

Abschlussarbeit (BSc/MSc): Methodenentwicklung im Bereich Quantum Machine Learning

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 *AQUAS*¹ wird die Nutzung von Quantencomputern für die Katalysatorentwicklung von Elektrolyseuren erforscht. Hierzu sind aufwändige quantenchemische Simulationen erforderlich, um geeignete Katalysematerialien zu finden, die zu einer Effizienzsteigerung in der Wasserstoffproduktion führen können. Innerhalb dieses Projekts untersuchen wir regressionsbasierte QML-Algorithmen, um Simulationen durch die Erstellung geeigneter Surrogatmodelle zu ergänzen.

Im Rahmen der Abschlussarbeit erfolgt zunächst die Einarbeitung in den Themenkomplex Quantencomputing mit Hauptaugenmerk auf QML. Daraufhin soll eine gezielte Recherche zu den QML-Methoden „Quantum Sparse Gaussian Processes (QSGPR)²“, „Quantum Recurrent Neural Networks (QRNN)³“ und „Quantum Convolutional Neural Networks (QCNN)⁴“ erfolgen, woraufhin die Festlegung auf eine der Methoden erfolgt. Hieran schließt sich die Implementierung des entsprechenden Algorithmus an. Darüber hinaus sollen einfache Beispiele für Funktionstests identifiziert werden, die dann systematisch ausgeführt werden. In einem weiteren Schritt kann das Modell dann auf projektspezifische Datensätze angewendet werden.

Forschungsfragen

- Wie verhält sich die Quantenmethode in geeigneten Benchmarks zum klassischen Analogon?
- Wie vergleicht sich das ausgewählte QML-Modell auf geeigneten Benchmark-Datensätzen zu anderen QML-Methoden?

Voraussetzungen

- Studiengänge: Mathematik, Physik, (Theoretische) Chemie oder ähnliche Fachrichtungen
- Python-Kenntnisse und Erfahrungen im Bereich Machine Learning hilfreich
- Erfahrung im Umgang mit Quantencomputing-SDKs und Grundlagenwissen der Quantenmechanik von Vorteil aber nicht Voraussetzung
- Bereitschaft zur selbstständigen Einarbeitung in neue Themenfelder sowie eigenständige, sorgfältige und strukturierte Arbeitsweise

¹ <https://quantumsimulations.de/aquas>.

² G. I. Kus et al., Quantum Machine Intelligence 3, 6 (2021).

³ J. Bausch, arXiv:2006.14619.

⁴ I. Cong et al., Nat. Phys., 15, 1273 (2019).