

УДК 519.654 : 519.676

АСИММЕТРИЧНАЯ ЛОГИСТИЧЕСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРКОЛЯЦИИ НА ОГРАНИЧЕННЫХ РАВНОМЕРНО ВЗВЕШЕННЫХ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ С (1, 0)-ОКРЕСТНОСТЬЮ

П. В. Москалев, А. С. Мягков

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»

Аннотация. Проводится сравнительный анализ моделей, используемых для аппроксимации частоты перколяционных (стягивающих) кластеров на ограниченных равномерно взвешенных квадратных решётках с (1, 0)-окрестностью. Рассматриваются два подхода: на основе симметричной и асимметричной логистических функций. Параметры моделей оцениваются методом нелинейных наименьших квадратов по эмпирическим данным, полученным для ограниченных решеток с размерами 33, 65 и 129 узлов при стартовом множестве, состоящем из единственного центрального узла решетки. Показано, что асимметричная логистическая функция обеспечивает существенно лучшее качество аппроксимации: остаточная стандартная ошибка снижается, а апостериорная оценка точки перегиба оказывается ближе к известному значению порога перколяции для квадратной решетки и лежит в пределах 0,95-доверительных интервалов. Полученные результаты подтверждают, что учет асимметрии формы переходной кривой позволяет повысить точность и надежность оценок критических параметров в задачах перколяции на ограниченных решетках с локализованным стартовым множеством.

Ключевые слова: порог перколяции, перколяция узлов, квадратная решетка, частота стягивающего кластера, асимметричная логистическая функция.

Введение

С математической точки зрения перколяционные модели описывают возникновение глобальной связности во взвешенных графах, что представляет интерес при исследовании процессов в материаловедении, теории фильтрации или анализе устойчивости коммуникационных сетей. В частности, задача перколяции узлов на равномерно взвешенной двумерной квадратной решетке с (1, 0)-окрестностью (т.е. с единичной окрестностью фон Неймана) служит в теории перколяции типовым тестовым полигоном для изучения особенностей фазовых переходов в случайных средах [1, 2]. К ключевым особенностям подобных моделей относят: а) стохастичность, которая проявляется в зависимости глобальных характеристик модели от закона распределения случайной величины S , определяющей структуру решетки; б) связность, проявляющуюся в корреляции между глобальными характеристиками кластеров и локальными свойствами ε -окрестностей узлов решетки; в) критический характер процесса перколяции, выражающийся в существовании пороговых значений, в окрестности которых малые изменения локальных параметров приводят к скачкообразному изменению эффективных характеристик модели.

Для построения большинства перколяционных моделей требуется знание критического значения – порога перколяции p_c , которое является одной из фундаментальных характеристик используемой решетки. Для задачи узлов на квадратной решетке значение $p_c \approx 0,592746\dots$ в литературе можно встретить численные оценки с точностью от 8 до 12 десятичных знаков [3, 4]. В подобных вычислительных экспериментах оценка p_c по эмпирическим данным часто зависит от адекватного выбора функции, используемой для аппроксимации зависимости

вероятности перколяционного (стягивающего) кластера от доли открытых (достижимых) узлов решетки $w(p)$. Типичной аппроксимацией первого порядка является логистическая функция, предполагающая симметрию фазового перехода. Подобный сценарий возникает при рассмотрении задачи о возникновении кластера, стягивающего решетку от достижимых узлов вдоль нижней границы решетки (стартовое подмножество) до достижимых узлов вдоль ее верхней границы (целевое подмножество). В таком случае стягивающий кластер представляет собой лес деревьев, растущих снизу вверх, и его вероятность хорошо описывается симметричной логистической функцией [2, 5], поскольку процесс заполнения решетки в вертикальном направлении усредняется за счет множества достижимых узлов по горизонтали.

Здесь мы рассматриваем более специфический случай, когда стартовое множество состоит из единственного узла в центре решетки, и нас интересует вероятность того, что кластер, связанный с этим узлом, стянет всю решетку по вертикали (от нижней до верхней ее границы). Это принципиально отличается от классического случая, когда стартовое множество образовано узлами вдоль нижней границы. В нашем случае, когда кластер начинается с одной точки в центре, то процесс перколяции становится сильно асимметричным, поскольку он зависит от совмещения двух случайных событий – связности нижней и верхней границы с центром решетки, что создает дополнительную нелинейность и сдвиг в точке перегиба. Именно этот эффект и является предметом нашего исследования для повышения точности и снижения трудоемкости оценок порога перколяции p_c на решетках конечного размера.

1. Перколяция узлов на равномерно взвешенной квадратной решетке

В соответствии с подходом, изложенным в нашем исследовании [5], в задаче узлов для моделей решеточной перколяции в качестве ключевых параметров рассматриваются размер решетки x и доля достижимых узлов p . Именно эти параметры определяют эффективные характеристики моделей, такие как функция вероятности образования перколяционного (стягивающего) кластера $w(p)$ и порог перколяции p_c . Как было показано в [2, 6], априорные оценки для p_c могут быть получены через квантили функции взвешивающего распределения $F_0(p)$, в то время как апостериорные оценки — с помощью аппроксимаций функции $w(p)$.

В рамках поставленной задачи будем рассматривать модели перколяции узлов на ограниченной квадратной равномерно взвешенной решетке с $(1, 0)$ -окрестностью с размерами $x = 33, 65$ и 129 узлов при долях достижимых узлов p_i , определяемых квантильной функцией логистического распределения:

$$p_i = b_0 + b_1 \ln \left(\frac{q_i}{1 - q_i} \right), \quad (1)$$

где $b = (b_0 = 0,592746; b_1 = 0,050)$ – эмпирические параметры квантильной функции (1); $q_i = 0,025; 0,050; \dots; 0,975$, позволяющей отобразить сетку узлов, равномерную на отрезке $[0; 1]$, в сетку узлов равномерных вдоль логистической кривой с выбранными параметрами b . Для этих моделей будем исследовать статистику образования кластеров, связанных с ее центральным узлом и стягивающих решетку в вертикальном направлении, то есть обладающих вертикальным размером, сопоставимым с размером перколяционной решетки.

Все реализации кластеров на рис. 1 строились нами для квадратной решетки с размерами $x = 33, 65, 129$ узлов с $(1, 0)$ -окрестностью при критических значениях параметра $p \approx p_c$. Стартовое подмножество узлов на рис. 1 формировалось в центре перколяционной решетки (узел $(0, 0)$, отмеченный символом “+”), а целевое подмножество – вдоль ее верхней и нижней границ $X_{0|1} = \{(x_k, y_k) : x_k = -(x-1)/2, 1-(x-1)/2, \dots, (x-1)/2; y_k = 1 \pm (x-1)/2\}$. Светло-серым цветом на рис. 1 обозначены узлы с малым значением $p \rightarrow 0^+$, темно-серым цветом – узлы с

высоким значением $p \rightarrow 1^-$, а белым цветом – узлы кластера, стягивающего решетку по вертикали. Все используемые в работе реализации были построены с помощью функций пакета “SPSL” для системы R [7]: а) “ssi20(x = 33, p = 0.592746, shape = c(1, 1))”; б) “ssi20(x = 65, p = 0.592746, shape = c(1, 1))”; в) “ssi20(x = 129, p = 0.592746, shape = c(1, 1))”.

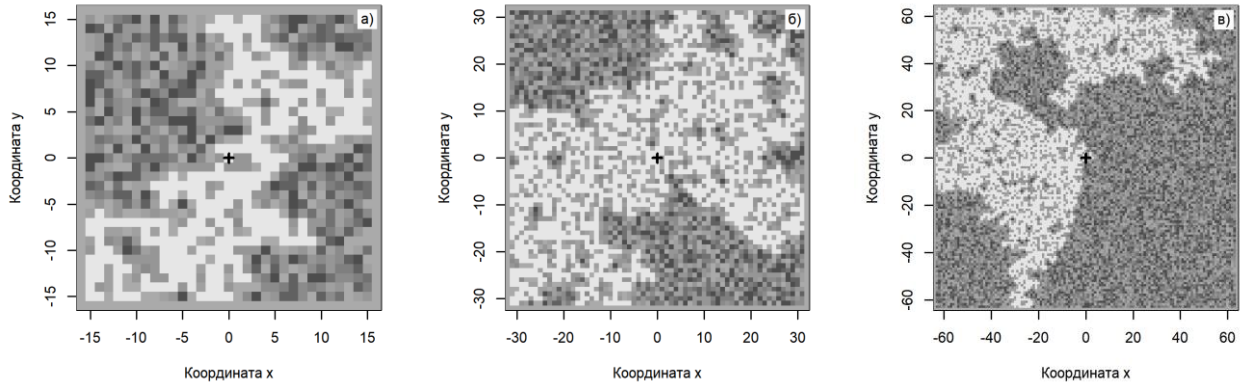


Рис. 1. Реализации стягивающих кластеров при критических значениях параметра $p \approx p_c$ для перколяционных решеток различного размера: а) $x_1 = 33$; б) $x_2 = 65$; в) $x_3 = 129$ узлов

2. Аппроксимации частот стягивающих кластеров на квадратных решетках

В качестве оценок функции вероятности перколяционных кластеров $\{w_i(p_i)\}$ примем усредненные по выборке объемом $N = 800$ реализаций относительные частоты стягивающих кластеров, примеры которых показаны выше на рис. 1.

На рис. 2 (а, б) приведены корреляционные поля статистических оценок зависимости относительных частот стягивающих кластеров w_i для равномерно взвешенных квадратных решеток с линейными размерами $x_j = 33, 65, 129$ узлов с (1, 0)-окрестностью (показанных символами “•”, “■”, “◆”) от долей достижимых узлов p_i в окрестности критической точки $p = p_c \pm \Delta p$, где $p_c \approx 0,592746$; $\Delta p \approx 0,183178$. Вертикальные и горизонтальные штриховые линии на рис. 2 соответствуют характерным для данной задачи оценкам долей достижимых узлов $p \approx p_c$ и значениям относительных частот w в точках перегиба аппроксимирующих функций.

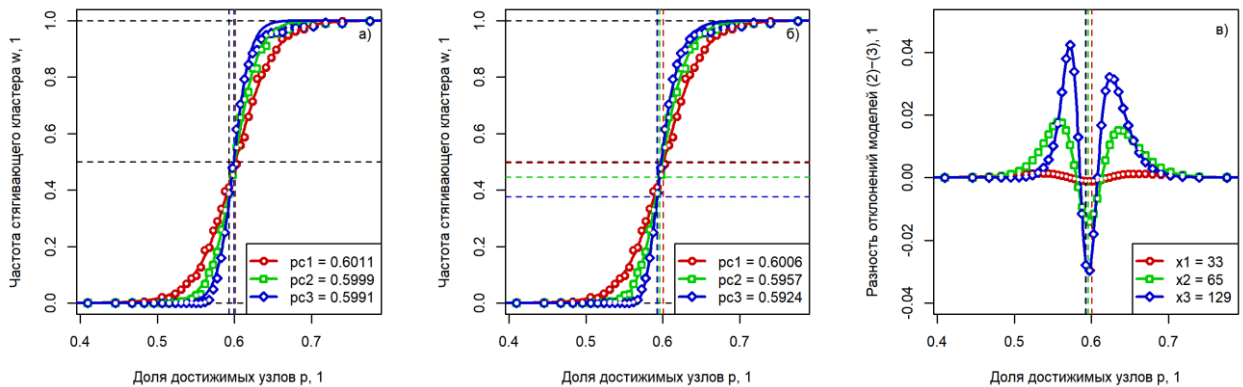


Рис. 2. Аппроксимация частоты стягивающих кластеров при различных размерах решетки: а) модель (2); б) модель (3); в) разность отклонений моделей (2)–(3)

Утолщенные сплошные линии соответствуют логистическим функциям, аппроксимирующим зависимости относительных частот стягивающих кластеров от доли достижимых узлов для решеток заданного размера $w(p|x)$. На рис. 2 (а) частоты стягивающих кластеров в окрестности p_c аппроксимируются симметричной логистической функцией вида:

$$w_i = \frac{1}{1 + \exp[-b_0(p_i - b_1)]} + \varepsilon_i, \quad (2)$$

где $b = (b_0, b_1)$ – вектор параметров, оцениваемых по выборке $\{w_i(p_i|x_j)\}$; ε_i – отклонения модели (2), минимизируемые нелинейным методом наименьших квадратов. На рис. 2 (б) частоты стягивающих кластеров в окрестности p_c аппроксимируются асимметричной логистической функцией вида:

$$w_i = \frac{1}{(1 + \exp[-b_0(p_i - b_1)])^{b_2}} + \varepsilon_i, \quad (3)$$

где $b = (b_0, b_1, b_2)$ – вектор параметров, оцениваемых по выборке $\{w_i(p_i|x_j)\}$; ε_i – отклонения модели (3), минимизируемые нелинейным методом наименьших квадратов. Заметим, что при симметричной аппроксимации в форме (2) точка перегиба функции $w = f(p|b)$ соответствует одному из оцениваемых параметров $p_c = b_1$, а для асимметричной аппроксимации в форме (3) точка перегиба функции $w = f(p|b)$ соответствует их нелинейной комбинации

$$p_c = b_1 + \frac{\ln b_2}{b_0}. \quad (4)$$

На рис. 2 (в) представлены разности отклонений наблюдаемых относительных частот стягивающих кластеров $\{w_i(p_i|x_j)\}$ от прогнозируемых с помощью моделей (2) и (3).

3. Результаты и обсуждение

При построении вышеуказанной аппроксимации в системе R была использована реализация нелинейного метода наименьших квадратов из пакета “*gslnls*” для системы R [7]. Пример результатов, полученных при аппроксимации в формах (2) и (3) для зависимости частоты стягивающих кластеров от доли достижимых узлов $w_i(p_i|x_j)$ для равномерно взвешенной квадратной решетки размером $x_2 = 65$ узлов с $(1, 0)$ -окрестностью приведена в листинге 1.

Листинг 1.

Аппроксимация эмпирической зависимости $\{w_i(p_i|x_j)\}$ в формах (2) и (3)

```
> summary(f2)
Formula: ww[, 2] ~ slog(p, b0, b1)
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 6.402e+01  1.265e+00   50.63  <2e-16 ***
b1 5.999e-01  3.378e-04 1776.10  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.01533 on 37 degrees of freedom
Number of iterations to convergence: 13
Achieved convergence tolerance: 5.898e-17

> confint(f2)
      2.5 %      97.5 %
b0 61.4586258 66.5831531
b1  0.5992613  0.6006301

> summary(f3)
Formula: ww[, 2] ~ alog(p, b0, b1, b2)
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 53.692006   1.913098  28.065  < 2e-16 ***
b1  0.583398   0.004421 131.958  < 2e-16 ***
```

```

b2 1.935547 0.325583 5.945 8.23e-07 ***
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.01194 on 36 degrees of freedom
Number of iterations to convergence: 13
Achieved convergence tolerance: 1.587e-16

> confint(f3)
      2.5 %      97.5 %
b0 49.8120633 57.5719496
b1 0.5744313 0.5923641
b2 1.2752352 2.5958596
    
```

Анализ полученных результатов показывает, что асимметричная логистическая функция (модель (3)) обеспечивает существенно более точную аппроксимацию эмпирической зависимости частоты стягивающих кластеров от доли достижимых узлов $w(p|x)$ в условиях, когда стартовое множество состоит из единственного узла в центре решетки. Это подтверждается как статистическими критериями качества аппроксимации, так и вероятностной интерпретацией перколяционного процесса.

Для симметричной модели (2) остаточное стандартное отклонение составляет 0,01533, в то время как для асимметричной модели (3) — 0,01194. Это свидетельствует о том, что модель (3) объясняет большую долю дисперсии эмпирических данных и лучше соответствует их нелинейной структуре.

Асимметрия кривой $w = f(p|x)$ в данном сценарии обусловлена тем, что формирование стягивающего кластера требует одновременной связности кластера вверх и вниз от центрального узла. Такой процесс в статистическом смысле не является симметричным относительно вертикальной оси решетки, так как вероятность достижения обеих границ одновременно пропорциональна квадрату вероятности связности в одном направлении, что смещает точку перегиба к меньшим значениям p по сравнению с симметричным случаем. Именно это и позволяет модели (3) с параметром степени $b_2 \approx 1,94$ (см. листинг 1) более адекватно отражать эмпирическую форму кривой.

В модели (2) точка перегиба совпадает с параметром $b_1 = 0,5999$, что близко, но систематически завышено относительно известного значения $p_c \approx 0,592746$. В то же время, в модели (3) апостериорная оценка точки перегиба в соответствии с (4) дает величину $p_c^* \approx 0,5957$, которое ближе к известному значению p_c благодаря учету асимметрии, а 0,95-доверительный интервал для точки перегиба включает значение p_c , чего не наблюдается в модели (2).

Разность отклонений между моделями (2) и (3) показывает, что симметричная модель (2) систематически переоценивает частоты как при $p < p_c$, так и при $p > p_c$, в то время как асимметричная модель (3) компенсирует эти эффекты, что свидетельствует о большей ее адекватности механизму фазового перехода в рассматриваемом случае.

4. Заключение

Представленные результаты на взгляд авторов наглядно демонстрируют, что применение асимметричных логистических функций позволяет достичь существенно более высокой точности аппроксимации эмпирической зависимости частоты стягивающих кластеров от доли достижимых узлов на ограниченных квадратных решетках, особенно в случаях, где стартовое множество состоит из единственного узла в центре решетки. С теоретической точки зрения интерес вызывает исследование природы возникновения асимметрии в зависимости частоты

стягивающих кластеров от доли достижимых узлов. Полученные результаты указывают на то, что асимметрия обусловлена комбинаторной сложностью двунаправленного роста кластера и усиливается с уменьшением размера решетки, что требует дальнейшего изучения в рамках теории конечномерных эффектов в задачах перколяции. С практической точки зрения перспективными направлениями исследований являются: а) анализ зависимости параметров асимметричной логистической функции от линейного размера решетки для уточнения оценок порога перколяции; б) обобщение предложенного подхода на кубические и неравномерно взвешенные решетки.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание в области научной деятельности FSFS-2024-0007).

Литература

1. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю. Ю. Тарасевич. – Москва: URSS, 2002. – 112 с. – URL: <https://elibrary.ru/jkmburu> (дата обращения: 09.11.2025).
2. Москалев П. В. Перколяционное моделирование пористых структур / П. В. Москалев. – Москва: URSS, 2018. – 240 с. – URL: <https://elibrary.ru/zrjswd> (дата обращения: 09.11.2025).
3. Newman M. E. J. Efficient Monte Carlo algorithm and high-precision results for percolation / M. E. J. Newman, R. M. Ziff // Physical Review Letters. – 2000. – V. 85, No. 19. – P. 4104–4107. – URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.4104> (accessed: 09.11.2025).
4. Newman M. Networks [2nd edn.] / M. Newman. – Oxford: Oxford Academic, 2018. – URL: <https://doi.org/10.1093/oso/9780198805090.001.0001> (accessed: 09.11.2025).
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://doi.org/10.20537/2076-7633-2014-6-3-405-414> (дата обращения: 09.11.2025).
6. 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> (accessed: 09.11.2025).
7. Moskalev P. V. SPSL: Site Percolation on Square Lattices. – R package version 0.1.9. – URL: <https://doi.org/10.32614/CRAN.package.SPSL> (accessed: 09.11.2025).
8. Chau J. gslnls: GSL Nonlinear Least-Squares Fitting. – R package version 1.1.2. – URL: <https://doi.org/10.32614/CRAN.package.gslnls> (accessed: 09.11.2025).

Информация об авторах

Москалев Павел Валентинович – д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры прикладной математики Московского государственного технологического университета «СТАНКИН». E-mail: moskaleff@mail.ru.

Мягков Александр Сергеевич – старший преподаватель кафедры прикладной математики Московского государственного технологического университета «СТАНКИН». E-mail: almyagkov99@yandex.ru.