Memóriafelhasználás optimalizálása

kvantumalgoritmusok szimulációja során

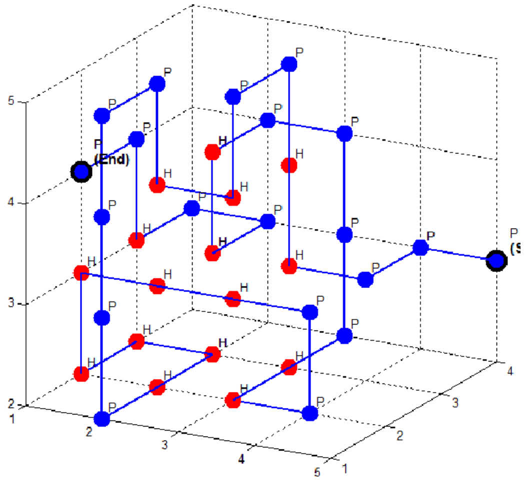
Nemkin Viktória

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 kockarács pontjain.
  - Cél: Minimális energiájú elhelyezés.
- **Kódolás**:
  - Origóból, lépésenként
    6 irány = 6 kvantumbit (qubit).
- **Orákulum**:
  - Energiaviszonyok lepontozása.
- **Grover keresés:** $O(\sqrt{N})$
  - "Kvantum párhuzamosság"-ot kihasználva.
  - Energiaminimum megtalálása.



Egy összehajtogatott protein.[1]

[1] Forrás: Traykov et al. (2018). Protein Folding in 3D Lattice HP Model Using Heuristic Algorithm.

Feladat

- **Cél**:
  - Kvantumalgoritmusok kipróbálása és elemzése.
- **Eszköztár**:
  - Regiszterek.
  - Operátorok: Hadamard, Grover, Sum, MC-NOT.
    - ”Fekete doboz”-ként szimulálni.
- **Probléma**:
  - 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

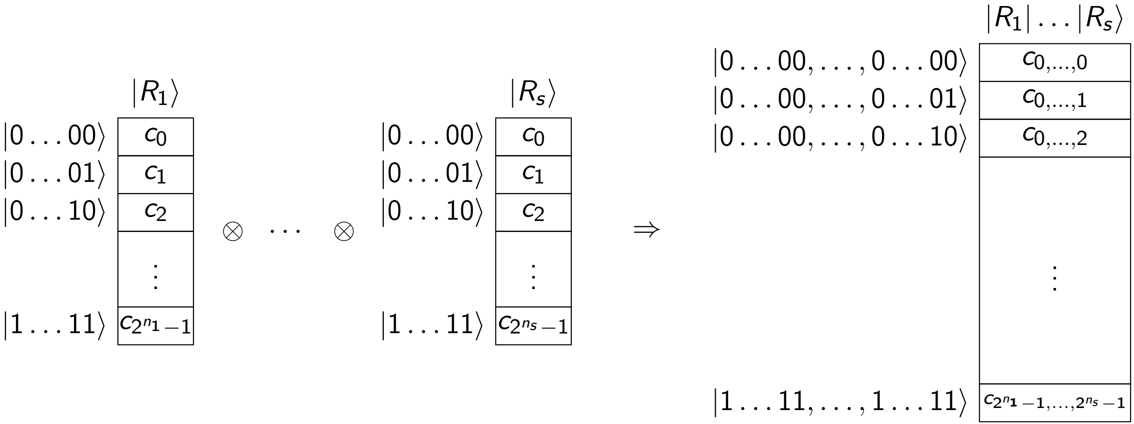
Megoldás: "On-the-fly" és "Függvény-alapú" operátorok

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.

Regiszterek állapotának tárolása

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



Regiszterkezelés nehézségei

Példa: $A_{4\times 4}$ (2 qubites) operátor.

Utolsó 2 qubit-re:

$$|\square\dots\square\blacksquare\blacksquare\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} A & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & A \end{pmatrix}$$

$$\searrow$$

Első 2 qubit-re:

$$|\blacksquare\blacksquare\square\dots\square\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} A_{0,0}I & A_{0,1}I & A_{0,2}I & A_{0,3}I \\ A_{1,0}I & A_{1,1}I & A_{1,2}I & A_{1,3}I \\ A_{2,0}I & A_{2,1}I & A_{2,2}I & A_{2,3}I \\ A_{3,0}I & A_{3,1}I & A_{3,2}I & A_{3,3}I \end{pmatrix}$$

$$\swarrow$$

Köztes esetek?

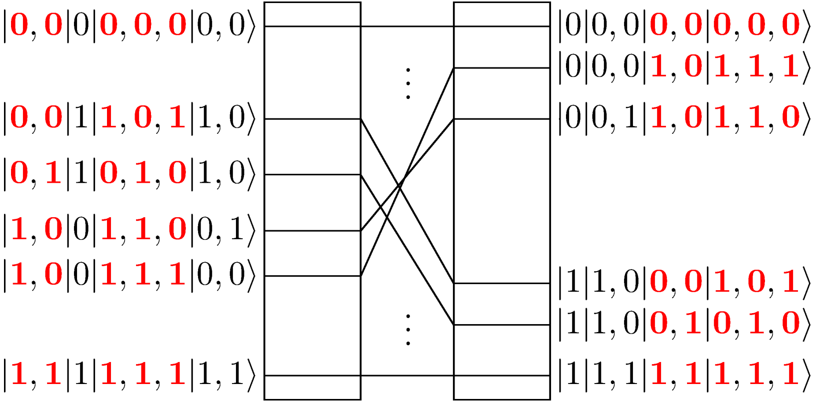
$$|\square\dots\square\blacksquare\square\dots\square\blacksquare\square\dots\square\rangle$$

Qubit és index leképezés

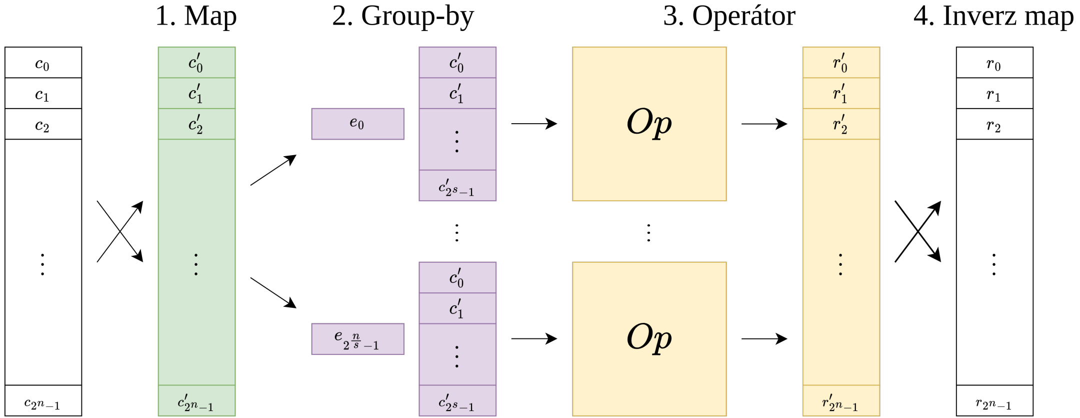
Qubit map

$$|\mathbf{q_0}, \mathbf{q_1}|q_2|\mathbf{q_3}, \mathbf{q_4}, \mathbf{q_5}|q_6, q_7\rangle \Rightarrow |q_2|q_6, q_7|\mathbf{q_0}, \mathbf{q_1}|\mathbf{q_3}, \mathbf{q_4}, \mathbf{q_5}\rangle$$

Index map



Operátor végrehajtás



Operátorok megvalósítása

Megvalósítás:

- Inverzió (Visitor minta):
  - Operátornak odaadom a regisztert, végrehajtja magát rajta.
  - Belső működés eltakarva $\rightarrow$ mátrix reprezentáció nem szükséges $\rightarrow$ memória spórolás.
- Operátor típusok:
  - "On-the-fly" operátorok:
    - A mátrix egy sorát generálom $\rightarrow$ skalárszorzás.
    - Hadamard, Grover.
  - "Függvény-alapú" operátorok:
    - $u : |0\ldots 0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{out}, \text{in}\rangle$
    - Sum: $\sum : |0\ldots 0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{count}(\text{in}), \text{in}\rangle$
    - MC-NOT: $\text{mcnot} : |0, \text{in}\rangle \rightarrow |\text{any}(\text{in}), \text{in}\rangle$
- Strategy minta:
  - Egységes algoritmus interfész: több lehetséges implementáció.
- Operátor csak egy "handle", példány nem foglal memóriát.

Összegzés

Eredmények:

- Regiszterek:
  - Ritka mátrixos tárolás.
  - Tetszőleges célregiszterek: qubit és index leképzés.
- Operátorok:
  - "On-the-fly": Hadamard, Grover.
  - "Függvény-alapú": Sum, MC-NOT.
- Könnyen bővíthető architektúra.
- Forráskód: https://github.com/nemkin/qmem (MIT licensz).

Jövőbeli tervek:

- 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?

- 30 qubit körüli.

Mekkora n esetén tudja implementálni a Sudoku verifiert?

- 3×3-mas Sudoku táblát lehet (27 qubit) $\Leftrightarrow$ 4×4-es táblát már nem (64 qubit).

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

- A tároláshoz 27 qubitre + 1 orákulum kimeneti qubitre van szükség.
- Az orákulum implementálása "Függvény-alapú" operátorral megoldható.
- Becsléseim szerint egy-két napon belül lefutna.
- Qiskit-ben ezt elkészítettem, ott a 3×3-mas Sudoku táblához 67 TB memóriára lenne szükség.

Bíráló kérdései - 3.

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

- "On-the-fly" típusú operátorok könnyen implementálhatóak GPU-n, a meglévő keretrendszerben.
- "Függvény-alapú" operátorok nem vihetők át GPU-ra (nincs skalárszorzás) $\rightarrow$ sokszálú CPU-val párhuzamosíthatók.

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?

- A dekoherencia csökkenti a találati valószínűséget.
- Amíg ez nem lép túl egy korlátot, addig többszöri ismételt futtatással javítható.

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?

- A dekoherencia modellezhető bizonyos valószínűséggel alkalmazott mátrixműveletekkel, ezek operátorként megvalósíthatók ebben a rendszerben.