

Mateus M. S. do Nascimento

**Otimização dos Padrões de Acesso a Memória em Simulação de Computação
Quântica**

Proposta de Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação

Orientador: Prof. Dr. Renata H. S. Reiser
Coorientador: Prof. Dr. Maurício L. Pilla

Pelotas, 2017

RESUMO

Nos dias de hoje, uma das maiores dificuldades na simulação de algoritmos quânticos é o crescimento exponencial das computações, provocando um incremento expressivo nas complexidades espacial e temporal. Isto ocorre pois as simulações frequentemente utilizam produtos tensoriais caracterizando o paralelismo quântico, mas que demandam considerável espaço de leitura e escrita, uma vez que os operadores são modelados por estruturas matriciais. A simulação quântica é um importante passo para o desenvolvimento da CQ e de soluções alternativas para problemas como o aumento exponencial do espaço de estados e processos.

Entretanto, explorar o potencial computacional oferecido por arquiteturas modernas como *clusters* e *GPU* é frequentemente insuficiente para solucionar tais problemas, embora alguns simuladores já ofereçam abstrações para utilização destes recursos. Mesmo assim é possível observar que conforme um sistema quântico demanda mais passos de computação, a simulação adquire um custo exponencial, o qual os simuladores não conseguem gerenciar. Por fim, otimizações nos simuladores podem enriquecê-los no sentido de simular circuitos maiores.

O ambiente D-GM apresenta-se como um simulador cujos principais componentes são o ambiente de desenvolvimento *VPE-qGM* e o de execução *VirD-GM* das aplicações quânticas. O D-GM conta com interface gráfica e diversas otimizações que buscam melhorar o seu desempenho, considerando a execução de duas classes de transformadas quânticas especiais: as transformações unitárias, e as controladas, as quais estão caracterizadas por operadores matriciais densos e esparços respectivamente. Por último, o D-GM possui a capacidade de utilizar tanto a *GPU* para realização de cálculos, quanto a *CPU* para computação distribuída, estando em consolidação de uma arquitetura híbrida para desenvolvimento de aplicações quânticas.

Como principal meta deste trabalho, busca-se compreender as estruturas de dados mais frequentemente utilizadas por simuladores quânticos e, a partir desta compreensão se estrutura a proposta de um modelo de memória com suporte a novas estratégias de gerenciamento e incremento no desempenho do D-GM, com resultados significativos no desenvolvimento de aplicações e pesquisa teórica.

Palavras-Chave: simulação quântica; vpe-qgm; vird-gm; modelo qgm

1 MOTIVAÇÃO

É notória a prática, dos grandes fabricantes, na atualidade de optar pela inclusão de vários núcleos nos processadores ao invés de aumentar a sua frequência de operação. Esta mudança decorre de muitos fatores, e já tínhamos conhecimento prévio do aumento da frequência dos processadores (MOORE et al., 1965). Entretanto, atualmente atingimos certos limites ao tentar empregar isto, como o aquecimento excessivo dos periféricos, o gasto de energia, e ainda o limite físico de componentes como o silício. Dessa forma, é necessário garantir que vamos maximizar a capacidade destas máquinas, isso tanto no âmbito de *softwares* quanto na parte de *hardware*.

Para que os programas desenvolvidos possam usufruir do potencial destas máquinas, eles precisam ter acesso a grande quantidade de núcleos presentes, e fazer bom uso dos mesmos. Para que isso ocorra, é necessário que os aplicativos sejam programados de modo a utilizar esses processadores, ou seja, os programas devem utilizar vários fluxos de execução (*threads*). Entretanto, a programação de sistemas paralelos/concorrentes é complexa e propensa a erros (JONES, 2007; LEE, 2006; RAJWAR; GOODMAN, 2003), os desenvolvedores tem de saber utilizar tais recursos de forma coesa e evitar possíveis “gargalos”.

Uma das alternativas para esta situação é utilizar novas técnicas e paradigmas de programação. Já existem novas linguagens de programação que fazem uso melhor dos recursos oferecidos pelo computador, facilitando assim a complexa tarefa de desenvolver aplicativos. Da mesma forma, novos paradigmas computacionais estão surgindo e outros estão sendo explorados, na tentativa de se obter melhores resultados.

A Computação Quântica (CQ) é um paradigma emergente fundamentado nos postulados da Mecânica Quântica(MQ) (PESSOA JR, 2003; PORTUGAL et al., 2004). A aplicação de conceitos introduzidos na CQ no contexto computacional acaba por introduzir uma nova classe de computadores, os quais seriam identificados por computadores quânticos e apresentariam um desempenho maior que os computadores clássicos para a resolução de problemas específicos, como fatoração de números (SHOR, 1999).

Devido a ausência do *hardware* quântico, atualmente mais restrito e disponível apenas em laboratórios de pesquisa, a CQ no momento está limitada a utilização de simuladores, os quais são apresentados em diversas abordagens (MARON; REISER; PILLA, 2012). Entre estes, podemos citar simuladores sequenciais, que costumam reduzir o consumo de memória com otimizações em relação às transformadas quânticas. Uma alternativa a esta abordagem seria o uso de simuladores (DE RAEDT et al., 2007; NIWA; MATSUMOTO; IMAI, 2002) com recursos para simulação paralela de algoritmos quânticos, tendo foco em reduzir o tempo necessário para a simulação através do uso de *clusters*. Adicionalmente, em (GUTIÉRREZ et al., 2010) tem-se a exploração de *GPUs* (*Graphic Processing Units*), obtendo-se bons tempo pelo uso do paralelismo .

Entretanto, mesmo com os avanços recentes dos simuladores ao utilizar paralelismo, tais simuladores ainda utilizam-se de matrizes e vetores para representar as transformações e os estados quânticos. Sendo assim, a simulação fica restrita à quantidade de memória disponível. As questões associadas a evolução do sistema quântico, frente a sua complexidade temporal e espacial, ainda estão abertas. Então, nesta questão onde temos uma batalha entre a crescente complexidade dos sistemas quânticos e a limitação das arquiteturas de memória, algumas alternativas foram cogitadas, como: *QuIDD-Pro*(VIAMONTES, 2007), tal simulador utiliza o particionamento das matrizes (submatrizes) que são comuns a múltiplos estados quânticos, e associando-as através de subgrafos. O simulador *PVLIB* utiliza uma estratégia mais genérica ao recorrer a estruturas simbólicas e recursivas para representar as transformações quânticas. É necessário salientar que ambas ideias são viáveis em casos específicos, não sendo assim soluções definitivas.

Neste contexto, o projeto D-GM, que segue o padrão de desenvolvimento proposto pelo *VPE-qGM* (*visual programming environment for the quantum geometric machine model*), sendo este integrado ao *VirD-GM* (*virtual distributed geometric machine* (FONSECA et al., 2007)), continua a evoluir propondo uma arquitetura híbrida para a simulação de algoritmos quânticos. Desta maneira, o D-GM utiliza computação distribuída através da *CPU*, e o potencial paralelo oferecido pela *GPU*.

A tarefa de prover atualizações em um projeto complexo como o D-GM, em meio aos avanços tanto de *hardware* quanto de técnicas que exploram o potencial computacional, consiste em um contínuo desafio de pesquisa. Porém, os bons resultados alcançados recentemente (AVILA et al., 2016) na simulação de sistemas *multiqubits* motiva futuras pesquisas relacionadas a otimizações na representação da memória, uma vez que este constitui-se atualmente no mais relevante fator limitante, restringindo o número de *qubits* de uma aplicação sendo executada no D-GM, quando comparado em sua versões anteriores, o tempo de execução determinava as restrições nas aplicações desenvolvidas (ÁVILA et al., 2013).

2 OBJETIVOS E RESULTADOS

2.1 Objetivo Geral

Esta proposta tem como objetivo geral a otimização do ambiente D-GM, através do estudo da concepção, representação e modelagem do comportamento da memória de um sistema quântico, visando encontrar propriedades que permitam otimizações relacionadas ao espaço de memória necessário para seu armazenamento em um computador clássico. Estas otimizações permitiriam a simulação tanto sequencial quanto paralelamente, das aplicações no D-GM e incrementam o número de *qubits* nas aplicações *multi-qubits*.

Assim, este trabalho colabora com a proposta de uma arquitetura de memória, visando uma melhoria quanto a representação da memória, sendo que a mesma pode ser utilizada em outros softwares buscando utilizar propriedades como localidade espacial e temporal.

2.2 Objetivos Parciais

Considera-se os seguintes objetivos específicos:

- Estudo sobre as estruturas de dados utilizadas pelos simuladores quânticos;
- Avaliação dessas estruturas para utilização em um simulador quântico de propósito geral, como o D-GM;
- Implementação das estruturas que forem avaliadas como promissoras (caso haja alguma);
- Estudo do comportamento da memória de um sistema quântico, utilizando técnicas de visualização de acessos a memória, na aplicação de:
 - portas quânticas unitárias;
 - portas quânticas unitárias;
 - portas quânticas controladas;

- conjuntos de portas quânticas, tanto simultâneos quanto sequenciais;
 - algoritmos simples(somadores, transformadas de Fourier)
 - e por fim, algoritmos mais complexos como Shor e Grover.
-
- Avaliação da contribuição dos resultados para a identificação de padrões no comportamento que possam ser usadas para otimizar a memória;
 - Mediante os dados coletados durante a pesquisa, analisar se é possível melhorar o desempenho do simulador através dos padrões de acesso à memória;
 - Publicação de resultados conforme o avanço da pesquisa.

3 METODOLOGIA

A metodologia a ser seguida neste trabalho envolve o aprofundamento em questões teóricas relacionadas a CQ, estudo sobre simuladores, pesquisa sobre ferramentas para análise da memória, e implementação e obtenção de resultados. As atividades a serem seguidas são exibidas abaixo:

1. **Revisão do conteúdo e definição de bibliografia**

Estudo mais detalhado dos conceitos relacionados a esta proposta;

2. **Aprofundamento em relação à computação quântica**

Revisão de conteúdo da computação quântica e publicações mais recentes;

3. **Estudo sobre o *VirD-GM* ao longo de seu desenvolvimento**

O *VirD-GM* é um dos componentes mais importantes do D-GM, como ele já passou por diversas modificações é necessário conhecer a fundo tal ferramenta;

4. **Análise de outros simuladores quânticos**

Há diversos simuladores que utilizam diferentes técnicas para a simulação de algoritmos quânticos, estuda-los a fim de observar métodos que melhorem o desempenho da simulação;

5. **Planejamento do seminário de andamento**

Elaboração da apresentação do seminário de andamento;

6. **Apresentação do seminário de andamento**

Apresentação do seminário de andamento;

7. **Definição de ferramentas para se analisar o padrão de acesso à memória**

Definir ferramentas a serem utilizadas para analisar o padrão de acesso à memória, respeitando como funcionam e suas diferenças;

8. **Início da análise das estruturas de dados presentes nos simuladores estudados**

Estudo sobre estruturas de dados que melhorem o desempenho de simuladores;

9. Obtenção dos primeiros dados referentes ao padrão de acesso dos simuladores

Com as estruturas de dados e as ferramentas de análise é possível obter padrões de acesso à memória e resultados relacionados;

10. Publicação dos resultados finais

Escrita de artigos com os resultados obtidos até então;

11. Escrita da Dissertação

Confecção do texto;

12. Defesa da Dissertação

Entrega e apresentação da monografia.

REFERÊNCIAS

AVILA, A.; REISER, R. H.; PILLA, M. L.; YAMIN, A. C. Optimizing D-GM quantum computing by exploring parallel and distributed quantum simulations under GPUs architecture. In: EVOLUTIONARY COMPUTATION (CEC), 2016 IEEE CONGRESS ON, 2016. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2016. p.5146–5153.

ÁVILA, A.; SCHMALFUSS, M. F.; PILLA, M. L.; REISER, R. R. Estendendo o Ambiente VirD-GM para Execução Distribuída via GPUs. **XXIII Escola Regional de Alto Desempenho**, Porto Alegre, p.210–214, 2013.

DE RAEDT, K. et al. Massively parallel quantum computer simulator. **Computer Physics Communications**, [S.l.], v.176, n.2, p.121–136, 2007.

FONSECA, V.; REISER, R.; YAMIN, A.; PILLA, M. VirD-gm: Towards a grid computing environment. In: CCGRID, 2007. **Proceedings...** [S.l.: s.n.], 2007. v.2007, p.1–6.

GUTIÉRREZ, E.; ROMERO, S.; TRENAS, M. A.; ZAPATA, E. L. Quantum computer simulation using the cuda programming model. **Computer Physics Communications**, [S.l.], v.181, n.2, p.283–300, 2010.

JONES, S. P. Beautiful concurrency. **Beautiful Code: Leading Programmers Explain How They Think**, [S.l.], p.385–406, 2007.

LEE, E. A. The problem with threads. **Computer**, [S.l.], v.39, n.5, p.33–42, 2006.

MARON, A. K.; REISER, R. H.; PILLA, M. L. Um Estudo das Possibilidades de Otimização para Simulação Quântica. **Anais CNMAC 2012**, [S.l.], 2012.

MOORE, G. E. et al. **Cramming more components onto integrated circuits**. [S.l.]: McGraw-Hill New York, NY, USA, 1965.

NIWA, J.; MATSUMOTO, K.; IMAI, H. General-purpose parallel simulator for quantum computing. In: **Unconventional Models of Computation**. [S.l.]: Springer, 2002. p.230–251.

PESSOA JR, O. **Conceitos de Física Quântica 1**. São Paulo - SP, Brasil: Editora Livraria da Física, 2003. v.1.

PORTUGAL, R.; LAVOR, C. C.; CARVALHO, L. M.; MACULAN, N. **Uma introdução à computação quântica**. São Carlos - SP, Brasil: Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional (SBMAC), 2004.

RAJWAR, R.; GOODMAN, J. Transactional execution: Toward reliable, high-performance multithreading. **IEEE Micro**, [S.l.], n.6, p.117–125, 2003.

SHOR, P. W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. **SIAM review**, [S.l.], v.41, n.2, p.303–332, 1999.

VIAMONTES, G. F. **Efficient quantum circuit simulation**. 2007. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) — The University of Michigan.

5 ASSINATURAS

Mateus Moreira Silveira do Nascimento
Proponente

Profa. Dra. Renata Hax Sander Reiser
Profa. Orientadora