Anderson 局部化实验报告 8

sis-flag

2020 年 11 月 25 日

特征值的理论计算

特征值问题

$$-u''(x) + V(x)u(x) = \lambda u(x) \qquad 0 < x < 1$$

周期边界条件，$V(x)$ 是分片常数，取值为 0 或者 K。

在 $V(x) = 0$ 处，方程变为

$$-u''(x) = \lambda u(x)$$

取 $\alpha = \sqrt{\lambda}$，它的通解为

$$u(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x) \qquad u'(x) = A\alpha\cos(\alpha x) - B\alpha\sin(\alpha x)$$

其中 A, B 是待定系数。

对于较小的几个特征值，满足 $\lambda < K$。在 $V(x) = K$ 处，方程变为

$$u''(x) = (K - \lambda)u(x)$$

取 $\beta = \sqrt{K - \lambda}$，它的通解为

$$u(x) = A\exp(\beta x) + B\exp(-\beta x) \qquad u'(x) = A\beta\exp(\beta x) - B\beta\exp(-\beta x)$$

周期边界下，不妨设 $V(0) = 0, V(1) = K$。在不同的区域上，对应不同的待定系数。如图1。

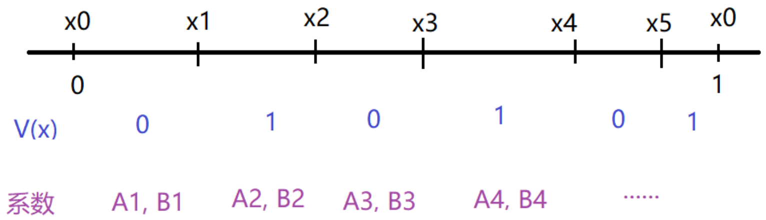


图 1: 区域示意图

我们要求特征函数的函数值连续，一阶导数也连续，加上周期边界条件，就得到了一系列方程约束

$$
\begin{gathered}
A_1 \sin(\alpha x_1) + B_1 \cos(\alpha x_1) = A_2 \exp(\beta x_1) + B_2 \exp(-\beta x_1) \\
A_1 \alpha \cos(\alpha x_1) - B_1 \alpha \sin(\alpha x_1) = A_2 \beta \exp(\beta x_1) - B_2 \beta \exp(-\beta x_1) \\
\cdots
\end{gathered}
$$

记

$$
G_i = \begin{bmatrix} \sin(\alpha x_i) & \cos(\alpha x_i) \\ \alpha \cos(\alpha x_i) & -\alpha \sin(\alpha x_i) \end{bmatrix} \qquad E_i = \begin{bmatrix} \exp(\beta x_i) & \exp(-\beta x_i) \\ \beta \exp(\beta x_i) & -\beta \exp(-\beta x_i) \end{bmatrix}
$$

可以得到

$$
\begin{gathered}
G_1 [A_1, B_1]^T = E_1 [A_2, B_2]^T \\
E_2 [A_2, B_2]^T = G_2 [A_3, B_3]^T \\
\cdots \\
E_N [A_N, B_N]^T = G_0 [A_1, B_1]^T
\end{gathered}
$$

如果 λ 是方程的特征值，就等价于下面这个方程有非零解

$$
G_0^{-1} E_N E_{N-1}^{-1} G_{N-1} \cdots G_2^{-1} E_2 E_1^{-1} G_1 [A_1, B_1]^T = [A_1, B_1]^T
$$

就等价于系数矩阵行列式为零

$$
D(\lambda) = \det(G_0^{-1} E_N E_{N-1}^{-1} G_{N-1} \cdots G_2^{-1} E_2 E_1^{-1} G_1 - I) = 0
$$

虽然这里面都是二阶的矩阵，但是在分段很多的时候，$D(\lambda)$ 的表达式会变得特别复杂。但是可以肯定的是，它是一个定义在 $[0, K]$ 上的光滑函数。

如图2左边。图中蓝色的线是 $D(\lambda)$ 的图像，黄色的线是 $y = 0$，黑色的点是用谱元法计算得到的特征值。（参数 $K = 1100$，$N = (7, 20, 5, 1, 5)$）

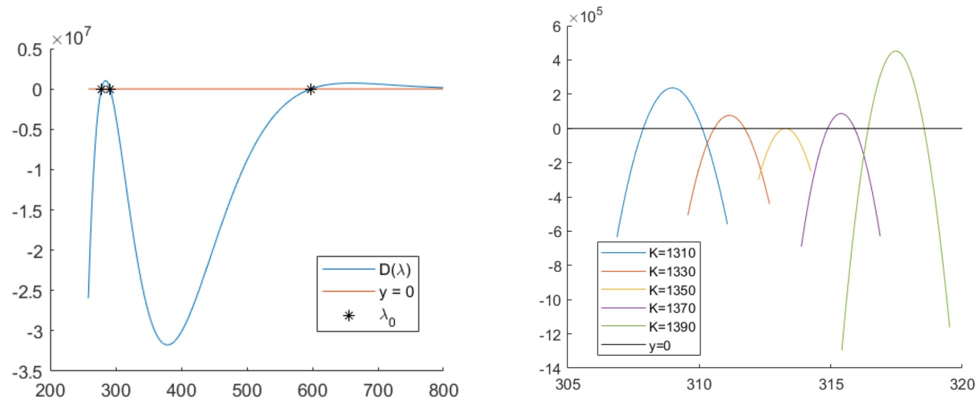


图 2: 函数图像

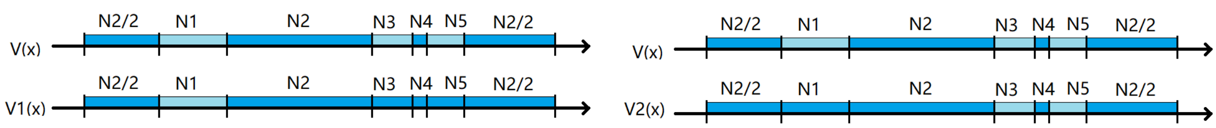
图2右边画出了不同 K 下的 $D(\lambda)$ 图像。根据之前的分析，相变发生的时候，是特征值出现重根的时候，也就是函数 $D(\lambda)$ 的零点是二重零点的时候。之前通过模拟，我们得到 $N=(7,20,5,1,5)$ 情况下，相变点是 $K=1351.22$。这和图中的结果也相符。

这里给出了一种不用模拟系统就能求解得到相变点的方法。

子区域特征值计算

之前我们提到，localize 到左边的特征函数对应一个特征值，localize 到右边的对应一个特征值。它们随 K 增加而增长的变化速率不一样。由于我们关心“最小”特征值对应的特征函数，当一个特征值和另一个相等的时候，“最小”的特征值就从一个变成了另一个，从而发生了相变。下面我们更加深入地研究一下这个问题。

在计算其中一个子区域对应的特征值时，我们把另一个子区域内的 $V(x)$ 取值改成 0，就得到了两个子区域对应的势函数 $V_1(x), V_2(x)$，示意图如图3图中深蓝色是取值为 K 的，浅蓝色是取值为 0 的区域。



(a) V1　　(b) V2

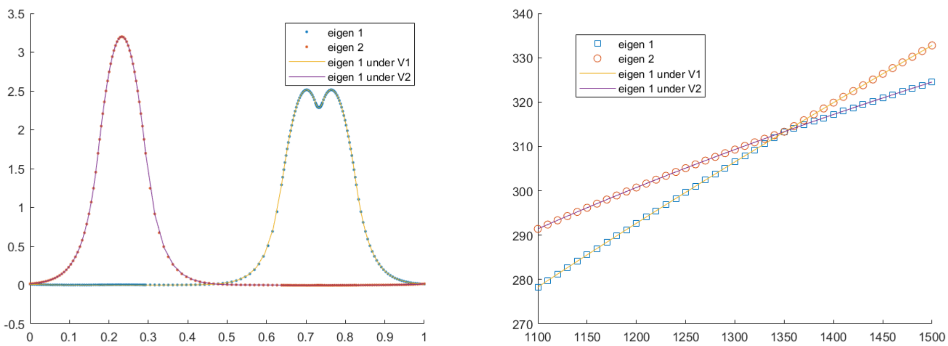
图 3: 势函数示意图

计算两个子区域分别对应的特征值，得到结果如图4。在 $V(x)$ 下的最小和第二小的特征

函数和子区域上的几乎重合。参数 $N = (7, 20, 5, 1, 5)$，第一张图里 $K = 1000$。计算得到的特征值为

$$\lambda_1(V) = 263.3242;\ \lambda_2(V) = 281.1789;\ \lambda_1(V_1) = 263.3247;\ \lambda_1(V_2) = 281.1808;$$

图4(b) 中画出了不同 K 下的原问题特征值和子区域问题特征值。



(a) 特征函数 (b) 特征值

图 4: 模拟结果

这里我们验证了总的特征值可以用两个区域对应的子特征值近似，下面我们试图从理论上求出子区域上的特征值。(这里考虑 $N_3 = N_5$ 的情况)

如图3。由于是周期边界条件，我们可以把一段 0 移动到正中间，而不改变特征值的数值。同时，又根据特征函数的对称性，把整个区间上的周期边界条件问题等价成半个区间上的 Neumann 边界条件问题。经过这些等价，我们终于可以计算出每个区间上特征值的理论表达式了。

N_1 子区域特征值

第一段子区域上，可以看成是在 $[0, 1/2]$ 上，Neumann 边界条件，在 $[0, x_0]$ 上 $V(x)$ 取值为 0，其他部分取值为 K 的情况。其中 $x_0 = L_1/2$。

在 $[0, x_0]$ 上，通解为

$$u(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x) \qquad u'(x) = A\alpha\cos(\alpha x) - B\alpha\sin(\alpha x)$$

在 $[x_0, 1/2]$ 上，通解为

$$u(x) = C\exp(\beta x) + D\exp(-\beta x) \qquad u'(x) = C\beta\exp(\beta x) - D\beta\exp(-\beta x)$$

边界条件和连续性条件表示为

$$\begin{aligned}
u'(0) &= A\alpha = 0 \\
u'(1/2) &= C\beta\exp(\beta/2) - D\beta\exp(-\beta/2) = 0 \\
u(x_0) &= A\sin(\alpha x_0) + B\cos(\alpha x_0) = C\exp(\beta x_0) + D\exp(-\beta x_0) \\
u'(x_0) &= A\alpha\cos(\alpha x_0) - B\alpha\sin(\alpha x_0) = C\beta\exp(\beta x_0) - D\beta\exp(-\beta x_0)
\end{aligned}$$

系数矩阵为

$$\begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta e^{\frac{\beta}{2}} & -\beta e^{-\frac{\beta}{2}} \\ \sin(\alpha x_0) & \cos(\alpha x_0) & -e^{\beta x_0} & -e^{-\beta x_0} \\ \alpha\cos(\alpha x_0) & -\alpha\sin(\alpha x_0) & -\beta e^{\beta x_0} & \beta e^{-\beta x_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

方程有非零解，就是系数矩阵行列式为 0

$$\alpha e^{2\beta x_0}\sin(\alpha x_0) - \beta e^{\beta}\cos(\alpha x_0) + \alpha e^{\beta}\sin(\alpha x_0) + \beta e^{2\beta x_0}\cos(\alpha x_0) = 0$$

化简得到

$$D_1(K,\lambda) = \alpha\tan(\alpha x_0) - \beta\tanh(\beta(\frac{1}{2} - x_0)) = 0$$

N_3 子区域特征值

第二段子区域上，可以看成是在 $[0,1/2]$ 上，Neumann 边界条件，在 $[0,x_1]$ 和 $[x_2,1/2]$ 上 $V(x)$ 取值为 K，其他部分取值为 0 的情况。其中 $x_1 = N_4/2, x_2 = N_4/2 + N_3$

在 $[0,x_1]$ 上，通解为

$$u(x) = A\exp(\beta x) + B\exp(-\beta x) \qquad u'(x) = A\beta\exp(\beta x) - B\beta\exp(-\beta x)$$

在 $[x_1,x_2]$ 上，通解为

$$u(x) = C\sin(\alpha x) + D\cos(\alpha x) \qquad u'(x) = C\alpha\cos(\alpha x) - D\alpha\sin(\alpha x)$$

在 $[x_2,1/2]$ 上，通解为

$$u(x) = E\exp(\beta x) + F\exp(-\beta x) \qquad u'(x) = E\beta\exp(\beta x) - F\beta\exp(-\beta x)$$

边界条件和连续性条件表示为

$$
\begin{aligned}
u'(0) &= A\beta - B\beta = 0 \\
u(x_1) &= A\exp(\beta x_1) + B\exp(-\beta x_1) = C\sin(\alpha x_1) + D\cos(\alpha x_1) \\
u'(x_1) &= A\beta\exp(\beta x_1) - B\beta\exp(-\beta x_1) = C\alpha\cos(\alpha x_1) - D\alpha\sin(\alpha x_1) \\
u(x_2) &= C\sin(\alpha x_2) + D\cos(\alpha x_2) = E\exp(\beta x_2) + F\exp(-\beta x_2) \\
u'(x_2) &= C\alpha\cos(\alpha x_2) - D\alpha\sin(\alpha x_2) = E\beta\exp(\beta x_2) - F\beta\exp(-\beta x_2) \\
u'(1/2) &= E\beta\exp(\beta/2) - F\beta\exp(-\beta/2) = 0
\end{aligned}
$$

系数矩阵为

$$
\begin{bmatrix}
1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
e^{\beta x_1} & e^{-\beta x_1} & -\sin(\alpha x_1) & -\cos(\alpha x_1) & 0 & 0 \\
\beta e^{\beta x_1} & -\beta e^{-\beta x_1} & -\alpha\cos(\alpha x_1) & \alpha\sin(\alpha x_1) & 0 & 0 \\
0 & 0 & \sin(\alpha x_2) & \cos(\alpha x_2) & -e^{\beta x_2} & -e^{-\beta x_2} \\
0 & 0 & \alpha\cos(\alpha x_2) & -\alpha\sin(\alpha x_2) & -\beta e^{\beta x_2} & \beta e^{-\beta x_2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & e^{\frac{\beta}{2}} & -e^{-\frac{\beta}{2}}
\end{bmatrix}
$$

方程有非零解，就是系数矩阵行列式为 0

$$
\begin{aligned}
&\alpha^2 e^{2\beta(x_1+x_2)} + \alpha^2 e^{2\beta(x_1+x_3)} \\
&+\beta^2 e^{2\beta(x_1+x_2)} - \beta^2 e^{2\beta(x_1+x_3)} \\
&+\alpha^2 e^{2\beta x_2} + \alpha^2 e^{2\beta x_3} \\
&-\beta^2 e^{2\beta x_2} + \beta^2 e^{2\beta x_3} \\
&+2\alpha\beta e^{2\beta(x_1+x_3)}\cot(\alpha(x_1-x_2)) - 2\alpha\beta e^{2\beta x_2}\cot(\alpha(x_1-x_2)) = 0
\end{aligned}
$$

化简得到

$$
\begin{aligned}
D_2(K,\lambda) =& (\alpha^2-\beta^2)(e^{2\beta x_2} + e^{2\beta(x_1+x_3)})/(e^{2\beta(x_1+x_3)} - e^{2\beta x_2}) \\
&+(\alpha^2+\beta^2)(e^{2\beta x_3} + e^{2\beta(x_1+x_2)})/(e^{2\beta(x_1+x_3)} - e^{2\beta x_2}) \\
&+2\alpha\beta\cot(\alpha(x_1-x_2)) = 0
\end{aligned}
$$

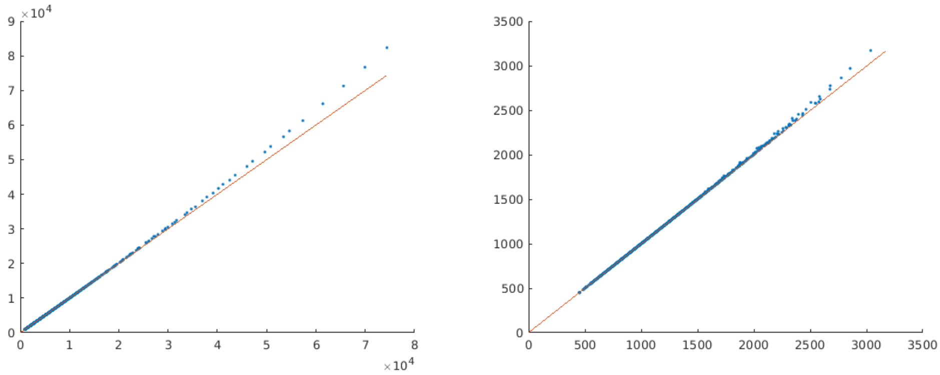
其中 $x_3 = \frac{1}{2}$

发生相变的时候，两个方程的零点相同，所以我们就得到了相变点满足的方程组为

$$
\begin{aligned}
D_1(K,\lambda) = 0 \\
D_2(K,\lambda) = 0
\end{aligned}
$$

方程组的解 K 就是相变点，解 λ 就是相变时的特征值。

图5中展示了通过求解方程组得到的和模拟物理过程得到的结果对比。图中横轴是相变点和相变处特征值的预测值，纵轴是模拟得到的值，红色线是 $x=y$ 直线。可以看出，在相变点和特征值不是特别大的时候，预测的结果都很好。



(a) 相变点　　(b) 特征值

图 5: 模拟结果和预测结果

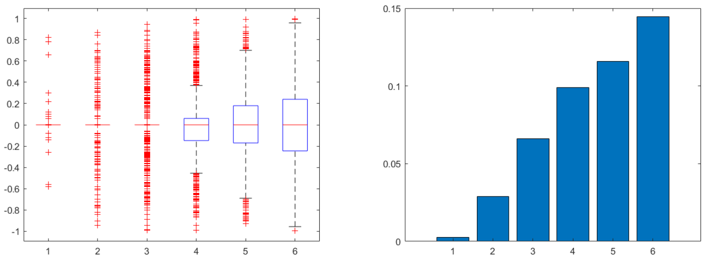
landscape 和特征函数之间的关系

我们猜测，landscape 最高的峰，对应最小特征函数的峰。下面我们分别随机生成势函数，找到 landscape 前几个峰值的位置 $x^{(l)}$，和前几个特征值峰的位置 $x^{(e)}$。计算它们之间的差异。

图中横轴是特征值序号，纵轴展示了 landscape 的峰和特征函数的峰值位置之间的差异。图中参数为 $K=1e6, h=10$，势函数分片数 $N=50$，共采样 1000 次。图6是 Bernoulli 分布 $(p=0.5)$ 的结果，图7中是均匀分布的结果。

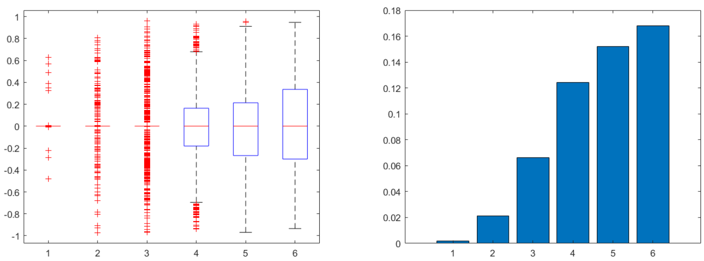
我们同样统计了二维情况下的结果，由于计算量限制，我们计算的是 10×10 的分片，采样 200 次。结果如图8。二维情况下无法比较大小，只能计算均方误差了。

从图中可以看出，编号稍大的特征函数可能误差较大，但是对于最小特征值对应的特征函数，这样的猜想还是很可靠的。



(a) 差异箱线图 $x^{(l)} - x^{(e)}$ (b) 均方误差 $\sum |x^{(l)} - x^{(e)}|^2$

图 6: landscape 的峰和特征函数的峰值位置差异（$P = 0.5$）



(a) 差异箱线图 $x^{(l)} - x^{(e)}$ (b) 均方误差 $\sum |x^{(l)} - x^{(e)}|^2$

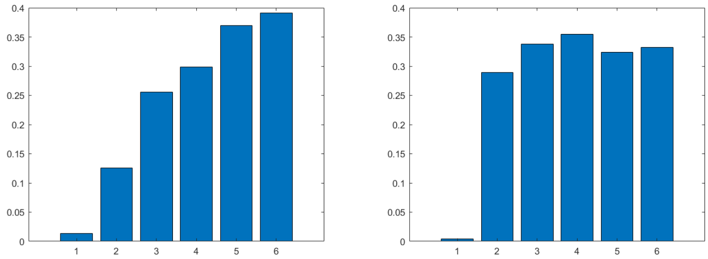
图 7: landscape 的峰和特征函数的峰值位置差异（均匀分布）

两段一样长的概率

这里我们关注一维的情况。如图9，有的时候，最小特征值对应的特征函数有两个峰。根据之前的分析，这种情况会出现在最长的两段连续的 0 相等的时候。图中紫色和黄色的线是最小和第二小的特征函数，蓝色的部分代表 $V(x)$ 在此处取值为 K，否则取值为 0。需要注意的是，在 Dirichlet 边界下，有可能出现图 (b) 中的情况，如果最长的一段位于边界，就不会出现双峰的情况。另一方面，在 Neumann 边界下，边界附近的长度要按二倍计算。

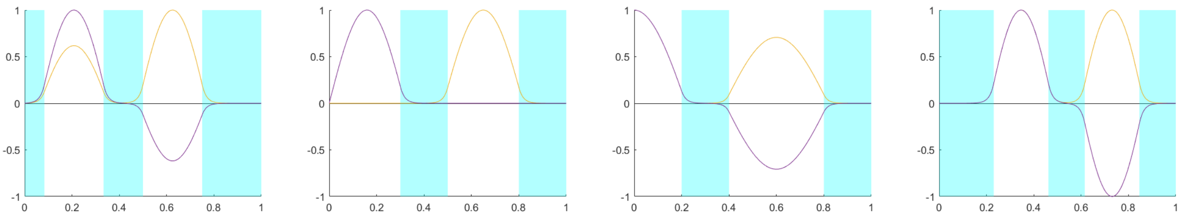
后面又模拟了一些结果，发现**特征值的双峰并不是完全和“两段一样长”这个事件等价，具体原因不明**，也有可能是模拟误差的问题。如图10，图中紫色和黄色的线是最小和第二小的特征函数。

图11中，蓝色线是对“两段一样长”概率的预测值，紫色线是模拟过程中“两段一样长”出现的频率，红色的线是模拟过程中最小特征函数出现多个峰的频率。



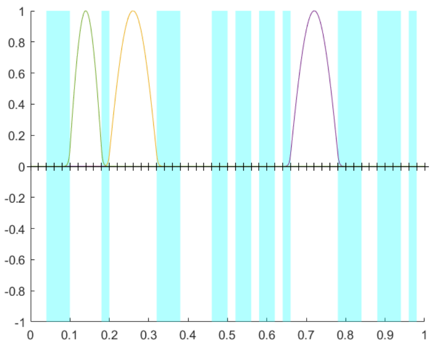
(a) Bernoulli 分布（$p = 0.5$） (b) 均匀分布

图 8: landscape 的峰和特征函数的峰值位置均方误差（二维）



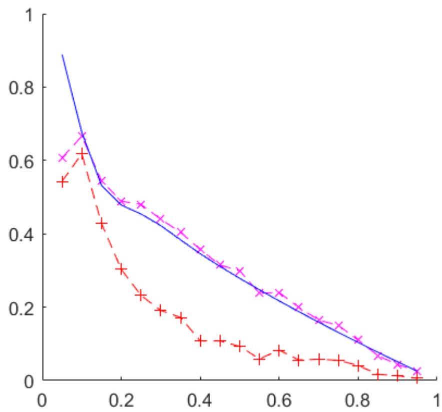
(a) Dirichlet 边界 (b) Dirichlet 边界 (c) Neumann 边界 (d) Neumann 边界

图 9: 特征函数图像



(a) Dirichlet 边界

图 10: 特征函数图像



(a) Dirichlet 边界

图 11: 概率和频率