

FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT ZUR FÖRDERUNG DER ANGEWANDTEN FORSCHUNG E. V.
MIT IHREN INSTITUTEN
FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR TECHNO- UND WIRTSCHAFTSMATHEMATIK ITWM
FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR OPTRONIK, SYSTEMTECHNIK UND BILDAUSWERTUNG IOSB
INSTITUTSTEIL ANGEWANDTE SYSTEMTECHNIK AST

KIRCHHOFF-INSTITUT FÜR PHYSIK DER RUPRECHT-KARLS-UNIVERSITÄT HEIDELBERG

JOS QUANTUM GMBH

ENERQUANT: ENERGIEWIRTSCHAFTLICHE FUNDAMENTALMODELLIERUNG MIT QUANTENALGORITHMEN

Abschlussbericht

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor



Offen



UNIVERSITÄT
HEIDELBERG
ZUKUNFT
SEIT 1386

ENERQUANT

Projektnummer: 03EI1025A, 03EI1025B,
03EI1025C

Dr. Pascal Halfmann

Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM
in Kaiserslautern,

Dr. Steve Lenk

Fraunhofer-Institut Für Optronik, Systemtechnik Und Bildauswertung IOSB
Institutsteil Angewandte Systemtechnik AST
In Ilmenau.

Niklas Hegemann

JoS QUANTUM GmbH, Frankfurt,

Prof. Dr. Markus Oberthaler

Kirchhoff-Institut für Physik, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Mit assoziiertem Partner

Prof. Dr. Philipp Hauke

Universität Trento, Italien

Datum: 27.06.2024

Inhalt

1	Übersicht des Projektvorhabens	4
1.1	Aufgabenstellung	4
1.2	Voraussetzungen	6
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens	8
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand	11
1.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	14
2	Projektergebnisse	17
2.1	Teilvorhaben Energiewirtschaftliche Modellierung	17
2.1.1	Lineare und gemischt-ganzzahlige Fundamentalmodelle	17
2.1.2	Qubit-Formulierung des Fundamentalmodells	23
2.1.3	Stochastische Modelle und Szenariogenerierung	35
2.1.4	Evaluation auf Vergleichsarchitekturen	39
2.2	Teilvorhaben Algorithmen für digitale Quantencomputer	42
2.2.1	Formulierung des Knapsack-Problems und Entwicklung von Prototypen	42
2.2.2	Stochastische Faktoren auf Quantencomputer	44
2.2.3	Übertragbarkeit auf Monte-Carlo Simulationen	46
2.2.4	Anbindung der Hardware (aus TV 3) an die Softwareplattform GRND	46
2.3	Teilvorhaben Entwicklung analoger Quantensimulatoren	50
2.3.1	Hamiltonianformalismus	50
2.3.2	Test des Fundamentalmodells auf Quantensimulator und Hardware Entwicklung	52
2.3.3	Quantensimulator mit stochastischen Parametern	56
3	Fortschritte außerhalb des Projektes	58
3.1	Fortschritte im Bereich der Quantenalgorithmen	58
3.2	Fortschritte im Bereich Quantenhardware und –simulatoren für kontinuierliche Variablen	60
3.3	Fortschritte in der Anwendung von Quantencomputing in der Energiewirtschaft	62
4	Nutzen und Verwertbarkeit	65
4.1	Verwertungsplan	65
4.2	Wirtschaftliche Verwertung	66
4.3	Wissenschaftliche Verwertung	72
4.4	Abschlussworkshop	75
5	Veröffentlichung	78
5.1	Publikationen in Peer-Reviewten Journalen	78
5.2	Konferenzbeiträge	79
5.3	Sonstige Veröffentlichungen	80
6	Weitere Referenzen	82

1 Übersicht des Projektvorhabens

1.1 Aufgabenstellung

Die Energiewirtschaft befindet sich in einem tiefgreifenden Transformationsprozess, getrieben durch die Notwendigkeit, erneuerbare Energiequellen effizient zu integrieren und eine stabile Energieversorgung unter schwankenden Bedingungen, sowohl bei der Stromnachfrage als auch beim Energiedargebot der erneuerbaren Energien, zu gewährleisten. Die herkömmlichen Modelle und Algorithmen stoßen hierbei an ihre Grenzen, da sie nicht in der Lage sind, die inhärente Unsicherheit und Komplexität der modernen Energiemärkte adäquat zu handhaben. Zum Beispiel erfordert die Kraftwerkseinsatzplanung mit Dargebot erneuerbarer Energien die Berücksichtigung von unvorhersehbaren Ereignissen wie Wetterbedingungen und technischen Störungen und somit zahlreicher Variablen und Szenarien, was mit klassischen computergestützten Methoden nur begrenzt möglich ist. Es entsteht somit ein dringender Bedarf an fortschrittlicheren Optimierungstechniken, die eine präzisere und schnellere Verarbeitung und Analyse von Daten ermöglichen.

In diesem Kontext bietet Quantencomputing eine vielversprechende Perspektive. Mit seiner potenziell überlegenen Rechenleistung und der einzigartigen Fähigkeit, komplexe stochastische Daten effektiv zu verarbeiten, könnte es bestehende Hindernisse überwinden. Die quantenmechanische Überlagerung von Zuständen ermöglicht es, vielfältige Kombinationen von Eingabedaten simultan zu verarbeiten, was insbesondere bei der Optimierung unter Unsicherheit von großem Vorteil ist. Allerdings ist Quantencomputing selbst noch eine junge Technologie, die gerade zu Beginn von Problemen wie der geringen Anzahl verfügbarer Qubits, hohen Fehlerraten und der Schwierigkeit der Algorithmenentwicklung gekennzeichnet ist. Die Herausforderung liegt daher nicht nur in der Entwicklung neuer Algorithmen, sondern auch in der Anpassung und Modellierung von Energiewirtschaftsproblemen in einer Weise, die die Stärken von Quantencomputern nutzen kann.

Das Projekt „EnerQuant: Energiewirtschaftliche Fundamentalmodellierung mit Quantenalgorithmen“ (kurz: EnerQuant) hat sich zum Ziel gesetzt, das revolutionäre Potential des Quantencomputings für die Energiewirtschaft zu erkunden. Das übergeordnete Ziel des Projekts besteht darin, zu untersuchen, wie Quantencomputertechnologien genutzt werden können, um komplexe und stochastische Optimierungsprobleme, die in der Energiewirtschaft auftreten, effizienter zu lösen. Durch den Einsatz von Quantencomputern und Quantensimulatoren wird angestrebt, signifikante Verbesserungen in der Modellierung und Optimierung von Energiesystemen zu erreichen, insbesondere in Bereichen wie der Lastverteilung, der Vorhersage von Energieproduktion und -bedarf sowie der Optimierung des Kraftwerkseinsatzes.

Das Konsortium hinter EnerQuant vereint führende Akteure aus Wissenschaft und Industrie, die in den Bereichen Quantencomputing, Energiewirtschaftsmodellierung und stochastische Optimierung spezialisiert sind. Dieses interdisziplinäre Team umfasst Forschungseinrichtungen wie die *Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e. V.* mit ihrem *Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM* und dem *Institutsteil Angewandte Systemtechnik des Instituts für Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung IOSB-AST* und das *Kirchhoff-Institut für Physik der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg*, die bereits umfangreiche Erfahrungen in der Grundlagenforschung und angewandten Wissenschaften mitbringen, sowie Industriepartner wie *JoS QUANTUM GmbH*, die Expertise im kommerziellen Einsatz von Quantentechnologien einbringen. Komplettiert wird das Konsortium durch die *Universität Trento* in Italien als assoziierter Partner. Durch die Zusammenstellung dieses Konsortiums ist das Projekt in der Lage, eine umfassende und integrative Herangehensweise an die Herausforderungen der Energiewirtschaft zu verfolgen. Die Partner bringen nicht nur ihre spezifischen

Fachkenntnisse ein, sondern auch ihre unterschiedlichen Perspektiven und Ressourcen, was eine synergetische und innovative Forschungs- und Entwicklungsarbeit ermöglicht. Diese Kollaboration soll sicherstellen, dass die entwickelten Lösungen nicht nur wissenschaftlich fundiert, sondern auch praktisch umsetzbar und an die Bedürfnisse der Industrie angepasst sind.

Zentral für das EnerQuant-Projekt ist die Entwicklung von Algorithmen, die speziell für die Anforderungen der Energiewirtschaft modelliert und auf Quantencomputern sowie Quantensimulatoren implementiert werden können. Das Projekt adressiert dabei sowohl fundamentale wissenschaftliche Fragestellungen als auch angewandte technische Probleme und strebt danach, einen nachhaltigen Einfluss auf die zukünftige Gestaltung von Energiesystemen und deren Management zu nehmen. Die Ergebnisse des Projekts sollen tiefgreifende Einblicke in die Leistungsfähigkeit von Quantentechnologien bieten und demonstrieren, wie diese in einem der kritischsten und komplexesten Bereiche der modernen Infrastruktur – der Energiewirtschaft – eingesetzt werden können. Die erwarteten Erkenntnisse und Entwicklungen werden nicht nur für die beteiligten Partner, sondern für die gesamte Branche von Bedeutung sein, da sie neue Wege zur Effizienzsteigerung und zur Reduzierung von Umweltauswirkungen aufzeigen.

Das Projekt EnerQuant ist strukturiert, um durch eine koordinierte Zusammenarbeit von Experten aus verschiedenen Bereichen ein umfassendes Verständnis und innovative Lösungen zu entwickeln. Im Rahmen des Projekts werden spezifische Modelle der Energiewirtschaft entwickelt, die sich auf gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme konzentrieren und eine umfangreiche stochastische Modellierung beinhalten. Diese Modelle werden dann für die Anwendung auf Quantencomputern und -simulatoren angepasst. Die Entwicklung der Algorithmen erfolgt in enger Abstimmung mit der Erstellung der Modelle, um sicherzustellen, dass die entwickelten Lösungen optimal auf die spezifischen Anforderungen und Charakteristika der Quantentechnologie zugeschnitten sind. Dabei wird zunächst eine Basisversion eines gemischt-ganzzahligen Optimierungsproblems formuliert, das sukzessive erweitert und verfeinert wird, um die komplexe Dynamik des Energiemarktes und die spezifischen Herausforderungen der stochastischen Modellierung zu integrieren. Parallel zur Entwicklung der Algorithmen wird die technische Umsetzung auf Quantensimulatoren vorangetrieben, wobei insbesondere die spezielle Hardware für Quantensimulatoren entwickelt und optimiert wird, um realistische und effiziente Simulationen von Energiesystemen zu ermöglichen. Dies schließt die Entwicklung eines Prototyps ein, der auf ultrakalten Atomen basiert und speziell für die energiewirtschaftliche Modellierung konzipiert ist. Die in diesen Simulatoren verwendeten Algorithmen und Techniken werden schrittweise verfeinert, um eine hohe Genauigkeit und Skalierbarkeit zu erreichen.

Das gesamte Projekt ist darauf ausgerichtet, durch diese innovative Kombination von theoretischer Forschung und praktischer Anwendung nicht nur die wissenschaftlichen Grundlagen zu schaffen, sondern auch konkrete Lösungsansätze für die Energiewirtschaft zu entwickeln und zu testen. Die Ergebnisse dieser Arbeit sollen helfen, den Rahmen für den Einsatz von Quantentechnologien in der Energiewirtschaft zu definieren und die Grundlage für zukünftige Anwendungen und Weiterentwicklungen zu legen. In enger Zusammenarbeit der Projektpartner aus Wissenschaft und Industrie wird so ein grundlegendes Verständnis der Möglichkeiten und Grenzen des Quantencomputings im Kontext der Energiewirtschaft erarbeitet. Das EnerQuant-Projekt wird dadurch zu einem wichtigen Baustein in der Weiterentwicklung von Quantentechnologien und ihrer Anwendung in kritischen Infrastrukturen und trägt langfristig zur Sicherstellung einer nachhaltigen, effizienten und sicheren Energieversorgung bei.

1.2 Voraussetzungen

Das Konsortium hinter EnerQuant vereint führende Akteure aus Wissenschaft und Industrie, die in den Bereichen Quantencomputing, Energiewirtschaftsmodellierung und stochastische Optimierung spezialisiert sind. Dieses interdisziplinäre Team umfasst Forschungseinrichtungen wie die Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. mit ihrem Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM und dem Institutsteil Angewandte Systemtechnik des Instituts für Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung IOSB-AST. Beide Institute verfügen über umfangreiche Erfahrungen in der Grundlagenforschung sowie in der angewandten Wissenschaft und haben in der Vergangenheit bedeutende Beiträge zur Entwicklung fortschrittlicher mathematischer Modelle und Algorithmen für industrielle Anwendungen geleistet. Das Kirchhoff-Institut für Physik der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg ergänzt das Konsortium mit seiner herausragenden Expertise in der Quantenphysik und stochastischen Modellierung, die durch zahlreiche Publikationen und erfolgreiche Forschungsprojekte belegt ist. Die JoS QUANTUM GmbH bringt ihre umfassende Erfahrung im kommerziellen Einsatz von Quantentechnologien ein. Sie haben sich durch innovative Anwendungen in der Finanz- und Energiewirtschaft einen Namen gemacht und sind bekannt für ihre praxisorientierte Herangehensweise und die Entwicklung von Lösungen, die den Marktanforderungen gerecht werden. Durch diese enge Verknüpfung von Forschung und Industrie gewährleistet das Projekt eine praxisnahe Umsetzung der entwickelten Technologien.

Das Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) ist das weltweit größte Institut für Industriemathematik und verfügt über eine starke Expertise in der Entwicklung und Anwendung mathematischer Modelle und Optimierungsalgorithmen in verschiedenen Industriezweigen, einschließlich der Energiewirtschaft. Die Abteilung Finanzmathematik, geleitet von Dr. Andreas Wagner, hat umfangreiche Erfahrung in der Entwicklung von Software-Prototypen und in der Durchführung von Industrie- und Forschungsprojekten im Bereich der Energie- und Finanzwirtschaft. Dr. Wagner hat in seiner Promotion Strompreismodelle entwickelt, die explizit die Einspeisung von Wind- und Solarenergie berücksichtigen und sich mit Gebotsstrategien am Regelenergiemarkt beschäftigen [Wagner2014]. Weiterhin hat die Abteilung bedeutende Beiträge zur Preisgestaltung von Energiewende-Produkten und zur Anwendung von stochastischen Modellen im deutschen Strommarkt geleistet [Hinderks2019a; Hinderks2019b]. Das Competence Center High-Performance Computing (CC-HPC) am ITWM ist führend in der Entwicklung und Optimierung von Software und Hardware für Supercomputer mit heterogenen Architekturen. Es hat Algorithmen für paralleles, skalierbares Deep Learning und Big Data Processing entwickelt und evaluiert [Falcone2006; Boehm2019]. Diese Erfahrungen und Kompetenzen fließen in das Projekt EnerQuant ein, insbesondere in die Benchmarking- und Evaluationsprozesse.

Das Fraunhofer-Institut für Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung mit dem Institutsteil Angewandte Systemtechnik (IOSB-AST) in Ilmenau forscht an Methoden zur optimalen Steuerung und Führung komplexer Systeme. Die Abteilung Energiesysteme, geleitet von Prof. Dr.-Ing. Peter Bretschneider, hat umfassende methodische und technologische Kompetenzen auf den Gebieten der Bedarfsvorhersage, der Einspeisung erneuerbarer Energien, der optimalen Netzbetriebsführung, des Erzeugungsmanagements, der Beschaffungsoptimierung und der Systemintegration von Energiespeichern [Naumann2015; Naumann2018]. Diese Abteilung hat ein eigenes Fundamentalmodell der Energiewirtschaft (FENIA) entwickelt, das im Projekt EnerQuant genutzt wird.

Stefan Klaiber, Leiter der Arbeitsgruppe cross-sektorale Energiesysteme, und Steffi Naumann, spezialisiert auf die mathematische Modellierung komplexer Planungs- und Betriebsführungsprozesse, tragen wesentlich zur Weiterentwicklung des FENIA-Modells bei. Ihre Expertise in der Modellierung von Unsicherheiten und in der mathematischen Optimierung wird genutzt, um das Fundamentalmodell für die Anwendung auf Quantencomputern anzupassen und zu erweitern.

Die bisherigen Vorarbeiten umfassen auch die Entwicklung und Umsetzung stochastischer Optimierungsansätze zur kurzfristigen Einsatzplanung von Wasserkraftwerken unter meteorologischen Unsicherheiten sowie die Simulation koordinierten Markt-Netz-Betriebsführungen unter Berücksichtigung von Prognoseunsicherheiten [Naumann2015; Naumann2018].

Diese umfassenden Vorarbeiten und die Synergien zwischen den beteiligten Fraunhofer-Instituten bilden eine solide Grundlage für die erfolgreichen Fortschritte und Innovationen im Rahmen des Projekts EnerQuant.

Die Universität Heidelberg mit dem assoziiertem Partner Universität Trento, insbesondere die Gruppen von Fred Jendrzejewski und Philipp Hauke, haben bedeutende Vorarbeiten im Bereich der Quantensimulation und der Entwicklung von Quantenalgorithmen geleistet. Ein zentraler Aspekt ihrer Forschung ist die Entwicklung und Anwendung von Quantensimulatoren, insbesondere für die Lösung komplexer Optimierungsprobleme in der Energiewirtschaft.

Fred Jendrzejewski, seit 2018 Emmy-Noether-Gruppenleiter an der Universität Heidelberg, hat in mehreren Projekten bahnbrechende Arbeiten im Bereich der Quantensimulation durchgeführt. Sein Fokus liegt auf der Verwendung ultrakalter Atome zur Quantensimulation grundlegender Vielkörperprobleme, die eine hohe Relevanz für praktische Anwendungen besitzen. In einem Projekt zur Untersuchung des Kondoeffekts wurden einzelne Atome an eine große Wolke gekoppelt, was die Grundlage für die experimentellen Apparaturen bildet, die im aktuellen Projekt genutzt werden sollen. Diese Arbeiten sind essentiell für die Implementierung der gemischt-ganzzahligen Optimierungsprobleme, die für das Fundamentalmodell der Energiewirtschaft relevant sind. Ein Beispiel hierfür ist die Beobachtung des phononischen Lamb-Shifts mit einem synthetischen Vakuum, bei dem unabhängige Gase an eine globale kontinuierliche Variable gekoppelt wurden [Rentrop2016].

Philipp Hauke, zu Projektbeginn Associate Professor an der Universität Trento und seit April 2024 Full Professor, bringt umfassende Expertise im Bereich der Quantenannealing-Algorithmen und numerischen Simulationsmethoden ein. Seine Forschung zur Rolle von Verschränkung in quantenmechanischen Vielteilchensystemen und deren Anwendung auf neuartige Quantentechnologien liefert einen theoretischen Rahmen für die in diesem Projekt zu entwickelnden Anwendungen. In einer Veröffentlichung diskutiert Hauke die Perspektiven des Quantenannealings und untersucht verschiedene experimentelle Plattformen sowie die Herausforderungen und Möglichkeiten zur Überwindung dieser Hürden. Diese Arbeit bietet entscheidende Impulse für die Weiterentwicklung des Projekts EnerQuant [Hauke2019].

Ein konkretes Beispiel für die Synergie zwischen den beiden Forschungsgruppen ist die Demonstration eines skalierbaren Bausteins einer $U(1)$ -Eichtheorie mit kalten atomaren Mischungen. Diese Arbeit zeigt, wie gemischt-ganzzahlige Quantenprobleme auf atomare Mischungen abgebildet werden können und diskutiert die Skalierbarkeit, die für die Analyse praktischer Probleme erforderlich ist [Mil2019].

Hauke hat außerdem eine detaillierte Studie zur aktuellen Forschung an Quantenannealern veröffentlicht, die verschiedene experimentelle Plattformen und die wesentlichen Hürden zur Realisierung praktisch relevanter Technologien untersucht [Hauke2019a]. Eine frühere Arbeit von Hauke präsentiert eine Möglichkeit, allgemeine Ising-Spin-Glas-Modelle auf Quantenannealer mit beschränkter Konnektivität abzubilden, was wichtige Einsichten für die Lösung praktischer Optimierungsprobleme auf realistischen Quantenhardware liefert [Hauke2015].

Ein weiteres bedeutendes Projekt ist die Untersuchung der Rolle von Verschränkung in der Performanz von Quantenannealern. In dieser Arbeit wird aufgezeigt, wie eine Anzahl von Optimierungsproblemen auf Quantencomputern basierend auf gefangenen Ionen übersetzt werden können, und die Rolle der Verschränkung in der Performanz von Quantenannealern wird analysiert [Hauke2015].

Die umfangreichen Vorarbeiten umfassen auch die Entwicklung von Quantencomputeralgorithmen und deren praktische Implementierung. Dies wird in der Vorlesung "Running a Quantum Computer" beschrieben, die von Jendrzewski und Hauke gemeinsam im Sommersemester 2019 an der Universität Heidelberg gehalten wurde [Jendrzewski2019].

Zusammengefasst haben die bisherigen Arbeiten der Universität Heidelberg, insbesondere durch die enge Zusammenarbeit der Gruppen von Jendrzewski und Hauke, eine solide Grundlage geschaffen, auf der die geplanten Entwicklungen im Rahmen des EnerQuant-Projekts aufbauen können. Ihre Expertise in der Quantensimulation, gekoppelt mit der Anwendung dieser Techniken auf praktische Probleme der Energiewirtschaft, stellt einen entscheidenden Vorteil für das Projekt dar und trägt wesentlich zu dessen Erfolgsaussichten bei.

Bei JoS QUANTUM wurden bereits diverse Studien und Positionspapiere für Kunden verfasst, in denen Quantentechnologien und Quantenalgorithmen, sowie deren Einsatzgebiete erklärt und beschrieben wurde. Zusammen mit Kunden hat JoS QUANTUM Algorithmen und Machbarkeitsstudien entwickelt, jedoch unterliegen diese entsprechenden Geheimhaltungspflichten.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das erfolgreiche Management und die Durchführung eines so komplexen und ambitionierten Projekts wie EnerQuant erfordern eine sorgfältige Planung und eine strukturierte Vorgehensweise. Die Planung und der Ablauf des Vorhabens sind darauf ausgerichtet, die gesteckten Ziele durch eine klare Aufteilung in definierte Arbeitspakete und Meilensteine zu erreichen. Jedes Teilvorhaben wurde spezifisch entworfen, um die Kernaspekte des Projekts abzudecken – von der Modellierung der Energiewirtschaft über die Entwicklung von Quantenalgorithmen bis hin zur Realisierung von Quantensimulatoren. Die Fraunhofer-Institute, genauer gesagt das Fraunhofer ITWM übernimmt die Koordination des Gesamtprojekts. Das EnerQuant-Projekt ist durch einen multidisziplinären und integrativen Ansatz gekennzeichnet, bei dem verschiedene Teilvorhaben und Verantwortlichkeiten klar definiert sind, um die anspruchsvollen Ziele des Projekts zu erreichen. Die Teilvorhaben sind entlang der Hauptthemen des Projekts organisiert:

TV1: Energiewirtschaftliche Modellierung: Ziel dieses Teilvorhabens unter Leitung der Fraunhofer-Institute ist es, Formulierungen des Fundamentalmodells in unterschiedlichen Komplexitätsstufen bereitzustellen, die von den Projektpartnern in die Quantensprache übersetzt und mit Hilfe von Quantencomputern gelöst werden können. Nach bisherigem Verständnis stellen gerade die Modelle, die bisher mit klassischen Computern am leichtesten zu lösen sind, in der Quantensprache neue Herausforderungen dar. Andererseits sind offenbar die komplizierteren Modelle mit Binärvariablen mit dem Quantencomputer "einfach" lösbar. Zunächst werden daher die unterschiedlichen Modellierungen gesammelt und aus der Sicht der heutigen Lösbarkeit bewertet (TV 1.1 Lineare und gemischt-ganzzahlige Fundamentalmodelle). Dann wird ihre Umformulierung für Quantencomputer vorbereitet (TV 1.2 Qubit-Formulierung des Fundamentalmodells). Während bereits die Lösung des deterministischen Fundamentalmodells mit Quantencomputern innovativ und erfolgsversprechend ist, so erwarten die Antragsteller einen noch größeren Qualitätsgewinn in der Möglichkeit, tausende Szenarien ins Modell einzubinden, was nach heutigem Stand der Technik selbst mit Hilfe von Parallelisierung nicht in einem akzeptablen Zeitrahmen möglich ist. Dies ist daher Thema des nächsten Arbeitspakets (TV 1.3 Stochastische Modelle und Szenariogenerierung). Um einen fundierten Vergleich von erreichter Qualität und Effizienz herzustellen, wird im letzten Arbeitspaket ein Benchmarking erstellt (TV 1.4 Evaluation auf Vergleichsarchitekturen). Hierbei vergleichen wir die Ergebnisse auf klassischen High-Performance

Computing Systemen u.U. mit reduzierter Dimensionalität bzw. nutzen eine theoretische Evaluation der Performanz für Problemgrößen, die nicht empirisch gemessen werden können. Für einen fairen Vergleich werden auch auf klassischen Systemen Optimierungsmöglichkeiten hinsichtlich unterschiedlicher Hardwareplattformen evaluiert und ggfs. implementiert.

TV2: Algorithmen für Quantencomputing: Unter der Leitung von JoS QUANTUM, konzentriert sich dieses Paket auf die Entwicklung und Integration von Algorithmen für die jeweiligen Komplexitätsstufen des Fundamentalmodells aus TV 1. Dabei wird mit der Darstellung einer einfachen Version des gemischt-ganzzahligen Optimierungsproblems begonnen, als Basis wird dabei das mathematische Knapsackproblem formuliert (TV 2.1) und das Modell über die Projektlaufzeit stetig erweitert. Außerdem wird die Erweiterung um die Stochastischen Parameter geprüft, sowie ein geeigneter Formalismus ausgewählt. In TV 2.2 werden die Simulationen hinzugenommen, die durch TV 1.3 bereitgestellt werden, und in die Prototypen auf Quantensimulatoren und verschiedenen Hardwarelösungen erweitert. Hierbei werden Lösungen auf adiabatischen Quantencomputern (Quantenannealer) entwickelt und es erfolgt ein Mapping auf Gatebasierte Quantencomputer (z.B. IBM, Rigetti, IQM, AQT). Die Verbindung von stochastischer Simulation und zu optimierenden Parametern unter Berücksichtigung vieler Randbedingungen sind Problemstellungen in der Vermögensverwaltung, als auch in der Preisgestaltung von komplexen Finanzprodukten. Es wird in TV 2.3 geprüft inwiefern Erkenntnisse aus der Formulierung der Problemstellung und Performance der Lösungen auf Modelle in der Optionsbewertung, Risikoanalyse und Portfoliooptimierung übertragen werden können. In TV 2.4 wird die in TV 3 entwickelte Hardwarelösung an die Cloudlösung Grundzustand angebunden. Durch das Verfolgen zweier komplementärer Ansätze in TV2 und TV3 sollen Risiken minimiert und optimale Synergien zwischen Hardware-Plattformen erzeugt werden.

TV3: Entwicklung analoger Quantensimulatoren: Das Kirchhoff-Institut für Physik der Universität Heidelberg übernimmt die Entwicklung skalierbarer Quantensimulatoren für die jeweiligen Komplexitätsstufen des Fundamentalmodells aus TV 1. Dieses TV ist komplementär zur Arbeit in TV2, da das Fundamentalmodell hier mit spezialisierter Hardware analysiert wird. Ein unumgänglicher erster Schritt ist hierbei die Übersetzung des Fundamentalmodells auf den Hamiltonschen Formalismus (TV 3.1). Dieser ist die mathematische Grundlage für die Analyse optimaler Quantensimulatoren. Als Startpunkt wird hierfür das Knapsack-Problem genutzt, welches einen ersten Zugang zum Fundamentalmodell darstellt. Von der zeitgleichen Übersetzung des Knapsack-Problems auf Qubit-basierte Quantencomputer innerhalb TV 1.2 und 2.1 erwarten wir gegenseitige Synergien. Der Fokus in dem vorliegenden TV soll besonders darauf liegen, die experimentelle Implementierbarkeit des Problems auf der Basis von ultrakalten Atomen zu analysieren, für welche die Universität Heidelberg jahrelange Erfahrung besitzt. In dieser Plattform eröffnet sich ein neuer erfolgversprechender Ansatz in Form einer Übersetzung der gemischten Variablen auf atomare Bose-Einstein-Kondensate. Ziel dieses TV ist es, die relevanten physikalischen Prozesse zu identifizieren, welche für eine effiziente Quantensimulation benötigt werden. Diese Analyse erlaubt uns auch eine vergleichende Machbarkeitsstudie mit gefangenen Ionen, welche eine alternative hochkontrollierte Plattform zur Quantensimulation darstellen. Aufbauend auf unsere Analyse werden wir die existierenden Maschinen anpassen und erste Simulationen testen (TV 3.2). Dieses Arbeitspaket zielt somit auf eine Fallstudie der technischen Machbarkeit einer effizienten Quantensimulation des Fundamentalmodells ab. Spezifisch werden wir den Ansatz des Variationellen Eigensolvers mithilfe großer Bose-Einstein-Kondensate mit kontrolliertem Spin-Freiheitsgrad implementieren. Sowohl für den Algorithmus als auch die Hardware wurden mehrere erfolgreiche Proof-Of-Concepts veröffentlicht. Die Kombination beider im Kontext dieses Projekts ist somit mit geringen Risiken verbunden. Im letzten Schritt wollen wir dann unser theoretisches und technisches Know-How nutzen, um zunehmend komplexere Formulierungen des

Fundamentalmodells zu studieren (TV 3.3). Ziel ist die Entwicklung einer technologischen Roadmap für robuste Quantensimulatoren des Fundamentalmodells in Regimes, welche mit klassischen Algorithmen nicht zugänglich sind. Eine besondere Herausforderung stellt hierbei die Berücksichtigung stochastischer Prozesse im Optimierungsproblem dar (siehe TV 1.3 und 2.1), wie sie für realistische Anwendungen des Fundamentalmodells von besonderem Interesse sind. In diesem Arbeitspaket soll insbesondere geprüft werden, wie ein geeigneter Einsatz von Quantenparallelismus die Stochastik effizient implementieren kann. Im Verlauf des Projektes sollen experimentelle Fortschritte kontinuierlich gegen klassische (siehe TV 1.4) und Qubit-basierte (siehe TV 2.1 und TV 2.2) Lösungen verglichen werden.

Das EnerQuant-Projekt ist auf eine Laufzeit von drei Jahren ausgelegt, beginnend am 1. September 2020. Ein Zeitplan findet sich in Abbildung 1. Der Zeitplan ist in Quartale unterteilt, um eine effektive Überwachung und Steuerung der Projektfortschritte zu ermöglichen.

Meilensteine dienen als wichtige Kontrollpunkte, um den Fortschritt des Projekts zu bewerten und bei Bedarf Anpassungen vorzunehmen. Für das EnerQuant-Projekt wurden mehrere entscheidende Meilensteine definiert:

Teilvorhaben		Jahr 1				Jahr 2				Jahr 3				
		Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	
TV 1:	Energiewirtschaftliche Modellierung													
1.0	Projektkoordination und -management	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	
1.1	Lineare und gemischt-ganzzahlige Fundamentalmodelle	■	■			■	■			■	■			
1.2	Qubit-Formulierung des Fundamentalmodells		■	■			■	■			■	■		
1.3	Stochastische Modelle und Szenariogenerierung			■	■			■	■			■	■	
1.4	Evaluation auf Vergleichsarchitekturen				■	■			■	■			■	■
TV 2:	Algorithmen für digitale QC													
2.0	Projektmanagement	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	
2.1	Formulierung des Knapsack-Problems und Entwicklung von Prototypen	■	■	■	■	■	■	■	■					
2.2	Stochastische Faktoren auf Quantencomputer							■	■	■	■			
2.3	Übertragbarkeit auf Monte-Carlo Simulationen										■	■	■	
2.4	Anbindung der Hardware (aus TV 3) an die Softwareplattform GRND								■	■	■	■	■	
TV 3:	Entwicklung analoger Quantensimulatoren													
3.0	Projektmanagement	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	
3.1	Hamiltonianformalismus	■	■	■	■	■								
3.2	Test des Fundamentalmodells auf Quantensimulator			■	■	■	■	■						
3.3	Quantensimulator mit stochastischen Parametern					■	■	■	■	■	■	■	■	

Abbildung 1: Eine Auflistung der Arbeitspakete aller Teilvorhaben als Balkenplan. Der Übersichtlichkeit halber ist die Zeit in Quartale aufgelöst.

- **Meilenstein 1 (Q4):** Erstellung eines Whitepapers, das eine gemeinsame Sprachbasis schafft und öffentlich zugänglich ist, um die Projektziele und -methoden zu verbreiten.
- **Meilenstein 2 (Q6):** Eine erste Version des Fundamentalmodells in klassischer und Qubit-Formulierung sowie im Hamiltonschen Formalismus, inklusive abgeschlossenem Benchmarking auf klassischen und Quantencomputern.
- **Meilenstein 3 (Q10):** Vollständige Version des gemischt-ganzzahligen Fundamentalmodells in allen Formulierungen mit umfassendem Benchmarking.
- **Meilenstein 4 (Q12):** Abschluss des stochastischen, gemischt-ganzzahligen Fundamentalmodells in allen Formulierungen und abschließendem Benchmarking.

Das Projekt soll auch zum allgemeinen Verständnis der Quantentechnologie beitragen. Hierzu ist u.a. geplant, das Projekt innerhalb des Forschungsnetzwerks Energiesystemanalyse vorzustellen. Außerdem soll ein eigener Workshop zum Thema "Quantentechnologie in der Energiewirtschaft" organisiert werden. Auch eine gemeinsame Projekt-Webseite soll einerseits Interessierte mit Informationen versorgen, andererseits schon im Hinblick auf eine wirtschaftliche Verwertung nach Projektende potenzielle Kunden aufmerksam machen.

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Dieses innovative Projekt kombiniert den Anwendungsfall des Fundamentalmodells in der Energiewirtschaft mit der neuartigen Technologie Quantencomputing mithilfe von Quantenalgorithmien zur Lösung von Optimierungsproblemen. Daher wird die Übersicht über den wissenschaftlichen und technischen Stand auf eben diese drei Felder aufgeteilt. Die eigenen Vorarbeiten wurden bereits in Kapitel 1.2 dargestellt.

Fundamentalmodelle in der Energiewirtschaft

Als Fundamentalmodell (auch Systemmarktmodell oder Elektrizitätsmarktmodell) bezeichnet man ein Optimierungsproblem, mit dem der kostenminimale Kraftwerkseinsatz zur Deckung einer gegebenen Nachfrage bestimmt wird. In seiner einfachsten Form wird das Fundamentalmodell auch als Merit-Order-Modell bezeichnet: Die betrachteten Kraftwerke werden nach ihren variablen Kosten aufsteigend sortiert und dann der Reihe nach mit ihrer jeweiligen Maximalkapazität eingesetzt, bis die gegebene Nachfrage vollständig gedeckt ist. Damit hat das Merit-Order-Problem die Struktur des bekannten Knapsack-Problems. Die Kosten des "als letztes eingesetzten" Kraftwerks werden auch als Grenz- oder marginale Kosten bezeichnet und geben den Strompreis an, mit dem kostendeckend produziert werden kann. Das Merit-Order-Modell kann als lineares Optimierungsproblem formuliert werden und ist mit zur Verfügung stehenden klassischen Verfahren relativ einfach zu lösen, zumindest in der deterministischen Form. Es wird komplexer, wenn man Speicher bei der Modellierung berücksichtigt, da dadurch aufeinanderfolgende Zeitschritte miteinander verknüpft werden müssen. Der Komplexitätsgrad steigt weiter, wenn bei den Kraftwerken On-/Off-Zustände berücksichtigt werden, wodurch dann An- und Abfahrbedingungen, Mindestbetriebs- und Mindeststillstandszeiten, Rampen, Mindestkapazitäten etc. modelliert werden können. Das entstehende Optimierungsproblem, auch als Unit Commitment Modell bezeichnet, ist dann nicht mehr kontinuierlich, sondern gemischt-ganzzahlig, wobei sich die ganzzahligen Variablen auf Binärvariablen beschränken. Die Kraftwerkseinsatzplanung mit diesen Restriktionen ist ein NP-schweres Optimierungsproblem [Bendotti2018]. Weitere Treiber des Komplexitätsgrads sind die betrachtete Granularität (Anzahl Kraftwerke in Deutschland bzw. ganz Europa, stündliche Auflösung bei einem Zeithorizont von einem oder mehreren Jahren) sowie die Stochastik (verschiedene Szenarien für Nachfrage und Dargebot, Kraftwerksausfälle etc.). In der Praxis sind daher Vereinfachungen z.B. in Form von Aggregationen oder der Einsatz

von Heuristiken oder einer rollierenden Planung üblich. Bei den Szenarien, die typischerweise durch eine Monte-Carlo-Simulation erzeugt werden, kommt z.B. eine Szenarienreduktion zum Einsatz [Growe-Kuska2003]. Ein performanter Lösungsansatz würde es hingegen ermöglichen, das Problem exakt zu lösen und eine deutliche größere Anzahl an Szenarien als momentan möglich zu berücksichtigen.

Quantencomputing

Die Quanteninformatik unterscheidet sich grundlegend von der klassischen Informatik, da sie kontraintuitive Effekte der Quantenmechanik ausnutzt. Zum Beispiel können sich quantenmechanische Systeme in einer Überlagerung verschiedener Zustände befinden, was es ermöglicht, Quantenalgorithmen zu entwickeln, die sich durch eine massive Parallelisierung auszeichnen. Zum Zeitpunkt der Beobachtung des Systems wird die Überlagerung zerstört, wobei das Ergebnis der Beobachtung rein stochastisch ist. Lediglich seine Wahrscheinlichkeitsverteilung wird durch die Schrödingergleichung vorhergesagt und von einem Quantencomputer kontrolliert. Dadurch werden Quantenalgorithmen anfällig für Störungen, welche die Überlagerung ungewollt zerstören können. Dies macht technische Lösungen erforderlich, die die Grenzen des Machbaren vorwärtstreiben.

In der digitalen Quanteninformatik werden die Bits der klassischen Informatik, welche immer 0 oder 1 sind, durch Qubits ersetzt. Jeder einzelne Qubit kann zum Zeitpunkt der Rechnung in einer Überlagerung der beiden Zustände 0 und 1 sein. Eine geeignete Verschränkung von Qubits führt dann zu der bereits erwähnten Parallelisierung der Berechnungen. Derzeit existieren verschiedene Technologien wie gefangene Ionen, supraleitende Qubits oder kalte Atome in der frühen Anwendungsphase.

Dabei kann auf einige Systeme per API zugegriffen werden, um Berechnungen durchzuführen. Die zum Projektbeginn über Cloud zugänglichen Geräte von IBM und Rigetti Computing verfügen über $n=5$ bis 20 Qubits¹. Da sich die abbildbaren quantenmechanischen Zustände mit jedem zusätzlichen Qubit verdoppeln, wird erwartet, dass störungsfreie, universelle Quantencomputer mit 40 - 50 Qubits in der Lage sein sollten, die Leistungsfähigkeit klassischer Rechner zu übertreffen. Allerdings macht die Anfälligkeit auf externe Störungen die Entwicklung solcher universeller Quantencomputer technologisch extrem anspruchsvoll. Somit muss für die nächsten Jahre die Entwicklung der Quantenalgorithmen auf Quantencomputern die Limitierungen der Hardware in Form von recht flachen Schaltkreisen und beschränkter Qubitanzahl in Kauf nehmen [Preskill2018].

Neben den Möglichkeiten eines universellen Quantencomputers gibt es Hardware, die auf spezielle Anwendungen ausgelegt ist. In Annealern werden hierfür klassische Optimierungsprobleme, welche in der Physik als Isingmodelle bekannt sind, von Bits in Qubits übersetzt [Lucas2014]. Durch langsame Überführung des Systems von einer gut bekannten Anfangssituation von Parametern in komplexe Endzustände wird das Problem adiabatisch gelöst. Durch Effekte wie Quantentunneln könnten sich dabei erhebliche Geschwindigkeitsvorteile für große und komplexe Optimierungsprobleme ergeben [Hauke2020].

Eine alternative Plattform, die sich durch exzellente Quanteneigenschaften auszeichnet, sind ultrakalte Atome. Dies sind Gase, welche gut von der Umwelt isoliert sind und nahe absolut Null gekühlt werden. Bei solch niedrigen Temperaturen haben Quanteneffekte eine große Rolle auf die Eigenschaften der Gaswolke. Heutzutage sind sie eine wohl etablierte Plattform für die Quantensimulation von komplexen Problemen aus allen Bereichen der Physik wie der Kosmologie oder der Festkörperphysik [Bloch2012]. Eine der größten Herausforderungen für die Nutzung dieser skalierbaren Quantensimulatoren liegt in der Übersetzung des ursprünglichen Problems in die Sprache des hamiltonischen Systems.

¹ <https://quantum.ibm.com/> und <https://qcs.rigetti.com/qpus>.

tonschen Formalismus, welcher für diese Quantensimulatoren benötigt wird. Diese Übersetzungsarbeit kann durch die Kompetenz des Konsortiums hervorragend geleistet werden.

Optimierung und Quantencomputing

Bei dem in diesem Projekt betrachteten Unit Commitment Problem handelt es sich um ein NP-schweres Optimierungsproblem, was z.B. durch Rückführung auf das Knapsack-Problem gezeigt werden kann. Letzteres gehört zur Liste der 21 klassischen NP-vollständigen Probleme von Richard Karp (1972). Nach heutigem Kenntnisstand wird vermutet, dass NP-vollständige Probleme nicht in polynomialer Zeit lösbar sind, jedoch gibt es dafür noch keinen Beweis. Vielmehr ist diese Frage eines der sieben Millenniums-probleme. Bislang werden NP-vollständige Probleme entweder mit exakten exponentiellen Verfahren oder approximativ mit sogenannten Heuristiken bzw. Meta-Heuristiken gelöst.

Bekanntere exakte Lösungsstrategien, also Strategien, die beweisbar eine optimale Lösung finden, sind z.B. Branch & Bound oder Branch & Cut Verfahren. Ihr großer Nachteil ist die typischerweise lange Laufzeit, die hauptsächlich für den Nachweis der Optimalität benötigt wird. Heuristische Verfahren finden in der Regel schnell sehr gute Lösungen, allerdings ist deren Optimalität nicht nachweisbar. Prominente Beispiele sind Evolutionäre Verfahren oder Genetische Verfahren. Insgesamt wurde in den letzten Jahrzehnten eine Vielzahl von deterministischen und stochastischen Verfahren zur Lösung des Unit Commitment Problems vorgeschlagen [Saravanan2013].

Ein Anwendungsbereich für Quantencomputer sind kombinatorische Optimierungsprobleme. So lässt sich z.B. zeigen, dass das Knapsack-Problem mit einem Adiabatischen Quantencomputer lösbar ist [Coffey2017, Lucas2014]. Quanten-Architekturen eröffnen also ganz neue Möglichkeiten, das Unit Commitment Problem zu lösen. Binärvariablen lassen sich direkt in Qubits übersetzen, wobei Nebenbedingungen als Zusatzterme der Zielfunktion formuliert werden. Die Parallelisierung des Problems beruht dann auf einer effizienten Verschränkung der Qubits, sodass nichtklassische Korrelationen eine schnellere Optimierung erlauben.

Eine besondere offene Herausforderung stellen kontinuierliche Variablen dar, die im Falle des UC Problems z.B. für die Erzeugungsmenge benötigt werden. Während konvexe kontinuierliche Optimierungsprobleme als leicht gelten und hierfür performante Algorithmen wie das Simplex-Verfahren oder Innere-Punkte-Verfahren existieren, sind Optimierungsprobleme mit Nicht-Konvexitäten oder diskreten Variablen nicht mehr leicht lösbar. Für Quantencomputer gibt es zahlreiche Beispiele für die Behandlung von Optimierungsproblemen mit ganzzahligen Variablen, während kontinuierliche Variablen neuartige Lösungen verlangen [Adesso2014]. Für universelle, qubit-basierte Quantencomputer könnte ein erster Ansatz in einer Diskretisierung der kontinuierlichen Variablen liegen, während sie in kalten Atomen durch Bose-Einstein-Kondensate dargestellt werden könnten.

Abgrenzung zu weiteren Förderprojekten

Auf der Seite <https://www.enargus.de> wurde nach "Systemmodell", "Fundamentalmodell", "Quantencomputing", "Quantenalgorithmien" und "Quantentechnologie" gesucht. Nur zu den ersten beiden Begriffen finden sich Treffer in der Datenbank. Diese sind im Folgenden aufgeführt. Sie sind absteigend nach Relevanz sortiert.

- Verbundvorhaben OEB-EnSys - MINLP-Optimierung des Entwurfs und Betriebs eines komplexen Energiesystems, Teilvorhaben: Entwicklung von parallelen Dekompositionsverfahren zur globalen Optimierung von großen strukturierten Energiesystemmodellen unter Unsicherheiten (BMW i 2017-2020)

Abgrenzung: Das Projekt hat einen ähnlichen Fokus wie das vorliegende Projekt, begegnet der Komplexität des Problems jedoch mit parallelen Dekompositionsverfahren.

- **Verbundvorhaben METIS:** Entwicklung von neuen interdisziplinären methodischen und analytischen Verfahren (Komplexitätsmanagement, räumliche Aggregation, zeitliche Aggregation, verbesserte Rechennutzung oder Nutzung neuer Optimierungsverfahren) zur Implementierung der Komplexität der Energiewende in Energiesystemmodelle (BMW i 2018-2021)
Abgrenzung: Das Projekt fokussiert ebenfalls auf Fundamentalmodelle (Energie Marktmodelle), versucht jedoch mithilfe von Aggregations- und Reduktionsmethoden die Recheneffizienz zu erhöhen. Im vorliegenden Projekt soll dies stattdessen mithilfe der Quantentechnologie erzielt werden.
- **Verbundvorhaben WeatherAggReOpt:** Entwicklung von Aggregations- und Reduktionsmethoden zur Implementierung disaggregierter Einspeiseprofile erneuerbarer Energien in Energiesystemmodellen (BMW i 2017-2020)
Abgrenzung: Das Projekt versucht mithilfe von Aggregations- und Reduktionsmethoden der stochastischen Einflussgrößen die Recheneffizienz zu erhöhen. Im vorliegenden Projekt soll dies stattdessen mithilfe der Quantentechnologie erzielt werden.
- **Verbundvorhaben ProKoMo -** Bessere Preisprognosen in der Energiewirtschaft durch Kombination von fundamentalen und stochastischen Modellen, Teilvorhaben: Stochastifizierung sowie Fundamentalmarktmodellierung (BMW i, 2018-2021)
Abgrenzung: Das Projekt betrachtet auch ein stochastisches Fundamentalmodell, zielt jedoch nicht auf eine neue Technologie zur Lösung des Problems ab.
- **Verbundvorhaben: UNSEEN:** Bewertung der Unsicherheiten in linear optimierenden Energiesystem-Modellen unter Zuhilfenahme Neuronaler Netze, Teilvorhaben: Design und Training Neuronaler Netze zur Beschleunigung von Optimierungsmethoden für Energiesystemmodelle (BMW i 2019-2022)
Abgrenzung: Das Projekt untersucht die Anwendung von Methoden der künstlichen Intelligenz in der Energiesystemmodellierung. Die nachgelagerten Optimierungsalgorithmen werden jedoch klassisch und nicht mit Quantenalgorithmen gelöst.
- **FOCCSI:** Korrektur- und Kombinationsverfahren für Prognosen zur Verbesserung der Systemintegration erneuerbarer Energien (BMW i, 2018-2020)
Abgrenzung: Das Projekt zielt auf verbesserte Prognosen insbesondere von erneuerbaren Energien ab, jedoch nicht auf eine disruptive Technologie zur Lösung des Gesamtsystemmodells.
- **MODEX-Net -** Modellvergleich von Stromnetzmodellen im europäischen Kontext (BMW i, 2019-2021)
Abgrenzung: Das Projekt zielt auf Modelle der Übertragungsnetze ab, die im Fundamentalmodell typischerweise vereinfacht dargestellt bzw. ignoriert werden. Dies liegt zum einen an der weiter steigenden Komplexität des Modells bei der Berücksichtigung von Netzrestriktionen, zum anderen aber auch daran, dass das Fundamentalmodell eher die Marktsicht einnimmt, die keine Übertragungsrestriktionen kennt. Daher ist eine genaue Abbildung des Netzes nicht nötig.

Patente

Nach unserem Kenntnisstand existierten zu Beginn des Projektes keine entgegenstehenden Schutzrechte. Recherchen in Patentdatenbanken, v.a. EspaceNet, haben keinerlei Hinweise auf entgegenstehende Schutzrechte ergeben.

1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Projektpartner haben während des Projekts umfassende Kooperationen mit verschiedenen nationalen und internationalen Partnern gepflegt und weiterentwickelt. Diese Partnerschaften haben nicht nur den Austausch von Wissen und Technologien gefördert, sondern auch entscheidend zur erfolgreichen Durchführung des Projekts beigetragen. Wir gehen hier auf die wichtigsten Verbindungen ein, weitere Kooperationen, insbesondere hinsichtlich der Verwertung, finden sich in Kapitel 4.

IOSB-AST

Das Fraunhofer IOSB-AST hat mehrere bedeutende Kooperationen initiiert und gepflegt:

- **EU-gefördertes Projekt „Next level Quantum information processing for Science and Technology“ (NeQST):** Dieses Projekt umfasst sieben Partner und zielt darauf ab, die nächste Stufe der Quanteninformationsverarbeitung für Wissenschaft und Technologie zu erreichen. Weitere Informationen sind auf der Projektwebsite <https://neqst-he.eu> verfügbar.
- **TAB-gefördertes Projekt „Quantum Hub Thüringen“:** In diesem Projekt, das elf Partner umfasst, werden innovative Ansätze und Technologien im Bereich der Quanteninformation entwickelt und erforscht. Weitere Details finden sich auf der Website <https://quantum-hub.de/>.
- **Partnerschaft mit dem Honda Research Institute Europe, Offenbach:** Diese Kooperation zielt darauf ab, fortschrittliche Technologien und Lösungen im Bereich der Quantenforschung zu entwickeln.
- **BMWK-gefördertes Projekt ALEC:** In diesem Projekt wurde das vom IOSB-AST verwendete Optimierungsproblem entwickelt und erfolgreich am Flughafen Erfurt-Weimar getestet. Diese Zusammenarbeit stärkt die Anwendung und Validierung der entwickelten Technologien in realen Szenarien.

Fraunhofer ITWM

Das Fraunhofer ITWM hat das Projekt genutzt, um sich mit zahlreichen Akteuren im Energiebereich und der Quantencomputing-Community zu vernetzen. Besonders erwähnenswert ist die Kooperation mit folgenden Institutionen:

- **University of Strathclyde, Glasgow, und University of Durham:** Diese Zusammenarbeit hat zur Veröffentlichung eines gemeinsamen Papers geführt, welches wichtige wissenschaftliche Erkenntnisse im Bereich der Quantenoptimierung und der Energiewirtschaft beinhaltet.
- **Jülich Supercomputing Centre (JSC):** Um das Benchmarking auf Quantencomputern durchzuführen, hat das Fraunhofer ITWM einen Antrag auf Rechenzeit auf dem D-Wave Quantenannealer (D-Wave Advantage™ System JUPSI) gestellt. Dieser Antrag wurde im Rahmen des Jülich UNified Infrastructure for Quantum computing (JUNIQU) Projekts unter dem Namen "Robust optimization for the Unit Commitment Problem" bewilligt. Das Jülich Supercomputing Centre ist ein führendes Zentrum für Hochleistungsrechnen und Quantencomputing, was die Durchführung hochkomplexer Berechnungen ermöglicht.

JoS QUANTUM GmbH

Hinsichtlich weiterer Zusammenarbeiten, insbesondere bezüglich Kunden, wird auf das Geschäftsgeheimnis verwiesen.

Universität Heidelberg

Die Universität Heidelberg und assoziierter Partner Universität Trento haben mehrere bedeutende kooperative Projekte initiiert, angestoßen auch dank der Beteiligung an Enerquant und der dadurch generierten wissenschaftlichen Partnerschaften:

- **EU-gefördertes Projekt „Next level Quantum information processing for Science and Technology“ (NeQST):** Dieses Projekt wird von der Universität Trento koordiniert und umfasst neben IOSB-AST fünf weitere Partner. Ziel ist es, auf qudits-basierte Quanteninformationsverarbeitung zu einer reifen Technologie für Anwendungen in Wissenschaft und Industrie zu entwickeln. Weitere Informationen sind auf der Projektwebsite <https://neqst-he.eu> verfügbar.
- **EU-gefördertes Projekt „ From DYNAMICAL Gauge Fields to Lattice Gauge Theory“ (DYNAMITE):** An diesem Quantero-Projekt nehmen neben den Universitä-

ten Heidelberg und Trento vier weitere europäische Partner teil. Ziel ist es, auf kalten Atomen basierte Quantensimulatoren für grundlegende Fragestellungen in der Hochenergiephysik und kondensierten Materie zu entwickeln. Weitere Informationen sind auf der Projektwebsite <https://dynamite-project.eu/> verfügbar.

Übersicht des Projektvorhabens

Es wird hiermit klargestellt, dass es sich bei sämtlichen Kooperationen um keine Doppelförderung handelt, sondern um gezielte Partnerschaften, die den wissenschaftlichen Fortschritt und die technologische Entwicklung im Projekt EnerQuant unterstützen und fördern.

2 Projektergebnisse

Die Darstellung der Projektergebnisse erfolgt nach der Gliederung des Projektplans, siehe Kapitel 1.3. Dabei gehen wir auf die einzelnen Teilvorhaben (TV) ein und die jeweiligen Arbeitspakete in den TVs. Das Projekt besteht aus den folgenden Teilvorhaben:

- TV1: Energiewirtschaftliche Modellierung
- TV2: Algorithmen für Quantencomputing
- TV3: Entwicklung analoger Quantensimulatoren

2.1 Teilvorhaben Energiewirtschaftliche Modellierung

2.1.1 Lineare und gemischt-ganzzahlige Fundamentalmodelle

Das Ziel des Arbeitspakets 1.1 besteht darin, die grundlegenden Formulierungen des Fundamentalmodells für die Energiewirtschaft in unterschiedlichen Komplexitätsstufen zu entwickeln und bereitzustellen. Diese Modelle dienen als Basis für die weiteren Arbeiten im Projekt, insbesondere für die Übersetzung in die Sprache der Quantenmechanik und die anschließende Lösung mithilfe von Quantencomputern. Die Arbeit umfasst die Sammlung und Bewertung verschiedener Modellierungsansätze, die sich durch ihre heutige Lösbarkeit mit klassischen Computern unterscheiden. Ein Fokus liegt auf der Entwicklung von linearen und gemischt-ganzzahligen Modellen, die sowohl deterministische als auch stochastische Einflüsse berücksichtigen. Diese Modelle sollen später auf Quantencomputern gelöst werden, um die Leistungsfähigkeit dieser neuen Technologie im Vergleich zu klassischen Verfahren zu evaluieren.

Als Fundamentalmodell der Energiewirtschaft wird das sogenannte Unit Commitment Problem (UCP) gesehen. Das UCP stellt ein zentrales Optimierungsproblem im Energiesektor dar. Es zielt darauf ab, den kosteneffektivsten Einsatzplan für Stromerzeugungseinheiten zu bestimmen, um die Nachfrage über einen festgelegten Zeithorizont zu decken. Die Optimierung dieses Plans ist wichtig für eine nicht nur zuverlässige und effiziente, sondern auch kostengünstige Energieproduktion. Die Aufgabe ist jedoch alles andere als trivial, da eine Vielzahl komplexer Faktoren berücksichtigt werden muss, darunter die Variabilität der Nachfrage, die betrieblichen Beschränkungen der Kraftwerke, die Brennstoffkosten und zunehmend auch die Integration erneuerbarer Energiequellen.

Die Dringlichkeit und Komplexität des UCP wurden durch jüngste globale Ereignisse, wie die Ukraine-Krise 2022, noch verstärkt. Diese Krise verdeutlichte die Fragilität und Sensibilität der Energiemärkte und zeigte, wie geopolitische Spannungen schnell die Energielieferketten beeinflussen können, was zu Schwankungen in der Verfügbarkeit und den Kosten von Brennstoffen führt. Solche Dynamiken machen die Landschaft der Energieproduktion volatil und unterstreichen die Bedeutung eines flexiblen und anpassungsfähigen Systems zur Planung der Stromerzeugung, das sich schnell ändernden Bedingungen anpassen und gleichzeitig die Kosten minimieren kann.

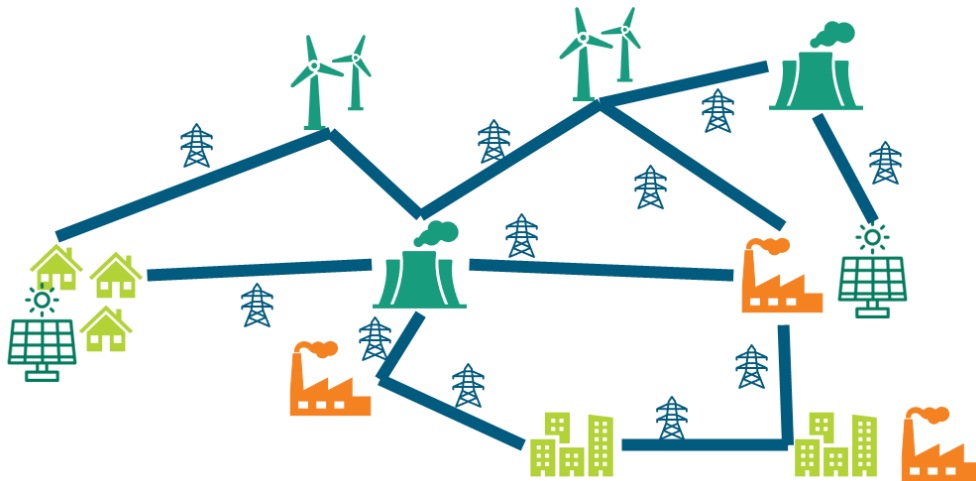


Abbildung 2: Typisches Stromnetz mit Erzeugern (Kohle, Wind, Sonne) und Verbrauchern (Städte, Industriegebiete) und deren Verbindungen über Stromleitungen. Mit dem Aufkommen der erneuerbaren Energien entstehen auch Prosumer, zum Beispiel Häuser, die sowohl Strom verbrauchen als auch mit PV produzieren.

Darüber hinaus führt der Anstieg der erneuerbaren Energien zu neuen Dimensionen der Komplexität und Unvorhersehbarkeit im UCP. Erneuerbare Energiequellen wie Wind- und Solarenergie sind von Natur aus intermittierend, was zu einer Diskrepanz zwischen Angebot und Nachfrage führen kann, die ohne Vorwarnung auftritt. Da der Anteil erneuerbarer Energien im Energiemix weiterwächst, getrieben von dem globalen Bestreben nach Nachhaltigkeit und reduzierten Kohlenstoffemissionen, wird die Aufgabe, diese Quellen effektiv in das Stromnetz zu integrieren und gleichzeitig die Betriebseffizienz und Kosteneffektivität zu wahren, zunehmend anspruchsvoller.

Das UCP zielt darauf ab, den Einsatzplan der Stromerzeugungseinheiten so zu optimieren, dass die prognostizierte Nachfrage effizient gedeckt wird. Dies bedeutet, zu entscheiden, welche Kraftwerke betrieben werden sollen, wann sie betrieben werden sollen und mit welcher Leistung, unter Berücksichtigung verschiedener technischer und wirtschaftlicher Einschränkungen. Es gibt zahlreiche Varianten des UCP mit unterschiedlichen Zielen, Einschränkungen oder Meta-Anforderungen [Pradhy2004]. Im Allgemeinen umfasst ein UCP die folgenden Elemente:

- **Ein festgelegter Planungszeitraum**, typischerweise 24 Stunden, der in 1-Stunden- oder 15-Minuten-Schritte unterteilt ist, für den die Stromplanung bestimmt werden muss.
- **Ein Lastprofil (Nachfrage)** für den bevorstehenden Zeitraum, das erfüllt werden muss. Für jeden Zeitschritt des Planungszeitraums wird die Nachfrage spezifiziert. Da die Nachfrage nicht im Voraus festgelegt werden kann, wird üblicherweise ein prognostiziertes Profil (oder eine Reihe von Lastszenarien) verwendet.
- **Eine Menge an Kraftwerken oder Stromerzeugungseinheiten** mit ihren Produktionskapazitäten. Grob lassen sich drei verschiedene Typen unterscheiden: thermische Einheiten (wie Kohle-, Gas- und Kernkraftwerke, die eine Art Brennstoff zur Stromerzeugung verbrennen), Wasserkraftwerke und erneuerbare Energieeinheiten (wie Windparks und Solaranlagen). Alle haben unterschiedliche Merkmale, während die Leistung erneuerbarer Energieeinheiten von der Verfügbarkeit von Wind oder Sonnenlicht abhängt und daher nicht vollständig steuerbar ist. Thermische Einheiten können an die Energienachfrage angepasst werden, unterliegen jedoch komplexen technischen Beschränkungen (z. B. Mindestlauf- und Abschaltzeiten: Wenn sie ein- oder ausgeschaltet werden, müssen sie für eine bestimmte Zeit ein- oder ausgeschaltet bleiben).

- **Das zugrunde liegende Energienetzwerk**, das die Produktions- und Verbrauchsknoten sowie die dazwischen liegenden Stromleitungen und deren Kapazitäten spezifiziert.

Dies führt zu einem Optimierungsproblem mit den folgenden Merkmalen:

- **Entscheidungsvariablen**: Sie spezifizieren den Produktionsstatus (ein/aus, ein-/ausgeschaltet) der Energieeinheiten zu jedem Zeitschritt, die Produktionsmenge der Energieeinheiten zu jedem Zeitschritt und den Energiefluss durch das Energienetzwerk.
- **Ziel**: Minimierung der Produktionskosten (einschließlich fixer Kostenkomponenten und variabler Komponenten, die von der produzierten Energiemenge abhängen), Maximierung des Profits, Minimierung der Kohlenstoffemissionen, unter anderen.
- **Einschränkungen**: Erfüllung des Lastprofils, Einhaltung der Netzbeschränkungen und der Beschränkungen der verschiedenen Energieeinheiten.

Das Unit Commitment Problem ist somit ein zentrales Element der Optimierung in der Energiewirtschaft, das sowohl technische als auch wirtschaftliche Aspekte vereint, um eine effiziente und zuverlässige Stromversorgung zu gewährleisten.

Zur Lösung des komplexen Unit Commitment Problems (UCP) wird oft eine vereinfachte Darstellung verwendet, um die Berechnungen und die Entscheidungsfindung zu erleichtern. Ein häufig verwendeter Ansatz zur Vereinfachung ist die Merit-Order-Darstellung. Diese Methode sortiert die verfügbaren Stromerzeugungseinheiten nach ihren Grenzkosten, also den Kosten, die bei der Produktion einer zusätzlichen Einheit Energie entstehen. Die Merit-Order-Darstellung ist besonders nützlich, um schnell einen Überblick über die kosteneffizienteste Reihenfolge der Einsatzplanung zu erhalten und kann wie folgt beschrieben werden:

1. **Sortierung nach Grenzkosten**: Die verfügbaren Kraftwerke werden nach ihren Grenzkosten sortiert. Erneuerbare Energiequellen wie Wind und Solarenergie haben in der Regel die niedrigsten Grenzkosten, da sie keine Brennstoffkosten verursachen. Darauf folgen Kernkraftwerke, Kohlekraftwerke und schließlich Gaskraftwerke, die oft die höchsten Grenzkosten haben.
2. **Deckung der Nachfrage**: Die Nachfrage nach Strom wird schrittweise durch die Einspeisung von Kraftwerken mit den niedrigsten Grenzkosten gedeckt. Dies bedeutet, dass zuerst die erneuerbaren Energiequellen genutzt werden, gefolgt von den nächstgünstigeren Kraftwerken, bis die gesamte Nachfrage erfüllt ist.
3. **Preisbildung**: Der Strompreis im Merit-Order Modell wird durch die Grenzkosten des letzten eingesetzten Kraftwerks bestimmt, das zur Deckung der Nachfrage benötigt wird. Dieses Kraftwerk wird auch als "marginale Kraftwerk" bezeichnet. Der Preis, den dieses Kraftwerk für die Produktion einer zusätzlichen Einheit Energie benötigt, setzt den Marktpreis für den gesamten erzeugten Strom.

Das Merit-Order Problem veranschaulicht die Funktionsweise von Strommärkten und die Priorisierung von Kraftwerken basierend auf ihren Grenzkosten. Es bietet eine einfache und effektive Möglichkeit, die kosteneffizienteste Stromerzeugung zu planen, indem es die wirtschaftlichsten Einheiten zuerst nutzt. Allerdings berücksichtigt das Merit-Order Problem nicht die technischen Einschränkungen der Kraftwerke oder die Dynamik des Stromnetzes, was es zu einer stark vereinfachten Darstellung des tatsächlichen Unit Commitment Problems macht. Trotz dieser Vereinfachungen bleibt das Merit-Order Prinzip ein wichtiges Werkzeug für die kurzfristige Einsatzplanung von Kraftwerken und die Analyse von Strommärkten. Es hilft dabei, die wirtschaftlichen Auswirkungen verschiedener Energiequellen zu verstehen und die Effizienz der Stromerzeugung zu optimieren.

Das Merit-Order Problem kann als Optimierungsproblem formuliert werden, das dem Rucksack- oder Knapsack-Problem sehr ähnlich ist. Ziel ist es, die kosteneffizienteste Einsatzreihenfolge für die verfügbaren Kraftwerke zu bestimmen, um die Nachfrage nach Strom zu decken. Hier ist die Formulierung des Problems:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N (\text{gen}_{t,i} \cdot \text{varcost}_i) \\ & \sum_{i=1}^N \text{gen}_{t,i} \geq \text{demand}_t, \forall t \\ & \text{gen}_{t,i} \geq 0, \forall i, t \end{aligned}$$

Parameter und Variablen

- $\text{gen}_{t,i}$: Generierte Strommenge von Kraftwerk i im Zeitschritt t .
- varcost_i : Variable Kosten für die Stromerzeugung von Kraftwerk i pro Einheit Strom.
- demand_t : Nachfrage nach Strom im Zeitschritt t .

Diese Formulierung stellt sicher, dass die Nachfrage in jedem Zeitschritt zu den minimalen variablen Kosten gedeckt wird, indem die Kraftwerke in der Reihenfolge ihrer variablen Kosten genutzt werden. Allerdings ist diese Formulierung sehr einfach und bereits mit herkömmlichen, klassischen Methoden leicht lösbar. Zur Vollständigkeit halber und zur Erfüllung des Meilensteins 2 sei dieses Modell hier erwähnt. Erstes Test auf den unterschiedlichen Systemen (klassisch, Quantensimulator, Quantencomputer) bestätigen diesen Eindruck, sodass wir uns im Folgenden mit einer komplexeren Formulierung des UCPs beschäftigen. Diese entstammt der Arbeit von Knueven et al. [Knueven2020] und lässt sich wie folgt als gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsproblem (MIP) formulieren:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N (\text{gen}_{t,i} \cdot \text{varcost}_i + \text{start}_{t,i} \cdot \text{startcost}_i) \\ & \sum_{i=1}^N \text{gen}_{t,i} \geq \text{rd}_t, \forall t \\ & \text{on}_{t,i} \cdot \text{mingen}_i \leq \text{gen}_{t,i}, \forall t, i \\ & \text{on}_{t,i} \cdot \text{maxgen}_i \geq \text{gen}_{t,i}, \forall t, i \\ & \text{on}_{t,i} - \text{on}_{t-1,i} \leq \text{start}_{t,i}, \forall t, i \\ & \sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{on}_{\tau,i} \geq \text{start}_{t,i} \cdot \text{minup}_i, \forall t, i, \\ & \sum_{\tau=t+1-\text{mindown}_i}^t \text{start}_{\tau,i} \leq 1 - \text{on}_{t-\text{mindown}_i,i}, \forall t, i, \\ & \text{on}_{t,i}, \text{start}_{t,i} \in \{0,1\}, \forall t, i, \\ & \text{gen}_{t,i} \geq 0, \forall i, t \end{aligned}$$

Variablen

- $\text{gen}_{t,i}$: Die in Zeitschritt t von Kraftwerk i erzeugte Strommenge.
- $\text{on}_{t,i}$: Binäre Variable, die den Betriebszustand von Kraftwerk i in Zeitschritt t angibt (1 = an, 0 = aus).
- $\text{start}_{t,i}$: Binäre Variable, die angibt, ob Kraftwerk i in Zeitschritt t eingeschaltet wird (1 = eingeschaltet, 0 = sonst).

Parameter

- $varcost_i$: Variable Kosten für die Stromerzeugung von Kraftwerk i pro Einheit Strom.
- $startcost_i$: Startkosten für das Einschalten von Kraftwerk i .
- rd_t : Residuallast (Nachfrage minus Angebot erneuerbarer Energien) im Zeitschritt t
- $mingen_i$: Minimale Leistung von Kraftwerk i .
- $maxgen_i$: Maximale Leistung von Kraftwerk i .
- $minup_i$: Mindestlaufzeit von Kraftwerk i .
- $mindown_i$: Mindeststillstandszeit von Kraftwerk i .

Diese Formulierung und Modellierung des UCPs haben wir für den Rest des Projekts verwendet.

Beim Projektpartner IOSB-AST hat sich nach ausgiebiger Prüfung des im Antrag vorgesehenen Fundamentalmodells (s. TV1.1), welches das Thüringer oder gar das deutschlandweite Energiesystem abbildet, herausgestellt, dass bei den notwendigen Vereinfachungen zur Berechnung/Simulation mithilfe eines Quantencomputers nur geringfügige Unterschiede zum vom ITWM und JoS Quantum untersuchten Unit Commitment Problem auftreten würden. Gleichzeitig wurde ein weiteres relevantes Praxisproblem mit Potential für die Optimierung mit Quantencomputern identifiziert: eine Anwendung im Bereich Elektromobilität aus dem BMWK-Projekt ALEC. In dieser Anwendung geht es um das optimale (d.h. kosten-minimale) Beladen von Service-Elektrofahrzeugen am Flughafen Erfurt-Weimar unter Berücksichtigung der Stromgeneration mittels Photovoltaikanlage und des Flugplans.

Es handelt es sich um ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsproblem (s. TV1.1). Die Optimierungsaufgabe wurde in 3 Teile zerlegt, die Berechnung der Flexibilität, die Optimierung des Flottenladeplans und die optimierte Aufteilung des Flottenladeplans auf die verfügbaren Elektrofahrzeuge. Im Projekt EnerQuant wurde hauptsächlich der Problemteil 2: Optimierung des Flottenladeplans untersucht.

Die erfolgte Literaturrecherche des State-of-the-Art zum Lösen von Ladeproblemen in der Praxis. Dabei zeigte sich, dass der State-of-the-Art darin besteht, in der gegebenen Planungssituation ein sogenanntes Mixed Integer Linear Program (MILP) zu formulieren und durch einen kommerziell-verfügbaren, klassischen Optimierungssolvern zu lösen. Teilweise wird aber auch mit einem einfachen Priorisierungsansatz gearbeitet, welcher keinerlei Optimierung beinhaltet. Mit diesen Ansätzen kann man in der zur Verfügung stehenden Zeit von ca. 15 Minuten (Abtastzeit im deutschsprachigen Energiesektor)

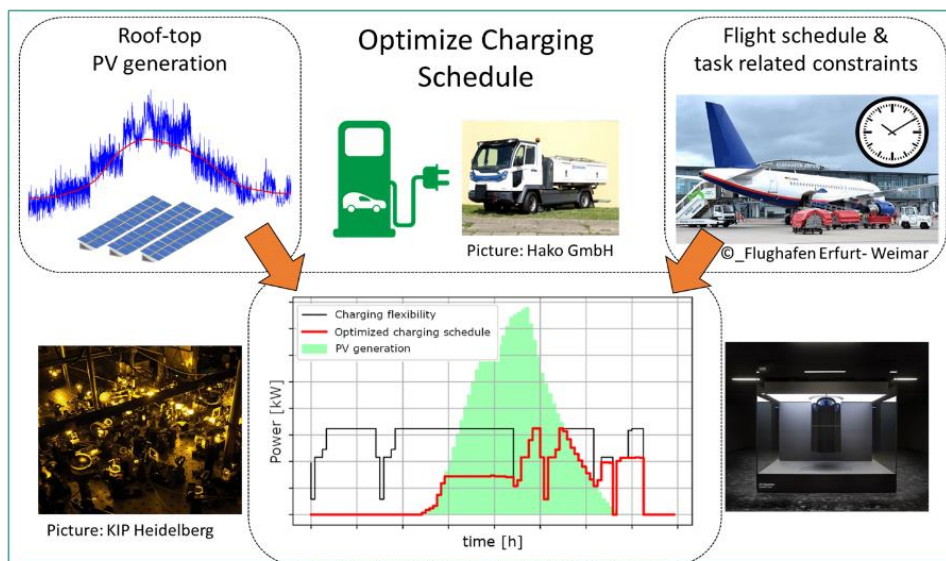


Abbildung 3: Zweiter Anwendungsfall: Flottenladeproblem.

Lösungen mit unterschiedlicher Qualität ermitteln. Es wurden auch erste Paper zur Lösung mit Quantencomputing gefunden, allerdings auf einem sehr oberflächlichen Niveau und ohne einen Vergleich mit klassischen Lösungsmethoden [Asna2022]. An diesem Punkt knüpfte die Arbeit im Projekt EnerQuant an.

Die Formulierung des Flottenladeproblems als Lineares Problem mit diskreten Variablen konnte im ersten Projektjahr abgeschlossen werden, dabei stellt die Zielfunktion einen maximalen Eigenverbrauch der vorhandenen Photovoltaikanlage sicherstellen, wobei als Nebenbedingungen der Flugplan und die daraus resultierende Flexibilitätten beachtet werden.

■ Objective (Use Case: Minimizing Grid Usage):

$$z = \min(\sum_t c(t) |P_{Netz}(t)|)$$

■ Constraints:

$$P_{Netz}(t) = P_{ges}(t) - P_{PV}(t) \quad (\text{Grid Usage} = \text{Total Charging Power} - \text{PV-Power})$$

$$P_{ges}(t) \leq L(t) \quad (\text{Constraint from max. charging power})$$

$$P_{ges}(t) = \sum_i P_{ges}^i(t) \quad (\text{Total charging power of all EV charging time slots})$$

$$P_{ges}^i(t) = j^i(t) * s, j \in \mathbb{Z}^+ \quad (\text{Constraint based on integer charging level})$$

$$\sum_{t=0}^T P_{ges}^i(t) \Delta t \leq (\theta(t - t_{in}^i) - \theta(t_{off}^i - t)) E_{max}(t_{off}^i) \quad (\text{Constraints from charging time slots (Gültigkeitsbereich)})$$

$$\sum_{t=t_{in}^i}^{t_{off}^i} P_{ges}^i(t) \Delta t \geq E_{min}(t_{off}^i) \quad (\text{min. energy demand})$$

$$\sum_{t=t_{in}^i}^{t_{off}^i} P_{ges}^i(t) \Delta t \leq E_{max}(t_{off}^i) \quad (\text{max. energy demand})$$

$$\sum_{t=t_{off}^i}^{t_{in}^i+1} P_{ges}^i(t) \Delta t = 0 \quad (\text{No leakage})$$

Die lineare Formulierung des Problems wurde vereinfacht, um den Vergleich der Lösung mit klassischen Solvern mit derzeitiger Quantencomputerhardware bzw. mit der Emulation auf klassischen Computerhardware im folgenden Arbeitsschritt zu erlauben.

$$z = \min_{j_t} C(j_t)$$

$$C(j_t) = \sum_t |j_t - E_t^{pd}|$$

s.t.

$$j_t^{min} \leq j_t \leq j_t^{max}$$

$$E^{min} \leq \sum_t j_t \leq E^{max}$$

Das Optimierungsmodell zur Aufteilung des Flottenladeplans auf die verfügbaren Elektrofahrzeuge (Quadratisches Problem mit diskreten Variablen) wurde mathematisch formuliert und für die Lösung mit klassischen Solvern implementiert. Es wurde auch eine MILP-Formulierung für Vergleichszwecke erstellt.

- $z = \min \sum_t (j(t) - \sum_n j_n(t))^2$ s.t.
 - $e_{mi,n} \leq \sum_t j_n(t) \leq e_{ma,n}$
 - $0 \leq j_n(t) \leq j_{ma,n}$
 - $e_{mi} \leq \sum_t \sum_n j_n(t) \leq e_{ma} \iff e_{mi} = \sum_n e_{mi,n}, e_{ma} = \sum_n e_{ma,n}$
 - $0 \leq \sum_n j_n(t) \leq j_{ma}(t) \iff \sum_n j_{ma,n}(t) = j_{ma}(t)$

Die Evaluation mit verschiedenen klassischen Solvern wurde abgeschlossen. Es wurde festgestellt, dass bei diesem Problem häufig entartete Lösungen auftreten und verschiedene klassische Solver mit quadratischen, ganzzahligen Problemen nicht gut zu recht kommen. Der Solver gurobi schnitt hierbei am besten ab.

2.1.2 Qubit-Formulierung des Fundamentalmodells

Das Arbeitspaket 1.2 zielt darauf ab, die entwickelten Fundamentalmodelle aus Arbeitspaket 1.1 in eine Qubit-basierte Formulierung zu überführen. Dies umfasst die Übersetzung der Modelle in die Sprache der Quantenmechanik, um sie auf Quantencomputern ausführen zu können. Der Fokus liegt darauf, effiziente Quantenalgorithmen zu entwickeln, die die spezifischen Optimierungsprobleme in der Energiewirtschaft lösen können. Ein besonderer Schwerpunkt liegt auf der Modellierung von gemischt-ganzzahligen Optimierungsproblemen für Quantenalgorithmen.

Die meisten Quantenoptimierungsalgorithmen wie QAOA oder Quantum Annealing erfordern die Transformation des Optimierungsproblems in ein quantenmechanisches System, um das Problem zu lösen. In der Regel wird das Optimierungsproblem in einen Ising-Modell-Hamiltonian transformiert, der wie folgt ausgedrückt werden kann

$$H = - \sum_{i < j} J_{i,j} \cdot s_i \cdot s_j - \sum_i h_i \cdot s_i,$$

wobei s_i für den Spin des i -ten Teilchens steht (mit den Werten +1 oder -1), $J_{i,j}$ die Wechselwirkungsstärke zwischen den Spins i und j bezeichnet und h_i das an den Spin i angelegte externe Magnetfeld ist.

Der Ising-Hamiltonian hat eine große Ähnlichkeit mit dem Problem der Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO):

$$\begin{aligned} &\text{Minimiere} && \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \\ &&& \mathbf{x} \in \{0,1\}^n. \end{aligned}$$

Für binäre Variablen kann der lineare Teil der Ising-Hamiltonschen als die Diagonale der Matrix Q identifiziert werden.

$$s_i = 2x_i - 1.$$

Durch die Übersetzung eines Optimierungsproblems in ein QUBO-Problem kann es dann auf ein Ising-Modell abgebildet werden. Mehr dazu in Kapitel 2.3.1. Es gibt eine allgemeine Umwandlung in QUBOs, die für die meisten kombinatorischen und anderen Optimierungsprobleme mit nicht-binären Variablen und Nebenbedingungen geeignet ist. Beispielhaft hier für eine lineare Nebenbedingung $a^T x \leq b$:

- Umwandlung von Ungleichheits- in Gleichheitsbedingungen durch Einführung zusätzlicher so genannter Slack Variablen $s \geq 0$:

$$a^T x \leq b \iff a^T x + s = b.$$

- Umwandlung der Gleichheitsbedingungen in quadratische Strafterme in der Zielfunktion und Einführung eines Straffaktors p :

$$\min_{x \in X} f(x) \text{ with } a^T x + s = b \iff \min_{x \in X} f(x) + p \cdot (a^T x + s - b)^2.$$

- Umwandlung der nicht-binären Variablen durch Verwendung einer binäre Kodierung:

$$\min_{x \in X} f(x) + p \cdot (a^T x + s - b)^2 \Rightarrow \min_{x \in X} f(x) + p \cdot (a^T x + \text{encod}(s) - b)^2.$$

Dies ist zwar ein vielseitiger Ansatz, der in vielen Fällen funktioniert, hat aber auch einen Nachteil, ein Beispiel: Die Nebenbedingung für die Mindestlaufzeit

$$\sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{on}_{\tau,i} \geq \text{start}_{t,i} \cdot \text{minup}_i$$

würde folgendermaßen umgewandelt:

$$\left(\sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{on}_{\tau,i} + \text{encod}(s) - \text{start}_{t,i} \cdot \text{minup}_i \right)^2.$$

Dadurch erhalten wir eine all-to-all Konnektivität zwischen allen Variablen inklusive zusätzlicher Hilfsvariablen. Diese Konnektivität muss auch in der Quantenhardware verfügbar sein, da sonst zusätzliche Hilfsqubits erforderlich sind. Dies führt zu größeren Schaltkreisen und -tiefe und einer schlechteren Lösungsqualität.

Unsere Idee war es nun, das UCP direkt als quadratisches Problem zu formulieren, so dass die quadratischen Gleichheitsnebenbedingungen einfach in quadratische Strafterme überführt werden können. Konkret kann obige Nebenbedingung folgendermaßen formuliert werden:

$$\sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{start}_{t,i} \cdot \text{on}_{\tau,i} = \text{start}_{t,i} \cdot \text{minup}_i.$$

Diese kann sehr leicht als Strafterm geschrieben werden:

$$\text{minup}_i - \sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{on}_{\tau,i}.$$

Wir haben daraus ausgehend eine QUBO-Formulierung für das UCP erstellt. Zunächst für ein vereinfachtes UCP, bei dem ein eingeschaltetes Kraftwerk immer die maximale Strommenge produziert, das heißt die generierte Strommenge kann vernachlässigt werden.

Minimiere

$$\sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N (\text{maxgen}_i \cdot \text{on}_{t,i} \cdot \text{varcost}_i + \text{start}_{t,i} \cdot \text{startcost}_i)$$

$$+ A \cdot \sum_{t=1}^T \left(\sum_{i=1}^N \text{maxgen}_i \cdot \text{on}_{t,i} - \text{rd}_t \right)^2$$

$$+ B \cdot \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N (\text{on}_{t,i} \cdot (1 - \text{on}_{t-1,i}) + 2 \cdot \text{start}_{t,i} (\text{on}_{t-1,i} + 1 - \text{on}_{t,i}) - \text{start}_{t,i}),$$

$$C \cdot \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N \left(\text{minup}_i - \sum_{\tau=t}^{t-1+\text{minup}_i} \text{on}_{\tau,i} \right)$$

$$D \cdot \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^I \left(\sum_{\tau=t}^{t+\text{mindown}_i} (\text{start}_{\tau,i} + \text{on}_{t-1,i} - \text{on}_{t,i}) \cdot \text{on}_{\tau,i} \right)$$

$\text{on}_{t,i}, \text{start}_{t,i} \in \{0,1\}, \forall t, i,$

Natürlich kann diese Formulierung um diskretisierte Leistungsstufen bei der generierten Strommenge erweitert werden. Dazu nutzen wir für jedes Kraftwerk $d_i = \lceil \log \left(\frac{\text{maxgen}_i - \text{mingen}_i}{\text{step}_i} \right) \rceil + 1$ Variablen $\text{gen}_{t,i,k}$.

Wir

ersetzen

Projektergebnisse

$$A \cdot \sum_{t=1}^T \left(\sum_{i=1}^I \max gen_i \cdot on_{t,i} - rd_t \right)^2$$

durch

$$A \cdot \sum_{t=1}^T \left(\sum_{i=1}^I \min gen_i \cdot on_{t,i} + \left(\sum_{k=1}^{d_i-1} 2^k \cdot gen_{t,i,k} + (d_i + 1 - 2^{d_i}) \cdot gen_{t,i,d_i} \right) - rd_t \right)^2 \\ + A \cdot \sum_{t=1}^T \left((1 - on_{t,i}) \cdot \sum_{k=1}^{d_i} gen_{t,i,k} \right).$$

Ferner ersetzen wir $\max gen_i \cdot on_{t,i}$ durch $\min gen_i \cdot on_{t,i} + (\sum_{k=1}^{d_i-1} 2^k \cdot gen_{t,i,k} + (d_i + 1 - 2^{d_i}) \cdot gen_{t,i,d_i})$ in der Zielfunktion.

Die Formulierung des Unit Commitment Problems (UCP) als Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) bietet mehrere wesentliche Vorteile. Die Formulierung des UCP als QUBO erfordert lediglich $2 \cdot T \cdot I$ viele Variablen, wobei T die Anzahl der Zeitschritte und I die Anzahl der Kraftwerke darstellt. Diese geringe Anzahl an Variablen führt zu einer kompakten und effizienten Darstellung des Problems, was die Lösbarkeit und die Implementierung auf Quantencomputern erleichtert. Ein weiterer Vorteil der QUBO-Formulierung ist, dass die resultierende QUBO-Matrix dünn besetzt (sparse) ist. Weniger als 5% der Einträge in der QUBO-Matrix sind nicht-null, siehe Abbildung 4. Dies bedeutet, dass die meisten Einträge in der Matrix null sind, was die Speicheranforderungen und die Rechenzeit erheblich reduziert. Sparse Matrizen sind besonders effizient zu handhaben und ermöglichen schnellere Berechnungen.

Die QUBO-Formulierung ermöglicht eine klare und gut definierte Bestimmung der Penalty-Faktoren, die verwendet werden, um die Einhaltung der Nebenbedingungen sicherzustellen. Diese Penalty-Faktoren können a priori gut bestimmt werden, was die Robustheit und Effizienz der Lösung verbessern. Die Penalty-Faktoren helfen dabei, die Nebenbedingungen in die Zielfunktion zu integrieren und gewährleisten, dass die Lösungen die geforderten Bedingungen erfüllen.

Der letzte Punkt ist ein wichtiger Schritt zur Sicherstellung, dass die QUBO-Formulierung des UCPs die gewünschten Nebenbedingungen korrekt umsetzt. Diese Faktoren müssen sorgfältig gewählt werden, um sicherzustellen, dass die Strafen für verletzte Nebenbedingungen groß genug sind, um die Optimierung zu leiten, ohne die Lösbarkeit des Problems zu beeinträchtigen. Es kann zu folgender Situation kommen: Wenn $start_{t,i}$ auf 0 gesetzt ist, obwohl das Kraftwerk i zu Zeitpunkt t gestartet wird, erhalten wir einen Bonus D für jeden Zeitschritt, den das Kraftwerk läuft, über den letzten Penalty-Term. Dies verletzt den zweiten Penalty-Term, daher muss $B > D \cdot \max_i mindown_i$ sein. Daraus ergeben sich die folgenden Penalty-Faktoren:

- $A = \max_i(\text{varcost}_i) + \max_i(\text{startcost}_i)$
- $B = D \cdot \max_i(\text{mindown}_i) + 1$
- $C = D$
- $D = \max_i(\text{varcost}_i \cdot \max_i(\text{maxgen}_i))$

Example: 2 plants, 5 timesteps, no discretization

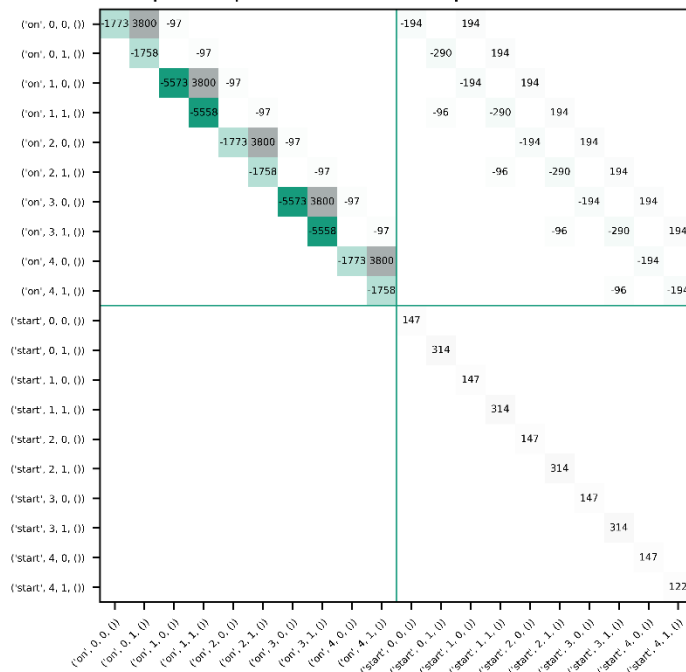


Abbildung 4: Beispielhafte QUBO-Matrix für eine Instanz mit fünf Zeitschritten, zwei Kraftwerken.

Die Erkenntnisse zur Modellierung flossen insbesondere in unser Übersichtspaper zum Lösen von Optimierungsprobleme mit Quantencomputing ein [Au-Yeung2023]. Wir haben diese Formulierung sowohl auf dem Quantenannealer von D-Wave als auch mit Warm-Starting QAOA auf dem IBM Quantencomputer in Ehningen getestet. Mithilfer der Benchmarkingsoftware aus Kapitel 2.1.4 haben wir einen größer angelegten Vergleich auf D-Wave ausgeführt, siehe Tabelle 1. Es zeigen sich einige interessante Fakten. In der Tat ist unsere QUBO-Formulierung sehr sparse, selbst bei diesen eher kleineren Instanzen mit bis zu zwölf Zeitschritten und fünf Kraftwerken sind in der Spitze nur knapp 3% der Matrixeinträge nicht null. Während Gurobi mit der MIP-Formulierung keine Probleme hat, können quadratische Probleme den Solver vor große Herausforderungen stellen. Eine quadratische Kostenfunktion könnte hier für den Quantencomputer von Vorteil sein. Wir sehen auch, dass es einen großen Unterschied zwischen der Anzahl der logischen Qubits (=QUBO-Größe) und der physischen Qubits (benötigte Qubits auf dem Annealer) groß ist und signifikant auf über das Vierfache ansteigt (Abbildung 5). Zusätzlich ist dieses Mapping auf die Hardwarearchitektur auch sehr zeitintensiv und macht fast die komplette Rechenzeit aus. Natürlicherweise fällt die Annealingzeit (die Zeit, die die QPU benötigt) nicht stark ins Gewicht oder ändert sich nicht, da diese vorab auf 40 μ s gesetzt wurde.

Entscheidend ist aber zunächst die Lösungsqualität in der letzten Spalte der Tabelle. Während für die ganz kleinen Instanzen diese noch akzeptabel ist, verschlechtert sich diese signifikant. Insgesamt bewerten wir diese Ergebnisse als durchwachsen.

In Folge dieser ersten Ergebnisse haben wir die Resultate genauer untersucht. Ein zentraler Punkt war, dass trotz der gut gewählten Penalty-Faktoren Lösungen oft unzulässig sind, das heißt, der Demand oder eine Kraftwerkseigenschaft ist nicht erfüllt. Bei der Verwendung klassischer Solver genügen die Penalty-Faktoren, sodass die zulässige Optimallösung des MIPs gefunden wird.

Ein erster Schritt war hier einfache Reparaturmechanismen in ein Postprocessing der Ergebnisse des Annealers zu implementieren:

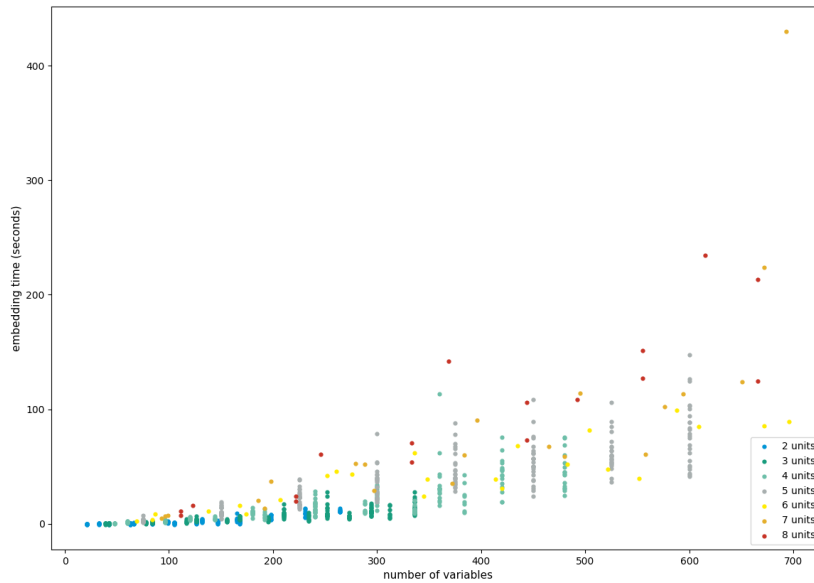


Abbildung 5: Zeit für die Transformation des QUBOs auf die Hardwarearchitektur von D-Wave (Embedding). Ein exponentielles Wachstum ist erkennbar.

- Falls der Demand nicht exakt erfüllt wurde: Anpassung der Stromproduktion im Rahmen des Produktionsintervalle der Kraftwerke.
- Falls eine Startvariable falsch gesetzt wurde, kann dies leicht durch Änderung der Werte behoben werden.

Dieser Reparaturmechanismus brachte eine deutliche Verbesserung, aber noch keine zufriedenstellenden Ergebnisse. Daher haben wir uns für eine Anpassung der Penalty-Faktoren entschieden, diese sollen erhöht werden, aber nicht zu hoch, da sonst zwar zulässige Lösungen wahrscheinlicher werden aber die Wichtigkeit der ursprünglichen Zielfunktion in den Hintergrund tritt. Hier haben wir innovative Verfahren entwickelt, um bessere Penaltyfaktoren zu entwickeln. Diese beruhen auf der Interpretation des QUBOs als multikriterielles Optimierungsproblem. Ein multikriterielles Problem hat im Gegensatz zu klassischen Optimierungsproblemen nicht nur eine, sondern mehrere, meist gegenläufige Zielfunktionen, die simultan optimiert werden müssen. Dabei existiert meist nicht nur ein optimaler Zielfunktionswert, sondern mehrere Kompromisslösungen, die Pareto-optimal oder nichtdominiert genannt werden. Ein Vektor ist nicht-dominiert, wenn es keinen anderen zulässigen Vektor gibt, der in jedem Eintrag mindestens genauso gut und in mindestens einem Eintrag echt besser ist. Nun können wir das QUBO-Problem als gewichtete Summe aus der originalen Zielfunktion und dem Wert der Penaltyterme auffassen:

$$f(x, p) = f_{obj}(x) + p \cdot f_{penalty}(x).$$

Bisher haben wir diesen Faktor p beziehungsweise beim UCP die Parameter A, B, C und D a priori gewählt¹. Diese Faktoren sind aber nur eine Hilfe für das eigentliche Ziel: Wir wollen eine Lösung finden, die keinen Penalty hat, als zulässig ist ($f_{penalty}(x) = 0$) und

¹ Sofern das Verhältnis zu den Faktoren bekannt und konstant ist, können diese zu einem Faktor zusammengefasst werden.

Units	Time steps	Average MIP runtime	Average # logical qubits	QUBO sparsity	MIP QUBO result quality	Average GRB QUBO runtime	GRB QUBO time limit reached	Average # GRB violated constraints	GRB QUBO result quality	Average # physical qubits	Embedding expansion	Average D-Wave execution time	Average QPU access time	Average # D-Wave violated constraints	QPU result quality
2	3	0,00033	25	85,2%	1	0,0	0	0	1,0000	36,0	1,44	0,2	0,14	1,0	1,72
	6	0,00064	50	92,3%	1	0,4	0	0	1,0000	75,3	1,51	0,4	0,15	4,7	14,01
	9	0,00027	75	94,8%	1	0,6	0	0	1,0000	127,7	1,70	0,7	0,14	11,3	46,20
	12	0,00048	100	96,0%	1	2,8	0	0	1,0000	178,0	1,78	1,8	0,15	15,7	99,92
3	3	0,00254	41	86,9%	1	0,4	0	0	1,0000	77,7	1,89	0,4	0,14	5,0	11,67
	6	0,00467	82	93,3%	1	17,2	0	0	1,0000	175,7	2,14	1,6	0,15	13,0	81,79
	9	0,00561	123	95,4%	1	257,5	2	0	1,0000	300,3	2,44	3,6	0,16	24,0	227,57
	12	0,00574	164	96,6%	1	173,9	1	0	1,0000	389,7	2,38	4,5	0,17	36,7	350,72
4	3	0,00345	56	87,6%	1	200,9	2	0	1,0000	137,0	2,45	1,4	0,15	9,7	12,00
	6	0,00698	112	93,7%	1	300,0	3	0	1,0000	299,3	2,67	3,8	0,16	29,0	198,74
	9	0,00896	168	95,7%	1	300,0	3	0	1,0013	512,7	3,05	9,4	0,17	39,7	791,41
	12	0,01219	224	96,8%	1	300,0	3	0	1,0012	736,3	3,29	10,4	0,17	65,7	2249,20
5	3	0,00559	75	87,8%	1	300,0	3	0	1,0000	228,7	3,05	4,7	0,16	9,0	43,96
	6	0,00667	150	93,8%	1	300,0	3	0	1,0002	513,3	3,42	8,0	0,17	37,0	488,11
	9	0,00803	225	95,8%	1	300,0	3	0	1,0002	915,3	4,07	28,4	0,17	67,7	2371,14
	12	0,01438	300	96,8%	1	300,1	3	0	1,0045	1275,0	4,25	46,1	0,18	75,3	4196,90

Tabella 1: Erste Benchmarkingergebnisse für unsere QUBO-Formulierung auf dem D-Wave Quantenannealer. Vergleich mit Gurobi.

die Zielfunktion $f_{obj}(x)$ minimal ist. In der multikriteriellen Optimierung nennt man das eine lexikografisch optimale Lösung, da wir zunächst $f_{penalty}(x)$ und dann $f_{obj}(x)$ minimieren. Um so eine lexikografisch optimale Lösung zu finden, existieren verschiedene Verfahren, die wir für unseren Fall adaptieren:

- Bikriteriell: Wir fassen das Problem als bikriterielles Problem mit den zwei Zielfunktionen originale Zielfunktion und Penalty-Funktion auf. Wir bestimmen eine obere Schranke UB für die originale Zielfunktion (zum Beispiel mit LP-Relaxierung und Runden). Wir setzen dann $p = UB + 1$. Das garantiert uns Optimalität bei klassischen Solvern.
- Bikriteriell iterativ: Wie bikriteriell, nur passen wir den Penaltyfaktor sukzessive an. Wir nehmen den Startpunkt $(y_1, y_2) = (UB, 0)$ und setzen $p = 1$. Dann lösen wir $f(x, p)$ mit dem Quantenannealer und erhalten eine Lösung mit Zielfunktionswert (z, z_2) . Wir adaptieren unseren Penaltyfaktor:

$$p = \frac{y_1 - z_1}{z_2 - y_2}.$$

- Multikriteriell iterativ: Wie bikriteriell iterativ, aber wir machen dies sukzessive mit zwei Funktionen (aus der Menge der Penaltyfunktionen, zum Beispiel zur Mindestlaufzeit, oder der Zielfunktion).
- Lexikografisch: Löse das einkriterielle Optimierungsproblem

$$\min_{x \in X} f_{penalty}(x)$$

und erhalte eine Lösung \hat{x} . Bestimme den Zielfunktionswert der Lösung $b = f_{obj}(\hat{x})$.
 Löse nun

$$\min_x f_{obj}(x) + (1 + b) \cdot f_{penalty}(x).$$

Auch hier ist klassisch die lexikografische Optimalität gewährleistet.

- Lexikografisch iterativ: Wie Multikriteriell iterativ nur verwenden wir den lexikografischen Ansatz.

Zusätzlich haben wir eine bekannte genetische Heuristik zur Penaltyfaktoroptimierung, nämlich Nelder-Mead, eingesetzt. Diese evaluiert für gewisse Penalty-Faktoren die Zielfunktion (durch den D-Wave Annealer) und adaptiert dann die Penalty-Faktorwerte.

In einer groß angelegten Studie haben wir diese Verfahren verglichen. Es hat sich herausgestellt, dass Nelder-Mead ohne Reparatur und Multikriteriell iterativ mit Reparatur die beste Performance haben. Wir stellen diese beiden nun gegenüber.

Es zeigt sich, dass Nelder-Mead deutlich besser in der Laufzeit ist und leicht besser bezüglich der Qualität der Zielfunktion (Abbildung 6, Abbildung 7). Dafür liefert der iterative Ansatz mehr zulässige Lösungen beziehungsweise haben Lösungen generell weniger verletzte technische Constraints (der Kraftwerkseigenschaften) und auch der Demand wird besser erreicht (Abbildung 6, Abbildung 7).

Im Vergleich zum kommerziellen Solver Gurobi besteht immernoch ein deutlicher Performancevorteil von etwa 10^2 bis 10^3 (Abbildung 7). Allerdings scheint die Skalierung für die Quantenalgorithm vorteilhafter zu sein. Wir haben dies in einer weiteren Studie überprüft; es zeigt sich zwar, dass bei Extrapolation der Laufzeit besteht ein Vorteil für die Quantenalgorithm, allerdings müssen diese Probleme sehr groß sein. Für diese Problemgrößen reichen aber die aktuelle Zahl der Qubits nicht aus und auch die Qualität der Qubits ist hier problematisch, da die Lösungsqualität mit steigender Problemgröße rapide abnimmt.

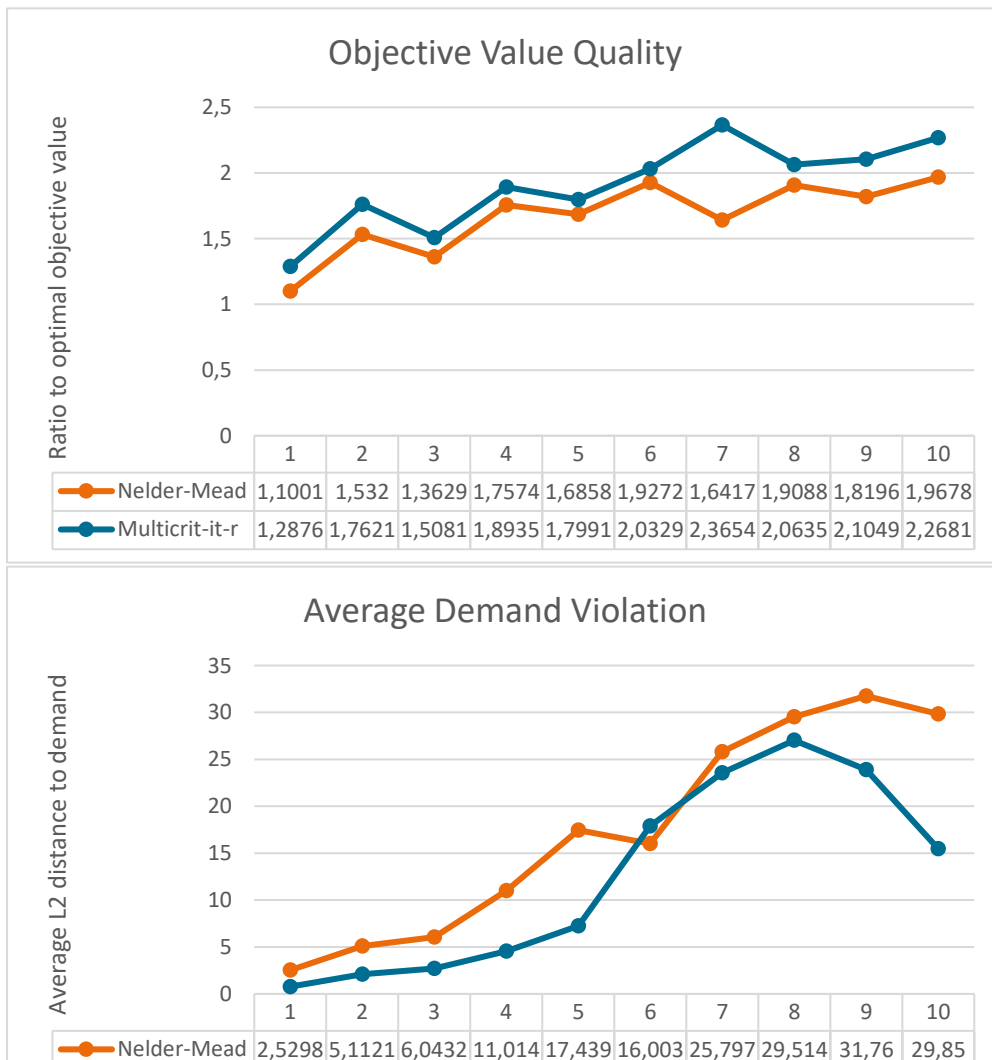
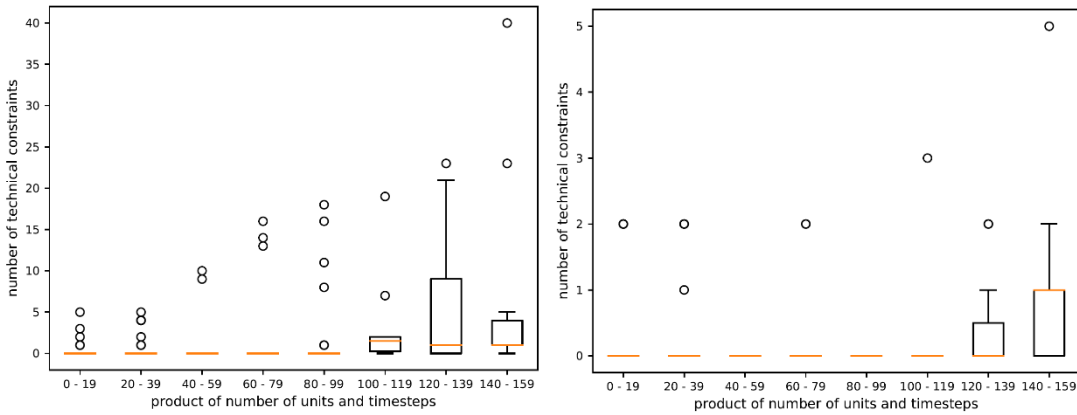


Abbildung 6: Vergleich zwischen Nelder-Mead und Multikriteriell iterativ mit Reparatur.

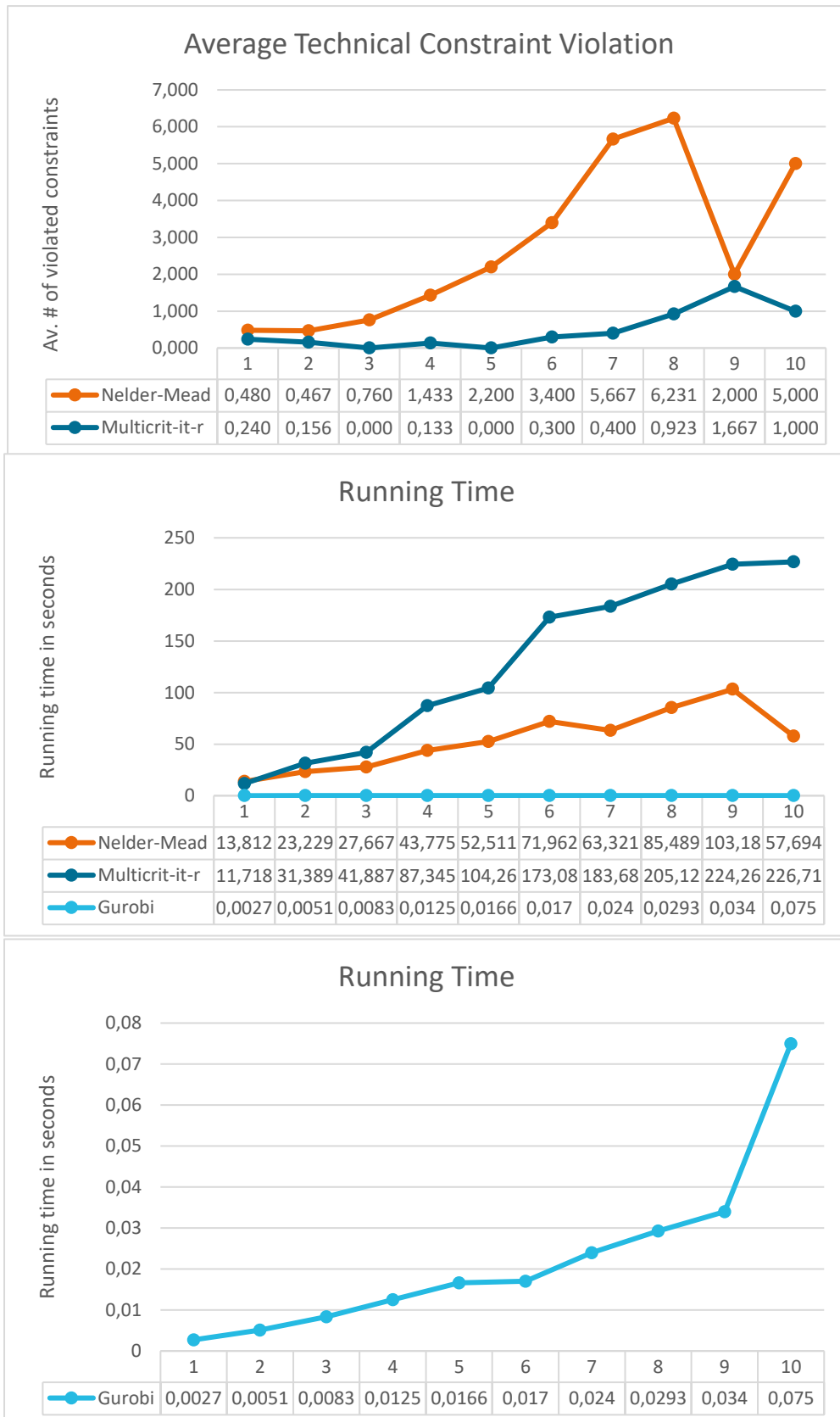


Abbildung 7: Vergleichen zwischen Nelder-Mead und Multikriteriell iterativ mit Reparatur. Zusätzlich der Vergleich bezüglich der Laufzeit mit Gurobi.

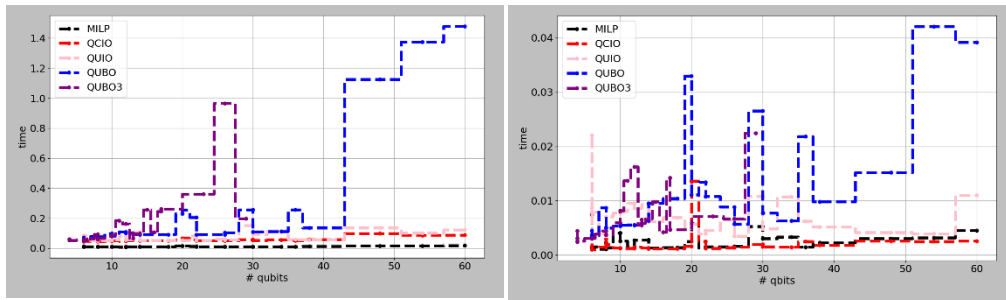


Abbildung 9: Performancevergleich zwischen MILP und verschiedenen QUBO-Lösungen.

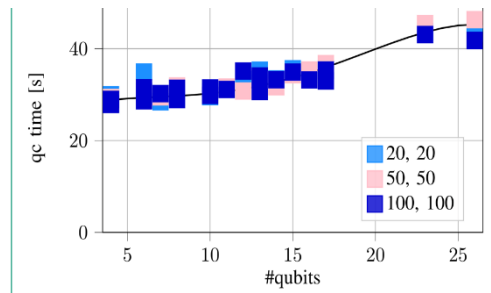


Abbildung 8: Performance für unterschiedliche QUBO-Größen.

Das Optimierungsproblem zur Beladung der Flotte von Servicefahrzeugen musste für die Lösung mit einem Quantenalgorithmus als ganzzahlige, quadratische Programme mit und ohne Nebenbedingungen umformuliert werden. Dabei ist letztere Formulierung, auch quadratic unconstrained integer optimization (QUIO) genannt, für die Lösung mittels Qudits, z.B. auf Basis von neutralen Atomen, verwendbar, wie in [Deller2023] gezeigt wurde. Zur Lösung mittels Qubits wurde eine binäre Formulierung ohne Nebenbedingungen, die sogenannte quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) Formulierung erstellt.

Die QUBO-Formulierung wurde mehrfach optimiert, um die notwendige Anzahl von Qubits zu minimieren und dadurch möglichst große Probleme auf der verfügbaren Hardware des IBM Quantum System One Ehningen zu berechnen.

Dafür wurde ein Benchmark bestehend aus 36 Einzelproblemen (unterschiedliche Anzahl von Fahrzeugen, Parametern und Zeitschritten) entwickelt, um die Lösungen mittels klassischen Solvern (cplex, gurobi, ...), klassischen Emulatoren für Quantenrechner und physischen Quantenrechnern zu vergleichen.

Dabei stellte sich bisher heraus, dass die klassischen Solver mit dem Linearen Problem nahezu unschlagbar sind, was die Qualität und die Performance betreffen. Mit der Lösung der quadratischen Probleme und vor allem der QUBO-Formulierung haben die klassischen Solver weit mehr Probleme und man erkennt deutlich einen nichtlinearen Anstieg der Rechenzeit und es wurden bei speziellen quadratischen Solvern (ipopt) nicht binäre Lösungsvariablen gefunden, welche klar dem Definitionsbereich des Variablen widersprechen. In den folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse der Berechnungen der klassischen Solver gurobi und cplex gezeigt. Es ist deutlich zu sehen, dass Cplex mit Experimenten, welche eine größere Anzahl von bits enthalten schlechter abschneidet im Vergleich zu den Lösungszeiten mit gurobi. Die Lösungsqualität war aber für beide Solver identisch und sie konnten für die gezeigten Experimente die optimale Lösung bestimmen.

Außerdem wurden erste Berechnungen mit Quantenalgorithmen unter Nutzung des Statevector und QASM Simulators (ideale Qubits) von IBM durchgeführt und die Ergebnisse entsprechen weitestgehend den erwarteten Ergebnissen, allerdings ist die Rechenzeit deutlich länger als bei den klassischen Solvern [Federer2022a]. Wie in der nebenstehenden Abbildung deutlich wird.

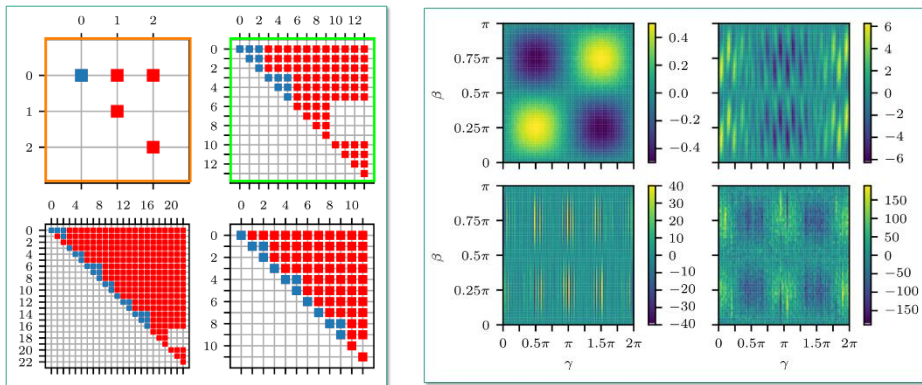


Abbildung 10: Darstellung der QUBO-Matrix (links) und Visualisierung der Parameter des QAOA (rechts).

Damit konnten wir den Meilenstein 2 für diesen Problem abschließen konnten. Dabei haben wir vor allem den QAOA-Algorithmus verwendet, da er wesentlich besser für unsere Problemstellung im NISQ-Zeitalter als VQE geeignet ist. Weiterhin haben wir uns auf Untersuchungen mit gatter-basierter Quantum Hardware beschränkt.

Nachdem wir verschiedene Tests zur Bestimmung der optimalen Parameter für den Quanten- und den klassischen Teil des QAOA-Algorithmus durchgeführt, konnten wir durch das Nachprogrammieren des QAOA Algorithmus feststellen, dass im von IBM zur Verfügung gestellten Algorithmus besser Lösungen erzeugt werden und somit verschiedene nicht klar benannte Optimierungsschritte implementiert wurden. Außerdem hatten wir große Probleme verlässlich die variationellen Parameter mittels klassischer Optimierung zu bestimmen. Daher haben wir uns auf die Extraktion dieser Parameter ohne einen klassischen Optimierungsschritt fokussiert und verschiedene Visualisierungen eingeführt, z.B. um die Sparsity der QUBO-Matrix (siehe Abbildung 10 links) und die Erwartungswertlandschaft (s. Abbildung 10 rechts) zu veranschaulichen. Die Auswertung und der Vergleich der Ergebnisse erfolgte und wurde auf den Konferenzen IEEE Quantum Week 2022 und IEEE VPPC 2022 vorgestellt und veröffentlicht [Federer2022b, Federer2022c]. Dies führte u.a. zu oben erwähnten Optimierungen der QUBO-Formulierung.

Zur besseren Analyse wurde das quantenmechanische Problem zusätzlich analytisch gelöst, um daraus ein noch tieferes Verständnis für Formulierung des QUBOs, des Ising-Hamiltonians und des Algorithmus abzuleiten und eine analytische Version der Kostenlandschaftsberechnung angewendet. Nachdem wir festgestellt hatten, dass der Benchmark mit 36 Experimenten oftmals nicht für alle Experimente in einer annehmbaren Zeit lösbar ist, hatten wir zuerst auf eine reduzierte Variante mit 28 Experimente zurückgegriffen, bevor wir einen systematischen Benchmark mit einem Umfang von 52 Experimenten, welcher aber nur 2 Zeitschritte beinhaltet, implementiert haben und seither benutzen.

Die Visualisierung ist ein Teil der Masterarbeit von M. Sc. Sukanya, welche im Sommer 2023 abgeschlossen wurde [Sukanya2023]. Es wurden die Ursprünge des Rauschens in der Kostenlandschaft analysiert und dann eine statistische Methode zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnis angewendet. Darauf aufbauend wurde eine Methode aus der Bildverarbeitung angepasst, um alle Minima für den QAOA-Algorithmus mit einer Schicht zu bestimmen. Damit konnten die Symmetrien in der Kostenlandschaft analysiert werden. Der zweite Teil dieser Arbeit ist die Schätzung der variationellen Parameter mittels Machine Learning Ansatz, welcher auf Basis des erzeugten Benchmarks die Parameter vorhersagen konnte. Weiterhin haben wir die Korrelation zwischen der Erwartungswertlandschaft und der Wahrscheinlichkeitsverteilung für verschiedene Experimente untersucht und Instanzen gefunden, welche eine für das QAOA-Konzept gut geeignete Korrelation aufweisen und welche bei denen dies nicht zutrifft. Dies wird nach dem Projektende weiter analysiert und validiert.

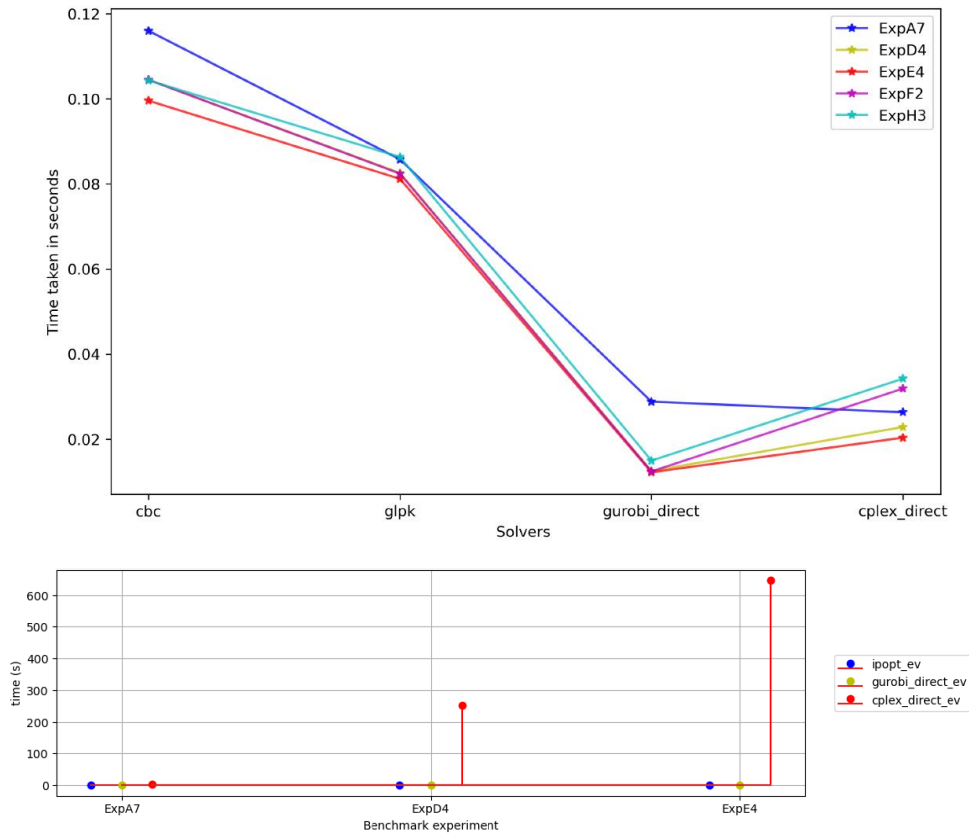


Abbildung 11: Ergebnisse der Masterarbeit von Ron George [George2024].

Auf Basis der in der Masterarbeit von M. Sc. Sukanya gefundenen Strukturen in der Kostenlandschaft hat B. Eng. Ron George einen Vorverarbeitungsschritt für das Optimierungsproblem implementiert und validiert. Damit ist es möglich die Anzahl der Experimente, welche zu berechnen sind, drastisch zu reduzieren und auch die Lösungsqualität konnte gesteigert werden [George2024]. Die Arbeit wurde Mitte April zur Begutachtung eingereicht.

Die Analyse der beschriebenen Ergebnisse und die sich daraus ergebenden Schlussfolgerungen warfen allerdings immer wieder neue Fragen auf, so dass weitere Untersuchungen und Analysen erfolgten. Zusätzlich mussten einige Analysen aufgrund von Updates von Qiskit erneut durchgeführt werden und bisherige Ergebnisse neu berechnet und analysiert werden. Daher wird die Publikation der umfangreichen Tests und Analysen nach Projektende voraussichtlich im Sommer 2024 erfolgen. Damit hat der Abschluss des Meilenstein 3 mehr Zeit in Anspruch genommen als geplant, allerdings haben wir neben den geplanten Aktivitäten noch die Verknüpfung von QAOA mit Machine Learning und einem Preprocessing-Schritt, um die Quantum Optimierung robuster und performanter für Industrieanwendungen zu gestalten.

Neben den beschriebenen Arbeiten haben wir uns noch mit Umsetzungen in der Post-NISQ-Ära beschäftigt und einen Ansatz mittels Grover Adaptive Search konzeptioniert [Federer2023] und auch eine Arbeit zur Erweiterung des Ansatzes auf bi-direktionales Laden mit QAOA für 2-Schichten vorgestellt [Müssig2023].

Das Optimierungsmodell zur Aufteilung des Flottenladeplans (s. Kapitel 2.1.1) auf die verfügbaren Elektrofahrzeuge (Quadratisches Problem mit diskreten Variablen) wurde aufgrund der Komplexität der Lösungen, welche häufig entartete Lösungen beinhalten, noch nicht mit Quantenalgorithmien aufgearbeitet, da dafür ebenfalls eine adäquate Vorverarbeitung notwendig ist. Allerdings wurde es mit klassischen Solver untersucht und in der nebenstehenden Abbildung sind nur geringfügige Unterschiede für die Lösung des MILP Problems zu sehen. Für die QUBO-Formulierung sieht man deutliche Performance-Unterschiede. Hierbei muss aber erwähnt werden, dass die Ergebnisse mit

dem ipopt-Solver nicht ganzzahlig sind und somit verworfen werden mussten. Daher war gurobi der bester Solver für diese Untersuchung im Rahmen der Masterarbeit von Ron George [George2024].

2.1.3 Stochastische Modelle und Szenariogenerierung

Das Ziel des Arbeitspakets 1.3 ist die Entwicklung und Implementierung stochastischer Modelle und die Generierung von Szenarien für das Fundamentalmodell. Diese Modelle sollen die Unsicherheiten und Variabilitäten in der Energiewirtschaft, wie die Einspeisung erneuerbarer Energien und Kraftwerksausfälle, berücksichtigen. Die Arbeit umfasst die Erstellung von Szenarien mittels Monte-Carlo-Simulationen und die Integration dieser Szenarien in die Qubit-basierten und klassischen Modelle. Ein Schwerpunkt liegt darauf, die Effizienz und Genauigkeit der stochastischen Modellierung durch den Einsatz von Quantencomputern zu verbessern. Die Fähigkeit von Quantencomputern, eine Vielzahl von Szenarien gleichzeitig zu evaluieren, soll genutzt werden, um die Qualität und Effizienz der Modelllösungen zu steigern.

Im Rahmen des Arbeitspakets 1.3 haben wir uns darauf konzentriert, die Unsicherheiten des Dargebots erneuerbarer Energien zu adressieren. Aufgrund der schwankenden Verfügbarkeit von Sonne und Wind ist das Angebot erneuerbarer Energien und damit die Residualnachfrage nach Strom ein unsicherer Parameter im Unit Commitment Problem (UCP). Das heißt für jeden Zeitschritt ist die Residualnachfrage ein unsicherer Parameter.

Aus Gesprächen mit Anwendern und anderen Forschenden, unter anderem beim Netzwerktreffen des BMWKs, haben wir erfahren, dass es schwierig ist, für das Stromangebot der erneuerbaren Energien eine präzise Wahrscheinlichkeitsverteilung anzugeben. Oft wird vereinfacht die Normalverteilung verwendet, obwohl diese nicht immer die tatsächlichen Bedingungen widerspiegelt. Ein weiteres wichtiges Thema, das aus diesen Gesprächen hervorging, betrifft das Optimierungsziel. Stochastische Zielfunktionen wie der Erwartungswert erweisen sich als nicht optimal, da letztlich ein Kraftwerkseinsatzplan benötigt wird, der in allen Szenarien des Stromangebots erneuerbarer Energien gut performt. Dies führt zu einem stärkeren Fokus auf robuste Optimierung anstelle von stochastischer Optimierung. Die robuste Optimierung zielt darauf ab, Lösungen zu finden, die unter verschiedenen Unsicherheiten gut funktionieren, ohne dass eine genaue Wahrscheinlichkeitsverteilung der Unsicherheiten bekannt sein muss.

Daher haben wir unseren Fokus auf die robuste Optimierung des Unit Commitment Problems gelegt. Dies beinhaltet die Entwicklung von Modellen, die ohne genaue Wahrscheinlichkeitsverteilungen arbeiten können und stattdessen auf Worst-Case-Szenarien oder anderen robusten Metriken basieren. Im Folgenden fokussieren wir uns auf die Verwendung von Quantenannealing zum Lösen robuster Unit Commitment Probleme.

Ein deterministisches Problem lässt sich mit einem Quantum Annealer lösen, indem dieser für jeden Durchlauf (Shot) eine mögliche Lösung generiert. Wir erhalten eine Samplemenge. Idealerweise liefert jeder Durchlauf die optimale Lösung mit hoher Wahrscheinlichkeit. Allerdings erzeugt der Quantenannealer auch eine signifikante Anzahl an nahe-optimalen Lösungen, die nicht unbedingt die beste, aber dennoch eine sehr gute Lösung darstellen. Dieses Verhalten des Quantenannealers ist besonders nützlich für die robuste Optimierung. In der robusten Optimierung geht es darum, Lösungen zu finden, die unter verschiedenen Unsicherheiten gut funktionieren, ohne dass eine exakte Wahrscheinlichkeitsverteilung der Unsicherheiten bekannt sein muss. Robust optimale Lösungen sind oft auch nahe-optimale Lösungen für das deterministische Gegenstück des Problems. Das bedeutet, dass diese Lösungen nicht nur für ein einzelnes Szenario gut sind, sondern über eine Vielzahl von möglichen Szenarien hinweg eine stabile und effiziente Leistung erbringen. Daher liegt es nahe, die Menge vom Quantenannealer erzeugten Lösungen des deterministischen Problems hinsichtlich ihrer Performance bezüglich der gewählten und sinnvollen robusten Metrik zu bewerten und

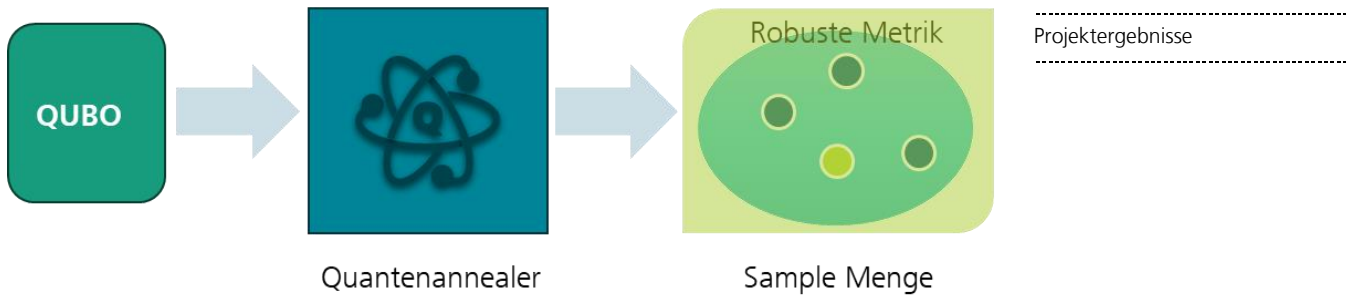


Abbildung 12: Unser Vorgehen zur Lösung robuster Optimierungsprobleme mit Quantenannealer durch "Solution Harvesting".

die beste Lösungen bezüglich dieser Metrik als Kandidat für das robuste Optimierungsproblem zu wählen. Wir gehen wie folgt vor:

1. Preprocessing: Erstelle ein deterministisches QUBO-Problem aus dem robusten Optimierungsproblem. Verwende dafür die deterministische Zielfunktion des Problems und ersetze den unsicheren Parameter beispielsweise durch seinen Erwartungswert. Im Fall des Unit Commitment Problems verwenden wir die erwartete Residualnachfrage in jedem Zeitschritt.
2. Quantenannealer: Wir verwenden den Quantenannealer, um den QUBO des erzeugten deterministischen Problems zu lösen und erhalten eine Menge von Samples.
3. Die Samples werden nun bezüglich der gewählten robusten Metrik evaluiert. Zunächst wird die Lösung als Kraftwerkseinsatzplan aufgefasst und wir wählen den Plan der die beste Robustheit aufweist.

Wir gehen nun konkret auf die verwendeten Robustheitsmetriken ein. Auch hier haben wir Informationen der Anwendenden verwendet, insbesondere was eine „gute“ Performance bezüglich einer Szenariomenge in der Praxis bedeutet. Entscheidende Faktoren sind, dass der Stromoutput der Kraftwerke auch kurzfristig noch angepasst werden kann oder aber auf dem Strommarkt (Intraday) fehlender Strom eingekauft werden kann. Daher nutzen wir statt der Standardrobustheitsmaße wie MinMax oder MinMaxRegret die folgenden:

- Intraday: Für jedes Szenario erlauben wir das Nachkaufen von Strom auf dem Intradaymarkt um die Stromnachfrage in jedem Zeitschritt zu decken. Wir ergänzen unsere deterministische Zielfunktion um den Mittelwert der zusätzlichen Kosten durch den Stromkauf zu einem vorher festgelegten Preis:

$$\sum_t \sum_i (gen_{t,i} \cdot varcost_i + start_{t,i} \cdot startcost_i) + \sum_t \frac{price}{|S|} \sum_{s \in S} buy_{t,s}$$

- Intraday-Adaptive: Vor dem Kaufen auf dem Strommarkt, das sehr teuer ist, erlauben wir die Anpassung der generierten Strommenge für jedes Kraftwerk innerhalb der minimalen und maximalen erzeugten Strommenge für jeden Zeitschritt. Hier verwenden wir die mittleren variablen Stromkosten über alle Szenarien plus die oben beschriebenen mittleren Strommarktkosten:

$$\sum_t \sum_i (start_{t,i} \cdot startcost_i) + \frac{1}{|S|} \sum_{s \in S} \sum_t \sum_i (gen_{t,i,s} \cdot varcost_i) + \sum_t \frac{price}{|S|} \sum_{s \in S} buy_{t,s}$$

Wir haben den robusten Kandidaten, den wir mit unserer Methode erhalten, mit der robust-optimalen für die Robustheitsmetrik Intraday-Adaptive verglichen. Dazu haben wir den kommerziellen Solver Gurobi sowie die Benchmarkingsoftware und Instanzen aus Kapitel 2.1.4 verwendet. Für die Szeanriogenerierung haben wir eine Normalverteilung um die deterministischen Werte der Instanzen und einer Varianz aus der Praxis verwendet. Es wurden 100 Instanzen erzeugt. Als Quantenannealer diente das D-Wave Advantage™ System JUPSI in Jülich mit 100 shots und 40 μ s annealing Zeit. Die Ergebnisse werden in Tabelle und Abbildung aufbereitet und sind vielversprechend. Die Ergebnisse werden in Kürze in ausführlicher Form als wissenschaftlicher Artikel eingereicht und auf arXiv veröffentlicht [Halffmann2024c].

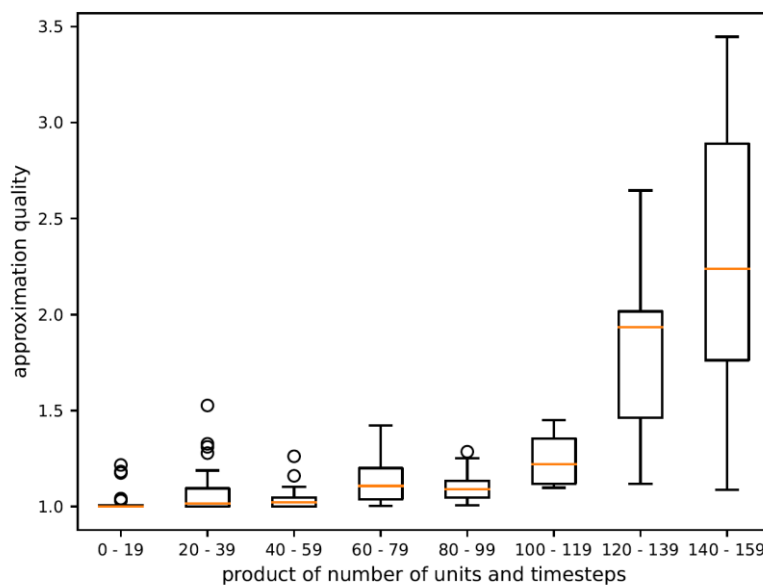


Abbildung 13: Vergleich zwischen unserem Algorithmus und der robust-optimalen Lösungen (gefunden mit Gurobi). Bis auf die sehr großen Instanzen hat unser Algorithmus eine gute Approximationsgüte.

problem size (number of power units by timesteps)	total instances	embeddable instances	instances with repairable states found	avg number of variables (if embeddable)	avg number of physical qubits (if embeddable)	avg number of repairable states (if embeddable)	avg approximation quality (if any)
0 - 19	25	25	25	63,5	146,4	91,8	1,028
20 - 39	45	45	45	147,4	535,3	70,5	1,071
40 - 59	25	25	25	229,3	766,2	44,4	1,043
60 - 79	30	30	30	323,6	1.613,7	23,1	1,130
80 - 99	25	25	25	433,2	1.968,4	14,6	1,105
100 - 119	10	10	10	508,5	3.024,0	3,7	1,247
120 - 139	15	15	15	571,4	3.087,4	2,1	1,817
140 - 159	20	20	13	668,5	3.502,4	1,6	2,296
160 - 179	5	5	4	766,5	3.943,8	0,0	
180 - 199	15	15	2	840,0	4.276,0	0,0	
200 - 219	10	10	0				
240 - 259	10	10	0				
280 - 299	5	5	0				

Tabelle 2: Benchmarkingresultate für den Algorithmus zum Lösen robuster Optimierungsprobleme. Die Instanzen wurden in Gruppen eingeteilt, je nach ihrer Größe gegeben durch das Produkt aus Anzahl der Kraftwerke und Anzahl der Zeitschritte (Spalte 1). Die nächste Spalte zeigen die absolute Anzahl von Instanzen, wie viele davon auf dem Quantenannealer lösbar sind, wie viele eine zulässige (mit Reparaturmechanismen wie in Kapitel 2.1.2) Lösung haben. Spalten 5 und 6 zeigen den Unterschied zwischen logischen und physischen Qubits für die unterschiedlichen Instanzgrößen. Spalte 7 gibt die durchschnittliche Anzahl an zulässigen, reparierten Lösungen an. In der letzten Spalte zeigen wir die Performance zwischen unserem Algorithmus und der eines klassischen Solvers (Gurobi). Es zeigt sich, dass unser Algorithmus eine ordentliche Performance hat, auch wenn er bei größeren Instanzen Probleme aufgrund der geringen Anzahl zulässiger Lösungen bekommt.

Für den Anwendungsfall aus der Elektromobilität haben wir uns vorerst nur mit der Unsicherheit der prognostizierten Solarenergie beschäftigt und mittels stochastischer Optimierung behandelt. Dazu wurden mehrere Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit den dazugehörigen Parametern angenommen. Für die einfachen Fälle von Normal- und Gleichverteilung konnten analytische Formulierungen zur QUBO-basierten Lösung gefunden werden. Diese Fälle stellen aber stark vereinfachte Problemstellungen dar und müssten im direkten Anwendungsfall weiterentwickelt werden. Da dies beliebig kompliziert werden kann haben wir uns mit einem anderen Ansatz weiterbeschäftigt. Dazu wurde ein mehrstufiges Optimierungsverfahren entwickelt, welches eine Art parallel-geführte Szenarienberechnung entspricht, unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Unsicherheit. Dies wurde für ein einfachen Anwendungsfall implementiert und daraus die Bedingungen für eine Anwendbarkeit mittels Sensitivitätsanalyse untersucht.

Im Rahmen des Arbeitspakets 1.3 haben wir erste vielversprechende Ergebnisse erzielt, wie man robuste und stochastische Versionen von energiewirtschaftlichen Problemen mithilfe von Quantencomputern lösen kann. Wir haben die inhärente Stochastizität des Quantencomputers genutzt, um eine Vielzahl von Lösungen unter einer Wahrscheinlichkeitsverteilung zu generieren. Die eigentliche Bewertung dieser Lösungen hinsichtlich stochastischer oder robuster Zielfunktionen erfolgt jedoch auf einem klassischen Computer. Diese Methode erlaubt es, verschiedene Szenarien parallel zu betrachten und so einen umfassenderen Einblick in die möglichen Lösungspfade zu erhalten.

Unsere bisherigen Arbeiten haben gezeigt, dass wir hier gerade erst an der Oberfläche kratzen. Der nächste Schritt wird es sein, diese Ansätze weiterzuentwickeln und zu untersuchen, wie man robuste Metriken und die Szenariomenge direkt in dem Teil des Algorithmus, der auf dem Quantencomputer ausgeführt wird, berücksichtigen kann. Dies ist ein sehr spannendes und vielversprechendes Forschungsgebiet, das vom Umfang her ein eigenständiges Projekt darstellt. Die Integration robuster Optimierungsansätze und stochastischer Szenarien direkt auf Quantencomputern könnte die Effizienz und Genauigkeit der Lösungen weiter verbessern und neue Möglichkeiten für die Anwendung von Quantencomputing in der Energiewirtschaft eröffnen.

2.1.4 Evaluation auf Vergleichsarchitekturen

Ziel in diesem Arbeitspaket war es, zu ermitteln, wie gut sich das Unit Commitment Problem mit Hilfe klassischer Rechner im Vergleich zu quantenbasierten Ansätzen lösen lässt. Für einen fairen Vergleich war es hier wichtig, einerseits die Rechengeschwindigkeit und andererseits die Qualität der gefundenen Lösungen zu berücksichtigen. Zudem war es wichtig, die genauen technischen Ausgestaltungen zu berücksichtigen, mittels derer das zugrundeliegende Domänenproblem der Kraftwerkseinsatzplanung formuliert und auf einem quantenbasierten oder klassischen Rechner gelöst wurde. Ein Beispiel ist hier, ob die Kraftwerksleistung mittels kontinuierlicher Variablen oder über eine Diskretisierung abgebildet wird. Bei einer zu groben Diskretisierung wird die Lösungsqualität negativ beeinflusst, da das Optimum nicht hinreichend nahe angenähert werden kann.

Quantenbasierte Ansätze und klassische Rechner erfordern es jeweils, das Unit Commitment Problem auf eine der Technologie angemessene Weise zu formulieren und zu lösen. Um einen fairen Technologievergleich zu ermöglichen, wurde unter Berücksichtigung der oben erwähnten Rahmenbedingungen zunächst ein Benchmarking-Konzept entwickelt und dokumentiert. Das Konzept beinhaltet die Wahl bzw. Erzeugung der Eingaben, auf denen das Problem gelöst wird, sowie die Art und Weise der Auswertung von Rechenzeit und Lösungsqualität. Bei der Wahl der Eingaben (Menge von Kraftwerken mit technischen Eigenschaften und Kosten, abzudeckende Lastkurve) war insbesondere zu beachten, dass auf Grund der aktuell sehr limitierten Hardwareressourcen von Quantenrechnern auf ihnen nur sehr kleine Eingaben mit wenigen Kraftwerken und Lastkurven-Zeitschritten gehandhabt werden können. Dementspre-

chend wurde als Teil des Benchmarking-Konzepts eine Vorgehensweise ausdetailliert, wie auf Basis von Realwelt-Eingaben aus Benchmarking-Testdatensätzen solche mit beliebiger Größe erzeugt werden können, die als realistisch angesehen werden können. Dies ermöglichte, das Problem auf Eingabegrößen zu betrachten, die mit der jeweiligen Technologie handhabbar sind.

Eine Literaturrecherche ergab, dass der State-of-the-Art Ansatz zur Lösung des Unit Commitment Problems auf klassischen Rechnern ist, das Problem als gemischt-ganzzahliges lineares Programm zu formulieren [Knueven2020] und mit Hilfe von kommerziellen Solvern wie IBM CPLEX oder Gurobi Optimizer zu lösen. Mit diesem Ansatz lässt sich das Problem auf aktuellen Standard-PCs auf realistisch großen Eingaben in der Regel innerhalb einiger Minuten optimal lösen. Dabei können Eingaben mit hunderten oder tausenden Kraftwerken und Lastkurven mit 24 oder 48 Stundenzeitschritten betrachtet werden. Zudem lassen sich mittels der gewählten Problemformulierung als gemischt-ganzzahliges Programm eine Vielzahl technischer und wirtschaftlicher Aspekte des Problems (z.B. Anfahrbedingungen, Stillstands- und Betriebszeiten, Anfahr- und Betriebskosten) detailliert abbilden. Die Kraftwerksleistung kann dabei als kontinuierliche Variable abgebildet werden, ohne die Probleme welche eine Diskretisierung mit sich bringt. Da bei der Kraftwerkseinsatzplanung hohe monetäre Beträge im Spiel sind, ist es wichtig, Lösungen für das Problem zu finden, die sehr nahe am Optimum sind. Entsprechend wird in den existierenden Benchmarks für das Problem die sog. MIP-Gap, also die maximal erlaubte Abweichung der gefundenen Lösung vom Optimum, auf 0,01 % gesetzt. In der Regel findet dann ein kommerzieller Solver in einigen Minuten eine in diesem Sinne optimale Lösung, d.h. er kann beweisen, dass die gefundene Lösung optimal ist oder um maximal 0,01 % vom Optimum abweicht. Diese Eigenschaft ist ein weiterer positiver Aspekt der gemischt-ganzzahligen Lösungsansätze, da für die Kraftwerkseinsatzplaner das Wissen über die Optimalität wichtig ist, um eine gefundene Lösung zu bewerten. Zudem ist auf Grund des gewählten Ansatzes garantiert, dass eine gefundene Lösung alle Domänenconstraints erfüllt.

Um eine effiziente und wiederholbare Durchführung des Benchmarkings entsprechend des entwickelten Konzepts im Projekt zu unterstützen, wurde ein Software-Framework in der Programmiersprache Python entwickelt. Mittels des Benchmarking-Frameworks ist es möglich, Eingaben für das Problem aus Testdatensätzen zu importieren, beispielsweise aus der sog. "Power Grid Lib" [PGL18], welche etablierte Testdatensätze aus der realen Welt für das Benchmarking des Problems beinhaltet. Solche Eingaben können dann mit Hilfe des Frameworks auf eine wählbare Größe skaliert werden, d.h. eine gewünschte Zahl an Kraftwerken und Zeitschritten. Dabei wird darauf geachtet, dass die resultierenden Eingaben "realistisch" bleiben. Mittels sogenannter Adapter kann dann eine erhaltene Eingabe in eine gewünschte quantenbasierte oder klassische Formulierung, z.B. ein QUBO oder ein gemischt-ganzzahliges Programm überführt werden. Für eine Menge von Eingaben können dann die Formulierungen auf den quantenbasierten und klassischen Architekturen gelöst werden, und die relevanten Daten wie Rechenzeit und Lösungsqualität (Zielfunktionswert, Einhaltung der Domänenconstraints für zulässige Lösungen) werden geloggt und können grafisch ausgewertet werden.

Zur konkreten Durchführung des Benchmarkings wurden drei Testdatensätze aus der o.g. Power Grid Lib verwendet. Basierend auf der im Projekt erarbeiteten QUBO-Formulierung des Problems für Quantenrechner wurde eine gemischt-ganzzahlige Formulierung erarbeitet, die das Domänenproblem in derselben Weise erfasst wie die QUBO-Formulierung, d.h. es werden die gleiche Zielfunktion und Domänenconstraints verwendet, allerdings werden in technologisch angemessener Weise kontinuierliche Variablen für die Kraftwerksleistung verwendet, die auf Quantenrechnern nicht möglich sind. Mittels entwickelter Adapter für das Benchmark Framework konnten so Testeingaben aus der Power Grid Lib automatisiert auf den verwendeten Quantenrechnern und klassischen Rechnern gelöst werden.

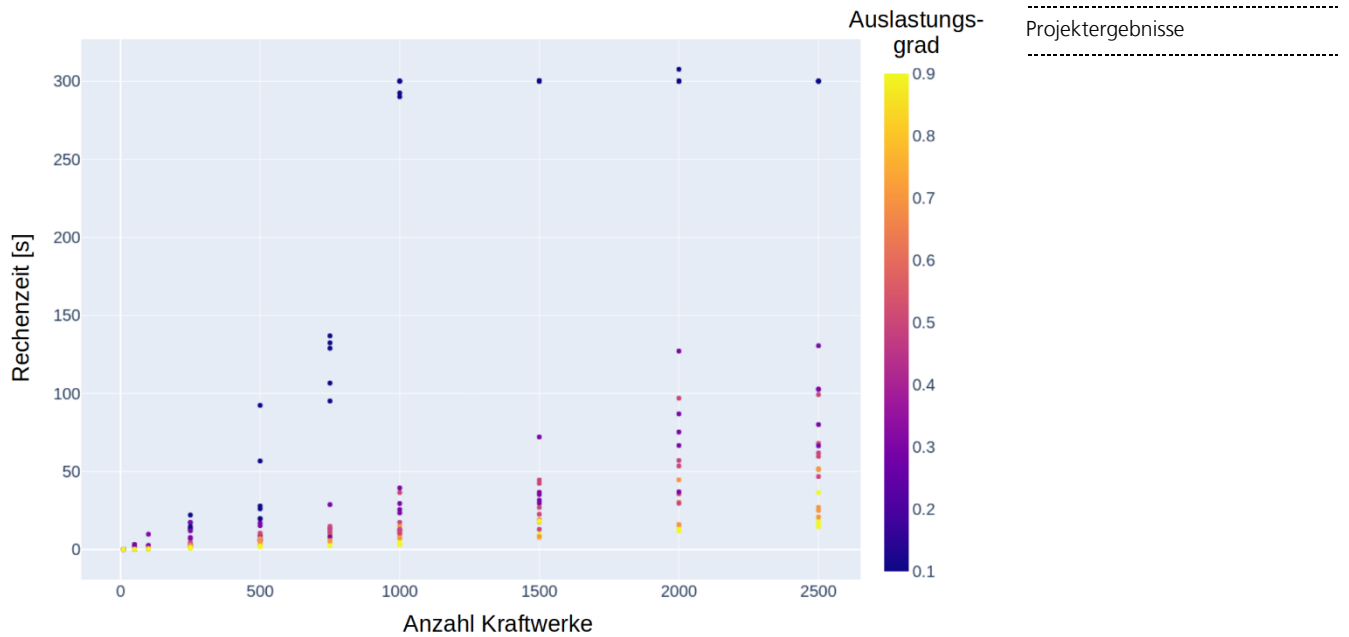


Abbildung 14: Benchmarkingresultate für Gurobi mit unterschiedlicher Anzahl Kraftwerken und Kraftwerksauslastung.

Die untenstehende Abbildung zeigt Ergebnisse des Benchmarkings für klassische Rechner. Für das Lösen der gemischt-ganzzahligen Programme zu den Testeingaben wurde der Solver Gurobi Optimizer 9.1.1 verwendet. Als Rechnerhardware wurde ein Notebook mit Intel Core i7-8665U CPU, acht Cores mit 1,9 GHz Taktfrequenz und 16 GB RAM verwendet. Erzeugt wurden Eingaben mit bis zu 2.500 Kraftwerken und 24 Stunden-Zeitschritten. Für die Optimalität wurde entsprechend des etablierten Vorgehens aus der Literaturrecherche eine maximal zulässige Abweichung (MIP-Gap) von 0,01 % vom Optimum gewählt.

Basierend auf dem "CA Testdatensatz" aus der Power Grid Lib wurden die Eingabe aus der Abbildung erzeugt. Jeder farbige Punkt in der Grafik entspricht einer Eingabe für das Problem, mit einer Menge von Kraftwerken und einer abzudeckenden Lastkurve. Die Farbe des Punktes entspricht dem "Auslastungsgrad", d.h. dem Verhältnis aus Lastkurven-Peak-Wert und totaler Kraftwerks-Nennleistung. Die Solver-Rechenzeit in Sekunden ist nach oben abgetragen. Für 231 der 249 betrachteten Eingaben (92,8 %) hat der Solver innerhalb des vorgegebenen Zeitlimits von 300 Sekunden (fünf Minuten) eine optimale Lösung gefunden. Für die restlichen Eingaben (Timeout) wurden Lösungen gefunden, die maximal 2 % vom Optimum abweichen. Alle Timeout-Eingaben waren solche mit einem Auslastungsgrad von 10 %, welcher in der Praxis nicht vorkommt. Für zwei weitere Testdatensätze aus der Power Grid Lib ergab sich ein ähnliches Bild. Zusammenfassend kann man sagen, dass mit aktueller Standard-PC-Hardware und Solvern wie dem Gurobi Optimizer das Unit Commitment Problem in der Form, wie es im Projekt für Quantenrechner erfasst wurde, typischerweise innerhalb weniger Minuten mit bis zu mehreren tausend Kraftwerken optimal gelöst werden kann.

Für die Vergleiche mit den Quantenalgorithmen, insbesondere Quantenannealing verweisen wir auf unsere Ergebnisse zur Penaltyfaktor-Optimierung in Kapitel 2.1.2, genauer auf Seite 30. Es zeigt sich, dass Quantenalgorithmen besser skalieren können als Gurobi, allerdings ein tatsächlicher Vorteil an der Verfügbarkeit und Qualität größerer Quantencomputer scheidert.

2.2.1 Formulierung des Knapsack-Problems und Entwicklung von Prototypen

Im ersten Schritt wurde das Unit Commitment Problem mathematisch als Knapsack (englisch: "Rucksack") Problem formuliert. Das Rucksackproblem wird dabei definiert als Objekte mit Wert und Gewichten und einem Gesamtgewicht, welches nicht überschritten werden soll. Lösung des Optimierungsproblems ist die Kombination an Objekten, die in Summe nicht das Gesamtgewicht übersteigen und den Gesamtwert aller Objekte maximiert. Diese Formulierung kann übersetzt werden, um einen optimalen Fahrplan für Kraftwerke zu finden. Dabei können Kraftwerke im ersten Schritt $An = 1$ sein und eine bestimmte Menge an Strom produzieren oder $Aus = 0$ sein und keinen Strom produzieren. Das Rucksackgewicht stellt dabei die Stromnachfrage dar. Nun soll die Kombination an Kraftwerken gesucht werden, die zusammen exakt der Stromnachfrage entspricht und die minimalen Produktionskosten aufweist. Diese Formulierung kann einfach in eine quadratische Binärdarstellung überführt werden und stellt die Ausgangsbasis für alle weiteren Schritte dar. Anschließend wurden Nebenbedingungen wie Mindest-/Maximallaufzeiten und Mindest-/Maximal-Stillstandszeiten formuliert. Dabei ist die wichtigsten Bedingungen für Übertragungsnetzbetreiber, dass Stromproduktion und -erzeugung zu jedem Zeitpunkt ausgeglichen sein muss, da die Netzfrequenz 50 Hz betragen muss. Schon bei kleinen Abweichungen kann es zu Beschädigungen an Umspannwerken, Turbinen und Übertragungsleitungen geben.

Da Kraftwerke nicht nur An oder Aus sein können, sondern in Intervallen von Mindestleistung und Maximalleistung Strom produzieren, wurde eine Formulierung für die Auflösung der Binärdarstellung gewählt, sowie Schranken für die Intervalle definiert. Die Einführung der Zeitkomponente erfolgt durch die Einbettung von Submatrizen in eine große Matrix, sowie Definition von Abhängigkeiten von Zeitschritten untereinander.

Als Referenzproblem wurde folgendes Problem gewählt:

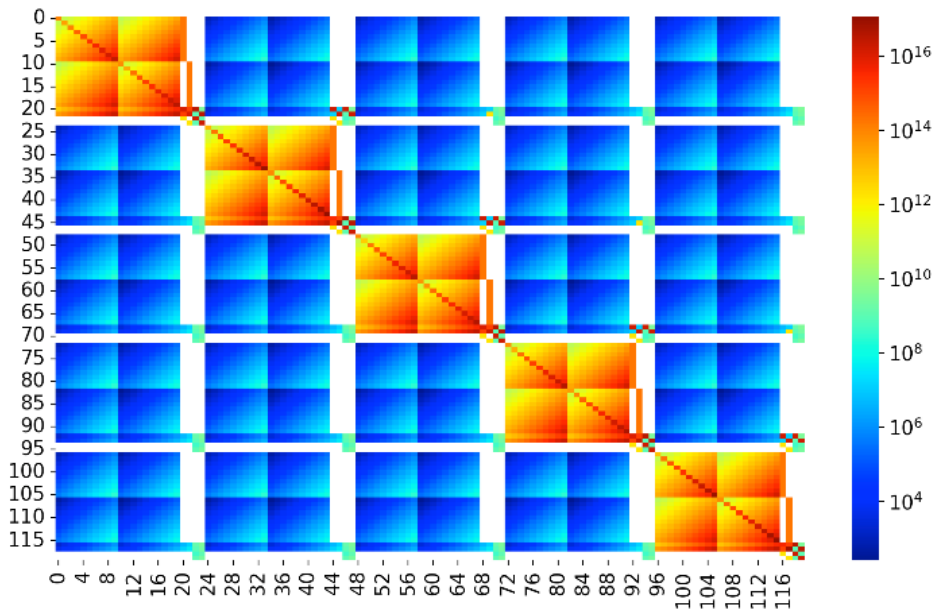
- 5 konventionelle Kraftwerke mit verschiedenen Mindeststillstandszeiten
- 2 erneuerbare Kraftwerke
- 24 Zeitschritte mit unterschiedlicher Energienachfrage

Anschließend wurde die Problemstellung verkleinert und vergrößert und die Größe der Matrix zu bestimmen und Lösungen verschiedener Problemgrößen auf dem Quantenannealer von D-Wave zu lösen.

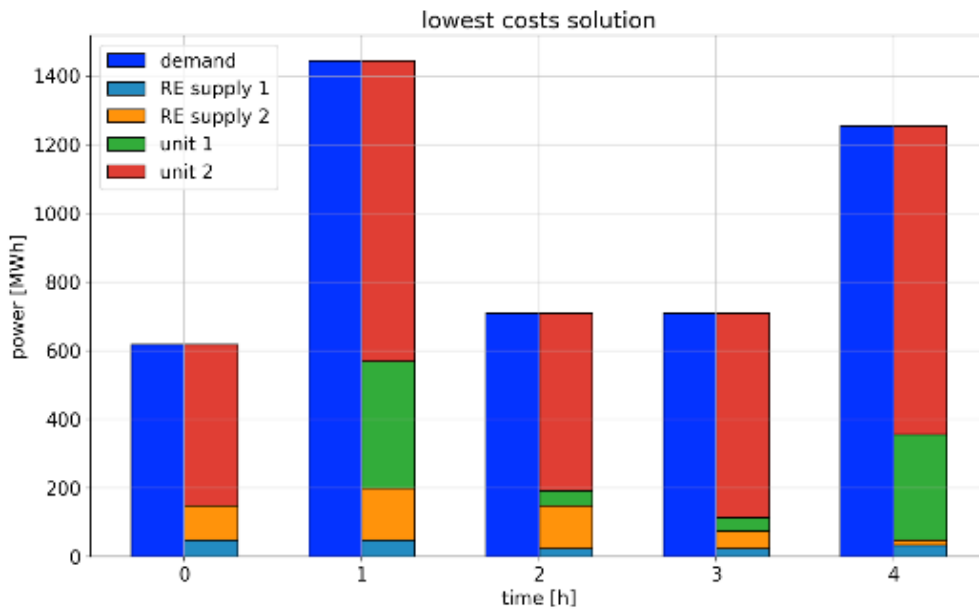
Example Set	QUBO size [n x n]				Sparsity (zeros)			
	res = 1	res = 2	res = 4	res = 6	res = 1	res = 2	res = 4	res = 6
XXS (2 units, 1h)	6 x 6 0.09 ms	8 x 8 0.1 ms	12 x 12 0.37 ms	16 x 16 0.4 ms	50 %	44 %	33 %	27 %
XS (2 units, 3h)	18 x 18 0.2 ms	24 x 24 0.3 ms	36 x 36 0.6 ms	48 x 48 0.9 ms	81 %	80 %	77 %	75 %
S (2 units, 5h)	30 x 30 0.4 ms	40 x 40 0.5 ms	60 x 60 0.9 ms	80 x 80 2 ms	88 %	88 %	86 %	85 %
M (5 units, 24h)	360 x 360 9 ms	480 x 480 21 ms	720 x 720 25 ms	960 x 960 43 ms	98 %	98 %	97 %	97 %
L (50 units, 24h)	3 600 x 3 600 0.3 s	4800 x 4800 0.6 s	7200 x 7200 1.5 s	9600 x 9600 3 s	98.6 %	98.1 %	97.6 %	97.2 %
XL (500 units, 24h)	36000 x 36000 26 s	48000 x 48000 57 s	72000 x 72000 2 min 30 s	96000 x 96000 5 min	98.6 %	98.2 %	97.6 %	97.2 %
XXL(5000 units, 24h)	360000 x 360000	480000 x 480000	720000 x 720000	960000 x 960000				

Im Folgenden ist eine Heatmap einer beispielhaften QUBO-Matrix zu sehen (Beispieldatensatz "S" mit einer 116x116 großen Matrix):

 Projektergebnisse



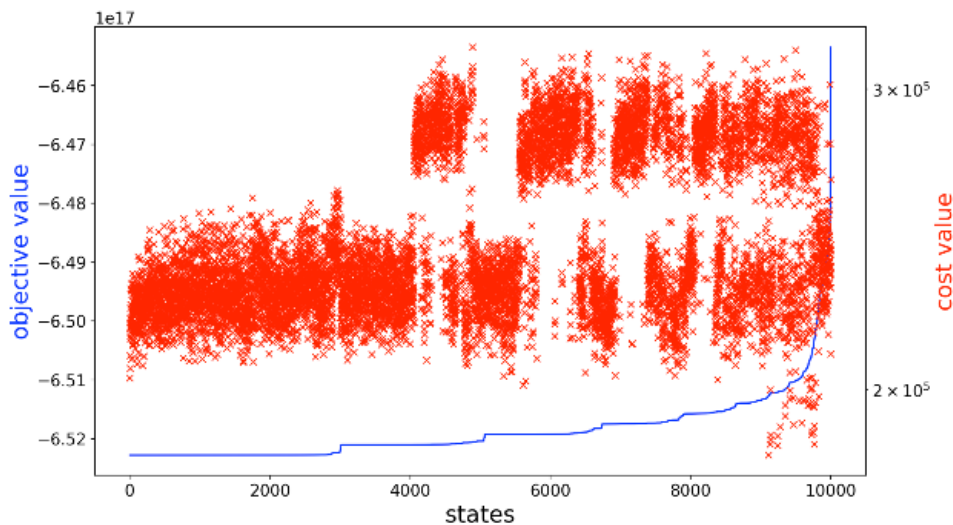
Nach Lösung mit dem D-Wave Quantenannealer + Gradient descent:



RE supply 1+2 entsprechen den erneuerbaren Energieproduzenten (Wind/Solar) deren Energieproduktion nicht angepasst werden kann. Unit 1+2 sind konventionelle Kraftwerke, deren Energieproduktion entsprechend der Residualnachfrage (demand) und den Möglichkeiten aus den Kraftwerksnebenbedingungen angepasst werden kann. Zu sehen hier die optimale Lösung, bei der Unit 1 (grün) +2 (rot) exakt den Unterschied aus RE supply 1 (hellblau) + 2 (orange) und demand (blau) ausgleichen.

Konvergenz der Lösung hinzu erlaubten und günstigen Zuständen:

Projektergebnisse



Für die Lösung verschiedener Probleminstanzen wurden folgende Solver entwickelt und verwendet:

- Brute force
- Monte Carlo random sampler
- Monte Carlo gradient descent
- Simulated annealing
- Branch and bound
- Quantum annealer
- Variational Quantum Eigensolver (VQE)
- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

Alle Solver sind in der Softwarebibliothek von pygrnd verfügbar und nutzbar:

<https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd>

Hier befinden sich die Demo-Notebooks für das Merit-Order Problem:

https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/notebooks/merit_order.ipynb

Hier befinden sich die Demo-Notebooks für das Unit Commitment Problem inkl. der Nebenbedingungen für Kraftwerks-Stillstandszeiten und –Maximallaufzeiten:

https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/notebooks/ucp_sat.ipynb

Hier befinden sich die Demo-Notebooks für das relaxierte Unit Commitment Problem inkl. der Nebenbedingungen für Kraftwerks-Stillstandszeiten und –Maximallaufzeiten, Unsicherheiten für erneuerbare Kraftwerke und Optimierung auf das gewichtete Optimum:

https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/notebooks/ucp_relaxedQUBO.ipynb

2.2.2 Stochastische Faktoren auf Quantencomputer

Die Stromproduktion erneuerbare Energieträger wie Wind/Solar hängt von externen Wetterfaktoren wie Wind und Sonnenstrahlung ab. Für eine Vorhersage der Stromproduktion sind gute Wettermodelle notwendig. Zudem muss die Stromnachfrage prognostiziert werden, wobei hier saisonale Effekte und Tagesschwankungen eine relativ gute Vorhersage ermöglichen. Beide Unsicherheiten müssen betrachtet werden, um die Residualnachfrage (Stromnachfrage – Produktion erneuerbare Energieträger) zu bestimmen, die durch konventionelle Kraftwerke gedeckt werden muss.

In erster Näherung kann angenommen werden, dass die Produktionsprognose jedes erneuerbaren Kraftwerks in jedem Zeitschritt normalverteilt um einen Erwartungswert ist. Deshalb kann nun der Erwartungswert der Zufallsvariable verwendet werden. Aufgrund der Linearität der QUBO-Terme entspricht die Summe der Erwartungswerte der QUBO-Einträge dem Erwartungswert des Gesamt-QUBOs. Auf Basis dieser Beziehung lassen sich die Erwartungswerte bilden und direkt für die Optimierung als Einträge in der QUBO-Matrix nutzen.

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \left[x^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} x \right] \\
 &= \mathbb{E} \left[\sum_i \sum_j a_{i,j} x_i x_j \right] \\
 &= \sum_i \sum_j \mathbb{E}[a_{i,j} x_i x_j] \\
 &= \sum_i \sum_j \mathbb{E}[a_{i,j}] x_i x_j \\
 &= x^T \begin{pmatrix} \mathbb{E}[a_{1,1}] & \cdots & \mathbb{E}[a_{1,n}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{E}[a_{n,1}] & \cdots & \mathbb{E}[a_{n,n}] \end{pmatrix} x \\
 \\
 &\implies \min_x \mathbb{E} \left[x^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} x \right] = \min_x x^T \begin{pmatrix} \mathbb{E}[a_{1,1}] & \cdots & \mathbb{E}[a_{1,n}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{E}[a_{n,1}] & \cdots & \mathbb{E}[a_{n,n}] \end{pmatrix} x
 \end{aligned}$$

2.2.3 Übertragbarkeit auf Monte-Carlo Simulationen

Die Formulierung aus 2.2.2. lässt ebenfalls auf die Unsicherheit bei der Portfoliooptimierung anwenden. Dabei kann eine Zufallsvariable $a_{i,j}$ als Eintrag einer Kovarianzmatrix angesehen werden, also die Korrelation von Assets, wobei diese den Erwartungswert einer unbekanntenen Wahrscheinlichkeitsfunktion annehmen können. In folgendem Notebook ist eine Demonstration zu finden, welche die Formulierung auf die Asset Allokation und multikriterielle Optimierung anwendet. Dabei wird die obige Formulierung angewendet:

Asset Allocation and Multicriteria Optimization

The asset allocation problem is one of the most famous examples of multicriteria optimization.

According to Markowitz's modern portfolio theory, for a given number of n assets, each asset numbered $i \in \{1, \dots, n\}$ can be treated as a **random variable** X_i , and its **expected return** μ_i and **standard deviation** σ_i can be estimated with historical stock data. For every two assets $i, j \in \{1, \dots, n\}$, we can estimate their **correlation** $\rho_{i,j} \in [0, 1]$, where the **covariance** of the two assets is calculated as $\sigma_{i,j} = \sigma_i \sigma_j \rho_{i,j}$, and the **covariance matrix** is defined as $\Sigma := (\sigma_{i,j})$. In case of $i = j$, the value $\sigma_{i,i} = \sigma_i^2$ is the **variance** of asset i .

Assume that the available amount of capital is large enough, so that the stock price of each asset does not matter, and the capital can be distributed in each asset in continuous percentages. In this case, a **portfolio** can be encoded as a vector of weights $w = (w_1, \dots, w_n)^T \in [0, 1]^n$, with the sum of weights $\sum_{i=1}^n w_i = 1$. The portfolio w produces a random variable $X_w = \sum_{i=1}^n w_i X_i$, with its expected return and variance calculated as

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[X_w] &= \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^n w_i X_i\right] = \sum_{i=1}^n w_i \mathbb{E}[X_i] \approx \sum_{i=1}^n w_i \mu_i = \mu^T w \\ \mathbb{V}[X_w] &= \mathbb{V}\left[\sum_{i=1}^n w_i X_i\right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \text{Cov}[X_i, X_j] \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \sigma_{i,j} = w^T \Sigma w\end{aligned}$$

and its **volatility** (i.e. standard deviation) given as $\sqrt{\mathbb{V}[X_w]}$.

The goal is to find a portfolio with a maximized return and minimized volatility (note that minimizing the volatility can be achieved by minimizing the variance):

$$\begin{aligned}\max & \quad \mu^T w \\ \min & \quad w^T \Sigma w \\ \text{s. t.} & \quad \sum_{i=1}^n w_i = 1 \\ & \quad w \in [0, 1]^n\end{aligned}$$

The linear constraint $\sum_{i=1}^n w_i = 1$ ensures that the total budget of $1 = 100\%$ holds; the range constraint $w \in [0, 1]^n$ says that all asset weights in the portfolio must be positive (i.e. only longs, no short sale), and each of them should not exceed 100%.

The two objectives are generally conflicting. For an optimization problem with multiple objectives, it is typically not possible to search for the optimal solution, but rather a solution set. In case of portfolio optimization, this solution set is called the **efficient frontier**, the elements of which are **Pareto-optimal**.

Das komplette Jupyter notebook für die Erstellung einer Asset Allokation basierend auf der Formulierung aus 2.2.2. ist hier zu finden:

https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/notebooks/qmco_portfolioOpt.ipynb

2.2.4 Anbindung der Hardware (aus TV 3) an die Softwareplattform GRND

Alle Funktionen wurden in einem Python Paket zusammengefasst und als öffentliches Github Repository der allgemeinen Entwicklercommunity bereitgestellt. Dabei wurden die folgenden Funktionen integriert:

Formulierung beliebiger Problemklassen als QUBO:

- Zeitschritte
- Stromnachfrage je Zeitschritt
- Kraftwerke konventionell mit Output, Mindest-/Maximallaufzeiten
- Wahrscheinlichkeitsverteilung von Prognosen erneuerbarer Kraftwerke
- Solver:

- Brute force
- Monte Carlo
- Simuliertes Annealing
- Anbindung an Quantennealer von D-Wave
- Implementierung von Quantenschaltkreisen für den Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
- Anbindung an Hardware von IBM

In der Python Datei **qaoa.py**

(<https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/pygrnd/optimize/qaoa.py>)

befinden alle relevanten Funktionen, um die QUBO Formulierung in die eines QAOA's zu überführen. Dabei können verschiedene Problemgrößen mit bis zu 25 qubits gelöst werden. Beispielhaft wird die Problemklasse XXS (4x4 QUBO Matrix) mit 5 Layern gelöst:

https://github.com/JoSQUANTUM/pygrnd/blob/main/notebooks/ucp_sat.ipynb

Hier die vollständige Funktion des QAOA, welche hier auf dem lokalen QASM Simulator ausgeführt wird:

```
In [10]: # solve example set xxs
# xs is a 4x4 qubo that requires 4 qubits
vec, counts, obj, prob, qc, res1, res2, bestBetas, bestGammas = QAOAoptimizeMaxCount(xxs,5,1000)

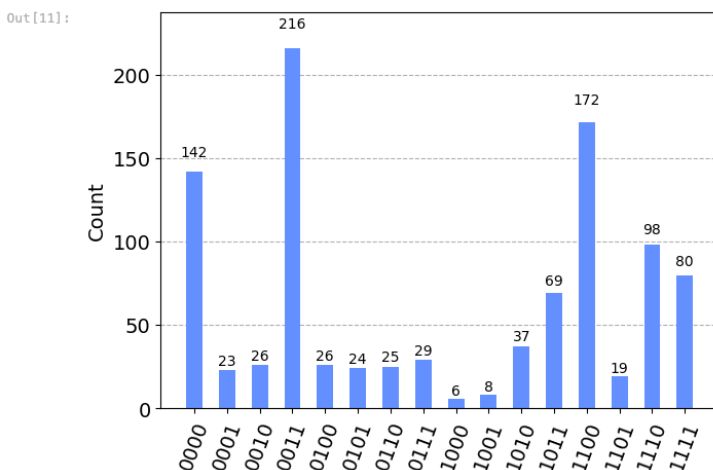
Selected device: <qiskit.providers.basic_provider.basic_simulator.BasicSimulator object at 0x177b80500> with
1000 shots
Trying 5 layer
Generating initial random parameters beta and gamma
Starting with betas: [3.7443099029981735, 5.905577736913067, 0.7220980631420435, -2.8871889705219846, -4.005059
703764794]
Starting with gammas: [-1.6673195290943505, -0.22400732060630357, 1.211096247479599, 4.326454138601974, -4.6375
78976309973]
Optimize FIRST round with random initialisation
Optimize SECOND round with the found initialization
Best Beta [ 3.76469093  6.07059848  0.7250357 -2.886231 -3.99910498] Best Gamma [-1.67639508 -0.22336379  1.2
1768849  4.35000389 -4.61654292]
Now run the QAOA with the found parameters

Optimum = -99.0 with probability = 0.216

Depth: 67
Gate counts: OrderedDict({'rz': 35, 'cx': 30, 'ry': 20, 'barrier': 11, 'h': 4, 'measure': 4})
```

Durch einfaches Anhängen eines spezifischen "Backend" kann diese Funktion auch auf echter Quantenhardware ausgeführt werden.

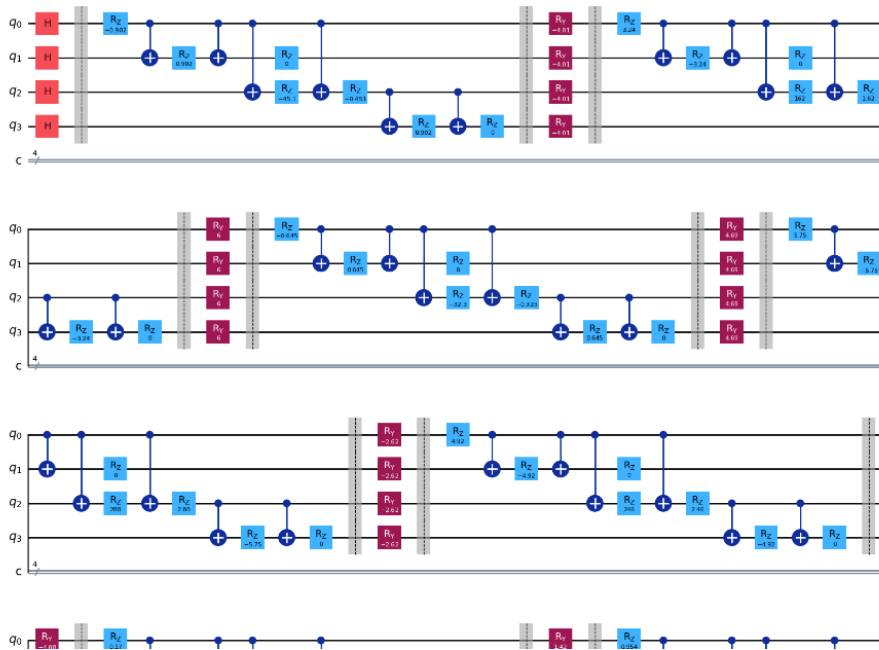
Hier die Messergebnisse des finalen Schaltkreises mit optimierten Parametern. Dabei die Anzahl der Counts in den einzelnen Bins (bei 1000 shots). Zu sehen hier, dass bei der (optimalen) Lösung "0011" in Binärdarstellung der höchste Count vorliegt. Das bedeutet, dass die Hyperparameter des Schaltkreises (beta, gamma) so optimiert wurden, dass am Ende das korrekte Ergebnis gefunden wird. Korrekterweise gehört der Lösungsvektor "0011" zum globalen Optimum und wird bei 1000 shots mit 21,6% Wahrscheinlichkeit gefunden



Hier ein Ausschnitt des ausgeführten Schaltkreises:

```
In [25]: print("Circuit depth: ", qc.depth(), " | Number of qubits: ", qc.size())
display(qc.draw("mpl", style="iqp"))
```

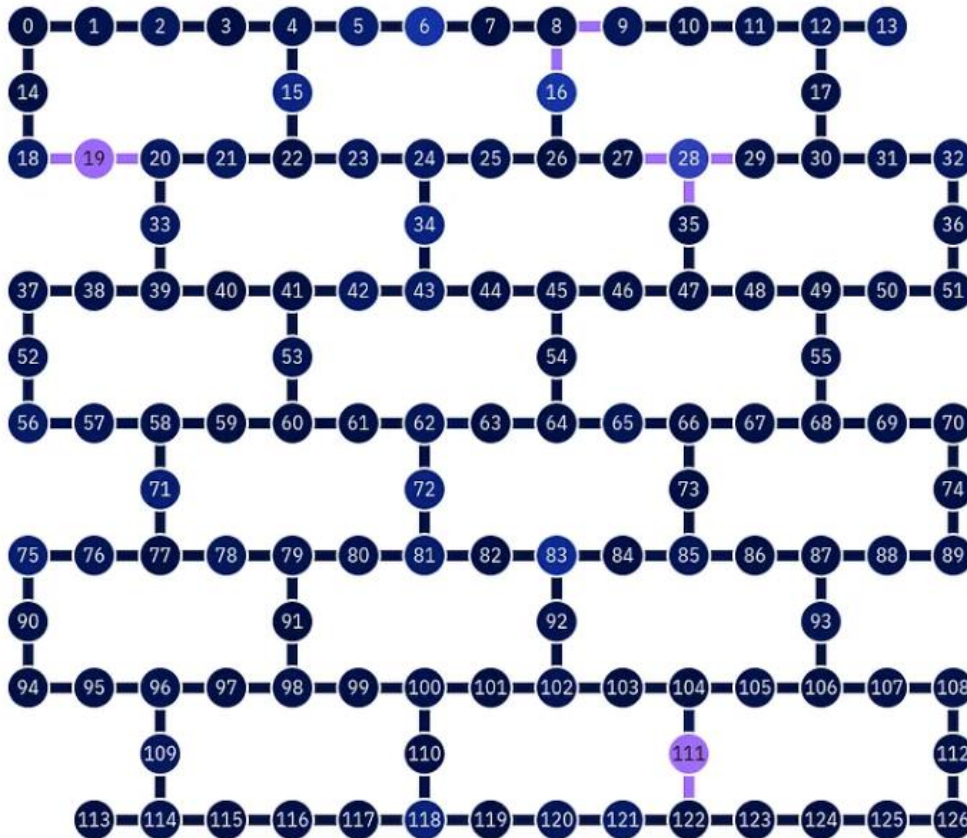
Circuit depth: 119 | Number of qubits: 161



Zu sehen dabei die verschiedenen Layer.

1. Initialisierung mit Hadamard Gates H
2. Implementierung der Kostenfunktion (Mapping des QUBO auf Gatteroperationen) - Kosten Hamiltonian
3. Hyperparameter – Mixing Hamiltonian

Teil der Library ist die Transpile Funktion, welche die wichtigste Integrationskomponente Richtung Hardware von IBM darstellt. Dabei werden die universellen Gatteroperationen auf die Hardwarespezifischen Operationen übersetzt und die besondere Topologie von echter Hardware berücksichtigt:



ibm_sherbrooke 127 qubits device.

Hier zu sehen, dass jedes nummerierte Qubit in einem Gitter angeordnet ist, wobei nicht jedes Qubit mit jedem vernetzt ist und nicht verschränkt werden kann. Beispielsweise kann Qubit 2 ausschließlich mit Qubit 1 und Qubit 3 verschränkt werden, wobei Qubit 4 mit Qubit 3, Qubit 5 und Qubit 15 verschränkt werden kann. Fall also eine voll besetzte QUBO-Matrix implementiert werden muss, müsste jedes Qubit mit jedem vernetzt werden, was mit dieser Topologie mittels Swap-Gatteroperationen sehr viele Zusatzoperationen notwendig machen würde. Aus diesem Grund, wurde bereits in der Konstruktion der QUBO-Formulierung auf eine dünn besetzte Matrix geachtet.

Für die Übersetzung auf Neutralatome kann das folgende Paket genutzt werden, welches von der Universität Heidelberg entwickelt wurde:

<https://github.com/synqs/pennylane-ls>

2.3 Teilvorhaben Entwicklung analoger Quantensimulatoren

2.3.1 Hamiltonianformalismus

Zur Lösung von Optimierungsproblemen in einem Quantensimulator muss man zunächst eine klassische Kostenfunktion bestimmen, deren Minimum die optimale Lösung ergibt. Dann muss man die Kostenfunktion in einen Hamilton-Formalismus übersetzen, in den meisten Fällen Ising-ähnliche Modelle. Diese müssen auf einen geeigneten Hamilton-Operator abgebildet werden, der in Quantenhardware realisierbar ist. Motiviert durch den Heidelberger Versuchsaufbau haben wir eine experimentelle Plattform für universelle Quantenberechnungen vorgeschlagen, die eine Mischung aus zwei ultrakalten Atomsorten (A und B) verwendet. Von den beiden Arten ultrakalter Atome realisiert Spezies A lokalisierte kollektive Spin-Freiheitsgrade (Qudits) als grundlegende Informationseinheiten. Diese sind an zweite Spezies B gekoppelt, die als ein kontinuierliches Bad im Hintergrund vorliegt und deren ausgedehnte Phononenanregungen Verschränkung zwischen den Qudits erzeugen. Der physikalische Hamilton-Operator dieses Szenarios, die Abstimmbarkeit der Variablen und die notwendigen experimentellen Resources werden in dem veröffentlichten Papier [Kasper2021] detailliert beschrieben. Es ist wichtig zu betonen, dass bei der Spezies B, die eine kontinuierliche Variable ist, viel mehr Möglichkeiten von Quantenannealingpfaden (einschließlich nicht-adiabatischer Anregungen) möglich sind, was die Wahrscheinlichkeit erhöht, die optimale Lösung zu finden. Die Initialisierung von Quantenschaltungen, auch bekannt als

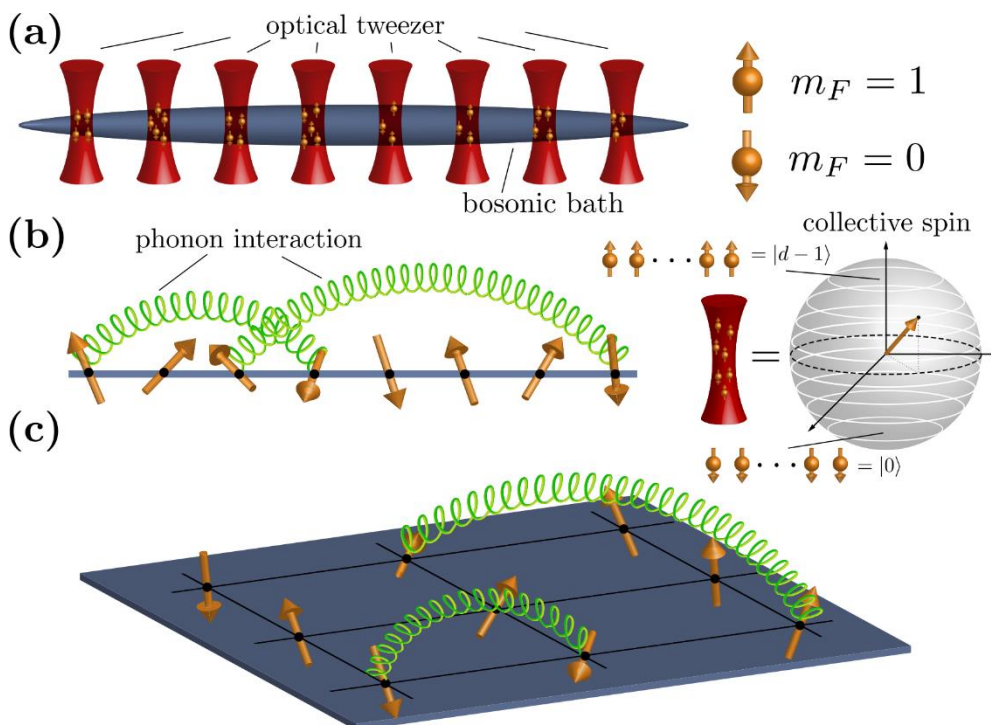


Abbildung 15: Quantencomputing mit ultrakalten Atomen. (a) Vorgeschlagene experimentelle Plattform für den Fall einer Dimension: Bosonische Atome A (gelb) werden über optische Potentiale (rote optische Pinzette) gefangen und in ein eindimensionales Quasi-Kondensat eingebracht, das von einer zweiten Spezies bosonischer Atome B (blau) gebildet wird. (b) und (c) Ein-/zweidimensionales Spin-Phononen-Modell: Zwei Hyperfeinniveaus mehrerer A-Atome bilden kollektive Spins (gelbe Pfeile), die über Phononenanregungen von B-Atomen (grüne Linien) wechselwirken. Aus [Kasper2021].

Zustandsvorbereitung von Spezies A, kann mit Hilfe eines externen Magnetfelds und dem Auslesen des Zustands mit Hilfe der Homodyne-Detektion erfolgen. Darüber hinaus wurde gezeigt, wie der vorgeschlagene Aufbau für die Quantenfehlerkorrektur verwendet werden kann, die für gute Ergebnisse im verrauschten Quantencomputer mit wenigen fehlerhaften Operationen unerlässlich ist. Diese Ergebnisse bilden die Grundlage für den Hamilton-Formalismus für Quantenannealing auf kalten Atomen, der z.B. in [Deller2023] zum Entwurf von Quantenoptimierungsprotokollen für verschiedene harte Optimierungsprobleme verwendet wurde. In dieser Arbeit wird im Detail der Ressourcenaufwand der für die Implementierung verschiedener relevanter Optimierungsprobleme in der Kalt-Atom-Architektur nötig ist beschrieben und mit den Ressourcen in typischen Qubit-Systemen verglichen.

Diese Arbeiten ermöglichen es, eine Vielzahl von eingeschränkten Optimierungsproblemen, wie das in TV 1.1 behandelte Fundamentalmodell der energiewirtschaftlichen Modellierung in einer quantenmechanischen Maschine zu behandeln. Solche eingeschränkten Optimierungsprobleme treten ubiquitär auf, z.B. in Form des Knapsack-Problems oder des Problems des kürzesten Weges. Im Kontext des Energiemarktes der nahen Zukunft ist ein besonders relevantes Optimierungsproblem die Aufgabe, den Ladeplan von Elektrofahrzeugen zu optimieren. In Zusammenarbeit mit der FhG IOSB haben wir untersucht, wie dieses Problem in einem experimentellen Aufbau umgesetzt werden kann. Die in [Kasper2021] (siehe unten) vorgeschlagene, auf kalten Atomen basierende, Quantenarchitektur erwies sich als ideal für diese Art von Optimierungsproblemen. Wir untersuchten in diesem Zusammenhang auch die Verwendung des *Quantum approximate optimization algorithms* (QAOA), der eine Möglichkeit darstellt, das Problem der Adiabaticität des Quantenannealing zu umgehen, indem eine trotterisierte Evolution zusammen mit einem klassischen Optimierer verwendet wird. Zu diesem Zweck haben wir diese Art von Algorithmus, der ursprünglich zur Lösung von Qubit-Problemen vorgeschlagen wurde, für den Kontext des Versuchsaufbaus verallgemeinert, d.h. für kollektive Spin-Freiheitsgrade, auch bekannt als Qudits. In der entsprechenden Publikation [Deller2023] wird qudit-QAOA vorgestellt und anhand verschiedener ganzzahliger Optimierungsprobleme veranschaulicht, zu denen neben dem Laden von Elektrofahrzeugen auch Graphenfärbungsprobleme und Portfolio-Management gehören.

Um die Effizienz der Formulierung des Elektrofahrzeug-Ladeproblems für Quantencomputer weiter zu verbessern, haben wir eine heuristische Hybridstrategie vorgeschlagen, die klassische und Quantenoptimierung kombiniert. Dadurch können Lösungen mit Randbedingungen statistisch erfasst werden, während der Optimierungsraum der Aufgabe erheblich eingeschränkt wird. Dieser Ansatz ist allgemein und kann daher leicht an andere Optimierungsprobleme angepasst werden. Die Arbeit wurde als Konferenzbericht veröffentlicht [DeAndoin2023].

Um allgemeingültige Merkmale zu extrahieren und die Wirkung des Projekts über sein primäres Ziel hinaus zu erweitern, haben wir darüber hinaus eine Reihe von eingeschränkten Optimierungsproblemen untersucht, die für reale Anwendungen relevant sind. Die Arbeit [Hauke2021] zeigt zum Beispiel, wie man ein kompliziertes Problem der Übergänge in der Proteinfaltung als eingeschränktes Problem des kürzesten Weges formulieren kann. In dieser Arbeit wird weiter analysiert, wie ein solches Problem mit Quantenannealing gelöst werden kann. Die vielversprechenden Ergebnisse deuten auf das zukünftige Potenzial von Quantenannealing zur effizienten Lösung von Optimierungsproblemen hin, d.h. in unserem Fall von kalten atomaren Quantensimulatoren.

Weiterhin haben wir das Polymer-Sampling als ein eingeschränktes Optimierungsproblem formuliert. Auf diese Weise werden Mikrozustände, die verschiedene Gitterpolymer-Ensembles darstellen, nahtlos durch die Lösung geeigneter diskreter Energieminimierungsprobleme erzeugt [Micheletti2021]. Wir konnten zeigen, dass bereits eine quanteninspirierte Lösung des entsprechenden quadratischen unconstrained binary

optimization (QUBO)-Problems die besten derzeit verwendeten Algorithmen, die auf Monte-Carlo-Sampling basieren, deutlich übertrifft. Diese Ergebnisse zeigen das Potenzial von quanteninspirierten Lösungen, die bereits bei der Implementierung auf klassischen Maschinen große Auswirkungen haben können. Darüber hinaus verbessert sich die Leistung sogar noch weiter, wenn sie auf einem Quantenannealer implementiert wird, was auf das Potenzial für eine Quantenbeschleunigung in diesem wichtigen Szenario hindeutet.

2.3.2 Test des Fundamentalmodells auf Quantensimulator und Hardware Entwicklung

Ein wichtiger Teil der in TV 3.2 vorgesehenen Arbeit war eine vergleichende Studie von Quanten-Annealing- und Quanten-Metrologie-Protokollen in verschiedenen Architekturen. In [Santra2024a] wollten wir besser verstehen, wie Quantenoptimierung einerseits und Quanten-Simulatoren andererseits auf einer fundamentalen Ebene zusammenhängen und was die Charakteristika beider Protokolle in verschiedenen Architekturen sind, insbesondere der in TV 3.1 behandelten Kalt-Atom-Maschine die Wechselwirkungen zwischen kollektiven Spins ausnutzt. Durch detaillierte numerische Berechnungen fanden wir heraus, dass ein Quantenoptimierer, der bekannte Optimierungsprobleme wie das symmetrische MaxCut-Problem auf vollständigen Graphen löst, formal äquivalent zu einer Plattform für kalte Atome ist, die ein Quantenmetrologieprotokoll über den sogenannten einachsigen Twisting-Hamiltonian durchführt. Diese Arbeit stellt somit eine wichtige Verbindung zwischen Quantenannealingprotokollen und bestehender Hardware mit kalten Atomen her. In dieser Arbeit wurde weiterhin eine vergleichende Studie zwischen verschiedenen Plattformen (gefangene Ionen, kalte Atome, supraleitende qubits) durchgeführt und insbesondere der Ressourcenaufwand für die Lösung des MaxCut-Problems vergleichend gegenübergestellt.

Metrologisch nützlich Squeezing, das von einem drei Lagen tiefen QAOA für das MaxCut-Problem in einem vollständigen Graphen von 12 Knoten erzeugt wurde. (a) Vollständig verbundener ungewichteter Graph, in welchem Knoten und Kanten gemäß einer der 924 möglichen maximalen Schnittkonfigurationen eingefärbt sind. (b) Wigner-Quasiwahrscheinlichkeitsverteilung des symmetrischen Dicke-Zustands, ein idealisiertes Beispiel für einen gequetschten Zustand und das Ziel für unsere QAOA. (c) Quanten-Schaltungsdarstellung von QAOA mit abwechselnder Anwendung von Kostenfunktion und Mischer-Hamilton-Operator. Die Bloch-Kugeln und Histogramme von

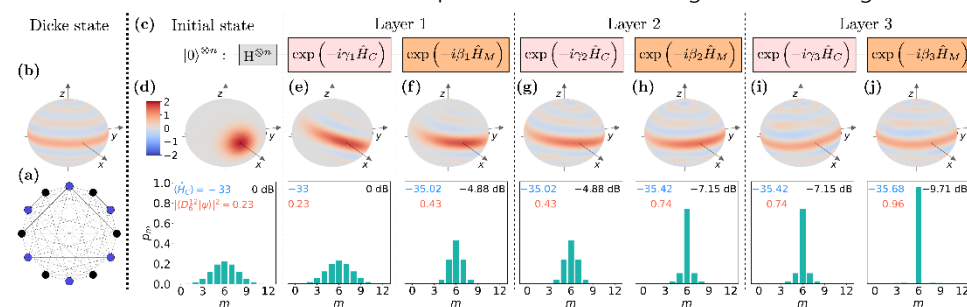


Abbildung 16: Metrologisch nützlich Squeezing, das von einem drei Lagen tiefen QAOA für das MaxCut-Problem in einem vollständigen Graphen von 12 Knoten erzeugt wurde. (a) Vollständig verbundener ungewichteter Graph, in welchem Knoten und Kanten gemäß einer der 924 möglichen maximalen Schnittkonfigurationen eingefärbt sind. (b) Wigner-Quasiwahrscheinlichkeitsverteilung des symmetrischen Dicke-Zustands, ein idealisiertes Beispiel für einen gequetschten Zustand und das Ziel für unsere QAOA. (c) Quanten-Schaltungsdarstellung von QAOA mit abwechselnder Anwendung von Kostenfunktion und Mischer-Hamilton-Operator. Die Bloch-Kugeln und Histogramme von (d) bis (j) zeigen den Zustand nach dem entsprechenden Gatter in der optimierten QAOA-Schaltung. Das Squeezing (in schwarz), die Energieerwartung (in blau) und die Überlappwahrscheinlichkeitsdichte mit dem Dicke-Zielzustand (in orange) werden in jedem Histogramm angezeigt. Aus [Santra2024a].

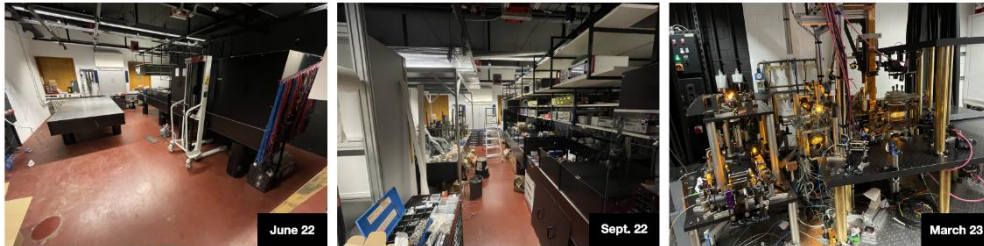


Abbildung 17: Bilder des Labors und des Aufbaus im Laufe des ersten Jahres des Umbaus.

(d) bis (j) in Abbildung 16: Metrologisch nützlichem Squeezing, das von einem drei Lagen tiefen QAOA für das MaxCut-Problem in einem vollständigen Graphen von 12 Knoten erzeugt wurde. (a) Vollständig verbundener ungewichteter Graph, in welchem Knoten und Kanten gemäß einer der 924 möglichen maximalen Schnittkonfigurationen eingefärbt sind. (b) Wigner-Quasiwahrscheinlichkeitsverteilung des symmetrischen Dicke-Zustands, ein idealisiertes Beispiel für einen gequetschten Zustand und das Ziel für unsere QAOA. (c) Quanten-Schaltungsdiagramm von QAOA mit abwechselnder Anwendung von Kostenfunktion und Mischer-Hamilton-Operator. Die Bloch-Kugeln und Histogramme von (d) bis (j) zeigen den Zustand nach dem entsprechenden Gatter in der optimierten QAOA-Schaltung. Das Squeezing (in schwarz), die Energieerwartung (in blau) und die Überlappwahrscheinlichkeitsdichte mit dem Dicke-Zielzustand (in orange) werden in jedem Histogramm angezeigt. Aus [Santra2024a].

Neben den theoretischen Aspekten war auch ein definiertes Ziel eine neue Plattform zu realisieren, die erlaubt quantenmechanische kollektive Variablen (squeezed states) zu implementieren. Eine einschneidende Veränderung im Projekt war der Weggang des Projektleiters J.Prof. Jendrzewski, der im April 2022 das akademische Umfeld verlassen hat. Das Experiment wurde zu dieser Zeit von 3 Doktorand:innen vorangetrieben und musste entsprechend weitergeführt werden. Prof. Oberthaler hat sich bereit erklärt die Betreuung der Doktorand:innen und der entsprechenden Projekte zu übernehmen.

Bei Übergabe des Projekts war der Prototyp eines experimentellen Aufbaus vorhanden, in dem Laserkühlung beider Spezies d.h. Qudit (Kalium) und Hintergrund (Natrium) möglich war. Erste Experimente zur Einzelatomdetektion von Natrium unter dem Einfluss eines Hintergrunds aus Kalium waren durchgeführt und veröffentlicht [Bhatt2022]. Zur weiteren Erniedrigung der Temperatur mit Hilfe von Verdampfungskühlen hatte der Aufbau wesentliche Limitationen (bspw kleine erreichbare Magnetfeldgradienten, fehlende Freiheitsgrade im optischen Aufbau, um hohe Atomzahlen zu erreichen, siehe [Bhatt2022a]) Außerdem ließ der sehr kompakte Aufbau der Lasertische keine effiziente Erweiterung oder Umstrukturierung zu. Um diese prinzipiellen Hürden auszuräumen, wurde die Laborumgebung angepasst und eine Apparatur von Grund auf neu konzipiert und aufgebaut.

Nach der halbjährigen Demontage und Umstrukturierung des Labors wurde im Frühjahr 2023 begonnen den neuen Aufbau zu installieren. Dafür wurde das Vakuumsystem auf einen größeren optischen Tisch transferiert und das Hochvakuum in der Quellkammer für Kalium neu erstellt. Dafür wurde ein Pumpstand mit Turbomolekularpumpe und Vakuumdiagnostik an diesen Teil angeflanscht, die Kammer in Aluminiumfolie und Heizbänder gehüllt und kontrolliert auf bis zu 250 Grad Celsius geheizt. Nach einigen Wochen auf dieser Temperatur konnte die permanente Hochvakuumpumpe aktiviert, das System abgekühlt und der Pumpstand abgeflanscht werden. Anschließend wurde ein neu entwickelter wassergekühlter Magnetspulenaufbau eingebaut und in Betrieb genommen. Abweichend vom ursprünglichen Konzept ist die Hauptmagnetfeldrichtung nun vertikal statt horizontal. Dies ist von Vorteil, damit die Wechselwirkung zwischen Natrium-Hintergrund und Kalium möglichst homogen und flexibel eingestellt

werden kann (Bild links). Parallel wurden mehrstufige Plattformen für die Montage von optischen Komponenten um die Kammer herum neu erstellt und bestückt. Eine kinematische Halterung für das hochauflösende Objektiv wurde neu entworfen und eingebaut. Die ebenfalls neu entworfenen optischen Aufbauten für die zwei Quellen mit zweidimensionaler Laserkühlung und die dreidimensionale magneto-optische Falle bieten sehr viel mehr Flexibilität bei der Optimierung und eine höhere Stabilität als der bisherige Aufbau, bei dem eine unabhängige Optimierung beider Spezies nicht möglich war.

Projektergebnisse

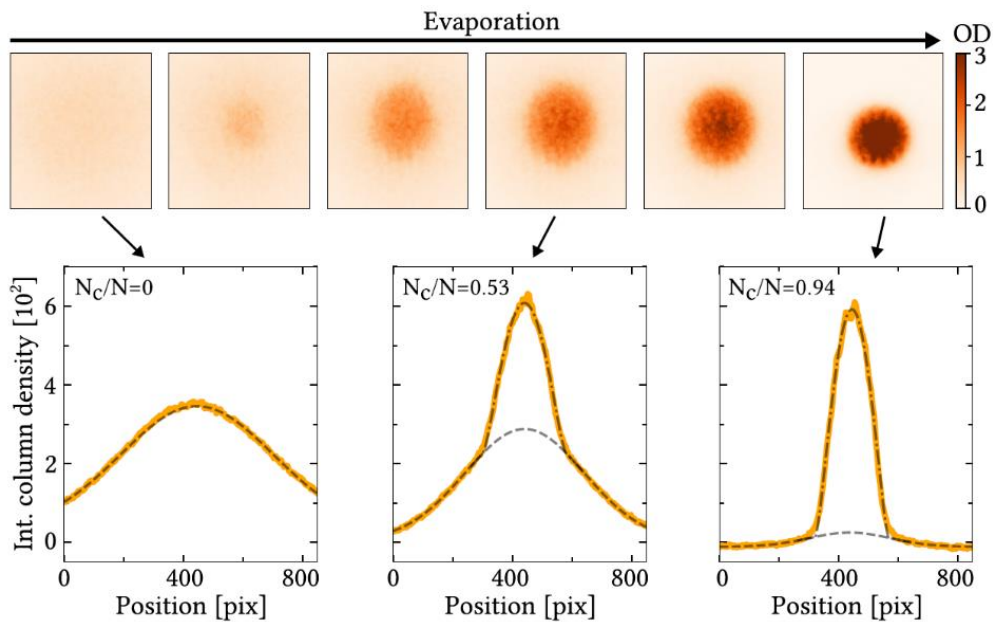


Abbildung 19: Oben: Absorptionbilder die erlauben die atomare Dichte zu messen; von links nach rechts wird die Verdampfungsrampe heruntergefahren und die Kondensation von Natrium zeigt sich als Erhöhung der Dichte in der Falle; Unten die aufsummierten Dichten zeigen die klare Ausbildung eines Kondensats, weil die Verteilung bi-modal wird.

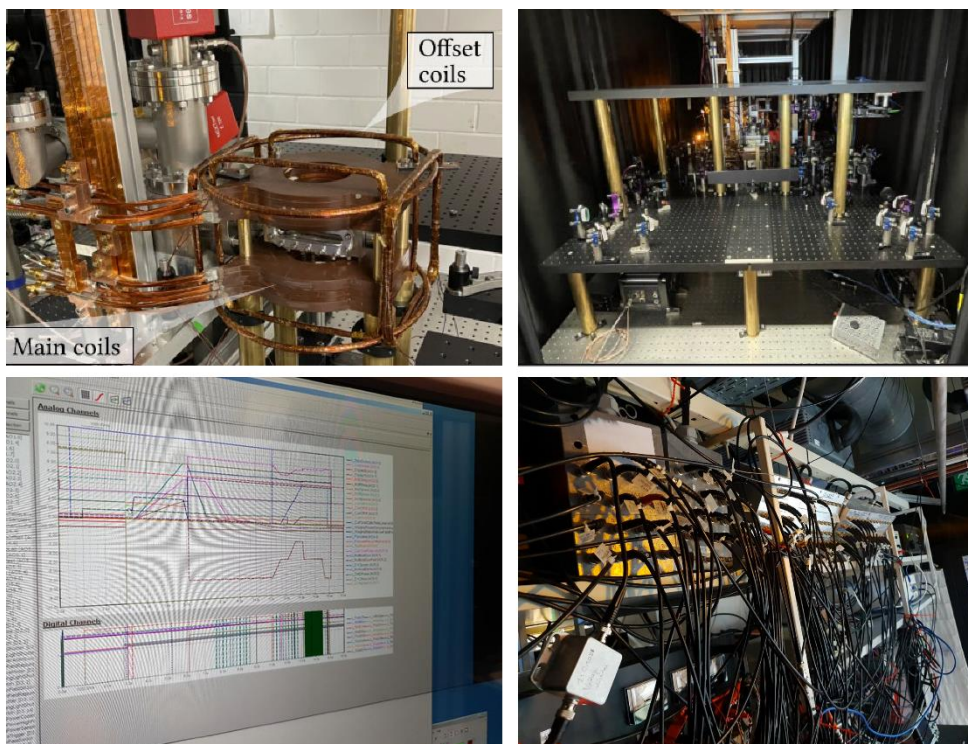


Abbildung 18: Oben links: Die Spulen zu Erzeugung der starken Magnetfeldgradienten wurden neu designed und im experimentellen Aufbau eingebaut. Oben rechts: Für den Vakuumaufbau und dem optischen Aufbau wurde eine temperaturstabilisierte und staubarmen Umgebung realisiert. Untere Reihe: Die vielen Parameter des Experiments werden mit spezieller Software realisiert, die auch erlaubt das Experiment remote zu betreiben.

Die hardwarenahe Steuerung des experimentellen Aufbaus wurde an bestehende Systeme angepasst, sodass ein effektiver Wissenstransfer zwischen benachbarten Laboren möglich wurde. Die optischen Tische für die Laser und Aufbereitung des Laserlichts wurden für beide Spezies neu aufgebaut. Dabei wurden einige Schwächen des alten Aufbaus beseitigt und der Aufbau für nahresonantes Kalium-Licht komplett neu entworfen. Zur Optimierung beider Spezies wurden Absorptionsabbildungen mit niedriger Vergrößerung installiert. Nach der erfolgreichen Laserkühlung und Speicherung beider Spezies in magneto-optischen Fallen und weiterer Kühlung in optischen Molassen konnten beide Spezies zusammen in eine Magnetfalle geladen werden. Die automatisierte Ansteuerung der Mikrowellen-Infrastruktur wurde verbessert und Verdampfungskühlung von Natrium erfolgreich implementiert. Als folgende Stufe wurde eine gekreuzte optische Dipolfalle installiert. In diese wurde zunächst Natrium umgeladen und durch weitere Verdampfungskühlung im Mai 2023 als wichtiger Meilenstein ein Bose-Einstein-Kondensat erzeugt. Abbildung 19 zeigt die letzten Momente der Verdampfungskühlung [Kilinc2024].

Das Erreichen dieses Materiezustands in der Apparatur hat gezeigt, dass die Kontrolle der experimentellen Parameter eine Qualität erreicht hat, um zügig die nächsten Schritte anzugehen. Erste Untersuchungen der Wechselwirkung von thermischen Wolken einer Mischung aus Natrium und Kalium haben die Magnetfeldwerte bekannter Feshbach-Resonanzen bestätigt und gezeigt, dass eine präzise Kontrolle der Wechselwirkung zwischen Hintergrund und Qudit möglich ist, siehe [Kilinc2024].

Derzeit wird die Kühlung von Kalium weiter verbessert, sodass dieses ebenfalls in einem Bose-Einstein-Kondensat präpariert werden kann. Gleichzeitig wird an der Implementierung eines hochauflösenden Abbildungssystems und einer weiteren Dipol-Falle gearbeitet, um beide Kondensate in eine zweidimensionale Konfiguration umladen und diese mit hoher Ortsauflösung auslesen zu können.

2.3.3 Quantensimulator mit stochastischen Parametern

Realistische Optimierungsprobleme sind oft durch Parameter mit signifikanter Unsicherheit gekennzeichnet, und Quantensimulationen in echter Quantenhardware unterliegen zufälligem Rauschen. Daher ist es wichtig, den Einfluss von Unordnung (stochastische Faktoren) auf die Dynamik eines Quanten-Hamilton-Operators (Kostenfunktion) zu verstehen. Mit diesem Ziel—und in Einklang mit den Arbeiten an TV 1.3 und TV 2.2) wurden analytische Mastergleichungen abgeleitet, welche die Dynamik relevanter Observablen nach der Unordnungs-Mittelung über vielfache Realisierungen unsageordneter Hamilton-Operatoren beschreibt [Santra2024c]. Wir haben weiterhin analysiert, wie sich das dynamische Verhalten in Abhängigkeit von der Wahrscheinlichkeitsverteilung der stochastischen Faktoren ändert. Das Verständnis dieses Verhaltens gibt Aufschluss über die Auswahl der experimentellen Kontrollparameter, die den Quantenzustand vor dem durch seine fluktuierende Umgebung verursachten Zerfall schützen.

Ein weiterer wichtiger Aspekt der Arbeiten an TV 3.1 und TV 3.3, in Zusammenarbeit mit TV 1.4, war das benchmarking von Quantensimulatoren. In [Santra2024a] wurde herausgearbeitet, dass „squeezing“ und der Grad an Mehrteilchen-Verschränkung, der von einer Quantenhardware für einen bestimmten Algorithmus wie QAOA erreicht wird, als ein Benchmark der Qualität der Maschine verwendet werden kann.

In Anlehnung an die obigen Arbeiten haben wir uns außerdem zum Ziel gesetzt, die Rolle der Verschränkung für eine mögliche Quanten-Beschleunigung zu verstehen. Eine wichtige Frage in diesem Feld ist, wie viel Verschränkung im Quantensimulator-Experiment erzeugt werden muss, damit der Algorithmus erfolgreich läuft. Wir haben ein geometrisches Maß der Verschränkung mit zwei relevanten Quantenalgorithmen berechnet, um die Rolle der Mehrteilchen-Verschränkung zu untersuchen: Quantenannealing und QAOA. Die Verschränkung wächst während des Verlaufs des Algorithmus und nur wenn eine erfolgreiche Lösung erreicht wird, geht die Verschränkung auf null zurück. Dieses Verhalten beschreibt das neuartige Phänomen einer „Verschränkungs-

barriere“ [Santra2024b]. Wir haben auch beobachtet, wie die Höhe einer solchen Verschränkungsbarriere mit sinkender Geschwindigkeit des Algorithmus abnimmt. Weiterhin haben wir Statistiken über die Beobachtung solcher Verschränkungsbarrieren bei verschiedenen Problemen gesammelt, um ihre Beziehung zur minimalen Energielücke zu verstehen. Solche Analysen werden wichtig sein, um die Leistung von Quantenannealern einschätzen zu können, insbesondere im Vergleich zu klassischen Maschinen. Um das Potenzial für eine Quantenbeschleunigung in der Quantenoptimierung gegenüber der klassischen Optimierung besser zu verstehen, haben wir in [Musso2024] die Effizienz des Quanten-Annealing beim Problem des kürzesten Weges eingehend analysiert. Zu diesem Zweck haben wir klassische Tensornetzwerk-Simulationen verwendet und eine Störungstheorie hergeleitet. Dieser analytische Ansatz ermöglicht es uns, den optimalen Annealing-Zeitplan für Instanzen vorherzusagen, die zu groß sind, um sie auf klassischen Computern zu berechnen, und könnte auch bei anderen Problemen Anwendung finden.

3 Fortschritte außerhalb des Projektes

Fortschritte außerhalb des
Projektes

3.1 Fortschritte im Bereich der Quantenalgorithmen

Die Anwendung von Quantencomputing zur Lösung von Optimierungsproblemen hat in den letzten Jahren erhebliche Fortschritte gemacht. Daher werden wir hier nur einige Highlightpublikationen zu ausgewählten Themen besprechen. Für einen tiefergehenden und vollständigen Überblick verweisen wir auf die zwei Übersichtsartikel, die im Zuge des Projekts entstanden sind: Die im Projekt gewonnenen Kenntnisse konnten zur Veröffentlichung eines Whitepapers zum Stand und der nächsten Herausforderungen zum Aufzeigen von möglichen Quantenvorteilen im Bereich Quantenoptimierung herangezogen und genutzt werden [Abbas2023]. Ferner besprechen wir die generelle Anwendung von Quantenalgorithmen für Optimierungsprobleme von der Modellierung über die Auswahl des Quantenalgorithmus bis zum Einsatz der Quantenhardware in einer weiteren Publikation [Au-Yeung2023]. Wir untersuchen, wie Quantenmethoden effizient bestimmte NP-schwere Optimierungsprobleme lösen können, bei denen klassische Ansätze versagen. Und wir bieten einen Einstieg in das Feld der Quantenoptimierung und diskutieren die Fortschritte, Hindernisse und Zukunftsperspektiven dieser Technologien.

Ein umfassender Überblick über die aktuellen Entwicklungen im Bereich der quantenmechanisch inspirierten Metaheuristik-Algorithmen wird von Biswal et al. (2023) präsentiert. Der Artikel betont die signifikanten Vorteile der Quantenmechanik zur Verbesserung konventioneller Optimierungstechniken und diskutiert die zukünftigen Perspektiven und Herausforderungen dieser neuen Kategorie von Optimierungsalgorithmen [Biswal2023]. Wang et al. (2023) bieten eine Übersicht über fundamentale Quantenalgorithmen, die zur Lösung von Optimierungsproblemen verwendet werden können, einschließlich Grover-Suche, Quantenphasenabschätzung, Quantum Annealing, QAOA und VQE. Der Artikel beleuchtet die Anwendungen dieser Methoden im Ingenieurwesen und diskutiert die Herausforderungen bei der Entwicklung skalierbarer und zuverlässiger Quantenalgorithmen [Wang2023]. Cerezo et al. (2020) bieten einen umfassenden Überblick über Variational Quantum Algorithms (VQAs), die als führende Strategie zur Nutzung von derzeit verfügbaren Quantencomputern gelten. Der Artikel diskutiert die Herausforderungen, die mit der Trainierbarkeit, Genauigkeit und Effizienz von VQAs verbunden sind, und beleuchtet die aufregenden Aussichten, diese Algorithmen zur Erzielung eines Quantenvorteils einzusetzen [Cerezo2020].

Quantum Annealing

Ein wichtiger Beitrag zur Anwendung von Quantum Annealing wird von Shaydulin et al. (2019) vorgestellt. Sie diskutieren hybride quanten-klassische Algorithmen zur Lösung größerer Optimierungsprobleme und demonstrieren deren Anwendung auf Probleme wie die Gemeinschaftserkennung [Shaydulin2019].

Korolyov und Khodzinskyi (2020) bieten einen Überblick über Methoden zur Erstellung von Quantenalgorithmen für kombinatorische Optimierungsprobleme und analysieren den Einfluss der Qubit-zu-Qubit-Kopplung auf die Leistung der Quantenberechnung. Sie zeigen Beispiele für die Konstruktion eines Halbaddierers für zwei Qubits eines IBM-Quantenprozessors und die Lösung des Problems der maximalen unabhängigen Menge [Korolyov2020].

Variationelle Quantenalgorithmen

Kolotouros und Wallden (2021) führen eine sich entwickelnde Zielfunktion, Ascending-CVaR, ein, die für jedes Optimierungsproblem verwendet werden kann. Sie zeigen, dass Ascending-CVaR bei der Anwendung auf verschiedene Optimierungsprobleme, wie Max-Cut, Zahlpartitionierung und Portfolio-Optimierung, bessere Ergebnisse liefert

als standardmäßige Zielfunktionen [Kolotouros2021]. Dupont et al. (2022) untersuchen das Wachstum und die Verbreitung von Verschränkung während des QAOA-Algorithmus und vergleichen die Entstehung von Verschränkung mit einem Quantum Annealing-Protokoll. Sie diskutieren die Auswirkungen dieser Ergebnisse auf die Simulation von QAOA-Schaltkreisen mit tensorbasierten Methoden [Dupont2022]. Gidi et al. (2022) überprüfen den Einsatz von stochastischen Optimierungsalgorithmen in Kombination mit VQE, der Quantenkontrolle von Quantenzuständen und der Quantenzustandsschätzung. Sie zeigen, dass Optimierungsalgorithmen im Bereich der komplexen Zahlen insgesamt die beste Leistung erbringen [Gidi2022]. Ein bemerkenswerter neuer Ansatz wird von Akmal und Jin (2021) vorgestellt. Sie entwickeln Quantenalgorithmen für fundamentale String-Probleme und zeigen, dass diese Algorithmen im Vergleich zu klassischen Algorithmen eine nahezu optimale Abfrage- und Zeitkomplexität aufweisen [Akmal2021].

Wir gehen nun auf zwei zentrale Ergebnisse unserer Arbeit bei der Verbesserung von Quantenalgorithmen ein und stellen die Publikationen während der Laufzeit des Projektes vor.

QUBO-Modellierung und Penaltyfaktoroptimierung

Nach dem Standardwerk von Glover et al. (2018) [Glover2018] konzentrieren sich Verma und Lewis (2020) auf Techniken zur Verbesserung der Leistung von QUBO-Solvern durch die Begrenzung der Magnitude des Penaltyfaktors. Sie demonstrieren die Wirksamkeit ihres Ansatzes anhand von Benchmark-Problemen und zeigen, dass eine sorgfältige Wahl der Penaltygröße entscheidend für die Lösung von QUBO-Problemen ist [Verma2020]. Djidjev (2020) stellt eine Methode vor, die auf der Darstellung von Constraints durch endliche Automaten basiert. Diese Methode reduziert die Anzahl der benötigten Qubits und kann auf eine Vielzahl von Constraints angewendet werden. Dies führt zu effizienteren QUBO-Modellen, die weniger Ressourcen auf Quantencomputern benötigen [Djidjev2020]. Goh et al. (2022) behandeln permutation-basierte Optimierungsprobleme und präsentieren Techniken zur Verbesserung der Leistung von QUBO-Solvern durch Daten-Skalierung und zufällige Stichprobenahme der Penalty-Koeffizienten. Sie demonstrieren die Wirksamkeit ihrer Methoden an großen Benchmark-Problemen wie dem Traveling Salesman Problem (TSP) und dem Quadratischen Zuweisungsproblem (QAP). Silva et al. (2021) entwickeln eine QUBO-Formulierung zur optimalen Rekonfiguration von Verteilungsnetzen. Sie definieren Constraints, die topologisch gültige Lösungen sicherstellen, und konvertieren diese in Penalty-Terme. Ihre Methode zeigt, wie spezifische Problemstellungen durch angepasste QUBO-Modelle effizient gelöst werden können [Silva2021]. Garcia et al. (2022) präsentieren eine Methode zur Bestimmung exakter und sequentieller Penalty-Gewichte, die auf jede QUBO anwendbar ist. Diese Methode bietet eine einfache, effiziente und allgemeine Möglichkeit zur Festlegung von Penalty-Gewichten, die globale Optima bewahren und die Durchführbarkeit der Lösungen sicherstellen [Garcia2022].

Quantenalgorithmen für robuste und stochastische Optimierungsprobleme

Bisher wurden diese Probleme nur wenig betrachtet. Stochastische Probleme mit Erwartungswertzielfunktion lassen sich, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, gut mithilfe der Standardalgorithmen lösen. Daher ist sind die Ergebnisse eine der ersten, die sich konkret mit diesen Problemen beschäftigen. Lim, Doriguello und Rebentrost (2023) präsentiert einen Quantenalgorithmus zur robusten Optimierung, der auf stochastischen Gradientenverfahren basiert [Lim2023]. Der Algorithmus bietet eine quadratische Verbesserung hinsichtlich der Dimension durch Nutzung von Quantenmethoden wie Zustandsvorbereitung und Mehrfachabtastung. Anwendungen umfassen robuste lineare und semidefinite Programme in Bereichen wie Finanzen und Ingenieurwesen, wobei die Robustheit gegen Unsicherheiten in den Parametern gewährleistet wird. Es ist eine Herausforderung dediziert Artikel zu diesen Themen zu finden, da es im Fall von robuster Optimierung oft darum geht, die Quantenalgorithmen gegenüber Veränderung (z.B. der Hardware) robust zu machen, statt für robuste Probleme Lösungen zu be-

stimmen. Exemplarisch für die stochastische Optimierung stellen wir ein aktuell erschienenenes Paper vor: Rotello et al. (2024) präsentieren ein zweistufiges Verfahren zur Bestimmung des Erwartungswertes eines stochastischen Optimierungsproblems [Rotello2024]. Der Algorithmus nutzt eine Kombination aus dem Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) und der Quantum Amplitude Estimation (QAE), was zu einer polynomischen Verbesserung gegenüber klassischen Methoden führt.

3.2 Fortschritte im Bereich Quantenhardware und – simulatoren für kontinuierliche Variablen

Die Forschung auf dem Gebiet des Quantencomputer- und der Quantensimulationshardware hat in den letzten Jahren bemerkenswerte Fortschritte erzielt. Im Gegensatz zu klassischen Computern nutzen Quantencomputer quantenmechanische Prinzipien wie Überlagerung und Verschränkung, um Rechenoperationen durchzuführen. Entsprechend aufwändig sind die experimentellen Aufbauten bzw. Maschinen.

Seit mehr als acht Jahren gibt es *D-Wave-Quantencomputer*, die mit einem Verfahren namens Quantenannealing nach Lösungen für ein Problem suchen. IBM, Microsoft, Google, Intel und die NASA sowie verschiedene Universitäten rund um den Globus haben sich mit der Entwicklung von Quantencomputern und ihren Anwendungen beschäftigt. Teile dieses Projekts haben die zugänglichen Ressourcen von IBM Quantencomputer verwendet, um damit Optimierungsprobleme zu lösen. In den letzten Jahren wurden auch neue Plattformen entwickelt, die auf der Manipulation von Qubits basieren. Mit neuen physikalischen Systemen wie Rydbergatomen in optischen Pinzetten (optical tweezers) konnten bahnbrechende Ergebnisse erzielt werden, z.B. [Bluvstein 2024].

Ein anderes Konzept ist die Nutzung von *Quantensimulatoren*, um komplexe Probleme zu lösen. Diese Ansätze sind derzeit noch nicht kommerziell verfügbar und wurden im Rahmen des EnerQuant-Projekts erforscht. Quantensimulatoren können auch im diskreten Regime arbeiten, d.h. die Informationseinheiten sind z.B. einzelne Teilchen auf einem Gitter, die miteinander wechselwirken. Beispiele hierfür sind ultrakalte Atome in optischen Gittern [Bloch 2008], aber seit einigen Jahren auch einzelne Atome in sogenannten optischen Pinzetten [Browaeys 2020]. Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen erfolgt entweder durch Stöße zwischen den Atomen oder durch die Rydberg-Rydberg Wechselwirkung, bei der die Atome kontrolliert in elektronisch hochangeregte Zustände angeregt werden.

Ein anderer Ansatz ist die Verwendung von kontinuierlichen Freiheitsgraden, die in Quantengasen realisiert werden können, darunter kollektive Spinvariablen oder auch kollektive Anregungen von ultrakalten Gasen wie Phononen. Diese Variablen sind im Gegensatz zu Qubits nicht auf +1 und -1 und deren quantenmechanische Überlagerung beschränkt, sondern können viele Werte zwischen +1 und -1 annehmen. Natürlich sind quantenmechanisch nur diskrete Einstellungen möglich, aber diese liegen im Bereich von 100-1000 möglichen Einstellungen. Diese Variablen können, wenn sie quantenmechanisch manipuliert („squeezed“) werden, zur Lösung eines MaxCut-Problems verwendet werden [Santra2024a] (siehe auch Abschnitt 2.3.2.). Diese Zustände können bereits seit einiger Zeit kontrolliert im Labor hergestellt werden, z.B. [Muessel 2014].

Eine weitere Anwendung eröffnet sich, wenn zu den kontinuierlichen Variablen die räumlichen Freiheitsgrade hinzukommen. Vor zwei Jahren wurde erstmals gezeigt, dass es mit dieser Erweiterung möglich ist, die Teilchenproduktion im Universum im Labor zu simulieren [Viermann]. Dies ist zwar eine fundamentale Frage in der Physik, zeigt aber, wie hochkontrolliert diese Quantensysteme erzeugt und zur Lösung von Simulations- oder Optimierungsaufgaben eingesetzt werden können. Ein weiteres Beispiel ist die Nutzung der implizit nichtlinearen Dynamik in ultrakalten Gasen für Machine-Learning-Aufgaben, die kürzlich auch erstmals experimentell gezeigt werden konnte [Hans 2024]. Die Ergebnisse zeigen, dass die Kontrolle einzelner Parameter dieser Expe-

perimente bereits ein Niveau erreicht hat, das quantitative Vorhersagen bzw. Rechnungen erlaubt.

Der Aufbau dieser Experimente erfordert eine Vielzahl unterschiedlicher Techniken, und es müssen verschiedene technische Herausforderungen bewältigt werden.

- Zum einen müssen die Atome in einem Ultrahochvakuum gefangen werden. Dieses Vakuum ist so gut, dass ein Atom etwa 100 km weit fliegen kann, ohne mit einem anderen Atom zusammenzustoßen.
- Zum anderen müssen die Atome gekühlt werden. Um die Atome ins Quantenregime zu bringen, muss die Temperatur von Raumtemperatur auf $0.000\ 000\ 1\ \text{°K}$ über dem absoluten Nullpunkt abgekühlt werden. Dies wird erreicht, indem die Atome mit Lasern vorgekühlt und anschließend in magnetischen Fallen mit Verdampfungskühlen auf die Endtemperatur abgekühlt werden.
- Diese Schritte müssen fein aufeinander abgestimmt werden, was eine umfangreiche Steuerung vieler (bis zu 40) Einzelkomponenten mit μsec -Auflösung erfordert. Diese wird durch eine umfangreiche Steuerungssoftware realisiert und kann heute über Standardschnittstellen von einem entfernten Rechner aus gesteuert werden.
- Eine weitere wichtige Herausforderung neben der Kontrolle der Bewegungszustände ist die genaue Kontrolle der internen Zustände der Atome. Dies ist notwendig für die kontrollierte Präparation des Anfangszustands der Atome, aber auch für die Nutzung in Anwendungen muss der interne Spinzustand der Atome kontrolliert werden. Dies wird mit rf-Strahlung und μ -Wellenstrahlung erreicht, die auf die Genauigkeit einer GPS-Atomuhr stabilisiert sind. Mit der vollständigen Kontrolle der internen und externen Freiheitsgrade des Atoms werden die oben genannten Experimente/Simulationen möglich.
- Eine essenzielle neue Errungenschaft konnte mit dieser Kontrolle erzielt werden, nämlich das Auslesen des kollektiven Spin-Variable. Damit kann man umgehen, dass die Standardmessung mit einem Stern-Gerlach Ansatz nur das Auslesen der Projektion des kollektiven Spins in eine bestimmte Richtung erlaubt. Mit der neuen Methode, die die zusätzlichen Spinfreiheitsgrade ausnutzt, können alle Projektionen des kollektiven Spins mit hoher Genauigkeit ausgelesen werden [Kunkel 2019]. Das erlaubt nun, die quantenmechanischen Eigenschaften eines ausgedehnten Systems nicht nur zu detektieren [Kunkel 2022], sondern auch zu nutzen.

Fortschritte außerhalb des
Projektes

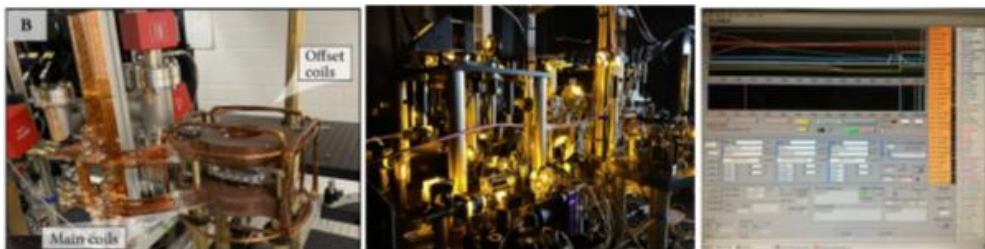


Abbildung 20: Links: Die Atome werden im Ultrahochvakuum in stark inhomogenen Magnetfeldern gefangen, die von Spulen erzeugt werden; Mitte: Mit Licht, hier gelbes Licht für Natrium, werden die Atome vorgekühlt, manipuliert und auch detektiert. Dazu werden modernste Optiken und Kameratechniken eingesetzt. Rechts: Während des Versuchsablaufs müssen die verschiedensten Parameter des Experiments auf μsec genau getaktet verändert werden. Dies geschieht mit Hilfe einer komplexen Experimentsteuerung, die es auch erlaubt, das Experiment fernzusteuern und die Ergebnisse remote auszulesen.

3.3 Fortschritte in der Anwendung von Quantencomputing in der Energiewirtschaft

Fortschritte außerhalb des
Projektes

Die Energiewirtschaft bietet eine Vielzahl komplexer und hochdimensionaler Probleme, die ideal für die Anwendung von Quantencomputing (QC) sind. Diese Probleme zeichnen sich durch ihre inhärente Komplexität, die Notwendigkeit zur Echtzeit-Optimierung und die Integration von Unsicherheiten und stochastischen Variablen aus. Diese Eigenschaften machen sie besonders reizvoll für die Anwendung von QC, da Quantenalgorithmen das Potenzial haben, Lösungen effizienter und schneller als klassische Algorithmen zu finden. Verschiedene Übersichts- und Diskussionsartikel beleuchten die aktuellen Entwicklungen, Herausforderungen und zukünftigen Möglichkeiten der Anwendung von Quantencomputing im Energiesektor.

Quantencomputing für die Optimierung von Energiesystemen

Ajagekar und You (2019) untersuchen die Anwendung von Quantencomputing zur Optimierung von Energiesystemen und diskutieren die Herausforderungen und Potenziale dieser Technologie. Sie vergleichen Quantencomputer mit klassischen Computern und zeigen auf, wie Quantenalgorithmen zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme wie der Standortplanung von Energieinfrastruktur, dem Unit Commitment und der Synthese von Wärmetauschernetzwerken eingesetzt werden können. Die Autoren betonen die Begrenzungen der aktuellen Quantenhardware, aber auch deren großes Potenzial für die Energieoptimierung [Ajagekar2019]. GPT

Blenninger et al. [Blenninger2024] fassen die wichtigsten Ergebnisse und Anwendungsfälle des Q-GRID-Projekts zusammen, das vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) finanziert wird. Das Projekt untersucht, wie Quantenalgorithmen zur Optimierung dezentraler Energieerzeugung und -übertragung sowie neuer Energietransport- und Austauschmethoden wie Peer-to-Peer-Energiehandel und Mikrogrid-Bildung beitragen können. Erste Ergebnisse zeigen, dass variationale Quantenalgorithmen und hybride Quantenannealing-Lösungen möglicherweise günstigere Laufzeit-Skalierungen bieten als klassische Optimierer.

Quantencomputing für Fusion Energy Science

Joseph et al. (2022) bieten eine umfassende Übersicht über die Anwendung von Quantencomputing in der Fusionsenergiewissenschaft. Sie erklären die Grundlagen der Quantenalgorithmen und deren Anwendung zur Simulation von sowohl linearen als auch nichtlinearen Dynamiken, die für die Modellierung von Plasmen notwendig sind. Diese Arbeit zeigt, wie Quantencomputer zur Verbesserung der Simulation von Wellenteilchen-Interaktionen und Wellen-Wellen-Interaktionen in der Plasmaphysik beitragen können [Joseph2022].

Quantenkommunikationsnetzwerke für Energieanwendungen

Paudel et al. (2023) untersuchen die Möglichkeiten von Quantenkommunikationsnetzwerken im Energiesektor. Sie analysieren, wie Quantenkommunikation zur sicheren Datenübertragung in Smart Grids, zur Überwachung von Treibhausgasen und zur Sicherheit in Kernkraftwerken beitragen kann. Diese Übersicht zeigt die Fortschritte in der Quantenkommunikation und ihre potenziellen Anwendungen zur Verbesserung der Energieinfrastruktur [Paudel2023].

Quantencomputing für die nächste Generation von Energiespeicherlösungen

Khalid et al. (2021) geben einen umfassenden Überblick über die Anwendung von Quantencomputing zur Entwicklung innovativer Energiespeichersysteme. Sie diskutieren die theoretischen Grundlagen von Quantenbatterien und deren potenziellen Vorteile gegenüber klassischen Speichersystemen. Die Autoren beleuchten die Herausforderungen und Möglichkeiten der Implementierung von Quantenbatterien und deren Einfluss auf die Energiebranche [Khalid2021].

Potenziale von Quantentechnologien im Energiesektor

Mešter (2023) verbindet die technologischen Anforderungen und Aktivitäten zur Unterstützung des Betriebs und Managements von Energiesystemen mit den neuesten Erkenntnissen aus der Welt der Quantentechnologien. Er diskutiert, wie Quantensimulation, Quantencomputing und Quantenkommunikation zur Lösung von Herausforderungen im Energiesektor beitragen können und bietet einen Ausblick auf zukünftige Innovationen bis 2050 [Mešter2023].

In den nächsten Abschnitten konzentrieren wir uns auf zwei spezifische Anwendungsprobleme in der Energiewirtschaft, die besonders gut für die Anwendung von QC geeignet sind: das Unit Commitment Problem und das Ladeproblem. Beide Probleme erfordern komplexe Optimierungen und berücksichtigen Unsicherheiten sowie stochastische Variablen, was sie zu idealen Kandidaten für die Nutzung der Vorteile von Quantencomputern macht. Wir werden die Fortschritte und Forschungsergebnisse in diesen Bereichen detailliert beleuchten und die Potenziale sowie die Herausforderungen der Anwendung von QC in diesen spezifischen Kontexten diskutieren.

Unit Commitment Problem

Das Unit Commitment Problem (UCP) ist ein sehr frequentiertes Problem in der Quantum Computing (QC) Community, da es sich um ein komplexes Optimierungsproblem handelt, das ideal für die Anwendung von QC-Techniken geeignet ist. Verschiedene Studien haben bedeutende Fortschritte in diesem Bereich gemacht und zeigen, wie Quantenalgorithmen zur Lösung von UCP beitragen können.

Eine der ersten Studien, die Quantum Annealing (D-Wave) für das UCP einsetzte, stammt von Ajagekar und You (2019). Diese Arbeit behandelte ein einfaches UCP mit quadratischen Kosten und zeigte, dass Quantencomputer in der Lage sind, solche Probleme zu lösen, obwohl die Skalierbarkeit noch begrenzt war [Ajagekar2019].

Ein weiterer bedeutender Beitrag kam von Koretsky et al. (2021), die einen hybriden Ansatz präsentierten, bei dem ein klassischer Solver mit dem Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) kombiniert wurde, um die optimale Energieproduktion jeder Einheit zu berechnen. Dieser Ansatz demonstrierte die Vorteile der Nutzung von Quanten- und klassischen Rechnern in einem gemeinsamen System [Koretsky2021].

Feng et al. (2022) verwendeten einen Surrogat-Lagrange-Relaxationsansatz, um binäre und kontinuierliche Teilprobleme zu lösen. Dieser Ansatz beinhaltete die Eigenschaften von Kraftwerkseinheiten und zeigte Verbesserungen bei der Lösung von UCPs durch Quantenmethoden [Feng2022].

Ein weiteres Beispiel für die Anwendung hybrider Methoden ist die Arbeit von Gao et al. (2022), die einen hybriden Quanten-Klassischen Benders-Zerlegungsalgorithmus für UCP mit Mikrogrids einführten. Diese Studie zeigte, dass QC-Techniken effektiv in vernetzten Mikronetzen angewendet werden können [Gao2022]. Nikmehr et al. (2022) untersuchten die Anwendung von ADMM auf verteilte UCPs mit verbundenen Hubs (Mikrogrids) und zeigten, wie verteilte Optimierungsansätze durch QC verbessert werden können [Nikmehr2022].

Mahroo und Kargarian (2022) präsentierten einen hybriden Ansatz, der eine Zersetzung des Problems in ein QUBO und zwei Nicht-QUBOs beinhaltete, wobei ADMM verwendet wurde. Dies ermöglichte die Lösung einfacher UCPs mit quadratischen Kosten durch QC [Mahroo2022]. Stein et al. (2023) kombinierten die HHL- und QAOA-Algorithmen, um erhebliche Geschwindigkeitsvorteile bei der Lösung des UCP zu erzielen. Diese Arbeit zeigte, dass die Kombination von Quantenalgorithmen signifikante Vorteile bieten kann [Stein2023].

Schließlich betonten Abbas et al. (2023) in ihrer Übersichtsarbeit die Herausforderungen und das Potenzial der Quantenoptimierung und unterstrichen die Bedeutung von Benchmarking und realen Anwendungen in Bereichen wie Finanzen und Nachhaltigkeit [Abbas2023].

Zusammengefasst bleibt das Unit Commitment Problem ein zentrales Thema in der QC-Forschung. Die aktuelle Literatur zeigt, dass verschiedene Ansätze wie Quantum Anne-

aling, QAOA und hybride Methoden vielversprechende Ergebnisse liefern. Die fortschreitende Entwicklung in diesem Bereich könnte zu bedeutenden Fortschritten bei der Lösung komplexer Optimierungsprobleme führen.

Fortschritte außerhalb des
Projektes

E-Auto Ladeproblem

Das Laden von Elektrofahrzeugen (EVs) ist ein bedeutendes Problem in der Energie- und Mobilitätsbranche, insbesondere im Hinblick auf die effiziente Nutzung von Ressourcen und die Minimierung von Kosten. Allerdings findet sich neben unseren eigenen Arbeiten wenige Publikationen in diesem Bereich.

Zhang et al. (2022) schlagen eine dynamische Planungsmethode basierend auf dem Quantum SWARM Algorithmus vor, die in ungeordneten Verkehrsbedingungen die Ladeeffizienz maximiert. Simulationsergebnisse zeigen, dass der Algorithmus in der Lage ist, für 100 zufällig ausgewählte Kunden eine nahezu optimale Ladeplanung zu erstellen [Zhang2022].

Jing et al. verwenden den Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA), um die Auswirkungen von EV-Ladestationen auf den dynamischen Betrieb von Microgrids zu analysieren. Der Algorithmus zeigt seine Effektivität bei der Maximierung der Energieabschnitte des Systems unter Berücksichtigung der Integration von EV-Ladestationen [Jing2022].

Asna et al. (2022) präsentieren eine multi-objektive Version des Atom-Suchalgorithmus (ASO) zur Planung von Schnellladestationen für EVs. Die Studie zeigt, dass der Quantum ASO (QASO) eine höhere Konvergenzrate und bessere Ergebnisse als herkömmliche Algorithmen bietet [Asna2022].

Eine weitere wichtige Arbeit von Chandra et al. (2021) kombiniert Quantum Annealing und genetische Algorithmen, um das Problem der Platzierung von EV-Ladestationen zu lösen. Der hybride Ansatz führt zu einer signifikanten Reduzierung der Entfernung zu den Ladestationen und optimiert die Platzierung effizient [Chandra2021].

In einer Studie von Kea et al. (2023) wird der Knapsack-Algorithmus mit QAOA kombiniert, um das EV-Ladeproblem zu lösen. Die Ergebnisse zeigen, dass der Ansatz in simulationsfreien und realen quantenbasierten Umgebungen beeindruckende Annäherungsverhältnisse erreicht [Kea2023].

Die Forschung von Veshchezerova et al. (2023) schlägt eine hybride Quanten-Klassische Routine für die Lade- und Zuweisungsprobleme von EV-Flotten vor. Der Ansatz zeigt, dass quantenbasierte Methoden zur Lösung realistischer Probleme mit vielen Ungleichheitsbeschränkungen verwendet werden können [Veshchezerova2023].

Nutzen und Verwertbarkeit

4.1 Verwertungsplan

Der Verwertungsplan für das EnerQuant-Projekt verfolgte eine ganzheitliche Strategie, die sowohl wissenschaftliche als auch wirtschaftliche Verwertungsmöglichkeiten abdeckt. Ziel war es, die im Projekt gewonnenen Erkenntnisse und Entwicklungen auf verschiedenen Ebenen nutzbar zu machen. Dies umfasst die wissenschaftliche Veröffentlichung und Weiterentwicklung, die Identifikation und Umsetzung praktischer Anwendungen sowie die Erhöhung der Sichtbarkeit und Vernetzung innerhalb der relevanten Communities.

Wissenschaftlicher Erkenntnisgewinn

Ein wesentlicher Bestandteil des Verwertungsplans ist der wissenschaftliche Erkenntnisgewinn. Durch das Projekt soll das allgemeine Verständnis des Quantencomputings, insbesondere in Bezug auf die Energiewirtschaft, signifikant erweitert werden. Die gewonnenen wissenschaftlichen Ergebnisse werden in fachspezifischen und interdisziplinären Zeitschriften veröffentlicht sowie auf internationalen Konferenzen präsentiert. Diese Veröffentlichungen tragen dazu bei, die Sichtbarkeit der Forschung zu erhöhen und die wissenschaftliche Diskussion voranzutreiben. Ferner verbessert dies die Wettbewerbssituation: Dadurch wird die Marktpositionierung bei der Einwerbung von Industrie- und Beratungsprojekten mit Forschungsfragen im Bereich Energiewirtschaft verbessert.

Identifikation von praktischem Nutzen

Ein weiteres Ziel des Verwertungsplans ist die Identifikation und Nutzung praktischer Vorteile, die durch Quantencomputing in der Energiewirtschaft realisiert werden können. Das Projekt untersucht potenzielle Quantenvorteile und vertreibt diese Erkenntnisse in Form von Beratungs- und Softwaredienstleistungen an Kunden. Diese Dienstleistungen umfassen die Implementierung und Optimierung quantenbasierter Lösungen für spezifische Anwendungsfälle in der Energiewirtschaft. Dabei sollen auch praktische Benchmarks erstellt und dokumentiert werden, die als Grundlage für industrielle Anwendungen dienen können.

Sichtbarkeit der Vorteile und Nutzen bei Anwendern steigern

Um die Vorteile und den Nutzen von Quantencomputing bei Anwendern in der Energiewirtschaft sichtbar zu machen, werden gezielte Marketing- und Outreach-Maßnahmen ergriffen. Diese umfassen Workshops, Webinare und andere Veranstaltungen, die dazu dienen, Anwender über die Möglichkeiten und Vorteile von Quantencomputing zu informieren. Zudem wird eine Projektwebseite eingerichtet, die sowohl technische Informationen als auch Anwenderberichte und Fallstudien bereitstellt. Dazu sollen wissenschaftlichen Projektergebnisse veröffentlicht und somit anderen Nutzern zur Verfügung gestellt werden.

Sichtbarkeit unserer Forschung bei anderen Forschenden

Die Sichtbarkeit der Forschungsergebnisse wird durch die Teilnahme an wissenschaftlichen Konferenzen und die Veröffentlichung in renommierten Fachzeitschriften erhöht. Dies ermöglicht es, die erzielten Fortschritte einem breiten wissenschaftlichen Publikum zugänglich zu machen und den Austausch mit anderen Forschenden zu fördern. Dies trägt zur Weiterentwicklung der Quantencomputing-Technologien bei und eröffnet neue Kooperationsmöglichkeiten. Kern der Sichtbarkeit unserer Forschungsergebnisse soll durch die Organisation eines Workshops ermöglicht werden. Diese Veranstaltung zum Thema „Quantentechnologie in der Energiewirtschaft“ ist ein zentraler Bestandteil

des Verwertungsplans und wir neben der wirtschaftlichen und wissenschaftlichen Verwertung gesondert in Kapitel 4.4 besprochen.

Vernetzung mit Kunden und Forschenden

Ein zentraler Aspekt des Verwertungsplans ist die Vernetzung sowohl mit potenziellen Kunden als auch mit anderen Forschenden. Durch die Organisation eines Workshops sowie durch die Teilnahme an Fachveranstaltungen wird ein Netzwerk aufgebaut, das den Austausch von Wissen und Erfahrungen fördert. Diese Vernetzung soll dazu beitragen, neue Projekte zu initiieren und langfristige Kooperationen zu etablieren. Dabei sollen sowohl potentielle Kunden als auch Kooperationspartner für zukünftige Forschung integriert werden.

Eigene Weiterbildung

Das Projekt dient auch der eigenen Weiterbildung der beteiligten Wissenschaftler. Durch die Arbeit an den verschiedenen Teilprojekten und die Auseinandersetzung mit den neuesten Entwicklungen im Bereich Quantencomputing können die Forschenden ihre Expertise erweitern und vertiefen. Dies ist nicht nur für die erfolgreiche Durchführung des Projekts wichtig, sondern erhält und erhöht Kompetenzen bei den einzelnen Projektpartnern und stärkt somit die Position der Forschungseinrichtungen im internationalen Wettbewerb.

Weiterbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Weiterbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses. Junge Wissenschaftler und Studierende werden aktiv in das Projekt eingebunden und erhalten so die Möglichkeit, praktische Erfahrungen zu sammeln und sich in einem hochinnovativen Forschungsumfeld weiterzuentwickeln. Dies trägt dazu bei, die nächste Generation von Forschenden im Bereich Quantencomputing auszubilden und die Zukunft der Forschung zu sichern.

4.2 Wirtschaftliche Verwertung

Die wirtschaftliche Verwertung der im EnerQuant-Projekt gewonnenen Erkenntnisse und Technologien ist ein zentraler Bestandteil des Verwertungsplans. Ziel ist es, die entwickelten Lösungen und Technologien in marktfähige Produkte und Dienstleistungen zu überführen und somit einen direkten wirtschaftlichen Nutzen zu generieren. Dabei spielen sowohl direkte Anwendungen in der Energiewirtschaft als auch der Transfer von Quantencomputing-Technologien in andere Bereiche eine wichtige Rolle. Ein wesentlicher Aspekt der wirtschaftlichen Verwertung ist die Kommerzialisierung der entwickelten Algorithmen und Softwarelösungen. Durch gezielte Marketing- und Vertriebsstrategien wie zum Beispiel [Halffmann2022] soll die Sichtbarkeit der entwickelten Lösungen erhöht und potenzielle Kunden auf die Vorteile von Quantencomputing aufmerksam gemacht werden. Dies umfasst die Teilnahme an Messen und Fachveranstaltungen, die Erstellung von Informationsmaterialien und die Nutzung digitaler Plattformen, um ein breites Publikum zu erreichen.

Um als Partner der angewandten Forschung aktuelle Erkenntnisse vor allem aus den Bereichen Quantenoptimierung und Quantum Machine Learning in die sächsische Wirtschaft zu transferieren, ist das IOSB-AST mit seinem Standort in Görlitz Teil des Center For Applied Quantum Computing Saxony (QAPPS). Hier sind die wichtigsten Akteure im Bereich Quantencomputing in Sachsen vereint, um Industrie und Gesellschaft das Thema näherzubringen und als Ansprechpartner und Dienstleister zur Verfügung zu stehen. Auch das Fraunhofer ITWM ist Teil des Quantenkompetenznetzwerks Rheinland-Pfalz, das eine ähnliche Agenda verfolgt. Darüber hinaus ist das ITWM auch Teil der Fraunhofer Allianz zum Thema Quantencomputing.

Erweiterung des Netzwerks im Energiebereich

Die Energiewirtschaft stand im Fokus unserer wirtschaftlichen Verwertung, und wir konnten in diesem Bereich unser Netzwerk signifikant erweitern. Durch gezielte Maßnahmen haben wir unsere Sichtbarkeit erhöht und wertvolle Kontakte zu potenziellen Partnern und Kunden geknüpft. Ein zentraler Bestandteil dieser Bemühungen waren unsere Vorträge und Ausstellungen bei verschiedenen Messen und Fachveranstaltungen. Diese Plattformen boten uns die Möglichkeit, unsere Forschungsergebnisse und technologischen Entwicklungen einem breiten Fachpublikum zu präsentieren und direkt mit wichtigen Akteuren der Energiewirtschaft in Kontakt zu treten.

Der Abschlussworkshop war hierbei das zentrale Mittel, um den Schulterschluss zwischen Energiewirtschaft und Quantencomputing zu erreichen. Durch die Teilnahme und Mitwirkung von Experten aus beiden Bereichen konnten wir eine Brücke zwischen der theoretischen Forschung und den praktischen Anwendungen schlagen.

Darüber hinaus haben Projektpartner an weiteren Fachkonferenzen und Messen teilgenommen, so zum Beispiel waren wir auf einer der größten Messen der Energiewirtschaft, der E-World in Essen als Aussteller aktiv [Lenk2021a]. Weitere Vorträge für Interessenten aus der Industrie wurden auf branchenspezifischen Messen und lokalen Veranstaltungen platziert. Erwähnenswert sind hier Quantum Meets Industry der Universität Heidelberg [Lenk2021b], SCI Business Week [Lenk2023] und eine Vortragsreihe des VDE [Lenk2024a]. Auch sind wir der Einladung zum DigiNetzWerk des Verbands kommunaler Unternehmen e.V. gefolgt und haben auf dieser Veranstaltung den interessierten Zuhörenden Quantencomputing näher gebracht [Halffmann2022a].

Außerdem haben wir die aktiv das Angebot für Vernetzungs- und Verbreitungsaktivitäten des BMWKs genutzt. Das Projekt EnerQuant ist Teil des Forschungsbereichs Energiesystemanalyse. Daher haben wir im Rahmen des Forschungsnetzwerktreffen „Systemanalyse für ein resilientes Energiesystem“ einen Workshop zum Thema Quantum Computing für die Energiesystem-Modellierung organisiert und sind auf reges Interesse gestoßen. Der Austausch war konstruktiv und hat uns nochmal gute Impulse für die letzten Projektmonate geliefert.

Im Rahmen des Projekts EnerQuant waren wir auch an der Produktion einer Podcastfolge beteiligt, um die breitere Öffentlichkeit über die Fortschritte und Anwendungen von Quantencomputing in der Energiewirtschaft zu informieren. In der Podcastfolge „Quantencomputing“ aus der Serie „Volle Energie voraus“, Staffel 2, Folge 2 des Future Energy Labs der Deutschen Energieagentur (dena), spricht Dr. Pascal Halffmann über die neuesten Entwicklungen und die Bedeutung von Quantencomputing für die Energiewirtschaft. Diese Episode bietet einen spannenden Einblick in die Forschung und die praktischen Anwendungen, die im Rahmen des Projekts entwickelt wurden, und richtet sich sowohl an Fachleute als auch an interessierte Laien. Die Podcastfolge ist online verfügbar [Halffmann2023b].

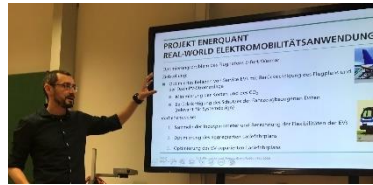
Natürlich sind aus diesen Vernetzungs- und Verbreitungsaktivitäten einige Kooperationen oder ein regelmäßiger Austausch mit potenziellen Kunden entstanden. Aus Geheimhaltungsgründen gehen wir hier nicht tiefer darauf ein, beispielhaft bestehen Kooperationen oder ein Austausch mit E.on, Hitachi Energy [Halffmann2023a] und Uniper. Derzeit bereiten wir Gespräche mit verschiedenen sächsischen Firmen vor, welche vor allem innerhalb des QAPPS-Netzwerks zum angewandten Quantencomputings durchgeführt werden sollen

Erweiterung des Netzwerks in anderen Gebieten

Obwohl die Energiewirtschaft im Fokus unserer Bemühungen stand, haben wir auch andere Gebiete im Blick behalten, um unser Netzwerk zu erweitern. Dies umfasst sowohl Anwender aus unterschiedlichen Industrien als auch Quantencomputerhersteller und weitere relevante Akteure. Unsere Teilnahme an Messen und Veranstaltungsreihen war nicht ausschließlich auf die Energiewirtschaft beschränkt, sondern zielte darauf ab, ein breites Spektrum an Interessenten und potenziellen Partnern zu erreichen. Durch diese vielfältigen Interaktionen konnten wir unser Netzwerk signifikant ausbauen und

die Anwendungsmöglichkeiten von Quantencomputing in verschiedenen Sektoren erkunden und fördern.

Dr. Steve Lenk, IOSB-AST, hat am 15. Januar 2024 einen Vortrag in der VDE-Reihe "Aktuelle Herausforderungen der Elektrotechnik" an der TU Ilmenau gehalten. Anwesend waren Wissenschaftler, Ingenieure und Elektrotechniker des VDEs. Außerdem wurden das Projekt am 07.10. 2021 im Rahmen des Quantum Meets Industry Workshops in Heidelberg und im Rahmen der SCI Business Week vorgestellt. Weitere Vorträge im Rahmen wissenschaftlicher Konferenzen und Workshops sind ebenfalls erfolgt.



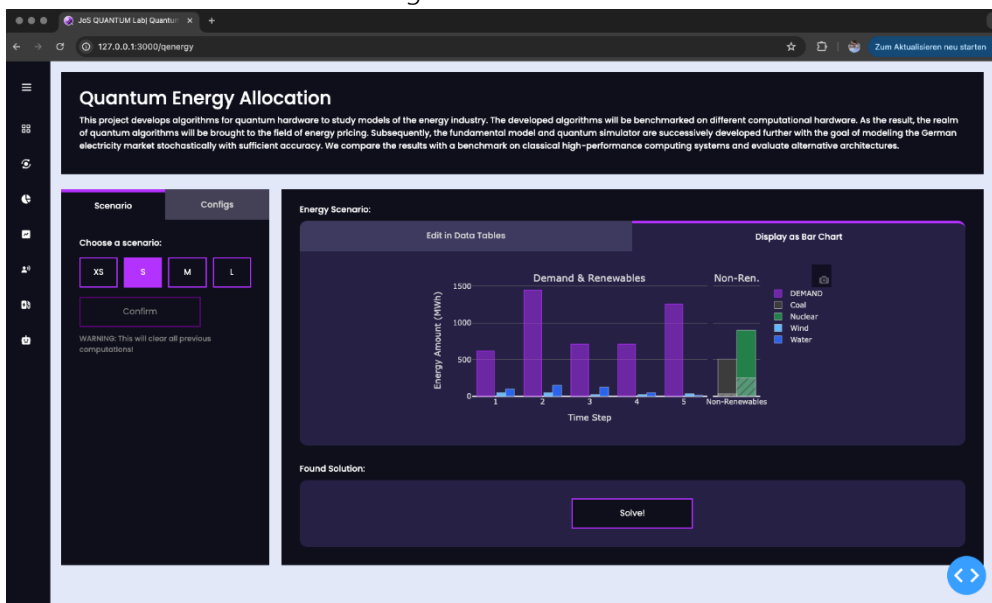
Auch haben wir uns mit verschiedenen Quantenhardwareherstellern vernetzt und ausgetauscht. Dabei haben wir neben den großen Herstellern wie IBM und D-Wave auch bewusst kleinere Hersteller wie AQT und IQM angesprochen. Hier geht es auch um die Unterstützung der europäischen Hersteller sowie um die juristischen Herausforderungen durch Exportkontrolle und Embargos. Ferner war JoS QUANTUM als Aussteller auf der Quantum Effects Messe 2023 aktiv.

Ein bemerkenswertes Beispiel für die Erweiterung unseres Netzwerks ist die Einladung von Mitarbeitenden des Fraunhofer ITWMs zu den Veranstaltungen von Gurobi, einem führenden Anbieter von Optimierungssoftware und einem direkten Konkurrenten der Quantenalgorithmen. Hier waren wir auf Panels zu Quantencomputing vertreten und konnten unsere Expertise und Perspektiven einbringen. Dr. Pascal Halffmann nahm 2022 an einer Expertendiskussion zu Optimierung und Quantencomputing bei den Gurobi Days in Paris teil [Halffmann2022b], während Dr. Michael Trebing beim Quantum Computing Panel der Gurobi Days 9. Anwendertage 2022 in Frankfurt präsent war [Trebing2022]. Diese Gelegenheiten ermöglichten es uns, wertvolle Einblicke zu gewinnen, Wissen auszutauschen und neue Kontakte in der Optimierungs- und Quantencomputing-Community zu knüpfen.

Demonstrator

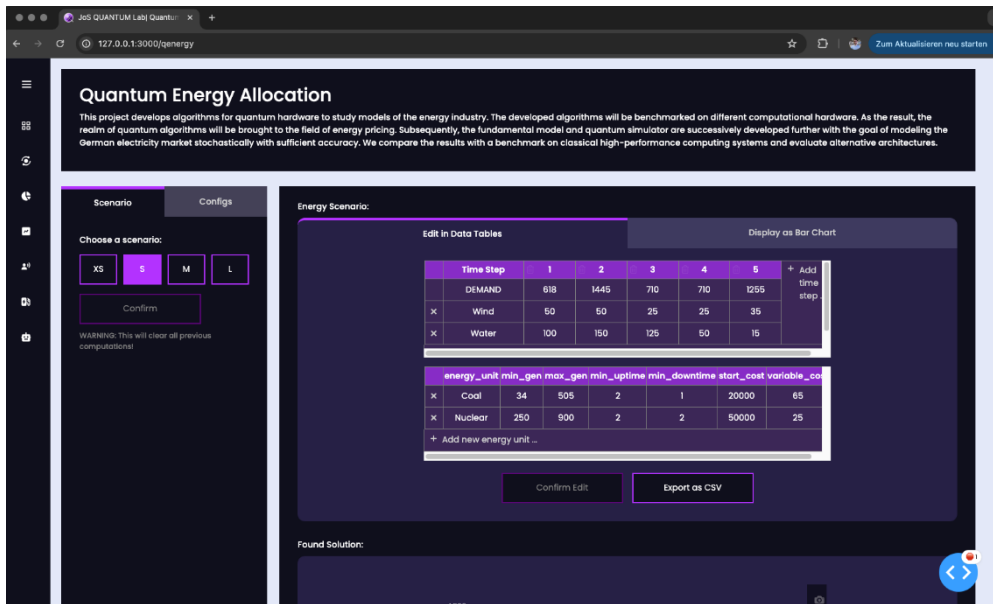
Alle Projektergebnisse wurden in einem Demonstrator zusammengefasst und stehen potenziellen Kunden und Interessierten offen. Dabei kann über einen einfachen Docker-Container auf eine UI zugegriffen werden, um Daten für das UCP einzuladen und mit verschiedenen Lösungsalgorithmen zu lösen.

Oberfläche zur Problemformulierung:

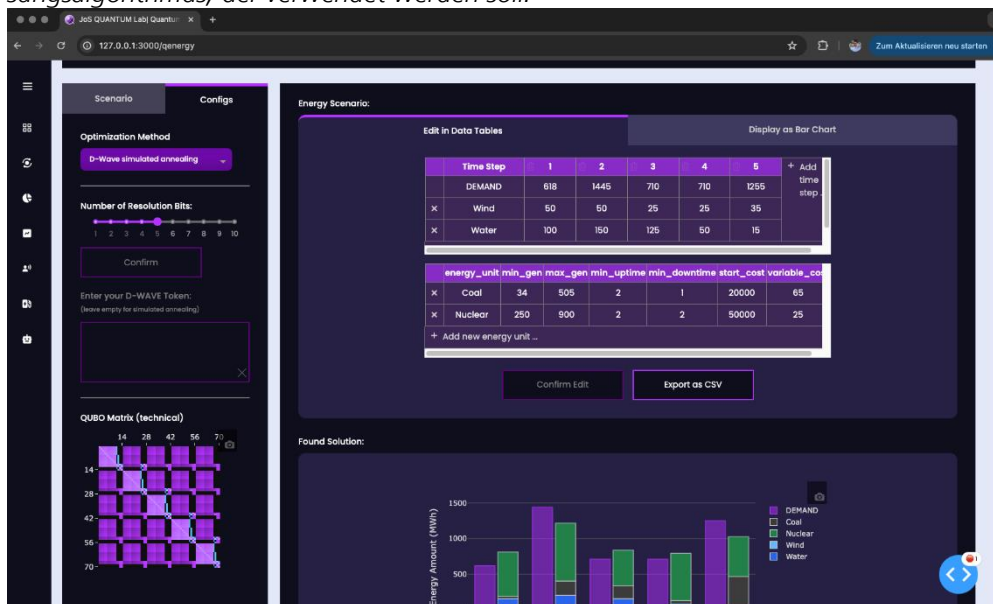


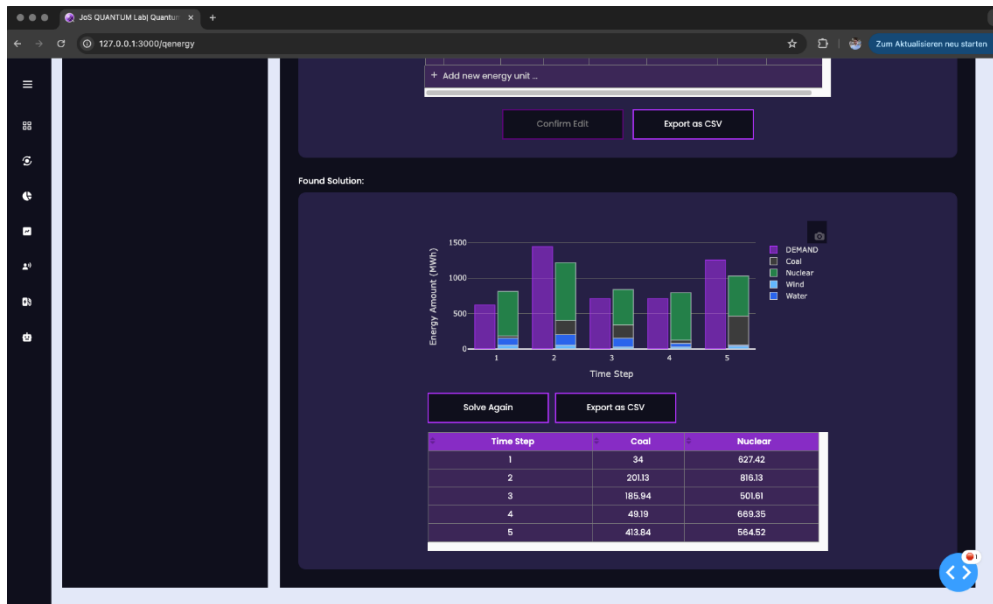
Eingabemaske für Kraftwerkparameter, Zeitschritte and andere:

Nutzen und Verwertbarkeit



Einstellungen zu Auflösung und der gewünschten Optimierungsmethode. Auf der rechten Seite lassen sich mit einem Schieberegler die Bit-Auflösung einstellen, sowie der Lösungsalgorithmus, der verwendet werden soll.





Der Demonstrator dient dazu, die Dienstleistungen und Erfahrungswerte zu zeigen. Alle Arbeiten von EnerQuant fließen in die unternehmensinterne Codebase ein und ermöglichen allen Mitarbeitern den Zugriff auf die entwickelte Formulierung als QUBO, sowie die Implementierten Solver und Schnittstellen.

Teilnahme an öffentlichen Ausschreibungen

Im Bereich Beratung und Auftragsforschung flossen die Erkenntnisse des Projekts EnerQuant in die Anträge von mehreren Anträgen für Auftragsforschung, welche durch das DLR ausgeschrieben wurden. Die Verhandlungen dazu sind derzeit vom DLR für das Auftragsforschungsprojekt QuantiCoM QML pausiert und im Verfahren für das Projekt QMPC haben wir nicht den Zuschlag erhalten. Allerdings konnte JoS QUANTUM den Zuschlag bei einer Ausschreibung der Bundesdruckerei erhalten. Weitere Details sowie weitere Aktivitäten können aufgrund von Geheimhaltungsvereinbarungen hier nicht erwähnt werden. Dennoch konnten wir hier bereits einige Aufträge erhalten.

Weiterhin werden Gespräche mit verschiedenen Hardwareherstellern geführt, welche eine langfristige Partnerschaft im Bereich des Quantum Software Engineerings im Fokus haben und natürlich auch kurzfristige Aufträge anvisieren. Derzeit bereiten wir Gespräche mit verschiedenen sächsischen Firmen vor, welche vor allem innerhalb des QAPPS-Netzwerks zum angewandten Quantencomputings durchgeführt werden sollen. Im Bereich Consulting ist ein Fokus dabei auf dem Bereich Benchmarking und Validierung und erarbeitet auf Basis des entwickelten Benchmarking Tools „QBench“ Services zur Evaluierung des Quantencomputings im industriellen Umfeld. Dazu werden kontinuierlich Gespräche geführt und das Tool um weitere Funktionalitäten erweitert.

Schulungsangebot

Der Teil Aus-/Fortbildung beinhaltet die Erstellung von attraktiven und interaktiven Schulungsmaterialien und dem Angebot von Schulungen in Präsenz, Online und im blended-learning Format. Dabei wurde die QAOA-Methode, welche im Projekt EnerQuant vom IOSB-AST implementiert wurde, als Grundlage für Hands-on Tutorials für Schulungen und Workshops aufgearbeitet und z.B. in der Business Week (11.05.2023 in Ilmenau) des Vereins Student Consulting Ilmenau sci e.V. im Workshop „The next energy level – Quantencomputing in der Elektromobilität“ verwendet.

Weiterhin wurde ein Ausblick Quantum Optimierung im Energiesektor für die Schulungsreihe „Energy Data Scientist for Optimisation“ erstellt und die Schulung wird seit 2022 zweimal im Jahr für Beschäftigte im Energiesektor angeboten.

Schulungen zum Thema „Quantencomputing für Schüler und Lehrer“ sind ausgearbeitet und konnten schon erfolgreich angeboten werden. Eine Verstetigung ist angedacht. Als ein Herausstellungsmerkmal für zukünftige Schulungen konnte ein portabler Quantencomputers für Schulungszwecke (außerhalb des EnerQuant-Projekts) angeschafft werden. Dieser soll den Anreiz unserer Schulungsangebote weiter steigern und neue Schulungsangebote ermöglichen.

Im Rahmen der Initiative zur Verwertung und Weitergabe der im EnerQuant-Projekt gewonnenen Erkenntnisse bietet auch das Fraunhofer ITWM Schulungen an. Der Kurs „Quantum Technology Professional“ richtet sich an Fachkräfte, die ein tiefgehendes Verständnis der Quantencomputing-Technologien und ihrer praktischen Anwendungen erwerben möchten. Die Schulung umfasst grundlegende Konzepte des Quantencomputings sowie fortgeschrittene Themen und deren Anwendungen in verschiedenen Industriebereichen, einschließlich der Energiewirtschaft.

Die Inhalte des Kurses wurden maßgeblich durch die im EnerQuant-Projekt erzielten Ergebnisse und Entwicklungen beeinflusst. Die Teilnehmer profitieren von den neuesten Forschungserkenntnissen und praxisnahen Beispielen, die direkt aus den Arbeiten und Erfahrungen des Projekts stammen. Diese Integration der Projektergebnisse gewährleistet, dass die Schulung auf dem aktuellen Stand der Technik basiert und die relevanten Herausforderungen und Lösungen im Bereich Quantencomputing adressiert.

Weitere Informationen zur Schulungsmaßnahme und Anmeldeöglichkeiten finden Sie auf <https://www.itwm.fraunhofer.de/de/Anwendungsfelder/quantencomputing/quantum-technology-professional.html> der Homepage:

Fazit und Ausblick

Der wirtschaftliche Verwertungsplan des EnerQuant-Projekts hat bereits vielversprechende Ergebnisse gezeigt, und der Ausblick für die zukünftige Verwertung ist positiv. Ein zentrales Ziel bleibt die kontinuierliche Erweiterung unseres Netzwerks, sowohl in der Energiewirtschaft als auch in anderen Industriebereichen. Dies wird durch die Teilnahme an weiteren Fachkonferenzen, Messen und Netzwerkveranstaltungen unterstützt.

Wir planen, unsere Bemühungen in der Akquise von Auftragsforschung weiter zu intensivieren. Dies umfasst die Beteiligung an öffentlichen Ausschreibungen und die Entwicklung neuer Projektanträge. Der Fokus wird weiterhin auf der praktischen Anwendung von Quantencomputing-Lösungen liegen, um industrielle Herausforderungen zu bewältigen und den Nutzen dieser Technologien zu demonstrieren. Darüber hinaus werden wir unsere Aktivitäten im Bereich Consulting ausbauen. Basierend auf dem entwickelten Benchmarking-Tool „QBench“ werden wir Dienstleistungen zur Evaluierung des Quantencomputings im industriellen Umfeld anbieten. Diese Services sollen Unternehmen dabei unterstützen, die Vorteile und Einsatzmöglichkeiten von Quantencomputing zu verstehen und zu nutzen. Ein weiterer Schwerpunkt wird die kontinuierliche Weiterbildung unserer Mitarbeitenden sowie die Schulung des wissenschaftlichen Nachwuchses sein. Durch Schulungsangebote wie den Kurs „Quantum Technology Professional“ und andere Fortbildungsprogramme werden wir sicherstellen, dass unsere Expertise im Bereich Quantencomputing auf dem neuesten Stand bleibt und kontinuierlich erweitert wird. Insgesamt sind wir zuversichtlich, dass die im EnerQuant-Projekt erzielten Fortschritte und die daraus resultierenden Verwertungsstrategien zu nachhaltigem wirtschaftlichem Erfolg und weiterem Wachstum führen werden. Wir freuen uns darauf, die Potenziale von Quantencomputing weiterhin zu erforschen und in praktische, wirtschaftlich nutzbare Anwendungen zu überführen.

4.3 Wissenschaftliche Verwertung

Die wissenschaftliche Verwertung der im EnerQuant-Projekt erzielten Erkenntnisse ist ein zentraler Aspekt unserer Gesamtstrategie. Durch die Erweiterung des Forschungsnetzwerks, die Veröffentlichung von Forschungsergebnissen in renommierten Fachzeitschriften und die aktive Teilnahme an Konferenzen und wissenschaftlichen Veranstaltungen haben wir die Sichtbarkeit und den Einfluss unserer Arbeit erheblich gesteigert. Ein weiterer wichtiger Bestandteil der wissenschaftlichen Verwertung sind die Einreichung von Forschungsanträgen und die Initiierung von Folgeprojekten. Diese Maßnahmen stellen sicher, dass die im EnerQuant-Projekt entwickelten Ideen und Technologien weiter erforscht und in neuen Kontexten angewendet werden können. Darüber hinaus legen wir großen Wert auf die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses. Durch die Einbindung junger Wissenschaftler und Studierender in unsere Forschungsprojekte fördern wir die nächste Generation von Quantencomputing-Experten und sichern so die langfristige Kontinuität und Weiterentwicklung dieses zukunftsträchtigen Forschungsgebiets.

Erweiterung des Forschungsnetzwerks

Ein wesentlicher Bestandteil der wissenschaftlichen Verwertung der im EnerQuant-Projekt erzielten Erkenntnisse ist die kontinuierliche Erweiterung unseres Forschungsnetzwerks. Durch den Aufbau und die Pflege von Beziehungen zu anderen Forschungsinstituten, Universitäten und Industriepartnern konnten wir eine starke, interdisziplinäre Gemeinschaft schaffen, die den Austausch von Wissen und Ideen fördert. Dies ist besonders wichtig, um die neuesten Entwicklungen im Bereich Quantencomputing schnell zu adaptieren und gemeinsam an innovativen Lösungen zu arbeiten.

Die Maßnahmen zur wirtschaftlichen Verwertung haben gleichzeitig auch zur Erweiterung unseres wissenschaftlichen Netzwerks beigetragen. Die Teilnahme an Messen und Fachveranstaltungen, die ursprünglich zur Markterschließung und Kundengewinnung gedacht waren, haben uns ebenfalls wertvolle Kontakte zu Forschungspartnern verschafft. Viele potenzielle Kunden aus der Industrie sind gleichzeitig auch an Forschungskooperationen interessiert. Diese doppelte Rolle als Kunde und Forschungspartner ermöglicht es uns, praxisnahe Forschungsprojekte durchzuführen und sicherzustellen, dass unsere wissenschaftlichen Arbeiten auch tatsächlich in der Praxis Anwendung finden.

Der Abschlussworkshop und das Forschungsnetzwerktreffen „Systemanalyse für ein resilientes Energiesystem“ waren hierbei besonders hilfreich. Diese Veranstaltungen boten eine Plattform, um die Projektergebnisse zu präsentieren, Feedback von Experten zu erhalten und neue Kooperationen zu initiieren. Der direkte Austausch mit Vertretern aus Wissenschaft und Industrie hat uns wertvolle Einblicke in die aktuellen Herausforderungen und Bedürfnisse der Branche gegeben und somit die Grundlage für zukünftige gemeinsame Forschungsprojekte gelegt.

Ein weiterer wichtiger Schritt zur Erweiterung unseres Forschungsnetzwerks war die Vernetzung mit verschiedenen Universitäten, wie beispielsweise der Universität Innsbruck. Durch diese Kooperationen konnten wir unser Wissen im Bereich Quantencomputing erweitern und gemeinsam an neuen, innovativen Lösungen arbeiten. Diese akademischen Partnerschaften sind essenziell, um die wissenschaftliche Basis unserer Arbeiten zu stärken und neue Forschungsansätze zu entwickeln.

Auch die Zusammenarbeit mit Quantenhardwareherstellern ist für uns von großer Bedeutung. Diese Hersteller sind nicht nur Lieferanten von Technologie, sondern auch ideale Forschungspartner. Durch die enge Zusammenarbeit erhalten wir direktes Feedback zu unseren Algorithmen und Anwendungen und können so das volle Potenzial der Quantenhardware ausschöpfen. Diese Partnerschaften ermöglichen es uns, die neuesten technologischen Entwicklungen in unsere Forschung zu integrieren und praxisnahe Lösungen zu entwickeln, die den Anforderungen der Industrie entsprechen. Außerdem soll ganz konkret die Kooperation zwischen Fraunhofer IOSB-AST und Honda RI auch weiterhin vertieft werden, um gemeinsame wissenschaftliche und wirt-

schaftliche Projekte im Bereich bidirektionales Laden und Quantenoptimierung mit Qudits zu bearbeiten und eine feste Partnerschaft zu etablieren
Insgesamt hat die Erweiterung unseres Forschungsnetzwerks maßgeblich dazu beigetragen, die Qualität und Relevanz unserer wissenschaftlichen Arbeiten zu erhöhen. Durch die enge Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft und Industrie können wir sicherstellen, dass unsere Forschungsergebnisse sowohl theoretisch fundiert als auch praktisch anwendbar sind. Dies stärkt nicht nur unsere Position in der wissenschaftlichen Community, sondern trägt auch zur nachhaltigen Entwicklung und Anwendung von Quantencomputing-Technologien bei.

Publikationen und Konferenzen

Insgesamt können wir auf eine sehr erfolgreiche wissenschaftliche Verwertung zurückblicken, wie die harten Fakten es belegen: Im Lauf des Projektes wurden *zwei* Publikationen in peer-reviewten Journalen veröffentlicht oder akzeptiert. Besonders herauszuheben ist dabei die Publikation von Santra et al. [Santra2024a], die das Prädikat „Editor’s Choice“ erhalten hat. Wir gehen hier nicht auf die weiteren Publikationen in Journalen im Detail ein, sondern verweisen auf Kapitel 5.1. Vier weitere Publikationen sind aktuell in Bearbeitung und werden in Kürze eingereicht.

Ferner waren wir trotz der Corona-Pandemie und den damit verbundenen Einschränkungen auf verschiedenen Konferenzen aktiv. Insgesamt wurden *18* Vorträge in wissenschaftlichen Konferenzen und Fachtagungen gehalten. Dabei haben wir ein breites und diverses Feld von Konferenzen, sei es internationale Konferenzen, Summer Schools oder Workshops, mit unterschiedlichen Themengebieten und Fokus abgedeckt. Wir waren auf den renommiertesten Konferenzen im Bereich Quantencomputing aktiv, so zum Beispiel die QuantumMatter [Santra2023c] oder die IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE) [Federer2022c]. Darüber hinaus haben wir unsere wissenschaftlichen Erkenntnisse auch in wissenschaftlichen Konferenzen in den Anwendungsgebieten vorgestellt. Ein gutes Beispiel dafür ist der Vortrag von Federer et al. [Federer2022a] auf der IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference (VPPC). Da wir Optimierungsprobleme betrachten, waren auch Konferenzen zum Thema mathematische Optimierung in unserem Fokus. Dr. Pascal Halffmann hat beispielsweise eine Session zum Thema Quantenoptimierung bei der OR2022 organisiert und selbst einen Vortrag gehalten [Halffmann2022]. Weitere Konferenzbeiträge finden sich in Kapitel 5.2.

Zusätzlich entstanden *drei* Masterarbeiten und *vier* Dissertationen im Projekt EnerQuant, auf diese gehen wir weiter unten ein.

Forschungsanträge und Folgeprojekte

Im Rahmen des EnerQuant-Projekts wurden zahlreiche Erkenntnisse und Technologien entwickelt, die eine solide Grundlage für weitere Forschungsanträge und Folgeprojekte bieten. Diese Projekte zielen darauf ab, die im EnerQuant-Projekt erzielten Fortschritte weiter zu vertiefen und neue, innovative Anwendungen von Quantencomputing zu erforschen. Die kontinuierliche Einreichung von Forschungsanträgen und die Initiierung von Folgeprojekten sind essenziell, um die nachhaltige Entwicklung und Anwendung der Quantencomputing-Technologien voranzutreiben.

Das Fraunhofer IOSB-AST, die Universität Heidelberg und der assoziierte Partner Universität Trento beschäftigen sich im EU-geförderten Projekt „Next level Quantum information processing for Science and Technology“ (NeQST) mit der Optimierung des bidirektionalen Ladens mittels Quantencomputing. Im Fokus stehen dabei nicht Qubits mit zwei Niveaus, sondern Qudits mit mehreren Niveaus. Diese Qudits könnten häufig verwendete ganzzahlige Optimierungsprobleme auf einfachere Weise kodieren. Ziel des Projekts ist es, möglichst industrierelevante Anwendungsfälle zu entwickeln und umzusetzen. Es werden sowohl Problemformulierungen mit einer einzelnen Zielfunktion als auch mit mehreren Zielfunktionen (multi-objective optimization) untersucht. Neue, an Qudits angepasste Algorithmen werden entwickelt, wobei die Ergebnisse des EnerQuant-Projekts bezüglich QAOA für Qudits die Grundlage bilden. Zudem werden ro-

buste und stochastische Optimierungsansätze speziell für Quantencomputer mit Qudits entwickelt und evaluiert. Auch hier spielen die Vorarbeiten des EnerQuant-Projekts eine wesentliche Rolle.

Die Ergebnisse des EnerQuant-Projekts im Kontext der Optimierung von Ladeprotokollen von elektrischen Fahrzeugen haben maßgeblich zur Entstehung des NeQST-Projekts beigetragen. Dieses Projekt wird von der Universität Trento koordiniert und umfasst neben dem IOSB-AST fünf weitere Partner. Innerhalb EnerQuant wurde festgestellt, dass Optimierungsprobleme wie das Ladeproblem idealerweise durch kollektive Spins dargestellt werden können. Ein Hauptunterfangen von NeQST ist es, diese Erkenntnisse auf Qudits (analog zu Qubits, jedoch mit $d > 2$ verschiedenen Basiszuständen) zu übertragen, die in gefangenen Ionen realisiert werden. Weiterhin werden in NeQST neuartige Möglichkeiten untersucht, Einschränkungen, die solche Optimierungsprobleme grundlegend charakterisieren und deren Wichtigkeit eine weitere maßgebliche Erkenntnis von EnerQuant war, in Quantenhardware zu realisieren.

Das EU-geförderte Projekt „From DYNAMIcal Gauge Fields to Lattice Gauge Theory“ (DYNAMITE) ist ein weiteres Beispiel für ein Folgeprojekt, das durch die Ideen und Erkenntnisse aus EnerQuant inspiriert wurde. An diesem Quantero-Projekt nehmen neben den Universitäten Heidelberg und Trento vier weitere europäische Partner teil. Ziel des Projekts ist es, auf kalten Atomen basierte Quantensimulatoren für grundlegende Fragestellungen in der Hochenergiephysik und kondensierten Materie zu entwickeln. Weitere Informationen sind auf der Projektwebsite <https://dynamite-project.eu> verfügbar.

Die Ideen zur Verwendung von Mischungen mit kalten Atomen, die im EnerQuant-Projekt entwickelt wurden, haben zur Konzeption des DYNAMITE-Projekts beigetragen. Diese Quantensimulatoren ermöglichen es, komplexe physikalische Systeme und ihre dynamischen Eigenschaften zu erforschen, was zu neuen Einblicken und Anwendungen in der Grundlagenforschung führen kann.

Natürlich bestehen weiterhin offene Forschungsfragen, insbesondere zur Nutzung von Qudits oder zur robusten Optimierung. Weitere Projektanträge sind und werden bei geeigneten Ausschreibungen erarbeitet und sollen die Möglichkeit bieten, zusätzliche Themen zu untersuchen. Dazu gehört beispielsweise die systematische Untersuchung möglicher Nebenbedingungen und deren Implementation über Strafterme, Mixing-Operatoren oder Squeezing-Ansätze. Ein Beispiel hierfür ist der abgelehnte Antrag im Rahmen der BMBF-Förderungsmaßnahme „Wissenschaftliche Vorprojekte“ zu Grundlagenfragen der Quantentechnologien und Photonik.

Zusätzlich haben wir einen Antrag zur Förderung einer Nachwuchsgruppe zum Thema Quantenoptimierung eingereicht. Diese Gruppe soll sich auf die Entwicklung und Erforschung neuer Optimierungsalgorithmen und deren Anwendungen konzentrieren und somit die wissenschaftliche Basis und die praktischen Anwendungen von Quantencomputing weiter vorantreiben.

Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses

Die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses ist ein wichtiger Beitrag zur nachhaltigen Entwicklung der Quantencomputing-Community. Im Rahmen des Projekts wurden zwei Dissertationen und mehrere Masterarbeiten angefertigt, die maßgeblich zur Vertiefung des Wissens und zur Ausbildung junger Talente im Bereich Quantencomputing beigetragen haben.

Die Dissertation von Gopal Santra, die sich aktuell in der Fertigstellung befindet, befasst sich mit dem Thema „Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) mit Qudits“. Diese Arbeit untersucht die Potenziale und Herausforderungen des Einsatzes von Qudits im QAOA und leistet einen wichtigen Beitrag zur Optimierungsforschung im Quantencomputing. Eine weitere Dissertation von Maurus Hans, die 2022 an der Universität Heidelberg abgeschlossen wurde, trägt den Titel „Physical Computing on a Versatile Setup for Ultra-cold Potassium“ (Hans2022). Diese Arbeit erforscht die Nutzung ultrakalter Kalium-Atome für physikalische Berechnungen und eröffnet neue Möglichkeiten für die Entwicklung von Quantensimulatoren.

Zusätzlich wurden im Zuge des Projekts drei Masterarbeiten erstellt, die sich mit den Themen Elektromobilität und Shortest Path mit Quantencomputing beschäftigten. Diese Arbeiten haben nicht nur zur wissenschaftlichen Weiterentwicklung beigetragen, sondern auch den beteiligten Studierenden wertvolle praktische Erfahrungen im Bereich Quantencomputing vermittelt. Damit haben wir einen signifikanten Beitrag zur Ausbildung von jungen Talenten im QC-Bereich geleistet. Die intensive Betreuung und Einbindung der Studierenden und Doktoranden in das Projekt hat dazu beigetragen, dass sie tiefgehende Kenntnisse und Fähigkeiten in diesem zukunftssträchtigen Forschungsfeld erwerben konnten.

Darüber hinaus sind die in Kapitel 4.2 angesprochenen Schulungsmaßnahmen, die ursprünglich für die wirtschaftliche Verwertung konzipiert wurden, auch für Studierende interessant und nutzbar. Diese Schulungen bieten eine praxisnahe und umfassende Einführung in die Quantencomputing-Technologien und deren Anwendungen und tragen somit auch zur Weiterbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses bei.

Zudem waren wir aktiv bei Summer Schools, Workshops und haben Vorlesungen an Universitäten gehalten, um unser Wissen und unsere Forschungsergebnisse zu teilen [Hauke2023, Jendrzewski2021, Lenk2023a, Lenk2024b]. Diese Aktivitäten haben dazu beigetragen, die nächste Generation von Forschenden im Bereich Quantencomputing zu inspirieren und auszubilden und somit die langfristige Kontinuität und Weiterentwicklung dieses wichtigen Forschungsgebiets zu sichern.

Fazit und Ausblick

Die wissenschaftliche Verwertung der im EnerQuant-Projekt erzielten Erkenntnisse ist ein zentraler Aspekt unserer Gesamtstrategie. Durch die Erweiterung des Forschungsnetzwerks, die Veröffentlichung von zahlreichen Forschungsergebnissen in renommierten Fachzeitschriften und die aktive Teilnahme an Konferenzen und wissenschaftlichen Veranstaltungen haben wir die Sichtbarkeit und den Einfluss unserer Arbeit erheblich gesteigert. Die Ergebnisse des EnerQuant-Projekts haben bereits den Weg für zwei bedeutende Folgeprojekte geebnet, das EU-geförderte Projekt „Next level Quantum information processing for Science and Technology“ (NeQST) und das Quanterra-Projekt „From DYNAMICAL Gauge Fields to Lattice Gauge Theory“ (DYNAMITE). In den nächsten Jahren planen wir, diese Erfolge weiter auszubauen. Wir werden weiterhin aktiv neue Forschungsprojekte initiieren und unsere Zusammenarbeit mit bestehenden und neuen Partnern vertiefen. Der Ausbau unseres Forschungsnetzwerks bleibt ein zentrales Ziel, um den Austausch von Wissen und Ideen zu fördern und gemeinsam an innovativen Lösungen zu arbeiten. Gleichzeitig werden wir die Einreichung von Forschungsanträgen intensivieren, um neue Finanzierungsmöglichkeiten zu erschließen und die Erforschung von Quantencomputing-Technologien voranzutreiben. Dabei legen wir besonderen Wert auf die systematische Untersuchung und Implementierung von Optimierungsproblemen und deren spezifischen Anforderungen in der Quantenhardware.

4.4 Abschlussworkshop

Der Abschlussworkshop wurde als integraler Bestandteil des Projekts EnerQuant organisiert, um die Sichtbarkeit des Projekts und seiner Partner zu erhöhen und die Projektergebnisse einem breiten Publikum zu präsentieren. Der Workshop war im ursprünglichen Projektantrag fest eingeplant, um mehrere zentrale Ziele zu erreichen. Zum einen sollte ein eigener Workshop zum Thema „Quantentechnologie in der Energiewirtschaft“ organisiert werden, um Interessierte mit aktuellen Informationen zu versorgen und die wirtschaftliche Verwertung der Projektergebnisse nach Projektende vorzubereiten. Diese Veranstaltung sollte sowohl Forschende im Bereich Quantencomputing und Energie als auch potenzielle Anwender und Industrievertreter ansprechen. Ein weiterer wesentlicher Zweck des Workshops war die Förderung der Vernetzung zwischen Wissenschaft und Industrie. Durch die Einbindung internationaler Experten und das Netzwerk der Verbundpartner sollten neue Kontakte geknüpft und bestehende Kooperatio-

nen vertieft werden. Die Veranstaltung bot eine ideale Plattform, um die Synergien zwischen den Bereichen QC und Energie zu stärken und zukünftige gemeinsame Forschungsprojekte oder Aufträge zu akquirieren. Darüber hinaus diente der Workshop dazu, die Ergebnisse des Projekts EnerQuant öffentlich zugänglich zu machen und einen Austausch über die neuesten Entwicklungen und Herausforderungen im Bereich Quantencomputing in der Energiewirtschaft zu fördern. Durch die Präsentation der Projektergebnisse sollte die Relevanz und der Nutzen der entwickelten Lösungen hervorgehoben und das Interesse potenzieller Kunden und Partner geweckt werden.

Insgesamt zielte der Abschlussworkshop darauf ab, die Sichtbarkeit des Projekts und der beteiligten Partner zu erhöhen, ein Netzwerk aufzubauen, die Projektergebnisse öffentlich bereitzustellen und die Verbindung zwischen den Bereichen QC und Energie zu stärken. Die Veranstaltung war ein bedeutender Schritt, um die im Projekt erzielten Fortschritte zu präsentieren und die Grundlage für zukünftige Kooperationen und Entwicklungen zu legen.

Der Abschlussworkshop fand am 22. November 2023 als Online-Workshop statt. Die Entscheidung für ein virtuelles Format wurde auf Wunsch vieler Interessenten getroffen, um eine größere Teilnehmerzahl zu ermöglichen, insbesondere auch international. Diese Flexibilität trug dazu bei, dass über 60 Personen in der Spitze gleichzeitig an der Veranstaltung teilnahmen. Die Resonanz auf den Workshop war äußerst positiv, was das große Interesse und die Relevanz des Themas unterstreicht. Weitere Informationen zum Workshop sind auf der Workshop-Webseite (https://www.itwm.fraunhofer.de/de/messen-veranstaltungen/2023/2023_11_22_enerquant-workshop1.html) verfügbar.

Eine besondere Erwähnung verdient die erfolgreiche Zusammenarbeit mit Womanium, einem Partner für das Event. Womanium ist eine Organisation, die sich der Förderung von Frauen in Wissenschaft und Technologie widmet. Sie bietet Bildungs- und Netzwerkprogramme an, um Frauen zu unterstützen und ihre Sichtbarkeit in technischen und wissenschaftlichen Bereichen zu erhöhen. Zudem beteiligt sich Womanium aktiv an der Forschung zur Anwendung von Quantencomputing in der Energiewirtschaft. Diese Partnerschaft hat dem Workshop eine zusätzliche Dimension verliehen und das Engagement für Diversität und Inklusion in der Wissenschaft unterstrichen.

Speaker und Institutionen:

- **Dr. Pascal Halffmann**, Fraunhofer ITWM
- **Dr. Steve Lenk**, Fraunhofer IOSB-AST
- **Niklas Hegemann**, JoS QUANTUM GmbH
- **Gopal Chandra Santra**, Universität Heidelberg & Universität Trento
- **Dr. Marlou Slot**, Womanium & National Institute of Standards and Technology
- **Vardaan Sahgal**, Womanium

Dr. Pascal Halffmann stellte in seinem Vortrag die am Fraunhofer ITWM erzielten Ergebnisse vor. Dabei war der Fokus auf der Modellierung des Unit Commitment Problems inklusive Optimierung der Penaltyfaktoren für die Modellierung sowie der Einbindung von unsicheren Parametern, siehe Kapitel 2.1. Dr. Steve Lenk ergänzte hier mit den Ergebnissen des Fraunhofer IOSB-ASTs zu dem zweiten Anwendungsproblem, der Ladeoptimierung von Elektrofahrzeugen. Hier ist vor allem das Vortrainieren der Parameter des variationellen Algorithmus erwähnenswert. Niklas Hegemann von JoS QUANTUM stellte neben den wissenschaftlichen Resultaten (Kapitel 2.2) vor allem die Einbindung der Modellierung der Algorithmen in das Softwarepaket pyground. Der entwickelte Demonstrator, siehe Kapitel 4.2, erlaubt es Datensätze für das Unit Commitment Problem zu erstellen, mithilfe von Quantenalgorithmen auf Quantensimulatoren zu lösen und die Ergebnis visuell aufbereitet zu analysieren. Stellvertretend für die Universität Heidelberg präsentierte Gopal Chandra Santra die Fortschritte im Bereich

Quantencomputer mit Qudits. Dabei zeigte er vor allem Ergebnisse aus seiner Dissertation zur Adaption von QAOA auf Qudits. Dr. Marlou Slot, Womanium & National Institute of Standards and Technology, zeigte in ihrem Impulsvortrag die Wichtigkeit von Quantenmaterialien und -sensoren für die Energiewirtschaft. Zum Abschluss präsentierte Vardaan Sahgal von Womanium, dass smarte Stromnetze unerlässlich für die Erreichung der Energiewendeziele sind und wie man hier mit Quantenalgorithmen sowohl in der Optimierung als auch im maschinellen Lernen Stromnetze verbessern kann.

Die Organisation und Durchführung des Workshops stellten einige Herausforderungen dar. Ursprünglich war geplant, den Workshop in Präsenz abzuhalten, doch aufgrund der Pandemie und der damit verbundenen Unsicherheiten wurde der Workshop zunächst verschoben und letztendlich online durchgeführt. Diese Umstellung ermöglichte es, eine breitere Teilnahme zu gewährleisten und auch internationale Experten ohne Reiseaufwand einzubinden. Eine weitere Herausforderung bestand darin, Forschende im QC-Bereich und Anwender aus dem Energiebereich miteinander zu vernetzen. Diese unterschiedliche Zielgruppen zusammenzubringen, war ein zentraler Aspekt des Workshops und erforderte sorgfältige Planung und gezielte Ansprache.

Der Abschlussworkshop war ein großer Erfolg und ermöglichte es, die Projektergebnisse einem breiten Publikum vorzustellen. Die Diskussionen und das Feedback der Teilnehmer waren äußerst wertvoll und lieferten wichtige Impulse für die Weiterentwicklung der Forschung. Der Workshop förderte den Austausch zwischen den Projektpartnern und externen Experten und trug zur weiteren Vernetzung in der Quantencomputing-Community bei. Es haben sich neue Kontakte aus dem Workshop ergeben, und die Kooperation mit Womanium wurde ausgebaut. Zudem wurden neue Interessenten und potenzielle Kunden für zukünftige Forschungsprojekte und Aufträge gefunden. Insgesamt hat der Workshop die Ziele des Projekts unterstützt und die Basis für zukünftige Kooperationen gelegt.

Dieser Abschlussbericht wird gemäß Nr. 11 NKBF 98 über die Technische Informationsbibliothek Hannover (TIB) veröffentlicht. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren. Teilergebnisse dieses Projekts wurden ferner in Publikationen und Vorträgen veröffentlicht, diese werden in den folgenden Abschnitten aufgelistet.

5.1 Publikationen in Peer-Reviewten Journalen

- [Abbas2023] Abbas, A., Lenk, S., et al. (2023). Quantum optimization: Potential, challenges, and the path forward. <https://arxiv.org/abs/2312.02279>. (submitted to Nature Reviews Physics)
- Au-Yeung, R., Chancellor, N., & Halffmann, P. (2023). NP-hard but no longer hard to solve? Using quantum computing to tackle optimization problems. In *Frontiers in Quantum Science and Technology* (Vol. 2). Frontiers Media SA. <https://doi.org/10.3389/frqst.2023.1128576>
- [Deller2023] Deller, Y., Schmitt, S., Lewenstein, M., Lenk, S., Federer, M., Jendrzejewski, F., Hauke, P. & Kasper, V. (2023). Quantum approximate optimization algorithm for qudit systems. In *Phys. Rev. A* 107, 062410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.107.062410>.
- [Flemming2020] Flemming, S., Naumann, S., Bretschneider, P. (2020). Energie- und Lademanagement für eine CO₂-neutralen Beladung von batterieelektrisch betriebenen Service-Fahrzeugen auf dem Flughafenvorfeld. In *RET.Con 2020*. <https://doi.org/10.22032/dbt.46248>.
- [Halffmann2022a] Halffmann, P., Hegemann, N., Jendrzejewski, F., & Lenk, S. (2022). Energy Economics Fundamental Modelling with Quantum Algorithms. *ERCIM News*, 2022(128).
- [Halffmann2023] Halffmann, P., Holzer, P., Plociennik, K., & Trebing, M. (2023). A Quantum Computing Approach for the Unit Commitment Problem. In *Lecture Notes in Operations Research* (pp. 113–120). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-031-24907-5_14
- [Halffmann2024] Halffmann, P., Lenk, S., & Trebing, M. (2024). Harnessing Inferior Solutions For Superior Outcomes: Obtaining Robust Solutions From Quantum Algorithms. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2404.16784> (Accepted in Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference. GECCO '24. ACM)
- [Hans2024] Hans, M., Kath, E., Sparn, M., Liebster, N., Strobel, H., Oberthaler, M. K., Draxler, F. and Schnörr, C. (2024). Bose-Einstein condensate experiment as a nonlinear block of a machine learning pipeline. In *Phys. Rev. Research* 6. 013122. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.013122>.
- [Hauke2021] Hauke, P., Mattiotti, G., & Faccioli, P. (2021). Dominant Reaction Pathways by Quantum Computing. *Physical Review Letters*, 126(2), 028104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.028104>
- [Kasper2021] Kasper, V., González-Cuadra, D., Hegde, A., Xia, A., Dauphin, A., Huber, F., Tiemann, E., Lewenstein, M., Jendrzejewski, F., & Hauke, P. (2021). Universal Quantum Computation and Quantum Error Correction with Ultracold Atomic Mixtures. *Quantum Science and Technology*, 7(1), 015008. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2058-9565/ac2d39>
- [Micheletti2021] Micheletti, C., Hauke, P., & Faccioli, P. (2021). Polymer Physics by Quantum Computing. *Physical Review Letters*, 127(8), 080501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.080501>

- [Santra2024a] Santra, G.C., Jendrzejewski, F., Hauke, P., Egger, D. J. (2024). Squeezing and quantum approximate optimization. In Phys. Rev. A, 109(1), 012413 (Editors' Suggestion) <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.012413>
- [Bhatt2022] Bhatt, R.P., Kilinc, J., Höcker, Fred Jendrzejewski (2022). Stochastic dynamics of a few sodium atoms in presence of a cold potassium cloud. In Sci Rep 12, 2422 <https://doi.org/10.1038/s41598-022-05778-8>

5.2 Konferenzbeiträge

- [DeAndoin 2023] De Andoin, M. G., Bottarelli, A., Schmitt, S., Oregi, I., Hauke, P., & Sanz, M. (2023). Formulation of the Electric Vehicle Charging and Routing Problem for a Hybrid Quantum-Classical Search Space Reduction Heuristic. In 2023 IEEE 26th International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC) (pp. 5318-5323). IEEE. [10.1109/ITSC57777.2023.10421787](https://doi.org/10.1109/ITSC57777.2023.10421787)
- [Federer2022a] Federer, M., Müssig, D., Klaiber, S., Lässig, J., Bretschneider, P., & Lenk, S. (2022). Application benchmark for quantum optimization on electromobility use case. In 2022 IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference (VPPC) (pp. 1-6). IEEE. <https://doi.org/10.1109/VPPC55846.2022.10003292>.
- [Federer2022b] Federer, M., Müssig, D., Lenk, S., & Lässig, J. (2022). Real-world application benchmark for QAOA algorithm for an electromobility use case. In Lecture Notes in Informatics (LNI), P326 (pp. 1145-1151). Bonn: Gesellschaft für Informatik e.V. https://doi.org/10.18420/inf2022_97.
- [Federer2022c] Federer, M., Müssig, D., Klaiber, S., & Lenk, S. (2022, September). Application-oriented quantum computing benchmark for an electromobility use case. In 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE) (pp. 749-752). IEEE. <https://doi.org/10.1109/QCE53715.2022.00105>.
- [Federer2023] Federer, M., Lenk, S., Müssig, D., Wappler, M. & Lässig, J. (2023). Constrained Grover Adaptive Search for Optimization of the Bidirectional EV Charging Problem. In Lecture Notes in Informatics (LNI), P327 (pp.1121-1127). Bonn: Gesellschaft für Informatik e.V. https://doi.org/10.18420/inf2023_124.
- [Halffmann2022] Halffmann, P., Holzer, P., Plociennik, K., & Trebing, M. (2022). A Quantum Computing Approach for the Unit Commitment Problem. International Conference on Operations Research - OR 2022. Karlsruhe, Germany. https://www.or2022.de/img/Conference_Booklet_OR2022.pdf
- [Halffmann2024a] Halffmann, P., Lenk, S., & Trebing, M. (2024). Harnessing Inferior Solutions For Superior Outcomes: Obtaining Robust Solutions From Quantum Algorithms. GECCO '24: Genetic and Evolutionary Computation Conference.
- [Hauke2023b] Hauke, P. (2023). Symposiums-Vortrag „Quantum computing and simulation from entanglement as a resource to sampling of polymer melts“. Spring School on Open-Source Tools for Quantum Computing & Simulation, 31.03.2023, ICFO, Barcelona.
- [Hauke2023c] Hauke, P. (2023). Vortrag beim Workshop „Quantum Computing and Simulation“ in Venice, Italien. Titel: „Research activities at Trento -- Quantum solutions for quantum field theories and beyond“. 11.10.2023-13.10.2023
- [Müssig2023] Müssig, D., Federer, M., Lenk, S. & Lässig, J. (2023). Solving the Optimization Problem of Bidirectional EV-Charging on a Quantum Computer. 23. Nachwuchswissenschaftler*innenkonferenz, NWK 2023. (pp. 94-101). Harzer Hochschultexte. https://www.hs-harz.de/dokumente/extern/Forschung/NWK2023/Beitraege/Solving_the_Optimization_Problem_of_Bidirectional_EV-Charging_on_a_Quantum_Computer.pdf.
- [Santra2023a] Santra, G.C. (2023). Poster-Präsentation auf der „Quantum Science Generation Conference“ 02.05.23-05.05.23, Trento. Poster-Titel „Quantum Approximate Optimization and Squeezing.“
- [Santra2023c] Santra, G.C. (2023). Poster-Präsentation auf der Konferenz "QuantumMatter" 23.05.23-25.05.23, Madrid. Poster-Titel „Quantum Approximate Optimization and Squeezing.“

- [Santra2023d] Santra, G.C. (2023). Poster-Präsentation im Rahmen der "HGSFP Summer School", Molveno, Italy, 11.06.23-17.06.23. Poster-Titel „Quantum Approximate Optimization and Squeezing.“
- [Santra2023e] Santra, G.C. (2023). Poster-Präsentation im Rahmen der „Quantum Error Correction and Mitigation“, Trento. 16.10.23-18.10.23. Poster-Titel „Quantum Approximate Optimization and Squeezing.“
- [Santra2024e] Santra, G.C. (2024). Vortrag im Rahmen der Tagung „DPG-Frühjahrstagung“ in Berlin. Titel „Quantum Approximate Optimization and Squeezing.“ 17.03.2024-22.03.2024
- [Santra2024g] Santra, G.C. (2024). Poster-Präsentation im Rahmen der „Quantum Science Generation Workshop 2024“, Trento, 06.05.24-10.05.24. Poster-Titel „Multipartite Entanglement in Quantum Optimization“.
- [Santra2024h] Santra, G.C. (2024). Poster-Präsentation im Rahmen der "HGSFP Summer School", Molveno, Italy. 10.06.24-15.06.24. Poster-Titel „Multipartite Entanglement in Quantum Optimization“.
- [Trebing2023] Trebing, M., Halffmann, P. (2023). Power Production Planning With Quantum Computers. 22nd ECMI Conference on Industrial and Applied Mathematics 2023. Wroclaw, Poland.

5.3 Sonstige Veröffentlichungen

- [Bhatt2022a] Bhatt, R. (2022). Developing tools for cold atom research: an ultracold Na-K experiment, proposals for unitary k-designs, and a web interface. Dissertation Universität Heidelberg.
- [Federer2022a] Federer, M., Lenk, S., Babayev, M. (2022) Talk about EnerQuant–Elektromobilität und Quantumcomputing. Fraunhofer Quantumcomputing Developer Meeting. 09.03.2022.
- [George2024] Ron George (2024). Analysis of performance improvements due to preprocessing of a quantum optimization algorithm for an electric vehicle use case. Masterarbeit Hochschule Nordhausen. (voraussichtliches Einreichungsdatum 12.04.2024)
- [Halffmann2022a] Halffmann, P. (2022). Quantencomputing für die Energiewirtschaft. Vortrag DigiNetzWerk des VKU e.V. Online.
- [Halffmann2022b] Halffmann, P. (2022). Expert panel discussion on optimization and quantum computing. Gurobi Days Paris 2022.
- [Halffmann2023a] Halffmann, P. (2023). Quantencomputing für die Energiewirtschaft. Vortrag bei Hitachi Energy. Online.
- [Halffmann2023b] Halffmann, P. (2023). Quantencomputing. Podcast „Volle Energie voraus“, Staffel 2, Folge 2 des Future Energy Labs der Deutschen Energieagentur (dena). <https://dena-energiegeladen.podigee.io/13-neue-episode>
- [Halffmann2024b] Halffmann, P., & Trebing, M. (2024). Penalty Factor Optimization. In Preparation.
- [Halffmann2024c] Halffmann, P., & Trebing, M. (2024). Quantum Robust Optimization. In Preparation.
- [Hans2022] Hans, M. (2022). Physical Computing on a Versatile Setup for Ultra-cold Potassium. Dissertation Universität Heidelberg.
- [Hauke2023a] Hauke, P. (2023). Kurs zu „Quantum Simulation of Strongly Correlated Systems“ HGSFP Sommer-Schule, Molveno, Italy. 15.03.2023-16.03.2023
- [Hauke2024a] Hauke, P. (2024). Eingeladener Vortrag bei Quantum Computing @ Trento, EJCPi - Euregio Workshop in Trento. 14.03.2024
- [Hauke2024b] Hauke, P. (2024). Wissenschaftliche Präsentation für die breite Öffentlichkeit zum Thema Quantencomputing, Muse Fuori Orario, Trento. 14.03.2024
- [Hegemann2022] Hegemann, N. (2022). Workshop zum Thema Quantum Computing für die Energiesystem-Modellierung. „Systemanalyse für ein resilientes Energiesystem“ im Forschungsnetzwerk. Energiesystemanalyse am 8. und 9. November 2022 in Berlin.

- [Jendrzejewski2021] Jendrzejewski, F. (2021). Projekt im Rahmen eines eingeladenen Vortrags im Kolloquium der Graduierten- und Forschungsschule „Effiziente Energienutzung“ der Universität Stuttgart vorgestellt
- [Kilinc2024] Kilinc, J. (2024). A new setup for experiments with an ultracold ^{23}Na - ^{39}K mixture. Dissertation Universität Heidelberg.
- [Lenk2021] Werner, T. & Lenk, S. (2021) Talk about EnerQuant. Institutskolloquium Fachgebiet Strömungsmechanik, TU Ilmenau, 31.05.2021.
- [Lenk2021a] Lenk, S. (2021) Talk about Quantum Computing and E-Mobility. E-World Community Event, 19.11.2021.
- [Lenk2021b] Lenk, S. (2021) Talk about Energy problems and quantum computing. Quantum Meets Industry Universität Heidelberg, 07.10.2021.
- [Lenk2022] Lenk, S. (2022). Talk about EnerQuant–Elektromobilität und Quantum-computing. Gesellschaft für Informatik, AK Quantencomputing. 26.04.2022.
- [Lenk2023] Lenk, S. (2023). Workshop Quantum Computing und Elektromobilität im Rahmen der SCI Business Week. 11.05.2023.
- [Lenk2023a] Lenk, S. (2023). Vorlesung Quantum Computing und Elektromobilität. Im Rahmen der Reihe Parallel Computing von Prof. Mäder. TU Ilmenau. 06.07.2023.
- [Lenk2024] Lenk, S. (2024) Talk about “QAOA for an EV Charging Scheduling Optimization: Current Achievements”. Quantum Computing Workshop DESY – University of the Bundeswehr – Fraunhofer-Gesellschaft.
- [Lenk2024a] Lenk, S. (2024). Talk about Quantum Computing und Elektromobilität. Im Rahmen der vde Vortragsreihe an der TU Ilmenau. 15.01.2024.
- [Lenk2024b] Lenk, S. (2024). Seminar about Quantum Computing und Elektromobilität. Im Rahmen der Schulung Energy Data Scientist for Optimization. 13.03.2024.
- [Musso2024] Musso, F., Santra, G. C., & Hauke, P. (2024). The Efficiency of Quantum Annealing in the Shortest Path Algorithm. Master thesis. <https://webapps.unitn.it/du/en/Persona/PER0215513/Tesi>
- [Santra2024b] Santra, G. C., Roy, S. S., Egger, D. J., & Hauke, P. (2024). Genuine Multipartite Entanglement in Quantum Annealing. In Preparation.
- [Santra2024c] Santra, G. C., & Hauke, P. (2024). Generalised Dynamics in Disordered Hamiltonians of Finite Order. In Preparation.
- [Santra2023b] Santra, G.C. (2023). Poster-Präsentation im Rahmen des Workshops „Nordita Quantum Get-Together & Work-Together,“ 15.05.23-17.05.23 Nordita, Stockholm, Poster-Titel „Many-body Physics in Quantum Optimization.“
- [Santra2024d] Santra, G.C. (2024). Vortrag beim Workshop „Trento-Innsbruck Quantum Information Tour“, Trento. 23.02.2024. Titel: „Solving industry-relevant problems using quantum computing“
- [Santra2024f] Santra, G.C. (2024). Poster-Präsentation im Rahmen des „NeQST workshop“, Offenbach, 09.04.24-11.04.24. Poster-Titel „Quantum resources in optimization algorithms/ problems.“
- [Sukanya2023] Sukanya. (2023). Investigating an ML approach to enhance the performance of the Quantum Approximate Optimisation Algorithm for an electro-mobility use case. Masterarbeit TU Ilmenau.
- [Trebing2022] Trebing, M. (2022). Quantum Computing Panel. Gurobi Days 9. Anwendertage 2022 Frankfurt.

Diese Referenzen umfassen wissenschaftliche Arbeiten von Dritten, sowie Arbeiten der beteiligten Projektpartner, die nicht im Zuge des Projekts EnerQuant entstanden sind.

- [Adesso2014] Adesso, G., Ragy, S., & Lee, A. R. (2014). Continuous Variable Quantum Information: Gaussian States and Beyond. In *Open Systems & Information Dynamics* (Vol. 21, Issue 01n02, p. 1440001). World Scientific Pub Co Pte Lt. <https://doi.org/10.1142/s1230161214400010>
- [Ajagekar2019] Ajagekar, A., & You, F. (2019). Quantum computing for energy systems optimization: Challenges and opportunities. In *Energy* (Vol. 179, pp. 76–89). Elsevier BV. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.04.186>
- [Akmal2021] Akmal, S. S., & Jin, C. (2021). Near-Optimal Quantum Algorithms for String Problems. *Algorithmica*. <https://doi.org/10.1137/1.9781611977073.109>
- [Asna2022] Asna, M., Shareef, H., Muhammad, M., Ismail, L., & Prasanthi, A. (2022). Multi-objective quantum atom search optimization algorithm for electric vehicle charging station planning. *International Journal of Energy Research*, 46, 17308–17331. <https://doi.org/10.1002/er.8399>
- [Bendotti2018] Bendotti, P., Fouilhoux, P., & Rottner, C. (2018). On the complexity of the Unit Commitment Problem. In *Annals of Operations Research* (Vol. 274, Issues 1–2, pp. 119–130). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1007/s10479-018-2827-x>
- [Biswal2023] Biswal, S. S., Swain, D., Rout, P., Das, A., & Mishra, A. K. (2023). A Comprehensive Review of Metaheuristic Algorithms Inspired by Quantum Mechanics. 2023 International Conference in Advances in Power, Signal, and Information Technology (APSIT). <https://doi.org/10.1109/APSIT58554.2023.10201716>
- [Blenninger2024] Blenninger, J., Bucher, D., Cortiana, G., Ghosh, K., Mohseni, N., Nüßlein, J., O’Meara, C., Porawski, D., & Wimmer, B. (2024). Quantum Optimization for the Future Energy Grid: Summary and Quantum Utility Prospects (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2403.17495>
- [Bloch 2008] Bloch, I., Dalibard, J., and W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, *Rev.Mod.Phys.* 80, 885 (2008).
- <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885>
- [Bloch 2008] Bloch, I., Dalibard, J., and W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, *Rev.Mod.Phys.* 80, 885 (2008).
- <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885>
- [Bloch2012] Bloch, I., Dalibard, J., & Nascimbène, S. (2012). Quantum simulations with ultracold quantum gases. In *Nature Physics* (Vol. 8, Issue 4, pp. 267–276). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1038/nphys2259>
- [Boehm2019] Boehm, J., Brugger, A., Habich, J., Hartmann, B., Held, M., Kling, M., Koenig, S., Pfreundt, F.J., Schmale, T., & Streichert, F. (2019). Towards Massively Parallel Computations in Algebraic Geometry. arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1808.09727>
- [Bluvstein 2024] Bluvstein, D., Evered, S.J., Geim, A.A. et al. Logical quantum processor based on reconfigurable atom arrays. *Nature* 626, 58–65 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06927-3>
- [Browaeys 2020] Browaeys, A., Lahaye T., Many-Body Physics with Individually-Controlled Rydberg Atoms, *Nature Physics* 16, 132 (2020) <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0733-z>
- [Cerezo2020] Cerezo, M., Arrasmith, A., Babbush, R., Benjamin, S., Endo, S., Fujii, K., McClean, J., Mitarai, K., Yuan, X., Cincio, L., & Coles, P. J. (2020). Variational

quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 3, 625-644.

<https://doi.org/10.1038/s42254-021-00348-9>

- [Chandra2021] Chandra, A., Lalwani, J., & Jajodia, B. (2021). Towards an Optimal Hybrid Algorithm for EV Charging Stations Placement using Quantum Annealing and Genetic Algorithms. 2022 International Conference on Trends in Quantum Computing and Emerging Business Technologies (TQCEBT).
<https://doi.org/10.1109/TQCEBT54229.2022.10041464>
- [Coffey2017] Coffey, M. W. (2017). Adiabatic quantum computing solution of the knapsack problem (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1701.05584>
- [Djidjev2020] Djidjev, H. (2020). Automaton-based methodology for implementing optimization constraints for quantum annealing. Proceedings of the 17th ACM International Conference on Computing Frontiers.
<https://doi.org/10.1145/3387902.3392619>
- [Dupont2022] Dupont, M., Didier, N., Hodson, M., Moore, J., & Reagor, M. (2022). Entanglement perspective on the quantum approximate optimization algorithm. *Physical Review A*. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.022423>
- [Falcone2006] Falcone, G., Kredel, H., Kreuter, S., Krietemeyer, M., Merten, D., Meuer, M., Merz, M., Pfreundt, F.J., Reinig, D., & Ristau, H. (2006). IPACS-benchmark: Integrated performance analysis of computer systems (IPACS); Benchmarks for distributed computer systems. Berlin.
<https://doi.org/10.1515/PIKO.2005.150>
- [Feng2023] Feng, F., Zhang, P., Bragin, M. A., & Zhou, Y. (2023). Novel Resolution of Unit Commitment Problems Through Quantum Surrogate Lagrangian Relaxation. In *IEEE Transactions on Power Systems* (Vol. 38, Issue 3, pp. 2460–2471). Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE).
<https://doi.org/10.1109/tpwrs.2022.3181221>
- [Gao2022] Gao, F., Huang, D., Zhao, Z., Dai, W., Yang, M., & Shuang, F. (2022). Hybrid Quantum-Classical General Benders Decomposition Algorithm for Unit Commitment with Multiple Networked Microgrids (Version 1). arXiv.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2210.06678>
- [Garcia2022] Garcia, M., Ayodele, M., & Moraglio, A. (2022). Exact and sequential penalty weights in quadratic unconstrained binary optimisation with a digital annealer. Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion. <https://doi.org/10.1145/3520304.3528925>
- [Gidi2022] Gidi, J. A., Candia, B., Muñoz-Moller, A., Rojas, A., Pereira, L., Muñoz, M., Zambrano, L., & Delgado, A. (2022). Stochastic optimization algorithms for quantum applications. *Physical Review A*.
<https://doi.org/10.1103/physreva.108.032409>
- [Glover2018] Glover, F., Kochenberger, G., & Du, Y. (2018). Quantum Bridge Analyt-ics I: a tutorial on formulating and using QUBO models. *4OR*, 17, 335-371.
<https://doi.org/10.1007/s10288-019-00424-y>
- [Goh2022] Goh, S. T., Bo, J., Gopalakrishnan, S., & Lau, H. (2022). Techniques to enhance a QUBO solver for permutation-based combinatorial optimization. Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion.
<https://doi.org/10.1145/3520304.3533982>
- [Grove-Kuska2003] Grove-Kuska, N., Heitsch, H., & Romisch, W. (n.d.). Scenario reduction and scenario tree construction for power management problems. In 2003 IEEE Bologna Power Tech Conference Proceedings, 2003 IEEE Bologna Power Tech. IEEE. <https://doi.org/10.1109/ptc.2003.1304379>
- [Hans2024] Hans, M., Kath, E., Sparr, M., Liebster, N., Strobel, H., Oberthaler, M.K., Draxler, F. and Schnörr, C., Bose-Einstein condensate experiment as a nonlinear block of a machine learning pipeline, *PhysRevResearch* 6, 013122 (2024)
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.6.013122>
- [Hauke2015] Hauke, P., Bonnes, L., Heyl, M., & Lechner, W. (2015). Probing entanglement in adiabatic quantum optimization with trapped ions. In *Frontiers in Physics* (Vol. 3). Frontiers Media SA. <https://doi.org/10.3389/fphy.2015.00021>

Weitere Referenzen

- [Hauke2019] Hauke, P., Katzgraber, H. G., Lechner, W., Nishimori, H., & Oliver, W. D. (2020). Perspectives of quantum annealing: methods and implementations. In *Reports on Progress in Physics* (Vol. 83, Issue 5, p. 054401). IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/1361-6633/ab85b8>
- [Hauke2020] Hauke, P., Katzgraber, H. G., Lechner, W., Nishimori, H., & Oliver, W. D. (2020). Perspectives of quantum annealing: methods and implementations. In *Reports on Progress in Physics* (Vol. 83, Issue 5, p. 054401). IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/1361-6633/ab85b8>
- [Hinderks2019a] Hinderks, W.J., & Wagner, A. (2019). Pricing German Energiewende products: intraday cap/floor futures. *Energy Economics*, 81, 287-296. <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2019.04.005>
- [Hinderks2019b] Hinderks, W.J., & Wagner, A. (2019). Factor models in the German electricity market: stylized facts, seasonality, and calibration. *Energy Economics*. <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2019.03.024>
- [Jendrzewski2019] Jendrzewski, F., & Hauke, P. (2019). *Running a Quantum Computer*. Lecture Notes, Summer Semester 2019, Heidelberg University.
- [Jing2022] Jing, H., Wang, Y., Li, Y., Du, L., & Wu, Z. (2022). Dynamics Analysis of Microgrids Integrated with EV Charging Stations based on Quantum Approximate Optimization Algorithm. 2022 IEEE Transportation Electrification Conference & Expo (ITEC). <https://doi.org/10.1109/ITEC53557.2022.9813820>
- [Joseph2022] Joseph, I., Shi, Y., Porter, M. D., Castelli, A., Geyko, V., Graziani, F., Libby, S., & Dubois, J. (2022). Quantum computing for fusion energy science applications. *Physics of Plasmas*. <https://doi.org/10.1063/5.0123765>
- [Kea2023] Kea, K., Huot, C., & Han, Y. (2023). Leveraging Knapsack QAOA Approach for Optimal Electric Vehicle Charging. *IEEE Access*, 11, 109964-109973. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3320800>
- [Khalid2021] Khalid, A., Tufail, S., & Sarwat, A. I. (2021). A Review on Quantum Computing Approach for Next-Generation Energy Storage Solution. In *Southeast-Con 2021*. SoutheastCon 2021. IEEE. <https://doi.org/10.1109/southeastcon45413.2021.9401854>
- [Knueven2020] Knueven, B., Ostrowski, J., & Watson, J. P. (2020). On mixed-integer programming formulations for the unit commitment problem. *INFORMS Journal on Computing*, 32(4), 857-876. <https://doi.org/10.1287/ijoc.2019.0944>
- [Kunkel 2019] Kunkel, P., Prüfer, M., Lannig, S., Rosa-Medina, R., Bonnin, A., Gärtner, M., Strobel, H., Oberthaler, M.K., Simultaneous Readout of Noncommuting Collective Spin Observables beyond the Standard Quantum Limit, *Phys.Rev.Lett.* 123, 063603 (2019) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.063603>
- [Kunkel 2022] Kunkel, P., Prüfer, M., Lannig, S., Strohmaier, R., Gärtner, M., Strobel, H., Oberthaler, M.K., Detecting Entanglement Structure in Continuous Many-Body Quantum Systems, *Phys.Rev.Lett.* 128, 020402 (2022) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.020402>
- [Kolotouros2021] Kolotouros, I., & Wallden, P. (2021). Evolving objective function for improved variational quantum optimization. *Physical Review Research*. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023225>
- [Koretsky2021] Koretsky, S., Gokhale, P., Baker, J. M., Vizlai, J., Zheng, H., Gurung, N., Burg, R., Paaso, E. A., Khodaei, A., Eskandarpour, R., & Chong, F. T. (2021). Adapting Quantum Approximation Optimization Algorithm (QAOA) for Unit Commitment. In 2021 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE). 2021 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE). IEEE. <https://doi.org/10.1109/qce52317.2021.00035>
- [Korolyov2020] Korolyov, V., & Khodzinskiy, O. (2020). Solving Combinatorial Optimization Problems on Quantum Computers. *Quantum Computers and Mathematics*. <https://doi.org/10.34229/2707-451x.20.2.1>
- [Lechner2015] Lechner, W., Hauke, P., & Zoller, P. (2015). A quantum annealing architecture with all-to-all connectivity from local interactions. In *Science Advances*

(Vol. 1, Issue 9). American Association for the Advancement of Science (AAAS).

<https://doi.org/10.1126/sciadv.1500838>

- [Lim2023] Lim, D., Doriguello, J. F., & Reberstrost, P. (2023). Quantum algorithm for robust optimization via stochastic-gradient online learning (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2304.02262>
- [Lucas2014] Lucas, A. (2014). Ising formulations of many NP problems. In *Frontiers in Physics* (Vol. 2). Frontiers Media SA. <https://doi.org/10.3389/fphy.2014.00005>
- [Mahroo2022] Mahroo, R., & Kargarian, A. (2022). Hybrid Quantum-Classical Unit Commitment. In *2022 IEEE Texas Power and Energy Conference (TPEC)*. 2022 IEEE Texas Power and Energy Conference (TPEC). IEEE. <https://doi.org/10.1109/tpec54980.2022.9750763>
- [Mešter2023] Mešter, M. (2023). Potential of Quantum Technologies in the Energy Sector. *2023 23rd International Scientific Conference on Electric Power Engineering (EPE)*. <https://doi.org/10.1109/EPE58302.2023.10149255>
- [Mil2019] Mil, A., Zache, T. V., Hegde, A., Xia, A., Bhatt, R. P., Oberthaler, M. K., Hauke, P., Berges, J., & Jendrzejewski, F. (2020). A scalable realization of local U(1) gauge invariance in cold atomic mixtures. In *Science* (Vol. 367, Issue 6482, pp. 1128–1130). American Association for the Advancement of Science (AAAS). <https://doi.org/10.1126/science.aaz5312>
- [Muessel 2014] Muessel, W. and Strobel, H. and Linnemann, D. and Hume, D. B. and Oberthaler, M. K, Scalable Spin Squeezing for Quantum-Enhanced Magnetometry with Bose-Einstein Condensates, *Phys.Rev.Lett.* 113, 103004 (2014) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.103004>
- [Naumann2015] Naumann, S., Schwanenberg, D., Karimanzira, D., Fan, F., & Allen, C. (2015). Short-term management of hydropower reservoirs under meteorological uncertainty by means of multi-stage optimization. *at-Automatisierungstechnik*, 63(7), 535-542. <https://doi.org/10.1515/auto-2014-1168>
- [Naumann2018] Naumann, S., Klaiber, S., Kummerow, A., & Bretschneider, P. (2018). Simulation of Coordinated Market Grid Operations considering Uncertainties. In *2018 IEEE PES Innovative Smart Grid Technologies Conference Europe (ISGT-Europe)*. 2018 IEEE PES Innovative Smart Grid Technologies Conference Europe (ISGT-Europe). IEEE. <https://doi.org/10.1109/isgteurope.2018.8571833>
- [Nikmehr2022] Nikmehr, N., Zhang, P., & Bragin, M. A. (2022). Quantum Distributed Unit Commitment: An Application in Microgrids. In *IEEE Transactions on Power Systems* (Vol. 37, Issue 5, pp. 3592–3603). Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). <https://doi.org/10.1109/tpwrs.2022.3141794>
- [Padhy2004] Padhy, N. P. (2004). Unit Commitment—A Bibliographical Survey. In *IEEE Transactions on Power Systems* (Vol. 19, Issue 2, pp. 1196–1205). Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). <https://doi.org/10.1109/tpwrs.2003.821611>
- [Paudel2023] Paudel, H. P., Crawford, S. E., Lee, Y.-L., Shugayev, R., Leuenberger, M. N., Syamlal, M., Ohodnicki, P., Lu, P., Mollot, D., & Duan, Y. (2023). Quantum Communication Networks for Energy Applications: Review and Perspective. *Advanced Quantum Technologies*. <https://doi.org/10.1002/qute.202300096>
- [PGL18] PowerGridLib - <https://github.com/power-grid-lib/pglib-uc>
- [Preskill2018] Preskill, J. (2018). Quantum Computing in the NISQ era and beyond. In *Quantum* (Vol. 2, p. 79). Verein zur Förderung des Open Access Publizierens in den Quantenwissenschaften. <https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
- [Rentrop2016] Rentrop, T., Trautmann, A., Olivares, F. A., Jendrzejewski, F., Komnik, A., & Oberthaler, M. K. (2016). Observation of the phononic Lamb shift with a synthetic vacuum. *Physical Review X*, 6(4), 041041. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.041041>
- [Rotello2024] Rotello, C., Graf, P., Reynolds, M., Winkleblack, C. J., & Jones, W. (2024). Calculating the expected value function of a two-stage stochastic optimization program with a quantum algorithm (Version 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2402.15029>

Weitere Referenzen

- [Saravanan2013] Saravanan, B., Das, S., Sikri, S., & Kothari, D. P. (2013). A solution to the unit commitment problem—a review. In *Frontiers in Energy* (Vol. 7, Issue 2, pp. 223–236). Springer Science and Business Media LLC.
<https://doi.org/10.1007/s11708-013-0240-3>
- [Shaydulin2019] Shaydulin, R., Ushijima-Mwesigwa, H., Negre, C., Safro, I., Mniszewski, S., & Alexeev, Y. (2019). A Hybrid Approach for Solving Optimization Problems on Small Quantum Computers. *Computer*, 52, 18-26.
<https://doi.org/10.1109/MC.2019.2908942>
- [Silva2021] Silva, F., Carvalho, P., Ferreira, L., & Omar, Y. (2021). A QUBO Formulation for Minimum Loss Network Reconfiguration.
<https://doi.org/10.1109/TPWRS.2022.3214477>
- [Stein2023] Stein, J., Jojo, J., Farea, A., Bucher, D., Altmann, P., Çelebi, M. S., & Linnhoff-Popien, C. (2023). Combining the QAOA and HHL Algorithm to achieve a Substantial Quantum Speedup for the Unit Commitment Problem (Version 2). arXiv.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2305.08482>
- [Viermann 2022] Viermann, C., Sparn, M., Liebster, N. et al. Quantum field simulator for dynamics in curved spacetime. *Nature* 611, 260–264 (2022).
<https://doi.org/10.1038/s41586-022-05313-9>
- [Verma2020] Verma, A., & Lewis, M. W. (2020). Penalty and partitioning techniques to improve performance of QUBO solvers. *Discret. Optim.*, 44, 100594.
<https://doi.org/10.1016/j.disopt.2020.100594>
- [Veshchezerova2023] Veshchezerova, M., Somov, M., Bertsche, D., Limmer, S., Schmitt, S., Perelshtein, M., & Tripathi, A. J. (2023). A Hybrid Quantum-Classical Approach to the Electric Mobility Problem. 2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE).
<https://doi.org/10.1109/QCE57702.2023.00078>
- [Vyskocil2019] Vyskocil, T., Pakin, S., & Djidjev, H. (2019). Embedding Inequality Constraints for Quantum Annealing Optimization. https://doi.org/10.1007/978-3-030-14082-3_2
- [Wagner2014] Wagner, A. (2014). Residual demand modeling and application to electricity pricing. *The Energy Journal*, 35(2).
<https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.2018908>
- [Wang2023] Wang, Y., Kim, J. E., & Suresh, K. (2023). Opportunities and Challenges of Quantum Computing for Engineering Optimization. *Journal of Computing and Information Science in Engineering*. <https://doi.org/10.1115/1.4062969>
- [Zhang2022] Zhang, G., Dai, M., Zhao, S., & Zhao, P. (2022). Dynamic Charging Scheduling Optimization for Electric Vehicles Based on Quantum SWARM Algorithm. 2022 7th Asia-Pacific Conference on Intelligent Robot Systems (ACIRS).
<https://doi.org/10.1109/ACIRS55390.2022.9845549>