Künstliche Intelligenz als Treiber für volkswirtschaftlich relevante Ökosysteme

Technologieprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz

QUANTENCOMPUTING – SOFTWARE FÜR INNOVATIVE UND ZUKUNFTSFÄHIGE ANWENDUNGEN

Potenziale, Entwicklung, Zugang

Studie im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) im Rahmen der Begleitforschung zum Technologieprogramm „Künstliche Intelligenz als Treiber für volkswirtschaftlich relevante Ökosysteme“ (KI-Innovationswettbewerb)

www.ki-innovationen.de

IMPRESSUM

Die Studie „Quantencomputing – Software für innovative und zukunftsfähige Anwendungen“ wurde durch die Begleitforschung zum KI-Innovationswettbewerb im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) erstellt und im März 2022 veröffentlicht.

Herausgeber

Technologieprogramm KI-Innovationswettbewerb
des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK)
Begleitforschung
iit-Institut für Innovation und Technik in der VDI/VDE Innovation + Technik GmbH
Dr. Steffen Wischmann
Steinplatz 1
10623 Berlin
wischmann@iit-berlin.de

Autor:innen

Dr. Dr. Regina Finsterhölzl
Dr. Nicole Wittenbrink
Benedict Wenzel
Dr. Christoph Grzeschik
Marlene Eisenträger
Dr. Matthias Bürger
Dr. Steffen Wischmann

Gestaltung

LHLK Agentur für Kommunikation GmbH
Hauptstraße 28
10827 Berlin
KI-Innovationswettbewerb@lhlk.de

Stand

März 2022

Bilder

techdesign07 (Titel), giorgos245 (S. 17), DP (S. 21), nadiinko (S. 43), noche (S. 82) – stock.adobe.com

EXECUTIVE SUMMARY

Zentrale Aussagen und Prognosen:

- Viele Probleme, an denen heute selbst Hochleistungsrechner scheitern, werden sich perspektivisch durch Einsatz von Quantencomputing effizient lösen lassen.
- Quantencomputing eröffnet ein breites Feld für neue Anwendungen und Geschäftsmodelle in wichtigen Branchen wie Finanz-, Energie- und Gesundheitswirtschaft, Produktion und Logistik, Transportwesen sowie IT-Sicherheit.
- Quantencomputing hat das Potenzial, das Feld Künstliche Intelligenz zu revolutionieren und die Entwicklung von KI-Produkten voranzutreiben.
- Durch die frühzeitige Auseinandersetzung mit dem Thema Quantencomputing und die Erarbeitung von Entwicklungsvorsprüngen eröffnen sich für Unternehmen neue Marktchancen.
- Im aktuellen Fokus der Softwareentwicklung für Quantencomputer stehen Optimierungsverfahren, chemische Simulationen sowie Maschinelles Lernen und Künstliche Intelligenz.
- Software und Services werden von Beginn an den Großteil der Wertschöpfung ausmachen. Bereits im Jahr 2030 wird die weltweite Wertschöpfung im Bereich Quantencomputing-Software laut Prognose doppelt so hoch sein wie im Bereich Quantencomputing-Hardware.
- Für Deutschland wird ab 2050 eine jährliche Wertschöpfung von bis zu 53,1 Mrd. Euro durch Endanwendungen erwartet.
- Die Limitierung der heutigen Quantencomputing-Hardware ist eine generelle Herausforderung, stellt jedoch keinen Grund dar, die Entwicklungsarbeiten im Hinblick auf Quantencomputing-Software einzuschränken.

Die Entwicklung der Technologie Quantencomputing schreitet in den letzten Jahren mit immer größeren Schritten voran. Erste kommerzielle Quantencomputing-Systeme für spezielle Anwendungen sind bereits verfügbar und immer mehr Unternehmen und Organisationen bieten Zugang zu eigens entwickelten Plattformen an. Voraussichtlich werden Quantencomputer bereits mittelfristig für ein breiteres Anwenderfeld einsatzbereit sein. Daher rückt die Umsetzung von Anwendungssoftware aktuell immer mehr in den Fokus der Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten. Die vorliegende Studie gibt einen Überblick über potenzielle Einsatzfelder von Quantencomputern und soll zukünftigen Nutzenden und Interessierten einen ersten Zugang zum Thema ermöglichen. Idealerweise soll sie es erleichtern, erste Einschätzungen hinsichtlich der Anwendungsmöglichkeiten und Relevanz im eigenen Umfeld zu treffen.

Die Grundeinheit von Quantencomputern sind Quantenbits – kurz Qubits. Aufgrund ihrer speziellen Eigenschaften ermöglichen sie die Konstruktion von neuen Algorithmen, die klassischen Algorithmen in ihrer Leistungsfähigkeit theoretisch massiv überlegen sind. Diese sogenannten Quantenalgorithmen können die Lösungsberechnung schwieriger Probleme beschleunigen. Dadurch sollen Probleme, an denen selbst heutige Hochleistungsrechner aufgrund zu langer Laufzeiten scheitern, in Zukunft effizient lösbar sein. Durch die Entwicklung entsprechender Software für Quantencomputer können daher perspektivisch viele neue Anwendungen erschlossen werden. Um den Einstieg in die Softwareentwicklung zu erleichtern, stellt die Studie neben dem logischen Konzept von Quantencomputern und den State-of-the-Art-Modellen des Quantencomputings auch die jeweiligen aufeinander aufbauenden Reihen von Hard- und Software-Komponenten, den „Stacks“, dar und fasst die Zugangsmöglichkeiten zu Quantenhardware, Open-Source-Software-Frameworks und Software-Development-Kits zusammen.

Das Spektrum potenzieller Szenarien für Quantencomputing-Anwendungen ist weit. Im Zentrum dieser Studie steht eine Auswahl von neun konkreten Anwendungsfällen, die aktuell im Rahmen des Projekts PlanQK („Plattform und Ökosystem für Quantenunterstützte Künstliche Intelligenz") untersucht werden. Sie decken die Anwendungsdomänen Finanz-, Gesundheits- und Transportwesen, Produktion/Logistik, Energiewirtschaft sowie IT-Sicherheit ab und umfassen unter anderem Problemstellungen wie die Personaleinsatzplanung, die Verbesserung der Energieeffizienz des chemischen Herstellungsprozesses eines Arzneimittelvorprodukts oder die Detektion von betrügerischen Kreditkartentransaktionen. In Tiefeninterviews mit den Inhabern der Anwendungsfälle wurden zentrale Aspekte der Softwareentwicklung beleuchtet, wie Problemstellung, Lösungsansatz, mathematische Problemformulierung, Algorithmen und Implementierung. In der Gesamtbetrachtung stellt sich dabei heraus, dass die Limitierung der Hardware zwar eine generelle Herausforderung ist, aber keinen Grund darstellt, die Entwicklungsarbeiten im Hinblick auf Software einzuschränken, bis der hardwareseitige Fortschritt einsetzt. Es bestehen Hürden im Entwicklungsprozess, die bereits jetzt angegangen werden können, wie die quantencomputergerechte Vorverarbeitung der Daten oder die noch forschungsaufwendige Implementierung von Modellen oder Algorithmen zur Übersetzung der Problemstellung auf die verfügbare bzw. zukünftige Hardware. Die Inhaber der Anwendungsfälle betonen darüber hinaus, dass das übergeordnete Ziel der Entwicklungsarbeiten nicht darin liegt, das klassische Computing vollständig zu ersetzen, sondern es sinnvoll zu ergänzen. Dies spiegelt sich unter anderem in der Verwendung quanten-klassischer hybrider Modelle und Algorithmen wider, bei denen nur der rechenintensive Teil auf einem Quantencomputer ausgeführt wird. Quantencomputing hat das Potenzial, die Produktentwicklung auf dem Gebiet Künstliche Intelligenz (KI) voranzutreiben. Es kann die Prozessierung größerer und komplexerer Datensätze ermöglichen und die Laufzeiten von KI-Algorithmen beschleunigen.

Die Chance für Unternehmen besteht vor allem darin, sich durch frühzeitige Auseinandersetzung mit dem Thema Quantencomputing, sowie durch entsprechende Vorarbeiten, einen Entwicklungsvorsprung zu sichern. Zu diesen Vorarbeiten zählt zunächst die Identifizierung und Bewertung von Anwendungsfällen im eigenen Unternehmen. Im Rahmen der Studie werden Werkzeuge des Quantum Applications and Research Laboratory (QAR-Lab) vorgestellt, die dabei unterstützen sollen. Die Verortung eines Anwendungsfalls in der entstehenden Quantencomputing-Landschaft kann darüber hinaus dabei helfen, Entwicklungen gezielt zu verfolgen oder gegebenenfalls sogar aktiv mitzugestalten. Die Studie präsentiert ein Konzept für die Verortung entlang der dem Anwendungsfall zugrundeliegenden Problemkategorie. Grundsätzlich stehen zum jetzigen Zeitpunkt drei Problemkategorien im Vordergrund: Optimierung, chemische Simulation und Maschinelles Lernen/Künstliche Intelligenz. Innerhalb dieser Problemkategorien kann jeweils weiter zwischen verschiedenen Problemklassen differenziert werden. Eine generell anwendbare Zuordnung von Algorithmen zu Problemklassen oder Problemklassen zu Hardware lässt sich aus der Betrachtung der Anwendungsfälle noch nicht ableiten.

Aus einer Analyse des Wertschöpfungspotenzials von Quantencomputing, die im Rahmen der Studie durchgeführt wurde, geht hervor, dass sich der Markt voraussichtlich deutlich anders entwickeln wird als der Markt für klassische Computer. Software und Services für Quantencomputer werden von Beginn an den Großteil der Wertschöpfung ausmachen. Bereits für das Jahr 2030 wird prognostiziert, dass die weltweite Wertschöpfung im Bereich Software doppelt so hoch sein wird wie im Bereich Hardware (1,2 Mrd. Euro gegenüber 0,6 Mrd. Euro). Hintergrund hierfür sind die hohen Anschaffungs- und Betriebskosten der Hardware sowie die absehbar hohe Nachfrage nach Anwendungssoftware zur Lösung nutzungsspezifischer Aufgaben. Allein für Deutschland wird ab dem Jahr 2050 eine jährliche Wertschöpfung von bis zu 53,1 Mrd. Euro durch Endanwendungen erwartet. Zu den Schlüsselsektoren werden dabei voraussichtlich die Bereiche Transport, Pharmazie, Energiewirtschaft, Finanzdienstleistungen und IT-Sicherheit zählen.

Die Studie schließt mit Empfehlungen für Unternehmen und zeigt Handlungsbedarfe auf. Die zentralen Ergebnisse werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

Empfehlungen

- Frühzeitige Identifizierung und Evaluation von Quantencomputing-Anwendungsfällen im eigenen Unternehmenskontext.
- Nutzung des zurzeit herrschenden offenen und austauschorientierten Klimas, das den Zugang zu Technologie und Expertise erleichtert. Senkung der Hürden durch aktive Vernetzung mit Quantencomputing-Expertinnen und -Experten.
- Mitwirkung an Prozessen zur Festlegung von Standards, der Definition von Referenz-Anwendungsfällen und der Etablierung von Evaluationskriterien.

Handlungsbedarfe

- Die Formalisierung und Generalisierung von Quantencomputing-Anwendungsfällen sollte innovationspolitisch angestoßen und begleitet werden, um zukünftig den Weg vom Labor auf den Markt zu verkürzen.
- Abbau bestehender Hürden in der Quantensoftwareentwicklung durch gezielte innovationspolitische Förderung von Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten – insbesondere im Hinblick auf Themen wie Daten und deren quantencomputergerechten Vorverarbeitung.
- Berücksichtigung rechtlicher, regulatorischer und ethischer Aspekte des Quantencomputings.

INHALT

EXECUTIVE SUMMARY 3

1 EINLEITUNG 10

2 DIE TECHNOLOGIE QUANTENCOMPUTING 14
2.1 Grundlagen 14
2.1.1 Quantenbits 14
2.1.2 Rechnen mit Quantenbits 14
2.1.3 Quantenalgorithmen und ihr Potenzial 15
2.1.4 Modelle des Quantencomputing 18
2.2 Der Quantencomputing-Full-Stack 19
2.2.1 Physikalische Realisierung von Quantencomputer-Hardware 19
2.2.2 Der Quantencomputing-Software-Stack 21
2.3 Zugang und Anbietermarkt 22

3 ANWENDUNGSFÄLLE FÜR QUANTENCOMPUTING 30
3.1 Klassifizierung und Strukturierung von Quantencomputing-Anwendungsfällen 30
3.2 Anwendungsfälle der Problemkategorie Optimierung 33
3.2.1 Anwendungsfall 1: Management der zukünftigen Energieversorgung – Allokation dezentraler Speicher für erneuerbare Energien 34
3.2.2 Anwendungsfall 2: Personaleinsatzplanung im Gesundheitswesen – Dienstplanung für Krankenhäuser, Großpraxen und Pflege 37
3.2.3 Anwendungsfall 3: Produktionsplanung – Schachtelung und Scheduling in der Blechfertigung 41
3.2.4 Anwendungsfall 4: Produktionsplanung – Flexible Maschinenbelegung unter Einbezug fahrerloser Transportsysteme (FTS) 44
3.2.5 Anwendungsfall 5: Management des Flugbetriebs – Passagierführung von Fluggesellschaften 47
3.3 Anwendungsfälle der Problemkategorie „Chemische Simulation“ 50
3.3.1 Anwendungsfall 6: Arzneimittelproduktion (Theophyllin) – Energieeffiziente Herstellung des Vorprodukts (Methylamin) 51
3.4 Anwendungsfälle der Problemkategorie „ML/KI“ 54
3.4.1 Anwendungsfall 7: Betrugserkennung für Finanzdienstleister – Detektion betrügerischer Kreditkartentransaktionen 55
3.4.2 Anwendungsfall 8: Netzwerk- und Kommunikationssicherheit – Detektion von Netzwerkangriffen 60
3.4.3 Anwendungsfall 9: Sicherheit digitaler Ökosysteme – Identitätsschutz und Kommunikationssicherheit 64

4 GESAMTBETRACHTUNG DER ANWENDUNGSFÄLLE: CHANCEN UND HERAUSFORDERUNGEN 70

5 ORIENTIERUNGSHILFEN DES QAR-LAB FÜR DEN EINSTIEG IN DAS ANWENDUNGSORIENTIERTE QUANTENCOMPUTING 76
5.1.1 Die QC-Treppe – Werkzeug zur Einordnung und Weiterentwicklung der eigenen Quantencomputing-Bereitschaft 76
5.1.2 Der 4-Kriterien-Katalog: Werkzeug zur Identifizierung von Anwendungsfällen 77

6 ANALYSE DES WERTSCHÖPFUNGSPOTENZIALS VON QUANTENSOFTWARE 82

6.1 Status Quo 82
6.2 Wertschöpfungspotenzial 83
6.2.1 Wertschöpfungspotenziale durch den Einsatz von Quantencomputing-anwendungen 83
6.2.2 Der Markt für Anwendungen – Prognose und Vergleich der Produktarten 86

7 FAZIT: EMPFEHLUNGEN UND HANDLUNGSBEDARFE 90

8 GLOSSAR 94

LITERATURVERZEICHNIS 100

1 EINLEITUNG

1 EINLEITUNG

Die Entwicklung von Computern auf der Basis von Mikroprozessoren in den 1970er Jahren stellt den Ausgangspunkt der digitalen Revolution dar. Aus der Möglichkeit, große Datenmengen zu verarbeiten und komplexe mathematische Probleme zu lösen, resultierte ein massiver Fortschritt in der Forschung sowie ein tiefgreifender Wandel in der Industrie und Gesellschaft. Durch die ständige Weiterentwicklung von Mikroprozessoren können immer komplexere Probleme in noch kürzerer Zeit gelöst werden.

Kann ein Computer prinzipiell jeden beliebigen mathematischen Algorithmus rechnen, so gibt es trotzdem mathematische Problemstellungen, die aufgrund des massiven Anstiegs nötiger Rechenzeit und Hardwareressourcen, selbst unter Beachtung der stetigen Weiterentwicklung von Computern, praktisch nicht exakt lösbar sind. Zukünftige Quantencomputer versprechen nun, Lösungen für solche Probleme in erheblich kürzerer Rechenzeit zu finden. Die vorliegende Studie stellt genau solche mathematisch „harten" Probleme vor und zeigt, mit welchen Herangehensweisen sie auf einem Quantencomputer gelöst werden könnten.

Das Anwendungsgebiet ist hierbei sehr breit gefächert und dementsprechend interessant für viele Agierende. Klassische Optimierungsaufgaben betreffen sowohl große als auch kleine und mittlere Unternehmen im Industrie- oder Dienstleistungsbereich. Pharma- und Chemieunternehmen können auf raschere Entwicklung von Produkten und Prozessen mit reduzierter Zahl an Laborversuchen hoffen. Durch die Simulation von Strömungsvorgängen könnten präzisere Modelle in der Mobilität bzw. Luft- und Raumfahrt erstellt werden. Ebenso lassen sich Algorithmen für die Künstliche Intelligenz effizienter trainieren und große Datenbanken rascher durchsuchen. In der Kommunikation werden Quantencomputer perspektivisch dazu führen, dass heute typische Verschlüsselungsverfahren gebrochen werden.

Bisher gestaltet sich die Evaluation der Technologie Quantencomputing für potenzielle Anwenderinnen und Anwender sowie politische Entscheidungsträgerinnen und -träger in der Regel schwierig: Populärwissenschaftliche Studien und Artikel konzentrieren sich vor allem auf das visionäre Potenzial der neuen Technologie. Die in der Fachliteratur vorgestellten und erläuterten Quantenalgorithmen sind wiederum sehr technisch und werden nur selten in einen konkreten und aktuell realisierbaren Anwendungskontext gestellt. Welche Problemstellungen können heutzutage schon anwendungsnah bearbeitet werden und mit welchen Algorithmen? Welche Branchen und Unternehmen können sich einen echten Mehrwert erhoffen? Diese anwendungszentrierten Fragen stehen im Fokus der vorliegenden Studie, die im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWK) im Rahmen der Begleitforschung zum Technologieprogramm „Künstliche Intelligenz als Treiber für volkswirtschaftlich relevante Ökosysteme" (KI-Innovationswettbewerb) durchgeführt wurde.

Ziel der Studie ist es, einen niederschwelligen Zugang zum Thema anwendungszentriertes Quantencomputing für Unternehmen und politische Entscheidungsträgerinnen und -träger zu schaffen. Neben einem Überblick über die zugrundeliegenden Hard- und Softwaretechnologien einschließlich Zugang und Anbietermarkt (Kapitel 2), wirft sie einen Blick hinter die Kulissen laufender Entwicklungsprojekte für Software-Anwendungen aus den Bereichen Gesundheits-, Finanz-, Transport- und Verkehrswesen, Energiewirtschaft, IT-Sicherheit und Logistik/Produktion (Kapitel 3). Anhand der Gesamtbetrachtung von insgesamt neun konkreten Anwendungsfällen arbeitet die Studie eine Orientierungshilfe zur Verortung von Anwendungsfällen in der entstehenden Landschaft heraus (Kapitel 3) und identifiziert die aktuellen Chancen und Herausforderungen hinsichtlich der Entwicklung von Software-Anwendungen (Kapitel 4). Darüber hinaus bietet sie Orientierungshilfen und Werkzeuge für den Einstieg ins anwendungszentrierte Quantencomputing (Kapitel 5) an und beleuchtet das Wertschöpfungspotenzial von Quantencomputing im Allgemeinen sowie von Quantensoftware im Speziellen (Kapitel 6).

Methodik der Studie

Grundlage der Studie sind neben einer ausführlichen Literaturrecherche eine Reihe von Tiefeninterviews mit den Expertinnen und Experten aktueller Anwendungsfälle des PlanQK-Projekts[1]. PlanQK baut im Rahmen des BMWK-Technologieprogramms KI-Innovationswettbewerb derzeit eine Plattform und ein Ökosystem für quantenunterstützte Künstliche Intelligenz auf. Im Zentrum steht dabei unter anderem die Entwicklung von anwendungszentrierter Quantencomputing-Software, die zukünftig über einen App-Store verfügbar gemacht werden soll. Die Interviews mit den Inhabern der Anwendungsfälle wurden von April bis Juli 2021 geführt.

1 PlanQK – „Plattform und Ökosystem für Quantenunterstützte Künstliche Intelligenz": https://planqk.de/

Darunter sind Expertinnen und Experten mit professionellem Bezug zum Quantencomputing aus Wissenschaft und Wirtschaft, sowie Expertinnen und Experten aus den jeweiligen Anwendungsdomänen. Die Interviewsitzungen wurden als Videokonferenz durchgeführt, Grundlage der offenen Interviews waren dabei Leitfragen zu den Themen „Potenzial des Anwendungsfalls", „Problemformulierung und Lösungsansatz", „technische Umsetzung bzw. Implementierung (Modell, Algorithmus, Hardware)", „Entwicklungsstand" sowie „Ressourcenbedarf und Herausforderungen". Die Interviewten haben darüber hinaus ihre bisher erarbeiteten mathematischen Formulierungen, Teile ihres Codes oder erste Ergebnisse in Form von Abbildungen zur Verfügung gestellt.

Das Autorinnen- und Autorenteam möchte sich an dieser Stelle noch einmal ganz herzlich bei allen Interviewpartnerinnen und -partnern für die Offenheit und aktive Mitarbeit bedanken:

Dr. Nima Barraci, Lufthansa Gruppe
Dr. Thomas Gabor, Quantum Applications and Research Laboratory (QAR-Lab)
Dr. Ferdinand Graf, d-fine
Dr. Cristian Grozea, Fraunhofer-Institut für Offene Kommunikationssysteme FOKUS (FhG FOKUS)
Oliver Haßa, Deutsche Flugsicherung (DFS)
Dr. Daniel Herr, d-fine
Dr. Fabian Klos, Frankfurt Consulting Engineers
Dr. Matthias Koch, DB Systel GmbH
Dr. Olga Kulikovska, Bundesdruckerei GmbH
Dr. Jan-Rainer Lahmann, IBM
Dr. Tim Leonhardt, Accenture
Lucine Madadi, IBM und Duale Hochschule Baden-Württemberg (DHBW)
Dr. Benjamin Obert, d-fine
Felix Paul, StoneOne AG
Christoph Roch, Quantum Applications and Research Laboratory (QAR-Lab)
Dean Emmett Smith, Accenture
Wolfgang Steigerwald, T-Labs
Patrick Steinmüller, d-fine
Dr. Frederick Struckmeier, TRUMPF
Dr. Stephanie Strobel, Planerio GmbH
Dr. Andreas Wilke, Bundesdruckerei GmbH
Prof. Dr. Carmen Winter, Duale Hochschule Baden-Württemberg (DHBW)
Dr. Armin Wolf, Fraunhofer-Institut für Offene Kommunikationssysteme FOKUS (FhG FOKUS)
Dr. Philip Zupancic, Accenture

Zudem bedankt sich das Autorinnen- und Autorenteam beim QAR-Lab der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) für die Bereitstellung von Orientierungshilfen für den Einstieg von Unternehmen in das anwendungszentrierte Quantencomputing.

2 DIE TECHNOLOGIE QUANTEN-COMPUTING

2 DIE TECHNOLOGIE QUANTENCOMPUTING

Quantencomputing, das Rechnen auf Basis sogenannter Quantenbits, ist eine noch recht neue Technologie. Das Konzept dafür entstand in den 1980er Jahren aus der Idee, Eigenschaften quantenphysikalischer Systeme, wie beispielsweise Moleküle und Atome, für komplexe Berechnungen zu verwenden. Seit den frühen 2000er Jahren gilt die Technologie als realisierbare Perspektive, nachdem in den 1990er Jahren sowohl im Bereich der Algorithmenforschung als auch in der experimentellen Realisierbarkeit wichtige Durchbrüche erzielt wurden (Dunjko und Briegel 2017). Die derzeitige Forschung und Entwicklung wird von großen Industrieunternehmen, Start-ups und staatlichen Förderprogrammen vorangetrieben. Der Reifegrad der Technologie ähnelt aktuell dem Entwicklungsstand von klassischen, Bit-basierten Rechnern in den 1950er Jahren, als noch Lochkarten oder Assembler ein wesentlicher Bestandteil des Programmiervorgangs waren. Um den Einstieg in das Thema Quantencomputing zu erleichtern, werden die Grundprinzipien der zugrundeliegenden Technologie in den folgenden Unterkapiteln erläutert.

2.1 Grundlagen

2.1.1 Quantenbits

Zentrale Informationseinheit von Quantencomputern sind die sogenannten Quantenbits – kurz Qubits. Ein Qubit ist hierbei typischerweise ein isoliertes System im Nanometerbereich, das sich in zwei definierten physikalischen Zuständen befinden kann. Ein solches System kann beispielsweise ein ionisiertes Atom sein, das sich in zwei verschiedenen Anregungszuständen befinden kann oder ein supraleitender Kreisstrom, in dem zwei verschiedene Umlaufrichtungen des Stroms möglich sind. Die zwei Systemzustände repräsentieren dann wie bei den klassischen Bits die beiden Zustände „0“ und „1“. Im Unterschied zu klassischen Bits können Qubits sich aber auch in einer Überlagerung der beiden Zustände befinden, also gleichzeitig die Werte 0 und 1 repräsentieren. Diese Zustandsüberlagerung wird Superposition genannt und erlaubt eine neue, andere Art von Rechnungen auf einem Quantencomputer. Am Ende einer Rechnung sollte das Ergebnis allerdings in einem für den Menschen interpretierbaren, klassischen Format vorliegen, das heißt nicht mehr als Superposition mehrerer Zustände. Aus diesem Grund muss das Qubit innerhalb einer Messung ausgelesen werden. Führt man eine Messung an einem Qubit im Überlagerungszustand durch, so erhält man gemäß den Regeln der Quantenmechanik mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit entweder den Zustand „0“ oder den Zustand „1“. Der überlagerte Zustand kollabiert zu einem klassischen Zustand. Technisch kann eine Messung beispielsweise durch Anwendung von Mikrowellen realisiert werden, die mit dem Qubit wechselwirken und in einer speziellen Anordnung detektiert werden. Qubits, die sich im Überlagerungszustand befinden, sind extrem instabil. Geringste Wechselwirkungen mit der Umgebung können zu einem Verlust der quantenmechanischen Eigenschaften führen. Die Qubits eines Quantencomputers müssen von Umgebungseinflüssen isoliert werden, z. B. durch technisch aufwendige Kühlmethoden.

Der Zustand eines klassischen Bits kann anhand einer Zahl beschrieben werden, die angibt, ob das Bit den Zustand „0“ oder „1“ annimmt. Zur Beschreibung des Zustands eines Qubits werden dagegen zwei Zahlen benötigt – jeweils eine Zahl für die Wahrscheinlichkeit bei der Messung den Zustand „0“ oder „1“ zu erhalten. Um den Zustand eines Registers zu beschreiben, das mehrere bzw. N Qubits enthält, wird daher insgesamt ein Satz von 2^N Zahlen benötigt. Dementsprechend kann in Qubits exponentiell mehr Information codiert werden, als dies bei klassischen Bits der Fall ist. Neben der Superposition lassen sich Qubits auch verschränken. Anschaulich ausgedrückt bedeutet dies, dass sie in einem kollektiven Zustand miteinander gekoppelt werden. Die Veränderung eines Qubits in einem Register wirkt sich dann beispielsweise auch auf andere Qubits im gleichen Register aus. Dies gilt auch, wenn die beiden Qubits räumlich voneinander getrennt sind. Aufgrund der Verschränkung ist es möglich, durch Auslesen nur eines Qubits auch Informationen zu den Zuständen weiterer Qubits in einem Register zu erhalten. Dadurch erschließen sich neue Berechnungsvorschriften, die sogenannten Quantenalgorithmen. Durch Superposition und Verschränkung können Rechnungen auf mehreren Qubitzuständen gleichzeitig durchgeführt werden. Dies wird auch als Quantenparallelismus bezeichnet und ermöglicht es theoretisch, bestimmte Probleme bzw. Berechnungen effizienter zu lösen.

2.1.2 Rechnen mit Quantenbits

Ein Rechenschritt auf einem oder mehreren Qubits wird als Quantengatter bezeichnet und ist eine reversible Veränderung an dem Zustand des Qubits unter Erhalt der gesamten Wahrscheinlichkeit. Das heißt, die Summe der Wahrscheinlichkeiten für den Erhalt eines Ergebnisses „0“ oder „1“ an jedem der Qubits muss nach Messung 100 Prozent ergeben – nur die Verteilung der Wahrscheinlichkeiten darf sich ändern. Die Reversibilität

der Rechnung bedeutet, dass man von einem Rechenergebnis eindeutig auf den Zustand zu Beginn der Rechnung rückschließen kann, wenn man alle Rechenschritte nochmals „rückwärts“ ausführt, also jeweils ihr Gegenteil anwendet. Dies ist eine ziemlich starke Einschränkung der zugelassenen Rechenvorgänge, die für klassische Rechner nicht gilt. Dies lässt sich am Beispiel einer einfachen Addition von zwei Zahlen verdeutlichen. Allein aus dem Ergebnis ihrer Summe kann nicht mehr eindeutig auf die Summanden geschlossen werden.

Die Forderung der Wahrscheinlichkeitserhaltung bedeutet, dass das System aus Qubits während des Rechenvorgangs keine Information verlieren darf. Sie stellt die Technologieentwicklung vor sehr große Herausforderungen, da quantenmechanische Systeme in der Regel sehr störanfällig sind. Das Eindämmen von Dissipation von Information in die Umgebung des Systems, also die Reduzierung von Informationsverlust über das quantenmechanische System, ist eine der großen technischen Hürden bei der Entwicklung von Quantencomputern.

Rechenschritte auf Qubits werden mit den mathematischen Methoden der linearen Algebra beschrieben. Dafür werden die Zustände der Qubits als Vektoren und die Quantengatter als unitäre Matrizen dargestellt. Der Gesamtzustand eines einzelnen Qubits wird demnach als Vektor im sogenannten Hilbertraum – einem speziellen komplexen Vektorraum – dargestellt:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix},$$

wobei α und β die komplexwertigen Wahrscheinlichkeitsamplituden der Zustände |0⟩ und |1⟩ sind. Deren Betragsquadrat ergibt die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung das System im Zustand |0⟩ oder |1⟩ aufzufinden. Die Schreibweise „|X⟩“ wird Dirac-Notation genannt und wird in der theoretischen Quantenphysik für die Darstellung von Vektoren verwendet.

Ein allgemeines Quantengatter O kann als unitäre Matrix wie folgt dargestellt werden:

$$O = \begin{pmatrix}x_{11} & x_{12}\\ x_{21} & x_{22}\end{pmatrix}.$$

Ein Rechenschritt entspricht also einer unitären Transformation des Ausgangszustands, realisiert durch eine Matrix-Vektor Multiplikation, die zum Folgezustand $\begin{pmatrix}\alpha'\\ \beta'\end{pmatrix}$ führt:

$$O|\psi\rangle = \begin{pmatrix}x_{11} & x_{12}\\ x_{21} & x_{22}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha x_{11} + \beta x_{12}\\ \alpha x_{21} + \beta x_{22}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha'\\ \beta'\end{pmatrix}.$$

Als Beispiel für eine Operation auf einem Qubit, dient hier eine der zentralen Gatter-Operationen, das Hadamard-Gatter H, welches wie folgt als Matrix dargestellt werden kann:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$$

Das Hadamard-Gatter erzeugt aus einem Zustand in der Rechenbasis (also |0⟩ oder |1⟩) einen gleichmäßig superponierten Zustand, wie folgende Rechnung deutlich macht, bei der ein Hadamard-Gate auf den Zustand |0⟩ angewandt wird:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle.$$

Auch ein Messvorgang kann mittels der Wirkung eines Operators bzw. einer Matrix auf einen Zustand erfasst werden. Dazu definiert man einen zur Messung korrespondierenden Operator und berechnet im nächsten Schritt das Skalarprodukt mit dem Ausgangszustand. Möchte man beispielsweise messen, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich das Qubit $|\psi\rangle$ im Grundzustand befindet, so wendet man den Operator $O_G = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$ auf den Zustand an und erhält:

$$|\psi'\rangle = O_G\,|\psi\rangle = O_G\,(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha\\ 0\end{pmatrix}.$$

Im Anschluss muss noch das Skalarprodukt mit dem Ausgangszustand berechnet werden. Dieses kann als Produkt aus dem neuen Zustand $|\psi'\rangle$ und dem transponierten und komplex konjugierten zu messenden Zustand $\langle\psi|$ dargestellt werden:

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ 0\end{pmatrix} = \alpha a^* = |\alpha|^2.$$

Die Wahrscheinlichkeit das Qubit im Grundzustand zu finden ist demnach $|\alpha|^2$.

2.1.3 Quantenalgorithmen und ihr Potenzial

Ein Quantenalgorithmus besteht aus einer Abfolge von Rechenoperationen auf den Qubits, das heißt aus einer bestimmten Verschaltung von Operationen und Messvorgängen. Dies wird in einem Quantenschaltkreis mit Quantengattern realisiert. Eine Visualisierung der Erzeugung und Messung eines superponierten Zustands mit dem Hadamard-Gate, wie sie weiter oben als Matrix-Operation gezeigt wurde, ist in Abbildung 1 dargestellt. Abbildung 2 zeigt einen Schaltkreis zur Erzeugung eines maximal verschränkten Zustands von zwei Qubits – eines sogenannten Bell-Zustands. Der Schaltkreis startet mit beiden Qubits im klassischen Grundzu-

stand |0⟩): Zunächst erzeugt das Hadamard-Gate einen superponierten Zustand für das erste Qubit. Dann wird ein XOR-Quantengatter angewandt. Dieses führt analog zum klassischen XOR-Gatter[2] auf dem zweiten Qubit eine Negation aus – verändert also den Zustand von |0⟩ auf |1⟩ oder von |1⟩ auf |0⟩, aber nur dann, wenn sich das erste Qubit (Kontroll-Qubit) im Zustand |1⟩ befindet. Befindet es sich im Zustand |0⟩, geschieht nichts. Damit sind die Qubits verschränkt und lassen sich nicht mehr getrennt betrachten. Der gemeinsame Zustand lässt sich wie folgt formulieren:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle.$$

Misst man nun das zweite Qubit, wie in Abbildung 2 gezeigt, erhält man mit dem Ergebnis der Messung nicht nur eine Information über das zweite, also das gemessene, Qubit, sondern auch über das erste. Denn der Zustand nach der Messung ist entweder |00⟩ oder |11⟩. Nach der Messung ist die Verschränkung zerstört, mit dem Wissen über den Zustand des ersten Qubits kann aber weitergerechnet werden. Dieser Vorgang hat kein klassisches Pendant und ist einer der wesentlichen Grundbausteine bei der Konstruktion von Algorithmen für Quantencomputer.

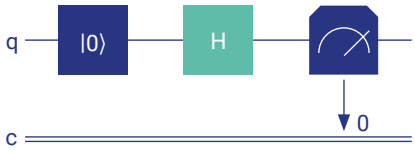


Abbildung 1: Quantenschaltkreis für Erzeugung und Messung eines superponierten Zustands eines Qubits. Auf den initialen klassischen Zustand |0⟩ wird ein Hadamard-Gatter H angewendet und anschließend ein Messvorgang durchgeführt.

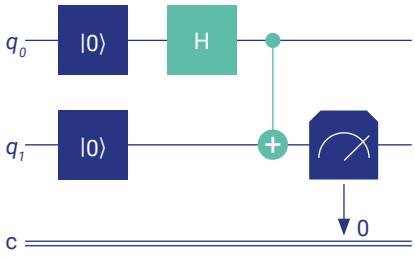


Abbildung 2: Quantenschaltkreis für die Erzeugung eines der Bell-Zustände, also eines maximal verschränkten Zustands $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$. Auf das Hadamard-Gatter H folgt ein CNOT-Gatter, welches das zweite Qubit invertiert, aber nur dann, wenn das erste Qubit im Zustand |1⟩ ist. Nach dem Messen des zweiten Qubits kann mit dem ersten Qubit bei Kenntnis seines Zustands weitere Operationen durchführen.

Basierend auf den elementaren Eigenschaften von Qubits, wie Superposition und Verschränkung, können Algorithmen konstruiert werden, die in ihrer Leistungsfähigkeit klassischen Computern massiv überlegen sind. Diese erwartete Überlegenheit des Quantencomputers gegenüber dem klassischen Hochleistungsrechner wird mit dem Begriff der Quantenüberlegenheit (engl. Quantum Advantage) beschrieben. Dahinter verbirgt sich das Ziel, praktisch zu beweisen, dass Quantencomputer Probleme lösen können, an denen selbst aktuell verfügbare Hochleistungsrechner scheitern. Dabei handelt es sich vor allem um Problemstellungen, bei denen die für die Lösungsfindung benötigte Anzahl an Rechenschritten mit zunehmender Größe des Problems ungünstig skaliert. Erhöht sich die Anzahl der Rechenschritte, dann erhöht sich auch die Laufzeit der Berechnung. Es dauert z. B. länger, eine Liste von 100 Zahlen nach der Größe zu sortieren, als eine Liste von 50 Zahlen. Im Fall eines klassischen Rechners vervierfacht sich die Laufzeit, wenn die Liste der Zahlen doppelt so lang ist, wie im genannten Beispiel. Die Laufzeit skaliert somit quadratisch. Probleme, bei denen die Laufzeit quadratisch skaliert, lassen sich in der Regel mit klassischen Rechnern noch effizient lösen. Wenn die Laufzeit exponentiell skaliert, ist das ab einer bestimmten Größe des Problems oft nicht mehr der Fall, die Zeitspanne bis zur Lösungsfindung bewegt sich hier für praktische Problemstellungen gegebenenfalls in Größenordnungen von mehreren Monaten bis Jahren. Probleme dieser Art zählen laut Komplexitätstheorie der Informatik oft zur Klasse der NP-schweren Probleme (NP steht für nicht-deterministisch-polynomial). Ein anschauliches Beispiel für ein NP-schweres Problem ist das kombinatorische Optimierungsproblem des Handelsreisenden (engl. Traveling Salesman Problem, TSP; Abbildung 3). Ein Reisender plant eine Rundfahrt und will dabei eine Reihe bestimmter Sehenswürdigkeiten besichtigen, gesucht ist die optimale bzw. kürzeste Route. Für eine Problemgröße mit N=13 Sehenswürdigkeiten existieren bereits mehr als sechs Milliarden mögliche Lösungen bzw. Routen (Skalierung mit Fakultät N). Ab einer Problemgröße von N=58 umfasst der Lösungssuchraum mehr Routen als Atome im Weltall, klassische Rechner scheitern spätestens hier an unrealistischen Laufzeiten. Durch Konstruktion eines Quantenalgorithmus, der aufgrund von Superposition und Verschränkung deutlich weniger Rechenschritte benötigt, kann theoretisch die Laufzeit und somit die Lösungsfindung beschleunigt werden. Unstrukturierte Suchen, wie das TSP-Problem, lassen sich theoretisch z. B. durch den Grover-Algorithmus quadratisch beschleunigen. Mit dem Algorithmus von Harrow, Hassidim und Lloyd (HHL) kann die Lösung linearer

2 Exklusiv-Oder-Gatter

Gleichungssysteme exponentiell schneller gefunden werden, mit dem Shor-Algorithmus die Primfaktorzerlegung ganzer Zahlen. Eine umfassende Zusammenstellung von Quantenalgorithmen und ihrer jeweiligen Beschleunigung bietet der „Quantum Algorithm Zoo" unter https://quantumalgorithmzoo.org/.

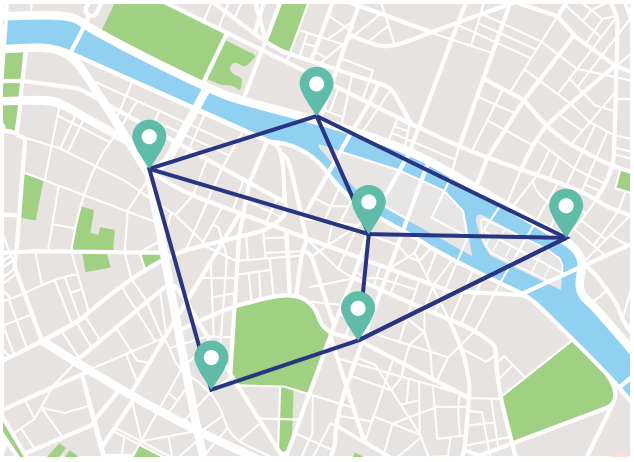


Abbildung 3: Das Problem des Handelsreisenden. Beim Problem des Handelsreisenden wird nach der optimalen, d. h. kürzesten Route für den Besuch mehrerer Orte unter allen möglichen Routen gesucht. Dabei darf jeder Ort nur einmal besucht werden, mit Ausnahme des Ausgangsorts, der auch die letzte Station der Route ist.

Eine allgemeine Überlegenheit von Quantenalgorithmen ist bisher weder theoretisch noch praktisch bewiesen. Für spezielle Einzelfälle konnte praktisch eine Überlegenheit gegenüber klassischen Computern gezeigt werden (Arute et al. 2019; Zhong et al. 2020). Ein umfassender Nachweis wurde bislang jedoch noch nicht erbracht. Die Quantencomputer-Hardware ist noch nicht weit genug entwickelt und keine der aktuell verfügbaren Plattformen bietet eine ausreichende Anzahl an stabilen, miteinander verbundenen Qubits. Im Fall des Shor-Algorithmus wird z. B. geschätzt, dass mehrere Millionen Qubits erforderlich sein werden, um den praktischen Nachweis zu erbringen. Die Systeme sind aktuell noch sehr stör- und damit fehleranfällig. Deshalb werden neben den Qubits für die eigentliche Berechnung zusätzliche Qubits für die Korrektur ungewollter Abweichungen benötigt. Im Fokus der Hardwareentwicklung stehen daher unter anderem fehlertolerante Qubits. Ziel ist es dabei, Quantencomputing zu ermöglichen, das gegenüber hardwarebedingten Fehlern geschützt ist. Wann die Ära eines solchen fehlertoleranten Quantencomputings erreicht sein wird, ist zum jetzigen Zeitpunkt nicht sicher zu prognostizieren. Das heißt aber nicht, dass Quantencomputing in der Zwischenzeit keine Relevanz haben wird. Bereits auf der heute verfügbaren Hardware können Quantenalgorithmen implementiert werden, mit denen sich auch auf den relativ kleinen und verrauschten Systemen effiziente Berechnungen für praktische Problemstellungen ausführen lassen[3]. Der US-amerikanische Physiker John Preskill hat für dieses Entwicklungsstadium den Begriff der Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) Ära geprägt.

Um einen Quantenalgorithmus in einem konkreten Anwendungsfall nutzen zu können, sind verschiedene Schritte notwendig, wie in Abbildung 4 für gatterbasiertes Quantencomputing illustriert. Zunächst wird das zugrundeliegende Problem, wie beispielsweise das Problem des Handelsreisenden, mathematisch formuliert. In einem nächsten Schritt müssen die Daten, auf denen der Quantenalgorithmus operieren soll, in einen Quantenzustand aus mehreren Qubits codiert werden. Anschließend wird eine dem Algorithmus entsprechende Sequenz aus Quantengattern ausgewählt und in einer zeitlichen Abfolge auf den codierten Quantenzustand der Qubits angewandt. Um am Ende der Rechnungen ein klassisch interpretierbares Ergebnis zu erhalten, müssen ein oder mehrere Qubits ausgelesen bzw. ihr Endzustand gemessen werden. Die Darstellung der Ergebnisse oder gegebenenfalls auch die Weiterverwendung für klassische Algorithmen erfolgt dann auf einem klassischen Computer. Um einen neuen, nicht in Bibliotheken einer Hochsprache enthaltenen Quantenalgorithmus in Code zu implementieren, muss in Assemblersprache[4] programmiert werden. Dies erfordert die Kenntnis der physikalischen Umsetzung des Algorithmus auf Hardwareebene (siehe Abschnitt 2.2). Wie auch beim klassischen Programmieren bieten Software-Development-Kits (SDK) eine übergreifende Zusammenstellung üblicher Programmierroutinen und Bibliotheken.

3 Beispiele siehe: https://www.dwavesys.com/learn/featured-applications/
4 Architekturspezifische Programmiersprache für einen Prozessor

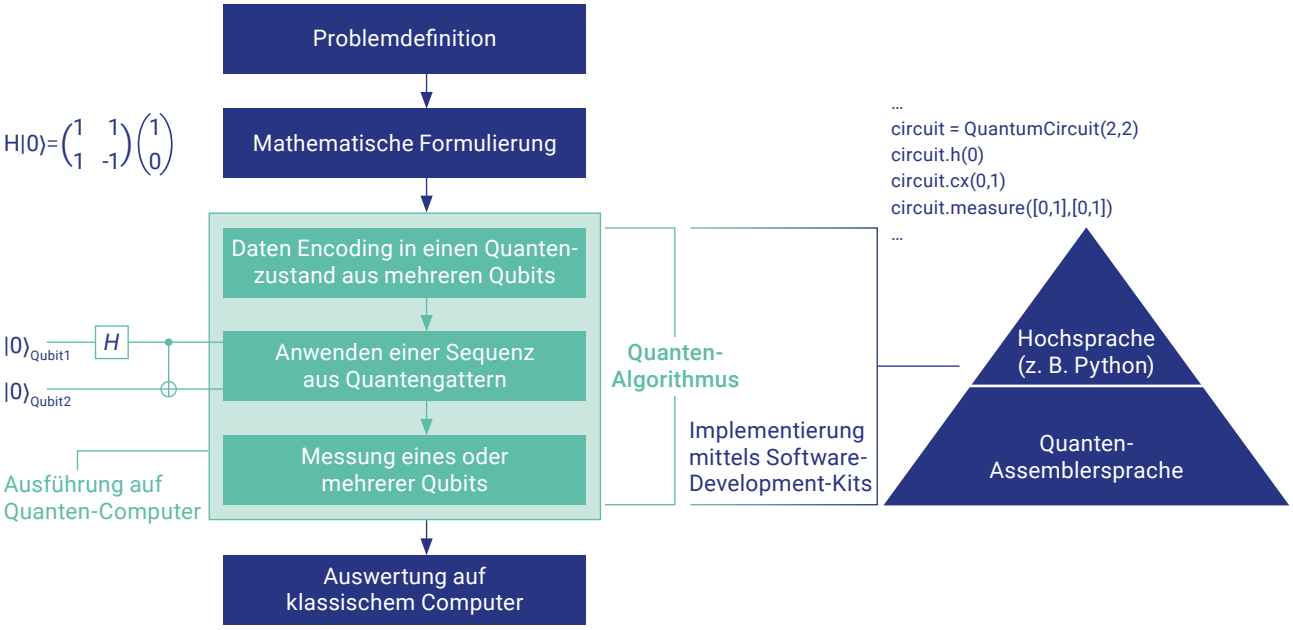


Abbildung 4: Schritte eines Quantenalgorithmus auf einem quantengatterbasierten Computer für einen Anwendungsfall (links) und dessen Implementierung mittels Software-Development-Kits (rechts).

2.1.4 Modelle des Quantencomputing

Es existieren verschiedene Modelle für das Quantencomputing, die sich konzeptionell stark unterscheiden und im Folgenden erläutert werden. Die derzeit prominentesten Modelle sind das diskrete Gate-Modell bzw. das gatterbasierte Modell sowie das adiabatische Quantencomputing. Die komplexe Frage, welches Modell für eine vorliegende spezifische Problemstellung am besten geeignet ist, ist Gegenstand aktueller Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten.

Das diskrete Gate-Modell wird unter anderem von den Hardwareherstellern IBM, Google und Rigetti in der Entwicklung verfolgt und ist auch in der Forschung aktuell stark vertreten. Es fußt auf der Beschreibung eines Quantenalgorithmus mit grundlegenden Quantengattern, wie in Abschnitt 2.1.3 vorgestellt. Dieses Modell ist das Analogon zum klassischen Computer, die Qubits treten an die Stelle von Bits und bilden die Grundeinheit des Rechners. Während auf einem klassischen Computer Berechnungen durch logische Operationen mittels Logikgatter an den Bits durchgeführt werden, werden auf Quantencomputern in diesem Modell mathematisch unitäre Transformationen mittels Quantengatter auf den Qubits durchgeführt und somit ein Quantenzustand in einen anderen überführt. Mehrere Quantengatter können dabei zu einem Quantenschaltkreis zusammengeschaltet werden. Die diskreten Zustände der Qubits sind die Grundlage der mittels der Quantenschaltkreise realisierten Berechnungen. Dies grenzt das Modell von dem kontinuierlichen Gate-Modell ab, bei dem auch kontinuierliche Variablen verwendet werden (Brands 2011).

Adiabatisches Quantencomputing kommt beim sogenannten Quantenannealing zum Einsatz und wird derzeit führend von dem Unternehmen D-Wave entwickelt (Dahl und Goliber 2019). Dieses Modell ist gerade in der NISQ-Ära vielversprechend, da es zum Beispiel im Vergleich zum gatterbasierten Quantencomputing nicht so anfällig gegenüber Einflüssen aus der Umgebung ist, die zu einem Verlust der quantenmechanischen Eigenschaften der Qubits führen können (Kaminsky und Lloyd 2004). Die Grundidee innerhalb dieses Modells ist es, durch hinreichend langsame Zustandsänderung der Qubits eine Näherungslösung für ein bestimmtes Optimierungsproblem zu finden. Hierzu wird das System aus Qubits in einem Anfangsgrundzustand präpariert und dieser dann zeitlich, zum Beispiel durch Anlegen eines externen Magnetfeldes, entwickelt. Ist die zeitliche Entwicklung langsam genug, das heißt adiabatisch entsprechend dem sogenannten adiabatischen Theorem der Quanten-

mechanik, kann sich das System im globalen Minimum einpendeln – dem Zustand minimaler Energie, der die Lösung des Problems darstellt (Harris et al. 2014). Über Quantenannealing lassen sich insbesondere quadratische binäre Optimierungsprobleme ohne Nebenbedingungen (engl.: Quadratic unconstrained binary optimization, QUBO) lösen. Diese Klasse von Problemen lässt sich in Graphen übersetzen, die sich wiederum auf die gitterartige Anordnung der Qubits in der Hardwarestruktur abbilden und lösen lassen.

Neben den beschriebenen Modellen existieren weitere rechentheoretisch beschränkte Paradigmen, wie beispielsweise die Quantensimulation. Diese wird oft mit der Simulation quantenphysikalischer Systeme auf einem klassischen Computer verwechselt, meint jedoch ein anderes Prinzip. Hinter der Quantensimulation steht die zu Beginn der 1980er Jahre von dem US-amerikanischen Physiker Richard Feynman geäußerte Idee, ein quantenphysikalisches System (ein Beispiel für eine Realisierung wäre eine Anordnung von Atomen in einem optischen Gitter aus Laserstrahlen) als Hardwareplattform für die Simulation eines anderen quantenphysikalischen Problems zu verwenden (Feynman 1982). Bei der Quantensimulation werden spezielle quantenmechanische Vielkörpersysteme genutzt, um insbesondere bestimmte Probleme auf den Gebieten der Chemie und Materialforschung zu lösen. Auch gatterbasierte oder adiabatisch arbeitende Quantencomputer können zur Simulation quantenphysikalischer Systeme herangezogen werden.

Um Berechnungen auf einem Quantencomputer ausführen zu können, wird neben der Hardware selbst auch ein auf sie abgestimmter Software-Stack benötigt. Grundlage dieses Software-Stacks ist die unterste Ebene der Hardware der jeweiligen Modelle: die Quantum Processing Unit (QPU) oder der Quantencomputer Simulator. Während es sich bei der QPU um eine physische Einheit, also um eine reale Hardwarekomponente handelt, simuliert der Quantencomputer Simulator das quantenmechanische Verhalten der Hardware auf einem klassischen Prozessor. Dies hat den Vorteil, dass die verwendeten Qubits frei von Fehlern sind, bedarf allerdings auch einer enormen Prozessorleistung, deren Grenze aktuell bei der Simulation von rund 60 Qubits erreicht wird (Raedt et al. 2019).

2.2 Der Quantencomputing-Full-Stack

Der Full-Stack eines Quantencomputers lässt sich grob in eine Hard- und eine Softwareebene unterteilen, wie in Abbildung 5 schematisch dargestellt. Für eine anwendungsorientierte, praxistaugliche Programmierung eines Quantencomputers müssen beide Ebenen optimal aufeinander abgestimmt sein, in Fachkreisen wird dafür auch der Begriff des Co-Designs verwendet (Donati 2021). Die detaillierten Softwarekomponenten des Stacks sind abhängig von der physikalischen Plattform, mit der die Qubits realisiert werden. Die Umsetzung dieser physikalischen Plattformen wird im nächsten Abschnitt näher erläutert. Eine genauere Betrachtung hinsichtlich der jeweiligen Softwarekomponenten erfolgt anschließend in Abschnitt 2.2.2.

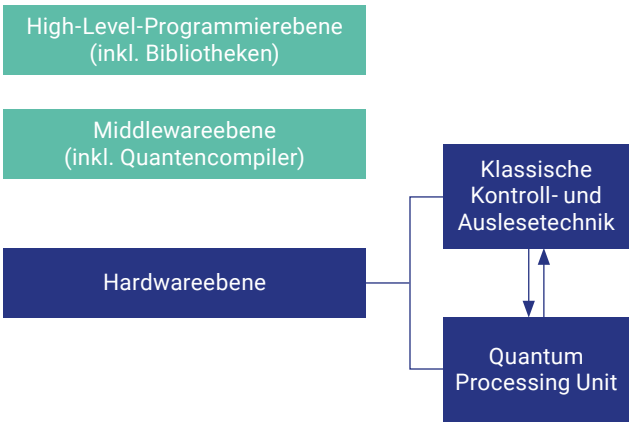


Abbildung 5: Schematische Skizze des Full-Stacks für Quantencomputing. Die Darstellung ist angelehnt an die Ausführung in (Donati 2021).

2.2.1 Physikalische Realisierung von Quantencomputer-Hardware

Es existieren verschiedene technologische Ansätze, Quantencomputer hardwareseitig zu realisieren. Zur Evaluation der Umsetzung bzw. der Systeme werden, unabhängig von der zugrundeliegenden Technologie, Metriken herangezogen. Die wichtigsten werden im Folgenden kurz erläutert.

Die Dekohärenzzeit (engl. decoherence time) ist ein Maß für die statistische Zeitspanne, in der die Information auf einem Qubit bestehen bleibt, bevor sie durch Wechselwirkung mit der Umgebung verloren geht. Sie ist damit ein Maß für die Lebensdauer eines Qubits. Ihre Größenordnung variiert abhängig von der Technologie zwischen Mikrosekunden und Sekunden. Im Fall von gatterbasierten Quantencomputern wird zur Bewertung der Dekohärenzzeit eine weitere Metrik hinzugezogen, die Gatterlaufzeit (engl. gate operation time). Dabei handelt es sich um ein Maß für die Zeitspanne, die für die Ausführung eines Quantengatters benötigt wird. Eine Anforderung an gatterbasierte Quantencomputer ist, dass die Dekohärenzzeit wesentlich länger sein muss als die Gatterlaufzeit. Der Quotient der beiden Metriken wird auch als Qualitätsfaktor beschrieben (engl. quality factor). Im Rahmen von komplexen Algorithmen müssen mehrere hintereinandergeschaltete Quantengatter ausgeführt werden, wobei die Anzahl möglicher Rechenschritte durch den Qualitätsfaktor begrenzt ist. Aufgrund dieser Begrenzung kann bisher nur eine begrenzte Auswahl an Algorithmen auf gatterbasierten Quantencomputern ausgeführt werden. Eine weitere wichtige Metrik ist die Güte der Gatteroperationen (engl. gate fidelity). Sie ist, vereinfacht, ein Maß für die Verrauschtheit und drückt aus, wie wahrscheinlich es ist, dass eine Gatteroperation ausgeführt wird, ohne dass dabei Fehler durch Dekohärenzeffekte auftreten. Für eine effektive Korrektur von Dekohärenzeffekten während der Rechnung, muss die Güte der Gatteroperationen möglichst hoch sein (Resch und Karpuzcu 2019).

Zur Charakterisierung der Systeme dienen auch Kennzahlen wie die Systemgröße und Eigenschaften wie ihre Topologie. Die Systemgröße gibt an, wie viele physikalische Qubits verfügbar sind. Derzeit liegt die maximale Systemgröße gatterbasierter Quantencomputer bei etwa 65 Qubits, im Fall von Quantenannealern bei über 5000 Qubits. Diese physikalischen Qubits sind zwar stabil genug, um Rechenoperationen auszuführen, die aufgrund von Dekohärenzeffekten dabei auftretenden Fehler sind aber bislang noch nicht vollständig korrigierbar. Logische Qubits, die (fast) fehlerfreie Operationen gewährleisten, existieren noch nicht und sind Gegenstand aktiver Forschungs- und Entwicklungsarbeiten. Die Topologie eines Systems wird über das Konnektivitätsmaß beschrieben (engl. connectivity), das die Anzahl an Qubits angibt, zwischen denen eine volle Verschränkung aufgebaut werden kann.

Eine zentrale Anforderung an alle Systeme ist ihre Skalierbarkeit. Das heißt, die Ausführbarkeit von Operationen sollte nicht zu stark von der Systemgröße oder der Konnektivität abhängen. Operationen, die mit wenigen Qubits gelingen, sollten z. B. auch auf zukünftige, größere Systeme übertragbar sein. Zukünftig werden zudem vor allem auch Metriken wichtig sein, mit denen die Implementierung von Algorithmen auf unterschiedlichen Systemen evaluiert und verglichen werden kann, z. B. im Hinblick auf ihre Güte oder die Laufzeit. Eine erste Metrik hierfür wurde bereits 2017 vorgeschlagen, das Quantenvolumen (Moll et al. 2017). Sie berücksichtigt sowohl die Anzahl der für die Ausführung notwendigen Qubits als auch die Anzahl der benötigten Rechenschritte (Schaltkreistiefe, engl. circuit depth). 2019 hat IBM eine Quantenvolumen-Metrik für die aktuell verfügbaren Systeme eingeführt (Cross et al. 2019).

Im Rahmen der hardwareseitigen Technologieentwicklung wird aktiv geforscht, um die Systeme im Hinblick auf die beschriebenen Kennzahlen bzw. Gütekriterien zu verbessern. Zu den größten Herausforderungen zählen dabei die Reduzierung der Fehleranfälligkeit bzw. des Informationsverlusts durch physikalische Rauschprozesse oder Dekohärenzeffekte sowie die Konnektivität und Skalierbarkeit der jeweiligen Plattformen. Typische zurzeit verfolgte technologische Ansätze zur hardwareseitigen Realisierung von Quantencomputern wie supraleitende Qubits oder Ionenfallen werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

Supraleitende Qubits basieren auf den Energieniveaus der Leitungselektronen eines supraleitenden Schaltkreises, der allerdings nur bei einer Umgebungstemperatur nahe dem absoluten Temperaturnullpunkt bei -273,15 Grad Celsius realisiert werden kann. Sie zählen zu den derzeit führenden und am intensivsten erforschten Technologien. Ihre Dekohärenzzeit liegt aktuell im Mikrosekunden-Bereich, ihre Gatterlaufzeit im Bereich von Nano- bis Mikrosekunden. Die Hardwarehersteller IBM und Google bieten derzeit mit einer Systemgröße von bis zu 65 Qubits die größten Prozessoren an (siehe Abbildung 6). Beide Unternehmen haben den ehrgeizigen Plan, ihr System innerhalb der kommenden Jahre auf eine Systemgröße von einer Million Qubits zu skalieren. Auch andere Unternehmen setzen auf die Technologie der supraleitenden Qubits, darunter Rigetti, Intel und IQM. Ebenso werden supraleitende Qubits in den Systemen des Unternehmens D-Wave verwendet, die nicht auf dem diskreten Gate-Modell, sondern dem Quantenannealing basieren.

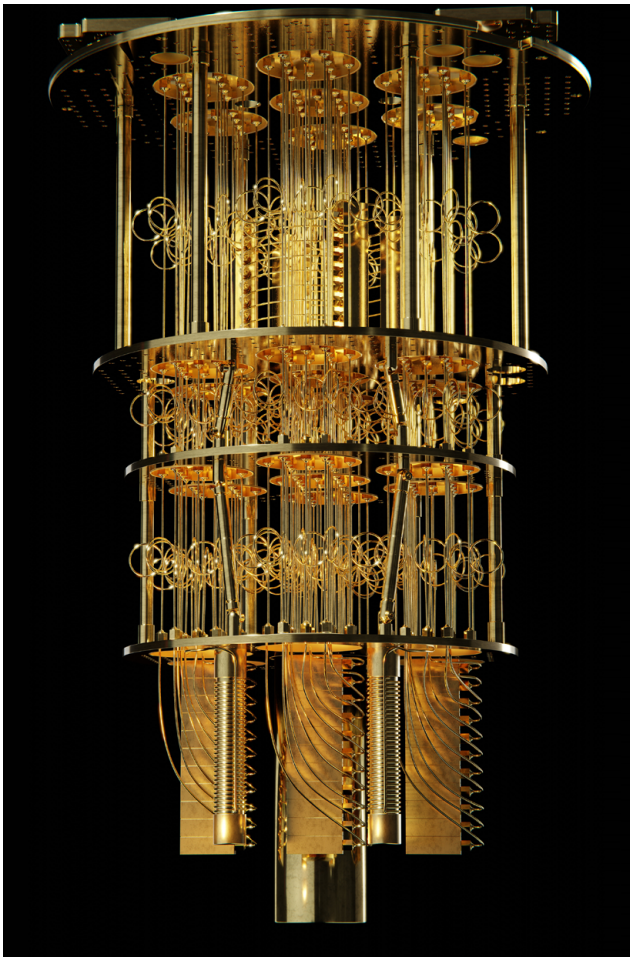


Abbildung 6: Ein auf supraleitender Technologie basierender Quantencomputer. Der eigentliche Prozessor befindet sich am unteren Ende des Bildes – der überwiegende Rest der abgebildeten Technik dient der Kühlung.

Ionenfallenbasierte Quantencomputer nutzen diskrete Energieniveaus von elektrisch geladenen Atomen, um sie mithilfe von elektromagnetischen Feldern zu fangen. Ihre Qubits weisen lange Dekohärenzzeiten im Sekundenbereich auf. Die Technologie wird derzeit unter anderem von den Unternehmen Alpine Quantum Technologies, Honeywell und IonQ verfolgt und weiterentwickelt.

Neben supraleitenden Qubits und Ionenfallen existieren weitere Plattformen, darunter solche, die auf Photonen (Lichtteilchen) basieren. Ein Vorteil dieser Plattformen ist, dass sie bei Umgebungstemperatur betrieben werden können. Die technologische Herausforderung ist hier, zuverlässige Ein-Photonen-Quellen zu betreiben. Andere Plattformen basieren auf Halbleitermaterialien oder Diamantstrukturen und werden zum Beispiel vom deutschen Halbleiterhersteller Infineon oder dem Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik IAF entwickelt. Microsoft setzt auf sogenannte topologische Qubits, die eine exzellente Stabilität gegen Fehler versprechen. Ihre experimentelle Realisierung ist von Microsoft für 2023 angekündigt.

2.2.2 Der Quantencomputing-Software-Stack

Nach dem Überblick über die verschiedenen Hardware-Plattformen wird im Folgenden der Software-Stack für das diskrete Gate-Modell beschrieben (Rosenkranz et al. 2020). Auf der obersten Ebene des Stacks befinden sich Programmierschnittstellen und eine Reihe von Bibliotheken in etablierten Programmiersprachen wie Python, in denen grundlegende Algorithmen implementiert sind. Auf dieser Ebene kann somit im Grunde zunächst auch ohne die Kenntnis der tieferen Schichten programmiert werden. Da aktuell noch kein umfassender Satz an Bibliotheken für verschiedene Problemstellungen auf den jeweiligen Hardwareplattformen existiert, muss für die Umsetzung der Spezifika der jeweiligen Problemstellung diese oberste Ebene verlassen und auf niedrigeren Ebenen programmiert werden. Dafür ist es nötig, die darunterliegende Ebene, die der Quantenschaltkreise (engl. quantum circuits), zu modifizieren.

Quantenschaltkreise definieren den Ablauf der oben erwähnten Quantengatter, also der Zustandsmodifikationen auf einem Qubit. Ein Quantenschaltkreis besteht aus mindestens einem Quantengatter, in der Regel jedoch aus deutlich mehr. Programmieren auf dieser Ebene entspricht im klassischen Rechnermodell der Modifikation von einzelnen logischen Gattern. Hierfür ist ein fundamentales Verständnis der existierenden Quantengatter nötig und setzt somit Kenntnisse der linearen Algebra voraus.

Der Compiler verbindet die Ebene der abstrakt definierten Quantenschaltkreise mit der QPU oder dem Quantencomputer Simulator. Welche Quantenschaltkreise bzw. Quantengatter tatsächlich implementierbar sind, hängt von der Wahl der verwendeten Hardware ab. Dies bedeutet, dass der Compiler zunächst die Quantenschaltkreise der Hochsprachen auf die Ebene der verfügbaren Hardwaregatter übersetzen muss. In dieser Schicht kann auch die Fehlerkorrektur (engl. quantum error correction) durchgeführt werden: Hier geht es darum, den Informationsverlust aufgrund von Dekohärenz und Rauschen, also aufgrund von Wechselwirkungen mit der Umgebung, einzudämmen. Für diesen Vorgang wird der Einsatz zusätzlicher quantencomputerspezifischer Korrekturalgorithmen angestrebt. Zuletzt über-

setzt eine Art Assemblersprache die Gatter in Anweisungen für die entsprechenden physikalischen Vorgänge auf der jeweiligen Hardwareplattform. Hierbei kann die Fehlerrate zusätzlich durch sogenannte Quantum Firmware reduziert werden, die Software zum Steuern zusätzlicher physikalischer Vorgänge auf der Hardware anbietet (Ball et al. 2021).

Wie der beschriebene Kompiliervorgang konkret durchgeführt wird, ist abhängig von der Hardware. Im Fall der auf supraleitenden Prozessen basierenden Qubits besteht die Hardware-Schicht zunächst aus einem Prozessor aus supraleitenden Schaltkreisen. Diese werden auf weniger als 100 mK mithilfe von Helium-Kryotechnik gekühlt. Für die Kontrolle und das Ausleseverfahren wird der auf einem Chip befindliche Prozessor mit einer Hülle und mit Anschlüssen für die Steuerung durch Mikrowellenpulse versehen. Auf der untersten Ebene des Software-Stacks muss die Abfolge der Quantengatter im Quantenschaltkreis in die analogen Kontrollprozesse der Hardware übersetzt werden.[5]

Der Software-Stack für das Quantenannealing unterscheidet sich von dem Stack des diskreten Gate-Modells. Die Problemstellung wird nicht in eine Abfolge von Quantengattern, sondern in einen Graphen untereinander verknüpfter Qubits überführt. Anhand des Graphen kann die Energie des physikalischen Systems berechnet werden, die während des Berechnungsvorgangs minimiert werden soll. Entsprechend müssen auf der obersten Abstraktionsebene, das heißt beim Programmieren in einer Hochsprache wie Python, andere Bibliotheken eingebunden werden. Der Kompiliervorgang auf einem Quantenannealer beinhaltet, dass das Problem auf die Topologie der Hardware mittels entsprechender Software übersetzt wird. Das Programmieren auf dieser Ebene erfordert wie im Fall des Quantenassemblers bei gatterbasierten Quantencomputern ein fundiertes physikalisches und technisches Verständnis der zugrundeliegenden Hardwareplattform.

Da sich Quantenhardware konzeptionell von klassischer Hardware unterscheidet, bedarf es für den Betrieb entsprechend angepasste Software. Wie außerdem aus den Stacks für die verschiedenen Modelle hervorgeht, muss die Software zudem auf die jeweilige Technologie der zugrundeliegenden Quantenhardware abgestimmt sein. Für Anwendungsfälle, in denen benötigte Funktionalitäten in bestehenden Bibliotheken nicht abgedeckt sind, müssen diese von den Entwickelnden auf tiefer liegenden Schichten des Software-Stacks eigenhändig programmiert werden. Zentrale Herausforderungen in der Softwareentwicklung liegen derzeit im Bereich des Testens von Algorithmen und der Fehlersuche (engl. Debugging). Der Messvorgang beim Auslesen der Qubits zerstört ihren Zustand und erschwert daher die Fehlersuche. Außerdem ist eine Verifikation mit klassischen Computern schwierig, da selbst Hochleistungsrechner nur relativ kleine quantenmechanische Systeme vollständig abbilden können.

2.3 Zugang und Anbietermarkt

Quantencomputer stehen bisher größtenteils in den Laborräumen von Universitäten und Technologiekonzernen. Die Hersteller bieten aber bereits jetzt Zugang zu ihrer Quantenhardware via Cloud-Services und stellen zudem entsprechende Software für Simulatoren von Quanten Processing Units (QPUs) und weitere Open-Source-Software-Frameworks bereit, wie in Abbildung 7 für eine Auswahl an Anbietern dargestellt.

5 https://opensuperq.eu/approach

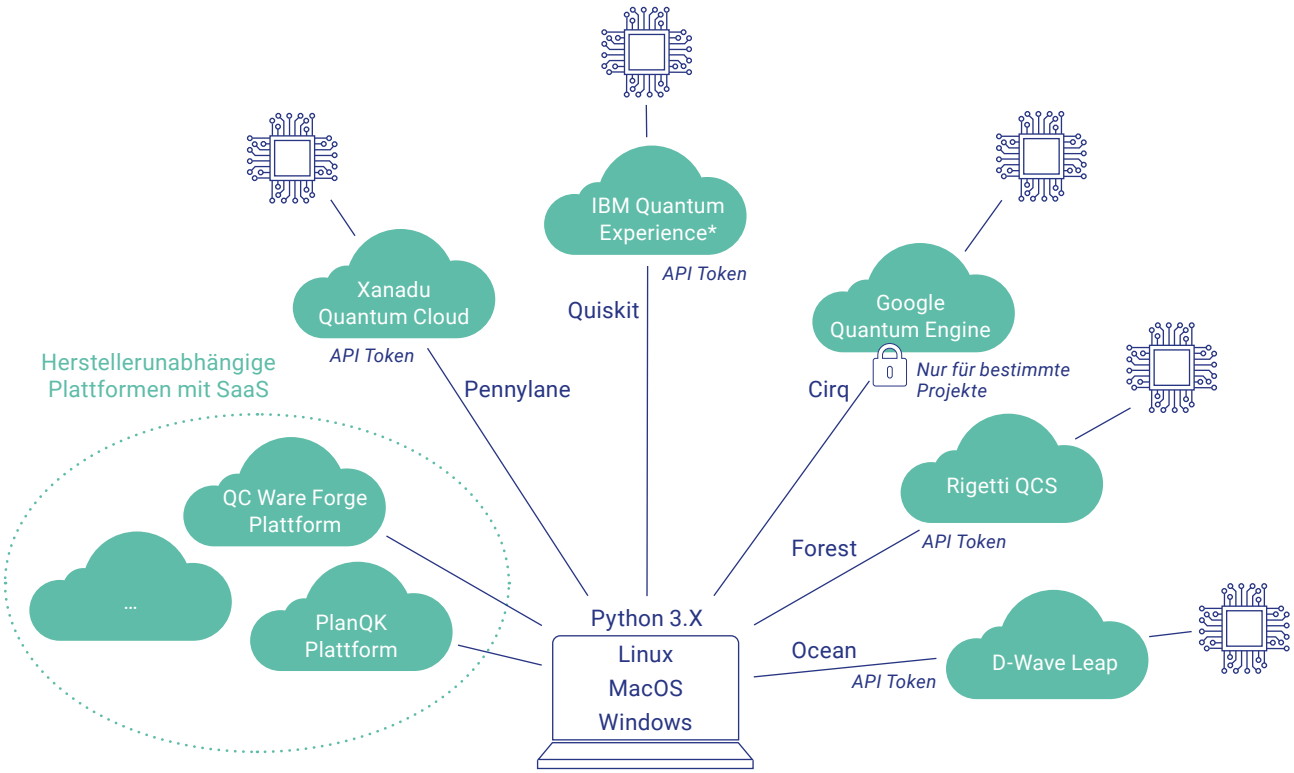


Abbildung 7: Schematische Darstellung der Zugangsmöglichkeiten zu Quantenhardware über Cloudservices für eine Auswahl an Anbietern; links: mittelbarer Zugang über herstellerunabhängige Plattformen, die vor allem bereits fertige Softwarelösungen anbieten und rechts unmittelbarer Zugang über herstellerabhängige Webseiten, verbunden mit der Möglichkeit, Quantensoftware selbst mithilfe angebotener Open-Source-Software-Development-Kits zu implementieren und auszuführen (* Unter dem Begriff IBM Quantum Experience sind der IBM Quantum Composer und das IBM Quantum Lab zusammengefasst).

Bereits jetzt kann auf einem herkömmlichen PC, der unter MacOS, Windows oder Linux arbeitet, Programmcode für einen Quantencomputer geschrieben und anschließend auf verschiedenen Hardwareplattformen zum Teil kostenlos getestet werden. Hierfür bieten die Hersteller in der Regel umfangreiche Open-Source-Software-Frameworks, Tutorials und Codedokumentationen auf ihren Webseiten zum Download an (https://qosf.org/project_list/#quantum-full-stack-libraries). Alternativ kann auf diese Ressourcen über entsprechende Cloud-Dienste zugegriffen werden. Abbildung 8 gibt einen Überblick über verschiedene Quantencomputing-Anbieter, ihre Full-Stack-Konzepte[6] und Online-Ressourcen für den Einstieg.

Die meisten Anbieter ermöglichen das Schreiben von Programmcode mittels der Hochsprache Python und unter Verwendung von Open-Source-Software-Frameworks und Software-Development-Kits (SDK). Für das lokale Programmieren auf dem PC ist die Installation einer der aktuellen Python Versionen (ab v3) erforderlich. Nach Download eines anbieterspezifischen SDK stehen Anwendenden zumeist Compiler, Assembler, Bibliotheken, Quantensimulatoren und APIs zur Verfügung. Über die Bibliotheken lassen sich bereits etablierte Quantenalgorithmen einfach in den eigenen Programmcode einbinden. Die Bibliotheken TensorFlow Quantum[7] von Google oder Pennylane[8] von Xanadu stellen darüber hinaus Schnittstellen für die nahtlose Integration von Quantenalgorithmen in Machine-Learning-Frameworks wie TensorFlow oder Pytorch bereit (Broughton et al. 2020). Die webbasierte interaktive Umgebung Jupyter Notebooks[9] kann die Entwicklung und das Testen des Python Programmcodes erleichtern. Sie ermöglicht es unter anderem, die Ergebnisse des ausgeführten Programmcodes einfach zu visualisieren. Jupyter Notebooks wird in den meisten Fällen über den jeweiligen Cloudservice der Anbieter zur Verfügung gestellt.

6 Full-Stack-Konzept steht für ein integriertes Software- und Hardware-Design, das verschiedene Abstraktionsebenen bietet. https://www.d-fine.com/news/quantum-computing/

7 https://quantumai.google/
8 https://xanadu.ai/access
9 https://jupyter.org/

Anbieter (Hauptsitz)	Hardware	Software-Frameworks und Software-Development-Kits	Online-Ressourcen als Einstiegshilfe
IBM (USA)	Supraleitende Schaltkreise für gatterbasiertes Quantencomputing	**Qiskit** **Hochsprache:** Python **Bibliotheken:** Acqua (beinhaltet unter anderem diverse Algorithmen wie Q-VSM, Q-BM, VQE, QAOA etc. zu verschiedenen Problemkategorien: KI, Chemie, Optimierung), Terra (beinhaltet verschiedene Werkzeuge zum Erstellen und Ausführen von Quantengattern/Schaltkreisen) **Assemblersprache:** OpenQASM **Quantencomputer-Simulatoren:** Über den Aer Provider können verschiedene High-Performance-Simulatoren (HP-Simulatoren) als Backend ausgewählt werden; verschiedene Simulatoren können auch lokal ausgeführt werden	**Einstieg und erste Schritte:** https://qiskit.org/documentation/getting_started.html **Tutorials:** https://qiskit.org/documentation/locale/de_DE/tutorials.html www.youtube.com/channel/UCIBN-q7mCMf5xm8baE_VMl3A **Registrierung für Cloudservice (inkl. Hardwarezugang durch API Token):** https://quantum-computing.ibm.com/lab
Google (USA)	Supraleitende Schaltkreise für gatterbasiertes Quantencomputing (Zugriff auf diese Hardware wird momentan nur ausgewählten Projekten gewährt)	**Cirq** **Hochsprache:** Python **Bibliotheken:** TensorFlow Quantum (verknüpft Cirq und TensorFlow um Quantenalgorithmen für ML-Anwendungen zu programmieren), OpenFermion (zum Kompilieren und Analysieren von Quantenalgorithmen, um fermionische Systeme zu simulieren, z. B. VQE) **Assemblersprache:** - **Quantencomputer-Simulatoren:** Build-in-Simulatoren für kleinere Schaltkreise und externe HP-Simulatoren verfügbar (qism, qsimh, qFlex, quimb)	**Cirq Installation:** https://quantumai.google/cirq/install#installing_on_windows **Tutorials und Beispiele** https://quantumai.google/cirq/tutorials **Ausführung via Simulatoren:** https://quantumai.google/cirq/simulation
Rigetti (USA)	Supraleitende Schaltkreise für gatterbasiertes Quantencomputing	**Forest** **Hochsprache:** Python **Bibliothek:** pyQuil **Assemblersprache:** Quil (Compiler Quilc übersetzt von Python nach Quil) **Quantencomputer-Simulatoren:** QVM (Quantum virtual machine, HP-Simulation via Cloud – auch lokal nutzbar)	**Lokale Installation Forest:** https://qcs.rigetti.com/sdk-downloads **Registrierung für Cloudservice (inkl. Hardwarezugang durch API Token):** https://qcs.rigetti.com/request-access **Erste Schritte:** https://docs.rigetti.com/qcs/getting-started
D-Wave Systems (Kanada)	Supraleitende Schaltkreise für Quantenannealer	**Ocean** **Hochsprache:** Python **Bibliotheken:** ja, vor allem verschiedenste Algorithmen aus dem Bereich Optimierung in Code implementierbar (QUBO) **Assemblersprache:** QMASM **Quantencomputer-Simulatoren:** ja	**Ocean Software Übersicht:** https://docs.ocean.dwavesys.com/en/stable/overview/stack.html **Download Ocean:** https://github.com/dwavesystems/dwave-ocean-sdk **Tutorials:** www.youtube.com/user/dwavesystems/featured **Registrierung für Cloudservice (inkl. Hardwarezugang durch API Token):** https://cloud.dwavesys.com/leap/signup/

Anbieter (Hauptsitz)	Hardware	Software-Frameworks und Software-Development-Kits	Online-Ressourcen als Einstiegshilfe
Xanadu (Kanada)	Quanten-optische Schaltkreise für continuous variable (CV) Quantencomputing	**Pennylane, Strawberry Fields** **Hochsprache:** Python **Bibliotheken:** Pennylane (für differentielles, das heißt Maschinelles Lernen und numerische Optimierung vereinendes Programmieren von Quantencomputern; kompatibel mit Qiskit, Cirq, Forest und Strawberry Fields) Strawberry Fields (beinhaltet verschiedene Tools zum Erstellen, Ausführen und Verwalten von Quantenprogrammen für die Problemkategorien Graphen und Netzwerke, Maschinelles Lernen und Chemie) **Assemblersprache:** Blackbird **KI-Simulatoren:** eigene HP-Simulatoren und kompatibel mit externen	**Pennylane Website:** https://pennylane.ai/index.html **Strawberry Fields Website:** https://strawberryfields.ai/ **Registrierung für Cloudservice (inkl. Hardwarezugang durch API Token):** https://xanadu.ai/access

Abbildung 8: Übersicht über die Full-Stack-Konzepte verschiedener Anbieter und Online-Ressourcen für einen schnellen Zugang zur Quantenprogrammierung.

Auf GitHub gibt es aktive öffentliche Online-Communitys für verschiedene Bibliotheken zu unterschiedlichen Hardwareplattformen, die diese stets erweitern, verbessern und kombinieren. Zusätzlich kann über GitHub auf Projekte zugegriffen werden, die einen spielerischen und anschaulichen Einstieg in die Quantenprogrammierung ermöglichen (z. B. https://github.com/JanLahmann/Fun-with-Quantum).

Open-Source-Software-Frameworks wie Eclipse XACC[10] und ProjectQ[11] verfolgen einen hardwareagnostischen Ansatz, bei dem mittels einer Hochsprache wie Python auf verschiedene Backends zugegriffen werden kann. Diese Projekte erlauben damit das Testen von Quantenalgorithmen auf verschiedenen Backends.

Analog zum klassischen Programmieren gibt es beim Programmieren von Quantencomputern verschiedene Compiler, die den Programmcode bzw. Quellcode in eine Form übersetzen, die von den Maschinen ausführbar ist. Im Fall von gatterbasierten Quantencomputern werden die High-Level-Anweisungen des Programmcodes durch einen Compiler z. B. in Quantengatter übersetzt. Für Fortgeschrittene und Expertinnen und Experten gibt es die Möglichkeit, mittels Quantenprogrammiersprache direkt auf Gatterebene zu programmieren. Beispiele für Quantenprogrammiersprachen sind Q# von Microsoft, Quil von Rigetti, OpenQASM von IBM, Blackbird von Xanadu und QMASM. Nicht selten sind diese Low-Level-Sprachen allerdings plattformspezifisch, das heißt, sie können beispielsweise entweder nur von ionenfallenbasierten QPUs oder nur von supraleitenden QPUs ausgeführt werden.

Für alle Teile der Software-Development-Kits gibt es umfangreiche Code-Dokumentationen, die das Erlernen von Quantenprogrammiersprachen erleichtern. Zudem finden sich auf den Webseiten der Anbieter ausführliche Tutorials, sowohl in Schriftform als auch in Form von Videos, die neben Programmierkenntnissen auch quantenmechanische Grundlagen vermitteln (siehe Online-Ressourcen in Abbildung 8). Für die anwendungsbezogene Programmierung sind Informationen zur realen Hardware, das heißt detaillierte Informationen zur Topologie und den Fehlerraten der einzelnen Qubits notwendig. Auch diese Informationen werden von den Anbietern größtenteils kostenlos zur Verfügung gestellt. Ein Vergleich unterschiedlicher Programmiersprachen für Quantencomputer findet sich beispielsweise in LaRose (2019). Eine weitere Hilfe beim Programmieren von Quantencomputern können Integrated-Development-Environments (IDE) darstellen, die unter anderem Features wie Syntaxhervorhebung oder automatische Codevervollständigung enthalten.

10 https://projects.eclipse.org/proposals/eclipse-xacc
11 https://projectq.ch/

Es gibt mehrere Wege, ein fertiges Programm auszuführen und seine Quantenschaltkreise zu testen: i) Zugriff auf reale Quantenhardwareplattformen über Cloud-Services, ii) Zugriff auf Supercomputer, die die Simulation der Schaltkreise erlauben, oder iii) lokale Simulation der Schaltkreise auf dem eigenen PC. Soll der Programmcode debuggt werden und/oder im Fall von kleineren Programmen, kann die Ausführung auf Quantencomputer-Simulatoren vorteilhaft sein. Diese können lokal, auf der eigenen CPU oder GPU ausgeführt werden. Falls die Ausführung sehr rechenintensiv ist, besteht die Möglichkeit, über entsprechende Cloud-Zugänge der Anbieter auf Hochleistungsrechner zuzugreifen. Da die Quantensimulatoren Software sind, die auf klassische Hardware zugreifen, treten zudem keine Fehler durch Rauschen auf. Zusätzlich lässt sich der Superpositionszustand der Qubits nach der Ausführung von Gatteroperationen anzeigen, im Gegensatz zum Rechnen mit physischen Qubits, bei denen er durch den Messprozess beim Auslesen der Qubits zerstört wird. Diese Vorhersagbarkeit erleichtert das Schreiben von Quantenprogrammen insbesondere für Einsteiger, da die Fehlersuche leichter wird (Matthews 2021). Darüber hinaus bieten Quantencomputer-Simulatoren die Möglichkeit, vollverknüpfte Qubits (engl. all-to-all connectivity) auf einer klassischen CPU zu simulieren. Solche Topologien können in realen Quantencomputern bisher noch nicht realisiert werden.

Es bietet sich an, Programmcode von anwendungsnaher Software auch immer auf realer Quantenhardware zu testen. So kann sichergestellt werden, dass die verwendeten Algorithmen auch mit den eigentlichen NISQ-Geräten kompatibel sind. Um das geschriebene Quantenprogramm auf realer QPU ausführen zu können, bedarf es eines API-Tokens, der nach Registrierung über ein Formular auf der Webseite des jeweiligen Unternehmens an den Nutzenden übermittelt wird. Über den eigenen Account kann dann das Programm als Job auf verschiedene Weise bearbeitet werden. Bei IBM beispielsweise geben Nutzende ihren Job in eine Warteschlange (engl. queue). Je nachdem, wie viele Nutzende gleichzeitig auf ein gewähltes Backend zugreifen, kann es zu mehrtägigen Wartezeiten kommen, bis der eigene Programmcode ausgeführt wird (https://quantum-computing.ibm.com/). Im Gegensatz zu IBM verfolgt Rigetti den Ansatz, dass Nutzende zunächst über ein Online-Formular den Zugang zu einem der Hardwaregeräte beantragen (https://qcs.rigetti.com). Unabhängig vom technischen Zugang zur Quantenhardware ist die Nutzung bis zu einer bestimmten Leistungsgrenze zumeist kostenfrei. Um besonders leistungsfähige Hardware nutzen zu können bzw. um sehr rechen- bzw. zeitintensive Programme ausführen zu können, muss man gegebenenfalls auf kostenpflichtige Dienste zurückgreifen oder bestimmten Unternehmensnetzwerken angehören. Beispielsweise ist hier das IBM Quantum Network zu nennen, dem weltweit über 140 Unternehmen angehören und dessen Ziel es ist, ein Ökosystem rund um existierende und entstehende Hubs zu bilden.

Zusätzlich zu den beschriebenen Frameworks gibt es auch herstellerunabhängige Software-Frameworks und Ökosysteme. Beispiele hierfür sind Amazon Braket oder das öffentlich geförderte Projekt PlanQK. PlanQK zielt darauf ab, eine Plattform und ein Ökosystem für quantengestützte Künstliche Intelligenz zu entwickeln. Entwicklerinnen und Entwickler sollen über die Plattform in Zukunft quantengestützte Lösungen für Anwendende anbieten können. Das Unternehmen QC Ware verfolgt mit Forge – einer Quantencomputing-Plattform als Software-as-a-Service (SaaS) – einen ähnlichen Ansatz. Auf der Plattform wird Nutzenden die Implementierung verschiedener Quantenalgorithmen aus den Bereichen Maschinelles Lernen, binäre Optimierung und lineare Algebra angeboten. Über Amazon Braket können die Algorithmen hierbei auf unterschiedlichen Hardwareplattformen (D-Wave, IonQ und Rigetti) getestet werden. Voraussetzung ist eine Registrierung auf der Homepage von QC Ware Forge. Abgesehen von einer Gratis-Testminute Rechenzeit ist der Dienst kostenpflichtig.

Insgesamt besteht ein breitgefächertes Angebot für den Zugang zu Quantencomputing und es zeichnen sich erste Geschäftsmodelle ab (siehe Infobox). Eine Analyse des Wertschöpfungspotenzials von Quantencomputing erfolgt im Rahmen von Kapitel 6 dieser Studie.

Infobox: Übersicht zu sich abzeichnenden Geschäftsmodellen im Bereich Quantencomputing

INTEGRATED HARDWARE-AS-A-SERVICE	Bereitstellung von Rechenkapazität über Infrastucture-as-a-Service-Dienste (IaaS-Dienste). IBM und Rigetti verfolgen zurzeit diesen Weg.
HARDWAREVERTRIEB UND -SERVICE	Verkauf von vollintegrierten Systemen (Hardware + Software-Entwicklungsumgebung) an Endkunden und gegebenenfalls Angebot von Wartungsdienstleistungen. D-Wave verfolgt diesen Weg.
SOFTWARE-AS-A-SERVICE	Angebot von Softwarelösungen für unterschiedliche Schichten des Software-Stacks: **Hardware-unabhängige Kontrollsoftware** zur Fehlerreduktion für Anwendungssoftwarehersteller und Endnutzende. Das australische Start-up Q-CTRL und das kanadische Start-up Quantum Benchmark verfolgen zurzeit diesen Weg. **Anwendungssoftware** zur Lösung kundenspezifischer Aufgaben. Dieser Weg wird von großen Beratungsagenturen sowie hoch spezialisierten Start-ups verfolgt, darunter das britische Unternehmen Cambridge Quantum Computing, das US-amerikanische Harvard-Spinoff Zapata Computing, das französische Startup QC Ware oder das deutsche Start-up HQS Quantum Simulations. Der Zugang zur Hardware ist in der Regel Teil der angebotenen Dienstleistung und erfolgt über die Cloud-Angebote der großen Hersteller. Die Umsetzung von Anwendungssoftware wird darüber hinaus durch Universitäten, Forschungsinstitute und öffentlich geförderte Konsortien in Zusammenarbeit mit industriellen Partnern vorangetrieben.

3 ANWENDUNGSFÄLLE FÜR QUANTEN-COMPUTING

3 ANWENDUNGSFÄLLE FÜR QUANTENCOMPUTING

Ziel des folgenden Kapitels ist es, einen praxisnahen Einblick in aktuelle Anwendungsszenarien bzw. Anwendungsfälle von Quantencomputing zu gewähren. Welche Probleme werden angegangen und warum, wie werden sie angegangen und mit welchem bisherigen Erfolg? Welche Hürden existieren und wie können sie gegebenenfalls überwunden werden? Wann ist der Zeitpunkt gekommen, sich mit dem Thema Quantencomputing für das eigene Unternehmen intensiv auseinanderzusetzen? Im Rahmen des KI-Innovationswettbewerbs entwickelt PlanQK eine Plattform und ein Ökosystem für quantenunterstützte künstliche Intelligenz. Ziel ist unter anderem der Aufbau eines App-Stores für Quantensoftware[12]. Aktuell arbeiten die Partner dafür an einer Reihe von Anwendungsfällen. Für diese Studie wird ein Ausschnitt daraus im Detail betrachtet. Die Wahl fiel auf insgesamt neun Anwendungsfälle, die ein breites Anwendungsfeld und eine große Bandbreite an Problemstellungen abdecken – von der Arzneimittelproduktion im Gesundheitswesen über das Management der Energieversorgung in der Energiewirtschaft bis zur Betrugserkennung im Finanzsektor. Es zeigt sich bereits hier, dass die Landschaft für Quantencomputing-Anwendungsfälle weit und unter Umständen schwer zu überblicken ist. Um die Verortung von Anwendungsfällen in dieser Landschaft zu erleichtern, wurde im Rahmen der Studie ein Konzept für die Klassifizierung und Strukturierung von Anwendungsfällen erarbeitet, das zu Beginn vorgestellt wird. Die einzelnen Anwendungsfälle werden anschließend, diesem Konzept folgend, vorgestellt.

3.1 Klassifizierung und Strukturierung von Quantencomputing-Anwendungsfällen

Die für diese Studie betrachteten neun Anwendungsfälle decken die folgenden Anwendungsdomänen von Quantencomputing ab: Energiewirtschaft, Finanzwesen, Gesundheitswesen, IT-Sicherheit, Produktion und Logistik sowie Transport- und Verkehrswesen (siehe Abbildung 9). Für sich allein genommen, hat die Domäne eine geringe Aussagekraft in Hinblick auf die Verortung eines Anwendungsfalls in der Gesamtlandschaft. So sind sich zum Beispiel ein Anwendungsfall aus dem Gesundheitswesen und ein Anwendungsfall aus der Produktion unter Umständen inhaltlich deutlich näher als zwei Anwendungsfälle aus dem Gesundheitswesen (siehe Anwendungsfälle 2, 3, 4 und 6 in Abbildung 9). Inhaltlich bezieht sich in diesem Zusammenhang insbesondere auf die Art der Problemstellung. Grundsätzlich kann hier zwischen drei übergeordneten Problemkategorien unterschieden werden: Optimierung, chemische Simulation und Maschinelles Lernen/Künstliche Intelligenz (ML/KI). Die Problemkategorien umfassen wiederum mehrere Problemklassen, die zur näheren Spezifizierung herangezogen werden können, beispielsweise indem sie die Art eines Optimierungsproblems festlegen. Eine Klassifizierung von Quantencomputing-Anwendungsfällen entlang der drei angeführten Dimensionen (Anwendungsdomäne, Problemkategorie, Problemklasse) erleichtert ihre Verortung in der Gesamtlandschaft und somit auch die Identifizierung von ähnlich gelagerten Anwendungsfällen. Um dies zu verdeutlichen, ist die Klassifizierung und Verortung der im Rahmen dieser Studie betrachteten Anwendungsfälle in Abbildung 9 exemplarisch dargestellt. Auch ohne nähere Kenntnis der Anwendungsfälle und Detailwissen hinsichtlich der Problemklassen lassen sich bereits hilfreiche Informationen ableiten. Die beiden Anwendungsfälle aus dem Gesundheitswesen (Anwendungsfälle 2 und 6) sind in Bezug auf die Problemstellung z. B. sehr unterschiedlich gelagert, während die Anwendungsfälle aus den Bereichen IT-Sicherheit und Finanzwesen (Anwendungsfälle 7, 8, 9) sich nahestehen. Die große Mehrheit der Anwendungsfälle fällt zwar unter die Problemkategorie Optimierung, ihre jeweiligen Problemklassen sind aber sehr divers und auch Kombinationen von Problemklassen sind möglich.

Die Landschaft für Quantencomputing-Anwendungsfälle ist nicht nur weit, sondern auch lebendig, d. h. sie wird über die Zeit Veränderungen unterworfen sein. Es ist bereits jetzt absehbar, dass neue Problemkategorien und somit auch weitere Problemklassen hinzukommen werden. Die in Abbildung 9 dargestellte Landschaft ist daher als aktuelle Momentaufnahme zu verstehen, ihre Problemkategorien und wichtigsten Problemklassen werden im Folgenden kurz erläutert.

12 https://planqk.de/

Optimierung

In die Problemkategorie Optimierung fallen alle Anwendungsfälle, die sich im Kern damit beschäftigen, die optimalen Parameter eines in der Regel hochkomplexen Systems zu finden (z. B. Systeme mit vielen Eingangsgrößen und Nebenbedingungen). Es wird nach der optimalen Lösung einer Zielfunktion gesucht, z. B. zur Minimierung der Kosten oder der Zeit. Optimierungsprobleme lassen sich in vielen Fällen nicht analytisch exakt lösen. In der Praxis muss daher oft auf numerische Näherungslösungen oder heuristische Lösungen zurückgegriffen werden. Der Einsatz von quantencomputerbasierten Heuristiken soll in Zukunft die Lösungsfindung beschleunigen und ihre Qualität verbessern. Die Problemkategorie Optimierung umfasst diverse Problemklassen – von der Maschinenbelegungsplanung in der Fertigung (engl. job shop scheduling problem, JSSP) über die Schichtplanung in medizinischen Einrichtungen (engl. nurse scheduling problem, NSP), die Reisewegplanung (engl. traveling salesman problem, TSP), die Kombinatorik von Objekten (engl. combinatorial optimization problem, COP oder Rucksackproblem als Spezialfall), die Erfüllbarkeit der Aussagenlogik (engl. satisfiability problem, SAT), bis hin zur Optimierung von Strukturdesigns in Kombination mit Finite-Elemente-Methoden (FEM).

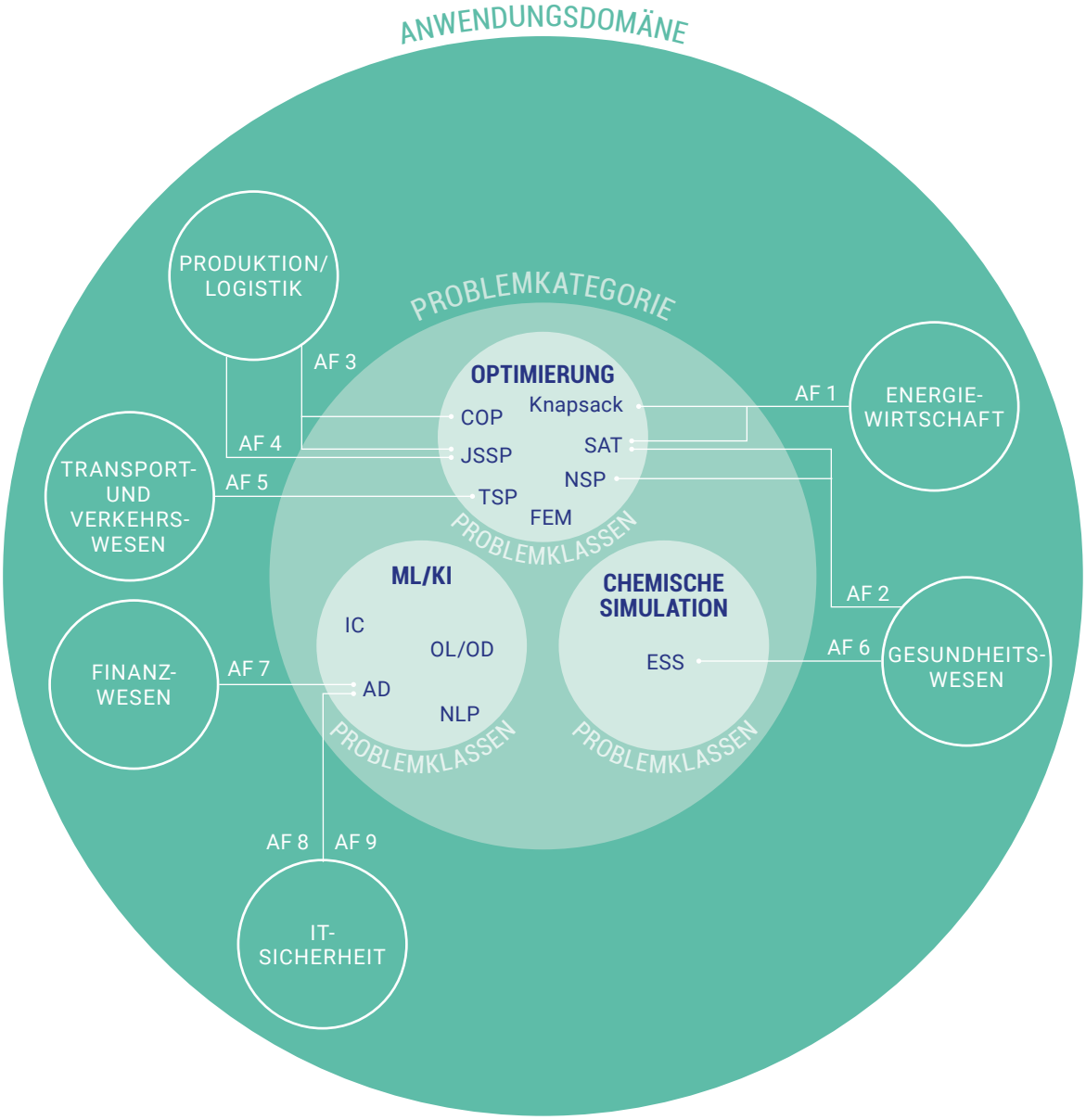
Chemische Simulation

Die Problemkategorie Chemische Simulation umfasst alle Anwendungsfälle, deren Fokus die Simulation und Bewertung von hochkomplexen chemischen Reaktionsprozessen ist (z. B. zur Entwicklung von Medikamenten oder modernen Batterietechnologien. Ähnlich wie bei den Optimierungen lassen sich hierbei Vielteilchensysteme nicht mehr analytisch lösen. Der Zugang wird dann über genäherte Modelle und numerische Rechnungen ermöglicht, welche allerdings sehr rechenintensiv sind und nur Näherungslösungen liefern. Der große Vorteil ergibt sich nun dadurch, dass ein quantenmechanisches System wie ein Molekül direkt durch ein quantenmechanisches System auf einem Quantencomputer mit all seinen typischen Eigenschaften modelliert werden kann. Die Anwendungsfälle fallen in der Regel in die Problemklasse Elektronische Struktursimulation (engl. electronic structure simulation, ESS).

Maschinelles Lernen/Künstliche Intelligenz (ML/KI)

Unter der Problemkategorie ML/KI werden alle Anwendungsfälle zusammengefasst, in denen selbstlernende Verfahren aus Erfahrung im Zentrum stehen, wie z. B. die Identifizierung von Gesetzmäßigkeiten oder Mustern anhand von Beispiel- bzw. Trainingsdatensätzen. Quantencomputing soll es in Zukunft ermöglichen, größere und diversere Datensätze zu verarbeiten und somit bessere Modelle zu trainieren. Zu den Problemklassen zählen neben Bildklassifikation (engl. image classification, IC), Objekterkennung bzw. -lokalisierung (engl. object detection/localization, OD/OL) und Computerlingusitik (engl. natural language processing, NLP) vor allem auch die Anomaliedetektion (AD).

Quantencomputing-Anwendungsfälle sind zum jetzigen Zeitpunkt in der Regel stark experimentell und in der angewandten Forschung verhaftet. Werkzeuge, die für eine erfolgreiche Überführung in Produkte wie Software und Apps essenziell sind, müssen zum Teil erst noch entwickelt werden, unter anderem Leitlinien für die Umsetzung von Referenzanwendungen und etablierte Vergleichsmaßstäbe (engl. Benchmarks). Ein erster Schritt in diese Richtung ist die Formalisierung der Beschreibung von Quantencomputing-Anwendungsfällen. Im Rahmen dieser Studie wurde eine Formalisierung in Form von strukturierten Steckbriefen entworfen, die die wichtigsten Merkmale eines Anwendungsfalles zusammenfasst: Klassifizierung (Anwendungsdomäne, Problemkategorie, Problemklasse), Handlungsbedarf, Potenzial und Nutzen, Lösungsansatz (Modell, Algorithmus, Hardware, Daten), Besonderheiten, Stand der Entwicklung, Horizont zur Marktreife. Die Unterkapitel zu den neun betrachteten Anwendungsfällen werden im Folgenden jeweils durch ihren Steckbrief eingeleitet. Die Steckbriefe sollen einen schnellen Überblick und gezielten Zugriff auf Inhalte ermöglichen sowie den Vergleich von Anwendungsfällen erleichtern.



OPTIMIERUNG

FEM	Finite-Elemente-Methode/Randwertproblem (engl. boundary value problem)
COP	Kombinatorisches Optimierungsproblem (engl. combinatorial optimization problem)
JSSP	Job Shop Scheduling Problem
Knapsack	Rucksackproblem (engl. knapsack problem)
NSP	Nurse Scheduling Problem
SAT	Erfüllbarkeitsproblem der Aussagenlogik (engl. satisfiability problem)
TSP	Problem des Handlungsreisenden (engl. traveling salesman problem)

ML/KI

AD	Anomaliedetektion
IC	Bildklassifikation (engl. image classification)
NLP	Natural Language Processing
OL/OD	Objektlokalisierung bzw. -erkennung (engl. object localization/detection)

CHEMISCHE SIMULATION

ESS	Elektronische Struktursimulation

Abbildung 9: Klassifizierung der Anwendungsfälle (AF) entlang der drei Dimensionen Anwendungsdomäne, Problemkategorie und Problemklasse.

3.2 Anwendungsfälle der Problemkategorie Optimierung

Quantencomputer sind besonders geeignet, bestimmte mathematische Probleme der Kategorie Optimierung zu lösen, dementsprechend gibt es hier besonders viele Anwendungsfälle. Dies spiegelt sich auch in der Auswahl der Anwendungsfälle für diese Studie wider: Fünf von insgesamt neun Anwendungsfällen fallen in die Kategorie Optimierung.

Die Optimierungsprobleme, für die man sich einen Vorteil verspricht, zeichnen sich durch eine hohe Berechnungskomplexität (engl. computational complexity) aus. Stark vereinfacht heißt das, dass es mit zunehmender Größe des Problems immer schwieriger wird, es zu lösen, da die erforderlichen Ressourcen (z. B. Rechenzeit, Speicherkapazität) den Rahmen der Machbarkeit oder Praktikabilität sprengen. Das Teilgebiet Komplexitätstheorie der theoretischen Informatik befasst sich ausgiebig mit der Klassifikation von Problemen entlang ihrer Komplexität. Eine detaillierte Erläuterung der zugrunde liegenden Konzepte und Mathematik übersteigt den Rahmen dieser Studie[13]. Allen Anwendungsfällen, die im Folgenden dargestellt werden, ist gemein, dass ihre Problemklassen laut Komplexitätstheorie zu denen gehören, die besonders schwer zu lösen sind (Komplexitätskategorie „nichtdeterministische Polynomialzeit" NP-schwer oder NP-vollständig[14]).

In der Anwendungsdomäne Produktion/Logistik ergeben sich klassischerweise viele Optimierungsprobleme – von der Reihenfolge, in der Teile gefertigt oder LKW ihre Ware ausliefern sollten, bis hin zur Verringerung des Materialausschusses im Verlauf der Fertigung. Es werden daher im Folgenden zwei Anwendungsfälle aus dieser Anwendungsdomäne vorgestellt. Im Zentrum beider Anwendungsfälle steht die Maschinenbelegungsplanung, einmal unter Einbezug der Anordnung von Teilen („Puzzling") in der Blechfertigung und einmal unter Einbezug eines fahrerlosen Transportsystems, kurz FTS. Darüber hinaus wird ein Anwendungsfall aus der Energiewirtschaft präsentiert, in dem eine Optimierung des Planungsprozesses für die Platzierung von dezentralen Energiespeichern für erneuerbare Energien angestrebt wird. Zwei weitere Anwendungsfälle aus den Anwendungsdomänen Gesundheitswesen und Transport/Verkehrswesen geben Einblick in die Optimierung der Personaleinsatzplanung für medizinische Einrichtungen bzw. der Passagierführung im Luftverkehr.

13 Die Stanford Encyclopedia of Philosophy bietet einen umfassenden Überblick über das Teilgebiet Komplexitätstheorie: https://plato.stanford.edu/archives/fall2021/entries/computational-complexity/, (Dean 2021).

14 Eine intuitive und leicht verständliche Erläuterung zu den Problemkategorien NP-schwer findet sich hier: https://www.quantum-bits.org/?p=1988.

3.2.1 Anwendungsfall 1: Management der zukünftigen Energieversorgung – Allokation dezentraler Speicher für erneuerbare Energien

AF1: MANAGEMENT DER ZUKÜNFTIGEN ENERGIEVERSORGUNG Allokation dezentraler Speicher für erneuerbare Energien			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Energiewirtschaft	HANDLUNGSFELD	Energiemanagement
PROBLEMKATEGORIE	Optimierung	PROBLEMKLASSE	Knapsack/SAT
HANDLUNGSBEDARF	Die sichere Kompensation von Versorgungsfluktuationen, die in komplexen Energienetzen auftreten, erfordert einen rechenintensiven Planungsprozess zur optimalen Platzierung dezentraler Energiespeicher.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Höhere Energiesicherheit, kosteneffektiver Betrieb von Energienetzen, Einhaltung der Rahmenbedingungen für die Versorgungsqualität.		
LÖSUNGSANSATZ	Zeitdiskrete Modellierung des Energienetzes als Graph, aufbauend auf bestehendem Python Paket PyPSA zur Energienetzmodellierung, Überführung in QUBO-Modell. Zielfunktion ist die Minimierung der Kosten für die Energiespeicher (Produktion, Installation, Instandhaltung) unter Einhaltung festgelegter Bedingungen (Netzkapazität, Angebot/Nachfrage, nomineller Ladezustand der Speicher).		
MODEL	PyPSA, QUBO	ALGORITHMUS	QA, QAOA
HARDWARE	Annealer (D-Wave), Gate-QC (IBM)	DATEN	Open Source Electricity Model for Germany (ELMOD-DE), PyPSA-EUR (Open Power System Data)
BESONDERHEITEN	Entwicklung eigener Python-Module zur QUBO-Transformation der PyPSA-Modelle und für maßgeschneiderte hybride Algorithmen. Bereitstellung einer Webapp zur grafischen Darstellung und Beeinflussung der Netzparameter.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung, Proof-of-Concept mit reduzierten Datensätzen, hybrider Ansatz wird verfolgt, um Randbedingungen zu implementieren		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	> 10 Jahre		
INHABER	Accenture (Philip Zupancic, Dean Emmett Smith, Tim Leonhardt)		

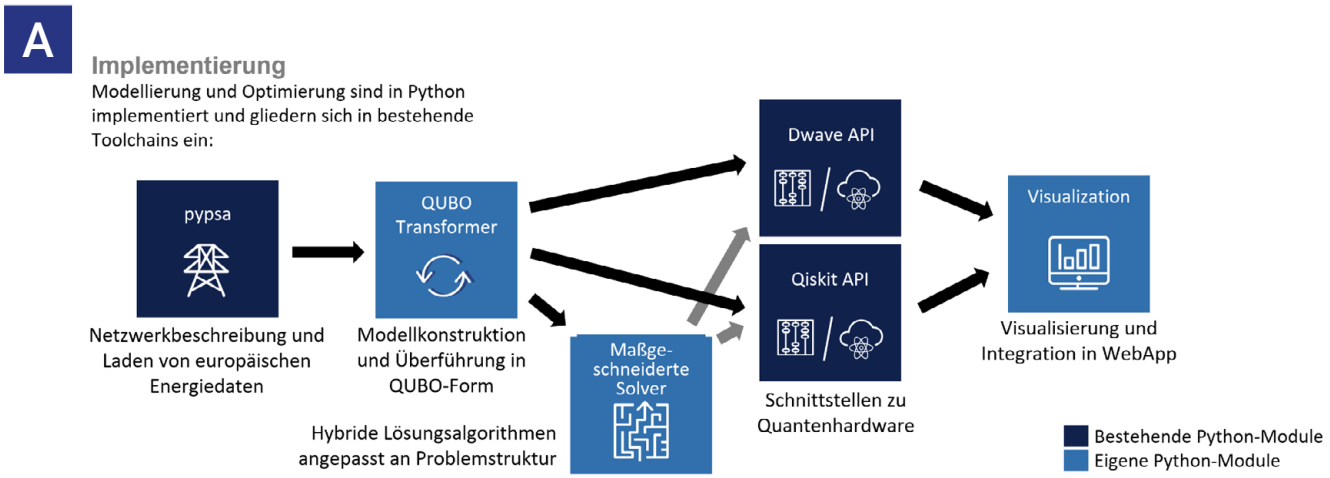
Das Stromnetzwerk Deutschlands ist etwa zwei Millionen Kilometer lang, die Leitungen reichen rund 45 Mal um die Erde. Tausende Kraftwerke, Solaranlagen und Windkrafträder speisen kontinuierlich Energie in den Kreislauf ein, um eine lückenlose Versorgung zu gewährleisten. Solaranlagen und Windkrafträder zählen zu den volatilen Energiequellen, da die Menge des Stroms in Abhängigkeit von der Tageszeit oder den Wind- und Wetterbedingungen schwankt. Der Anteil der erneuerbaren Energien am Energiemix wächst stetig und die Volatilität der Energieversorgung nimmt dementsprechend zu. Da auch der Stromverbrauch fluktuiert, kann es dazu kommen, dass zu einem Zeitpunkt wesentlich mehr oder weniger Energie erzeugt wird, als benötigt. Dies birgt das Risiko von Versorgungslücken und Netzfrequenzschwankungen. Ein Lösungsansatz sind dezentrale, das heißt lokale, Energiespeicher (engl. distributed energy storage systems, DESS), die überschüssige Energie zunächst aufnehmen und in Zeiten von Unterversorgung wieder abgeben (siehe Abbildung 9, A). Aus Sicht eines Stromnetzbetreibers ist es aus wirtschaftlichen Gründen besonders wichtig, das Aufstellen dieser Energiespeicher gut zu planen. Wie viele Speicher werden gebraucht und wo werden sie am besten platziert? Aufgrund der hohen Komplexität des Energienetzes ist der Planungsprozess sehr rechenintensiv. Klassische Computer stoßen hier schnell an ihre Grenzen. Im Anwendungsfall 1 von Accenture wird daher die Entwicklung einer Quantensoftware für diesen Planungsprozess angestrebt.

Das dem Use Case zugrundeliegende Problem ist ein typisches Optimierungsproblem mit dem Ziel, die bestmögliche bzw. effizienteste Versorgung bei möglichst geringen Kosten sicherzustellen. Zielfunktion ist daher die Minimierung der Kosten, die bei den Betreiberinnen und Betreibern für die Anschaffung, das Aufstellen und die Instandhaltung der Energiespeicher anfallen, unter Einhaltung von Randbedingungen. Für die Berechnung wird das Energienetz zu diskreten Zeitschritten als Graph modelliert (Netzwerkmodell), wobei an jedem Knoten des Graphen Energie durch Verbraucherinnen und Verbraucher abgenommen (zeitabhängige Energienachfrage), durch Generatoren eingespeist (zeitabhängiges Energieangebot) und von Energiespeichern aufgenommen bzw. abgegeben werden kann. Die Nachfrage an jedem Knoten soll zu jedem Zeitpunkt dem Energieangebot entsprechen (Randbedingung 1), die Ladung der Energiespeicher soll sich immer zwischen Null und ihrer maximalen Speicherkapazität bewegen (Randbedingung 2) und die Energietransmissionen dürfen nie das Limit der Netzleitungen überschreiten (Randbedingung 3). Perspektivisch sollen weitere Effekte wie Transmissions- und Batterieverluste, Lade-/Endladelimits von Batterien und Spannungsstabilität durch die Formulierung entsprechender Randbedingungen im Modell berücksichtigt werden.

Für die Implementierung der mathematischen Formulierung wird das Netzwerkmodell mithilfe der freien Software-Toolbox PyPSA[15] (Python for Power System Analysis) erstellt und, ebenfalls über PyPSA, die Energiedaten geladen (siehe Abbildung 10, B). Das Problem wird anschließend in die QUBO-Form überführt. Dazu wird ein im Anwendungsfall entwickeltes, eigenes Python-Modul (QUBO-Transformer) verwendet. Das Modul hat Schnittstellen zu Annealer- (D-Wave API) und Gate-basierter Quantenhardware (IBM Qiskit API), die zur Lösungsfindung genutzt werden können. Darüber hinaus werden im Anwendungsfall eigene für die Problemstruktur maßgeschneiderte Solver entwickelt, die auf hybriden Lösungsalgorithmen basieren und ebenfalls Schnittstellen zur Quantenhardware haben. Diese Konfiguration soll es in Zukunft ermöglichen, hybride Algorithmen auszuführen bzw. Lösungen unter Einsatz einer CPU sowie einer QPU zu berechnen (z. B. Lösung von Teilproblemen mit Annealer-Hardware). Es ist weiterhin vorgesehen, eine intuitive Visualisierung für die Ergebnisse zu entwickeln und diese in eine webbasierte App einzubinden. Über eine entsprechende grafische Benutzeroberfläche soll es Anwenderinnen und Anwendern zukünftig möglich sein, die Netzwerkparameter interaktiv zu steuern.

Aktuell ist noch keine Hardware vorhanden, mit der sich Probleme von wirtschaftlich relevanter Größe lösen lassen. Die Leistungsgrenze klassischer Rechner liegt derzeit bei Netzwerken mit 30–40 Knoten, mit Quantenhardware können nur Minimalprobleme angegangen werden (z. B. Netzwerk mit 5 Knoten und 10 Zeitschritten). Maßgeblich hierfür ist die Anzahl der Nebenbedingungen und ihre Form. Bei zwei der drei Randbedingungen handelt es sich um Ungleichungen, die bei der Überführung in die QUBO-Form zusätzliche Hilfsvariablen und somit für die Lösungsfindung weitere Qubits erfordern. Im Anwendungsfall werden daher insbesondere die bereits konzeptuell beschriebenen Ansätze von Misch- bzw. Hybridlösungen verfolgt, bei denen nur Teilprobleme mit Quantenhardware optimiert werden (z. B. binäre Teilprobleme).

15 https://pypsa.org/



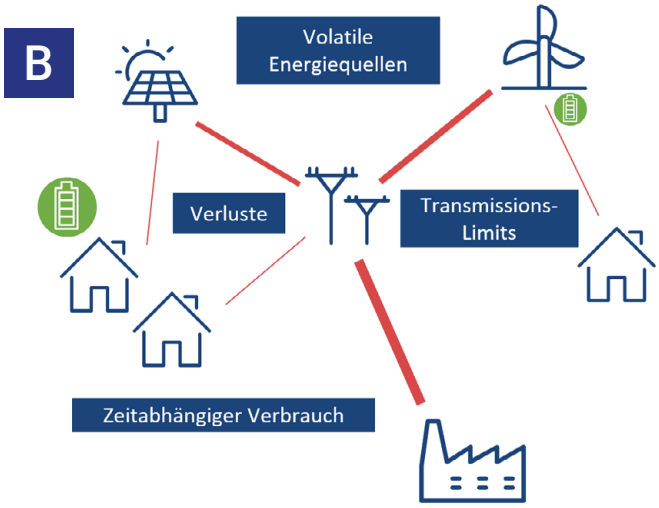


Abbildung 10: Anwendungsfall 1. (A) Schematische Darstellung zur Volatilität der Energieversorgung und Einbindung von dezentralen Energiespeichern in Grün. (B) Ablauf für die Umsetzung bzw. Implementierung des Lösungsansatzes.

3.2.2 Anwendungsfall 2: Personaleinsatzplanung im Gesundheitswesen – Dienstplanung für Krankenhäuser, Großpraxen und Pflege

AF2: PERSONALEINSATZPLANUNG IM GESUNDHEITSWESEN Dienstplanung für Krankenhäuser, Großpraxen und Pflege			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Gesundheitswesen	HANDLUNGSFELD	Personalmanagement
PROBLEMKATEGORIE	Optimierung	PROBLEMKLASSE	NSP/SAT
HANDLUNGSBEDARF	Die flexible automatische Anpassung von Dienstplänen (z. B. bei spontanen Ausfällen) ist zu rechenintensiv für klassische Computer, Lösungen können nicht in Echtzeit bereitgestellt werden.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Effizientes Management von unvorhergesehenen Abwesenheiten unter Einhaltung aller Richtlinien und individuellen Vorgaben.		
LÖSUNGSANSATZ	Formulierung des Problems und seiner Randbedingungen als QUBO-Modell		
MODEL	QUBO	ALGORITHMUS	QA, QAGA
HARDWARE	Annealer (D-Wave)	DATEN	Reale Datensätze
BESONDERHEITEN	Randbedingungen müssen zum Teil als Ungleichungen formuliert werden (z. B. maximale Anzahl aufeinanderfolgender Arbeitstage ≤ 5). Ihre Nutzung erfordert Hilfsvariablen und somit zusätzliche Qubits in einer Größenordnung, die auf der derzeitigen Hardware schwierig zu implementieren ist. Ein hybrider Ansatz wird daher in Betracht gezogen. Die Güte der gefundenen Lösungen ist aufgrund von persönlichen Präferenzen (u. a. Wochenendarbeit, Abfolge der Schichtwechsel) schwer zu quantifizieren.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung, Proof-of-Concept mit reduzierten Datensätzen, hybride Ansätze werden evaluiert.		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	> 10 Jahre		
INHABER	QAR-Lab (Christoph Roch, Dr. Thomas Gabor), Planerio GmbH (Dr. Stephanie Strobel)		

Eine erfahrene Mitarbeiterin bzw. ein erfahrener Mitarbeiter fällt aufgrund einer Erkrankung für mehrere Tage aus. Dieses Szenario ist in vielen Betrieben im Normalfall gut kompensierbar, für Dienstplanerinnen und -planer im Pflegedienst tritt damit oft bereits der Worst Case ein. Gibt es überhaupt freie Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter mit ähnlicher Qualifikation? Und wenn ja, wer kann überhaupt eingeplant werden, ohne gegen arbeitsschutzrechtliche Vorgaben zu verstoßen? Die Personalplanung für Pflegebetriebe ist aufgrund der vielen gesetzlichen Bestimmungen und des allgemein herrschenden Pflegenotstands eine besondere Herausforderung. Es gilt Schicht- und Wochenendarbeit und die damit verbundenen Zuschläge zu berücksichtigen. Ruhezeiten müssen eingehalten werden, die Bedürfnisse aller Patientinnen und Patienten müssen durch eine Zusammenstellung von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern mit vielen unterschiedlichen Qualifikationen zu jeder Zeit abgedeckt sein. Da der Arbeitskraftbedarf in der Regel nur gerade so gedeckt ist, werden Dienstpläne häufig „vorausschauend überplant", um im Fall der Fälle schnell reagieren zu können und Überstunden der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter sind unter Umständen regelmäßiger Bestandteil der Planung. Dabei sind individuelle Wünsche der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter noch gar nicht berücksichtigt. Zettel, Papier und Bleistift allein reichen in den meisten Fällen schon lange nicht mehr aus, um zu einer zulässigen und verträglichen Lösung zu kommen. Abhilfe verschafft hier speziell auf den Pflegebetrieb abgestimmte Dienstplanungssoftware, wie die der Planerio GmbH (Inhaber des Anwendungsfalls). Mithilfe von genetischen Algorithmen generiert die Planerio Software Vorschläge für optimale Dienstpläne (siehe Abbildung 11, A) und entlastet somit die Dienstplanerinnen und -planer. Für große Schichtgruppen erreicht die Rechenzeit aber schnell die Grenze zur Praxistauglichkeit. Auch eine flexible Dienstplanung in Echtzeit ist in der Regel nicht möglich. Es ist ein Problem, wenn am Montagabend eine

Krankmeldung für den nächsten Tag eingeht, die für die Planung verantwortlichen Mitarbeitenden aber bereits ihre Schicht beendet haben, daher zunächst Ersatz gefunden werden muss und sich dann die Neuberechnung des Dienstplans über ein bis zwei Stunden streckt. Im Anwendungsfall 2 strebt Planerio daher in Zusammenarbeit mit dem QAR-Lab der LMU München an, die quantencomputerbasierte Machbarkeit der automatisierten, flexiblen Dienstplanoptimierung für Pflegebetriebe zu evaluieren. Neben der Frage der Praxistauglichkeit, soll insbesondere untersucht werden, welche der durch die gesetzlichen Regelungen vorgegebenen Bedingungen überhaupt effizient implementiert werden können.

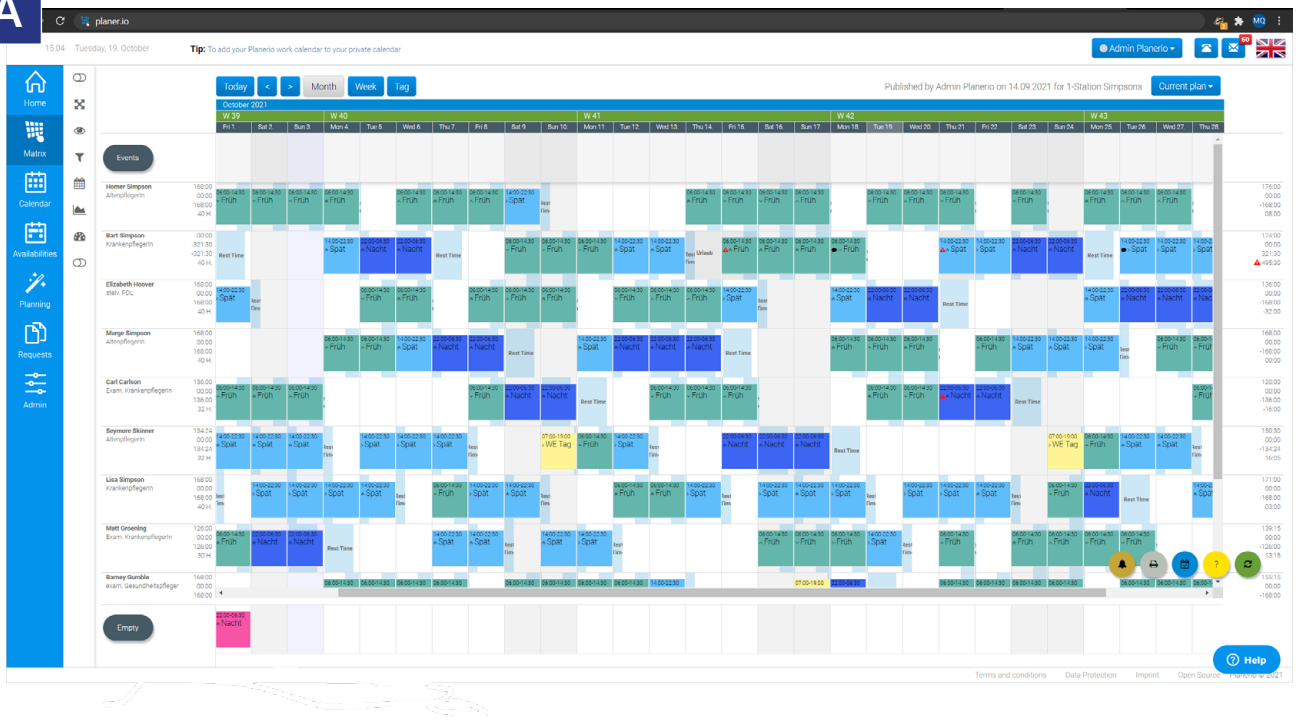
Das dem Anwendungsfall zugrundeliegende Problem ist ein spezielles Personaleinsatz-Optimierungs-Problem (NSP), das sich durch eine Vielzahl an harten und weichen Beschränkungen auszeichnet. Zielfunktion ist die Einhaltung aller harten und möglichst vieler weichen Beschränkungen (siehe mathematische Formulierung). Zu den harten Beschränkungen zählen z. B., dass alle Schichten eines Planungsszenarios genau einmal besetzt sind, dass die Qualifikationsvoraussetzungen für alle Schichten im Planungsszenario erfüllt werden und dass im Planungsszenario jedem Mitarbeitenden maximal eine Schicht pro Tag zugewiesen ist (Beschränkungen 1–3 in mathematischer Formulierung). Eine weitere harte Beschränkung ist die Einhaltung einer Ruhezeit von mindestens 11 Stunden zwischen zwei Schichten. Die weichen Beschränkungen berücksichtigen unter anderem die minimale und maximale Anzahl an Schichten für eine Mitarbeiterin bzw. einen Mitarbeiter innerhalb des Planungsszenarios, die Anzahl der aufeinanderfolgenden Schichten einer Mitarbeiterin/eines Mitarbeiters, die Belastung der Mitarbeitenden durch Wochenenddienste sowie individuelle Wünsche der Mitarbeitenden. Sie dienen vor allem dazu, eine hinreichende Work-Life-Balance sicherzustellen, indem sie verhindern, dass Mitarbeitende nur jeden zweiten Tag oder mehrere Wochenenden hintereinander arbeiten. Bei der Berücksichtigung von individuellen Wünschen spielt das Fairnessprinzip eine wichtige Rolle, die erfüllten Wünsche sollten sich gleichmäßig über alle Mitarbeitende verteilen. Neben den harten und weichen Beschränkungen fließen unter Umständen auch manuell festgelegte, fixe Schichten ein, die im Verlauf der Optimierung nicht verändert werden dürfen (z. B. für regelmäßige Teamleiterinnen-/Teamleitersitzungen oder Bürodienste im kleinen Kreis).

Für die Implementierung auf Quantenhardware müssen das Problem und seine Beschränkungen zunächst in die QUBO-Form überführt werden (siehe mathematische Formulierung für drei ausgewählte Beschränkungen)[16]. Die Berechnung des Problems erfordert aufgrund der vielen harten und weichen Beschränkungen umfangreiche Hardware-Ressourcen (hohe Anzahl an Qubits mit möglichst hoher Konnektivität der Architektur), daher fiel die Wahl der Inhaber des Anwendungsfalls auf eine Annealer-Hardware (D-Wave 2000Q).

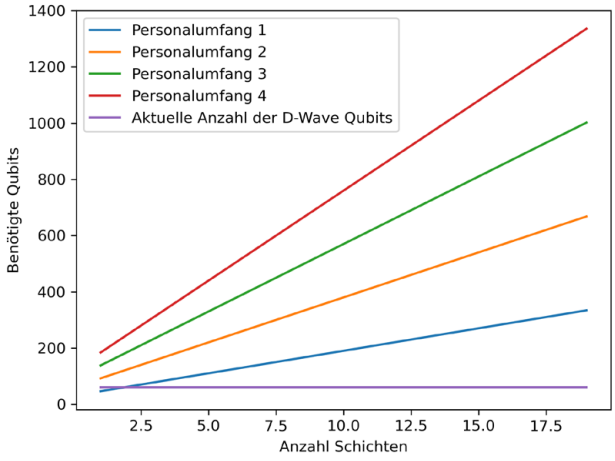
Das Dienstplan-Optimierungsproblem zeichnet sich dadurch aus, dass viele der Beschränkungen durch Ungleichungen ausgedrückt sind, wie z. B. „eine Mitarbeiterin/ein Mitarbeiter darf nur maximal fünf Tage hintereinander arbeiten“ oder „die Wochenstunden einer Mitarbeiterin/eines Mitarbeiters dürfen eine bestimmte Stundenanzahl nicht überschreiten“. Für die Formulierung dieser Ungleichungen in QUBO-Form müssen Hilfsvariablen herangezogen werden (wie exemplarisch für Beschränkung 3 im Rahmen der mathematischen Formulierung beschrieben). Da Hilfsvariablen zusätzliche Qubits erfordern, ist die Grenze der derzeitigen Machbarkeit im Hinblick auf Anzahl und Konnektivität der verfügbaren Qubits schnell überschritten (siehe Abbildung 11, B). Die eingesetzte Annealer-Hardware stellt zwar Qubits zur Verfügung, aufgrund ihrer geringen Konnektivität können aber derzeit nur 64x64 große vollvermaschte logische QUBO-Matrizen gelöst werden. Das heißt, dass für vollvermaschte Probleme wie die Dienstplanoptimierung effektiv nur 64 logische Qubits zur Verfügung stehen (diese obere Begrenzung ist in Abbildung 11, B durch die lilafarbene Linie dargestellt). Der vorgestellte Lösungsansatz ist daher aktuell nur für vergleichsweise kleine Probleminstanzen der Dienstplanoptimierung anwendbar. Um dennoch verschiedene Dienstplanungsinstanzen mit der Annealer-Hardware lösen zu können, werden die durch Ungleichungen dargestellten Beschränkungen vorerst vernachlässigt. Für die Lösung von realen, großen Probleminstanzen soll ein hybrider Ansatz verfolgt werden, z. B. unter Verwendung von quanten-assistierten genetischen Algorithmen (QAGA). Die Anwendungsfall-Inhaber des QAR-Lab haben hierfür bereits vier Beispielszenarien untersucht. Ihre Ergebnisse zeigen, dass das hybride iterative QAGA-Verfahren Verbesserungen in den Dienstplänen findet, während die reine QUBO-Variante meist in einem lokalen Optimum verhaftet bleibt. Die Lösungsfindung (Fitness) des QAGA-Verfahrens ist in allen vier betrachteten Szenarien von höherer Qualität (siehe Abbildung 11, C). Als Nächstes streben die Inhaber des Anwendungsfalls die Evaluierung verschiedener weiterer hybrider Ansätze an.

16 Die Inhaber des Anwendungsfalls verweisen in Hinblick auf die QUBO-Überführung auf folgende Hilfe: https://arxiv.org/abs/1302.5843

A



B Hardwareauslastung: Erforderliche Anzahl an Qubits als Funktion der Mitarbeitenden- und der Schichtanzahl im Planungsszenario



C Vergleich der Qualität der Lösungsfindung (Fitness) vom reinen QUBO-Ansatz und hybriden QAGA-Ansatz für vier ausgewählte Planungsszenarien (job)

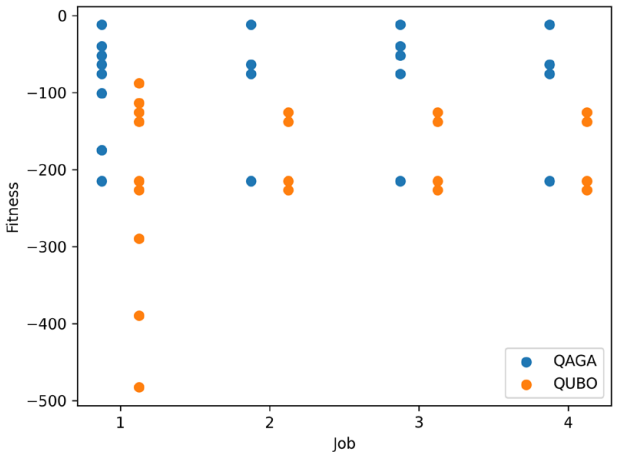


Abbildung 11: Anwendungsfall 2. (A) Screenshot der Software von Planerio für imaginäres Planungsszenario. (B) Hardwareauslastung (Qubits) des D-Wave 2000Q Rechners für den reinen QUBO-Ansatz. (C) Fitness der Lösungsfindung des reinen QUBO-Ansatzes im Vergleich zum hybriden QAGA Ansatz (für vier ausgewählte Planungsszenarien). Die Lösungsfindung hat eine Fitness von 0, wenn alle Bedingungen eingehalten bzw. erfüllt sind.

Mathematische Formulierung

ZIELFUNKTION

Minimiert werden soll die Zielfunktion, welche durch die Summe aller Randbedingungen dargestellt werden kann (z. B. Besetzung aller Schichten, Ruhezeit). Zusätzlich sollen weiche Bedingungen betrachtet werden (z. B. persönliche Schichtpräferenzen). Zur Überprüfung wird ein Quantenannealing-Algorithmus herangezogen. Gesucht wird die Lösung mit der geringsten Energie.

VARIABLEN UND INDIZES

Variablen

D: Anzahl der Tage
S: Anzahl der Schichten
E: Anzahl der Mitarbeiter
W: Anzahl der Wochen
x: Binärvariable (Boolean), die 0 oder 1 sein kann
y: Binärvariable (Hilfsvariable, Boolean), die 0 oder 1 sein kann
A: Strafwert (Penalty-Wert, hoher positiver Wert)

Indizes

e: Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter
s: Schicht
n: Anzahl aufeinanderfolgender Nachtschichten
c: Länge der Schichtkette
d: Wochentag
w: Woche

FORMULIERUNG AUSGEWÄHLTER BESCHRÄNKUNGEN IN QUBO-FORM

Beschränkung 1: Alle Schichten des Planungsszenarios sind besetzt.

$$A_1 \sum_{S} \left(\sum_{e,n,c} x_{e,s,n,c} - 1 \right)^2$$

Die Formulierung gewährleistet, dass alle Schichten besetzt sind. Es wird über alle Schichten S iteriert, wobei der quadrierte Differenzterm sicherstellt, dass eine Schicht s genau einmal besetzt wird (quadrierter Differenzterm hat einen Wert von 0). Wenn eine Schicht s unbesetzt oder mehrfach besetzt ist (quadrierter Differenzterm > 0), fließt über den Strafwert A1 ein hoher Wert in die Zielfunktion bzw. Lösungsenergie ein. Dieser hohe Wert ist für die Minimierung der Zielfunktion ungünstig und kennzeichnet eine schlechte oder invalide Lösung.

Beschränkung 2: Die Qualifikationsvoraussetzungen für die Schichten im Planungsszenario sind erfüllt.

$$A_2 \sum_{e,s,n,c} f(e,s) x_{e,s,n,c}$$

Mit f(e,s)=1, wenn Mitarbeiterin/Mitarbeiter e die Qualifikationsvoraussetzungen für Schicht s nicht erfüllt, andernfalls f(e,s)=0.

Wenn Mitarbeitende für Schichten eingeplant werden, die die Qualifikationsvoraussetzungen nicht erfüllen, fließt über den Strafwert A_2 ein hoher Wert in die Zielfunktion bzw. Lösungsenergie ein.

Beschränkung 3: Im Planungsszenario ist allen Mitarbeitenden maximal eine Schicht pro Tag zugewiesen.

$$A_3 \sum_{e,d,n,c} \left(\sum_{S} f(d,s)\, x_{e,s,n,c} - \sum_{i=0}^{1} i y_{e,d,i} \right) + \sum_{e,d} \left(\sum_{I=0}^{1} y_{e,d,i} - 1 \right)^2$$

mit f(d,s)=1, wenn eine Schicht s am Tag d zugewiesen ist, andernfalls f(d,s)=0.

Die Formulierung stellt sicher, dass allen Mitarbeitenden maximal eine Schicht pro Tag zugewiesen wird. Da es sich um eine Ungleichung handelt (Anzahl der Schichten pro Tag ≤ 1), muss für die Formulierung als QUBO eine binäre Hilfsvariable y eingeführt werden. Der zweite Term der Bedingung legt für jede Mitarbeiterin und jeden Mitarbeiter und Tag fest, ob eine oder keine Schicht zugewiesen ist. Im Idealfall ist genau eine Hilfsvariable y pro Mitarbeiterin bzw. Mitarbeiter und Tag gleich 1, da dann der erste Term der Bedingung gewährleistet, dass die Differenz der Summen gleich 0 ist (d. h. falls Mitarbeiterin/Mitarbeiter e am Tag d eine Schicht zugewiesen ist, sollte dies mit der zugehörigen Hilfsvariable y übereinstimmen). Ist Mitarbeiterin/Mitarbeiter e mehr als eine Schicht pro Tag zugewiesen, dann ist die Differenz der Summen ungleich 0 und über den Strafwert A_3 fließt ein hoher Wert in die Zielfunktion bzw. Lösungsenergie ein.

3.2.3 Anwendungsfall 3: Produktionsplanung – Schachtelung und Scheduling in der Blechfertigung

AF3: PRODUKTIONSPLANUNG Schachtelung und Scheduling in der Blechfertigung			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Produktion/Logistik	HANDLUNGSFELD	Produktionsplanung (Blechverarbeitung)
PROBLEMKATEGORIE	Optimierung	PROBLEMKLASSE	COP+JSSP
HANDLUNGSBEDARF	Eine automatisierte optimale Schachtelung beim Blechzuschnitt und der Maschinenbelegung ist in Echtzeit mit klassischen Computern nur beschränkt machbar. Insbesondere die Schachtelung erfolgt zu großen Teilen noch manuell.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Steigerung von Arbeitsproduktivität, Maschinenproduktivität und Rohmaterialnutzung. Schnelle, termingerechte Bereitstellung von vielfältigen Teilen, insb. bei geringen Losgrößen.		
LÖSUNGSANSATZ	Formulierung als QUBO-Modell. Zielfunktion enthält Terme für die Schachtelung und die Terminierung sowie Terme für Nebenbedingungen.		
MODEL	QUBO	ALGORITHMUS	QA
HARDWARE	Annealer (D-Wave)	DATEN	Beispieldatensätze
BESONDERHEITEN	Zielkonflikt zwischen optimaler Schachtelung und Scheduling. Das Scheduling unterliegt den Rahmenbedingungen der Schachtelung.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung, Proof-of-Concept		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	> 10 Jahre		
INHABER	TRUMPF GmbH & Co. KG (Frederick Struckmeier), Fraunhofer FOKUS (Dr. Armin Wolf, Dr. Cristian Grozea)		

Aufgrund des modernen Markts ist die fertigende Industrie dazu gezwungen, ihre Fertigungsabläufe, Systeme und Anlagen stetig zu optimieren – um Kunden zu halten oder neue zu gewinnen und dem zunehmenden Preisdruck standzuhalten. Die Marktanforderungen haben sich in vielen Bereichen radikal geändert, der Trend geht hin zu stark individualisierten Produkten. Wo früher große Losgrößen der immer gleichen Teile gefertigt wurden, sind heute kleine Losgrößen ganz unterschiedlicher und sich täglich ändernder Teile gefragt. Die Fertigung muss flexibel sein, um dem nachzukommen. Im Idealfall werden alle Aufträge so bearbeitet, dass die gefertigten Teile gerade zur rechten Zeit an die Kunden ausgeliefert werden können (Just-in-time-Produktion, JIT). Wie stellt man sicher, dass alle Maschinen in der Prozesskette aufeinander abgestimmt sind und immer auf die richtigen Materialien zugreifen können? Es existiert bereits Software für die automatische Maschinenbelegungsplanung. Sie stößt aber an ihre Grenzen, je mehr Maschinen und Arbeitsschritte berücksichtigt werden müssen. Praxistaugliche Lösungen sind, abhängig von den jeweils konkreten Gegebenheiten, bis zu einer Größenordnung von etwa 10 Maschinen und 10 Arbeitsschritten erzielbar. Dabei ist noch gar nicht berücksichtigt, dass die Planung oft mehr umfasst als die reine Maschinenbelegung (z. B. Lagerung und Transport von Materialien oder Minimierung des Materialverbrauchs). Im Anwendungsfall 3 von TRUMPF Werkzeugmaschinen und Fraunhofer FOKUS wird ein solches erweitertes Planungsszenario der flexiblen Blechfertigung untersucht und im Hinblick auf seine Umsetzbarkeit auf Quantencomputern evaluiert. In das Planungsszenario der Prozesskette Blech (siehe Abbildung 12) geht neben der Maschinenbelegung auch die sogenannte Schachtelung ein. Unter Schachtelung (engl. nesting) versteht man die Anordnung der einzelnen zu schneidenden Teile auf einem Blech. Im Grunde handelt es sich dabei um eine Puzzleaufgabe, mit dem Ziel, den Verschnitt von

Material zu minimieren. Es gibt bereits Software, die bei der Schachtelung unterstützt, ihre Leistungsfähigkeit ist aber eingeschränkt. Im Fall der Freiformschachtelung ist die Aufgabe z. B. mit klassischen Computern für bis zu 16 Teile optimal lösbar. Für größere, praktische Probleminstanzen (z. B. Schachtelung von mehreren Tausend Teilen) müssen heuristische Verfahren herangezogen werden, die eine gute, aber gegebenenfalls nicht optimale, Lösung finden.

TRUMPF Werkzeugmaschinen verkauft Werkzeugmaschinen für die flexible Blechfertigung. Die Kunden des Unternehmens sind insbesondere Produktionsstätten, die kleine Losgrößen und sich täglich ändernde Teile fertigen. Neben bzw. mit den Maschinen soll Kundinnen und Kunden auch eine Software angeboten werden, die sie bei der Planung ihrer Fertigungsprozesse unterstützt. Bislang gibt es noch kein TRUMPF Produkt für das beschriebene Planungsszenario (Schachtelung + Maschinenbelegung), da mit klassischen Rechnern nur bedingt Lösungen gefunden werden können, die praxistauglich sind. Das Potenzial des Quantencomputing wird in einer Verbesserung der Lösungsqualität, in einer Senkung der Lösungszeit und in der Möglichkeit gesehen, immer komplexere Probleminstanzen angehen zu können.

Das dem Anwendungsfall zugrundeliegende Problem ist ein Maschinenbelegung-Schachtelung-Problem (engl. scheduling nesting problem), es handelt sich somit um ein erweitertes JSSP. Ziel ist es, die Prozesskette Blech zu optimieren. In der Prozesskette Blech wird zunächst das Rohblech durch ein trennendes Verfahren in einzelne Teile zerlegt. Damit der Verschnitt möglichst gering ist, müssen die Teile zuvor so geometrisch angeordnet werden, dass möglichst viel Fläche des Blechs belegt ist (Schachtelung-Planung). Natürlich können dabei nur Teile auf einem Blech zusammengefasst werden, die die gleichen Materialanforderungen haben (z. B. Art und Dicke des Materials). Nach dem Zuschnitt werden die Teile individuell weiterverarbeitet, je nach Auftrag folgen Schritte wie Entgraten, Biegen, Schweißen und Verschrauben. Die Prozesskette schließt in der Regel mit einer Oberflächenbehandlung wie Lackieren oder Pulverbeschichten. Ein typischer Auftrag besteht aus mehreren Teilen und hat ein Fertigstellungsdatum, das für alle Teile gilt. Das heißt, wenn nur ein Teil nicht rechtzeitig fertiggestellt ist, gilt der gesamte Auftrag als verspätet. Damit die Summe der Verspätungen aller Aufträge möglichst gering ist, müssen die Teile bestimmten Maschinen zu bestimmten Zeitpunkten zugewiesen werden (Maschinenbelegung-Planung, JSSP). Obwohl diese Darstellung des Problems sich nur auf das Wesentliche konzentriert, zeigt sich bereits hier, dass ein Zielkonflikt zwischen Schachtelung und Maschinenbelegung besteht. Möglichst viele Teile auf einem Blech unterzubringen (Schachtelung) geht damit einher, dass das Blech gegebenenfalls später bearbeitet wird bzw. dass die Teile die Schneidemaschine erst zu einem späteren Zeitpunkt verlassen. Es besteht somit die Gefahr, dass die in der Prozesskette folgenden Maschinen auf Teile warten müssen und sich ungenutzt im Leerlauf befinden. Die Planung der Maschinenbelegung unterliegt also den Rahmenbedingungen der Schachtelung-Planung. Ein anderes Extrem ergibt sich, wenn man der Maschinenbelegung die vollen Freiheitsgrade gibt. In diesem Fall werden nur sehr wenige bis einzelne Teile aus einem Blech geschnitten und der Verschnitt ist extrem hoch. Ziel der Optimierung ist es daher, eine möglichst enge Schachtelung zu planen, die eine effiziente Maschinenbelegung für die weitere Prozesskette zulässt. Die mathematische Formulierung des Problems ist aufgrund der vielen Rahmenbedingungen und der beschriebenen Abhängigkeiten von Schachtelung und Maschinenbelegung komplex und unter Umständen eine Herausforderung. Die Inhaber des Anwendungsfalls haben eine Formulierung für eine Probleminstanz erarbeitet, die eine Prozesskette von Schneide- und Biegemaschinen berücksichtigt (siehe Abbildung 12). Für die Schachtelung wird nicht die Geometrie bzw. die exakte geometrische Anordnung der Teile beachtet, sondern nur ihre jeweiligen Flächen. Die Zielfunktion setzt sich aus drei Teilen zusammen: Der Summe der notwendigen Bleche (Maß für Schachtelung), der Summe der Verspätungen (engl. tardiness, Maß für Scheduling) und dreizehn Termen für Nebenbedingungen (u. a. jedes Teil ist genau einem Blech zugewiesen, jedem Blech ist genau eine Schneidemaschine sowie ein Startzeitpunkt für das Schneiden zugewiesen oder das Biegen eines Teils kann erst erfolgen, nachdem das gesamte Blech, dem es zugeordnet war, geschnitten ist). Im Verlauf der Optimierung wird die gewichtete Summe aller Zielfunktionsterme minimiert.

Für die Implementierung auf Quantenhardware muss das Problem zunächst als QUBO-Problem formuliert werden, dies wurde von den Anwendungsfall-Partnern von Fraunhofer FOKUS umgesetzt. Die Berechnung des Problems erfordert aufgrund der vielen Nebenbedingungen umfangreiche Hardware-Ressourcen (hohe Anzahl an Qubits); daher fiel die Wahl der Inhaber des Anwendungsfalls auf eine Annealer-Hardware (D-Wave

Advantage System, 5000 Qubit)[17]. Eine Herausforderung bei der Implementierung war, dass der Literatur- bzw. Forschungsstand zur Umsetzung von kombinatorischen Optimierungsproblemen (u. a. Schachtelung) auf Quantenhardware noch relativ gering ist.

17 Für die Implementierung haben sich die Use Case Inhaberinnen und Inhaber an einer Publikation aus dem Jahr 2016 orientiert, auf die an dieser Stelle für detailliertere Informationen verwiesen wird: https://arxiv.org/abs/1506.08479

Die Inhaber des Anwendungsfalls gehen derzeit davon aus, dass mit einem echten Quantenvorteil für praxisrelevante Probleminstanzen erst zu rechnen ist, wenn Annealer-Hardware mit 30.000–100.000 Qubits zur Verfügung steht. Sie betonen aber, dass der theoretische Nachweis des Quantenvorteils für die Industrie eine untergeordnete Rolle spielt. Selbst kleine Verbesserungen, z. B. in Hinblick auf die Lösungsqualität oder die Rechenlaufzeit, können bereits wirtschaftlich interessant sein.

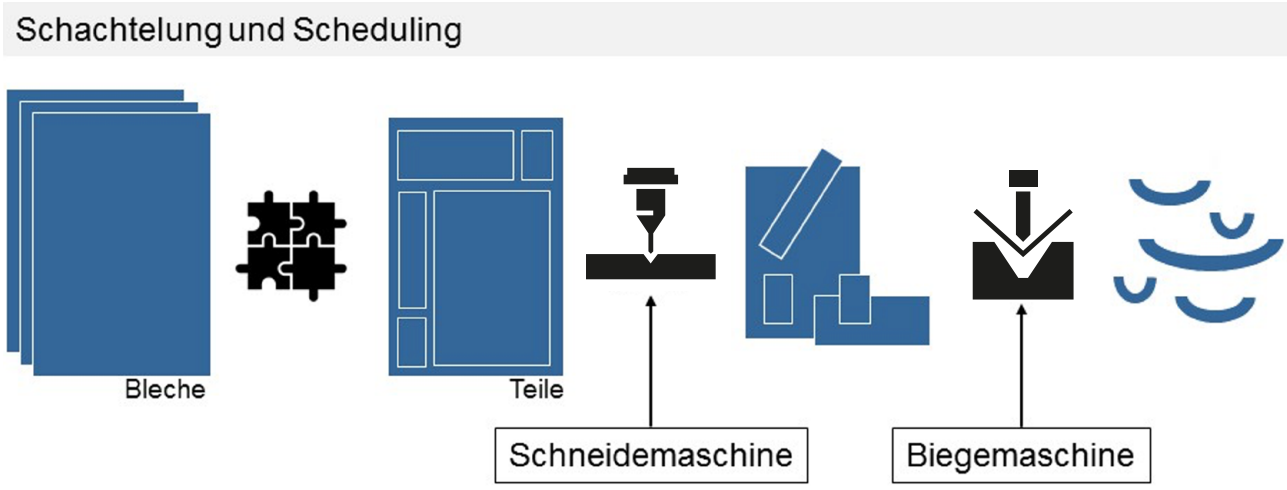


Abbildung 12: Anwendungsfall 3. Schematische Darstellung von Schachtelung und Scheduling in der Blechverarbeitung (Fallbeispiel, das für die mathematische Formulierung betrachtet wird).

3.2.4 Anwendungsfall 4: Produktionsplanung – Flexible Maschinenbelegung unter Einbezug fahrerloser Transportsysteme (FTS)

AF4: PRODUKTIONSPLANUNG Flexible Maschinenbelegung unter Einbezug fahrerloser Transportsysteme (FTS)			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Produktion/Logistik	HANDLUNGSFELD	Produktionsplanung
PROBLEMKATEGORIE	Optimierung	PROBLEMKLASSE	JSSP
HANDLUNGSBEDARF	Die Maschinenbelegung-Optimierung in der Produktion ist rechenintensiv. Die Grenze der Lösbarkeit wird gegebenenfalls bereits erreicht, wenn nur wenige Maschinen und Arbeitsschritten berücksichtigt werden müssen. Die Berücksichtigung des Transports der zu fertigenden Teile von Maschine zu Maschine (z. B. durch ein fahrerloses Transportsystem, FTS) erhöht zusätzlich die Komplexität des Problems.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Effizientere und effektivere Produktionsplanung und -kontrolle, Steigerung der Maschinenproduktivität		
LÖSUNGSANSATZ	Formulierung eines Minimalproblems als QUBO-Modell mit Penalisierungstermen für Aktionen, die nicht parallel ausgeführt werden dürfen (forbidden sets). Zielfunktion ist die Minimierung der Gesamtfertigungszeit, einschließlich der Fahrzeit des FTS.		
MODEL	QUBO	ALGORITHMUS	QA
HARDWARE	Annealer (D-Wave Leap 2) Digital Annealer (Fujitsu DAU)	DATEN	Beispieldatensatz für Minimalproblem
BESONDERHEITEN	Für die Lösung eines Minimalproblems mit vier Jobs, vier Maschinen und zwei FTS sind bereits mehr als 5.000 Qubits erforderlich. Die Lösungen, die für das Minimalproblem gefunden werden, sind mit denen klassischer Verfahren vergleichbar. Praxisrelevante Problemgrößen können aufgrund der Limitierung der Hardware noch nicht adressiert werden.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung, Proof-of-Concept für Minimalproblem		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	> 10 Jahre		
INHABER	Telekom Innovation Laboratories (Wolfgang Steigerwald), Fraunhofer FOKUS (Dr. Armin Wolf, Dr. Cristian Grozea)		

Im Zentrum des Anwendungsfalls 4 der Telekom Innovation Laboratories (T-Labs) und von Fraunhofer FOKUS steht die Optimierung von Fertigungsprozessen in der Industrie. Die Relevanz dieses Themas für die fertigende Industrie sowie der Hintergrund zur Maschinenbelegungsplanung werden bereits im Rahmen von Anwendungsfall 3 näher erläutert, die Autorinnen und Autoren verweisen an dieser Stelle darauf, um Dopplungen zu vermeiden. Tatsächlich sind die Anwendungsfälle 3 und 4 auf den ersten Blick sehr ähnlich gelagert, da es in beiden Fällen um ein erweitertes Maschinenbelegungs-Problem (JSSP) geht. Sie unterscheiden sich aber in Hinblick auf die Art der Erweiterung. Im Gegensatz zum Anwendungsfall 3, in dem zusätzlich zum JSSP ein Schachtelungsproblem betrachtet wird, schließt das Planungsszenario von Anwendungsfall 4 den Transport der Teile von Maschine zu Maschine durch ein fahrerloses Transportfahrzeug (FTS) ein. Für die cloudbasierte Steuerung von FTS werden in Betrieben und Produktionsstätten zunehmend 5G-Campusnetze eingesetzt. Neben dem Campus-Netz selbst, sollen den Kunden in Zukunft auch Software-Produkte angeboten werden, die sie bei der Planung und Steuerung von Prozessabläufen unterstützt. Der vorliegende Anwendungsfall stellt einen Ansatz dar, dies umzusetzen. Die Ergebnisse des Anwendungsfalls sollen in die T-Systems Demonstratorumgebung integriert werden, darüber hinaus wird eine Einbindung in die 5G-Modellfabrik in Aachen angestrebt.

Im Anwendungsfall wird ein JSSP unter Einbezug eines FTS evaluiert. JSSP gelten als besonders „hartnäckig", wenn es darum geht, optimale Lösungen zu finden (Venturelli et al. 2016). Selbst relativ kleine Probleminstanzen, die kein FTS berücksichtigen, stellen für die besten aktuell verfügbaren klassischen Solver (IBM CPLEX, Gurobi Optimizer, SCIP) unter Umständen bereits eine Herausforderung dar (siehe Anwendungsfall 3). Im erweiterten Szenario der Anwendungsfall-Inhaber setzt sich die Größe der Probleminstanz aus der Anzahl der Maschinen, der Anzahl der Jobs, der Anzahl der Arbeitsschritte (engl. tasks) sowie der Anzahl der FTS zusammen (z. B. 4 x 4 x 24 x 1). Abbildung 13 zeigt ein Beispielszenario für vier Maschinen und ein FTS. Jede Maschine besitzt eine spezifische Funktionalität, die anderen Maschinen können den von ihr ausgeführten Arbeitsschritt nicht übernehmen. Neben den typischen Nebenbedingungen von JSSP müssen in diesem Szenario zusätzliche Nebenbedingungen für das FTS berücksichtigt werden[18].

Zu den typischen Nebenbedingungen von JSSP zählt z. B., dass jedes Teil zu jedem Zeitpunkt nur einer Maschine zugewiesen sein kann, dass Arbeitsschritte nicht unterbrochen werden können und dass die Reihenfolge der Bearbeitungsschritte eines Jobs unveränderlich festgelegt ist. Die Nebenbedingungen für das FTS sind z. B., dass es maximal ein Teil pro Transportschritt tragen kann und dass die Zeiten, die es für das Zurücklegen der jeweiligen Transportwege benötigt, von vornherein festgelegt sind. Dies gilt sowohl für die Transportwege zwischen den einzelnen Maschinen als auch die Transportwege zwischen den Maschinen und dem Ausgangs- bzw. Bestimmungsort – wie Rohmateriallager oder Fertigteillager. Ziel der Optimierung ist die Minimierung der Gesamtzeit, die zum Abarbeiten aller Jobs erforderlich ist, unter Einhaltung aller Nebenbedingungen. Diese Gesamtzeit beinhaltet auch die Fahrzeiten des FTS. Die Lösungen von JSSP werden in der Regel als Gantt-Chart visualisiert. Je mehr Lücken das Gantt-Chart einer vorgeschlagenen Lösung aufweist, desto geringer ist ihre Lösungsqualität, da Lücken ungewünschten Maschinenstillstand implizieren.

Für die Implementierung auf Quantenhardware muss das Problem zunächst als QUBO-Problem formuliert werden. Dies wurde vom Anwendungsfall-Partner Fraunhofer FOKUS umgesetzt. Neben den Aktionen der Maschinen muss das QUBO-Modell auch die Bewegungen der FTS berücksichtigen. Zusätzlich zu den Standardoperationen der Maschinen wurden daher Operationen für die Bewegung der FTS eingeführt (engl. walking operations). Diese Operationen werden zwischen allen Paaren direkt aufeinanderfolgender Standardoperationen eines Jobs hinzugefügt. Darüber hinaus wurden sogenannte Vorgängeroperationen definiert. Die FTS-Vorgängeroperation umfasst die Bewegungen der FTS, die direkt vor einer Standardoperation ausgeführt werden (engl. predecessor walking operation). Die Standard-Vorgängeroperation gibt dagegen die Standardoperation an, die einer FTS-Operation direkt vorhergeht (engl. predecessor standard operation). Die QUBO-Überführung wird mit zunehmender Größe und Komplexität des zugrundeliegenden Problems extrem kompliziert, die Inhaber des Anwendungsfalls raten daher, gegebenenfalls Expert:innen und Experten hinzuzuziehen.

Aufgrund der Beschränkungen in Hinblick auf die aktuell verfügbare Quantenhardware können bisher nur kleine Probleminstanzen evaluiert werden. Für die Lösung eines Minimalproblems mit vier Jobs, vier Maschinen und zwei FTS (4x4x24x2) sind bereits 5.525 Qubits erforderlich, die Berechnungen können daher noch nicht

18 Die Nebenbedingungen, die Formulierung des Problems als QUBO-Problem sowie erste Ergebnisse werden im Rahmen einer Fachpublikation der Anwendungsfall-Inhaberinnen und -Inhaber ausführlich dargestellt: https://arxiv.org/pdf/2109.04830.pdf

auf einem gatterbasierten Quantencomputer ausgeführt werden. Der Vergleich verschiedener anderer Plattformen zeigt jedoch, dass sowohl Quantenannealer (D-Wave Leap 2) als auch quanteninspirierte Ansätze (Fujitsu DAU Digital Annealer) für das beschriebene Minimalproblem Lösungen finden, die mit denen klassischer Methoden vergleichbar sind (u. a. Tabu-Suche[19]). Mit zunehmender Komplexität der Probleminstanz nimmt die Qualität der Lösungsfindung der quantenbasierten Ansätze aber ab, klassische Methoden zeigen dann eine deutlich bessere Leistung. Die Inhaber des Anwendungsfalls führen dies unter anderem auf die Fehleranfälligkeit und die limitierte Kohärenzzeit der Qubits der aktuell verfügbaren Quantenhardware zurück. Praxisrelevante Problemgrößen können voraussichtlich erst hinreichend evaluiert werden, wenn Annealer-Hardware mit etwa 50.000 Qubits zur Verfügung steht.

19 Iteratives, metaheuristisches Verfahren zur näherungsweisen Lösung komplexer Optimierungsprobleme.

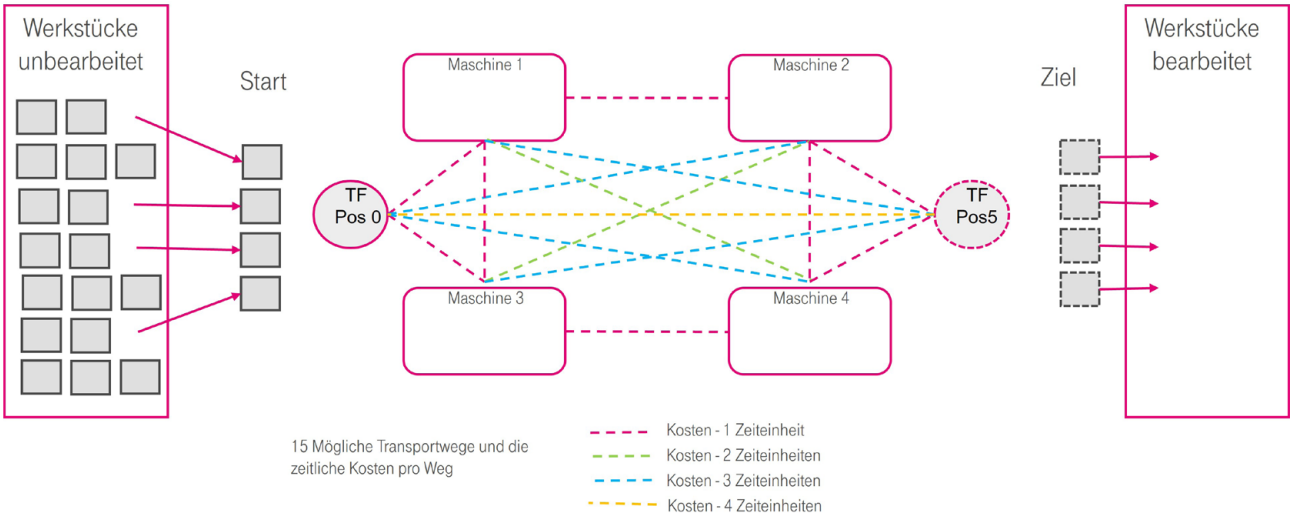


Abbildung 13: Anwendungsfall 4. Beispielszenario für das erweiterte Job Shop Scheduling Problem mit vier Maschinen und einem FTS. Die gestrichelten Linien kennzeichnen die Transportwege des FTS, die Linienfarbe gibt Auskunft über die Zeit, die das FTS für das Zurücklegen des Wegs benötigt.

3.2.5 Anwendungsfall 5: Management des Flugbetriebs – Passagierführung von Fluggesellschaften

AF5: MANAGEMENT DES FLUGBETRIEBS Passagierführung von Fluggesellschaften			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Verkehrs- und Transportwesen	HANDLUNGSFELD	Passagierführung im Luftverkehr
PROBLEMKATEGORIE	Optimierung	PROBLEMKLASSE	TSP/SAT/COP
HANDLUNGSBEDARF	Für die Planung der Passagierführung müssen viele Akteure und Faktoren berücksichtigt werden (u. a. Fluglinien, Reisegruppen, Anschlussflüge). Der Problemraum ist daher sehr groß, eine holistische vollautomatische Optimierung ist bislang nicht möglich.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Flexible Anpassungsfähigkeit unter Einhaltung aller Richtlinien und individuellen Vorgaben, Kostensenkung und höhere Kundenzufriedenheit		
LÖSUNGSANSATZ	Formulierung eines ersten Teilproblems (COP) und seiner Randbedingungen als QUBO-Modell		
MODEL	QUBO	ALGORITHMUS	QAOA
HARDWARE	Quantum Simulator, Gate-QC	DATEN	Beispieldatensätze für Minimalprobleme
BESONDERHEITEN	Die aktuell verfügbaren Quantencomputer erlauben nur die Untersuchung von Minimalproblemen, die Daten müssen dafür stark vereinfacht werden.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung, Proof-of-Concept mit reduzierten Daten		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	> 10 Jahre		
INHABER	FCE Frankfurt Consulting Engineers GmbH (Fabian Klos), IBM (Jan-Rainer Lahmann, Lucine Madadi), Lufthansa-Gruppe (Dr. Nima Barraci), DFS Deutsche Flugsicherung GmbH (Oliver Haßa), DHBW Stuttgart (Prof. Dr. Carmen Winter, Lucine Madadi)		

Jeden Tag sorgen Fluggesellschaften dafür, dass zivile Passagiere von A nach B fliegen können. Im Jahr 2019 haben allein die Airlines der Lufthansa Group mehr als 145 Millionen Fluggäste an Bord ihrer Flugzeuge begrüßt (Lufthansa Group 2020). Die Deutsche Flugsicherung (DFS) verzeichnete für denselben Zeitraum insgesamt mehr als 3 Millionen zivile Flüge nur für den deutschen Luftraum (DFS Deutsche Flugsicherung) (siehe Abbildung 14, A). Dieses Volumen an Passagieren und Flügen kann nur durch gute und flexible Planung und Koordination bewältigt werden. Flexible Planung ist immer dann besonders erforderlich, wenn sich Flüge verspäten oder ganz ausfallen. Für alle betroffenen Passagiere müssen neue Flüge gefunden werden, um sie möglichst termingerecht an ihr Ziel zu bringen. Familien und Reisegruppen sollten als Folge dieser Umbuchungen nicht auseinandergerissen werden, es gilt Reisende zu priorisieren, die einen Anschlussflug dringend erreichen müssen und bei all dem sollen auch noch die Kosten für die Fluggesellschaft möglichst geringgehalten werden. Die Fluggesellschaften setzen Software ein, die sie bei der flexiblen Planung unterstützt. Dabei handelt es sich in der Regel um Decision Support Systeme (DSS), übersetzt: Entscheidungsunterstützungssysteme. Die Leistungsfähigkeit dieser DSS ist aktuell noch eingeschränkt. Sie schlagen mehrere nicht-optimale Lösungen vor und es liegt dann an den Bedienerinnen und Bedienern der Software, eine Lösung auszuwählen und manuell zu verfeinern. Von einer Vollautomatisierung ist der Prozess also noch weit entfernt. Die Lösungsfindung der DSS ist darüber hinaus nicht robust. Für sehr artverwandte Problemstellungen geben sie unter Umständen sehr unterschiedliche Lösungen aus. Dies liegt vor allem daran, dass sie keine holistische Optimierung durchführen, sondern nur Teilaspekte berücksichtigen. Wenn für die Optimierung im Fall A z. B. die zusätzliche Bodenzeit nicht berücksichtigt wurde, im Fall B dagegen der Treibstoffverbrauch, dann unter-

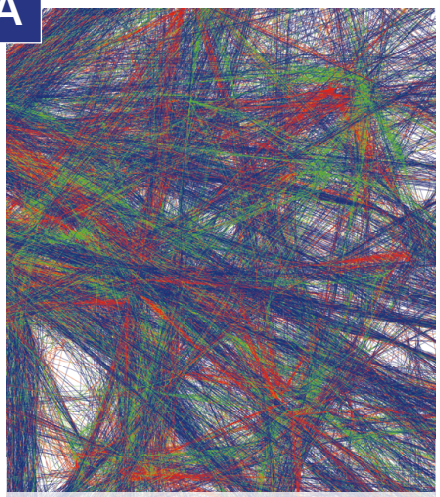
scheiden sich die ausgegebenen Lösungen zum Teil erheblich. Eine holistische Optimierung ist mit klassischen Computern derzeit nicht machbar. Die Rechenzeiten werden schnell so lang, dass sie praxisuntauglich sind. Weder die Reisenden noch die Fluggesellschaft haben die Zeit, mehrere Tage auf die Berechnung einer Lösung zu warten. Im Anwendungsfall 5 wollen Lufthansa, DFS, IBM, Frankfurt Consulting Engineers (FCE) und die Duale Hochschule Baden-Württemberg (DHBW) daher das Potenzial von Quantencomputing für die flexible Planung im Luftverkehr evaluieren. Grundlage dafür sind unter anderem theoretische Vorarbeiten des Inhabers FCE, die im Rahmen des Anwendungsfalls 5 auf reale Anwendungsfälle übertragen werden sollen (Jaroszewski et al. 2020). Zunächst konzentrieren sich die Inhaber des Anwendungsfalls dabei auf die Teilprobleme Passagierführungsplanung (engl. passenger routing problem) und Schlechtwetter-Umfliegungsgsplanung. Vorgestellt werden im Folgenden die Arbeiten zur Passagierführungsplanung.

Im Anwendungsfall 5 wird zunächst eine vereinfachte Probleminstanz der Passagierführungsplanung betrachtet. Ziel für diese Instanz ist es, einer Anzahl von Reisenden jeweils eine Flugroute zu empfehlen, die sie an ihr Ziel bringt, ohne dass dabei die Kapazität der einzelnen Flüge überschritten wird. Das heißt, einzelne Flüge dürfen nicht überbucht werden (Nebenbedingung). Es handelt sich also um ein kombinatorisches Optimierungsproblem (COP); wird die Kapazität einzelner Flüge überschritten, fließt dies durch einen Strafterm in die Zielfunktion ein.

Für die Implementierung auf Quantenhardware wurde das Problem in die QUBO-Form überführt und als Polynom dargestellt. Zur Berechnung werden noch keine realen Daten, sondern Beispieldatensätze für ein Minimalproblem verwendet, das nur eine Fluggesellschaft berücksichtigt. Selbst das Minimalproblem erfordert aber Hardwareressourcen, die aktuell noch nicht verfügbar sind. Eine weitere Vereinfachung der Daten ist daher notwendig. Jede mögliche Zuweisung von einem Reisenden zu einem Flug erfordert ein Qubit. Falls die Anzahl der möglichen Flüge für alle Reisenden gleich ist, entspricht die Anzahl der insgesamt erforderlichen Qubits der Summe aller insgesamt möglichen Flüge. Durch entsprechende Vorverarbeitung kann die Anzahl aller Flüge auf die jeweiligen Reisenden abgestimmt und damit insgesamt verringert werden. Die Inhaber des Anwendungsfalls streben an, sowohl eine Annealer- als auch eine Gate-basierte Hardware einzusetzen. Für die Berechnung auf einem Gate-basierten Quantencomputer wird ein QAOA-Algorithmus verwendet. Wie dieser auf einem IBM-Quantencomputer ausgeführt werden kann, ist anhand eines „Codeschnipsel" in Abbildung 14, B dargestellt.

Die Inhaber des Anwendungsfalls sehen insgesamt eine große Herausforderung im Hinblick auf die Daten. Szenarien der realen Welt involvieren viele Handelnde, darunter verschiedene Fluggesellschaften und die Flugsicherung. Da das Teilen von Daten aufgrund von Sicherheitsbedenken oder aus Unternehmensgründen oft eingeschränkt ist, ist es fraglich, ob Realdatensätze zusammengestellt werden können. Eine weitere wichtige Frage ist die der Datenvorverarbeitung für Quantencomputer, z. B., in welche Strukturen Daten verpackt werden sollten, um auf sie bestmöglich zugreifen zu können. Die Inhaber des Anwendungsfalls erwarten, dass Quantencomputer ähnlich wie die klassischen Rechner ab einem gewissen Zeitpunkt schnell skalieren werden. Ab diesem Zeitpunkt wird es dann auch schnell möglich sein, große Probleminstanzen bzw. Szenarien aus der realen Welt zu untersuchen.

A



Verkehrsreichster Tag über Deutschland am 4.7.2019

DFS Deutsche Flugsicherung

B

```
# lade IBM Account
provider = IBMQ.load_account()


# wähle 5-Qubit Quantencomputer
backend_quantum = provider.get_backend('ibmq_london')
```

```
# führe QAOA aus
qaoa = QAOA(quantum_instance = QuantumInstance(backend_quantum))
optimizer_qaoa = MinimumEigenOptimizer(qaoa)
result_qaoa = optimizer_qaoa.solve(cost_function)
print("QAOA on quantum computer: ", result_qaoa2)
```

Abbildung 14: Anwendungsfall 5. (A) Flugverkehr hoher Dichte im deutschen Luftraum (Quelle: DFS Deutsche Flugsicherung GmbH). (B) Ausführung des QAOA-Algorithmus zur Lösung einer polynomischen Zielfunktion (cost_function) auf einem IBM Quantencomputer (Programmiercode in Python).

3.3 Anwendungsfälle der Problemkategorie „Chemische Simulation“

Chemische oder biologische Prozesse im Detail zu verstehen, ist von hoher Relevanz für die Entwicklung von neuen Medikamenten, Materialien, effizienteren Batterien oder Brennstoffzellen. Dieses Verständnis kann aus praktischen Gründen nicht allein am Labortisch oder im Versuchsreaktor gewonnen werden, da es z. B. unmöglich ist, tausende von Verbindungen zu synthetisieren, zu testen und die Reaktionsbedingungen zu optimieren. In vielen Entwicklungsbereichen wird daher Software zur Simulation von Prozessen am Computer eingesetzt. Idealerweise lässt sich anhand einer Simulation verfolgen, wie ein Prozess in einer kontrollierten Umgebung abläuft. Dazu werden Modelle und Konzepte herangezogen, die bekannte Regeln und Phänomene beschreiben. Theoretische Grundlage hierfür ist die Betrachtung der zeitlichen Entwicklung des sogenannten Hamiltonian bzw. Hamiltonoperators. Dieser beschreibt mathematisch das zu betrachtende physikalische System. Die zeitliche Entwicklung des Hamiltonians wird durch die Schrödingergleichung beschrieben. Mit deren Hilfe können chemische Reaktionen unter gegebenen Randbedingungen berechnet werden. Insbesondere die Simulation der elektronischen Struktur ist hier für den Ablauf chemischer Reaktionen von Interesse (elektronische Strukturssimulation). Allerdings ist schon für kleine Mehrteilchensysteme eine analytische Lösung nicht mehr möglich. Durch verschiedene, bereits frühzeitig beschriebene Näherungsverfahren und die Verfügbarkeit der hierfür nötigen Rechenleistung, gelang es Mitte der 1970er Jahre erstmals, größere molekulare Systeme zu simulieren und Prozesse wie die Faltung einfacher Proteine zu modellieren (Jha 2013). Klassische Computer stoßen jedoch bis heute noch an eine Grenze, wenn es darum geht, exakte Simulationen für Moleküle mit komplexem Elektronenverhalten auszuführen. Zum Beispiel müssen für anorganische Verbindungen in der Regel vereinfachende Näherungen herangezogen werden, damit sie überhaupt handhabbar sind. Viele dringende Probleme, wie die Identifizierung von neuen Materialien für Solarzellen, die Optimierung der Effizienz von Batterien oder die schnelle und zielgerichtete Bereitstellung neuer Medikamente, können daher bisher nur unzureichend angegangen werden. Als prominentestes Beispiel wird hier oft das Haber-Bosch-Verfahren genannt, welches zur Synthese von Ammoniak genutzt wird. Ammoniak wird in erster Linie für Düngemittel benötigt und dessen Synthese deckt geschätzt 1–2 % des jährlichen weltweiten Energiebedarfs. Eine Optimierung des Verfahrens würde dementsprechend signifikant zur Verringerung von Treibhausgasemissionen führen. Quantencomputer sollen hier neue Lösungsmöglichkeiten eröffnen.

Im Rahmen dieser Studie wird ein Anwendungsfall der Problemkategorie Chemische Simulation aus dem Bereich Arzneimittelentwicklung vorgestellt (Anwendungsfall 6). Im Zentrum des zugrundeliegenden Problems steht eine elektronische Struktursimulation (Problemklasse), zur Lösung der Simulation werden KI-Modelle herangezogen.

3.3.1 Anwendungsfall 6: Arzneimittelproduktion (Theophyllin) – Energieeffiziente Herstellung des Vorprodukts (Methylamin)

AF6: ARZNEIMITTELPRODUKTION (THEOPHYLLIN) Energieeffiziente Herstellung des Vorprodukts Methylamin			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Gesundheitswesen	HANDLUNGSFELD	Arzneimittelproduktion
PROBLEMKATEGORIE	Chemische Simulation	PROBLEMKLASSE	Elektronische Struktursimulation
HANDLUNGSBEDARF	Die existierenden Ansätze zur Verbesserung des Produktionsdurchsatzes sind entweder sehr zeit- und kostenintensiv (nass-chemische Laboranalysen) oder erreichen nicht die erforderliche Präzision (computergestützte Näherungsverfahren).		
POTENZIAL UND NUTZEN	Pharmazeutische Industrie: Verbesserung der Energieeffizienz und Kostensenkung in der Vorproduktion durch hochpräzise Simulationen und die damit einhergehende Minimierung der im Rahmen von Forschungs- und Entwicklungsarbeiten erforderlichen nass-chemischen Laboranalysen. Chemische Industrie: Etablierung wirtschaftlich tragfähiger hybrider Verfahren (Simulation/Laboranalysen)		
LÖSUNGSANSATZ	Abbildung der Chemie, beschrieben durch elektronischen Hamiltonian, auf Quantenhardware, Abschätzung der Grundzustandsenergie und des dazugehörigen Zustandes unter Verwendung einer Quantum Boltzmann Maschine mit drei Schichten (Xia und Kais 2019), Toolkit für die Optimierung der Reaktionsbedingungen (Druck, Temperatur)		
MODEL	Hamiltonian	ALGORITHMUS	QBM mit 3 Schichten
HARDWARE	Quantum Simulator, Gate-QC	DATEN	Nutzung von OpenFermion, Qiskit Nature und PySCF
BESONDERHEITEN	Der Quantenressourcenbedarf ist angesichts der Komplexität des Problems gering. Erste Umsetzungen können daher bereits in der heutigen NISQ-Ära realisiert werden.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Konzeption, Proof-of-Concept mit einfacheren Molekülen (H2, LiH)		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	5–10 Jahre		
INHABER	Accenture (Dean Smith, Tim Leonhardt, Alexander Beinsen), StoneOne (Felix Paul)		

Chemische Simulationen werden derzeit als vielversprechender Kandidat für Quantencomputing Anwendungen mit einem messbaren Vorteil gegenüber klassischer Methoden gesehen (Devanesan 2021). Die Möglichkeit im Detail zu studieren, wie Moleküle interagieren und sich verändern bzw. unter welchen Bedingungen chemische und biochemische Reaktionen energieeffizient ablaufen, soll dabei insbesondere der Pharmabranche und der medizinischen Forschung neue Perspektiven eröffnen. Dies gilt sowohl für die Entwicklung neuer als auch für die Herstellung bereits bekannter Medikamente. Eine Grundlage für die Optimierung chemischer Prozesse ist eine möglichst präzise Beschreibung der Eigenschaften der beteiligten Moleküle. Die Näherungsmethoden, die im Rahmen von computergestützten Simulationen[20] bisher eingesetzt werden, erreichen aber aufgrund der hohen Anzahl an quantenmechanisch zu betrachtenden Orbitalkonfigurationen nicht die Präzision der Ergebnisse vergleichbarer Laboranalysen. Kurz: Durch Simulation kann zwar der Aufwand zur Gewinnung von Forschungsergebnissen verringert und gegebenenfalls auch die Produktentwicklung (schneller) vorangetrieben werden, dies geht aber mit Einbußen in Hinblick auf die Qualität der berechneten Ergebnisse einher. Das Potenzial von Quantencomputing wird in der Aufhebung genau dieser Einbußen gesehen und spiegelt sich deutlich im Verhalten der großen Pharmakonzerne wider. Pharmakonzerne

20 In der Regel handelt es sich hierbei um sogenannte ab-initio-Simulationen, die keine an experimentelle Daten angepassten Parameter verwenden.

wie Boehringer-Ingelheim und Roche investieren bereits heute zunehmend in Quantencomputing (Kirsopp et al. 2021; Malone et al. 2021). Seit Januar dieses Jahres kooperiert Boehringer-Ingelheim mit Google (Boeringer Ingelheim 2021) und nur kurz darauf hat Roche seine Zusammenarbeit mit Cambridge Quantum Computing (CQC) bekannt gegeben (Cambridge Quantum Computing 2021). Auch in der Chemieindustrie gibt es Potenziale für den Einsatz von Quantencomputern: Bei der Planung chemischer Großprozesse können schon kleine Änderungen der beteiligten thermodynamischen Parameter, wie etwa Temperatur oder Druck, großen Einfluss auf eine effiziente und wirtschaftliche Umsetzung haben. Der Grund dafür liegt in den komplexen (mathematisch: nicht linearen) Wechselwirkungen der beteiligten Variablen, welche zu schwer vorhersagbaren Reaktionsverhalten führen. Aufgrund hoher Entwicklungskosten werden bereits etablierte Produktionsverfahren nur sehr konservativ und in sehr kleinen Schritten optimiert. Aus Kostengründen liegt daher meist nur ein rudimentäres Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse vor. Die Inhaber des Anwendungsfalls konzentrieren sich auf die thermochemische Optimierung dieser Großprozesse. Sie streben die Entwicklung einer Quantencomputer-gestützten Methode an, die eine Vorselektion der beteiligten Parameter ermöglicht. Im Anwendungsfall 6 von Accenture und StoneOne wird daher als erster Schritt die Umsetzbarkeit einer Quantencomputer-gestützten Simulation thermodynamischer Zusammenhänge anhand des Fallbeispiels der Methylaminsynthese evaluiert. Methylamin ist ein wichtiges Vor- bzw. Zwischenprodukt der pharmazeutischen Industrie, es wird unter anderem zur Synthese von Medikamenten zur Behandlung von Lungenkrankheiten (Theophyllin) und Aufmerksamkeitsdefizit-Hyperaktivitätsstörungen (ADHS) eingesetzt (Desoxyn). Es ist darüber hinaus Ausgangsstoff für die Synthese mehrerer Pestizide und Lösungsmittel. Das gewählte Fallbeispiel hat hohe praktische Relevanz und, gemessen an der Komplexität des zugrundeliegenden Problems, ist der Hardwareressourcenbedarf (Qubits) vergleichbar gering. Dies macht es besonders interessant für die Forschung und Entwicklung in der aktuellen NISQ-Ära.

Im Zentrum des Problems des Anwendungsfalls 6 steht die elektronische Struktursimulation (ESS), die ein wichtiges Werkzeug für das Verständnis der chemischen Eigenschaften von Molekülen ist. Die elektronische Struktur einer organischen Verbindung kann durch Lösen der zeitunabhängigen bzw. stationären Schrödingergleichung gut angenähert werden: $\hat{H}\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R})=E\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R})$. Die Gleichung besagt, dass der Zustand, der durch die Wellenfunktion ψ beschrieben wird, die Energie E hat.

$\hat{H}$ steht in der Gleichung für den molekularen Hamiltonian, ein mathematischer Ausdruck, der die Energien von Elektronen und Kernen in einem Molekül beschreibt. Er setzt sich aus mehreren Termen zusammen (u. a. für die Bewegungsenergie aller Kerne, sowie aller Elektronen und die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen den geladenen Teilchen). Insbesondere die untrennbaren, abstoßenden Elektron-Elektron Wechselwirkungen erschweren das Lösen von elektronischen Strukturproblemen. Der molekulare Hamiltonian wird zur Berechnung von Wellenfunktionen Ψ in der Regel simplifiziert. Geht man davon aus, dass die Elektronen getrennt von der Bewegung der Kerne betrachtet werden können und die Bewegung der Kerne gegenüber den Elektronen vernachlässigt werden kann, so kann die molekulare Wellenfunktion Ψ als Produktansatz geschrieben werden, mit einer Kern-Wellenfunktion $\chi(\mathbf{R})$, die nur von der Position der Kerne **R** abhängt, und einer Elektronen-Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r};\mathbf{R})$, die auch von der Position der Elektronen **r** abhängt: $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R})=\psi(\mathbf{r};\mathbf{R})\cdot\chi(\mathbf{R})$. Diese sogenannte Born-Oppenheimer-Näherung ermöglicht die Aufstellung zweier für Elektronen und Kerne entkoppelter Schrödingergleichungen, über die stabile Molekülkonformationen und Schwingungszustände bestimmt werden können. Zur Geometrieoptimierung werden klassische numerische Verfahren wie das Gradientenabstiegsverfahren herangezogen. Im Laufe des Gradientenabstiegsverfahrens wird der Wert der elektronischen Energiefunktion iterativ minimiert, bis ein lokales Minimum bezüglich der Koordinaten der Atomkerne gefunden wird. Bei jedem iterativen Schritt werden dafür die Koordinaten der Atomkerne entlang des Wegs der steilsten Energiegefälle verschoben. Zur Bestimmung der molekularen Verteilungsfunktionen und weiterer molekularer Eigenschaften sind Energieableitungen an diesen Minima notwendig.

Zur Lösung von elektronischen Strukturproblemen werden zunehmend Verfahren bzw. Modelle aus dem Bereich Machine Learning herangezogen, darunter eingeschränkte Boltzmann-Maschinen (RBM, engl. restricted Boltzmann machine). Eingeschränkte Boltzmann-Maschinen sind stochastische (nicht deterministische) bzw. generative neuronale Netze, die nur aus Schichten sichtbarer und versteckter Einheiten/Neuronen bestehen; sie besitzen keine Ausgabeeinheiten. Im Gegensatz zu typischen neuronalen Netzen sind die Eingabeeinheiten einer Boltzmann-Maschine untereinander verknüpft, können Informationen austauschen und auf diesem Weg neue Datensätze generieren. Sie eignen sich daher für die Lösung von Problemen, die eine Sampling-Prozedur erfordern (wie z. B. die Bestimmung der Eigen-

zustände und Eigenwerte der im vorherigen Absatz beschriebenen elektronischen Schrödingergleichung). Boltzmann-Maschinen ohne Beschränkung lassen sich nur schwer trainieren, daher werden oft sogenannte eingeschränkte Boltzmann-Maschinen (RBM) eingesetzt. Für RBM gilt, dass nur Verknüpfungen zwischen den Schichten sichtbarer und versteckter Einheiten bestehen, innerhalb der Schichten selbst existieren keine Verknüpfungen. Durch den Einsatz von Quantenalgorithmen kann die Trainingsprozedur der RBM optimiert werden, da die Verteilung effizienter generiert werden kann. Die resultierenden Modelle bezeichnet man als quantenbasierte eingeschränkte Boltzmann-Maschinen (QBM). Im Anwendungsfall wird eine 3-schichtige QBM zur Beschreibung der Elektronenverteilung verwendet (Xia und Kais 2019). Die sichtbare Schicht kodiert die Qubit-/Spin-Zustände der Eingabe, die zweite versteckte Schicht enthält die Parameter, die zu den Amplituden der beteiligten Zustände beitragen. Die nicht quantenbasierte klassische dritte Schicht weist den Eingabezuständen die zugehörigen Vorzeichen (+ oder -) zu, die zur Überlagerung der Elektronenkonfigurationen beitragen (siehe Abbildung 15). Mit dieser Kombination aus Amplitude und Vorzeichen ist es dann möglich, die Eigenzustände mit den niedrigsten Energien zu finden und aus dem Schaltkreis der QBM zu extrahieren.

Die Vorbereitungen für den Anwendungsfall sind im Wesentlichen abgeschlossen. Die Methylamindaten wurden für die Eingabe in die QBM aufbereitet und die QBM kann so präpariert werden, dass sie eine Boltzmann-Verteilung der elektronischen Wahrscheinlichkeitsdichte gemäß der Eingabe generiert. Derzeit wird ein Proof-of-Concept auf Basis der Bestimmung der Grundzustandsenergien einfacher Moleküle (H2, HeH+, LiH) angestrebt. Im Fall von einfachen Molekülen können die Ergebnisse der QBM mit denen bestehender klassischer Verfahren verglichen werden. Die gesuchte Grundzustandsenergie wird durch lokale Variation der QBM-Parameter in Richtung der größten Verbesserung bestimmt. Die in diesem Fall betrachteten QBMs und damit die Wahrscheinlichkeitsverteilungen können auf dem Quantencomputer mit zur Anzahl der Qubits quadratisch zunehmendem Aufwand initialisiert werden. Die Erzeugung der Verteilung mit einem Quantensimulator erfordert im Vergleich zu realer Quantenhardware wesentlich mehr Zeit und ist für Qubitzahlen von etwas mehr als 50 mit heutigen Rechnern nicht möglich. Dies liegt daran, dass die Gatteroperationen auf realer Quantenhardware schneller ausgeführt werden können. Um die Verteilung hinreichend gut annähern zu können, ist zudem eine hohe Anzahl von Wiederholungen desselben Experiments notwendig. Diese Anzahl der Wiederholungen skaliert dabei stark mit der Anzahl betrachteter Molekülorbitale[21].

Die Umsetzung von Anwendungsfällen, die auf einer ESS beruhen, stellt eine Herausforderung dar, da sie umfangreiches Domänenwissen in den Bereichen Chemie und Quantencomputing bzw. -algorithmen erfordert. Eine Hilfe bieten hier frei zugängliche Softwarepakete[22], die den Zugang erleichtern, z. B. indem sie Werkzeuge zur Übertragung der molekularen Eigenschaften auf Quantenschaltkreise anbieten. Dazu gehört das Paket OpenFermion (McClean et al. 2017), das als Schnittstelle zwischen klassischer Quantenchemie-Software und Quantencomputing-Stacks dient, sowie das Paket Open Babel (O'Boyle et al. 2011), mit dem sich verschiedene Chemiedateiformate ineinander überführen lassen. Auch weitere Schnittstellen zu klassischer Quantenchemie-Software, wie PySCF (Sun et al. 2017; Sun et al. 2020) und Psi4 (Smith et al. 2020), werden im Rahmen des Anwendungsfalls 6 genutzt. Die Inhaber des Anwendungsfalls stehen im ständigen fachlichen Austausch mit den anderen PlanQK-Partnerinnen und -Partnern, um diese und weitere Technologien und Toolkits in eine Pipeline zu integrieren und die Idee eines skalierbaren Modells in Form einer Quantum Boltzmann Maschine umzusetzen.

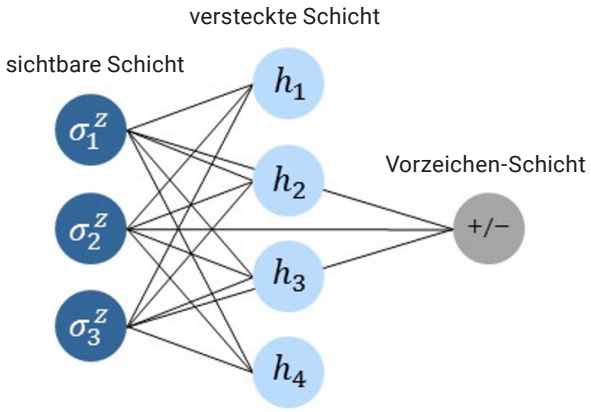


Abbildung 15: Anwendungsfall 6. Schematischer Aufbau der quantenbasierten eingeschränkten Boltzmann-Maschine, die im Anwendungsfall eingesetzt wird. Die erste sichtbare Schicht (σ^z) repräsentiert die Spinzustände der Qubits der Eingabe, die zweite versteckte Schicht enthält die Parameter (h), die zu den Amplituden der beteiligten Zustände beitragen. Die nicht quantenbasierte klassische dritte Schicht weist den Zuständen das zugehörige Vorzeichen (+ oder -) in der Wellenfunktion zu. Modifiziert nach (Xia und Kais 2019).

21 Ein Experiment mit einem H2O-Molekül und 14 Qubits muss z. B. typischerweise 40.000 Mal wiederholt werden (https://www.youtube.com/watch?v=Iq4YaT-tRXg).

22 Open Fermion: https://quantumai.google/openfermion, PySCF: https://pyscf.org/, Psi4: https://psicode.org/, Open Babel: https://openbabel.org/docs/dev/UseTheLibrary/Python_Pybel.html

3.4 Anwendungsfälle der Problemkategorie „ML/KI“

Quantencomputing hat Sachverständigen zufolge das Potenzial, das Feld Künstliche Intelligenz zu revolutionieren und die Entwicklung von KI-Produkten massiv anzukurbeln. Mit quantenunterstützter KI soll es sowohl gelingen, größere Mengen an komplexen Datensätzen zu prozessieren und somit robustere Modelle zu trainieren, als auch die Laufzeit der bedeutendsten und am weitesten verbreiteten Algorithmen zu beschleunigen. Obwohl der grundlegende Beweis für diese Annahmen noch aussteht, wird für einige Algorithmen bereits eine exponentielle Beschleunigung erwartet. Neben den allgemein quantitativen Verbesserungen wird auch ein signifikanter Fortschritt in Hinblick auf die Qualität bzw. Leistungsfähigkeit bestimmter Modelle antizipiert. Allen voran sind hier generative Modelle zu nennen. Unter generativen Modellen versteht man Modelle, die anhand eines Trainingsdatensatzes lernen, neue Daten zu generieren und auszugeben, die den Trainingsdaten ähnlich sind. Ein sehr anschauliches Beispiel hierfür ist ein Modell, das anhand der Fotos von US-Prominenten gelernt hat, täuschungsechte fotorealistische Bilder von fiktiven Menschen zu erzeugen (Karras et al. 2017).

Quantencomputing hat das Potenzial, das Leistungsvermögen generativer Modelle zu verbessern. Die ausgegebenen Datensätze wie z. B. Bilder, Geräusche oder Dokumente werden noch täuschungsechter und der Erzeugungsprozess nimmt deutlich weniger Zeit in Anspruch. Insbesondere können die künstlich erzeugten Datensätze im Nachhinein genutzt werden, um klassische, diskriminative Modelle zu verbessern oder gar erst möglich zu machen, indem sie die Trainingsgrundlage erweitern. Ein Modell, das beispielsweise zwischen Hunden und Katzen unterscheiden soll, wird umso besser und robuster, je mehr Bilder zum Trainieren vorliegen. Hierbei ist nicht nur die Anzahl, sondern auch die Vielfalt der Trainingsbilder von Interesse.

Im Rahmen dieser Studie werden drei Anwendungsfälle vorgestellt, in denen unter anderem generative Modelle eingesetzt werden, um Unregelmäßigkeiten in Datenbanken zu identifizieren. Die frühzeitige Erkennung von Unregelmäßigkeiten ist von hoher Relevanz für viele Anwendungsdomänen, sei es, um Schadensfälle in der Produktion zu vermeiden, Kreditkartenbetrug im Finanzwesen vorzubeugen (Anwendungsfall 7) oder Angriffe auf Computersysteme und -netzwerke im IT-Sektor zu unterbinden (Anwendungsfälle 8 und 9). Den Unregelmäßigkeiten ist in allen Fällen gemein, dass sie bezogen auf das Gesamtdatenvolumen (z. B. alle Kreditkartentransaktionen) nur sehr selten auftreten. Daher bezeichnet man sie auch als Anomalien und die entsprechenden Erkennungsverfahren als Anomaliedetektion. Obwohl sie extrem selten sind, gehen Anomalien in der Regel mit hohen wirtschaftlichen Verlusten einher. Der Bedarf für Werkzeuge, die Anomalien automatisch, sicher und im Idealfall in Echtzeit identifizieren, ist dementsprechend hoch und hat dazu geführt, dass viele KI-basierte Anomaliedetektionssysteme entworfen und getestet wurden. In der Praxis stoßen diese Systeme jedoch oft noch an ihre Grenzen. Da Anomalien nur mit geringer Frequenz auftreten, sind die aufgenommenen Datenbanken von Natur aus extrem unausgeglichen (z. B. 492 betrügerische gegenüber 284.315 nicht betrügerischen Kreditkartentransaktionen in einem Zeitraum von zwei Tagen (Machine Learning Group – ULB 2018)) und müssen daher sehr groß sein, um überhaupt robuste Modelle trainieren zu können. Das hohe erforderliche Datenvolumen und die extreme Unausgeglichenheit der Datenbanken hemmt insbesondere die Entwicklung von überwachten Machine-Learning-Verfahren, die ein Labeling der Daten voraussetzen.

Bei den drei Anwendungsfällen, die im Folgenden vorgestellt werden, arbeiten deren Inhaber innerhalb des PlanQK-Konsortiums eng zusammen. Es hat sich bereits früh herausgestellt, dass die Datenvorverarbeitung für die Anomaliedetektion eine große gemeinsame Herausforderung darstellt. Die Inhaber des Anwendungsfalls 9 haben sich daher zunächst dezidiert mit diesem Thema auseinandergesetzt, im Rahmen der Beschreibung ihres Anwendungsfalls werden die vorläufigen Ergebnisse dazu präsentiert.

3.4.1 Anwendungsfall 7: Betrugserkennung für Finanzdienstleister – Detektion betrügerischer Kreditkartentransaktionen

AF7: BETRUGSERKENNUNG FÜR FINANZDIENSTLEISTER Detektion betrügerischer Kreditkartentransaktionen			
ANWENDUNGSDOMÄNE	Finanzwesen	HANDLUNGSFELD	Sichere Finanzdienstleistungen
PROBLEMKATEGORIE	ML/KI	PROBLEMKLASSE	Anomaliedetektion
HANDLUNGSBEDARF	Die existierenden klassischen Ansätze zur Detektion betrügerischer Transaktionen erfordern große Datensätze (supervised ML) oder sind nicht sensitiv genug (unsupervised ML). Sie liefern zudem in der Regel keine Erklärung dafür, warum eine Transaktion als betrügerisch erkannt wurde.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Hochsensitive, erklärbare Erkennung von betrügerischen Transaktionen in Echtzeit		
LÖSUNGSANSATZ	Hybrides GAN mit klassischem Diskriminator und Quantum-Generator		
MODEL	Quantum-GAN (QWGAN-GP)	ALGORITHMUS	hybrid (VQA-klassisch)
HARDWARE	Quantum Simulator	DATEN	Kaggle Datensatz (Machine Learning Group - ULB 2018)
BESONDERHEITEN	Die Performanz des hybriden Quantum-GAN auf dem Beispieldatensatz ist mit der Performanz klassischer GAN vergleichbar.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Implementierung		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	2–3 Jahre		
INHABER	d-fine (Dr. Benjamin Obert, Dr. Ferdinand Graf, Dr. Daniel Herr, Patrick Steinmüller)		

Laut einer Studie der Unternehmensberatung PwC aus dem Jahr 2018 „Sizing the price" zählt das Finanzwesen neben dem Gesundheitswesen und dem Einzelhandel zu den drei Branchen mit dem größten Potenzial für Künstliche Intelligenz (Anand und Verweij 2017). Es wird unter anderem damit gerechnet, dass die Finanzbranche bis 2030 durch Einsatz von KI zusätzliche 2 Billionen Dollar zum weltweiten Bruttoinlandsprodukt beitragen wird. Die drei Geschäftsfelder, in denen das größte Potenzial gesehen wird, sind dabei die personalisierte Finanzplanung, die Transaktionsautomatisierung sowie die Betrugserkennung und Geldwäschebekämpfung. Betrug frühzeitig zu erkennen oder im Idealfall ganz zu unterbinden, ist für Finanzinstitutionen von hohem wirtschaftlichen Interesse, da ihnen durch betrügerische Aktionen hohe Verluste entstehen. Allein durch Kreditkartenbetrug gingen z. B. im europäischen Raum im Jahr 2018 laut dem fünften Bericht der EZB 1,8 Milliarden EUR verloren (European Central Bank 2018). Dementsprechend verzeichnet das Anwendungsfeld Betrugserkennung (engl. fraud detection) gerade auf diesem Gebiet viel Aktivität. Übliche Praxis waren zunächst sogenannte Expertensysteme, wie Software, die aus Wenn-dann-Regeln einer von Expertinnen und Experten gepflegten Wissensdatenbank Handlungsempfehlungen ableitet und ausgibt. Wenn z. B. eine Kreditkarte in einer Stunde an mehr als vier Geldautomaten oder innerhalb von fünf Minuten für mehr als zwei Transaktionen genutzt wurde, dann liegt möglicherweise ein Betrug vor (Botzen 2018). Da sich die Betrugsmaschen ständig ändern und immer ausgefeilter werden, sind diese Systeme allein nicht ausreichend und werden zunehmend durch Anwendungen aus dem Bereich KI-basierte Anomalieerkennung ergänzt. Die Anforderungen an diese Anwendungen sind hoch, sie müssen große Volumina heterogener und verrauschter Daten verarbeiten, eine schnelle Entscheidungsfindung unterstützen (idealerweise in Echtzeit), dynamisch adaptierbar sein (z. B. an sich ändernde Betrugsmuster) und Erklärungen dafür liefern, warum Transaktionen als betrügerisch identifiziert werden. Die Leistungsfähigkeit klassischer Systeme ist im Hinblick auf diese Anforderungen weiterhin eingeschränkt. Im Anwendungsfall 7 evaluiert d-fine daher das Potenzial von Quantencomputing für die KI-basierte Anomalie-

erkennung im Anwendungsfeld Kreditkartenbetrug. Die Inhaber verfolgen dabei zunächst eine Strategie, die auf unüberwachtes Maschinelles Lernen ausgelegt ist, das heißt, es werden Verfahren untersucht, die keine gelabelten Daten erfordern.

Ein Ansatz zur unüberwachten Anomaliedetektion sind Modelle, die auf generativen gegnerischen Netzwerken (engl. generative adversarial networks, GANs) beruhen. GANs bestehen aus zwei neuronalen Netzen: einem Erzeugungsnetzwerk (Generator) und einem Unterscheidungsnetzwerk (Diskriminator). Die beiden neuronalen Netze treten gegeneinander an: Der Generator lernt künstliche Datensätze zu erzeugen, die den Trainingsdatensätzen statistisch möglichst ähnlich sind, während der Diskriminator lernt, diese künstlichen bzw. „gefälschten" Datensätze von den realen Trainingsdatensätzen zu unterscheiden. Die optimalen Gewichte des Generators und des Diskriminators werden durch die Optimierung von spezifischen Verlustfunktionen, die ein Maß für die Qualität des Generators bzw. des Diskriminators sind, gelernt. Das trainierte GAN kann anschließend zur Klassifikation neuer Datensätze herangezogen werden (echt/anomal). Der Generator erzeugt dazu ein Sample, das dem Datensatz möglichst ähnlich sein soll. Die Ähnlichkeit einer Beobachtung zu der im Verlauf des Trainings gelernten Generator-Verteilung ist eine von zwei Komponenten für den Grad der Anomalität der Beobachtung (siehe Infobox). Wenn der Generator kein Beispiel erzeugen kann, das der realen Beobachtung nahekommt, ist es wahrscheinlich, dass die Beobachtung eine Anomalie ist.

Typische Herausforderungen in Hinblick auf GANs sind Instabilitäten während des Trainings und die Einschränkung der Sampling-Effizienz klassischer Sampling-Prozeduren. Wasserstein-GANs (WGANs) stellen eine Erweiterung von GANs dar, welche die Trainingsstabilität verbessern und im Hinblick auf Modellarchitektur und Wahl der Hyperparameter weniger anfällig sind[23]. Während der Diskriminator eines GANs Datensätze klassifiziert (echt/künstlich), gibt der WGAN-Diskriminator für jeden Datensatz einen Echtheit- bzw. Fake-Score aus. Durch das Gegenspiel zwischen Generator und Diskriminator verbessert sich die Qualität beider. Die Sampling-Effizienz kann durch die Verwendung eines hybriden quanten-klassischen WGAN verbessert werden. Dabei handelt es sich um eine besondere Form eines Quantum-Generative-Adversarial-Network (QGAN). Beim quanten-klassischen WGAN wird der klassische Generator durch einen Generator ersetzt, der Quantenschaltkreise mit einem klassischen neuronalen Netz verbindet; der Diskriminator wird nicht verändert (Herr et al. 2021) (siehe Abbildung 16, A). Anhand zufälliger latenter Variablen (niedrig-dimensionale Repräsentation des Datenraums) werden über die Quantenschaltkreise Daten erzeugt, die aus einer gelernten Verteilung kommen und die reale Verteilung approximieren (Sampling-Prozedur). Das klassische neuronale Netz des Generators übersetzt bzw. skaliert diese Daten anschließend in den hoch-dimensionalen „realen" Datenraum. Vorteil dieses QGAN-Ansatzes ist, dass die hoch-dimensionalen Daten mit rein klassischen Komponenten verarbeitet werden, Encoding-Probleme werden somit umgangen. Aufgrund der beschriebenen Vorteile fiel die Wahl der Inhaber des Anwendungsfalls in Hinblick auf das Modell für die Anomaliedetektion auf ein hybrides quanten-klassisches WGAN. Die zugrundeliegende mathematische Formulierung wurde für diese Studie zusammengefasst (siehe Infobox), für eine vollständige Darstellung verweisen die Autorinnen und Autoren an dieser Stelle auf die Fachpublikation der Inhaber des Anwendungsfalls (Herr et al. 2021).

Das hybride quanten-klassische WGAN (QGAN) wurde zunächst mit TensorFlow Quantum[24] implementiert (QWGAN-GP) und anschließend wurden mit dem TensorFlow Quantensimulator Quantenschaltkreise mit bis zu neun Qubits simuliert. Neben dem QGAN wurde zu Vergleichszwecken auch ein rein klassisches WGAN (GAN) implementiert (siehe Abbildung 16). Zur Beurteilung der Konvergenz und der Qualität der Modelle ziehen die Inhaber des Anwendungsfalls das F1-Maß[25] als Metrik heran: umso höher der F1-Wert, desto besser die Qualität. Die Ergebnisse der Simulationen zeigen, dass die Qualität des implementierten QGAN mit der Qualität eines klassischen GANs vergleichbar ist (F1~0.84, Abbildung 16, B). Die Konvergenzverhalten von QGANs und GANs weisen jedoch Unterschiede auf: Das klassische GAN konvergiert früher als das QGAN (bei ähnlicher Tiefe der neuronalen Netze sind weniger Iterationen erforderlich), jedoch ist die Zahl der Parameter höher. Das heißt, dass selbst mit QGANs, die wenige Qubits erfordern, bereits Ergebnisse erzielt werden können, die denen klassischer Verfahren entsprechen; allerdings müssen QGANs länger trainiert werden, um die gleiche

23 Die Welt der GAN ist groß. Es existieren mittlerweile viele Typen bzw. Varianten von GAN, die sich hinsichtlich des Ziels und der Zielfunktion unterscheiden. Einen ersten Überblick bietet folgender Blogartikel: https://towardsdatascience.com/gan-objective-functions-gans-and-their-variations-ad77340bce3c

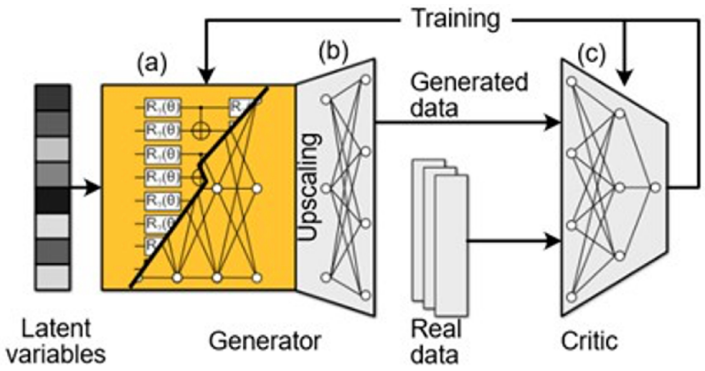
24 https://www.tensorflow.org/quantum

25 Harmonischer Mittelwert von Präzision (engl. precision oder positive predictive value, PPV) und Widerruf (engl. recall oder sensitivity).

Ergebnisqualität zu erzielen. Aktuell wird die Berechnung der vorgestellten Implementierung auf Quantenhardware angestrebt (IBMQ, Rigetti/Pennylane). Ziel ist es, die Hardware untereinander und mit klassischer Hardware zu vergleichen.

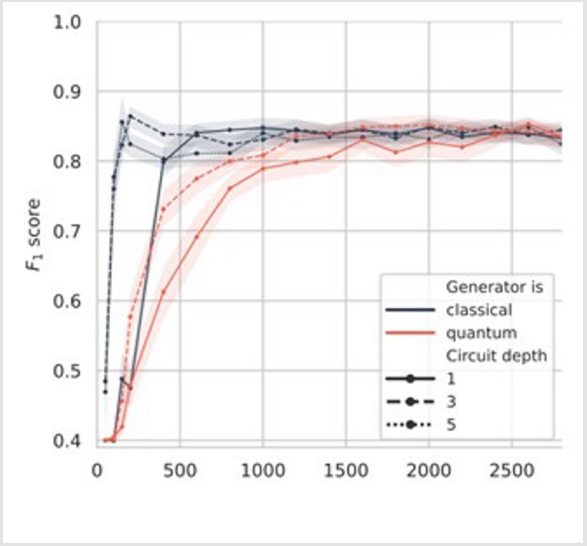
Ein weiterer Fokus von d-fine ist die Erklärbarkeit (engl. eXplainable AI, kurz XAI) bzw. die Transparenz und Nachvollziehbarkeit von quantenunterstützten KI-Methoden für Entwickler und Anwender. Dies beinhaltet die Anwendbarkeit von klassischen Erklärbarkeitsmethoden und auch deren Erweiterung, um sie für quantenbasierte Verfahren besser nutzbar zu machen. Es werden sowohl modell-agnostische Ansätze wie LIME, KernelSHAP, ANCHORS und Counterfactuals als auch model-spezifische Ansätze (z. B. für GANs) untersucht. In diesem Rahmen entwickeln die Inhaber auf der Basis von KernelSHAP ein eigenes Verfahren (qSHAP), welches die inhärente Struktur parametrisierter Quantenschaltkreise zur Beschleunigung ausnutzt. Als erstes Ergebnis konnten multivariate symmetrische Funktionen beschleunigt werden.

A



B

Konvergenz des implementierten QGAN im Vergleich zu einem klassischen implementiertem GAN



Performanz des implementierten QGAN im Vergleich zu einem klassisch implementiertem GAN

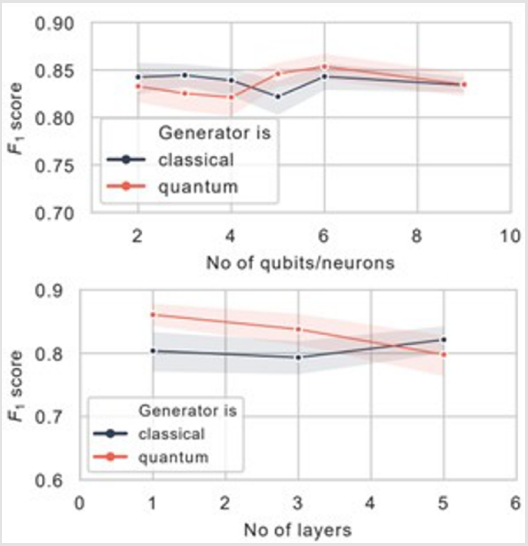


Abbildung 16: Anwendungsfall 7. (A) Architektur des implementierten QGAN im Vergleich zu einem klassisch implementierten GAN. Das Sampling (Generator) erfolgt in beiden Fällen anhand zufälliger latenter Variablen (niedrig-dimensionale Repräsentation des Datenraums). Eine sogenannte Upscale-Schicht transformiert die generierten Datensätze anschließend in den hoch-dimensionalen „realen" Datenraum. Die transformierten, generierten Datensätze werden neben den Echtdatensätzen in den Diskriminator eingespeist. Der Diskriminator berechnet die Divergenz der Verteilungen der erzeugten und der echten Datensätze. Das Ergebnis des Diskriminators wird zum Trainieren des Diskriminators und des Generators verwendet. Im Hinblick auf die Architektur unterscheiden sich QGANs und GANs nur durch die Ersetzung des klassischen Samplings durch ein Sampling, das auf Quantenschaltkreisen beruht (gelb unterlegt). (B) Konvergenzverhalten und Performanz des implementierten QGAN im Vergleich zu einem klassisch-implementierten GAN (Setup: Dimension des Raums der latenten Variablen=9, Generator [Breite 0] und Diskriminator [29,16,8,1]). Die Performanz ist in Abhängigkeit von der Anzahl der Qubits und der Tiefe der neuronalen Netze dargestellt. (Bildrechte bei Journal Quantum Science and Technology)

Mathematische Formulierung: Hybrides quanten-klassisches WGAN (Quantum Generative Adversarial Networks, QGANs)

ZIELFUNKTION UND VARIABLEN

Das Ziel für das Trainieren eines GAN ist es, den Unterschied bzw. die Divergenz zwischen erzeugten und realen Daten zu minimieren. Dazu wird die sogenannte MinMax-Optimierung herangezogen:

$$\min_G \max_D \mathbb{E}_{x\sim p_r(x)}[D(x)] - \mathbb{E}_{z\sim p(z)}[D(G(z))]$$

Die Bezeichnung MinMax drückt aus, dass der Generator (G) versucht, seine Ausgabe zu minimieren, während der Diskriminator (D) versucht, seine Ausgabe zu maximieren. Die Divergenz zwischen den Verteilungen der realen und erzeugten Daten wird bei einem klassischen GAN über das Jensen-Shannon-Divergenz-Maß (JSD-Maß) bestimmt. WGANs verwenden ein anderes Maß, die Wasserstein-Distanz (bzw. Earth-Mover-Distanz (EM-Distanz)). Die Wasserstein-Distanz spiegelt die minimalen Kosten wider, die dafür aufgebracht werden müssen, eine der Verteilungen in die andere Verteilung zu transformieren. Die Wasserstein-Distanz hat mehrere Vorteile gegenüber dem JSD-Maß, insbesondere wenn für die Optimierung Gradienten herangezogen werden: Sie konvergiert besser.

Die Verlustfunktionen des Diskriminators $(\mathfrak{L}_c(\psi))$ und des Generators $(\mathfrak{L}_g(\theta,\phi))$ sind durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$\mathfrak{L}_c(\psi) = \mathbb{E}_{p(z)}[D_\varphi(G(z))] - \mathbb{E}_{p_r(x)}[D_\psi(x)] + \lambda\mathbb{E}_{p_{\hat{x}(\hat{x})}}[(\left\|\nabla_{\hat{x}} D_\psi(\hat{x})\right\|_2 - 1)^2]$$

$$\mathfrak{L}_g(\theta,\phi) = -\mathbb{E}_{p(z)}[D(G(z;\theta,\phi))]$$

Das zweistufige Optimierungsproblem wird durch folgende Gleichungen beschrieben:

$$\min_\psi \mathfrak{L}_c(\psi) \qquad \min_{\theta,\phi} \mathfrak{L}_g(\theta,\phi)$$

Im Fall der Anomalie-Detektion sollen seltene irreguläre Datensätze identifiziert werden, die signifikant von der Mehrheit der anderen Datensätze abweichen. Dazu wird ein Anomaliemaß (S_O) definiert:

$$S_O = \mathfrak{L}_R + \mathfrak{L}_D$$

Der erste Teil des Ausdrucks beschreibt das Verlustmaß für den Generator. Ziel des Generators ist es, einen Vektor latenter Variablen (z_{opt}) zu finden, der ein neues Sample generiert, das möglichst nah an der Eingabe (x) liegt:

$$\mathfrak{L}_R = \left\|x - G(z_{opt})\right\|_1$$

Der zweite Ausdruck beschreibt das Verlustmaß des Diskriminators. Er bestimmt den Abstand zwischen dem optimierten generierten Sample ($G(z_{opt})$) und der Eingabe (x) in einer Zwischenschicht des Diskriminators (z. B. für die Ausgabe D(x) des Diskriminators).

$$\mathfrak{L}_D = \left\|D(x) - D(G(z_{opt}))\right\|_1$$

Mathematische Formulierung: Hybrides quanten-klassisches WGAN (Quantum Generative Adversarial Networks, QGANs)

AUSGABE DER NEURONALEN NETZE UND EINBINDUNG DES QUANTEN-SCHALTKREISES

Bei Generator (G) und Diskriminator (D) handelt es sich um neuronale Netze, die jeweils aus einer Verkettung von einzelnen Netzschichten bestehen. Die Reihenschaltung des Diskriminators ist durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$D_\psi: \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}, D_\psi = D_4 \circ D_3 \circ D_2 \circ D_1$$

Wichtig ist an dieser Stelle, dass keine Aktivierungsfunktion verwendet wird, die auf ein beschränktes Gebiet abbildet (Voraussetzung für das Trainieren des Modells auf Basis der Wasserstein-Distanz).

Für den Generator wird im Gegensatz zum Diskriminator eine beschränkte Aktivierungsfunktion (W) benötigt, um die Werte der generierten Samples auf das korrekte Intervall abzubilden:

$$G_c(z;\theta_c,\phi) = W[g_c(z;\theta_c;\phi)], z{\sim}U(0,1)$$

Für die vorliegende Implementierung fiel die Wahl auf eine sigmoidale Aktivierungsfunktion:

$$W(x) = \sigma(wx + b)$$

Die Reihenschaltung des Generators ist klassisch durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$g_c(z;\theta_c) = (g_L \circ g_{L-1} \circ \dots \circ g_1)(z)$$

g_L wird dabei als Upscale-Schicht bezeichnet, über die die Ausgabe die richtige Dimension erreicht.

Für das quanten-klassische WGAN (g_q) werden die Schichten $g_1 \dots g_{L-1}$ durch einen Quantenschaltkreis ersetzt:

$$g_q(z;\theta,\upsilon) = \langle z|U_\upsilon^\dagger(\theta)ZU_\upsilon(\theta)|z\rangle$$

Den Erwartungswert erhält man über viele z-Basis Messungen und die unitäre Transformation $U_v(\theta)$ beschreibt den Effekt der verschiedenen Quantenschichten. Um den Zustand $|z\rangle$ zu generieren, wird eine zusätzliche Encodingschicht S(z) benötigt, die aus Pauli-X Rotationen besteht. Für das Trainieren werden uniform verteilte latente Variablen verwendet:

$$z{\sim}U(-\pi,\pi) \text{ als } |z\rangle = S(z)|0$$

Die Gradienten, die für das Trainieren von Generator und Diskriminator verwendet werden, sind über die folgenden Ausdrücke definiert:

$$\frac{\partial \mathfrak{L}_g}{\partial \theta_m}(\theta,\phi) = -\mathbb{E}_{p(z)}[\beta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_m} g_q(z;\theta,\nu)] \qquad \frac{\partial g_q}{\partial \theta_m}(z;\theta,\upsilon) = \frac{\partial \langle Z\rangle_{z;\theta,\upsilon}}{\partial \theta_m}$$

3.4.2 Anwendungsfall 8: Netzwerk- und Kommunikationssicherheit – Detektion von Netzwerkangriffen

AF8: NETZWERK- UND KOMMUNIKATIONSSICHERHEIT Detektion von Netzwerkangriffen			
ANWENDUNGSDOMÄNE	IT-Sicherheit	HANDLUNGSFELD	Netzwerk- und Kommunikationsabsicherung
PROBLEMKATEGORIE	ML/KI	PROBLEMKLASSE	Anomalieerkennung
HANDLUNGSBEDARF	Das Netzwerkverkehrsvolumen ist hoch, die Angriffe nehmen zu und werden immer komplexer und dynamischer. Für existierende Angriffserkennungssysteme stellt dies eine Herausforderung dar.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Stärkung der Cyberresilienz von Unternehmen		
LÖSUNGSANSATZ	Unüberwachte Anomalieerkennung unter Verwendung (1) eines Quantum Generative Adversarial Networks (Quantum-GAN, VQA) und/oder (2) einer One-Class Quantum Support Vector Machine (QSVM)		
MODEL	Quantum-GAN, QUBO	ALGORITHMUS	VQA, QSVM
HARDWARE	Quantum Simulator, Gate-QC	DATEN	Öffentlich zugängliche Datensätze (KDD99)
BESONDERHEITEN	Die Performanz der unüberwachten Anomalieerkennung ist noch unzureichend. Eine mögliche Erklärung ist, dass der Latenzbereich des Autoencoders aufgrund der begrenzten Anzahl an Qubits zu klein ist.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Konzept/Implementierung		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	5–10 Jahre		
INHABER	DB Systel GmbH (Dr. Matthias Koch, Christina Riehn)		

Als einer der größten Infrastrukturbetreiber Europas muss die Deutsche Bahn AG (DB) einen ordnungsgemäßen Betrieb garantieren. Selbst lokale Ausfälle des Schienennetzes können sich im schlimmsten Fall gravierend auf den nationalen und gegebenenfalls sogar europäischen Waren- und Personenverkehr auswirken. Neben physischen Schäden wie z. B. Unwetterschäden, stellen mit zunehmender Digitalisierung des Bahnbetriebs insbesondere defekte oder kompromittierte IT-Systeme ein hohes Risiko dar. Die IT-Infrastruktur ist dabei genauso systemrelevant wie das physische Schienennetz und muss gegen mögliche Cyber-Bedrohungen, ob staatlicher oder krimineller Natur, abgesichert werden. Zur Erkennung von Cyber-Angriffen werden bereits verschiedene Systeme eingesetzt, darunter ein Intrusion Detection System, das gängige Angriffsmuster im Datenverkehr identifiziert. Dieses System ist sehr leistungsstark, wenn es um bereits bekannte Angriffe bzw. Muster geht. Die größte Gefahr geht jedoch von unbekannten Angriffen und Schwachstellen aus, für die noch keine Muster bekannt sind. Um diesen Gefahren entgegenzuwirken, werden zunehmend zusätzliche Systeme aus dem Bereich KI-basierte Anomalieerkennung eingesetzt. Ziel ist es dabei, Abweichungen vom Regelbetrieb wie ungewöhnliche Verhaltensmuster von IT-Systemen oder IT-Nutzern frühzeitig zu detektieren, zu quantifizieren und zu bewerten. Um Abweichungen vom Regelbetrieb erkennen zu können, werden spezielle Machine-Learning-Algorithmen herangezogen, die mit nicht klassifizierten Daten trainiert werden, sogenanntes

unüberwachtes maschinelles Lernen. Eine Herausforderung dabei ist, dass das Training der entsprechenden Modelle aufgrund der riesigen Datenmenge im Multi-Terabyte aufwendig ist. Genau hier kann der Einsatz eines Quantencomputers einen Vorteil liefern. Denn Quantencomputing hat theoretisch das Potenzial, diese Lern- bzw. Trainingsphase zu beschleunigen, indem die Trainingsdaten in Superposition gebracht werden. Darüber hinaus gehen Expertinnen und Experten auch davon aus, dass der Einsatz von quantenmechanischen Kernelmaps die Klassifizierungsgenauigkeit der trainierten Modelle verbessern wird. Als IT-Dienstleisterin der Deutschen Bahn und Inhaber des Anwendungsfalls 8, muss die DB Systel GmbH schon frühzeitig den Einsatz von Quantenhardware und die Potenziale für die unüberwachte Erkennung von Anomalien in IT-Netzwerken näher evaluieren. Umgesetzt wurden bisher zwei quantenunterstützte KI-Systeme, die auf unterschiedlichen Algorithmen beruhen; eine One-Class Quantum Support Vector Machine (QSVM) sowie ein Quantum Generative Adversarial Network (QGAN).

Ansatz1: QSVM

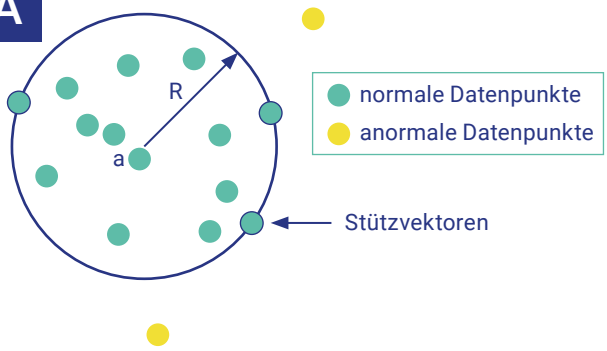
Support Vector Machines (SVM) zählen zu den ersten Machine-Learning-Algorithmen und werden primär zur überwachten Klassifikation von Datensätzen in zwei Klassen eingesetzt (bi-class SVM: z. B. Hund/Katze oder gesund/krank). Jeder Datensatz bzw. jedes Objekt in einer Trainingsdatenbank wird dafür als Vektor über die konstante Anzahl an Merkmalen repräsentiert, die den Datensatz beschreiben (Featurevektor). Zielfunktion der SVM ist die Bestimmung einer Hyperebene, die die Vektoren der zwei Klassen bestmöglich auftrennt. Mathematisch wird dies durch ein Lagrange Verfahren erreicht. Vereinfacht bedeutet das, dass die Stützvektoren[26] gesucht werden, die die Hyperebene bilden. Dafür wird mithilfe von Lagrange-Multiplikatoren[27] eine quadratische Zielfunktion unter Einhaltung von zwei Nebenbedingungen minimiert. Die klassische bi-class SVM erfordert klassifizierte Datensätze (überwachtes Lernen). SVM können aber auch zur Klassifizierung nicht klassifizierter Datensätze herangezogen werden, wie z. B. zur unüberwachten Anomaliedetektion (One-Class SVM). Anstelle einer Hyperebene wird bei der One-Class SVM nach einer Hypersphäre gesucht, die die Vektoren der Trainingsdaten möglichst eng umschließt. Datensätze, die außerhalb der Hypersphäre liegen, werden als Anomalien klassifiziert (siehe Abbildung 17, A). Zur Identifizierung der kleinsten Hypersphäre muss bei der QSVM eine quadratische Zielfunktion optimiert werden. Quantencomputer sind grundsätzlich gut geeignet, Optimierungsprobleme mit quadratischer Zielfunktion effizient zu lösen (z. B. unter Verwendung von QA- oder QAOA-Algorithmen). Die quadratische Zielfunktion der One-Class QSVM stellt jedoch eine Besonderheit dar, da die Größe des Optimierungsproblems hier nicht von der Dimension der Stützvektoren, sondern ausschließlich von der Anzahl der Trainingsdatensätze abhängt. Die Lagrange-Multiplikatoren α werden durch Qubits realisiert, wobei für jeden Trainingsdatensatz i ein α_i benötigt wird. Die Anzahl der erforderlichen Qubits wächst also mit der Anzahl der Trainingsdatensätze. Die Grenze der derzeitigen Machbarkeit ist in Hinblick auf die verfügbaren Qubits somit schnell erreicht. Der Ansatz eignet sich daher insbesondere für Probleme mit kleinen Trainingsdatenbanken. Der aktuelle Stand der Quantenhardware ist noch weit davon entfernt, die Menge an Daten, die für diesen Use Case herangezogen werden muss, verarbeiten zu können. Der vorgestellte Ansatz kann jedoch bereits von quantenmechanischen Kernelfunktionen profitieren, die die Trainingsdatensätze in einen höherdimensionalen Vektorraum überführen. Das Potenzial einer derartigen Implementierung wurde anhand eines kleinen Auszugs des KDD99-Datensatzes[28] evaluiert (400 Trainingsdatensätze, Abbildung 17, B). Die Klassifizierungsgenauigkeit der auf Quantencomputern implementierten One-Class SVM ist mit 0.7–0.83 noch nicht zufriedenstellend und erreicht nicht die Genauigkeit klassischer Implementierungen (0.89–0.98). Es ist aber zu berücksichtigen, dass die Aussagekraft dieses Ergebnisses aufgrund der kleinen Trainingsdatenbank stark eingeschränkt ist. In Zukunft sollen verstärkt Kernelfunktionen untersucht werden, die auf einem Quantencomputer berechnet werden. Auf diesem Weg kann auch das Problem umgangen werden, dass die Anzahl der Trainingsdaten durch die Qubitanzahl begrenzt ist.

26 Stützvektoren (engl. support vectors) sind die Vektoren, die der Hyperebene am nächsten liegen. Die Stützvektoren reichen aus, die Hyperebene mathematisch zu beschreiben.

27 Unter Lagrange-Multiplikatoren versteht man in der mathematischen Optimierung eine Methode zur Lösung von Optimierungsproblemen mit Nebenbedingungen.

28 Ältester und meistgenutzter öffentlich zugänglicher Datensatz im Bereich Intrusion Detection Systeme (IDS), http://kdd.ics.uci.edu/databases/kddcup99/kddcup99.html.

A



B

400 Trainingsdaten

METHODE	GENAUIGKEIT
Selkit (klassisch)	0,89
CVXOPT (klassisch)	0,98
Quanten Inspired	0,7
D'Wave	0,83
QAOA mit Qiskit (nur 5 Trainingsdaten)	0,2

Abbildung 17: Anwendungsfall 8, Lösungsansatz 1. (A) Schematische Darstellung der Hypersphäre der unüberwachten One-Class SVM (durchgezogener Kreis) zur Anomaliedetektion. Die Hypersphäre kann über die Lage der Stützvektoren, ihren Radius (R) und ihren Mittelpunkt mathematisch beschrieben werden. Datensätze, die außerhalb der Hypersphäre liegen, werden als Anomalien klassifiziert. (B) Klassifizierungsgenauigkeit der im Anwendungsfall implementierten One-Class QSVM für unterschiedliche Quantumhardware und im Vergleich zu klassischen Implementierungen.

Ansatz 2: QGAN

Die Erweiterung des Generators um ein neuronales Quantennetzwerk (QNN) bietet die Möglichkeit, von der Samplefähigkeit eines Quantencomputers zu profitieren (siehe auch Anwendungsfall 7 für den Hintergrund und die grundsätzliche mathematische Formulierung der Zielfunktion von QGAN). Eine solche Erweiterung ist im Anwendungsfall dadurch implementiert, dass abwechselnd Rotationen um X/Y/Z und ein Set an Controlled-Not-Gattern durchgeführt werden (qGenerator, Abbildung 18, A). Die Tiefe des neuronalen Netzes ist dabei über die Anzahl der Rotations-Controlled-Not Ebenen definiert. Der Diskriminator ist klassisch implementiert und kann daher auch bei potenziellen Kunden eingesetzt werden, die über keinen Zugang zu Quantenhardware verfügen. Der Aufbau des im Anwendungsfall implementierten QGAN ist in Abbildung 18, B schematisch illustriert. Im Gegensatz zur One-Class SVM ist die erforderliche Anzahl an Qubits für ein QGAN nicht von der Anzahl der Trainingsdatensätze, sondern von der Anzahl der Merkmale der Trainingsvektoren abhängig. Im Anwendungsfall konnte das Potenzial der Implementierung daher bereits anhand eines kleinen Auszugs des KDD99-Datensatzes mittels Tensorflow-Quantum evaluiert werden (bis zu 100 Trainingsschritte mit etwa 200 Trainingsdatensätzen, Abbildung 18, C). Im Verlauf des Trainings werden die einzelnen Trainingsdatensätze geladen, um die Gewichte bzw. Winkel des qGenerators einzustellen. Für die Beurteilung der Performanz der Implementierung wird neben der Klassifizierungsgenauigkeit auch die mittlere quadratische Abweichung der Klassifizierung (engl. mean squared error) berechnet. Letzteres bewertet die Güte der Klassifizierung: je kleiner die Abweichung, desto größer die Gewissheit. Die Ergebnisse der Evaluation zeigen, dass das implementierte Modell im Prinzip funktioniert und Potenzial hat. Die Klassifizierungsgenauigkeit des QGAN nimmt mit der Anzahl der Qubits und der Tiefe der Schaltkreise zu, während die mittlere quadratische Abweichung abnimmt (Abbildung 18, C). Die maximale Klassifizierungsgenauigkeit und die minimale mittlere quadratische Abweichung des QGAN sind zudem mit den Kennzahlen eines klassisch-implementierten GAN vergleichbar (Abbildung 18, C). In Zukunft soll sowohl der Aufbau der Quantenlayer als auch das Laden bzw. Einlesen der Trainingsdatensätze in den Quantencomputer variiert werden, um einen möglichen Quantenvorteil nachzuweisen.

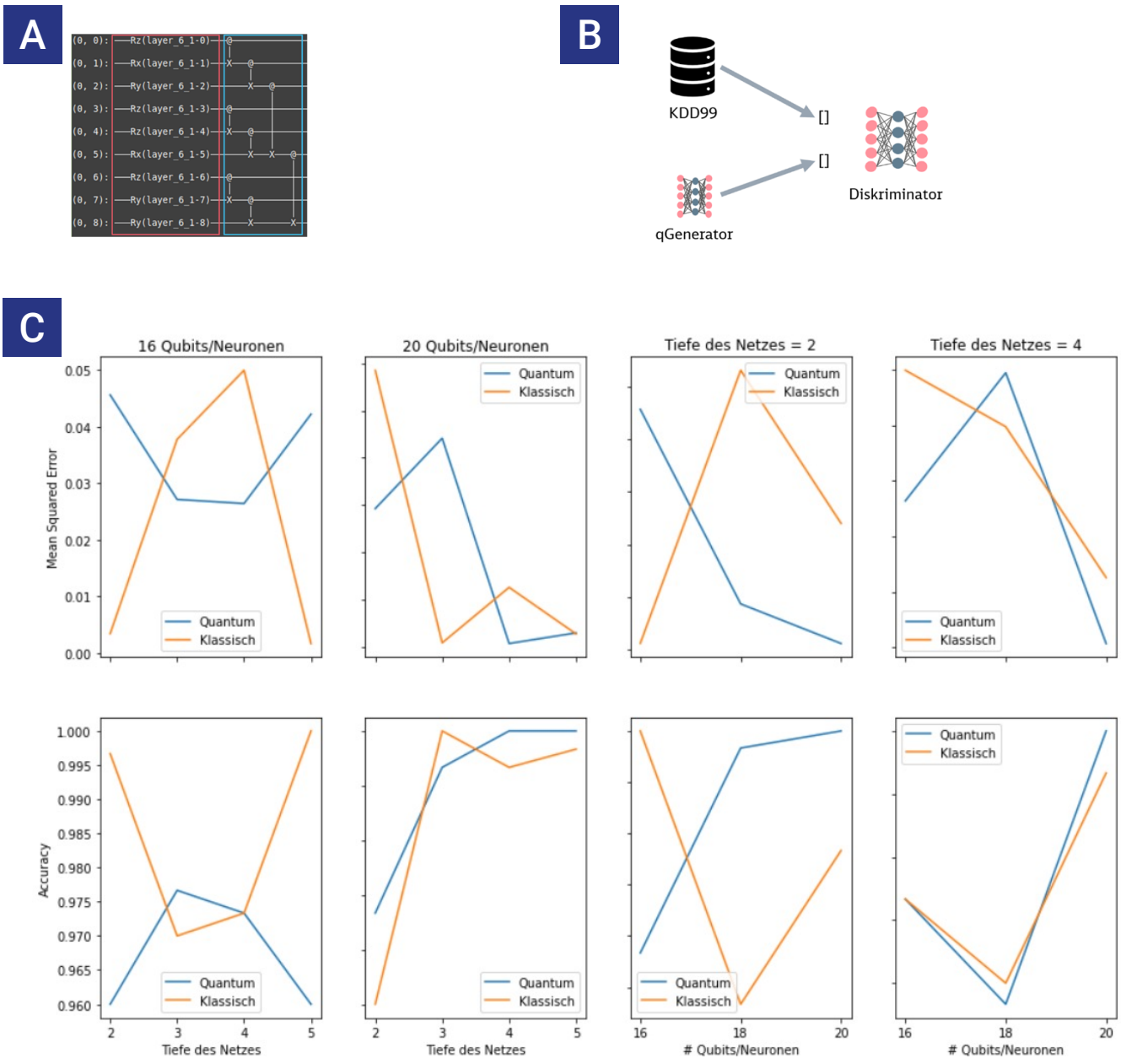


Abbildung 18: Anwendungsfall 8, Lösungsansatz 2. (A) Beispielhafte Darstellung eines neuronalen Quantennetzwerks (QNN) mit einer Schaltkreistiefe von 1. (B) Schematischer Aufbau des im Anwendungsfall implementierten QGAN. Der Generator wurde um ein QNN erweitert (qGenerator), der Diskriminator ist klassisch implementiert. (C) Klassifizierungsgenauigkeit und mittlere quadratische Abweichung des im Anwendungsfall implementierten QGAN als Funktion der Schaltkreistiefe und der Anzahl der Qubits. Die Linien sind repräsentativ für 100 Trainingsschritte.

3.4.3 Anwendungsfall 9: Sicherheit digitaler Ökosysteme – Identitätsschutz und Kommunikationssicherheit

AF9: SICHERHEIT DIGITALER ÖKOSYSTEME Identitätsschutz und Kommunikationssicherheit			
ANWENDUNGSDOMÄNE	IT-Sicherheit	HANDLUNGSFELD	ID- und IT-Dienstleistungen
PROBLEMKATEGORIE	ML/KI	PROBLEMKLASSE	Anomalieerkennung
HANDLUNGSBEDARF	Die organisierte Internetkriminalität nimmt zu, insbesondere in Hinblick auf Identitätsdiebstahl (z. B. durch gezielte Netzwerkangriffe). Die Leistungsfähigkeit existierender klassischer Abwehrsysteme ist aufgrund des hohen Datenvolumens eingeschränkt.		
POTENZIAL UND NUTZEN	Gewährleistung von ID-Schutz und IT-Sicherheit.		
LÖSUNGSANSATZ	Entwicklung einer Strategie für die quantenrechnergerechte Datenvorverarbeitung zur Erkennung von Netzwerkanomalien.		
MODEL	nicht definiert	ALGORITHMUS	nicht definiert
HARDWARE	nicht definiert	DATEN	Kaggle Datensätze, NYC Taxi Datenbank, reale Daten (LOG-Files)
BESONDERHEITEN	Die Anonymisierung und Dimensionsreduktion der Daten bei gleichzeitigem Erhalt der in ihnen enthaltenen Anomalien ist eine bisher ungelöste Herausforderung (dies betrifft auch die Use Cases 7 und 8). Im Use Case wird ein Lösungsansatz entwickelt.		
ENTWICKLUNGSSTAND	Konzeption		
HORIZONT ZUR MARKTREIFE	nicht definiert		
INHABER	Bundesdruckerei GmbH (Dr. Olga Kulikovska, Andreas Wilke)		

Im Zentrum des von der Bundesdruckerei verfolgten Anwendungsfall 9 steht die Entwicklung von Strategien und Technologien, die ID-Schutz und IT-Sicherheit im Post-Quantum-Zeitalter gewährleisten. Eine wesentliche Frage ist z. B. wie man sich zukünftig vor Netzwerkangriffen (von innen und außen) in Echtzeit schützen kann; mit hoher Genauigkeit und Präzision. Wie in den Anwendungsfällen 7 und 8 wurden zu Beginn Ansätze aus der Problemklasse Anomaliedetektion der Problemkategorie ML/KI verfolgt. Die Implementierung gängiger Algorithmen auf Quantenhardware und klassischer Hardware (z. B. QSVM, SVM) hat dabei jedoch für die ausgewählten Datensätze (unter anderem Kaggle Datensätze zu Netzwerkanomalien, NYC Taxi Datenbank) keinen signifikanten Quantenvorteil demonstriert. Neben den genannten öffentlich zugänglichen Datensätzen sollten auch interne Datensätze aus dem Haus der Bundesdruckerei aufbereitet und untersucht werden, insbesondere Logdateien der IT-Systeme. Die Logdateien enthalten jedoch kritische und sensible Informationen. Eine Herausgabe an Dritte wie etwa die Projektparteien ist daher grundsätzlich ausgeschlossen. Dies ist ein Problem, das auch die Anwendungsfälle 7 und 8 betrifft. In Abstimmung mit den Beteiligten dieser Anwendungsfälle hat die Bundesdruckerei sich im Folgenden daher auf die Aufbereitung und Anonymisierung von Logdateien konzentriert. Die Charakterisierung des Informationsgehalts der Daten aus Logdateien und die Verfolgung bekannter Anonymisierungsstrategien hat ergeben, dass keine universell anwendbare Lösung für das Problem existiert. Ursächlich dafür ist die Tatsache, dass die Anonymisierung nicht nur an die jeweiligen Datensätze, sondern auch an den gewünschten bzw. erforderlichen Ziel-Informationsgehalt angepasst werden muss (z. B.

durch Dimensionsreduktion). Im Zuge eines solchen Anonymisierungsprozesses kann es dazu kommen, dass die Anomalien in den Daten vernichtet werden. Die Vorverarbeitung und Anonymisierung von Datensätzen bei gleichzeitigem Erhalt der in ihnen enthaltenen Anomalien stellt somit eine bisher ungelöste Herausforderung dar. Im Rahmen der Arbeiten des Dahlem Center für komplexe Quantensysteme der Freien Universität Berlin[29] konnte zudem gezeigt werden, dass die Datenvorverarbeitung, insbesondere die Art und Weise, wie die Daten an einen Quantenrechner übergeben werden, einen starken Einfluss auf die Performanz von Quanten-Machine-Learning-Modellen hat (Schuld et al. 2021). Die Bundesdruckerei sieht daher insgesamt großes wissenschaftliches und wirtschaftliches Potenzial in der Entwicklung von problemspezifischen quantenrechnergerechten Datenvorverarbeitungsroutinen und will dies im Anwendungsfall weiterverfolgen. Für die Vorverarbeitung von Datensätzen für die quantenrechnerbasierte Anomaliedetektion liegt bereits ein erster entsprechender Ansatz vor, der im Folgenden kurz dargestellt wird.

Ziel des verfolgten Ansatzes ist eine Routine zur quantenrechnergerechten Vorverarbeitung von Datensätzen für die Anomaliedetektion. Die Vorverarbeitung darf die anschließende Auswertung der Daten nicht beeinflussen, Anomalien müssen erhalten bleiben. Datensätze werden zunächst aus den notwendigen Datenquellen extrahiert, gegebenenfalls bereinigt und anschließend in einer CortexDB[30] Datenbank zusammengeführt (siehe Abbildung 19). In CortexDB werden die Datensätze normalisiert und in einen komplett invertierten Index überführt. In der Regel verwenden Datenbanken einen Vorwärtsindex, das heißt, Einträge (z. B. Dokumente) verweisen auf Inhalte (z. B. Wörter). Der invertierte Index ist ein Datenbankindex, der Inhalte (z. B. Wörter) entsprechend ihrer Lokalität in einer Tabelle, einer Datenbank oder einem Dokument kartiert und speichert. Das heißt z. B., dass nun eine Liste von Wörtern auf Dokumente zeigt, die sie beinhalten. Durch die Vorverarbeitung in CortexDB entsteht eine neue, kompaktere Datenbasis mit schlankerer Struktur (unter anderem durch Reduzierung der Anzahl der Variablen). Zusammenhänge zwischen den einzelnen Datensätzen sollen dadurch leichter identifizierbar sein. Datensätze aus einer öffentlich-verfügbaren Datenbank (NYC Taxi Datenbank) wurden bereits in CortexDB importiert und der vorgestellten Strategie entsprechend vorverarbeitet. Im Anwendungsfall wird derzeit ein Vergleich der Performanz der Anomaliedetektion auf Basis der Originaldaten und der vorverarbeiteten Daten angestrebt.

Der im Anwendungsfall entwickelte Ansatz ist zwar ein erster Schritt, er löst aber noch nicht das Problem, dass sich eine Anonymisierung von Datensätzen unter Umständen negativ auf eine anschließende Anomaliedetektion auswirkt. Es besteht das generelle Problem, dass eine technische Definition von Anonymisierung schwierig ist. So gibt es z. B. keine Werkzeuge, mit denen sich überprüfen lässt, ob und wann tatsächlich Anonymisierung erreicht ist. Eine weitere Herausforderung, die sich stellt, ist die Festlegung, was man überhaupt anonymisieren sollte bzw. muss. Der Inhaber des Anwendungsfalls setzt sich daher verstärkt auch mit Themen wie Differential Privacy (engl. für „differentielle Privatsphäre“) auseinander, unter anderem im Rahmen eines Austauschs mit der Europäischen Organisation für Kernforschung (CERN) zum Thema Nutzung von Mobilfunkdaten zur Covid-19 Pandemiebewältigung.

Datensparsamkeit und Energieeffizienz sind in den Augen der Inhaber des Anwendungsfalls zwei weitere wichtige Aspekte, die für die Definition der zukünftigen Infrastruktur für Quantencomputing berücksichtigt werden müssen. Insbesondere gilt es, Wege zu finden, sinnlose Daten bzw. Datenmüll zu identifizieren und zu löschen. Es können nicht auf unbestimmte Zeit unendlich viele Daten gehalten werden, da irgendwann das Energielimit erreicht wird. In diesem Kontext stellt sich auch die spannende Frage, ob und wie Quantencomputing allgemein dazu beitragen kann, die Energieeffizienz von Algorithmen zu verbessern.

29 Partner des PlanQK-Konsortiums

30 CortexDB ist ein kommerzielles Datenbankmanagementsystem (Multi-Model NoSQL DBMS), Link https://docs.cortex-ag.com/de/. Wodurch sich CortexDB von anderen Systemen abgrenzt, ist einem Webartikel zu entnehmen, der 2019 im Online-Magazin Informatik Aktuell erschienen ist: https://www.informatik-aktuell.de/betrieb/datenbanken/adaptive-informationskontext-management-systeme.html

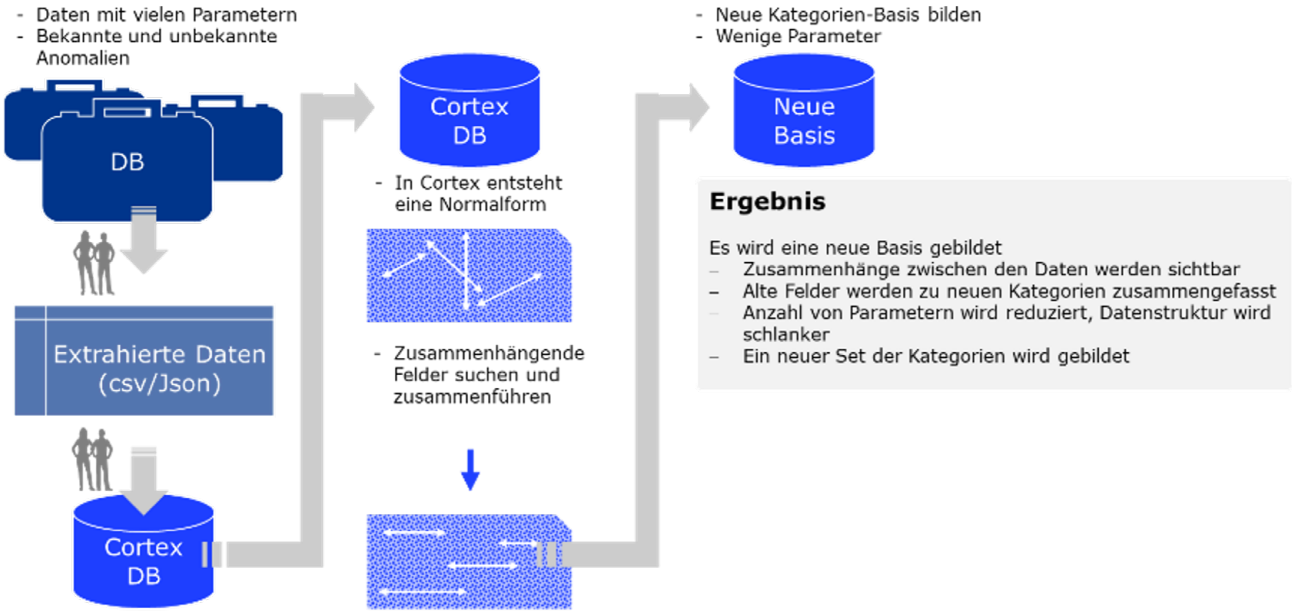


Abbildung 19: Anwendungsfall 9. Schematische Darstellung des Ansatzes zur quantenrechnergerechten Vorverarbeitung von Datensätzen für die Anomaliedetektion. Im Zentrum des Ansatzes steht die Normalisierung und Überführung der Datensätze in einen komplett invertierten Index in der CortexDB.

4 GESAMTBETRACHTUNG DER ANWENDUNGSFÄLLE: CHANCEN UND HERAUSFORDERUNGEN

4 GESAMTBETRACHTUNG DER ANWENDUNGSFÄLLE: CHANCEN UND HERAUSFORDERUNGEN

In Hinblick auf den Entwicklungsstand sind alle vorgestellten Anwendungsfälle der Phase Proof-of-Concept zuzuordnen. Stark vereinfacht heißt dies, dass die jeweiligen Inhaber der Anwendungsfälle zunächst ausloten, ob sich die Entwicklung einer Software lohnt. „Lohnen" bezieht sich in diesem Zusammenhang nicht nur auf das wirtschaftliche Potenzial, sondern vor allem auch auf die generelle Machbarkeit des Vorhabens. Auffällig ist in dieser Hinsicht, dass die Limitierung der Hardware (in der jetzigen NISQ-Ära) zwar über alle Anwendungsfälle hinweg als Einschränkung angeführt wird, jedoch nicht als die einzige zentrale Hürde oder Herausforderung für die Softwareentwicklung angesehen wird. Ausschlaggebend dafür sind zwei Aspekte, die von den Expertinnen und Experten unabhängig voneinander in nahezu allen Interviews benannt wurden:

1. Aus Sicht der Domänen-Sachverständigen steckt bereits in kleinen Verbesserungen – insbesondere von Optimierungsproblemen – ein gegebenenfalls hohes wirtschaftliches Potenzial. Dabei kann es sich um rein qualitative Verbesserungen von Teilproblemlösungen handeln. Das Erreichen bzw. der quantitative Nachweis eines Quantenvorteils spielt für die Domänen-Sachverständigen in der Regel eine untergeordnete Rolle. Entscheidend ist für sie vor allem die Größe des Effekts, den die neue Lösung auf ihr Unternehmen hat (z. B. Kosteneinsparung oder Ablaufeffizienz). Diese Effektgröße skaliert zum jetzigen Zeitpunkt nicht ausschließlich mit der Verfügbarkeit von Hardwareressourcen.

2. Aus Sicht der technologischen Fachleute, die mit der Umsetzung der Software betraut sind, gibt es vorgelagerte Hürden im Entwicklungsprozess, die unabhängig von der Hardwareverfügbarkeit erfolgreich genommen werden müssen. Zu diesen Hürden zählt insbesondere der Implementierungsprozess (Modell, Algorithmus) selbst, sowie die quantencomputergerechte Vorverarbeitung der Daten. Im Rahmen der Implementierung muss eine mathematische Problemformulierung in ein Format übertragen werden, das Quantencomputer verstehen und adäquat verarbeiten können. Die Übertragung einer anwendungsfallspezifischen Problemformulierung ist daher oft mit einem hohen Forschungs- und Entwicklungsaufwand verbunden. Dies gilt ebenso für die quantencomputergerechte Vorverarbeitung der Daten eines Anwendungsfalls. Um einen Algorithmus ausführen zu können, müssen zunächst die Daten geladen und in Qubits codiert werden (engl. data encoding). Wie effizient dieser Ladevorgang ist, hängt dabei sowohl von den Daten selbst als auch dem Codierungsverfahren ab. Es existieren unterschiedliche Codierungsverfahren (Weigold et al. 2020, 2021). Die Wahl muss für jeden Anwendungsfall individuell abgewogen werden[31]. Dabei muss zusätzlich berücksichtigt werden, dass die Codierung auch einen Einfluss auf die Aussagekraft eines Modells insgesamt haben kann (Schuld et al. 2021). Für Daten aus realen Anwendungsszenarien stellen sich weitere Herausforderungen, insbesondere in Hinblick auf ihre (Pseudo-)Anonymisierung und Dimensionsreduktion. Mit zunehmender Größe und Komplexität eines Datensatzes wird eine Anonymisierung ohne hohen Informationsverlust immer schwieriger. Da Quantencomputer es in Zukunft ermöglichen sollen, wesentlich größere und komplexere Datensätze zu verarbeiten, als es heute der Fall ist, wird sich das Problem voraussichtlich verschärfen. Forschende von Google Quantum AI haben in Zusammenarbeit mit dem California Institute of Technology (Caltech) darüber hinaus kürzlich gezeigt, dass die Datenverfügbarkeit allein einen großen Einfluss auf die Komplexität von Problemen der Kategorie ML/KI hat und somit darauf, ob ein quantenbasiertes Modell überhaupt einen Vorteil gegenüber klassischen Modellen verspricht (Huang et al. 2021). Daten haben die Macht, ein zunächst unterlegen scheinendes klassisches Modell zu einem ernsthaften Konkurrenten zu heben. Aufgrund dieser Eigenschaft, auch unter dem englischen Begriff „power of data" bekannt, sollte für die Abschätzung eines Quantenvorteils neben der Ausgangskomplexität des Problems auch immer die Datenverfügbarkeit berücksichtigt werden. Insgesamt ergibt sich das Bild, dass das Thema „Daten" noch eine hohe Hürde im Entwicklungsprozess von Software darstellt.

31 https://quantumzeitgeist.com/quantum-encoding-an-overview/

Die in den vorgestellten Anwendungsfällen verfolgten Lösungsansätze sind fallspezifisch individuell und die Evaluation ihrer Güte erfolgt noch nicht entlang gemeinsamer bzw. festgelegter Kriterien. Dies erschwert die Vergleichbarkeit. Eine allgemeingültige, belastbare Zuordnung von Problemklassen zu Algorithmen oder Algorithmen zu Hardware lässt sich zu diesem Zeitpunkt noch nicht ableiten. Generell kommen derzeit variationelle sowie hybride Algorithmen stark zum Einsatz, da sie es ermöglichen, die Limitierungen der verfügbaren Hardware zu umgehen. Unabhängig von der Problemklasse und der Hardware beeinträchtigt zudem oft die hohe Anzahl an Rand- und Nebenbedingungen die Implementierung. Auch hier stellen hybride Modelle, bei denen klassische Algorithmen zur Überprüfung der Bedingungen herangezogen werden, eine Lösungsoption dar, die in den meisten Anwendungsfällen verfolgt wird.

Im Rahmen des Anwendungsfalls zur Personaleinsatzplanung (Anwendungsfall 2) konnte anhand eines hybriden quantenunterstützten genetischen Algorithmus bereits demonstriert werden, dass diese Lösungsoption vielversprechend ist. Die Verwendung hybrider Modelle und Algorithmen spiegelt einen Aspekt des Quantencomputings wider, den die Befragten in den Interviews betont haben. Es geht nicht darum, das klassische Computing vollständig zu ersetzen, sondern sinnvoll zu ergänzen. Dies zeigt sich auch in den Lösungsansätzen für Probleme der Klasse Anomaliedetektion der Problemkategorie ML/KI. Hier zeichnet sich eine Tendenz zu generativen Modellierungsframeworks wie GAN ab, bei denen nur ein Teil des Frameworks, der Generator, durch einen Quantenalgorithmus ersetzt wird (QGAN), während der Diskriminator weiterhin klassisch gehalten wird.

In den Anwendungsfällen zur Detektion betrügerischer Kreditkartentransaktionen und zur Detektion von Netzwerkangriffen konnte demonstriert werden, dass die Lösungsfindung erster implementierter QGAN mit der Lösungsfindung klassisch-implementierter GAN für reduzierte Datensätze vergleichbar ist. Generative Technologien wie QGAN haben disruptives Potenzial, da sie gegebenenfalls Einfluss auf die Breite und Güte zukünftig möglicher KI-Anwendungen haben. Aufgrund einer unzureichenden Trainingsgrundlage können manche KI-Anwendungen zum jetzigen Zeitpunkt noch gar nicht oder nur unter Qualitätseinbußen trainiert werden. Gelingt es, generative Verfahren zu etablieren, mit denen sich die Trainingsgrundlage durch synthetisch erzeugte Daten sinnvoll erweitern lässt (engl. synthetic data augmentation), entfallen diese Einschränkungen. Für klassisch-implementierte GAN konnte dies bereits für medizinische Anwendungen demonstriert werden (Bildklassifizierung (Frid-Adar et al. 2018), Bildsegmentierung (Sandfort et al. 2019)). QGAN könnten perspektivisch auch dazu genutzt werden, Datensätze, die aufgrund von Privacy-Bedenken nicht teilbar sind, in synthetische Abbilder zu überführen, die teilbar sind (Jordon et al. 2019). Im Zuge solcher Entwicklungen würde der Handel mit Daten voraussichtlich erheblichen Änderungen unterliegen. Zugleich würden sich neue regulatorische, IP-rechtliche und ethische Herausforderungen stellen: Wem gehören die künstlich generierten Daten, ist das IP-Recht überhaupt anwendbar und wie wird sichergestellt bzw. nachgewiesen, dass die künstlichen Daten keinen Bias erzeugen? Können die Anforderungen an Transparenz und Erklärbarkeit von KI-Anwendungen dann überhaupt noch erfüllt werden, und wenn ja, wie? Neben einem qualitativen Mehrwert (z. B. Verbesserung der Leistungsfähigkeit von generativen Modellen) wird das Potenzial quantenunterstützter KI von den Expertinnen und Experten auch in quantitativen Mehrwerten, wie der Prozessierung größerer und komplexerer Datensätze und der Beschleunigung der Laufzeiten der bedeutendsten und am weitesten verbreiteten Algorithmen gesehen.

Im Rahmen der für die Studie durchgeführten Interviews wurden von den Befragten auch anwendungsfallübergreifende Aspekte von Quantencomputing thematisiert, wie etwa Regulierung, Ethik und Nachhaltigkeit. Neben dem wirtschaftlich disruptiven Potenzial von Quantencomputing wird gerade in der anwendungsnahen Softwareentwicklung ein transformatives gesellschaftliches Potenzial gesehen. Eine zukünftige Herausforderung, die sich stellen wird, ist, die Interessen von Unternehmen und Gesellschaft in Einklang zu bringen. Da es sich laut der meisten Expertinnen und Experten nicht mehr um die Frage handelt, ob sich Quantencomputing als Technologie etablieren wird, sondern eher wann dies der Fall sein wird, sollte ein entsprechender Gestaltungsprozess

möglichst früh eingeleitet werden. Zentrale Fragen, die sich in diesem Prozess stellen, sind die Demokratisierung des Zugangs zu der Technologie selbst sowie den mit ihr erzielten Ergebnissen, die Folgenabschätzung und die Etablierung von Quantenethik-Leitlinien. Gerade in Hinblick auf die Quantenethik besteht ein großer Handlungsbedarf, wie ein aktueller Aufruf zur Aktion von international führenden Köpfen des Quantencomputing unlängst unterstreicht[32]. Die Themen Rechtsrahmen und Regulierung von Quantencomputing werden auch in der Fachliteratur zunehmend diskutiert (Kop 2020; Jeutner 2021).

Insbesondere aufgrund der großen Herausforderungen in Hinblick auf die Daten und den Implementierungsprozess raten die Expertinnen und Experten zu einem frühen Einstieg in das Thema anwendungsbezogene Quantensoftwareentwicklung, insofern der Effekt der angestrebten Lösung auf das eigene Unternehmen als groß identifiziert wurde. Da diese Herausforderungen auch unabhängig von der verfügbaren Hardware bereits angegangen werden können, sollten Unternehmen nicht auf die Hardware warten, sondern die Zeit nutzen, sich durch eine frühe Auseinandersetzung mit dem Thema einen Vorteil zu verschaffen. Auch wenn die Phänomene der Quantenphysik oft nicht intuitiv greifbar sind, so basiert doch ihre Beschreibung gerade im Kontext der Programmierung von Quantencomputern auf einfachen mathematischen Prinzipien. Formulierungen der Zustände und Operationen auf Qubits werden durch lineare Algebra ausgedrückt. Diese ist ebenso Grundlage klassischen, datenzentrierten Programmierens. Ein Einstieg in die Programmierung von Quantencomputern ist also prinzipiell für Softwareentwickler auch ohne fundiertes Studium der Quantenmechanik möglich. Ökosysteme für anwendungsbezogene Quantensoftware befinden sich gerade im Aufbau, die Communitys sind von einem sehr offenen, austauschorientierten Klima geprägt. Da Exklusivität und IP noch eine untergeordnete Rolle spielen, können gerade jetzt besonders gut Netzwerke geknüpft werden, die den Zugang zu Technologien und den Einstieg in die Softwareentwicklung erleichtern. Eine erste Orientierungshilfe für den Einstieg bieten zwei Werkzeuge des Quantum Applications and Research Laboratory (QAR-Lab) der LMU München, die im folgenden Kapitel vorgestellt werden.

32 Mini-Dokumentation des Nachrichtenportals „The Quantum Daily" mit dem Titel „Quantum Ethics – A Call to Action": https://www.youtube.com/watch?app=desktop&v=5qc7gpabEhQ

5 ORIENTIERUNGS-HILFEN DES QAR-LAB FÜR DEN EINSTIEG IN DAS ANWENDUNGS-ORIENTIERTE QUANTENCOMPUTING

5 ORIENTIERUNGSHILFEN DES QAR-LAB FÜR DEN EINSTIEG IN DAS ANWENDUNGS-ORIENTIERTE QUANTENCOMPUTING

Die Mission des QAR-Labs[33] der LMU München ist es, den Zugang zu Quantencomputing für Interessierte aus Wissenschaft und Wirtschaft zu erleichtern. Im Folgenden werden zwei Werkzeuge vorgestellt, die das Lab entwickelt hat, um (i) die unternehmenseigene Quantencomputing-Bereitschaft einzuordnen und gezielt weiterzuentwickeln (QC-Treppe) und (ii) das Potenzial von Anwendungsfällen für das eigene Unternehmen zu identifizieren (4-Kriterien-Katalog).

5.1.1 Die QC-Treppe – Werkzeug zur Einordnung und Weiterentwicklung der eigenen Quantencomputing-Bereitschaft

Das QAR-Lab rät Unternehmen dazu, als ersten Schritt die eigene Quantencomputing-Bereitschaft einzuordnen und sie anschließend gezielt weiterzuentwickeln. Es schlägt dazu eine Einteilung der Bereitschaft in sechs Level vor (Linnhoff-Popien 2021b), die für diese Studie als Treppenmodell visualisiert wurde (siehe Abbildung 20). Die Antrittsstufe „Thinking" der Treppe ist erreicht, wenn das Thema Quantencomputing bereits als potenziell wirtschaftlich relevant für das eigene Unternehmen erkannt wurde. Wenn zudem bekannt ist, in welchen Bereichen derzeit das größte wirtschaftliche Potenzial für Quantencomputing gesehen wird (Problemkategorien: Optimierung, chemische Simulation, ML/KI) und wie sich Quantencomputing in die bestehende IT-Landschaft einbettet (Ergänzung für komplexe Probleme, kein Ersatz), dann ist die zweite Stufe „Classification" erreicht. Die dritte Stufe „Discovery" wird durch die Erstellung einer Longlist von Anwendungsfällen mit Quantencomputing-Potenzial erklommen. Erfahrungsgemäß sollte sie 25–75 Einträge lang sein. Die Longlist muss als Nächstes durch Bewertung und Priorisierung der Anwendungsfälle zu einer Shortlist eingedampft werden (z. B. durch Nutzung des 4-Kriterien-Katalog-Werkzeugs, Abbildung 21). Sobald ein Anwendungsfall-Favorit identifiziert ist, ist die nächste Stufe „Selection" geschafft. Weiter geht es mit einem Sprung, der Umsetzung des Favoriten auf mehreren Quantencomputern. Das QAR-Lab empfiehlt, möglichst viele Lösungen (z. B. Quantenannealing, gatterbasiertes Quantencomputing), Varianten der Lösungen und Anbieter für die Lösungen zu vergleichen, um sicher auf der Stufe „Implementation" zu landen und um die letzte Stufe „Prediction" nehmen zu können. Um das Treppenplateau zu erreichen, muss nämlich, ausgehend von den Ergebnissen der Implementierung (z. B. Laufzeit, Güte der Lösung, Bedarf an Qubits), hochgerechnet werden, wann die benötigte Hardware vermutlich verfügbar sein wird, und daraus abgeleitet werden, wann der verfolgte Anwendungsfall-Favorit einen Quantenvorteil erreichen kann.

33 https://qarlab.de/

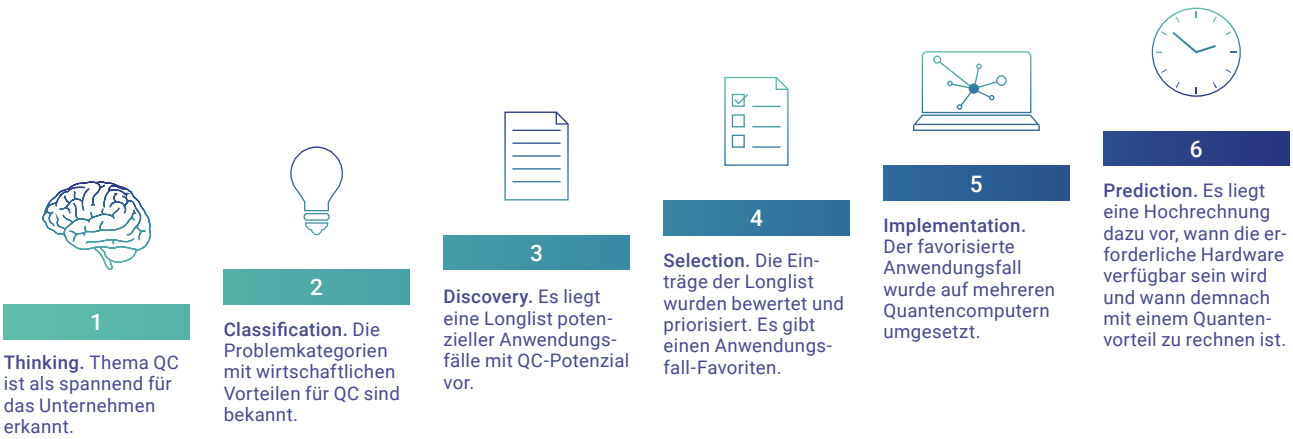


Abbildung 20: QC-Treppe des QAR-Lab für Unternehmen[34]. Die Treppe dient dazu, die unternehmenseigene Quantencomputing-Bereitschaft einzuordnen und gezielt weiterzuentwickeln.

34 Modifiziert nach: https://digitaleweltmagazin.de/magazin/wie-jetzt-der-aufbruch-in-ein-neues-zeitalter-beginnt/

5.1.2 Der 4-Kriterien-Katalog: Werkzeug zur Identifizierung von Anwendungsfällen

Ein grundlegender Schritt für den Ausbau der eigenen Quantencomputing-Bereitschaft ist es, Anwendungsfälle zu identifizieren und zu bewerten (siehe Abbildung 20, Stufen Discovery und Selection der QC-Treppe). Welche Anwendungsfälle gibt es und welcher Anwendungsfall hat aus Software-Sicht das größte Potenzial für das Unternehmen? Wie kann man die Anwendungsfälle einer Longlist gewichten? Das QAR-Lab hat mit dem 4-Kriterien-Katalog ein Werkzeug entworfen, das bei der Beantwortung dieser Fragen unterstützen soll (Abbildung 21). Herzstück des Katalogs ist die Definition von vier grundlegenden Kriterien, die einen Anwendungsfall ausmachen: Er sollte schwer, wichtig, passend und frühzeitig umsetzbar sein (Linnhoff-Popien 2021a). Wie das Werkzeug eingesetzt werden kann, wird im Folgenden am Beispiel des Airport-Gate-Assignment-Problems (AGAP) demonstriert. Beim AGAP handelt es sich um eine Problemklasse aus der Problemkategorie Optimierung, in deren Mittelpunkt die effiziente Zuweisung von Flughafengates steht. Beim klassischen AGAP wird nach der optimalen Zuweisung von Flugzeugen zu Flughafengates gesucht, mit dem Ziel, die Anzahl der nicht zugewiesenen Flugzeuge, die Gesamtlaufstrecke umsteigender Passagiere sowie die Anschlusszeit zu minimieren.

Schwere Anwendungsfälle

Unter schweren Anwendungsfällen versteht man Fälle, deren zugrundeliegendes Problem mit den derzeit zur Verfügung stehenden klassischen Mitteln nicht, nur unzureichend oder nur unter Aufbringung enormer Rechenzeit lösbar ist. Dazu zählen vor allem Probleme mit hoher Komplexität bzw. Schwere wie das kombinatorische AGAP Problem. Die theoretische Komplexität eines Problems lässt sich abschätzen, wenn das zugrundeliegende mathematische Modell bekannt ist[35]. In die Betrachtung der Komplexität sollten neben der theoretischen Abschätzung auch die tatsächlichen Problemgrößen in der Praxis einbezogen werden. Für den Fall des AGAP hat sich dabei z. B. herausgestellt, dass der praktische Einsatz klassisch implementierter Lösungen durch die verfügbare Rechenzeit per se sehr begrenzt ist (eine Tagesplanung, die länger als eine Nacht berechnet werden muss, ist nicht praktisch).

Wichtige Anwendungsfälle

Wenn die quantenbasierte Problemlösung eines Anwendungsfalls einen großen Effekt hat, z. B. in Hinblick auf Kosteneinsparungen oder Verbesserung der Organisation/Abläufe, liegt ein wichtiger Anwendungsfall vor. Wenn es um die Abschätzung der Effekte geht, dann sind allem voran die Domänen-Sachverständigen der Anwendungsfälle gefragt – intern oder extern, sie sollten eng eingebunden werden. Im Fall des AGAP konnte durch den Austausch mit Fachleuten aus der allgemeinen Luftfahrt sowie Flughafenbetreibern die Lösung des AGAP als eine der bedeutendsten Kosteneinsparungsquellen identifiziert werden. Selbst eine Teillösung, die die Tagesplanung partiell verbessert, kann einen großen Effekt haben, indem sie Ressourcen öffnet (z. B. Erhöhung der maximalen Zahl der handhabbaren Flugzeuge pro Tag durch eine schnellere Zuweisung von Parkpositionen). Sollte eine Lösung gefunden werden, die die bestehenden klassischen Lösungen hinsichtlich der Rechenzeit deutlich unterbietet, können sich Organisation und Abläufe maßgeblich ändern – z. B. durch den Übergang von tage- zu schichtweiser oder gar Echtzeitplanung.

Passende Anwendungsfälle

Ein passender Anwendungsfall liegt immer dann vor, wenn für das zugrundeliegende Problem bereits (prospektive) Lösungsansätze existieren bzw. bekannt sind, die (i) Software und Hardware einschließen und für die (ii) ein messbarer Vorteil vorliegt. Für kombinatorische Optimierungsprobleme wie das AGAP liegen Lösungsansätze vor, unter anderem die Formulierung als QUBO und anschließende Implementierung auf einer Annealer-Hardware. Es hat sich jedoch gezeigt, dass die QUBO-Übersetzung ineffizient ist, sie dehnt die Problemformulierung zu sehr aus (siehe hierzu auch die Anmerkungen zur mathematischen Formulierung von Anwendungsfall 2). Der Anwendungsfall ist somit auf den ersten Blick nicht passend. Durch Einsatz von Tricks kann er aber durchaus passend genug gemacht werden. Mit Tricks sind hier problemspezifische Werkzeuge und Methoden gemeint, die oft erst noch entwickelt oder entsprechend angepasst werden müssen. Im Fall des AGAP konnte das QAR-Lab die Übersetzung durch neue Tricks verbessern.

35 Das Fachgebiet Komplexitätstheorie der Theoretischen Informatik beschäftigt sich maßgeblich mit der Abschätzung der theoretischen Komplexität und bietet Methoden an.

Frühe Anwendungsfälle

Wenn sich die quantenbasierte Lösung eines Problems bereits jetzt oder zumindest bald mit der aktuell verfügbaren (NISQ-)Hardware umsetzen lässt, liegt ein früher Anwendungsfall vor. Dabei ergibt es Sinn, sich bei den Anwendungsfällen zunächst auf die zu konzentrieren, die einen frühen Vorteil versprechen. Auch eine kleine Verbesserung der Performanz ist unter Umständen wirtschaftlich interessant (siehe wichtiger Anwendungsfall). Gewinne können gegebenenfalls auch durch Verwendung kleiner oder prototypischer Quantencomputer erzielt werden. Das AGAP zeichnet sich dadurch aus, dass aktuelle Übersetzungen eine hohe Dichte an Qubit-Interaktionen erfordern, die der Hardware noch Schwierigkeiten bereiten. Es stehen aber Brückentechnologien zur Verfügung, mit denen das Problem trotzdem bereits angegangen werden kann. Der Quantenannealer-Hersteller D-Wave Systems bietet z. B. umfangreiche hybride Cloud-Bibliotheken an, um Skalierungsprobleme vorerst abzufangen. Mit der eigenen Hardwarelösung von Fujitsu (Digital Annealing Unit) lassen sich Probleme, wie das beschriebene, zwar vorerst noch klassisch, aber im deutlich größeren Umfang als mit Quantencomputing-Hardware bearbeiten. Die Verfügbarkeit dieser Brückentechnologien spricht für einen Einsatz von AGAP-Lösungen in der Praxis in absehbarer Zeit.

Um zu bestimmen, ob die vier Kriterien des Katalogs erfüllt sind und somit ein echter Anwendungsfall vorliegt, arbeitet das QAR-Lab immer eng mit den Inhabern des Falls und ihren Domänen-Sachverständigen zusammen. Dies ist insbesondere wichtig, um eine auf den Fall zugeschnittene Anforderungsanalyse zu erstellen. Die Disziplin Quantencomputing ist noch sehr jung, weder standardisierte Prozesse noch generische Werkzeuge sind weit verbreitet. Die gemeinsame Entwicklung neuer Anwendungen entlang konkreter Fallbeispiele wie AGAP trägt entscheidend dazu bei, Erfahrungen zu sammeln, Best Practices zu entwickeln und somit das Feld insgesamt voranzubringen.

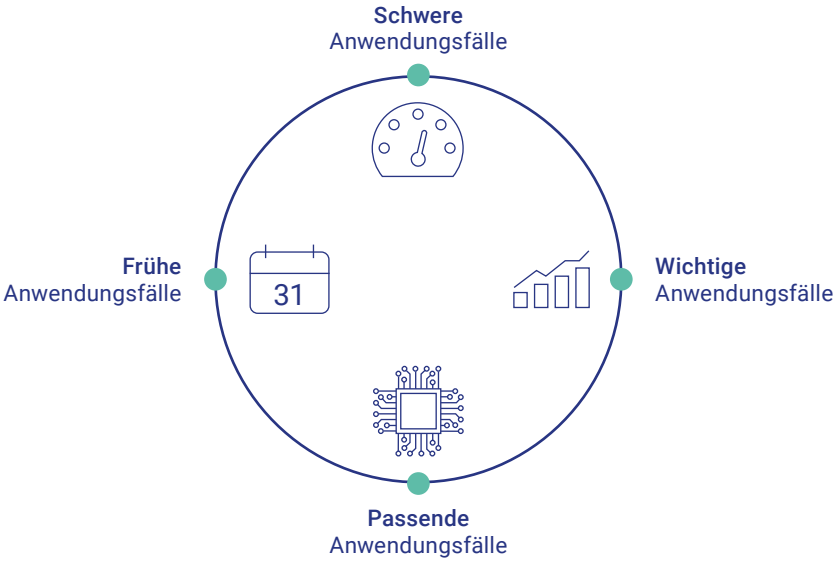


Abbildung 21: 4-Kriterien-Katalog des QAR-Lab.

6 ANALYSE DES WERTSCHÖPFUNGS-POTENZIALS VON QUANTENSOFT-WARE

6 ANALYSE DES WERTSCHÖPFUNGS-POTENZIALS VON QUANTENSOFTWARE

6.1 Status Quo

2020 lag das weltweite Marktvolumen für Quantencomputing (Hardware, Software, Speicherlösungen und Dienstleistungen) bei 260 Mio. USD (Kirkpatrick und Kaul 2019). Die industrielle Anwendung von Quantensoftware hat somit bisher kein signifikantes wirtschaftliches Gewicht erlangt. Dem stehen aktuell erhebliche Fördersummen und -aktivitäten für Hard- und Software in diesem Technologiesektor gegenüber: Mit insgesamt 2,7 Mrd. USD Förderung bis 2020 ist Deutschland hierbei führend, vor den USA mit 2,2 Mrd. USD, der Europäischen Union mit 1,2 Mrd. USD, jedoch nach China, das Quantencomputing Jahr für Jahr mit einer geschätzten Summe von 2,5 Mrd. USD fördert (McKinsey & Company 2020). Darüber hinaus wurden auch 2021 Förderprogramme aufgelegt. So entwickelt ein Konsortium unter Leitung des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) einen Quantencomputer mit 740 Mio. EUR Förderung. Hinsichtlich des Fördervolumens für Quantentechnologien ist Deutschland damit insgesamt gut aufgestellt.

Die Anzahl der Start-ups und die Investments in diese sind hingegen vor allem in den USA höher, aber auch in Kanada und in Großbritannien. Der Fokus der privaten und staatlichen Investitionen in Start-ups bis 2020 lag auf der Hardware von Quantencomputern. Mehr als neunzig Prozent des Finanzierungsvolumens, darunter die größten Investitionssummen, erhielten Hardwarehersteller (siehe Abbildung 22).

Unternehmen	Land	Geschäftsjahr	Produkt	Investitionsvolumen in Million USD
PsiQuantum	USA	2019	Hardware	230
PsiQuantum	USA	2020	Hardware	215
Xanadu	Kanada	2021	Hardware	100
Rigetti	USA	2020	Hardware	79
Silicon Quantum Computing	Australien	2017	Hardware	66

Abbildung 22: Top 5 der Investitionen in QC-Start-ups, Stand in 2020 (McKinsey & Company 2020, S. 11).

Noch ist unklar, welche Technologien sich bei Quantencomputern am Markt durchsetzen werden. Die Prognose des wirtschaftlichen Potenzials (siehe Kapitel 6.2) ist vom technologischen Fortschritt abhängig – vor allem davon, wann die wesentlichen Meilensteine der Quantenüberlegenheit hinsichtlich Fehlerquote, Rechenzeit und Problemkomplexität erreicht werden. In jedem Fall wird Quantencomputing hohe Anforderungen an die Betriebsbedingungen stellen und unter Umständen erhebliche Kosten für die Hardware verursachen. Daher basieren bestehende Prognosen auf der Annahme, dass Rechenkapazitäten primär mittels Quantencomputing-as-a-Service (QCaaS) über die Cloud bereitgestellt und Unternehmen diese in Verbindung mit klassischen Computern nutzen werden.

Darüber hinaus besteht ein erheblicher Bedarf an geeigneter Software und praktischen Anwendungen. Auf diese Entwicklungsbereiche entfielen bisher jedoch weit geringere Investitionsvolumina und Forschungsbudgets als auf die Hardwareentwicklung. Laufende Entwicklungen von Software werden derzeit schwerpunktmäßig in der Wissenschaft und durch eine Vielzahl an Start-ups vorangetrieben (McKinsey & Company 2020, S. 12 ff.; Tyborski und Koch 2021). Mit der seit Mitte 2021 ausgeschriebenen Förderung des anwendungsorientierten Quantencomputings durch das BMWK soll die Forschung und Entwicklung zu Software und ihre wirtschaftliche

Erschließung gestärkt werden. Die Notwendigkeit zur Förderung anwendungsbezogener Software wird auch in der nationalen Roadmap zum Quantencomputing betont (VDI Technologiezentrum GmbH 2021).

Neben aktuell noch hohen Kosten hemmen auch technische Hürden wie die geringe Rauschresistenz der Quantencomputer die industrielle Entwicklung und Verwendung von Software und sogenannten hybriden Algorithmen. Letztere ermöglichen es, Quantencomputing in Verbindung mit klassischer stationärer Rechentechnik und Infrastruktur zur Datenübertragung und -verarbeitung über Clouddienste zu nutzen. Lokal eingesetzte Quantencomputer bleiben auf absehbare Zeit die Ausnahme. Daher ist mit der Entstehung eines bedeutenden Marktes für kombinierte Leistungsangebote aus Software, Rechenkapazitäten und ergänzenden Services wie Datenaufbereitung und Konfiguration der Algorithmen zu rechnen, den Anbieter für Software künftig erschließen können (Kirkpatrick und Kaul 2019).

6.2 Wertschöpfungspotenzial

Zur Abschätzung der zukünftigen Wertschöpfungspotenziale des Quantencomputing gilt es, zunächst zwischen den Potenzialen aufgrund der Anwendung der Technologie und dem Umsatzpotenzial der Unternehmen zu unterscheiden, die entsprechende Lösungen anbieten. Während letztere den potenziellen Umsatz durch Hard- und Software, Services und Speicherlösungen widerspiegeln, ergeben sich erstere durch Umsatzsteigerungen und Effizienzgewinne von Unternehmen, die neue Anwendungen einsetzen.

Das Wertschöpfungspotenzial einer Technologie zu beziffern, bei der bis heute noch unklar ist, welche Verfahren sich tatsächlich etablieren, welche Branchen davon profitieren werden und wann mit entsprechenden Durchbrüchen in der Entwicklung zu rechnen sein wird, ist keine leichte Aufgabe. Entsprechend rar sind die bisherigen Versuche, dieses Potenzial zu quantifizieren. Von den wenigen bestehenden Untersuchungen bleiben viele zudem eine nachvollziehbare Beschreibung der zugrundeliegenden Methodik schuldig. Die hier dargestellten Wertschöpfungspotenziale basieren auf der Auswertung dreier relevanter Studien sowie auf eigenen, darauf aufbauenden Berechnungen. Langione et al. (2019) untersuchen das Wertschöpfungspotenzial von Anwendungen in unterschiedlichen Branchen innerhalb der nächsten drei Dekaden und damit welche Branchen von der Technologie am meisten profitieren werden. Russo, Thaker und Adam (2018) sowie Kirkpatrick und Kaul (2019) untersuchen zudem den Markt für Anwendungen und damit das Umsatzpotenzial für Anbieterunternehmen im weltweiten Markt für Quantencomputingtechnologien. Die Schätzungen des Wertschöpfungspotenzials werden in den genannten Studien in US-Dollar angegeben und im Folgenden anhand des durchschnittlichen Wechselkurses der letzten fünf Jahre (2016 bis 2020) in Euro umgerechnet. Die Prognosen in den folgenden Abschnitten beziehen sich auf die Jahre 2030, 2040, 2050 und bilden die jeweils jährliche Bruttowertschöpfung ab.

6.2.1 Wertschöpfungspotenziale durch den Einsatz von Quantencomputinganwendungen

Langione et al. (2019) analysieren die Produktivitätsgewinne für Unternehmen durch die Nutzung von Anwendungen entlang der drei Phasen NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum), Broad Quantum Advantage und Full-Scale Fault Tolerance. In der letzten Phase soll eine vollumfängliche Nutzung von Quantencomputern möglich sein. Ihre Schätzungen beruhen auf Interviews und Workshops mit mehr als 100 Expertinnen und Experten, der Durchsicht von rund 150 Peer-Review-Veröffentlichungen sowie auf der Analyse von mehr als 35 Anwendungsfällen. Angelehnt an die Ergebnisse dieser Studie werden im Folgenden zwei Szenarien dargestellt, ein

Base-Case- und ein deutlich optimistischeres Upside-Case-Szenario (Abbildung 23). Die beiden Szenarien unterscheiden sich dabei insbesondere in der Geschwindigkeit des technologischen Entwicklungsfortschritts.

Derzeit befindet sich die Technologie in der NISQ-Ära, die durch Geräte mit hohen Fehlerraten und eingeschränkter Funktionalität gekennzeichnet ist. Für die kommenden drei Jahre schätzen Langione et al. (2019) das jährliche Wertschöpfungspotenzial entsprechend auf zunächst 1,8 bis maximal 4,4 Mrd. EUR (zwei bis fünf Mrd. USD). Das wahre Potenzial der Technologie beginnt sich dagegen erst mit dem Eintritt in die nächste Phase und dem Erreichen des Broad Quantum Advantage zu entfalten. Dann erreichen Quantencomputer eine gegenüber herkömmlichen Computern überlegene Leistungsfähigkeit bei Aufgaben von tatsächlicher industrieller Bedeutung. Im besten Fall ist damit bereits bis zum Jahr 2030 zu rechnen. Das von Langione et. al. (2019) geschätzte Wertschöpfungspotenzial beläuft sich dabei auf jährlich 22 bis 44 Mrd. EUR (25 bis 50 Mrd. USD). Für den Upside Case kann daher von einem weltweiten Wertschöpfungspotenzial von 44 Mrd. EUR ausgegangen werden. Der Base Case dagegen ist dadurch gekennzeichnet, dass die Phase des Broad Quantum Advantage erst im Jahr 2040 vollständig erreicht sein wird. Das Wertschöpfungspotenzial im Jahr 2030 entspricht in diesem Fall dem unteren Bereich der Schätzung von Langione et al. (2019) und erreicht erst zehn Jahre später 44 Mrd. EUR.

Weltweites Wertschöpfungspotenzial durch den Einsatz von QC-Anwendungen (in Mrd. EUR)

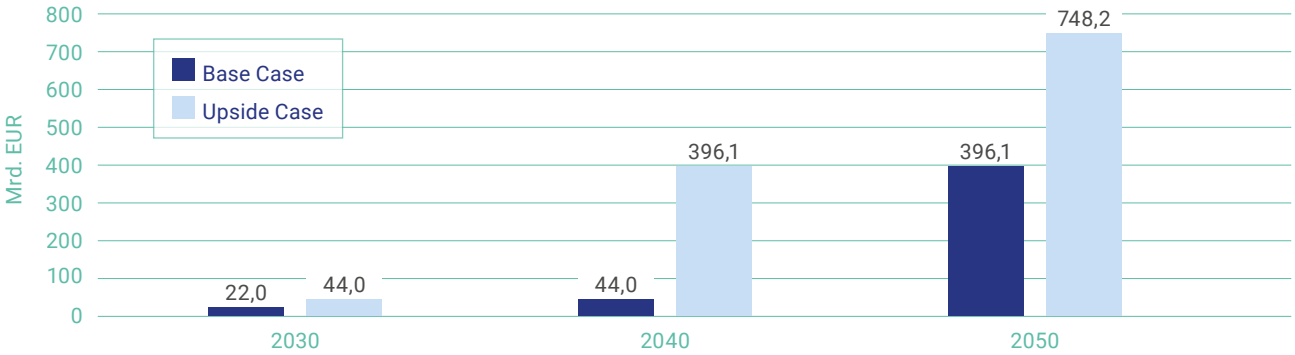


Abbildung 23: Weltweites Wertschöpfungspotenzial durch den Einsatz von QC-Anwendungen in Mrd. EUR.

Eine vollumfängliche Fehlertoleranz (Full-Scale Fault Tolerance) wird in diesem Szenario voraussichtlich frühestens im Jahr 2040 erreicht werden. Mit dem Eintritt in diese Phase ist jedoch davon auszugehen, dass die Technologie eine große Bandbreite unterschiedlicher Branchen beeinflussen wird. Entsprechend hoch sind die Erwartungen an das damit verbundene wirtschaftliche Potenzial der Technologie. Für das Jahr 2050 erwarten Langione et al. (2019) eine zusätzliche Wertschöpfung durch Quantencomputing-Anwendungen in Höhe von rund 396 Mrd. bis ca. 748 Mrd. EUR (450 bis 850 Mrd. USD). Das Base-Case-Wertschöpfungspotenzial für 2050 entspricht daher auch dem unteren Bereich dieser Schätzung, wohingegen der obere Schätzwert das Wertschöpfungspotenzial des Upside Case abbildet. Das Upside-Case-Wertschöpfungspotenzial für das Jahr 2040 errechnet sich dann durch lineare Interpolation aus den Werten für 2030 und 2050 und liegt damit ebenfalls bei ca. 396 Mrd. EUR.

Es stellt sich die Frage, welcher Anteil dieser weltweiten Wertschöpfung auf Unternehmen in Deutschland entfallen kann. Insofern es sich bei den geschätzten Effekten um Produktivitätssteigerungen handelt, liegt es zunächst nahe, den Anteil Deutschlands am weltweiten (kaufkraftbereinigten) Bruttoinlandsprodukt (BIP) als Vergleichsgröße hinzuzuziehen. Dieser betrug im Jahr 2019 rund 3,47 %. Multipliziert mit dem oben dargestellten Wertschöpfungspotenzial

im Base-Case-Szenario ergibt dies die Mindesterwartung für die Potenziale der Technologie für deutsche Unternehmen ausgehend von einer durchschnittlichen Adaptionsrate der Technologie innerhalb der deutschen Wirtschaft.

Jedoch ist der Anteil Deutschlands am Welthandel in vielen Branchen, die erwartungsgemäß stärker von Quantencomputingtechnologien profitieren werden, deutlich höher, sodass hier auch mit einem größeren Effekt auf die Wertschöpfung deutscher Unternehmen zu rechnen ist. Um diesem Sachverhalt Rechnung zu tragen, wird das Wertschöpfungspotenzial aus dem oben gezeigten Upside Case mit dem Anteil Deutschlands am Welthandel (WH) ins Verhältnis gesetzt. Der Welthandelsanteil Deutschlands belief sich im Jahr 2019 auf rund 7,1 Prozent. Auf diese Weise kann eine optimistischere Erwartung für die Potenziale des Quantencomputings für deutsche Unternehmen abgeschätzt werden – vorausgesetzt, dass die Unternehmen der betreffenden Branchen aktiv die Adaption der neuen Technologie vorantreiben.

Die Abbildung 24 stellt die beiden Szenarien einander gegenüber. Der Base-Case-BIP ist dabei durch eine etwas langsamere technologische Entwicklung und eine eher durchschnittliche Adaption der Technologie seitens deutscher Unternehmen gekennzeichnet. Der Upside-Case-WH dagegen spiegelt eine schneller fortschreitende Technologieentwicklung sowie eine progressivere Adaption der Technologie durch deutsche Unternehmen wider. Während die errechneten Werte im Jahr 2030 noch relativ nah beieinander liegen und sich zwischen knapp 800 Mio. EUR und rund 3,1 Mrd. EUR bewegen, driften die Szenarien für 2040 bereits deutlich auseinander und nehmen Werte zwischen 1,5 Mrd. EUR im Base-Case-BIP und mehr als 28 Mrd. EUR im Upside-Case-WH an. Im Jahr 2050 ergibt sich für Deutschland auf Basis dieser Berechnungen schließlich ein mögliches jährliches Wertschöpfungspotenzial in Höhe von bis zu 53,1 Mrd. EUR im Upside-Case-WH. Im Base-Case-BIP beläuft sich das geschätzte Potenzial im Jahr 2050 immerhin noch auf gut 13,7 Mrd. EUR.

Wertschöpfungspotenzial durch den Einsatz von QC-Anwendungen in Deutschland (in Mrd. EUR)

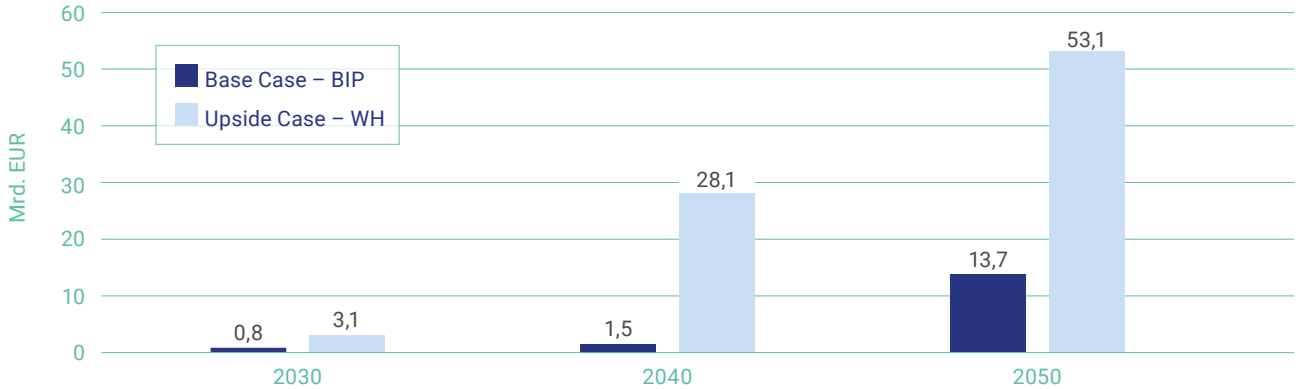


Abbildung 24: Wertschöpfungspotenzial durch den Einsatz von QC-Anwendungen in Deutschland in Mrd. EUR

Schlüsselbranchen

Quantencomputing wird die klassische Rechentechnik bedarfsgerecht ergänzen. Die Adaption in der Praxis wird allerdings branchenspezifisch hinsichtlich des Umfangs, der Anwendungsfälle und den damit einhergehenden Schwerpunkttechnologien erheblich variieren.

Das Spektrum an profitierenden Branchen ist breit: Analysen von McKinsey (2020) zeigen, dass Quantencomputing bereits 2020 strategische Relevanz in der Telekommunikations- und Medienbranche erlangt hat und erprobte Anwendungen evaluiert werden. Erste Anwendungen und die

verstärkte Einstellung von Quantencomputing-Expertinnen und -Experten werden zudem im Automobilsektor, der chemischen Industrie, im Pharma- und Medizinbereich, im Luftfahrt- und Verteidigungssektor sowie in der Finanzbranche beobachtet (McKinsey & Company 2020, S. 6).

Wie die betrachteten Studien (Langione et al. 2019; Russo et al. 2018; Kirkpatrick und Kaul 2019) übereinstimmend prognostizieren, wird Quantencomputing jedoch zukünftig einen besonders großen wirtschaftlichen Effekt in spezifischen Branchen entfalten, so z. B. im Transportsektor (Automobilbranche sowie Luft- und Raumfahrt), in den Lebenswissenschaften und der Pharmabranche (beispielsweise bei der Entwicklung neuer Medikamente) sowie im Energiesektor und den Materialwissenschaften (hier unter anderem in der Batteriezellforschung). Auch für den Finanzmarkt (Portfoliooptimierung, Risiko- und Betrugsanalyse) und die nachhaltige Landwirtschaft verspricht Quantencomputing, komplexe Systeme besser simulieren zu können und damit erhebliche Erträge zu generieren. Darüber hinaus betreffen zentrale Querschnittsthemen wie Cyber Security nahezu alle Branchen.

Optimierungsalgorithmen und quantenbasierte KI-Anwendungen werden in allen Schwerpunktbranchen einen Beitrag zur Wertschöpfung leisten. Für Quantensimulation wird hingegen erwartet, dass sie spezifisch in der Energiebranche, in den Materialwissenschaften und bei der Entwicklung von Medizinprodukten eingesetzt wird. Algorithmen zur Primfaktorzerlegung sind zentrale Bausteine für die Kryptografie, sodass diese Technologien im Telekommunikations-, Finanz- und Versicherungssektor künftig hohe Relevanz haben werden. Das 2021 gegründete nationale Industriekonsortium QUTAC (Quantum Technology and Application Consortium) strebt die Weiterentwicklung von ersten Ansätzen aus den Branchen Automobilindustrie, Chemie, Pharmaindustrie sowie Versicherung in industrielle Anwendungen an (Quantum Technology and Application Consortium – QUTAC., Bayerstadler, A., Becquin, G. et al., 2021). Dem Konsortium gehören zehn Mitglieder an, darunter Konzerne wie die BASF, Bosch und Siemens.

6.2.2 Der Markt für Anwendungen – Prognose und Vergleich der Produktarten

Bei der Betrachtung der Potenziale für anbietende Unternehmen von Quantencomputingtechnologien lässt sich zunächst prinzipiell zwischen dem Markt für Software und dem Markt für Hardware unterscheiden. Im klassischen Computing gewann der Softwaremarkt gegenüber dem Hardwaremarkt im Laufe der Zeit zunehmend an Bedeutung (Leimbach 2010, S. 121 ff.). Im Bereich des Quantencomputings ist mit einer solchen Entwicklung dagegen nicht zu rechnen. Vielmehr ist davon auszugehen, dass der Markt für Software den für Hardware von Beginn an übersteigen wird. Der Grund hierfür liegt in der Natur der Technologie selbst, mit ihren hohen technologischen Anforderungen, die es auf absehbare Zeit unrealistisch erscheinen lassen, dass sich einzelne Unternehmen oder gar Privatpersonen eigene Quantencomputer zulegen werden. Der Zugang zu Rechenkapazitäten wird voraussichtlich eher über cloudbasierte Infrastructure-as-a-Service-Modelle erfolgen, sodass neben Hard- und Software auch relevante Umsätze mit Dienstleistungen und Datenspeicherung erwirtschaftet werden.

Kirkpatrick und Kaul (2019) schätzen die Umsätze mit Software für das Jahr 2030 auf rund 1,2 Mrd. EUR (1,4 Mrd. USD), die Umsätze mit Hardware dagegen mit rund 640 Mio. EUR (725 Mio. USD) auf lediglich etwas mehr als die Hälfte (Abbildung 26). Eine ähnliche Entwicklung des Marktes für Anwendungen sehen Russo, Thaker und Adam (2018) voraus, deren Umsatzschätzung für 2030 zwischen rund 900 Mio. EUR (1 Mrd. USD) und ca. 1,8 Mrd. EUR (2 Mrd. USD) liegt (Abbildung 25). Die Autorinnen und Autoren kommen außerdem zu dem Schluss, dass bei positiver Entwicklung der Technologie, der weltweite Markt für Software im Jahr 2040 bereits ein Potenzial in Höhe von mehr als 118 Mrd. EUR (135 Mrd. USD) entfalten und im Jahr 2050 sogar fast 260 Mrd. EUR (295 Mrd. USD) erreichen könnte. Bei einer etwas langsamer fortschreitenden technologischen Entwicklung schätzen sie den Softwaremarkt für

das Jahr 2040 auf rund 5,3 Mrd. EUR (6 Mrd. USD). Doch auch in diesem Fall könnte der Markt bis ins Jahr 2050 auf mehr als 231 Mrd. EUR (263 Mrd. USD) anwachsen.

Der Markt für QC-Software (in Mrd. EUR)

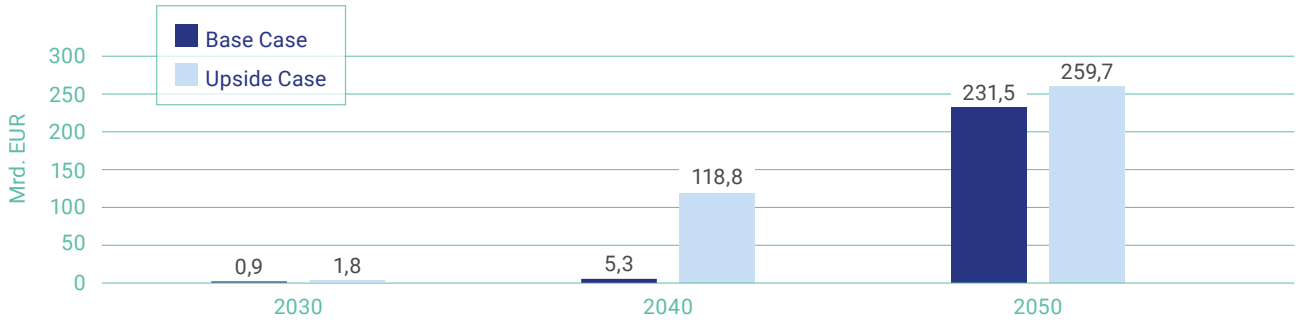


Abbildung 25: Der weltweite Markt für Quantencomputingsoftware in Mrd. EUR.

Mit der Bedeutung von Infrastructure-as-a-Service-Geschäftsmodellen steigt zugleich der Markt für Dienstleistungen. Dieser umfasst neben dem cloudbasierten Zugang zu Rechenkapazitäten auch Beratungsleistungen, die von Softwareunternehmen, professionellen Dienstleistungsunternehmen und externen Branchenberatungen erbracht werden (Kirkpatrick und Kaul 2019). Im Rahmen der anfänglichen Markterschließung gehören dazu insbesondere auch Beratungsleistungen zur Vorbereitung von Unternehmen auf die kommenden Anwendungen. Kirkpatrick und Kaul (2019) schätzen den Markt für Services für das Jahr 2030 entsprechend auf immerhin rund 5,8 Mrd. EUR (6,6 Mrd. USD) und damit fast fünfmal so hoch wie den Markt für Software (Abbildung 26).

Prognose des weltweiten QC-Marktes im Jahr 2030 (in Mrd. EUR)

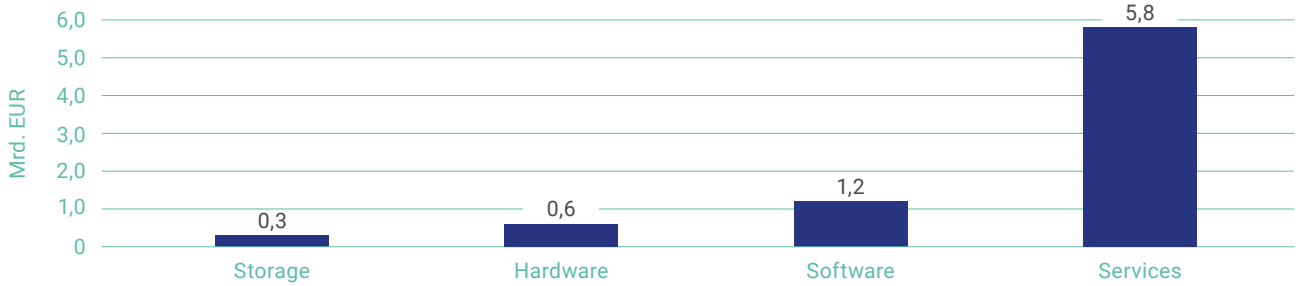


Abbildung 26: Prognose des weltweiten Markts für Quantencomputing im Jahr 2030 in Mrd. EUR, differenziert nach Speicherlösungen, Hardware, Software und Dienstleistungen (Kirkpatrick und Kaul 2019).

Insbesondere zu Beginn der kommerziellen Adaption von Quantencomputing-Technologien wird der Markt für Services eine große Bedeutung haben. Die weitere Entwicklung über das Jahr 2030 hinaus ist dagegen weniger eindeutig. Hier spielen verschiedene, teils gegenläufige Entwicklungstrends eine Rolle: Der Bedarf an allgemeiner Beratung zur Vorbereitung auf die neue Technologie wird mit zunehmender Adaptionsrate abnehmen. Auch die Kosten für den cloudbasierten Zugang zu Ressourcen werden aufgrund von Skaleneffekten und des technischen Fortschritts voraussichtlich sinken. Gleichzeitig wird aufgrund der zunehmenden Adaptionsrate der Technologie in der Wirtschaft die allgemeine Nachfrage nach Dienstleistungen steigen. Im Ergebnis ist die langfristige Entwicklung des Marktes für Services nicht seriös abschätzbar. Es ist jedoch anzunehmen, dass Software-Unternehmen ihr Geschäft sinnvollerweise um ergänzende Dienstleistungen erweitern werden, um das Marktpotenzial beider Bereiche zu adressieren.

7 FAZIT: EMPFEHLUNGEN UND HANDLUNGS-BEDARFE

7 FAZIT: EMPFEHLUNGEN UND HANDLUNGSBEDARFE

Die vorliegende Studie zeigt anhand eines Auszugs an Anwendungsfällen, dass die Landschaft der Quantencomputing-Anwendungen mit potenziellem Mehrwert für Unternehmen weit ist. Sie umfasst diverse Problemstellungen aus den Bereichen Optimierung, chemische Simulation sowie Maschinelles Lernen/KI und erstreckt sich über viele Anwendungsdomänen und Branchen – von der Energiewirtschaft über das Gesundheitswesen bis zum Transport- und Verkehrswesen. Die Entwicklung von Software für die Anwendungen rückt aktuell immer mehr in den Fokus von Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten.

Im Gegensatz zur Wertschöpfungsentwicklung klassischer Computer wird im Bereich Quantencomputing der weltweite Markt für Software den Markt für Hardware von Anfang an übersteigen. Gleichzeitig wird ein früher großer Markt für Services und Dienstleistungen erwartet. Die Limitierung der Hardware stellt zwar eine Herausforderung für die Softwareentwicklung dar, behindert sie aber nicht grundlegend. Teile der erforderlichen Entwicklungsarbeiten können bereits heute bearbeitet werden. Die Chance für Unternehmen liegt vor allem darin, sich durch entsprechende Vorarbeiten einen Entwicklungsvorsprung zu sichern, anstatt zuerst einen Durchbruch in der technologischen Entwicklung abzuwarten.

Das zukünftige Wertschöpfungspotenzial für Unternehmen durch Quantencomputing wird auf der Anwenderseite in der Optimierung von Geschäftsprozessen, der Erweiterung des Produktportfolios und der Verbesserung der Leistungsfähigkeit bereits bestehender Produkte liegen. Dem steht die Entwicklung eines entsprechenden Anbietermarkts komplementär gegenüber, der auf die jeweiligen Anwenderbedarfe hin spezifische Quantensoftware und -Services umsetzt und anbietet.

Für die Bewertung des konkreten Wertschöpfungspotenzials mit Bezug auf ein spezifisches Anwendungsfeld existieren noch keine generisch anwendbaren Methoden. Sie muss daher im Einzelfall erfolgen – idealerweise unter Einbezug von Domänen-Sachverständigen und Expertinnen und Experten aus dem Bereich Quantencomputing. Im Zentrum des Bewertungsprozesses sollte dabei zunächst die Identifizierung und Evaluation von Anwendungsfällen und der damit verbundenen Effektgröße zukünftiger Lösungen für das Unternehmen stehen. Dieser Prozess kann und sollte bereits jetzt angestoßen werden, um Unternehmen einen zeitlichen Vorsprung zu verschaffen, der dann zum Tragen kommt, wenn der technologische Fortschritt in Hinblick auf die Hardware einsetzt. Das offene, austauschorientierte Klima, das in der jetzigen Phase herrscht, erlaubt einen leichten Zugang zu Quantencomputing-Expertise und ermöglicht es, frühzeitig wertvolle Kontakte und Netzwerke zu knüpfen.

Unternehmen, die sich im Rahmen der Bewertung als zukünftige Anwendende bzw. Klientel bestimmter Quantensoftwarelösungen identifizieren, sollten die Entwicklungen auf dem betreffenden Gebiet gezielt verfolgen oder sich idealerweise selbst aktiv in die Entwicklung einbringen. Unternehmen, die ein Potenzial in der Entwicklung von Quantensoftware für das eigene Unternehmen sehen oder sich als potenzielle zukünftige Anbietende von Quantensoftwarelösungen für andere begreifen, sollten zunächst Quantencomputing-Expertinnen und -Experten hinzuziehen, um die generelle Umsetzbarkeit des Vorhabens festzustellen und eine Strategie für die technologische Umsetzung festzulegen. Im Hinblick auf die tatsächlichen Entwicklungsarbeiten ist zu raten, sie frühzeitig aufzunehmen. Auch ohne vertieftes Studium der Quantenmechanik ist es für Softwareentwicklerinnen und -entwickler möglich, sich in die Programmierung von Quantencomputern einzuarbeiten. Der Austausch mit Erfahrenen kann den Einstieg in die fundamentalen Prinzipien von Quantencomputern beschleunigen.

Die Betrachtung der im Rahmen der Studie vorgestellten Anwendungsfälle hat gezeigt, dass sich im Hinblick auf die Umsetzung und Implementierung Herausforderungen stellen (Problemübertragung, Algorithmus, Data Encoding, Datenvorverarbeitung), die zumindest in Teilen bereits jetzt angegangen werden können, obwohl die Hardware noch limitiert ist. Viele Aspekte dieser Herausforderungen sind noch Gegenstand aktueller Forschung, der Entwicklungsaufwand ist dementsprechend hoch. Durch Vernetzung mit anderen Akteuren aus Ökosystemen und Kompetenzzentren für anwendungsbezogene Quantensoftware (z. B. PlanQK, Kompetenz-

zentrum Quantencomputing Baden-Württemberg) bietet sich für Unternehmen aber die Möglichkeit, die Hürden zu senken. Gleichzeitig eröffnet die Vernetzung auch die Chance für Unternehmen, ihre Sicht und Anforderungen frühzeitig einzubringen und darüber Prozesse wie die Festlegung von Standards[36], die Definition von Referenz-Anwendungsfällen und die Etablierung von Evaluationskriterien von Anfang an mitzugestalten.

Technologische und wissenschaftliche Synergien treiben Innovation, insbesondere in der frühen Proof-of-Concept-Phase. Sie kommen im Bereich des anwendungszentrierten Quantencomputings derzeit noch nicht voll zum Tragen, da strukturelle Werkzeuge wie Referenz-Anwendungsfälle oder Kriterienkataloge für die Leistungsbewertung fehlen. Für die Entwicklung dieser Werkzeuge ist es entscheidend, dass ein formaler Rahmen für den Vergleich von Anwendungsfällen geschaffen wird. Dies schließt Leitlinien für die Verortung und Beschreibung der Fälle und ihrer Ergebnisse ein. Die Formalisierung der Anwendungsfälle ist eine Grundvoraussetzung für den nächsten Schritt, die Generalisierung. Das heißt, den Übergang von individuellen Lösungsansätzen zu allgemein anwendbaren Gesetzmäßigkeiten für die Lösungsfindung zu ermöglichen (z. B. Zuordnung von Algorithmen zu Problemklassen oder Problemklassen zu Hardware). Die Generalisierung wiederum kann in Zukunft entscheidend dazu beitragen, den Weg vom Labor zum Markt zu verkürzen. Sie sollte daher vonseiten der Unternehmen aktiv unterstützt werden.

Aufgrund ihrer hohen Relevanz sollte die Generalisierung auch im Rahmen von innovationspolitischen Maßnahmen angestoßen und begleitet werden. Durch gezielte Förderung von Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten auf den Gebieten, die aktuell eine besondere Herausforderung für die Umsetzung von Anwendungen darstellen, kann die Innovationspolitik darüber hinaus perspektivisch dazu beitragen, die Hürden für deutsche Unternehmen zu senken. Insbesondere sind hier die Herausforderungen im Hinblick auf die Daten und die quantencomputergerechte Vorverarbeitung von Daten zu nennen.

Ob und wie sich Produkte und Dienstleistungen des anwendungszentrierten Quantencomputings im zukünftigen Markt durchsetzen werden, wird auch davon abhängen, ob es gelingt, die Interessen von Unternehmen und Gesellschaft in Einklang zu bringen. Themen wie ein zukünftiger Rechtsrahmen, Regulierung und ethische Ansprüche werden in Fachkreisen bereits diskutiert (Kop 2020; Jeutner 2021; Elija Perrier 2021) und wurden auch von den im Rahmen der Studie interviewten Fachleuten angesprochen.

Neben Fragen zur Regulierung der Technologie selbst (z. B. Demokratisierung des Zugangs) sind aus Sicht der Expertinnen und Experten auch Fragen im Hinblick auf die technologiebasierten Anwendungen noch ungeklärt. Welche Anwendungen werden in Zukunft zugelassen, welche gegebenenfalls eingeschränkt? Wird die Zulassung und Markteinführung von Produkten an Bedingungen geknüpft sein? Insbesondere in Hinblick auf Quantencomputing-Anwendungen der Problemkategorie ML/KI stellt sich die Frage, ob und wie sie gegebenenfalls in den bestehenden Gesetzentwurf zur KI-Regulierung (Europäische Kommission 21.04.2021) eingebunden werden sollen. Dies wird unter anderem davon abhängen, ob Anforderungen an KI-Systeme, wie Transparenz und Erklärbarkeit der Lösungsfindung, für Quantencomputing-Anwendungen überhaupt erfüllbar sind bzw. ihre Erfüllung technisch nachweisbar ist. Generative KI-Modelle wie hybride QGAN, die in der Proof-of-Concept-Phase der betrachteten Anwendungsfälle bereits eingesetzt werden, sind auch in der aktuellen Forschungsliteratur sehr präsent. Es ist davon auszugehen, dass die Aktivitäten gerade auf diesem Gebiet der quantenunterstützten KI zunehmen werden. Da generative KI-Modelle ein hohes disruptives Potenzial haben, sollten die rechtlichen und regulatorischen Rahmenbedingungen für ihren Einsatz frühzeitig evaluiert werden. Die ethischen Ansprüche an zukünftige Quantencomputing-Anwendungen sind zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht klar definiert, der Ruf nach einer Einigung auf eine Quantenethik wird aber lauter.

36 Derzeit wird auf internationaler Ebene bei ISO/IEC JTC1 in der Arbeitsgruppe für Quantencomputing an einem Terminologie-Standard gearbeitet und auf europäischer Ebene gibt es unter anderem die Möglichkeit bei CEN/CENELEC in der Focus Group on Quantum Technologies an einer Normungsroadmap für Quantentechnologien mitzuarbeiten, die auch erste Empfehlungen für den Bereich Quantencomputing enthalten soll. Ein Kontakt zu diesen Aktivitäten bietet hierbei die nationale Normungsorganisation DIN e.V.

8 GLOSSAR

8 GLOSSAR

ADIABATISCHES QUANTENCOMPUTING	Spezieller Quantencomputer, der auf der kontinuierlichen zeitlichen Entwicklung von miteinander verknüpften Qubits basiert und in erster Linie für Optimierungsprobleme verwendet wird.
AGAP	Airport Gate Assignment Problem: Optimierungsproblem im Personenluftverkehr.
BOLTZMANN-MASCHINE	Künstliches neuronales Netzwerk basierend auf Stochastik.
COP	Combinatorial Optimization Problem: kombinatorisches Optimierungsproblem.
DEKOHÄRENZZEIT	Zeitskala auf der ein quantenmechanisches System durch Interkation mit der Umgebung seine Kohärenz verliert.
FEHLERKORREKTUR (ENGL. (QUANTUM ERROR CORRECTION)	Durch Dekohärenz entstehende Störungen der Qubits sollen durch geschickt gewählte Verknüpfungen mehrerer physischer Qubits kontrollier- und korrigierbar werden.
FTS	Fahrerloses Transportsystem
GAN	Generative Adversarial Network: Ansatz des maschinellen Lernens, bei dem zwei neuronale Netze sich gegenseitig trainieren.
GATE FIDELITY	Maß für die Reproduzierbarkeit und Güte von Operationen, welche durch Dekohärenz gemindert wird.
GATE OPERATION TIME	Benötigte Zeit für Gate-Operationen, welche in erster Linie durch technische Randbedingungen sowie der prinzipiellen Art der Qubits limitiert wird.
GATE-MODELL DES QUANTENCOMPUTING	Modell in dem diskrete Quantengatter in definierter zeitlicher Abfolge auf einen Satz von Qubits wirken und somit universelle Rechenoperationen erlaubt.
GROVER ALGORITHMUS	Quantenalgorithmus zum effizienten Durchsuchen unsortierter Datenbanken.
HADAMARD-GATE	Gatter im Quantencomputing, welches bei Anwendung auf einen klassischen Zustand einen Superpositionszustand erzeugt
HAMILTON-OPERATOR	Auch Hamiltonian. Dient zur mathematischen Beschreibung eines physikalischen Systems und ermöglicht die Berechnung von dessen Zuständen und Energien.
HYBRIDES QUANTEN-COMPUTING	Effiziente Aufteilung von Algorithmen, bei denen ein Quantencomputer nur für bestimmte Rechenoperationen verwendet wird, während der Rest auf klassischer Hardware gerechnet wird.
JSSP	Job Shop Scheduling Problem: Mathematisches Problem, bei dem die Belegung von Maschinen sowie der zeitliche Ablauf einer Fertigung optimiert werden soll.
KMU	Kleine und mittlere Unternehmen.
KNAPSACK PROBLEM	Auch Rucksackproblem. Mathematisches Problem der Kombinatorik, bei dem aus einer Reihe von gegebenen Elementen eine Zusammenstellung gewählt werden soll, welche bestimmte Randbedingungen einhält und dabei den Gesamtnutzen optimiert.
KOHÄRENZ/DEKOHÄRENZ	Kohärente Quantensysteme können sich in klar definierten Überlagerungszuständen befinden. Durch Interaktion mit der Umgebung tritt Dekohärenz in diesen Systemen auf, wodurch die Überlagerungszustände zerstört werden können.

NISQ-ÄRA	Noisy intermediate-scale quantum era. Bevorstehender zeitlicher Abschnitt, in dem Quantencomputer mit einigen hunderten, jedoch noch nicht fehlerkorrigierten, Qubits mit nicht beschränkter Connectivity verfügbar sind und für erste Spezialaufgaben sinnvoll angewendet werden können.
NSP	Nurse Scheduling Problem: Optimierungsproblem für Dienstpläne
PHYSIKALISCHE UND LOGISCHE QUBITS	Logische Qubits sollen durch Verschaltung mehrerer physischer Qubits realisiert werden, um dann Fehlerkorrektur zu ermöglichen.
PLANQK	Plattform und Ökosystem für Quantenunterstützte Künstliche Intelligenz www.planqk.de)
QA	Quantum Annealing: Algorithmus, der auf einem Quantenannealer gerechnet wird (s. adiabatisches Quantencomputing).
QAGA	Quantum-Assisted Genetic Algorithm: Evolutionärer (genetischer) Algorithmus, welcher durch quantenbasierte Erzeugung von Mutationen erweitert wird.
QAOA	Quantum Approximate Optimization Algorithm. Quantenalgorithmus zur näherungsweisen Lösungsfindung kombinatorischer Optimierungsprobleme.
QBM	Stochastisches künstliches neuronales Netz, bei dem die Neuronen anders als bei der klassischen Boltzmann-Maschine nicht einer klassischen Boltzmann-Verteilung folgen, sondern der Boltzmann-Verteilung des quantenmechanischen sogenannten Transverse-Field-Ising Hamiltonians.
QGAN	Hybrides GAN, bei dem Teile des Algorithmus auf Quantenschaltkreisen beruhen.
QPU	Quantum Processor Unit, zentrale Einheit eines Quantencomputers, der die Qubits und Schnittstellen zu diesen bereitstellt.
QSVM	Quantum Support Vector Machine: um Quantenschaltkreise erweiterter Algorithmus für das Maschinelle Lernen (SVM).
QUANTUM ADVANTAGE	Prognostizierter Geschwindigkeitsvorteil von Quantencomputern gegenüber der Berechnung auf transistorbasierten klassischen Prozessoren.
QUANTUM COMPUTER SIMULATION	Softwaresimulation von Quantencomputern für Vorabuntersuchungen auf klassischen Computern. Es existieren zusätzlich für diese Aufgaben speziell darauf ausgelegte Hardwareprozessoren.
QUANTUM SIMULATION	Simulation von beispielsweise chemischen Prozessen mittels Quantencomputern.
QUBO	Quadratic unconstrained binary optimization: Spezielle Formulierung eines kombinatorischen Optimierungsproblems ohne Randbedingungen.
RESTRICTED BOLTZMANN MACHINE (RBM)	Spezialform der Boltzmann-Maschine.
SAAS	Software-as-a-Service
SAT	Erfüllbarkeitsproblem (Satisfiability): Problem der Aussagenlogik, bei dem geprüft werden soll, ob eine Aussage für gegebene Variablen erfüllbar ist.
SCHALTKREISTIEFE (ENGL.: CIRCUIT DEPTH)	Gibt längsten Pfad in einem Quantenschaltkreis zwischen einer Zustandspräparation (Input) und einer Messung (Output) an und wird durch eine ganzzahlige Zahl beschrieben, die der Anzahl an Gattern auf diesem Weg entspricht.
SHOR-ALGORITHMUS	Von Peter Shor entwickelter Algorithmus für Quantencomputer, mit dessen Hilfe in Zukunft typische asymmetrische Verschlüsselungsverfahren wesentlich rascher geknackt werden könnten.

SKALIERBARKEIT	Gewünschte Erhöhung der Anzahl der Qubits unter Beachtung der Connectivity und Gate Fidelity sowie der technischen Infrastruktur.
SVM	Support Vector Machine. Algorithmus für das maschinelle Lernen.
TSP	Traveling Salesman Problem: kombinatorisches Optimierungsproblem, bei dem beispielsweise die kürzeste Verbindung bei gegebener Zahl von zu besuchenden Orten gesucht wird.
VQE	Variational Quantum Eigensolver: Quantenalgorithmus für die Berechnung von Eigenwerten. Kann zur Bestimmung von chemischen Zustandsenergien, aber auch für Optimierungsaufgaben verwendet werden.
VQA	Variational Quantum Algorithm: Quantenalgorithmus der sowohl zum Maschinellen Lernen als auch für Optimierungen eingesetzt werden kann.
WGAN	Wasserstein Generative Adversarial Network: Weiterentwicklung eines GAN.

LITERATUR-VERZEICHNIS

LITERATURVERZEICHNIS

Anand, Rao; Verweij, Gerard (2017): Sizing the price. PwC's Global Artificial Intelligence Study: Exploiting the AI Revolution. PricewaterhouseCoopers. Online verfügbar unter https://www.pwc.com/gx/en/issues/data-and-analytics/publications/artificial-intelligence-study.html, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Arute, Frank; Arya, Kunal; Babbush, Ryan; Bacon, Dave; Bardin, Joseph C.; Barends, Rami et al. (2019): Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. In: Nature 574 (7779), S. 505–510. DOI: 10.1038/s41586-019-1666-5.

Ball, Harrison; Biercuk, Michael J.; Hush, Michael R. (2021): Quantum firmware and the quantum computing stack. In: Physics Today 74 (3), S. 28–34. DOI: 10.1063/PT.3.4698.

Bayerstadler, Andreas; Becquin, Guillaume; Binder, Julia; Botter, Thierry; Ehm, Hans; Ehmer, Thomas; Erdmann, Marvin; Gaus, Norbert; Harbach, Philipp; Hess, Maximilian; Klepsch, Johannes; Leib, Martin; Luber, Sebastian; Luckow, Andre; Mansky, Maximilian; Mauerer, Wolfgang; Neukart, Florian; Niedermeier, Christoph (2021): Industry quantum computing. applications. Online verfügbar unter https://epjquantumtechnology.springeropen.com/articles/10.1140/epjqt/s40507-021-00114-x, zuletzt geprüft am 27.01.2022

Boeringer Ingelheim (11.01.2021): Quantencomputer: Boehringer Ingelheim und Google kooperieren für Pharmaforschung. Pressemitteilung. Online verfügbar unter https://www.boehringer-ingelheim.de/pressemitteilung/partnerschaft-mit-google-bei-quantencomputern, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Botzen, Katrin (2018): Fraud Detection: Künstliche Intelligenz deckt Betrug auf. In: IT Finanzmagazin, 27.04.2018. Online verfügbar unter https://www.it-finanzmagazin.de/fraud-detection-kuenstliche-intelligenz-deckt-betrug-auf-69863/, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Brands, Gilbert (2011): Einführung in die Quanteninformatik. Quantenkryptografie, Teleportation und Quantencomputing. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg (eXamen.press).

Broughton, Michael; Verdon, Guillaume; McCourt, Trevor; Martinez, Antonio J.; Yoo, Jae Hyeon; Isakov, Sergei V. et al. (2020): TensorFlow Quantum: A Software Framework for Quantum Machine Learning. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/2003.02989, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Cambridge Quantum Computing (29.01.2021): Cambridge Quantum to Develop Quantum Algorithms with Roche for Drug Discovery & Development. Pressemitteilung. Online verfügbar unter https://cambridgequantum.com/cambridge-quantum-roche-drug-discovery/, zuletzt geprüft am 12.01.2021.

Cross, Andrew W.; Bishop, Lev S.; Sheldon, Sarah; Nation, Paul D.; Gambetta, Jay M. (2019): Validating quantum computers using randomized model circuits. In: Phys. Rev. A 100 (3). DOI: 10.1103/PhysRevA.100.032328.

Dahl, Edward; Goliber, Victoria (2019): Hardware and Software Advances in Quantum Annealing. Online verfügbar unter Link bitte durch folgenden ersetzen: https://www.suny.edu/media/suny/content-assets/images/research/events/Hardware-Software-Advances-in-Quantum-Annealing-DWaveSlides-Dahl_Goliber.pdf.

Dean, Walter (2021): Computational Complexity Theory. In: Edward N. Zalta (Hg.): The Stanford Encyclopedia of Philosophy. Fall 2021: Metaphysics Research Lab, Stanford University.

Devanesan, Joe (2021): Will pharma discovery be quantum computing's first killer app? - TechHQ. TechHQ. Online verfügbar unter https://techhq.com/2021/05/will-pharma-discovery-be-cambridge-quantum-computings-first-killer-app/, zuletzt aktualisiert am 19.05.2021, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

DFS Situation and Information Centre (LIZ) (2019): LIZ Annual Summary 2019. Hg. v. DFS Deutsche Flugsicherung. Online verfügbar unter https://www.dfs.de/dfs_homepage/de/Unternehmen/Zahlen und Daten/Statistiken/Annual_Summary_2019.pdf, zuletzt aktualisiert am 09.01.2020, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Donati, Gaia (2021): A look at the full stack. In: Nat Rev Phys 3 (4), S. 226–228. DOI: 10.1038/s42254-021-00301-w.

Dunjko, Vedran; Briegel, Hans J. (2017): Machine learning & artificial intelligence in the quantum domain. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1709.02779, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Elija Perrier (2021): Ethical Quantum Computing: A Roadmap. Online verfügbar unter https://arxiv.org/abs/2102.00759.

Europäische Kommission (21.04.2021): Ein Europa für das digitale Zeitalter: Kommission schlägt neue Vorschriften und Maßnahmen für Exzellenz und Vertrauen im Bereich der künstlichen Intelligenz vor. Brüssel. Online verfügbar unter https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/de/ip_21_1682, zuletzt geprüft am 14.10.2021.

European Central Bank (2018): Fifth Oversight Report on Card Fraud. Online verfügbar unter https://www.ecb.europa.eu/pub/cardfraud/html/ecb.cardfraudreport201809.en.html#toc1, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Feynman, Richard P. (1982): Simulating physics with computers. In: Int J Theor Phys 21 (6-7), S. 467–488. DOI: 10.1007/BF02650179.

Frid-Adar, Maayan; Klang, Eyal; Amitai, Michal; Goldberger, Jacob; Greenspan, Hayit (2018): Synthetic Data Augmentation using GAN for Improved Liver Lesion Classification. Online verfügbar unter http://arxiv.org/pdf/1801.02385v1.

Google Quantum AI (2020): OpenFermion; Google Quantum AI. Online verfügbar unter https://quantumai.google/openfermion, zuletzt aktualisiert am 30.10.2020, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Harris, Richard G.; Amin, Mohammad H.S.; Smirnov, Anatoly (2015): Universial Adiabatic Quantum Computing with Superconducting Qubits. Angemeldet durch D-Wave Systems Inc. am 21.10.2014. Anmeldenr: 14/520,139. Veröffentlichungsnr: US 2015/0111754 A1.

Herr, Daniel; Obert, Benjamin; Rosenkranz, Matthias (2021): Anomaly detection with variational quantum generative adversarial networks. In: Quantum Sci. Technol. 6. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/2010.10492, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Huang, Hsin-Yuan; Broughton, Michael; Mohseni, Masoud; Babbush, Ryan; Boixo, Sergio; Neven, Hartmut; McClean, Jarrod R. (2021): Power of data in quantum machine learning. In: Nat Commun 12 (1), S. 2631. DOI: 10.1038/s41467-021-22539-9.

Jaroszewski, Daniel; Klos, Fabian; Sturm, Benedikt (2020): Ising formulations of routing optimization problems. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/2012.05022, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Jeutner, Valentin (2021): The Quantum Imperative: Addressing the Legal Dimension of Quantum Computers. In: Morals & Machines 1 (1), S. 52–59. Online verfügbar unter https://ssrn.com/abstract=3820003, zuletzt geprüft am 13.10.2021.

Jha, Alok (2013): Nobel prize for simulating lightning-fast chemical reactions. In: The Guardian, 09.10.2013. Online verfügbar unter https://www.theguardian.com/science/2013/oct/09/nobel-prize-simulating-chemical-reactions, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Jordon, James; Yoon, Jinsung; van der Schaar, Mihaela (2019): PATE-GAN: Generating Synthetic Data with Differential Privacy Guarantees. In: International Conference on Learning Representations (ICLR) Proceedings. New Orleans, USA, 06.-09.05.2019.

Kaminsky, W. M.; Lloyd, S. (2004): Scalable Architecture for Adiabatic Quantum Computing of Np-Hard Problems. In: Anthony J. Leggett, Berardo Ruggiero und Paolo Silvestrini (Hg.): Quantum Computing and Quantum Bits in Mesoscopic Systems. New York: Springer, S. 229–236.

Karras, Tero; Aila, Timo; Laine, Samuli; Lehtinen, Jaakko (2017): Progressive Growing of GANs for Improved Quality, Stability, and Variation. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1710.10196, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Kirkpatrick, Keith; Kaul, Aditya (2019): Quantum Computing for Enterprise Markets. Tractica. Online verfügbar unter https://omdia.tech.informa.com/OM011977/Quantum-Computing-for-Enterprise-Markets, zuletzt aktualisiert am 25.08.2019, zuletzt geprüft am 26.08.2021.

Kop, Mauritz (2020): Regulating Transformative Technology in The Quantum Age: Intellectual Property, Standardization & Sustainable Innovation. In: Transatlantic Antitrust and IPR Developments, 2020.

Langione, Matt; Tillemann-dick, Corban; Kumar, Amit; Taneja, Vikas (2019): Where Will Quantum Computers Create Value—and When? BCG Boston Consulting Group. Online verfügbar unter https://www.bcg.com/de-de/publications/2019/quantum-computers-create-value-when, zuletzt aktualisiert am 13.05.2019, zuletzt geprüft am 26.08.2021.

LaRose, Ryan (2019): Overview and Comparison of Gate Level Quantum Software Platforms. In: Quantum 3, S. 130–148. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1807.02500, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Leimbach, Timo (2010): Die Geschichte der Softwarebranche in Deutschland. Entwicklung und Anwendung von Informations- und Kommunikationstechnologie zwischen den 1950ern und heute. Inaugural-Dissertation. Ludwig-Maximilians-Universität, München. Institut für Philosophie.

Linnhoff-Popien, Claudia (2021a): Das QAR-Lab. In: Digitale Welt 5 (4), S. 6. Online verfügbar unter https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/s42354-021-0393-x.pdf, zuletzt geprüft am 08.12.2021.

Linnhoff-Popien, Claudia (2021b): Wann hat meine Firma einen Quantenvorteil? In: Digitale Welt 5 (2), S. 4–5. Online verfügbar unter https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/s42354-021-0327-7.pdf, zuletzt geprüft am 08.12.2021

Lufthansa Group (2020): Airlines der Lufthansa Group begrüßen im Jahr 2019 mehr als 145 Millionen Fluggäste an Bord. Online verfügbar unter https://investor-relations.lufthansagroup.com/de/meldungen/finanznachrichten/investor-relations-finanznachricht/datum/2020/01/13/airlines-der-lufthansa-group-begruessen-im-jahr-2019-mehr-als-145-millionen-fluggaeste-an-bord.html, zuletzt aktualisiert am 13.01.2020, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Machine Learning Group – ULB (2018): Credit Card Fraud Detection. Hg. v. Kaggle. Online verfügbar unter https://www.kaggle.com/mlg-ulb/creditcardfraud, zuletzt aktualisiert am 23.03.2018, zuletzt geprüft am 24.08.2021.

Matthews, David (2021): How to get started in quantum computing. In: Nature 591 (7848), S. 166–167. DOI: 10.1038/d41586-021-00533-x.

McKinsey & Company (2020): McKinsey Quantum Computing Monitor. Online verfügbar unter https://www.mckinsey.de/~/media/mckinsey/locations/europe and middle east/deutschland/news/presse/2020/2020-12-13 - quantum computing monitor/mckinseyquantum computing monitor122020.pdf, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Moll, Nikolaj; Barkoutsos, Panagiotis; Bishop, Lev S.; Chow, Jerry M.; Cross, Andrew; Egger, Daniel J. et al. (2017): Quantum optimization using variational algorithms on near-term quantum devices. In: Quantum Science and Technology 3 (3). Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1710.01022, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Raedt, Hans de; Jin, Fengping; Willsch, Dennis; Willsch, Madita; Yoshioka, Naoki; Ito, Nobuyasu et al. (2019): Massively parallel quantum computer simulator, eleven years later. In: Computer Physics Communications 237, S. 47–61. DOI: 10.1016/j.cpc.2018.11.005.

Resch, Salonik; Karpuzcu, Ulya R. (2019): Quantum Computing: An Overview Across the System Stack. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1905.07240, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Rosenkranz, Matthias; Baden, Markus; Herr, Daniel; Obert, Benjamin (2020): Taming quantum computers with high-level software stacks. d-fine. Online verfügbar unter https://www.d-fine.com/news/quantum-computing/, zuletzt aktualisiert am 06.07.2020, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Russo, Massimo; Thaker, Anant; Adam, Suhare (2018): The Coming Quantum Leap in Computing. Boston Consultung Group. Online verfügbar unter https://www.bcg.com/de-de/publications/2018/coming-quantum-leap-computing, zuletzt aktualisiert am 16.05.2018, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

Sandfort, Veit; Yan, Ke; Pickhardt, Perry J.; Summers, Ronald M. (2019): Data augmentation using generative adversarial networks (CycleGAN) to improve generalizability in CT segmentation tasks. In: Scientific reports 9 (1), S. 16884. DOI: 10.1038/s41598-019-52737-x.

Schuld, Maria; Sweke, Ryan; Meyer, Johannes Jakob (2021): Effect of data encoding on the expressive power of variational quantum-machine-learning models. In: Phys. Rev. A 103 (3). DOI: 10.1103/PhysRevA.103.032430.

Tyborski, Roman; Koch, Moritz (2021): Deutschland hinkt bei der Quantencomputer-Entwicklung hinterher – Konzerne zaudern. In: Handelsblatt, 09.03.2021. Online verfügbar unter https://www.handelsblatt.com/technik/it-internet/quantencomputing-deutschland-hinkt-bei-der-quantencomputer-entwicklung-hinterher-konzerne-zaudern/26984870.html, zuletzt geprüft am 23.08.2021.

VDI Technologiezentrum GmbH (Hg.) (2021): Roadmap Quantencomputing. Nationale Strategie für das Quantencomputing. Online verfügbar unter https://www.quantentechnologien.de/fileadmin/public/Redaktion/Dokumente/PDF/Publikationen/Roadmap-Quantencomputing-bf-C1.pdf, zuletzt geprüft am 13.10.2021.

Venturelli, Davide; Marchand, Dominic J. J.; Rojo, Galo (2016): Job Shop Scheduling Solver based on Quantum Annealing. Online verfügbar unter https://arxiv.org/pdf/1506.08479v2.pdf, zuletzt geprüft am 27.01.2022.

Weigold, Manuela; Barzen, Johanna; Leymann, Frank; Salm, Marie (2020): Data Encoding Patterns for Quantum Algorithms. HILLSIDE Proc. of Conf. on Pattern Lang. of Prog. 22. Online verfügbar unter https://hillside.net/plop/2020/papers/weigold.pdf, zuletzt geprüft am 05.11.2021.

Weigold, Manuela; Barzen, Johanna; Leymann, Frank; Salm, Marie (2021): Expanding Data Encoding Patterns For Quantum Algorithms. In: 2021 IEEE 18th International Conference on Software Architecture Companion (ICSA-C): IEEE, S. 95–101.Online verfügbar unter https://www.iaas.uni-stuttgart.de/publications/Weigold2021_ExpandingDataEncodingPatterns.pdf, zuletzt geprüft am 05.11.2021.

Xia, Rongxin; Kais, Sabre (2018): Quantum machine learning for electronic structure calculations. In: Nat Commun 9. 4195. DOI: 10.1038/s41467-018-06598-z. Online verfügbar unter https://www.nature.com/articles/s41467-018-06598-z, zuletzt geprüft am 05.11.2021.

Zhong, Han-Sen; Wang, Hui; Deng, Yu-Hao; Chen, Ming-Cheng; Peng, Li-Chao; Luo, Yi-Han et al. (2020): Quantum computational advantage using photons. In: Science (New York, N.Y.) 370 (6523), S. 1460–1463. DOI: 10.1126/science.abe8770. Online verfügbar unter https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/2012/2012.01625.pdf, zuletzt geprüft am 05.11.2021.