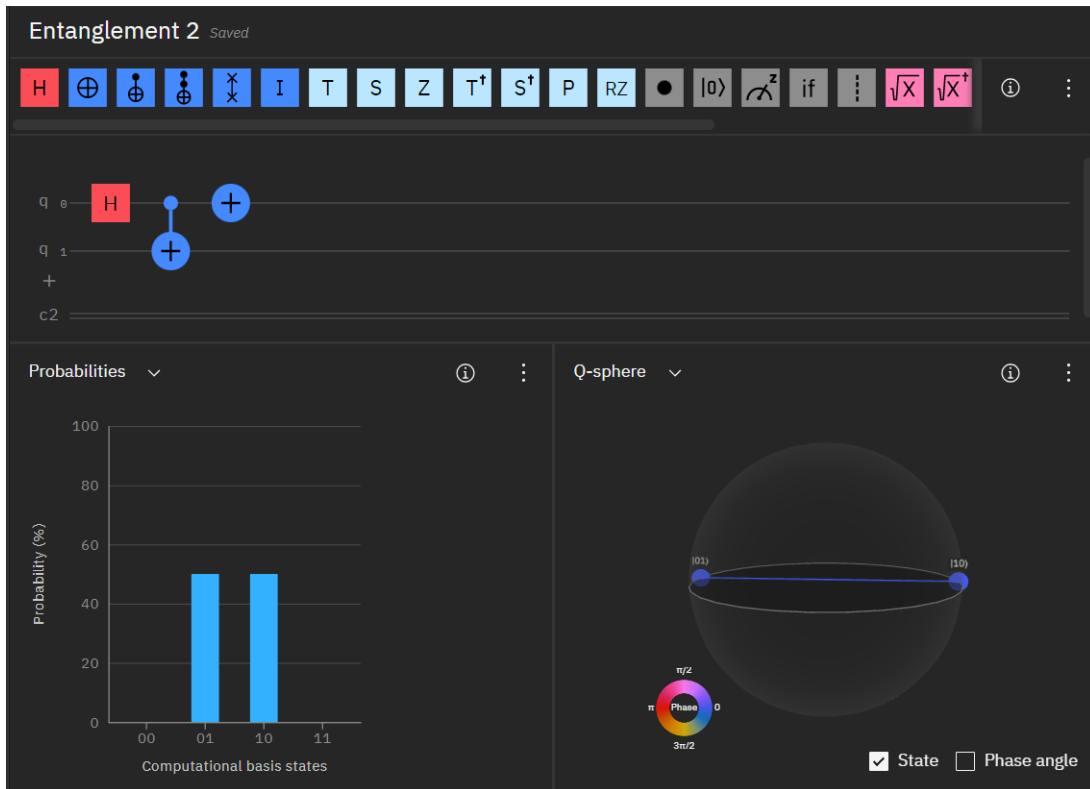
$$|+\rangle|0\rangle CNOT = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\Phi^+\rangle$$

Obteniéndose así el famoso estado EPR (Einstein, Podolsky y Rosen) o estado de Bell $|\Phi^+\rangle$. En este aparentemente sencillo estado puede apreciarse el entrelazamiento cuántico, lo que dio lugar a dicha paradoja. Estudiémos este estado en detalle.

Para empezar, al medir ambos qubits únicamente podremos obtener los resultados 00 y 11. Si únicamente medimos uno de los dos qubits y obtenemos, por ejemplo, un 0, entonces cuando midamos el otro estado obtendremos otro 0 con toda probabilidad, pues los únicos resultados finales válidos son los anteriormente descritos 00 y 11. Lo mismo ocurre si medimos 1: el valor del segundo qubit ha de ser también un 1.

De esta forma, hemos hecho que el segundo qubit colapse a un estado al medir otro qubit distinto. Estas son las implicaciones del entrelazamiento cuántico.

Estudiémos ahora el circuito del enunciado:



Esto es, aplicarle una puerta NOT al primer qubit del estado de Bell, obteniendo:

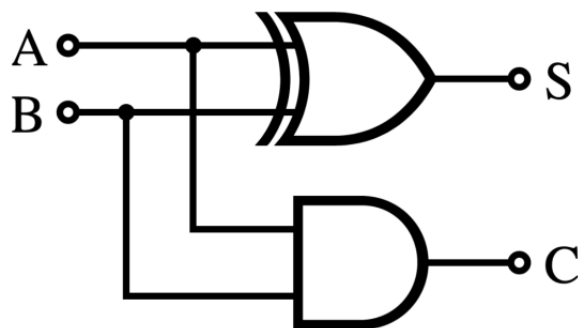
$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} (X \otimes \mathbb{I}) = \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}}$$

Este estado se comporta como el anterior pero con valores de medida opuestos: si medimos un 0 en el primer qubit, el segundo colapsará automáticamente al estado 1, y viceversa.

2.4. Sumador de 2 qbits

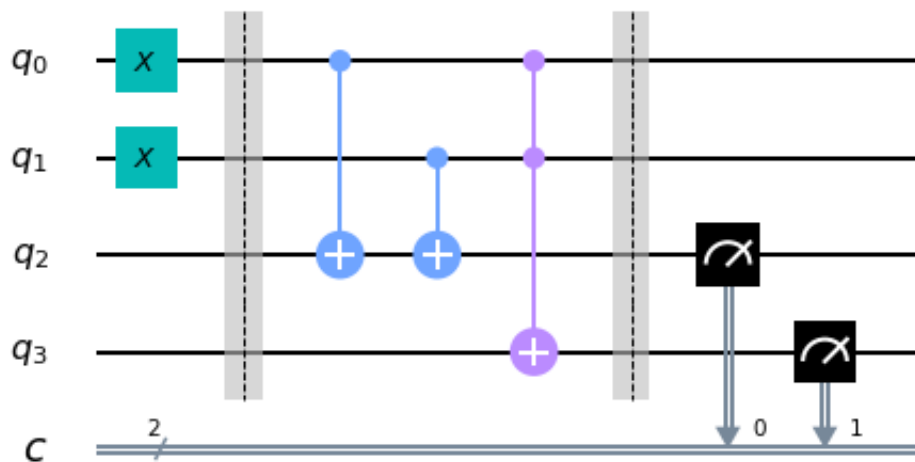
Ejercicio 8

Realice el circuito cuántico que equivale a un sumador de dos bits equivalente al siguiente circuito clásico:



Tenga en cuenta que las puertas XOR y AND clásicas no reversibles y por tanto es necesario buscar puertas cuánticas equivalentes pero que sean reversibles. Puede seguir las indicaciones de [este enlace](#).

El circuito cuántico que implementa el sumador de 2 qubits es el siguiente, donde los qubits de entrada son q_0, q_1 y q_2, q_3 son los qubits de salida:



Entendámoslo paso a paso. Puesto que los qubits q_0, q_1 son de entrada, los valores que aparecen

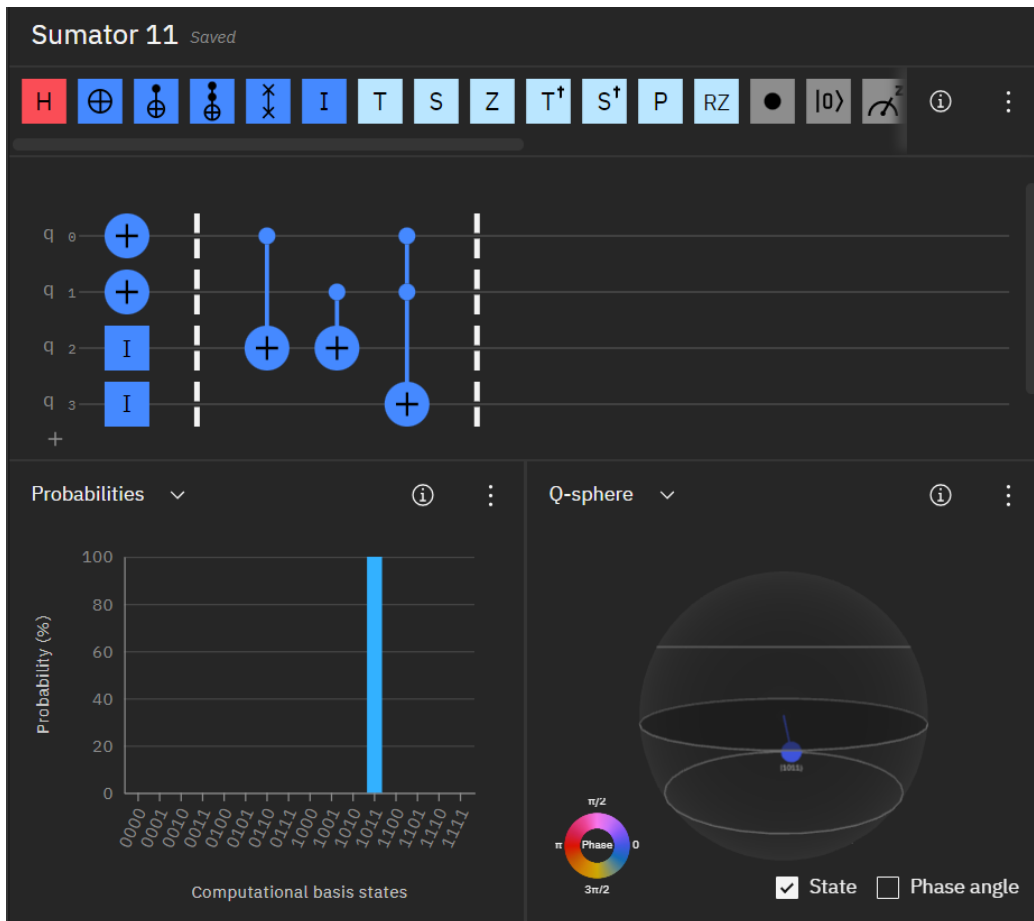
antes de la primera línea puntea ($q_0, q_1 = |1\rangle$) son un ejemplo en este caso.

Como vimos en ejercicios anteriores, la primera puerta CNOT mapea $|q_2\rangle|q_0\rangle \mapsto |q_2\rangle|q_0 \oplus q_2\rangle$. Puesto que inicialmente $|q_2\rangle = |0\rangle$, tras aplicar la primera puerta obtenemos $|0\rangle|q_0\rangle \mapsto |0 \oplus q_0\rangle|q_0\rangle = |q_0\rangle|q_0\rangle$.

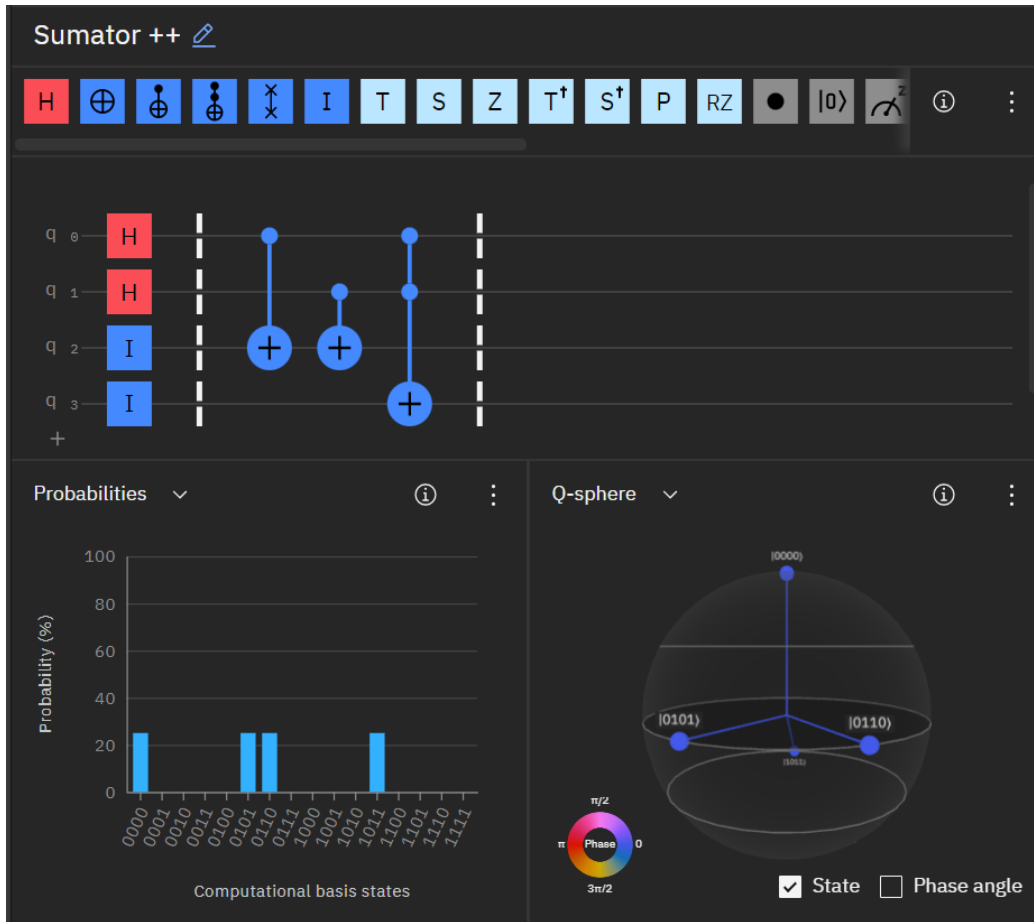
Al aplicar la segunda puerta X obtenemos en el tercer qubit $|q_0 \oplus q_1\rangle$. Esto completa la primera parte de nuestro sumador de dos qubits.

De cara al acarreo acumulado en q_3 , este unicamente es 1 si ambos qubits son 1. Por lo tanto, utilizamos la puerta de Toffoli para mapear $|0\rangle|q_1\rangle|q_0\rangle \mapsto |0 \oplus (q_0 \wedge q_1)\rangle|q_1\rangle|q_0\rangle = |q_0 \wedge q_1\rangle|q_1\rangle|q_0\rangle$.

Comprobemos el resultado de este circuito utilizando el Quantum Composer de IBM para distintas entradas. En primer lugar utilizamos $|11\rangle$ para los qubits de entrada como en el circuito proporcionado:



Podemos ver en las probabilidades de las salidas como 1011 es el único resultado posible (a nivel teórico) de nuestro circuito. Recordemos que esto representa las medidas de $q_3q_2q_1q_0$, en ese orden. Es decir, tras sumar dos estados $|1\rangle$ obtenemos $|10\rangle$, como cabría esperar. Estudiémos ahora el resultado de nuestro circuito para dos entradas $|+\rangle$:



Obtenemos las siguientes salidas, con igual probabilidad:

- $P(q_3q_2q_1q_0 = 0000) = 0,25.$
- $P(q_3q_2q_1q_0 = 0101) = 0,25.$
- $P(q_3q_2q_1q_0 = 0110) = 0,25.$
- $P(q_3q_2q_1q_0 = 1011) = 0,25.$

Sin embargo, si miramos unicamente los qubits de salida obtenemos la siguiente distribución:

- $P(q_3q_2 = 00) = 0,25.$
- $P(q_3q_2 = 01) = 0,50.$
- $P(q_3q_2 = 10) = 0,25.$

Lo que concuerda con las predicciones teóricas: la probabilidad de que ambos qubits iniciales sean 0 o 1 es 0,25, mientras que la probabilidad de que uno sea 0 y el otro 1 es de 0,5.

3. Ejercicios opcionales de la práctica 2

Para la parte opcional de esta práctica explicaremos en detalle el funcionamiento de algunos algoritmos cuánticos.

3.1. Teleportación cuántica

El objetivo de este algoritmo es el de transmitir un qubit entre dos personas llamadas Alice y Bob. Antes de realizar el experimento, Bob y Alice comparten un qubit entrelazado. Aunque este proceso es equivalente para cualquier otro estado de **la base de Bell**, tomaremos el estado de Bell presentado en la sección 2.3:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |1_A\rangle \otimes |1_B\rangle}{\sqrt{2}}$$

Donde utilizamos la notación convencional de la física cuántica:

$$|0_A\rangle \otimes |1_B\rangle \equiv |0_A\rangle|1_B\rangle \equiv |01\rangle$$

Una vez el estado entrelazado ha sido correctamente creado, Alice y Bob toman cada uno de los qubits entrelazados y se separan una distancia suficiente para que ambos sistemas no interfieran entre ellos. La distancia entre Alice y Bob puede ser tan grande como se quiera mientras los qubits permanezcan entrelazados (no haya ninguna alteración a los qubits en su transporte).

El objetivo será transmitir un nuevo qubit $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ de Alice a Bob. Para ello asumimos que las amplitudes α y β son desconocidas para ambos. De esta forma, nuestro sistema inicial consta de tres qubits: el primero pertenece a Alice y procede del estado $|\Psi\rangle$, el segundo también pertenece a Alice y procede del estado compartido y entrelazado $|\Phi^+\rangle$, y el tercero que pertenece a Bob y también procede del estado compartido $|\Phi^+\rangle$. Podemos escribir el estado inicial de nuestro sistema completo de la siguiente forma:

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi\rangle|\Phi^+\rangle = |00\rangle + |11\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{\alpha|0\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta|1\rangle(|00\rangle + |11\rangle)}{\sqrt{2}}$$

De nuevo, recordemos que el objetivo es enviar el estado $|\Psi\rangle$ de Alice a Bob. Para ello tendremos que, además de aplicar nuestro circuito cuántico al sistema, enviar dos únicos bits clásicos de Alice a Bob. Estudiémos el circuito paso a paso:

Primer paso: Puerta CNOT

El primer paso de nuestro algoritmo es aplicar una puerta CNOT a los dos qubits de Alice. Esto es, aplicar al sistema completo la transformación $CNOT \otimes \mathbb{I}$:

$$|\Psi_1\rangle = (CNOT \otimes \mathbb{I})|\Psi_0\rangle = \frac{\alpha|0\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta|1\rangle(|10\rangle + |01\rangle)}{\sqrt{2}}$$

De esta forma únicamente habrá cambiado el segundo qubit de Alice en el sistema - correspondiente al qubit central de nuestro sistema completo.

Segundo paso: Puerta de Hadamard

Aplicamos la puerta de Hadamard al qubit de Alice, obteniendo:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= (H \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I})|\Psi_1\rangle = \frac{\alpha|+\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta|-\rangle(|10\rangle + |01\rangle)}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)(|00\rangle + |11\rangle) + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)(|10\rangle + |01\rangle) \right) \end{aligned}$$

Operamos en la expresión anterior para agrupar los qubits de Alice:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} \left(|00\rangle_A (\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B) + |01\rangle_A (\alpha|1\rangle_B + \beta|0\rangle_B) \right. \\ &\quad \left. + |10\rangle_A (\alpha|0\rangle_B - \beta|1\rangle_B) + |11\rangle_A (\alpha|1\rangle_B - \beta|0\rangle_B) \right) \end{aligned}$$

Último paso: Medida y transmisión

Como podemos ver en la expresión anterior de $|\Psi_2\rangle$, para cada posible valor de los qubits de Alice tenemos un estado distinto para el qubits de Bob. El resto del proceso consiste en medir los estados de Alice y transmitir la medida a Bob. Por ejemplo, si Alice mide en sus dos qubits el valor 00, el qubit de Bob estará en el estado $\alpha|0\rangle_B + \beta|1\rangle_B = |\Psi\rangle$.

Si el resultado de la medida de Alice fuese distinto a 00, Bob no tendría el estado $|\Psi\rangle$ como tal, pero podría recuperarlo aplicando operaciones sencillas. Para saber qué puertas ha de aplicarle a su qubit necesita saber cuál es su contenido actual. Es por ello que necesita la información de la medida transmitida por Alice.

En la siguiente tabla podemos ver un desglose de las operaciones que ha de aplicar Bob según la medida de Alice para recuperar el qubit original.

Medida de Alice m	Estado de Bob $ \Psi_3\rangle_m$	Operación a aplicar	Resultado
00	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$	\mathbb{I}	$\mathbb{I} \Psi_3\rangle_{00} = \Psi\rangle$
01	$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$	X	$X \Psi_3\rangle_{01} = \Psi\rangle$
10	$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$	Z	$Z \Psi_3\rangle_{10} = \Psi\rangle$
11	$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$	XZ	$XZ \Psi_3\rangle_{11} = \Psi\rangle$

En la figura 7 podemos ver el circuito cuántico que implementa este algoritmo, donde la puerta morada es la *Controlled-Z*, que aplica la puerta Z al tercer qubit si y sólo si el estado del primer qubit es 1.

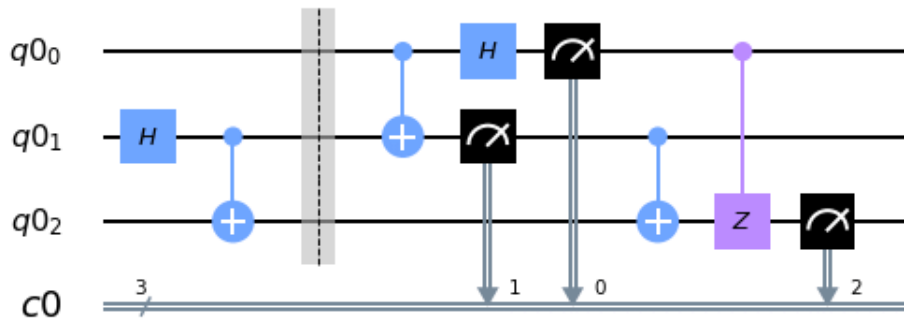


Figura 7: Circuito cuántico que implementa la teleportación cuántica.

Finalmente, merece la pena comentar la paradoja que surgió a partir de este circuito cuántico. Ya que Alice y Bob están tan separados físicamente como se quiera, al medir los qubits de Alice estamos haciendo el qubit de Bob (a distancia arbitrariamente grande) colapse a un estado de forma instantánea. ¿Estamos a caso transmitiendo información más rápido de lo que viaja la velocidad de la luz?

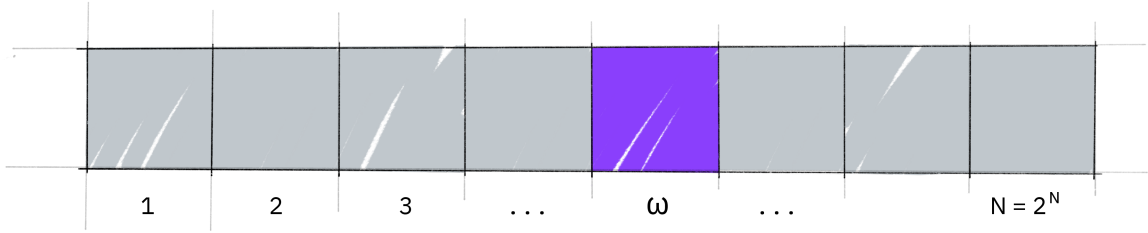
Como cabe esperar, la respuesta es no. Aunque el qubit de Bob haya colapsado a un estado, sin Bob saber la información transmitida por Alice sobre su medida, no podrá recuperar el estado original. Y, naturalmente, la medida de Alice no puede ser transmitida a Bob más rápido que la velocidad de la luz.

3.2. El algoritmo de Grover

Este algoritmo consiste en la búsqueda de un elemento particular sobre una base de datos de 2^N elementos. Esta explicación se basará en [el tutorial de Qiskit](#) y el [artículo de Wikipedia sobre el algoritmo de Grover](#), en inglés.

Definición del problema y oráculo

Supongamos que tenemos una función $f : \{0, 1, \dots, N - 1\} \rightarrow \{0, 1\}$ que representa nuestra base de datos. Dado un índice x a un elemento, esta función evalúa $f(x) = 1$ si y solamente si x es el índice del elemento buscado. Dicho índice suele denominarse por ω (de *winner*).



Habitualmente accederemos a la información de f mediante un operador unitario denominado el *oráculo*, definido de la siguiente forma:

$$U_{\omega}|x\rangle = \begin{cases} -|x\rangle & \text{si } f(x) = 1 \\ |x\rangle & \text{si } f(x) = 0 \end{cases}$$

O, equivalentemente:

$$U_{\omega}|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$$

Supongo que disponemos de un sistema con 3 qubits y el índice buscado es $\omega = 101$. El oráculo asociado será de la forma:

$$U_{\omega} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \leftarrow \omega = 101$$

Podemos construir un oráculo genérico de la siguiente forma:

$$U_{\omega} = \begin{bmatrix} (-1)^{f(0)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (-1)^{f(1)} & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (-1)^{f(2^n-1)} \end{bmatrix}$$

Definición del problema y oráculo