



Problemlöser mit Quantenmodul

Wie die Supercomputer der Zukunft aussehen werden

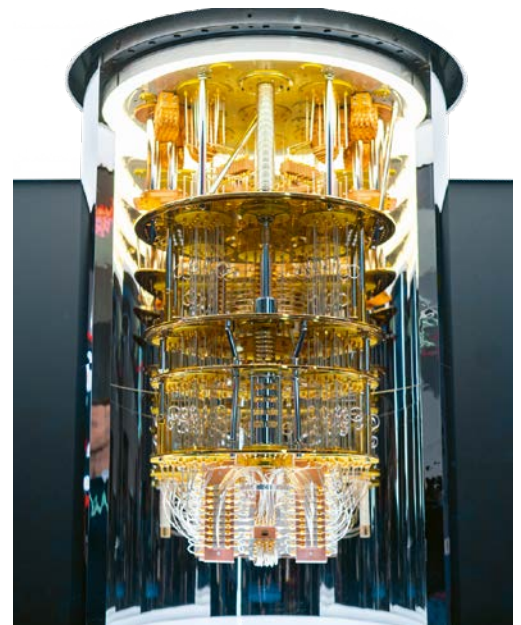
von Andreas Lorenz-Meyer



Sie heißen Leonardo, Fugaku oder Jupiter und verfügen über enorme Rechenpower. Es sind Supercomputer, also geschlossene Reihen von mächtigen, »Racks« genannten IT-Schränken, die in Universitätsgebäuden in kahlen Räumen stehen und geheimnisvoll blinken, wenn sie etwas ausrechnen. Zusammen bilden sie ein Cluster, also einen »Haufen« von vernetzten Computern. Regelmäßig werden in der Welt der Hochleistungsrechner neue Rekorde aufgestellt. Der derzeitige Spitzenreiter der Top500-Liste, der Supercomputer Frontier des Oak Ridge National Laboratory in den USA, durchbrach als Erster offiziell die magische 1-Exaflop-Grenze. 1 Exaflop Leistung bedeutet eine Trillion – 1 000 000 000 000 000 000 – Rechenoperationen pro Sekunde. Mit einer solchen technischen Ausstattung lassen sich komplizierteste Rechnungen durchführen: Klimamodelle, die bis weit ins 21. Jahrhundert reichen, oder Simulationen, welche räumlichen Strukturen das Corona-Spike-Protein einnehmen kann. Oft geht es bei Supercomputern um die großen Fragen. Wie retten wir das Klima? Wie bekämpfen wir Pandemien? Jedoch wächst der Schwierigkeitsgrad der Aufgaben immer weiter, weswegen es mehr braucht als nur möglichst viele Operationen pro Sekunde. Es müssen auch Ideen her, wie die geballte Rechenkraft der Supercomputer schlau anzuwenden ist.

Eine solche Idee wird gerade an der Goethe-Universität verwirklicht, genauer am Center for Scientific Computing (CSC). Das gehört zum 2021 gegründeten Verein Nationales Hochleistungsrechnen (NHR), so etwas wie die deutsche Supercomputer-Elite. Der CSC-Rechnerkomplex hat aktuell eine Leistung von ein paar Petaflops – ein Petaflop bedeutet eine Billion Operationen pro Sekunde. Auf die schiere Rechenpower kommt es aber nicht an, vielmehr geht es um das Grundkonzept. Es nennt sich Modular Supercomputing Architecture (MSA). Der Physiker und Informatiker Thomas Lippert, der zu den Wegbereitern des Konzepts gehört, will damit in Frankfurt einen Hochleistungsrechner der besonderen Art aufbauen. Was MSA grundsätzlich kann, erklärt er so: »Es ermöglicht die parallele Bearbeitung von Rechenproblemen auf Systemebene, wir nennen es auch funktionalen Parallelismus.« Wofür der genau da ist? Man stelle sich vor, eine Rechenaufgabe besteht aus zwei Teilen, die sich

Das Center for Scientific Computing der Goethe-Universität betreibt momentan einen Rechnerkomplex mit 25 000 CPU Cores (Prozessoren) und 880 AMD MI50 GPUs (Grafikkarten). Die CPU-Leistung liegt bei zwei Petaflops pro Sekunde, die GPU-Leistung bei sechs Petaflops pro Sekunde. Ein Petaflop entspricht einer Billion Operationen pro Sekunde. Für 2023 ist ein Upgrade geplant, der Beschaffungsprozess läuft. Lippert: »Unsere Ausbauphilosophie sieht so aus: Wir werden das Hochleistungssystem kontinuierlich erneuern, streng orientiert an den Bedürfnissen der Wissenschaft und bei maximaler Energieeffizienz, anstatt das System in Zyklen von vier bis fünf Jahren komplett zu ersetzen, wie es sonst bei Supercomputern üblich ist.«



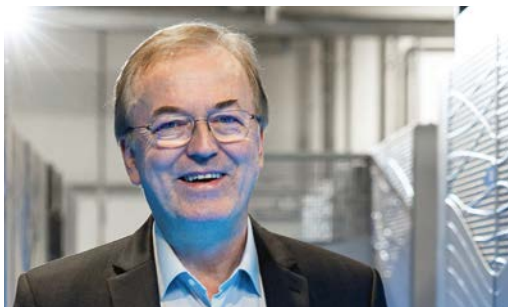
Sieht auch spektakulär aus: 2021 wurde der »Quantum System One« von IBM als erster Quantencomputer Deutschlands in Ehningen bei der Fraunhofer-Gesellschaft eingeweiht.

Wenn viele Computer zu einem Supercomputer zusammengeschlossen werden, spricht man von High Performance Computing. Die Goethe-Universität hat einen solchen Rechnerverbund – und bald kommt sogar noch ein Quantencomputer dazu. Der hilft, Rechenaufgaben zu bewältigen, die heute noch unlösbar sind.

nur auf zwei Parallelrechnern gut lösen lassen, welche aber eine ganz unterschiedliche Systemarchitektur haben.

Stilmix der Computer-Architekturen

Solche verschiedenen Architekturen haben zum Beispiel ein CPU-Cluster und ein GPU-Cluster. CPUs, central processing units, verfügen über eine begrenzte Zahl von Rechenkernen (Cores) und erledigen Aufgaben hintereinander. GPUs, die Grafikkarten, bestehen dagegen aus Tausenden sehr kleiner Cores, die im Gleichtakt an einem Problem arbeiten. Zwei grundverschiedene Funktionsweisen also – die modulare Architektur bringt sie dennoch zusammen. »Sie liefert ein einfaches Konzept und die notwendigen Tools und Softwareumgebungen, damit beide Systeme gleichzeitig einsetzbar sind«, erläutert Lippert. »Dadurch wird der ganze Prozess bezüglich Zeit- und Energieaufwand optimiert.« Wie so etwas praktisch funktioniert, zeigt sich bei der Weltraumwetterbeobachtung der Europäischen Weltraumbehörde. Hier gibt es ein Rechensystem, das den Sonnenwind – bei Sonneneruptionen ausgeschleuderte geladene Teilchen (Plasma) – und seine Wechselwirkung mit der Erdmagnetosphäre simuliert. Der Workflow setzt zwei sogenannte Löser voraus. Der



ZUR PERSON

Der Physiker und Informatiker **Thomas Lippert** hat eine eigene modulare Architektur für Supercomputer entwickelt und patentieren lassen. Seit August 2020 hält er die Professur für »Modulares Supercomputing und Quantencomputing« am Institut für Informatik der Goethe-Universität. Er ist zudem Direktor des Jülich Supercomputing Centre (JSC) des Forschungszentrums Jülich, mit dem der Frankfurter CSC zusammenarbeitet. In Jülich wird der Computer Jupiter aufgebaut, der erste europäische Supercomputer im Exaflop-Bereich. Lippert sitzt auch im Direktorium des John von Neumann Institute for Computing (NIC), welches Supercomputer-Rechenzeit für Forschungsprojekte bereitstellt. Die Goethe-Universität soll Mitglied des NIC werden.

lippert@fias.uni-frankfurt.de

AUF DEN PUNKT GEBRACHT

- Sehr komplexe Berechnungen etwa für globale Klimamodelle, die Formenvielfalt flexibler Biomoleküle oder große KI-Anwendungen werden mit Supercomputern gemacht.
- Künftig sollen in Supercomputern auch Quantencomputer zusammen mit klassischen Rechnern verbaut werden.
- Durch eine Modulbauweise werden die Stärken beider Computertypen miteinander verbunden.

Feldlöser berechnet die Entwicklung des elektromagnetischen Feldes der Erde – diesen Part übernimmt ein CPU-Cluster. Der Teilchenlöser berechnet die Bewegung der geladenen Teilchen in dem vom Feldlöser berechneten elektromagnetischen Feld – was auf einem GPU-Cluster läuft.

Um eine ähnliche Aufgabenteilung geht es auch beim eigentlichen Clou der CSC-Pläne: Der schon bestehende Supercomputer bekommt in diesem Jahr ein Quantencomputermodul eingebaut. Klassisches High Performance Computing und Quantencomputing sollen in Zukunft ein Team bilden. Was aber nicht einfach so zu bewerkstelligen ist, denn Quantencomputer bewegen sich in ganz anderen Sphären als klassische Computer. Die haben Bits (binary digits) als Informationseinheit, welche sich immer in genau einem von zwei möglichen Zuständen befinden: 0 oder 1. Quantencomputer bedienen sich dagegen der verrückt erscheinenden Gesetze der Quantenwelt, also der Welt der aller kleinsten Teilchen: Photonen oder Quarks. Gerechnet wird da mit Quantenbits, kurz Qubits. Diese können nicht nur gleichzeitig 0 und 1 sein, sondern auch unendlich viele Zustände dazwischen annehmen. Es können sogar komplexe Zahlen sein, die über die reellen Zahlen hinausgehen. Qubits sind mit einer drehenden Münze vergleichbar: Es gibt nicht nur Kopf oder Zahl, sondern alle möglichen Zustände auf einmal.

Aufbau in Modulen

Diese Überlagerung wird als Superposition bezeichnet. Sie bildet die mathematische Grundlage für das exponentielle Wachstum der Rechenleistung, das Quantencomputern eigen ist. Während bei klassischen Computern die Rechenleistung linear mit der Anzahl der Rechenbausteine steigt, erhöht sich die Rechen-

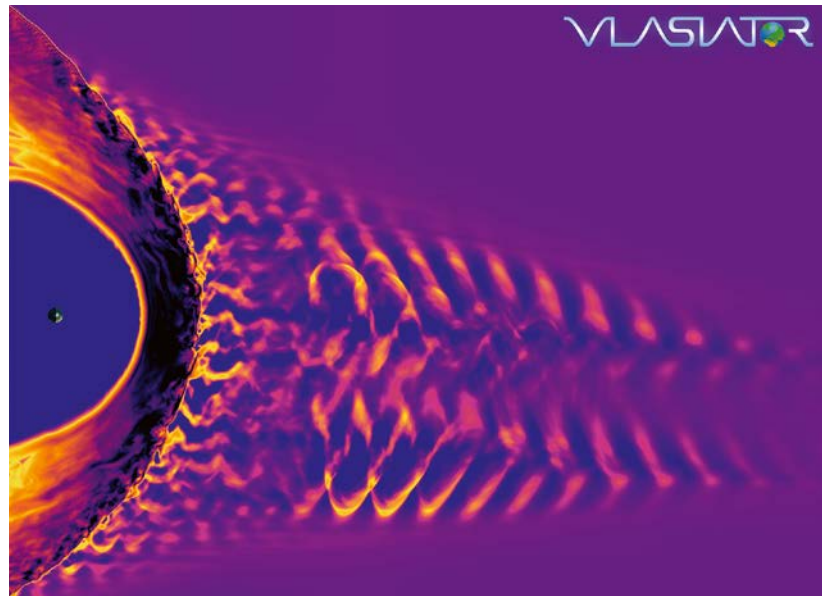
leistung eines Quantencomputers exponentiell mit der Anzahl der eingesetzten Qubits. Lippert veranschaulicht das mit Zahlen: »Für einen Zustand mit zwei Qubits braucht man vier komplexe Zahlen zur Charakterisierung, für einen Zustand mit drei Qubits aber nicht sechs, sondern bereits acht. Und 50 Qubits kodieren nicht etwa 100 Zahlen, sondern $2 \text{ hoch } 50$ komplexe Zahlen – das sind 1 125 899 906 842 624, also mehr als eine Billion.« So können Quantencomputer hochkomplexe Probleme lösen, an denen klassische binäre Computer allein scheitern würden. Was ein Quantencomputer in 200 Sekunden schafft, daran kann ein »normaler« Computer schon mal 10 000 Jahre herumrechnen – so das spektakuläre Ergebnis eines Experiments.

Eine Menge großer Unterschiede, und dennoch lassen sich beide Grundtypen auf einfache Weise miteinander koppeln. Auch dafür sorgt die modulare Architektur. »Damit werden unser Quantencomputer und unser Supercomputer gemeinsam an einem Problem arbeiten können – und dabei jeweils die für sie optimalen Aufgaben übernehmen«, so Lippert. Zum Einsatz kommen dabei hybride Algorithmen mit einem Anteil klassischem High Performance Computing und einem Anteil Quantencomputing. »Wir werden Quantenalgorithmen in Zukunft überall da brauchen, wo sehr schwierige Optimierungsprobleme anstehen. Zum Beispiel bei der Planung von Verkehrsrouten oder Flugzeug-Flugplänen. Der entscheidende Vorteil liegt darin, dass sich die Quantenoptimierung sehr schnell wiederholt ausführen lässt. Wir sind dann in der Lage, alle paar Sekunden die Verkehrslage in einer Millionenstadt neu zu optimieren und zu steuern.« Das führe zu Energieeinsparungen und verbessere den Umweltschutz.

Supercomputer der Zukunft

Eine grundsätzliche Einordnung ist Lippert wichtig: »Quantencomputer werden nicht gebaut, um klassische Hochleistungsrechner zu ersetzen. Sie sind ja auf dem Gebiet der klassischen Arithmetik ziemlich schwach und lassen sich auch nur sehr begrenzt einsetzen. Vielmehr bauen wir sie als Ergänzung, um uns Bereiche zugänglich zu machen, die wir bisher einfach noch nicht rechnen konnten.« Der klassische Supercomputer übernehme auch weiter den Großteil der Aufgaben.

Fragt sich, welche Quantencomputertechnik der CSC bekommt. Qubits lassen sich ja auf unterschiedliche Art erzeugen, zum Beispiel mit Ionenfallen. Dabei werden die geladenen Teilchen in elektrische Felder gesperrt, mit Mikrowellen oder Lasern bestrahlt und so gezielt in verschiedene Zustände gebracht. So entstehen



die Qubits. Die Entscheidung am CSC ist noch nicht gefallen, aber es gibt einen »sehr interessanten Kandidaten«, und dessen Alleinstellungsmerkmal verrät Lippert auch schon: Er kann bei Raumtemperatur betrieben werden. Ein großer Vorteil gegenüber den Quantencomputertypen, die nur bei Temperaturen fast am absoluten Nullpunkt laufen, bei fast minus 273,15 Grad Celsius.

Es dauert noch eine Weile, bis die modulare Architektur im CSC komplettiert ist, aber für Lippert steht jetzt schon fest, dass in diesem Ansatz die Zukunft des Hochleistungsrechnens liegt. »Wir brauchen MSA dringend, um die exponentiell wachsenden Rechenanforderungen im Bereich der Simulation, der digitalen Zwillinge oder groß angelegter KI-Anwendungen bewältigen zu können.« So fänden sich hoffentlich auch Lösungen für die großen Krisen von heute, sei es die Corona-, die Klima- oder die Energiekrise. ●

Sonnenwind-Simulation mit Supercomputern: Das Magnetfeld, das die Erde umgibt (kleiner Punkt links im Bild), blockiert den Sonnenwind, der in einem Bogen um die Erde herumgelenkt wird. Das Wirbelmuster rechts entsteht durch reflektierte Sonnenwindteilchen, die sich mit dem Sonnenwind überlagern.



Der Autor

Andreas Lorenz-Meyer, Jahrgang 1974, wohnt in der Pfalz und arbeitet seit 13 Jahren als freischaffender Journalist mit Schwerpunkt Nachhaltigkeit, Klimakrise, erneuerbare Energien, Digitalisierung. Er veröffentlicht in Tageszeitungen, Fachzeitschriften, Universitäts- und Jugendmagazinen.

andreas.lorenz.meyer@
nachhaltige-zukunft.de