

Arbeitstitel: Transfer Learning für ^{31}P NMR-Vorhersagen mit Graph-Neural-Networks

Fachgebiete: Physikalische Chemie / Katalyse & Mathematics of Data Science

Betreuer: Prof. Robert Geitner, Prof. Jana de Wiljes, M.Sc. Dimitri Domnjuk

1. Hintergrund und Motivation

Neuronale Netze, insbesondere Graph-Neural-Networks (GNNs), haben sich in den letzten Jahren als leistungsfähige Werkzeuge zur Vorhersage von Moleküleigenschaften etabliert. Für die Kernresonanzspektroskopie (NMR) besteht jedoch das Problem, dass für viele Heterokerne wie ^{31}P bislang nur vergleichsweise kleine Datensätze verfügbar sind. Klassische Trainingsansätze setzen jedoch große Datenmengen voraus, um robuste Modelle zu entwickeln.

Eine mögliche Lösung bietet das sogenannte Transfer Learning: Dabei wird ein Modell zunächst auf großen, verwandten Datensätzen vortrainiert und anschließend auf die kleinere Zieldatenmenge angepasst (Fine-Tuning). Dieses Vorgehen ist aus der Bildverarbeitung bekannt und erlaubt es, bereits gelernte Strukturen und physikalische Zusammenhänge auf neue Aufgaben zu übertragen.

2. Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, verschiedene Ansätze des Transfer Learnings für die NMR-Vorhersage von ^{31}P zu untersuchen. Im Mittelpunkt steht die Frage, wie sich die begrenzte Datenlage für diese Kerne durch Vortraining auf andere, größere Datensätze (z. B. ^1H und ^{13}C) kompensieren lässt.

3. Methoden

Im Rahmen des Projekts sollen folgende Konzepte erprobt werden:

a) Vortraining auf großen NMR-Datenbanken

- Nutzung öffentlich zugänglicher ^1H - und ^{13}C -Datenbanken (z. B. nmrshiftdb2) oder der DFT-basierten Datensätzen
- Anschließendes Fine-Tuning auf kleinere ^{31}P -Datensätze.
- Vergleich mit Modellen, die ohne Vortraining starten („random initialization“).

b) Feinabstimmung einzelner Netzwerkschichten

- Anpassung nur ausgewählter Schichten nahe der Ausgabeschicht.
- Untersuchung, ob dies den Trainingsaufwand reduziert und trotzdem präzise Vorhersagen ermöglicht.

c) Erweiterung durch zusätzliche Schichten nach dem Vortraining

- Einführung neuer Layer, die gezielt die Besonderheiten der jeweiligen Kerne berücksichtigen.
- Anwendung eines Bayes'schen Rahmens, um die Unsicherheit in den Vorhersagen zu reduzieren.

4. Literatur

J. Hack, M. Jordan, A. Schmitt, M. Raru, H. Sönke Zorn, A. Seyfarth, I. Eulenberger, R. Geitner, *Ilm-NMR-P31: an open-access ^{31}P nuclear magnetic resonance database and data-driven prediction of ^{31}P NMR shifts*, Journal of Cheminformatics **2023**, 15, 122. doi:10.1186/s13321-023-00792-y

E. Jonas, S. Kuhn, N. Schlörer, *Prediction of chemical shift in NMR: A review*, Magnetic Resonance in Chemistry **2022**, 60 (11), 1021-1031. doi:10.1002/mrc.5234

H. Han, S. Choi, *Transfer Learning from Simulation to Experimental Data: NMR Chemical Shift Predictions*, Journal of Physical Chemistry Letters **2021**, 12, 3662. doi:10.1021/acs.jpcllett.1c00578