Cvičení STP005 – bodové procesy s hustotou

Příklady homogenních bodových procesů s párovými interakcemi

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

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 $\varphi(B) > n_0$.

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. Definujeme *rozsah interakcí (range of interaction)* jako

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

Proces nazveme *odpudivý (repulsive)*, jestliže $\theta(r) \leq 1$ pro všechna $r > 0$. Ukažte, že pro každý odpudivý proces je hustota stabilní ve smyslu Ruelleho, a tudíž integrovatelná.

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 $R = 0$.

1. *Straussův proces (Strauss process)*:

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

přitom pokládáme $0^0 = 1$. Jedná se o nejjednodušší netriviální proces s párovými interakcemi.

2. *Straussův proces s pevným jádrem (Strauss hard-core process)*:

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

Proces je dobře definován pro $\gamma \geq 0$ a $R > h > 0$. Jde o proces s pevným jádrem h a rozsahem interakcí R.

3. *víceměřítkový proces (multiscale process)*:

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

kde $\gamma_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, k$, $\gamma_{k+1} = 1$, $0 = R_0 < R_1 < \ldots R_k < R_{k+1} = \infty$, $k \in \mathbb{N}$. Tedy rozsah interakcí je $R = R_k$ a pokud $\gamma_1 = 0$, jde o proces s pevným jádrem R_1.

Ukažte, že p je integrovatelná vzhledem k rozdělení Poissonova procesu s jednotkovou intenzitou na omezené množině B, pokud

a) $0 < \gamma_1 \leq 1$ a $0 \leq \gamma_2, \ldots, \gamma_k \leq 1$, nebo
b) $\gamma_1 = 0$ a $\gamma_2, \ldots, \gamma_k \geq 0$.

Víceměřítkový proces umožňuje modelovat různé typy párových interakcí v různých měřítkách. Pro $k = 1$ jde o Straussův proces. Pro $k = 2$ a $\gamma_1 = 0$ dostaneme Straussův proces s pevným jádrem.

4. *proces s lineárně se měnícími interakcemi*:

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

kde $R > 0$. Zatímco ve Straussově procesu je θ po částech konstantní, zde je θ lineární. Podobně můžeme dostat modifikaci víceměřítkového procesu nahrazením po částech konstantní funkce funkcí po částech lineární.

5. *Diggleův-Grattonův proces*:

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

Parametry modelu jsou $0 \le \delta \le R$ a $\kappa \ge 0$. Jedná se o zobecnění předchozího procesu ($\kappa = 1$, $\delta = 0$). Opět 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.

6. *Diggleův-Gatesův-Stibbardové proces*:

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

Je to další příklad odpudivého procesu s rozsahem interakcí $R > 0$.

7. *proces překrývajících se ploch (overlap area process)*:

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

kde $0 \le \gamma \le 1$ a $R > 0$. Tento proces je motivován představou, že body procesu jsou středy kulových oblastí (zóny vlivu) o průměru R. Interakce jsou odpudivé a jejich velikost závisí na míře průniku těchto zón vlivu. Jak víme z jednoho z předchozích cvičení, tak pro $d = 2$ je $|b(x, R/2) \cap b(y, R/2)| = \frac{R^2}{2} \arccos \frac{r}{R} - \frac{r}{2}\sqrt{R^2 - r^2}$ pro $r \le R$. Rozsah interakcí je R, pokud $\gamma < 1$. Pro $\gamma = 0$ dostáváme proces s pevným jádrem R (podle úmluvy je $0^0 = 1$). Pro $\gamma = 1$ jde o Poissonův proces.

8. *proces s měkkým jádrem (soft-core process)*:

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

kde $\sigma \ge 0$ a $\kappa > 0$. Jde o příklad procesu s nekonečným rozsahem interakcí. Proces má odpudivé interakce, které 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.

9. *Lennard-Jonesův proces*:

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

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. Dokažte, že hustota procesu je stabilní ve smyslu Ruelleho, přitom není lokálně stabilní pro $\tau > 0$.

Balíček spatstat v současné verzi umožňuje simulovat Metropolisovým-Hastingsovým algoritmem pomocí funkce rmh tyto modely: Straussův proces (strauss), Straussův proces s pevným jádrem (straush), proces s měkkým jádrem (sftcr), Diggleův-Gatesův-Stibbardové proces (dgs), Diggleův-Grattonův proces (diggra) i libovolný homogenní bodový proces s párovými interakcemi s po částech konstantní funkcí θ zadanou uživatelem (lookup). Dále spatstat nabízí možnost fitovat např. Straussův proces (Strauss), Straussův proces s pevným jádrem (StraussHard), proces s měkkým jádrem (Softcore), Diggleův-Grattonův proces (DiggleGratton), Lennard-Jonesův proces (LennardJones) nebo bodový proces s párovými interakcemi specifikovaný uživatelem (Pairwise, PairPiece).

Straussův proces s pevným počtem bodů

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

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

kde $S_R(\varphi) = \sum_{\{x,y\} \subseteq \varphi} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \le R]}$. Ukažte, že p_n je integrovatelná pro všechna $\gamma \ge 0$.

Saturační Geyerův proces

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

$$p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(\mathbb{R}^2)} \gamma^{t(\varphi)}.$$

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

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

Kruh o poloměru R a středu x rozdělíme na 6 shodných kruhových výsečí. Bod $y \in \varphi$ splňující $m_y(\varphi) < c$ a $\|x - y\| \le R$ 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 $t(\varphi \cup \{x\}) - t(\varphi) \le c + 6(c+1)$.

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).

V balíčku spatstat je možné tento proces generovat Metropolisovým-Hastingsovým algoritmem pomocí volby modelu geyer ve funkci rmh. Taky je možné fitovat tento model na data pomocí funkce Geyer.

Geyerův proces s trojnými interakcemi

Geyer zavedl rovinný proces, který zobecňuje Straussův proces přidáním členu, který je definován pomocí trojic bodů. Hustota má následující tvar ($d = 2$)

$$p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(\mathbb{R}^2)} \gamma^{S_R(\varphi)} \delta^{T_R(\varphi)},$$

kde

$$S_R(\varphi) = \sum_{\{x,y\} \subseteq \varphi} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \le R]}, \quad T_R(\varphi) = \sum_{\{x,y,z\} \subseteq \varphi} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \le R, \|x-z\| \le R, \|y-z\| \le R]}.$$

Ukažte, že hustota je lokálně stabilní (a tudíž integrovatelná), pokud $\beta > 0$, $R > 0$ a
a) $0 \le \gamma \le 1$ a $0 \le \delta \le 1$, nebo
b) $\gamma > 1$ a $0 < \delta < 1$.

Návod: V případě b) potřebujeme omezit výraz $S_R(\varphi \cup \{x\}) - S_R(\varphi)$ shora a výraz $T_R(\varphi \cup \{x\}) - T_R(\varphi)$ zdola. Oba výrazy závisí pouze na bodech procesu v kruhu o poloměru R. Rozdělme kruh $b(x, R)$ na šest shodných kruhových výsečí. Nechť k_i značí počet bodů v i-té výseči, $i = 1, \dots, 6$. Protože všechny body v jedné výseči jsou R-sousedé a také R-sousedé x, tak $S_R(\varphi \cup \{x\}) - S_R(\varphi) = \sum_{i=1}^6 k_i$ a $T_R(\varphi \cup \{x\}) - T_R(\varphi) \ge \sum_{i=1}^6 \binom{k_i}{2}$. Papangelouova podmíněná intenzita se tak dá odhadnout výrazem $\beta \gamma^{\sum_{i=1}^6 k_i} \delta^{\sum_{i=1}^6 \binom{k_i}{2}}$, který lze omezit konstantou, protože funkce $k - \binom{k}{2}$ nabývá maxima na $(0, \infty)$.

Ukažte, že se jedná o markovský bodový proces vzhledem k relaci R-sousedství a určete interakční funkci z Hammersleyho-Cliffordovy-Ripleyho-Kellyho věty.

Bodový proces objemových interakcí

Bodový proces s hustotou

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

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)*.

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

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.

Simulace konečných bodových procesů metodami MCMC

Metody MCMC jsou založené na konstrukci markovského řetězce, jehož limitní rozdělení je to, ze kterého chceme simulovat. Nechť Φ je konečný bodový proces s hustotou p vzhledem k rozdělení Poissonova procesu s mírou intenzity Λ. Naším cílem je simulovat realizaci tohoto procesu. To lze provést pomocí speciálního případu tzv. Metropolisova-Hastingsova-Greenova algoritmu.

Nejprve budeme uvažovat případ simulace bodového procesu s pevným počtem bodů. Hustota $p(\varphi)$ je soustředěna na $\mathcal{N}_n = \{\varphi : \varphi(\mathbb{R}^d) = n\}$.

Metropolisův-Hastingsův algoritmus pro pevný počet bodů:

Pro $t = 0, 1, \dots$ a dané $\Phi_t = \varphi \in \mathcal{N}_n$, generuj Φ_{t+1} následovně:

1. generuj $x \in \mathbb{R}^d$ a $y \in \varphi$ z návrhového rozdělení s hustotou $q(\varphi, x, y)$ vzhledem k míře $\Lambda \times \mu$, kde μ je diskrétní míra s atomy v bodech φ,
2. návrh $(\varphi \cup \{x\}) \setminus \{y\}$ přijmi s pravděpodobností $\alpha(\varphi, x, y) = \min(1, h(\varphi, x, y))$, kde

$$h(\varphi, x, y) = \frac{q((\varphi \cup \{x\}) \setminus \{y\}, y, x) p((\varphi \setminus \{x\}) \cup \{y\})}{q(\varphi, x, y) p(\varphi)}.$$

Nejjednodušší volba je $q(\varphi, x, y) = \frac{1}{n\Lambda(\mathbb{R}^d)}$, tedy návrh vzniká tak, že jeden z n bodů procesu (rovnoměrně náhodně zvolený) se nahradí bodem vygenerovaným z rovnoměrného rozdělení vzhledem k míře Λ. V tomto případě je

$$h(\varphi, x, y) = \frac{p((\varphi \setminus \{x\}) \cup \{y\})}{p(\varphi)},$$

neboli návrh, který vede k větší hodnotě hustoty je přijat vždy.

Nyní uvažujme případ s náhodným počtem bodů.

Metropolisův-Hastingsův algoritmus zrození a zániku (birth-death Metropolis-Hastings algorithm):

Pro $t = 0, 1, \dots$ a dané $\Phi_t = \varphi \in \mathcal{N}$, generuj Φ_{t+1} následovně:

1. s pravděpodobností $Q(\varphi)$ navrhni přidání bodu x s hustotou $b(\varphi, x)$ vzhledem k Λ, s pravděpodobností $1 - Q(\varphi)$ navrhni ubrání bodu y s pravděpodobností $d(\varphi, y)$, $y \in \varphi$,
2. návrh přijmi (buď $\Phi_{t+1} = \varphi \cup \{x\}$, nebo $\Phi_{t+1} = \varphi \setminus \{y\}$) s pravděpodobností $\alpha(\varphi, \varphi \cup \{x\}) = \min(1, h(\varphi, x))$, nebo $\alpha(\varphi \cup \{x\}, \varphi) = \min\left(1, \frac{1}{h(\varphi, x)}\right)$, kde

$$h(\varphi, x) = \lambda^*(\varphi, x) \cdot \frac{1 - Q(\varphi \cup \{x\})}{Q(\varphi)} \cdot \frac{d(\varphi \cup \{x\}, x)}{b(\varphi, x)},$$

kde $\lambda^*(\varphi, x)$ je Papangelouova podmíněná intenzita. Polož $\Phi_{t+1} = \varphi$, pokud je návrh zamítnut. Často se volí speciálně

$$Q(\cdot) = \frac{1}{2}, \quad b(\cdot, \cdot) = \frac{1}{\Lambda(\mathbb{R}^d)}, \quad d(\varphi \cup \{x\}, \cdot) = \frac{1}{\varphi(\mathbb{R}^d) + 1},$$

tedy $h(\varphi, x) = \lambda^*(\varphi, x) \frac{\Lambda(\mathbb{R}^d)}{\varphi(\mathbb{R}^d)+1}$.