

## БИЛОГИСТИЧЕСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ МОЩНОСТИ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ КЛАСТЕРОВ НА ОГРАНИЧЕННЫХ НЕРАВНОМЕРНО ВЗВЕШЕННЫХ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ С (1, 0)-ОКРЕСТНОСТЬЮ

П. В. Москалев<sup>1,2</sup>, А. С. Мягков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»*

<sup>2</sup> *Воронежский государственный технический университет*

**Аннотация.** Проводится анализ модели, используемой для аппроксимации функций мощности перколяционных кластеров на ограниченных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью, взвешенных бета-распределенными случайными величинами. Аппроксимация строится как произведение функции взвешивающего распределения и пары двухпараметрических логистических функций. Статистические оценки параметров моделей получены с помощью нелинейного метода наименьших квадратов. Показано, что апостериорные оценки сдвиговых параметров обеих логистических функций значительно отличаются от априорных оценок порога перколяции, что приводит к существенной асимметрии функции, аппроксимирующей мощность перколяционных кластеров на ограниченных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью.

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

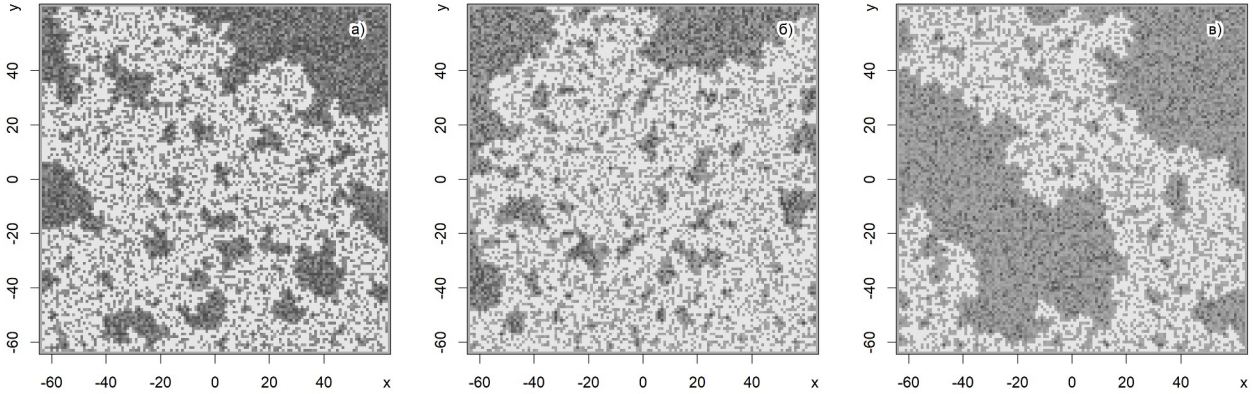
### Введение

Модели решеточной перколяции находят применение в различных областях, например, при исследовании процессов в пористых материалах, или при изучении фазовых переходов в физике твердого тела. Одной из задач, решаемых для перколяционных моделей, является выделение некоторого подмножества узлов (кластера), непрерывным образом связанного с другим (стартовым) подмножеством. Типичные модели решеточной перколяции основаны на структурах регулярных (однородных) графов [1, 2], вершины или ребра которых взвешиваются с помощью некоррелированной выборки значений случайной величины  $S$  с некоторым известным законом распределения. К особенностям таких моделей обычно относят: во-первых, их стохастичность, проявляющуюся в виде взаимосвязи между глобальными характеристиками модели и законом распределения взвешивающей решетку случайной величины  $S$ ; во-вторых, их связность, проявляющуюся во взаимосвязи глобальных характеристик кластеров с локальными характеристиками  $\epsilon$ -окрестностей узлов в перколяционной решетке; в-третьих, критический характер процесса протекания, проявляющийся в наличии некоторых (пороговых) значений, в окрестности которых малые вариации локальных параметров приводят к существенно большим изменениям эффективных характеристик перколяционной модели.

Следуя логике нашего предыдущего исследования [3], в качестве параметров в задаче узлов для моделей решеточной перколяции выделим размер решетки  $x$  и долю ее достижимых узлов  $p$ , а также теоретическую функцию распределения  $F_0(p)$  случайной величины  $S$ , взвешивающей узлы перколяционной решетки. Их значения и будут определять эффективные характеристики исследуемых моделей, в частности, функцию мощности перколяционных кластеров  $P_\infty(p)$  и порог протекания, априорные оценки которого, как показано в [4], могут быть определены квантилями функций распределения  $F_0(p)$ , а апостериорные — аппроксимациями функций мощности перколяционных кластеров  $P_\infty(p)$ .

# 1. Модель перколяции узлов на квадратной неравномерно взвешенной решетке

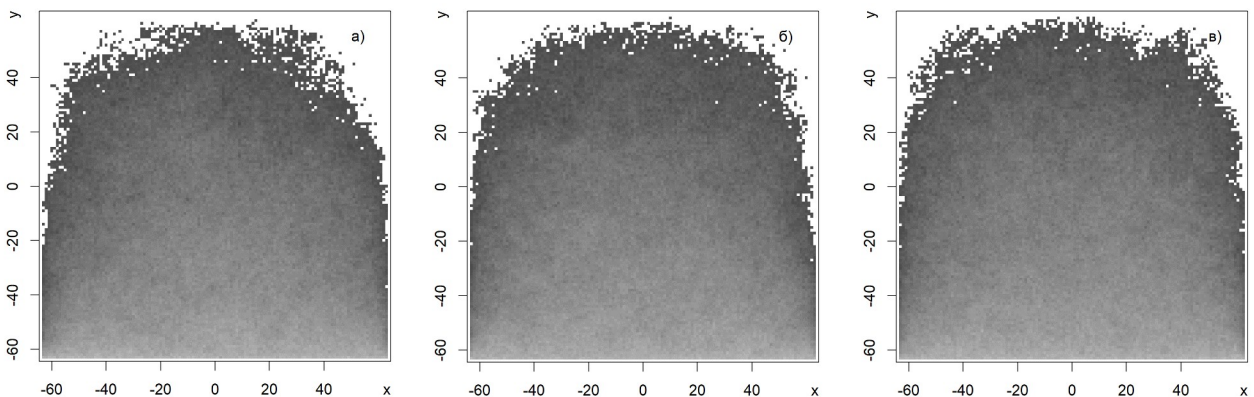
В рамках поставленной задачи будем рассматривать модель перколяции узлов на ограниченной квадратной решетке с  $(1, 0)$ -окрестностью, взвешенную непрерывной случайной величиной  $S$ , имеющей бета-распределение  $S \sim \mathbf{B}(s_1, s_2)$ . Для этих моделей, следуя работам [3-5], будем исследовать статистику образования кластеров, стягивающих решетку в вертикальном направлении, то есть обладающих вертикальным размером, сопоставимым с размером перколяционной решетки.



**Рис. 1.** Реализации стягивающих кластеров при критических значениях параметра  $p \approx p_c$  для различных взвешивающих распределений  $S$ : а)  $S \sim \mathbf{B}(1, 2)$ ; б)  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$ ; в)  $S \sim \mathbf{B}(2, 1)$

Все реализации кластеров на рис. 1 строились нами для квадратной решетки размером  $x = 129$  узлов с  $(1, 0)$ -окрестностью при критических значениях параметра  $p \approx p_c$ , соответствующих априорным оценкам порога перколяции [4] с различными взвешивающими распределениями  $S$ : а)  $S \sim \mathbf{B}(1, 2)$ ,  $p = 0,3618$ ; б)  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$ ,  $p = 0,5927$ ; в)  $S \sim \mathbf{B}(2, 1)$ ,  $p = 0,7699$ .

Стартовое подмножество узлов на рис. 1 формируется вдоль нижней границы перколяционной решетки, а целевое подмножество — вдоль ее верхней границы  $X_{0|1} = \{(x_k, y_k): x_k = -64, -63, \dots, 64; y_k = \mp 64\}$ . Светло-серым цветом на рис. 1 мы обозначили узлы с низкой вероятностью протекания, темно-серым цветом — узлы с высокой вероятностью протекания, а белым цветом — узлы кластера, стягивающего решетку по вертикали. Реализации строились с применением пакета “SPSL” для системы R [6]: а) “ssi20(x=129, p=0.3618, shape=c(1, 2))”; б) “ssi20(x=129, p=0.5927, shape=c(1,1))”; в) “ssi20(x=129, p=0.7699, shape=c(2,1))”.



**Рис. 2.** Распределения относительных частот стягивающих кластеров при критических значениях параметра  $p \approx p_c$  для различных взвешивающих распределений  $S$ : а)  $S \sim \mathbf{B}(1, 2)$ ; б)  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$ ; в)  $S \sim \mathbf{B}(2, 1)$

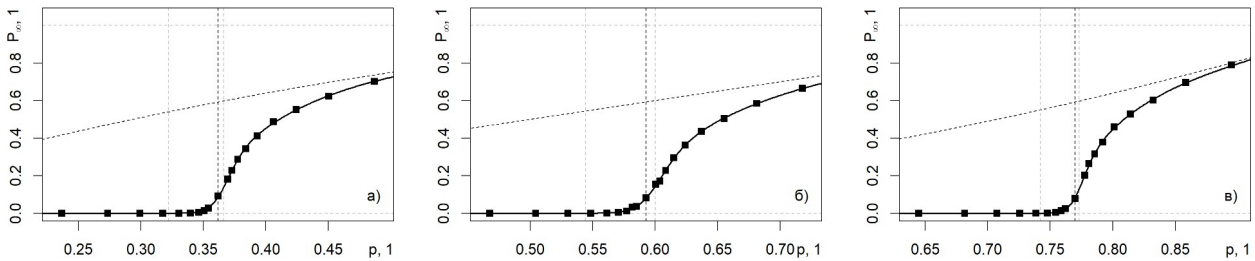
На рис. 2 показаны распределения относительных частот узлов квадратных решеток для выборок объемом  $n = 300$  кластеров узлов с  $(1, 0)$ -окрестностью при критических значе-

ниях параметра  $p \approx p_c$ , соответствующих априорным оценкам порога перколяции [4] для взвешивающих распределений  $S$ , идентичных ранее показанным на рис. 1.

Светло- и темно-серым цветом на рис. 2 показаны узлы перколяционной решетки с высокими и низкими частотами принадлежности к стягивающим кластерам, а все узлы с околонулевыми частотами условно не отображаются. По аналогии с рис. 1 все распределения на рис. 2 были построены с помощью пакета “SPSL” для системы R [6]: а) “fssi20(n=300, x=129, p=0.3618, shape=c(1,2))”; б) “fssi20(n=300, x=129, p=0.5927, shape=c(1,1))”; в) “fssi20(n=300, x=129, p=0.7699, shape=c(2,1))”.

## 2. Аппроксимация функций мощности стягивающих кластеров на неравномерно взвешенных перколяционных решетках

В качестве оценок функции мощности перколяционных кластеров  $\{P_{\infty,i}(p_i)\}$  примем усредненные по целевому подмножеству  $X_1$  относительные частоты узлов решетки в стягивающих кластерах, примеры распределений которых показаны выше на рис. 2. В работе [4] было показано, что при убывании параметра  $p \rightarrow 0+$  эти оценки близки к нулю  $P_{\infty}(p) \rightarrow 0+$ , а при его возрастании  $p \rightarrow 1-$  сходятся к функции взвешивающего распределения  $P_{\infty}(p) \rightarrow F_0(p)-$ .



**Рис. 3.** Аппроксимация мощности стягивающих кластеров  $P_{\infty}(p|S)$  для различных взвешивающих распределений  $S$ : а)  $S \sim \mathbf{B}(1, 2)$ ; б)  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$ ; в)  $S \sim \mathbf{B}(2, 1)$

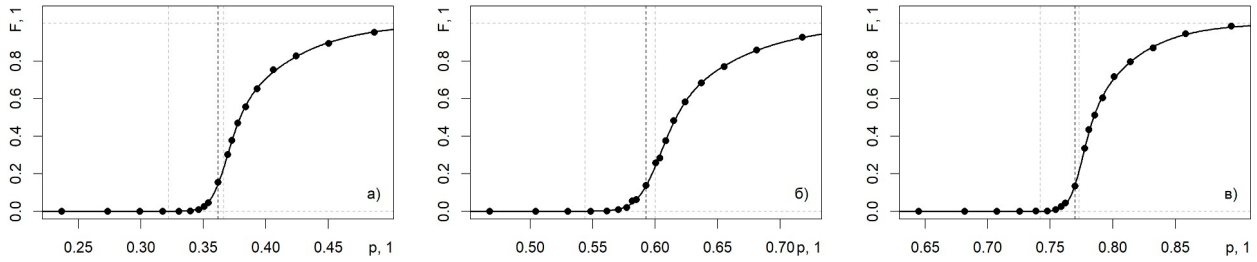
На рис. 3 приведены зависимости статистических оценок мощности стягивающих кластеров от доли достижимых узлов  $P_{\infty}(p|S)$  для неравномерно взвешенных квадратных решеток с линейным размером  $x = 129$  узлов с  $(1, 0)$ -окрестностью для множества возможных значений долей достижимых узлов  $p$  в окрестности критической точки  $p \approx p_c$ . Символами «■» показаны статистические оценки  $\{P_{\infty,i}(p_i)\}$ . Вертикальные и горизонтальные штриховые линии серого и черного цветов на рис. 3 соответствуют характерным для данной задачи уровням долей достижимых узлов  $p \approx p_c$  и предельных вероятностей  $P = \{0, 1\}$ . Выпуклые вверх, вниз или прямые штриховые линии черного цвета соответствуют интегральным функциям бета-распределенной случайной величины  $S$ , на интервале  $p_c - 0,13 < p < p_c + 0,13$ . При этом мощность стягивающего кластера на интервале  $0 < p < 1$  будет аппроксимироваться моделью вида:

$$P_{\infty}(p|S) = F_0(p|S) F(p), \quad (1)$$

где  $F_0(p|s_1, s_2) = \mathbf{B}(p|s_1, s_2)/\mathbf{B}(s_1, s_2)$  — интегральная функция распределения взвешивающей узлы перколяционной решетки случайной величины  $S$ ;  $F(p)$  — асимметричная билогистическая функция вида:

$$F(p) = (2/[1 + \exp(-(p - a_2)/b_2)] - 1)/[1 + \exp(-(p - a_1)/b_1)], \quad (2)$$

где  $a_1, a_2$  — параметры сдвига, определяющие абсциссы точек перегиба отдельных компонент  $F_1(p)$  и  $F_2(p)$  билогистической функции (2);  $b_1, b_2$  — параметры масштаба, определяющие радиусы асимметричного интервала значений параметра  $p_c - \varepsilon_1 < p < p_c + \varepsilon_2$ , в пределах которого функция (2) статистически значимо отличается от своих асимптот.



**Рис. 4.** Аппроксимация билогистических сигмоидных функций  $F(p|S)$  для различных взвешивающих распределений  $S$ : а)  $S \sim \mathbf{B}(1, 2)$ ; б)  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$ ; в)  $S \sim \mathbf{B}(2, 1)$

На рис. 4 представлены примеры графиков асимметричных билогистических сигмоидных функций вида (2) со сдвиговыми и масштабными параметрами, идентичными принятым при построении аппроксимаций на рис. 3. Символами «●» показаны отношения оценок мощности стягивающих кластеров к соответствующим значениям функций распределения  $\{P_{\infty,i}/F_0(p_i)\}$  взвешивающей узлы перколяционной решетки случайной величины  $S$ .

### 3. Результаты и обсуждение

При построении вышеуказанной аппроксимации в системе R была использована реализация нелинейного метода наименьших квадратов из пакета “gslnlsl” для системы R [7]. Основные результаты, полученные при аппроксимации в форме (1) для зависимости мощности стягивающих кластеров от доли достижимых узлов  $\{P_{\infty,i}(p_i)\}$  при параметрах взвешивающего распределения  $S \sim \mathbf{B}(1, 1)$  приведена в листинге 1.

**Листинг 1.**

*Аппроксимация эмпирической зависимости  $\{P_{\infty,i}(p_i)\}$  в форме (1)*

```
> summary(fit)
Formula: Pinf ~ p * (2/(1 + exp(-(p - a2)/b2)) - 1)/(1 + exp(-(p - a1)/b1))
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
a1 0.5989037  0.0003941 1519.65  <2e-16 ***
a2 0.5447627  0.0019619  277.67  <2e-16 ***
b1 0.0097962  0.0001619   60.52  <2e-16 ***
b2 0.0532708  0.0009085   58.64  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.001864 on 22 degrees of freedom
Number of iterations to convergence: 14
Achieved convergence tolerance: 1.751e-16

> confint(fit)
          2.5 %      97.5 %
a1 0.598086392 0.59972104
a2 0.540693863 0.54883144
b1 0.009460513 0.01013191
b2 0.051386728 0.05515483
```

Как было показано в работе [3], при исследовании равномерно взвешенных перколяционных решеток малого размера удовлетворительную аппроксимацию для функции мощности стягивающих кластеров можно построить на базе произведения функции распределения и единичной логистической функции. Однако для неравномерно взвешенных решеток большего размера построение удовлетворительной аппроксимации вида (1) основано на использовании асимметричной билогистической функции вида (2), причем, если ориентироваться на остаточное стандартное отклонение (RSE), то можно заметить, что качество построенной аппроксимации выросло более чем пятикратно  $\sigma_{\varepsilon 1}/\sigma_{\varepsilon 2} \approx 0,0097/0,0019 \approx 5,1$ .

На рис. 3 вертикальными штриховыми линиями серого цвета показаны статистические оценки сдвиговых параметров модели (1), а вертикальными линиями черного цвета – априорные оценки порога перколяции на бета-взвешенных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью. Нетрудно заметить, что во всех рассмотренных случаях выполняются неравенства вида  $a_2 < p_c < a_1$ , причем радиусы левого и правого полуинтервалов различаются почти на порядок  $p_c - a_1 < p_c - a_2$ .

#### 4. Заключение

Представленные результаты на взгляд авторов наглядно демонстрируют, что применение билогистических моделей позволяет получать удовлетворительные аппроксимации кластеров, стягивающих неравномерно взвешенные решетки для большого диапазона размеров решеток. С теоретической точки зрения интерес вызывает исследование природы возникновения асимметрии в зависимости функции мощности стягивающих кластеров от доли достижимых узлов. С практической точки зрения интерес вызывают корреляции параметров предлагаемых аппроксимаций от размера решетки и параметров взвешивающего распределения, а также применимость предлагаемых аппроксимаций на неравномерно взвешенных кубических решетках.

#### Благодарности

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

#### Литература

1. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю. Ю. Тарасевич. — Москва: URSS, 2002. — 112 с. — URL: <https://elibrary.ru/jkmbnu> (дата обращения: 29.10.2024).
2. Москалев П. В. Перколяционное моделирование пористых структур / П. В. Москалев. — Москва: URSS, 2018. — 240 с. — URL: <https://elibrary.ru/zrjswd> (дата обращения: 29.10.2024).
3. Москалев П. В. Об аппроксимации функций мощности перколяционных кластеров на равномерно взвешенных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью / П. В. Москалев, Л. С. Онищенко // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции. — Воронеж: Научно-исследовательские публикации, 2024. — С. 564–568. — URL: <https://elibrary.ru/hvsmwr> (дата обращения: 29.10.2024).
4. Moskalev P. V. Convergence of percolation probability functions to cumulative distribution functions on square lattices with (1, 0)-neighborhood / P. V. Moskalev // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2020. — V. 553. — P. 124657. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124657> (дата обращения: 29.10.2024).
5. Москалев П. В. Оценки порога и мощности перколяционных кластеров на квадратных решетках с (1,  $\pi$ )-окрестностью / П. В. Москалев // Компьютерные исследования и моделирование. — 2014. — Т. 6, № 3. — С. 405–414. — URL: <https://elibrary.ru/sitewx> (дата обращения: 29.10.2024).
6. Moskalev P. V. SPSL: Site Percolation on Square Lattices. — R package version 0.1.9. — URL: <https://cran.r-project.org/package=SPSL> (дата обращения: 29.10.2024).
7. Chau J. gslnls: GSL Nonlinear Least-Squares Fitting. — R package version 1.1.2. — URL: <https://cran.r-project.org/package=gslnls> (дата обращения: 29.10.2024).