



Bachelorthesis

A Deep Learning Approach for Predicting Pesticide Degradation Based on Enzyme Classes

Prüfer(in):

Prof. Dr. Thomas Ströder

Fethi Temiz

Verfasser(in):

Tobias Polley

100853

Gutenbergstr. 5

51469 Bergisch Gladbach

BFWC321B

Cyber Security

Eingereicht am:

29. April 2024

Sperrvermerk

Diese Arbeit enthält vertrauliche Informationen über die Firma Bayer AG. Die Weitergabe des Inhalts dieser Arbeit (auch in Auszügen) ist untersagt. Es dürfen keinerlei Kopien oder Abschriften - auch nicht in digitaler Form - angefertigt werden. Auch darf diese Arbeit nicht veröffentlicht werden und ist ausschließlich den Prüfern, Mitarbeitern der Verwaltung und Mitgliedern des Prüfungsausschusses sowie auf Nachfrage einer Evaluierungskommission zugänglich zu machen. Personen, die Einsicht in diese Arbeit erhalten, verpflichten sich, über die Inhalte dieser Arbeit und all ihren Anhängen keine Informationen, die die Firma Bayer AG betreffen, gegenüber Dritten preiszugeben. Ausnahmen bedürfen der schriftlichen Genehmigung der Firma Bayer AG und des Verfassers.

Die Arbeit oder Teile davon dürfen von der FHDW einer Plagiatsprüfung durch einen Plagiatsoftware-Anbieter unterzogen werden. Der Sperrvermerk ist somit im Fall einer Plagiatsprüfung nicht wirksam.

Inhaltsverzeichnis

Sperrvermerk II

Abbildungsverzeichnis V

Tabellenverzeichnis VI

Listingverzeichnis VII

Introduction 1

0.1 Motivation 1

0.2 Problem Statement 1

0.3 Purpose and Research Question 1

0.4 Structure of the Thesis 1

Literature Review 2

0.1 Enzymatic Mechanisms Involved in Pesticide Breakdown 2

0.2 Deep Learning Techniques in Environmental Science 2

Theoretical Background 3

0.1 Principles of Enzymology 3

0.1.1 Enzyme Classification and Function 3

0.1.2 Role of Enzymes in Biodegradation 3

0.2 Fundamentals of Deep Learning 3

0.2.1 Introduction to Deep Learning 3

0.2.2 Fundamentals of Geometric Deep Learning 3

0.2.3 Evaluation of Deep Learning Models 3

Methodology 4

0.1 Data Collection 4

0.1.1 Data Sources 4

0.1.2 Data Preprocessing 4

0.2 Feature Engineering 4

0.3 Model Development 4

0.3.1 Model Architecture 4

0.3.2 Model Training 4

0.3.3 Model Evaluation	4
Results	5
0.1 Model Performance	5
0.2 Comparative Analysis with Existing Models	5
0.3 Interpretation of Model Predictions	5
Discussion	6
0.1 Implications of Findings	6
0.2 Strenths and Limitations	6
Conclusion	7
0.1 Summary of Findings	7
0.2 Contributions to the Field	7
0.3 Final Remarks and Future Work	7
Appendix	8
List of references	10
Statement of independent work	11

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Listingverzeichnis

Introduction

0.1 Motivation

0.2 Problem Statement

0.3 Purpose and Research Question

0.4 Structure of the Thesis

Literature Review

0.1 Enzymatic Mechanisms Involved in Pesticide Breakdown

0.2 Deep Learning Techniques in Environmental Science

Theoretical Background

0.1 Principles of Enzymology

0.1.1 Enzyme Classification and Function

0.1.2 Role of Enzymes in Biodegradation

0.2 Fundamentals of Deep Learning

0.2.1 Introduction to Deep Learning

0.2.2 Fundamentals of Geometric Deep Learning

0.2.3 Evaluation of Deep Learning Models

Methodology

0.1 Data Collection

0.1.1 Data Sources

0.1.2 Data Preprocessing

0.2 Feature Engineering

0.3 Model Development

0.3.1 Model Architecture

0.3.2 Model Training

0.3.3 Model Evaluation

Results

0.1 Model Performance

0.2 Comparative Analysis with Existing Models

0.3 Interpretation of Model Predictions

Discussion

0.1 Implications of Findings

0.2 Strenths and Limitations

Conclusion

0.1 Summary of Findings

0.2 Contributions to the Field

0.3 Final Remarks and Future Work

Appendix

Appendix

Anhang 1: Filler	9
Anhang 1.1: Filler	9

Appendix 1 Filler

Appendix 1.1 Filler

- Filler

List of references

Statement of independent work

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Bachelorthesis selbständig angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich benannten Quellen und Hilfsmittel benutzt. Wörtlich oder sinngemäß übernommenes Gedankengut habe ich als solches kenntlich gemacht. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Bergisch Gladbach, 29. April 2024

Tobias Polley