HIPERWALK 2.0 – EXPANDINDO AS POSSIBILIDADES DE UM SIMULADOR DE PASSEIOS QUÂNTICOS

GUSTAVO A. BEZERRA[1], PAULO MOTTA[2], RENATO PORTUGAL[3]

Laboratório Nacional de Computação Científica, RJ, Brasil

gbezerra@posgrad.lncc.br[1], prmottajr@gmail.com[2], portugal@lncc.br[3]

Resumo

O Hiperwalk (High-Performance Quantum Walk Simulator) é um projeto que usa *high-performance computing* (HPC) e gerencia os recursos computacionais para simular passeios quânticos. Neste trabalho, descrevemos como o Hiperwalk está sendo reformulado para ser usado como uma biblioteca Python. Atualmente, o Hiperwalk 2.0 simula passeios no modelo com moeda em grafos gerais e exibe gráficos das distribuições de probabilidade.

Palavras-Chave: passeios quânticos; simulação; high-performance computing.

Introdução

Devido ao crescimento exponencial da dimensão do espaço de Hilbert, o uso de computadores pessoais são úteis apenas para instâncias pequenas de simulações de passeios quânticos. Logo, o uso de HPC é necessário para instâncias relevantes. Entretanto, implementar simulações em paralelo não é trivial, principalmente usando a estrutura heterogênea de um supercomputador.

Objetivos

O Hiperwalk visa mitigar a dificuldade de implementação de passeios quânticos em arquiteturas heterogêneas. De modo que o usuário foque apenas na formulação do passeio e não nos detalhes da paralelização. O Hiperwalk deve dar suporte para visualização dos resultados e estatísticas das simulações.

Fundamentação Teórica

Os simuladores de passeios quânticos sanam necessidades distintas dos pesquisadores; com focos em diferentes tipos de passeios. Alguns exemplos são: PyCTQW[1], Qwalk[3] e Hiperwalk[2]. O PyCTQW é um simulador de passeios em tempo contínuo que usa multipartículas, HPC, memória distribuída, disponibiliza visualização de dados e é implementado em Fortran e Python. O Qwalk é um simulador em tempo discreto do modelo com moeda em látices uni ou bi-dimensionais, ou qualquer subgrafo desses, e é implementado em C e Gnuplot. O Hiperwalk 1.0 é um simulador de passeios quânticos em tempo discreto que implementa passeios em diversos modelos (em grafos específicos e gerais), e é implementado em Python, OpenCL, Neblina e GnuPlot.

Desenvolvimento e Metodologia ou Materiais e Métodos

O Hiperwalk está separado em três grandes partes: neblina-core, pyneblina e Hiperwalk.

Figura 1: Nova arquitetura do Hiperwalk.

Neblina-core: Neblina → C e arquitetura Numina[4]. Implementação de *bridges* que abstraem as operações matriciais em diferentes tipos de hardware, e.g. CUDA e OpenCL.

PyNeblina: interface entre o neblina-core e o Hiperwalk.

Hiperwalk: é o *front-end* da aplicação, a parte que oferece uma API para o usuário. O Hiperwalk é implementado em Python e invoca funções do Neblina-core para paralelização através do PyNeblina. O Hiperwalk disponibiliza funções para geração de operadores de evolução de passeios com moeda em grafos genéricos dada uma matriz de adjacência, e funções para cálculo e exibição de gráficos das distribuições de probabilidade ao longo do passeio. Uma nova documentação está sob construção, apresentando exemplos e detalhes sobre o funcionamento de métodos, classes e funções.

Resultados

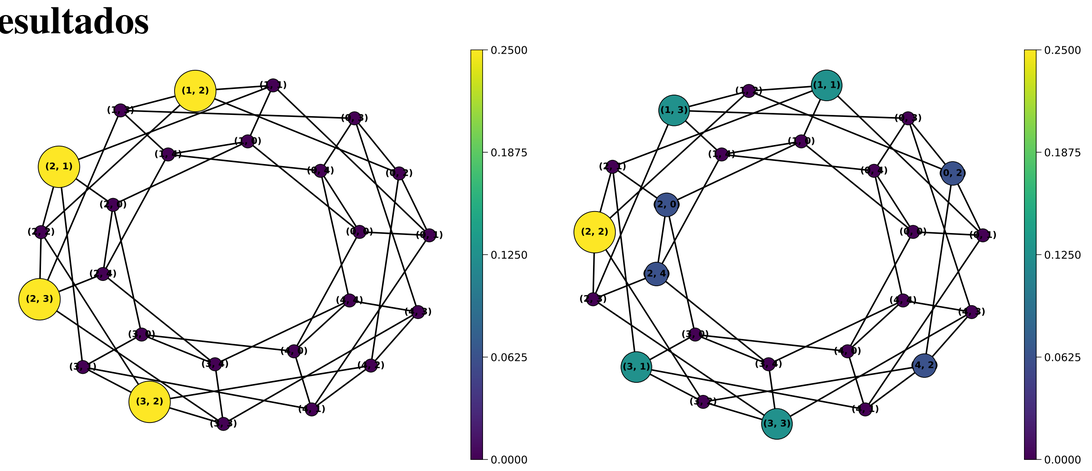

Figura 2: Distribuição de probabilidade de um passeio na malha 5×5, passos 1 e 2.

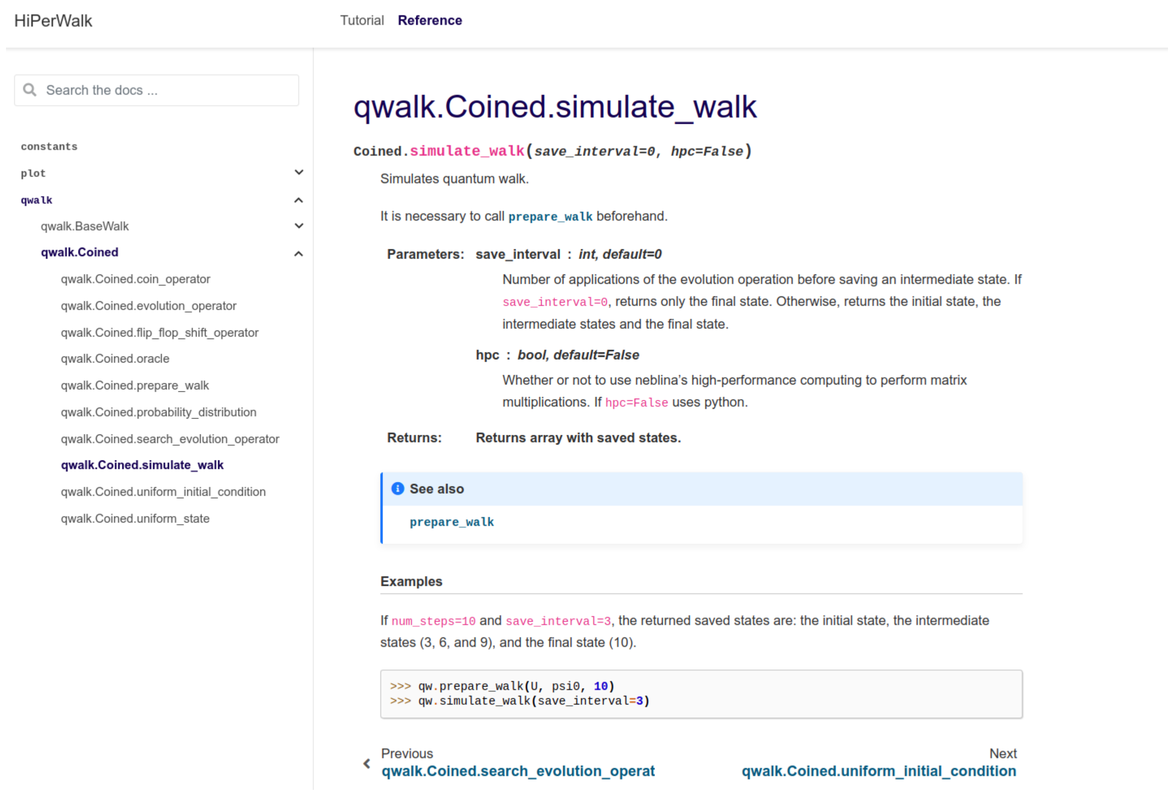

Figura 3: Trecho da documentação.

Conclusões

Mostramos uma versão funcional da reformulação do Hiperwalk. Os objetivos foram majoritariamente cumpridos, porém resta testar o hiperwalk em arquiteturas heterogêneas. Esperamos que usando a estrutura do Numina e removendo a linguagem Neblina seja mais fácil dar suporte contínuo ao projeto. Além disso, manter o Hiperwalk aberto seguindo os padrões da comunidade de Python (e.g. PEP8 e numpydoc) facilitará a expensão do projeto, manutenção por usuários, acusação de bugs, etc. Possibilitando a ampliação para outros tipos de passeios e passeios em grafos específicos.

Referências

[1] Izaac, J. A., Wang, J. B. pyCTQW: A continuous-time quantum walk simulator on distributed memory computers, *Computer Physics Communications*, 186, 81-92, 2015. DOI: 10.1016/j.cpc.2014.09.011.

[2] Lara, P., Leão, A., Portugal, R. (2015). Simulation of quantum walks using HPC, *Proceedings of the 3rd Conference of Computational Interdisciplinary Sciences* 230-242, 2015. DOI: 10.6062/jcis.2015.06.01.0092.

[3] Marquezino, F. L., Portugal, R. The QWalk simulator of quantum walks. *Computer Physics Communications*, 179(5), 359-369, 2008. DOI: 10.1016/j.cpc.2008.02.019.

[4] Motta, P.R. Abstração para Programação Paralela: Suporte para o Desenvolvimento de Aplicações. *Departamento de Informática - PUC-Rio*, 2012

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq por financiamento do projeto.