Anderson 局部化实验报告 6（补充）

sis-flag

2020 年 9 月 30 日

聚集到边界的程度

研究特征值问题，定义在 $[0,1]^d$ 上。

$$\begin{aligned} -\Delta u + KVu = \lambda u \qquad & \mathbf{x} \in \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n} + hu = 0 \qquad & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned}$$

研究 $V(x)$ 为 Bernoulli 分布的情况。**它以概率 p 取值为 0，概率 $q = 1 - p$ 取值为 1。**

一维情况下，对于某个特征函数 $u(x)$，定义它聚集到边界的“程度”为

$$Pb = \frac{\max\{|u(0)|, |u(1)|\}}{\max_{x\in\Omega} |u(x)|}$$

二维情况下，定义它 localize 到边界的“程度”为

$$Pe = \frac{\max_{x\in\partial\Omega} |u(x)|}{\max_{x\in\Omega} |u(x)|}$$

同样可以定义 localize 到角落的“程度”为

$$Pc = \frac{\max\{|u(0,0)|, |u(0,1)|, |u(1,1)|, |u(1,0)|\}}{\max_{x\in\Omega} |u(x)|}$$

在 Dirichlet 边界下，这些都是 0。在导数边界条件下，随着 $V(x)$ 随机生成，这些量就是一些和 K, p, h 有关的随机变量。取值在 0 到 1 之间。下面研究这个随机变量的分布随参数的变化。

这里**只研究了最小特征值对应的特征函数**，其它较小特征值的规律和它是一样的。

理论推导

根据之前的推断，一维的 Neumann 边界条件下，K 很大的时候，特征函数聚集与边界的概率等于“边界上一段取值为 0 的长度的 2 倍，大于内部所有取值为 0 段的长度”这个事件的概率。

假设已经观察到两段取值为 1 和 0，设后面取值为 0 对应的段数为 X，X 是一个随机变量。它取值为 n 的概率等于“在后面观察到 $n-1$ 段为 0”的概率乘以“在 n 处观察到 1”的概率。

由于区间总数有限，X 实际上应该服从一个“截断的几何分布”，在 N 很大的时候，可以用几何分布近似它

$$\mathbb{P}(X=n)=p^{n-1}q$$

均值 $E(X)=1/q$。而且

$$\mathbb{P}(X<n)=1-p^{n-1}$$

同理，已经观察到两段取值为 0 和 1，设后面取值为 1 对应的段数为 Y。Y 也近似服从几何分布

$$\mathbb{P}(Y=n)=q^{n-1}p$$

均值 $E(Y)=1/p$

在整个区间中，一个全为 0 的段和一个全为 1 的段一定交替出现，称为一个“周期”。每个周期的平均长度为 $E(X+Y)=\frac{1}{pq}$。所以整个区间里的平均“周期”数为 Npq，也就是 $2Npq$ 个取值相同的段。

设 $M=Npq$，在平均的意义下，我们可以近似地认为长度为 $X_1,Y_1,\cdots,X_M,Y_M$ 的取值相同的段组成。（这个假设随着 N 增大不会变准确）

这些随机变量 $X_1,Y_1,\cdots,X_M,Y_M$ 相加要等于 N，所以它们之间不是独立的。但是在 N 很大的时候，我们近似认为它们独立。

情况 1　两端取值都为 0，这种情况出现的概率为 p^2。

我们所求的概率为

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{P}(\max\{X_2, X_3, \cdots, X_{M-1}\} < 2\max\{X_1, X_M\}) \\
=&\sum_{m,n=1}^{\infty} \mathbb{P}(\max\{X_2, X_3, \cdots, X_{M-1}\} < 2\max\{m, n\})\mathbb{P}(X_1 = m)\mathbb{P}(X_M = n) \\
=&\sum_{m,n=1}^{\infty} [\mathbb{P}(X_i < 2\max\{m, n\})]^{M-2}\mathbb{P}(X_1 = m)\mathbb{P}(X_M = n) \\
=&\sum_{m,n=1}^{\infty} (1 - p^{2\max\{m,n\}-1})^{M-2} p^{m-1} q p^{n-1} q \\
=&\sum_{k=1}^{\infty} p^{k-2} q^2 \sum_{n=1}^{k-1} (1 - p^{2\max\{k-n,n\}-1})^{M-2}
\end{aligned}
$$

情况 2 左边取值为 0，右边取值为 1，这种情况出现的概率为 pq。

我们所求的概率为

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{P}(\max\{X_2, X_3, \cdots, X_M\} < 2X_1) \\
=&\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(\max\{X_2, X_3, \cdots, X_{M-1}\} < n)\mathbb{P}(X_1 = n) \\
=&\sum_{n=1}^{\infty} [\mathbb{P}(X_i < 2\max\{m, n\})]^{M-1}\mathbb{P}(X_1 = n) \\
=&q\sum_{n=1}^{\infty} (1 - p^{2n-1})^{M-2} p^{n-1}
\end{aligned}
$$

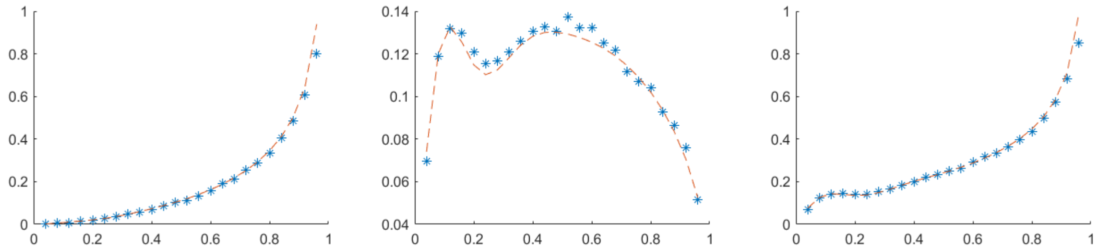
情况 3 左边取值为 1，右边取值为 0，同理。

实验模拟

首先随机生成一些 Bernoulli 分布的数，验证概率计算的准确性。预测和模拟的结果比较一致，如图1。这里 $N = 50$，采样个数为 10000。

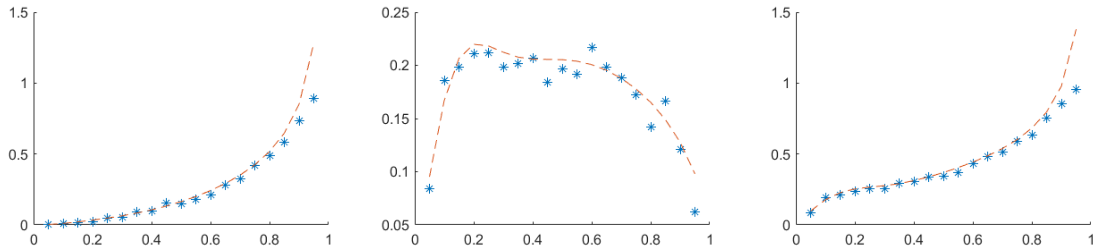
这里需要注意的是，N 的个数不能太小。取 $N = 20$，重复上面的实验，结果如图2。在 p 较大的时候不准确，预测值甚至已经大于 1 了。

根据之前的结果，一维的模型中 h 很小，K 很大时，可以近似为 Neumann 边界条件。此时，要分两种情况讨论。如果 $V(x)$ 恒为 1，特征函数就近似是常数，集中到边界的程度为 1。如果 $V(x)$ 有一段不为 1，这个时候聚集到边界的程度就由上面计算的概率决定。



(a) 情况 1　(b) 情况 2+3　(c) 总体概率

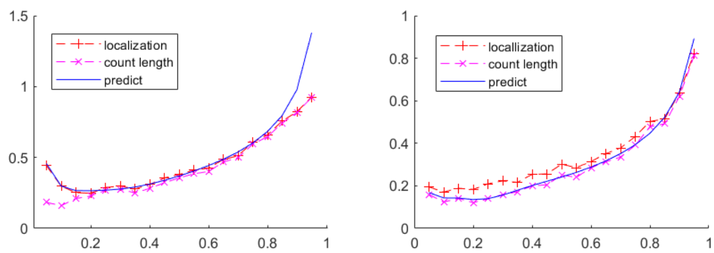
图 1: 实验结果（N=50）



(a) 情况 1　(b) 情况 2+3　(c) 总体概率

图 2: 实验结果（N=20）

全取 1 的概率为 $(1-p)^N$，我们把这一项加到预测值里面，计算聚集到边界的程度。这里参数 $h=0.01$，$K=10^4$。图中红色线为模拟得到的 Pb 的均值，紫色线是在相同的样本下计数得到的“最长一段位于边界”的频率。蓝色线是预测值。



(a) N=20　(b) N=50

图 3: 实验结果

可以看出，在 $N=20$ 时，$V(x)$ 恒为 1 这种情况对应的概率无法忽略，曲线在靠近 0 的位置会翘起来。$N=50$ 时，翘起来的程度会更陡峭，图里画不出来。而且 N 较小，p 靠近 1 的时候预测不准确，这个也和之前的模拟结果吻合。

相变

这里我们考虑一维的情况。势函数取成：$N_2/2$ 个 $1+N_1$ 个 $0+N_2$ 个 $1+N_3$ 个 $0+N_4$ 个 $1+N_5$ 个 $0+$：$N_2/2$ 个 1。其中 $\max\{N_3,N_5\}<N_1<N_3+N_5$（两边差不多长），$N_4<\min\{N_3,N_5\}/2$（被吃掉的部分要足够短），$N_2>N_1+N_3+N_4+N_5$（中间的分隔要足够长）。边界为周期边界。总长度 $N=N_2+N_1+N_2+N_3+N_4+N_5$。

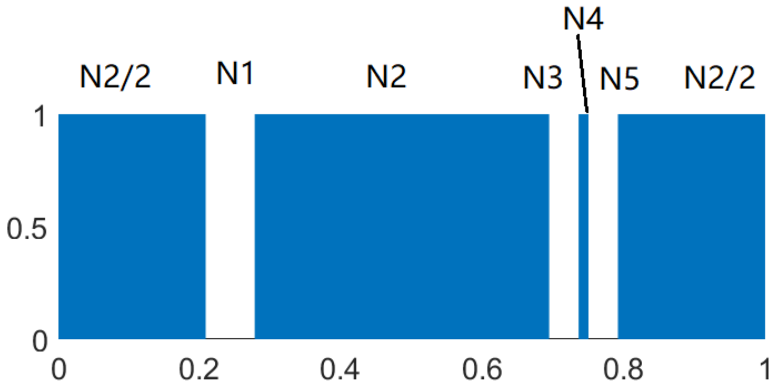


图 4: 示意图

更新了代码，增加了非均匀网格求解的部分。现在的 N 可以是小数。

这里对变量进行归一化，考虑 $N_3=N_5$ 的情况，定义下面分别模拟这些变量和相变点之间的关系。**在之前的报告里我犯了个错误，在拟合某个变量和其它变量之间关系的时候，并没有保证其它变量不变。控制变量没有控制好。**

这里的 4 个变量，一共有 3 个自由度。我们选取要拟合的变量为

$$L_2=\frac{N_2}{N_1+2N_2+N_3+N_4+N_5},\quad L_4=\frac{N_4}{N_3+N_5},\quad L_1=\frac{N_1}{N_3+N_5}$$

在拟合其中一个时，保持其余变量不变。

L_2 和 K_c 之间的关系

N_2 对应的区域，作用就是把两段区域分割开。相变的本质是子区域的特征值哪个更大，整个问题是定义在 $[0,1]$ 上的，因此增加 L_2 相当于压缩两个子区域的区间长度，而区间长度的平方是和特征值成反比的。

根据这些分析，我们猜测关系为

$$\frac{1}{K_c}=A_c(1-2L_2)^2$$

在以下三组参数对模型进行拟合，得到拟合的参数值和 R^2 如下：

$$N = (5, n, 3, 1, 3), \quad n \in [20, 40] \quad A_c = 0.0345, \quad R^2 = 1 - 1.4 \times 10^{-7} \quad \text{图中紫色}$$
$$N = (6, n, 4, 1, 4), \quad n \in [20, 40], \quad A_c = 0.0137, \quad R^2 = 1 - 5.9 \times 10^{-11} \quad \text{图中红色}$$
$$N = (7, n, 5, 1, 5), \quad n \in [20, 40], \quad A_c = 0.0077, \quad R^2 = 1 - 1.1 \times 10^{-9} \quad \text{图中蓝色}$$

由于数据是由模拟生成的，而不是从实际测量中获得，所以几乎没有什么误差，R^2 的值十分接近 1 也是可以接受的。

图5中可以看出，拟合结果很好，这些直线都通过原点。A_c 是一个和 L_2 无关的量，它越大代表相变点越小。

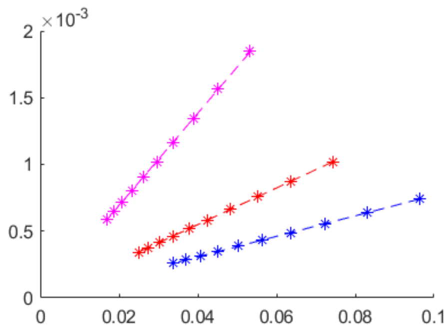


图 5: 拟合结果。横轴：$(1-2L_2)^2$，纵轴：K_c

L_4 和 A_c 之间的关系

进一步分析发现，如果 N_4 等于 0，模型中就不会出现相变。在 N_4 靠近 0 的时候，相变点会不断变大，直到无穷，此时 A_c 趋于 0，所以模型一定要过原点。

我们猜测 L_4 和 A_c 之间的关系为

$$A_c = B_c L_4$$

在 N_4 很大的时候，相变会消失，也就是随着 L_4 的增大，$1/K_c$ 会在某个有限的位置趋于无穷。因此这里得到的关系只有在 L_4 较小的某个范围内才成立。

在以下三组参数对模型进行拟合，得到拟合的参数值和 R^2 如下：

$$N = (5, 2(11+n), 3, n, 3), \quad n \in [0.4, 1.6], \quad B_c = 0.0129, \quad R^2 = 1 - 1.4 \times 10^{-3} \quad \text{图中紫色}$$
$$N = (6, 2(14+n), 4, n, 4), \quad n \in [0.4, 1.8], \quad B_c = 0.0071, \quad R^2 = 1 - 8.6 \times 10^{-4} \quad \text{图中红色}$$
$$N = (7, 2(17+n), 5, n, 5), \quad n \in [0.4, 2.1], \quad B_c = 0.0052, \quad R^2 = 1 - 1.2 \times 10^{-3} \quad \text{图中蓝色}$$

图6中可以看出，拟合结果比较好。

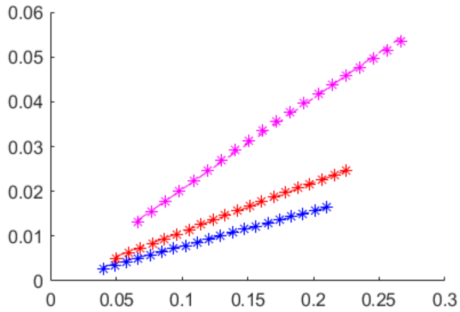


图 6: 拟合结果。横轴：L_4，纵轴：A_c

L_1 和 B_c 之间的关系

进一步分析发现，如果 N_1 等于 $\max\{N_3, N_5\}$，模型中就不会出现相变。在 N_1 趋近于 $\max\{N_3, N_5\}$ 的时候，相变点会不断变大，直到无穷，此时 B_c 趋于 0，所以模型一定要过原点。

同样的，随着 L_1 的增大，$1/K_c$ 会在某个有限的位置趋于无穷。因此这里得到的关系只有在 L_1 较小时成立。

我们猜测在 $0.5 < L_1 < 0.75$ 区间内，它和 K_c 之间的关系为

$$\log(B_c) = D_c(L_1 - 0.5) + E_c$$

这个模型既不过原点，也不在有限点处趋于无穷，但是它是目前区间内和数据拟合效果最好的模型。

在以下三组参数对模型进行拟合，得到拟合的参数值和 R^2 如下：

$N = (n, 2(7+n), 3, 1, 3), \quad n \in [3.5, 4.5], \quad D_c = 7.3358, \quad E_c = -4.0118, \quad R^2 = 1 - 0.0024$ 图中紫色

$N = (n, 2(9+n), 4, 1, 4), \quad n \in [4.5, 6.0], \quad D_c = 7.7312, \quad E_c = -4.1023, \quad R^2 = 1 - 0.006$ 图中红色

$N = (n, 2(11+n), 5, 1, 5), \quad n \in [5.5, 7.5], \quad D_c = 8.0747, \quad E_c = -4.1830, \quad R^2 = 1 - 0.010$ 图中蓝色

图7中可以看出，拟合结果比较好。由于已经消除了前两个变量的影响，这里的线看起来是重合的。

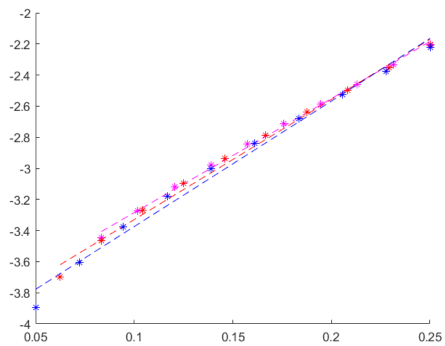


图 7: 拟合结果。横轴：$L_1 - 0.5$，纵轴：$\log(B_c)$

总结

综上所述，得到总的公式为

$$\frac{1}{K_c} = (1 - 2L_2)^2 L_4 e^{D_c(L_1 - 0.5) - E_c}$$

在一定范围内取很多点，验证公式的准确性。各项参数的范围是：

$$\begin{aligned}
&N_3 \in [3, 6], \\
&N_1 \in [N3 + 0.5, 1.5N3], \\
&N_4 \in [0.5, N_3/2], \\
&N_2 \in [2(N_1 + N_3 + N_4 + N_3), 3(N_1 + N_3 + N_4 + N_3)]
\end{aligned}$$

图8中可以看出，拟合结果比较好，预测值和实际值大致相等。（图中取 $D_c = 7.1, E_c = 4$）

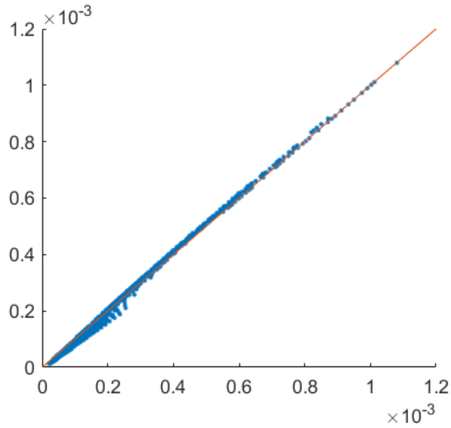


图 8: 拟合结果。横轴：$\frac{1}{K_c}$ 预测值，纵轴：$\frac{1}{K_c}$ 模拟值，红线为直线 $x = y$