

О связи вероятностей пересечения и принадлежности в моделях перколяции узлов на квадратных решетках

Москалев П.В., Мягков А.С., Москаленко Е.И.

ФГАОУ ВО «Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»

Аннотация. Исследуется взаимосвязь вероятностей пересечения и принадлежности в моделях перколяции узлов на конечных равномерно взвешенных квадратных решетках. Предложена обобщенная параметрическая модель аппроксимации частот стягивающего кластера в зависимости от мощности целевого подмножества узлов. Показано, что при увеличении размера решетки параметр сдвига сходится к теоретическому значению порога перколяции, а для граничных значений мощности целевого подмножества предложенная модель сходится к конечно-размерным аппроксимациям исследуемых вероятностей.

Ключевые слова: перколяция узлов, квадратная решетка, перколяционный кластер, вероятность пересечения, вероятность принадлежности, библиотека SPSL, система R.

1. Введение

Теория решеточной перколяции представляет собой эффективный математический аппарат для описания фазовых переходов в неупорядоченных средах, процессов проводимости в пористых материалах и формирования связанных структур в случайных графах [1, 2]. Ключевыми макроскопическими характеристиками таких моделей для неограниченных решеток выступают функции $\Pi_{\infty}(p)$ — вероятности образования перколяционного кластера (вероятности пересечения) и $P_{\infty}(p)$ — вероятности принадлежности случайно выбранного узла к перколяционному кластеру (мощности перколяционного кластера), где параметр p — это относительная доля (вероятность) достижимых узлов решетки, формирующих связанные подмножества называемые кластерами [3, 4].

В термодинамическом пределе при $L \rightarrow \infty$ эти характеристики демонстрируют сингулярное поведение в окрестности порога перколяции $p \approx p_c$, однако при численном моделировании систем конечного размера $L < \infty$ возникает необходимость в использовании скейлинговых аппроксимаций. В классических работах оценки $\Pi_L(p)$ и $P_L(p)$ получаются независимо, что ограничивает возможность построения моделей, описывающих топологию стягивающего кластера на разных масштабах [5, 6].

Целью исследования является обоснование и анализ регрессионной модели, устанавливающей взаимосвязь между конечно-размерными аппроксимациями вероятности образования и принадлежности узла к перколяционному кластеру за счет введения целевого подмножества варьируемой мощности.

2. Постановка задачи перколяции

Рассматривается двумерная квадратная решетка размера $L \times L$. В рамках задачи перколяции узлов каждый узел решетки взвешивается равномерно распределенной случайной величиной U : узел считается достижимым, если его вес удовлетворяет условию $u_i < p$, где p — относительная доля достижимых узлов решетки. В типичной постановке вероятность пересечения $\Pi_L(p)$ соответствует вероятности существования хотя бы одного кластера, стягивающего две противоположные границы решетки. Мощность такого кластера $P_L(p)$ соответствует вероятности того, что случайно выбранный достижимый узел решетки принадлежит стягивающему кластеру.

В термодинамическом пределе, то есть на бесконечной решетке при $L \rightarrow \infty$, вероятность протекания, соответствующая возникновению стягивающего решетку бесконечного кластера $\Pi_\infty(p)$, в критической точке при $p \rightarrow p_c$ претерпевает единичный скачок, то есть поведение такой системы можно описать с помощью функции Хевисайда

$$\Pi_\infty(p) = \Theta(p - p_c) = \begin{cases} 0, & p < p_c; \\ 1, & p \geq p_c. \end{cases} \quad (1)$$

При переходе к вычислительному моделированию физических систем на решетках конечного размера $L < \infty$ из-за влияния стохастических флуктуаций этот разрыв размывается. Согласно теории конечно-размерного скейлинга, поведение вероятности перколяции в окрестности критической точки $p \rightarrow p_c$ определяется некоторой масштабирующей функцией [5]

$$\Pi_L(p) = \Phi(L^{1/\nu}(p - p_c)), \quad (2)$$

где ν — критический индекс корреляционной длины, в двумерном случае равный $\nu = \frac{4}{3}$. С учетом изотропности и симметрии квадратных решеток в качестве простейшей конечно-размерной аппроксимации функции Хевисайда обычно используется логистическая функция вида

$$\Pi_L(p|\mathbf{b}) = \left(1 + \exp\left(-\frac{p-b_0}{b_1}\right)\right)^{-1}, \quad (3)$$

где $\mathbf{b} = (b_0, b_1)$ — вектор параметров, сдвиговой параметр которого b_0 асимптотически сходится к порогу перколяции $b_0 \rightarrow p_c$ при $L \rightarrow \infty$, а масштабный параметр b_1 — задает эффективную ширину переходной зоны $b_1 \propto L^{-1/\nu}$.

В соответствии с нашей гипотезой [7] для мощности перколяционного кластера на бесконечной перколяционной решетке, взвешенной равномерно распределенной случайной величиной $U \sim \mathcal{U}[0, 1]$ справедливо предельное соотношение

$$P_\infty(p) = F_U(p) \Theta(p - p_c), \quad (4)$$

где $F_U(p)$ — функция распределения случайной величины U . Тогда по аналогии с переходом от (1) к (3) для перколяционной решетки конечного размера $L < \infty$ можно записать

$$P_L(p|\mathbf{b}) = F_U(p) \Pi_L(p|\mathbf{b}). \quad (5)$$

Для проверки гипотезы о взаимосвязи характеристик (3) и (5) ставится вычислительный эксперимент со следующей модификацией граничных условий. Фиксируется стартовое подмножество достижимых узлов вдоль горизонтальной (нижней) границы квадратной решетки $S = \left\{(i, j) \mid -\frac{L-1}{2} \leq i \leq \frac{L-1}{2}; j = -\frac{L-1}{2}; u_{i,j} < p\right\}$. На противоположной (верхней) границе решетки задается целевое подмножество узлов $T = \left\{(i, j) \mid -r \leq i \leq r; j = \frac{L-1}{2}\right\}$, мощность которого $|T| = 2r + 1$ параметризуется неотрицательным целочисленным радиусом $r = 0, 1, \dots, \frac{L-1}{2}$. В результате, оценка частоты стягивающего кластера становится функцией не только доли достижимых узлов решетки, но и мощности целевого подмножества.

Примеры возможного расположения стартового S и целевых T подмножеств узлов на квадратной решетке размером 31×31 узел показаны на рис. 1. Темно-коричневым цветом вдоль нижней границы решетки показано возможное расположение узлов стартовых подмножеств $S = \{(i, j) \mid i = -15, -14, \dots, 15; j = -15\}$. Единственный темно-коричневый узел в центре верхней границы на рис. 1 слева соответствует целевому подмножеству нулевого радиуса $T_0 = \{(i, j) \mid i = 0; j = 15\}$, а темно-коричневым цветом вдоль верхней границы решетки на

рис. 1 справа показано возможное расположение узлов целевого подмножества при максимальном значении радиуса $T_{15} = \{(i, j) | i = -15, -14, \dots, 15; j = 15\}$.

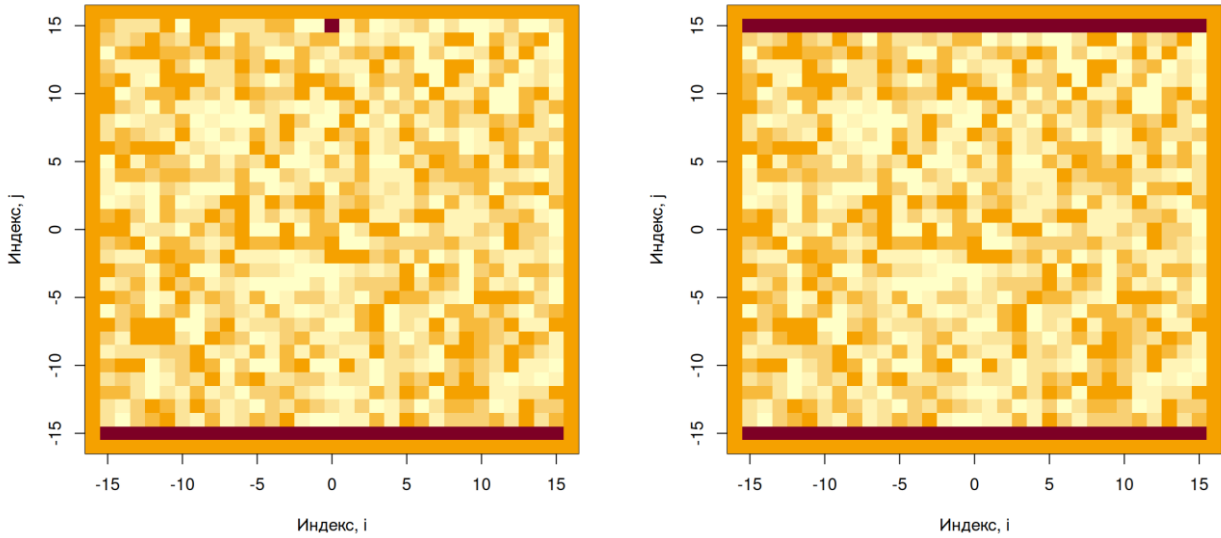


Рис. 1. Примеры расположения стартового S и целевых T_0 и T_{15} подмножеств при предельных значениях радиуса $r = 0, 15$ узлов на квадратной решетке размером $L = 31$ узел

3. Выбор модели для аппроксимации

Для аппроксимации сечений выборки эмпирических частот стягивающих кластеров $\{w_{i,j}(p_i | r_j)\}$ объемом $n = 1000$ реализаций для каждого значения доли достижимых узлов p_i , была предложена нелинейная регрессионная модель

$$w_{i,j}(p_i | \mathbf{b}_j) = \frac{1 - (1 - p_i)^{b_{j,2}}}{1 + \exp\left(-\frac{p_i - b_{j,0}}{b_{j,1}}\right)} + \varepsilon_{i,j}, \quad (6)$$

где $\mathbf{b} = (b_0, b_1, b_2)$ — вектор оцениваемых параметров; $\varepsilon_{i,j}$ — случайная ошибка нелинейной регрессионной модели. Модели такого типа обычно вводятся из феноменологических соображений, но в данном случае структура регрессионной модели выбрана с учетом возможной теоретико-вероятностной интерпретации ее параметров. В частности:

1. По аналогии с (3) знаменатель вида $1 + \exp\left(-\frac{p - b_0}{b_1}\right)$ представляет собой логистическую функцию, используемую для замены ступенчатой функции Хевисайда в задачах перколяции на конечных решетках. Сдвиговой параметр b_0 характеризует абсциссу точки перегиба и с ростом размера решетки $L \rightarrow \infty$ асимптотически сходится к известному значению порога перколяции в задаче узлов на квадратной решетке $b_0 \rightarrow p_c$. Масштабный параметр b_1 характеризует ширину переходной зоны логистической функции, обратно пропорционален размеру решетки $b_1 \propto L^{-1/\nu}$ и связан с критическим индексом корреляционной длины, который в двумерном случае равен $\nu = \frac{4}{3}$.
2. Числитель вида $1 - (1 - p)^{b_2}$ отражает влияние доли достижимых узлов решетки, а показатель b_2 выступает в роли эффективного числа степеней свободы моделируемой системы, определяемого мощностью целевого подмножества узлов $b_2 = |T|$.

Оценка вектора параметров \mathbf{b} осуществлялась нелинейным методом наименьших квадратов с использованием алгоритма Левенберга-Марквардта, реализованного в библиотеке 'gslnls' для системы R [8].

4. Анализ результатов вычислительного эксперимента

Вычислительные эксперименты проводилось для равномерно взвешенных квадратных решеток с (1,0)-окрестностью, что эквивалентно стандартной задаче перколяции узлов с порогом протекания $p_c \approx 0.592746 \dots$ Моделирование выполнялось с использованием функции `ssi20` из состава библиотеки `SPSL` для системы R [9].

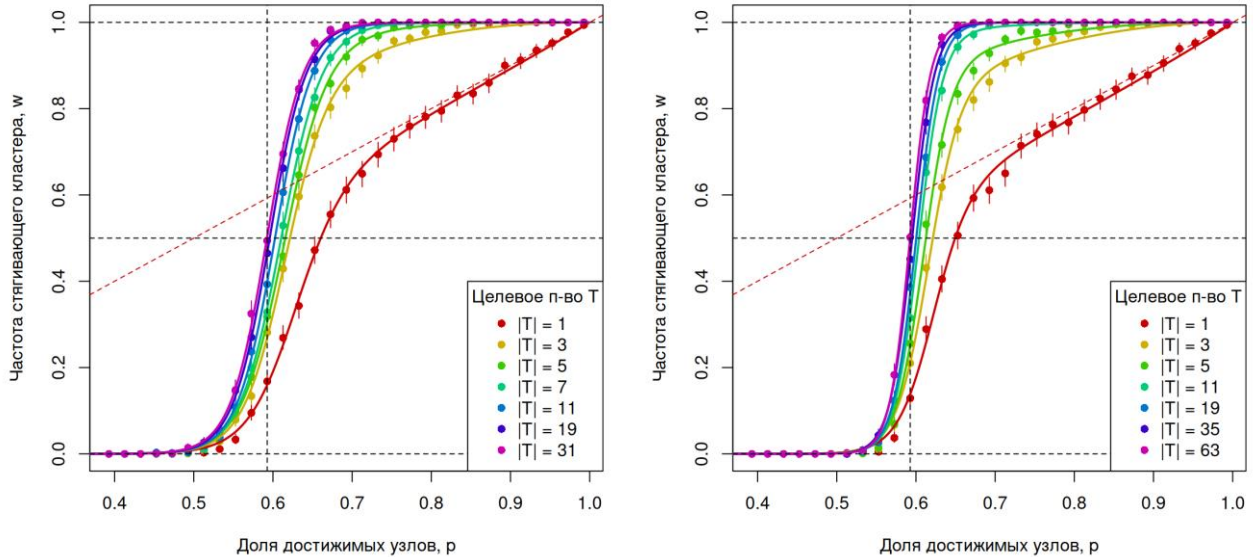


Рис. 2. Примеры корреляционных полей и аппроксимаций (6) для равномерно взвешенных квадратных решеток с линейными размерами $L = 31$ и 63 узла с (1,0)-окрестностью

Примеры результатов, полученных при аппроксимации в форме (6) для эмпирических зависимостей частоты стягивающих кластеров от доли достижимых узлов $\{w_{i,j}(p_i | \mathbf{b}_j)\}$ для равномерно взвешенных квадратных решеток размером $L = 31$ узел при предельных значениях мощности целевого подмножества $|T_0| = 1$ и $|T_{15}| = 31$ узел приведены в листинге 1.

Листинг 1.

Аппроксимация (6) при $|T_0| = 1$ и $|T_{15}| = 31$ узел для решетки размером $L = 31$ узел

```
> print(summary(f1))
Formula: ww[, 1] ~ pp * flog(p = pp, b0 = b0, b1 = b1)

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 0.622652  0.001355  459.6  <2e-16 ***
b1 0.031593  0.001188   26.6  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.01363 on 29 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 7
Achieved convergence tolerance: 2.446e-06

> print(summary(f31))
Formula: ww[, 7] ~ flog(p = pp, b0 = b0, b1 = b1)
```

```

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 0.5888391 0.0009584 614.37 <2e-16 ***
b1 0.0257130 0.0008439 30.47 <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.01725 on 29 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 7
Achieved convergence tolerance: 3.071e-06

```

Полученные результаты показывают, что модель вида (6) обеспечивает достаточно точную аппроксимацию эмпирической зависимости частоты стягивающих кластеров от доли достижимых узлов в условиях, когда мощность целевого подмножества варьируется от единственного узла в центре верхней границы до всех узлов вдоль верхней границы решетки. Это подтверждается как статистическими критериями качества аппроксимации, так и вероятностной интерпретацией перколяционного процесса.

Для симметричной логистической модели в форме (3) остаточное стандартное отклонение (RSE) не превышает 0.0173, в то время как для модели в форме (5) — не превышает 0.0137. Это свидетельствует о том, что модель в форме (6), из которой как частные случаи вытекают модели (3) и (5) удовлетворительно объясняет большую часть наблюдаемой дисперсии эмпирических данных и вполне соответствует их нелинейной структуре.

5. Основные выводы

Анализ показанных на рис. 2 корреляционных полей и аппроксимаций (6) для решеток с линейными размерами $L = 31$ и 63 узла позволяет выделить следующие закономерности.

1. При максимальном радиусе целевого подмножества $r = \frac{L-1}{2}$, перекрывающего всю границу решетки в направлении протекания, функция аппроксимации (6) сходится к логистической аппроксимации вероятности возникновения стягивающего кластера (3), а с ростом размера решетки — к функции Хевисайда, смещенной к порогу перколяции $\Theta(p - p_c)$.
2. При минимальном радиусе целевого подмножества $r = 0$, функция аппроксимации (6) сходится к конечно-размерной аппроксимации вероятности принадлежности произвольного узла к стягивающему кластеру. В силу трансляционной инвариантности и изотропности перколяционной решетки, эта метрика дает конечно-размерную оценку мощности перколяционного кластера (5), а с ростом размера решетки — предельную функцию мощности (4).
3. Сдвиговой параметр b_0 модели (6) сходится к известному значению порога перколяции узлов на квадратной решетке $b_0 \rightarrow p_c$. С ростом размера решетки скорость сходимости увеличивается, а радиус ε -окрестности критической точки p_c уменьшается.
4. Масштабный параметр b_1 модели (6) характеризует ширину переходной зоны логистической функции и обратно пропорционален размеру решетки $b_1 \propto L^{-1/\nu}$ с учетом критического индекса корреляционной длины, в двумерном случае равного $\nu = \frac{4}{3}$.
5. Степенной показатель b_2 модели (6) выступает в роли эффективного числа степеней свободы, определяемого мощностью целевого подмножества узлов $b_2 \approx |T_r|$.

Соотношение (6) демонстрирует высокую эффективность для универсальной аппроксимации макроскопических и микроскопических характеристик моделей решеточной перколяции. Введение целевого подмножества T_r варьируемой мощности позволяет рассматривать

функции $\Pi_L(p)$ и $P_L(p)$ в формах (3) и (5) как сечения единой функции вероятности $P_L(p|\mathbf{b})$ при различных векторах параметров \mathbf{b} .

Структура модели вида (5) статистически достоверно отражает характер этой взаимосвязи, что подтверждается сходимостью параметра b_0 к теоретическому значению порога перколяции $b_0 \rightarrow p_c$.

Полученные результаты открывают перспективы для распространения данного подхода на задачи перколяции на неравномерно взвешенных двух- и трехмерных решетках, где поиск аналитических или высокоточных численных решений может быть существенно затруднен.

Благодарности

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

Список литературы

1. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. — London: Taylor & Francis, 2003. — 192 p. — ISBN 978-1-1357-4783-1.
2. Kirkpatrick S. Percolation and conduction // Reviews of Modern Physics. — 1973. — Vol. 45, No. 4. — P. 574–588. — DOI: 10.1103/RevModPhys.45.574.
3. Essam J.W. Percolation theory // Reports on Progress in Physics. — 1980. — Vol. 43, No. 7. — P. 833–912. — DOI: 10.1088/0034-4885/43/7/001.
4. Grimmett G. Percolation. — Berlin: Springer-Verlag, 1999. — 444 p. — ISBN 978-3-5406-4902-1.
5. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: URSS, 2026. — 184 с. — ISBN 978-5-0023-7299-7.
6. Москалев П. В. Перколяционное моделирование пористых структур. — М.: URSS, 2018. — 240 с. — ISBN 978-5-9710-4963-0.
7. 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. — Vol. 553. — P. 124657. — DOI: 10.1016/j.physa.2020.124657.
8. Chau J. gslnls: GSL nonlinear least-squares fitting. — CRAN, 2025. — R package version 1.4.1. — DOI: 10.32614/CRAN.package.gslnls.
9. Moskalev P. V. SPSL: Site percolation on square lattices. — CRAN, 2019. — R package version 0.1.9. — DOI: 10.32614/CRAN.package.SPSL.