

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

# Fuzzy Patterns

<sup>1</sup>Moscow State University

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

## ① Исследование поведения

### T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

### Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## ② Задача определения концентрации ферментов

### Калибровка

### Сглаживание

### Определение концентрации ферментов

# Задача исследования поведения

Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

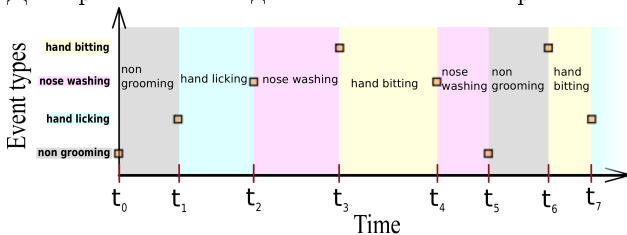
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Дана разметка поведения животного во времени.



# Формальное описание данных

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

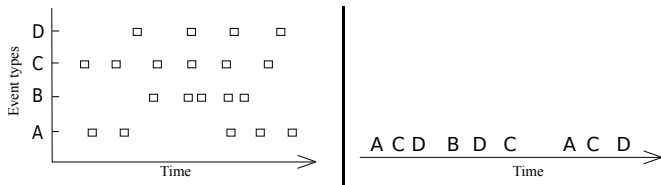
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Поведенческие события(акты):  $A, B, C, D \dots$
- Каждый поведенческий акт происходит в некоторые моменты времени:  $t_{A_1}, \dots, t_{A_N}$ .



## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения

концентрации

ферментов

Калибровка

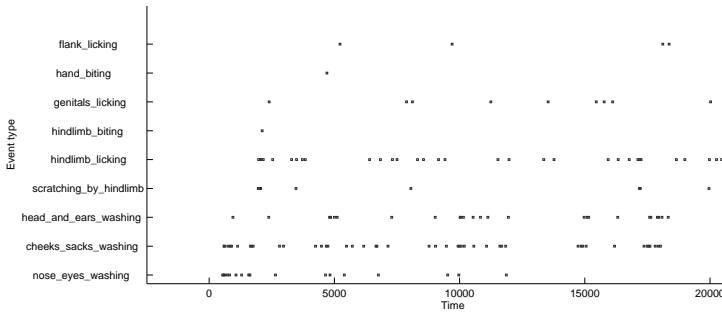
Сглаживание

Определение

концентрации

ферментов

forelimb\_licking[426 431]hand\_licking <0.0003763> 4: (638 1069) (4518 4944) (10400 10826) (11166 11597)



# Что такое паттерн

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Паттерн — это последовательность событий(поведенческих актов), повторяющихся один за другим достаточно часто.

# Подход к поиску паттернов

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Инициализируем множество паттернов псевдопаттернами(поведенческие акты). Потом итеративно повторяем:

- **Конструирование:** Для всех пар паттернов проверить, повторяется ли один за другим достаточно часто. Если да, то получаем новый паттерн.
- **Зачистка:** Удалить одинаковые паттерны, которые были сконструированы по-разному.

# Общие замечания

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Важно формально определить, что такое паттерн.
- Этапы конструирования и зачистки определяются заданием паттерна.
- Как проверить, повторяется ли один паттерн за другим достаточно часто?



Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

## 1 Исследование поведения

### T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

### Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## 2 Задача определения концентрации ферментов

### Калибровка

### Сглаживание

### Определение концентрации ферментов

# Понятие T-Паттерна(М.С. Magnusson)

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

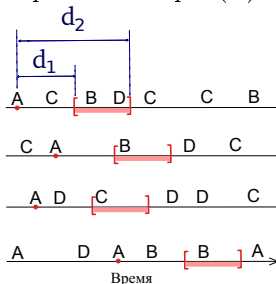
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- События соединятся критическими интервалами.  $A[dA_l, dA_r]B[dB_l, dB_r]C \dots F$ .
- Критический интервал  $(A[d_1, d_2]B)$  – это связь между двумя паттернами, означающая, что второй паттерн( $B$ ) промежутке  $[d_1, d_2]$  после появления первого паттерна( $A$ ) чаще, чем ожидается.



# Этап конструирования

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

Существуют ли такие  $d_1$  и  $d_2$ , что  $A[d_1, d_2]B$  является критической связью?

- Перебираем все возможные пары  $d_1$  и  $d_2$ .
- Проверяем, значимость связи  $[d_1, d_2]$ . «Чаще чем ожидается».

Ожидается что паттернов нету. Значит времена появления событий распределены равномерно.

# Статистический критерий

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- $N_A, N_B$  — количество появлений событий  $A$  и  $B$ .
- $N_t$  — продолжительность времени наблюдения.
- $d = d_2 - d_1 + 1$  — ширина тестируемого интервала.
- $P(A) = \frac{N_A}{N_t}$  — вероятность наблюдать событие  $A$  в какой-либо момент времени.
- $P(\neg A) = 1 - P(A)$
- $1 - P(\neg A)^d$  — вероятность наблюдать событие  $A$  в каком-либо интервале длины  $d$ .
- $N_{AB}$  — Количество интервалов  $A[d_1, d_2]$ , в которых есть событие  $B$ .
- $\rho = P(\geq N_{AB}) = 1 - \sum_{i=0}^{N_{AB}-1} C_{N_A}^i (1 - P(\neg B)^d)^i P(\neg B)^{d(N_A-i)}$

# Статистический критерий

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Итак, мы имеем  
 $\rho = \rho(N_A, N_B, N_t, N_{AB}, d)$  —вероятность текущей конфигурации событий, предполагая равномерное распределение данных(паттернов нету).
- Если  $\rho < \alpha \approx 0.05$ , то считаем что существует критическая связь  $A[d_1, d_2]B$ .
- Обычно требуется  $N_{AB} > N_{min} \approx 3$ .
- Можно ставить разные уровни значимости для паттернов разной длины.
- Для двух паттернов  $A$  и  $B$  могут существовать разные критические интервалы  $[d_1, d_2]$ . Какой выбирать?

# Типы «лишних» паттернов

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

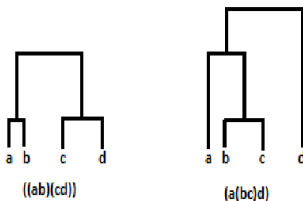
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

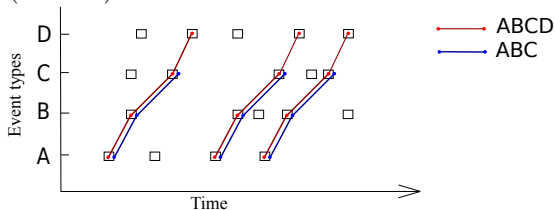
Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- **Дубликаты:**  $(AB)(CD)$  и  $(A(BC))D$



- **Неполные копии:**  $(BCD)$  не встречается вне  $(ABCD)$



# Правило удаления

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

Паттерн  $A$  считается менее полным, чем паттерн  $B$ , если  $A$  и  $B$  появляются одинаково часто и все события, возникающие в  $A$  также возникают в  $B$ .

# Параметры метода

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Параметр	Область значений	Значение по умолчанию	Смысл
$\alpha$	$[0, 1]$	0.995	Уровень значимости паттернов
$N_{min}$	$[0, +\infty]$	3	Минимальное число появлений паттерна

- Задание стратегии поиска критических интервалов.
- Дополнительные ограничения.



# Параметры метода

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

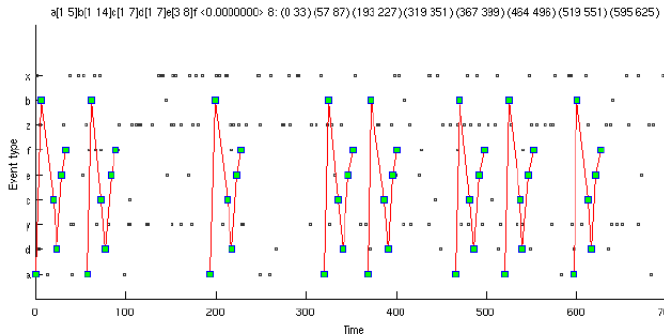
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Удовлетворительно работает на поведенческих данных.



- Алгоритм очень чувствителен к пропускам в данных.

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

## 1 Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## 2 Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

# Предпосылки

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Еще раз: T-Паттерны очень чувствительны к пропускам в данных,
- новый тип паттернов,
- схожий с T-Паттернами метод поиска,
- правдоподобие паттерна в каждой точке.

# Представление паттерна

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

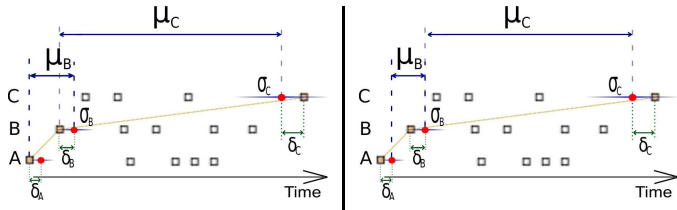
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Паттерн состоит из элементарных событий,
- каждое событие паттерна характеризуется смещением и разбросом от предыдущего события(гармошка),
- либо от предыдущего мат. ожидания(занавеска),
- $P = A[\mu_A, \sigma_A]B[\mu_B, \sigma_B]C[\mu_C, \sigma_C]$



# Функция потерь

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

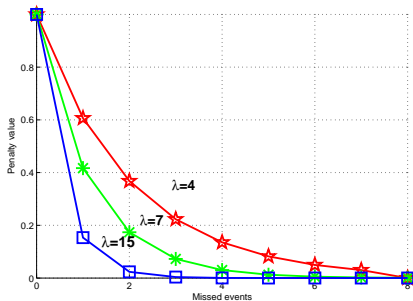
Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Штраф за пропуск  $x$  событий в паттерне длины  $N$ :

$$f_{LOSS}(x, N) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\lambda x}{N}\right), & x < N, \\ 0, & x = N. \end{cases}$$

- $\lambda$  определяет уровень нечеткости паттернов.



# Правдоподобие

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

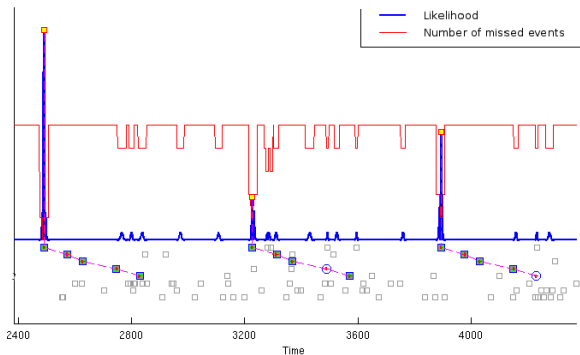
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

$$L_P(\varepsilon) = f_{LOSS}(N_-, N) \prod_{i=1}^N \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \right) \prod_{i=1}^{N_+} \exp\left(-\frac{\delta_i^2}{2\sigma_i^2}\right)$$



# Правдоподобие

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

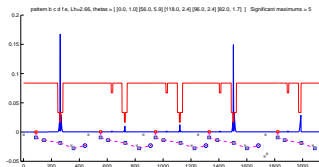
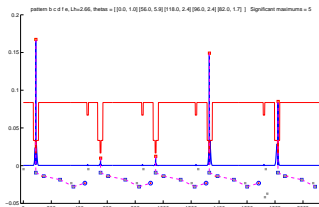
Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Правдоподобие можно считать с конца, или начиная с  $i$ -го события.

$$L_{P,m} = L_P(\varepsilon + \sum_{j=1}^m \mu_j)$$



# Межточечное распределение

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

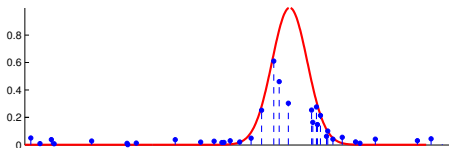
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Рассматриваем распределение расстояний между концом левого и началом правого паттерна,
- отсечение окном ширины  $M$ ,
- вводим  $g_{\mu,\sigma}(\rho_l) = \exp\left(-\frac{(\rho_l - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$  – это статистическая модель связи между событиями,
- подсчитываем  $k = \sum_{l=1}^Q w_l g_{\mu,\sigma}(\rho_l)$ .





# Гипотеза о случайности распределения

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Если в данных нету закономерностей:

- с.в.  $w$  и  $\rho_l$  – независимы,
- $\rho_l \in U[0, M]$ ,
- $Y = \sum_{i=1}^Q w_l g_{\mu, \sigma}(\rho_l)$ ,

- Используя Ц.П.Т, можно показать, что:

$$Y \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sum_{i=1}^Q w_i}{M} S, \frac{1}{M^2} \left[ M S \sqrt{2} \sum_{i=1}^Q w_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^Q w_i)^2}{Q} S^2 \right]\right)$$

- ищем  $\mu$  и  $\sigma$ :

$$\frac{k - \mathbb{E}Y}{\sqrt{\mathbb{D}Y}} \rightarrow \min_{\mu, \sigma},$$

- сравниваем с квантилью нормального распределения;  $\omega$ .

# Виды «лишних» паттернов

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- **Дубли:** (AB)(CD), (ABC)D,
- **Неполные копии:** (BCD) не встречается вне (ABCD).
- похожесть паттернов по вектору правдоподобия  $\vec{L}$ , коэффициент корреляции:

$$\text{cor}(\vec{L}_1, \vec{L}_2) = \frac{\vec{L}_1 \vec{L}_2^T}{\sqrt{\vec{L}_1 \vec{L}_1^T} \sqrt{\vec{L}_2 \vec{L}_2^T}}$$

# Процедура удаления

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

Есть паттерн  $P_1$  и  $P_2$ . Если все события, которые входят в  $P_1$  так же входят в  $P_2$  и  $\exists m : cor(\overrightarrow{L_{P_1,m}}, \overrightarrow{L_{P_2,1}}) > \nu$ , то  $P_1$  удаляется.

# Parameters of algorithm

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Parameter	Possible values	Default value	Has influence on
$\omega$	$[0, 1]$	0.995	Significance of pattern
$\mu$	$[0, +\infty]$	3	Minimal pattern occurrences
$\lambda$	$[0, +\infty]$	6	Fuzziness of patterns
$\nu$	$[0, 1]$	0.7	Similarity of patterns for elimination
$M$	$[0, N_t]$	None	Max time span between events in patterns

# Пример

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

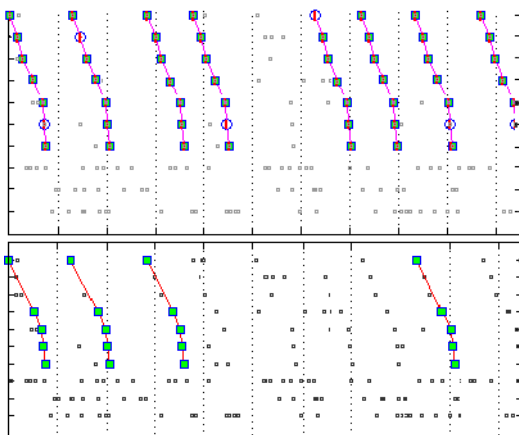
Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение



# Plan

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

## 1 Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## 2 Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

# Химическая кинетика

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

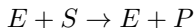
Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

Есть субстрат  $S$ , преобразуемый ферментом  $E$  в конечный продукт реакции  $P$ .



Уравнение Михаэлиса – Ментен:

$$v = \frac{dP(t)}{dt} = \frac{V_{max}S(t)}{K_M + S(t)}$$

$$V_{max} = k_{cat}E$$

$$S(0) = S_0, P(0) = 0$$

$$S(t) + P(t) = S_0$$

# Исходные данные

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

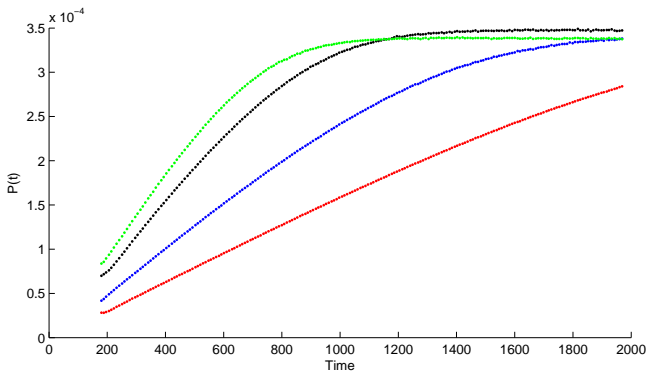
Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

После интегрирования, учитывая начальные условия:

$$P(t) = k_{cat}Et + K_M \ln\left(1 - \frac{P(t)}{S_0}\right)$$





# Формулировка задания

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Данные о реакции одного фермента и одного субстрата.
- Даны измерения  $P(t)$ .
- 8 разных концентраций фермента ( $E$ ). По 5 экспериментов с каждым значением концентрации  $E$ .
- $S_0$  должно быть одинаково во всех экспериментах.
- Найти значения констант  $V_{max}$  и  $K_M$  для данной пары фермент – субстрат.

# Сглаживание

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

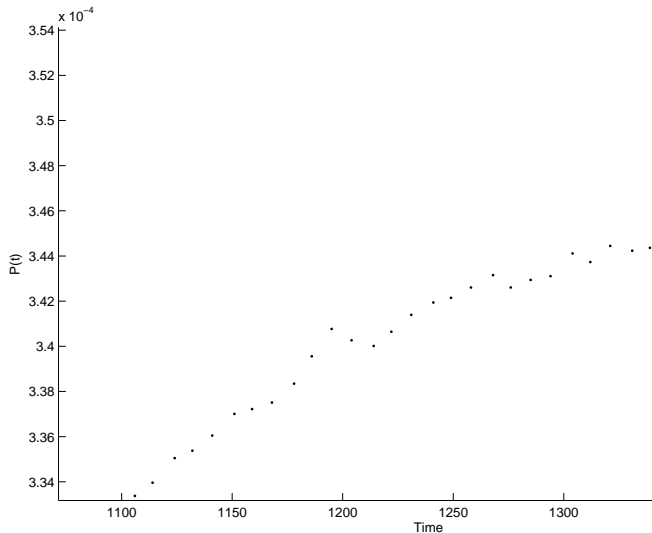
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Plan

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

## ① Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## ② Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

# Как восстанавливать функцию

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- На отрезке  $[a, b]$  даны значения целевой функции  $f(x_i) = y_i, i = 1, \dots, l$ .
- Требуется восстановить целевую функцию  $\hat{f}(x), x \in [a, b]$ .
- Интерполирование. Найти  $\hat{f} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  такую, что  $y_i = \hat{f}(x_i), i = 1, \dots, l$
- Регрессия. Curve fitting. Найти  $\hat{f} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ , минимизирующую ошибку  $\sum_{i=1}^l (\hat{f}(x_i) - y_i)^2$ .  
Точнее  $y_i = \hat{f}(x_i) + \varepsilon_i$

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Kernel smoothing
- Линейная регрессия. Polynomial fitting.
- Локальная регрессия.
- Сплайны.

# Kernel smoothing

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- $$\hat{f}(x) = \frac{\sum_{i=1}^l \left[ W\left(\frac{x_i - x}{h}\right) y_i \right]}{\sum_{i=1}^l W\left(\frac{x_i - x}{h}\right)}$$
- $W(h)$  — весовая функция. Например,  $W(u) = \exp(-u^2)$ .
- Проблема выбора ширины окна.
- Краевые эффекты.

# Kernel smoothing

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

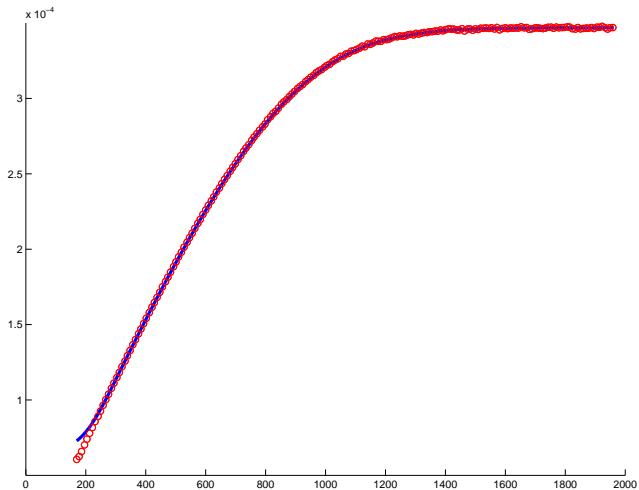
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Kernel smoothing

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

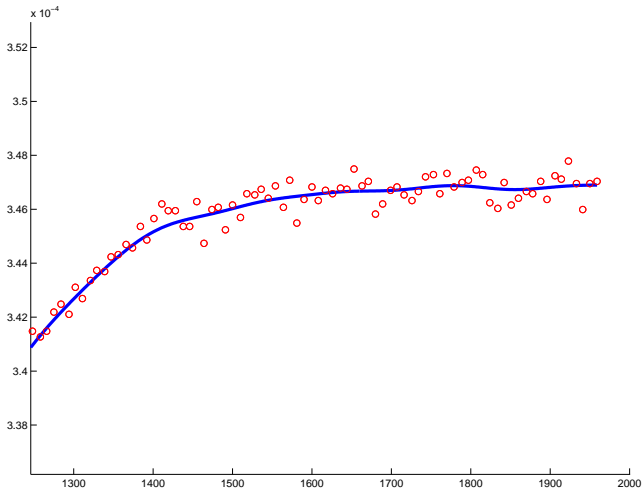
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов





# Линейная регрессия. Polynomial fitting

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Предполагаем, что
$$\hat{f}(x) = w_m x^m + w_{m-1} x^{m-1} + \dots + w_1 x + w_0.$$
- Настраиваем веса  $w_i, i = 1, \dots, m$  методом наименьших квадратов.
- Проблема выбора степени полинома.

# Линейная регрессия. Polynomial fitting

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

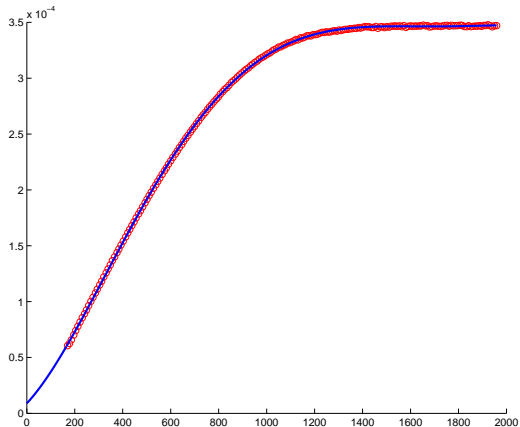
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Линейная регрессия. Polynomial fitting

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

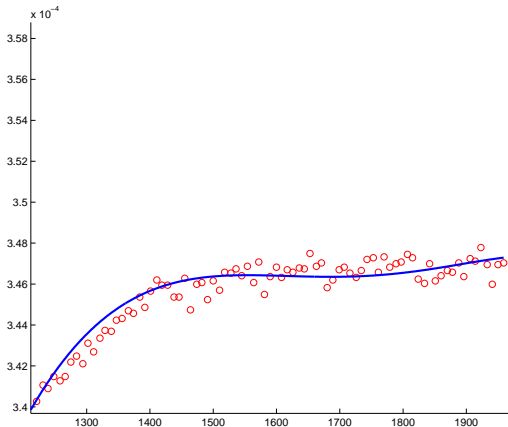
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Локальная регрессия

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Восстанавливается линейная регрессия в окрестности каждой точки.
- $\hat{f}(x) \approx a_0(x) + a_1(x)x$
- В каждой точке  $a_0$  и  $a_1$  могут быть найдены, решая следующую задачу взвешенных наименьших квадратов:

$$\operatorname{argmin}_{a_0, a_1} \sum_{i=1}^l W\left(\frac{x_i - x}{h}\right) [y_i - a_0 + a_1 x]^2$$

# Локальная регрессия

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

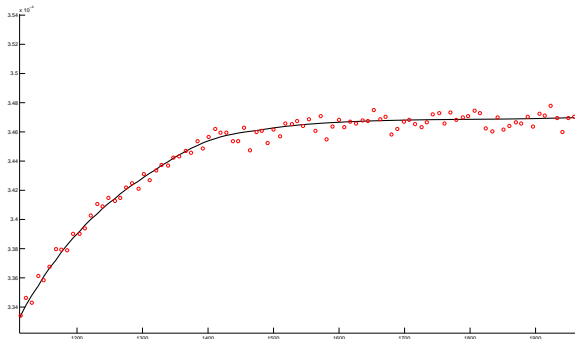
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- Разбиваем  $[a, b]$  на  $k$  отрезков. На каждом отрезке строим оптимальный полином, учитывая краевые ограничения.
- Можем задавать дополнительные ограничения: выпуклость, монотонность, значение интеграла на отрезке, линейные участки.
- Можно аналитически посчитать производную.

# Сплайны

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

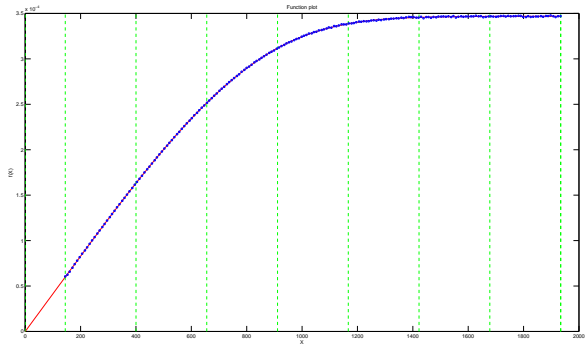
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Сплаины

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

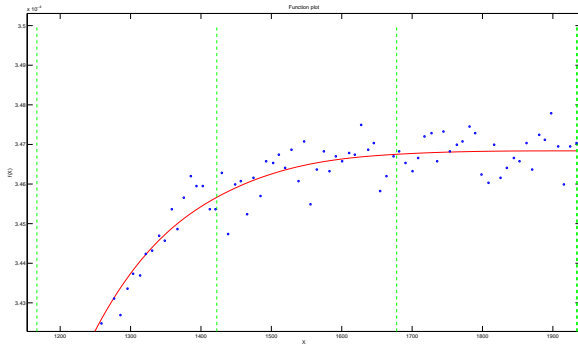
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов





# Smoothing(regression) splines

## Fuzzy Patterns

Исследование  
поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие  
паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения  
концентрации  
ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение  
концентрации  
ферментов

- $\sum_{i=1}^l (\hat{f}(x_i) - y_i)^2 + \lambda \int (\hat{f}''(t))^2 dt \rightarrow \min_{\hat{f}}$
- $\hat{f}(x) = \sum_{j=1}^l N_j(x)\theta_j$ , где  $N_j$  – базис сплайна.

# Smoothing(regression) splines

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

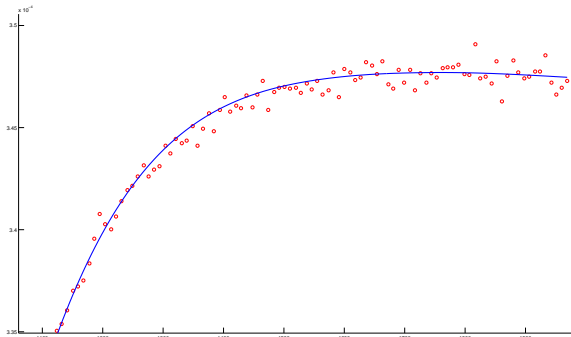
Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов



# Plan

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

## 1 Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

## 2 Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

# Определение концентрации ферментов

## Fuzzy Patterns

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Рассматриваем реакцию одного субстрата. Известно, что в растворе могут присутствовать  $N$  ферментов  $e_1, \dots, e_N$ .
- Известны  $k_{cat}^{(e_j, s)}$  и  $K_M^{(e_j, s)}$ ,  $j = 1, \dots, N$ . Требуется найти концентрации  $E_j$ ,  $j = 1, \dots, N$

$$v = \frac{dP(t)}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{k_{cat}^{(e_j, s)} S(t)}{K_M^{(e_j, s)} + S(t)} E_j$$

Исследование поведения

T-Паттерны

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Fuzzy Patterns

Правдоподобие паттерна

Этап конструирования

Этап зачистки

Заключение

Задача определения концентрации ферментов

Калибровка

Сглаживание

Определение концентрации ферментов

- Matlab, кусочное интерполирование слайдами: SLM Tools, John D'Errico, <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/slm-shape-language-modeling>
- The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. <http://www-stat.stanford.edu//ElemStatLearn/>
- Handbook of Computational Statistics. Gentle, James <http://fedc.wiwi.hu-berlin.de/xplora/ebooks/html/csa/>