

Abschlussarbeit (BSc/MSc): Quanten-Kernel-Methoden zum Lösen von Differentialgleichungen

Betreuer: Jan Schnabel, Fraunhofer IPA
jan.schnabel@ipa.fraunhofer.de

Themenbeschreibung

Wir, die Quantencomputing-Gruppe am Fraunhofer IPA, konzentrieren uns auf methodengeleitete Forschung in den Bereichen Quantenmaschinelles Lernen (QML) und Quantenoptimierung. Die Hauptanwendungsgebiete umfassen unter anderem die Fertigungs- und Prozessindustrie, wobei stets ein Augenmerk auf den Transfer aktueller Forschungsergebnisse in Unternehmen gelegt wird. Dadurch ergibt sich ein spannendes und interdisziplinäres Arbeitsfeld im Wechselspiel zwischen abstrakter Grundlagenforschung, über Methodenentwicklung und Implementierung bis hin zum konkreten Anwendungsbezug. Im Rahmen des Projekts *DEGRAD-EL³-Q¹* untersuchen wir, wie Quantencomputingmethoden zur Analyse der Lebensdauer von Elektrolyseuren eingesetzt werden können. Das Projekt ist Teil des Leitprojekts *H₂Giga²* mit dem Ziel, den industriellen Herstellungsprozess von Elektrolyseuren voranzubringen. Die mathematische Beschreibung des Verhaltens von Elektrolyseuren im Betrieb kann durch Differentialgleichungen modelliert werden. Im Projekt wollen wir dabei erforschen, inwieweit Quanten-Kernel-Methoden zur Lösung von Differentialgleichungen^{3,4,5} eingesetzt werden können; woran diese Arbeit direkt anknüpft.

In der Abschlussarbeit soll ein Verständnis davon erarbeitet werden, wie Quanten-Kernel-Methoden zum Lösen von Differentialgleichungen eingesetzt werden können. Nach einer Einarbeitungsphase in das Themenfeld Quantencomputing mit dem Hauptaugenmerk auf QML und Quanten-Kernel-Methoden soll der erwähnte Algorithmus implementiert werden. Darüber hinaus sollen einfache Beispiele identifiziert werden, anhand derer Funktionstests durchgeführt werden können. Abschließend soll ein systematischer Vergleich zu den ebenfalls im Projekt untersuchten quantenneuronalen Netzen erfolgen.

Forschungsfragen

- Wie unterscheiden sich "fidelity quantum kernels" von "projected quantum kernels" in diesem Kontext?
- Welche Rückschlüsse kann man aus dem systematischen Vergleich zu quantenneuronalen Netzen ziehen?
- Raum um eigene Ideen zu entwickeln und resultierenden Fragestellungen nachzugehen

Voraussetzungen

- Studiengänge: Mathematik, Physik, (Theoretische) Chemie oder ähnliche Fachrichtungen
- Python-Kenntnisse und Grundlagenwissen der Quantenmechanik sind hilfreich, aber keine Voraussetzung
- Bereitschaft zur selbstständigen Einarbeitung in neue Themenfelder sowie eigenständige, sorgfältige und strukturierte Arbeitsweise

¹ <https://www.ipa.fraunhofer.de/de/referenzprojekte/Degrad-EL3-Q.html>.

² <https://www.wasserstoff-leitprojekte.de/leitprojekte/h2giga>.

³ M. Schuld and N. Killoran, Phys. Rev. Lett., 122, 040504 (2019).

⁴ M. Schuld, arXiv:2101.11020v2 (2021).

⁵ A. E. Paine et al., arXiv:2203.08884v1 (2022).