Q-Grid Abschlussbericht (LMU)

Einleitung

Die zunehmende Komplexität zukünftiger Energienetze stellt Betreiber und Planer vor fundamentale Herausforderungen: Dezentralisierung durch erneuerbare Energien, volatile Einspeise- und Verbrauchsprofile, dynamische Netzbelastungen sowie steigende Anforderungen an Effizienz, Resilienz und Nachhaltigkeit verlangen nach neuen Optimierungsansätzen. Klassische Methoden zur Steuerung, Planung und Analyse stoßen hierbei zunehmend an ihre Grenzen – insbesondere bei kombinatorisch anspruchsvollen Aufgaben wie der Partitionierung von Stromnetzen in Microgrids, der gerechten Allokation von Netzkosten in Peer-to-Peer-Märkten oder der dynamischen Preisgestaltung zur Verbrauchslenkung. Diese Problemstellungen zeichnen sich oft durch eine hohe Zahl binärer Entscheidungsvariablen, komplexe Nebenbedingungen und nichtlineare Zielfunktionen aus, was sie in ihrer Struktur für klassische Algorithmen schwer lösbar macht. Vor diesem Hintergrund untersucht das Forschungsprojekt Q-Grid das Potenzial von Quantencomputing zur Bewältigung solcher hochdimensionalen Optimierungsprobleme. Insbesondere sogenannte QUBO-Modelle (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) bilden hierbei eine zentrale Rolle, da sie sowohl von Quantenannealern als auch von hybriden und gate-basierten Quantenalgorithmen direkt verarbeitet werden können. Die Motivation liegt darin, durch geeignete Modellierungen, Vorverarbeitung und algorithmische Innovationen die besonderen Fähigkeiten von Quantencomputern – etwa bei der gleichzeitigen Auswertung vieler möglicher Lösungen durch Quantenparallelismus – für reale energiewirtschaftliche Anwendungsfälle nutzbar zu machen.
Im Projekt wurden deshalb gezielt drei exemplarische Use-Cases definiert, die verschiedene Aspekte zukünftiger Energienetze abbilden und gleichzeitig unterschiedliche algorithmische Anforderungen stellen:

1. Demand Side Response durch individuelle, CO_2-optimierte Preisgestaltung zur aktiven Verbrauchssteuerung
2. die Identifikation autarker Energiegemeinschaften durch graphbasierte Partitionierung unter Stromfluss- und Versorgungsrestriktionen sowie
3. die Kostenallokation in Peer-to-Peer-Märkten basierend auf physikalischen und logischen Leistungsflüssen.

Allen Use-Cases gemeinsam ist, dass sie komplexe, NP-schwere Optimierungsprobleme beinhalten, die sich zwar mit klassischen Methoden approximativ lösen lassen, deren Lösungsqualität und Skalierbarkeit jedoch stark begrenzt ist. Das Projekt Q-Grid setzt daher sowohl auf die Entwicklung neuartiger, quanteninspirierter Algorithmen, die problemstrukturierte Vorverarbeitung (z. B. durch Symmetriereduktion oder Zerlegungsmethoden) als auch auf die Integration und Evaluation von Quantentechnologien in realitätsnahen Szenarien. Ziel ist es, eine belastbare Einschätzung über das Potenzial und die praktischen Voraussetzungen quantenbasierter Optimierungsmethoden im Energiesektor zu erlangen – von der formalen Modellierung über die algorithmische Umsetzung bis hin zur realen oder simulierten Ausführung auf (hybrider) Quantenhardware. Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse basieren auf der engen Zusammenarbeit zwischen der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) sowie den Industriepartnern E.ON und Aqarios und kombinieren theoretische Grundlagenforschung mit anwendungsnahen Implementierungen.

Im Rahmen des Forschungsprojekts Q-Grid, das unter dem Titel „Harnessing the Power of Quantum Computers for Future Energy Grid Optimization“ geführt wird, verfolgte die Ludwig-Maximilians-Universität München das übergeordnete Ziel, neuartige quantenbasierte Methoden zur Optimierung künftiger Energienetze zu entwickeln und auf anwendungsnahe Fragestellungen zu übertragen. Dabei lag der Fokus insbesondere auf der Weiterentwicklung von Algorithmen, der intelligenten Vorverarbeitung von Optimierungsproblemen, der Entwicklung wiederverwendbarer

Programmierkonstrukte sowie auf der algorithmischen Übertragbarkeit der entwickelten Konzepte in industrielle Anwendungen. Das Teilvorhaben der LMU ist in mehrere Arbeitspakete gegliedert, die sowohl theoretische Innovationen als auch praktische Anwendungsszenarien umfassen.

AP2 – Intelligente Vorverarbeitungsmethoden

Im Rahmen unseres Arbeitspakets AP2 haben wir einen umfassenden Vorverarbeitungsansatz für QUBO-Probleme entwickelt, der es ermöglicht, die strukturelle Komplexität deutlich zu reduzieren.

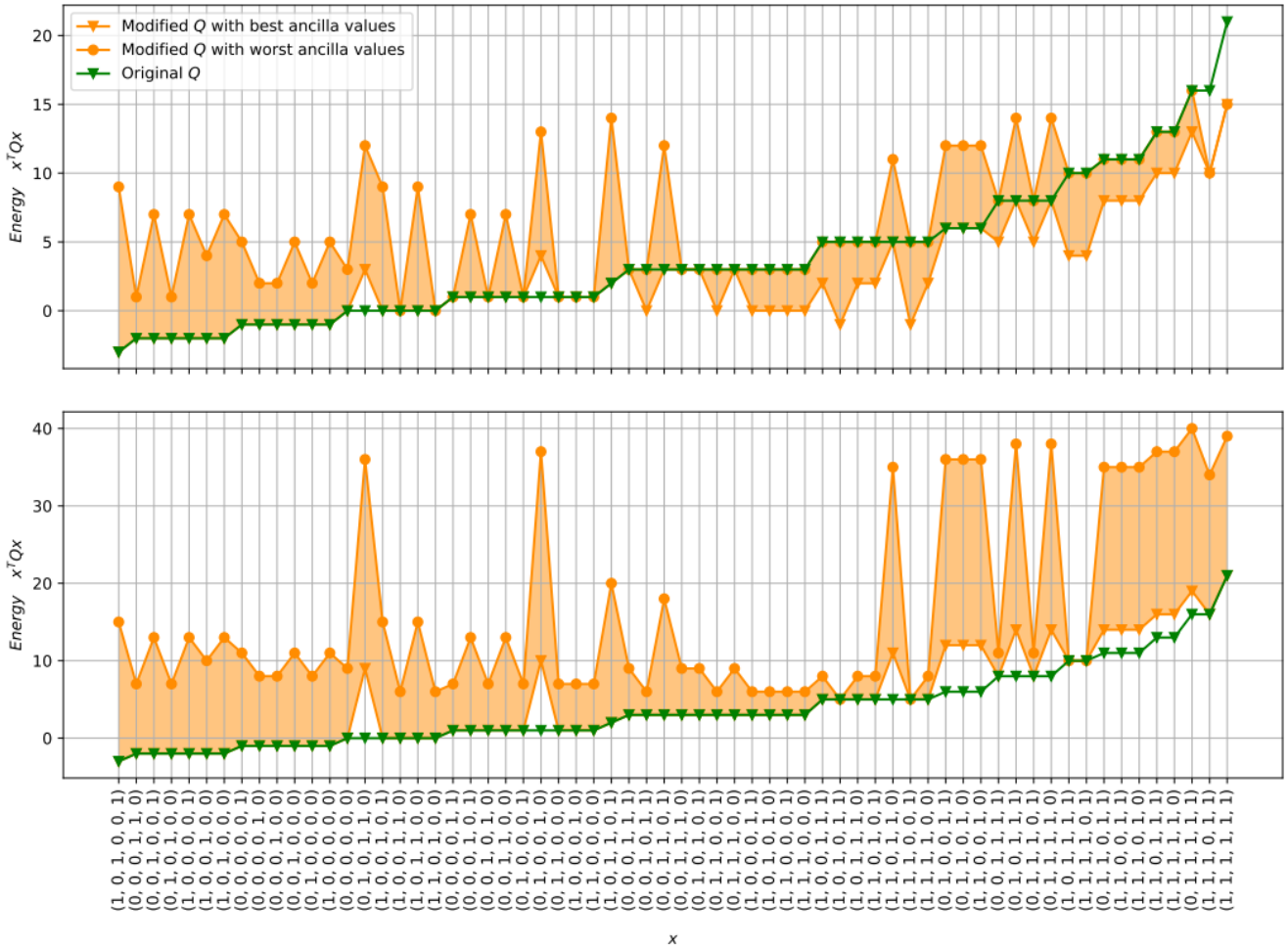
Unser Ziel war es, die physikalischen und rechnerischen Anforderungen an Quantum Annealing und QAOA zu reduzieren, ohne dabei die Struktur des Problems oder die Qualität der Lösung zu verändern. Dazu haben wir das Konzept sogenannter Semi-Symmetrien entwickelt und einen Algorithmus entworfen, der diese erkennt und nutzt, um Kopplungen innerhalb der QUBO-Matrix gezielt zu eliminieren.

Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) ist eine weit verbreitete Problemformulierung, bei der binäre Variablen x mit n Einträgen so gewählt werden soll, dass sie eine quadratische Zielfunktion der Form $x^T Q x$ minimiert. Die Matrix Q enthält dabei sowohl die Gewichtungen einzelner Variablen als auch die Kopplungen zwischen Variablenpaaren. Solche Formulierungen sind insbesondere für Quantenalgorithmen interessant, da sie sich direkt auf physische Quantenhardware wie Quanten-Annealer oder QAOA-kompatible Schaltkreise abbilden lassen. Allerdings ist die Kopplungsstruktur der QUBO-Matrix von zentraler Bedeutung für die praktische Implementierbarkeit: Je mehr Nicht-null-Kopplungen (also Verbindungen zwischen Qubits) vorhanden sind, desto mehr Zwei-qubit-Operationen sind notwendig, was wiederum die Schaltkreistiefe bei QAOA erhöht und die Qualität der Einbettung bei Quantum Annealing verschlechtert. In aktuellen Geräten führt dies nicht nur zu längeren Rechenzeiten, sondern auch zu einer erhöhten Fehleranfälligkeit.

Aus diesem Grund haben wir analysiert, ob sich bestimmte strukturelle Muster in QUBO-Matrizen identifizieren lassen, die es erlauben, Kopplungen zu entfernen, ohne dabei das Energiespektrum der Lösung zu verändern. Dabei haben wir ein neues Konzept eingeführt: die sogenannten Semi-Symmetrien. Zwei Qubits in einer QUBO-Matrix sind semi-symmetrisch, wenn sie mit einer ausreichend großen Teilmenge anderer Qubits identische Kopplungswerte teilen, aber nicht zwangsläufig vollständig identisch sind. Zusätzlich müssen sie im Sinne des Lösungsraums „konfliktär“ sein. Das bedeutet: Wenn beide gleichzeitig in einer Lösung den Wert 1 annehmen, erhöht sich die Energie des Systems im Vergleich zu einer Konfiguration, in der nur einer von beiden aktiviert ist. Solche Konflikte sind typisch für viele Problemstellungen, etwa bei der Suche nach maximalen Cliquen, bei Färbungsproblemen oder bei der Graphisomorphie.

Ein Beispiel: In einem Graphen mit mehreren Knoten, die alle auf ähnliche Weise mit bestimmten zentralen Knoten verbunden sind, ergibt sich in der QUBO-Matrix oft eine Situation, in der sich zwei Knoten ähnlich verhalten (d. h. sie haben ähnliche Kopplungen), aber nicht gemeinsam Teil einer gültigen Lösung sein dürfen (weil sie z. B. nicht gemeinsam in einer Clique liegen können). Diese strukturelle Redundanz nutzen wir.
Um solche Semi-Symmetrien automatisch zu identifizieren, haben wir einen Algorithmus entwickelt. Der Algorithmus analysiert die QUBO-Matrix Q systematisch nach Paaren von Qubits, die zum einen ein Konfliktverhältnis aufweisen, und zum anderen eine ausreichend große Anzahl identischer Kopplungen zu denselben anderen Qubits besitzen. Für jedes erkannte Paar wird eine neue Hilfsvariable – ein sogenannter Ancilla-Qubit – eingeführt. Dieser Ancilla übernimmt die gemeinsamen Kopplungen, während die ursprünglichen Qubits entlastet werden. Zusätzlich wird eine energetische Strafstruktur eingeführt, die sicherstellt, dass ungültige Lösungen (in denen beide ursprünglichen Qubits den Wert 1 annehmen) eine höhere Energie aufweisen.

In natürlicher Sprache beschrieben funktioniert der Algorithmus wie folgt: Zunächst wird für jede Qubit-Paar-Kombination geprüft, ob ein Konflikt vorliegt. Dazu wird für jedes Paar berechnet, ob die gleichzeitige Aktivierung beider Qubits zu einer höheren Energie führt als alle anderen möglichen Belegungen (z. B. einer aktiv, einer inaktiv). Diese Paare werden in eine Konfliktliste aufgenommen. Anschließend wird iterativ das Paar aus der Konfliktliste gewählt, welches die größte Anzahl gemeinsamer, identischer Kopplungen zu anderen Qubits aufweist. Hat ein solches Paar mindestens drei gemeinsame Kopplungen (dieser Schwellenwert ist ein Hyperparameter), gilt es als semi-symmetrisch. Der Algorithmus fügt dann einen neuen Ancilla-Qubit hinzu, der diese Kopplungen übernimmt, während die Kopplungen der beiden ursprünglichen Qubits zu diesen Dritten entfernt werden. Zudem werden gezielt Terme eingeführt, die gewährleisten, dass die Energie gültiger Lösungen erhalten bleibt und die Energie ungültiger Lösungen ansteigt. Dies geschieht durch Modifikation der Diagonale und Hinzufügen von linearen und quadratischen Kopplungstermen zwischen den Qubits und dem Ancilla mit einem Parameter z, der als Gewichtung dient. Dieser Vorgang wird so lange wiederholt, bis entweder keine neuen Semi-Symmetrien mehr gefunden werden oder eine zuvor festgelegte maximale Anzahl an Ancilla-Qubits erreicht wurde.

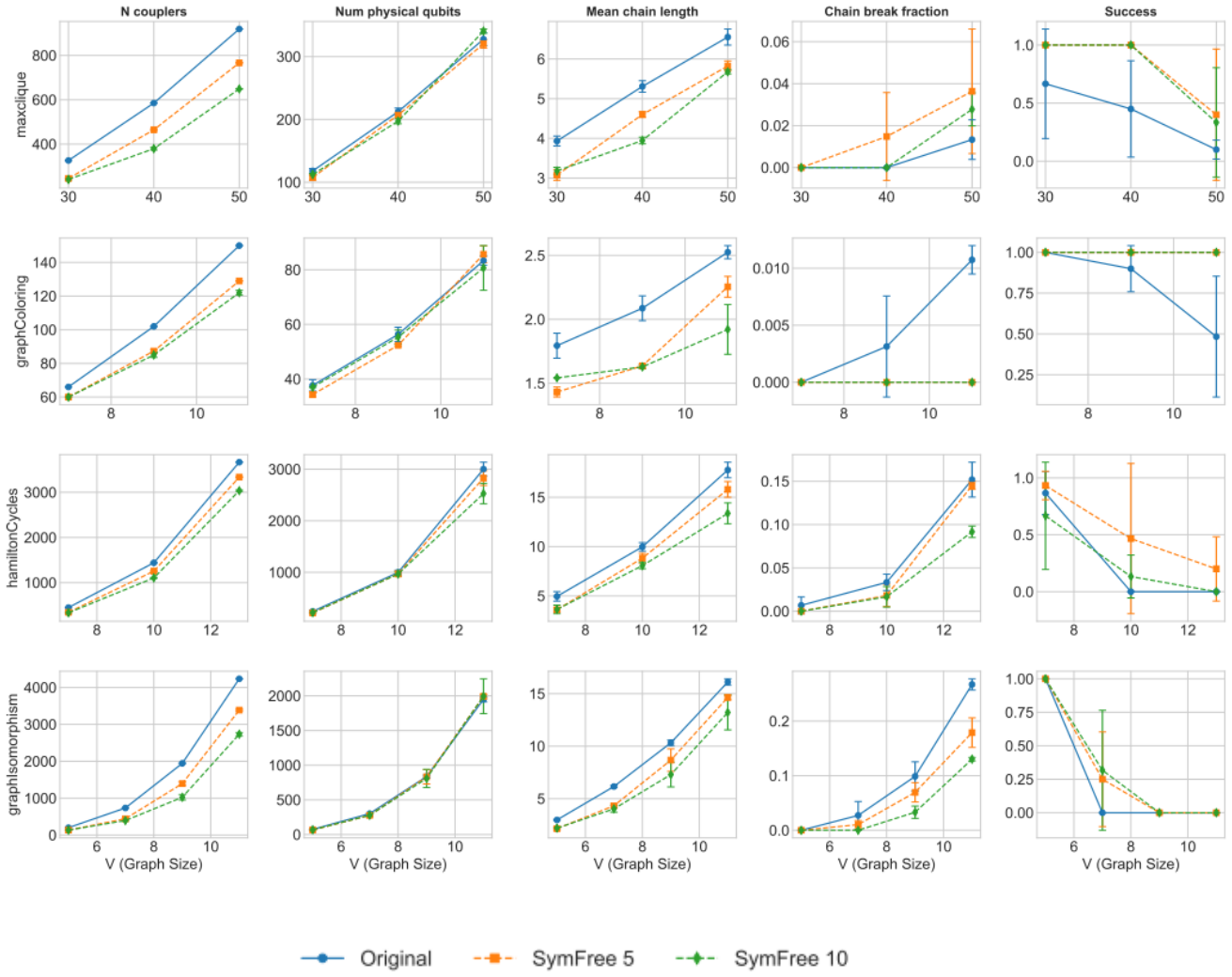


Die Korrektheit dieses Vorgehens haben wir sowohl theoretisch als auch experimentell bestätigt. In einem Beweis zeigten wir, dass mit ausreichend großem z der Energieverlauf für gültige Lösungen exakt erhalten bleibt. Gültige Konfigurationen mit aktivem Ancilla haben die gleiche Energie wie vorher, und ungültige Konfigurationen (z. B. mit beiden ursprünglichen Qubits aktiv) werden energetisch schlechter. Damit ist garantiert, dass das globale Minimum erhalten bleibt.

Zur Veranschaulichung haben wir ein kleines Beispiel mit sechs Qubits analysiert, bei dem eine Semi-Symmetrie zwischen zwei Qubits entfernt wurde. Der ursprüngliche QUBO hatte neun

Kopplungen, der modifizierte mit einem zusätzlichen Ancilla nur noch acht. Die Energie aller gültigen Lösungen blieb unverändert, und ungültige Lösungen wurden korrekt energetisch „bestraft“. In der Grafik sehen wir die Energielandschaft für alle möglichen Zustände ($2^6 = 64$). Die obere und untere Grafik unterscheiden sich nur durch verschiedene Werte von z.

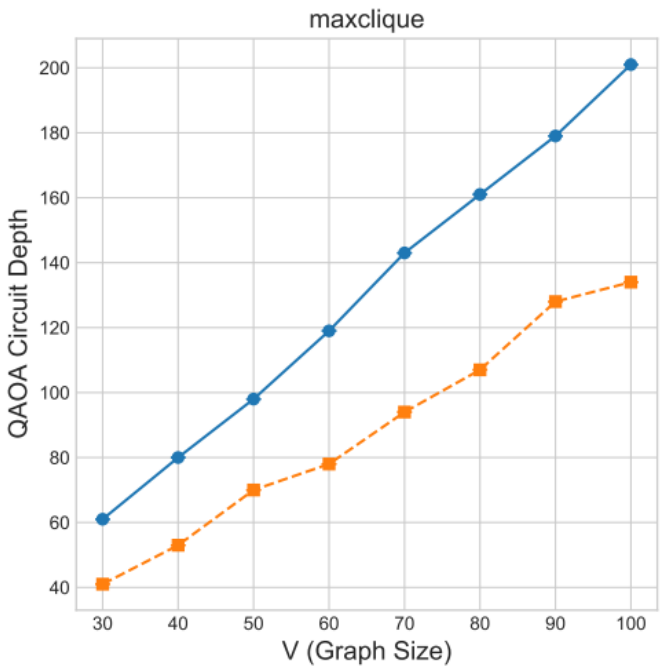
Im nächsten Schritt haben wir eine empirische Studie durchgeführt, bei der wir den Algorithmus auf vier verschiedene Problemklassen angewendet haben: Maximum Clique, Hamilton Cycles, Graph Coloring und Graph Isomorphism.

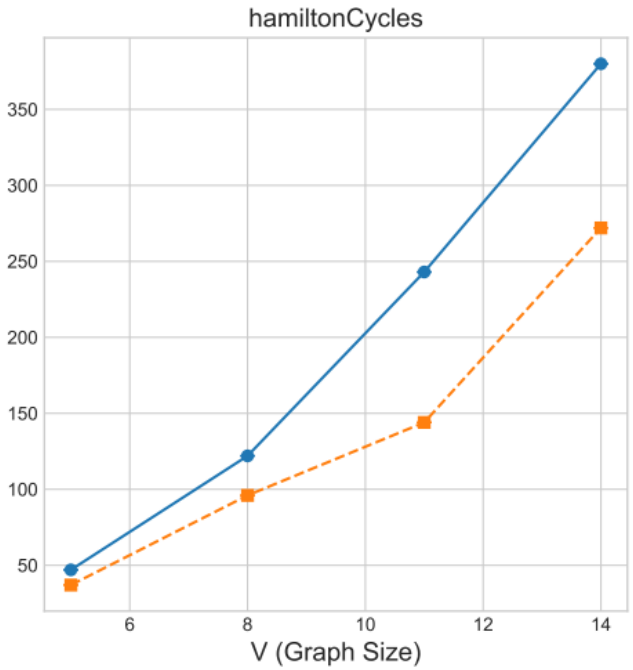


Für jede Problemklasse wurden QUBO-Formulierungen erzeugt und dann in drei Varianten getestet: ohne Symmetrie-Reduktion, mit maximal fünf Ancilla-Qubits und mit maximal zehn Ancilla-Qubits. Die resultierenden QUBO-Matrizen wurden auf einem D-Wave Advantage 4.1 Quanten-Annealer ausgeführt, und zentrale Kennzahlen erhoben. Die Ergebnisse zeigten, dass die reduzierte Kopplungsdichte zu kürzeren Ketten und weniger Fehlern beim Lösen führte. Konkret wurden die Zahl der physischen Qubits, die mittlere Kettenlänge, die Chain-Break-Fraction sowie die Erfolgsrate erfasst. In fast allen Fällen konnte die Erfolgsrate erhöht werden, da die geringere Dichte die Einbettung stabilisierte.

Zusätzlich haben wir den Effekt auf die QAOA-Schaltkreistiefe analysiert. Dazu wurden die QUBOs mit und ohne Symmetrie-Reduktion in Qiskit geladen und QAOA-Schaltkreise mit einer Schicht (p = 1) erzeugt. Die resultierende Tiefe wurde nach dem Transpilieren gemessen. Auch hier zeigte sich

eine signifikante Reduktion, insbesondere bei größeren Problemgrößen. Dies ist besonders wichtig, da auf aktuellen Quantenprozessoren die Schaltungstiefe stark mit der Fehlerrate korreliert.



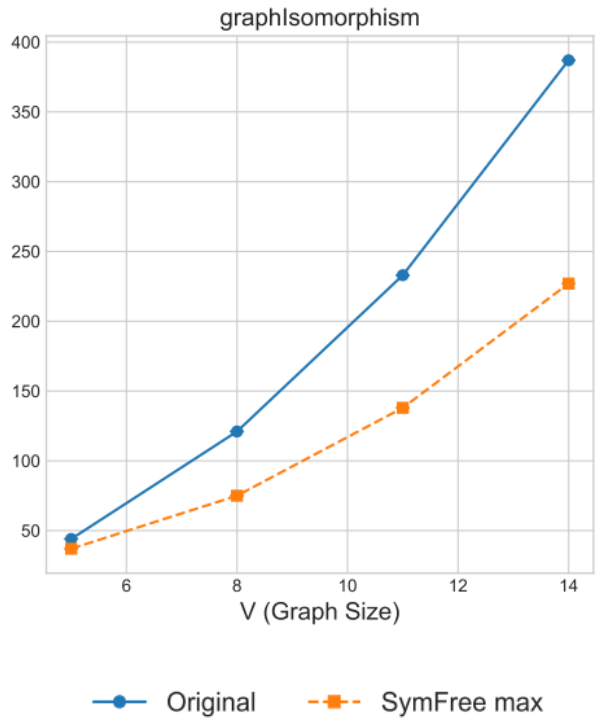


In den Experimenten konnte man beobachten, dass die QUBO-Matrizen, aus denen die Semi-Symmetrien entfernt wurden, bedeutend geringere QAOA-Schaltkreistiefen besitzen als die ursprünglichen QUBO-Matrizen. Dies hat bedeutende Konsequenzen für die praktische Anwendung von QAOA auf aktuellen NISQ-Geräten: Durch die deutlich reduzierte Schaltkreistiefe sinkt die kumulierte Fehlerrate bei jedem Ausführungszyklus, was zu einer stabileren und präziseren Lösung führt. Insbesondere lassen sich folgende Effekte festhalten:

- **Verringerte Fehlerraten:** Kürzere Gate-Sequenzen bedeuten weniger Decoherence-

Verluste und Gate-Fehler, was die Wahrscheinlichkeit erhöht, das optimale Ergebnis tatsächlich zu messen.

- **Bessere Skalierbarkeit:** Da weniger physische Qubits und kürzere Ketten benötigt werden, können größere Probleme auf derselben Hardware untergebracht werden, ohne in Ketten-Brüche zu laufen.
- **Effizienzgewinn bei Embedding:** Durch die Symmetrie-Reduktion sinkt die Kopplungsdichte, sodass das Minor-Embedding weniger komplex wird und schneller berechnet werden kann.



In der Gesamtschau zeigt unsere Arbeit, dass sich durch die gezielte Identifikation und Auslagerung von semi-symmetrischen Strukturen in QUBO-Matrizen erhebliche Vorteile für die Ausführung auf Quantenhardware ergeben. Unser Verfahren ist universell einsetzbar, vollständig korrekt in Bezug auf das ursprüngliche Problem, und erzielt deutliche Einsparungen bei Kopplungen, Schaltungstiefe und physikalischen Ressourcen.

AP3 – Anwendungsfälle des zukünftigen Energienetzes

Ein weiterer Schwerpunkt des LMU-Teilvorhabens lag im Arbeitspaket AP3, der Entwicklung von Optimierungsmethoden realer Fragestellungen in zukünftigen Energienetzen.

Die zentrale untersuchte Problemstellung besteht darin, ein großes Stromnetz in mehrere kleinere, stabil arbeitende Microgrids zu unterteilen. In einem Szenario, bei dem der gesamte Energiemix auf erneuerbaren Quellen basiert, wird die dynamische Aufteilung des Netzes zu einem essenziellen Kriterium, um Effizienz, Stabilität und Flexibilität der Energieversorgung zu gewährleisten. Konzeptionell wird das Problem als Partitionierung eines vollständigen, ungerichteten Graphen modelliert, wobei die Knoten als Prosumer – also als Teilnehmer, die sowohl Energie erzeugen als auch verbrauchen – interpretiert werden. Die Kanten des Graphen tragen Gewichte, die den Nutzen oder die Kooperationsvorteile zwischen den Prosumern repräsentieren. Die Optimierungsaufgabe besteht darin, den Graphen in Untergraphen zu zerlegen, sodass die Summe der innerhalb der

Teilgraphen vorhandenen Kantengewichte maximiert wird. Dieses Problem fällt in den Bereich der koalitionsstrukturellen Generierung und ist als NP-schwer klassifiziert. Vor diesem Hintergrund diente der bereits existierende Greedy-Ansatz GCS-Q (Graph-restricted Coalition Structure generation via Quantum Annealing) als Benchmark, gegen den die neu entwickelten Ansätze getestet wurden.

GCS-Q funktioniert folgendermaßen: man startet mit der so genannten Grand Coalition, also der Koalition, die alle Knoten beinhaltet. Anschließend teilt man eine Koalition in zwei Sub-Koalitionen, sodass die Summe der Summen der beinhalteten Kantengewichte maximiert wird. Dies wird wiederholt, bis keine Verbesserung mehr möglich ist, dann terminiert der Algorithmus. Das Problem mit diesem Ansatz ist, dass er greedy ist. Es kann also sein, dass der Algorithmus in lokale Optima fällt, aus denen er nicht mehr herauskommt.

Im Folgenden möchten wir unsere Ansätze kurz vorstellen, die weniger greedy sind als GCS-Q. Der erste Ansatz ist inspiriert von Kochenberger et al. Hierbei werden binäre Entscheidungsvariablen x_{ic} verwendet, die repräsentieren, dass Knoten i zur Koalition c gehört. Ohne Domain-Knowledge über die gewünschte Anzahl an Koalitionen kann man setzen $c = n$ (es gibt also maximal n mögliche Koalitionen). Die QUBO-Formulierung hierzu lautet:

$$\left(\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left(-w_{ij}\sum_{c=1}^{n}x_{ic}\,x_{jc}\right)\right)+\left(\sum_{i=1}^{n}P\,(1-\sum_{c=1}^{n}x_{ic})^2\right)$$

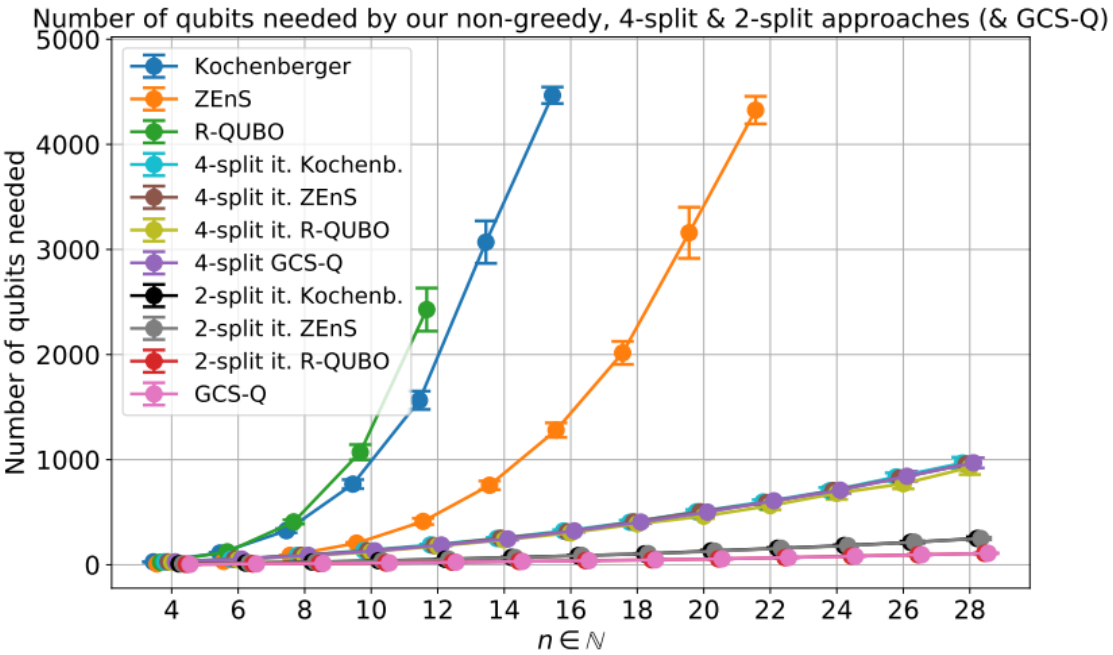
Da allerdings bei Ein-Knoten-Koalitionen die Summe der Kantengewichte 0 ist (da sie keine Kanten enthält) kann man trivialerweise c auf $n/2$ reduzieren. (Diesen Ansatz bezeichnen wir als Zero-Encoded Singletons (ZEnS).)

$$\left(\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left(-w_{ij}\sum_{c=1}^{\lfloor n/2\rfloor}x_{ic}\,x_{jc}\right)\right)+\left(\sum_{i=1}^{n}P\sum_{c_1=1}^{\lfloor n/2\rfloor-1}\sum_{c_2=c_1+1}^{\lfloor n/2\rfloor}x_{ic_1}x_{ic_2}\right)$$

In einem dritten Ansatz haben wir GCS-Q so adaptiert, dass eine gegebene Koalition nicht in zwei Sub-Koalitionen geteilt wird, sondern in k Sub-Koalitionen. Dadurch ist es deutlich unwahrscheinlicher, dass der Algorithmus in einem lokalen Optimum stecken bleibt. In den Experimenten haben wir herausgefunden, dass $k = 4$ auf dem von unserem Datensatz den besten Trade-off zwischen Größe des QUBOs und der non-greediness gibt (4-split iterative R-QUBO):

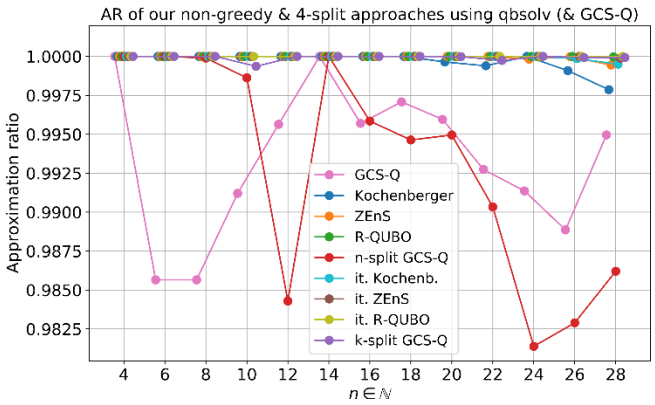
$$\left(\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\sum_{c=1}^{k-1}\left(w_{ij}x_{ic}+w_{ij}x_{jc}+(-2w_{ij})x_{ic}x_{jc}-\sum_{c_2\neq c}w_{ij}x_{ic}x_{jc_2}\right)\right)+\left(\sum_{i=1}^{n}P\sum_{c_1=1}^{k-2}\sum_{c_2=c_1+1}^{k-1}x_{ic_1}x_{ic_2}\right)$$

In der folgenden Grafik haben wir die Skalierungseigentschaften in Form der Größe der resultierenden QUBOs aufgeführt. (R-QUBO bezeichnet dabei letzteren Ansatz mit k = n.) Man sieht, dass GCS-Q am wenigsten QuBits braucht, allerdings mit dem Nachteil, dass es auch der Ansatz ist, der am wahrscheinlichsten in lokalen Optima stecken bleibt.

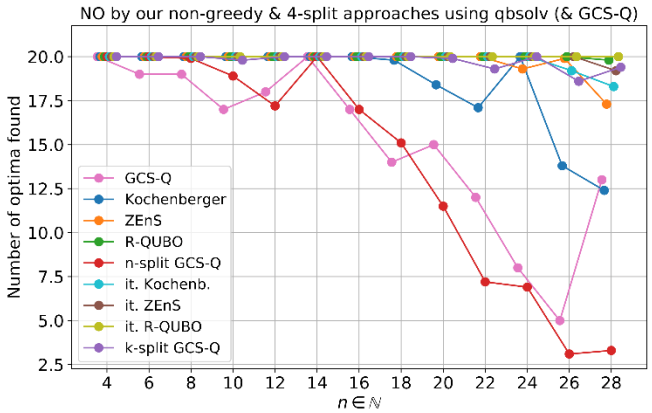


Die Evaluierung erfolgte auf verschiedenen Plattformen: Zum einen wurde der klassische QUBO-Solver QBSolv eingesetzt, zum anderen kamen reale Quantenhardware wie der D-Wave Advantage sowie in Simulatorumgebungen ausgeführte QAOA-basierte Ansätze zum Einsatz. Die Experimente zeigten, dass die neuen Ansätze – vor allem in idealisierten, simulationsbasierten Umgebungen – die Lösungsqualität des Greedy-Ansatzes übertreffen können, indem sie im Idealfall global optimale Lösungen finden. Auf der realen Hardware jedoch, die noch von Rauscheffekten und begrenzter QuBit-Konnektivität geprägt ist, dominiert der Greedy-Ansatz weiterhin, da die neuen Methoden aufgrund der aktuellen Hardwarebeschränkungen nicht ihr volles Potential entfalten können.

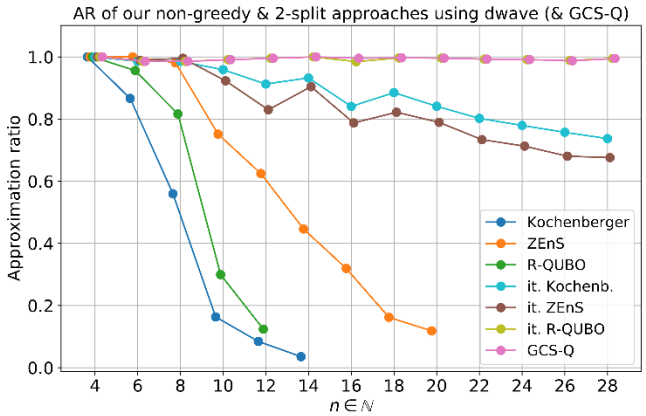
Ein weiterer wichtiger Befund ist die Skalierbarkeit des 4-split iterative R-QUBO-Algorithmus, dessen Laufzeit nur moderat mit der Anzahl der Prosumer zunimmt, wodurch dieser Ansatz als vielversprechend für zukünftige Anwendungen in großen Netzen eingeschätzt wird. Die Ergebnisse aus AP3 belegen somit, dass Quantum Annealing prinzipiell in der Lage ist, komplexe, praxisrelevante Optimierungsprobleme wie die Bildung von Microgrids anzugehen, wenngleich die derzeitige Hardware noch nicht alle theoretischen Vorteile in der Praxis abbilden kann.



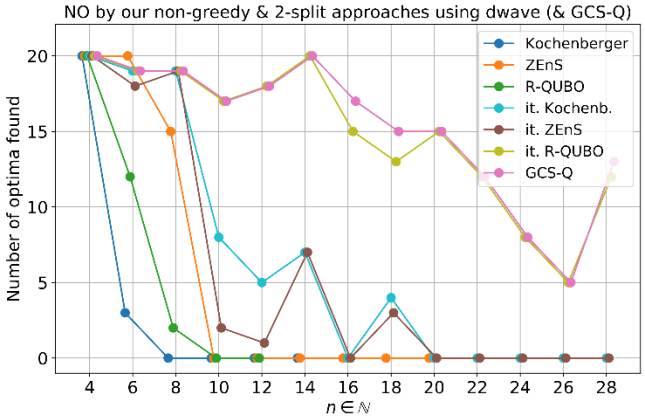
(a) AR of our approaches & GCS-Q using QBSolv.



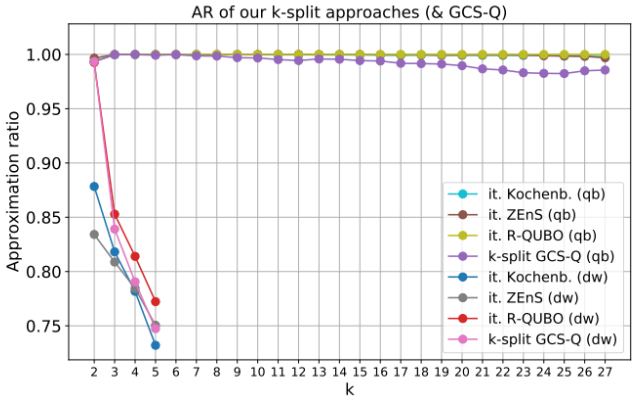
(b) NO by our approaches & GCS-Q using QBSolv.

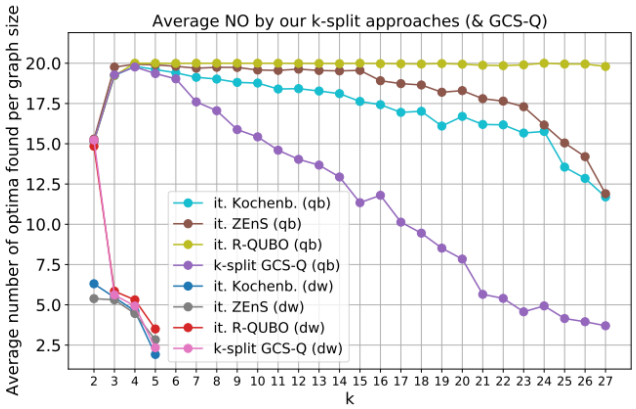


(c) AR of our approaches & GCS-Q using D-Wave.



(d) NO by our approaches & GCS-Q using D-Wave.





AP4 – Benchmarking System

In AP3 wurden die Benchmark-Verfahren für die einzelnen Anwendungsfälle bereits vorgestellt. Unser zentrales Vorgehen bestand darin, allen Lösungsalgorithmen eine vorab festgelegte Laufzeit – meist in Abhängigkeit von der Problemgröße – zuzuweisen und anschließend die Qualität der gefundenen Lösungen zu vergleichen, indem pro Algorithmus die beste Lösung herangezogen wurde. Gerade beim hybriden D-Wave-Service Leap, der einzig über einen Laufzeitparameter gesteuert wird, war dieses Verfahren notwendig, um faire Vergleichsbedingungen sicherzustellen. Für die Experimente haben wir zudem eine Software-Infrastruktur aufgebaut, die sämtliche

Ergebnisse eines Algorithmus in einer Datenbank speichert. Wenn für einen Problemfall bereits eine Lösung existiert, nutzen wir diese direkt wieder; werden hingegen Hyperparameter verändert, startet automatisch ein neuer Lauf. So konnten wir schnell und zuverlässig eine Vielzahl unterschiedlicher Experimente durchführen, etwa zur Optimierung der Hyperparameter einzelner Algorithmen.

AP5 – Generalisierung und Wiederverwendung von Code

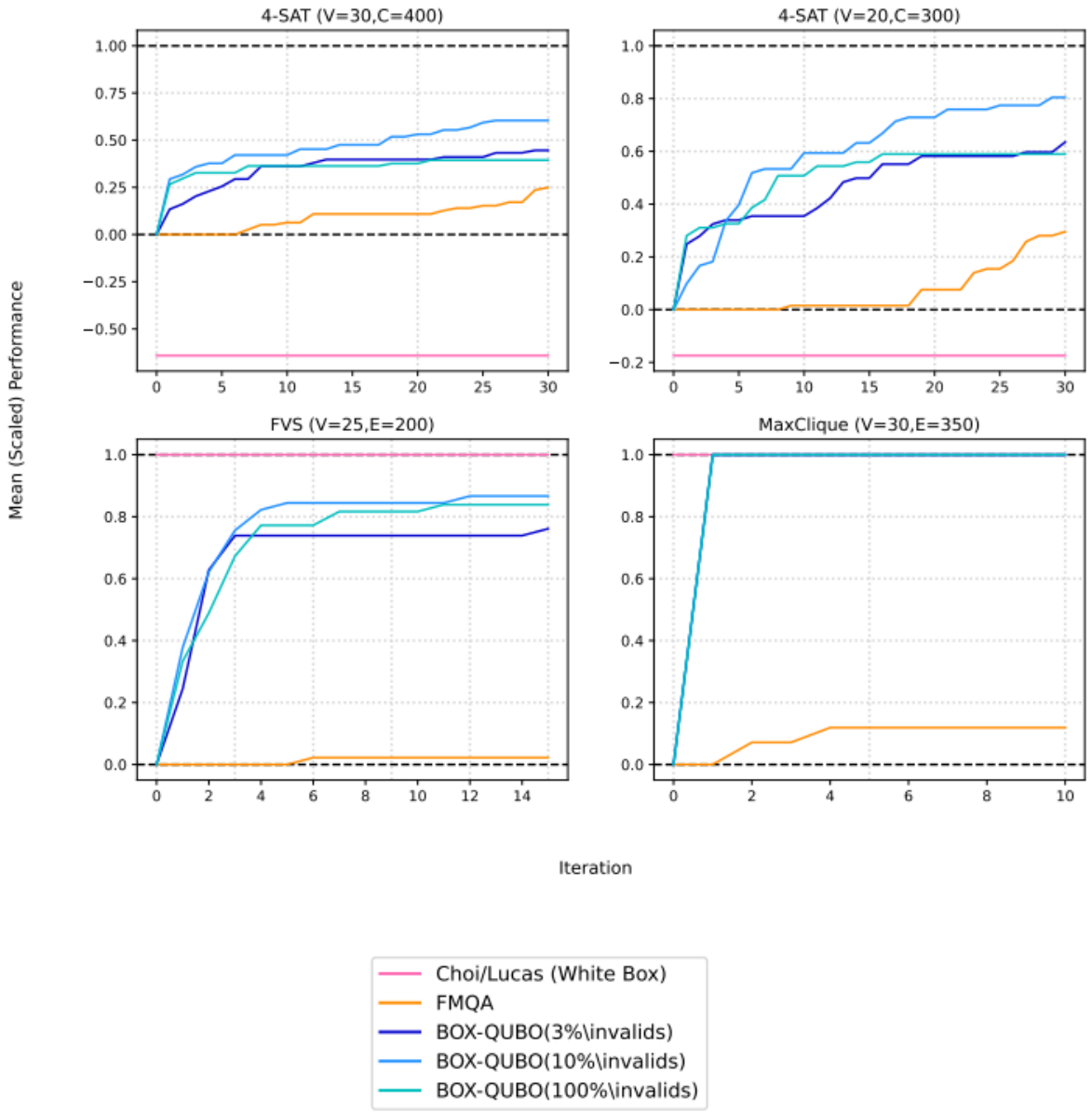
Ergänzend zu den oben genannten Arbeitspaketen widmet sich das Arbeitspaket AP5 der Generalisierung der entwickelten Algorithmen sowie der Wiederverwendung von Quantencomputercode in variablen Anwendungsfällen. Das grundlegende Ziel in AP5 war es, einen generischen Quantum-Optimierungsworkflow zu etablieren, der ohne erneute aufwändige Algorithmusentwicklung für beliebige Optimierungsprobleme eingesetzt werden kann. Die Schlüsselkomponente hierbei ist die universelle Anwendbarkeit der QUBO-Modellierung, da sich viele unterschiedliche Optimierungsprobleme – ob es sich um SAT-Probleme, Graphenprobleme oder andere kombinatorische Herausforderungen handelt – in einem QUBO-Format formulieren lassen. Im Zentrum dieses Ansatzes steht der Black-Box-Optimierungsansatz mit dem Namen BOX-QUBO. Die grundlegende Idee von BOX-QUBO besteht darin, die QUBO-Matrix nicht als starres Modell, sondern als ein trainierbares Surrogat der unbekannten Zielfunktion zu betrachten.

Algorithm 1: BOX-QUBO

```
Data: Set of initial training data D = {x, E(x)}; Oracle E(.)
Result: Best solution (x*, y*) of the oracle

Q ← init QUBO matrix
Q ← train(Q, D)

for trainingLength do
    X ← sample best k solutions from Q (e.g. using quantum annealing)
    Y = E(X)                                   // query oracle ∀x ∈ X
    D.add(X, Y)
    Q ← train(Q, D)
end

return (x*, y*) ∈ D          // Return best y and corresponding x

Function train(Q, D):
    H, L, τ ← sort and split D   // see chapter Splitting H and L
    for nCycles do
        T, Y_target = L, E(L)              // ensure regression ∀x ∈ L
        for x ∈ H do
            y_predict = x^T Q x          // ensure classification ∀x ∈ H
            if y_predict < τ then
                T ← x
                Y_target ← τ
            end
        end
        L(x, y_target) = (x^T Q x − y_target)^2          // the loss function
        optimize Q via gradient descent w.r.t. ∇_Q L(T, Y_target)
    end
    return Q
```

Im Obigen ist der BOX-QUBO Algorithmus im Detail aufgeführt. Die Grundlegende Idee hierbei ist, eine gleichzeitige Regression auf dem Niedrig-Energie-Spektrum und eine Klassifikation zwischen Niedrig- und Hoch-Energie-Lösungen durchzuführen.

Anfänglich wird eine QUBO-Matrix mit willkürlich festgelegten Parametern initialisiert. Anschließend folgt ein iteratives Verfahren, bei dem in jeder Runde mittels eines QUBO-Solvers – sei es über Simulated Annealing oder über einen Quantenannealer – vielversprechende Lösungskandidaten generiert und anhand ihres Zielfunktionswertes bewertet werden. Mithilfe der Cross-Entropy-Methode, einem Optimierungsverfahren aus der statistischen Optimierung, wird die QUBO-Matrix anhand der Güte der gefundenen Lösungen iterativ angepasst. Dabei kommt es darauf an, dass nicht nur kontinuierliche Parameter optimiert werden, sondern dass gleichzeitig ein Klassifikationsmechanismus integriert wird, der gute von schlechten Lösungen trennt. Dies verhindert ein Überanpassen an die aktuellen Daten und sorgt dafür, dass das Modell ausreichend Flexibilität besitzt, um die zugrunde liegende Problemstruktur zu erfassen.



Wir haben unseren Algorithmus auf 4 Black-Box-Optimierungsaufgaben getestet, wobei der

Algorithmus eine gegebene Lösung x mittels eines Orakels evaluieren konnte. Wir haben den Algorithmus gegen den bekannten FMQA-Algorithmus gebenchmarkt, ebenso wie gegen die White-Box Lösungen von Choi und Lucas.

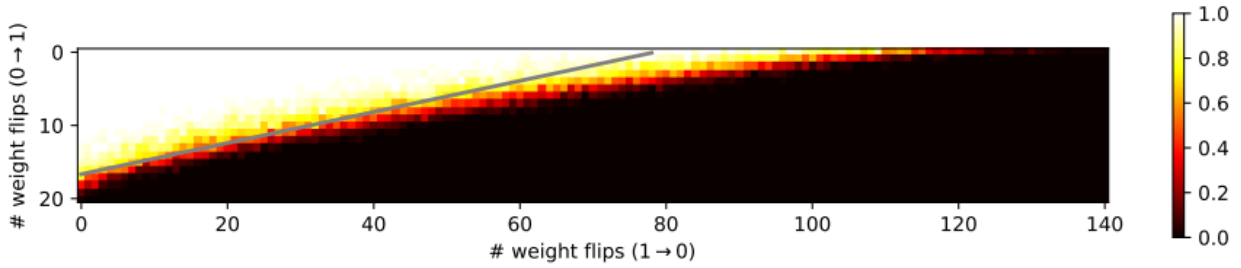
Die Ergebnisse zeigen, dass durch diesen iterativen Trainings- und Sampling-Prozess eine drastische Dimensionsreduktion erreicht werden kann. Ein beispielhafter Vergleich im Bereich MAX-4-SAT demonstriert, dass in der klassischen White-Box-Formulierung häufig mehrere hundert oder gar tausend QUBO-Variablen benötigt werden (durch die Verwendung von Ancilla-Variablen), während BOX-QUBO die Problemgröße auf nahezu das absolute Minimum – nämlich die Anzahl der logischen Variablen – reduzieren kann. Dies führt nicht nur zu einer signifikanten Reduktion des Suchraumes, sondern ermöglicht auch eine effizientere Nutzung der vorhandenen Rechenressourcen, da kleinere und übersichtlichere Modelle schneller und robuster gelöst werden können. Weiterhin zeigte sich, dass BOX-QUBO in umfangreichen Vergleichsstudien alternative Black-Box-Verfahren, wie beispielsweise FMQA (ein Verfahren, das ausschließlich auf Regression basiert), in allen getesteten Szenarien konsequent übertraf. Ein bedeutender Vorteil des Ansatzes ist außerdem die hohe Wiederverwendbarkeit der entwickelten Quanten-Codebausteine. Einmal implementierte Module für Sampling, Training und die Iteration der QUBO-Parameter können problemlos auf unterschiedliche Optimierungsprobleme übertragen werden. Dies reduziert den Aufwand für die Anpassung und Modellierung neuer Aufgaben erheblich und markiert einen wichtigen Schritt in Richtung eines industrietauglichen, flexiblen Werkzeugkastens für Quantum Computing.
Neben den Ansätzen zur direkten Optimierung von Zielgrößen wurde im Projekt auch intensiv an der Automatisierung der QUBO-Modellierung gearbeitet, insbesondere im Hinblick auf harte Nebenbedingungen, die in vielen praktischen Problemen auftreten.

Das Paper "Learning QUBO Formulations from Data" von Jonas Nüßlein, Sebastian Zielinski und Claudia Linnhoff-Popien beschäftigt sich mit der Frage, wie sich kombinatorische Optimierungsprobleme, insbesondere NP-schwere Aufgaben, automatisch in das QUBO-Format (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) überführen lassen. Das QUBO-Format ist zentral für viele Anwendungen im Bereich der Quantenoptimierung, insbesondere bei Quanten-Annealing-Systemen. Es besteht aus einer symmetrischen Matrix Q und einer binären Vektorvariable x, wobei das Optimierungsziel darin besteht, den Ausdruck x transponiert mal Q mal x zu minimieren. Diese Formulierung kann eine Vielzahl kombinatorischer Probleme abbilden. Das Problem besteht jedoch darin, dass die QUBO-Matrix Q normalerweise manuell modelliert werden muss, was nicht nur aufwendig, sondern auch stark von Expertenwissen abhängig ist.
Die Autoren schlagen stattdessen einen lernbasierten Ansatz vor, bei dem eine Funktion g gelernt wird, die eine Probleminstanz p direkt auf eine passende QUBO-Matrix Q abbildet. Anstatt direkt eine Lösung x für eine Problemstellung p zu lernen, wird ein Zwischenweg gewählt: Aus dem Input p wird durch das neuronale Netzwerk ein gewichtetes Max-SAT-ähnliches Modell erzeugt, das in eine QUBO-Matrix übersetzt wird. Die Lösung x ergibt sich anschließend als Minimierer der quadratischen Form $x^T Qx$. Diese Methode basiert auf der Idee, dass sich viele NP-schwere Probleme über eine Transformation in Max-SAT-Formulierungen darstellen lassen, wobei jede Klausel eine bestimmte Bedingung beschreibt, die erfüllt sein muss. Aus diesen Klauseln wird dann eine QUBO-Matrix konstruiert.

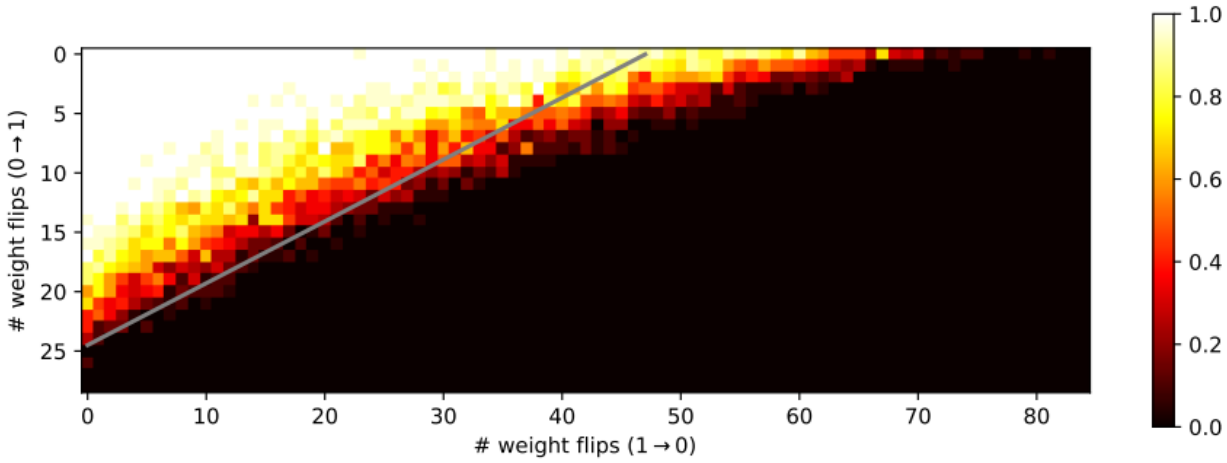
Der zentrale Baustein des vorgeschlagenen Verfahrens ist ein tiefes neuronales Netzwerk, das für jede Problemstellung p einen Vektor w ausgibt, in dem jede Komponente das Gewicht einer bestimmten Klausel darstellt. Diese Gewichtungen werden anschließend in eine QUBO-Matrix überführt. Um das Netzwerk zu trainieren, werden Paare aus Probleminstanzen und deren optimalen Lösungen genutzt. Die idealen Klauselgewichte werden durch Auswertung der Lösung bestimmt: Eine Klausel erhält das Gewicht 1, wenn sie von der Lösung erfüllt wird, und 0 sonst. Das Netzwerk lernt dann, diese idealen Gewichtungen möglichst genau zu approximieren.

Ein zentrales Konzept der Arbeit ist die Robustheit gegenüber Fehlern in den Klauselgewichtungen.

Die Autoren führen umfangreiche Experimente durch, in denen untersucht wird, wie viele dieser Gewichtungen von ihrem idealen Wert abweichen dürfen, bevor die optimale Lösung nicht mehr durch das QUBO-Modell erhalten bleibt (siehe die folgenden beiden Abbildungen).



(a) $\texttt{output_dim} = 6,\ k = 3$



(b) $\texttt{output_dim} = 7,\ k = 3$

Es zeigt sich, dass die Lösung gegenüber einer bestimmten Anzahl von Fehlern stabil bleibt. Diese Erkenntnis wird durch sogenannte Loss Maps visualisiert, in denen für verschiedene Kombinationen von fehlerhaften Gewichtungen die Erfolgswahrscheinlichkeit dargestellt wird, mit der die optimale Lösung erhalten bleibt. Hiervon kann eine empirische Schwelle abgeleitet werden, bis zu der eine gewisse Anzahl an Gewichtungsfehlern toleriert werden kann, ohne dass die Lösung verfälscht wird.

Ein weiterer wichtiger Vorteil des vorgeschlagenen Verfahrens gegenüber anderen Methoden wie SATNet, OptNet oder CombOptNet besteht darin, dass während des Trainingsprozesses keine Optimierungsprobleme gelöst werden müssen. In vielen bestehenden Verfahren ist ein Optimierer in das Netzwerk integriert, was dazu führt, dass in jeder Trainingsiteration eine aufwändige Optimierungsroutine ausgeführt werden muss. Das führt nicht nur zu erheblichen Rechenkosten, sondern auch zu potenziellen Stabilitätsproblemen. Das hier vorgeschlagene Verfahren umgeht dieses Problem vollständig, da die QUBO-Matrix direkt aus den Eingabedaten gelernt wird, ohne dass dafür während des Trainings eine Optimierung notwendig ist.

Der vollständige Algorithmus ist durch den folgenden Pseudo-Code gegeben. Die grundlegende Idee hierbei ist es, den Abstand zu der Trennlinie zu maximieren, was die Wahrscheinlichkeit maximiert, dass die gewünschte Lösung x tatsächlich auch die optimale Lösung der SAT-Formel und damit auch des QUBO-Problems ist.

Algorithm 1 Learning QUBO Formulations from Problem-Solution Pairs

Input: Dataset of problem-solution pairs $\{(p^{(i)}, x^{(i)})\}_{i=1}^{N}$, hyperparameters k, `scaling`, `penalty`, $d_{threshold}$

Precompute the set of clauses based on k and calculate numClauses $= 2^k \cdot \binom{n}{k}$

Construct a deep neural network f_θ mapping p to a clause weight vector $\hat{w} \in [0,1]^{\text{numClauses}}$

for each training sample (p, x) **do**

Compute the ideal clause weight vector w^* where:

$$w_j^* = \begin{cases} 1, & \text{if clause } j \text{ is satisfied by } x, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

Compute the elementwise error: $\Delta = |\hat{w} - w^*|$

Apply penalty weights to obtain $\Delta_{\text{weighted}} = \Delta \odot \text{penalty}$

Compute the distance d of the point p_x to the curve defined by:

$$\texttt{offset} = b\left(1 - \frac{1}{\texttt{output_dim}}\right),$$

$$\texttt{slope} = \frac{\texttt{offset}}{\frac{14}{25} \cdot (a-1) \cdot b}.$$

Scale d using the sigmoid function:

$$\ell = \sigma\left(\frac{\texttt{scaling} \cdot (d - d_{threshold})}{d_{threshold}}\right)$$

end for

Update network parameters θ to minimize the average loss using Adam

Output: Trained network f_θ such that for any problem instance p:

1. Compute $\hat{w} = f_\theta(p)$
2. Construct QUBO matrix Q from $\hat{w}$
3. Solve $x^* = \arg\min_x \; x^T Q x$

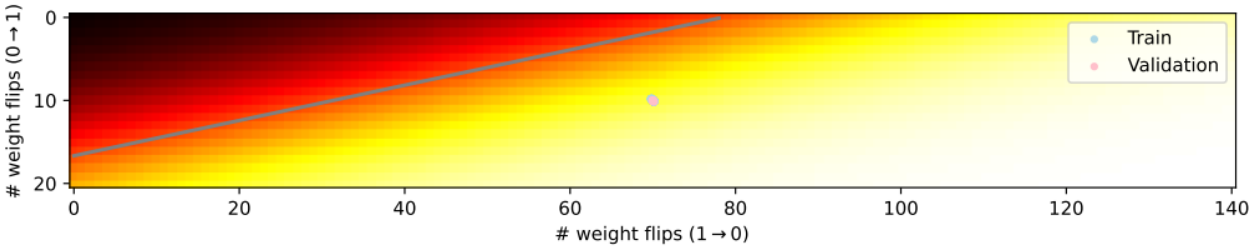
In einer Reihe von Experimenten haben wir den Algorithmus anhand klassischer kombinatorischer Probleme evaluiert: dem Maximum-Clique-Problem, dem Rucksackproblem und einem 4x4-Sudoku. Für diese Aufgaben wird gezeigt, dass das vorgeschlagene Verfahren deutlich bessere Ergebnisse liefert als konkurrierende Verfahren. Die Genauigkeit bei der Vorhersage der optimalen Lösung liegt beispielsweise bei 0,92 für Maximum Clique mit 7 Knoten, bei 0,88 für Knapsack mit 7 Items und bei 0,99 für Sudoku. Im Vergleich dazu schneiden SATNet, OptNet und CombOptNet deutlich schlechter ab, insbesondere bei komplexeren oder stärker strukturierten Problemen. Auch einfache Feedforward-Netzwerke ohne spezielle QUBO-Formulierung zeigen deutlich schlechtere Resultate.

Table 1: Performance Comparison Across Problem Classes

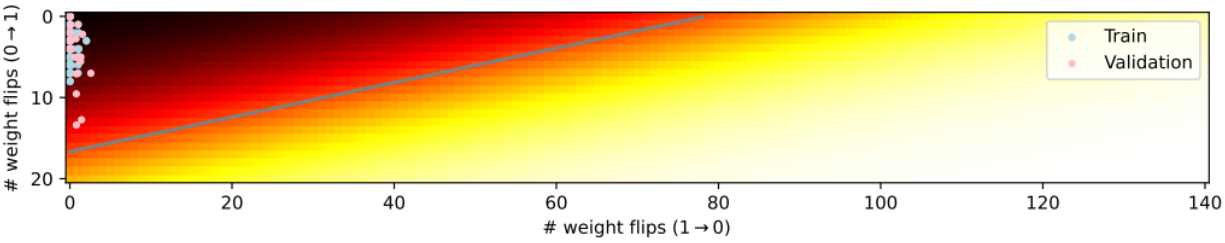
Problem	**DeepSAT**	**SATNet**	**OptNet**	**CombOptNet**	**FF**
Max Clique (7 nodes)	**0.92**	0.65	0.70	0.72	0.33
Knapsack (7 items)	**0.88**	0.34	0.55	0.51	0.18
4x4 Sudoku	**0.99**	0.72	0.34	0.67	0.11

Zusätzlich untersuchen die Autoren die Veränderung der Robustheit vor und nach dem Training des Netzwerks. Durch die Visualisierung der Positionen der Trainings- und Validierungsdaten im Raum der Gewichtungsfehler wird deutlich, dass das Netzwerk nach dem Training deutlich robustere QUBO-Formulierungen erzeugt.

Vor dem Training:



Nach dem Training:



Die vorhergesagten Klauselgewichte liegen nach dem Training näher an den idealen Gewichtungen, sodass auch bei leichtem Rauschen oder kleinen Abweichungen in der Matrix Q die optimale Lösung erhalten bleibt.

Insgesamt stellt die Arbeit einen wichtigen Beitrag zur automatisierten Generierung von QUBO-Modellen dar. Sie zeigt, dass es möglich ist, aus Daten robuste Optimierungsformeln zu lernen, die sowohl in klassischen als auch in quantenbasierten Optimierungsumgebungen effektiv eingesetzt werden können. Der vorgestellte Ansatz kombiniert maschinelles Lernen mit strukturellen Einsichten aus der Max-SAT-Formulierung und überführt diese in ein differenzierbares Trainingsverfahren. Damit stellt er eine vielversprechende Brücke zwischen diskreter Optimierung und kontinuierlichem Lernen dar.

In zukünftiger Arbeit planen wir diesen Ansatz auf größere Probleminstanzen auszuweiten und adaptive Mechanismen zur automatischen Anpassung der Strafparameter zu entwickeln. Darüber hinaus ist eine Integration mit realer Quantenhardware vorgesehen. Insgesamt lässt sich festhalten, dass das Lernen von QUBO-Formulierungen aus Daten ein vielversprechender Weg ist, um die automatische Übersetzung komplexer Optimierungsprobleme in eine lösbare Form zu ermöglichen.

AP6 – Skalierung auf Echtwelt-Problemgrößen

Die Qualität unserer Algorithmenlösungen wurde bereits im Rahmen der Anwendungsfälle in AP3 bewertet. Aktuell ist die Hardware jedoch noch durch die begrenzte Anzahl von Qubits und deren Vernetzung eingeschränkt, sodass verlässliche reine Quantenlösungen bisher nicht realisierbar sind.

Fazit

Insgesamt lässt sich festhalten, dass das LMU-Teilvorhaben sämtliche gesteckte wissenschaftliche und technische Ziele erreicht hat. Es wurden grundlegende Erkenntnisse in der Quantenalgorithmik gewonnen, die durch konkrete, praxisorientierte Anwendungen in der Aufteilung von Stromnetzen in Microgrids untermauert wurden.

Das Q-GRID-Projekt hat erfolgreich demonstriert, dass Quantencomputing-Techniken vielversprechende Ansätze für die Optimierung zukünftiger dezentraler Energienetze bieten können. Über die dreijährige Projektlaufzeit hinweg wurde ein umfassendes Forschungsprogramm realisiert, das sowohl theoretische Grundlagen als auch praktische Anwendungen adressierte.

Methodische Innovationen:

Im Bereich der algorithmischen Entwicklung erzielte das Projekt mehrere bedeutende Durchbrüche. Das LMU-Teilprojekt entwickelte mit dem Semi-Symmetrie-Ansatz eine neuartige Vorverarbeitungsmethode für QUBO-Probleme, die eine signifikante Reduktion der Kopplungsdichte ermöglicht und damit sowohl die Einbettung auf Quantum-Annealing-Hardware als auch die Schaltkreistiefe bei QAOA deutlich verbessert. Ergänzend wurde mit BOX-QUBO ein universeller Black-Box-Optimierungsworkflow etabliert, der die automatisierte Anwendung von Quantenoptimierung ohne aufwändige Neumodellierung ermöglicht. Darauf aufbauend wurde dieser automatische Optimierungsworkflow mit DeepSAT erweitert, einer Methode, die mit Neuronalen Netzen über den Umweg von SAT-Formeln QUBO-Formulierungen erlernt.
Das E.ON/Aqarios-Teilprojekt trug mit problemspezifischen Zerlegungsalgorithmen bei, die große Optimierungsprobleme in kleinere, quantenhardware-taugliche Teilprobleme zerlegen, ohne harte Nebenbedingungen als Strafterme formulieren zu müssen. Ein systematisches Benchmarking-System ermöglichte faire Vergleiche zwischen klassischen und quantenunterstützten Lösungsansätzen durch einheitliche Zeitlimits und standardisierte Metriken. Des Weiteren wurde der QAOA-Algorithmus mit Kombination von XY-Mixern und Indikatorfunktionen für harte Nebenbedingungen erweitert. Simulationen dieser QAOA-Erweiterung zeigte deutliche Verbesserungen gegenüber konventionellen QUBO-Formulierungen.

Anwendungen im Energienetz:

Die drei untersuchten Anwendungsfälle des zukünftigen Energienetzes zeigten unterschiedliche Grade der Quanteneignung. Das Discount Scheduling Problem für dynamische Preisgestaltung erwies sich als besonders vielversprechend: Die entwickelte Zerlegungsmethode ermöglichte die Skalierung auf über 3200 Kunden, wobei quantenunterstützte Hybrid-Solver ab 200 Kunden klassische Solver übertrafen. Der D-Wave LeapHybridCQM-Solver lieferte dabei nicht nur bessere Lösungsqualität, sondern auch fairere Rabattverteilung zwischen den Kunden.
Für die Identifikation autarker Energiegemeinschaften wurden zwei Formulierungen untersucht. Auf der einen Seite wurde das Self-Reliant Community Detection Problem entwickelt, bei dem ein hybrider Zerteilungs-Algorithmus auf Netzen mit bis zu 1888 Knoten überzeugende Ergebnisse zeigte. Auf der anderen Seite wurde eine Formulierung basierend auf kooperativer Spieltheorie, ebenfalls mit einer Zerteilungsmethode, untersucht, wobei Quantenanneling mit D-Wave besseres Skalierungsverhalten als klassische Lösungsmethoden aufzeigte. Verschiedene Zerteilungsmethoden wurden von der LMU für dieses Problem genauer untersucht, mit dem Ergebnis, dass eine iterative 4-fach Zerteilung die Besten Ergebnisse liefern kann, jedoch das Rauschen aktueller Quantenhardware die Anwendung auf 2-fach Zerlegung beschränkt.
Die Untersuchung von Peer-to-Peer Energiemärkten offenbarte hingegen wichtige Grenzen: Hier zeigten klassische Solver mit konvexer Problemformulierung deutlich bessere Skalierungs-eigenschaften als alle getesteten Quantenmethoden.

Gesammelte Erkenntnisse und Ausblick:

Die wichtigsten Erkenntnisse betreffen sowohl technische als auch strategische Aspekte. Problemspezifische Hybridansätze und intelligente Zerlegungsmethoden erwiesen sich oft als entscheidender für den praktischen Erfolg als die reine Quantenhardware-Leistung. Die Struktur der Optimierungsprobleme ist kritisch: Kombinatorische Probleme mit exponentieller klassischer Komplexität sind generell gute Kandidaten für Quantenvorteile, wobei hingegen konvexe Probleme keine Vorteile zeigten. Aktuelle NISQ-Hardware reicht noch nicht für produktive Anwendungen, aber hybride Cloud-Services wie D-Wave's Leap bieten bereits heute praktische Vorteile. Allerdings muss bei den hybriden Cloud-Services auch beachtet werden, dass keine Transparenz besteht, wie viel der tatsächlichen Optimierungsleistung auf Quantenhardware zurückzuführen ist. Zukünftige Fortschritte in der Hardwareentwicklung werden es ermöglichen, dass die vorgestellten Algorithmen und Methoden in noch größerem Umfang und mit noch besserer Effizienz zum Einsatz kommen können.
Für zukünftige Forschung ergeben sich vielversprechende Richtungen: Die entwickelten Zerlegungsmethoden sollten auf weitere Energieoptimierungsprobleme ausgeweitet werden, beispielsweise Vehicle-to-Grid-Integration und Energiespeicher-Optimierung. Die Vorverarbeitungsmethoden bieten großes Potenzial für andere industrielle Optimierungsprobleme außerhalb des Energiesektors. Die Kombination mit fortschrittlichen Machine Learning Techniken könnte zu vollständig automatisierten Quantenoptimierungs-Pipelines führen. QAOA kann über die untersuchten Erweiterungen hinaus für andere Nebenbedingungen modifiziert werden und hardwareeffiziente Schaltkreisimplementierungen gefunden werden.
Langfristig zeigt das Q-GRID-Projekt, dass Quantencomputing das Potenzial hat, zu einer Schlüsseltechnologie für die Energiewende zu werden. Die Komplexität dezentraler, erneuerbarer Energiesysteme stellt klassische Optimierungsmethoden vor erhebliche Herausforderungen, während die entwickelten Quantenansätze bereits heute erste praktische Vorteile bieten und mit der weiteren Hardwareentwicklung zu unverzichtbaren Werkzeugen werden könnten. Die innovativen Ansätze des Projekts schaffen somit nicht nur den theoretischen Rahmen für die Lösung von NP-schweren Problemen, sondern liefern auch konkrete, anwendungsnahe Instrumente, um komplexe Energienetzstrukturen zu optimieren und nachhaltig zu gestalten. Das Projekt hat somit sowohl wichtige wissenschaftliche Erkenntnisse generiert als auch den Grundstein für die praktische Nutzung von Quantencomputing in der Energiewirtschaft gelegt.