

索引

記号・数字

%%writefile.....	273
3層のニューラルネットワークモデル.....	159

A

accuracy.....	23, 118
activation function.....	27
Adam.....	158
AI アプタマー創薬.....	366
AI 創薬.....	312
AlphaFold2.....	14
Anaconda.....	284
argparse.....	281
ArrayExpress.....	66
assembly.....	391
Attention.....	30
AWS (Amazon Web Services).....	424

B

backpropagation.....	29, 152
BERT.....	288
binary cross entropy.....	149
binning.....	391
Biomedical Data Science Club.....	434
Biopython.....	292
boxenplot().....	85
boxplot().....	83

C

C (サポートベクトルマシン).....	114
CASP (Critical Assessment of protein Structure Prediction).....	14
Chainer.....	262
classification.....	22

Clusters of Orthologous Groups (COGs).....	403
confusion matrix.....	24
contig.....	391
convolutional neural network (CNN).....	29, 195
coverage.....	394
CRISPR-Cas.....	32
Cross-Validation.....	130
CT.....	194
CuPy.....	266

D

Data Augmentation.....	206
DataFrame.....	39
DEG (differentially expressed genes).....	97
depth.....	394
displot().....	86
Domain of unknown function (DUF).....	412
drop().....	55
Dropout 層.....	205

E

early stopping.....	29, 158, 171, 252
elastic net.....	22
ELBO (evidence lower bound).....	249
epoch.....	29
escribe().....	80

F

f1-score.....	118
false negative.....	24
false positive.....	24
FASTA.....	222
feature engineering.....	16
figure.....	44
fine-tuning.....	30, 288
fold change (FC).....	95
Forward 関数.....	163

G

gamma (サポートベクトルマシン).....	114
GCN (graph convolutional networks).....	335
Gene Expression Omnibus.....	66
Genome Taxonomy Database (GTDB).....	391
Genomon.....	221
GEOparse.....	67
get dummies.....	57
GIGO (Garbage In, Garbage Out).....	67
glob().....	199
Google Cloud Platform (GCP).....	423
Google Colaboratory.....	35
Google Drive からの読み込み.....	36
GPU (Graphics Processing Unit).....	35, 142, 233
GPU の使用.....	38
Grad CAM.....	195, 208

H

heatmap().....	87
HLA.....	220
HLA-ペプチドの結合性を予想.....	230
homolog.....	403
HT-SELEX.....	365
Hugging Face.....	289
hyperparameter.....	20

I

imbalanced data.....	24
info().....	80
iTOL.....	417

K

k-means クラスタリング.....	27, 285
Kaggle.....	34, 433
Kaplan-Meier 曲線.....	46
kernel.....	114
KL ダイバージェンス.....	249
Kyoto Encyclopedia of Genes of Genomes (KEGG).....	403
K 分割交差検証.....	129

L

lasso regression.....	22
LightGBM.....	332
linear regression.....	16
loc.....	55
logistic regression.....	23
loss function.....	19

M

Matplotlib.....	44
maximum likelihood estimation.....	16
mean squared error (MSE).....	19
metagenome-assembled genome (MAG).....	391
MRI.....	194

N

N50.....	393
Neoantigen.....	220
neural network.....	27
no_grad().....	203
NumPy.....	59, 142, 200, 266
NumPy のアレイ.....	143, 200

O

objective function.....	19
OG.....	403
optimizer.....	152
Optuna.....	106, 133, 179
ortholog.....	403
overfitting.....	21, 205

P

pairplot().....	86
Pandas.....	39, 71
pandas_profiling.....	53
Pfam.....	404
pIC ₅₀	354
PLS (partial least squares regression).....	360

pre-training.....	288
precision.....	24, 118
pretraining.....	30
principal component analysis (PCA).....	27, 242
PyTorch.....	65, 142, 159, 200, 230, 266

Q

quantile 正規化.....	83
-------------------	----

R

Radial Basis Function kernel.....	122
RaptGen.....	366
RBF カーネル.....	122
recall.....	25, 118
Rectified Linear Unit.....	27
recurrent neural network (RNN).....	30, 287
RefSeq.....	71
regression.....	22
regularization.....	22
ReLU.....	27, 148, 246
reparameterization trick.....	246
RGB.....	198
ridge regression.....	22
RMSprop.....	158
ROC 曲線.....	206

S

scaffold.....	393
Scanpy.....	244
scikit-learn.....	35, 65, 109
scVI8.....	243
Seaborn.....	49, 84
SELEX (Systematic Evolution of Ligands by EXponential enrichment).....	365
SHIRAUME.....	430
SHIROKANE.....	430
sigmoid function.....	23
single-cell RNA sequencing (scRNA-seq).....	241
SMILES 表記.....	313

standardization.....	98, 111
subplot.....	44
supervised learning.....	20
SVM (Support Vector Machine).....	113

T

TCGA-assembler.....	263
TCGA (The Cancer Genome Atlas).....	222, 261
Tensor.....	142, 200
TensorFlow.....	230
test data.....	21
The Cancer Genome Atlas (TCGA).....	222, 261
tidy data.....	99
TPU (Tensor Processing Unit).....	142
train_test_split().....	109
training data.....	21
transfer learning.....	30, 195, 209
Transformer.....	287
true negative.....	24
true positive.....	24

U

U-net.....	212
underfitting.....	22
unsupervised learning.....	27

V

VAE (variational autoencoder).....	242, 367
vcf.....	222
violinplot().....	85

Z

z-score.....	43
--------------	----

あ

アセンブリ.....	391
アダマール積.....	145

アプタマー創薬.....	364
アンサンブル学習.....	332
鞍点.....	156

い

イテレーション数.....	156
遺伝的アルゴリズム.....	16

え

エッジ.....	147
エネルギーベースモデル.....	427
エピジェネティクス情報.....	261
エポック.....	29
エポック数.....	156
エンコーダ.....	246

お

オートエンコーダ.....	263
オーバーサンプリング.....	227
オブティマイザ.....	152, 163, 234
重み行列.....	152
オルソログ.....	403
オルソログクラスタリング.....	403
オルソロググループ.....	403

か

カーネル.....	201
カーネル関数.....	122
カーネルトリック.....	122
回帰.....	22, 65
階層的クラスタリング.....	27
ガウスクーネル.....	122
過学習.....	21, 109, 170, 205
拡散モデル.....	427
学習率.....	266
確率的勾配降下法.....	156, 246
隠れ層.....	28, 147
可視化.....	80

過小学習.....	22
画像解析.....	195
仮想環境.....	284
画像のセグメンテーション.....	195
活性化関数.....	27, 148
カバレッジ.....	394
がんゲノム.....	219
がん免疫療法.....	219

き

偽陰性.....	24
機械学習とは何か.....	15
機能アノテーション.....	404
強化学習.....	63, 424
教師あり学習.....	20, 63, 195
教師なし学習.....	27, 63
偽陽性.....	24
行列.....	17
近傍遺伝子解析.....	387

く

クラスタリング.....	27, 258
グラフ.....	336
グラフ畳み込みニューラルネットワーク.....	335
グラフニューラルネットワーク.....	426
グリッドサーチ.....	123
クロスエントロピー誤差.....	234
群学習.....	429
訓練データ.....	21
訓練データセット.....	64, 109

け

計算グラフ.....	147
系統解析.....	401
系統プレイスメント.....	398
欠損値の処理.....	68, 94
欠損値の補完.....	55
決定境界.....	114
ゲノム解析.....	219

ゲノム編集.....	32
ケモインフォマティクス.....	313
検証データセット.....	109
顕微鏡.....	194

こ

交差検証.....	130
勾配.....	148
勾配降下法.....	148
勾配消失.....	148
誤差逆伝播法.....	29, 152, 163
コンテイング.....	391
混同行列.....	24

さ

再帰型ニューラルネットワーク.....	30, 287
最急降下法.....	148
再現率.....	25
最小二乗法.....	16
最尤推定法定法.....	16
サポートベクトル.....	114
サポートベクトルマシン.....	16, 106, 113
散布図.....	49
散布図行列.....	50

し

シークエンスロゴ.....	378
シグモイド関数.....	23
次元圧縮.....	264
次元削減.....	27
自己教師あり学習.....	426
事前学習.....	30, 288
事前学習済みモデル.....	30
自然言語.....	288
弱教師あり学習.....	426
主成分分析.....	27, 51, 242
出力層.....	28, 147
腫瘍特異的ネオ抗原.....	219
順伝播.....	152

順伝播処理.....	163
状態遷移可視化.....	378
蒸留.....	428
真陰性.....	24
シングルセル解析.....	241
人工タンパク質.....	310
深層学習.....	140
深層学習の基本知識.....	147
深層強化学習.....	425
真陽性.....	24

す

スキヤフォールド.....	393
---------------	-----

せ

正解率.....	23
正規化.....	245
生成モデル.....	427
整然データ.....	99
正則化項.....	22
生存時間解析.....	285
セグメンテーション.....	211
説明可能な人工知能 (AI).....	208, 428
ゼロ過剰モデル.....	250
線形回帰.....	16
線形代数.....	17
全結合.....	28
全結合層.....	147
前処理.....	63

そ

相関係数.....	87
早期打ち切り.....	29, 158, 171, 252
ソフトマージン.....	115
損失関数.....	19, 149, 163, 234

た

対偶遺伝学.....	387
------------	-----

多重共線性.....	360
畳み込みニューラルネットワーク	29, 195
ダブルメンター制度.....	435
短鎖化配列の生成.....	367
短鎖化モチーフの獲得.....	384
タンパク質言語モデル.....	288

ち

注意.....	30
抽出.....	94
重複の処理.....	88

て

定量的構造活性相関.....	348
定量的構造物性相関.....	322
データ増.....	206
データの前処理.....	54
データの水増し.....	206
データの読み込み.....	68
データフレーム.....	39
データローダー.....	229
適合率.....	24
敵対的生成ネットワーク.....	427
デコーダ.....	246
テストデータ.....	21
テストデータセット.....	64, 109
デブス.....	394
転移学習.....	30, 195, 209
テンソル.....	142, 266
テンソル積.....	145

と

動径基底関数カーネル.....	122
統計量.....	43
特徴マップ.....	201
特徴量.....	16, 65
特徴量工学.....	16
トランスクリプトーム情報.....	261
トランスクリプトームデータ.....	66
トランスフォーマー.....	225, 287

ドロップアウト.....	241, 266
--------------	----------

に

ニューラルネットワーク.....	27, 113
入力層.....	28, 147

ね

ネオ抗原.....	220
-----------	-----

の

ノーコード.....	423
ノード.....	147

は

パーセプトロン.....	147
バイアス.....	148
バイナリー交差エントロピー.....	149
ハイパーパラメータ.....	20, 114, 179, 266
ハイパーパラメータの最適化.....	123
箱ひげ図.....	83
発現差異解析.....	243
バッチ勾配降下法.....	156
バッチサイズ.....	29
バッチ正規化.....	158, 246
半教師あり学習.....	425
判断根拠の可視化.....	208

ひ

ヒートマップ.....	50, 87, 308
ヒストグラム.....	86
微生物データマター.....	387
微調整.....	30
ヒト白血球抗原.....	220
ビンニング.....	391
標準化.....	98, 111
汎化性能.....	109

ふ	
プーリング層	201
不均衡データ	24, 42
負の二項分布	250
部分的最小二乗回帰	360
ブローブ	70
プロファイル隠れマルコフモデル	366
分子記述子	317
分類	22, 65

へ	
平均二乗誤差	19
ベイズ最適化	133, 182, 367
ベイズ最適化を利用した効果的な配列生成	380
ベクトル	17
変分オートエンコーダ	242, 367, 427
変分推論	249

ほ	
ホールドアウト検証	124, 160
ホモログ	403

ま	
マージン	114
マイクロアレイ	66
負の二項分布	250
マラリア	195
マルチオミクス解析	261
マルチプルシーケンスアライメント (MSA)	14

み	
未学習	22
ミニバッチ勾配降下法	156

も	
目的関数	19
モンテカルロ積分	249

や	
焼きなまし法	16

ゆ	
尤度関数	249
ユニークなデータ	42

よ	
陽性適中率	24

ら	
ラッソ回帰	22
ランタイム	38, 142
ランダムフォレスト	16, 332

り	
リッジ回帰	22
量子化	428

れ	
連合学習	429

ろ	
ロジスティック回帰	16, 23