

SORTIERUNG VON EINZELMOLEKÜLTRAJEKTORIEN MIT METHODEN DES MASCHINELLEN LERNENS

Lisa Krenkel ^a, Tobias Schlosser ^b, Danny Kowerko ^b, Richard Börner ^a

^a Laserinstitut Hochschule Mittweida, Hochschule Mittweida, Schillerstraße 10, 09648 Mittweida

^b Department of Informatics, Technical University Chemnitz, Straße der Nationen 62, 09111, Chemnitz, Germany

In dieser Arbeit soll maschinelles Lernen für die Auswahl von Einzelmolekültrajektorien zum Einsatz kommen und die benutzerabhängige Sortierung ablösen. Ermittelte Fluoreszenzzeitreihen von markierten Einzelmolekülen müssen vor ihrer Auswertung in sog. ‚good molecules‘ und ‚bad molecules‘ sortiert werden. Momentan finden aber Verarbeitung, Sortierung und Analyse der Daten vorwiegend mit Hilfe laborspezifischer Programme statt. Zwar existieren bereits frei verfügbare Programme zur Verarbeitung von smFRET-Daten wie z.B. SPARTAN [1] oder MASH-FRET [2], jedoch findet hierbei das sog. ‚Molecular Sorting‘ nicht statt bzw. ist dieses rein empirisch. Es gab bereits Ansätze dieses Problem mittels Methoden des maschinellen Lernens zu lösen wie z.B. bei FRETboard [3] oder deepFRET [4]. Im Laufe dieser Arbeit soll ein solcher Ansatz genutzt werden, um mit annotierte smFRET Daten einen Algorithmus zum ‚Molecular Sorting‘ zu trainieren und diesen dann in MASH-FRET (MATLAB) zu implementieren. Aktuell befindet sich diese Arbeit am Anfang der Annotation der Daten für das Training des Algorithmus.

SORTING OF SINGLE-MOLECULE TRAJECTORIES BY MEANS OF MACHINE LEARNING

Lisa Krenkel ^a, Tobias Schlosser ^b, Danny Kowerko ^b, Richard Börner ^a

^a Laserinstitut Hochschule Mittweida, Hochschule Mittweida, Schillerstraße 10, 09648 Mittweida

^b Department of Informatics, Technical University Chemnitz, Straße der Nationen 62, 09111, Chemnitz, Germany

Here, we use machine learning for the selection and sorting of single-molecule trajectories to replace commonly used user-dependent sorting algorithms. Measured fluorescence time series of labelled single molecules need to be sorted into 'good molecules' and 'bad molecules' before they can be evaluated. Currently, however, processing, sorting and analysis of the data is mainly done with the help of laboratory specific programs. Although there are freely available programs for processing smFRET data such as SPARTAN [1] and MASH-FRET [2], they do not offer a 'Molecular Sorting' or it is purely empirical. Only recently, there have been approaches to solve this problem by means of machine learning such as FRETboard [3] or deepFRET [4]. In the course of this work such an approach will be used to train a 'Molecular Sorting' algorithm with annotated smFRET data and implemented in MASH-FRET (MATLAB based software for the analysis of simulated and experimental heterogeneous FRET data). Currently this work is at the beginning of the annotation of the data for the training of the algorithm.

Literatur/Bibliography:

[1] Juette, Manuel F.; Terry, Daniel S.; Wasserman, Michael R.; Altman, Roger B.; Zhou, Zhou; Zhao, Hong; Blanchard, Scott C. (2016): Single-molecule imaging of non-equilibrium molecular ensembles on the millisecond timescale. In: Nature methods 13 (4), S. 341–344. DOI: 10.1038/nmeth.3769.

[2] Börner, Richard; Kowerko, Danny; Hadzic, Mélodie C. A. S.; König, Sebastian L. B.; Ritter, Marc; Sigel, Roland K. O. (2018): Simulations of camera-based single-molecule fluorescence experiments. In: PloS one 13 (4), e0195277. DOI: 10.1371/journal.pone.0195277.

[3] Lannoy, Carlos de; Filius, Mike; Kim, Sung Hyun; Joo, Chirlmin; Ridder, Dick de (2020): FRETboard: semi-supervised classification of fret traces.

[4] Thomsen, Johannes; Sletfjerding, Magnus B.; Stella, Stefano; Paul, Bijoya; Jensen, Simon Bo; Malle, Mette G. et al. (2020): DeepFRET: Rapid and automated single molecule FRET data classification using deep learning
