

# JORNADA TÉCNICA COMPUTACIÓN CUÁNTICA

Wednesday 25 October 2023 - Wednesday 25 October 2023

CESGA



## Book of Abstracts



# Contents

Paralelizando algoritmos cuánticos en la era NISQ . . . . .	1
Interfaces de acceso a la infraestructura de Generación Cuántica de números aleatorios (QRNG) . . . . .	1
Herramientas para el estudio de la estabilidad del generador cuántico de números aleatorios . . . . .	1
Aplicación de las tecnologías cuánticas a las telecomunicaciones . . . . .	1
Investigación sobre la aplicabilidad de técnicas de computación cuántica en el sector del automóvil . . . . .	2
Tecnologías, soluciones y desafíos para la computación cuántica distribuida . . . . .	2
Simulación de espectros de resonancia magnética nuclear con un ordenador cuántico . . . . .	2
Computación Cuántica en Plegamiento de Proteínas: ¿ Suficientes Qubits para Tantos Átomos? . . . . .	2
Un nuevo enfoque en la resolución de problemas de Manufacturing Resource Planning (MRP) en sistemas cuánticos: LCU + Hadamard . . . . .	3
Las matemáticas en la era de la computación cuántica . . . . .	3
Redes neuronales recurrentes cuánticas para predicciones series temporales multivariantes . . . . .	3
Evaluando el rendimiento de un computador cuántico. . . . .	4
TBA . . . . .	4
Detección de rayos cósmicos na estructura de computación cuántica do CESGA . . . . .	4
Un enfoque híbrido y altamente escalable para la próxima generación de CPDs con capacidades cuánticas . . . . .	4
Quside QRNG en CESGA . . . . .	5



Las posibilidades de la computación cuántica: estudios de prospectiva / 1

## Paralelizando algoritmos cuánticos en la era NISQ

Servicio de geración de números aleatorios / 2

## Interfaces de acceso a la infraestructura de Generación Cuántica de números aleatorios (QRNG)

Servicio de geración de números aleatorios / 3

## Herramientas para el estudio de la estabilidad del generador cuántico de números aleatorios

**Author:** Elisabeth Ortega Carrasco (HPCNow)<sup>1</sup>

**Co-author:** Christian Bustelo (HPCNow)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> HPCNow

Los generadores de números (pseudo)aleatorios tienen una gran importancia en diferentes áreas del conocimiento. Por ese motivo, obtener números aleatorios verdaderos, es decir, que sean impredecibles, es una tarea clave.

Por otro lado, existen una gran cantidad de generadores de números aleatorios (y pseudoaleatorios). Desde algoritmos tales como Mersenne Twister o WELL (Well Equidistributed Long-period Linear), o procesos físicos tales como la desintegración radioactiva. Con la irrupción de las tecnologías cuánticas han aparecido nuevos métodos generadores, como las soluciones desarrolladas por Quside, que emplean tecnologías fotónicas para la generación de números aleatorios. Sin embargo, debido a la importancia que reside en el resultado obtenido al ejecutar el generador, es de vital importancia corroborar que los números aleatorios obtenidos son genuinamente aleatorios, y que esa comprobación sea consistente a lo largo del tiempo.

En esta charla se presentará la solución propuesta por HPCNow! para el control de la estabilidad del generador cuántico de números aleatorios instalado en el CESGA usando métodos de monitorización de código abierto.

Las posibilidades de la computación cuántica: estudios de prospectiva / 4

## Aplicación de las tecnologías cuánticas a las telecomunicaciones

**Authors:** Gabriel M. Carral López (GRADIANT)<sup>1</sup>; Óscar Iglesias González (GRADIANT)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> GRADIANT

La Segunda Revolución Cuántica supone un cambio de paradigma en la codificación, transmisión y procesamiento de la información. En el campo de las telecomunicaciones, el uso de las Tecnologías Cuánticas promete avances en múltiples direcciones: resolución de problemas específicos intratables para ordenadores clásicos, seguridad incondicional en las comunicaciones y detección de señales electromagnéticas de forma muy ventajosa respecto a los métodos clásicos

**Las posibilidades de la computación cuántica: estudios de prospectiva / 5**

## **Investigación sobre la aplicabilidad de técnicas de computación cuántica en el sector del automóvil**

El objeto del trabajo es identificar áreas en las que la computación cuántica pueda resolver problemas que optimicen los procesos productivos en el sector del automóvil. Al mismo tiempo se colabora en extender el conocimiento sobre la computación cuántica a los agentes más importantes del sector del automóvil de Galicia identificando potenciales aplicaciones que afecten al OEM, a los proveedores y a su cadena de suministros.

**Las posibilidades de la computación cuántica: estudios de prospectiva / 6**

## **Tecnologías, soluciones y desafíos para la computación cuántica distribuida**

Por el momento, la tecnología de computación cuántica no ha alcanzado un grado de desarrollo que permita resolver de forma fiable con un solo procesador problemas de tamaño moderado o grande, por lo que la única alternativa realista es alguna forma de computación cuántica distribuida entre varios nodos con algunos cientos de qubits cada uno. En esta presentación/informe se expone la situación científica y tecnológica en torno al diseño y uso de sistemas computacionales y de comunicaciones cuánticos distribuidos, con énfasis en los principios de diseño y las dificultades de ingeniería en la Internet cuántica y la aplicación al caso de conexión directa de varias QPU a cortas distancias.

**Proyectos de computación cuántica / 7**

## **Simulación de espectros de resonancia magnética nuclear con un ordenador cuántico**

**Proyectos de computación cuántica / 8**

## **Computación Cuántica en Plegamiento de Proteínas: ¿Suficientes Qubits para Tantos Átomos?**

En nuestra empresa nos dedicamos principalmente al diseño y optimización de nuevos principios activos y formulaciones en la industria farmacéutica a partir de la caracterización de sus interacciones con otras moléculas y agregados supramoleculares de diferente grado de organización, como por ejemplo membranas celulares. En particular, estamos interesados en la comprensión de la interacción entre péptidos del sistema inmunológico innato (los llamados péptidos antimicrobianos) y membranas con composiciones lipídicas patológicas. Estas interacciones dependen de la conformación de la secuencia de aminoácidos, que a menudo adquiere una forma de hélice- $\alpha$  durante su función lítica. El plegamiento de proteínas, que transforma una cadena de polipéptidos en su estructura tridimensional funcional, representa un desafío central en biología molecular, especialmente en interfases como la superficie de una membrana celular. A pesar de su papel clave en numerosos

mecanismos biológicos, los detalles cinéticos y dinámicos de estos procesos siguen sin entenderse. La paradoja de Levinthal, que destaca la imposibilidad de que las cadenas de aminoácidos encuentren su conformación nativa y funcional en un periodo biológicamente relevante si tuvieran que explorar todas las configuraciones posibles, ilustra esta complejidad. Tradicionalmente, las simulaciones computacionales utilizando superordenadores clásicos han tenido dificultades para abordar esta difícil tarea. En este punto, la computación cuántica ofrece una ventana de oportunidad. Recientemente, IBM liberó un código destinado a resolver el problema del plegamiento de péptidos en medios homogéneos para cadenas de aminoácidos relativamente cortas utilizando esta tecnología. Su enfoque se basa en varias aproximaciones, incluida la representación de los residuos peptídicos usando esferas que interactúan bajo el potencial de Miyazawa-Jernigan, y la discretización de grados de libertad, que se reducen a una red tetraédrica. Nosotros hemos modificado el Hamiltoniano empleado por el grupo de computación cuántica de IBM para incluir una interfase continua entre un medio hidrofóbico y un medio hidrofílico, modelando así la superficie de una membrana lipídica. Tras implementar esta modificación en la versión pública del código, calculamos la conformación óptima para tres secuencias de péptidos de 10 aminoácidos en interfases con diferentes gradientes de polaridad. Las tres secuencias empleadas fueron diseñadas para ser principalmente hidrofóbicas, hidrofílicas y altamente anfipáticas, mostrando así diferentes comportamientos en los modelos de interfase. Aquí presentaremos los resultados obtenidos con nuestra aproximación utilizando el emulador cuántico disponible en CESGA.

#### Proyectos de computación cuántica / 9

### Un nuevo enfoque en la resolución de problemas de Manufacturing Resource Planning (MRP) en sistemas cuánticos: LCU + Hadamard

En ese proyecto hemos estudiado posibles aplicaciones del algoritmo QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) en entornos industriales reales mediante el simulador del CESGA, haciendo énfasis en el Job Shop Scheduling Problem (JSSP). Para ello hemos desarrollado un método innovador, el Hadamard+LCU Test, y hemos creado una formulación QUBO del JSSP nueva para mejorar su performance

#### Proyectos de computación cuántica / 10

### Las matemáticas en la era de la computación cuántica

En esta charla se hará un resumen del estado del arte de los algoritmos cuánticos más relevantes para la investigación matemática y los problemas que resuelven, así como sus ventajas, limitaciones y problemas abiertos.

#### Proyectos de computación cuántica / 11

### Redes neuronales recurrentes cuánticas para predicciones series temporales multivariantes

**Author:** José Daniel Viqueira Cao (CESGA)<sup>1</sup>

**Co-authors:** Andrés Gómez Tato <sup>1</sup>; Daniel Faílde Balea <sup>1</sup>; David Mera Pérez <sup>2</sup>; Mariamo Mussa Juane <sup>1</sup>

<sup>1</sup> CESGA

<sup>2</sup> USC

Algunos algoritmos de Machine Learning, como las Redes Neuronales Recurrentes (RNN), analizan series temporales para predecir valores desconocidos de variables en un sistema complejo. Cuando se trabaja con redes multicapa y series amplias, surgen algunos problemas, como el sobreajuste o las pérdidas de memoria. Varios enfoques intentan resolverlos, por ejemplo, la célula Long Short-Term Memory (LSTM). A pesar de estos enfoques, el aprendizaje a partir de sistemas complejos multivariantes sigue siendo un reto y requiere redes con muchos términos no lineales, costosas de calcular en dispositivos clásicos.

La computación cuántica emerge como un enfoque prometedor para abordar problemas complejos de forma más eficiente, ya que permite computar términos no lineales en un espacio de alta dimensión sin gastar recursos exponenciales. Proponemos un modelo RNN cuántico (QRNN) como primer paso hacia la predicción de series temporales multivariantes. El núcleo de la QRNN es un circuito cuántico parametrizado que intercambia información de forma iterativa, pero, al mismo tiempo, guarda memoria de datos pasados

**Proyectos de computación cuántica / 12**

## **Evaluando el rendimiento de un computador cuántico.**

La compra de un computador cuántico supone una inversión de varios millones de euros. Sin embargo, la evaluación de qué computador cuántico tiene el mejor rendimiento entre varios candidatos es un problema abierto todavía por resolver. Así como en la computación clásica ya existen varias suites de evaluación del rendimiento bien establecidas y aceptadas por la comunidad, la cantidad de propuestas para la computación cuántica es abrumadora y no existe un claro ganador. El Grupo de Arquitectura de Computadores de la UDC y el CESGA están desarrollando una propuesta centrada en evaluar el desempeño de los computadores cuánticos en la ejecución de aplicaciones. La propuesta se basa en la identificación de aquellas tareas que son comunes a varias aplicaciones de la computación cuántica. Cada tarea será asociada a un caso de prueba en el que se deba utilizar dicha tarea y cuyo resultado sea verificable por medios clásicos. Los casos de prueba pueden ser formulados para un número arbitrario de qubits, lo cual evitará la obsolescencia de nuestra propuesta ante el incremento de las capacidades de los computadores cuánticos.

**Proyectos de computación cuántica / 13**

**TBA**

**Proyectos de computación cuántica / 14**

## **Detección de rayos cósmicos na estructura de computación cuántica do CESGA**

**Estudio de integración entorno cuántico / 15**

## **Un enfoque híbrido y altamente escalable para la próxima generación de CPDs con capacidades cuánticas**

La computación cuántica constituye un nuevo paradigma de la computación que se basa en las propiedades de la mecánica cuántica, como la superposición o el entrelazamiento para realizar cálculos de una manera mucho más eficiente y rápida. A pesar de los logros alcanzados en los últimos años, todavía son muchos los desafíos que deben ser abordados, como los problemas de escalabilidad en la representación tanto de los circuitos cuánticos como de los resultados. A este conjunto de desafíos técnicos propios de la disciplina habría que sumar aquellos asociados a la integración de una infraestructura de computación cuántica en un centro de supercomputación (control de acceso, gestión de colas, monitorización y gestión de la contabilidad, etc.). En este trabajo se realiza un análisis y se propone una arquitectura escalable y suficientemente flexible para abordar los principales desafíos en la integración de una computadora cuántica en un centro de supercomputación.

**Estudio de integración entorno cuántico / 16**

## **Quside QRNG en CESGA**

**Author:** Fernando de la Iglesia (Quside)<sup>None</sup>

El uso de números aleatorios de alto rendimiento y alta calidad tiene múltiples aplicaciones en distintos ámbitos, tanto en aplicaciones que hacen un uso importante de los números aleatorios como simulaciones de MonteCarlo u optimizaciones heurísticas, como en aplicaciones criptográficas donde el uso de entropía de alta calidad es fundamental para la seguridad. La única fuente conocida de aleatoriedad en la naturaleza es el mundo cuántico, por tanto los Generadores Cuánticos de Números Aleatorios (QRNG) son la solución práctica para dar soporte a estas necesidades. CESGA dispone entre sus capacidades de un QRNG de Quside que puede ser aprovechado por los investigadores y empresas que ejecutan estos tipos de trabajos.