

GRAPH NEURAL NETWORKS FOR MOLECULAR Property Prediction

CANDIDATE NUMBER:

In Fulfillment of Assessment for
'Topics in Computational Biology'

April 3, 2021

ABSTRACT

Der Abstract fasst die zentralen Inhalte der Arbeit zusammen. Eine Wertung oder Interpretation erfolgt nicht. Dies hilft, sich einen groben Überblick über Fragestellung, Vorgehen und Ergebnisse zu verschaffen. Bestandteil sollen die Teile a) Hintergrundinformationen, Fragestellung, Zielsetzung, Forschungskontext, b) Methoden, c) Ergebnisse und d) Schlussfolgerungen, Anwendungsmöglichkeiten sein. Der Text ist knapp, vollständig und präzise, zudem objektiv und ohne persönliche Wertung. Achten Sie auf eine einfache und verständliche Sprache. Alle genannten Inhalte müssen auch im Hauptteil aufgegriffen werden. Den Inhalt objektiv und ohne persönliche Wertung wiedergeben. Gehen Sie auf die wichtigsten Konzepte, Resultate oder Folgerungen ein. Verwenden Sie keine Zitate und verzichten Sie auf Abkürzungen. In der Regel sind ca. 200 Wörter ausreichend.

CONTENTS

1 Introduction	1
References	2
References	2
List of Figures	3
List of Tables	4
Appendix	5
A Simulationen – Fließbilder und Vorgaben	5
B Kostenrechnung	5
C Ergebnisse	5

1. INTRODUCTION

Molecules form the smallest identifiable parts of covalent compounds that still retain their chemical properties [1]. These covalent compounds can be found in all organisms, since together they form integral parts like proteins or the DNA making an understanding of molecules and their properties key to deciphering the foundations of life. Since molecules are complex physical entities in 3D space consisting of covalent bonds between atoms, identifying their chemical, physical or biological properties is by no means a simple task. *Molecular property prediction* aims to classify molecules according to their properties. In abstract terms this amounts to finding a nonlinear function from all molecules to a set of predefined properties. *In silico* methods to this by finding a mathematical representation of molecules serving as an input input for statistical or machine learning methods that try to learn the molecule's property. Classes of properties that have been of interest in the past are vast and comprise for example quantum-mechanic, physio-chemical, bio-physical or physiological properties [2].

REFERENCES

- [1] Molecules and molecular compounds. <https://chem.libretexts.org/@go/page/21702>, 2021. Retrieved: April 1, 2021.
- [2] Z. Wu et al.: Moleculenet: a benchmark for molecular machine learning, 2018. arXiv: 1703.00564 [cs.LG].

LIST OF FIGURES

LIST OF TABLES

APPENDIX

A. Simulationen – Fließbilder und Vorgaben

B. Kostenrechnung

C. Ergebnisse