УДК 519.654 : 519.676

О СВЯЗИ ПЕРЕХОДНЫХ ФУНКЦИЙ С ОЦЕНКАМИ МОЩНОСТИ СТЯГИВАЮЩИХ КЛАСТЕРОВ НА БЕТА-ВЗВЕШЕННЫХ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ С (1, 0)-ОКРЕСТНОСТЬЮ

П. В. Москалев[1,2], А. С. Мягков[1]

[1] Московский государственный технологический университет “СТАНКИН”,
Россия, Москва, 127055, Вадковский пер., 1
[2] Воронежский государственный технический университет,
Россия, Воронеж, 394006, ул. 20-летия Октября, 84
E-mail: moskaleff@mail.ru; almyagkov99@yandex.ru

Основные результаты исследований в математической теории протекания (перколяции) за последние полвека были получены для так называемого термодинамического предельного перехода (для $x \to \infty$). В то же время применение моделей решеточной перколяции в прикладных исследованиях в основном базируется на решетках ограниченного размера (для $x < \infty$). Построение аппроксимаций статистически устойчивых характеристик перколяционных кластеров на таких решетках обычно основано на различных сигмоидных функциях [1, 2]. Так при аппроксимации относительных частот стягивающих кластеров по выборке $\{w_i(p_i)\}$ на решетках конечного размера хорошие результаты дает применение симметричных сигмоидных функций:

$$w_i = \frac{1}{1+\exp\left(-\frac{p_i-b_0}{b_1}\right)} + e_i, \quad \text{для} \quad i = 1, 2, \ldots, n, \tag{1}$$

где p_i – статистическая оценка достижимости (относительная доля) узлов перколяционной решетки; b_0, b_1 – сдвиговой и масштабный параметры, первый из которых связан с порогом перколяции, а второй – с размером решетки. Нетрудно проверить, что функция (1) ограничена интервалом оси ординат от 0 до 1, возрастает на всей числовой оси, симметрична относительно точки перегиба с координатами (b_0; 0,5) и имеет две горизонтальные асимптоты:

$$\lim_{p\to-\infty} w(p) = 0+ \quad \text{и} \quad \lim_{p\to+\infty} w(p) = 1-. \tag{2}$$

Основные трудности при статистической оценке параметров функций вида (1) состоят в том, что в силу предельных свойств (2) для выборок ограниченного объема информационной значимостью обладает лишь некоторая симметричная ограниченная окрестность точки перегиба $\mathbf{I}_{0,95}(p_c) = (b_0 \pm \varepsilon(b_1))$, центр которой определяется сдвиговым параметром b_0 модели (1), а ее радиус $\varepsilon(b_1)$ коррелирует с масштабным параметром b_1 модели (1).

Как было показано в работе [3], мощность перколяционных кластеров в термодинамическом пределе (при $x \to \infty$) для сверхкритических долей достижимых узлов (при $p \ge p_c$) определяется как:

$$\lim_{x\to\infty} P_x(p) = \begin{cases} 0, & p < p_c; \\ F_0(p), & p \ge p_c, \end{cases} \qquad p_c = F_0^{-1}(p_0), \tag{3}$$

где p_c – порог перколяции, априорно определяемый для данной решетки p_0-квантилем интегральной функцией распределения $F_0(p)$ случайной величины S, взвешивающей узлы перколяционной решетки; p_0 = 0,592746 – уровень квантиля для квадратной решетки с (1, 0)-окрестностью.

Тогда для аппроксимации оценок мощности перколяционных кластеров на ограниченных решетках $\{P_{xi}(p_i)\}$ можно воспользоваться произведением интегральной функцией распределения $F_0(p)$ взвешивающей перколяционную решетку случайной величины S и некоторой переходной функции $F(p) = F_1(p)F_2(p)$, то есть:

$$P_{xi} = F_0(p_i)F_1(p_i)F_2(p_i) + e_i, \tag{4}$$

где $F(p)$ – в общем случае асимметричная сигмоидная функция, представление которой, обсуждавшееся в наших работах [4, 5], будет существенно влиять на качество аппроксимации модели вида (4). Ранее в работе [4] было показано, что для квадратных перколяционных решеток малого размера (при $x < 65$ узлов с (1, 0)-окрестностью) удовлетворительное качество аппроксимации может быть достигнуто с помощью простой логистической аппроксимации:

$$F_1(p) = \frac{1}{1+\exp\left(-\frac{p-b_0}{b_1}\right)}, \qquad F_2(p) = 1, \tag{5}$$

но с увеличением размера перколяционной решетки x качество аппроксимации для моделей вида (4), (5) быстро падает из-за роста асимметрии переходной функции $F(p)$. В работе [5] для решения этой проблемы предлагается построение билогистической асимметричной сигмоидной функции вида:

$$F_1(p) = \frac{1}{1+\exp\left(-\frac{p-b_0}{b_1}\right)}, \qquad F_2(p) = \frac{2}{1+\exp\left(-\frac{p-b_2}{b_3}\right)} - 1, \tag{6}$$

которая в силу различия масштабных параметров b_1 и b_3 позволяет легко моделировать существенную асимметрию $F(p)$, что повышает общее качество аппроксимации моделей вида (4), (6) как для квадратных, так и для кубических решеток. Вместе с тем вполне ясно, что это не единственный вариант для построения асимметричных сигмоидных функций $F(p)$. Например, анализ формулы (6) показывает, что $F_2(p)$ допускает упрощение путем замены логистической функции на аналог интегральной функции показательного распределения, после чего асимметричную (в общем случае) переходную функцию $F(p)$ можно записать в более простой форме:

$$F_1(p) = \frac{1}{1+\exp\left(-\frac{p-b_0}{b_1}\right)}, \qquad F_2(p) = 1 - \exp\left(-\frac{p-b_2}{b_3}\right). \tag{7}$$

Статистические данные для оценок мощности перколяционных (стягивающих) кластеров $\{P_{xi}(p_i)\}$ будем формировать по выборке объемом $N = 500$ реализаций. Статистика представляет собой усредненные вдоль верхней границы квадратной решетки относительные частоты узлов в кластерах со стартовым подмножеством вдоль нижней границы этой решетки. Стягивающие кластеры строятся на бета-взвешенных квадратных решетках размером $x = 65$ узлов с (1, 0)-окрестностью для показательно распределенных значений долей достижимых узлов $p_i = p_c \pm \Delta p_i$, где $\Delta p_i = 0, 3^{-4,8}, 3^{-4,5}, \ldots, 3^{-1,5}$.

На рис. 1 показаны корреляционные поля выборок оценок мощности $\{P_{xi}(p_i)\}$ и переходных функций $\{F_i(p_i)\}$ для стягивающих кластеров на квадратных решетках, взвешенных бета-распределенными случайными величинами: $S_1 \sim \mathbf{B}(1, 2)$; $S_2 \sim \mathbf{B}(1, 1)$; $S_3 \sim \mathbf{B}(2, 1)$, интегральные функции распределения которых показаны на рис. 1а выпуклыми вверх, вниз и прямыми штриховыми линиями, соединяющими точки с координатами (0, 0) и (1, 1). Горизонтальными штриховыми линиями показаны характерные значения мощностей стягивающих кластеров: P_x = 0; 0,592746; 1, вертикальными штриховыми линиями – характерные значения долей достижимых узлов: p = 0; 0,361835; 0,592746; 0,769900; 1. При этом нетривиальные значения долей достижимых узлов соответствуют априорным оценкам (3) для порогов перколяции $p_{c1|2|3}$ для квадратных решеток с (1, 0)-окрестностью, взвешенных случайными величинами $S_{1|2|3}$.

Применение вертикальных и горизонтальных линий на рис. 1б в целом аналогично их применению на рис. 1а. Нетрудно видеть, что величины масштабных параметров b_1 и b_3 для функций $F_1(p)$ и $F_2(p)$ различаются почти на порядок, что позволяет модели (7) адекватно учитывать существенную асимметрию переходной функции $F(p)$.

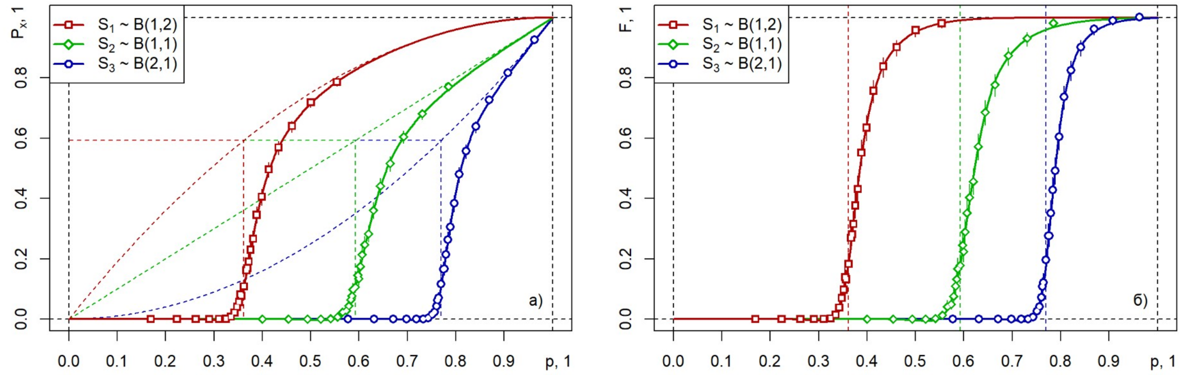

Рис. 1. Аппроксимации вида (4), (7) для мощностей стягивающих кластеров $\{P_{xi}(p_i)\}$ и переходных функций $\{F_i(p_i)\}$ на бета-взвешенных квадратных решетках для различных $S_{1|2|3}$ по сетке долей достижимых узлов $p_i = p_c \pm \Delta p_i$, где $\Delta p_i = 0, 3^{-4,8}, 3^{-4,5}, \ldots, 3^{-1,5}$

Все результаты на рис. 1 были получены с использованием функции «ssi20( )» из пакета “SPSL”, выпущенного автором для системы R под лицензией GNU GPL-3 [6]. Для оценки параметров регрессионной модели использовалась функция “gsl_nls( )” из пакета “gslnls”, выпущенного под лицензией GNU GPL-3 для системы R [7]. Примеры результатов, полученных при построении аппроксимаций вида (4), (5) и (4), (7) для мощности стягивающих кластеров по долям достижимых узлов для квадратных решеток с (1, 0)-окрестностью, взвешенных случайной величиной $S_2 \sim \mathbf{B}(1, 1)$, приведены в следующем листинге.

```
Formula: Pxb ~ pbeta(p,1,1) * F1(p,b0,b1)

Parameters:
   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 0.624557   0.001329  470.10  < 2e-16 ***
b1 0.022861   0.001213   18.85 1.75e-15 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.02201 on 23 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 14
Achieved convergence tolerance: 2.082e-17

Formula: Pxb ~ pbeta(p,1,1) * F1(p,b0,b1) * F2(p,b2,b3)

Parameters:
    Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 0.6033508  0.0014372  419.80  < 2e-16 ***
b1 0.0172637  0.0004244   40.68  < 2e-16 ***
b2 0.5375818  0.0067632   79.49  < 2e-16 ***
b3 0.0727979  0.0034454   21.13 1.25e-15 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.004179 on 21 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 13
Achieved convergence tolerance: 3.003e-15
```

В целом, качество построенной аппроксимации можно охарактеризовать как хорошее. Если использовать в качестве метрики качества остаточное стандартное отклонение (RSE), то для переходной функции $F(p)$ изменение модели с (5) на (7) приводит более чем к пятикратному росту качества аппроксимации для функции $P_x(p)$ мощности стягивающих кластеров: $\sigma_{e5}/\sigma_{e7} = 0{,}0220/0{,}0042 \approx 5{,}24$. Нетрудно заметить, что для сдвиговых параметров модели (7) выполняются неравенства вида $b_2 < p_{c2} < b_0$.

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

Список литературы

1. Ziff R. M., Newman M. E. J. Convergence of threshold estimates for two-dimensional percolation // Physical Review E. – 2002. – V. 86, No. 1. – P. 016129. – DOI: 10.1103/PhysRevE.66.016129.
2. Москалев П. В. Перколяционное моделирование пористых структур. – М.: URSS, 2018. – 240 с. – EDN: ZRJSWD.
3. 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. – DOI: 10.1016/j.physa.2020.124657.
4. Москалев П. В., Онищенко Л. С. Об аппроксимации функций мощности перколяционных кластеров на равномерно взвешенных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции. – Воронеж: Научно-исследовательские публикации, 2024. – С. 564–568. – EDN: HVSMWR.
5. Москалев П. В., Мягков А. С. Билогистическая аппроксимация функций мощности перколяционных кластеров на ограниченных неравномерно взвешенных квадратных решетках с (1, 0)-окрестностью // PREPRINTS.RU. – 2024. – DOI: 10.24108/preprints-3113167.
6. Moskalev P. V. SPSL: Site Percolation on Square Lattices. – CRAN: Contributed Packages, 2019. – DOI: 10.32614/CRAN.package.SPSL.
7. Chau J. gslnls: GSL Multi-Start Nonlinear Least-Squares Fitting. – CRAN: Contributed Packages, 2024. – DOI: 10.32614/CRAN.package.gslnls.