

Kvantumalgoritmusok bioinformatikai alkalmazása

Protein folding & Molecular docking

Nemkin Viktória

dr. Friedl Katalin
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék



- Véletlen séta a gráf csúcsain (speciális Markov-lánc).
- Klasszikusan:
 - ▶ Google kereső: PageRank
 - ▶ Közelítő algoritmusok: SAT megoldó, részgráf keresése
- Kvantumosan:
 - ▶ Gyorsabb: $O(N^2) \rightarrow O(N)$ (elérés a szélére)
 - ▶ Kvantum párhuzamosság
 - ▶ Destruktív / konstruktív interferencia
 - ▶ Korszerű, ma is aktívan kutatott, nem letisztult / kidolgozott

Kvantumséták kutatása

Kvantum hardver: kevés qubit → Szimuláció klasszikus számítógépen

Package	Frissítve	Architektúra	Gráfok	Klasszikus szimuláció?	Kezdők számára?
QWalk	2018	C++, optimalizációra kihegyezett	rács molekula-szerkezet	×	×: kvantum Monte Carlo elektronstruktúra számítások
QwViz	2016	C, szkript jellegű	irányítatlan gráfok, mátrix kézzel megadva	×	×: C forráskód technikai
Hiperwalk	2017 ¹	Python & Neblina, szkript jellegű, nested if-ek	egyenes, kör rács, tórusz	×	✓: saját bemeneti nyelv, de bővíteni nehéz
QuantumWalk.jl	2020	Julia, szép architektúra de: Szegedy-féle sétára	irányított gráfok	×	✓

Nem diszkrét séták:

- [PyCTQW](#): 2014, csak folytonos idejű szimuláció
- [QSWalk.jl](#): 2020, csak quantum stochastic walk szimuláció (generalizáció)

¹2021: Python 2 → 3 átállás

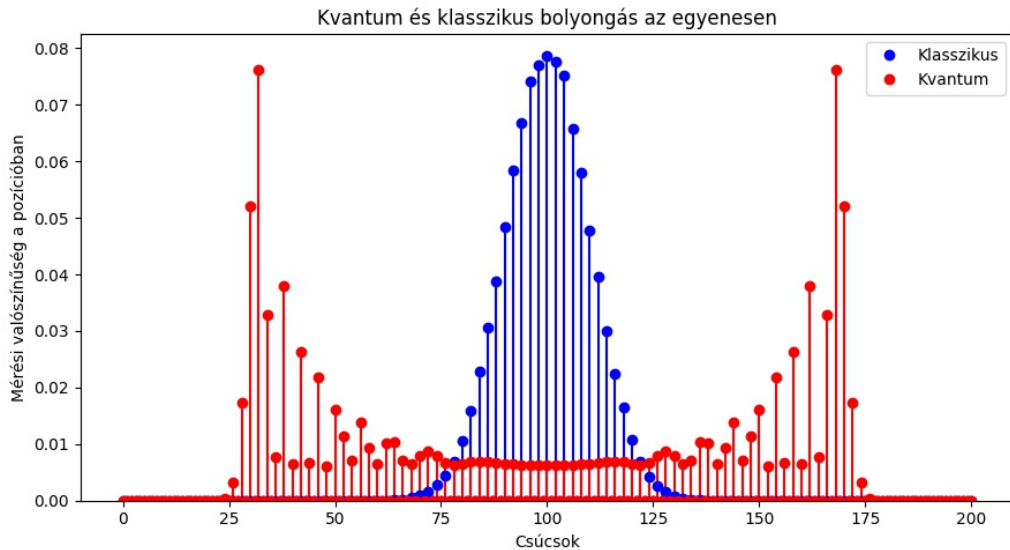
Elméleti matematikai

- Markov-láncok, valószínűségi számítás
- Gráfelméleti algoritmusok: körlefedés, teljes párosítás
- Kvantuminformatika, komplex lineáris algebra
- Diszkrét idejű kvantumséták: position-coin notation, (arc notation, Szegedy-féle séta)
- Kvantummechanikából származtatva (Kempe): 1 dimenziós séta = részecske \rightarrow hullámcsomag + spintől függő irány + detektálás valószínűsége

Szoftvermérnöki

- Architektúrális tervezés: Strategy minta
- Clean code elvek: Újrafelhasználhatóság, egységbe zárás, olvashatóság
- Futásidő és memóriahasználat optimalizálása: Szomszédossági orákulum
- Eszközök megválasztása:
 - ▶ Nyelv: Python3
 - ▶ Lineáris algebrai műveletek: Numpy
 - ▶ Eredmények vizualizációja: Matplotlib
 - ▶ Report fájl generálása: Latex

1 dimenziós séta



Kvantumérme

- Kvantum regiszter: $|c\rangle \rightarrow$
Érme aktuális állapota
- Evolúció operátor: $|C\rangle \rightarrow$

Fourier ($\omega = e^{\frac{2\pi i}{N}}$)

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \dots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \dots & \omega^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2(N-1)} & \dots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}$$

Hadamard

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

$$H_n = H^{\otimes n}$$

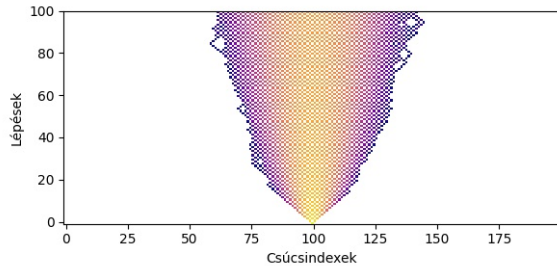
Grover

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{N} - 1 & \frac{2}{N} & \dots & \frac{2}{N} \\ \frac{2}{N} & \frac{2}{N} - 1 & \dots & \frac{2}{N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{2}{N} & \frac{2}{N} & \vdots & \frac{2}{N} - 1 \end{pmatrix}$$

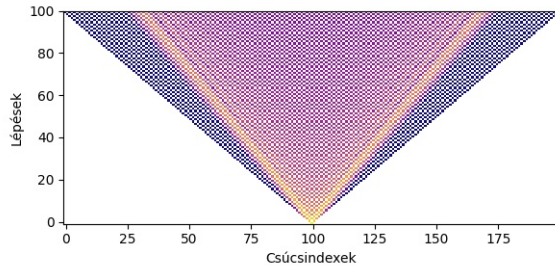
Kvantum shift operátor: Saját munkám

- **Több egydimenziós érme + kvantum shift operátor \rightarrow n dimenziós rács**
 - ▶ Bizonyítottam, hogy a kvantum shift operátor felbomlik n darab független 2 dimenziós operátorra.
 - ▶ Ezt felhasználva a memóriaigény lecsökkenthető:
 - ★ A d -től nem exponenciálisan, csak lineárisan függ.
 - ★ A futásidőt d -szerezére növelve a memóriaigény d -ben konstans.
- **Egy többdimenziós érme \rightarrow d -reguláris gráf**
 - ▶ Explicit unitér mátrixos felírás (függvények és implicit helyett).
 - ▶ Bizonyítás: Shift operátor a gráf körlefedéséből (élszínosztályokból) kiindulva konstruálható

1 dimenziós bolyongás

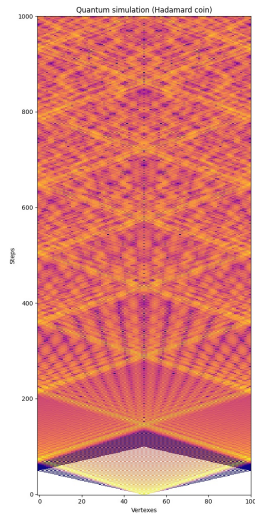
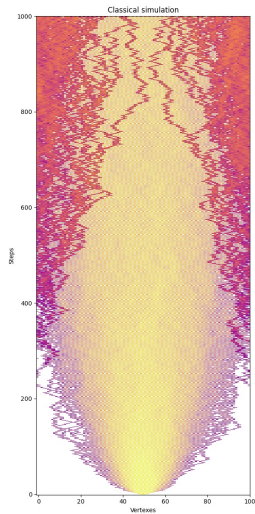


Klasszikus bolyongás

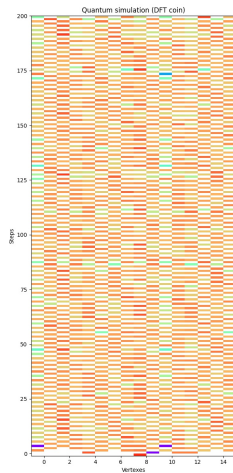
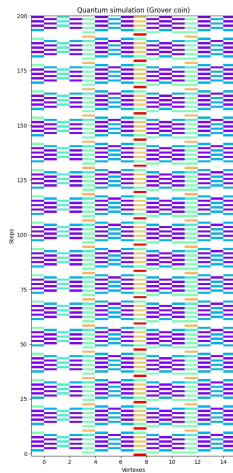
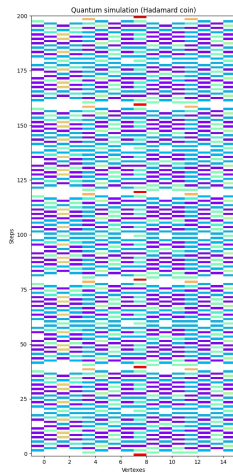
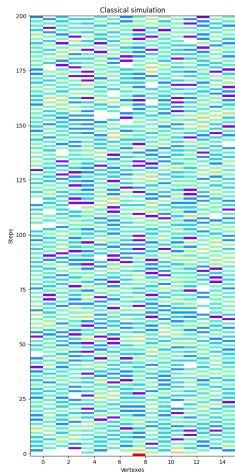


Kvantum bolyongás

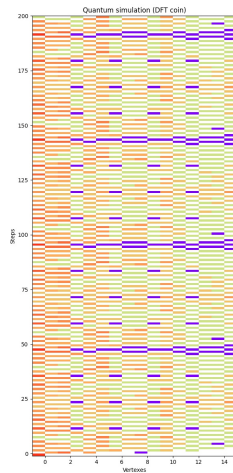
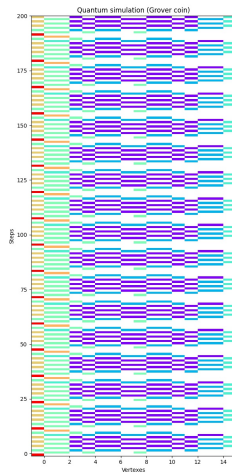
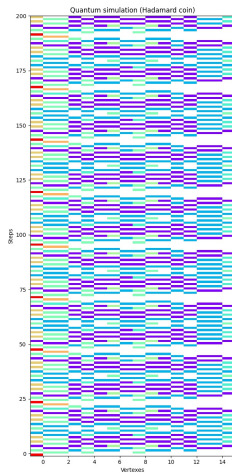
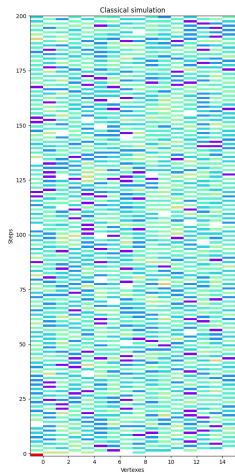
1 dimenziós bolyongás körbeér



Rácsos bolyongás



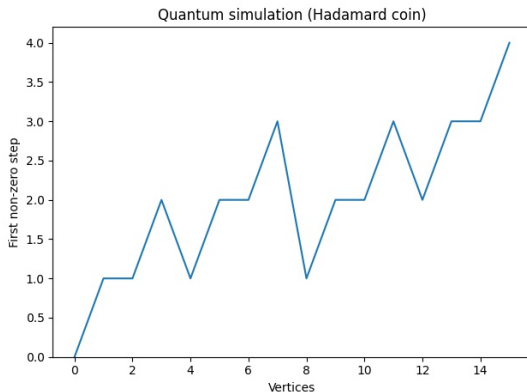
Hiperkockán bolyongás



- Szimulátor szoftver: github.com/nemkin/quantum (open source, MIT licenz)
- Kutatási irány:
 - ▶ kvantumséta alapú keresési algoritmus
 - ▶ klasszikusan NP-teljes problémák (protein folding) megoldására

Bíráló kérdései

- Miként értelmezhető a hitting time ábrákon a görbék folytonossága a vízszintes tengely mentén?
 - ▶ Nem a megfelelő grafikontípust választottam a diszkrét jellegű adatok szemléltetésére.



- Mi a TDK dolgozat elsődleges célja? A kvantumséta kutatása, vagy egy szimulátor írása, amely alkalmas a kvantumsétákkal kapcsolatos kutatások támogatására?
 - ▶ A TDK dolgozatom célja a kvantum shift operátorral kapcsolatos 2 elméleti eredmény bemutatása, továbbá ezekre építve a szimulátor szoftver implementálása volt. Hosszú távon ezt a szoftvert felhasználva szeretnék kvantumsétákra alapuló kvantum keresőalgoritmusok kutatásával foglalkozni.
- "Mátrix elemzés" a szerző által ismert szimulátorokról a dolgozatban javasolt 5 értékelési szempont alapján.
 - ▶ A 3. dián látható a dolgozatból hiányzó mátrix elemzés.