

二维 Corridor 半透膜与近起点双 Target 的双峰研究

新报告（接续 grid2d_rect_bimodality）

结论先行

本报告在二维长方形域上新增两条研究线，并且与旧报告的 phase 判据、峰谷图式、分解解释保持一致。

1. **有 corridor、单 target**：将原全反射走廊墙替换为半透膜，分别研究对称膜 ($\kappa_{\uparrow} = \kappa_{\downarrow}$) 与非对称膜 ($\kappa_{\uparrow} \neq \kappa_{\downarrow}$)。
2. **无 corridor、双 target**：将一个 target 放在起点附近，另一个保持远端，研究“近目标快峰 + 远目标慢峰”是否稳定形成双峰。

核心结果：

- 对称半透膜扫描中，clear-double 在超低泄漏区形成连续带（见图 1 与表 1）；随后进入 weak-double 过渡带，再增大渗透率后转为单峰。
- 非对称膜（如 $\kappa_{\uparrow} = 0.002, \kappa_{\downarrow} = 0$ ）可保持 clear-double，并在窗口分类中显著改变 valley/第二峰的组成权重。
- 无 corridor 双 target（近目标放到起点附近）可稳定得到双峰：代表案例 $(b_x, d, \Delta y) = (0.07, 2, 3)$ 的 near/far 质量约为 0.326/0.674、峰位约 (11, 739)；专用 clear-instance (show-case 最优) 为 (0.12, 4, 1)，near/far 质量约 0.350/0.650，且 valley/max 约 0.007。

1 模型与参数

1.1 统一基线

沿用已有二维长方形框架：

$$L_x = 60, \quad q = 0.8, \quad x_s = 7, \quad x_t = 58,$$

一阶邻域随机游走 + 惰性停留；边界为反射边界。单 target corridor 配置使用本轮优化后的锚点： $h = 2, m = 5, \delta_{\text{core}} = 1.00, \delta_{\text{open}} = 0.55, b_x = -0.08$ 。

1.2 半透膜定义

原走廊墙是全反射（穿越概率 0）。本报告改为半透膜：

$$P(\text{穿越膜边}) = \kappa, \quad P(\text{被反射}) = 1 - \kappa.$$

对称膜： $\kappa_{\uparrow} = \kappa_{\downarrow} = \kappa$ ；非对称膜： $\kappa_{\uparrow} \neq \kappa_{\downarrow}$ 。

1.3 分类框架

保持“峰-谷-峰”窗口分析，并加入新的 4 类标签：

- L : 是否发生膜泄漏（是否穿过膜边）；
- R : 是否发生 committor 承诺后回撤（recross）。

故有四类：LOR0, LOR1, L1R0, L1R1。

2 结果 A: corridor + 单 target + 半透膜

2.1 对称膜扫描

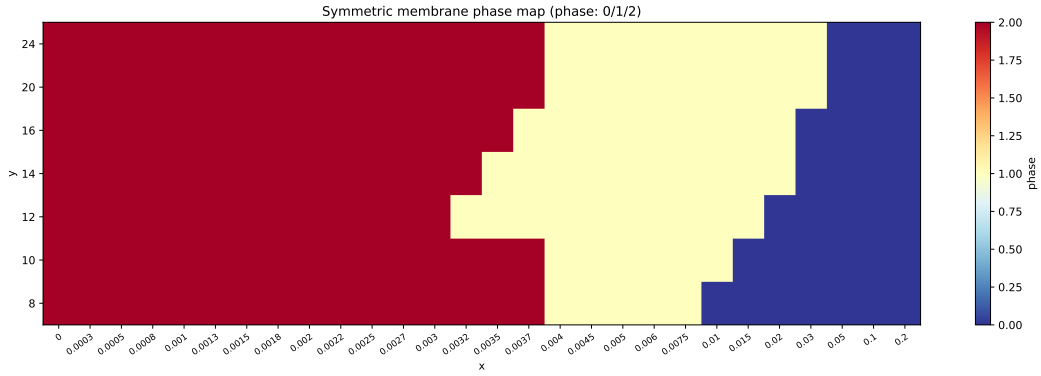


图 1: 对称半透膜相图（纵轴 W_y ，横轴 κ ，颜色数字为 phase）。

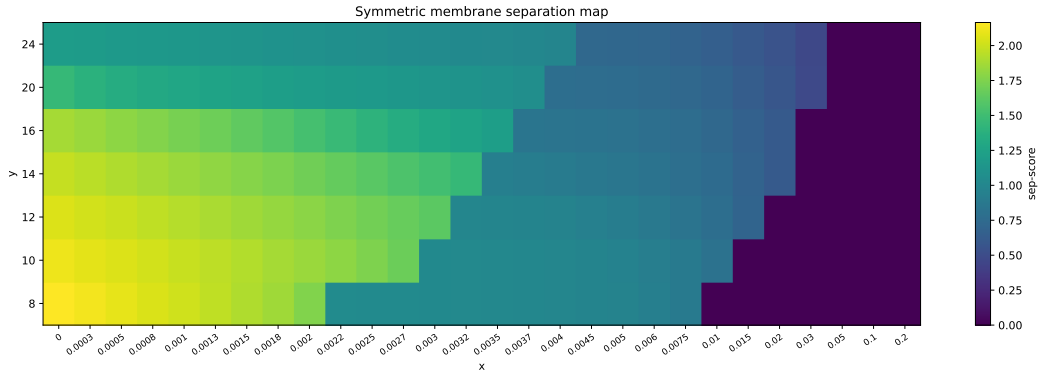


图 2: 对称半透膜分离度热图（sep-score）。

在本次参数下（以 $W_y = 16$ 截面为例）， $\kappa \in [0, 0.0035]$ 保持 clear-double；约 $\kappa \in [0.0037, 0.02]$ 处于 weak-double； $\kappa \geq 0.03$ 转为单峰，说明“膜泄漏”会持续削弱原走廊机制的时间尺度分离。

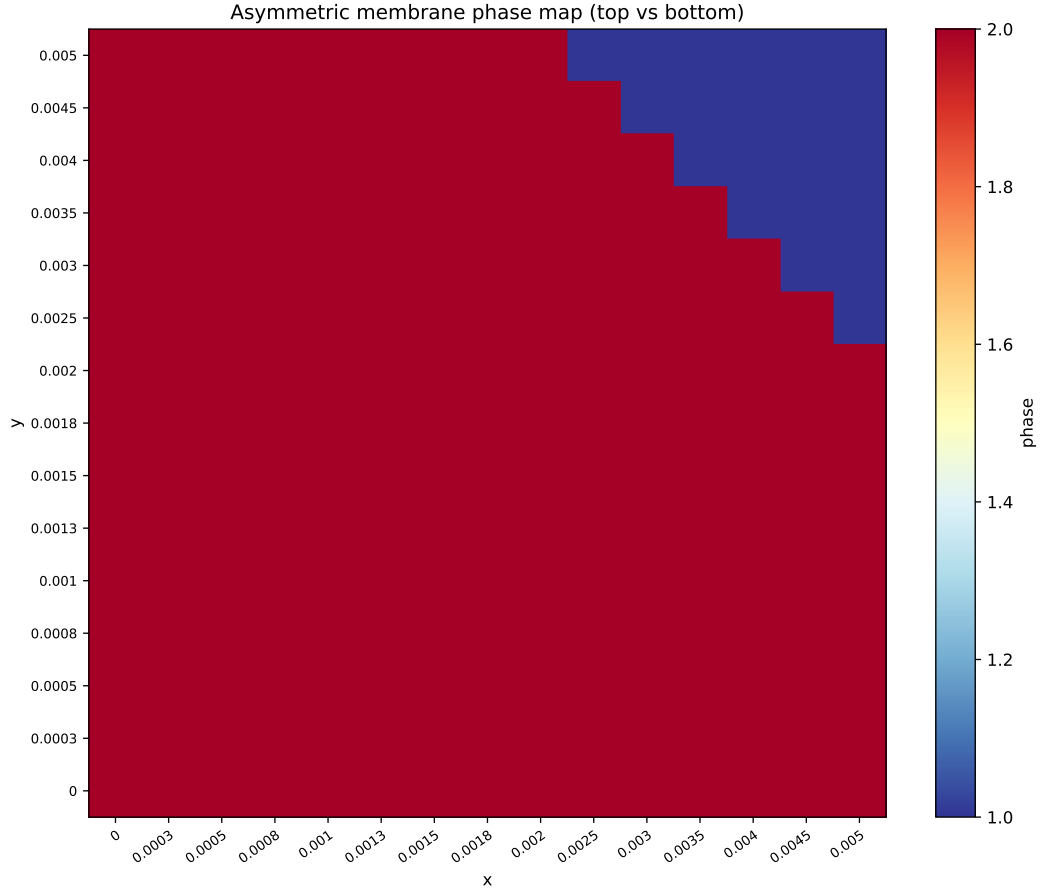
2.2 非对称膜扫描

代表性对比（对称 $\kappa = 0.002$ vs 非对称 $\kappa_{\uparrow} = 0.002, \kappa_{\downarrow} = 0$ ）如下：

基于“严格 recross（先达 Σ_{q^*} 后回到 A ）”的精确分解结果可见：peak1 由 LOR0 主导；valley 仍以 LOR0 为主但 L1R0 显著上升；peak2 由 LOR1 主导。说明慢峰主要来自“承诺后回撤”而不一定要求膜泄漏。

κ	phase	t_{p1}	t_{p2}	valley/max	sep-score
0	2	395	1711	0.058	1.87
0.0003	2	395	1710	0.061	1.84
0.0005	2	395	1708	0.063	1.80
0.0008	2	395	1706	0.066	1.76
0.001	2	394	1704	0.069	1.72
0.0013	2	394	1702	0.072	1.68
0.0015	2	394	1700	0.074	1.64
0.0018	2	394	1698	0.077	1.59
0.002	2	394	1696	0.080	1.53
0.0022	2	393	1694	0.082	1.46
0.0025	2	393	1692	0.085	1.40
0.0027	2	393	1690	0.087	1.34
0.003	2	393	1689	0.090	1.29
0.0032	2	393	1687	0.093	1.25
0.0035	2	393	1685	0.095	1.21
0.0037	1	392	1683	0.098	0.84
0.004	1	392	1681	0.100	0.84
0.0045	1	392	1677	0.105	0.82
0.005	1	392	1673	0.110	0.81
0.006	1	391	1664	0.120	0.79
0.0075	1	390	1652	0.134	0.77
0.01	1	388	1629	0.157	0.73
0.015	1	386	1576	0.198	0.67
0.02	1	383	1505	0.235	0.61
0.03	0	-	-	-	0.00
0.05	0	-	-	-	0.00
0.1	0	-	-	-	0.00
0.2	0	-	-	-	0.00

表 1: $W_y = 16$ 截面的对称膜指标。

图 3: 非对称半透膜相图 ($\kappa_{\uparrow}$ vs $\kappa_{\downarrow}$)。

$\kappa_{\uparrow}$	$\kappa_{\downarrow}$	phase	t_{p1}	t_{p2}	sep-score
0	0.0003	2	395	1711	1.85
0.0003	0	2	395	1710	1.85
0.0005	0	2	395	1710	1.84
0	0.0005	2	395	1710	1.84
0.0008	0	2	395	1709	1.82
0.0005	0.0003	2	395	1709	1.82
0.0003	0.0005	2	395	1709	1.82
0	0.0008	2	395	1709	1.82
0.001	0	2	395	1708	1.80
0.002	0	2	394	1704	1.73

表 2: 非对称膜 top cases (按 phase 与 sep 排序)。

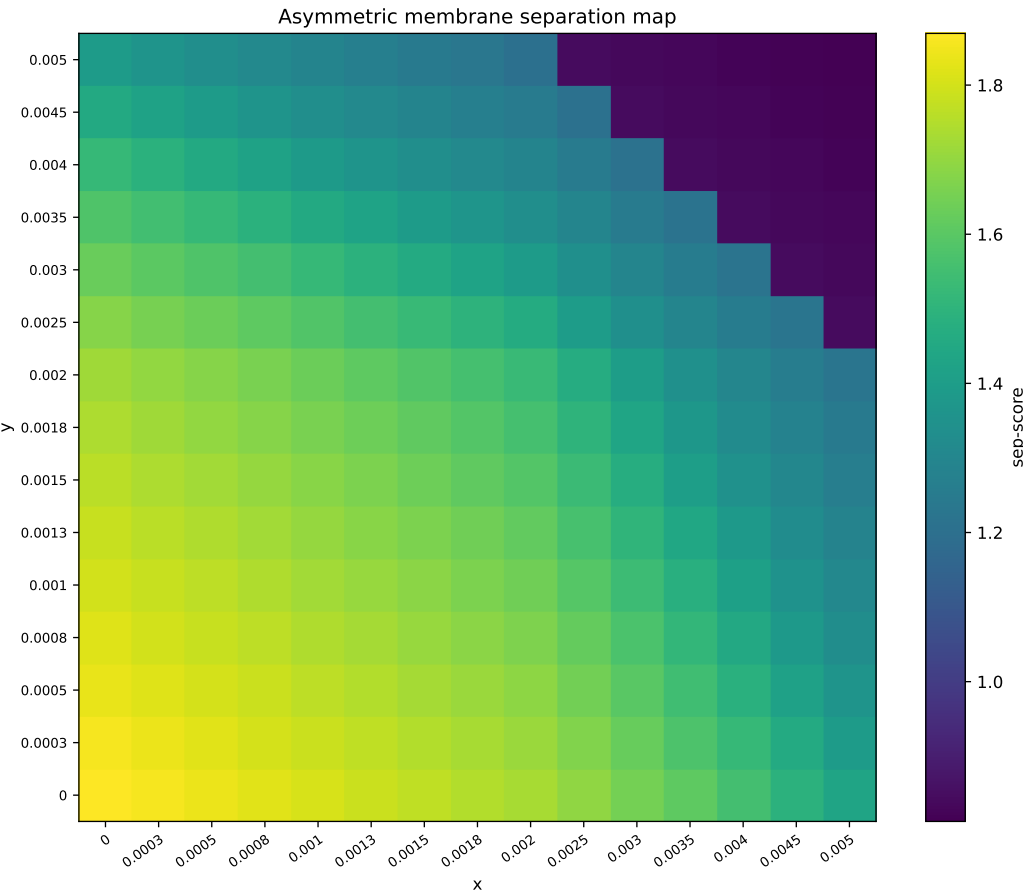


图 4: 非对称半透膜分离度热图。

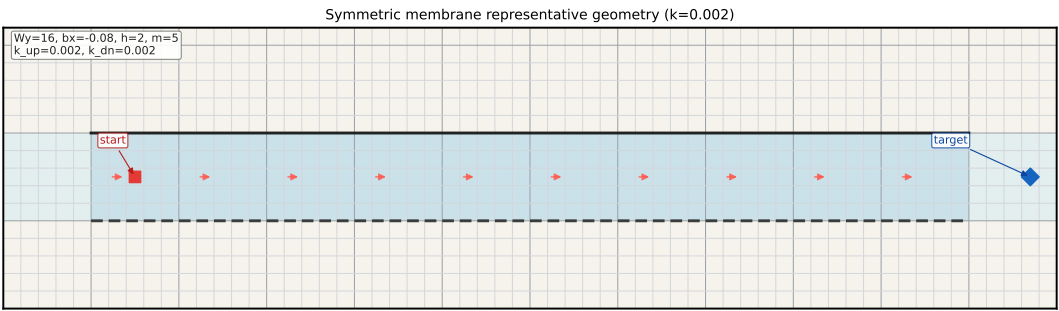


图 5: 对称半透膜代表案例配置图（包含 corridor、膜位置、起点/终点与局部偏置方向）。

Window	Case	L0R0	L0R1	L1R0	L1R1
peak1	sym	0.996	0.000	0.004	0.000
peak1	asym	0.998	0.000	0.002	0.000
valley	sym	0.581	0.116	0.299	0.004
valley	asym	0.687	0.142	0.169	0.002
peak2	sym	0.142	0.742	0.080	0.036
peak2	asym	0.149	0.794	0.040	0.018

表 3: 四类窗口占比数值表。

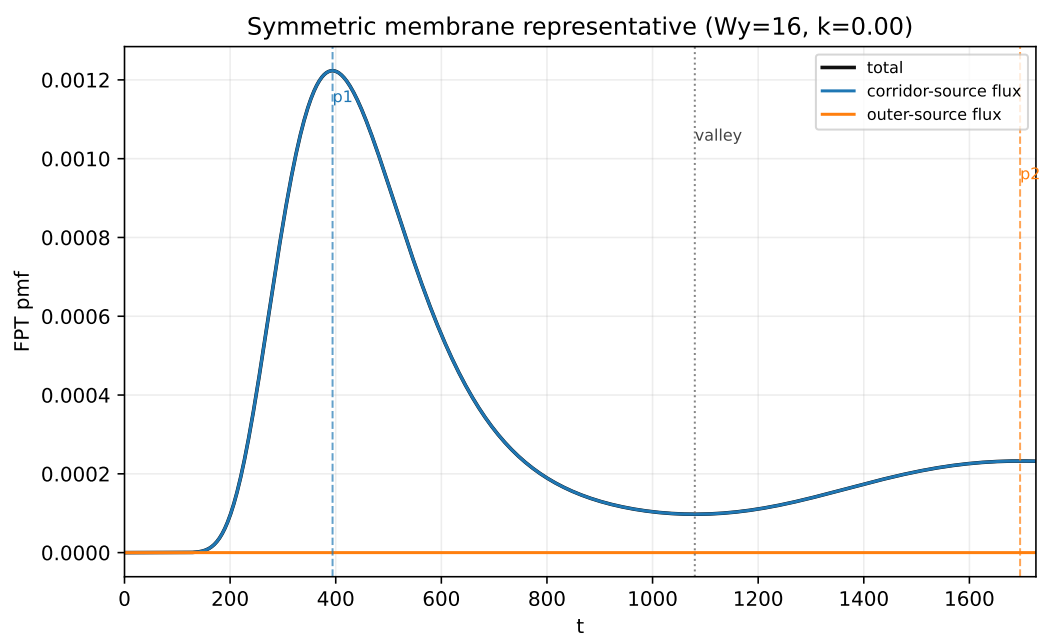


图 6: 对称半透膜代表案例: 总 FPT 与 corridor/outer 通量分解。

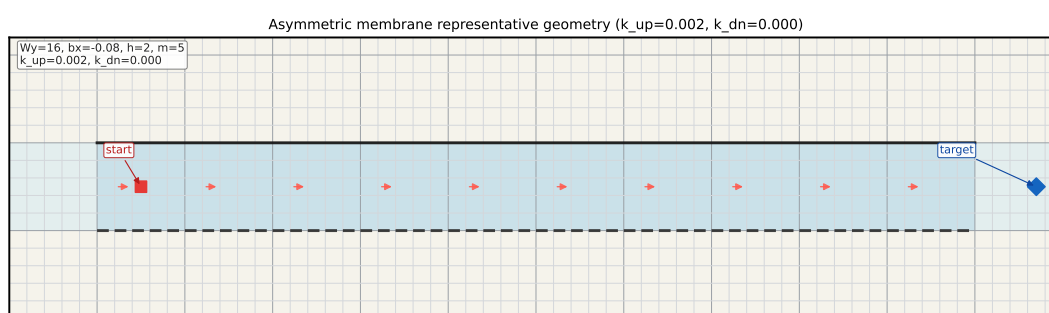


图 7: 非对称半透膜代表案例配置图 (上/下膜通透率不同)。

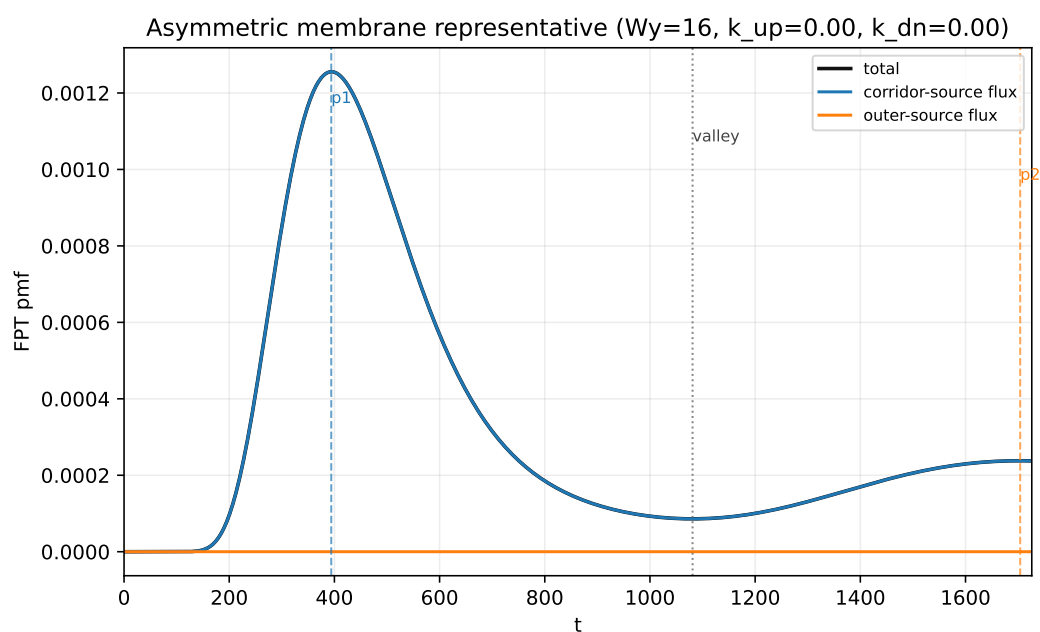


图 8: 非对称半透膜代表案例: 总 FPT 与 corridor/outer 通量分解。

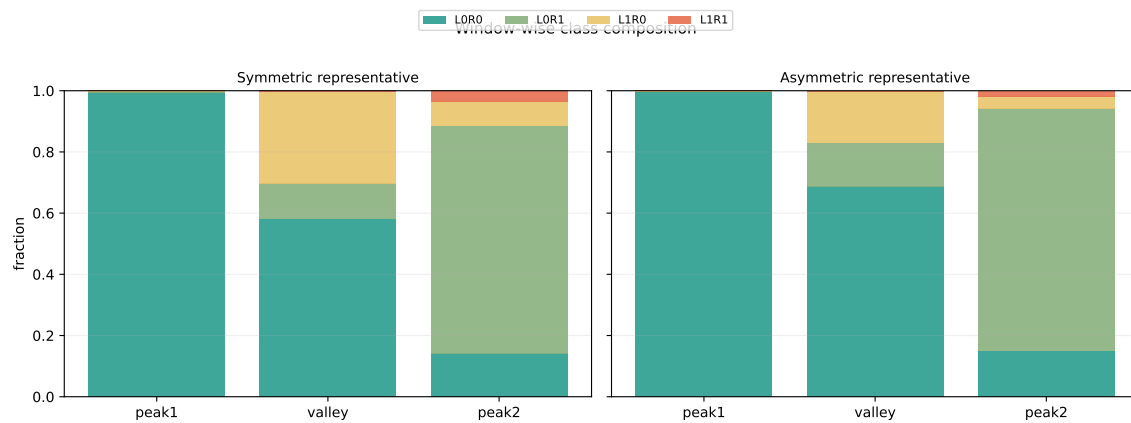


图 9: 峰 1/谷/峰 2 三窗口中的四类占比 (L×R)。

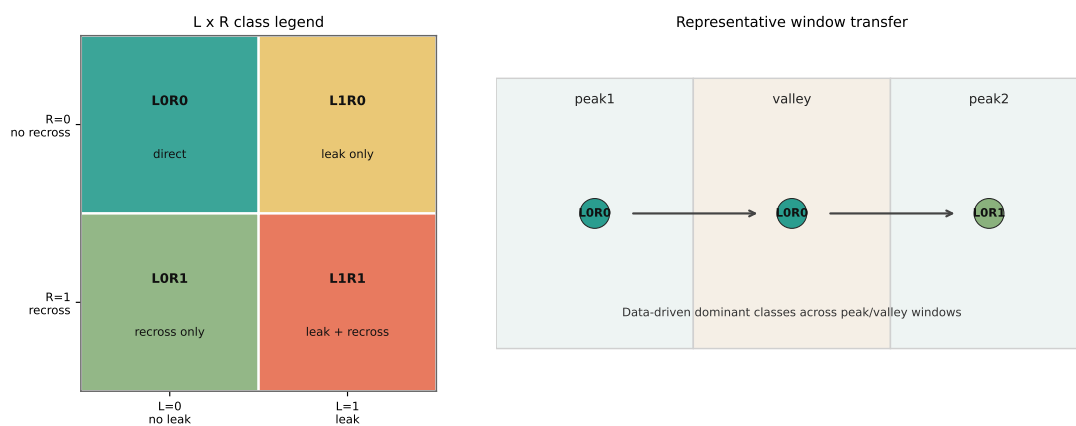


图 10: L×R 四类代表图例: 左图为 2×2 分类定义, 右图为代表性窗口主导类别转移示意。

Case	q^*	Window	dominant class	w_{L1R1}
sym	0.4	peak1	L0R0	0.000
sym	0.4	valley	L0R0	0.197
sym	0.4	peak2	L0R1	0.104
asym	0.4	peak1	L0R0	0.000
asym	0.4	valley	L0R0	0.113
asym	0.4	peak2	L0R1	0.052
sym	0.5	peak1	L0R0	0.000
sym	0.5	valley	L0R0	0.004
sym	0.5	peak2	L0R1	0.036
asym	0.5	peak1	L0R0	0.000
asym	0.5	valley	L0R0	0.002
asym	0.5	peak2	L0R1	0.018
sym	0.6	peak1	L0R0	0.000
sym	0.6	valley	L0R0	0.002
sym	0.6	peak2	L0R1	0.022
asym	0.6	peak1	L0R0	0.000
asym	0.6	valley	L0R0	0.001
asym	0.6	peak2	L0R1	0.011

表 4: q^* 鲁棒性检查 (精确分解): 不同承诺阈值下各窗口主导类别与 w_{L1R1} 。

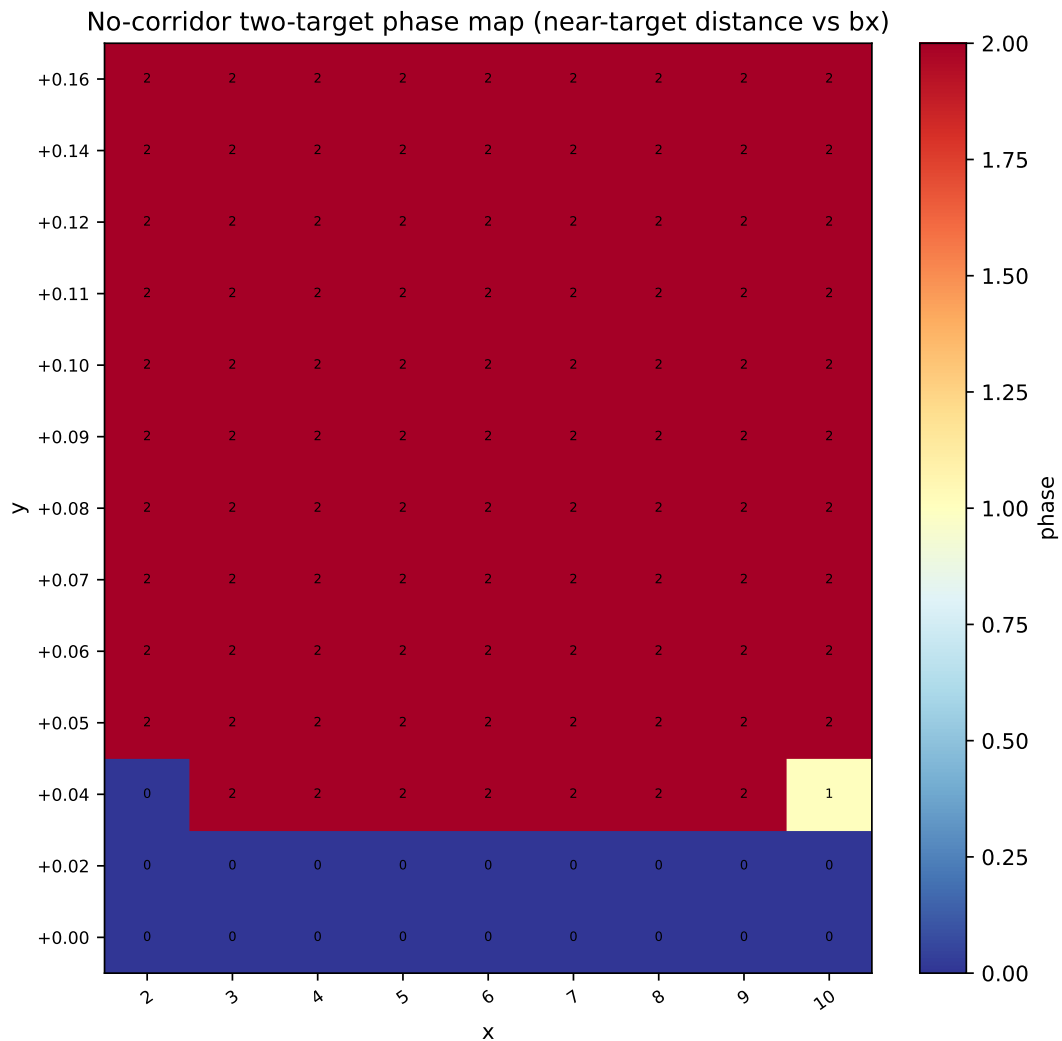
3 结果 B: 无 corridor + 双 target (近起点目标)

本节移除 corridor, 仅保留反射边界与全局 b_x , 并把一个 target 放到起点附近。扫描流程先在候选网格上优化 clear 覆盖率, 再从全部候选结果中自动选取 clear-instance (用于“最清晰双峰示例图”)。

b_x	clear d interval	best d	phase(best)	$P(\text{near})$	$P(\text{far})$
+0.00	-	3	0	0.867	0.087
+0.02	-	2	0	0.603	0.383
+0.04	3-9	3	2	0.444	0.556
+0.05	2-10	2	2	0.393	0.607
+0.06	2-10	2	2	0.355	0.645
+0.07	2-10	2	2	0.326	0.674
+0.08	2-10	2	2	0.301	0.699
+0.09	2-10	2	2	0.281	0.719
+0.10	2-10	2	2	0.264	0.736
+0.11	2-10	2	2	0.248	0.752
+0.12	2-10	2	2	0.235	0.765
+0.14	2-10	2	2	0.212	0.788
+0.16	2-10	3	2	0.206	0.794

表 5: 按 b_x 汇总的 clear 区间与最优近目标距离。

代表案例 ($W_y = 16, b_x = 0.07, d = 2$) :

图 11: 无 corridor 双 target: phase map (横轴近目标距离 d , 纵轴 b_x)。

spec	b_x	d	Δy	phase	sep-score	valley/max	$p_{\min}$	peak-ratio	peak-margin	min-margin	gate-pass	gate-slack	clear-score	showcase	$\varepsilon_{\text{split}}$
adaptive_refine	+0.12	4	1	2	2.38	0.007	0.350	0.170	0.070	0.070	yes	0.070	1.54	1.92	1.15×10^{-9}

表 6: 无 corridor clear-instance 质量指标 (从全部候选扫描中自动选点)。表中同时给出 peak-margin、min-margin 与首道强 gate 审计 (gate-pass/gate-slack), 避免“刚过阈值但视觉不稳”的伪 clear 点; 并附 showcase 用于图表可视化排序一致性。

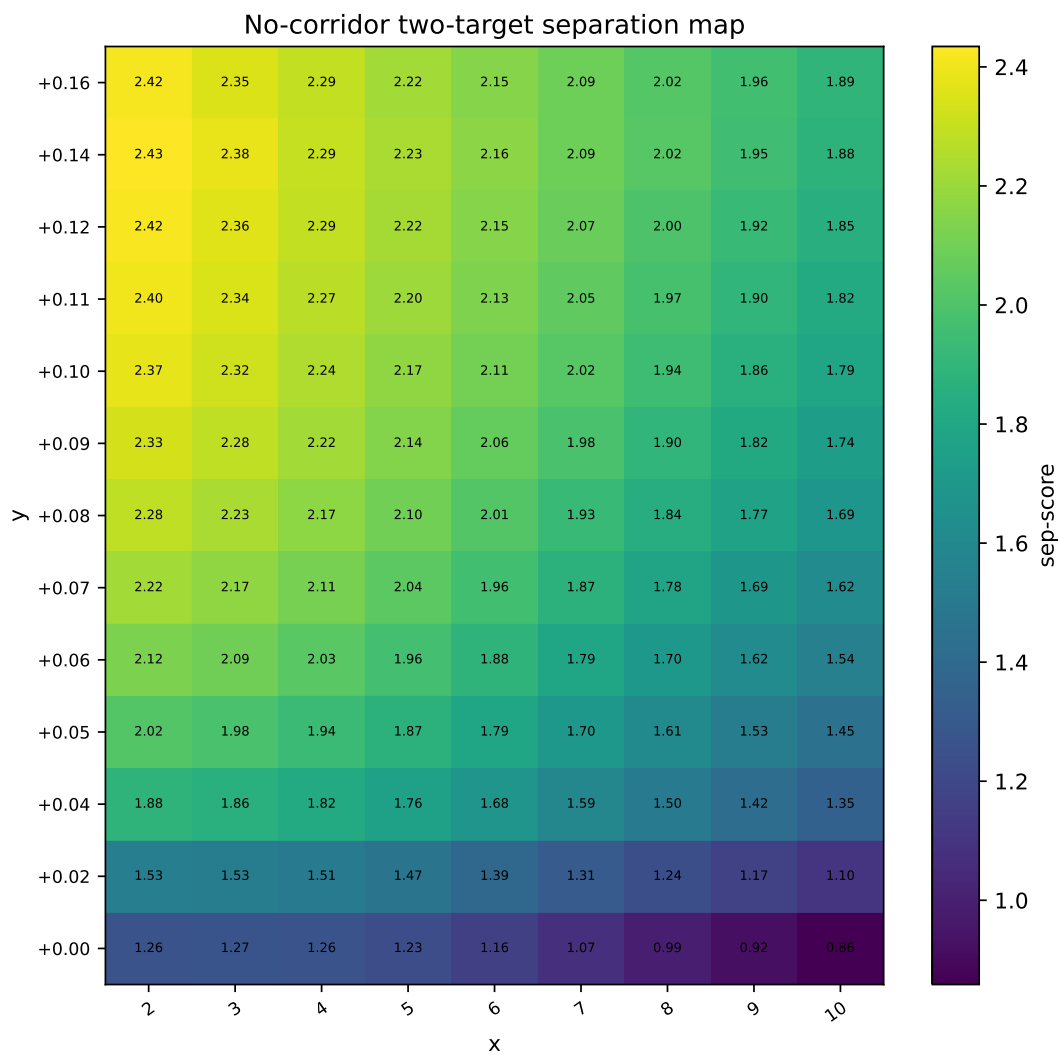


图 12: 无 corridor 双 target: 分离度热图。

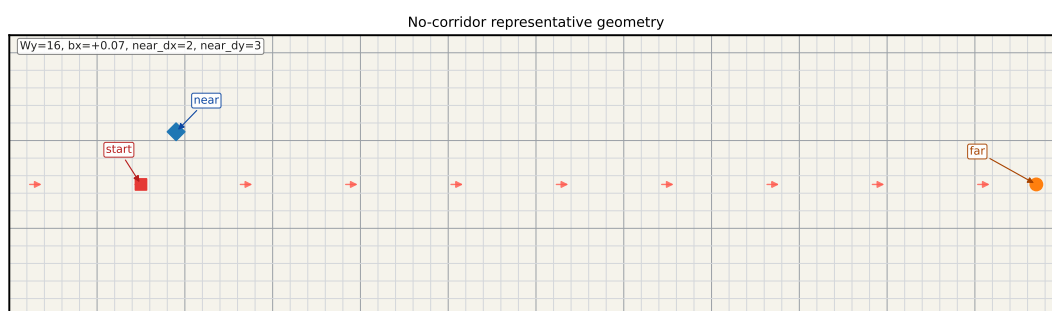


图 13: 无 corridor 双 target 代表案例配置图 (起点、近目标、远目标与全局漂移方向示意)。

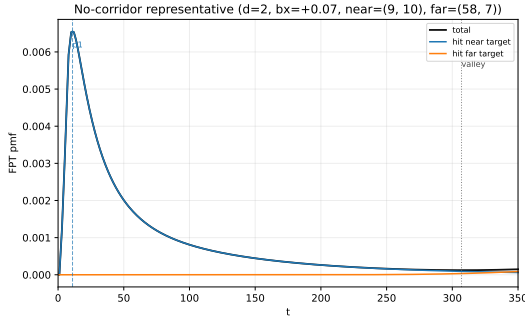


图 14: 无 corridor 双 target 代表案例: 总 FPT 及 near/far splitting 分量。

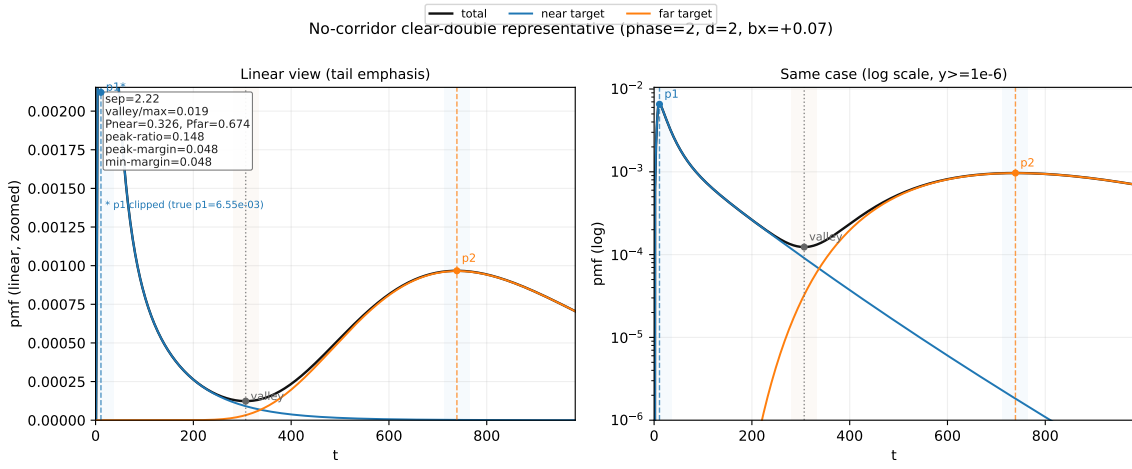
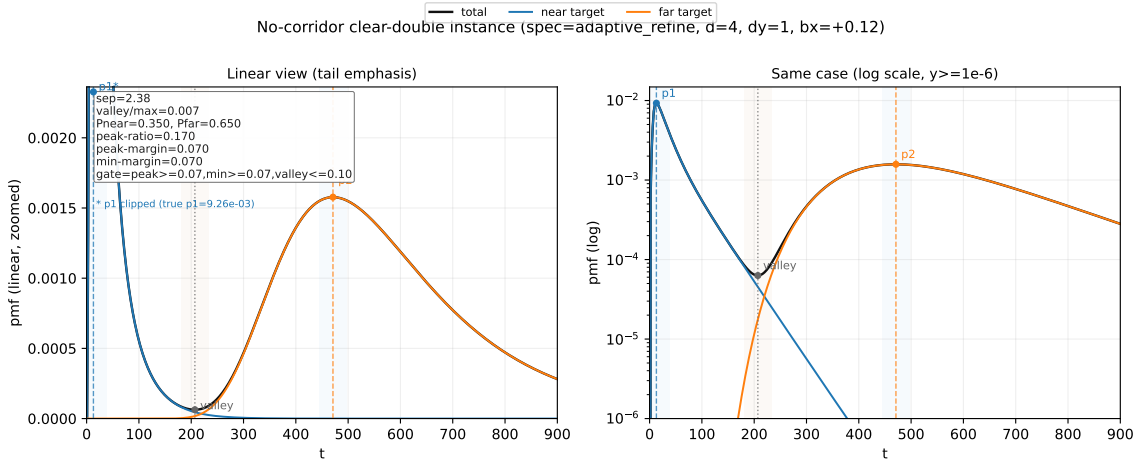
图 15: 无 corridor clear-double 实例图: 左图为线性坐标下的尾部增强视图 (为突出 valley/peak2, 对首峰做上截并以 p1* 标注真值), 右图为对数坐标 ($y \geq 10^{-6}$) 下的双峰结构。

图 16: 无 corridor clear-instance 专用图 (全候选扫描中 showcase-score 最大点): 线性尾部增强 + 对数视图并列, 确保 valley 与第二峰可视化清晰。

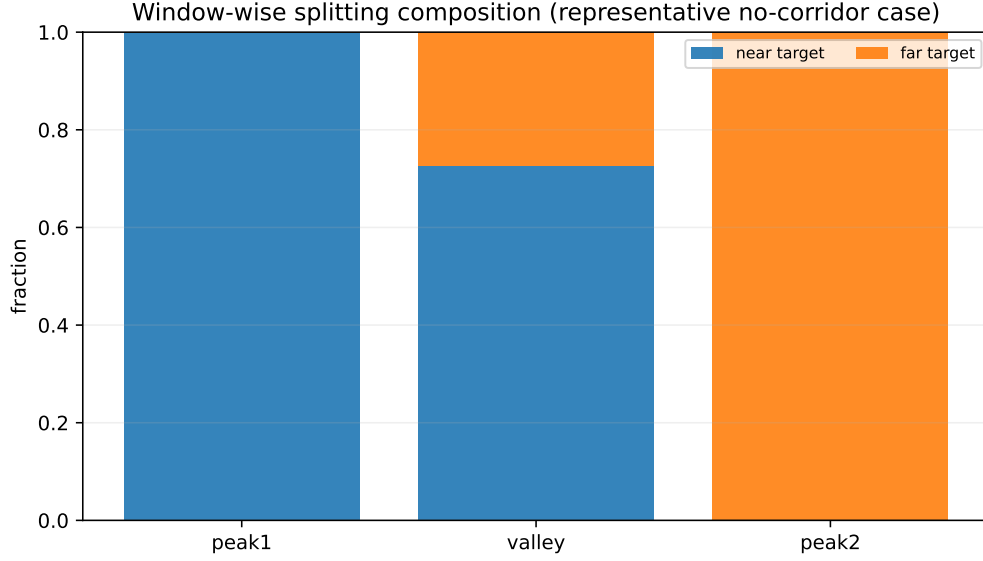


图 17: 代表案例在 peak1/valley/peak2 窗口的 near/far 质量占比。

本轮 clear-instance 的 near/far 总质量、sep-score、valley/max、peak/min 裕量、showcase 分数及 splitting committor 闭环误差 $\varepsilon_{\text{split}}$ 见表 6。本次在最终排序前加入“稳健门槛筛选”(优先要求 peak-margin/min-margin 正裕量并优先保留深谷约束), 确保选出的 no-corridor 实例不仅满足 phase=2 判据, 也能在阈值轻微扰动下保持可视化稳定。当前自动选出的 clear-instance 来自细化轮次 (spec=adaptive_refine), 参数为 $(b_x, d, \Delta y) = (0.12, 4, 1)$ 。其 peak-margin=0.070、min-margin=0.070、showcase=1.92, 并通过首道 gate: peak $\geq$ 0.07、min $\geq$ 0.07、valley $\leq$ 0.10; 对应审计量 gate-pass=yes、gate-slack=0.070 (三条阈值净裕量的最小值), 首道 gate 候选数为 168。

4 方法参考 (committor + 2×2 分类)

phase/sep-score 的可复现定义

为保证相图可复现, 本文直接采用代码中的判据 (与 src/vkcore/grid2d/rect_bimodality/cli.py 一致):

(1) 双峰探测 (find_two_peaks) 令 $\tilde{f} = \text{smooth}_7(f)$ (窗口 7 平滑)。候选峰点需满足局部极大且高于相对阈值

$$\tilde{f}(t) > \tilde{f}(t-1), \quad \tilde{f}(t) \geq \tilde{f}(t+1), \quad \tilde{f}(t) \geq 0.06 \max \tilde{f}.$$

从候选集合中选两峰 (t_{p1}, t_{p2}) 时, 额外要求 (代码默认值):

$$t_{p2} - t_{p1} \geq 20, \quad \text{peak_balance} \geq 0.08, \quad \text{valley_drop} \geq 0.08, \quad \text{minor_drop} \geq 0.005,$$

并满足左右主导性容差 (dominance_tol=0.02)。定义

$$\text{has_double} := \mathbf{1}\{t_{p1}, t_{p2} \text{ 均存在}\}.$$

(2) one-target 的 phase 定义 先定义

$$\text{sep}_{\text{peaks}} := \frac{|t_{p2} - t_{p1}|}{w_{1/2}^{(1)} + w_{1/2}^{(2)}}, \quad \text{valley/max} := \frac{h_v}{\max(h_{p1}, h_{p2})}, \quad \text{peak_balance} := \frac{\min(h_{p1}, h_{p2})}{\max(h_{p1}, h_{p2})}.$$

其中 $w_{1/2}^{(k)}$ 为第 k 峰半高宽 (由原始 f 计算), h_{p1}, h_{p2}, h_v 由平滑序列 $\tilde{f}$ 在峰/谷位置读取。分类为

$$\text{phase}_{\text{OT}} = \begin{cases} 2, & \text{has_double} = 1, \text{sep}_{\text{peaks}} \geq 1.0, \text{valley/max} \leq 0.35, \text{peak_balance} \geq 0.15, \\ 1, & \text{has_double} = 1 \text{ 但不满足上式}, \\ 0, & \text{has_double} = 0. \end{cases}$$

(3) two-target 的 phase 定义 先定义分量模态时间与分离度

$$t_{\text{mode}}^{\text{near}} := \arg \max_t f_{\text{near}}(t), \quad t_{\text{mode}}^{\text{far}} := \arg \max_t f_{\text{far}}(t),$$

$$\text{sep}_{\text{mode}} := \frac{|t_{\text{mode}}^{\text{far}} - t_{\text{mode}}^{\text{near}}|}{w_{1/2}^{\text{far}} + w_{1/2}^{\text{near}}}.$$

质量占比由分量总质量归一化得到

$$P_{\text{near}} := \frac{\sum_t f_{\text{near}}(t)}{\sum_t f_{\text{any}}(t)}, \quad P_{\text{far}} := \frac{\sum_t f_{\text{far}}(t)}{\sum_t f_{\text{any}}(t)}.$$

并在总分布上定义

$$\text{peak_ratio} := \frac{\min(h_{p1}, h_{p2})}{\max(h_{p1}, h_{p2})}, \quad \text{valley/max} := \frac{h_v}{\max(h_{p1}, h_{p2})}.$$

分类为

$$\text{phase}_{\text{TT}} = \begin{cases} 2, & \text{has_double} = 1, \text{sep}_{\text{mode}} \geq 1.0, \min(P_{\text{near}}, P_{\text{far}}) \geq 0.15, \\ & \text{valley/max} \leq 0.35, \text{peak_ratio} \geq 0.10, (\text{peak_ratio} - \text{valley/max}) \geq 0.01, \\ 1, & \text{has_double} = 1 \text{ 但不满足上式}, \\ 0, & \text{has_double} = 0. \end{cases}$$

因此: **phase=1** 的数学含义是 “检测到双峰, 但分离度/平衡度/谷深等条件至少有一项不达 clear-double 阈值”。

committor 的数学机理 (详细版)

记 hitting time 为 $\tau_C := \inf\{t \geq 0 : X_t \in C\}$ 。在离散马尔可夫链转移矩阵 P 上, 设 A 为起点盆 (本报告用起点附近 strip), B 为目标吸收集合, 定义

$$q_i := \mathbb{P}_i(\tau_B < \tau_A).$$

它满足离散 Dirichlet 边值问题

$$q_i = 0 \ (i \in A), \quad q_i = 1 \ (i \in B), \quad q_i = \sum_j P_{ij} q_j \ (i \notin A \cup B).$$

令 $U = \Omega \setminus (A \cup B)$, 按 (U, A, B) 重排后可写成线性系统

$$(I - P_{UU})q_U = P_{UB}\mathbf{1}.$$

在本问题中 (存在吸收且从 U 终将离开) 该系统解唯一, 因此 q 不是经验坐标, 而是由动力学唯一确定的最优进度坐标。我们取 $q^* = 0.5$ 定义承诺面

$$\Sigma_{q^*} := \{i : q_i \geq q^*\}.$$

此外, 在谱半径 $\rho(P_{UU}) < 1$ 时有 Neumann 展开

$$q_U = (I - P_{UU})^{-1}P_{UB}\mathbf{1} = \sum_{n \geq 0} P_{UU}^n P_{UB}\mathbf{1}.$$

这意味着 q_U 可以解释为 “在内部区反复游走 n 步后吸收到目标” 的总和, 从线性系统角度直接对应到后文的 renewal 失败-重试图景: 早峰偏向小 n , 慢峰来自大 n 的累计权重。

L×R 事件定义与 recross 计数

对轨迹 X_t (直到 τ_B) 定义膜泄漏次数

$$N_{\text{mem}} := \sum_{t=0}^{\tau_B-1} \mathbf{1}\{(X_t, X_{t+1}) \in \mathcal{E}_{\text{mem}}\},$$

以及承诺后回撤次数

$$N_{\text{ret}} := \sum_{t=0}^{\tau_B-1} \mathbf{1}\{X_t \in \Sigma_{q^*}, X_{t+1} \in A\}.$$

二值分类变量取

$$L = \mathbf{1}\{N_{\text{mem}} \geq 1\}, \quad R = \mathbf{1}\{N_{\text{ret}} \geq 1\},$$

从而得到四类

$$(L, R) \in \{(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)\},$$

对应 LOR0/LOR1/L1R0/L1R1 (图 10)。

与双峰/谷对应的 renewal 展开

将首达分布记为 $f(t)$ 。若把 “一次尝试直接成功” 记为核 $g(t)$, 把 “先失败并回到再生集合后继续” 记为核 $h(t)$, 则

$$f(t) = g(t) + (h * f)(t) = \sum_{k \geq 0} (h^{*k} * g)(t).$$

其中 k 可解释为失败尝试次数。双峰出现的条件就是 $k = 0$ 与 $k \geq 1$ 分量在时间尺度和质量上都可分离。窗口占比

$$w_{\ell r}(W) = \frac{\sum_{t \in W} f_{\ell r}(t)}{\sum_{t \in W} f(t)}$$

给出可视化证据: peak1 主要由 LOR0 托起; valley 仍以 LOR0 为主、但 L1R0 明显上升; peak2 则以 LOR1 主导, L1R1 仅占次要比例 (图 9, 表 3)。

从线性系统到首达核的闭环公式

在无 corridor 双 target 场景，把非吸收内部态记为 U ，起点内部基向量记为 e_s ，并记

$$Q := P_{UU}, \quad R_{\text{near}} := P_{U, \partial_{\text{near}}}, \quad R_{\text{far}} := P_{U, \partial_{\text{far}}}.$$

则首达 near/far 的 pmf 可写为

$$f_{\text{near}}(t) = e_s^\top Q^{t-1} R_{\text{near}} \mathbf{1}, \quad f_{\text{far}}(t) = e_s^\top Q^{t-1} R_{\text{far}} \mathbf{1}, \quad t \geq 1.$$

相应总质量为

$$P_{\text{far}} = \sum_{t \geq 1} f_{\text{far}}(t) = e_s^\top (I - Q)^{-1} R_{\text{far}} \mathbf{1}.$$

这条公式把“时域首达曲线分解”与“线性系统解”直接连通，是后续 splitting committor 闭环的核心。

条件化核 (Doob 变换) 与峰谷转移解释

在内部态且 $q_{\text{far}}(i) > 0$ 时，定义

$$\tilde{P}_{ij}^{\text{far}} := \frac{P_{ij} q_{\text{far}}(j)}{q_{\text{far}}(i)}.$$

这就是以 $h = q_{\text{far}}$ 对原转移核做的 Doob h -transform，对应“条件在最终先到 far 再到 near”下的精确动力学；near 分支则由互补的 $q_{\text{near}} = 1 - q_{\text{far}}$ 给出。于是 peak1 到 peak2 的窗口转移可解释为两类条件化轨道测度的再分配：早期质量主要来自短程成功轨道，而晚期质量来自多次离开并回到低- q_{far} 区域后的最终吸收。这一视角把观测到的 renewal 分解与可计算的条件化动力学直接对应起来。

谱分解视角：快慢双时标从何而来

在内部态子核 Q 上，若写成（广义）谱展开

$$Q^{t-1} = \sum_k \lambda_k^{t-1} r_k \ell_k^\top, \quad |\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots,$$

则

$$f_{\text{near}}(t) = \sum_k c_k^{\text{near}} \lambda_k^{t-1}, \quad f_{\text{far}}(t) = \sum_k c_k^{\text{far}} \lambda_k^{t-1}.$$

较小模值模态在早期快速衰减，主模 λ_1 控制慢尾和晚峰。当 near/far 两分量在模态投影 $c_k^{\text{near}}, c_k^{\text{far}}$ 上权重不同，就会出现“早期 near 主导、晚期 far 主导”的窗口迁移。这与 renewal 分解一致：peak1 对应短停留（小循环）贡献，peak2 对应准稳态主模累积释放。等价地看条件风险率

$$h_{\text{far}}(t) := \frac{f_{\text{far}}(t)}{S(t-1)},$$

其随时间上升就意味着远端吸收通道在晚窗口逐步占优。

双 target splitting committor 闭环

对同一系统，定义

$$q_{\text{far}}(i) := \mathbb{P}_i(\tau_{\text{far}} < \tau_{\text{near}}), \quad q_{\text{near}}(i) = 1 - q_{\text{far}}(i).$$

其边值问题为

$$q_{\text{far}} = 0 \text{ on near}, \quad q_{\text{far}} = 1 \text{ on far}, \quad q_{\text{far}}(i) = \sum_j P_{ij} q_{\text{far}}(j) \text{ on interior.}$$

因此一级分解 $f = f_{\text{near}} + f_{\text{far}}$ 与 committor 可直接闭环: $q_{\text{far}}(x_s)$ 应与 P_{far} 一致。定义

$$\varepsilon_{\text{split}} := \left| q_{\text{far}}(x_s) - \sum_{t \geq 1} f_{\text{far}}(t) \right| = |q_{\text{far}}(x_s) - P_{\text{far}}|.$$

进一步地，令 $\tau := \tau_{\text{near}} \wedge \tau_{\text{far}}$ ，并定义

$$M_t := q_{\text{far}}(X_{t \wedge \tau}).$$

由于 q_{far} 在 interior 上满足调和关系、在 near/far 边界上取 0/1, M_t 是有界鞅。由可选停时定理可得

$$q_{\text{far}}(x_s) = \mathbb{E}[M_\tau] = \mathbb{P}_{x_s}(\tau_{\text{far}} < \tau_{\text{near}}) = P_{\text{far}}.$$

因此 $\varepsilon_{\text{split}}$ 理论上应为 0；数值实现中它的量级应与 Bellman 残差处于同一误差层级，可直接作为机制闭环与数值稳定性的联合质检量。

case	$q_{\text{far}}(x_s)$	P_{far}	$\varepsilon_{\text{split}}$	$\ r_{\text{int}}\ _\infty$	$\ r_{\text{near}}\ _\infty$	$\ r_{\text{far}}\ _\infty$
representative	0.674289	0.674289	1.97×10^{-8}	9.93×10^{-12}	0	0
clear-instance	0.650264	0.650264	1.15×10^{-9}	9.93×10^{-12}	0	0

表 7: no-corridor 双 target 的 splitting committor 闭环质检 (代表案例 + 专用 clear-instance): 同时报告 $q_{\text{far}}(x_s)$ 、 P_{far} 、 $\varepsilon_{\text{split}}$ 与内点/边界残差。

表 7 显示，代表路径与 clear-instance 路径都满足 $q_{\text{far}}(x_s) \approx P_{\text{far}}$ ，且 $\varepsilon_{\text{split}}$ 分别在 10^{-8} 与 10^{-9} 量级，内点 Bellman 残差保持在 10^{-11} 量级。说明“快/慢峰由 near/far 吸收竞争产生”的解释在两条路径上都与精确分解一致。后续迭代中把 $\varepsilon_{\text{split}}$ 与 committor 在内点的 Bellman 残差、near/far 边界残差一起作为自动质检量，可持续监控图表解释与数值分解是否漂移。

本报告中的 committor 实现细节

1. 在代表案例上先构建精确转移矩阵 (已包含懒惰项、偏置、膜穿透率和反射边界)。
2. 取 $A = \{x \leq x_s + 1, |y - y_{\text{mid}}| \leq 1\}$, $B = \{\text{target}\}$ ，并用固定点迭代求解 q (迭代终止阈值 10^{-11})；同时输出内点 Bellman 残差与边界残差作为数值质检。
3. 对 $L \times R$ 采用扩展状态空间 (x, ℓ, s, r) 的**精确递推**而非 MC：其中 ℓ 记录是否发生膜泄漏， s 记录是否访问过 Σ_{q^*} ， r 记录是否在访问 Σ_{q^*} 后返回 A 。
4. 默认报告 $q^* = 0.5$ ，并额外输出 $q^* \in \{0.4, 0.5, 0.6\}$ 的鲁棒性表 (表 4)。
5. 在双 target 无 corridor 场景中，一级分解始终采用严格恒等式 $f = f_{\text{near}} + f_{\text{far}}$ ，保证“双峰来源”可直接追溯。

5 总结与后续优化方向 (committor 导向)

实现总结 (本轮优化后)

1. corridor 半透膜: 对称/非对称代表案例均保持 clear-double; 在严格 recross 定义下, peak1 主要是 LOR0, 而慢峰由 LOR1 抬升, valley 中 L1R0 比例明显增加。
2. 无 corridor 双 target: 新增 “全候选扫描 → 自适应局部细化 → 稳健门槛筛选 → clear-instance 排序” 流程, 并落地专用图/表 (图 16, 表 6); 当前 clear-instance 为 $(b_x, d, \Delta y) = (0.12, 4, 1)$, 在 five-constraint 下保持正裕量, 并通过首道 gate ($\text{peak} \geq 0.07$ 、 $\text{min} \geq 0.07$ 、 $\text{valley} \leq 0.10$); 新增强 gate 审计字段 ($\text{gate-pass/gate-slack}$) 和候选数统计 (首道 gate 候选 168 个), 同时保留 clear-instance 图完整性硬校验 (文件存在且大小 $> 2\text{KB}$), 并把图路径/大小写入 ‘summary.json’ 供持续巡检。
3. 方法层面: committor 从 “术语” 落到了可计算、可复核流程; splitting committor 在代表点与 clear-instance 上都与吸收质量形成数值闭环, 并把 $\varepsilon_{\text{split}}$ 与 committor 残差共同纳入自动质检 (当前代表点 $\varepsilon_{\text{split}}$ 量级 $\sim 10^{-8}$, clear-instance 量级 $\sim 10^{-9}$)。
4. 工程执行层面: 本轮本地完整回归 (codegen + 中英文构建) 单轮耗时约 70s (约 1.2 分钟), 满足 “本地 < 10 分钟优先” 条件; 后续仅在扫描规模扩大到预计单轮 > 20 分钟时切换 Isambard。

后续方向 (全部围绕 committor 落地)

1. 将当前 “代表案例精确分解” 扩展为 “整张相图上的精确分解”, 并同步输出 clear-instance 的阈值裕量热图 (而不只给单点表格)。
2. 做 q^* 鲁棒性扫描 (如 0.4/0.5/0.6) 并报告峰谷分类稳定性, 避免阈值依赖质疑。
3. 在双 target 场景系统化输出 splitting committor 场与窗口统计

$$q_{\text{far}}(x) = \mathbb{P}_x(\tau_{\text{far}} < \tau_{\text{near}}),$$

并把 $\varepsilon_{\text{split}} = |q_{\text{far}}(x_s) - P_{\text{far}}|$ (同时覆盖代表点与 clear-instance 选点) 与两项阈值裕量指标 (min-margin 与 gate-slack) 共同作为自动质检项。

4. 在膜模型中比较 “上下非对称” 与 “方向非对称 (内外穿透率不同)” 两类破缺, 并统一投影到 committor 几何上对比。
5. 在 keepalive 循环中把 “codegen + 中英文构建可通过” 作为一等优化目标, 并固定执行分流策略: 本地小轮次 (< 10 分钟) 优先直跑; 大规模扫描 (预计单轮 > 20 分钟) 走 isbard doctor/auth + submit/status/fetch; 远端失败时先记录原因并回退最小本地 smoke。
6. 所有远端轮次统一输出运行元信息 (JOB_ID、REMOTE_DIR、关键产物路径与下一步动作), 保证总结可追溯。

复现命令

```
cd reports/grid2d_membrane_near_target
../../.venv/bin/python code/membrane_near_target_report.py
```

```
latexmk -xelatex -interaction=nonstopmode -halt-on-error \  
-auxdir=build -emulate-aux-dir grid2d_membrane_near_target_cn.tex
```