Aquas Zwischenbericht Tobias Roth – Towards Quantum Graph Neural Networks for Molecular Property Prediction

Aufteilung der Masterarbeit in 2 Paper

Paper 1 – Architectures of Graph Neural Networks (fertig)

Abstract: Da Deep-Learning-Algorithmen zunehmend graphenstrukturierte Daten verarbeiten, spielen Graph Neural Networks (GNNs) eine immer wichtigere Rolle in verschiedenen Bereichen, darunter auch in der computergestützten Chemie und bei der Vorhersage molekularer Eigenschaften. Allerdings existieren in der Literatur derzeit unterschiedliche Architekturen und Ansätze von GNNs. Daher wird in diesem Beitrag der aktuelle Stand der Technik analysiert, indem Architekturen und Ansätze von GNNs in der Literatur untersucht werden. Durch die Erstellung eines Überblicks wird gezeigt, dass Convolutional-GNNs häufig verwendet werden und besonders zuverlässig sind, wenn es um molekulare Eigenschaften geht. Mit Hilfe des strukturierten Prozesses CRISP-DM wird anschließend ein Convolutional-GNN entwickelt, das die potenzielle Energiefläche von Molekülen mit dem QM9-Datensatz vorhersagt. Die Auswertung zeigt eine hohe Genauigkeit, daher wurde das GNN erfolgreich entwickelt.

Ziel: Darstellung des State-of-the-Arts zu GNNs in der Literatur, Identifikation einer geeigneten Architektur, Implementierung und Evaluierung eines klassischen GNNs

Paper 2 – Quantum Graph Neural Networks (in Arbeit)

Aktueller Stand: Einarbeitung mithilfe der vorhandenen Literatur in das Thema Quantum Computing und Quantum Machine Learning, Analyse dreier Paper zu Quantum-GNNs, Identifikation von Anforderungen und möglichen Architekturen für das zu implementierende Quantum-GNN, Beginn der Entwicklung basierend auf einer Quantum Convolutional Neural Network Architektur

Weiteres Vorhaben / Ziele: Implementierung und Evaluierung eines Quanten-GNNs, Performance Vergleich zu klassischen GNNs, Einbindung und Veröffentlichung in das sQUlearn-Python-Framework