
Quantum for Climate - Die Zukunft der Klimamodellierung?

GDS-Herbsttagung 2025

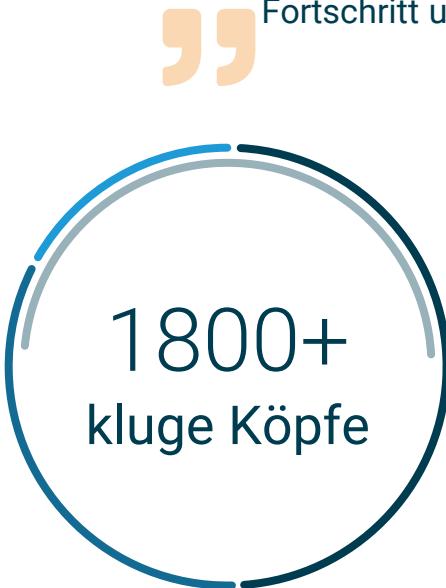
d-fine

analytisch. technologisch. quantitativ.

Unsere DNA – analytisch. technologisch. quantitativ.

Quantum for
Climate

Die geballte Kompetenz von über 1800 Expertinnen und Experten der Physik, Mathematik, Informatik und Ingenieurwissenschaften vereint in einem europäischen Unternehmen mit einer über 20-jährigen Geschichte, das den Fokus auf mathematische Modellierung, technologischen Fortschritt und Data Science legt – das ist d-fine.



- | | |
|-----|---|
| 50% | Physik |
| 35% | Mathematik |
| 15% | Informatik, Ingenieurwissenschaften & weitere |
| 50% | Promoviert |



Unsere Branchenkompetenz



Banking &
Capital Markets



Insurance & Asset
Management



Energy &
Industrials



Healthcare



Consumer &
Services



Technology



Public
Sector

Unsere Projekte im Quantum Computing

Material
Simulation



QuantiCoM
AMQS

BASIQ

QuantiCoM
H2Q

QuantiCoM
QALPHAD



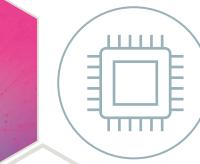
Klim-
QML



PlanQK

Quantum
Machine Learning

Quantum Hard-
/Software



ALQU QC
Software

R-QIP



Quantum
Optimization



QC Mobility
Intermodal



QC Mobility
Road



QC Mobility
Rail

Quantum for
Climate

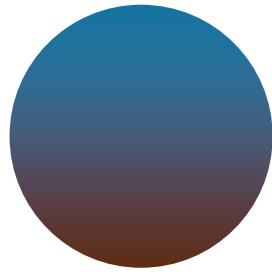
QUANTUM FOR CLIMATE

01 Quantum Computing in a nutshell



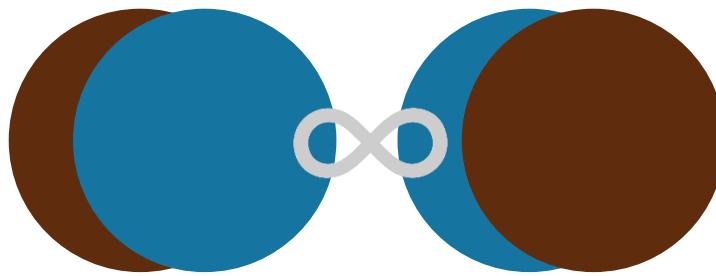
Fundamentale Eigenschaften von Quantensystemen

Superposition



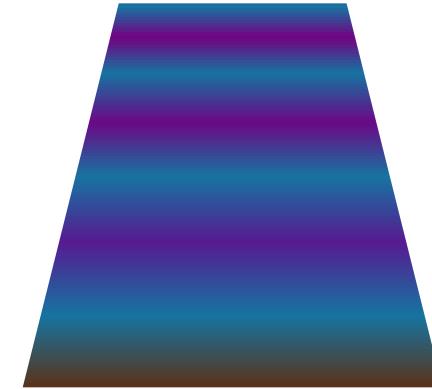
Ein Quantensystem kann sich gleichzeitig in einer von vielen möglichen Konfigurationen befinden.

Verschränkung



Zwei Quantenobjekte sind miteinander korreliert, unabhängig davon, wie weit sie räumlich voneinander entfernt sind.

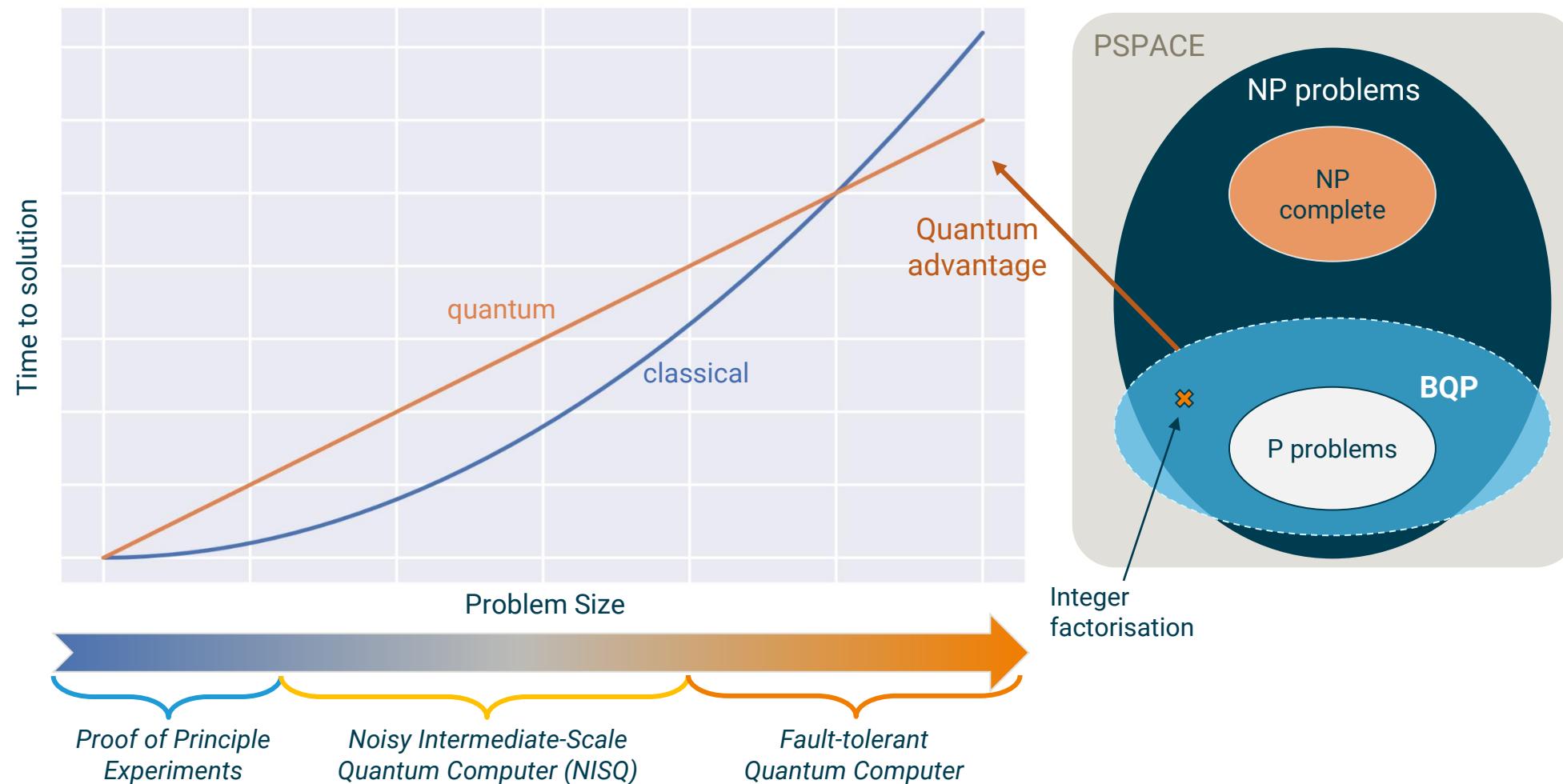
Interferenz



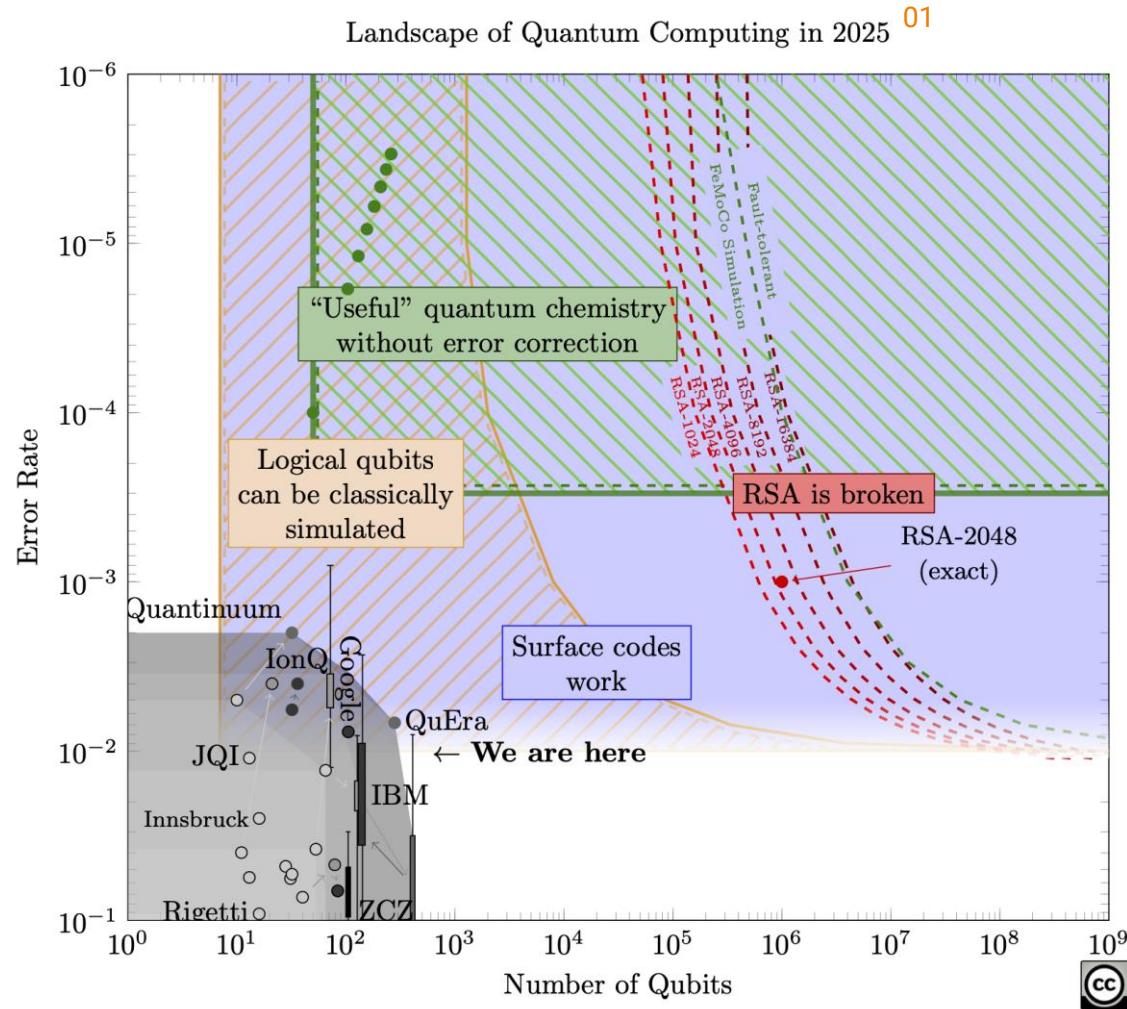
Quantenobjekte werden durch eine Wellenfunktion beschrieben, die definiert, wie sie sich ausbreiten und interagieren.

Die klassische Simulation eines Quantencomputers skaliert exponentiell, 300 Qubits beschreiben bereits einen Zustand von 2^{300} klassischen Bits. Dies entspricht der Anzahl aller Atome im sichtbaren Universum!

Das Versprechen des Quantencomputings...



Der Fortschritt in den letzten Jahren ist ermutigend, aber noch ist viel zu tun.

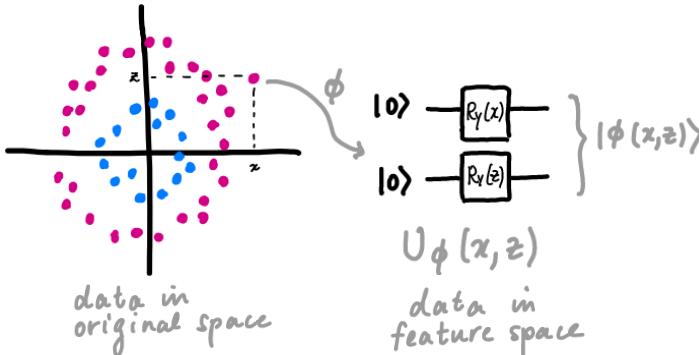


Grundkonzepte des Quantum Machine Learning

Quantum for Climate

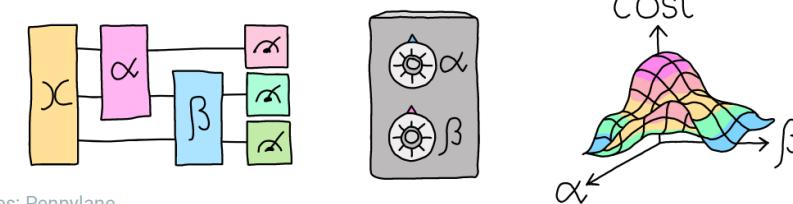
Quanten-Embedding

- Eine Quanten-Feature-Map^{01,02} wird verwendet, um die (klassischen) Daten in einen Quantenzustand einzubetten.



Variationelle Circuits

- Die Parameter des Schaltkreises werden optimiert, um eine bestimmte Verlustfunktion zu minimieren.
- Da Quantenschaltkreise differenzierbar sind, können sie ähnlich wie klassische neuronale Netze trainiert werden.
- Die Verlustfunktion wird durch Messung des resultierenden Quantenzustands ausgewertet.



Images: PennyLane

Vorteile

- Zugang zu einem feature space (=Hilbertraum), der mit 2^N in der Zahl der Qubits skaliert → größere Expressivität als klassische neuronale Netze
- Möglichkeit zur Implementierung klassisch nicht simulierbarer Kernel-Funktionen
- Robustheit gegenüber Fehlern macht die Methode NISQ-freundlich (=noisy, intermediate-scale quantum)
- Algorithmischer Vorteil für bestimmte ML-Aufgaben^{03,04}

Herausforderungen

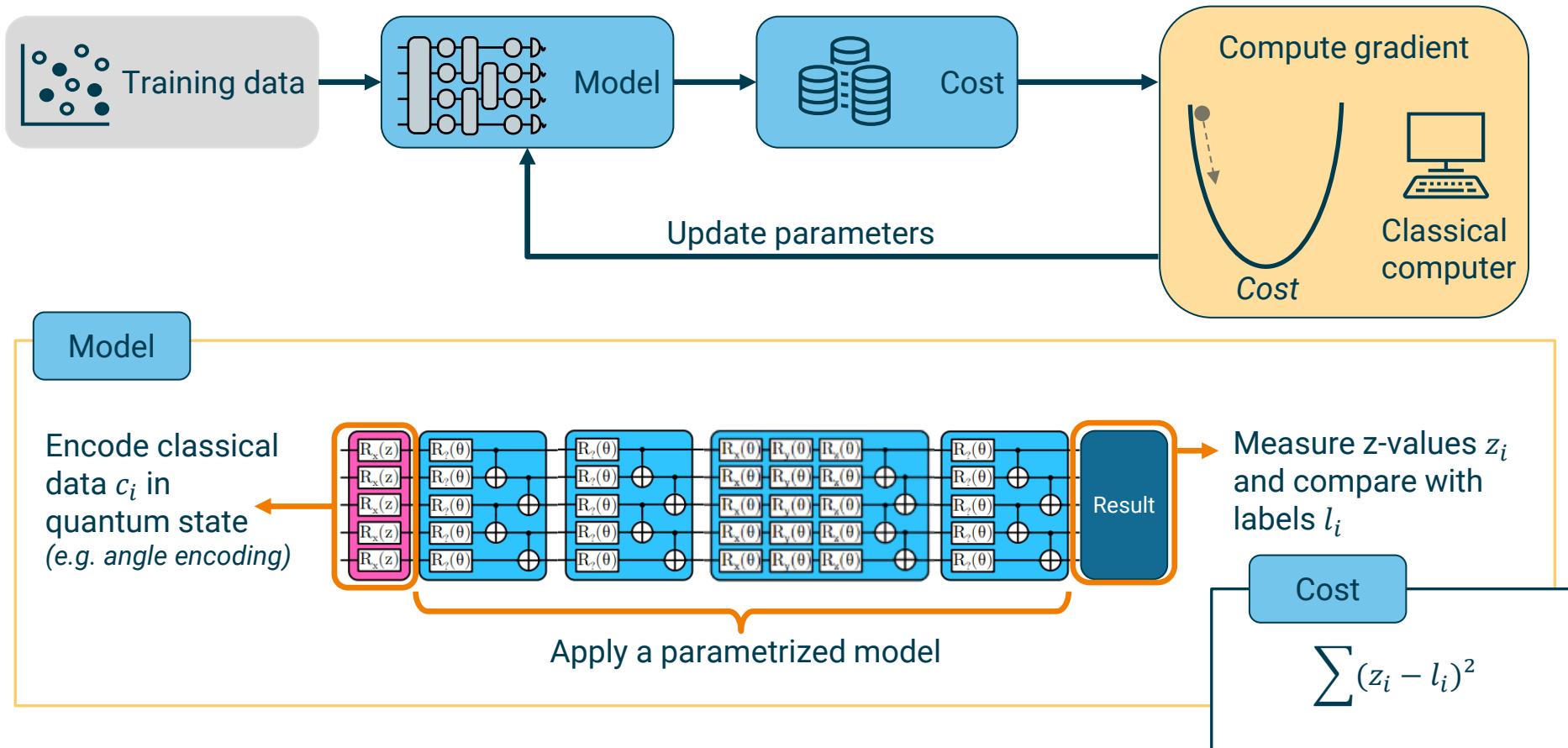
- Solider mathematischer Beweis für Quantenvorteil fehlt (vor allem für klassische Daten)
- Training der Modelle dauert sehr lange und bleibt oft in „barren plateaus“ stecken
- Große Datensätze können nicht effizient auf einen Quantencircuit gemappt werden

01 - QC in a nutshell

01 arXiv:1803.07128v1 02 arXiv:1804.11326v1
03 arXiv:2010.02174v2 04 arXiv:2112.00778v1

Ein echter Quantenvorteil im NISQ-Regime wird nicht erwartet, sondern benötigt wahrscheinlich fehlertolerante Quantencomputer.

QML-Modelle werden ähnlich wie klassische NN trainiert



Ein Quantencircuit wird anhand gelabelter Daten trainiert, um Werte für neue Datenpunkte vorherzusagen. Gatter-Parameter werden nach Evaluierung der Kostenfunktion angepasst.

QUANTUM FOR CLIMATE

02 Können Klimamodelle durch Quantencomputer verbessert werden?

DLR-Projekt KLIM-QML

d-fine



planqc



QCI

DLR
Quantencomputing
Initiative

Klimawandel: Bedrohung für Mensch und Umwelt⁰¹



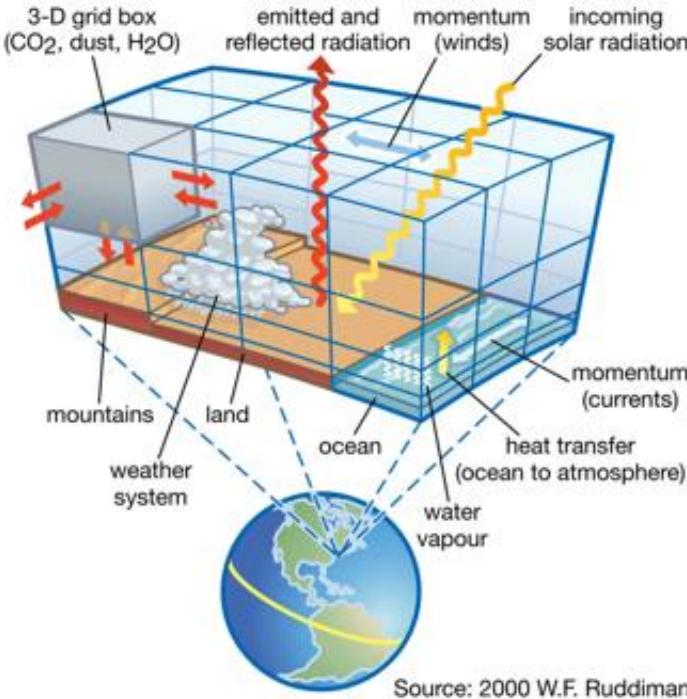
Quantum for
Climate

02 - KLIM-QML

⁰¹ Bild entnommen aus <https://www.noaa.gov/education/resource-collections/climate/climate-change-impacts>

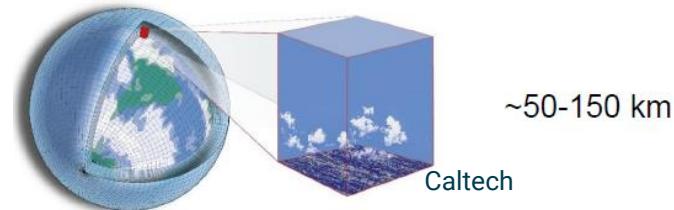
Klimaprognosen sind umfangreiche und aufwendige Computersimulationen

Schematische Darstellung eines Klimamodells



Parametrisierungen und Tuning

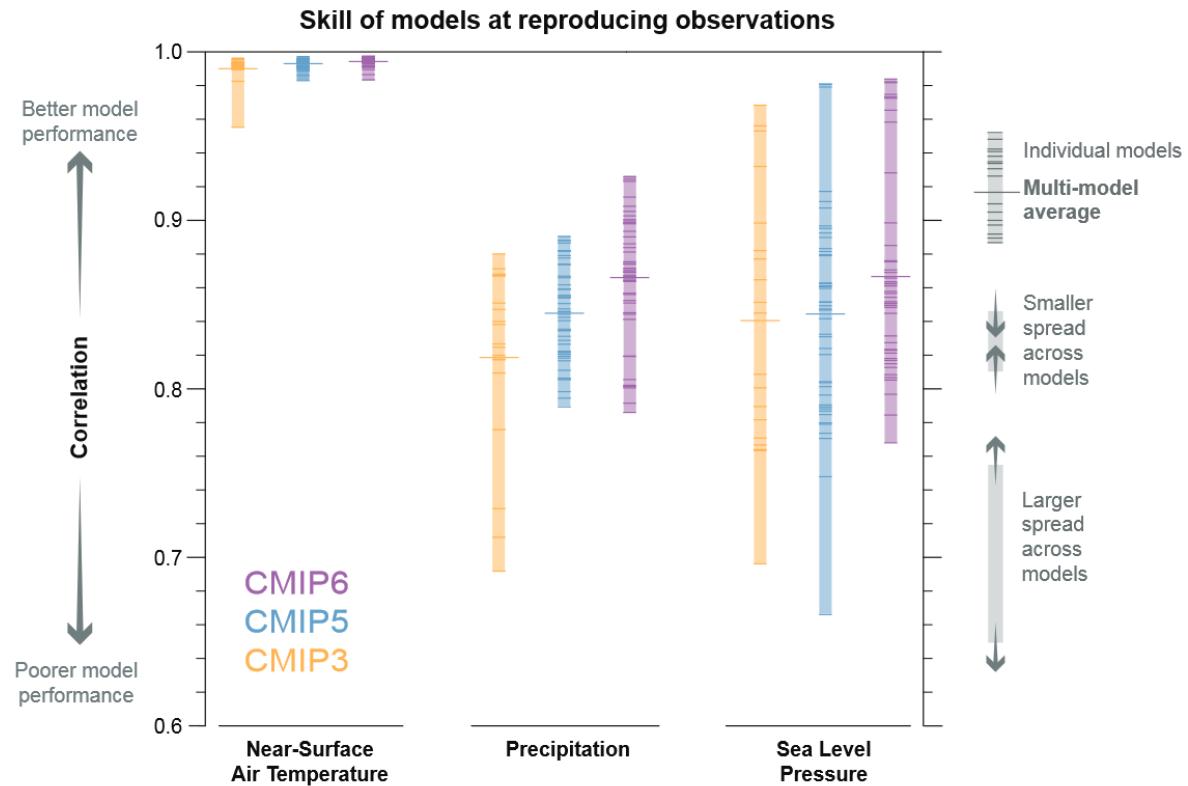
- Fokus auf die **Atmosphäre**: Modellierung durch ein System nichtlinear gekoppelter PDEs (**Navier-Stokes-Gleichungen**) auf einem relativ groben Gitter (~50–150 km).



- **Subgrid-Skalen-Phänomene**, wie (tiefe) Konvektion und (Wolken-)Mikrophysik, oder Multiskalen-Phänomene, wie atmosphärische Turbulenzen, **können nicht explizit aufgelöst werden**.
- Sie werden in der Regel durch **semi-empirische, parametisierte Funktionen modelliert** und dann mit dem globalen Klimamodell gekoppelt.
 - Dieses Verfahren wird als **Parametrisierung** bezeichnet.
 - Freie Parameter müssen angepasst werden, um den Beobachtungen zu entsprechen: **Parametertuning**.

Klimamodellierung ist äußerst anspruchsvoll und kostspielig. Parametrisierungen und sorgfältiges Tuning sind essenziell.

Unsicherheiten in bestehenden Klimamodellen ⁰¹

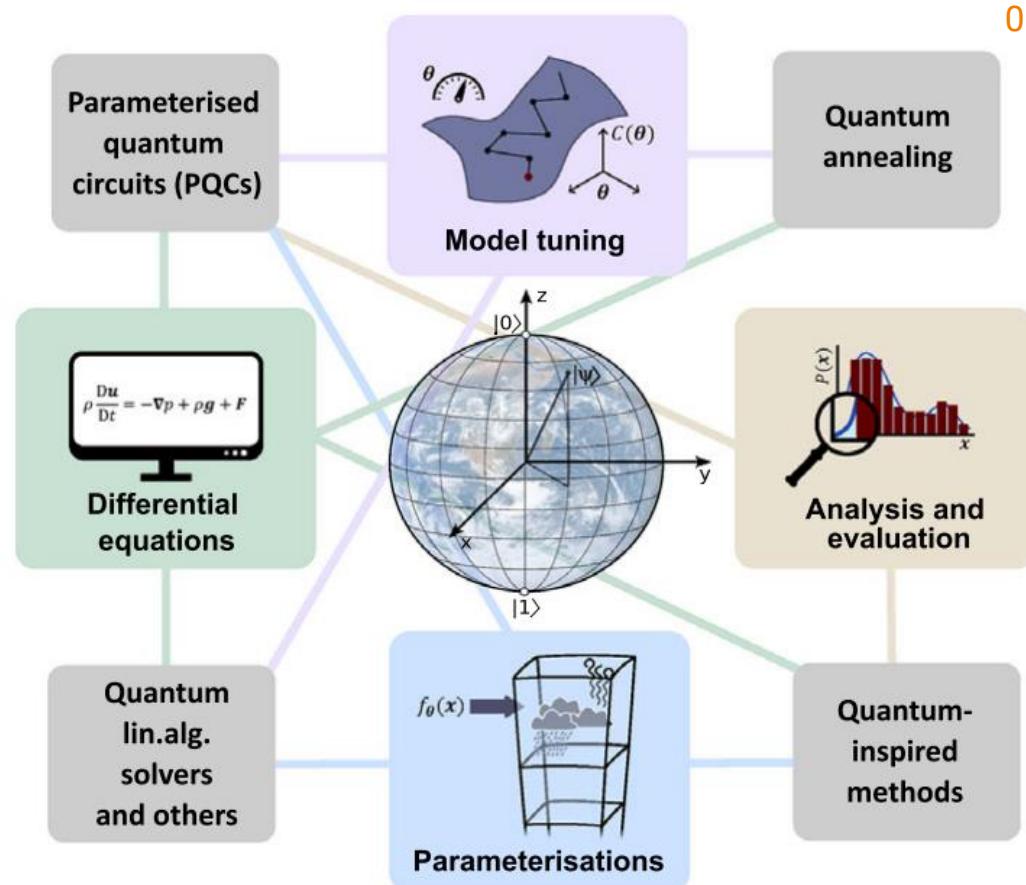


⁰¹ Eyring et al., IPCC AR6 WGI, Chapter 3: "Human influence on the climate system", 2021

Selbst moderne Klimamodelle weisen systematische Verzerrungen auf, insbesondere bei den Niederschlägen.

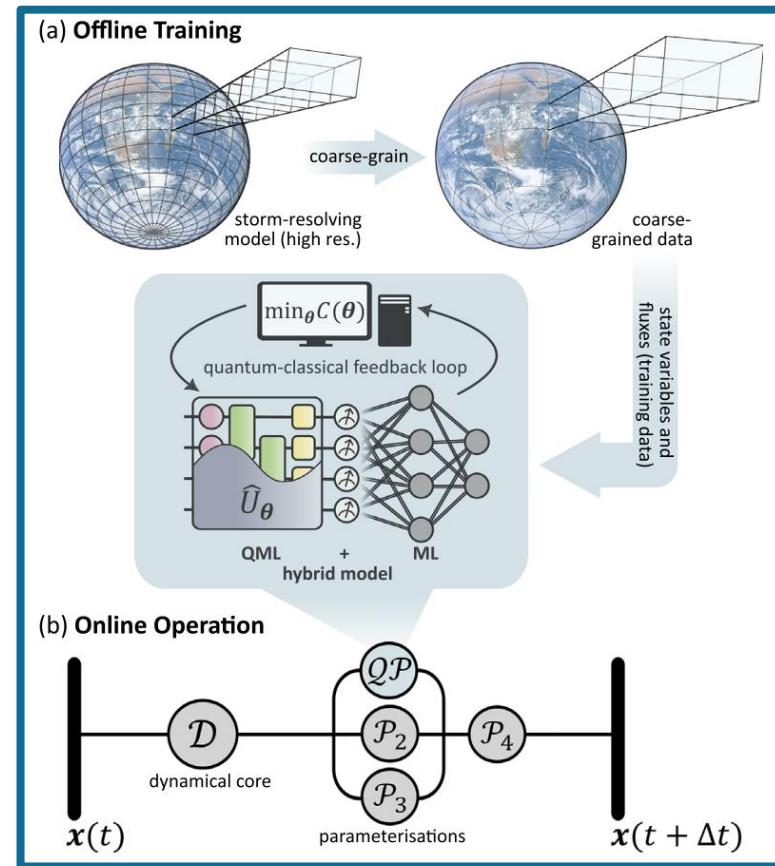
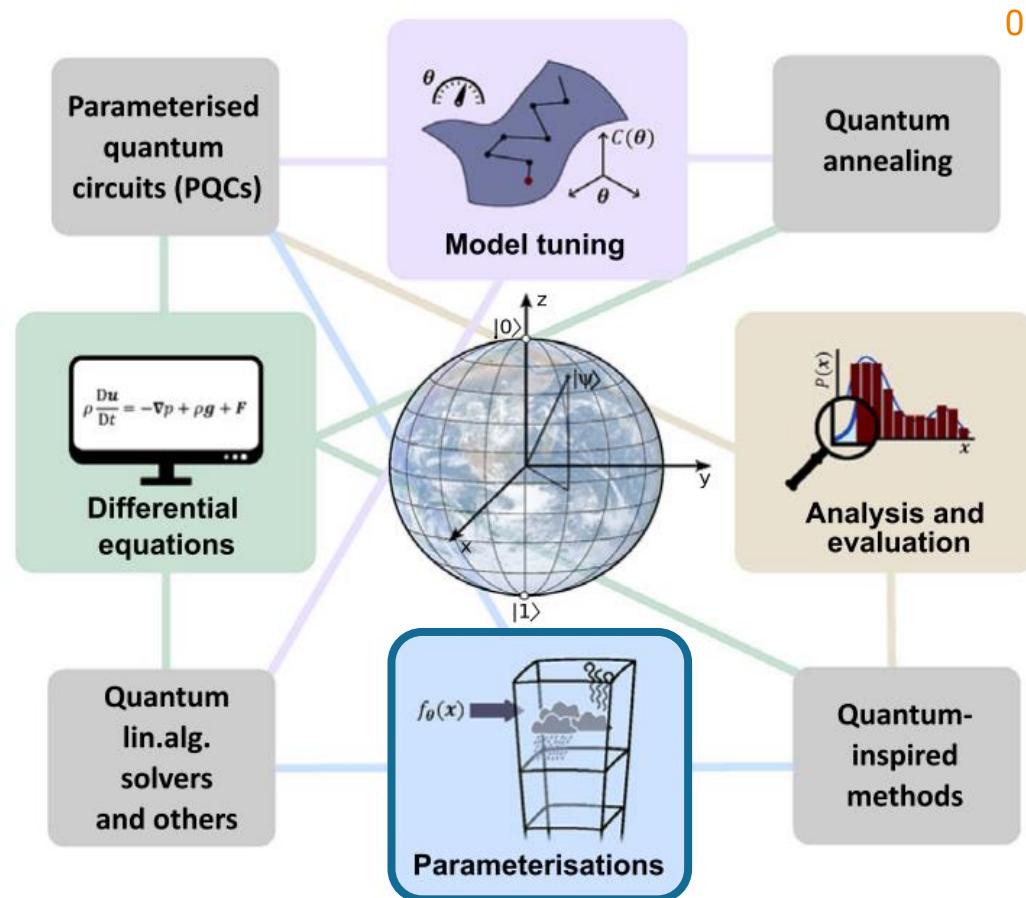
Wo kann Quantencomputing helfen?

Quantum for Climate

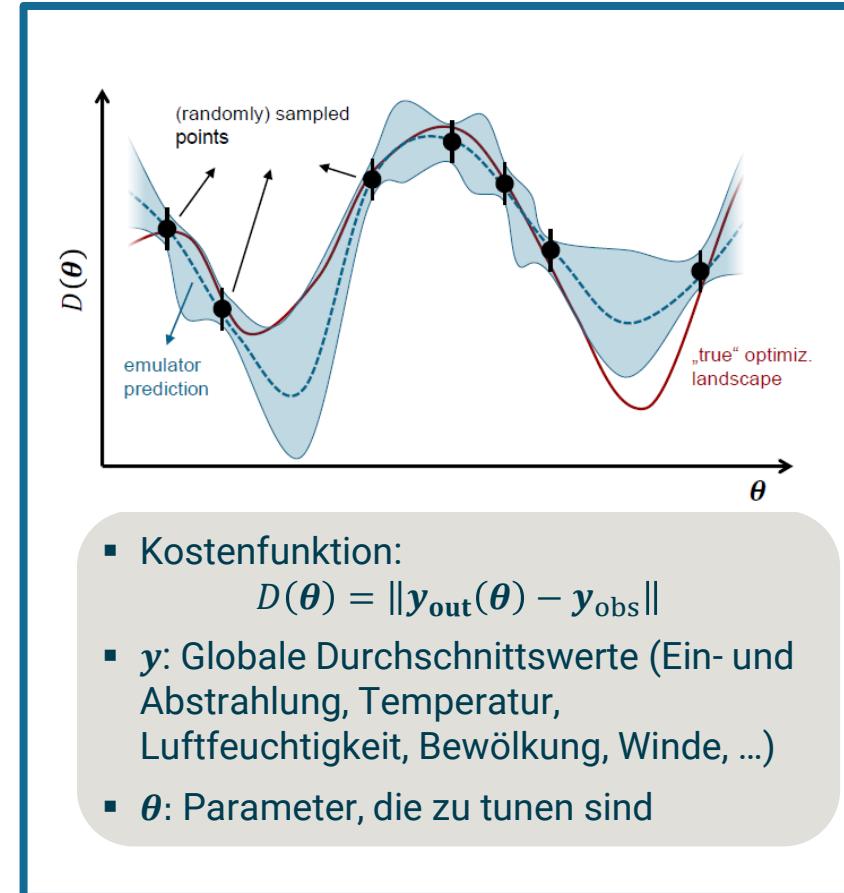
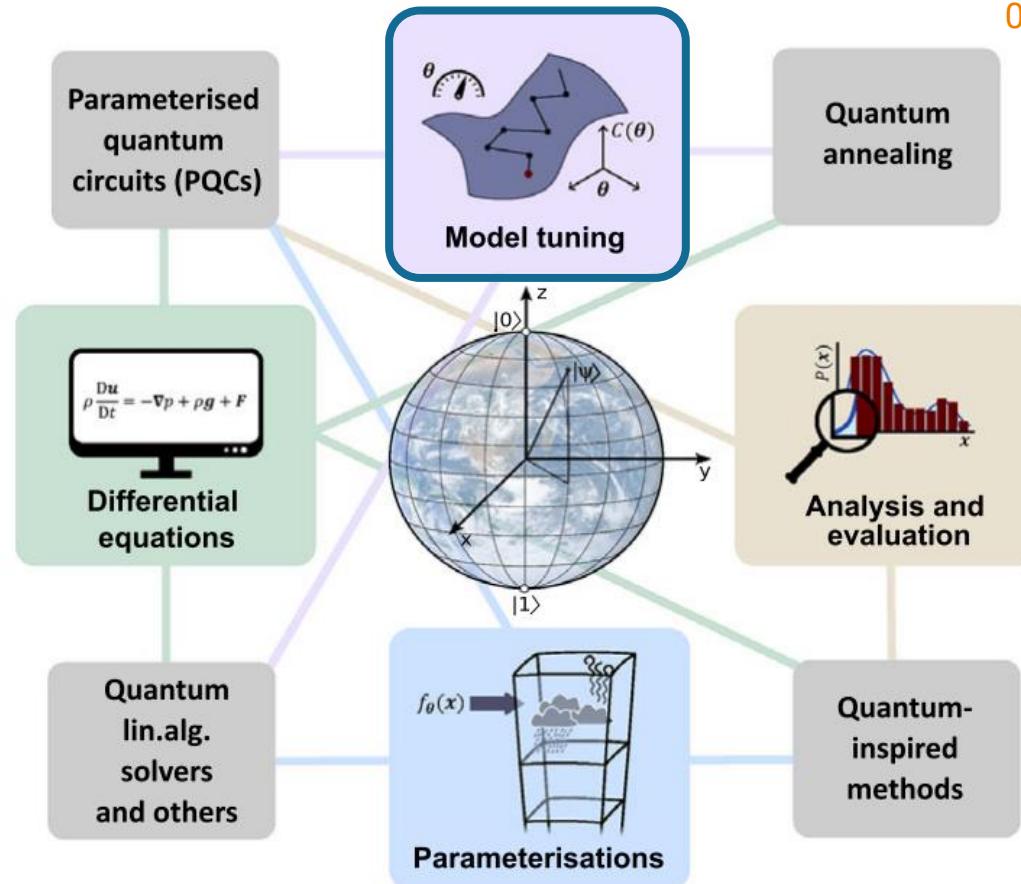


02 - KLIM-QML

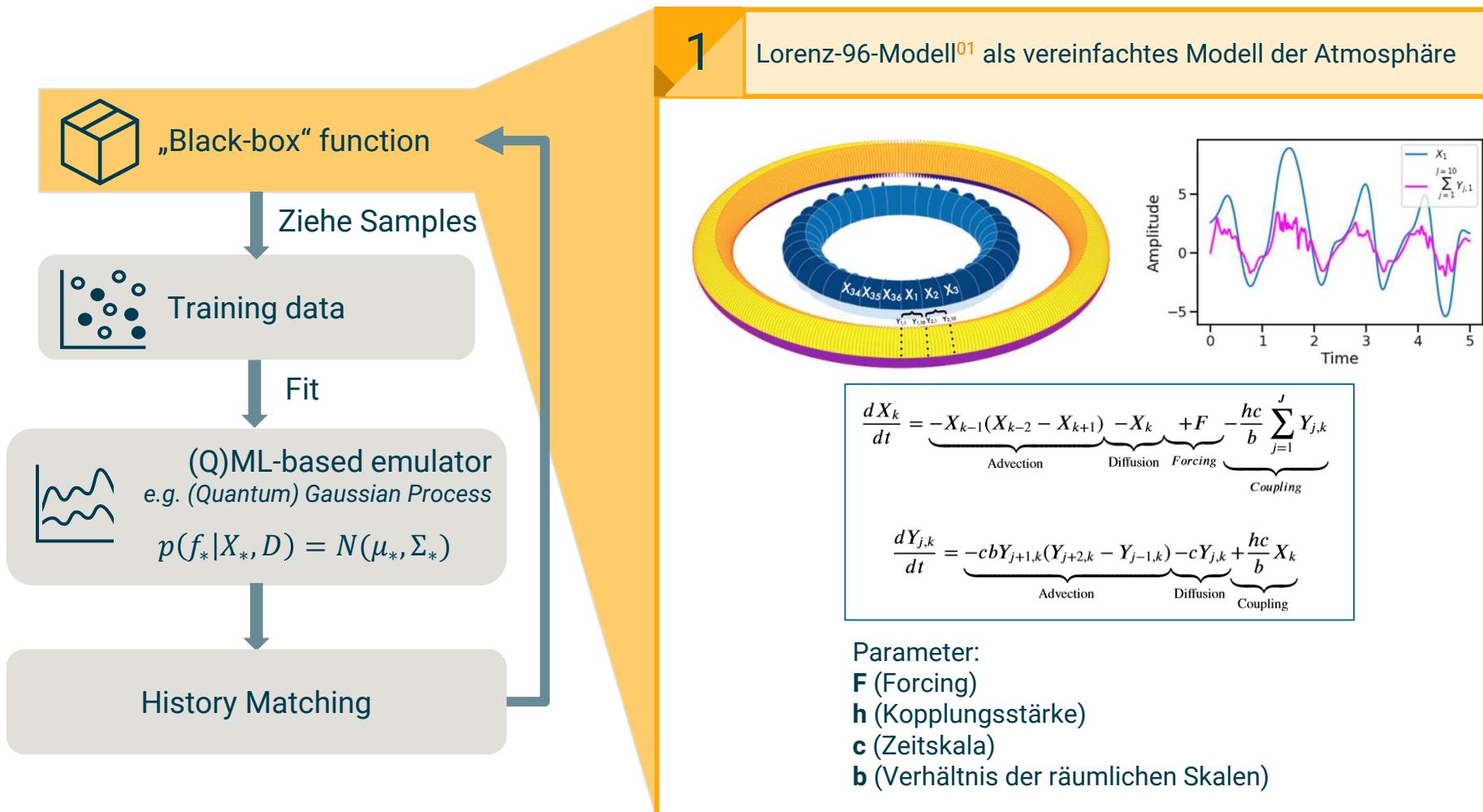
Wo kann Quantencomputing helfen?



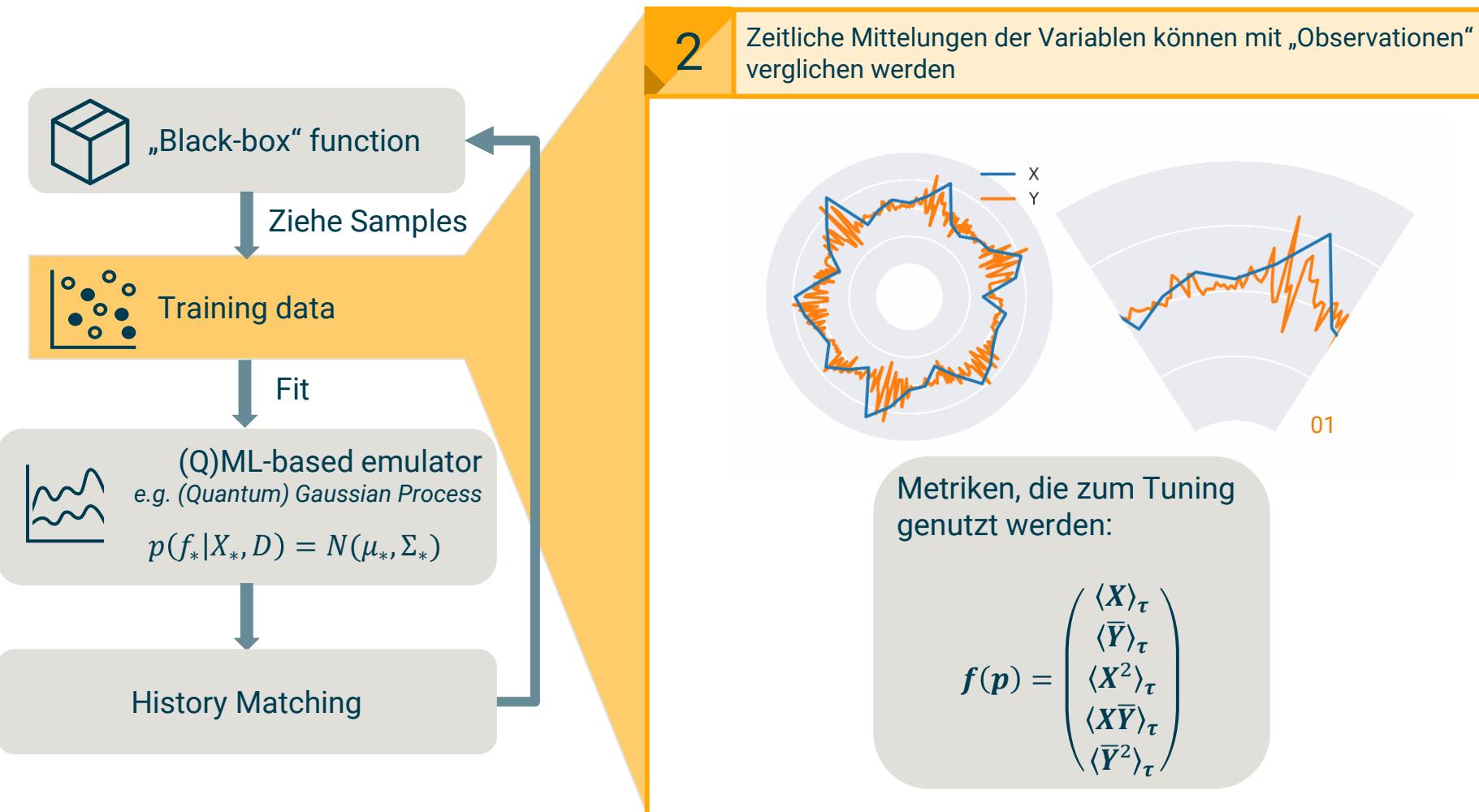
Wo kann Quantencomputing helfen?



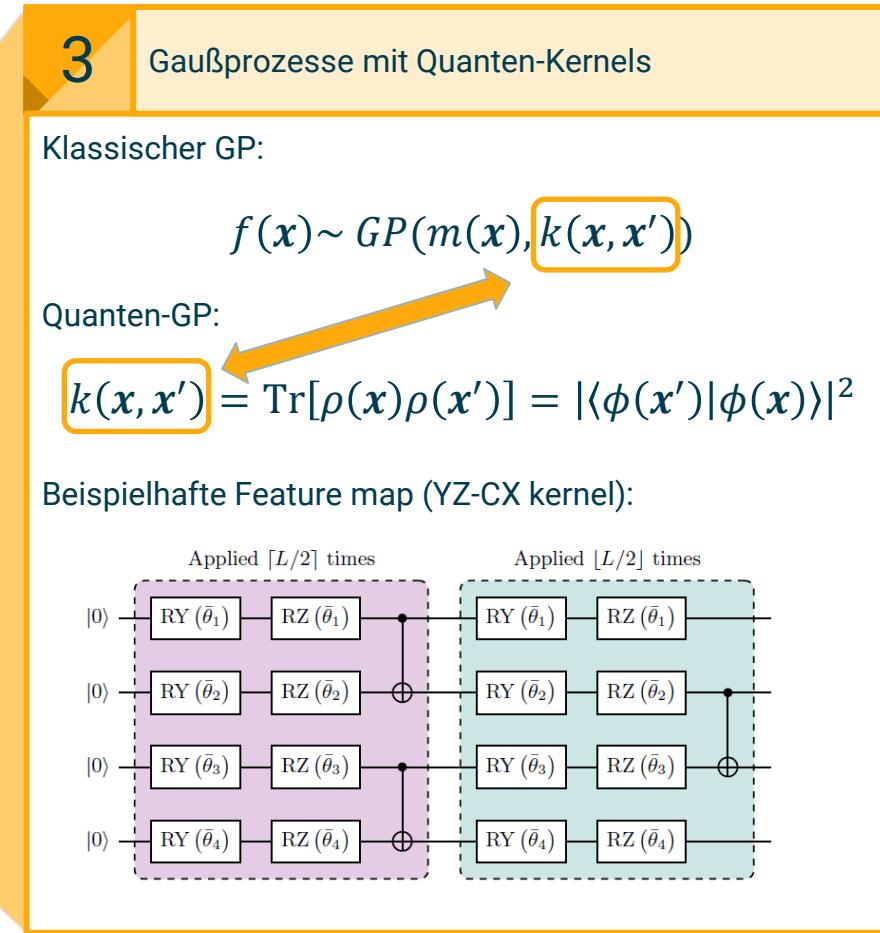
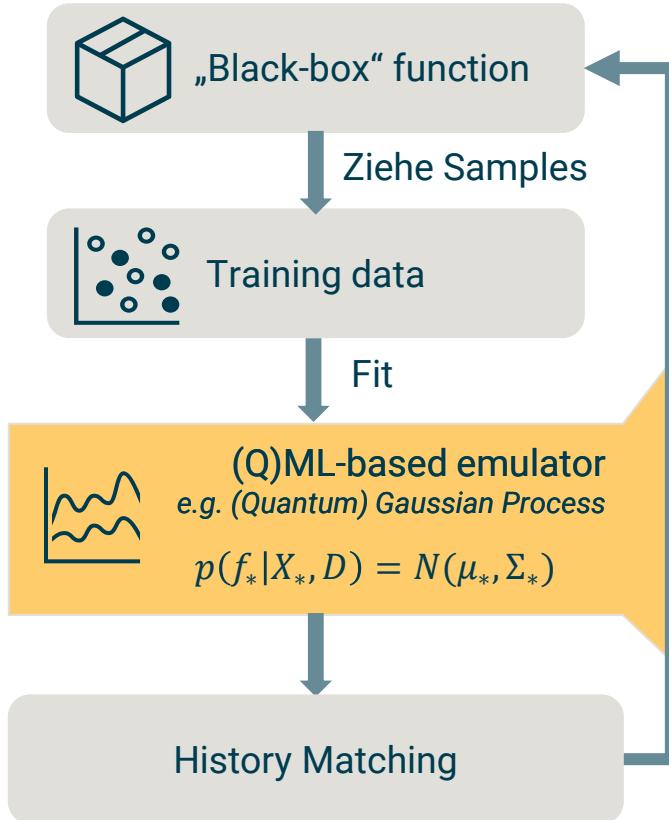
Dieses Problem kann als Bayesianische Optimierung verstanden werden



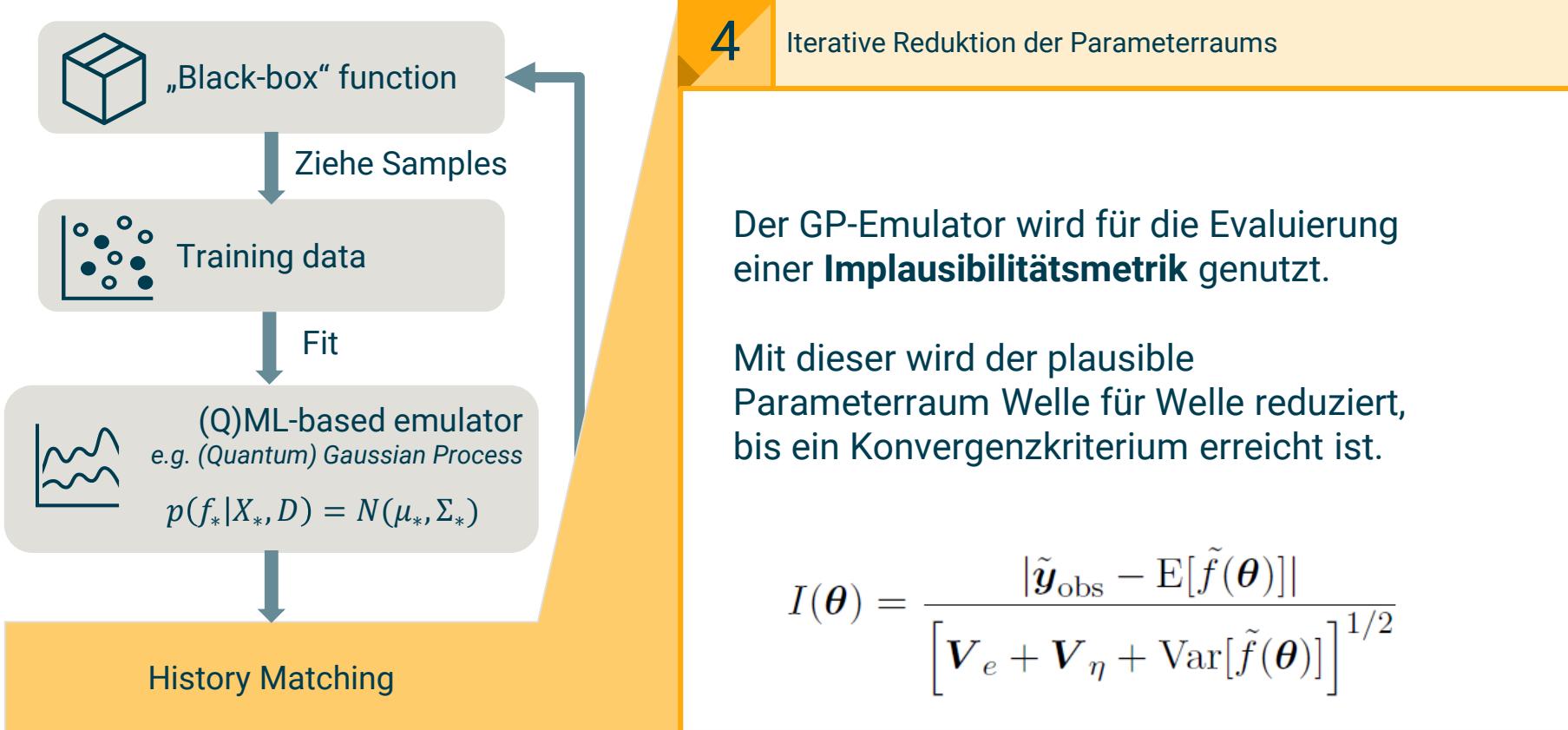
Dieses Problem kann als Bayesianische Optimierung verstanden werden



Dieses Problem kann als Bayesianische Optimierung verstanden werden

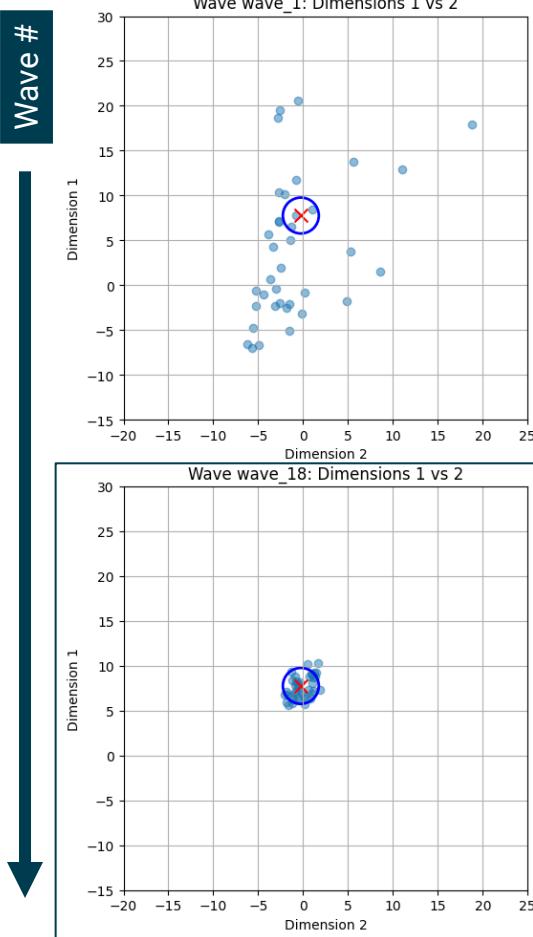


Dieses Problem kann als Bayesianische Optimierung verstanden werden

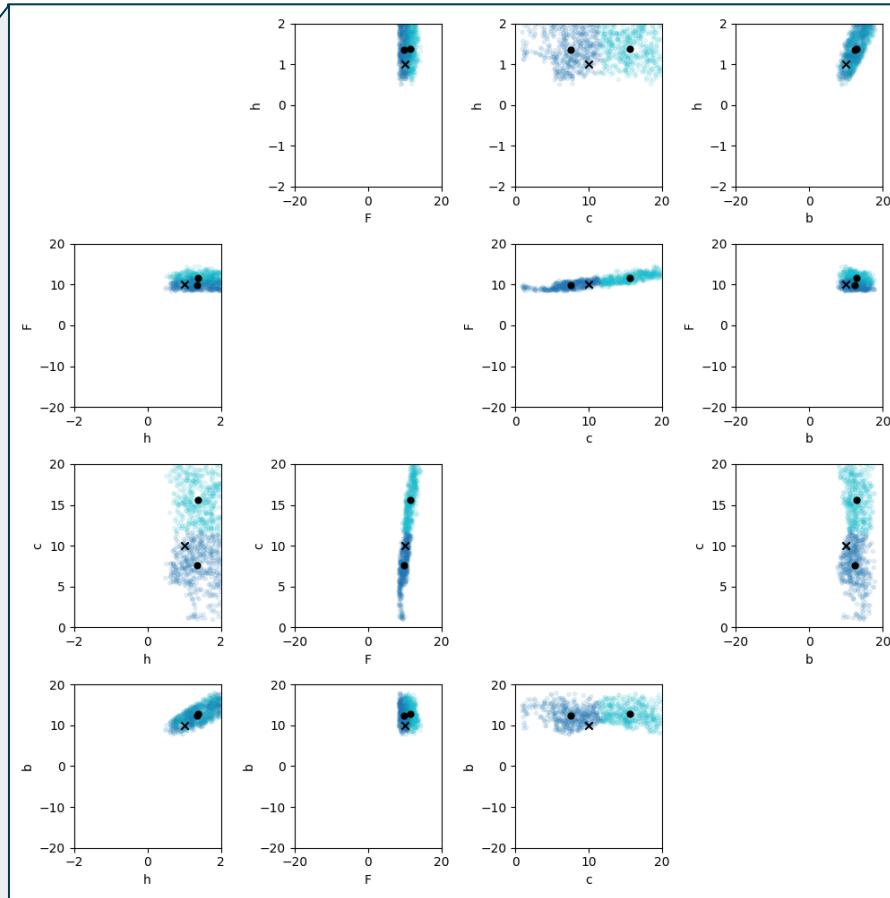


Nach genügend Iterationen ist die Varianz der Metriken konvergiert

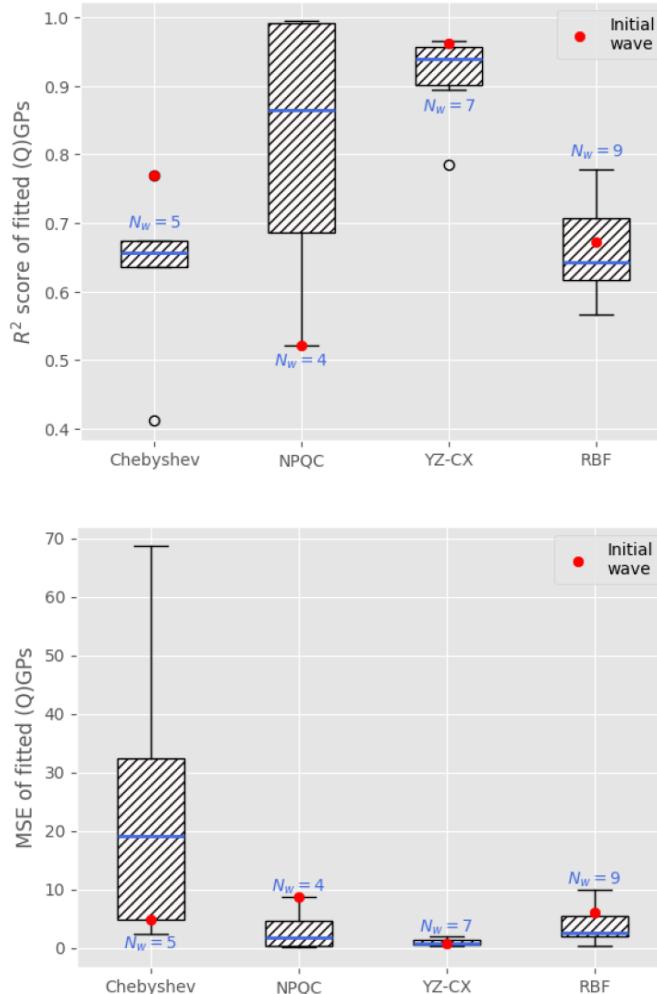
PCA Dimension



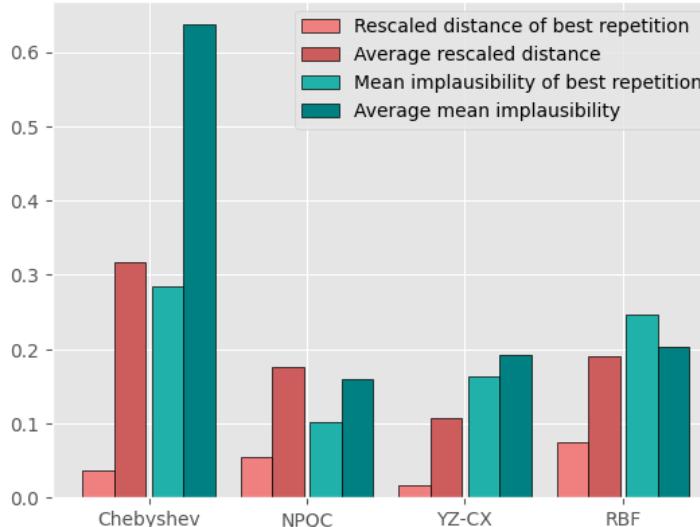
Konvergenz im Parameterraum



Die Ergebnisse sind vielversprechend, auch ohne einen klaren “Quantenvorteil”



Untersucht wurden drei verschiedene Quanten-Kernel-Architekturen mit jeweils 4-8 Qubits



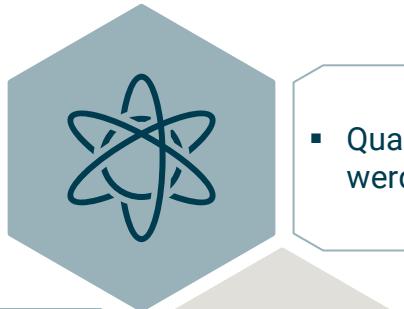
Zwei der untersuchten (simulierten) Quantenkernels führen zu besseren Ergebnissen und schnellerer Konvergenz als klassische RBF-Kernel.

Dies zeigt, dass quanteninspirierte Heuristiken auch ohne „Quantenvorteil“ einen Mehrwert bieten können.

P. Christiansen, D. Ohl de Mello et al., Quantum Bayesian Optimization for the Automatic Tuning of Lorenz-96 as a Surrogate Climate Model, arXiv preprint (to be published)

Zusammenfassung

- Es bestehen weiterhin zahlreiche Herausforderungen für die Verbesserung der Klimamodellprognosen.



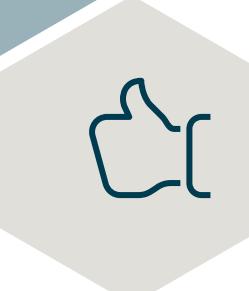
- Quantencomputing-Technologie muss noch weiter skaliert werden, um einen „echten“ Quantenvorteil zu bieten.



- Quantengestützte Parametrisierungen und Tuning-Prozesse zeigen qualitative Vorteile, müssen sich jedoch noch „online“ bewähren.



- Quanteninspirierte Heuristiken können einen Mehrwert bieten, auch bevor die fehlertolerante Hardware verfügbar ist.



Kontakt



Dr Daniel Ohl de Mello
Manager
Tel +49 69 90737-1672
Mobile +49 152 57975495
Daniel.Ohl.de.Mello@d-fine.com

d-fine GmbH
An der Hauptwache 7
D-60313 Frankfurt/Main
Deutschland

Frankfurt

Berlin

Düsseldorf

Hamburg

London

Mailand

München

Stockholm

Utrecht

Wien

Zürich