
Inhalt

Vorwort	IX
1 Warum Biowissenschaften?	1
Warum Deep Learning?	1
In den modernen Biowissenschaften geht es um Daten	2
Was werden Sie lernen?	3
2 Einführung in Deep Learning	9
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
3 Machine Learning mit DeepChem	25
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

4	Machine Learning mit Molekülen	43
	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
5	Biophysikalisches Machine Learning	61
	Proteinstrukturen	63
	Proteinsequenzen	65
	Eine kurze Einführung in die Proteinbindung	67
	Biophysikalische Eigenschaften	68
	Grid Featurization	69
	Atomare Featurization	74
	Die PDDBind-Fallstudie	74
	Der PDDBind-Datensatz	75
	Merkmale entwickeln im PDDBind-Datensatz	78
	Fazit	82
6	Deep Learning in der Genomik	85
	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
7	Machine Learning in der Mikroskopie	101
	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
Vorbereiten biologischer Proben für die Mikroskopie	112
Einfärben der Proben	112
Fixierung der Probe	113
Schneiden der Probe	113
Fluoreszenzmikroskopie	114
Artefakte der Probenvorbereitung	116
Deep-Learning-Anwendungen	117
Die Zellzählung	117
Zellsegmentierung	120
Rechnergestützte Assays	124
Fazit	125
8 Deep Learning in der Medizin	127
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
9 Generative Modelle	147
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

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