

ОБ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИЙ МОЩНОСТИ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ КЛАСТЕРОВ НА РАВНОМЕРНО ВЗВЕШЕННЫХ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ С (1, 0)-ОКРЕСТНОСТЬЮ

П.В. Москалев^{1,2}, Л.С. Онищенко²

¹ *Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»*

² *Воронежский государственный технический университет*

Аннотация. Исследуется проблема аппроксимации функций мощности перколяционных кластеров на квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью. Для равномерно взвешенных квадратных решеток конечного размера исследована применимость модели, основанной на обобщении логистической функции. Статистические оценки коэффициентов модели получены с помощью нелинейного метода наименьших квадратов, при этом показано, что сдвиговой параметр модели значительно отличается от известных значений порога перколяции и предложены две интерпретации обнаруженного факта.

Ключевые слова: перколяция узлов, квадратная решетка, порог перколяции, мощность перколяционного кластера, логистическая функция.

Введение

Для построения простейших моделей решеточной перколяции [1, 2] часто используют однородные графы (перколяционные решетки), вершины (узлы) и/или ребра (связи) которых взвешиваются выборкой значений непрерывной случайной величины $0 \leq S \leq 1$ с известным законом распределения. Среди ключевых особенностей таких моделей можно выделить: а) стохастичность, то есть взаимосвязь эффективных характеристик модели с характеристиками случайной величины S , взвешивающей структурные элементы ее перколяционной решетки; б) связность, то есть зависимость глобальных характеристик модели от вероятностных характеристик локальной окрестности узлов или связей перколяционной решетки; в) критический характер, то есть существование пороговых значений, в окрестности которых малые вариации параметров порождают качественное изменение глобальных свойств перколяционной решетки. К числу основных параметров моделей решеточной перколяции относятся: а) размеры перколяционной решетки x ; б) доли достижимых узлов p ; в) радиус и структура окрестности единичного узла перколяционной решетки. От этих параметров сильно зависят такие эффективные характеристики перколяционных моделей, как: а) функция вероятности возникновения перколяционных кластеров $w(p|x)$; б) функция мощности перколяционных кластеров $F(p|x)$; в) порог перколяции p_c , статистические оценки которого, в принципе, могут быть найдены как с помощью аппроксимации функции $w(p|x)$, так и с помощью аппроксимации функции $F(p|x)$.

1. Модель перколяции узлов на квадратной решетке

Следуя работам [3, 4] будем рассматривать модель перколяции узлов на двумерной квадратной решетке конечного размера $x < \infty$ с (1, 0)-окрестностью, взвешенную непрерывной случайной величиной S , равномерно распределенной на отрезке $S \sim U[0, 1]$. Для таких решеток будем рассматривать статистику образования кластеров, стягивающих решетку в направлении от нижней до верхней горизонтальной границ. На рис. 1 показаны примеры реализаций таких кластеров на квадратной перколяционной решетке с линейным размером $x = 33$ узла с (1,0)-окрестностью при до- и сверхкритических значениях доли достижимых уз-

лов: а) $p = p_c - 0,01$; б) $p = p_c + 0,01$, где $p_c \approx 0,592746\dots$ — порог перколяции в задаче узлов на квадратной решетке с $(1, 0)$ -окрестностью; при этом стартовое и целевое подмножества на рис. 1 формируются из достижимых узлов вдоль нижней и верхней границ решетки $X_{0,1} = \{(x_k, y_k) : x_k = -15, -14, \dots, 15; y_k = \mp 15\}$. Светло-серый цвет на рис. 1 соответствует узлам с низкой вероятностью протекания, темно-серый цвет — узлам с высокой вероятностью протекания, а белый цвет — узлам, входящим в кластер, связанный с нижней границей решетки. Для построения этих реализаций мы использовали функцию “ssi20()” из библиотеки “SPSL” выпущенной под лицензией GNU GPL-3 для системы R [5].

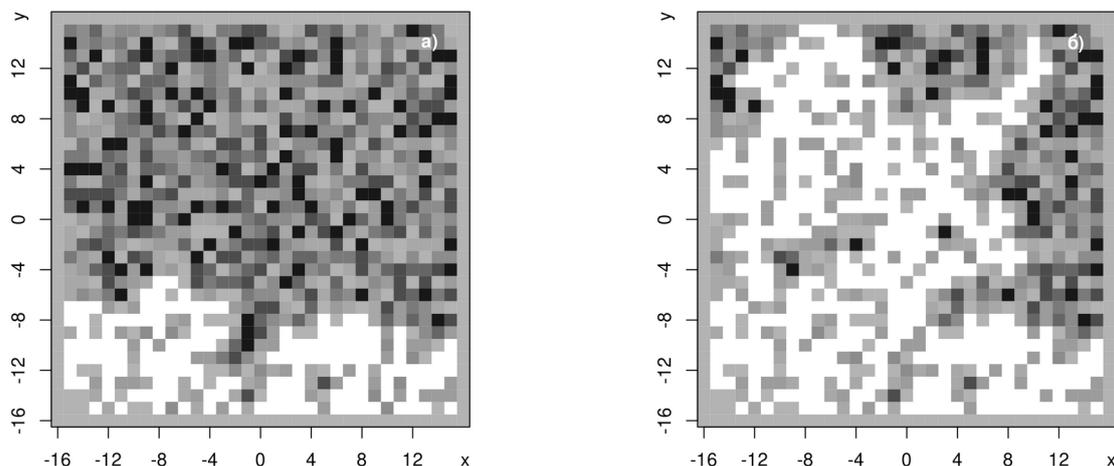


Рис. 1. Реализации кластеров на квадратной решетке при до- и сверхкритических долях достижимых узлов: а) $p = p_c - 0,01$; б) $p = p_c + 0,01$

На рис. 1 хорошо заметен критический характер модели решеточной перколяции: в левосторонней окрестности порога перколяции $p = p_c - 0,01$ вертикальный размер кластера существенно меньше вертикального размера перколяционной решетки, тогда как в правосторонней окрестности порога перколяции $p = p_c + 0,01$ вертикальный размер кластера резко возрастает и совпадает (в силу ограниченности) с вертикальным размером перколяционной решетки.

Для анализа статистически устойчивых характеристик перколяционных кластеров воспользуемся показанными на рис. 2 распределениями относительных частот для выборок объемом $n = 1000$ реализаций на квадратной решетке с линейным размером $x = 33$ узла с $(1, 0)$ -окрестностью при до- и сверхкритических значениях доли достижимых узлов: а) $p = p_c - 0,01$; б) $p = p_c + 0,01$.

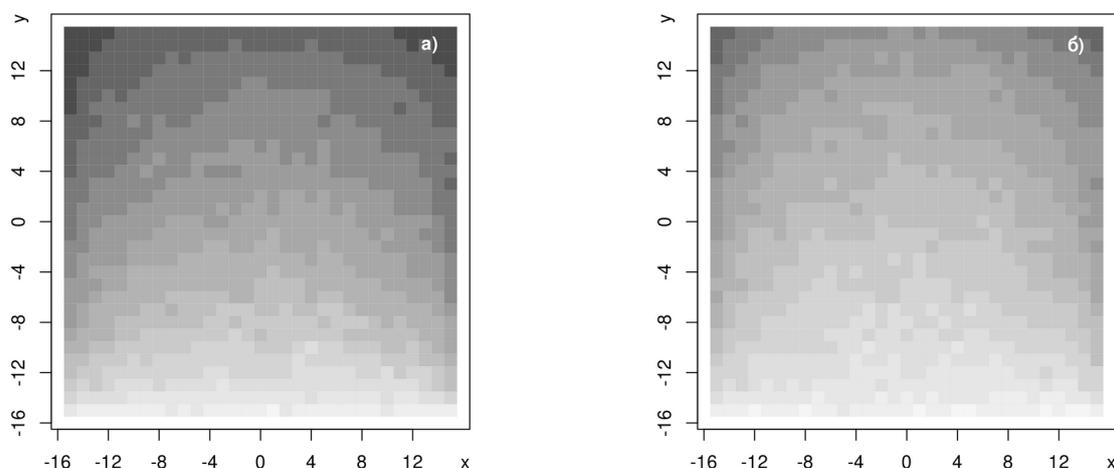


Рис. 2. Распределения относительных частот для выборки кластеров на квадратной решетке при до- и сверхкритических долях достижимых узлов: а) $p = p_c - 0,01$; б) $p = p_c + 0,01$

Светло-серый цвет на рис. 2 соответствует узлам перколяционной решетки с высокой частотой принадлежности к кластерам, стягивающим решетку в вертикальном направлении, темно-серый цвет — узлам решетки с низкой частотой принадлежности к стягивающим кластерам, а все узлы с нулевой частотой условно не показаны. Для построения этих распределений мы использовали функцию “fssi20()” из библиотеки “SPSL”, выпущенной под лицензией GNU GPL-3 для системы R [5]. Можно показать, что различие выборочных частот узлов стартового подмножества $X_0 = \{(x_k, y_k) : x_k = -15, -14, \dots, 15; y_k = -15\}$ не является статистически значимым, в то время как различие выборочных частот узлов целевого подмножества $X_1 = \{(x_k, y_k) : x_k = -15, -14, \dots, 15; y_k = 15\}$ — статистически значимо, причем в наибольшей степени этот эффект проявляется в субкритической области при $p \leq p_c$.

2. Аппроксимация функций мощности перколяционных кластеров

Если принять усредненную относительную частоту целевого подмножества узлов решетки X_1 в качестве статистической оценки функции мощности перколяционного кластера $F_i(p_i)$, то как показано в [4] при $p \rightarrow 0+$ эти оценки будут близки к нулю $F_i(p_i) \rightarrow 0+$ и будут сходиться к функции взвешивающего распределения $F_i(p_i) \rightarrow F_0(p)$ при $p \rightarrow 1-$. Точками на рис. 3 показаны такие оценки $F_i(p_i)$, полученные с помощью приведенных на рис. 2 распределений относительных частот для выборок объемом $n = 1000$ реализаций на квадратной решетке с линейным размером $x = 33$ узла с $(1, 0)$ -окрестностью для всех возможных значений долей достижимых узлов $0 \leq p < 1$. Вертикальные и горизонтальные штриховые линии серого цвета на рис. 3 соответствуют характерным для данной задачи уровням долей достижимых узлов $p = \{0, p_c, 1\}$ и их вероятностей $F = \{0, 0,592746, 1\}$.

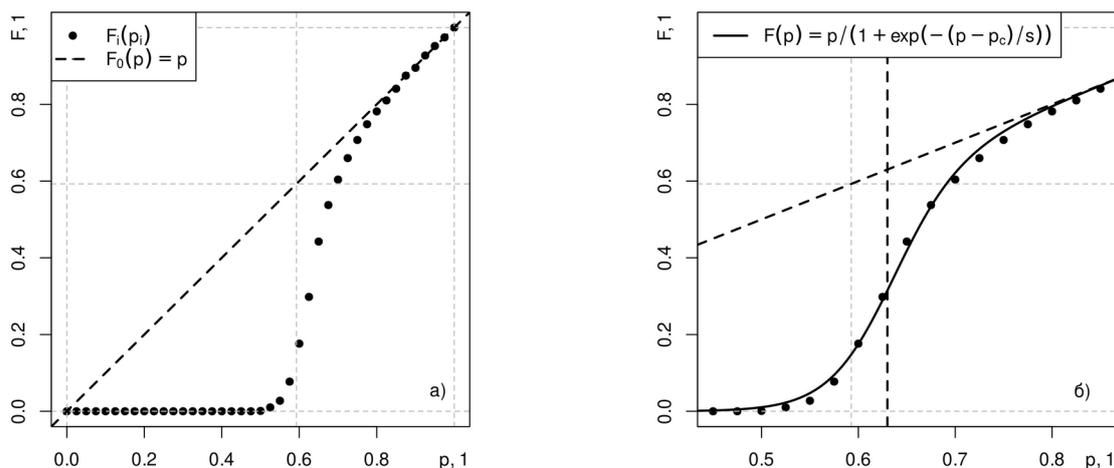


Рис. 3. Аппроксимация зависимости $F_i(p_i)$ с помощью логистической функции вида (1)

Утолщенная наклонная штриховая линия черного цвета на рис. 3 соответствует функции распределения случайной величины $F_0(p) = p$, равномерно распределенной на интервале $0 \leq p < 1$, выборка значений которой взвешивает узлы перколяционной решетки. Утолщенной сплошной линией на рис. 3 показана аппроксимация функции мощности перколяционных кластеров, построенная на базе логистической функции [6]:

$$F_i = p_i / (1 + \exp(-(p_i - p_c) / s)) + \varepsilon_i, \quad (1)$$

где p_c — параметр сдвига, статистическая оценка которого показана на рис. 3б утолщенной вертикальной штриховой линией черного цвета; s — параметр масштаба, определяющий радиус интервала, в пределах которого функция (1) значительно отличается от собственных асимптот: а) горизонтальной $F(p) \rightarrow 0+$ при $p \rightarrow 0+$ и б) наклонной $F(p) \rightarrow p-$ при $p \rightarrow 1-$.

3. Результаты и обсуждение

При построении вышеуказанной аппроксимации в системе R был использован нелинейный метод наименьших квадратов, реализованный в рамках функции “`gsl_nls()`” из библиотеки “`gslnls`”, выпущенной под лицензией GNU GPL-3 для системы R [5]. Сводка основных результатов, полученных при построении аппроксимации в форме (1) для зависимости мощности перколяционных кластеров от доли достижимых узлов $F_i(p_i)$ приведена в листинге 1.

Листинг 1. Аппроксимация эмпирической зависимости $F_i(p_i)$ в форме (1)

```
> summary(fit <- gsl_nls(Fi ~ pi/(1+exp(-(pi-pc)/s)),
start=list(pc=0.6,s=0.1))

Formula: Fi ~ pi/(1 + exp(-(pi - pc)/s))

Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
pc 0.6300121  0.0011057  569.79  <2e-16 ***
s  0.0338714  0.0009689   34.96  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.009719 on 39 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 8
Achieved convergence tolerance: 1.375e-12

> confint(fr1)
      2.5 %      97.5 %
1 0.62777557 0.63224853
2 0.03191162 0.03583121
```

Нетрудно видеть, что используя лишь статистические показатели качество построенной аппроксимации можно охарактеризовать как хорошее. Однако, статистическая оценка сдвигового параметра модели (1), соответствующая абсциссе максимума ее первой производной, значимо отличается от известных значений порога перколяции на квадратной решетке с (1, 0)-окрестностью $p_c \approx 0,5927 \notin (0,6278, 0,6322)$.

4. Заключение

Обнаруженный факт выглядит несколько неожиданно, но его можно интерпретировать как минимум двумя различными и не взаимоисключающими друг друга способами. Во-первых, этот факт может говорить о наличии систематической погрешности, порождающей заниженные оценки F_i — вероятности попадания узлов целевого подмножества в множество кластеров, стягивающих решетку в вертикальном направлении. Во-вторых, этот факт может говорить о принципиальной некорректности применения логистической функции вида (1) для аппроксимации эмпирических данных $F_i(p_i)$, например, из-за существенной асимметрии последних.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 23-21-00376).

Литература

1. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. – М.: URSS, 2002. – 112 с. –

URL: <https://elibrary.ru/jkmbbru>.

2. Москалев П.В. Перколяционное моделирование пористых структур. – М.: URSS, 2018. – 240 с. – URL: <https://elibrary.ru/zrjswd>.

3. Москалев П.В. Оценки порога и мощности перколяционных кластеров на квадратных решетках с $(1, \pi)$ -окрестностью // Компьютерные исследования и моделирование. – 2014. – Т. 6, № 3. – С. 405–414. – URL: <https://elibrary.ru/sitewx>.

4. Moskalev P.V. Convergence of percolation probability functions to cumulative distribution functions on square lattices with $(1, 0)$ -neighborhood // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2020. – V. 553. – P. 124657. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124657>.

5. Moskalev P.V. SPSL: Site Percolation on Square Lattices. – R package version 0.1.9. – URL: <https://cran.r-project.org/package=SPSL>.

6. Verhulst P.-F. Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement // Correspondance Mathématique et Physique. – 1838. – V. 10. – P. 113–121.

7. Chau J. gslnls: GSL Nonlinear Least-Squares Fitting. – R package version 1.1.2. – URL: <https://cran.r-project.org/package=gslnls>.