Cvičení STP005 – domácí úlohy

Budeme uvažovat bodové procesy s hustotou p vzhledem k rozdělení Poissonova procesu s jednotkovou intenzitou na omezené množině $B \in \mathcal{B}_0^d$.

1. Homogenní bodové procesy s párovými interakcemi

Připomeňme, že homogenní bodové procesy s párovými interakcemi mají hustotu tvaru

$$p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(B)} \prod_{\{x,y\} \subseteq \varphi} \theta(\|x - y\|),$$

kde $\beta > 0$, $\theta : (0, \infty) \to \mathbb{R}^+$ a α je normující konstanta.

Ve statistické fyzice se θ označuje jako *potenciál (potential)*. Určuje sílu interakcí mezi body. Hodnoty θ menší než 1 znamenají odpudivé interakce mezi body v dané vzdálenosti, zatímco hodnoty větší než 1 odpovídají přitažlivým interakcím. Proces nazveme *odpudivý (repulsive)*, jestliže $\theta(r) \leq 1$ pro všechna $r > 0$. Pokud $\theta(r) \geq 1$, mluvíme o *přitažlivém (attractive)* procesu. Definujeme *rozsah interakcí (range of interaction)* jako

$$R = \inf\{r > 0 : \theta(s) = 1 \text{ pro } s > r\}.$$

Různé volby funkce θ vedou na různé modely s párovými interakcemi. Triviální volba $\theta(r) = 1$ pro každé $r > 0$ odpovídá homogennímu Poissonovu procesu s intenzitou β, rozsah interakcí je pak $R = 0$. Jedná se o proces, který je zároveň odpudivý i přitažlivý. Nejjednodušší netriviální proces s párovými interakcemi je *Straussův proces (Strauss process)*:

$$\theta(r) = \gamma^{\mathbf{1}_{[r \leq R]}}, \quad 0 \leq \gamma \leq 1,\ R > 0,$$

přitom pokládáme $0^0 = 1$.

1a. Procesy s pevným jádrem

1. Pokud $\theta(r) = 0$ pro $r \leq h$, dostáváme proces s pevným jádrem $h > 0$. Předpokládejme navíc, že θ je omezená. Ukažte, že pak je p integrovatelná vzhledem k rozdělení Poissonova procesu s jednotkovou intenzitou na omezené množině B.
Návod: Podmínka na pevné jádro implikuje existenci konstanty n_0 takové, že $p(\varphi) = 0$ pro $\varphi(B) > n_0$.

2. Příkladem procesu s pevným jádrem je *Straussův proces s pevným jádrem (Strauss hard-core process)*, jehož potenciál má tvar

$$\theta(r) = \begin{cases} 0 & \text{pro } r \leq h, \\ \gamma & \text{pro } h < r \leq R, \\ 1 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Z předchozí úlohy plyne, že proces je dobře definován pro $\gamma \geq 0$ a $R > h > 0$. Jde o proces s pevným jádrem h a rozsahem interakcí R (pokud $\gamma \neq 1$). Vygenerujte realizace Straussova procesu s pevným jádrem pro několik různých voleb parametrů β, h, R a γ. Pro každou realizaci odhadněte párovou korelační funkci a Clarkův-Evansův index. Prokazují odhady těchto charakteristik odchylky od Poissonova procesu?
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `straush`.

3. Zobecněním Straussova procesu s pevným jádrem je *bodový proces s po částech konstatními interakcemi (piecewise constant pairwise interaction point process)* nebo také *víceměřítkový proces (multiscale process)*, který je definován pomocí

$$\theta(r) = \gamma_i \mathbf{1}_{[R_{i-1} < r \leq R_i]}, \quad i = 1, \dots, k+1,$$

kde $\gamma_1 = 0$, $\gamma_i \geq 0$, $i = 2, \dots, k$, $\gamma_{k+1} = 1$, $0 = R_0 < R_1 < \dots R_k < R_{k+1} = \infty$, $k \in \mathbb{N}$. Pevné jádro je R_1 a rozsah interakcí je R_k. Nasimulujte realizaci tohoto procesu pro $k = 4$ a vámi zvolené parametry γ_i, R_i.
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `lookup`.

4. Uvažujte víceměřítkový proces s pevnými parametry R_i, $i = 1, \ldots, 5$ a neznámými parametry β a γ_i, $i = 2, 3, 4$. Na základě realizace procesu z předchozí úlohy nalezněte odhad parametrů tohoto parametrického modelu. Porovnejte je se skutečnými hodnotami parametrů. Jak by vypadal odhad parametrů v případě, kdy zvolený parametrický model je Straussův proces s pevným jádrem R_1 a rozsahem interakcí R_4?
Návod: Použijte funkci `ppm` s volbou `PairPiece` nebo `StraussHard`.

1b. Diggleův-Grattonův proces

1. Ukažte, že pro každý odpudivý proces je hustota stabilní ve smyslu Ruelleho, a tudíž integrovatelná.

2. Definujme *proces s lineárně se měnícími interakcemi* pomocí

$$\theta(r) = \begin{cases} r/R, & r \leq R, \\ 1, & r > R, \end{cases}$$

kde $R > 0$ je rozsah interakcí. Zatímco ve Straussově procesu je θ po částech konstantní, zde je θ lineární. Vygenerujte realizaci tohoto procesu (pro vámi zvolené parametry) a odhadněte párovou korelační funkci.
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `diggra` (viz následující úloha).

3. Zobecněním procesu z minulé úlohy je *Diggleův-Grattonův proces* daný potenciálem

$$\theta(r) = \begin{cases} 0 & \text{pro } r \leq \delta, \\ \left(\frac{r-\delta}{R-\delta}\right)^{\kappa} & \text{pro } \delta < r \leq R, \\ 1 & \text{pro } r > R. \end{cases}$$

Parametry modelu jsou $0 \leq \delta \leq R$ a $\kappa \geq 0$. Pro $\kappa = 1$, $\delta = 0$ skutečně dostáváme proces s lineárně se měnícími interakcemi. Jde o odpudivý proces, čímž je zaručena integrovatelnost. Síla odpudivých interakcí roste s rostoucím κ. Pro $\kappa = 0$ máme proces s pevným jádrem δ, pro $\kappa = \infty$ jde o proces s pevným jádrem R. Vygenerujte realizace Diggleova-Grattonova procesu pro několik různých voleb parametrů β, δ, R a κ. Pro každou volbu vykreslete i průběh funkce θ.
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `diggra`.

4. Uvažujte Diggleův-Grattonův proces s pevnými parametry δ a R a neznámými parametry β a κ. Na základě některé realizace procesu z předchozí úlohy nalezněte odhad parametrů tohoto parametrického modelu. Porovnejte je se skutečnými hodnotami parametrů β a κ.
Návod: Použijte funkci `ppm` s volbou `DiggleGratton`.

1c. Dva příklady odpudivých procesů s konečným rozsahem interakcí

1. Ukažte, že pro každý odpudivý proces je hustota stabilní ve smyslu Ruelleho, a tudíž integrovatelná.

2. Definujme *Diggleův-Gatesův-Stibbardové proces* pomocí potenciálu

$$\theta(r) = \begin{cases} \sin^2 \frac{\pi r}{2R}, & r \leq R, \\ 1, & r > R. \end{cases}$$

Je to příklad odpudivého procesu s rozsahem interakcí $R > 0$. Vygenerujte realizaci tohoto procesu, vykreslete funkci θ a odhadněte párovou korelační funkci. Volte různá R a pro každé proveďte více simulací procesu. Z každé simulace spočtěte odhad Clarkova-Evansova indexu. Vykreslete graf závislosti průměru odhadnutých indexů na volbě R. Dá se očekávat, že pro malá R bude proces blízko Poissonovu procesu, zatímco pro větší R bude vyšší vliv odpudivých interakcí (Clarkův-Evansův index by měl být větší než 1).
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `dgs`.

3. *Proces překrývajících se ploch (overlap area process)* je dán potenciálem

$$\theta(r) = \theta(\|x - y\|) = \gamma^{|b(x,R/2) \cap b(y,R/2)|},$$

kde $0 \leq \gamma \leq 1$ a $R > 0$. Tento proces je motivován představou, že body procesu jsou středy kulových oblastí (zóny vlivu) o průměru R. Interakce jsou odpudivé ($\gamma \leq 1$) a jejich velikost závisí na míře průniku těchto zón vlivu. Rozsah interakcí je R (pokud $\gamma < 1$). Pro $\gamma = 1$ jde o Poissonův proces. Pro $\gamma = 0$ dostáváme proces s pevným jádrem R (podle úmluvy je $0^0 = 1$). Vyjádřete $|b(x, R/2) \cap b(y, R/2)|$ jako funkci R a $r = \|x - y\|$ v rovinném případě $d = 2$.

1d. Procesy s nekonečným rozsahem interakcí

1. Ukažte, že pro každý odpudivý proces je hustota stabilní ve smyslu Ruelleho, a tudíž integrovatelná.

2. Definujeme *proces s měkkým jádrem (soft-core process)* vztahem pro potenciál:

$$\theta(r) = \exp\left\{ -\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{2/\kappa} \right\},$$

kde $\sigma \geq 0$ a $\kappa > 0$. Jde o příklad procesu s nekonečným rozsahem interakcí. Příslušná hustota je integrovatelná, protože proces má odpudivé interakce. Ty jsou silnější pro větší hodnoty σ (pro $\sigma = 0$ jde o Poissonův proces). Větší hodnoty κ znamenají slabší interakce, limitní případ $\kappa \to 0$ odpovídá procesu s pevným jádrem σ. Vygenerujte realizace procesu s měkkým jádrem pro několik různých voleb parametrů β, σ, a κ. Vykreslete průběh funkce θ.
Návod: Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `sftcr`.

3. Definujeme *Lennard-Jonesův proces* pomocí

$$\theta(r) = \exp\left\{ \tau \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right\}, \quad \tau \geq 0,\ \sigma > 0.$$

Pro $\tau = 0$ jde o odpudivý proces, je to speciální případ procesu s měkkým jádrem s $\kappa = 1/6$. Opět se jedná o příklad procesu s nekonečným rozsahem interakcí. Ukažte, že pro $\tau > 0$ má tento proces odpudivé interakce pro $r < r_0$ a přitažlivé interakce pro $r > r_0$ a určete r_0. Parametr τ určuje sílu přitažlivých interakcí a parametr σ kontroluje hodnotu, ve které dochází k přechodu mezi odpudivými a přitažlivými interakcemi. Určete vzdálenost r, pro kterou je dosažena největší hodnota přitažlivých interakcí, a nalezněte maximální hodnotu funkce θ. Dá se ukázat, že hustota procesu je stabilní ve smyslu Ruelleho. Dokažte, že však není lokálně stabilní pro $\tau > 0$.

4. Považujte jednu nasimulovanou realizaci procesu s měkkým jádrem za pozorovaná data, která chcete modelovat Lennard-Jonesovým procesem. Odhadněte parametry β, τ a σ v tomto modelu. Poté zkuste modelovat data procesem s měkkým jádrem s předem specifikovaným parametrem κ. Odhadněte parametry β a σ v tomto modelu.
Návod: Použijte funkci `ppm` s volbou `LennardJones` nebo `Softcore`.

2. Straussův proces s pevným počtem bodů

Nechť Φ je Straussův proces a $n \in \mathbb{N}$ je pevné. Rozdělení Φ za podmínky $\Phi(B) = n$ je dáno hustotou

$$p_n(\varphi) = \alpha \beta^n \gamma^{S_R(\varphi)}, \quad \varphi \in \mathcal{N}_f : \varphi(B) = n,$$

kde $S_R(\varphi) = \sum_{\{x,y\} \subseteq \varphi} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \leq R]}$. Všimněte si, že člen β^n lze zahrnout do normující konstanty. Tvar hustoty tudíž nezávisí na volbě β.

1. Ukažte, že p_n je integrovatelná pro všechna $\gamma \geq 0$.

2. Vygenerujte realizace Straussova procesu s pevným počtem bodů pro několik různých voleb parametrů γ a R. Pro $\gamma < 1$ by se měly projevovat odpudivé interakce, zatímco pro $\gamma > 1$ se objevují přitažlivé interakce. V případě $\gamma = 1$ dostáváme binomický proces o n bodech.

3. Z realizace procesu odhadněte kontaktní distribuční funkci (označme tento odhad $\hat{F}(r)$) a spočtěte integrální odchylku od kontaktní distribuční funkce $F(r)$ Poissonova procesu:

$$\Delta = \int_0^s |\hat{F}(r) - F(r)| \, \mathrm{d}r,$$

kde s je maximální r, pro které jste obdrželi odhad kontaktní distribuční funkce. Toto proveďte pro různé volby parametrů. Pro které parametry se bude proces málo lišit od Poissonova procesu a kdy naopak hodně?

3. Saturační Geyerův proces

Saturační Geyerův model (saturation process) je modifikací Straussova procesu. Je definován v rovině (tj. $d = 2$). Nechť $R > 0$, $c > 0$, $\beta > 0$ a $\gamma \geq 0$ jsou dané parametry. Označme $m_x(\varphi) = \sum_{y \in \varphi \setminus \{x\}} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \leq R]}$ a $t(\varphi) = \sum_{x \in \varphi} \min(m_x(\varphi), c)$. Definujeme hustotu

$$p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(B)} \gamma^{t(\varphi)}.$$

1. Ověřte, že p je markovská vzhledem k relaci $2R$-sousedství a lokálně stabilní (a tudíž integrovatelná). *Návod:* Potřebujeme omezit výraz $t(\varphi \cup \{x\}) - t(\varphi)$ nějakou konstantou. Z definice zjistíme

$$t(\varphi \cup \{x\}) - t(\varphi) = \min(m_x(\varphi \cup \{x\}), c) + \sum_{y \in \varphi} \left[\min(\mathbf{1}_{[\|x-y\| \leq R]} + m_y(\varphi), c) - \min(m_y(\varphi), c) \right].$$

Kruh o poloměru R a středu x rozdělíme na 6 shodných kruhových výsečí. Bod $y \in \varphi$ splňující $m_y(\varphi) < c$ a $\|x - y\| \leq R$ leží v jedné z těchto výsečí. Všechny body procesu v této výseči jsou od sebe vzdálené nejvýše o R, proto je jich méně než $m_y(\varphi)+1 < c+1$. Odtud odvoďte odhad $t(\varphi \cup \{x\}) - t(\varphi) \leq c + 6(c+1)$.

2. Limitní případ $c = \infty$ vede na Straussův proces s parametry β, γ^2 a R. Pro $c = 0$ jde o Poissonův proces s intenzitou β. Pro $\gamma > 1$ dostáváme model shlukování bodů, pro $\gamma < 1$ se body odpuzují. Případ $\gamma = 1$ odpovídá Poissonovu procesu (úplná nezávislost). Vyberte různé volby parametrů β, γ a R a nasimulujte pro ně realizace saturačního procesu. *Návod:* Proces generujte pomocí volby modelu `geyer` ve funkci `rmh`.

3. Pro některou realizaci z předchozí úlohy odhadněte parametry β a γ za předpokladu, že parametr R je známý. Porovnejte odhadnuté parametry se skutečnými. *Návod:* Použijte funkci `ppm` s volbou `Geyer`.

4. Bodový proces objemových interakcí

Bodový proces s hustotou

$$p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(B)} \gamma^{-|U_{\varphi,R}|},$$

kde $U_{\varphi,R} = \bigcup_{x \in \varphi} b(x, R)$ a $\beta > 0$, $R > 0$, $\gamma > 0$, se nazývá *proces objemových interakcí* nebo také *Widomův-Rowlinsonův proces*. V $d = 2$ se mluví o *procesu plošných interakcí (area-interaction point process)*.

1. Vyjádřete Papangelouovu podmíněnou intenzitu a ukažte, že je omezená, tj. hustota je lokálně stabilní, a proto integrovatelná.

2. Ukažte, že se jedná o markovský proces vzhledem k relaci $2R$-sousedství.

3. Určete interakční funkci z Hammersleyho-Cliffordovy-Ripleyho-Kellyho věty. *Návod:* Výraz $|U_{\varphi,R}|$ lze rozepsat pomocí principu inkluze a exkluze tak, že závisí na Lebesgueových mírách průniků konečného počtu koulí.

4. Vygenerujte realizace procesu plošných interakcí pro několik různých voleb parametrů β, γ a R. Pro $\gamma < 1$ by se měla projevovat regularita (hustota $p(\varphi)$ je velká pro velké hodnoty $|U_{\varphi,R}|$), zatímco pro $\gamma > 1$ by mělo docházet ke shlukování bodů. Pro $\gamma = 1$ se dostává Poissonův bodový proces na B s intenzitou β. *Návod:* Pro simulování použijte funkci `rmh` s volbou `areaint`.

5. Pro některou realizaci z předchozí úlohy odhadněte parametry β a γ za předpokladu, že parametr R je známý. Porovnejte odhadnuté parametry se skutečnými. *Návod:* Použijte funkci `ppm` s volbou `AreaInter`.