

# Masterarbeit: Untersuchung von Quanten Graph Neural Networks für die Vorhersage von Moleküleigenschaften

Betreuer: Philipp Wagner, Fraunhofer IPA  
philipp.wagner@ipa.fraunhofer.de

## Themenbeschreibung

Skalierbare und kosteneffiziente Lösungen für die Speicherung erneuerbarer Energien sind unerlässlich, um den steigenden Energiebedarf der Welt zu decken und gleichzeitig den Klimawandel einzudämmen. Die Umwandlung von Strom in Wasserstoff, sowie der umgekehrte Verbrennungsprozess können dabei eine wichtige Rolle spielen. Um Katalyseprozesse im Bereich der Wasserstoffproduktion effizient ablaufen zu lassen, werden laufend neue Materialien untersucht. Zur Simulation und Berechnung von Katalyseeigenschaften werden bereits Methoden des maschinellen Lernens eingesetzt. Insbesondere graphenbasierte Neuronale Netze (GNN) erweisen sich hier als besonders vielversprechend.<sup>1</sup> Da die Vorhersage von Potentialflächen und anderen relevanten Eigenschaften auf molekularer und atomarer Ebene abläuft, wird ebenfalls der Einsatz von Quantencomputern untersucht. In der Literatur existieren bereits erste Ansätze um GNNs auf Quantencomputern zu realisieren.<sup>2, 3, 4</sup>

In der Masterarbeit soll untersucht werden, inwieweit sich diese Quanten GNNs zur Vorhersage von molekularen Eigenschaften eignen. Dazu muss je nach Vorwissen zunächst ein Verständnis über GNNs, sowie einiges Grundlagenwissen zu Quantencomputing erarbeitet werden. Tiefergehendes Wissen bezüglich der Elektrokatalyse ist nicht unbedingt erforderlich. Gegen Ende der Masterarbeit können die erarbeiteten Ansätze auf einem echten Quantencomputer getestet und evaluiert werden.

## Forschungsfragen

- Wie funktionieren Quanten GNNs?
- Wie müssen molekulare Daten vorverarbeitet werden, um sie mit einem Quantencomputer zu nutzen?
- Eignen sich Quanten GNNs zur Vorhersage von Potentialflächen im Kontext der Elektrokatalyse?
- Wie verhält sich die Performance im Vergleich zu klassischen GNNs?

## Voraussetzungen

- Studiengänge Mathematik, Physik, Informatik oder ähnliche Fachrichtungen
- Erfahrungen mit Maschinellem Lernen
- Programmierkenntnisse in Python
- Grundlagenwissen in Quantenmechanik/Quantencomputing

---

<sup>1</sup> R. Tran, J. Lan, M. Shuaibi, B. M. Wood, S. Goyal, A. Das, J. Heras-Domingo, A. Kolluru, A. Rizvi, N. Shoghi, A. Sriram, F. Therrien, J. Abed, O. Voznyy, E. H. Sargent, Z. Ulissi, and C. L. Zitnick, "The open catalyst 2022 (oc22) dataset and challenges for oxide electrocatalysts," 2022.

<sup>2</sup> G. Verdon, T. McCourt, E. Luzhnica, V. Singh, S. Leichenauer, and J. Hidary, "Quantum graph neural networks," 2019.

<sup>3</sup> K. Beer, M. Khosla, J. Köhler, and T. J. Osborne, "Quantum machine learning of graphstructured data," 2021.

<sup>4</sup> X. Ai, Z. Zhang, L. Sun, J. Yan, and E. Hancock, "Decompositional quantum graph neural network," 2022.