

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Πολιτικών Μηχανικών

Τομέας Δομοστατικής
Εργαστήριο Στατικής και Αντισεισμικών Ερευνών

**Αριθμητική Προσομοίωση Μη Γκαουσιανών
Στοχαστικών Πεδίων και Εφαρμογές σε Διφασικά
Υλικά**

Διπλωματική Εργασία

Γράφων:
Παναγιώτης Παναγόπουλος

Επιβλέποντες:
Μ. Παπαδρακάκης, καθηγητής Ε.Μ.Π.
Γ. Στεφάνου, επίκ. καθηγητής Α.Π.Θ.
Β. Παπαδόπουλος, επίκ. καθηγητής Ε.Μ.Π.



Αθήνα,
9 Νοεμβρίου 2016

Εισαγωγή

Στην παρούσα διπλωματική εργασία ασχολούμαστε με δύο θέματα. Το πρώτο είναι πιο γενικό και αφορά στη αριθμητική προσομοίωση μη Γκαουσιανών στοχαστικών πεδίων και το δεύτερο είναι η εφαρμογή στην ψηφιακή αναπαραγωγή διφασικών υλικών. Και για τα δύο παραπάνω θέματα κρίσιμη είναι η έννοια των μεταβατικών πεδίων-translation fields. Η δομή της εργασίας είναι η εξής. Στο πρώτο κεφάλαιο εισάγονται οι μαθηματικές έννοιες που είναι απαραίτητες για την συνέχεια. Στο δεύτερο κεφάλαιο περιγράφεται η μέθοδος της φασματικής απεικόνισης (spectral representation) για την παραγωγή Γκαουσιανών στοχαστικών πεδίων. Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφονται διάφοροι αλγόριθμοι για την παραγωγή μη Γκαουσιανών στοχαστικών πεδίων κάνοντας χρήση των μεταβατικών πεδίων. Στο τέλος του κεφαλαίου δίδονται αριθμητικά παραδείγματα. Στο τελευταίο κεφάλαιο περιγράφεται πως τα translation fields χρησιμοποιούνται για την ψηφιακή αναπαραγωγή υλικών. Εξετάζεται η περίπτωση τόσο των Γκαουσιανών στοχαστικών πεδίων όσο και των filtered Poisson fields.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Μανώλη Παπαδρακάκη καθηγητή Ε.Μ.Π. που μου έδωσε διπλωματική με θέμα το συγκεκριμένο γνωστικό πεδίο. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Γιώργο Στεφάνου επίκουρο καθηγητή Α.Π.Θ. που ήταν ο ουσιαστικός επιβλέπωντας αυτής της εργασίας, αυτός που με εισήγαγε στην υπολογιστική στοχαστική μηχανική και μου πρότεινε την συγκεκριμένη εφαρμογή στα υλικά. Ακόμα θα ήθελα να ευχαριστήσω όλα τα μέλη της τριμελούς επιτροπής για την ακρόαση και ιδιαίτερα τον επίκουρο καθηγητή Ε.Μ.Π. Βησσαρίων Παπαδόπουλο για την βοήθεια που μου προσέφερε. Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τον φίλο μου Κωνσταντίνο Καραγιάννη για την βοήθεια με την διαμόρφωση του κειμένου στο \LaTeX .

Περιεχόμενα

1	Μαθηματικό υπόβαθρο - Ορισμοί εννοιών	1
1.1	Στοιχεία θεωρίας πιθανοτήτων	1
1.2	Στοχαστικές διαδικασίες	13
2	Προσομοίωση Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών	23
2.1	Η μέθοδος της φασματικής απεικόνισης 1D	23
2.2	Η μέθοδος της φασματικής απεικόνισης 2D	26
3	Προσομοίωση μη Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών	31
3.1	Διαδικασίες μεταφοράς - Translation processes	31
3.2	Ο αλγόριθμος του Grigoriu	32
3.3	Ο αλγόριθμος των Yamazaki και Shinozuka	35
3.4	Ο αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti	37
3.5	Ο αλγόριθμος των Shields, Deodatis και Bocchini	40
3.6	Ο αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis	42
3.6.1	Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα	42
3.6.2	Ο αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης	43
3.6.3	Περιγραφή του αλγόριθμου	46
3.7	Αριθμητικές εφαρμογές	49
4	Τυχαία διφασικά υλικά	53
4.1	Τυχαία Πεδία Αποκοπής (level-cut random fields)	54
4.2	Μη μοναδικότητα της ανακατασκευής	54
4.3	Ο αλγόριθμος των Feng-Li-Cen-Owen	55
4.4	Level-cut filtered Poisson fields	60
4.5	Προσομοίωση Monte-Carlo	64
	Σύνοψη	69
	A' Αλγόριθμοι εύρεσης του πλησιέστερου πίνακα συσχέτισης	71
	Βιβλιογραφία	77

Κατάλογος σχημάτων

1.1	Αθροιστική συνάρτηση πιθανότητας ομοιόμορφης κατανομής	3
1.2	Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ομοιόμορφης κατανομής	4
1.3	Συνάρτηση πυκνότητας-πιθανότητας κανονικής κατανομής	8
1.4	Συνάρτηση πυκνότητας-πιθανότητας κανονικής δισδιάστατης κατανομής	10
1.5	Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας λογαριθμοκανονικής κατανομής	11
1.6	Προσέγγιση της κατανομής Poisson από κανονική κατανομή	13
1.7	Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία	15
1.8	Συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος	19
1.9	Ιδανικός λευκός θόρυβος	20
1.10	Λευκός θόρυβος περιορισμένου εύρους	21
1.11	Αρμονικό στοχαστικό πεδίο	21
2.1	Εργοδικότητα του πεδίου	25
2.2	Σύγκλιση του πεδίου προς Γκαουσιανό πεδίο	25
2.3	Δείγμα πεδίου σε μήκος μίας περιόδου	26
3.1	Ο Αλγόριθμος του Grigoriu	34
3.2	Ο Αλγόριθμος των Yamazaki και Shinozuka	36
3.3	Ο Αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti	39
3.4	Ο αλγόριθμος των Shields, Deodatis και Bocchini	41
3.5	Ο νευρώνας του Rosenblatt (Rosenblatt's Perceptron)	42
3.6	Πολυεπίπεδο νευρωνικό δίκτυο (multilayer neural network)	43
3.7	Ο Αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis (A)	47
3.8	Ο Αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis (B)	48
3.9	Περίπτωση (i)	49
3.10	Περίπτωση (ii)	50
3.11	Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (i) με χρήση του αλγόριθμου των Shields, Deodatis και Bocchini	50
3.12	Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (ii) με χρήση του αλγόριθμου των Shields, Deodatis και Bocchini	51
3.13	Περίπτωση (i) με χρήση νευρωνικού δικτύου	52
3.14	Περίπτωση (ii) με χρήση νευρωνικού δικτύου	52
4.1	Καμπύλες $R_I - R_G$	57
4.2	Δείγμα υλικού	59

4.3	Δείγμα υλικού	60
4.4	Δείγμα από filtered Poisson field με παραμέτρους $\lambda = 0.05, 0.5, 1, 5$	62
4.5	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	65
4.6	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	66
4.7	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	66
4.8	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	67
4.9	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	67
4.10	Δείγμα υλικού από filtered Poisson field	68

Κεφάλαιο 1

Μαθηματικό υπόβαθρο - Ορισμοί εννοιών

1.1 Στοιχεία θεωρίας πιθανοτήτων

Ορισμός 1.1.1. Έστω Ω σύνολο. Μια οικογένεια $\mathcal{F} \subseteq \mathbb{P}(\Omega)$ λέγεται σ -άλγεβρα αν έχει τις εξής ιδιότητες:

- $\emptyset \in \mathcal{F}$
- αν $A \in \mathcal{F}$, τότε $\Omega/A \in \mathcal{F}$
- η \mathcal{F} είναι κλειστή στις αριθμήσιμες ενώσεις, δηλαδή αν $(A_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{F}$ τότε $\bigcup_{n \in \mathbb{N}} A_n \in \mathcal{F}$

Έστω Ω σύνολο και \mathcal{F} σ -άλγεβρα στο Ω . Ονομάζουμε το ζεύγος (Ω, \mathcal{F}) μετρήσιμο χώρο.

Παράδειγμα 1.1.2. Έστω Ω σύνολο και $\mathcal{F} = \mathbb{P}(\Omega)$ το δυναμοσύνολο του (δηλαδή το σύνολο όλων των υποσυνόλων του Ω). Τότε το ζεύγος (Ω, \mathcal{F}) είναι μετρήσιμος χώρος.

Παράδειγμα 1.1.3. Έστω (X, T) ένας τοπολογικός χώρος. Η σ -άλγεβρα $\sigma(T)$ που παράγεται από την T δηλαδή την οικογένεια όλων των ανοιχτών συνόλων του X με $\sigma(T) = \bigcup_{A \in J} A$ με $J := \{A \subseteq P(X) : A \supseteq T\}$ όπου A είναι σ -άλγεβρα ονομάζεται Borel σ -άλγεβρα και τα στοιχεία της Borel σύνολα και συμβολίζεται $\mathcal{B}(X)$. Συνήθως $X = \mathbb{R}^n$ με την ευκλείδεια τοπολογία.

Ορισμός 1.1.4 (Μέτρο πιθανότητας). Μέτρο πιθανότητας στον (Ω, \mathcal{F}) λέμε κάθε συνάρτηση $\mathcal{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, \infty]$ που ικανοποιεί τις ιδιότητες:

- $\mathcal{P}(\emptyset) = 0$
- $\mathcal{P}\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{P}(A_n)$ για κάθε ακολουθία $(A_n)_{n \geq 1}$ ξένων ανά δύο στοιχείων της \mathcal{F}
- $\mathcal{P}(\Omega) = 1$

Έστω Ω σύνολο το οποίο είναι γνωστό και σαν δειγματικός χώρος, \mathcal{F} σ -άλγεβρα στο Ω και \mathcal{P} μέτρο πιθανότητας στον (Ω, \mathcal{F}) . Ονομάζουμε χώρο πιθανότητας την τριάδα $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$.

Παράδειγμα 1.1.5. Θεωρούμε το πείραμα της ρίψης ενός αμερόληπτου ζαριού. Τότε $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ και $\mathcal{F} = \mathbb{P}(\Omega)$. Το κατάλληλο μέτρο που μοντελοποιεί το πείραμα είναι το $\mathcal{P}(\{\omega\}) = \frac{1}{6}$ για κάθε $\omega \in \Omega$.

Παράδειγμα 1.1.6. Έστω $\Omega = [0, 1]$ και $\mathcal{F} = \mathcal{B}(\Omega)$. Τότε το μέτρο $\mathcal{P}(I) = \text{μήκος}(I)$ είναι μέτρο πιθανότητας στον χώρο (Ω, \mathcal{F}) και ονομάζεται μέτρο Lebesgue.

Ορισμός 1.1.7 (Τυχαία μεταβλητή). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ και (E, \mathcal{E}) μετρήσιμος χώρος. Μια συνάρτηση $X : \Omega \rightarrow E$ λέγεται τυχαία μεταβλητή αν είναι \mathcal{F}/\mathcal{E} μετρήσιμη δηλαδή αν $X^{-1}(A) \in \mathcal{F}$ για κάθε $A \in \mathcal{E}$.

Συνήθως $E = \mathcal{R}$ και $\mathcal{E} = \mathcal{B}(\mathcal{R})$ τα Borel μετρήσιμα σύνολα. Από εδώ και πέρα όταν θα λέμε τυχαία μεταβλητή θα αναφερόμαστε σε αυτή την περίπτωση εκτός αν αναφέρεται κάτι διαφορετικό.

Παράδειγμα 1.1.8. Θεωρούμε το πείραμα ρίψης ενός νομίσματος δύο φορές. Ένας κατάλληλος δειγματικός χώρος για την περιγραφή του είναι το $\Omega = \{(K, K), (K, \Gamma), (\Gamma, K), (\Gamma, \Gamma)\}$. Το $\mathbb{F} = \mathbb{P}(\Omega)$ και η συνάρτηση

$$X(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{αν } \omega = (K, K) \\ 1 & \text{αν } \omega = \{(K, \Gamma), (\Gamma, K)\} \\ 2 & \text{αν } \omega = (\Gamma, \Gamma) \end{cases}$$

είναι τυχαία μεταβλητή και εκφράζει τον αριθμό εμφανίσεων της όψης «γράμματα».

Ορισμός 1.1.9 (Αθροιστική συνάρτηση κατανομής πιθανότητας - Cumulative Distribution Function, cdf). Έστω λοιπόν X μια τυχαία μεταβλητή. Ορίζουμε την αθροιστική συνάρτηση κατανομής πιθανότητας $\mathbb{F}(x) = \mathbb{P}(\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x)$, $x \in \mathbb{R}$.

Πρόταση 1.1.10. Έστω F η συνάρτηση κατανομής της τυχαίας μεταβλητής X . Τότε ισχύουν τα παρακάτω:

- $0 \leq F(x) \leq 1$ για κάθε $x \in \mathbb{R}$
- $F(x_1) \leq F(x_2)$ για κάθε $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ $x_1 \leq x_2$ δηλαδή η F είναι αύξουσα
- Για κάθε φθίνουσα ακολουθία $x_n \in \mathbb{R}$ με $x_n \downarrow x$ θα ισχύει ότι $F(x+) = \lim_{n \rightarrow \infty} F(x_n) = F(x)$ δηλαδή η F είναι συνεχής από δεξιά
- Ισχύουν οι οριακές σχέσεις $F(-\infty) \equiv \lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0$ και $F(+\infty) \equiv \lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1$

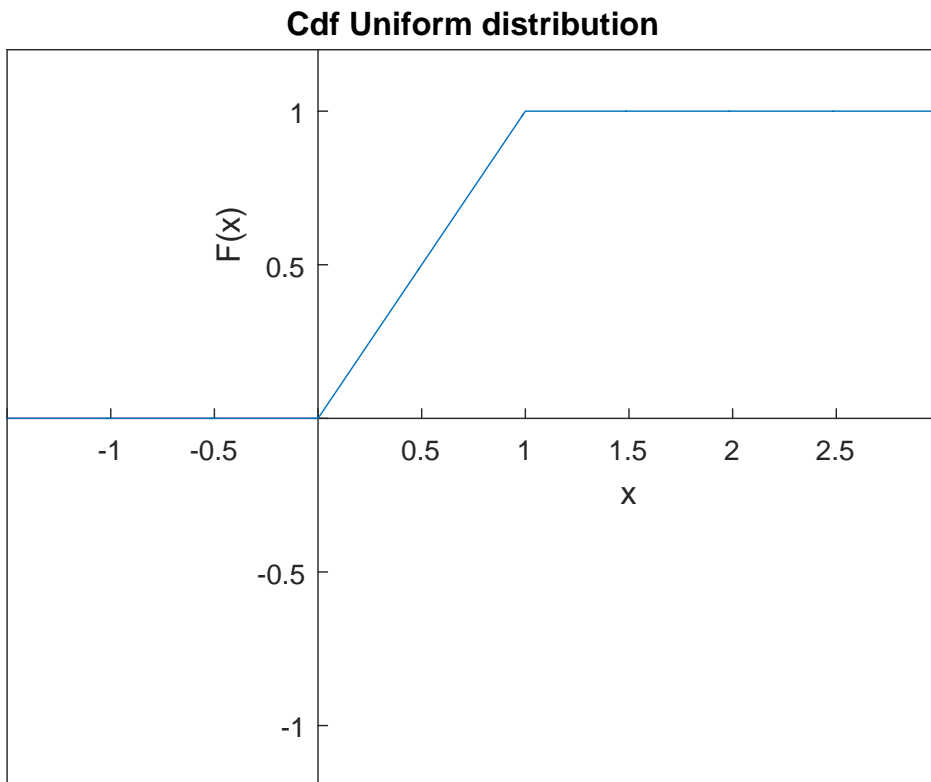
Επίσης ισχύει και το αντίστροφο δηλαδή κάθε συνάρτηση F που παίρνει τιμές στο $[0, 1]$ είναι αύξουσα, συνεχής από δεξιά και ισχύουν οι δύο παραπάνω οριακές σχέσεις είναι η αθροιστική συνάρτηση κατανομής κάποιας τυχαίας μεταβλητής X .

Παράδειγμα 1.1.11 (Ομοιόμορφη κατανομή). Ας θεωρήσουμε μια τυχαία μεταβλητή X με τιμές x στο διάστημα $[0, 1]$ και ας υποθέσουμε ότι η συνολική πιθανότητα $\mathcal{P}(0 \leq X \leq 1)$ είναι ομοιόμορφα κατανομημένη στο διάστημα $[0, 1]$ (κατά το ανάλογο της ομοιόμορφης κατανομής της μάζας μιας ράβδου με άκρα τα σημεία 0 και 1). Στην περίπτωση αυτή η πιθανότητα η να

βρίσκεται στο διάστημα $(x_1, x_2]$ με $0 \leq x_1 < x_2 \leq 1$ είναι ανάλογη του μήκους του διαστήματος $x_2 - x_1$ δηλαδή $\mathcal{P}(x_1 \leq X \leq x_2) = c(x_2 - x_1)$ όπου c η σταθερά αναλογίας. Επιπλέον έχουμε $\mathcal{P}(-\infty < X < 0) = 0$ και $\mathcal{P}(1 < X < +\infty) = 1$ και επομένως θέτοντας $x_1 = 0, x_2 = 1$ λαμβάνουμε $c = 1$.

Η συνάρτηση κατανομής F δίδεται από την

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{αν } -\infty \leq x < 0 \\ x & \text{αν } 0 \leq x < 1 \\ 1 & \text{αν } 1 \leq x < +\infty \end{cases}$$



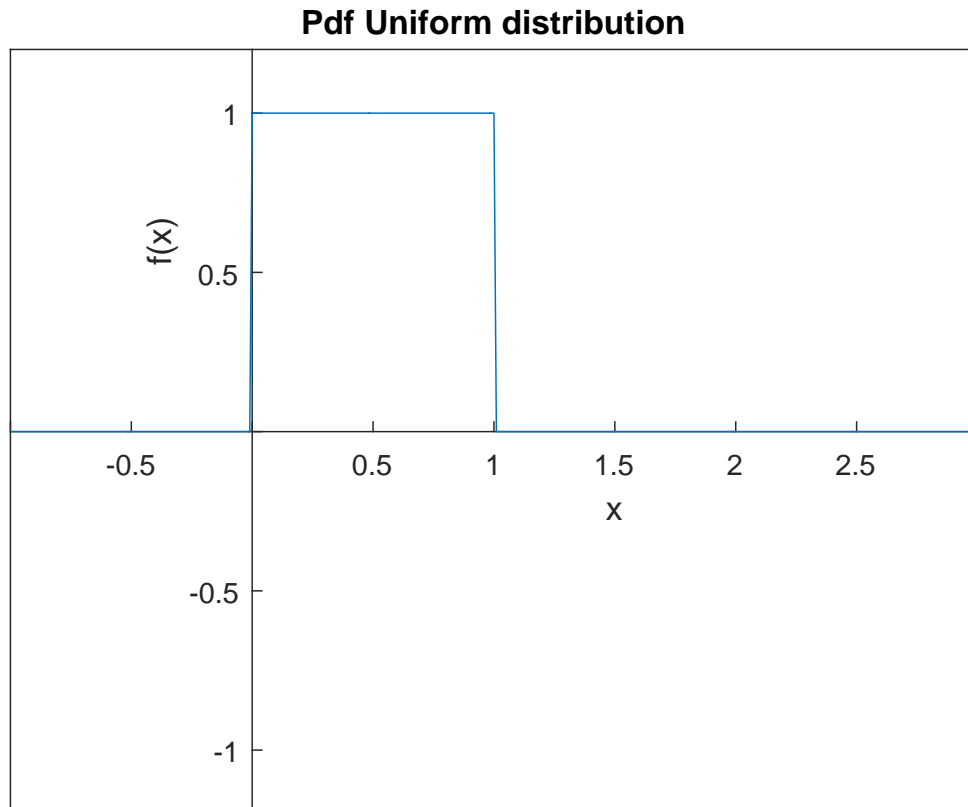
Σχήμα 1.1: Αθροιστική συνάρτηση πιθανότητας ομοιόμορφης κατανομής

Ορισμός 1.1.12 (Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας - Probability Density Function, pdf). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$, X τυχαία μεταβλητή, λ το μέτρο Lebesgue και $f : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty]$ Borel-μετρήσιμη συνάρτηση. Λέμε ότι η f είναι πυκνότητα της τυχαίας μεταβλητής αν ισχύει ότι $F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)d\lambda(x)$, για κάθε $x \in \mathbb{R}$.

Με βάση τον παραπάνω ορισμό αν η f είναι συνεχής ισχύει η σχέση $f(x) = \frac{dF}{dx}$ για κάθε $x \in \mathbb{R}$.

Παράδειγμα 1.1.13 (Ομοιόμορφη κατανομή). Παραγωγίζοντας την συνάρτηση κατανομής F έχουμε

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{αν } x < 0 \text{ και } x > 1 \\ 1 & \text{αν } 0 \leq x \leq 1 \end{cases}$$



Σχήμα 1.2: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ομοιόμορφης κατανομής

Ορισμός 1.1.14 (Ροπές τυχαίας μεταβλητής). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ και $X : \Omega \rightarrow [-\infty, +\infty]$ τυχαία μεταβλητή. Η μέση τιμή $E(X)$ της X ορίζεται ως $\mu = E(X)$ εφόσον το δεξί μέλος μπορεί να οριστεί. Επίσης ορίζουμε ροπή r τάξης της τυχαίας μεταβλητής $\mu_r = E(X^r)$ και την κεντρική ροπή r τάξης της τυχαίας μεταβλητής $\mu_r = E((X - \mu)^r)$. Ειδικότερα ονομάζουμε την ροπή δεύτερης τάξης της τυχαίας μεταβλητής διασπορά (variance) $\text{var}(X) = \sigma^2 = \mu_2 = E((X - \mu)^2)$.

Μια τυχαία μεταβλητή μπορεί να προσδιοριστεί πλήρως αν γνωρίζουμε όλες τις ροπές της.

Έστω $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μετρήσιμη συνάρτηση και X τυχαία μεταβλητή. Τότε ισχύει ότι

$$E(g(X)) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)f(x)dx \quad (1.1)$$

όπου f είναι η pdf της X .

Ορισμός 1.1.15 (Από κοινού συνάρτηση κατανομής - Joint cumulative distribution function, cdf). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ και $X, Y : \Omega \rightarrow [-\infty, +\infty]$ δύο τυχαίες μεταβλητές. Ορίζουμε σαν από κοινού συνάρτηση κατανομής την συνάρτηση $\mathbf{F} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ με

$$\mathbf{F}(x, y) = \mathbf{P}(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x, Y(\omega) \leq y\}). \quad (1.2)$$

Πρόταση 1.1.16. Έστω \mathbf{F} η από κοινού συνάρτηση κατανομής των τυχαίων μεταβλητών X, Y . Τότε ισχύουν τα παρακάτω:

- $0 \leq F(x, y) \leq 1$ για κάθε $(x, y) \in \mathbb{R}^2$
- $F(x_1, y) \leq F(x_2, y)$ για κάθε $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ με $x_1 \leq x_2$ και $y \in \mathbb{R}$ σταθερό δηλαδή η F είναι αύξουσα ως προς την μεταβλητή x . Όμοια και για την μεταβλητή y
- Ικανοποιεί την ανισότητα $F(x_2, y_2) - F(x_2, y_1) - F(x_1, y_2) + F(x_1, y_1) \geq 0$
- Για κάθε φθίνουσα ακολουθία $x_n \in \mathbb{R}$ $x_n \downarrow x$ και $y \in \mathbb{R}$ σταθερό ισχύει ότι η F είναι συνεχής από δεξιά ως προς την μεταβλητή x δηλαδή $F(x, y) = \lim_{n \rightarrow \infty} F(x_n, y)$. Όμοια και για την μεταβλητή y
- Ισχύουν οι οριακές σχέσεις $F(-\infty, y) \equiv \lim_{x \rightarrow -\infty} F(x, y) = 0$, $F(x, -\infty) \equiv \lim_{y \rightarrow -\infty} F(x, y) = 0$ και $F(+\infty, +\infty) \equiv \lim_{x, y \rightarrow \infty} F(x, y) = 1$

Επίσης ισχύει και το αντίστροφο δηλαδή κάθε συνάρτηση F που παίρνει τιμές στο $[0, 1]$ είναι αύξουσα ως προς κάθε μεταβλητή, συνεχής από δεξιά ως προς κάθε μεταβλητή και ισχύουν η ανισότητα και οι τρεις παραπάνω οριακές σχέσεις είναι η από κοινού αθροιστική συνάρτηση κατανομής κάποιων τυχαίων μεταβλητών X, Y .

Το όριο $F(x, +\infty) \equiv \lim_{y \rightarrow +\infty} F(x, y) = F_X(x)$ είναι γνωστό ως περιθώρια συνάρτηση κατανομής (marginal cumulative distribution function) της X . Όμοια ορίζεται η Y περιθώρια συνάρτηση κατανομής.

Ορισμός 1.1.17 (Από κοινού πυκνότητα πιθανότητας - Joint probability density function, pdf). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$, $X, Y : \Omega \rightarrow [-\infty, +\infty]$ δύο τυχαίες μεταβλητές, λ το μέτρο Lebesgue και $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0, +\infty]$ Borel-μετρήσιμη συνάρτηση. Λέμε ότι η είναι πυκνότητα της τυχαίας μεταβλητής X αν ισχύει ότι

$$\mathbf{P}(\{\omega \in \Omega : (X(\omega), Y(\omega)) \in A\}) = \int_A f d\lambda$$

για κάθε $A \subseteq \mathbb{R}^2$ Borel-μετρήσιμο σύνολο και λ το μέτρο Lebesgue στο \mathbb{R}^2 .

Με βάση τον παραπάνω ορισμό αν η f είναι συνεχής ισχύει η σχέση $f(x, y) = \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$ για κάθε $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

Αν για την περιθώρια συνάρτηση πυκνότητας F_X υπάρχει η pdf f_X αυτή ονομάζεται περιθώρια συνάρτηση πυκνότητας και αν είναι συνεχής ισχύει ότι $f_X(x) = \frac{dF_X}{dx}$.

Ορισμός 1.1.18 (Συσχέτιση και Συνδυακόμενη - Correlation and Covariance). Έστω X, Y δύο τυχαίες μεταβλητές με μέση τιμή m_X και m_Y αντίστοιχα και $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ η από κοινού συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας. Ορίζουμε σαν συσχέτιση R_{XY} και σαν συνδυακόμενη C_{XY} τις τιμές:

$$R_{XY} = E(XY) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} xyf(x, y) dx dy \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} C_{XY} &= E((X - m_X)(Y - m_Y)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - m_X)(y - m_Y)f(x, y) dx dy \\ &= R_{XY} - m_X m_Y \end{aligned} \quad (1.4)$$

Επίσης ορίζουμε σαν συντελεστή συσχέτισης των δύο τυχαίων μεταβλητών (correlation coefficient) την αδιάστατη τιμή

$$\rho = \frac{C_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (1.5)$$

όπου από την ανισότητα Cauchy - Schartz προκύπτει ότι $|\rho_{XY}| \leq 1$.

Ονομάζουμε τις τυχαίες μεταβλητές ανεξάρτητες αν $E(XY) = E(X)E(Y)$ ενώ ασυσχέτιστες αν $C_{XY} = 0$. Ισχύει ότι αν είναι ανεξάρτητες είναι και ασυσχέτιστες ενώ το αντίστροφο δεν ισχύει πάντα. Ανάλογα ορίζουμε τις παραπάνω έννοιες για παραπάνω από δύο τυχαίες μεταβλητές.

Ορισμός 1.1.19 (Πίνακας συσχέτισης). Έστω χώρος πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ και $X = (X_1, \dots, X_d) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ τυχαία μεταβλητή. Ορίζουμε σαν πίνακα συσχέτισης τον

$$R = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \dots & \rho_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{d1} & \dots & \rho_{dd} \end{pmatrix}$$

με $\rho_{ij} = \rho_{X_i X_j} = \frac{C_{X_i X_j}}{\sigma_{X_i} \sigma_{X_j}}$ και έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- $\rho_{ii} = 1$ για κάθε $i = 1, 2, \dots, d$
- $\rho_{ij} = \rho_{ji}$ για κάθε $i, j = 1, 2, \dots, d$
- Ο R είναι μη αρνητικά ορισμένος δηλαδή για κάθε $a = (a_1, \dots, a_d) \in \mathbb{R}^d$ ισχύει ότι $aRa^T \geq 0$.

Ισχύει και το αντίστροφο δηλαδή αν ο πίνακας R έχει τις παραπάνω ιδιότητες υπάρχει τυχαία μεταβλητή $X = (X_1, \dots, X_d) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ της οποίας είναι ο πίνακας συσχέτισης.

Η σημαντικότερη κατανομή πιθανότητας τόσο από θεωρητική άποψη όσο και από άποψη εφαρμογών είναι η κανονική ή Γκαουσιανή κατανομή.

Ορισμός 1.1.20 (Κανονική ή Γκαουσιανή Κατανομή). Μια συνεχής τυχαία μεταβλητή X με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f_X : \mathbb{R} \rightarrow (0, +\infty)$ που δίδεται από την σχέση

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma_X \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{x - \mu_X}{\sigma_X} \right)^2 \right\} \quad (1.6)$$

λέγεται κανονική τυχαία μεταβλητή και συμβολίζεται με $N(\mu_X, \sigma_X^2)$ ενώ για τις παραμέτρους ισχύει $-\infty < \mu_X < +\infty$ και είναι η μέση τιμή της X και $0 < \sigma_X < +\infty$ είναι η τυπική απόκλιση της X .

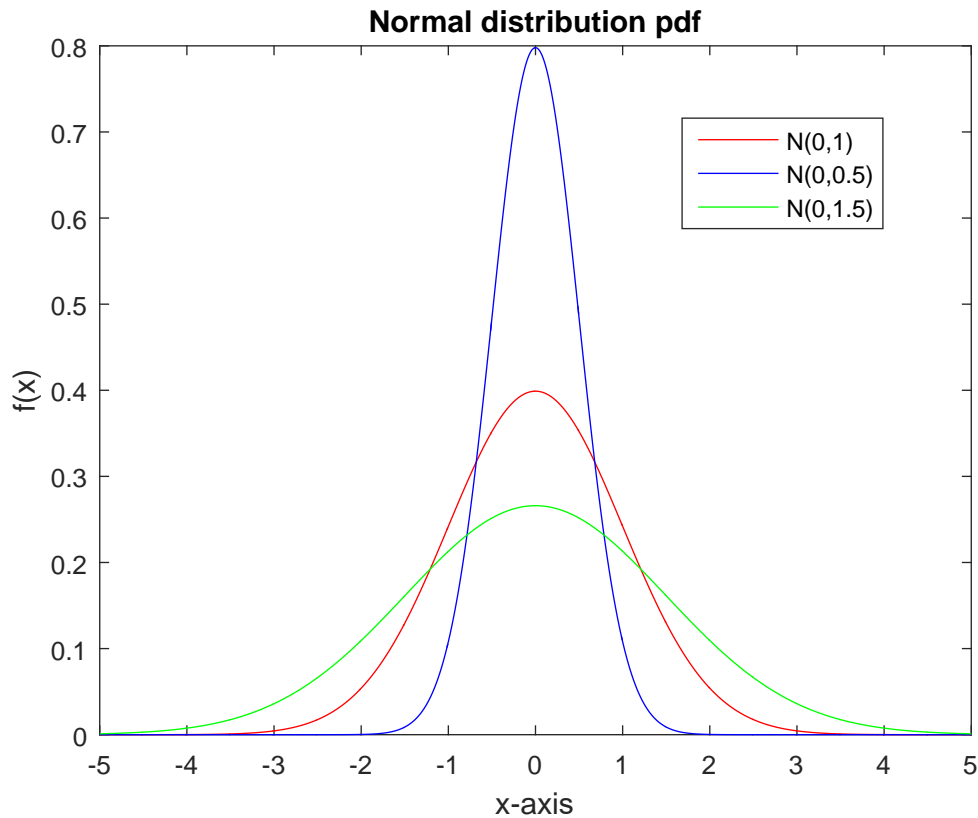
Στην ειδική περίπτωση που $\mu_X = 0$ και $\sigma_X = 1$ λέμε ότι η $N(0, 1)$ λέγεται κανονική κατανομή (standard normal distribution).

Οι κανονικές τυχαίες μεταβλητές έχουν διάφορες χρήσιμες ιδιότητες. Οι πιο σημαντικές από αυτές είναι:

- Αν η τυχαία μεταβλητή Y προκύπτει από έναν γραμμικό μετασχηματισμό μίας κανονικής τυχαίας μεταβλητής X , τότε η Y ακολουθεί και αυτή την κανονική κατανομή.
- Αν η τυχαία μεταβλητή X ακολουθεί την κατανομή $N(\mu_X, \sigma_X^2)$, τότε ισχύει η σχέση:

$$\mathbf{E}(X^n) = \mu_X \mathbf{E}(X^{n-1}) + (n-1)\sigma_X^2 \mathbf{E}(X^{n-2})$$

και επομένως όλες οι στατιστικές ροπές ανώτερης τάξης μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει των $\mu_X = 0$ και $\sigma_X = 1$.



Σχήμα 1.3: Συνάρτηση πυκνότητας-πιθανότητας κανονικής κατανομής

Η χρησιμότητα της κανονικής κατανομής φαίνεται από το παρακάτω.

Θεώρημα 1.1.21 (Κεντρικό οριακό θεώρημα). Έστω $X_n, n \geq 1$ ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με $\mathbf{E}(X_1) = \mu_X$ και $\text{var}(X_1) = \sigma_X^2 < \infty$. Για κάθε $n \geq 1$ θέτουμε $S_n = X_1 + \dots + X_n$ και $Z_n = \frac{S_n - n\mu_X}{\sqrt{n\sigma_X^2}}$. Τότε ισχύει ότι $F_{Z_n}(x) \rightarrow \Phi(x)$ για κάθε $x \in \mathbb{R}$ δηλαδή η ακολουθία των Z_n συγκλίνει κατά κατανομή στην $N(0, 1)$ ($\Phi(x)$ είναι η cdf της $N(0, 1)$).

Εφαρμογές

Το κεντρικό οριακό θεώρημα δίνει προσεγγίσεις για πιθανότητες που αφορούν άθροισμα ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών. Έχει εφαρμογές στη Στατιστική, για παράδειγμα στην κατασκευή προσεγγιστικών διαστημάτων εμπιστοσύνης. Το χρησιμοποιούμε θεωρώντας ότι μια ποσότητα της μορφής

$$\mathbf{P}\left(\frac{S_n - n\mu}{\sqrt{n\sigma^2}} \in A\right)$$

προσεγγίζεται (για μεγάλο n) από την

$$\mathbf{P}(Z \in A)$$

όπου $Z \sim N(0, 1)$ και A είναι ένα διάστημα ή μια πεπερασμένη ένωση διαστημάτων (αφού το όριο της πρώτης ποσότητας για $n \rightarrow \infty$ είναι η δεύτερη).

Παράδειγμα 1.1.22. Έχουμε ένα νόμισμα και θέλουμε να ελέγξουμε αν είναι αμερόληπτο. Το ρίχνουμε 100 φορές και έρχεται «Κεφαλή» 38 φορές. Πρέπει να μπούμε σε σκέψεις ότι δεν είναι αμερόληπτο;

Θεωρούμε τις τυχαίες μεταβλητές $(X_k)_{k \geq 1}$ με $X_k = 1$ όταν η k ρίψη φέρνει «Κεφαλή» και $X_k = 0$ όταν η k ρίψη φέρνει «Γράμματα». Ο συνολικός αριθμός κεφαλών σε n δοκιμές είναι $S_n := X_1 + \dots + X_n$. Υποθέτουμε ότι πράγματι το νόμισμα είναι αμερόληπτο (δηλαδή φέρνει «Κεφαλή» με πιθανότητα $p = 1/2$) και υπολογίζουμε την πιθανότητα $\mathbf{P}(S_{100} \leq 38)$. Έχουμε $\mu = \mathbf{E}(X_1) = 1/2$, $\sigma^2 := \text{Var}(X_1) = p(1-p) = 1/4$ και

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(S_{100} \leq 38) &= \mathbf{P}\left(\frac{S_{100} - 100 \times 0.5}{\sqrt{100/4}} \leq \frac{38 - 100 \times 0.5}{\sqrt{100/4}}\right) \simeq \mathbf{P}(Z \leq -12/5) \\ &= \Phi(-2.4) = 1 - \Phi(2.4) \simeq 0.0082 \end{aligned}$$

Η πιθανότητα είναι πολύ μικρή, μικρότερη του 1%. Μπορούμε να πούμε με μεγάλη βεβαιότητα ότι το νόμισμα δεν είναι αμερόληπτο.

Αν ερχόταν «Κεφαλή» 43 φορές, η ίδια διαδικασία δίνει την προσέγγιση $\mathbf{P}(S_{100} \leq 38) \simeq 0.0887$, περίπου 9%. Είναι ένα ενδεχόμενο που έχει σημαντική πιθανότητα να συμβεί. Δεν μας κάνει εντύπωση.

Παράδειγμα 1.1.23. Θεωρούμε ότι το βάρος έλξης κατά το οποίο σπάει ένα συγκεκριμένο συρματόσχοινο από μια πολύ μεγάλη ποσότητα που ένα εργοστάσιο μόλις παρήγαγε είμαι μια τυχαία μεταβλητή με άγνωστη μέση τιμή μ και διασπορά $\sigma = 1/10$. Θέλουμε να προσδιορίσουμε προσεγγιστικά τη μέση τιμή μ . Πραγματοποιούμε n ανεξάρτητες μετρήσεις X_1, X_2, \dots, X_n και θα χρησιμοποιήσουμε τον μέσο όρο $\bar{X} := (X_1 + \dots + X_n)/n$ ως προσέγγιση της μ . Πόσο μεγάλο πρέπει να είναι το n ώστε να ξέρουμε ότι θα συμβεί $|\bar{X} - \mu| \leq 1/100$ με πιθανότητα τουλάχιστον 0.95;

Για την πιθανότητα του γεγονότος που μας ενδιαφέρει έχουμε την εξής προσέγγιση

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left(\left|\frac{S_n}{n} - \mu\right| \leq \frac{1}{100}\right) &= \mathbf{P}\left(\frac{|S_n - n\mu|}{\sqrt{n\sigma^2}} \leq \sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) \simeq \mathbf{P}\left(|Z| \leq \sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) \\ &= \Phi\left(\sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) - \Phi\left(-\sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) = 2\Phi\left(\sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) - 1 \end{aligned}$$

Z είναι μια $N(0, 1)$ τυχαία μεταβλητή. Η τελευταία ποσότητα είναι τουλάχιστον 0.95 αν

$$\Phi\left(\sqrt{n} \frac{1}{100\sigma}\right) \geq 1 - 0.025.$$

Από πίνακες της Φ βρίσκουμε τον μοναδικό αριθμό $z_{0.025}$ που ικανοποιεί την σχέση $\Phi(z_{0.025}) = 1 - 0.025$. Ισχύει $z_{0.025} \simeq 1.96$. Πρέπει $\sqrt{n} \frac{1}{100\sigma} \geq z_{0.025}$ οπότε

$$n \geq (100\sigma z_{0.025})^2 \simeq 384.16$$

Άρα παίρνουμε οποιονδήποτε φυσικό n με $n \geq 385$.

Ορισμός 1.1.24 (Δισδιάστατη κανονική κατανομή). Έστω (X, Y) μια συνεχής δισδιάστατη τυχαία μεταβλητή. Αν η συνάρτηση πυκνότητας της δίδεται από την

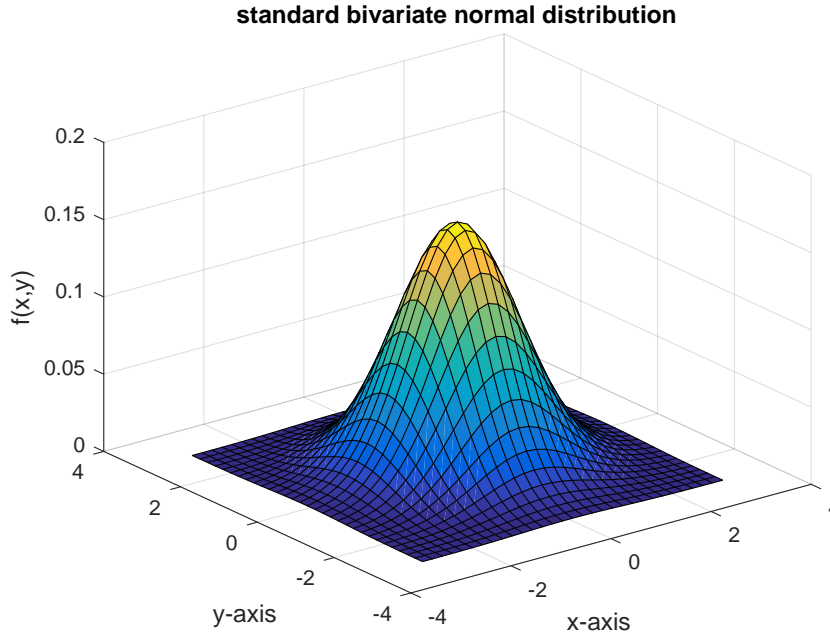
$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2}Q(x, y)\right) \quad (1.7)$$

όπου

$$Q(x, y) = \frac{1}{1-\rho^2} \left[\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)^2 - 2\rho\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right) + \left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)^2 \right]$$

και $\mu_X, \mu_Y \in \mathbb{R}$, $\sigma_X, \sigma_Y \in (0, +\infty)$ και $\rho \in (-1, 1)$ η (X, Y) λέγεται Δισδιάστατη κανονική κατανομή και ισχύουν τα παρακάτω:

- Οι περιθώριες κατανομές των X, Y είναι οι $N(\mu_X, \sigma_X^2)$ και $N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$ αντίστοιχα
- Ο συντελεστής συσχέτισης των X, Y είναι $\rho_{XY} = \rho$.



Σχήμα 1.4: Συνάρτηση πυκνότητας-πιθανότητας κανονικής δισδιάστατης κατανομής

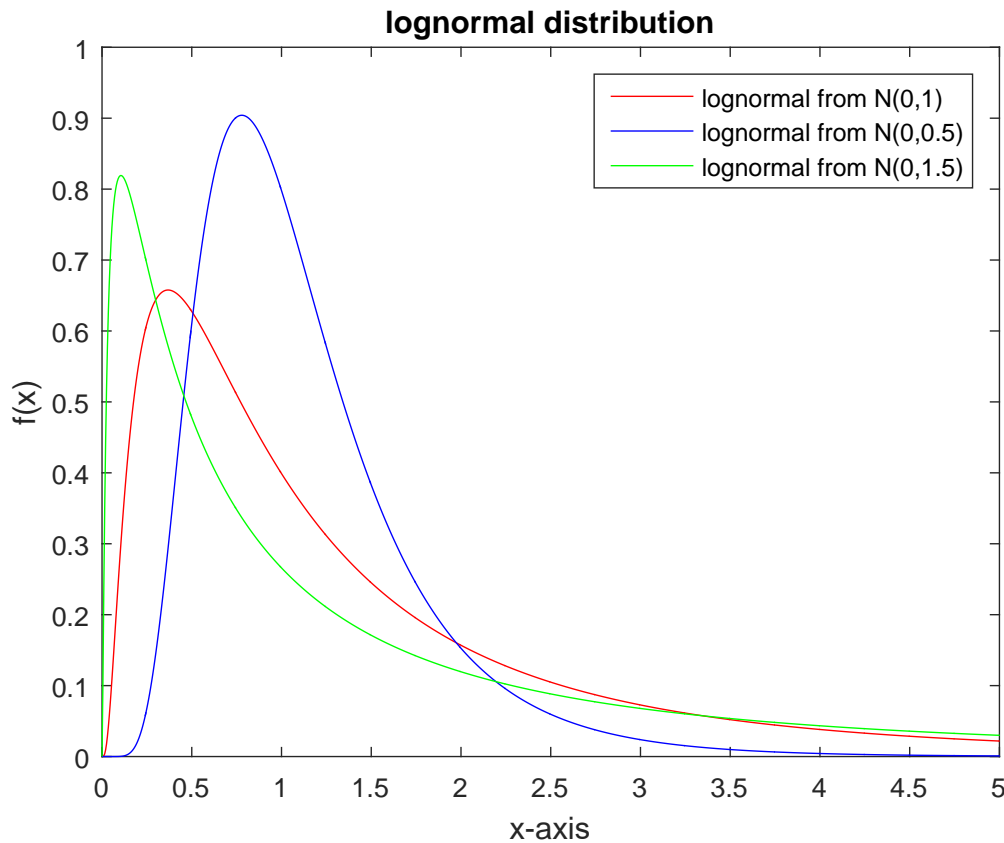
Ορισμός 1.1.25 (Τυχαία κανονικά διανύσματα - Gaussian random vectors). Έστω $\mu_X \in \mathbb{R}^d$ και $C_X \in \mathbb{R}^{d \times d}$ συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας. Ονομάζουμε την τυχαία μεταβλητή $X \in \mathbb{R}^d$ τυχαία κανονικά διανύσματα με μέση τιμή μ_X και συνδιακύμανση C_X αν η συνάρτηση πυκνότητας του X είναι η

$$f_X(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}} |C_X|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu_X)^T C_X^{-1} (x-\mu_X)\right\} \quad (1.8)$$

για $x \in \mathbb{R}^d$ και συμβολίζεται με $N(\mu_X, C_X)$.

Ορισμός 1.1.26 (Λογαριθμοκανονική Κατανομή). Μια συνεχής τυχαία μεταβλητή X ακολουθεί τη λογαριθμοκανονική κατανομή εάν η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας δίνεται από τη σχέση

$$f_X(x) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(x) - \mu}{\sigma}\right)^2\right\} \text{ για } x \in (0, +\infty). \quad (1.9)$$



Σχήμα 1.5: Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας λογαριθμοκανονικής κατανομής

Οι παράμετροι μ, σ αντιστοιχούν στη μέση τιμή και την τυπική απόκλιση της μεταβλητής $Y = \ln(X)$ η οποία ακολουθεί την κανονική κατανομή. Επίσης αν η τυχαία μεταβλητή Z ακολουθεί την κατανομή $(0, 1)$, τότε η τυχαία μεταβλητή $X = \exp\{\mu + \sigma Z\}$ ακολουθεί τη λογαριθμοκανονική κατανομή. Ισχύουν οι σχέσεις:

- $\mu_X = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right)$
- $\sigma_X^2 = \exp(2\mu + \sigma^2) (\exp(\sigma^2) - 1)$

Η λογαριθμοκανονική κατανομή έχει πολλές πρακτικές εφαρμογές. Στατιστικές αναλύσεις σε βάσεις δεδομένων υλικών δείχνουν ότι συχνά οι λογάριθμοι των δεδομένων τιμών ακολουθούν με καλή προσέγγιση την κανονική κατανομή. Επομένως, η λογαριθμοκανονική κατανομή είναι η καταλληλότερη για τη στατιστική περιγραφή ιδιοτήτων των υλικών.

Ορισμός 1.1.27 (Κατανομή Poisson). Έστω μια διακριτή τυχαία μεταβλητή με συνάρτηση πυκνότητας

$$f_X(x) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} \quad (1.10)$$

με $0 < \lambda < +\infty$ και $x = 0, 1, 2, \dots$ ονομάζεται κατανομή Poisson με παράμετρο λ .

Ισχύει ότι $\mathbf{E}(X) = \lambda$ και $\text{var}(X) = \lambda$ ενώ η συνάρτηση κατανομής της δίδεται από την σχέση

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{για } -\infty < x < 0 \\ \sum_{k=0}^{[x]} e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!} & \text{για } 0 \leq x < +\infty \end{cases}$$

όπου $[x]$ είναι το ακέραιο μέρος του x .

Η κατανομή Poisson χρησιμοποιήθηκε αρχικά ως προσέγγιση της διωνυμικής κατανομής όπως φαίνεται από το παρακάτω θεώρημα που είναι γνωστό ως νόμος των μικρών αριθμών.

Θεώρημα 1.1.28 (νόμος μικρών αριθμών). *Ας θεωρήσουμε μια ακολουθία n ανεξάρτητων δοκιμών με πιθανότητα επιτυχίας p και αποτυχίας $q = 1 - p$ σταθερή σε όλες τις δοκιμές. Ο δειγματικός χώρος του τυχαίου αυτού πειράματος είναι ο*

$$\Omega^n = \{(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n) : \omega_i \in \Omega\}$$

όπου $\Omega = \{\{\text{επιτυχία}\}, \{\text{αποτυχία}\}\}$. Θεωρούμε την τυχαία μεταβλητή X που συμβολίζει τον αριθμό των επιτυχιών. Τότε ισχύει ότι η X έχει συνάρτηση πυκνότητας την $f_X(x) = \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x}$ με $x = 0, 1, \dots, n$ και ονομάζεται διωνυμική κατανομή. Αν για μεγάλα n το p γίνεται πολύ μικρό και ισχύει ότι $\lim_{n \rightarrow \infty} np = \lambda$ τότε η X μπορεί να προσεγγιστεί από την Poisson καθώς ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x} = e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!} \quad \text{για } x = 0, 1, 2, \dots$$

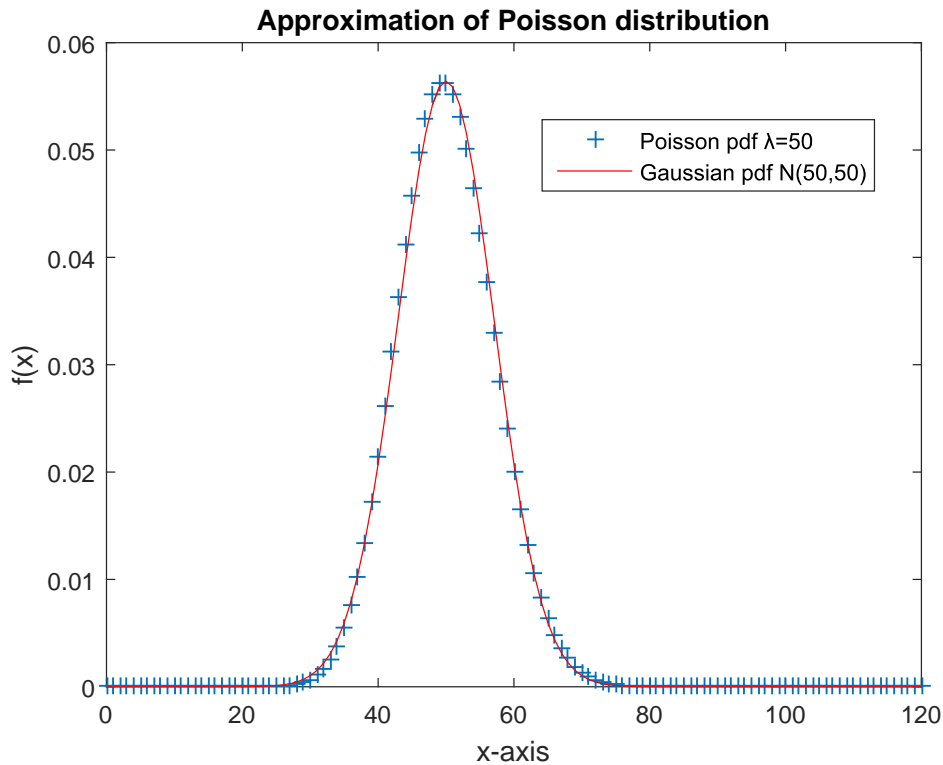
Η προσέγγιση είναι ικανοποιητική για $n \geq 20$ και $p \leq \frac{10}{n}$. Επειδή η τιμή του p θεωρείται μικρή η κατανομή Poisson θεωρείται η κατανομή των σπάνιων ενδεχομένων.

Παράδειγμα 1.1.29. Ας υποθέσουμε ότι η παραγωγή πρότυπων δοκών από χάλυβα ακολουθεί την διωνυμική κατανομή και η πιθανότητα μια δοκός να μην πληροί τις προδιαγραφές και να θεωρείται ελαττωματική είναι $p = 0.01$. Ζητάμε την πιθανότητα στις 100 δοκούς το πολύ μια να είναι ελαττωματική. Η ακριβής λύση με την διωνυμική κατανομή δίνει $\mathbf{P}(X \leq 1) = 0.7357$ ενώ αν την προσεγγίσουμε με την κατανομή Poisson με $\lambda = np = 1$ θα έχουμε $\mathbf{P}(X \leq 1) = 0.7358$.

Θεώρημα 1.1.30 (Κανονική προσέγγιση της κατανομής Poisson). Έστω ότι η τυχαία μεταβλητή X ακολουθεί την κατανομή Poisson με παράμετρο λ . Αν θεωρήσουμε ότι λ αρκετά μεγάλος θετικός αριθμός. Τότε ισχύει

$$f_X(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\lambda}{\sqrt{\lambda}}\right)^2\right\}$$

δηλαδή η X μπορεί να προσεγγιστεί από την κανονική κατανομή $N(\lambda, \lambda)$.



Σχήμα 1.6: Προσέγγιση της κατανομής Poisson από κανονική κατανομή

1.2 Στοχαστικές διαδικασίες

Ορισμός 1.2.1. Έστω ένας μετρήσιμος χώρος (S, \mathcal{A}) . Ονομάζουμε στοχαστική διαδικασία ή στοχαστική ανέλιξη με τιμές στον S την οικογένεια τυχαίων μεταβλητών $\{X_t : t \in I\}$ που ορίζονται σε ένα κοινό χώρο πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ και παίρνουν τιμές στον S . Το I είναι ένα σύνολο δεικτών και ανάλογα αν είναι αριθμήσιμο ή υπεραριθμήσιμο η στοχαστική διαδικασία λέγεται διακριτή ή συνεχής αντίστοιχα. Συνήθως $S = \mathbb{R}^d$ και $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ τα Borel μετρήσιμα σύνολα. Εδώ θα ασχοληθούμε με την περίπτωση των συνεχών στοχαστικών διαδικασιών.

Για σταθερό $\omega \in \Omega$ ορίζεται η συνάρτηση $f : t \rightarrow X_t(\omega)$ η οποία καλείται δειγματοσυνάρτηση ή μονοπάτι ή τροχιά της ανέλιξης.

Ορισμός 1.2.2 (Κατανομές πεπερασμένης τάξης). Έστω μια στοχαστική διαδικασία X_t με τιμές στο \mathbb{R}^d και n ακέραιος και t_1, t_2, \dots, t_n οποιοσδήποτε διακριτές ανά δύο χρονικές στιγμές. Θεωρούμε το τυχαίο διάνυσμα $X_n = (X_{t_1}, X_{t_2}, \dots, X_{t_n})$. Τότε οι κατανομές του τυχαίου διανύσματος X_n ορίζονται σαν κατανομές n τάξης της δηλαδή

$$F_{X_n}(x_1, \dots, x_n, t_1, \dots, t_n) = P\left(\bigcap_{i=1}^n \left\{X_{t_i} \in \prod_{k=1}^d (-\infty, x_{ik}]\right\}\right) \quad (1.11)$$

με $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{id}) \in \mathbb{R}^d$.

Επίσης αντίστοιχα ορίζονται και οι συναρτήσεις πυκνότητας n τάξης της X_t δηλαδή είναι οι συναρτήσεις πυκνότητας του X_n (αν υπάρχουν). Ειδικότερα ορίζουμε τα παρακάτω

Ορισμός 1.2.3. Η μέση τιμή στοχαστικής διαδικασίας ορίζεται κατ' αντιστοιχία με αυτή της τυχαίας μεταβλητής ως εξής:

$$\mu(t) = E(t) = \int_{\Omega} X_t dP \quad (1.12)$$

και είναι εν γένει συνάρτηση του t .

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (autocorrelation function, acf) του πεδίου ορίζεται ως εξής:

$$R_{ff}(t_1, t_2) = E(X_{t_1} X_{t_2}) \quad (1.13)$$

και η συνάρτηση αυτοδιακύμανσης (autocovariance function) του πεδίου ορίζεται ως

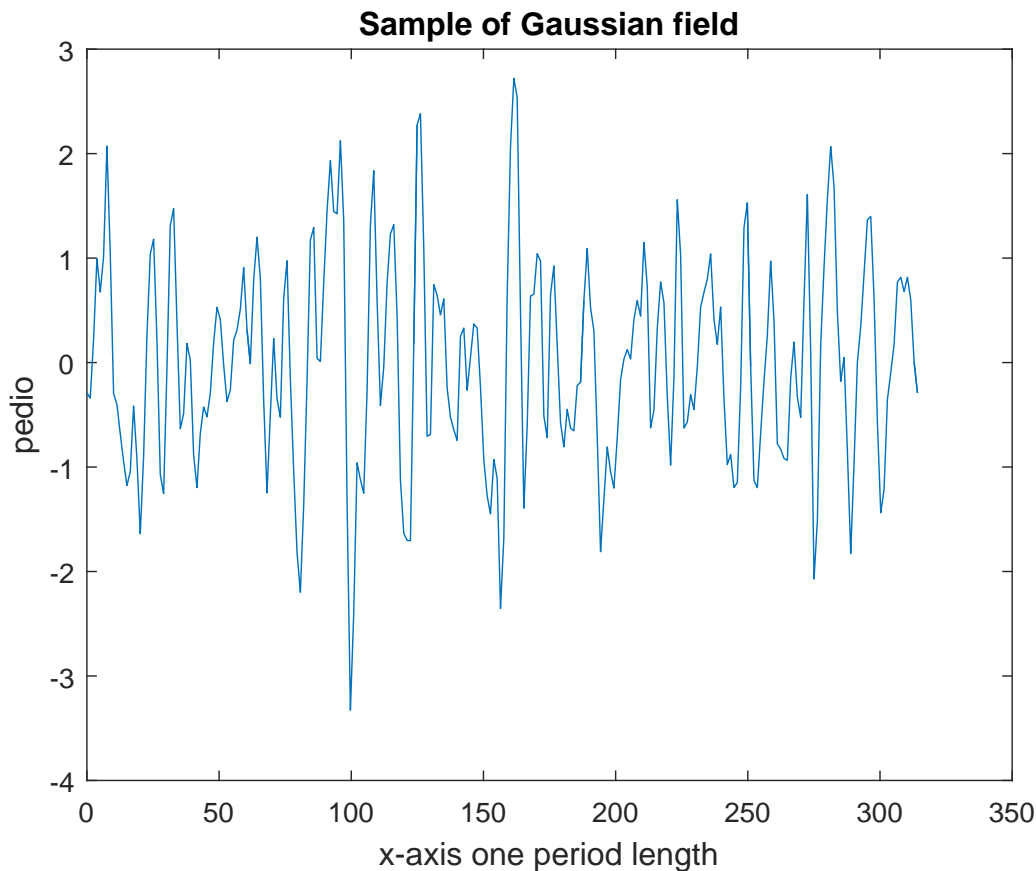
$$C_{ff} = E((X_{t_1} - \mu(t_1))(X_{t_2} - \mu(t_2))). \quad (1.14)$$

Επιπλέον, ο συντελεστής συσχέτισης (autocorrelation coefficient) του πεδίου ορίζεται ως

$$\rho_X(t_1, t_2) = \frac{C_X(t_1, t_2)}{\sqrt{C_X(t_1, t_1) C_X(t_2, t_2)}} \quad (1.15)$$

και ισχύει $|\rho_X(t_1, t_2)| \leq 1$ από την Cauchy-Schwartz.

Παράδειγμα 1.2.4 (Γκαουσιανές στοχαστικές διαδικασίες). Μια στοχαστική διαδικασία λέγεται Γκαουσιανή αν όλες οι πεπερασμένες κατανομές της είναι Γκαουσιανή. Ισοδύναμα θα πρέπει η X_t να είναι κανονική τυχαία μεταβλητή για κάθε t .



Σχήμα 1.7: Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία

Παράδειγμα 1.2.5 (Στοχαστική διαδικασία Poisson). Ας θεωρήσουμε ένα τυχαίο πείραμα στο οποίο ένα ενδεχόμενο A μπορεί να πραγματοποιείται σε διάφορες χρονικές στιγμές. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες του πειράματος είναι αμετάβλητες στο χρόνο και ο αριθμός εμφανίσεων του A σε δύο ξένα μεταξύ τους χρονικά διαστήματα είναι ανεξάρτητα ενδεχόμενα. Επιπλέον υποθέτουμε ότι η πιθανότητα πραγματοποίησης του A σε ένα μικρό χρονικό διάστημα είναι ανάλογη του μήκους του ενώ η πιθανότητα πραγματοποίησης του A παραπάνω από δύο φορές στο μικρό αυτό διάστημα είναι αμελητέα. Ορίζουμε την στοχαστική διαδικασία $t \rightarrow X_t$ με $t \in (0, +\infty)$ και X_t ο αριθμός εμφανίσεων του A σε χρονικό διάστημα μήκους t . Για να προσδιορίσουμε την συνάρτηση πυκνότητας της X_t χωρίζουμε το διάστημα $(0, t]$ σε n ξένα μεταξύ τους υποδιαστήματα μικρού μήκους $\Delta t = \frac{t}{n}$. Σε κάθε τέτοιο διάστημα θα έχουμε σύμφωνα με την υπόθεση μας ότι είτε το A πραγματοποιείται με πιθανότητα $p_n = \theta \Delta t = \frac{\theta t}{n}$ είτε το A δεν πραγματοποιείται με πιθανότητα $q_n = 1 - p_n$. Επίσης αφού τα διαστήματα είναι ξένα μεταξύ τους τα ενδεχόμενα πραγματοποίησης του A σε κάθε υποδιάστημα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Άρα

$$P(X_t = x) = \binom{n}{x} p_n^x (1 - p_n)^{n-x}$$

και επειδή $\lim_{n \rightarrow \infty} np_n = \theta t$ καθώς $\Delta t \rightarrow 0$ θα έχουμε

$$P(X_t = x) = e^{-\theta t} \frac{(\theta t)^x}{x!}$$

με $x = 0, 1, 2, \dots$ και $\theta, t \in (0, +\infty)$ δηλαδή η X_t ακολουθεί την κατανομή Poisson με παράμετρο θt .

Ορισμός 1.2.6. Ασθενώς στάσιμη στοχαστική διαδικασία λέγεται η στοχαστική διαδικασία για την οποία

- $\mu(t) = \mu$ δηλαδή η μέση τιμή είναι ανεξάρτητη του χρόνου και
- οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης και αυτοδιακύμανσης εξαρτώνται μόνο από την απόσταση των δύο χρονικών στιγμών δηλαδή $R_{ff}(t_1, t_2) = R_{ff}(\tau)$ και $C_{ff}(t_1, t_2) = C(\tau)$ όπου $\tau = t_2 - t_1$.

Σε αυτή την περίπτωση ο συντελεστής συσχέτισης θα δίδεται από την σχέση

$$\rho_X(\tau) = \frac{R_{ff}(\tau) - \mu_X^2}{\sigma_X^2}.$$

Άρα θα ισχύει ότι $R_{ff}(\tau) = \rho_X(\tau) \sigma_X^2 + \mu_X^2$ και καθώς $|\rho_X(\tau)| \leq 1$ θα έχουμε $-\sigma_X^2 + \mu_X^2 \leq R_{ff}(\tau) \leq \sigma_X^2 + \mu_X^2$. Καθώς $\tau \rightarrow \infty$ αναμένουμε να μην υπάρχει καμία συσχέτιση μεταξύ των τιμών X_t και $X_{t+\tau}$ άρα $\rho_X \rightarrow 0$ και $\lim_{\tau \rightarrow \infty} R_{ff}(\tau) = \mu_X^2$ ενώ για $\tau \rightarrow 0$ οι X_t και $X_{t+\tau}$ ταυτίζονται άρα $\rho_X \rightarrow 1$ και $\lim_{\tau \rightarrow 0} R_{ff}(\tau) = \mu_X^2 + \sigma_X^2$.

Ορισμός 1.2.7 (Μήκος συσχέτισης). Μία σημαντική παράμετρος που συνδέεται και με τον συντελεστή συσχέτισης ενός πεδίου είναι το μήκος συσχέτισης. Το μέγεθος αυτό προσδιορίζει τον βαθμό συσχέτισης μεταξύ των τιμών και του στοχαστικού πεδίου σε δύο διαφορετικές θέσεις, αποτελεί δε ένα μέτρο του αριθμού των ασυσχέτιστων τυχαίων μεταβλητών που απαιτούνται για να περιγραφεί το πεδίο με ικανοποιητική ποιότητα. Για τα ασθενώς ομογενή στοχαστικά πεδία το μήκος συσχέτισης ορίζεται ως εξής

$$b = \int_0^{+\infty} |\rho_X(\tau)| d\tau \quad (1.16)$$

όπου ρ_X ο συντελεστής συσχέτισης.

Παράδειγμα 1.2.8. Θεωρούμε ασθενώς στάσιμο στοχαστικό πεδίο X_t με συντελεστής συσχέτισης $\rho_X(\tau) = e^{-a|\tau|}$ και $a > 0$ το μήκος συσχέτισης δίδεται από την σχέση

$$b = \int_0^{+\infty} e^{-a\tau} d\tau = \frac{1}{a}.$$

Όταν το μήκος συσχέτισης τείνει στο άπειρο ($a \rightarrow 0$), το πεδίο θεωρείται πλήρως συσχετισμένο, όλες οι τυχαίες μεταβλητές του είναι γραμμικώς εξαρτημένες μεταξύ τους και επομένως εκφυλίζεται σε μία τυχαία μεταβλητή. Όταν πάλι το μήκος συσχέτισης τείνει στο μηδέν ($a \rightarrow \infty$), το πεδίο τείνει στον ιδανικό λευκό θόρυβο και είναι πλήρως ασυσχέτιστο.

Ορισμός 1.2.9. Στάσιμη ή αυστηρά στάσιμη στοχαστική διαδικασία με τιμές στον \mathbb{R}^d ονομάζουμε την στοχαστική διαδικασία για την οποία ισχύει $(X_{t_1}, \dots, X_{t_n}) = (X_{t_1+\tau}, \dots, X_{t_n+\tau})$ για κάθε $n \geq 1$, διακριτούς χρόνους $t_i, i = 1, \dots, n$ και κάθε τ χρονική μετατόπιση.

Ορισμός 1.2.10. Εργοδική ή αυστηρά εργοδική στοχαστική διαδικασία με τιμές στον \mathbb{R}^d ονομάζουμε την στοχαστική διαδικασία για την οποία ισχύει

$$\mathbf{E}(g(X_t)) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} g(X_s) ds \quad (1.17)$$

σχεδόν για κάθε ω και για κάθε μετρήσιμη συνάρτηση g τέτοια ώστε $\mathbf{E}(|g(X_t)|) < \infty$.

Στην ειδική περίπτωση που η συνάρτηση $g(x) = x$ λέμε ότι το πεδίο είναι εργοδικό ως προς την μέση τιμή, δηλαδή η μέση τιμή του πεδίου μπορεί να υπολογιστεί μόνο από μια δειγματοσυνάρτηση. Ισχύει ότι κάθε στάσιμη στοχαστική διαδικασία είναι και ασθενώς στάσιμη, ενώ κάθε εργοδική είναι και στάσιμη. Το αντίστροφο γενικά δεν ισχύει, ισχύει όμως για Γκαουσιανές στοχαστικές διαδικασίες.

Ιδιότητες συνάρτησης αυτοσυσχέτισης

Έστω X_t μια στοχαστική διαδικασία με τιμές στον \mathbb{R}^d και R_{ff} η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της. Τότε ισχύουν τα παρακάτω:

- Η R_{ff} είναι συμμετρική δηλαδή $R_{ff}(t_1, t_2) = R_{ff}(t_2, t_1)$. Αν η X_t είναι ασθενώς στάσιμη η R_{ff} θα είναι άρτια συνάρτηση του τ δηλαδή $R_{ff}(\tau) = R_{ff}(-\tau)$.
- Ισχύει η ανισότητα Cauchy-Schwartz δηλαδή $R_{ff}(t_1, t_2)^2 \leq R_{ff}(t_1, t_1)R_{ff}(t_2, t_2)$. Ειδικότερα αν η X_t είναι στάσιμη θα ισχύει $|R_{ff}(\tau)| \leq R_{ff}(0)$.
- Η R_{ff} είναι θετικά ορισμένη, δηλαδή ισχύει ότι $\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_k a_j R_{ff}(t_j, t_k) \geq 0$ για κάθε ακέραιο $n \geq 1$ και σταθερές (a_1, \dots, a_n) .

Συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος (power spectral density function, psdf)

Για τα ασθενώς στάσιμα στοχαστικά πεδία ορίζουμε την συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος. Χρησιμοποιούμε το παρακάτω αποτέλεσμα της αρμονικής ανάλυσης:

Θεώρημα 1.2.11 (Bochner). Μια συνεχής συνάρτηση $r : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ είναι θετικά ορισμένη αν και μόνο αν έχει αναπαράσταση της μορφής

$$r(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\nu\tau} dS(\nu) \quad (1.18)$$

όπου S είναι πραγματική, αύξουσα και φραγμένη συνάρτηση.

Ορισμός 1.2.12. Έστω X_t ασθενώς στάσιμο στοχαστικό πεδίο με τιμές στο \mathbb{R} και $R_{XX}(\tau)$ η συνάρτηση αυτοσυσχέτισής του. Ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης ορίζεται ως η συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος (power spectral density function, psdf) του πεδίου δηλαδή ισχύουν οι σχέσεις

$$R_{XX}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega\tau} S_{XX}(\omega) d\omega \quad (1.19)$$

και

$$S_{XX}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega\tau} R_{XX}(\tau) d\tau. \quad (1.20)$$

Από το θεώρημα Bochner και αν υποθέσουμε ότι η S είναι απολύτως συνεχής προκύπτει ότι υπάρχει $S_{XX}(\omega) = \frac{dS(\omega)}{d\omega}$ και άρα $S_{XX}(\omega) \geq 0$ αφού η S είναι αύξουσα.

Αν θέσουμε $\tau = 0$ στον ορισμό θα προκύψει

$$R_{XX}(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_{XX}(\omega) d\omega$$

από την οποία έχουμε ότι για πεδία μηδενικής μέσης τιμής ισχύει

$$\sigma_X^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} S_{XX}(\omega) d\omega.$$

Η παραπάνω σχέση μας βοηθά στην κατανόηση της φυσικής σημασίας της συνάρτησης πυκνότητας φασματικής ισχύος, που είναι η εξής: οι τιμές της συνάρτησης αυτής αντιστοιχούν στη συνεισφορά της κάθε συχνότητας ω ή του κάθε κυματικού αριθμού κ στη συνολική διακύμανση του στοχαστικού πεδίου. Η $S_{XX}(\omega)$ ονομάζεται και φάσμα ισχύος (power spectrum). Είναι συνάρτηση πραγματική και συμμετρική ως προς τον κατακόρυφο άξονα, γι' αυτό και συχνά χαρακτηρίζεται ως συνάρτηση δύο πλευρών (two-sided).

Ορισμός 1.2.13. Ένας άλλος τρόπος να ορίσουμε την συνάρτηση φασματικής ισχύος είναι ο εξής θεωρούμε ένα δείγμα x_t^k του ασθενώς στάσιμου στοχαστικού πεδίου X_t . Για ένα διάστημα πεπερασμένου μήκους $0 \leq t \leq T$ ορίζουμε την

$$S_{XX}(\omega, T, k) = \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T x_t^k e^{-i\omega t} dt \right|^2$$

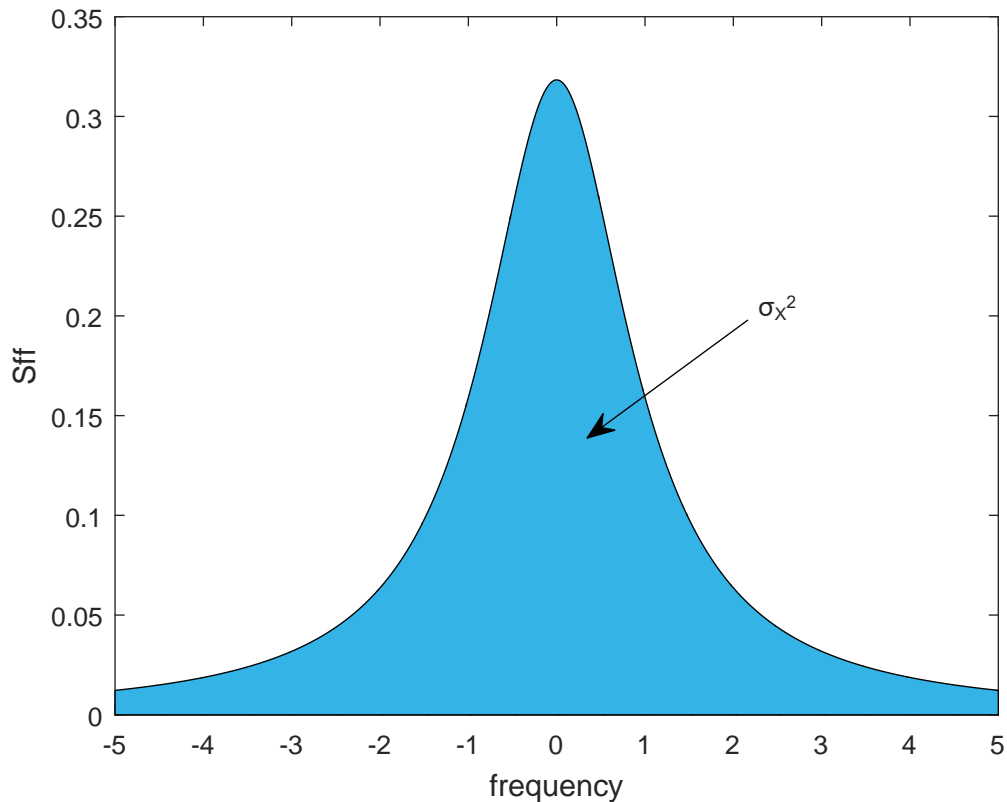
όπου η παραπάνω ποσότητα μέσα στο μέτρο του μιγαδικού αριθμού είναι ο μετασχηματισμός Fourier του δείγματος x_t^k στο διάστημα $0 \leq t \leq T$.

Ορίζουμε σαν συνάρτηση φασματικής ισχύος το

$$S_{XX}(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \mathbf{E}(S_{XX}(\omega, T, k)) \quad (1.21)$$

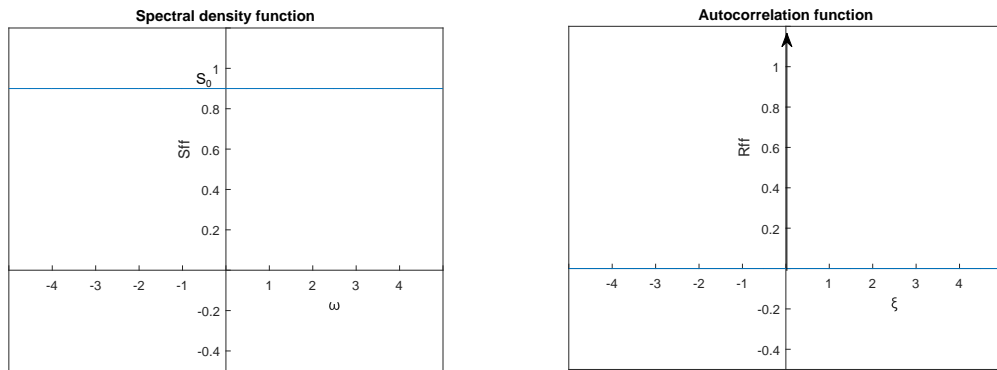
ενώ αν το X_t είναι εργοδικό στην παραπάνω σχέση δεν χρειάζεται να πάρουμε την μέση τιμή των δειγμάτων δηλαδή αρκεί το $S_{XX}(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} S_{XX}(\omega, T, k)$.

Μπορεί να δειχθεί ότι οι δύο ορισμοί της συνάρτησης φασματικής ισχύος είναι ισοδύναμοι.



Σχήμα 1.8: Συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος

Παράδειγμα 1.2.14 (Ο ιδανικός λευκός θόρυβος - Ideal white noise). Ένα ομογενές στοχαστικό πεδίο με σταθερή πυκνότητα φασματικής ισχύος $S_{XX}(\omega) = S_0$ = σταθερό ονομάζεται ιδανικός λευκός θόρυβος (ideal white noise). Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης που της αντιστοιχεί υπολογίζεται από τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier και δίδεται από $R_{XX}(\tau) = 2\pi S_0 \delta(\tau)$ όπου $\delta(\tau)$ είναι η συνάρτηση δέλτα του Dirac. Από τη σχέση προκύπτει ότι προκύπτει ότι $R_{XX}(\tau) = 0$ για $\tau \neq 0$ και επομένως οποιεσδήποτε τιμές X_t και $X_{t+\tau}$ του λευκού θορύβου είναι ασυσχέτιστες. Ιδανικός λευκός θόρυβος δεν υπάρχει στη φύση διότι είναι ένα πεδίο με άπειρη μέση τετραγωνική τιμή όπως εξάλλου φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος

(β') Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

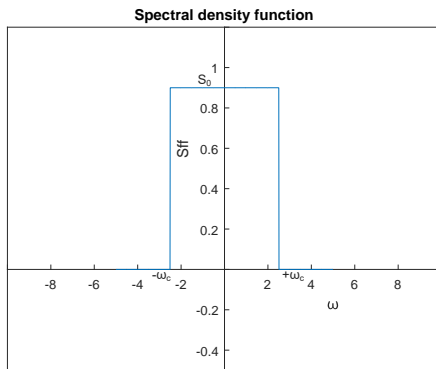
Σχήμα 1.9: Ιδανικός λευκός θόρυβος

Παράδειγμα 1.2.15 (Ο λευκός θόρυβος περιορισμένου εύρους). Ένα ομογενές στοχαστικό πεδίο X_t με σταθερή πυκνότητα φασματικής ισχύος στο διάστημα $[-\omega_c, \omega_c]$ $S_{XX}(\omega) = S_0 =$ σταθερό για $|\omega| \leq \omega_c$ αλλιώς μηδέν ονομάζεται λευκός θόρυβος περιορισμένου εύρους (bandlimited white noise).

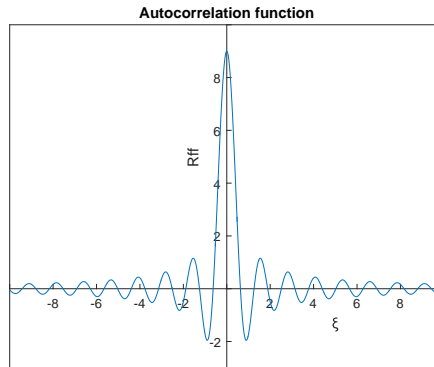
Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης δίδεται από την

$$R_{XX}(\tau) = S_0 \int_{-\omega_c}^{+\omega_c} \cos(\omega\tau) d\omega = 2S_0 \frac{\sin(\omega_c\tau)}{\tau}.$$

Σε αντίθεση με τον ιδανικό λευκό θόρυβο, ο λευκός θόρυβος περιορισμένου εύρους έχει πεπερασμένη μέση τετραγωνική τιμή: $\mathbf{E}(X_t^2) = R_{XX}(0) = 2S_0\omega_c$. Η συχνότητα ω_c καλείται συχνότητα αποκοπής (cut-off frequency). Οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης και πυκνότητας φασματικής ισχύος του λευκού θορύβου περιορισμένου εύρους παριστάνονται γραφικά στα παρακάτω σχήματα.



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος



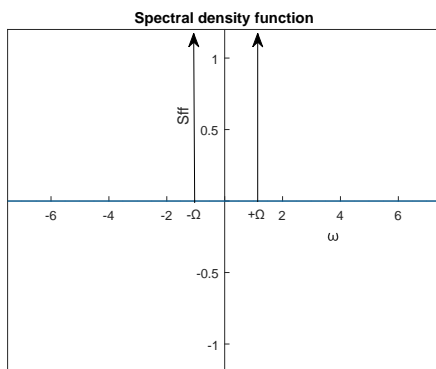
(β') Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

Σχήμα 1.10: Λευκός θόρυβος περιορισμένου εύρους

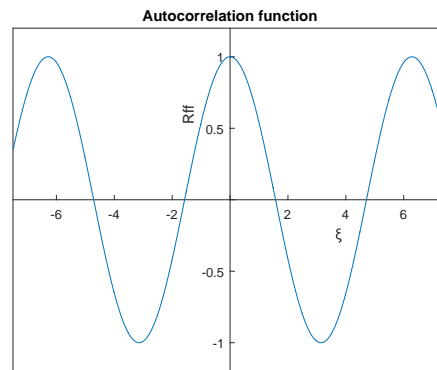
Παράδειγμα 1.2.16 (Αρμονικό στοχαστικό πεδίο). Το στοχαστικό πεδίο $X_t = A \cos(\Omega t) + B \sin(\Omega t)$ όπου A, B τυχαίες μεταβλητές με $\mathbf{E}(A) = \mathbf{E}(B) = 0$, $\text{var}(A) = \text{var}(B) = \sigma^2$ και $\mathbf{E}(AB) = 0$. Για κάθε δυνατό ζεύγος μεταβλητών A, B το στοχαστικό πεδίο X_t μεταβάλλεται αρμονικά. Οποιοδήποτε πεδίο έχει την παραπάνω μορφή ονομάζεται αρμονικό στοχαστικό πεδίο για προφανείς λόγους. Οι συναρτήσεις $S_{XX}(\omega)$ και $R_{XX}(\tau)$ είναι οι

$$S_{XX}(\omega) = \frac{\sigma^2}{2} [\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega)], \quad R_{XX}(\tau) = \sigma^2 \cos(\Omega\tau)$$

και φαίνονται στο παρακάτω σχήμα.



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος



(β') Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

Σχήμα 1.11: Αρμονικό στοχαστικό πεδίο

Κεφάλαιο 2

Προσομοίωση Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών

2.1 Η μέθοδος της φασματικής απεικόνισης 1D

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι αριθμητικής προσομοίωσης των Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών. Οι κυριότερες είναι η spectral representation method, η Karhunen-Loeve expansions και η sampling method. Εδώ θα ασχοληθούμε με την πρώτη.

Spectral representation method

Αν X_t είναι μια ασθενώς στάσιμη στοχαστική διαδικασία με τιμές στον \mathbb{R} συνεχής σχεδόν παντού με συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος $s(v)$. Τότε υπάρχουν δύο στοχαστικές διαδικασίες U_v, V_v με ορθογώνιες προσανξήσεις dU_v, dV_v τέτοια ώστε το ολοκλήρωμα να υπάρχει σχεδόν παντού και να ισχύουν οι σχέσεις:

$$X_t = \int_0^{+\infty} \cos(vt)dU_v + \sin(vt)dV_v \quad (2.1)$$

- $E(U_v) = E(V_v) = 0$ και $E(dU_v dV_v) = 0$
- $E(dU_v^2) = E(dV_v^2) = s(v)dv$ για κάθε $v, v \geq 0$

Στη περίπτωση των Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών με βάση το παραπάνω θεώρημα προκύπτει το εξής αποτέλεσμα:

Αριθμητική προσομοίωση Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών

Έστω $f(x)$ μια Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία. Τότε

$$f(x) \cong f_{appr}(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{N-1} A_k \cos(\omega_k x + \Phi_k) \quad (2.2)$$

όπου

- Φ_k ανεξάρτητες ομοιόμορφα κατενημημένες στο $[0, 2\pi]$ τυχαίες μεταβλητές
- $A_k = \sqrt{2S_{ff}(\omega_k)\Delta\omega}$, $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$
- $\omega_k = k\Delta\omega$, $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$
- $\Delta\omega = \frac{\omega_u}{N}$

με ω_u σε αυτή την σχέση να είναι η συχνότητα αποκοπής δηλαδή η συχνότητα πέρα από την οποία θεωρούμε ότι η S_{ff} έχει αμελητέες τιμές. Αυτή συνήθως προσδιορίζεται από την σχέση $\int_0^{\omega_u} S_{ff}(\omega)d\omega = (1-\varepsilon) \int_0^{+\infty} S_{ff}(\omega)d\omega$ όπου ε είναι μια πολύ μικρή ποσότητα. Εναλλακτικά η ω_u εκτιμάται από την γραφική παράσταση της S_{ff} .

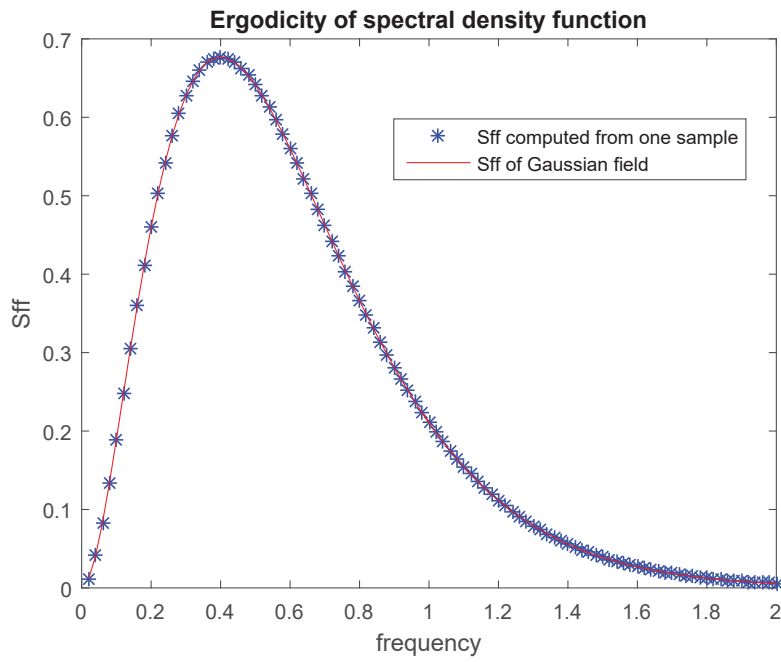
Η f_{appr} έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- είναι Γκαουσιανή καθώς $N \rightarrow \infty$ λόγω του κεντρικού οριακού θεωρήματος
- καθώς $N \rightarrow \infty$ ισχύει ότι $E(f) = E(f_{appr})$ και $R_{f_{appr}}(\tau) = R_f(\tau)$
- η f_{appr} είναι περιοδική με περίοδο $T_0 = \frac{2\pi}{\Delta\omega}$ και καθώς $N \rightarrow \infty$ ή ισοδύναμα $\Delta\omega \rightarrow 0$, η περίοδος προσομοίωσης $T_0 \rightarrow \infty$
- η f_{appr} είναι εργοδική ως προς την μέση τιμή και την αυτοσυσχέτιση δηλαδή αν $\phi_1^i, \phi_2^i, \dots, \phi_{N-1}^i$ είναι ένα τυχαίο δείγμα των $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_{N-1}$ και f_{appr}^i η δειγματοσυνάρτηση που προκύπτει τότε ισχύει

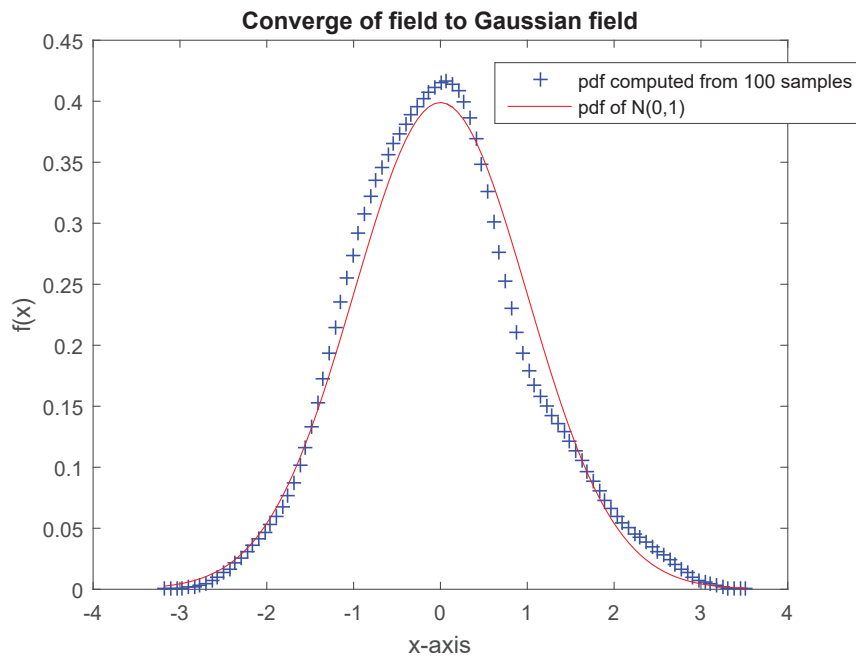
$$\mathbf{E}(f_{appr}) = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} f_{appr}^i(t) dt \quad \text{και} \quad R_{f_{appr}}(\tau) = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} f_{appr}^i(t) f_{appr}^i(t+\tau) dt$$

Ένα μειονέκτημα της παραπάνω προσομοίωσης φαίνεται να είναι το γεγονός ότι τα δείγματα της f_{appr} φράσσονται ως εξής $f_{appr}^i \leq \sqrt{2} \sum_{k=0}^{N-1} A_k$ παρόλα αυτά ακόμα και για μικρές τιμές του N οι τιμές του παραπάνω φράγματος είναι επαρκώς μεγάλες.

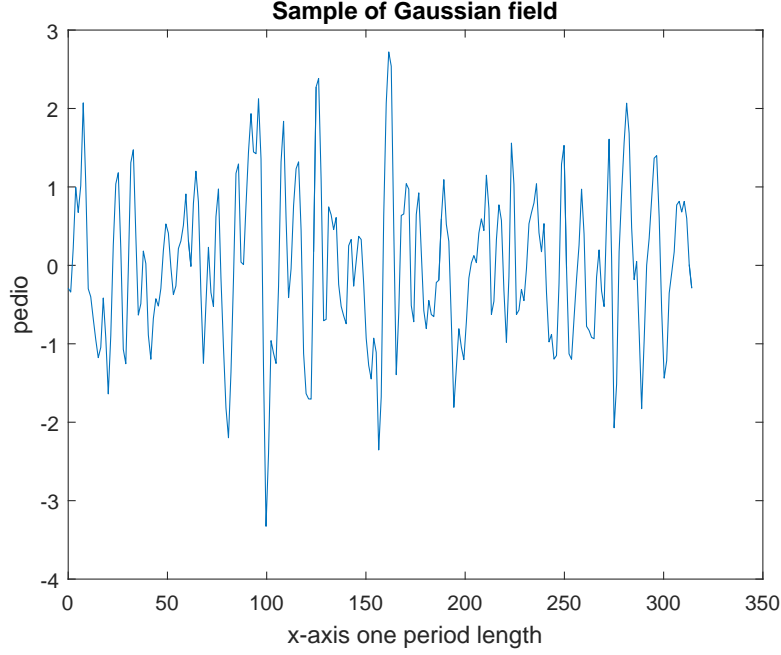
Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να επιταχυνθεί σημαντικά με την χρήση του ταχέως μετασχηματισμού Fourier (Fast Fourier Transform FFT). Στα παρακάτω σχήματα βλέπουμε για την φασματική συνάρτηση $S_{ff}(\omega) = \frac{125}{4}\omega^2 e^{-5|\omega|}$ την εργοδικότητα καθώς και την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf) του δείγματος σε σχέση με την Γκαουσιανή pdf καθώς και την μορφή του δείγματος.



Σχήμα 2.1: Εργοδικότητα του πεδίου



Σχήμα 2.2: Σύγκλιση του πεδίου προς Γκαουσιανό πεδίο



Σχήμα 2.3: Δείγμα πεδίου σε μήκος μιας περιόδου

Έχουν χρησιμοποιηθεί οι ακόλουθες τιμές (αναφέρουμε τα παρακάτω καθώς οι ίδιες τιμές έχουν χρησιμοποιηθεί και παρακάτω σε όλες τις περιπτώσεις που χρειάστηκε παραγωγή 1D-Γκαουσιανού δείγματος). Οι συχνότητες έχουν διακριτοποιηθεί με $N_\omega = 100$ σημεία και μέχρι το $\omega_u = 2 \text{ rad/m}$ με βήμα $d\omega = \frac{\omega_u}{N_\omega} = 0.02 \text{ rad/m}$. Επίσης το δείγμα έχει παραχθεί στο σύνολο μήκους μιας περιόδου $[x_u, x_0]$ με διακριτοποίηση $N_x = 500$ σημείων και $x_u = 0$, $x_0 = T = \frac{2\pi}{d\omega} = 314.16 \text{ m}$ με βήμα $dx = 0.6283 \leq \frac{\pi}{\omega_u} = 1.57$. Η τελευταία συνθήκη είναι απαραίτητη προκειμένου να αποφευχθεί το φαινόμενο της επικάλυψης (aliasing).

2.2 Η μέθοδος της φασματικής απεικόνισης 2D

Αντίστοιχα αποτελέσματα ισχύουν για παραπάνω διαστάσεις. Συγκεκριμένα αν $f(x)$ μια 2D-Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία με $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ έχουμε

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &\simeq f_{appr}(x_1, x_2) \\ &= \sqrt{2} \sum_{i=0}^{N_1-1} \sum_{j=0}^{N_2-1} A_{ij} \cos(\omega_{1i}x_1 + \omega_{2j}x_2 + \Phi_{ij}^1) + \tilde{A}_{ij} \cos(\omega_{1i}x_1 - \omega_{2j}x_2 + \Phi_{ij}^2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

όπου

- Φ_{ij}^1, Φ_{ij}^2 ανεξάρτητες ομοιόμορφα κατανομημένες στο $[0, 2\pi]$ τυχαίες μεταβλητές,
- $A_{ij} = \sqrt{2S_{ff}(\omega_i, \omega_j) \Delta\omega_1 \Delta\omega_2}$, $\tilde{A}_{ij} = \sqrt{2S_{ff}(\omega_i, -\omega_j) \Delta\omega_1 \Delta\omega_2}$
 $i = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1, j = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$,

- $\omega_i = i\Delta\omega_1, \Delta\omega_1 = \frac{\omega_{1u}}{N_1}, i = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1$
- $\omega_j = j\Delta\omega_2, \Delta\omega_2 = \frac{\omega_{2u}}{N_2}, i = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$
- $A_{0j} = A_{i0} = 0$ για $i = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1$ και $j = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$
- $\tilde{A}_{0j} = \tilde{A}_{i0} = 0$ για $i = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1$ και $j = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$

Οι συχνότητες ω_{1u}, ω_{2u} ονομάζονται συχνότητες αποκοπής κατά τους άξονες x_1, x_2 αντίστοιχα. Έχουν την ακόλουθη σημασία: η συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος του πεδίου είναι αμελητέα εκτός του συνόλου $\{(\omega_1, \omega_2) : |\omega_1| \leq \omega_{1u}, |\omega_2| \leq \omega_{2u}\}$ και προσδιορίζονται είτε γραφικά είτε θεωρώντας ένα μικρό αριθμό ε της τάξεως του 0.001 ώστε να ισχύει η σχέση

$$\int_0^{\omega_{1u}} \int_{-\omega_{2u}}^{\omega_{2u}} S_{ff}(\omega_1, \omega_2) d\omega_1 d\omega_2 = (1 - \varepsilon) \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} S_{ff}(\omega_1, \omega_2) d\omega_1 d\omega_2 \quad (2.4)$$

Για την f_{appr} ισχύουν κατά αντιστοιχία τα παρακάτω:

- είναι Γκαουσιανή καθώς $N_1, N_2 \rightarrow \infty$ λόγω του κεντρικού οριακού θεωρήματος
- καθώς $N_1, N_2 \rightarrow \infty$ ισχύει ότι $\mathbf{E}(f) = \mathbf{E}(f_{appr})$ και $R_f(\tau) = R_{f_{appr}}(\tau)$
- είναι περιοδική κατά τους άξονες x_1, x_2 με περιόδους $T_{x_1} = \frac{2\pi}{\Delta\omega_1}, T_{x_2} = \frac{2\pi}{\Delta\omega_2}$ αντίστοιχα
- η f_{appr} είναι εργοδική ως προς την μέση τιμή και την αυτοσυσχέτιση δηλαδή αν $\phi_1^{1k}, \phi_2^{1k}, \dots, \phi_{(N_1-1)(N_2-1)}^{1k}, \phi_1^{2k}, \phi_2^{2k}, \dots, \phi_{(N_1-1)(N_2-1)}^{2k}$ είναι ένα τυχαίο δείγμα των $\Phi_1^1, \Phi_2^1, \dots, \Phi_{(N_1-1)(N_2-1)}^1, \Phi_1^2, \Phi_2^2, \dots, \Phi_{(N_1-1)(N_2-1)}^2$ για την δειγματοσυνάρτηση που προκύπτει f_{appr}^k ισχύει

$$\mathbf{E}(f_{appr}) = \frac{1}{T_{x_1} T_{x_2}} \int_0^{T_{x_1}} \int_0^{T_{x_2}} f_{appr}^k(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad (2.5)$$

και

$$R_{f_{appr}}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{T_{x_1} T_{x_2}} \int_0^{T_{x_1}} \int_0^{T_{x_2}} f_{appr}^k(x_1, x_2) f_{appr}^k(x_1 + \xi_1, x_2 + \xi_2) dx_1 dx_2 \quad (2.6)$$

Παράδειγμα 2.2.1. Στα παρακάτω σχήματα φαίνονται δείγματα του πεδίου με την παραπάνω μέθοδο προσομοίωσης για την εξής συνάρτηση φάσματος:

$$S_{ff}(\omega_1, \omega_2) = \sigma^2 \frac{b_1 b_2}{4\pi} \exp\left(-\left(\frac{b_1 \omega_1}{2}\right)^2 - \left(\frac{b_2 \omega_2}{2}\right)^2\right)$$

που αντιστοιχεί στην συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

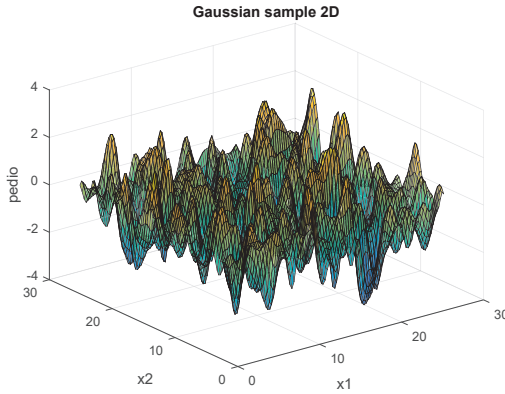
$$R_{ff}(\xi_1, \xi_2) = \sigma^2 \exp\left(-\left(\frac{\xi_1}{b_1}\right)^2 - \left(\frac{\xi_2}{b_2}\right)^2\right).$$

Θεωρούμε τις ακόλουθες τρεις περιπτώσεις:

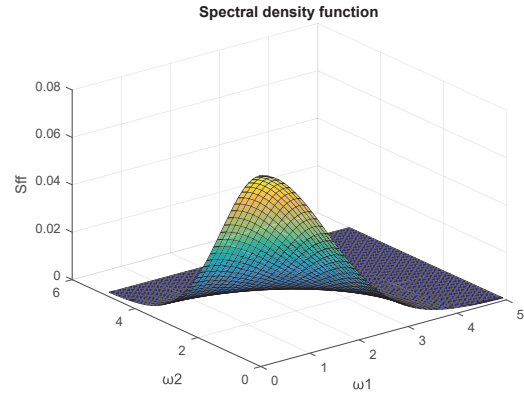
i. $\sigma = 1, b_1 = 1$ και $b_2 = 1$

Στην περίπτωση αυτή έχουμε $\omega_{1u} = 5rad/m$, $\omega_{2u} = 5rad/m$ όπως φαίνεται από την γραφική παράσταση της συνάρτησης φάσματος.

Διακριτοποιούμε το χώρο των συχνοτήτων με $N_{\omega_1} = N_{\omega_2} = 20$ σημεία. Έτσι θα έχουμε $\Delta\omega_1 = \frac{\omega_{1u}}{N_{\omega_1}} = 0.25rad/m$ και $\Delta\omega_2 = \frac{\omega_{2u}}{N_{\omega_2}} = 0.25rad/m$. Για να μην υπάρχει το φαινόμενο των επικαλύψεων θα πρέπει να ισχύει για την χωρική διακριτοποίηση $\Delta x_i \leq \frac{\pi}{\omega_{iu}}$ για κάθε i . Επιλέγουμε $Nx_1 = Nx_2 = 80$ και έτσι έχουμε $\Delta x_1 = \frac{L_{x_1}}{N_{x_1}} = 0.314m$ όπου $L_{x_1} = \frac{2\pi}{\Delta\omega_1} = 25.13m$ η περίοδος κατά την διεύθυνση x_1 , $\Delta x_2 = \frac{L_{x_2}}{N_{x_2}} = 0.314m$ όπου $L_{x_2} = \frac{2\pi}{\Delta\omega_2} = 25.13m$ η περίοδος κατά την διεύθυνση x_2 και $\Delta x_1 = \Delta x_2 \leq 0.628$



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (i)

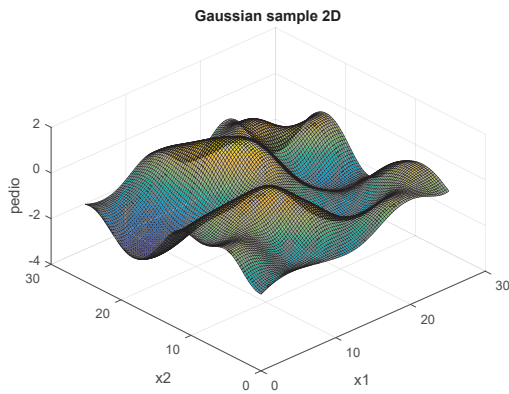


(β') Δείγμα του Γκαουσιανού πεδίου για την περίπτωση (i)

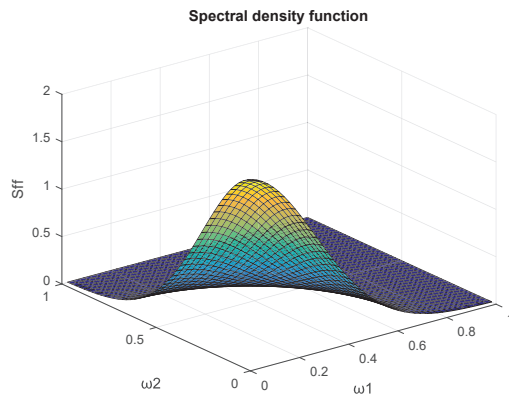
ii. $\sigma = 1, b_1 = 5$ και $b_2 = 5$

Στην περίπτωση αυτή έχουμε $\omega_{1u} = 1rad/m$ και $\omega_{2u} = 1rad/m$ όπως φαίνεται από την γραφική παράσταση της συνάρτησης φάσματος.

Διακριτοποιούμε το χώρο των συχνοτήτων με $N_{\omega_1} = N_{\omega_2} = 20$ σημεία. Έτσι θα έχουμε $\Delta\omega_1 = \frac{\omega_{1u}}{N_{\omega_1}} = 0.05rad/m$ και $\Delta\omega_2 = \frac{\omega_{2u}}{N_{\omega_2}} = 0.05rad/m$. Για την χωρική διακριτοποίηση επιλέγουμε $Nx_1 = Nx_2 = 80$ και έτσι έχουμε $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.314 \leq \pi$.



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (ii)

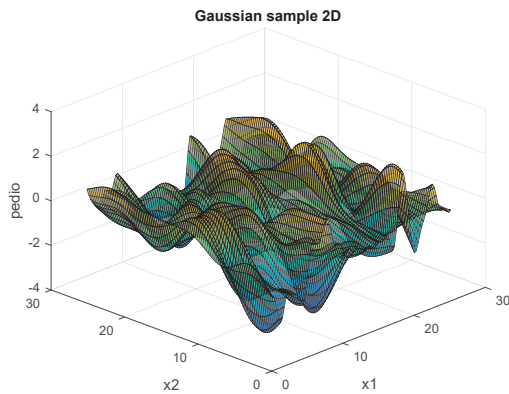


(β') Δείγμα του Γκαουσιανού πεδίου για την περίπτωση (ii)

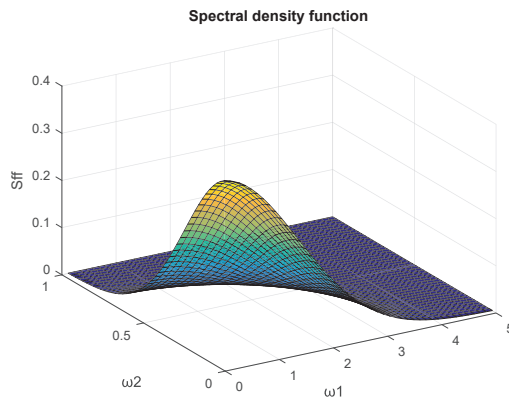
iii. $\sigma = 1, b_1 = 1$ και $b_2 = 5$

Στην περίπτωση αυτή έχουμε $\omega_{1u} = 5rad/m$ και $\omega_{2u} = 1rad/m$ όπως φαίνεται από την γραφική παράσταση της συνάρτησης φάσματος.

Διακριτοποιούμε το χώρο των συχνοτήτων με $N_{\omega_1} = N_{\omega_2} = 20$ σημεία. Έτσι θα έχουμε $\Delta\omega_1 = \frac{\omega_{1u}}{N_{\omega_1}} = 0.25rad/m$ και $\Delta\omega_2 = \frac{\omega_{2u}}{N_{\omega_2}} = 0.05rad/m$. Για την χωρική διακριτοποίηση επιλέγουμε $N_{x_1} = N_{x_2} = 80$ και έτσι έχουμε $\Delta x_1 = 0.314 \leq 0.628$ και $\Delta x_2 = 0.314 \leq \pi$.



(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (iii)



(β') Δείγμα του Γκαουσιανού πεδίου για την περίπτωση (iii)

Στις τελευταίες δύο περιπτώσεις για την παραγωγή των δειγματοσυναρτήσεων έχουμε χρησιμοποιήσει το χωρίο διαστάσεων $L_{x_1} \times L_{x_2}$ της πρώτης περίπτωσης ώστε να φανεί καλύτερα η επιρροή των παραμέτρων b_1, b_2 και άρα του μήκους συσχέτισης στον βαθμό διακύμανσης του πεδίου.

Τέλος αναφέρουμε μια μορφή του θεωρήματος της φασματικής αναπαράστασης για διανυσματικά τυχαία πεδία. Αυτά τα πεδία είναι αρκετά χρήσιμα στις εφαρμογές καθώς η πίεση του

ανέμου καθώς και η σεισμική διέγερση περιγράφονται με τέτοια διανυσματικά πεδία.

Θεώρημα 2.2.2. *Spectral representation* Αν X_t είναι μια ασθενώς στάσιμη στοχαστική διαδικασία με τιμές στον \mathbb{R}^d συνεχής σχεδόν παντού με συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος $s_{ij}(v)$. Τότε υπάρχουν δύο στοχαστικές διαδικασίες με τιμές στον \mathbb{R}^d U_v, V_v με ορθογώνιες προσαυξήσεις dU_v, dV_v τέτοια ώστε το ολοκλήρωμα να υπάρχει σχεδόν παντού και να ισχύουν οι σχέσεις

$$X_t = \int_0^{+\infty} \cos(vt) dU_v + \sin(vt) dV_v \quad (2.7)$$

- $\mathbf{E}(U_v) = \mathbf{E}(V_v) = 0$ $\mathbf{E}(dU_{iv}dU_{jv'}) = \mathbf{E}(dV_{iv}dV_{jv'}) = \delta(v - v') g_{ij}(v) dv$
- $\mathbf{E}(dU_{iv}dV_{jv'}) = -\mathbf{E}(dV_{iv}dU_{jv'}) = \delta(v - v') h_{ij}(v) dv$ όπου
- $g_{ij}(v) = s_{ij}(v) + s_{ij}(-v)$ και $h_{ij}(v) = -i[s_{ij}(v) - s_{ij}(-v)]$

Κεφάλαιο 3

Προσομοίωση μη Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών

Στις περισσότερες εφαρμογές θα είναι απαραίτητη η χρήση στοχαστικών διαδικασιών που δεν είναι Γκαουσιανές. Επομένως είναι απαραίτητη η παραγωγή δειγματοσυναρτήσεων μη Γκαουσιανών στοχαστικών πεδίων. Οι μέθοδοι που θα περιγράψουμε παρακάτω θεωρούν ως γνωστά την κατανομή και την συνάρτηση φασματικής ισχύος (ή ισοδύναμα την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης) του μη Γκαουσιανού πεδίου. Συγκεκριμένα θα περιγράψουμε τους αλγόριθμους των Grigoriu, Yamazaki και Shinozuka, Deodatis και Micaletti, Shields, Deodatis και Bocchini και τέλος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis.

3.1 Διαδικασίες μεταφοράς - Translation processes

Έστω X_t μια μηδενικού μέσου ασθενώς στάσιμη Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία με συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $\rho(\tau)$ και g μια αύξουσα συνάρτηση. Ορίζουμε σαν μεταβατική διαδικασία (translation process) την στοχαστική διαδικασία

$$Y_t = g(X_t). \quad (3.1)$$

Η μέση τιμή, η διακύμανση και η αυτοσυσχέτιση της Y_t είναι

$$\mu_Y = \mathbf{E}(Y_t) = \mathbf{E}(g(X_t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\phi(x)dx \quad (3.2)$$

$$\sigma_Y^2 = \mathbf{E}((Y_t - \mu_Y)^2) = \mathbf{E}((g(X_t) - \mu_Y)^2) = \int_{-\infty}^{+\infty} (g(x) - \mu_Y)^2 \phi(x)dx \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} c(\tau) &= \mathbf{E}((g(X_t) - \mu_Y)(g(X_{t+\tau}) - \mu_Y)) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (g(x) - \mu_Y)(g(y) - \mu_Y)\phi(x, y, \rho(\tau))dxdy \end{aligned} \quad (3.4)$$

όπου $\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ είναι η πυκνότητα της κανονικής κατανομής και

$$\phi(x, y, \rho) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-\rho^2}} e^{-\frac{(x^2+y^2-2xy\rho)}{2(1-\rho^2)}}$$

η πυκνότητα της δισδιάστατης κανονικής κατανομής με συντελεστή συσχέτισης ρ .

Η στοχαστική διαδικασία $\tilde{Y}_t = \frac{Y_t - \mu_Y}{\sigma_Y}$ έχει συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $\xi(\tau) = \frac{c(\tau)}{c(0)}$ και λέγεται κανονικοποιημένη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης. Ισχύει η σχέση $|\xi(\tau)| \leq |\rho(\tau)|$. Η $\xi(\tau) = 0, 1$ αν και μόνο αν $\rho(\tau) = 0, 1$ αντίστοιχα ενώ για $\rho(\tau) = -1$ ισχύει ότι οι τυχαίες μεταβλητές X_t και $-X_{t+\tau}$ έχουν την ίδια κατανομή, έστω X . Τότε $\xi(\tau) = \xi^* = \frac{\mathbf{E}[g(X)g(-X)] - [\mathbf{E}(g(X))]^2}{\mathbf{E}[g(X)^2] - \mathbf{E}[g(X)]^2}$ και $\xi^* = -1$ αν και μόνο αν η g είναι περιττή συνάρτηση, δηλαδή αν $g(-x) = -g(x), x \in \mathbb{R}$. Έτσι έχουμε ότι $\xi(\tau) \in [\xi^*, 1]$.

Συμβατότητα των προκαθορισμένων μη Γκαουσιανών PSDF και PDF

Δοθέντος ενός μη Γκαουσιανού στοχαστικού πεδίου Y_t με δεδομένη PSDF και PDF θέλουμε να βρούμε αν υπάρχουν Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία X_t με συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $R_G(\tau)$ και g μια αύξουσα συνάρτηση τέτοια ώστε $Y_t = g(X_t)$. Η απάντηση γενικά σε αυτό το ερώτημα είναι αρνητική. Για να ισχύει η παραπάνω σχέση θα πρέπει $g = F_{NG}^{-1} \circ \Phi$ όπου F_{NG} και Φ οι CDF των Y_t και X_t αντίστοιχα. Επίσης με βάση την σχέση για την αυτοσυσχέτιση των μεταβατικών πεδίων (translation fields) θα πρέπει να ισχύει η σχέση

$$R_{NG}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)g(y)\phi(x, y, \rho(\tau))dxdy \quad (3.5)$$

όπου $\phi(x, y, \rho) = \frac{1}{2\pi\sigma_X^2\sqrt{1-\rho^2}} e^{-\frac{(x^2+y^2-2xy\rho)}{2\sigma_X^2(1-\rho^2)}}$ η πυκνότητα της κανονικής κατανομής με συντελεστή συσχέτισης ρ . Η παραπάνω εξίσωση πρέπει να επιλυθεί ως προς $\rho(\tau) = \frac{R_G(\tau)}{\sigma_X^2}$ όπου αυτό είναι δυνατό, είτε αριθμητικά. Υπάρχουν δύο περιπτώσεις ασυμβατότητας. Η πρώτη είναι $\xi(\tau) = \frac{R_{NG}(\tau)}{\sigma_Y^2}$ να μην παίρνει τιμές στο $[\xi^*, 1]$ και η δεύτερη περίπτωση είναι όταν η λύση της παραπάνω εξίσωσης καταλήγει σε $\rho(\tau) = \frac{R_G(\tau)}{\sigma_X^2}$ που δεν είναι μη αρνητικά ορισμένη ή ισοδύναμα η αντίστοιχη PSDF να μην είναι μη αρνητική.

3.2 Ο αλγόριθμος του Grigoriu

Βήμα 1ο

Αρχικά ελέγχουμε αν $\xi(\tau) \in [\xi^*, 1]$. Αν δεν ισχύει αυτή, η $\xi(\tau) = \frac{R_{NG}(\tau)}{\sigma_Y^2}$ δεν είναι συνάρτηση αυτοσυσχέτισης. Στη συνέχεια επιλύουμε αριθμητικά ως προς $\rho(\tau)$ την

$R_{NG}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)g(y)\phi(x, y, \rho(\tau))dxdy$ όπου $g = F_{NG}^{-1} \circ \Phi$. Η επίλυση μπορεί να γίνει ως εξής. Ξεκινάμε με την τιμή $\rho_0(\tau) = \xi(\tau)$ και υπολογίζουμε μέσω της σχέσης 3.5 μια

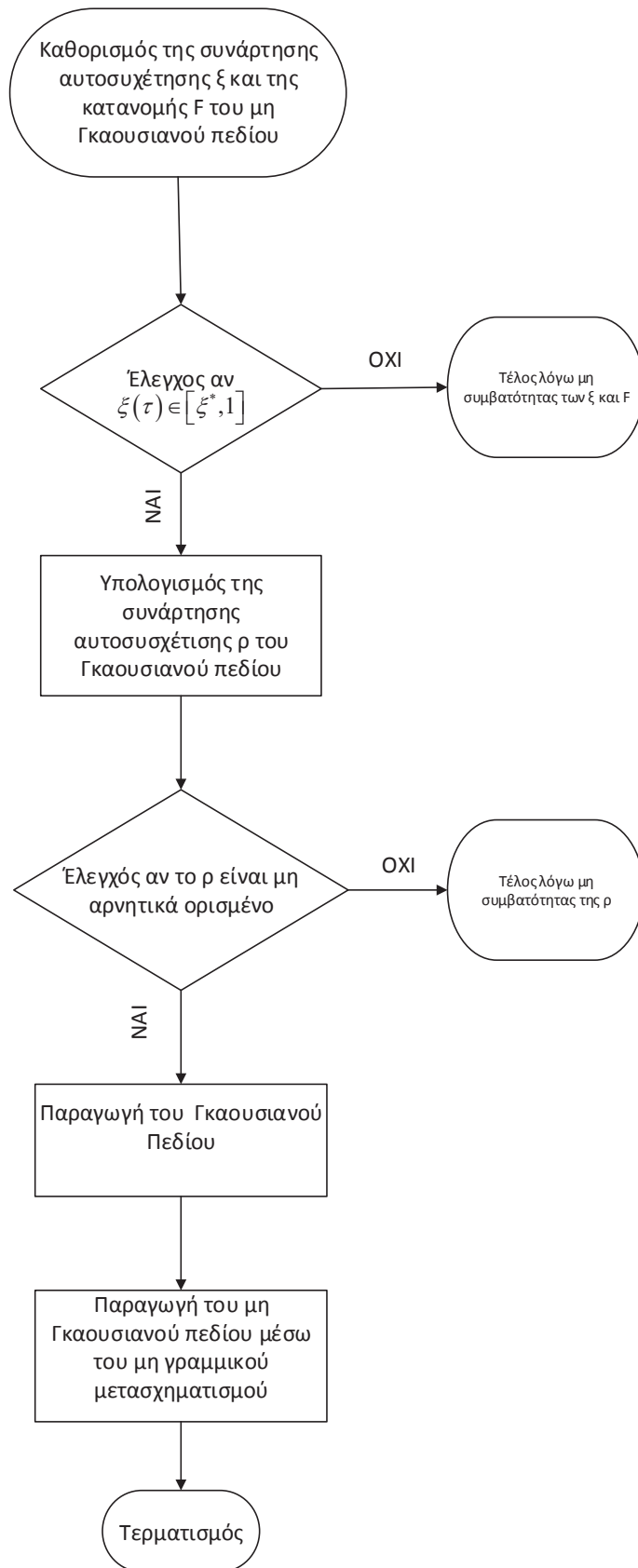
νέα τιμή $\xi_1(\tau)$. Επίσης μπορούμε να παραγωγίσουμε την σχέση 3.5 ως προς τ . Έτσι ανάλογα με τις τιμές των $\xi_1(\tau)$ και $\frac{d\xi_1}{d\tau}$ υπολογίζουμε την $\rho(\tau)$. Αν πχ $\xi_1(\tau) < \xi(\tau)$ και $\frac{d\xi_1}{d\tau} > 0$ τότε επιλέγουμε $\rho_1(\tau) > \rho_0(\tau)$. Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι $\|\xi_n(\tau) - \xi(\tau)\|$ να είναι αρκετά μικρή. Στη συνέχεια ελέγχουμε αν η $\rho(\tau)$ που προκύπτει με αυτή τη διαδικασία είναι μη αρνητικά ορισμένη δηλαδή αν για κάθε $a \in \mathbb{R}^*$ και αυθέρτες χρονικές στιγμές (t, \dots, t_n) και $\rho^n = \{\rho(t_i - t_j)\}$, $i, j = 1, \dots, n$ να ισχύει $a^T \rho^n a \geq 0$. Αν η $\rho(\tau)$ δεν είναι μη αρνητικά ορισμένη δεν μπορεί να είναι συνάρτηση αυτοσυσχέτισης οπότε τερματίζεται ο αλγόριθμος.

Βήμα 2ο

Αν έχουμε προσδιορίσει την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $\rho(\tau)$ μπορούμε να παράξουμε την Γκαουσιανή στοχαστική διαδικασία X_t με κάποια από τις μεθόδους που αναφέρθηκαν παραπάνω. Αν χρησιμοποιήσουμε την Spectral Representation Method η PSDF υπολογίζετε από την $\rho(\tau)$ με τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier.

Βήμα 3ο

Εφόσον έχουμε παράξει το X_t μπορούμε να παράξουμε δείγμα του μη Γκαουσιανού στοχαστικού πεδίου Y_t μέσω του μετασχηματισμού όπου $Y_t = g(X_t)$ όπου $g = F_{NG}^{-1} \circ \Phi$ και F_{NG} οι CDF των Y_t και X_t αντίστοιχα.



Σχήμα 3.1: Ο Αλγόριθμος του Grigoriu

3.3 Ο αλγόριθμος των Yamazaki και Shinozuka

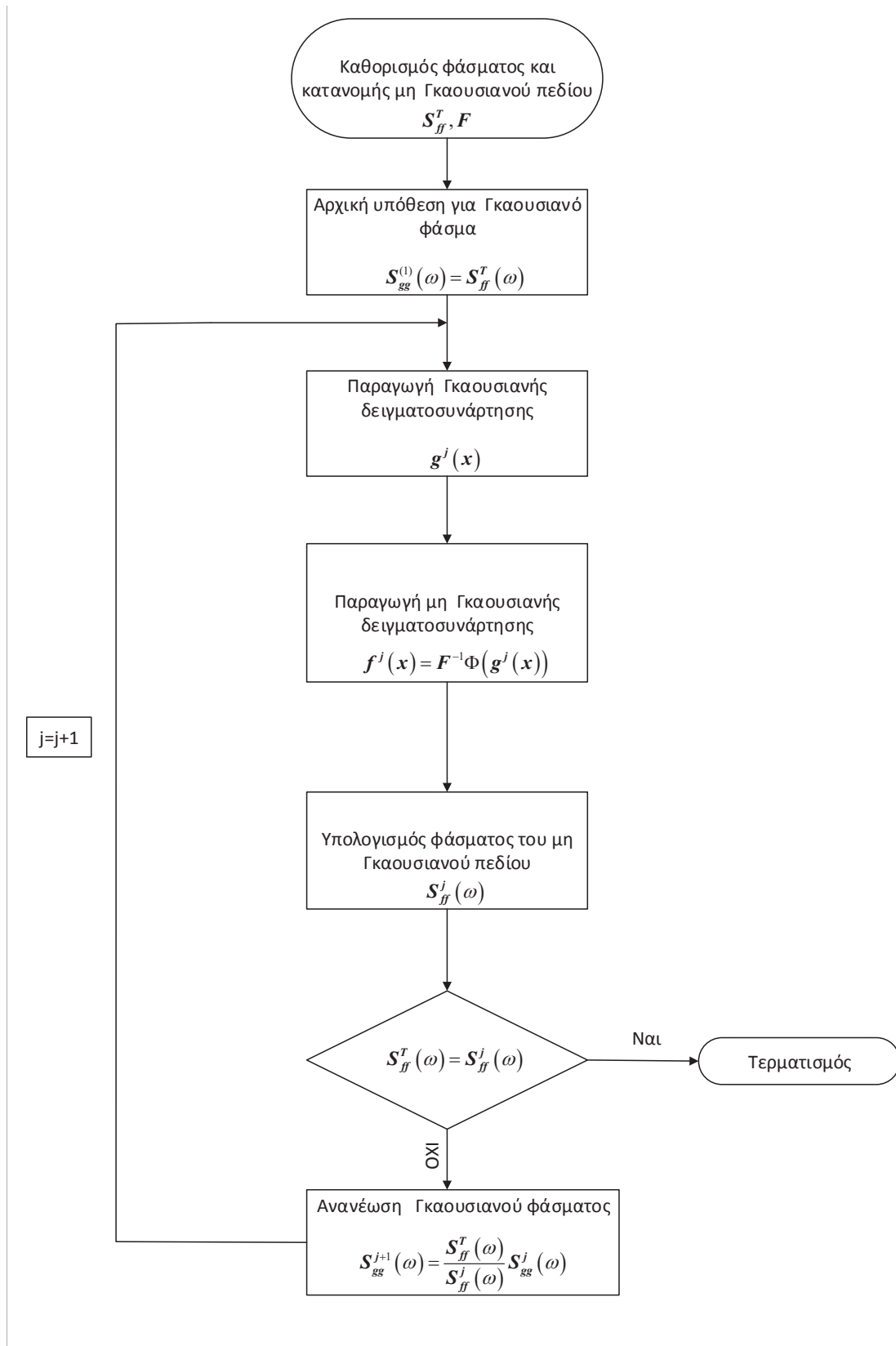
Έστω $f(x)$ μία μη Γκαουσιανή στάσιμη στοχαστική διαδικασία μηδενικής μέσης τιμής με συνάρτηση κατανομής F και συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος S_{ff}^T (T από το target). Οι Yamazaki και Shinozuka πρότειναν μία επαναληπτική διαδικασία σύμφωνα με την οποία το Γκαουσιανό φάσμα $S_{gg}(\omega)$ ανανεώνεται σε κάθε επανάληψη με τέτοιον τρόπον ώστε η τελική δειγματοσυνάρτηση $f_0(x)$ να έχει τόσο την προκαθορισμένη συνάρτηση κατανομής όσο και την προκαθορισμένη συνάρτηση πυκνότητας φασματικής ισχύος. Η διόρθωση του φάσματος $S_{gg}(\omega)$ κατά την $(j + 1)$ επανάληψη γίνεται με βάση τη σχέση

$$S_{gg}^{j+1}(\omega) = \frac{S_{gg}^j(\omega)}{S_{ff}^j(\omega)} S_{ff}^T(\omega) \quad (3.6)$$

όπου $S_{gg}^j(\omega)$ είναι το φάσμα ισχύος που χρησιμοποιήθηκε για την παραγωγή της Γκαουσιανής δειγματοσυνάρτησης στην τρέχουσα (j) επανάληψη και $S_{gg}(\omega)$ είναι το φάσμα ισχύος της μη Γκαουσιανής δειγματοσυνάρτησης $f_0^j(x)$ που παράχθηκε στην τρέχουσα επανάληψη. Το φάσμα αυτό υπολογίζεται από τη σχέση

$$S_{ff}^j(\omega) = \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T f_0^j(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \quad (3.7)$$

όπου είναι το «μήκος» της δειγματοσυνάρτησης $f_0^j(x)$ το οποίο λαμβάνεται συνήθως ίσο με την περίοδο της Γκαουσιανής διαδικασίας $T = T_0$. Τα βήματα του αλγορίθμου παρουσιάζονται στο λογικό διάγραμμα του. Για μη Γκαουσιανές διαδικασίες με κατανομές που δεν απέχουν πολύ από την Γκαουσιανή (έχουν δηλ. μικρή λοξότητα), η παραπάνω επαναληπτική διαδικασία οδηγεί σε αρκετά ακριβή αποτελέσματα. Όταν όμως πρόκειται για στοχαστικές διαδικασίες που ακολουθούν κατανομές μεγάλης λοξότητας, τότε ο αλγόριθμος εμφανίζει δυσκολίες στον ακριβή προσδιορισμό της συνάρτησης κατανομής και ακόμα περισσότερο στον υπολογισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας (ιδιαίτερα των ακραίων τιμών αυτής).



Σχήμα 3.2: Ο Αλγόριθμος των Yamazaki και Shinozuka

3.4 Ο αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti

Όπως προαναφέρθηκε ο αλγόριθμος των Yamazaki-Shinozuka παρουσιάζει δυσκολίες στον ακριβή προσδιορισμό της συνάρτησης κατανομής διαδικασιών μεταφοράς μεγάλης λοξότητας. Έστω ότι κατά την εκκίνηση της $(j + 1)$ επανάληψης παράγεται, με χρήση της μεθόδου φασματικής απεικόνισης, η ακόλουθη διαδικασία Gauss:

$$g_0^{j+1}(x) = 2 \sum_{k=0}^{N-1} \sqrt{S_{gg}^{j+1}(\omega_k) \Delta\omega} \cos(\omega_k x + \phi_k) \quad (3.8)$$

με $S_{gg}^{j+1}(\omega_k)$ να δίδετε από τη σχέση $\omega_k = k\Delta\omega$.

Το φάσμα $S_{ff}^j(\omega)$ (φάσμα ισχύος της μη Γκαουσιανής δειγματοσυνάρτησης $f_0^j(x)$ που παράχθηκε στην (j) επανάληψη) προσδιορίζεται με βάση την

$$\begin{aligned} S_{ff}^j(\omega) &= \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T f_0^j(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 = \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T F^{-1} \Phi(g_0^j(t)) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T F^{-1} \Phi \left(2 \sum_{k=0}^{N-1} \sqrt{S_{gg}^j(\omega_k)} \cos(\omega_k x + \phi_k) \right) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Από την τελευταία σχέση, φαίνεται ότι το φάσμα $S_{ff}^j(\omega)$ εξαρτάται από τις τυχαίες γωνίες φάσης ϕ_k , $k = 1, \dots, N_1$. Εφόσον το $S_{ff}^j(\omega)$ υπεισέρχεται στον υπολογισμό του $S_{gg}^{j+1}(\omega)$ σύμφωνα με την 3.6 και εφόσον το $S_{gg}^{j+1}(\omega)$ χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της $g_0^{j+1}(x)$ σύμφωνα με την 3.8, γίνεται προφανές ότι οι όροι του αθροίσματος στην 3.8 δεν είναι πια ανεξάρτητοι μεταξύ τους αφού κάθε όρος εξαρτάται τώρα από όλες τις (ανεξάρτητες) γωνίες φάσης ϕ_k των προηγούμενων βημάτων. Αυτές οι ανεπιθύμητες συσχετίσεις που εμφανίζονται μεταξύ των όρων του αθροίσματος μετά την πρώτη επανάληψη, έχουν δύο βασικές συνέπειες :

- Η $g_0^{j+1}(x)$ δεν θα είναι Γκαουσιανή διαδικασία μετά την πρώτη επανάληψη. Αρκεί να υπενθυμιστεί ότι, προκειμένου να είναι ασυμπτωτικά διαδικασία Gauss καθώς το $N \rightarrow \infty$, το κεντρικό οριακό θεώρημα απαιτεί οι όροι του αθροίσματος να είναι ανεξάρτητοι. Εφόσον κατά την πρόοδο των επαναλήψεων δημιουργούνται συσχετίσεις μεταξύ των όρων, η στοχαστική διαδικασία δεν θα είναι Γκαουσιανή. Στον αλγόριθμο των Yamazaki - Shinozuka αυτό δεν λαμβάνεται υπόψη και ο μετασχηματισμός της χρησιμοποιείται σαν να ήταν Γκαουσιανή. Κατά συνέπεια, η παραγόμενη δειγματοσυνάρτηση δεν θα έχει την προκαθορισμένη συνάρτηση κατανομής F .

- Με βάση την σχέση $g_0^{j+1}(x) = 2 \sum_{k=0}^{N-1} \sqrt{S_{gg}^{j+1}(\omega_k) \Delta\omega} \cos(\omega_k x + \phi_k)$ και γνωρίζοντας ότι οι όροι $S_{gg}^{j+1}(\omega_k) \Delta\omega$ δεν εξαρτώνται από τα ϕ_k , $k = 1, \dots, N_1$ καθώς και τον ορισμό της μέσης τιμής και της αυτοσυσχέτισης προκύπτει ότι το πεδίο είναι ασθενώς στάσιμο. Όμως είδαμε πριν ότι οι συντελεστές $S_{gg}^{j+1}(\omega_k) \Delta\omega$ εξαρτώνται από τα ϕ_k , $k = 1, \dots, N_1$ των προηγούμενων επαναλήψεων και άρα όταν ολοκληρώνουμε για να πάρουμε μέση τιμή ή

αυτοσυσχέτιση δεν μπορούν να βγουν έξω από το ολοκλήρωμα και άρα χάνεται η ιδιότητα της ασθενούς στασιμότητας για το πεδίο.

Ο αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti επιλύει αυτό το πρόβλημα ως εξής. Αντί να χρησιμοποιήσουμε την CDF της κανονικής κατανομής στην σχέση $F_{NG}^{-1} \circ \Phi$ υπολογίζουμε σε κάθε βήμα την εμπειρική CDF G της g με βάση τα παρακάτω. Έστω ότι η $g(x)$ είναι γνωστή σε N διακριτά σημεία $x = i\Delta x$ με $i = 1, \dots, N$. Τότε η PDF της g εκτιμάται ως εξής $p(g) = \frac{N_g}{NW}$ όπου $W = \frac{g_{\max} - g_{\min}}{L}$ είναι διάστημά μικρού μήκους με $g_{\max} - g_{\min}$ την μέγιστη και την ελάχιστη τιμή της g , N_g το πλήθος των $g(i\Delta x)$ που βρίσκονται εντός του διαστήματος W . Το πλήθος των διαστημάτων επιλέγεται περίπου ίσο με $L \simeq N \div 5N$. Με αριθμητική ολοκλήρωση της $\tilde{p}(g)$ παίρνουμε την εμπειρική CDF G της g . Εναλλακτικώς θα μπορούσε να εφαρμοστεί για τον υπολογισμό της εμπειρικής CDF G η μέθοδος smoothing kernel. Στην συνέχεια και εφόσον η CDF της μη Γκαουσιανής είναι γνωστή με interpolation βρίσκουμε τα σημεία $f(i\Delta x)$ τέτοια ώστε $F(f(i\Delta x)) = G(g(i\Delta x))$.

Μια άλλη βελτίωση του αλγόριθμου των Deodatis και Micaletti είναι ο τρόπος ανανέωσης του Γκαουσιανού φάσματος

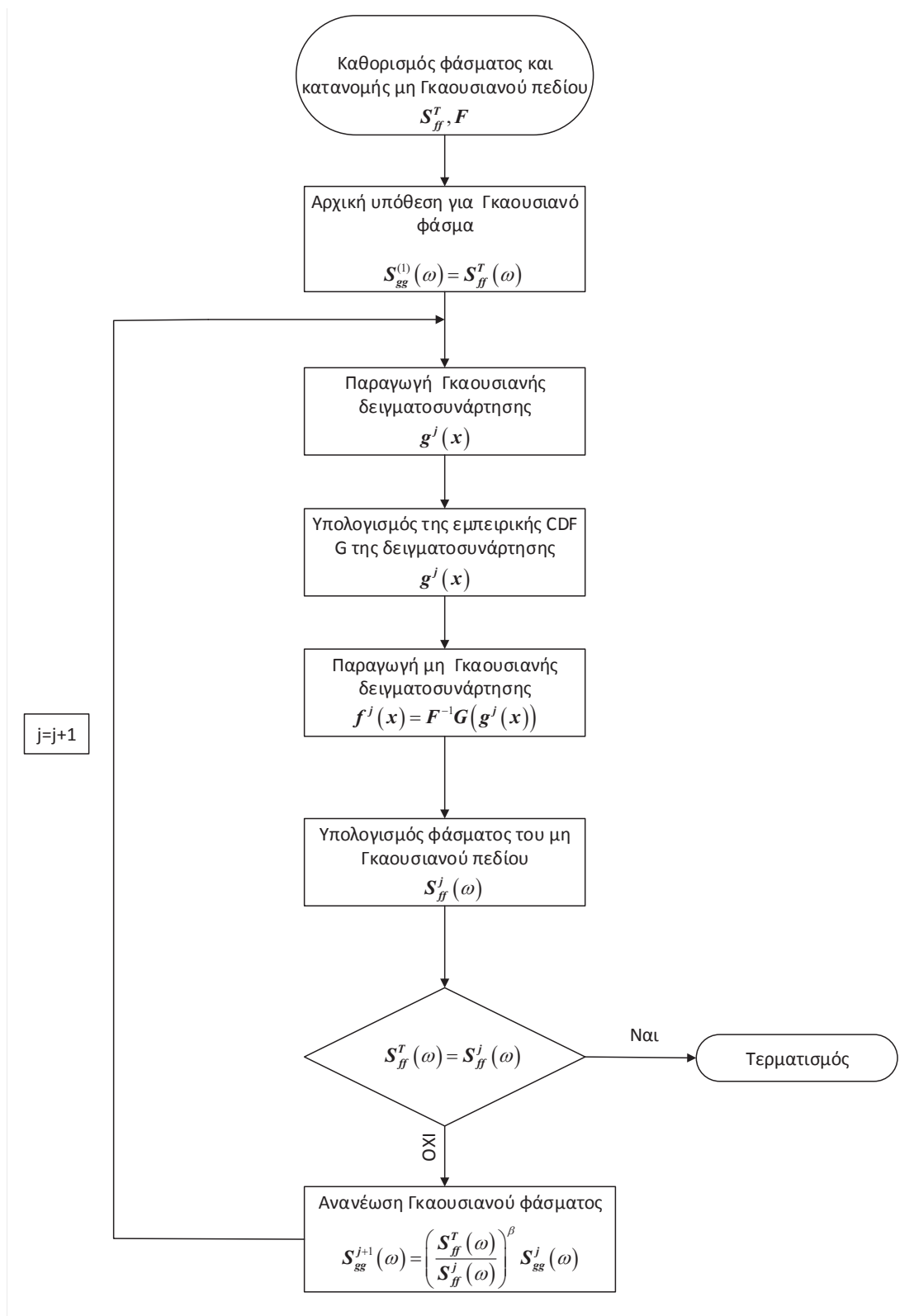
$$S_{gg}^{j+1}(\omega) = \left(\frac{S_{ff}^T(\omega)}{S_{ff}^j(\omega)} \right)^\beta S_{gg}^j(\omega). \quad (3.10)$$

Στον αλγόριθμό Yamazaki-Shinozuka $\beta = 1$. Προκύπτει από αριθμητικά πειράματα ότι μια τιμή β της τάξεως του 0.3 βοηθάει σημαντικά την συγκλιση. Τέλος ο αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti κάνει χρήση του θεωρήματος αλλαγής της συχνότητας του Paroulis και υπολογίζει το φάσμα στις τιμές $\omega = \omega_k = k\Delta\omega + \frac{\Delta\omega}{2}$ για να μπορούμε να δουλέψουμε με φάσματα που δεν μηδενίζονται στο 0. Αυτό έχει βέβαια σαν αποτέλεσμα το διπλασιασμό της περιόδου των δειγματοσυναρτήσεων αυξάνοντας έτσι το υπολογιστικό κόστος.

Ένα πρόβλημα του αλγόριθμου είναι ότι η $f(x)$ είναι μη Γκαουσιανή οπότε χάνεται η εργοδικότητα και επομένως η

$$S_{ff}^j(\omega) = \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T f_0^j(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2$$

δεν είναι καλή εκτίμηση του φάσματος. Ένας τρόπος για να επιλυθεί αυτό το πρόβλημά είναι να χρησιμοποιηθεί μια επαναληπτική διαδικασία Monte-Carlo δηλαδή να παραχθούν M δειγματοσυναρτήσεις $f^j(x)$ με $j = 1, \dots, M$ και στην συνέχεια το φάσμα να εκτιμηθεί με την $S_{ff}(\omega) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M S_{ff}^j(\omega)$. Εναλλακτικώς θα μπορούσε να εφαρμοστεί για τον υπολογισμό κάποια τεχνική από ανάλυση σήματος όπως η moving window technique.



Σχήμα 3.3: Ο Αλγόριθμος των Deodatis και Micaletti

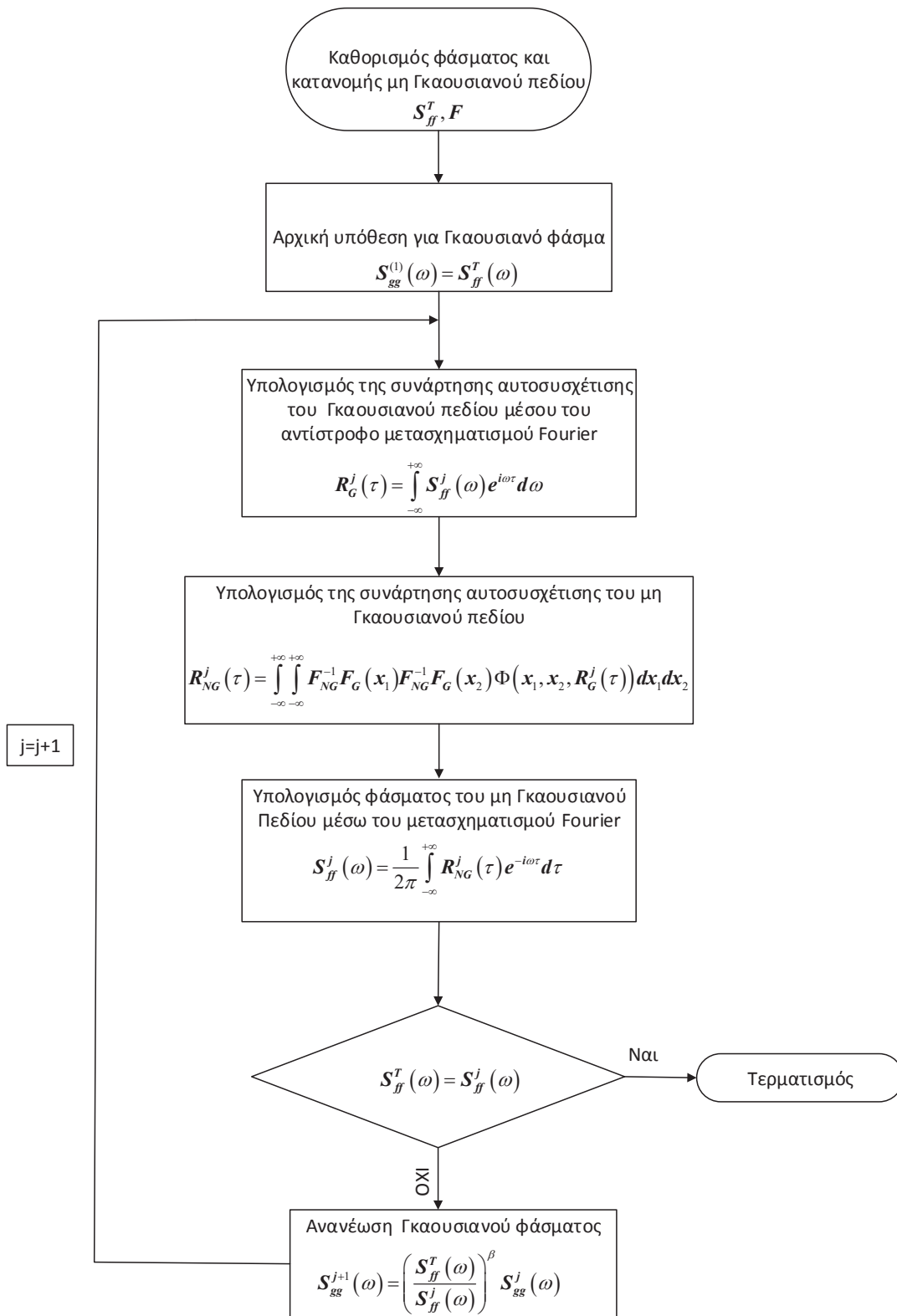
3.5 Ο αλγόριθμος των Shields, Deodatis και Bocchini

Ένα βασικό μειονέκτημα του αλγόριθμου των Deodatis και Micaletti είναι ότι είναι υπολογιστικά δαπανηρός. Το μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος είναι στην παραγωγή των Γκαουσιανών δειγματοσυναρτήσεων $g(x)$ ειδικά όταν η $f(x)$ είναι ισχυρά μη Γκαουσιανή οπότε απαιτείται η επαναληπτική διαδικασία Monte-Carlo για την εκτίμηση του φάσματος. Για αποφευχθούν τα παραπάνω οι Shields, Deodatis και Bocchini πρότειναν τα εξής. Υποθέτοντας αρχικά ένα Γκαουσιανό φάσμα μέσω του αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier υπολογίζουμε την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του Γκαουσιανού πεδίου και στην συνέχεια με βάση την σχέση

$$R_{NG}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)g(y)\phi(x, y, \rho(\tau))dxdy \quad (3.11)$$

υπολογίζουμε την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του μη Γκαουσιανού πεδίου. Στην συνέχεια με βάση τον μετασχηματισμό Fourier υπολογίζουμε το φάσμα του μη Γκαουσιανού πεδίου. Επαναλαμβάνουμε μέχρι να πετύχουμε το γνωστό μη Γκαουσιανό φάσμα.

Το κύριο μειονέκτημα του παραπάνω αλγόριθμου είναι ότι αποκλίνει αισθητά από την επιθυμητή *cdf* καθώς το παραγόμενο φάσμα μπορεί να μην είναι καν πραγματικό. Το συγκεκριμένο πρόβλημα θα μπορούσε να βελτιωθεί χρησιμοποιώντας κάθε φορά που υπολογίζουμε την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης τον αλγόριθμο του πλησιέστερου πίνακα συσχέτισης όπως περιγράφεται στο παράρτημα.



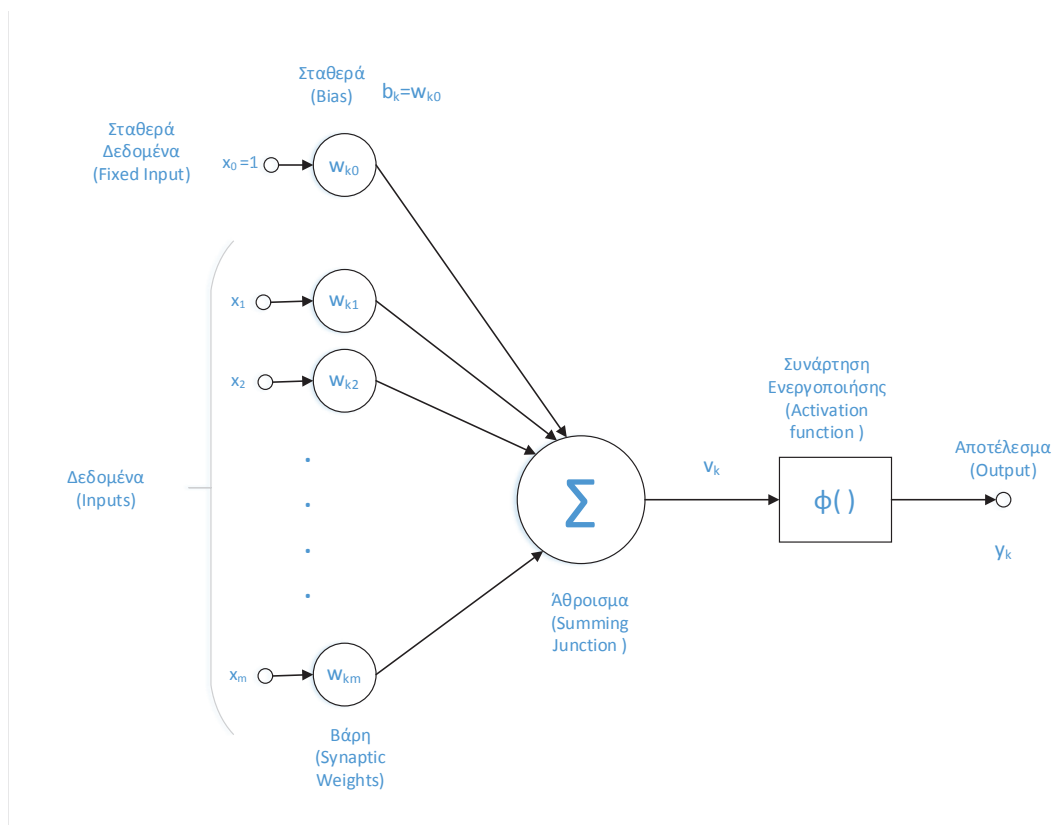
Σχήμα 3.4: Ο αλγόριθμος των Shields, Deodatis και Bocchini

3.6 Ο αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis

Ο αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis βελτιώνει την σύγκλιση του αλγόριθμου των Deodatis και Micaletti ανανεώνοντας το Γκαουσιανό φάσμα με χρήση νευρωνικών δικτύων.

3.6.1 Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα

Τα πολυεπίπεδα δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης (Multilayer Perceptrons) αποτελούν μια θεμελιώδη κατηγορία νευρωνικών δικτύων. Ένα τέτοιο δίκτυο αποτελείται από ένα σύνολο αισθητήρων που αποτελούν το επίπεδο εισόδου, ένα ή περισσότερα κρυμμένα επίπεδα στα οποία γίνονται οι διάφοροι υπολογισμοί και ένα επίπεδο εξόδου. Το πρότυπο που παρουσιάζεται στο επίπεδο εισόδου διαδίδεται κατά την εμπρόσθια διεύθυνση, επίπεδο προς επίπεδο. Ένας διαδεδομένος αλγόριθμος που εφαρμόζεται για την εκπαίδευση πολυεπίπεδων δικτύων εμπρόσθιας τροφοδότησης είναι ο αλγόριθμος οπίσθιας διάδοσης (Back Propagation).

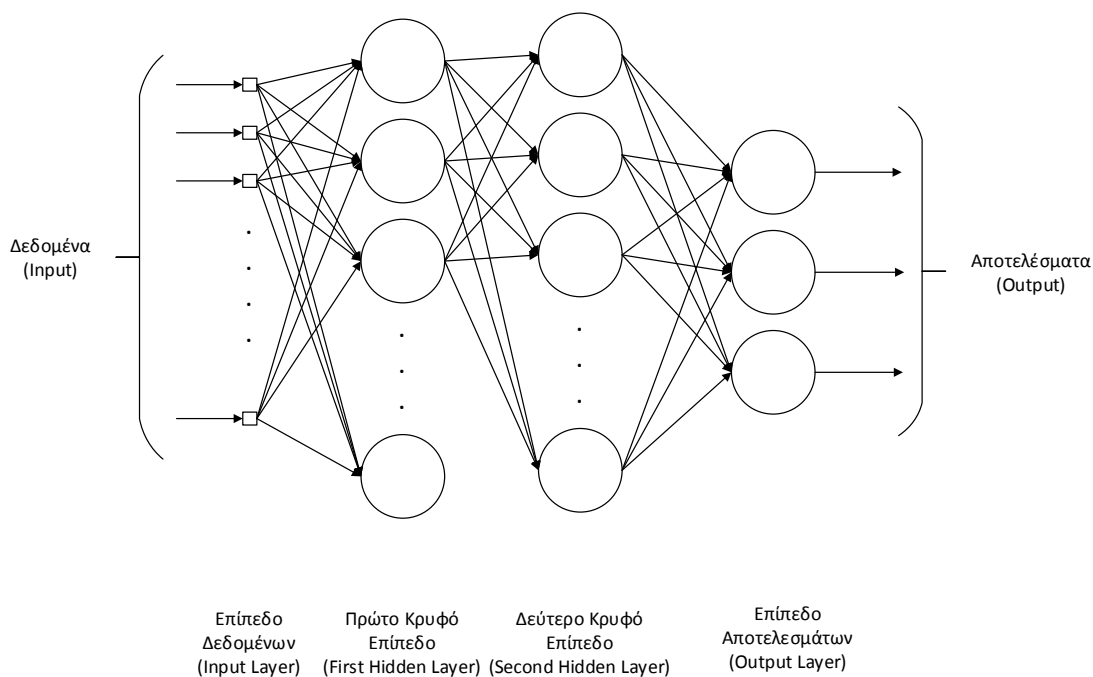


Σχήμα 3.5: Ο νευρώνας του Rosenblatt (Rosenblatt's Perceptron)

Τα χαρακτηριστικά του πολυεπίπεδου perceptron είναι τα εξής:

- Κάθε νευρώνας του δικτύου περιλαμβάνει μία μη γραμμική (διαφορίσιμη) συνάρτηση ενεργοποίησης.
- Το δίκτυο αποτελείται από ένα ή περισσότερα κρυμμένα επίπεδα νευρώνων, τα οποία δεν αποτελούν είσοδο ή έξοδο και του παρέχουν τη δυνατότητα μάθησης.
- Το δίκτυο έχει μεγάλο βαθμό συνεκτικότητας, που καθορίζεται από τις συνάψεις του.

Ο συνδυασμός των παραπάνω χαρακτηριστικών, μαζί με την ικανότητα της μάθησης μέσω της εκπαίδευσης προσδίδει στο δίκτυο μεγάλη υπολογιστική ισχύ. Στη σχεδίαση ενός νευρωνικού δικτύου υπεισέρχονται πολλά θέματα αρχιτεκτονικής στα οποία δεν υπάρχει συγκεκριμένη λύση.



Σχήμα 3.6: Πολυεπίπεδο νευρωνικό δίκτυο (multilayer neural network)

3.6.2 Ο αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης

Ας θεωρήσουμε το παρακάτω πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς: εύρεση του μητρώου ή διανύσματος w που ελαχιστοποιεί την ακόλουθη βαθμωτή πραγματική συνάρτηση $E = E(w)$ που ονομάζεται αντικειμενική συνάρτηση ή συνάρτηση κόστους ή συνάρτηση ενέργειας. Θεωρούμε ένα σύνολο m ζευγών εισόδου-εξόδου $(inp, tar) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k$. Το σύνολο αυτό ονομάζεται σύνολο εκπαίδευσης (training set) και αποτελείται από έναν πεπερασμένο αριθμό m ζευγών, όπου η πρώτη συντεταγμένη αντιστοιχεί σε ένα σημείο χώρου των δεδομένων εισόδου και η δεύτερη σε ένα σημείο του χώρου των δεδομένων εξόδου (επιθυμητή λύση). Ο αλγόριθμος που συνήθως χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της σχέσης που συνδέει τους δύο χώρους

$\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^k$ είναι αυτός της πίσω διάδοσης (back propagation). Κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης του δικτύου, ο αλγόριθμος αυτός προσδιορίζει μία ομάδα παραμέτρων που ονομάζονται βάρη με τελικό στόχο τον υπολογισμό της επιθυμητής απόκρισης για κάθε διάνυσμα εισόδου που εφαρμόζεται στο δίκτυο. Εάν η εκπαίδευση είναι επιτυχής, η εφαρμογή μίας ομάδας δεδομένων στο δίκτυο δίνει την επιθυμητή (σωστή) ομάδα αποτελεσμάτων. Επομένως, στην εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων, το w αντιστοιχεί στο μητρώο των αγνώστων ποσοτήτων που πρόκειται να προσδιοριστούν (βάρη) ενώ η αντικειμενική συνάρτηση ορίζεται ως εξής

$$E(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m E_i(w) \quad (3.12)$$

είναι προς ελαχιστοποίηση. Το $E_i(w)$ είναι η συνολική ενέργεια σφάλματος για το i ζεύγος του συνόλου εκπαίδευσης (total instantaneous error energy) και υπολογίζεται από την σχέση $E_i(w) = \sum_{j=1}^k E_{i,j}(w)$ όπου $E_{i,j}(w)$ είναι η συνολική ενέργεια σφάλματος για το i ζεύγος του συνόλου εκπαίδευσης του j νευρώνα εξόδου του δικτύου (instantaneous error energy of j neuron) και ορίζεται ως $E_{i,j}(w) = \frac{1}{2} e_{i,j}(w)^2$ όπου $e_{i,j}(w)$ είναι το σήμα σφάλματος του j νευρώνα εξόδου του δικτύου (error signal) και ορίζεται ως $e_{i,j}(w) = tar_{i,j} - out_j(inp_i, w)$ όπου $inp_i \in \mathbb{R}^n$ είναι το διάνυσμα εισόδου για το i ζεύγος του συνόλου εκπαίδευσης, $tar_{i,j}$ είναι η επιθυμητή απόκριση του του j νευρώνα εξόδου του δικτύου για το i ζεύγος του συνόλου εκπαίδευσης, out_j είναι το σήμα εξόδου του νευρώνα j του δικτύου για τις τρέχουσες τιμές των παραμέτρων βάρους και του διανύσματος εισόδου inp_i .

Οι συναρτήσεις βάρους του δικτύου ανανεώνονται με βάση την σχέση $w_{jk}^{t+1} = w_{jk}^t + \Delta w_{jk}^t$ όπου w_{jk}^0 είναι μικροί (συνήθως τυχαίοι) αριθμοί και j είναι ο αριθμός του νευρώνα από τον οποίο βγαίνει το σήμα. Στη συνέχεια πολλαπλασιάζεται με το βάρος w_{jk} και αφού αθροιστεί με τα αντίστοιχα υπόλοιπα γινόμενα καταλήγει σαν εισόδος στον νευρώνα k του επόμενου επιπέδου του δικτύου. $\Delta w_t = \eta d^t$ με η την παράμετρο μάθησης και d^t η διεύθυνση αναζήτησης της t εποχής (η t επανάληψη συνήθως ονομάζεται εποχή). Η d_t χρησιμοποιεί την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης $E^t(w)$ που υπολογίζεται ως εξής με την οπίσθια διάδοση του σφάλματος $\frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t} = \delta_k out_j$ όπου δ_k είναι το τοπικό διαφορικό (local gradient) και ορίζεται ως:

$$\delta_k = \begin{cases} -e_k \phi(y_k) & \text{αν ο νευρώνας } k \text{ είναι νευρώνας εξόδου} \\ \sum_L \delta_L w_{kL} \phi(y_k) & \text{αν ο νευρώνας } k \text{ δεν είναι νευρώνας εξόδου} \end{cases} \quad (3.13)$$

όπου ϕ είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης και y_k η είσοδος (input) του k νευρώνα. Αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν καθολική πληροφορία της κατάστασης του δικτύου, όπως π.χ. τη διεύθυνση του ολικού διανύσματος ανανέωσης των βαρών, αποτελούν τις καθολικές μεθόδους (global techniques). Αντίθετα οι τοπικές στρατηγικές (local strategies) βασίζονται σε εξειδικευμένη πληροφορία σχετικά με τα βάρη, όπως π.χ. η συμπεριφορά της μερικής παραγώγου ενός συγκεκριμένου βάρους. Η δεύτερη κατηγορία μεθόδων συνδέεται στενότερα με την έννοια του νευρωνικού δικτύου καταναμημένης επεξεργασίας (distributed processing) όπου οι υπολογισμοί γίνονται ανεξάρτητα ο ένας από τον άλλον. Επιπλέον σε πολλές εφαρμογές, οι τοπικές στρατηγικές επιτυγχάνουν ταχύτερη και πιο αξιόπιστη πρόβλεψη από τις καθολικές μεθόδους παρά το γεγονός ότι χρησιμοποιούν μικρότερο όγκο πληροφορίας.

Καθολικές μέθοδοι εκπαίδευσης

Οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενοι αλγόριθμοι αυτής της κατηγορίας είναι εκείνοι της απότομης καθόδου (steepest descent), των συζυγών διανυσματικών κλίσεων (conjugate gradient) και η μέθοδος του Newton με τα εξής διανύσματα διεύθυνσης:

- αλγόριθμος απότομης καθόδου: $d_t = -\nabla E(w_t)$
- αλγόριθμος συζυγών διανυσματικών κλίσεων: $d_t = -\nabla E(w_t) + \beta_{t-1}d_{t-1}$, όπου $\beta_{t-1} = \frac{\nabla E_t \cdot \nabla E_t}{\nabla E_{t-1} \cdot \nabla E_{t-1}}$ (Fletcher and Reeves)
- μέθοδος του Newton: $d_t = -H(w^t)^{-1} \nabla E(w^t)$, όπου $\nabla E(w^t)$ είναι η κλίση (gradient) και $H(w^t)$ είναι το Εσσιανό μητρώο (Hessian matrix) της διανυσματικής συνάρτησης $E(w^t)$.

Οι ιδιότητες σύγκλισης των προηγούμενων αλγορίθμων εξαρτώνται από τις ιδιότητες της πρώτης ή/και δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης προς βελτιστοποίηση. Για παράδειγμα, οι αλγόριθμοι της απότομης καθόδου και των συζυγών διανυσματικών κλίσεων προσδιορίζουν τη διεύθυνση αναζήτησης με βάση την πρώτη παράγωγο, ο ρυθμός σύγκλισής τους όμως εξαρτάται εμμέσως από τις ιδιότητες της δεύτερης παραγώγου. Αντίστοιχα, η μέθοδος του Newton απαιτεί την πρώτη παράγωγο και το Εσσιανό μητρώο για τον καθορισμό της διεύθυνσης αναζήτησης.

Τοπικές μέθοδοι εκπαίδευσης

Για τη βελτίωση των υπολογιστικών επιδόσεων της εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων προτάθηκαν δύο εντελώς διαφορετικές μέθοδοι που ανήκουν στην κατηγορία των τοπικών μεθόδων: η Quickprop και η Rprop.

Η μέθοδος Quickprop

Η μέθοδος αυτή συνίσταται σε έναν αλγόριθμο εκπαίδευσης που αναπτύχθηκε από τον Fahlman και βασίζεται εν μέρει στη μέθοδο του Newton. Ο αλγόριθμος Quickprop χρησιμοποιείται ευρέως για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Η επαναληπτική ανανέωση των βάρων γίνεται με βάση την εκτίμηση της θέσης του ελαχίστου για κάθε βάρος. Τα βάρη ανανεώνονται σύμφωνα με την επόμενη σχέση

$$\Delta w_{jk}^t = \frac{\frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t}}{\frac{\partial E^{t-1}}{\partial w_{jk}^t} - \frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t}} \Delta w_{jk}^{t-1} \quad (3.14)$$

Το υπολογιστικό κόστος εκπαίδευσης βελτιώνεται σημαντικά σε σύγκριση με αυτό των καθολικών μεθόδων.

Η μέθοδος Rprop

Ένας άλλος τοπικός αλγόριθμος εκπαίδευσης που και αναπτύχθηκε από τους Riedmiller και Braun είναι ο αλγόριθμος Rprop (συντομογραφία των λέξεων Resilient backpropagation). Η

σχέση ανανέωσης των βαρών είναι η ακόλουθη:

$$\Delta w_{jk}^t = -\eta_{jk}^t \operatorname{sgn} \left(\frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t} \right) \quad (3.15)$$

όπου

$$\eta_{jk}^t = \begin{cases} \min(a\eta_{jk}^{t-1}, \eta_{\max}) & \frac{\partial E^{t-1}}{\partial w_{jk}^{t-1}} \cdot \frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t} > 0 \\ \max(\beta\eta_{jk}^{t-1}, \eta_{\min}) & \frac{\partial E^{t-1}}{\partial w_{jk}^{t-1}} \cdot \frac{\partial E^t}{\partial w_{jk}^t} < 0 \\ \eta_{jk}^{t-1} & \end{cases}$$

με $a = 1.2$, $\beta = 0.5$, $\eta_{\max} = 50$ και $\eta_{\min} = 0.001$. Είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι, σε αντίθεση με τους άλλους αλγόριθμους, η μέθοδος Rprop χρησιμοποιεί το πρόσημο και όχι το απόλυτο μέγεθος των μερικών παραγώγων. Κάθε φορά που η μερική παράγωγος ενός βάρους w_{jk} αλλάζει πρόσημο, γεγονός που αποδεικνύει ότι η προηγούμενη μεταβολή ήταν μεγάλη και ο αλγόριθμος παράκαμψε ένα τοπικό ελάχιστο, ο συντελεστής η_{jk} μειώνεται κατά β . Εάν η μερική παράγωγος διατηρεί το πρόσημό της, ο συντελεστής η_{jk} αυξάνεται ελαφρώς με σκοπό την επιτάχυνση της σύγκλισης. Οι συντελεστές μεταβολής η_{jk} είναι συνήθως άνω και κάτω φραγμένοι για την αποφυγή αριθμητικών προβλημάτων.

3.6.3 Περιγραφή του αλγόριθμου

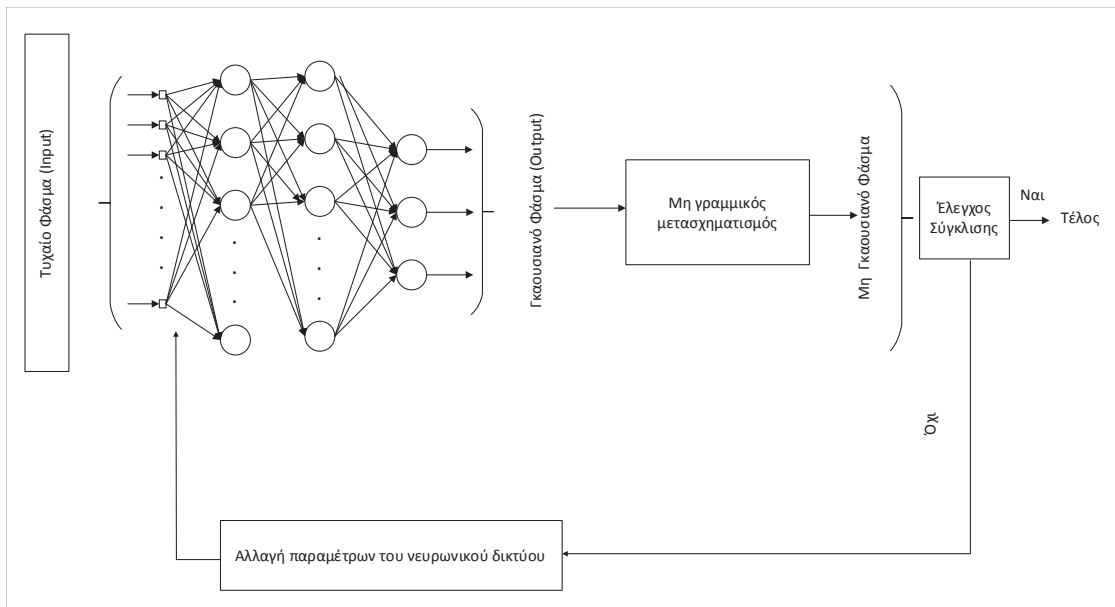
Το κύριο πρόβλημα όλων των παραπάνω αλγόριθμων είναι ο τρόπος ανανέωσης του Γκαουσιανού φάσματος. Ο συντελεστής β βελτιώνει την σύγκλιση αλλά πάλι μπορεί να μην επιτυγχάνεται. Οι Deodatis Bocchini προτείνουν αν δεν υπάρχει περαιτέρω σύγκλιση του αλγόριθμου από ένα σημείο και μετά δηλαδή αν δεν μειώνεται το σφάλμα να εφαρμόσουμε μια τυχαία διαταραχή στο Γκαουσιανό φάσμα ως εξής

$$S_{gg}^{j+1}(\omega) = S_{gg}^j(\omega) + \Delta S(\omega) \quad (3.16)$$

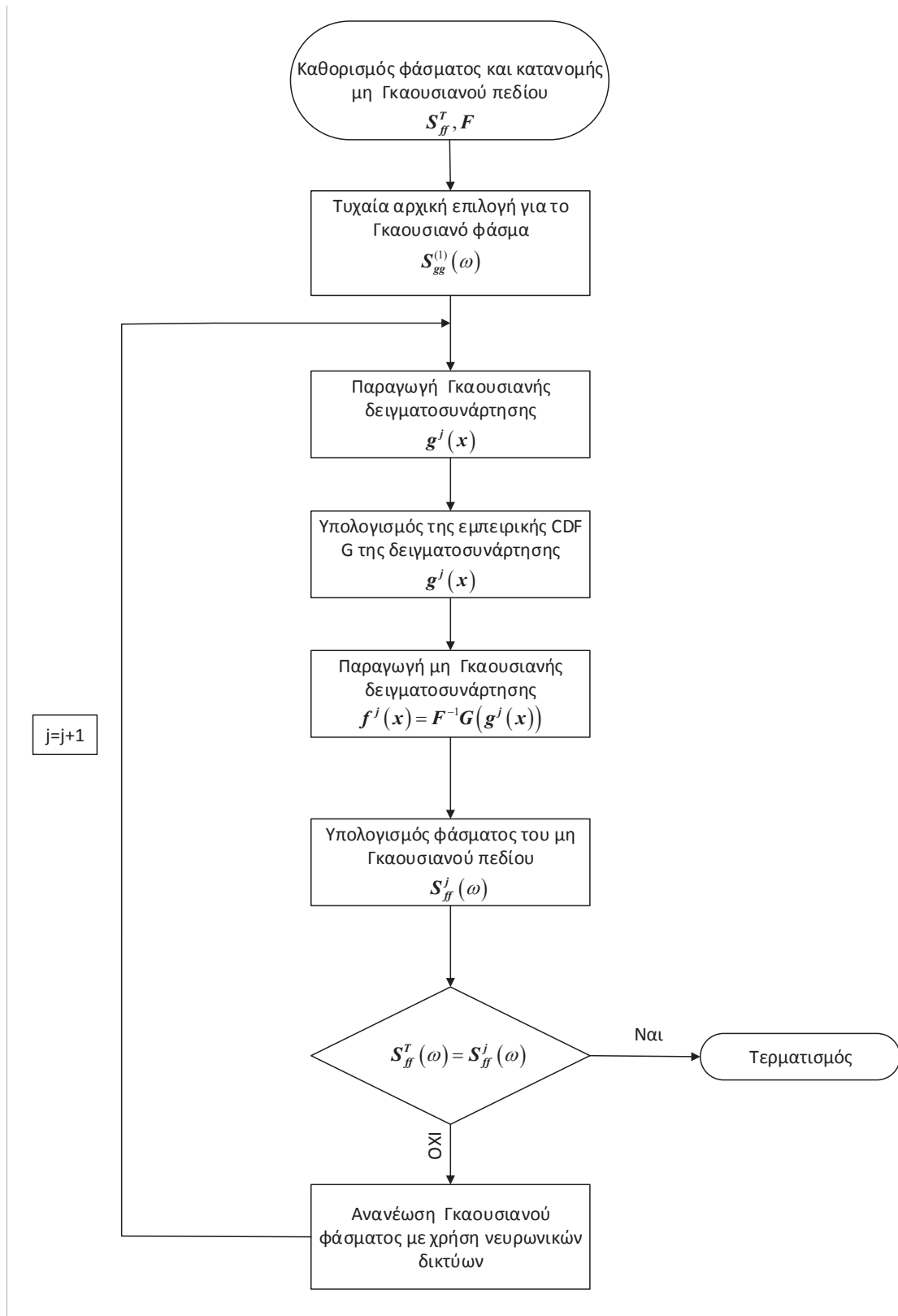
όπου το $\Delta S(\omega) = A e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{40}}$ με ω_0 τυχαία εκλεγμένο στο $[0, \omega_u]$ και $A = \pm \frac{S_{gg}^j(\omega)}{10}$. Τα παραπάνω βελτιώνουν την σύγκλιση αλλά με πολύ μεγάλο υπολογιστικό κόστος.

Η καινοτομία της συγκεκριμένης μεθόδου συνίσταται στην αντικατάσταση του σχήματος ανανέωσης του Γκαουσιανού φάσματος. Η εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων δεν περιλαμβάνει τις τρεις συνήθεις φάσεις εκπαίδευσης, ελέγχου και πρόβλεψης. Η συγκεκριμένη εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων παρουσιάζει δύο ιδιαίτερα χαρακτηριστικά σε σχέση με τη συμβατική διαδικασία. Το πρώτο είναι ότι χρησιμοποιείται μόνο η φάση εκπαίδευσης όπου το σύνολο εκπαίδευσης περιλαμβάνει μόνο ένα ζεύγος εισόδου-εξόδου. Το δiάνυσμα εισόδου αντιστοιχεί στις N δεδομένες τιμές συχνοτήτων ω με τυχαίες τιμές ενώ το δiάνυσμα εξόδου στις N τιμές του δεδομένου μη Γκαουσιανού φάσματος. Το δεύτερο χαρακτηριστικό της παρούσας εφαρμογής των νευρωνικών δικτύων είναι ότι το δiάνυσμα εξόδου δεν ταυτίζεται με την απόκριση (εξαγόμενο) του δικτύου. Η απόκριση του δικτύου αντιστοιχεί στο άγνωστο Γκαουσιανό φάσμα ενώ το δiάνυσμα εξόδου στο δεδομένο μη Γκαουσιανό φάσμα. Η αντικειμενική συνάρτηση του νευρωνικού δικτύου είναι η

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_\omega} \left[S_{ff}^T(\omega_k) - S_{ff}^j(\omega_k) \right]^2. \quad (3.17)$$



Σχήμα 3.7: Ο Αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis (A)



Σχήμα 3.8: Ο Αλγόριθμος των Lagaros, Stefanou και Papadrakakis (B)

3.7 Αριθμητικές εφαρμογές

Στα παρακάτω θα παρουσιάσουμε αριθμητικές εφαρμογές των παραπάνω αλγόριθμων. Για την παραγωγή των Γκαουσιανών πεδίων έχουν χρησιμοποιηθεί οι τιμές του παραδείγματος. Συγκεκριμένα οι συχνότητες έχουν διακριτοποιηθεί με $N_\omega = 100$ σημεία και μέχρι το $\omega_u = 2 \text{ rad/m}$ με βήμα $d\omega = \frac{\omega_u}{N_\omega} = 0.02 \text{ rad/m}$. Επίσης το δείγμα έχει παραχθεί στο σύνολο μήκους μιας περιόδου $[x_u, x_o]$ με διακριτοποίηση $N_x = 500$ σημείων και $x_u = 0, x_o = T = \frac{2\pi}{d\omega} = 314.16 \text{ m}$ με βήμα $dx = 0.6283 \leq \frac{\pi}{\omega_u} = 1.57$. Θεωρούμε σαν επιθυμητό φάσμα του μη Γκαουσιανού πεδίου το $S_{ff}^T(\omega) = \frac{125}{4}\omega^2 e^{-|5\omega|}$ και επιθυμητές μη Γκαουσιανές κατανομές τις

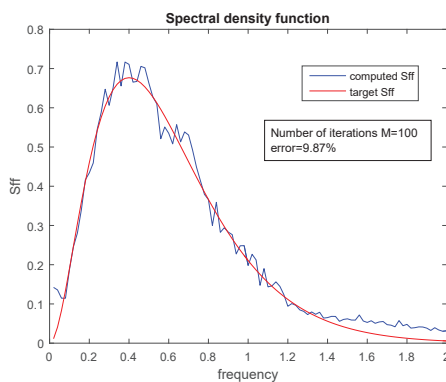
- i. $F_{NG}(x) = \Phi\left(\text{sign}(x)|x|^{1/3}\right)$ με $x \in \mathbb{R}$ και Φ η *cdf* της κανονικής κατανομής
- ii. $F_{NG}(x) = \Phi\left(\frac{\log(x-\alpha)}{\beta}\right)$ με $\alpha = -1.8 \in \mathbb{R}, \beta = 1 > 0$ και $x > \alpha$

Η πρώτη αντιστοιχεί στην $Y_t = X_t^3$ με X_t Γκαουσιανό πεδίο και η δεύτερη αντιστοιχεί στην *lognormal*.

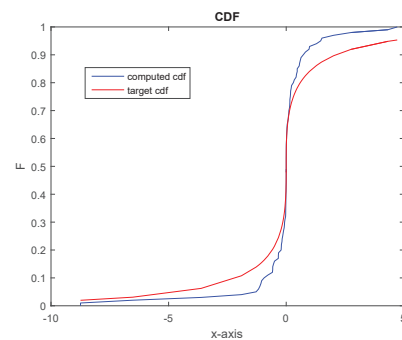
Έχουμε χρησιμοποιήσει μια παραλλαγή που θα έλεγα είναι ανάμεσα στους αλγόριθμους των Yamazaki και Shinozuka, Deodatis και Micaletti. Συγκεκριμένα η χρησιμοποιείται η σχέση $g = F_{NG}^{-1} \circ \Phi$ δηλαδή η σχέση των Yamazaki και Shinozuka για την παραγωγή των μη Γκαουσιανών δειγμάτων ενώ για τον υπολογισμό του μη Γκαουσιανού φάσματος έχει χρησιμοποιηθεί η σχέση $S_{XX}(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \mathbf{E}(S_{XX}(\omega, T, k))$ όπου για τον υπολογισμό της μέσης τιμής έχουν παραχθεί 100 δείγματα του μη Γκαουσιανού πεδίου. Τέλος το φάσμα ανανεώνεται όπως στον αλγόριθμο των Deodatis και Micaletti με την

$$S_{gg}^{j+1}(\omega) = \left(\frac{S_{ff}^T(\omega)}{S_{ff}^j(\omega)}\right)^\beta S_{gg}^j(\omega)$$

και $\beta = 0.3$. Στα παρακάτω σχήματα βλέπουμε τα αποτελέσματα 100 επαναλήψεων και τα αντίστοιχα σφάλματα.

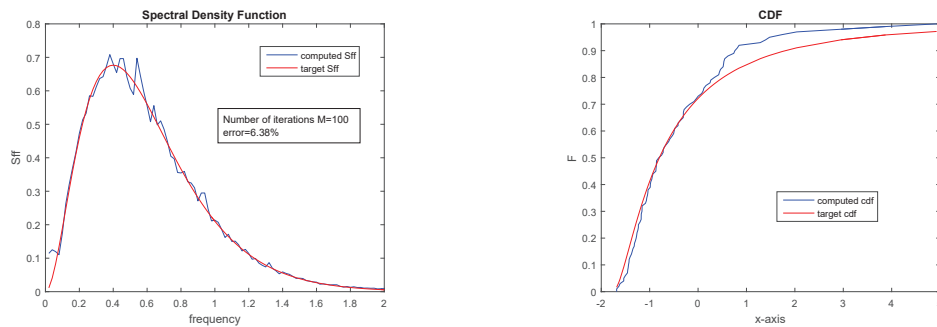


(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος



(β') Αθροιστική συνάρτηση πιθανότητας

Σχήμα 3.9: Περίπτωση (i)

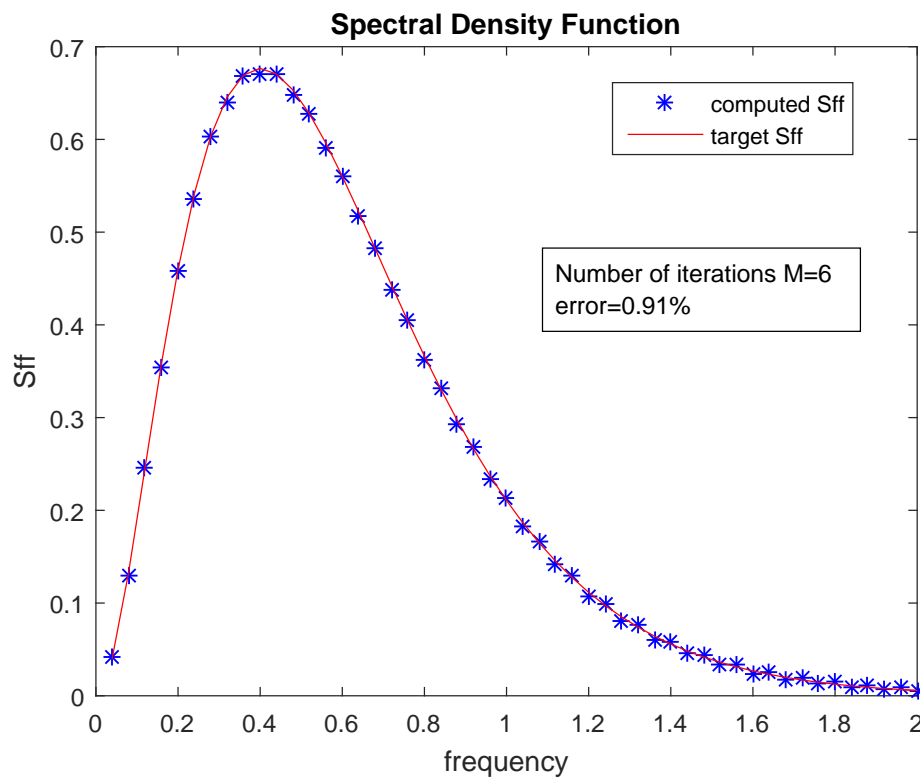


(α') Συνάρτηση φασματικής ισχύος

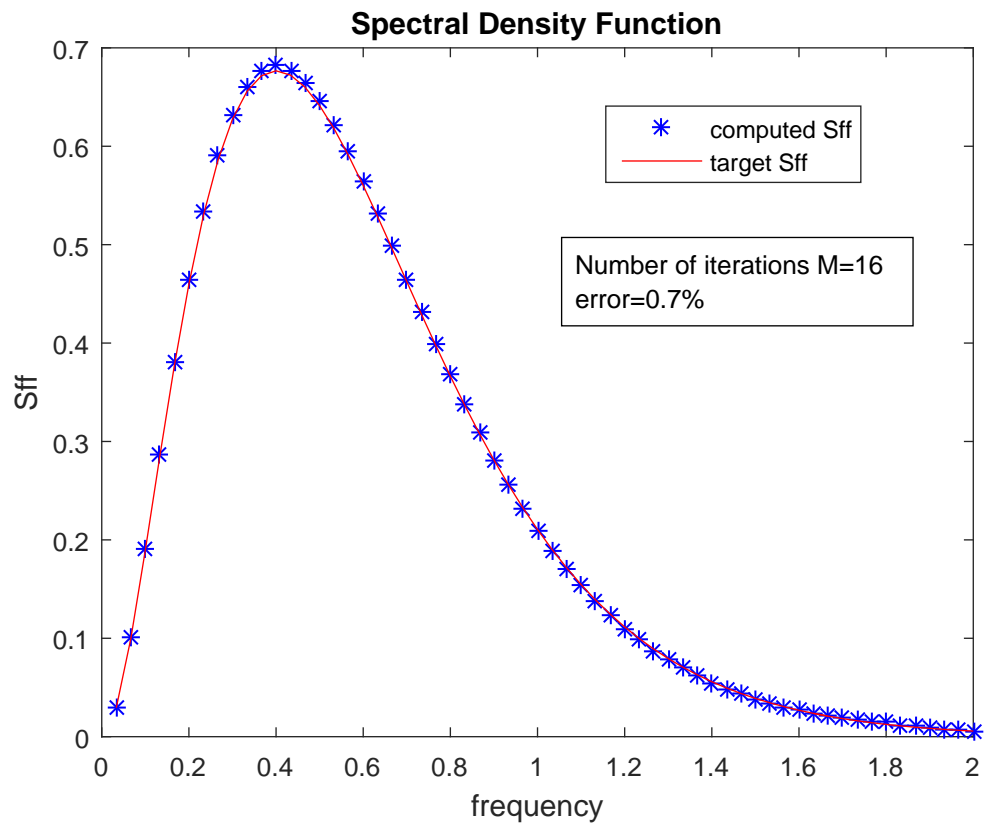
(β') Αθροιστική συνάρτηση πιθανότητας

Σχήμα 3.10: Περίπτωση (ii)

Στην συνέχεια βλέπουμε τα αποτελέσματα με τον αλγόριθμο των Shields, Deodatis και Bocchini για την ίδια διακριτοποίηση του φάσματος των συχνοτήτων.

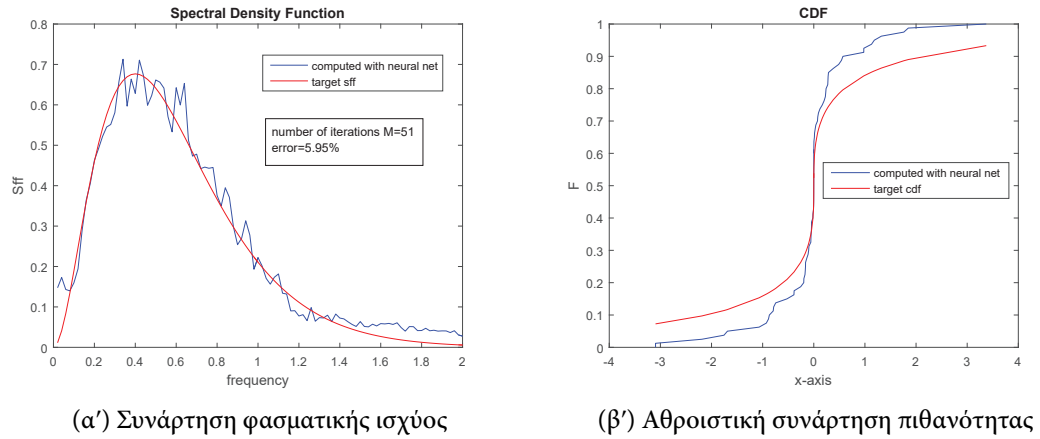


Σχήμα 3.11: Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (i) με χρήση του αλγόριθμου των Shields, Deodatis και Bocchini

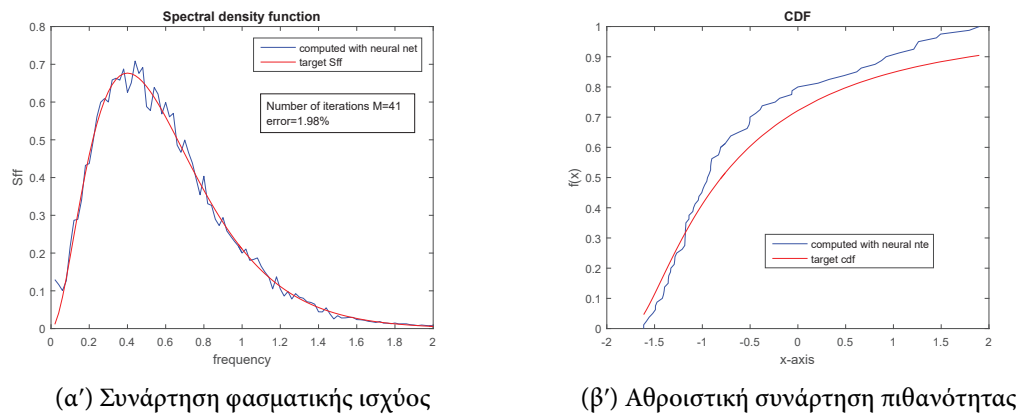


Σχήμα 3.12: Συνάρτηση φασματικής ισχύος για την περίπτωση (ii) με χρήση του αλγόριθμου των Shields, Deodatis και Bocchini

Τέλος βλέπουμε τα αποτελέσματα της πρώτης περίπτωσης αν γίνει η ανανέωση του φάσματος με χρήση νευρωνικού δικτύου. Έχει χρησιμοποιηθεί νευρωνικό δίκτυο με 3 κρυφά επίπεδα με $6N_{\omega} = 600$ νευρώνες και με συνάρτηση ενεργοποίησης την σιγμοειδή $\phi(v) = \frac{1}{1+\exp(-v)}$.



Σχήμα 3.13: Περίπτωση (i) με χρήση νευρωνικού δικτύου



Σχήμα 3.14: Περίπτωση (ii) με χρήση νευρωνικού δικτύου

Έχει χρησιμοποιηθεί ο αλγόριθμος Rprop με τιμές $\alpha = 1.2$, $\beta = 0.5$, $\eta_{\max} = 50$, $\eta_{\min} = 0.00001$ και παράμετρο μάθησης $\eta = 0.7$. Βλέπουμε ότι για να επιτευχθούν τα αποτελέσματα του παραδείγματος (ίδιο σφάλμα) χρειάζονται 51 επαναλήψεις ενώ για το παράδειγμα χρειάζονται 41 επαναλήψεις.

Κεφάλαιο 4

Τυχαία διφασικά υλικά

Τυχαία Πολυφασικά Υλικά

Πολυφασικά τυχαία υλικά όπως βράχος, μπετόν, κράματα σιδήρου και σύνθετα υλικά είναι ευρέως διαδεδομένα στην επιστήμη του μηχανικού. Οι μηχανικές, θερμικές, ηλεκτρομαγνητικές και άλλες ιδιότητες τους παρουσιάζουν μια ισχυρώς τυχαία συμπεριφορά με ασυνέχειες στο σύνορο των διαφόρων φάσεων του υλικού. Η συμπεριφορά των πολυφασικών υλικών υπό φόρτιση αποτελεί κείμενο μελέτης. Σε γενικές γραμμές οι στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις που διέπουν την συμπεριφορά των πολυφασικών υλικών δεν μπορούν να επιλυθούν αναλυτικά. Έτσι καταφεύγουμε στην βοήθεια αριθμητικών μεθόδων με την Monte-Carlo προσομοίωση να είναι η πιο αποτελεσματική.

Αναφέρουμε ενδεικτικά κάποιες από τις πιο γνωστές μεθόδους για την ανακατασκευή υλικών. Η μέθοδος των τυχαίων συνόλων (random set method) βασίζεται σε τελεστές Boole μεταξύ τυχαίων συνόλων. Η μέθοδος είναι γρήγορη υπολογιστικά αλλά η εφαρμογή της περιορίζεται σε υλικά με συγκεκριμένη μορφολογία (π.χ. υλικά με σφαιρικά ή πολυγωνικά εγκλείσματα). Η πιο διαδεδομένη μέθοδος είναι αυτή των Yeong Torquato της στοχαστικής βελτιστοποίησης (stochastic optimization method). Δοθέντος δείγματος του υλικού η συγκεκριμένη μέθοδος αφού σταθεροποιεί τον όγκο των προσθηκών με μια επαναληπτική διαδικασία αλλάζοντας τυχαία τα σημεία του υλικού προσπαθεί να ελαχιστοποιήσει την ενέργεια που μετράει την διαφορά στη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του δείγματος και του παραγόμενου υλικού. Το κύριο μειονέκτημα της είναι το υψηλό υπολογιστικό της κόστος. Διάφορες παραλλαγές της έχουν προταθεί κάνοντας χρήση γενετικών αλγόριθμων και υβριδικών μοντέλων βελτιστοποίησης προκειμένου να αντιμετωπίσουν αυτό το πρόβλημα. Τέλος υπάρχει και η μέθοδος της μεγιστοποίησης της εντροπίας (maximum entropy method) όπου το υλικό προσομοιώνεται σαν τυχαίο πεδίο Markov. Η από κοινού συνάρτηση κατανομής των πεδίων Markov είναι η κατανομή Gibbs η οποία μεγιστοποιεί την εντροπία του υλικού. Ο ακριβής τύπος της δεν μπορεί να δοθεί αναλυτικά και έτσι καταφεύγουμε σε Markov Chain Monte Carlo (MCMC) μεθόδους με την πιο διαδομένη να είναι ο αλγόριθμος Metropolis-Hastings. Υπολογιστικά θεωρείται πιο δαπανηρή από την στοχαστική βελτιστοποίηση η οποία θεωρείται ειδική περίπτωση των παραπάνω και άρα δεν είναι κατάλληλη για υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας. Με την χρήση όμως των translation fields μπορούμε να πετύχουμε ικανοποιητικά αποτελέσματα με χαμηλό υπολογιστικό κόστος.

4.1 Τυχαία Πεδία Αποκοπής (level-cut random fields)

Αν στον ορισμό του translation field πάρουμε σαν g την συνάρτηση $g = \mathbb{1}(x > a)$ με $x \in \mathbb{R}$ όπου $\mathbb{1}(\cdot)$ δηλώνει την χαρακτηριστική συνάρτηση του συνόλου (indicator function) δηλαδή

$$\mathbb{1}(x > a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0 & x \leq a \end{cases} \quad (4.1)$$

Το translation field που ορίζεται με τον παραπάνω τρόπο δηλαδή $Y(t) = g(X(t))$ με $X(t)$ Γκαουσιανό πεδίο λέγεται level-cut field επιπέδου a . Έτσι για ένα διφασικό υλικό τα εγκλείσματα (inclusions) ορίζονται από το σύνολο $\{t \in D : Y(t) = 1\}$ και η μήτρα (matrix) από το $\{t \in D : Y(t) = 0\}$ με $D \subseteq \mathbb{R}^d$ ο χώρος που καταλαμβάνει το υλικό.

Θεωρούμε την συλλογή τυχαίων μεταβλητών $Z_r(D; a) = \frac{1}{u_D} \int_D \eta_r(t; a) dr$ όπου $\eta_r = (X(t) - a)^r \mathbb{1}(X(t) > a)$, $r \geq 0$ είναι ακέραιος u_D είναι το μέτρο Lebesgue του συνόλου D δηλαδή ο όγκος του συνόλου. Οι τυχαίες μεταβλητές $u_D Z_0(D; a)$ και $u_D Z_2(D; a)$ είναι τα υποσύνολα του D στα οποία το X υπερβαίνει το a , και ο όγκος των τομών (cuts) που υπερβαίνουν το a αντίστοιχα. Η μέση τιμή της Z_r δίδεται από την σχέση

$$\mathbf{E}(Z_r(D; a)) = \frac{1}{u_D} \int_D \mathbf{E}(\eta_r(t; a)) dt = \frac{1}{u_D} \int_D (x - a)^r f(x) dx \quad (4.2)$$

όπου f είναι η συνάρτηση πυκνότητας του πεδίου X , αν το X είναι ομογενές.

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης των Z_r και Z_q είναι η

$$\mathbf{E}(Z_r(D; a)Z_q(D; a)) = \frac{1}{u_D^2} \int_{D \times D} \mathbf{E}(\eta_r(t_1; a)\eta_q(t_2; a)) dt_1 dt_2 \quad (4.3)$$

που εξαρτάται μόνο από το $t_1 - t_2$ για X ομογενές.

Οι ροπές δεύτερης τάξεως δίδονται από

$$\mathbf{E}(Y(t)) = \mathbf{P}(X(t) > a) = p_1(t) \quad (4.4)$$

$$\mathbf{E}(Y_1(t)Y_2(t)) = \mathbf{P}(X(t_1) > a, X(t_2) > a) = p_{11}(t_1, t_2) \quad (4.5)$$

Έστω ότι το $X(t)$ είναι ομογενές. Τότε $\mathbf{E}(Y(t)) = p_1(t)$ σταθερό και $\mathbf{E}(Y_1(t)Y_2(t)) = p_{11}(t_1 - t_2)$. Σε αυτή την περίπτωση $\mathbf{E}(Z_0(D; a)) = p_1$ και αναπαριστάνει τον όγκο του υλικού που ανήκει στις προσθήκες $\{t \in D : Y(t) = 1\}$. Η συνάρτηση p_{11} στην επιστήμη των υλικών ονομάζεται συνάρτηση συσχέτισης των δυο σημείων (two-point correlation function) και παίρνει τιμές στο $[p_1^2, p_1]$.

4.2 Μη μοναδικότητα της ανακατασκευής

Σε όλους τους αλγόριθμους ανακατασκευής υλικών το πρώτο βήμα είναι η εξαγωγή στατιστικών χαρακτηριστικών του υλικού. Για να ανακατασκευαστεί επακριβώς το υλικό θα έπρεπε

να είναι γνωστές όλες οι πεπερασμένης τάξης ροπές του δηλαδή να είναι διαθέσιμη άπειρη πληροφορία. Επειδή αυτό δεν είναι δυνατό περιοριζόμαστε σε ροπές χαμηλής τάξης του υλικού συνήθως μέχρι δεύτερης τάξης αν και σε ορισμένα προβλήματα έχει αποδειχθεί ότι δεν επαρκούν (όπως στην ρευστοποίηση και στην ροή δια μέσω του εδάφους). Στην εδαφική ροή δεν μπορούν να πιάσουν την συνεκτικότητα του εδαφικού υλικού πράγμα που μπορεί να γίνει αν χρησιμοποιήσουμε την lineal-path συνάρτηση που μας δίνει πληροφορίες για την γεωμετρία των εγκλεισμάτων, και ορίζεται ως η πιθανότητα ένα τμήμα συγκεκριμένου μήκους και τυχαίας διεύθυνσης να βρίσκεται εντός του $\{t \in D : Y(t) = 1\}$.

Δίδουμε στη συνέχεια ένα παράδειγμα πως μπορούμε να έχουμε άπειρες στοχαστικές διαδικασίες με ίδιες ροπές δεύτερης τάξης που όμως έχουν αρκετά διαφορετική συμπεριφορά. Θεωρούμε από την μια την κίνηση Brown $B(t)$ δηλαδή την διαδικασία που έχει τις εξής ιδιότητες:

- Η διαδικασία έχει ανεξάρτητες προσαυξήσεις δηλαδή για $n \geq 1$ και $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n$ οι τυχαίες μεταβλητές $B(t_1), B(t_2) - B(t_1), \dots, B(t_n) - B(t_{n-1})$ είναι ανεξάρτητες.
- Για κάθε $0 \leq s < t$ ισχύει ότι η $B(t) - B(s)$ ακολουθεί την $\mathbf{N}(0, t - s)$
- Η $t \rightarrow B(t)$ είναι συνεχής με πιθανότητα 1.

Η κίνηση Brown έχει μέση τιμή $\mathbf{E}(B(t)) = 0$ και συσχέτιση $\mathbf{E}(B(t)B(s)) = \min(t, s)$. Επίσης θεωρούμε μια σύνθετη διαδικασία Poisson (compound Poisson processes) $C(t)$ που ορίζεται ως εξής

$$C(t) = \sum_{k=1}^{N(t)} U_k,$$

με $t \geq 0$, $N(t)$ διαδικασία Poisson με παράμετρο λ και U_k ανεξάρτητες ισόνομες τυχαίες μεταβλητές. Τότε ισχύει ότι $\mathbf{E}(C(t)) = \lambda \mathbf{E}(U_1)$ και $\text{cov}(C(t), C(s)) = \lambda \mathbf{E}(U_1^2) \min(t, s)$. Άρα αν επιλέξουμε τις U_k έτσι ώστε $\mathbf{E}(U_1) = 0$ και $\mathbf{E}(U_1^2) = \frac{1}{\lambda}$ έχουμε ότι η $B(t)$ και η $C(t)$ έχουν τις ίδιες ροπές δεύτερης τάξης. Αν θεωρήσουμε τώρα $a \in [0, 1]$ τότε η οικογένεια των στοχαστικών διαδικασιών $aB(T) + \sqrt{1-a}C(t)$ ταυτίζεται ως προς τις ροπές δεύτερης τάξης. Παρατηρούμε επίσης ότι καθώς $\lambda \rightarrow \infty$ η $C(t)$ τείνει στην $B(t)$.

4.3 Ο αλγόριθμος των Feng-Li-Cen-Owen

Θεωρώντας γνωστά τα στατιστικά χαρακτηριστικά του υλικού δεύτερης τάξης δηλαδή την μέση τιμή και την συνάρτηση συσχέτισης των δύο σημείων αναζητούμε Γκαουσιανό ασθενώς στάσιμο πεδίο $G(x, \omega)$ με συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $R_G(\tau)$ τέτοιο ώστε $I(x, \omega) = T(G(x, \omega))$ όπου

$$T(x) = \begin{cases} 0 & \text{αν } x \leq F_G^{-1}(p_0) \\ 1 & \text{αν } x > F_G^{-1}(p_0) \end{cases} \quad (4.6)$$

και p_0 είναι ο όγκος της μήτρας, γνωστό ως κλάσμα όγκου (volume fraction) και δηλαδή του $\{x \in D : I(x) = 0\}$. Έτσι για το $I(x, \omega)$ ισχύει $\mu = 1 - p_0$ και $\sigma^2 = p_0(1 - p_0)$. Για τον προσδιορισμό του θα μπορούσαμε να εφαρμόσουμε κάποια μέθοδο από αυτές που έχουν προαναφερθεί. Για την

περίπτωση των Γκαουσιανών level-cut πεδίων ο αλγόριθμος αυτός προτείνει μια πιο οικονομική υπολογιστικά λύση. Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του $I(x, \omega)$ είναι η

$$R_I(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(T(x_1) - \mu)(T(x_2) - \mu)}{\sigma^2} \phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) dx_1 dx_2 \quad (4.7)$$

όπου

$$\phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1 - R_G(\tau)^2}} e^{-\frac{(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2R_G(\tau))}{2(1 - R_G(\tau)^2)}}$$

είναι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της κανονικής κατανομής στις δύο διαστάσεις με μέση τιμή μηδέν, διακύμανση ένα και συσχέτιση $R_G(\tau)$. Αντικαθιστώντας στην παραπάνω σχέση

$$\frac{(T(x_1) - \mu)(T(x_2) - \mu)}{\sigma^2} = \begin{cases} \frac{1-p_0}{p_0} & \text{αν } x_1 \in (-\infty, F_G^{-1}(p_0)], x_2 \in (-\infty, F_G^{-1}(p_0)] \\ -1 & \text{αν } x_1 \in (-\infty, F_G^{-1}(p_0)], x_2 \in (F_G^{-1}(p_0), +\infty) \\ -1 & \text{αν } x_1 \in (F_G^{-1}(p_0), +\infty), x_2 \in (-\infty, F_G^{-1}(p_0)] \\ \frac{p_0}{1-p_0} & \text{αν } x_1 \in (F_G^{-1}(p_0), +\infty), x_2 \in (F_G^{-1}(p_0), +\infty) \end{cases}$$

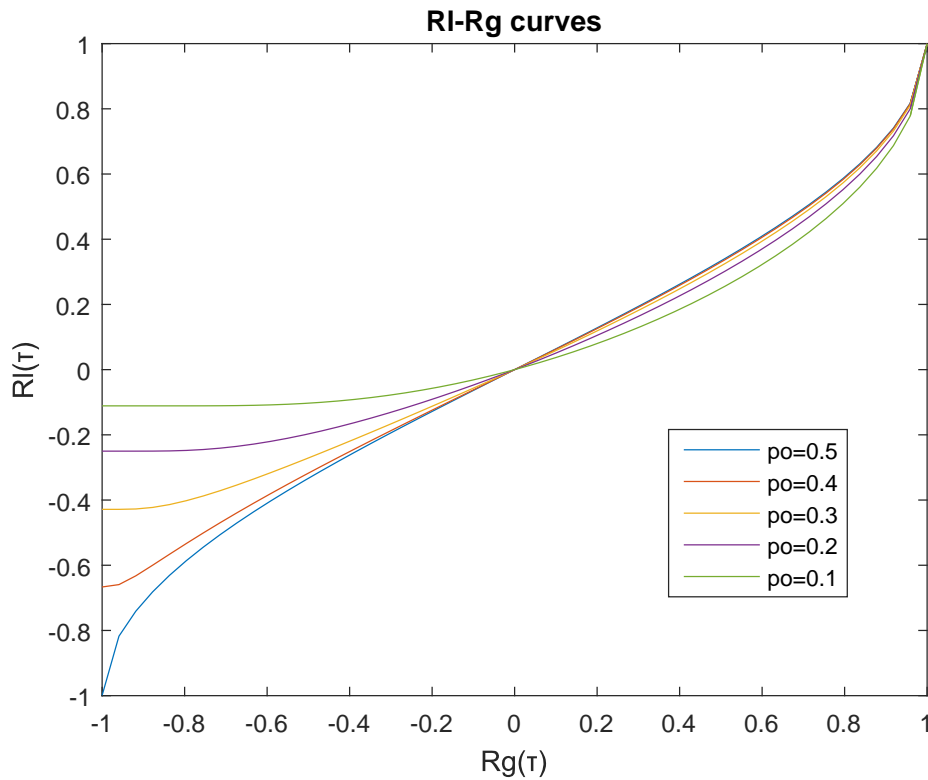
έχουμε

$$\begin{aligned} R_I(\tau) &= -1 + \frac{1}{p_0} \int_{-\infty}^{F_G^{-1}(p_0)} \int_{-\infty}^{F_G^{-1}(p_0)} \phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) dx_1 dx_2 + \\ &+ \frac{1}{(1-p_0)} \int_{-\infty}^{F_G^{-1}(p_0)} \int_{F_G^{-1}(p_0)}^{+\infty} \phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) dx_1 dx_2 \\ &= -1 + \frac{1}{p_0} \Phi(F_G^{-1}(p_0), F_G^{-1}(p_0), R_G(\tau)) + \frac{1}{(1-p_0)} \Phi(F_G^{-1}(p_0), F_G^{-1}(p_0), R_G(\tau)) \end{aligned}$$

όπου Φ η αθροιστική συνάρτηση κατανομής στις δύο διαστάσεις. Παραγωγίζουμε την παραπάνω σχέση ως προς $R_G(\tau)$ όπου μετά τις πράξεις καταλήγουμε

$$\frac{dR_I(\tau)}{dR_G(\tau)} = \left(\frac{1}{p_0} + \frac{1}{(1-p_0)} \right) \frac{e^{-\frac{F_G^{-1}(p_0)^2}{1+R_G(\tau)}}}{2\pi\sqrt{1 - R_G(\tau)^2}} \geq 0 \quad (4.8)$$

δηλαδή η $R_I(\tau)$ είναι αύξουσα ως προς $R_G(\tau)$. Στο παρακάτω σχήμα φαίνονται οι τιμές της $R_I(\tau)$ συναρτήσει της $R_G(\tau)$ για διάφορες τιμές του p_0 .

Σχήμα 4.1: Καμπύλες $R_I - R_G$

Έτσι μπορούμε με μια απλή γραμμική παρεμβολή (linear interpolation) να επιλύσουμε την σχέση των συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης αποφεύγοντας τις επαναληπτικές διαδικασίες όλων των προηγούμενων αλγόριθμων. Στην περίπτωση που το $R_G(\tau)$ δεν είναι πίνακας αυτοσυσχέτισης εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο εύρεσης του πιο κοντινού τέτοιου πίνακα. Επίσης προκειμένου η $R_I(\tau)$ να είναι συμβατή με το p_0 θα πρέπει να ισχύει

$$R_I(\tau) \in \left[-\frac{\min(p_0, 1-p_0)}{\max(p_0, 1-p_0)}, 1 \right] \quad (4.9)$$

καθώς ισχύουν

$$\max(R_I(\tau)) = \lim_{R_G(\tau) \rightarrow 1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(T(x_1) - \mu)(T(x_2) - \mu)}{\sigma^2} \phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) dx_1 dx_2 = 1$$

και

$$\begin{aligned} \min(R_I(\tau)) &= \lim_{R_G(\tau) \rightarrow 1} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(T(x_1) - \mu)(T(x_2) - \mu)}{\sigma^2} \phi(x_1, x_2, R_G(\tau)) dx_1 dx_2 \\ &= -\frac{\min(p_0, 1 - p_0)}{\max(p_0, 1 - p_0)} \end{aligned}$$

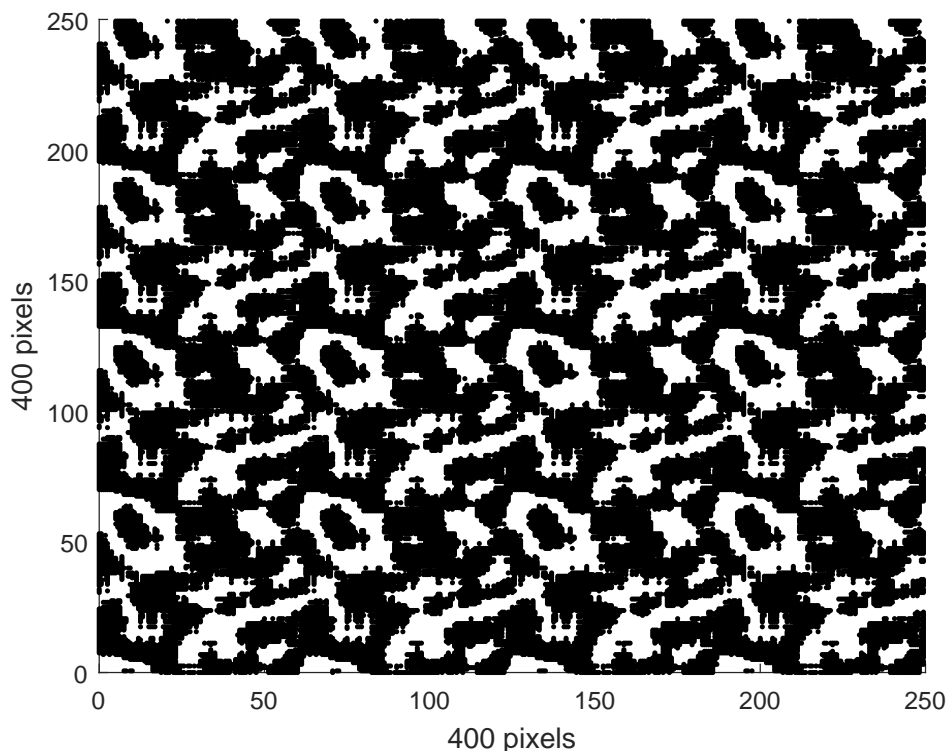
Στις περισσότερες εφαρμογές η $R_I(\tau)$ παίρνει θετικές τιμές και άρα η παραπάνω συνθήκη ικανοποιείται. Ο αλγόριθμος συνοψίζεται στα παρακάτω :

- Δοθέντος δείγματος του $I(x, \omega)$ υπολογίζουμε το κλάσμα όγκου p_0 και την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $R_I(\tau)$ χρησιμοποιώντας κάποια τεχνική ανάλυσης σήματος
- Για το δεδομένο p_0 υπολογίζουμε με την $R_G(\tau)$ μέσω της σχέσης των $R_I(\tau) - R_G(\tau)$ με γραμμική παρεμβολή.
- Υπολογίζουμε τον πλησιέστερο πίνακα συσχέτισης κοντά στον $R_G(\tau)$
- Υπολογίζουμε με τον μετασχηματισμό Fourier το $S_{GG}(\omega)$
- Παράγουμε δείγματα του Γκαουσιανού πεδίου $G(x, \omega)$ με την μέθοδο της φασματικής αναπαράστασης (spectral representation)
- Παράγουμε δείγματα του $I(x, \omega)$ μέσω του μη γραμμικού μετασχηματισμού $T(x)$

Παράδειγμα 4.3.1. Στα παρακάτω σχήματα βλέπουμε εικόνες για τις ακόλουθες περιπτώσεις:

- κλάσμα όγκου $p_0 = 0.5$ και συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

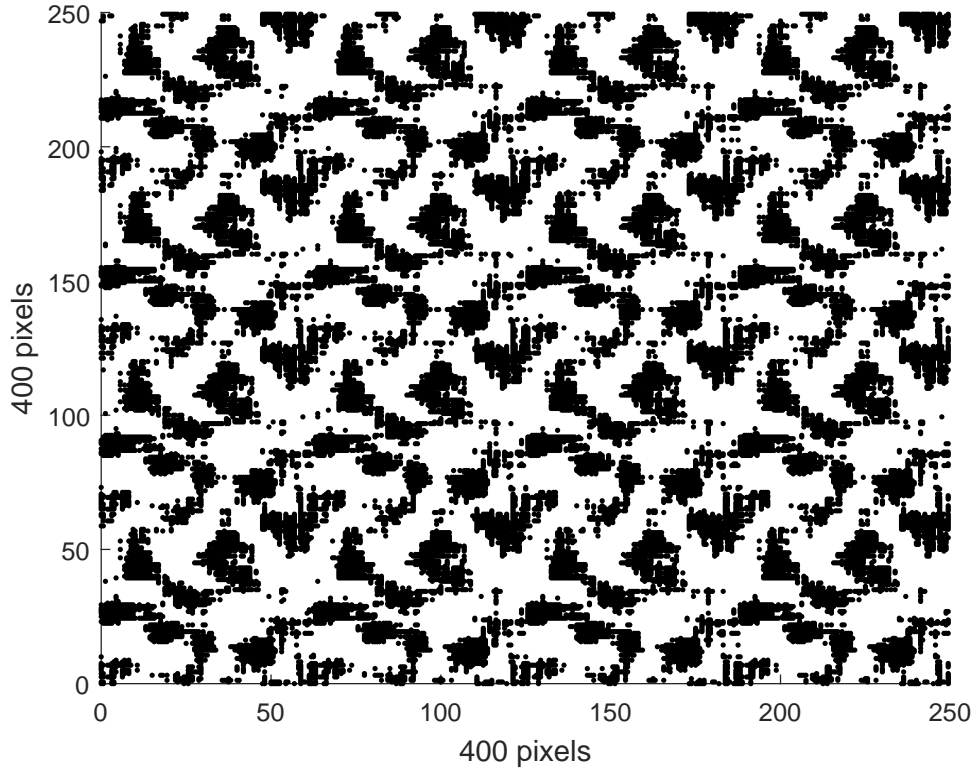
$$R_I(\tau_1, \tau_2) = \exp\left\{-0.25\sqrt{\tau_1^2 + \tau_2^2}\right\}$$



Σχήμα 4.2: Δείγμα υλικού

- κλάσμα όγκου $p_0 = 0.3$ και συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

$$R_I(\tau_1, \tau_2) = \exp\left\{-0.5\sqrt{\tau_1^2 + \frac{\tau_2^2}{25}}\right\}$$



Σχήμα 4.3: Δείγμα υλικού

Και στις δύο περιπτώσεις έχει χρησιμοποιηθεί μήκος μιας περιόδου του Γκαουσιανού πεδίου και 400×400 σημεία (pixels).

4.4 Level-cut filtered Poisson fields

Θα ορίζουμε πεδία γενικότερα από τα Γκαουσιανά πεδία τα οποία τείνουν ασυμπτωτικά να γίνουν Γκαουσιανά. Τα filtered Poisson fields ορίζονται ως εξής

$$X(t) = \sum_{i=1}^{N(D')} X_i h(R_i(t - \Gamma_i)) \quad (4.10)$$

με $t \in D \subseteq D' \subseteq \mathbb{R}^d$ όπου $N(D')$ είναι μια διαδικασία Poisson ορισμένη στον \mathbb{R}^d με παράμετρο $\lambda_{D'}$ και σημεία Γ_i , D και D' είναι φραγμένα υποσύνολα του \mathbb{R}^d , $u_{D'}$ είναι ο όγκος του D' , $h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ μετρήσιμη συνάρτηση, $\{X_i\}$ οικογένεια ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών και $\{R_i\}$ ανεξάρτητοι και ισόνομοι πίνακες στροφής στον \mathbb{R}^d . Το σύνολο D' είναι τέτοιο ώστε τα σημεία Γ_i που βρίσκονται στο \mathbb{R}^d/D' να μην συνεισφέρουν στην τιμή του X στο D . Αυτό συμβαίνει αν η h έχει συμπαγές στήριγμα δηλαδή αν $\{x \in \mathbb{R}^d : h(x) \neq 0\} \subseteq K$ με K συμπαγές σύνολο και τότε μπορούμε να πάρουμε σαν D' το K . Στο εξής θεωρούμε ότι η h έχει

συμπαγές στήριγμα. Έτσι έχουμε για την μέση τιμή και την συσχέτιση του X

$$\mathbf{E}(X(t)) = \lambda \mathbf{E}(X_1) \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{E}(h(R_1 a)) da \quad (4.11)$$

και

$$\text{cov}(X(t_1) X(t_2)) = \lambda \mathbf{E}(X_1^2) \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{E}(h(R_1 a) h(R_1(a + \tau))) da \quad (4.12)$$

όπου $\tau = t_2 - t_1$.

Άρα βλέπουμε ότι το X είναι ασθενώς ομογενές καθώς η μέση τιμή δεν εξαρτάται από το t ενώ η συσχέτιση εξαρτάται μόνο από το $\tau = t_2 - t_1$. Η φασματική πυκνότητα του X δίδεται από την

$$s(v) = \frac{\lambda \mathbf{E}(X_1^2)}{(2\pi)^d} \mathbf{E}(|\tilde{h}(R_1 v)|^2) \quad (4.13)$$

όπου $\tilde{h}(v) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-iv^T \tau} h(\tau) d\tau$ είναι ο μετασχηματισμός Fourier της h .

Στην συνέχεια βλέπουμε κάποιες ιδιότητες του X .

- Το X δεν είναι μόνο ομογενές αλλά και ισότροπο αφού

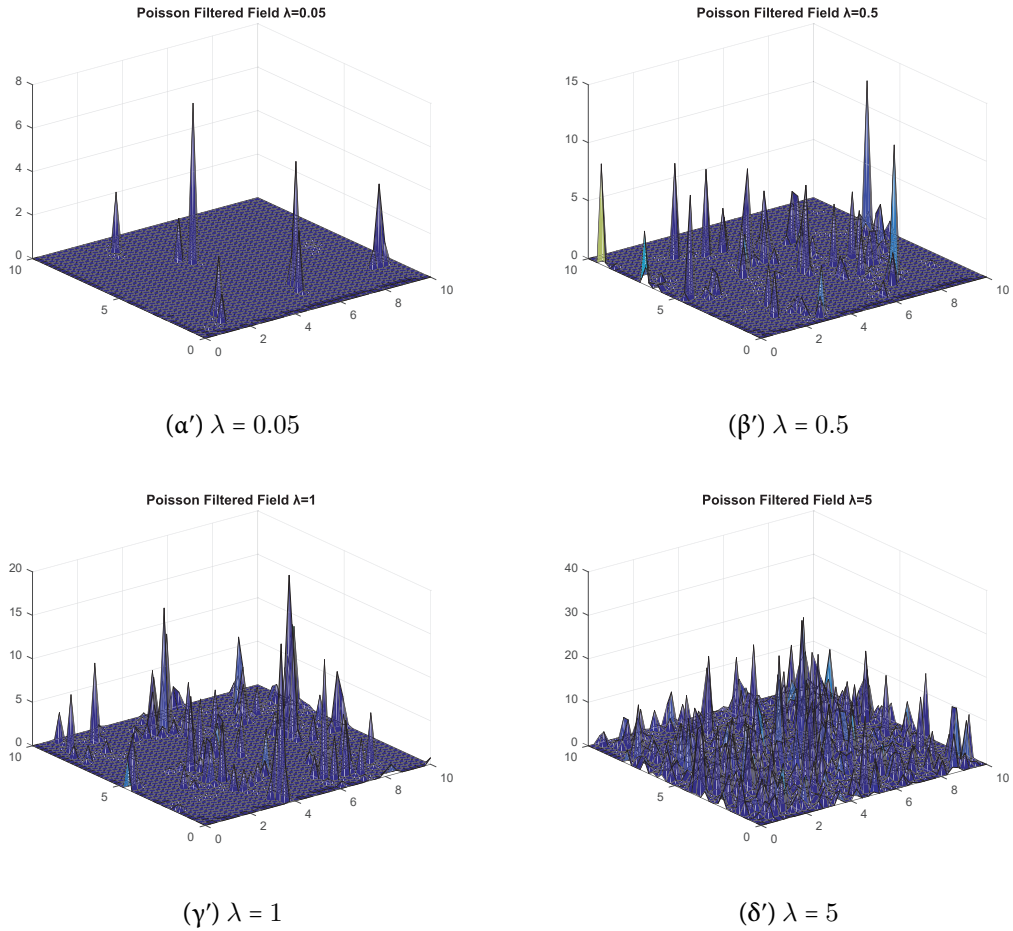
$$\tilde{h}(R_1 v) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-iv^T R_1^T \tau} h(\tau) d\tau = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{S}^d} e^{-iv^T sr} h(R_1 sr) R_1 ds \right] dr$$

όπου $\tau = s\|\tau\| = sr$ με $r \geq 0$, $s \in \mathbb{S}^d$ και \mathbb{S}^d η μοναδιαία σφαίρα στον \mathbb{R}^d . Αφού $v^T s = \|v\| \cos(v, s)$ το ολοκλήρωμα εντός της παρένθεσης θα είναι ανάλογο με την μέση τιμή της υπό ολοκλήρωση ποσότητας ως προς s εφόσον το s είναι ομοιόμορφα κατανομημένο στο \mathbb{S}^d και άρα η $\tilde{h}(R_1 v)$ εξαρτάται μόνο από το $\|v\|$ και το R_1 . Έτσι η $\mathbf{E}(|\tilde{h}(R_1 v)|^2)$ είναι συνάρτηση του $\|v\|$ άρα και το $s(v)$. Αν επιπλέον η h είναι τέτοια ώστε να ισχύει $h(\xi) = h(\|\xi\|)$ για κάθε $\xi \in \mathbb{R}^d$ θα έχουμε ότι και η

$$\tilde{h}(v) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-iv^T \tau} h(\tau) d\tau = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{S}^d} e^{-iv^T sr} ds \right] h(r) dr$$

εξαρτάται μόνο από το $\|v\|$.

- Ο μετασχηματισμός Fourier της h καθορίζει την φασματική πυκνότητα $s(v)$ ανεξάρτητα από την τιμή $\lambda \mathbf{E}(X_1^2)$.
- Τα δείγματα των filtered Poisson fields με $\mathbf{E}(X_1) = 0$ και $\lambda \mathbf{E}(X_1^2) = 1$ ταυτίζονται ως προς τις ροπές δεύτερης τάξης όμως έχουν αρκετά διαφορετική μορφή όπως φαίνεται από τα παρακάτω σχήματα. Έτσι βλέπουμε άλλο ένα παράδειγμα μη μοναδικότητας της ανακατασκευής.



Σχήμα 4.4: Δείγμα από filtered Poisson field με παραμέτρους $\lambda = 0.05, 0.5, 1, 5$

- Το filtered Poisson fields υπό κατάλληλη κανονικοποίηση τείνει στο Γκαουσιανό πεδίο καθώς $\lambda \rightarrow \infty$. Πράγματι έστω $\mu(t) = \lambda\mu_0(t)$ και $\sigma^2(t) = \lambda\sigma_0^2(t)$ η μέση τιμή και η διασπορά του. Θεωρούμε το κανονικοποιημένο πεδίο. Η χαρακτηριστική συνάρτηση του $\tilde{X}(t)$ είναι η

$$\phi_{\tilde{X}(t)}(u) = \mathbf{E}\left(e^{iu\tilde{X}(t)}\right) = e^{-iu\frac{\sqrt{\lambda}\mu_0(t)}{\sigma_0(t)}} \mathbf{E}\left(e^{iu\frac{X(t)}{\sigma(t)}}\right) = e^{-\frac{u^2}{2}} + O\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right)$$

Βλέπουμε έτσι πως η $\tilde{X}(t)$ συγκλίνει στην $N(0, 1)$ καθώς $\lambda \rightarrow \infty$.

Θεωρούμε ότι η συνάρτηση $h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ είναι θετική και έχει μέγιστο στο $\xi = 0$ την τιμή $h(0) = 1$. Μια τέτοια συνάρτηση είναι η

$$h(\xi) = \exp\left(-\sum_{k=1}^d \left(\xi_k / \sigma_k\right)^2\right) = \exp(-\xi^T \gamma \xi) \quad (4.14)$$

με $\xi \in \mathbb{R}^d$ και $\gamma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ διαγώνιος πίνακας με στοιχεία $\gamma_{kk} = \frac{1}{\sigma_k}$, $k = 1, \dots, d$. Θεωρούμε επίσης ότι τα λ , X_1 και h είναι τέτοια ώστε οι τιμές του πεδίου X σε μικρές περιοχές $D(\Gamma_i)$ των σημείων Γ_i μπορούν να προσεγγιστούν από την τιμή $X_i h(R_i(t - \Gamma_i))$ πράγμα που συμβαίνει για μικρές τιμές των λ και σ_k . Τότε ισχύουν τα εξής :

- Το πεδίο Y μπορεί να προσεγγιστεί από το $\tilde{Y}(t) = \mathbb{1}(X_i h(R_i(t - \Gamma_i)) > a)$ με $t \in D(\Gamma_i)$
- Τα εγκλείσματα του διαφοσικού υλικού μπορούν να προσεγγιστούν από τα υποσύνολα

$$(t - \Gamma_i)^T R_i^T \gamma R_i (t - \Gamma_i) \leq \ln\left(\frac{a}{X_i}\right)$$

του D για $X_i > a$ και $t \in D$ δηλαδή από ελλείψεις με τυχαίες διευθύνσεις κέντρου Γ_i και μεγάλο άξονα μήκους $2\sigma_1 \sqrt{-\ln\left(\frac{a}{X_i}\right)}$.

- Η πιθανότητα να τέμνονται δύο εγκλείσματα είναι σχεδόν μηδέν. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε ότι η μέση τιμή μπορεί να προσεγγιστεί από την σχέση (θεωρούμε τη περίπτωση $d = 3$)

$$\mathbf{E}(\tilde{Y}(t)) \simeq \frac{4\pi\lambda}{3} \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \int_a^{+\infty} \left(-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)\right)^{\frac{3}{2}} f_{X_1}(\xi) d\xi \quad (4.15)$$

Σκιαγραφούμε την απόδειξη του παραπάνω αποτελέσματος.

Ισχύει ότι

$$\mathbf{E}(\tilde{Y}(t)) = \mathbf{E}(\mathbf{E}(\tilde{Y}(t)/N(D'))) = \mathbf{E}(N(D')) \mathbf{E}(X_1 h(R_1(t - \Gamma_1)) > a).$$

Το παραπάνω προκύπτει από την ανεξαρτησία της $N(D)$ από τις άλλες μεταβλητές. Επίσης ισχύει

$$\mathbf{E}(X_1 h(R_1(t - \Gamma_1)) > a) = \int_a^{+\infty} \mathbf{E}(\xi h(R_1(t - \Gamma_1)) > a) f_{X_1}(\xi) d\xi.$$

Η μέση τιμή εντός του ολοκληρώματος στην παραπάνω σχέση δίνει την πιθανότητα μια προσθήκη με κέντρο το Γ_1 να περιέχει το t για κάποιο $X - 1 = \xi > a$. Έτσι θα είναι περίπου ίση με τον όγκο του ελλεισοειδούς πάνω από ένα επίπεδο a προς τον όγκο του D . Έτσι θα έχουμε

$$\mathbf{E}(X_1 h(R_1(t - \Gamma_1)) > a) = \frac{\frac{4}{3}\pi\sigma_1\sigma_2\sigma_3 \int_a^{+\infty} \left(-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)\right)^{\frac{3}{2}} f_{X_1}(\xi) d\xi}{u_{D'}}$$

η οποία σε συνδιασμό με την σχέση $\mathbf{E}(N(D')) = \lambda u_{D'}$ δίδει το ζητούμενο. Η προσέγγιση οφείλεται στο γεγονός ότι στα εγκλείσματα που βρίσκονται κοντά στο σύνορο του D δεν λαμβάνονται τελείως υπ' όψιν.

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης των δύο σημείων δίδεται από την σχέση

$$\mathbf{E}(\tilde{Y}(t_1)\tilde{Y}(t_2)) = p_{11}^*(t_1, t_2) + P(\tilde{Y}(t_1) = 1)P(\tilde{Y}(t_2) = 1) \quad (4.16)$$

όπου $p_{11}^*(t_1, t_2)$ είναι η πιθανότητα δύο σημεία t_1, t_2 που ανήκουν στο D να βρίσκονται στην ίδιο εγκλείσμα και είναι γνωστή σαν lineal-path function. Γενικά δεν υπάρχει αναλυτική λύση για την p_{11}^* . Μπορεί να υπολογιστεί στην περίπτωση που τα εγκλείσματα είναι σφαιρικής μορφής. Επίσης στην περίπτωση των level-cut filtered Poisson field και για $d = 1$ έχουμε την παρακάτω προσέγγιση. Το μήκος ενός εγκλείσματος πάνω από ένα επίπεδο a είναι $l = 2\sigma_1 \sqrt{-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)}$ με $X_1 = \xi > a$. Άρα η πιθανότητα τα σημεία $t_1, t_2 \in D$ να ανήκουν σε τμήμα μήκους l τυχαία τοποθετημένου στο D προσεγγίζεται από την

$$p_{11}^*(|t_1 - t_2|) \cong 1 \left(2\sigma_1 \sqrt{-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)} > |t_1 - t_2| \right) = \frac{2\sigma_1 \sqrt{-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)} - |t_1 - t_2|}{u_D}$$

και αν X_1 είναι τυχαία μεταβλητή τέτοια ώστε $P(X_1 > a) > 0$ και $a > 0$ θα έχουμε

$$p_{11}^*(|t_1 - t_2|) \cong \frac{1}{u_D} \int_{a^*}^{+\infty} \left(2\sigma_1 \sqrt{-\ln\left(\frac{a}{\xi}\right)} - |t_1 - t_2| \right) f_{X_1}(\xi) d\xi$$

όπου $a^* = a \exp\left(\left(\frac{t_1 - t_2}{2\sigma_1}\right)^2\right)$ και f_{X_1} η πυκνότητα της X_1 .

4.5 Προσομοίωση Monte-Carlo

Παρουσιάζουμε έναν αλγόριθμο πως μπορούμε να ανακατασκευάσουμε δείγματα του level-cut filtered Poisson field $Y(t)$. Θεωρούμε αρχικά το filtered Poisson field $X(t)$ με παραμέτρους το φραγμένο χωρίο D του \mathbb{R}^d , την οικογένεια των ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών $\{X_i\}$, το πεδίο Poisson με παράμετρο λu_D την συνάρτηση h και τους πίνακες στροφής $\{R_i\}$.

Στο \mathbb{R}^2 ο πίνακας έχει την μορφή

$$R_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

με $\theta \in [0, 2\pi]$ ομοιόμορφα κατανομημένη τυχαία μεταβλητή.

Στο \mathbb{R}^3 ο πίνακας μπορεί να κατασκευαστεί εφαρμόζοντας το θεώρημα του Euler που λέει ότι κάθε στροφή στον \mathbb{R}^3 μπορεί να περιγραφεί σαν μια στροφή γύρω από ένα διάνυσμα διεύθυνσης $\vec{\varepsilon}$ με τον εξής τρόπο: Θεωρούμε αρχικά μια στροφή γύρω από τον άξονα \vec{z}

$$R_1^{\vec{z}} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) & 0 \\ -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

με $\theta_1 \in [0, 2\pi]$ ομοιόμορφα κατανομημένη τυχαία μεταβλητή. Στην συνέχεια παρατηρούμε ότι μπορούμε να μεταφέρουμε την διεύθυνση \vec{z} στην διεύθυνση $\vec{\varepsilon}$ χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό Householder $H_1^{\vec{z}, \vec{\varepsilon}} = I - 2u_1^T u_1$ όπου u_1 μοναδιαίο διάνυσμα που ανήκει στο επίπεδο

των $\vec{z}, \vec{\varepsilon}, u_1 = [r \cos(\theta_2), r \sin(\theta_2), \sqrt{1-r^2}]$ με $\theta_2 \in [0, 2\pi)$ και $r \in [0, 1]$ ομοιόμορφα κατανεμημένες τυχαίες μεταβλητές. Έτσι έχουμε τον πίνακα στροφών από την σχέση $R_1 = -H_1^{\vec{z}, \vec{\varepsilon}} R_1^{\vec{z}}$.

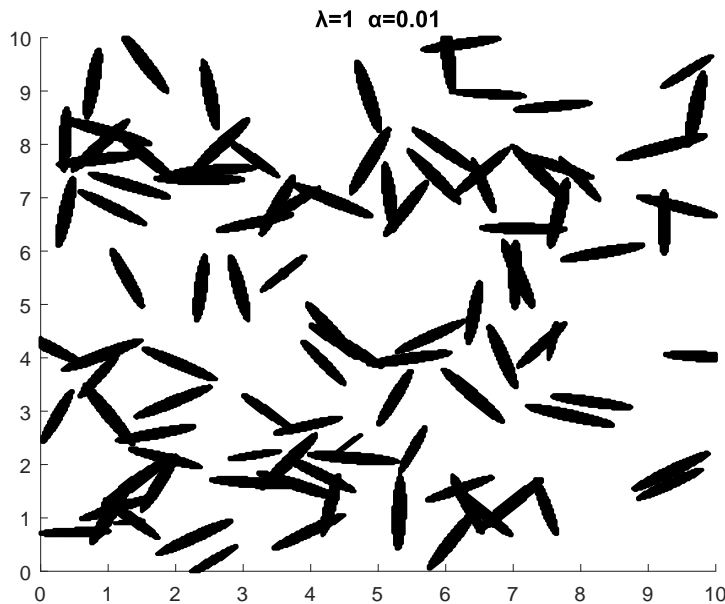
Η παραγωγή δειγμάτων των level-cut filtered Poisson field $Y(t)$ γίνεται με τα ακόλουθα βήματα:

- Παράγουμε ένα δείγμα της τυχαίας μεταβλητής Poisson $N(D')$ με παράμετρο $\lambda u_{D'}$
- Παράγουμε $N(D')$ ανεξάρτητα ομοιόμορφα κατανεμημένα σημεία στο D' τα σημεία Γ_i με $i = 1, 2, \dots, N(D')$
- Παράγουμε $N(D')$ ανεξάρτητα δείγματα των πινάκων στροφής R_1
- Παράγουμε $N(D')$ ανεξάρτητα δείγματα της τυχαίας μεταβλητής X_1
- Υπολογίζουμε με βάση την σχέση 4.14 το filtered Poisson field $X(t)$
- Υπολογίζουμε με βάση τον μη γραμμικό μετασχηματισμό g , από τη σχέση 4.1 το level-cut filtered Poisson field $Y(t)$ για ένα επίπεδο a .

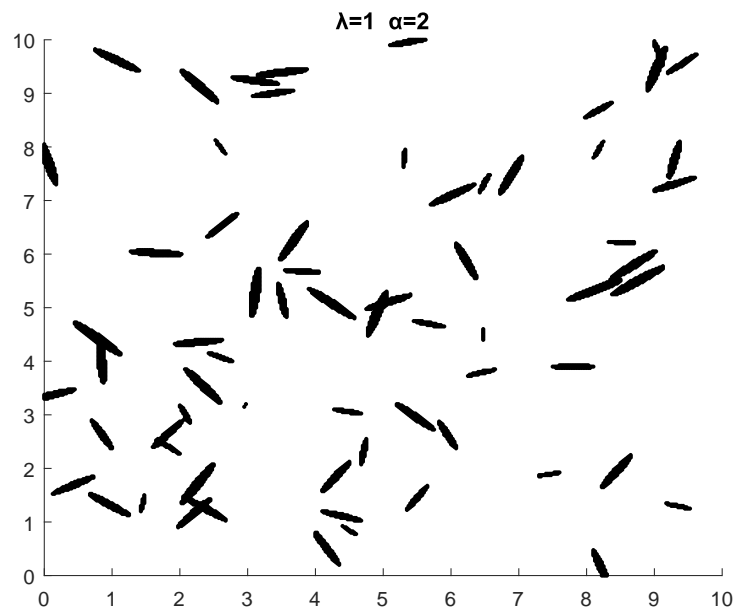
Παράδειγμα 4.5.1. Στα παρακάτω σχήματα βλέπουμε δείγματα από level-cut Poisson filtered fields. Έχουμε θεωρήσει χωρίο $D = (0, 10) \times (0, 10)$, $X_1 = 10|N(0, 1)|$ και

$$h(\xi) = \exp \left\{ - \sum_{k=1}^d \left(\xi_k / \sigma_k \right)^2 \right\} = \exp \{ -\xi^T \gamma \xi \}$$

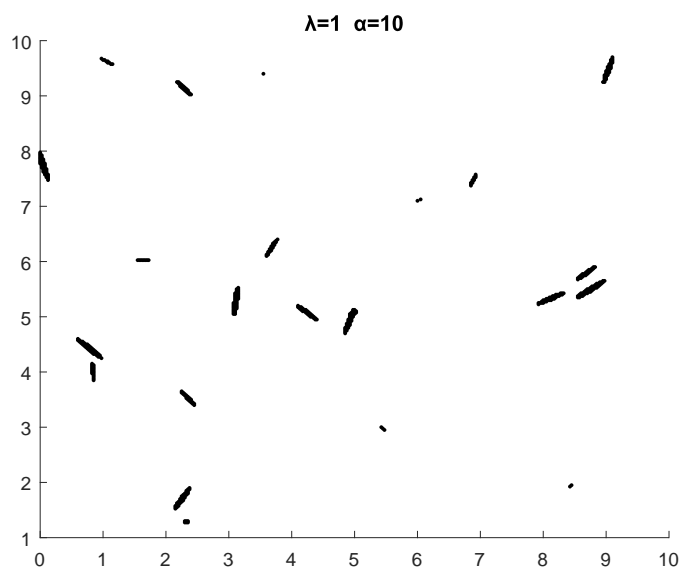
με $\sigma_1 / \sigma_2 = 7.5$ και $\sigma_1 = 0.3$. Έχουμε θεωρήσει τις περιπτώσεις $\lambda = 1$ και $\alpha = 0.1, 2, 10$ καθώς και $\lambda = 5$ και $\alpha = 0.1, 2, 10$.



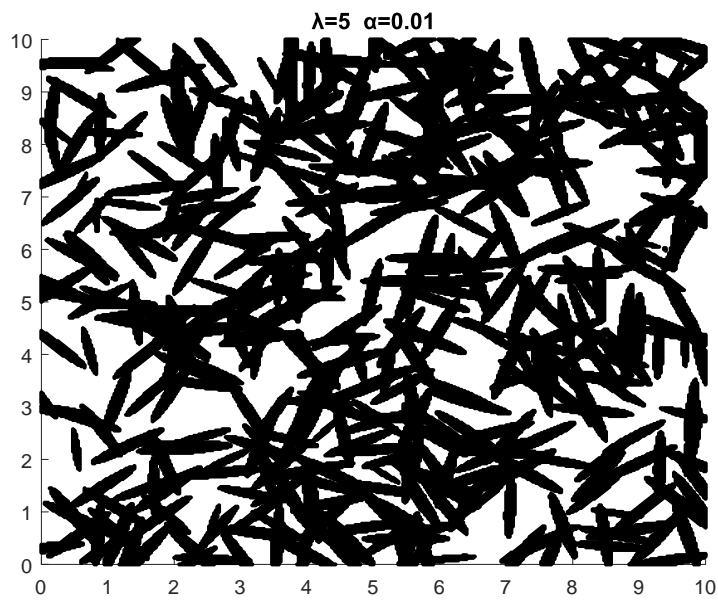
Σχήμα 4.5: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field



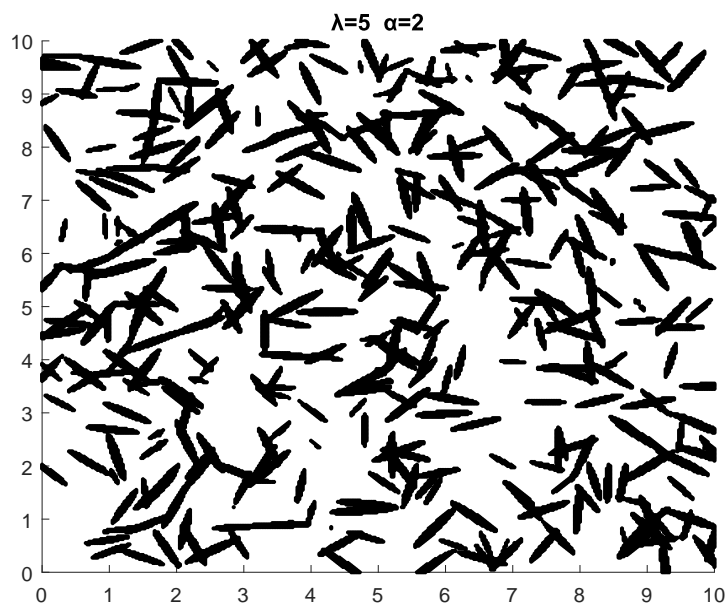
Σχήμα 4.6: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field



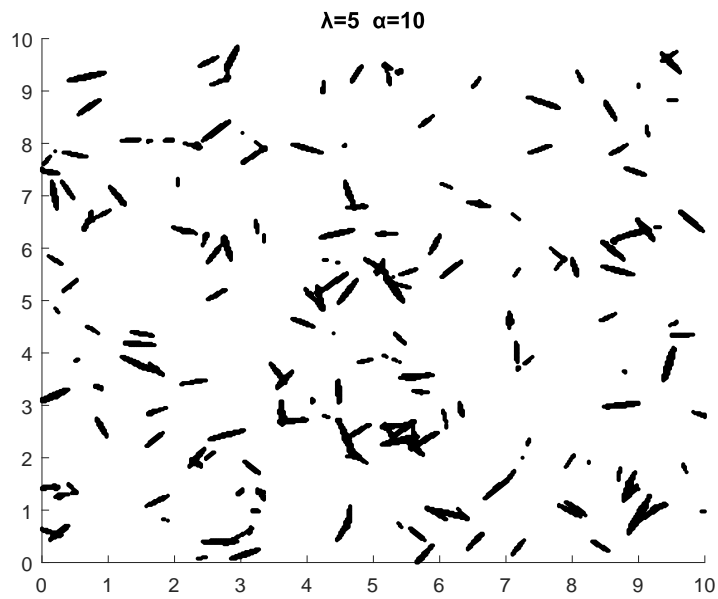
Σχήμα 4.7: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field



Σχήμα 4.8: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field



Σχήμα 4.9: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field



Σχήμα 4.10: Δείγμα υλικού από filtered Poisson field

Όπως ήταν αναμενόμενο τα εγκλείσματα προκύπτουν ελλειπτικής μορφής και για μικρότερες τιμές του λ βλέπουμε ότι ισχύει η προσέγγιση του Y από το \tilde{Y} .

Σύνοψη

Τα συμπεράσματα που βγαίνουν από την παρούσα εργασία είναι τα εξής:

- Ο καλύτερος τρόπος για να πετύχουμε ταύτιση της CDF στην παραγωγή των μη Γκαουσιανών στοχαστικών διαδικασιών είναι αυτός που προτείνεται από τους Deodatis και Micaletti και έχει υιοθετηθεί και από τους Lagaros, Stefanou και Papadrakakis.
- Ο καλύτερος τρόπος ανανέωσης του Γκαουσιανού φάσματος είναι αυτός με την χρήση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου όπως προτάθηκε από τους Lagaros, Stefanou και Papadrakakis. Δίνει καλύτερα αποτελέσματα ως προς την σύγκλιση καθώς με τους άλλους τρόπους που προτείνονται δεν εξασφαλίζεται ότι το σφάλμα διαρκώς θα μειώνεται.
- Ο αλγόριθμος των Shields Deodatis και Bocchini δίνει πολύ καλά αποτελέσματα ως προς το φάσμα όμως αποκλίνει σημαντικά από την CDF. Θα είχε ενδιαφέρον να συνδυαστεί με τον αλγόριθμο εύρεσης πλησιέστερου πίνακα συσχέτισης καθώς και με το νευρωνικό δίκτυο.
- Τα level-cut Γκαουσιανά πεδία με χρήση του αλγόριθμου των Feng-Li-Chen-Owen είναι μια καλή μέθοδος για την ψηφιακή παραγωγή υλικών με βάση τα στατιστικά χαρακτηριστικά δεύτερης τάξης. Το κύριο μειονέκτημα της είναι ότι δεν μπορεί να πετύχει το σχήμα των εγκλεισμάτων (π.χ. αν έχουμε σφαιρικά εγκλείσματα)
- Τα level-cut filtered Poisson fields μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να περιγράψουμε υλικά με ελλειπτικά εγκλείσματα (μικρό λ). Μπορούν να χρησιμοποιηθούν και για την παραγωγή υλικών με ακαθόριστο σχήμα εγκλεισμάτων καθώς για μεγάλα λ τείνουν να γίνουν Γκαουσιανά πεδία. Το κύριο μειονέκτημα είναι ότι δεν έχει προταθεί κάποιος αλγόριθμος που να εξηγεί αναλυτικά πώς να πετύχουμε συγκεκριμένα στατιστικά χαρακτηριστικά για το υλικό (έστω και δευτέρας τάξης) το οποίο αποτελεί και θέμα προς διερεύνηση.

Παράρτημα Α'

Αλγόριθμοι εύρεσης του πλησιέστερου πίνακα συσχέτισης

Πίνακας συσχέτισης είναι ένας συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας με μοναδιαία στοιχεία στην διαγώνιο. Το πρόβλημα που θα θεωρήσουμε είναι για $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ τυχόν συμμετρικό πίνακα να ελαχιστοποιήσουμε την απόσταση $d(A) = \min\{\|A - X\| : X \text{ correlation matrix}\}$ και X πίνακας συσχέτισης που ελαχιστοποιεί την παραπάνω απόσταση. Η νόρμα στην παραπάνω σχέση είναι μια νόρμα Frobenius με βάρη δηλαδή η $\|A\|_W = \|W^{1/2}AW^{1/2}\|_F$ όπου $\|A\|_W = \sum_{i,j} \alpha_{ij}^2$ η κλασική νόρμα Frobenius. Ορίζουμε τα σύνολα $S = \{Y = Y^T \in \mathbb{R}^{n \times n} : Y \geq 0\}$ και $U = \{Y = Y^T \in \mathbb{R}^{n \times n} : y_{ii} = 1, i = 1 : n\}$. Τότε ισχύουν τα παρακάτω αποτελέσματα.

Θεώρημα Α'.1. Για την νόρμα Frobenius με βάρη ισχύει ότι η προβολή ενός συμμετρικού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ στον υπόχωρο U είναι η

$$P_U(A) = A - W^{-1} \text{diag}(\theta_i) W^{-1}$$

όπου $\theta = [\theta_1, \dots, \theta_n]^T$ είναι η λύση του γραμμικού συστήματος $(W^{-1} \circ W^{-1})\theta = \text{diag}(A - I)$ και $(A \circ B) = (a_{ij}b_{ij})$ είναι το γινόμενο Hadamard.

Θεώρημα Α'.2. Για την νόρμα Frobenius με βάρη ισχύει ότι η προβολή ενός συμμετρικού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ στον υπόχωρο S είναι η

$$P_S(A) = W^{-1/2} \left(\left(W^{1/2} A W^{1/2} \right)_+ \right) W^{-1/2}$$

όπου για ένα συμμετρικό πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ το A_+ ορίζεται ως εξής : θεωρούμε την φασματική ανάλυση του $A = QDQ^T$ με Q ορθογώνιο πίνακα και $D = \text{diag}(\lambda_i)$ διαγώνιο. Τότε $A_+ = Q \text{diag}(\max(\lambda_i, 0)) Q^T$ και δεν εξαρτάται από την επιλογή του Q .

Χρησιμοποιώντας τα δύο παραπάνω θεωρήματα μπορούμε να βρούμε τον πίνακα X ως εξής:

Algorithm 1 Higham's Algorithm

```

1: procedure NEARESTCORRELATIONMATRIX
2:    $\Delta S_0 \leftarrow 0$ 
3:    $Y_0 \leftarrow A$ 
4:   for  $k = 1, 2, \dots$  do
5:      $R_k = Y_{k-1} - \Delta S_{k-1}$ 
6:      $X_k = P_S(R_k)$ 
7:      $\Delta S_k = X_k - R_k$ 
8:      $Y_k = P_U(X_k)$ 

```

όπου το ΔS είναι γνωστό σαν διόρθωση Dykstra και οι X_k, Y_k τείνουν και οι δύο στον επιθυμητό πίνακα συσχέτισης καθώς $k \rightarrow \infty$. Όποτε ορίζοντας ένα ανεκτό σφάλμα τερματίζουμε την παραπάνω διαδικασία. Η παραπάνω μέθοδος προτάθηκε από τον Higham και συγκλίνει γραμμικώς στην λύση. Μια άλλη αποτελεσματικότερη για υπολογισμού με μεγάλα μητρώα είναι η εξής που προτάθηκε από τους Qi και Sun και συγκλίνει τετραγωνικός στην λύση. Το πρόβλημα μετασχηματίζεται από το $\min \|A - \hat{A}\|_F$ ώστε $\hat{A} = \hat{A}^T$, $a_{ii} = 1$ και $\hat{A} \geq 0$ στο εξής πρόβλημα κυρτής βελτιστοποίησης

$$\min \theta(y) = \frac{1}{2} \|(A + \text{diag}(y))_+\|_F^2 - e^T y$$

όπου $y \in \mathbb{R}^n$ και $e = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$ ενώ ο A_+ ορίζεται όπως παραπάνω.

Θεωρούμε ένα σφάλμα ε και ακολουθούμε τα παρακάτω βήματα:

- Αρχικά θεωρούμε ένα τυχαίο $y_0 \in \mathbb{R}^n$, $\eta \in (0, 1)$, $\rho, \sigma \in (0, \frac{1}{2}]$ και $k = 0$
- Υπολογίζουμε το διαφορικό $\nabla \theta(y_k) = \text{diag}(A + \text{diag}(y_k))_+ - e$. Αν $\|\nabla \theta(y_k)\|_2 \leq \varepsilon$ τότε $\hat{A} = (A + \text{diag}(y_k))_+$
- Υπολόγισε την φασματική ανάλυση του $A + \text{diag}(y_k) = Q\Lambda Q^T$ και υπολόγισε τον πίνακα

$$W_{y_k} = \begin{bmatrix} E_{\alpha\alpha} & E_{\alpha\beta} & T \\ E_{\beta\alpha} & 0 & 0 \\ T^T & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

με $T = \left(\frac{\lambda_i(y_k)}{\lambda_i(y_k) - \lambda_j(y_k)} \right)_{i \in \alpha, j \in \gamma}$ όπου $\lambda(y_k)$ οι ιδιοτιμές του πίνακα σε φθίνουσα σειρά και $\alpha = \{i : \lambda_i(y_k) > 0\}$, $\beta = \{i : \lambda_i(y_k) = 0\}$, $\gamma = \{i : \lambda_i(y_k) < 0\}$ και $E_{\alpha\beta} \in \mathbb{R}^{\alpha \times \beta}$ πίνακας με μοναδιαία στοιχεία.

- Εύρεση της διεύθυνσης d_k χρησιμοποιώντας μια επαναληπτική διαδικασία υπολογισμού της Ιακωβιανής (Jacobian) ως εξής

$$V_k d_k = \text{diag}(P_{y_k} (W_{y_k} \circ (P_{y_k}^T D_k P_{y_k})) P_{y_k}^T)$$

όπου $d_k \in \mathbb{R}^n$, $D_k = \text{diag}(d_k)$, P_{y_k} είναι ορθογώνιος πίνακας με στήλες τις ιδιοτιμές του $A + \text{diag}(y_k)$ και \circ το γινόμενο Hadamard. Οι επαναλήψεις σταματάνε όταν ισχύουν οι εξής συνθήκες:

- i. $\|\nabla\theta(y_k) + V_k d_k\|_2 \leq \eta_k \|\nabla\theta(y_k)\|_2$
- ii. $\nabla\theta(y_k)^T d_k \leq -\eta_k \|d_k\|_2^2$

όπου $\eta_k = \min(\eta, \nabla\theta(y_k))$. Αν οι συνθήκες αυτές δεν ικανοποιούνται θα διαλέξουμε $d_k = -B_k^{-1} \nabla\theta(y_k)$ για κάποιο B_k συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα με $\|B_k\|_2, \|B_k^{-1}\|_2$ ομοιόμορφα φραγμένα. Με την παραπάνω διαδικασία έχουμε βρει προσεγγιστικά μια λύση της $\nabla\theta(y_k) + V_k d_k = 0$ χρησιμοποιώντας την μέθοδο του συζυγούς διαφορικού (conjugate gradient).

- Βρες ένα βήμα a_k υπολογίζοντας τον μικρότερο μη αρνητικό ακέραιο m_k ώστε να ισχύει $\theta(y_k + \rho^{m_k} d_k) \leq \theta(y_k) + \sigma \rho^{m_k} \nabla\theta(y_k)^T d_k$
- Θέσε $a_k = \rho^{m_k}$, $y_{k+1} = y_k + \rho^{m_k} d_k$ και $k = k + 1$ και επέστρεψε στο δεύτερο βήμα.

Βιβλιογραφία

- [1] Adler P M; Jacquin C G; Quiblier J A. Flow in simulated porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, 16(4):691–712, 2014.
- [2] D. Aldous. *Probability Approximations via the Poisson Clumping Heuristic*. Springer Verlag, 1989.
- [3] M. Riedmiller; H. Braun. A direct adaptive method for faster back-propagation learning: the rprop algorithm. *Proc. of the IEEE International Conference on Neural Networks (ICNN)*, pages 586–591, 1993.
- [4] Jeulin D. Random texture models for material structures. *Stat. Comput.*, 10:121–132, 2000.
- [5] Qi H; Sun D. A quadratically convergent newton method for computing the nearest correlation matrix. *SIAM. J. Matrix Anal Appl.*, 28(2):360–385, 2006.
- [6] Williams D. *Probability with martingales*. Cambridge University Press, 1991.
- [7] Gilks WR; Richardson S; Spiegelhalter DJ. *Markov chain Monte Carlo in practice*. Chapman&Hall/CRC, 1996.
- [8] Chib S; Greenberg E. Understanding the metropolis-hastings algorithm. *Am. Stat.*, pages 327–335, 1995.
- [9] Liu WK; Siad L; Tian R; Lee S; Lee D; Yin XL; et al. Complexity science of multiscale materials via stochastic computations. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 80:932–978, 2009.
- [10] Bocchini P; Deodatis G. Critical review and latest developments of a class of simulation algorithms for strongly non-gaussian random fields. *Probab. Eng. Mech.*, 23(4):393–407, 2008.
- [11] Koutsourelakis PS; Deodatis G. Simulation of multidimensional binary random fields with application to modeling of two-phase random media. *J.Eng. Mech.(ASCE)*, 131(4):397–412, 2005.
- [12] Patelli E; Schueller G. On optimization techniques to reconstruct microstructures of random heterogeneous media. *Comput. Mater. Sci.*, 45:536–549, 2009.

- [13] Patelli E; Schueller G. Computational optimization strategies for the simulation of random media and components. *Comput. Optim. Appl.*, pages 1–29, 2012.
- [14] Shinozuka M; Deodatis G. Simulation of stochastic processes by spectral representation. *Appl. Mech. Rev.(ASME)*, 44(4):191–204, 1991.
- [15] Shinozuka M; Deodatis G. Simulation of multi-dimensional gaussian stochastic fields by spectral representation. *Appl. Mech. Rev.(ASME)*, 49:29–53, 1996.
- [16] Stefanou George. The stochastic finite element method: past, present and future. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 198:1031–1051, 2009.
- [17] Stefanou George. Simulation of heterogeneous two-phase media using random fields and level sets. *Front. Struct. Civ. Eng.*, 9(2):114–120, 2015.
- [18] Molchanov IS. *Theory of random sets*. Springer-Verlag, 2005.
- [19] Arvo J. Fast random rotation matrices. *Graphics Gems III Academic Press Professional, Inc*, pages 117–120, 1992.
- [20] Feng J W; Li C F; Cen C; Owen D R J. Statistical reconstruction of two-phase random media. *Comput. Stuct.*, 137:78–92, 2014.
- [21] Grigoriu M. Simulation of stationary non-gaussian translation processes. *J. Eng. Mech. (ASCE)*, 124:121–126, 1998.
- [22] Grigoriu M. *Stochastic Calculus applications in science and engineering*. Springer, 2002.
- [23] Grigoriu M. Random field models for two-phase microstructures. *J.Appl. Physics*, 94(6):3762–3770, 2003.
- [24] Kim H.; Shields M. Modeling strongly non-gaussian non-stationary stochastic processes using the iterative translation approximation. *Comput. Stuct.*, 161:31–42, 2015.
- [25] Lagaros N.;Stefanou G.;Papadrakakis M. An enhanced hybrid method for the simulation of highly skewed non-gaussian stochastic fields. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 194:4824–4844, 2005.
- [26] Ostoja-Starzewski M. Random field models of heterogeneous materials. *Int. J. Solids Struct.*, 35:2429–2455, 1998.
- [27] Yamazaki F; Shinozuka M. Digital generation of non-gaussian stochastic fields. *J. Eng. Mech.*, 114(7):1183–1197, 1988.
- [28] Sankaran S; Zabarar N. A maximum entropy approach for property prediction of random microstructures. *Acta Mater*, 54:2265–2276, 2006.
- [29] Higham NJ. Computing the nearest correlation matrix-a problem from finance. *IMA J. Numer. Anal*, 22(3):329–343, 2002.

- [30] Shields M.; Deodatis G.; Bocchini P. A simple and efficient methodology to approximate a general non-gaussian stationary stochastic process by a translation process. *Probab. Eng. Mech.*, 26(4):511–519, 2011.
- [31] Koutsourelakis PS. Probabilistic characterization and simulation of multi- phase random media. *Prob. Eng. Mech.*, 21:227–234, 2006.
- [32] Durrett R. *Probability. Theory and examples*. Cambridge University Press, 2010.
- [33] Deodatis G; Micaletti RC. Simulation of highly skewed non-gaussian stochastic processes. *J. Eng. Mech.*, 127(12):1284–1295, 2001.
- [34] Haykin S. *Neural Networks and Learning Machines*. Prentice Hall, 2008.
- [35] Torquato S. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer Verlag, 2002.
- [36] Yeong CLY; Torquato S. Reconstructing random media. *Phys. Rev.E*, 57:495–506, 1998.
- [37] Yeong CLY; Torquato S. Reconstructing random media ii.three-dimensional media fromtwo-dimensiomal cuts. *Phys. Rev.E*, 58:224–233, 1998.
- [38] R. Ghanem; P.D. Spanos, editor. *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*. Springer-Verlang, 2003.
- [39] Στεφάνου Γ. *Στοχαστική Ανάλυση Κελύφων με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων*. PhD thesis.
- [40] Χελιώτης Δ. *Ένα δεύτερο μάθημα στις πιθανότητες*.
- [41] Χαραλαμπίδης Χ. *Θεωρία πιθανοτήτων και εφαρμογές*. Συμμετρία, 2000.