Anderson 局部化实验报告 2

flag

2020年5月30日

1 探究参数何时最优

1.1 α 的选取

我们先从一维的简单情况开始。一维区间分成 20 段,K=1000,V 是均匀分布的随机数,Neumann 边界条件。选取 x_0 为 0.5 对不同的 α 模拟。如图??

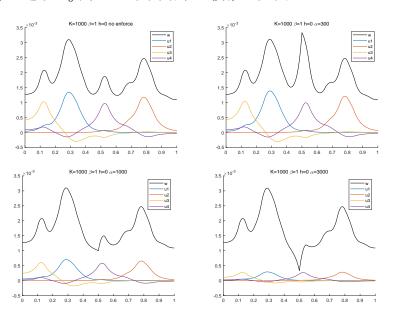


图 1: 一维,不同 alpha 下的表现

可以看到,在 x_0 附近 landscape 会间断。我们希望的情况是下面彩色的线和上面黑色的线比较靠近。可以看出,没有 enforce 的 landscape 是四幅图里最优的。

把四条 landscape 画在一起,发现强制的边界仅仅改变了 x_0 附近的函数值,对更远的地方就没有效果了。在二维情况,这种现象特别特别明显。如图??。图中二维分割成 20×20 的小块, $\alpha = 200$ 其他参数同上。

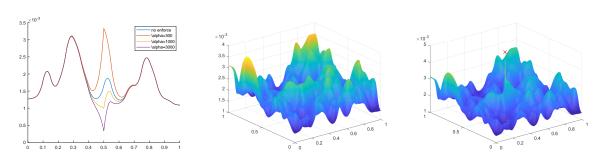
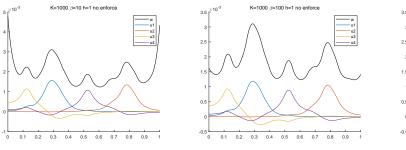


图 2: 左图是一维的情况,中间是 no enforce 的二维曲面,右边是把 (0.5, 0.5) 处强行设成 1/200 的曲面。红叉下面那个特别细的就是 enforce 对它的影响。

综合以上现象,我觉得 α 直接选成 landscape 最大值的倒数就好。

1.2 β 的选取

首先在一维情况下实验, Robin 边界条件, 取 h=1, 其他参数同上。结果如图??



25 25 15 0.5 0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1

图 3: beta 对结果的影响

从图中可以看出, β 不能太小,否则边界会翘起来,也不能太大,否则不等式就不精确了。 之前猜测 β 应该大概取成 Kh,现在看起来并不是这样。

同样, β 的选取仅仅影响 landscape 在边界附近的性质,对内部影响比较小。如图??

对于什么样的参数是"最优",并没有一个确切的有指标刻画的标准。对于 β 具体取什么样的值比较好,现在只能说可以在边界不会翘起来的情况下,可以尽量取得小一点。

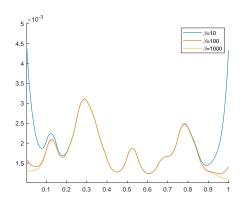


图 4: beta 对结果的影响

1.3 localize 到边界时参数的选取

之前有一个问题是当 localize 的位置在边界时,要如何选取 β 的值,这时的结果会不会有变化。我们用同样的势函数,换不同的 β 模拟。结果如图??。得到的结果和原来差不多。由于在最终的不等式里出现的是 β 和特征值相加,所以 β 选取和特征值在同一数量级的数就差不多。

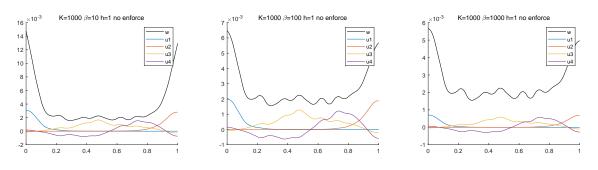


图 5: localize 到边界的 landscape

2 不同边界条件下的比较

在实验中我们发现,边界条件是 Dirichlet 还是导数型的,主要影响 landscape 的边界,对 landscape 的内部影响较小。对 eigenmode 的影响就比较大,因为原来不会聚集到边界的峰有可能聚集到边界了。

还是先看一维的情况,在一个特定的 V 下模拟,这里的 V 故意在边界选取得比较小,能够突出局部化到边界的效果。如图??

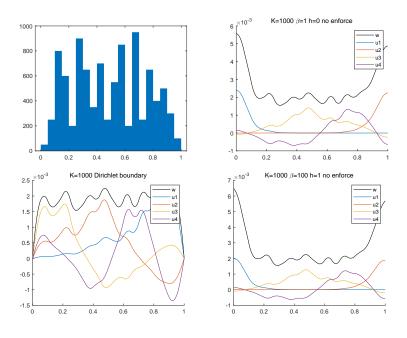


图 6: 左上为 V,剩下三个是不同边界条件下的模拟结果

这三个 eigenmode 很不一样,尤其是 Dirichelt 和 Neumann 边界的,相差很多。但是把它们的 landscape 画在一起,就会发现在内部很相似。图??中比较了不同边界条件下的 landscape。

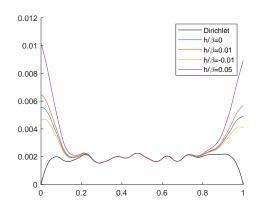


图 7: 不同边界条件下的 landscape

二维的也一样。二维的曲面画在一起不容易看清楚,我们只能画切面图。如图??。landscape 在内部差不多。在 y=0 和 y=1 的时候就不一样了。

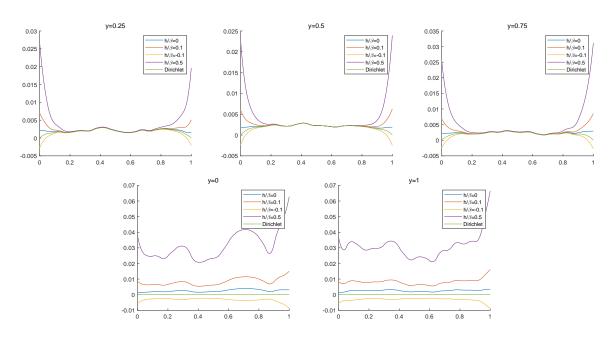


图 8: 二维不同边界条件下的 landscape

3 多算几个特征值

根据测试,现有的代码至少可以计算 50 个以内的最小特征值,更多的说不定也可以。测试过程中,用 50x50 的分块,求解了 50 个特征值,只用了 40 秒就收敛了。这样的表现应该可以达到要求。

我们希望知道不同边界条件下会不会对较大特征值对应的特征函数产生影响。我们还是先看一维的情况。在图??中我们比较了不同边界条件下的特征值。

得到的结论和我们的直觉相反,对前几个特征值,两种边界条件下的结果都一样,但是对后面的特征值,两种边界条件下就表现出了很大差异。注意到这个例子中没有前几个特征值 localize 到边界的情况,我们尝试模拟一下前面提到过的特殊选取,让特征函数出现在边界。如图??

可以看到,除了 eigenmode3,其它的都有很大差异。所以我们的结论还是和前面提到的一样:边界条件只影响边界。所以 localize 到内部的 eigenmode 不会有影响,如果 eigenmode 在边界附近出现了峰,那不同的边界条件就会对它影响很大。

下面我们研究二维的情况,如图??。由于二维的情况大多数都 localize 在边界,所以两种边界条件下的情况完全不一样。

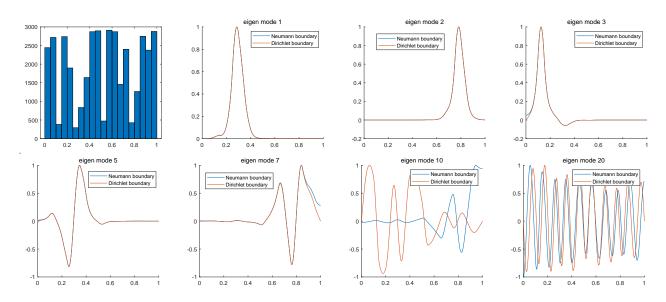


图 9: 不同边界条件下 eignemode 的比较(右上第一张为势函数 V)

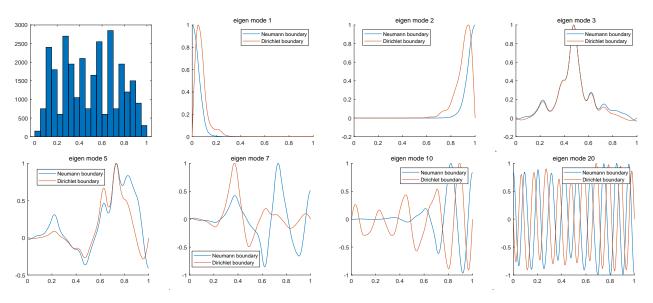


图 10: 不同边界条件下 eignemode 的比较(右上第一张为势函数 V)

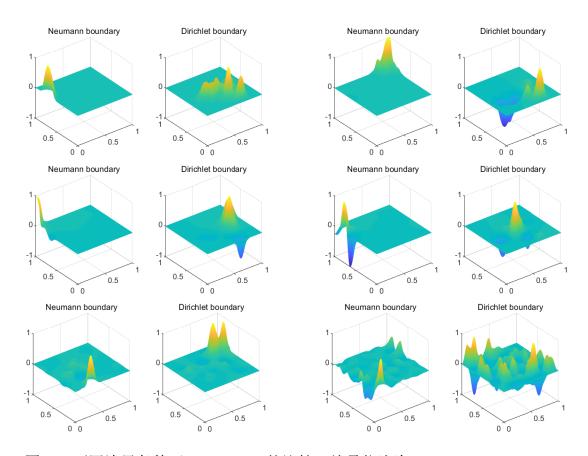


图 11: 不同边界条件下 eignemode 的比较(编号依次为 1, 2, 3, 5, 20, 50)

在这里,一维和二维的例子有很大的区别。在前面的两个例子中,我们同样取 K 为 3000,势函数为 [0, K] 内的均匀分布。画出两种不同边界下的特征值如图??。图中横轴为特征值编号(第几小的特征值),纵轴为特征值的数值。

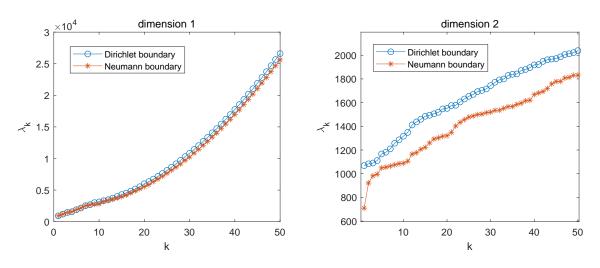


图 12: 不同边界条件下特征值的数值

可以看出,一维情况,两种边界条件下对应排序的特征值相差很小,但是二维的时候就相差很大。((这个也可以验证特征值增长的阶)

4 画出 valley line

valley line 是用 watershed 算法画出的分界线,它可以很好地分割出特征函数的峰。 取 K 为 8000,均匀分布, Neumann 边界。得到的 valley line 如图??。可以看出, valleyline

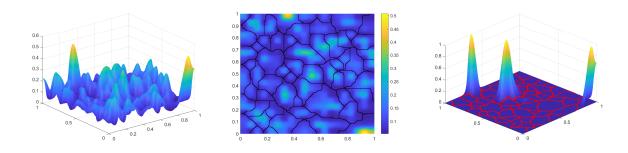


图 13: PNAS 文章中图 2 在 Neumann 边界下的结果

对特征函数的分割很明显。

画出更多的 eigenmode。得到的 valley line 如图??。

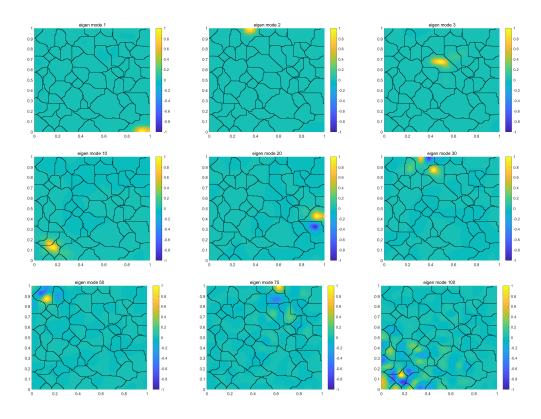


图 14: PNAS 文章中图 3 在 Neumann 边界下的结果

关于 effective valley line,在这个例子里,解 w(x) 的最小值是 0.0530,而即使是最小的特征值,它的倒数 $1/\lambda$ 也是 8.5672e-04。所以,按照 pnas 文章里面的定义,effective valley line **一条也没有**。