

Cvičení STP005 – domácí úlohy

Budeme uvažovat konečné 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 $\beta > 0$, $\theta : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^+$ 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 odpuzivé 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 odpuzivý i přitažlivý. Nejjednodušší netriviální proces s párovými interakcemi je *Straussův proces (Strauss process)*:

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

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 φ s $\varphi(B) > n_0$.

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 `straus`.

3. Zobecněním Straussova procesu s pevným jádrem je *bodový proces s po částech konstantními 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 víceměřtkový proces s pevnými parametry R_i , $i = 1, \dots, 5$ 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. Pro grafické srovnání vykreslete jednu nasimulovanou realizaci bodového procesu s odhadnutými parametry. 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 realizace tohoto bodového procesu pro několik různých voleb parametrů β , 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 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 . Pro grafické srovnání vykreslete jednu nasimulovanou realizaci bodového procesu s odhadnutými parametry.

Návod: Použijte funkci ppm s volbou DiggleGratton.

1c. Procesy s nekonečným rozsahem interakcí

1. Ukažte, že pro každý odpudivý proces je hustota stabilní ve smyslu Ruelleho, a tudíž integrovatelná.
2. Definujme 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 $\kappa \rightarrow 0$ 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 . 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 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. V obou případech vykreslete realizaci nasimulovaného bodového procesu s odhadnutými parametry.

Návod: Použijte funkci ppm s volbou LennardJones nebo Softcore.

2. Saturační Geyerův proces

Saturační Geyerův model (saturation process) je modifikací Straussova procesu. Je definován v rovině (tj. $d = 2$). Nechtě $R > 0$, $c > 0$, $\beta > 0$ 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: Stačí omezit výraz $t(\varphi \cup \{x\}) - t(\varphi)$ nějakou konstantou. 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. Příklad $\gamma = 1$ odpovídá Poissonovu procesu (úplná prostorová náhodnost). Vyberte různé volby parametrů β , γ a R a nasimulujte pro ně realizace saturačního procesu. Pro každou realizaci odhadněte párovou korelační funkci a Clarkův-Evansův index. Prokazují odhady těchto charakteristik odchylky od Poissonova 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. Pro grafické srovnání vykreslete nasimulovanou realizaci bodového procesu s odhadnutými parametry.
Návod: Použijte funkci ppm s volbou Geyer.

3. 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. 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.
3. Vygenerujte realizace procesu plošných interakcí pro několik různých voleb parametrů β, γ a R . Pro $\gamma < 1$ by se měla projevit 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 . 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 `areaint`.
4. Pro některou realizaci z předchozí úlohy odhadněte parametry β a γ za předpokladu, že parametr R je známý. Porovnejte odhadnuté parametry se skutečnými. Pro grafické srovnání vykreslete nasimulovanou realizaci bodového procesu s odhadnutými parametry.
Návod: Použijte funkci `ppm` s volbou `ArealInter`.