



Sergio Figueiras,
Director Innovación BAHIA SOFTWARE

**CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN
DE GALICIA**

**UN ENFOQUE HÍBRIDO Y ALTAMENTE
ESCALABLE PARA LA PRÓXIMA GENERACIÓN
DE CPDs CON CAPACIDADES CUÁNTICAS**

25/10/2023

INDICE

01

Bahía Software

02

Estado del arte

03

Análisis requisitos

04

Propuesta de
Arquitectura, Líneas
de I+D



01. BAHÍA SOFTWARE

Diversidad, Experiencia y Compromiso

Somos un equipo comprometido, y nuestra experiencia y nuestra pasión por los avances en **I+D+i** nos hacen vivir muy intensamente cada uno de nuestros proyectos desde el primer momento.

100+

Proyectos
en
marcha

270+

Staff

24+

Años

bahia
software



The background of the slide is a solid orange color with a complex, abstract geometric pattern. This pattern consists of numerous small, interconnected white dots and thin white lines, creating a network-like structure that resembles a molecular or digital mesh. The pattern is more dense in the lower half and fades slightly towards the top.

02. ESTADO DEL ARTE

APLICACIONES DE LA COMPUTACIÓN CUÁNTICA EN LA INDUSTRIA

- **Química:** diseño de nuevos materiales (baterías, fármacos, etc.).
- **Ingeniería y diseño:** optimización completa del proceso de fabricación.
- **Logística:** optimización de rutas, tiempos y costes.
- **Finanzas:** fijación de precios de derivados, modelado de riesgos, optimización de carteras, detección de fraude.
- **Salud:** descubrimiento de fármacos, simulaciones personalizadas, explotación de datos procedentes de tecnologías ómicas, análisis de riesgo, etc.



PRINCIPALES SOLUCIONES COMERCIALES

- **IBM:** provee dos interfaces web que permiten ejecutar circuitos cuánticos:
 - Un Jupyter Notebook con las dependencias necesarias (Qiskit).
 - Quantum Composer, una interfaz web para el diseño de circuitos de forma interactiva.
- **Amazon Braket:** sistema de notebooks propio basados en Jupyter (Braket).
 - Permite gestionar roles, permisos y monitorización (IAM, CloudWatch).
 - Desarrollos híbridos (clásica / cuántica).
- **Azure Quantum:** sistema basado en notebooks:
 - Incluye un conjunto de herramientas cuánticas (Cirq, Qiskit, Q# o QDK).
 - Se integra fácilmente con diferentes proveedores de soluciones cuánticas (basadas en ION capturado, superconductores, neutral atom u optimización).
- **Google Quantum AI:** sistema basado en Colab.
 - Ofrece un stack de herramientas para el desarrollo de procesos cuánticos (Cirq, OpenFermion, TensorFlow Quantum, Qsim).
 - Extensiones de terceros: Pennylane, Alpine Quantum Technologies, Pasqal.

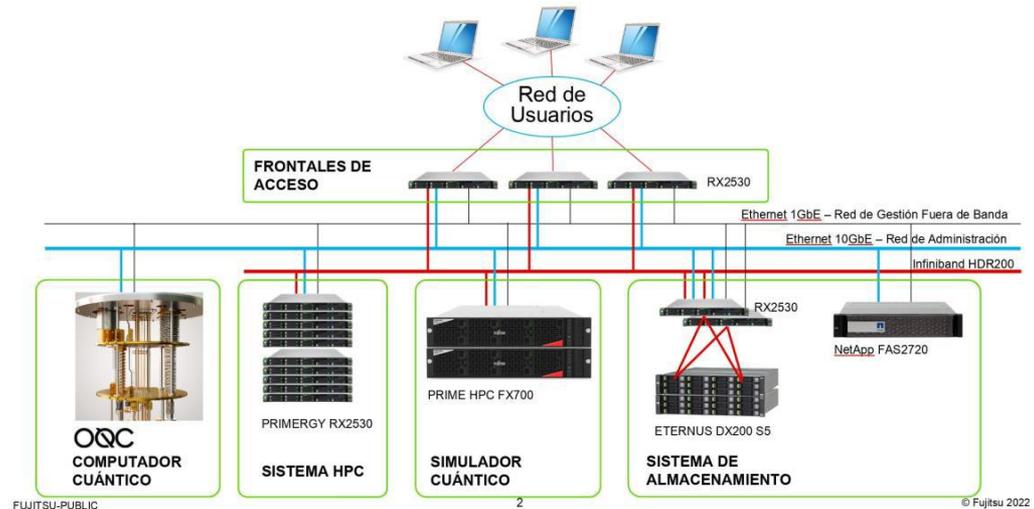
PRINCIPALES SOLUCIONES COMERCIALES

- **Strangerworks:**
 - Facilita la integración de la tecnología cuántica.
 - Ofrece conexiones con una amplia gama de servicios hardware mediante un único portal.
- **Quantum Inspire:**
 - Plataforma de computación cuántica soportada por QuTech.
 - Proporciona una interfaz gráfica para programar en QUASM y visualizar operaciones.
- **Quirk:**
 - Emulador destinado a ayudar a las personas a aprender computación cuántica.
 - Diseño de circuitos cuánticos interactivo.

03. ANÁLISIS DE REQUISITOS

INFRAESTRUCTURA DEL CESGA

- **Medidas de seguridad:** acceso acotado a un conjunto de **centros autorizados**. Fuera de ellos, se debe usar una VPN.
- **Transferencia de datos:**
 - Diversos protocolos de transferencia: scp, sftp, etc.
 - Nodos especiales DTN para agilizar el proceso.
- **Sistema de colas** altamente escalable y tolerante a fallos basado en SLURM:
 - Asignar acceso a los recursos durante un periodo de tiempo.
 - Marco para iniciar, ejecutar y monitorear trabajos en los nodos asignados.
 - Arbitra la gestión de recursos en base a la cola de trabajos pendiente.
- **El QRNG** tiene una restricción del número de usuarios, siendo posible únicamente **un cliente de forma simultánea**.



RETOS PRINCIPALES

1

2

3

4

5

6

Gestión de colas:

- Ejecución sobre emulador / QPU.
- Tipo de emulador y/o QPU.
- Tipo de infraestructura (interna / externa).

Interfaces de comunicación:

- Adaptar los protocolos de comunicación al paradigma de la computación cuántica.
- Establecer el nivel donde implementar el protocolo de comunicaciones entre los dispositivos clásicos y las QPU ponderando versatilidad, mantenibilidad y escalabilidad.

Integración con recursos externos:

- Ampliar la oferta con recursos externos (capacidad, benchmarks, etc.).
- Implantar herramientas de metascheduling

Representación de los circuitos cuánticos:

- Problemas de escalabilidad (vertical y horizontal).
- Descomponer los circuitos en componentes elementales.
- Anidar operadores.
- Relaciones de dependencia entre los distintos operadores

Representación de los resultados:

- Colapso al aumentar el número de cúbits: se tienen 2^n posibilidades, siendo n el número de cúbits de entrada.
- Herramientas que permitan **extraer la información relevante**.

Gestión de la contabilidad:

- Recabar información (procesos, consumos, huella energética, etc.) y monitorearla y **emitir informes**.
- Alimentar modelos de analítica avanzada para **optimizar la gestión de los recursos**.
- Establecer sinergias con sistemas de gestión de contabilidad de proveedores de servicios cuánticos.

The background features a complex network of white lines and dots on an orange gradient, resembling a molecular or digital structure. A white horizontal bar is centered across the middle of the image.

04. PROPUESTA DE ARQUITECTURA, LÍNEAS DE I+D

ARQUITECTURA GLOBAL

Control de acceso:

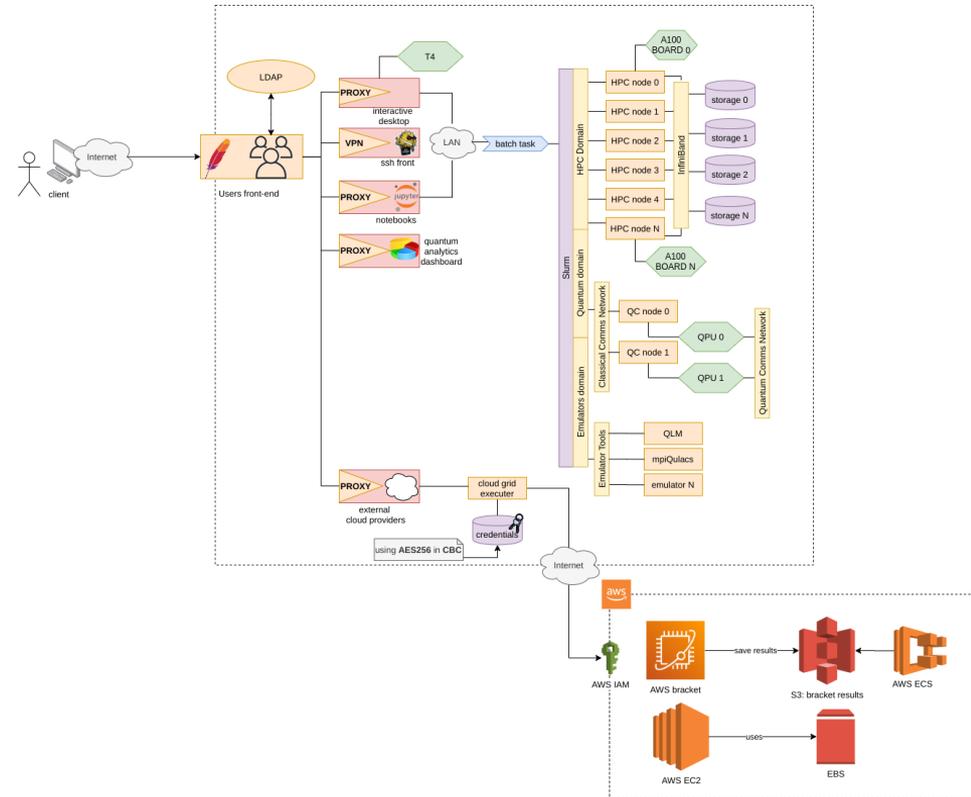
- A través de un portal de usuarios que hace uso del LDAP para la autenticación.
- Acceso a los servicios mediante un proxy.
- Acceso a un nodo frontal de SSH mediante VPN.

Frontales:

- **Escritorio interactivo.** Ejecución bajo demanda de pequeñas tareas y envío de trabajos más complejos al clúster de HPC.
- **SSH.** Tareas de compilación y pruebas para el envío de trabajos al sistema HPC.
- **Jupyter Notebooks.** Crear y editar scripts para su ejecución en el sistema HPC.
- **Quantum Analytics Dashboard.** Análisis de resultados cuánticos (QPU y emuladores).
- **External cloud providers.** Dar de alta cuentas en proveedores cloud externos.

Sistema HPC:

- Aproximación similar a cualquier supercomputador (computadoras, aceleradores hardware, sistema de almacenamiento, red de baja latencia).
- Gestión de los recursos mediante SLURM.



ARQUITECTURA GLOBAL

○ Recursos cuánticos:

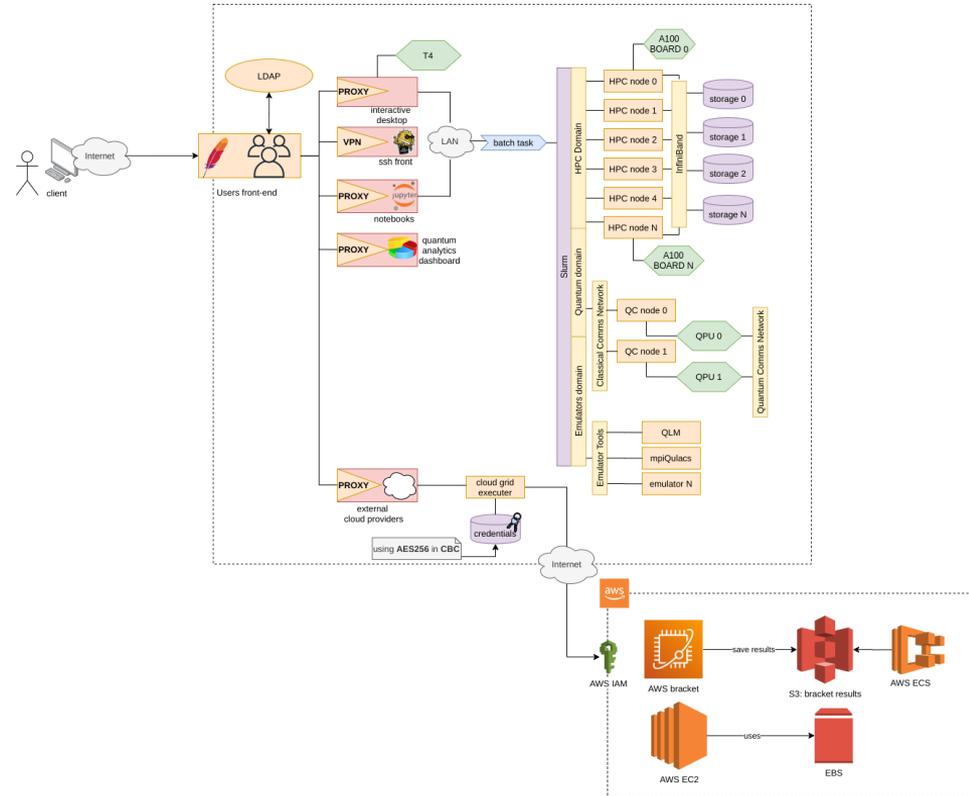
- Añadir las QPUs al sistema de colas.
- Crear reglas específicas para **computación híbrida** (clásica / cuántica).
- **Segmentación de la QPU** para permitir la ejecución de varias tareas simultáneamente.
- **Comunicación entre QPUs** para tareas complejas que requieran varias QPUs (sistema de comunicaciones cuánticas).

○ Recursos externos:

- Gestionar las cuentas y recursos de los usuarios en los proveedores de servicios cloud.
- Sistema de colas propio para la gestión de los trabajos.
- Servicios de autenticación y autorización.

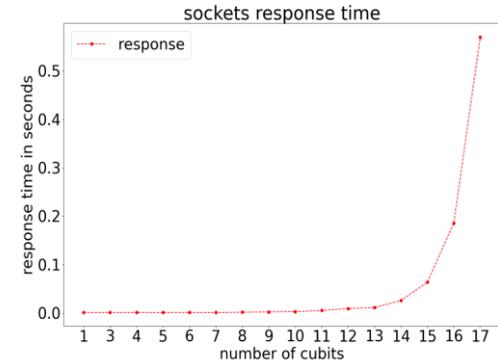
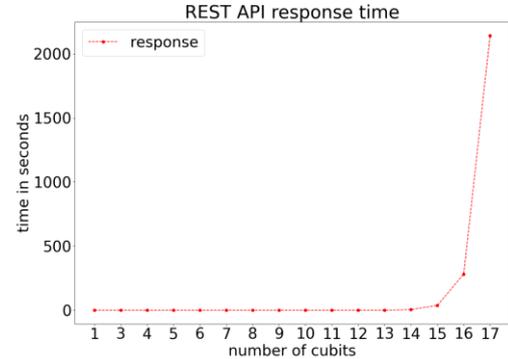
○ Propuesta I+D:

- Se deshecha GridWay MetaScheduler.
- Se diseña un sistema de integración de trabajos desde la red interna del supercomputador con 3 componentes principales



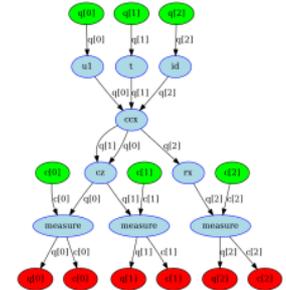
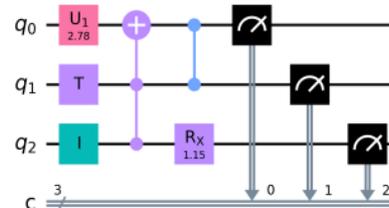
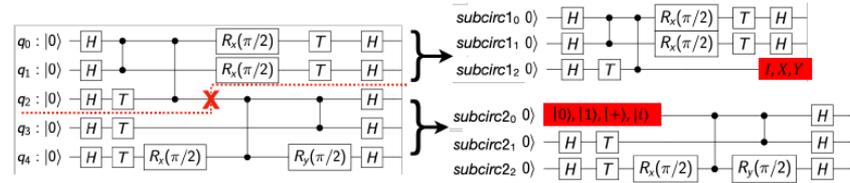
CONTROL DE ACCESO, GESTIÓN DE COLAS E INTERFACES DE COMUNICACIÓN

- **Control de acceso:**
 - Portal de usuario.
 - Nodo de login SSH mediante una conexión VPN.
- **Gestión de colas:**
 - Una única instancia de SLURM para gestionar los nodos de cómputo y la QPU.
 - 2 dominios (computación clásica / computación cuántica) con acceso al sistema de almacenamiento.
 - **Dominio mixto** para problemas híbridos.
- **Interfaces de comunicación:**
 - **Mediante interfaces de red:**
 - En general se usan comunicaciones basadas en REST.
 - Ligera optimización de las comunicaciones usando sockets.
 - Comunicaciones parciales donde se filtre los datos de interés
 - **Comunicaciones mediante bus:**
 - En contextos de programación híbrida es necesario implementar un conjunto de controladores y directivas para ejecutar instrucciones sobre la QPU.
 - En el caso del kernel de Linux, el bus de comunicaciones más habitual es mediante PCI.



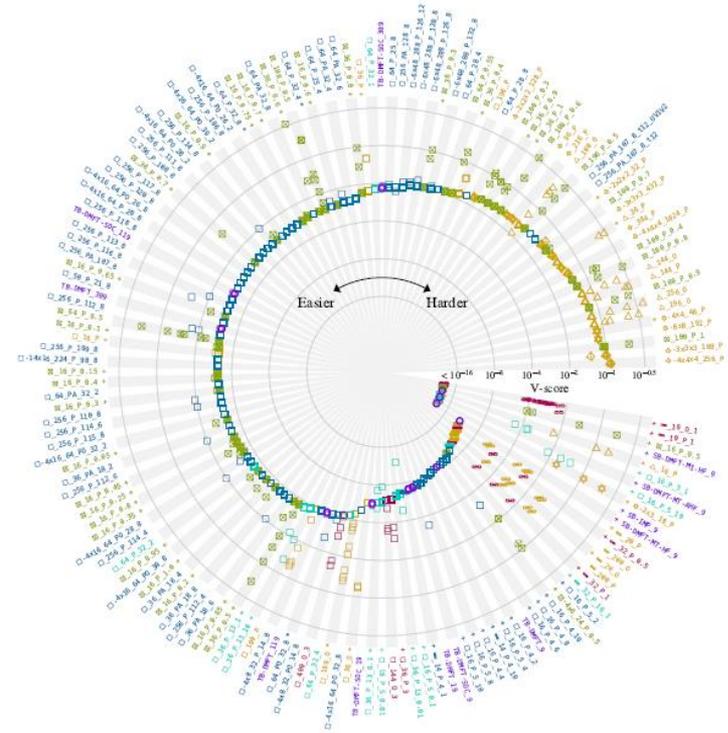
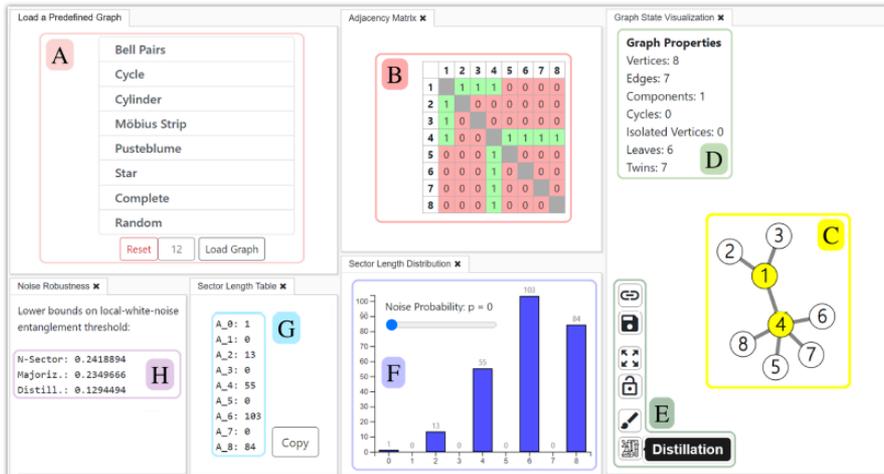
REPRESENTACIÓN DE LOS CIRCUITOS CUÁNTICOS

- Para subsanar las deficiencias de los métodos de representación actuales se consideran diferentes aproximaciones:
 - **Quantum circuit cutting:** técnica que permite descomponer un circuito cuántico en componentes más elementales (subcircuitos).
 - **Herramientas de abstracción:** agrupar varias puertas cuánticas en una única **capa abstracta**.
 - **Diagramas de flujo:** método alternativo para representar circuitos cuánticos grandes.
- Se proponen **métodos de visualización interactivos** (estilo Quirk) incluyendo herramientas de abstracción:
 - Reglas customizadas definidas por el usuario.
 - Reglas automatizadas basadas en técnicas como circuit cutting.
 - Opción de drill down al clicar en un operador abstracto.



REPRESENTACIÓN DE LOS RESULTADOS

- El módulo **Quantum Analytics Dashboard** contará con una galería de opciones de visualización interactiva (similar a GraphStateVis).
- Sistema versátil para que los usuarios puedan customizar sus propios gráficos o dashboards.
- Definir los filtros.
- El procesamiento de la información se realiza en el servidor.
- Se muestra la información en el cliente.



GESTIÓN DE LA CONTABILIDAD Y MONITORIZACIÓN

Objetivo: emitir informes sobre el uso de la plataforma, características de los procesos y tareas o el consumo energético.

- Mejoras en la gestión de los recursos disponibles.
- Se ha analizado el modo de gestión de la contabilidad de los principales proveedores de servicios cuánticos: Amazon Braket, IBM, Azure Quantum, Google Quantum AI, D-Wave y Pasqal.

Propuesta de KPIs:

- Número de cúbits.
- Número de operaciones de inicialización.
- Número de operaciones de un solo cúbit.
- Tiempo promedio de operaciones de un solo cúbit.
- Número de operaciones nativas de 2 cúbits.
- Tiempo promedio de operaciones de 2 cúbits.
- Número de operaciones de dos cúbits con varios controles.
- Tiempo promedio de operaciones de 2 cúbits con varios controles.
- Número de medidas del estado.
- Número de shots.
- Tiempo de cómputo por shot.
- Consumo energético asociado al periodo de cómputo.

Proveedor	Hardware	Contabilidad
Amazon Braket	IonQ Device (IonQ)	Proveedor de hardware
	Lucy (OQC)	Tarea
	Aquila (Quera)	Shot
	Aspen-M (Rigetti)	
	Borealis (Xanadu)	
IBM	QPU (5 y 7 cúbits)	Plan (open, pay-as-you-go, premium), basado en el tiempo de cómputo
	Falcon (27 cúbits)	
	Eagle (127 cúbits)	
	Osprey (433 cúbits)	
Azure Quantum	Infraestructura Azure Quantum	Plan (Learn & develop y Performance at scale), basado en tiempo de cómputo
	IonQ	Número de puertas Complejidad de las puertas Número de lanzamientos (gate-shots)
	Quantinuum	Créditos cuánticos del Sistema H (HQC)
	Rigetti	Tiempo de cómputo
	Google	IonQ
D-Wave	2000Q	Tiempo de cómputo
	Advantage	
Pasqal	Generation 1	Tiempo de cómputo
	Generation 2 (en desarrollo)	



Rúa das Hedras, 4, Local 1, Novo Milladoiro, 15895. Ames - A Coruña

www.bahiasoftware.es



Sergio Figueiras | Bahía Software

Director Innovación

+34 981 555 315

+34 687 337 676

sergio.figueiras@bahiasoftware.es

A iniciativa do Polo de Tecnoloxías Cuánticas de Galicia conta con financiamento de:

Fondos REACT EU



Despregamento dunha infraestrutura baseada en tecnoloxías cuánticas da información que permita impulsar a I+D+i en Galicia.

Apoiar a transición cara a unha economía dixital.

Operación financiada pola Unión Europea, a través do FONDO EUROPEO DE DESENVOLVEMENTO REXIONAL (FEDER), como parte da resposta da Unión á pandemia da COVID-19.

PROGRAMA OPERATIVO
FEDER GALICIA
2014-2020

Unha maneira de facer Europa