

---

# Inhalt

<b>Vorwort .....</b>	<b>IX</b>
<b>1 Warum Biowissenschaften? .....</b>	<b>1</b>
Warum Deep Learning? .....	1
In den modernen Biowissenschaften geht es um Daten .....	2
Was werden Sie lernen? .....	3
<b>2 Einführung in Deep Learning .....</b>	<b>9</b>
Lineare Modelle .....	10
Mehrlagige Perzeptronen .....	12
Trainieren der Modelle .....	15
Validierung .....	17
Regularisierung .....	18
Hyperparameteroptimierung .....	19
Weitere Arten von Modellen .....	20
Convolutional Neural Networks .....	21
Recurrent Neural Networks .....	22
Weiterführende Literatur .....	23
<b>3 Machine Learning mit DeepChem .....</b>	<b>25</b>
DeepChem-Datensätze .....	26
Trainieren eines Modells zur Vorhersage der Toxizität von Molekülen .....	27
Fallstudie: Trainieren eines MNIST-Modells .....	34
Der MNIST-Datensatz .....	35
Eine Konvolutionsarchitektur für MNIST .....	36
Fazit .....	41

<b>4 Machine Learning mit Molekülen . . . . .</b>	<b>43</b>
Was ist ein Molekül? . . . . .	44
Was sind molekulare Bindungen? . . . . .	46
Molekülgraphen . . . . .	48
Molekulare Konformationen . . . . .	49
Chiralität von Molekülen . . . . .	50
Featurization eines Moleküls . . . . .	51
SMILES-Strings und RDKit . . . . .	51
Konnektivitäts-Fingerprints . . . . .	52
Molekulare Deskriptoren . . . . .	53
Graph Convolutions . . . . .	53
Trainieren eines Modells zur Vorhersage der Löslichkeit . . . . .	54
MoleculeNet . . . . .	56
SMARTS-Strings . . . . .	56
Fazit . . . . .	59
<b>5 Biophysikalisches Machine Learning . . . . .</b>	<b>61</b>
Proteinstrukturen . . . . .	63
Proteininsequenzen . . . . .	65
Eine kurze Einführung in die Proteinbindung . . . . .	67
Biophysikalische Eigenschaften . . . . .	68
Grid Featurization . . . . .	69
Atomare Featurization . . . . .	74
Die PDBBind-Fallstudie . . . . .	74
Der PDBBind-Datensatz . . . . .	75
Merkmale entwickeln im PDBBind-Datensatz . . . . .	78
Fazit . . . . .	82
<b>6 Deep Learning in der Genomik . . . . .</b>	<b>85</b>
DNA, RNA und Proteine . . . . .	85
Und nun zur Wirklichkeit . . . . .	87
Transkriptionsfaktor-Bindung . . . . .	90
Ein Konvolutionsmodell für die TF-Bindung . . . . .	91
Zugänglichkeit von Chromatin . . . . .	93
RNA-Interferenz . . . . .	96
Fazit . . . . .	99
<b>7 Machine Learning in der Mikroskopie . . . . .</b>	<b>101</b>
Eine kurze Einführung in die Mikroskopie . . . . .	103
Zeitgemäße Lichtmikroskopie . . . . .	104
Die Beugungsgrenze . . . . .	106
Elektronen- und Rasterkraftmikroskopie . . . . .	108

Superauflösende Mikroskopie .....	110
Deep Learning und die Beugungsgrenze? .....	111
<b>Vorbereiten biologischer Proben für die Mikroskopie .....</b>	<b>112</b>
Einfärben der Proben .....	112
Fixierung der Probe .....	113
Schneiden der Probe .....	113
Fluoreszenzmikroskopie .....	114
Artefakte der Probenvorbereitung .....	116
<b>Deep-Learning-Anwendungen.....</b>	<b>117</b>
Die Zellzählung.....	117
Zellsegmentierung.....	120
Rechnergestützte Assays.....	124
Fazit .....	125
<b>8 Deep Learning in der Medizin .....</b>	<b>127</b>
Computerunterstützte Diagnostik.....	127
Probabilistische Diagnosen mit Bayes'schen Netzen.....	128
Die elektronische Gesundheitsakte .....	130
Worin liegen die Gefahren großer EHR-Datenbanken? .....	132
Deep Radiology .....	133
Röntgenaufnahmen und CT-Scans .....	135
Histologie .....	138
MRT-Scans .....	138
Lernmodelle als Therapeutika.....	139
Diabetische Retinopathie.....	140
Fazit .....	144
Ethische Überlegungen.....	144
Arbeitsplatzverluste .....	145
Zusammenfassung .....	146
<b>9 Generative Modelle .....</b>	<b>147</b>
Variational Autoencoder .....	147
Generative Adversarial Networks .....	149
Anwendungen generativer Modelle in den Biowissenschaften .....	151
Entwicklung neuer Ideen für die Kernstrukturen .....	151
Proteindesign .....	152
Ein Tool für wissenschaftliche Entdeckungen .....	152
Die Zukunft generativer Modellierung .....	152
Mit generativen Modellen arbeiten .....	153
Analysieren der Ausgabe des generativen Modells .....	155
Fazit .....	158

<b>10 Interpretieren von Deep-Learning-Modellen</b> . . . . .	<b>161</b>
Vorhersagen erklären . . . . .	161
Eingaben optimieren . . . . .	165
Unsicherheit vorhersagen . . . . .	168
Interpretierbarkeit, Erklärbarkeit und reale Konsequenzen . . . . .	172
Fazit . . . . .	173
<b>11 Beispiel eines virtuellen Screening-Workflows</b> . . . . .	<b>175</b>
Vorbereiten des Datensatzes . . . . .	176
Trainieren eines Vorhersagmodells . . . . .	182
Vorbereiten eines Datensatzes für die Vorhersage . . . . .	187
Ein Vorhersagmodell anwenden . . . . .	191
Fazit . . . . .	197
<b>12 Chancen und Perspektiven</b> . . . . .	<b>199</b>
Medizinische Diagnosen . . . . .	199
Personalisierte Medizin . . . . .	201
Arzneimittelentwicklung . . . . .	202
Biologische Forschung . . . . .	204
Fazit . . . . .	205
<b>Index</b> . . . . .	<b>207</b>