



# › RESEARCH DAY 2024

## Towards Quantum Graph Neural Networks for Molecular Property Prediction

Präsentation Master Thesis | Tobias Roth / WV / Wirtschaftsinformatik | WiSe 23/24

# AGENDA

---



Exposé / Einleitung



Paper #1



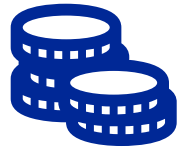
Paper #2



Konklusion

# PROJEKTVORSTELLUNG: AQUAS

Gefördert vom  
Bundesministerium für  
Wirtschaft und Klimaschutz



Innovationen in der  
Wasserstoffforschung durch  
Quantensimulation



# AQUAS

Präzisere sowie effizientere Berechnung  
und Simulation für spezifische Prozesse  
und Materialien im Rahmen  
wasserstoffbasierter Energie



universität  
**uulm**



<https://quantumsimulations.de/aquas>

[https://www.digitale-technologien.de/DT/Navigation/DE/ProgrammeProjekte/AktuelleTechnologieprogramme/Quanten\\_Computing/Projekte/AQUAS/aquas.html](https://www.digitale-technologien.de/DT/Navigation/DE/ProgrammeProjekte/AktuelleTechnologieprogramme/Quanten_Computing/Projekte/AQUAS/aquas.html)



# EINLEITUNG

## PROBLEMSTELLUNG

- Bemühungen zur Reduzierung der Umweltbelastung geraten aufgrund des stetig voranschreitenden Klimawandels rücken in den Fokus der Öffentlichkeit (Amin et al. 2022)
- Suche nach effizienten Speicherlösungen für die Deckung des wachsenden globalen Energiebedarfs (Kilkis et al. 2019)  
→ Umwandlung von Strom in Wasserstoff sowie Verbrennungsprozesse spielen eine wichtige Rolle (Amin et al. 2022)
- Erforschung neuer Materialien durch den Einsatz von Methoden im Bereich des maschinellen Lernens (Chen et al. 2023)
  - Bsp: Berechnung katalytischer Eigenschaften mithilfe **graphenbasierter Neuronaler Netze (GNNs)** (Tran et al. 2022)
- Erste Ansätze in der Literatur zur Realisierung von GNNs auf Quantencomputer (Verdon et al. 2019, Beer et al. 2021, Ai et al. 2023)



Untersuchung, inwiefern Quantencomputer bzw. quanten-graphenbasierte Neuronale Netze für die Vorhersage katalytischer Eigenschaften im Rahmen der Wasserstoffproduktion genutzt werden können

“

***Globale Forschungsfrage:***

*„Wie können klassische und quanten-graphenbasierte Neuronale Netze für die Vorhersage molekularer Eigenschaften genutzt werden?“*

- Q1: Wie funktionieren GNNs und Quanten-GNNs?**
- Q2: Wie müssen molekulare Daten verarbeitet werden, damit sie mit einem Quantencomputer verwendet werden können?**
- Q3: Wie ist die Leistung im Vergleich zu klassischen GNNs?**

# EINLEITUNG

## ZIELSETZUNG



**Ziel: Implementierung eines klassischen GNNs und eines Quanten-GNNs**

Auf Basis der vorhandenen Literatur einen Prototyp konzeptionieren, implementieren und evaluieren

### Paper #1:

- Literaturanalyse zu GNNs, Darstellung des State-of-the-Arts
- Identifikation einer geeigneten Architektur
- Implementierung und Evaluierung eines klassischen GNNs

### Paper #2:

- Analyse der vorhandenen Literatur (Foundation Paper) zu Quanten-GNNs
- Anforderungserhebungen für das zu implementierende Quanten-GNN
- Implementierung und Evaluierung eines Quanten-GNNs
- Einbindung und Veröffentlichung in das eQJTeam-Python-Framework des Fraunhofer IPA



# › PAPER 1: ARCHITECTURES OF GRAPH NEURAL NETWORKS

## 2 Architectures of Graph Neural Networks

### Abstract

As deep learning algorithms increasingly address graph-structured data, Graph Neural Networks (GNNs) play a more and more important role in various fields, including computational chemistry and the prediction of molecular properties. However, currently in the literature different architectures and approaches of GNNs exist. Therefore, this paper analyzes the current state-of-art by exploring architectures and approaches of GNNs in the literature. By creating an overview, it will show that convolutional GNNs are commonly used and particularly reliable when working with molecular properties. With the help of structured process CRISP-DM, later a convolutional GNN will be developed that predicts the potential energy surface of molecules with the QM9 dataset. The evaluation shows high accuracy, therefore the GNN was successfully developed.

**Keywords:** graph neural networks, architectures, literature review, potential energy surface prediction

### 2.1 Introduction

While deep learning algorithms effectively capture hidden patterns of Euclidean data, there is an increasing number of application areas where the data is represented in the form of graphs or structures similar to graphs [12]. Due to the expressive capabilities of graphs, researches on analyzing these kind of structures with machine learning have been receiving more and more attention. This is evident in the areas of social science, such as social networks, natural science like physical systems, knowledge graphs and other research areas [13]. Deep learning based methods that operate in a graph domains are called Graph Neural Networks (GNNs) [14].

In computational chemistry, molecules are modeled as graphs enabling various experiments [12]. This includes the prediction of potential energy surfaces for molecules made of hydrogen compounds or other materials [15]. In the current literature, different approaches or architectures for GNNs exist [12]. This raises the question of which approaches

of hydrogen compounds or other materials [15]. In the current literature, different approaches or architectures for GNNs exist [12]. This raises the question of which approaches

# PAPER #1

## PROBLEMSTELLUNG

- Daten werden vermehrt in Graphen oder graphenähnlichen Strukturen dargestellt (Wu et al. 2021)
- Mehr Aufmerksamkeit in der Forschung zur Analyse von Graphen mit maschinellem Lernen
  - z.B. Sozialwissenschaften (soziale Netzwerke), Naturwissenschaften (**physikalische Systeme**), etc. (Zhou et al. 2020)
- **GNNs**: Deep Learning Methoden, die Graphenstrukturen verarbeiten können (Velickovic 2023)
- Computergestützte Chemie: Moleküle werden als Graphen modelliert, verschiedene Experimente möglich (Wu et al. 2021)
  - Vorhersage von Potentialflächen und anderer molekularer Eigenschaften in Wasserstoffverbindungen oder anderer Materialien (Liu et al. 2023)



Literatur bietet verschiedene Ansätze bzw. Architekturen für GNNs – was eignet sich dabei besonders gut für die Vorhersage molekularer Eigenschaften?



“

***Forschungsfrage:***

*„Wie können graphenbasierte Neuronale Netze für die Vorhersage von Moleküleigenschaften entwickelt werden?“*

- Q1: Welche Architekturen existieren für GNNs in der Literatur?**
- Q2: Welche Architektur eignet sich am besten für die Vorhersage von Moleküleigenschaften?**

# EINLEITUNG

## ZIELSETZUNG



### **Ziel: Implementierung eines klassischen GNNs und eines Quanten-GNNs**

Auf Basis der vorhandenen Literatur einen Prototyp konzeptionieren, implementieren und evaluieren

#### **Paper #1:**

- Literaturanalyse zu GNNs, Darstellung des State-of-the-Arts
- Identifikation einer geeigneten Architektur
- Implementierung und Evaluierung eines klassischen GNNs

#### **Paper #2:**

- Analyse der vorhandenen Literatur (Foundation Paper) zu Quanten-GNNs
- Anforderungshebungen für das zu implementierende Quanten-GNN
- Implementierung und Evaluierung eines Quanten-GNNs
- Einbindung und Veröffentlichung in das eQJTeam-Python-Framework des Fraunhofer IPA



# PAPER #1

## GRUNDLAGEN – GRAPHENBASIERTE NEURONALE NETZE

---

- Framework für das Lernen von Abhängigkeiten und Interaktionen zwischen Datenpunkten → klassische neuronale Netze würden daran scheitern (Velickovic 2023)
- Im Kontext von GNNs: Graph besteht aus Nodes (Knoten, Datenpunkte) und Edges (Kanten, Beziehung zwischen diesen Datenpunkten) (Wu et al. 2021)
- Schlüsselaspekt: Message-Passing Mechanismus (Gasteiger, Groß und Günnemann 2022):
  - Definiert, wie die Informationen zwischen den Nodes ausgetauscht werden
  - Schrittweise Erlernung der Node Representations über verschiedene Schichten des GNN
- **Ziel von GNNs:** Erlernen der Node Representations unter lokalen und globalen Grapheninformationen (Wu et al. 2021)
- Essentiell für Anwendungen, bei welchen **Beziehung zwischen Datenpunkten** eine wichtige Rolle spielen (Zhou et al. 2020)

# PAPER #1

## GRUNDLAGEN - POTENTIALFLÄCHEN

---

In computergestützter Chemie und Materialwissenschaft:

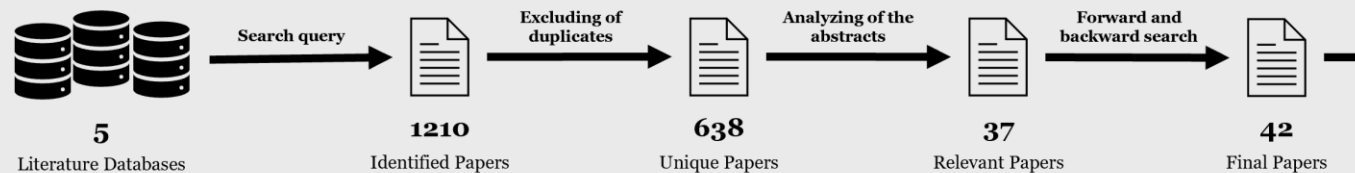
- Beschreibung der Energie eines Moleküls in Abhängigkeit verschiedener Parameter (Liu et al. 2023)
    - Hier: Zustandsenergie des Moleküls durch die Position der Atome im Raum
  - Vorhersage gibt etwa Aufschluss über die Stabilität und weiteren Eigenschaften von Molekülen und respektiven Materialien
- Zeigt, inwiefern Materialien genutzt werden können, um effiziente katalytische Prozesse im Bereich der Wasserstoffproduktion zu ermöglichen (Chen et al. 2023)

# PAPER #1

## FORSCHUNGSPROZESS

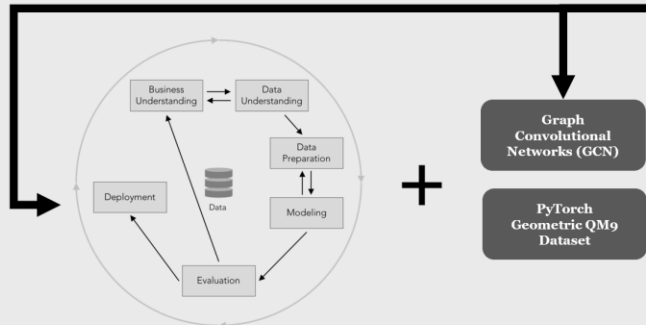
### 1 Literature Search

(Fettke 2006, vom Brocke et al. 2009, Webster and Watson 2002)



### 3 Prototypical Implementation of the GNN

(according to Crisp-DM, Wirth and Hipp 2000)

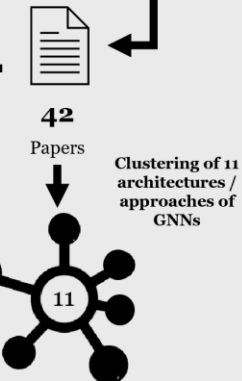


### 2 Literature Analysis

(Mayring 2010, Cruzes and Dyba 2011)

Architectures and approaches of Graph Neural Networks

Molecular property related (4)	In General (8)	
Graph Convolutional Networks (GCN)	Graph Convolutional Networks (GCN)	GraphSAGE (Sample and Aggregated)
Message Passing Neural Networks (MPNN)	Recurrent Graph Neural Networks (RecGNN)	Spatial-temporal Graph Neural Networks (STGNN)
DeepChem	Graph Attention Networks (GAT)	Graph Isomorphism Network (GIN)
AttentiveFP	Graph Symmetric Neural Network (GraphSNN)	Graph Autoencoder (GAE)



- Systematische Literaturanalyse in 5 Datenbanken: IEEE, ScienceDirect, SpringerLink, Emerald Insight, Google Scholar
- Suchterme: [("Graph Neural Networks") AND (("architectures") OR ("approaches"))] and [("Graph Neural Networks") AND ("\*molecular\*")]
- Clustering von 11 Ansätzen / Architekturen in zwei Kategorien
- Basierend auf den Ergebnissen Entwicklung eines GNNs nach CRISP-DM



# PAPER #1

## ERGEBNISSE - LITERATURANALYSE

### Architectures and approaches of Graph Neural Networks

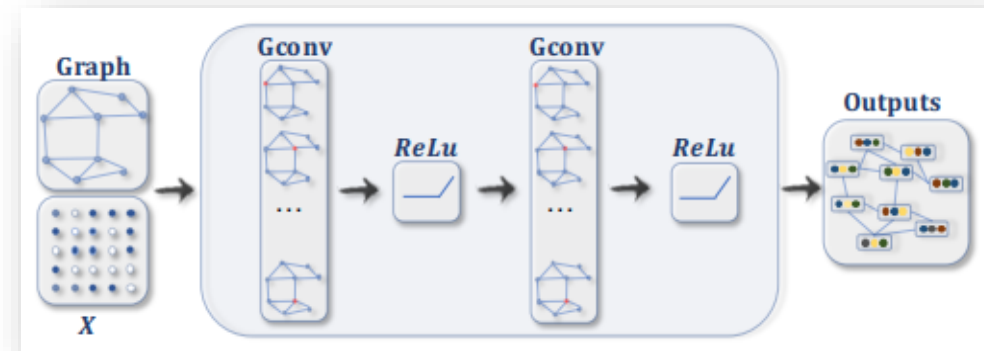
Molecular property related (4)	In General (8)	
Graph Convolutional Networks (GCN)	Graph Convolutional Networks (GCN)	GraphSAGE (Sample and Aggregated)
Message Passing Neural Networks (MPNN)	Recurrent Graph Neural Networks (RecGNN)	Spatial-temporal Graph Neural Networks (STGNN)
DeepChem	Graph Attention Networks (GAN)	Graph Isomorphism Network (GIN)
AttentiveFP	Graph Symmetric Neural Network (GraphSNN)	Graph Autoencoder (GAE)

- Literaturanalyse liefert zwei Kategorien: "Molecular property related" und "In General"
- Erste Kategorie zeigt Architekturen und Ansätze der computergestützten Chemie bzw. der Molekülforschung
- Zweite Kategorie zeigt Architekturen für andere Anwendungsfelder

# PAPER #1

## ERGEBNISSE – GRAPH CONVOLUTIONAL NETWORKS

- Graph Convolutional Neural Networks (GCNs) als eine der ersten und am meisten verwendeten Architekturen von GNNs (Kipf und Welling 2016)
- Kernaspekte (Zhang et al. 2019):
  - Aggregation von Informationen aus benachbarten Nodes in den Convolutional Layer
  - **Gewichtung** dieser Aggregationen und Hervorheben wichtiger Beziehungen → Iterative Informationsausbreitung durch den Graphen
- Gewichtungparameter werden während des Trainings erlernt und angepasst → Anpassung des GCNs an die Charakteristiken eines Datensatzes (Wu et al. 2021)



Beispielhafte GCN-Architektur  
für die Node Classification (Wu et al. 2021)

# PAPER #1

## ERGEBNISSE – ENTWICKLUNG

- Entwicklung eines GCNs basierend auf den Ergebnissen der Literaturrecherche
- QM9 Datensatz für Benchmarks in der computergestützten Chemie als Trainings- und Testdatensatz
- Ziel: Vorhersage der Potentialfläche von Molekülen des genutzten Datensatzes
- Business Understanding: Verständnis für das Ziel der Forschung und den Anforderungen → **siehe Einleitung / Exposé**



CRISP-DM Prozess nach Wirth und Hipp 2000

# PAPER #1

## ERGEBNISSE – ENTWICKLUNG: DATA UNDERSTANDING

**Ziel:** Schaffung des Verständnisses für den gegebenen Datensatz

- Beinhaltet ca. 130.000 Moleküle mit insgesamt 19 Regression Targets (Zielvariablen)
- Insgesamt fünf verschiedene Atomtypen, u.a. Wasserstoff, Sauerstoff und Kohlenstoff sowie Moleküle (z.B. Wasser,  $\text{H}_2\text{O}$ )
- Zielvariable: Potentielle Energiefläche, interne Energie bei 0K



Target	Property	Description	Unit
0	$\mu$	Dipole moment	D
1	$\alpha$	Isotropic polarizability	$a_0^3$
2	$\epsilon_{\text{HOMO}}$	Highest occupied molecular orbital energy	eV
3	$\epsilon_{\text{LUMO}}$	Lowest unoccupied molecular orbital energy	eV
4	$\Delta\epsilon$	Gap between $\epsilon_{\text{HOMO}}$ and $\epsilon_{\text{LUMO}}$	eV
5	$\langle R^2 \rangle$	Electronic spatial extent	$a_0^2$
6	ZPVE	Zero point vibrational energy	eV
7	$U_0$	Internal energy at 0K	eV
8	$U$	Internal energy at 298.15K	eV
9	$H$	Enthalpy at 298.15K	eV
10	$G$	Free energy at 298.15K	eV
11	$c_v$	Heat capacity at 298.15K	$\frac{\text{cal}}{\text{mol K}}$

*Regression Targets des QM9  
Datensatzes von PyTorch (Auszug)*

# PAPER #1

## ERGEBNISSE – ENTWICKLUNG: DATA PREPARATION

**Ziel:** Vorbereitung der Daten zum Training des GCNs

- Extraktion der relevanten Informationen (Atome, xyz-Koordinaten der Atome, Zielvariable Interne Energie bei 0K)
- Normalisierung der Zielvariable mithilfe des Mittelwertes und der Standardabweichung
- Aufteilen in Trainings- und Testdatensätze



```
# normalize labels using mean and standard deviation
def normalize_labels(labels):
    return (labels - train_labelm) / train_labelstd

# retransform predictions into original size
def transform_predictions(labels):
    return labels * train_labelstd + train_labelm
```

*Entwicklungsauszug*



# PAPER #1

## ERGEBNISSE – ENTWICKLUNG: MODELING

### Ziel: Umsetzung des GCN

- Implementierung der Architektur des GCN mithilfe des PyTorch Python Bibliothek
- GCN besteht aus zwei Convolutional Layer mit den zuvor präparierten Nodes, Edges und Features sowie den Gewichtungen als Inputparameter
- LeakyRelu als Aktivierungsfunktion (Erlernen komplexerer, nichtlinearer Zusammenhänge)



```
def gnn_layer(nodes, edges, features, we, wb, wv, wu):  
  
    leaky_relu = torch.nn.LeakyReLU(0.01)  
    new_nodes_tensor = torch.repeat_interleave(nodes[None, :], nodes.size()[0], dim=0)  
    input_tensor = wb + torch.matmul(new_nodes_tensor, we) * torch.transpose(edges[:,None],1,2)  
    ek = leaky_relu(input_tensor)  
  
    # sum over neighbors to get N x features  
    ebar = torch.sum(ek, 1)  
  
    # dense layer for new nodes to get N x features  
    new_nodes = leaky_relu(torch.matmul(ebar, wv) + nodes)  
  
    # sum over nodes to get shape features  
    global_node_features = torch.sum(new_nodes,0)  
  
    # dense layer for new features  
    new_features = leaky_relu(torch.matmul(global_node_features, wu)) + features  
  
    # just return features for ease of use  
    return new_nodes, edges, new_features
```

Entwicklungsauszug

# PAPER #1

## ERGEBNISSE – ENTWICKLUNG: EVALUATION

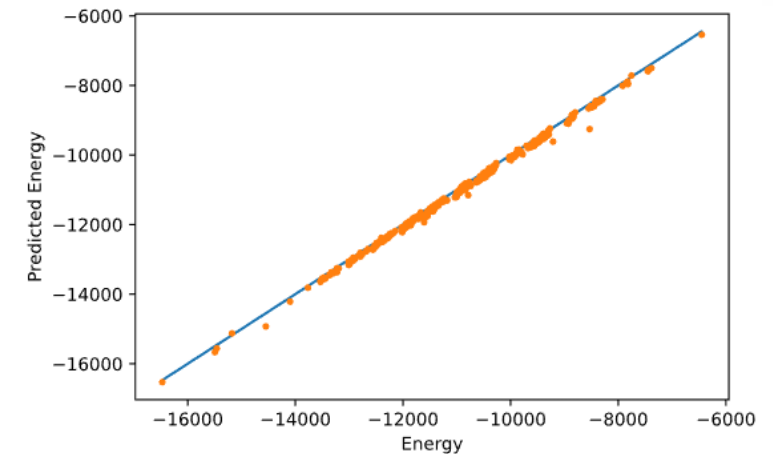
**Ziel:** Evaluation des entwickelten Modells

- Messung mithilfe der gängigen Regressionsmetriken

Performance Metric	Computed Value
Mean Squared Error (MSE)	97.5177
Root Mean Squared Error (RMSE)	9.3987
$R^2$ -Score ( $R^2$ )	0.9919

*Tabelle der Regressionsmetriken des entwickelten Modells*

Training time: 8 min 37.5s



*Plot der tatsächlichen und vorhergesagten Energie*

# › PAPER 2: QUANTUM GRAPH NEURAL NETWORKS FOR MOLECULAR PROPERTY PREDICTION

## 3 Quantum Graph Neural Networks for Molecular Property Prediction

### Abstract

Hydrogen research, particularly in the fields of energy storage and catalysis, hinges on a deep understanding of molecular interactions and properties. The surface area of molecules is a crucial parameter influencing hydrogen adsorption and catalytic efficiency. Traditional computational methods for predicting molecular surface areas, while effective, face challenges in terms of computational complexity and accuracy when dealing with large and complex molecular structures. The accurate prediction of molecular surface area is paramount in optimizing hydrogen storage and catalysis processes. Conventional computational models, primarily based on classical algorithms, struggle with the vast complexity and quantum nature of molecular systems. This gap necessitates a novel approach that can handle the quantum mechanical properties inherent in molecules more naturally and efficiently.

**Keywords:** *quantum machine learning, quantum graph neural networks, hydrogen research, potential energy surface prediction*

### 3.1 Introduction

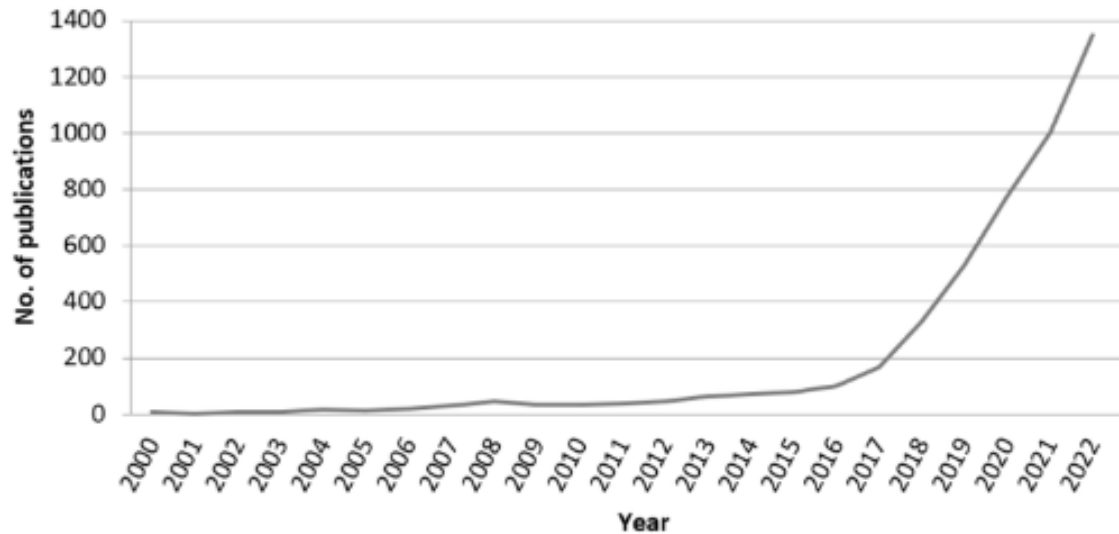
While there is growing research on the application of quantum computing in various domains, including chemistry and materials science, the specific application of QGCNNs for predicting molecular surface area in hydrogen research remains underexplored. This presents an opportunity to bridge the gap between quantum computing and molecular science, particularly in the context of hydrogen storage and catalysis. Recent advancements in quantum computing offer promising avenues for addressing complex problems in molecular sciences. Quantum Graph Convolutional Neural Networks (QGCNNs) have emerged as a potential tool for processing graph-structured data, which is naturally suited for molecular representations (Bronstein et al., 2017). The application of quantum computing in neural networks has shown significant improvements in handling high-dimensional data and complex interactions (Biamonte et al., 2017). Moreover, the representation of molecules as graphs aligns well with the capabilities of GNNs in capturing the intricate

molecules as graphs aligns well with the capabilities of GNNs in capturing the intricate

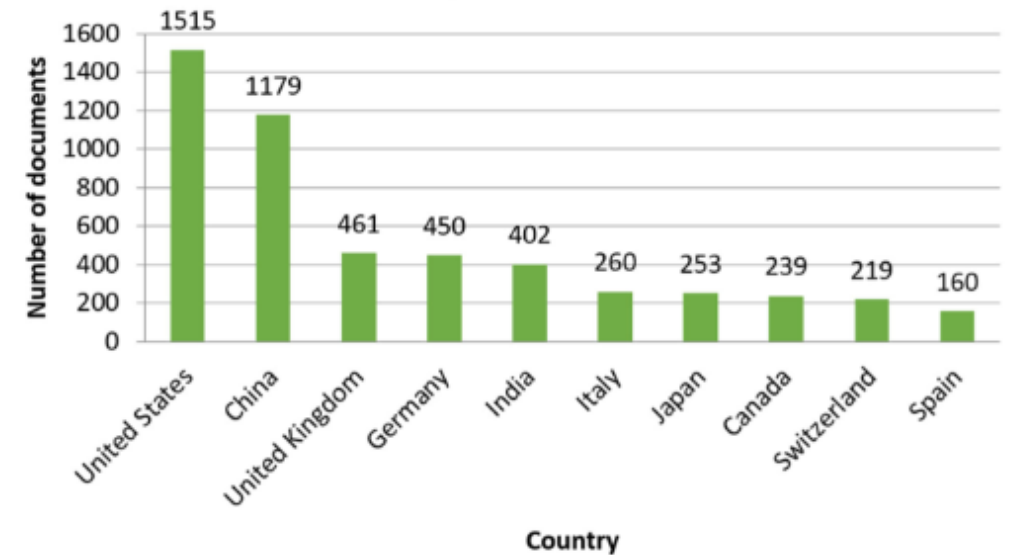
# PAPER #2

## PROBLEMSTELLUNG

Documents by year



Documents by the 10 first countries



Quelle: Quantum Machine Learning — An Overview (Tychola et al. 2023)

“

***Forschungsfrage:***

*„Wie können quanten-graphenbasierte Neuronale Netze für die Vorhersage von Moleküleigenschaften entwickelt werden?“*

- Q1: Wie müssen molekulare Daten verarbeitet werden, damit sie mit einem Quantencomputer verwendet werden können?**
- Q2: Wie ist die Leistung im Vergleich zu klassischen GNNs?**



# PAPER #2

## ZIELSETZUNG



### **Ziel: Implementierung eines klassischen GNNs und eines Quanten-GNNs**

Auf Basis der vorhandenen Literatur einen Prototyp konzeptionieren, implementieren und evaluieren

#### **Paper #1:**

- Literaturanalyse zu GNNs, Darstellung des State-of-the-Arts
- Identifikation einer geeigneten Architektur
- Implementierung und Evaluierung eines klassischen GNNs

#### **Paper #2:**

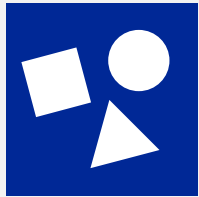
- Analyse der vorhandenen Literatur (Foundation Paper) zu Quanten-GNNs
- Anforderungserhebungen für das zu implementierende Quanten-GNN
- Implementierung und Evaluierung eines Quanten-GNNs
- Einbindung und Veröffentlichung in das sQUlearn-Python-Framework des Fraunhofer IPA



# PAPER #2

## GRUNDLAGEN – QUANTUM MACHINE LEARNING

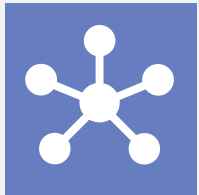
→ Kombination aus Quantencomputing und klassischem Machine Learning



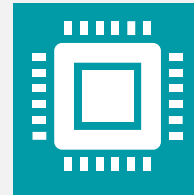
**Quantum Bits, Gates und Circuits (Zheng et al. 2021)**  
Nutzung von Qbits (equiv. klassischer Bits), Quantum Gates (Operationen auf den Qubits) und Quantum Circuits (Sequenz von Qbits und Quantum Gates, Ausführung von Berechnungen)



**Quantum Data Encoding (Schuld & Petruccione 2018)**  
Enkodierung klassischer Daten in einen Quantum State unter der Nutzung von Feature Maps



**Entanglement und Superposition (Dunjko & Briegel 2018)**  
Essentielle Eigenschaften des Quantencomputings, effiziente Optimierung und Mustererkennung durch die Nutzung der quantenmechanischen Eigenschaften



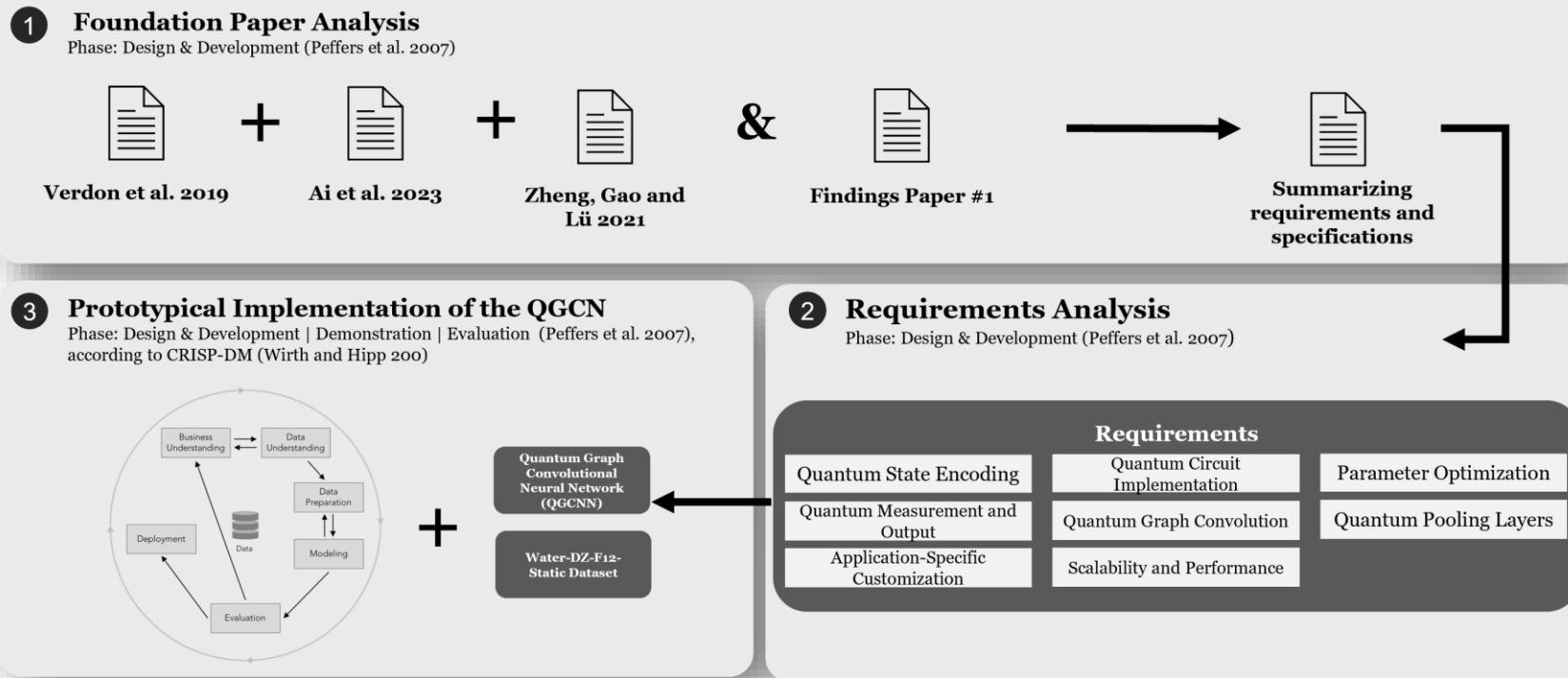
**Quantum Processing (Biamonte et al. 2017)**  
Verarbeitung der enkodierten Daten mit Quantenalgorithmen wie bspw. Quantum Support Vector Machines oder Quantum Neural Networks



Ziel: **Quantum Advantage**, Überlegenheit von Quantenalgorithmen zu herkömmlichen Algorithmen in bestimmten ML-Aufgaben

# PAPER #2

## FORSCHUNGSPROZESS



- Methodik DSR nach Peffer et al. 2007
- Untersuchung von drei relevanten Foundation Paper
- Zusammenfassung der Erkenntnisse aus den Foundation Paper und aus Paper#1
- Identifikation von Anforderungen zur Entwicklung von QGCN
- Entwicklung des QGCN nach CRISP-DM basierend auf den identifizierten Anforderungen

# PAPER #2

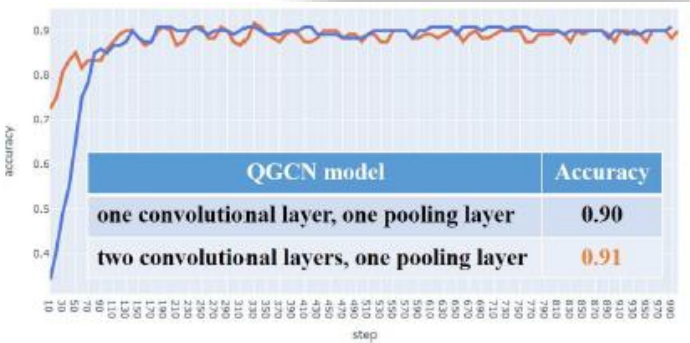
## FOUNDATION PAPER

Paper

Quantum Graph Convolutional Neural Networks  
*Zheng, Gao und Lü 2021*

Ziel: Entwicklung eines Quantum Graph Convolutional Neural Network (QGCGN)

- Strukturierte Vorgehensweise zur Entwicklung von QGCGNs
- Nutzung von Amplitude Encoding zur Umwandlung der Graphdaten in Quantum States
- Einsatz von parametrisierten Quantum Circuits zur Verarbeitung der Graphdaten
- Nutzung von Convolutional und Pooling Layer zum Training der Daten, optimiert für Graphdaten
- Test des Modells mithilfe des MNIST Datensatzes (Klassifikation)
  - Erfolgreiche Tests bzw. Vorhersagen mit Trainings- und Testdatensatz



Trainingsgenauigkeit mit dem MNIST Datensatz

# PAPER #2

## ANFORDERUNGSANALYSE – DATENVORBEREITUNG

### Quantum State Encoding:

- Enkodierung der Graphdaten in Quantum States (Features (Koordinaten), Labels (Energie))

### Quantum Circuit Implementation:

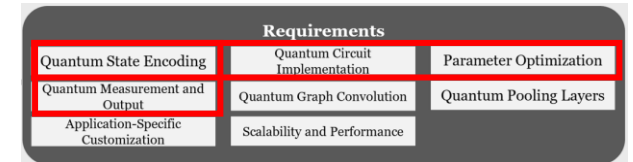
- Design und Implementierung von Quantum Circuits für die verschiedenen Layer des QGCNs

### Parameter Optimization:

- Optimierung der Parameter der Quantum Circuits (bspw. Anzahl Parameter der Circuits  $\geq$  Anzahl der Features im Datensatz)

### Quantum Measurement and Output:

- Einsatz von Messprotokollen (sog. Observables), um die verarbeiteten Daten aufzunehmen





# PAPER #2

## ANFORDERUNGSANALYSE – ARCHITEKTUR GQCN

### Quantum Graph Convolution:

- Umsetzung von Circuits, die den Convolutional Layern klassischer GNNs ähneln
- effektive Extraktion und Berechnung der Weights der Features bzw. Edges und der Nodes

Requirements		
Quantum State Encoding	Quantum Circuit Implementation	Parameter Optimization
Quantum Measurement and Output	Quantum Graph Convolution	Quantum Pooling Layers
Application-Specific Customization	Scalability and Performance	

### Quantum Pooling Layers:

- Einführung des Pooling-Mechanismus (Reduzierung der Graphengröße unter möglichst niedrigem bzw. keinem Informationsverlust)

### Application-Specific Customization:

- Anpassung des QGCN an den speziellen Anwendungsbereich (bspw. Anzahl der Qbits, Struktur der Circuits, Parameter in den Circuits, Anzahl der Convolutional / Pooling Layer, etc.)

### Scalability and Performance:

- Optimierung des Models für Recheneffizienz und Ressourcennutzung → Testen von Datensätzen unterschiedlicher Größe



# Entwicklungseinblick

Quantum Graph Convolutional  
Neural Networks



# › KONKLUSION

# KONKLUSION

## ZUSAMMENFASSUNG

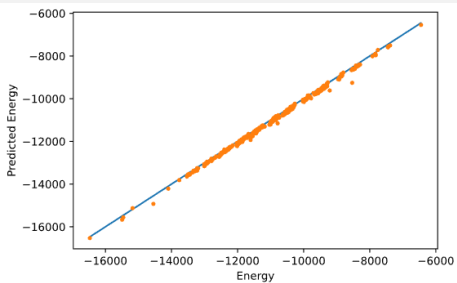
Architectures and approaches of Graph Neural Networks		
Molecular property related (4)	In General (8)	
Graph Convolutional Networks (GCN)	Graph Convolutional Networks (GCN)	GraphSAGE (Sample and Aggregated)
Message Passing Neural Networks (MPNN)	Recurrent Graph Neural Networks (RecGNN)	Spatial-temporal Graph Neural Networks (STGNN)
DeepChem	Graph Attention Networks (GAN)	Graph Isomorphism Network (GIN)
AttentiveFP	Graph Symmetric Neural Network (GraphSNN)	Graph Autoencoder (GAE)

**Implementierung**  
Umsetzung eines GCNs basierend auf den Ergebnissen der Literaturanalyse und nach CRISP-DM

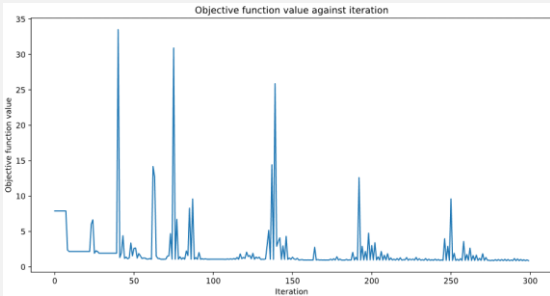
Requirements		
Quantum State Encoding	Quantum Circuit Implementation	Parameter Optimization
Quantum Measurement and Output	Quantum Graph Convolution	Quantum Pooling Layers
Application-Specific Customization	Scalability and Performance	

**Implementierung**  
Umsetzung des QGCN mithilfe nach den Anforderungen und der Qiskit Python Bibliothek unter der Nutzung von CRISP-DM

**Literaturanalyse**  
11 mögliche Architekturen für die Implementierung eines GNNs identifiziert



**Anforderungsanalyse**  
Analyse dreier Foundation Paper zur Identifikation notwendiger Anforderung an das zu entwickelnde QGCN



# KONKLUSION

## KRITISCHE WÜRDIGUNG



Ausgewählte Forschungsmethodik hat sich als geeignet herausgestellt



Erweiterung der Suchterme und Literaturdatenbanken, zur Identifizierung weitere möglicher Ansätze und Architekturen für GNNs



Limitation auf eine ausgewählte Architektur nach der Literaturanalyse



Bisher noch kein Performance Vergleich der Modelle möglich

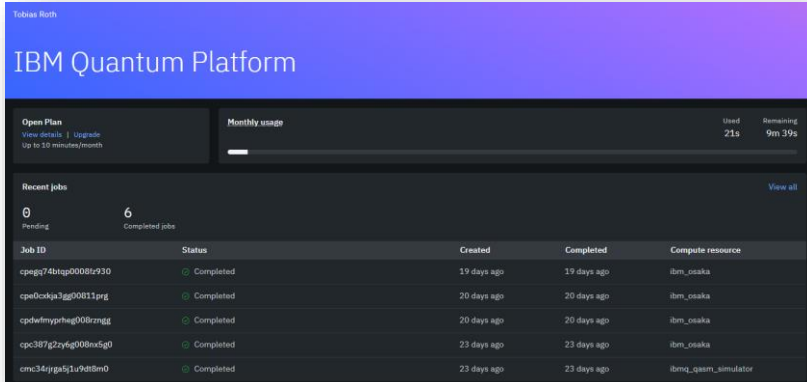
# KONKLUSION

## AUSBLICK

- Vollständige Umsetzung des QGCN
- Mögliches Testing der Ergebnisse auf einem echten Quantencomputer (IBM Quantum Experience)
- Vergleich der Performance der Modelle nach Beendigung der Entwicklung (Geschwindigkeit, Regressionsmetriken, etc.)

→ Beantwortung aller Forschungsfragen

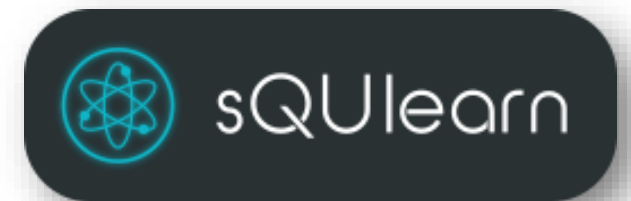
- Fraunhofer **sQUlearn Python-Bilbiothek**: Vereinfachung der Nutzung und Implementierung verschiedener QML – Algorithmen
  - Ziel: Veröffentlichung der Ergebnisse in der sQUlearn Bilbiothek und als Paper



The screenshot shows the IBM Quantum Platform interface. At the top, it says 'IBM Quantum Platform'. Below that, there's a section for 'Open Plan' with a 'View details' link and an 'Upgrade' button. To the right, a 'Monthly usage' bar chart shows 'Used' (214) and 'Remaining' (9m 39s). Below this is a 'Recent jobs' section with a table of job details.

Job ID	Status	Created	Completed	Compute resource
cpeg674btp0008t930	Completed	19 days ago	19 days ago	ibm_osaka
cpe0ckpa3gc0081prg	Completed	20 days ago	20 days ago	ibm_osaka
cpdwfmyprhg00bzmgg	Completed	20 days ago	20 days ago	ibm_osaka
cp387g2zy4g00n6fgl	Completed	23 days ago	23 days ago	ibm_osaka
cnc34jrgah1u9td8m0	Completed	23 days ago	23 days ago	ibmq_qasm_simulator

<https://quantum.ibm.com/>



<https://sqlearn.github.io/index.html>



# LITERATUR

- Ai, Xing, Zhihong Zhang, Luzhe Sun, Junchi Yan, and Edwin Hancock. 2023. "Decompositional Quantum Graph Neural Network." arXiv. <http://arxiv.org/abs/2201.05158>.
- Altae-Tran, Han, Bharath Ramsundar, Aneesh S. Pappu, and Vijay Pande. 2017. "Low Data Drug Discovery with One-Shot Learning." *ACS Central Science* 3 (4): 283–93. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.6b00367>.
- Amin, Muhammad, Hamad Hussain Shah, Anaiz Gul Fareed, Wasim Ullah Khan, Eunhyea Chung, Adeel Zia, Zia Ur Rahman Farooqi, and Chaehyeon Lee. 2022. "Hydrogen Production through Renewable and Non-Renewable Energy Processes and Their Impact on Climate Change." *International Journal of Hydrogen Energy* 47 (77): 33112–34. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.07.172>.
- Beer, Kerstin, Megha Khosla, Julius Köhler, and Tobias J. Osborne. 2021. "Quantum Machine Learning of Graph-Structured Data." arXiv. <http://arxiv.org/abs/2103.10837>.
- Biamonte, Jacob, Peter Wittek, Nicola Pancotti, Patrick Rebentrost, Nathan Wiebe, and Seth Lloyd. 2017. "Quantum Machine Learning." *Nature* 549 (7671): 195–202. <https://doi.org/10.1038/nature23474>.
- Brocke, Jan vom, Alexander Simons, Bjoern Niehaves, and Kai Reimer. n.d. "RECONSTRUCTING THE GIANT: ON THE IMPORTANCE OF RIGOUR IN DOCUMENTING THE LITERATURE SEARCH PROCESS."
- Chen, Zhijie, Sining Yun, Lan Wu, Jiaqi Zhang, Xingdong Shi, Wei Wei, Yiwen Liu, Renji Zheng, Ning Han, and Bing-Jie Ni. 2023. "Waste-Derived Catalysts for Water Electrolysis: Circular Economy-Driven Sustainable Green Hydrogen Energy." *Nano-Micro Letters* 15 (1): 4. <https://doi.org/10.1007/s40820-022-00974-7>.
- Cruzes, Daniela, and Tore Dybå. 2011. *Recommended Steps for Thematic Synthesis in Software Engineering. International Symposium on Empirical Software Engineering and Measurement*. <https://doi.org/10.1109/ESEM.2011.36>.
- "DeepChem." n.d. Accessed November 27, 2023. <https://deepchem.io/about/>.
- Dunjko, Vedran, and Hans J. Briegel. 2017. "Machine Learning & Artificial Intelligence in the Quantum Domain." arXiv. <http://arxiv.org/abs/1709.02779>.
- Fettke, Peter. 2006. "State-of-the-Art des State-of-the-Art: Eine Untersuchung der Forschungsmethode „Review“ innerhalb der Wirtschaftsinformatik." *WIRTSCHAFTSINFORMATIK* 48 (4): 257. <https://doi.org/10.1007/s11576-006-0057-3>.
- Gasteiger, Johannes, Janek Groß, and Stephan Günnemann. 2022. "Directional Message Passing for Molecular Graphs." arXiv. <http://arxiv.org/abs/2003.03123>.
- Gilmer, Justin, Samuel S. Schoenholz, Patrick F. Riley, Oriol Vinyals, and George E. Dahl. 2017. "Neural Message Passing for Quantum Chemistry." In *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*, 1263–72. PMLR. <https://proceedings.mlr.press/v70/gilmer17a.html>.
- Jiang, Dejun, Zhenxing Wu, Chang-Yu Hsieh, Guangyong Chen, Ben Liao, Zhe Wang, Chao Shen, Dongsheng Cao, Jian Wu, and Tingjun Hou. 2021. "Could Graph Neural Networks Learn Better Molecular Representation for Drug Discovery? A Comparison Study of Descriptor-Based and Graph-Based Models." *Journal of Cheminformatics* 13 (1): 12. <https://doi.org/10.1186/s13321-020-00479-8>.
- Kipf, Thomas N., and Max Welling. 2017. "Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks." arXiv. <http://arxiv.org/abs/1609.02907>.
- Kılış, Şiir, Goran Krajačić, Neven Duić, Luca Montorsi, Qiuwang Wang, Marc A. Rosen, and Moh'd Ahmad Al-Nimr. 2019. "Research Frontiers in Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems in a Time of Climate Crisis." *Energy Conversion and Management* 199 (November): 111938. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.111938>.
- Liu, Jin-Cheng, Hai Xiao, Xiao-Kun Zhao, Nan-Nan Zhang, Yuan Liu, Deng-Hui Xing, Xiaohu Yu, Han-Shi Hu, and Jun Li. 2023. "Computational Prediction of Graphdiyne-Supported Three-Atom Single-Cluster Catalysts." *CCS Chemistry* 5 (1): 152–63. <https://doi.org/10.31635/ccschem.022.202201796>.

# LITERATUR

Mayring, Philipp. 2010 "Qualitative Content Analysis."

Peffer, Ken, Tuure Tuunanen, Marcus A. Rothenberger, and Samir Chatterjee. 2007. "A Design Science Research Methodology for Information Systems Research." *Journal of Management Information Systems* 24 (3): 45–77. <https://doi.org/10.2753/MIS0742-1222240302>.

"PyTorch." n.d. PyTorch. Accessed November 28, 2023. <https://pytorch.org/>.

Schuld, M., I. Sinayskiy, and F. Petruccione. 2015. "An Introduction to Quantum Machine Learning." *Contemporary Physics* 56 (2): 172–85. <https://doi.org/10.1080/00107514.2014.964942>.

"Torch\_geometric.Datasets.QM9 — Pytorch\_geometric Documentation." n.d. Accessed November 22, 2023. [https://pytorch-geometric.readthedocs.io/en/latest/generated/torch\\_geometric.datasets.QM9.html](https://pytorch-geometric.readthedocs.io/en/latest/generated/torch_geometric.datasets.QM9.html).

Tran, Richard, Janice Lan, Muhammed Shuaibi, Brandon M. Wood, Siddharth Goyal, Abhishek Das, Javier Heras-Domingo, et al. 2023. "The Open Catalyst 2022 (OC22) Dataset and Challenges for Oxide Electrocatalysts." *ACS Catalysis* 13 (5): 3066–84. <https://doi.org/10.1021/acscatal.2c05426>.

Tychola, Kyriaki A., Theofanis Kalampokas, and George A. Papakostas. 2023. "Quantum Machine Learning—An Overview." *Electronics* 12 (11): 2379. <https://doi.org/10.3390/electronics12112379>.

Veličković, Petar. 2023. "Everything Is Connected: Graph Neural Networks." *Current Opinion in Structural Biology* 79 (April): 102538. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2023.102538>.

Verdon, Guillaume, Trevor McCourt, Enxhell Luzhnica, Vikash Singh, Stefan Leichenauer, and Jack Hiday. 2019a. "Quantum Graph Neural Networks." arXiv. <http://arxiv.org/abs/1909.12264>.

Webster, Jane, and Richard T. Watson. 2002. "Analyzing the Past to Prepare for the Future: Writing a Literature Review." *MIS Quarterly* 26 (2): xiii–xxiii.

Wirth, Rüdiger, and Jochen Hipp. n.d. "CRISP-DM: Towards a Standard Process Model for Data Mining."

"Wu et al. - 2021 - A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks.Pdf." n.d. Accessed November 21, 2023. <https://ieeexplore.ieee.org/ielaam/5962385/9312808/9046288-aam.pdf>.

Wu, Zonghan, Shirui Pan, Fengwen Chen, Guodong Long, Chengqi Zhang, and Philip S. Yu. 2021. "A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks." *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 32 (1): 4–24. <https://doi.org/10.1109/TNNLS.2020.2978386>.

Xiong, Zhaoping, Dingyan Wang, Xiaohong Liu, Zhong Feisheng, Xiaozhe Wan, Xutong Li, Zhaojun Li, et al. 2019. "Pushing the Boundaries of Molecular Representation for Drug Discovery with Graph Attention Mechanism." *Journal of Medicinal Chemistry* 63 (August). <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b00959>.

Xu, Keyulu, Weihua Hu, Jure Leskovec, and Stefanie Jegelka. 2019. "How Powerful Are Graph Neural Networks?" arXiv. <http://arxiv.org/abs/1810.00826>.

Yan, Dafeng, Chalachew Mebrahtu, Shuangyin Wang, and Regina Palkovits. 2023. "Innovative Electrochemical Strategies for Hydrogen Production: From Electricity Input to Electricity Output." *Angewandte Chemie International Edition* 62 (16): e202214333. <https://doi.org/10.1002/anie.202214333>.

Zhang, Si, Hanghang Tong, Jiejun Xu, and Ross Maciejewski. 2019. "Graph Convolutional Networks: A Comprehensive Review." *Computational Social Networks* 6 (1): 11. <https://doi.org/10.1186/s40649-019-0069-y>.

Zheng, Jin, Qing Gao, and Yanxuan Lv. 2021. "Quantum Graph Convolutional Neural Networks." arXiv. <http://arxiv.org/abs/2107.03257>.

Zhou, Jie, Ganqu Cui, Shengding Hu, Zhengyan Zhang, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Lifeng Wang, Changcheng Li, and Maosong Sun. 2020. "Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications." *AI Open* 1: 57–81. <https://doi.org/10.1016/j.aiopen.2021.01.001>.

# VIELEN DANK!

Bei Fragen kontaktieren Sie bitte:



**Tobias Roth**

Fakultät WV | Wirtschaftsinformatik  
[toroth@hs-heilbronn.de](mailto:toroth@hs-heilbronn.de)