Programación GPGPU y Computación Cuántica Procesamiento de Datos a Gran Escala

José Antonio Álvarez Ocete Francisco Javier Sáez Maldonado

31 de octubre de 2021

Índice

1. Parte 1: Programación GPGPU									
	1.1. Recursos de la GPU	2							
1.2. Suma de 2 vectores									
	1.2.1. Suma de dos enteros	4							
	1.2.2. Sumando vectores	6							
1.3. Paralelizando									
	1.3.1. Preguntas								
1.4. Suma de 2 matrices									
1.5. Stencil1d: Estudiar el efecto de la memoria compartida									
2.	Parte 2: Programación con QisKit: (Computación cuántica)	8							
	2.1. Puertas Cuánticas	8							
2.2. Generación de números aleatorios con un Computador Cuántico									
	2.3. Entrelazamiento								
	2.4. Sumador de 2 qbits								
3.	Ejercicios opcionales de la práctica 2	16							

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:	12	G	571M		9.9G	1.2M	2.2G	11G
Swap:	0:	В	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

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_Utilities/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
...
```

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.

1.2. Suma de 2 vectores

```
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 cudaMemopyHostToDevice del enumerado cudaMemopyKind 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.

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: ./suma1d
==229== Profiling result:
                                                            Min Max Name
            Type Time(%)
                              Time Calls Avg
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 5
0.12% 321.01us 101 3.1780us
                                            1 565.39us 565.39us 565.39us cuDeviceTotalMem
                                                             210ns 140.66us cuDeviceGetAttribute
                                           3 57.124us 5.6250us 152.77us cudaFree
                    0.06% 171.37us
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% 32.193ds

0.01% 24.277us

0.00% 5.0420us

0.00% 1.9970us

0.00% 1.5280us

0.00% 420ns
                                            1 24.277us 24.277us 24.277us cudaLaunchKernel
                                           1 5.0420us 5.0420us 5.0420us cuDeviceGetPCIBusId
                                           3 665ns 186ns 1.0810us cuDeviceGetCount
2 764ns 401ns 1.1270us cuDeviceGet
1 420ns 420ns cuDeviceGetUuid
                                            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.

1.2.2. Sumando vectores

Generalizamos el programa anterior para que sume vectores del mismo tamaño, elemento a elemento.

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 $\mathtt{add} <<<\mathtt{N},\mathtt{M}>>>$ 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</pre>
```

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 [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 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 cuDeviceGetCount

0.00% 1.7020us 3 567ns 162ns 876ns cuDeviceGetCount

0.00% 385ns 1 385ns 385ns cuDeviceGetUuid
                  Type Time(%) Time Calls
                                                                                                                                Min
                                                                                                          Avg
                                                                                                                                                       Max Name
```

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.

1.3. Paralelizando

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, querremos 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 las operaciones se hacen en hebras diferentes y cada una de las operaciones se hace en una hebra diferente y debe guardarse

1.3.1. 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.

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?

1.4. Suma de 2 matrices

Ejercicio 3

TODO: Completar

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 CNOT

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:

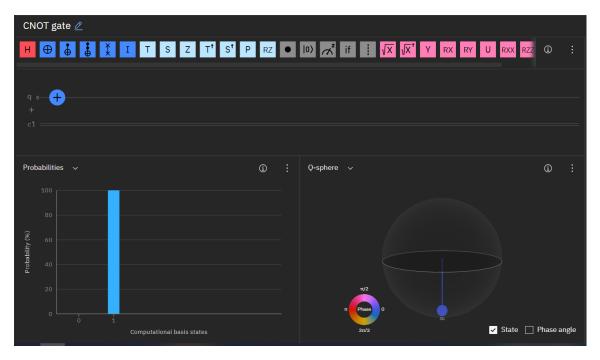


Figura 1: Circuito con puerta de CNOT

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:

$$H_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

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:

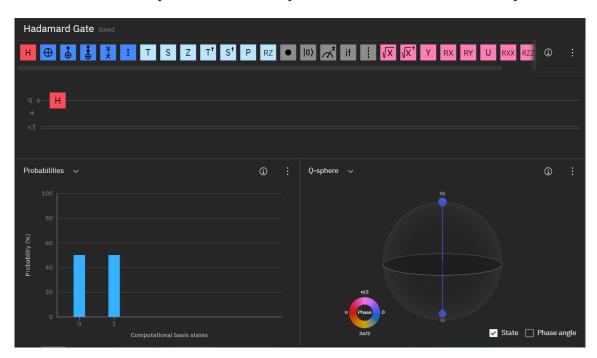


Figura 2: Circuito con puerta de Hadamard

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 quántica.

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

Theorem 1 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.

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:

$$\hat{H}_8|00000000\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^8}} (|0000000\rangle + |00000001\rangle + \dots + |111111111\rangle)$$

Donde la puerta H_8 tranformación 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 3: 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:

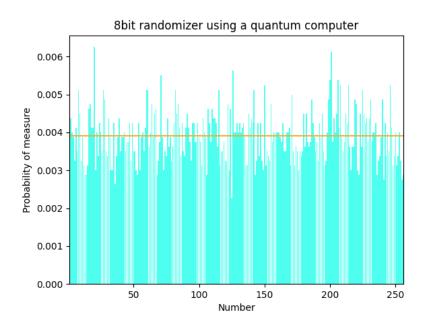


Figura 4: Resultados de la simulación con 8000 ejecuciones

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:

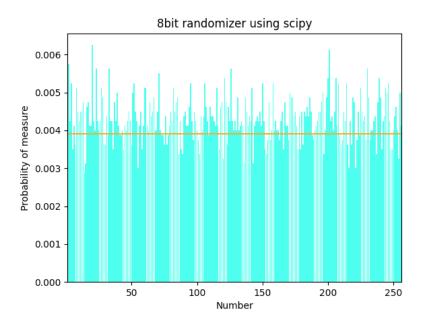


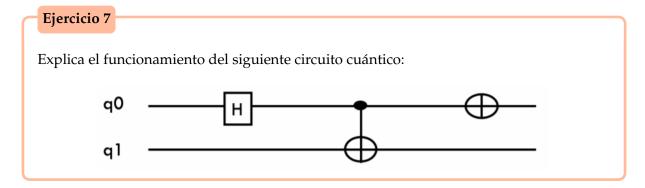
Figura 5: Resultados de la simulación con 8000 ejecuciones

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

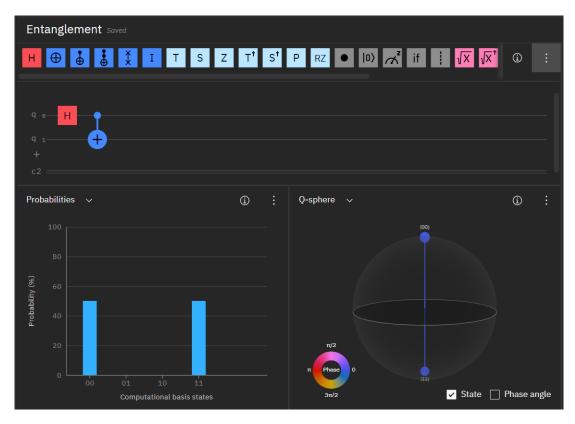
la distribución uniforme mencionada pero en ambas estamos relativamente lejos del modelo teórico. Tras ver los resultados de esta generación utilizando *scipy* podemos asegurar que el generador utilizando el Quantum Composer de IBM obtiene números aleatorios razonablemente aleatorizados.

TODO: explicar la puerta CNOT

2.3. Entrelazamiento



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:

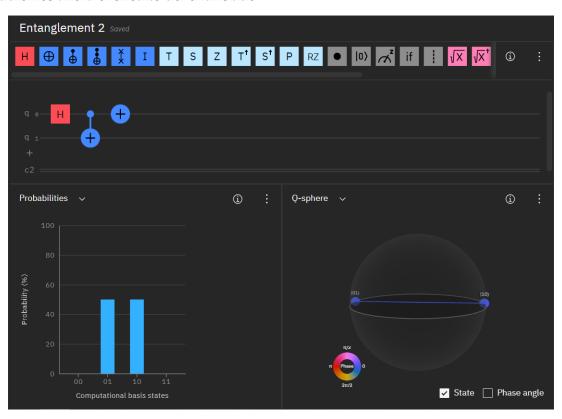
$$|+\rangle|0\rangle CNOT = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\Phi^{+}\rangle$$

Obteniéndo así el famoso estado EPR (Einstein, Podolsky y Rosen) o estado de Bell $|\Phi^+\rangle$. En este aparentemente sencillo estado puede apreciarse el entrelezamiento cuántico, lo que dió 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:

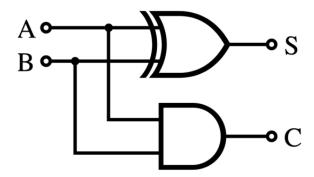
$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}(X \otimes \mathbb{I}) = \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}}$$

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.

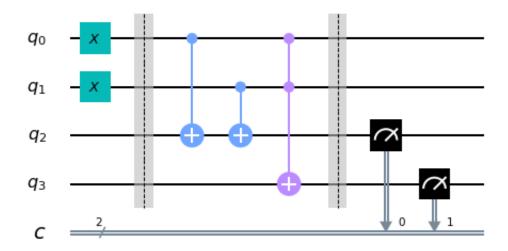
2.4. Sumador de 2 qbits

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.



3. Ejercicios opcionales de la práctica 2