Memóriafelhasználás optimalizálása

kvantumalgoritmusok szimulációja során

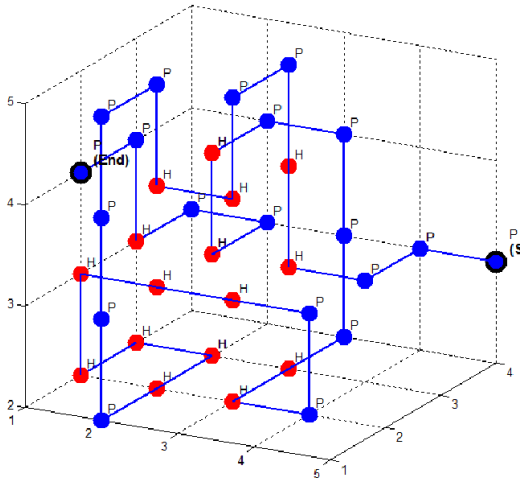
Nemkin Viktória

dr. Friedl Katalin
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék

Quantum Information National Laboratory HUNGARY

Motiváció: "Protein folding" megoldása kvantumalgoritmussal

- **Protein**:
  - Aminosavakból alkotott lánc.
    - ★ Piros = Hidrofób ("vízkerülő").
    - ★ Kék = Poláris ("vízszerető").
  - Hajtogatás: 3D kockarácson elhelyezés.
  - Cél: Minimális energiájú elhelyezés megtalálása.
- **Kódolás**:
  - Origóból, lépésenként 6 irány = 6 "qubit".
- **Orákulum**:
  - Energiaviszonyok lepontozása.
- **Grover keresés:** $O(\sqrt{N})$
  - "Kvantum párhuzamosság"-ot kihasználva.
  - Energiaminimum megtalálása.



Egy összehajtogatott protein.

Cél

- Algoritmus kipróbálása és elemzése.
- Eszköztár: Regiszterek + Hadamard, Grover, Sum, MC-NOT
- Kvantumszámítógép: Publikusan nem elérhető (elég nagy).
- Klasszikus szimuláció: Túl sok memóriát fogyaszt.

Probléma: Memóriahasználat

Lánc	Qubitek	Regiszter	Operátor
n	$6(n-1)$	$2^{6(n-1)} \cdot 16B$	$2^{12(n-1)} \cdot 16B$

Probléma: Memóriahasználat

Lánc	Qubitek	Regiszter	Operátor
n	$6(n-1)$	$2^{6(n-1)} \cdot 16B$	$2^{12(n-1)} \cdot 16B$
2	6	1 KB	64 KB
3	12	64 KB	256 MB
4	18	4 MB	1 TB
5	24	256 MB	4 PB
6	30	16 GB	16384 PB
7	36	1 TB	67108864 PB

Probléma: Memóriahasználat

Lánc	Qubitek	Regiszter	Operátor
n	$6(n-1)$	$2^{6(n-1)} \cdot 16B$	$2^{12(n-1)} \cdot 16B$
2	6	1 KB	64 KB
3	12	64 KB	256 MB
4	18	4 MB	1 TB
5	24	256 MB	4 PB
6	30	16 GB	16384 PB
7	36	1 TB	67108864 PB

- Optimalizációk (regiszer és operátor esetében is):
  - Ritka mátrixos tárolás:
    - ★ IBM Qiskit, Google Cirq, stb.
    - ★ Nem mindig ritkák a mátrixok.
  - Döntési fa alapú adatszerkezet:
    - ★ Újabb kutatási irány.
    - ★ Nem mindig segít.

Megoldás: "On-the-fly" és "Függvény-alapú" operátorok

Lánc	Qubitek	Regiszter	Operátor	"On-the-fly"	"Függvény-alapú"
n	$6(n-1)$	$2^{6(n-1)} \cdot 16B$	$2^{12(n-1)} \cdot 16B$	= Regiszter.	Nem kell tárolni.
2	6	1 KB	64 KB	1 KB	0 B
3	12	64 KB	256 MB	64 KB	0 B
4	18	4 MB	1 TB	4 MB	0 B
5	24	256 MB	4 PB	256 MB	0 B
6	30	16 GB	16384 PB	16 GB	0 B
7	36	1 TB	67108864 PB	1 TB	0 B

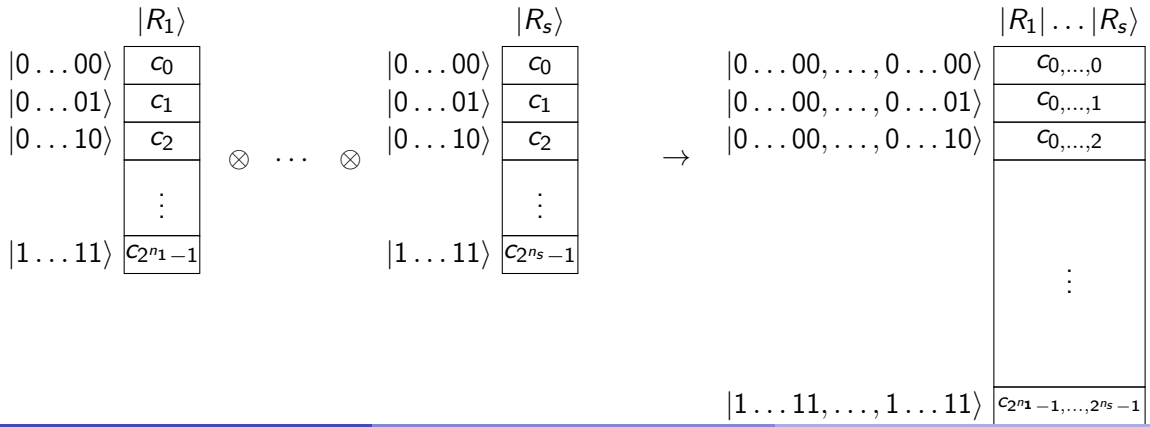
Megoldás: "On-the-fly" és "Függvény-alapú" operátorok

Lánc	Qubitek	Regiszter	Operátor	"On-the-fly"	"Függvény-alapú"
n	$6(n-1)$	$2^{6(n-1)} \cdot 16B$	$2^{12(n-1)} \cdot 16B$	= Regiszter.	Nem kell tárolni.
2	6	1 KB	64 KB	1 KB	0 B
3	12	64 KB	256 MB	64 KB	0 B
4	18	4 MB	1 TB	4 MB	0 B
5	24	256 MB	4 PB	256 MB	0 B
6	30	16 GB	16384 PB	16 GB	0 B
7	36	1 TB	67108864 PB	1 TB	0 B

- Qiskit, stb. nyílt forráskódúak...
- ...de szerves része a kódnak az operátor tárolása.
- $\rightarrow$ saját szimulátor implementáció.

Kvantumregiszterek állapotának tárolása

- Minden bitsorozathoz egy komplex valószínűségi amplítúdó.
- Szuperpozíció és összefonódás $\rightarrow$ indexek Descartes-szorzata.
- Méretek: $2^{n_1}, \ldots, 2^{n_s} \rightarrow \prod_{i=1}^{s} 2^{n_i}$.



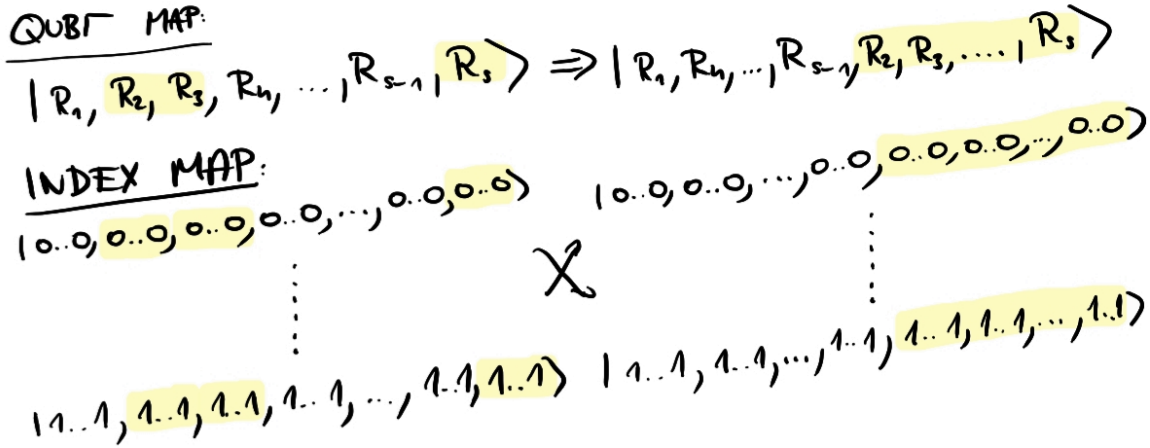
Operátor végrehajtás általánosan

TODO:

- Első két qubitra.
- Utolsó két qubitra.
- Köztes esetek: ebből van sok.

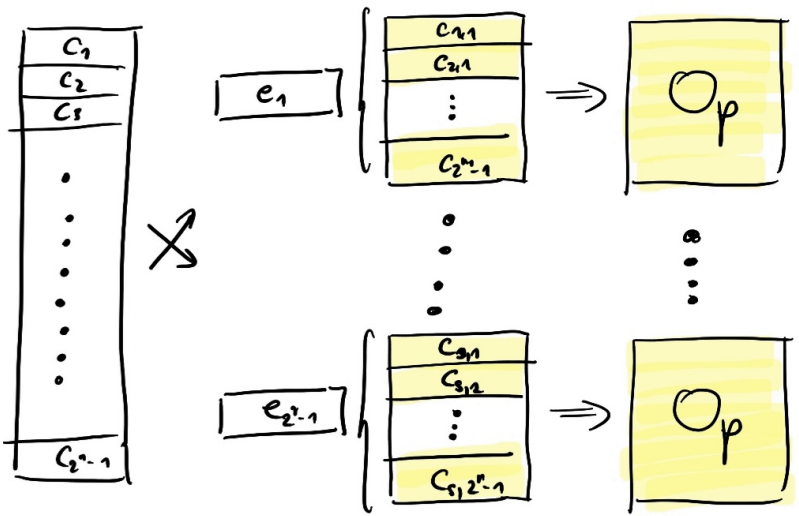
Mappelés

TODO: zavaros nyilas ábra.



Végrehajtás (párhuzamosíthatóan)

Tipikus eset.



Operátorok megvalósítása

- Visitor minta (inverzió):
  - Operátornak odaadom a regisztert, végrehajtja magát rajta.
  - Belső működés eltakarva: mátrix reprezentáció nem szükséges.
- Strategy minta:
  - Egységes algoritmus interfész: több lehetséges implementáció.
- Operátor csak egy handle, példány nem foglal memóriát.

Megvalósítás:

- "On-the-fly" operátorok:
  - A mátrix egy sorát generálom.
  - Hadamard, Grover.
- "Függvény-alapú" operátorok:
  - $u : |0 \dots 0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{out}, \text{in}\rangle$
  - Sum: $\sum : |0 \dots 0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{count(in)}, \text{in}\rangle$
  - MC-NOT: $\text{mcnot} : |0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{any(in)}, \text{in}\rangle$

Összegzés

- Eredmények:
  - Ritka mátrixosan tárolt regiszterek.
  - Regiszterkezelés tetszőleges célregiszterekkel.
  - "On-the-fly" operátorok: Hadamard, Grover.
  - "Függvény-alapú" operátorok: Sum, Multi-Controlled NOT.
  - Könnyű bővíthetőség új operátorral.
- Jövőbeli terv:
  - Protein folding algoritmus implementálása.
  - Döntési fa alapú tárolás kipróbálása.

Bíráló kérdései - 1.

A dolgozat bevezetésében írja, hogy az egyik motivációt a munkához a bioinformatika adja, ezen belül is a fehérje feltekeredés (protein folding) vizsgálata.

A dolgozatban azonban - érthető okokból - egy egyszerűbb problémával, a Sudoku általános változatával dolgozik.

Mégis, meg tudná mondani, hogyan lehetne (milyen jellegű továbbfejlesztésekkel) a kidolgozott eljárást a bioinformatikában használni?

Bíráló kérdései - 2.

Mi a szerző várakozása a kifejlesztett keretrendszer működési korlátait illetően?

Például:

Hány qubites Grover-keresést fog tudni implementálni? Mekkora n esetén tudja implementálni a Sudoku verifiert?

A maximális méretű problémát implementáló kód mennyi idő alatt fog lefutni egy laptopon?

Bíráló kérdései - 3.

A keretrendszer struktúrájában vagy implementációjában meg kell-e különböztetni a CPU-n és a GPU-n való futtatás esetét?

Bíráló kérdései - 4.

Valódi kvantumszámítógépekben a kvantumbitek és a környezet kölcsönhatása dekoherenciához vezet.

A Grover-keresés működőképes marad-e, ha a dekoherenciát figyelembe vesszük a szimuláció során?

Lehetséges-e a dolgozatban kifejlesztett hatékony keretrendszert általánosítani dekoherencia jelenléte esetére, és ha igen, akkor meg lehet-e ezt tenni úgy hogy a hatékonyság is megmarad?