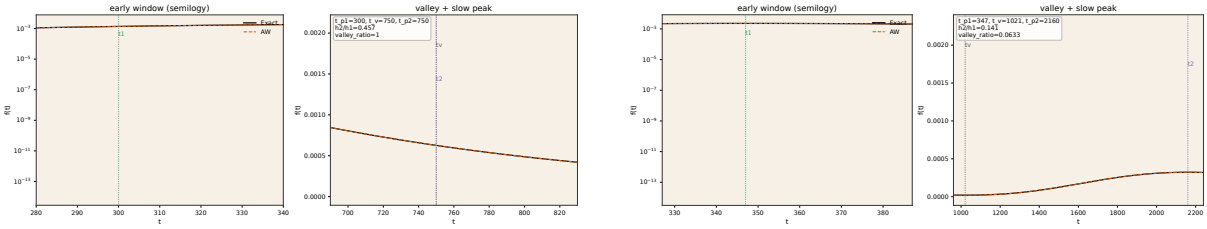
二维 $N \times N$ 晶格上**全反射边界**的首达时间双峰构造

结论与关键图示

- **全反射边界下仍可稳定形成双峰**：正文保留八类代表构造 R1（几何绕行）、R7（半透膜孔道 + 绕行）、C3（主动运输轨道）、R6（door 阵列）、NB4（外边界“传送带”模板）、NB5（传送带 + 全局偏置）、S1/S2（无内部 barrier/door 的软通道双轨），均在全反射外边界下产生清晰双峰。
- **几何慢通道 vs 动力学慢通道**：R1/R7/C3 通过“短直走廊 + 长绕行”与局部孔道/轨道形成时间尺度分离；R6 由 door 阵列降低有效通行率；NB4/NB5 由边界顺时针带 + 逆向短路形成深双峰；S1/S2 则以 sticky + 局部箭头构造软通道，实现“无墙”的 fast/slow 分离。
- **少结构仍可形成深谷**：NB4/NB5 仅改外边界一圈（sticky + 顺时针 bias），S1/S2 在内部不设 barrier/door，仅通过软通道仍可达到 valley ratio ≤ 0.07。
- **双峰量化**：峰谷指标与 MC 快通道权重见表 2；AW 误差达到 10^{-14} 量级（表 5）。
- **AW vs exact 验证**：在 $t \leq t_{\max}^{\mathrm{AW}}$ 内，AW 反演与 exact recursion 一致，且与 MC 叠加吻合。



(a) R1 峰谷放大　　(b) R6 峰谷放大

图 1: 全反射边界双峰示例（R1 与 R6）。

case	N	q	g_x	g_y	boundary	(start, target)
R1	60	0.8	-0.20	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)
R7	60	0.8	-0.20	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)
C3	60	0.8	-0.15	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)
R6	60	0.8	0.00	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)
NB4	60	0.8	0.00	0.00	reflecting	(12,60)→(10,60)
NB5	60	0.8	-0.10	0.00	reflecting	(12,60)→(10,60)
S1	60	0.8	0.00	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)
S2	60	0.8	0.00	0.00	reflecting	(10,30)→(50,30)

表 1: 代表性构造的核心参数。所有外边界均为反射边界。

case	t_{p1}	t_v	t_{p2}	peak ratio	valley ratio	P_{fast} (MC)
R1	136	269	424	0.451	0.035	0.321
R7	140	280	428	0.294	0.066	0.248
C3	160	388	702	0.231	0.022	0.293
R6	347	1021	2160	0.141	0.063	0.498
NB4	6	389	642	0.932	0.062	0.104
NB5	6	379	621	0.930	0.009	0.024
S1	47	240	363	0.641	0.037	0.127
S2	48	274	462	0.647	0.061	0.171

表 2: 代表性构造的双峰指标与 MC 快通道权重（吸收概率在截断时间内均接近 1）。

参数表

双峰指标汇总

1 模型定义与坐标约定

状态空间为 $\{1,\dots,N\}\times\{1,\dots,N\}$。记当前位置为 (x,y)，目标点 (x_t,y_t) 为吸收态。每步更新为

$$p_{\text{left}}=\frac{q}{4}(1+g_x),\quad p_{\text{right}}=\frac{q}{4}(1-g_x), \tag{1}$$

$$p_{\text{down}}=\frac{q}{4}(1+g_y),\quad p_{\text{up}}=\frac{q}{4}(1-g_y), \tag{2}$$

$$p_{\text{stay}}=1-q. \tag{3}$$

本文采用 “y 轴向下为正” 的坐标约定，因此 $g_y>0$ 表示向下偏置。本文仅使用**全反射边界**：越界概率全部加回 p_{stay}。由式 (1) 可见 $g_x>0$ 会增大 p_{left} 并减小 p_{right}，因此本文约定 $g_x>0$ 表示**向左**全局偏置（$g_x<0$ 表示向右偏置）。

局部异质性（组合）

- local bias（箭头）：将 p_{stay} 乘 $(1-\delta)$，并把 $\Delta=\delta p_{\text{stay}}$ 加到箭头方向；其余方向不变。
- sticky site：将该格点的移动概率缩放为 $q_{\text{site}}=\text{factor}\cdot q$，$p_{\text{stay}}$ 相应上升。
- barrier：反射墙将该方向概率加回 stay；半透门以 p_{pass} 通过、$1-p_{\text{pass}}$ 反射。

2 图形阅读指南

图 2 给出统一符号语法：红色方块为起点、蓝色菱形为目标；粗实线为反射墙、虚线为门（标注 p_{pass}）、半透明阴影为 sticky 区；红色小箭头为 local bias；图外大箭头给出全局偏置方向与 (g_x,g_y) 数值。为便于阅读，将环境示意、$P(n,t)$ 切片、FPT 多尺度图、峰谷放大图、诊断图与通道分解分别独立成图，避免子图拥挤。



图 2: 图形符号图例。

3 FPT 基础：定义、直观与三种计算方法

定义与直观 设首达时间（first-passage time）为

$$\tau=\inf\{t\ge 1:\ X_t=(x_t,y_t)\},$$

其 PMF 为 $f(t) = \Pr(\tau = t)$，CDF 为 $F(t) = \Pr(\tau \le t)$，生存概率为

$$S(t) = \Pr(\tau > t) = 1 - F(t).$$

直观上，$f(t)$ 描述“恰好在第 t 步首次抵达目标”的概率，因此图中的双峰就是 $f(t)$ 在早期与晚期各有一个显著局部极大值。对于吸收边界模型，$F(t)$ 也可以理解为“累计吸收概率”，而 $S(t)$ 则是“尚未吸收的剩余概率质量”。

三种计算方法（直观版） 本文的 $f(t)$ 由三种方法得到，并在图中叠加对比：

- **Exact recursion（确定性递推）**：把所有非吸收态组成 transient 子矩阵 Q，一步一步推进概率分布：

  $$p_{t+1} = Qp_t, \qquad f(t) = r^\top p_t, \quad t \ge 1,$$

  其中 r 是从 transient 进入吸收态的“流出概率”。这是“逐步推演”的确定性算法，数值误差仅来自浮点与截断。
- **AW 反演（生成函数数值反演）**：先构造生成函数 $\tilde{f}(z)$（本报告用 propagator + 缺陷公式得到），再用 Abate–Whitt 反演

  $$f(t) \approx r^{-t}\frac{1}{m}\sum_{k=0}^{m-1}\tilde{f}(z_k)e^{-2\pi ikt/m},$$

  得到整段时间序列。直观上是“先到 z 域算，再回到时间域”。
- **MC（蒙特卡洛）**：随机模拟大量轨迹，统计首达时间直方图得到 $f(t)$ 近似。它最灵活，但尾部噪声大，需要更多样本。

AW 与 Exact 的对比（给新手）

- **准确性**：Exact 是确定性的基准；AW 是高精度数值反演，参数选得合适时可与 Exact 几乎重合；MC 为统计估计，误差随样本数 $\propto 1/\sqrt{N}$ 衰减。
- **速度与适用场景**：Exact 适合中等规模、需要高精度的 $t_{\max}$；AW 在“已知生成函数”的前提下可同时得到大量 t 值，但每个 z_k 需要求解线性系统，缺陷数大时会变慢；MC 适合快速验证与复杂几何，但需要更多样本才能看清尾部与双峰细节。
- **本报告用法**：Exact 作为基准，AW 用于与 Exact 对齐验证，MC 用来展示通道分类与统计直观。

4 解析推导：从无缺陷 propagator 到时域 FPT

本节给出统一推导链条：*无缺陷 propagator* $\to$ *有缺陷 propagator* $\to$ *FPT 生成函数* $\to$ *AW 反演*。本文构造均可落在同一框架内。

4.1 矩阵形式与生成函数

设无吸收系统的转移矩阵为 A，约定 $A_{v,u} = \Pr(u \to v)$，因此列和为 1，且 $\mathbf{p}_{t+1} = A\mathbf{p}_t$。传播子满足

$$P_{n_0}(n,t) = \mathbf{e}_n^\top A^t \mathbf{e}_{n_0}, \qquad \tilde{\mathbf{P}}(z) = \sum_{t\ge 0} A^t z^t = (I - zA)^{-1}, \tag{4}$$

从而

$$\tilde{P}_{n_0}(n,z) = \mathbf{e}_n^\top (I - zA)^{-1} \mathbf{e}_{n_0}. \tag{5}$$

下面给出 A 的谱分解形式与缺陷更新公式，以便对任意构造得到 $\tilde{P}$。

4.2 无缺陷 propagator 的谱分解（反射边界）

将二维转移写成两个一维算子叠加（沿 x 与 y 方向）。设一维步进矩阵的特征对为 $\{\lambda_k^{(\mathrm{ref})}, h_k^{(\mathrm{ref})}\}$。定义

$$s_k^{(\mathrm{ref})} = q\left(\lambda_k^{(\mathrm{ref})} - 1\right), \qquad \Lambda_{k_1,k_2} = 1 + \frac{s_{k_1}^{(\mathrm{ref})} + s_{k_2}^{(\mathrm{ref})}}{2}. \tag{6}$$

则二维无缺陷 propagator（PRE 102, 062124 的 Eq.(33) 形式）为

$$P_{n_0}^{(\mathrm{ref})}(n,t) = \sum_{k_1}\sum_{k_2} h_{k_1}^{(\mathrm{ref})}(x,x_0)\, h_{k_2}^{(\mathrm{ref})}(y,y_0)\, \Lambda_{k_1,k_2}^{t}. \tag{7}$$

对时间做 z 变换得到

$$\tilde{P}_{n_0}^{(\mathrm{ref})}(n,z) = \sum_{k_1}\sum_{k_2} \frac{h_{k_1}^{(\mathrm{ref})}(x,x_0)\, h_{k_2}^{(\mathrm{ref})}(y,y_0)}{1 - z\Lambda_{k_1,k_2}}. \tag{8}$$

反射边界（reflecting） 设 $p_\ell = (1+g)/2$, $p_r = (1-g)/2$, $\rho = p_r/p_\ell$。可通过相似变换将一维算子对称化，得到

$$\lambda_0^{(\mathrm{ref})} = 1, \quad \lambda_k^{(\mathrm{ref})} = 2\sqrt{p_\ell p_r}\cos\frac{k\pi}{N}\ (k \geq 1), \quad h_k^{(\mathrm{ref})}(x,x_0) = u_k(x)u_k(x_0)\sqrt{\frac{\pi_x}{\pi_{x_0}}}, \tag{9}$$

其中 $\pi_x \propto \rho^x$ 为平衡分布，u_k 为正交余弦模（与 PRE Eq.(22)-(23) 一致）。

4.3 有缺陷 propagator 的 determinant 公式

将缺陷写为矩阵扰动 $\underline{X} = \underline{B} - \underline{A}$。对每条有向边 $(u_i \to v_i)$ 定义

$$\eta_{u_i,v_i} = X_{v_i,u_i} = B_{v_i,u_i} - A_{v_i,u_i}. \tag{10}$$

并定义差分 propagator

$$\tilde{P}^e_{\langle u-v\rangle}(n,z) = \tilde{P}^e_u(n,z) - \tilde{P}^e_v(n,z). \tag{11}$$

则 2311.00464v2 的 inert-heterogeneity 公式给出

$$\tilde{P}_{n_0}(n,z) = \tilde{P}^e_{n_0}(n,z) - 1 + \frac{\det[H(n,n_0;z)]}{\det[H(z)]}, \tag{12}$$

其中

$$H_{ij}(z) = -\frac{\delta_{ij}}{z} + \eta_{u_j,v_j}\,\tilde{P}^e_{\langle u_j - v_j\rangle}(u_i,z) - \eta_{v_j,u_j}\,\tilde{P}^e_{\langle u_j - v_j\rangle}(v_i,z), \tag{13}$$

$$H(n,n_0;z)_{ij} = H_{ij}(z) - \tilde{P}^e_{\langle u_j - v_j\rangle}(n,z)\left[\eta_{u_i,v_i}\tilde{P}^e_{n_0}(u_i,z) - \eta_{v_i,u_i}\tilde{P}^e_{n_0}(v_i,z)\right]. \tag{14}$$

数值实现中，我们等价地求解线性系统得到 $\tilde{P}$（由 Cramer 规则与上式等价），以获得更好的数值稳定性。亦可将其写成线性代数形式：

$$b_j(n,z) = \tilde{P}^e_{u_j}(n,z) - \tilde{P}^e_{v_j}(n,z), \tag{15}$$

$$a_i(n_0,z) = \eta_{u_i,v_i}\tilde{P}^e_{n_0}(u_i,z) - \eta_{v_i,u_i}\tilde{P}^e_{n_0}(v_i,z), \tag{16}$$

$$H_{ij}(z) = -\frac{\delta_{ij}}{z} + \eta_{u_j,v_j}\, b_j(u_i,z) - \eta_{v_j,u_j}\, b_j(v_i,z), \tag{17}$$

从而

$$\tilde{P}_{n_0}(n,z) = \tilde{P}^e_{n_0}(n,z) - \mathbf{b}(n,z)^\top H(z)^{-1}\mathbf{a}(n_0,z). \tag{18}$$

缺陷映射

- local bias：减少 self-loop 并把概率加到箭头方向，等价于 $(u \to v)$ 的 $\eta_{u,v} = +\Delta$，并对 $(u \to u)$ 添加补偿项以保持列和为 1。
- door/permeable barrier：跨门通过概率乘 p_{pass}，对应边 $(u \to v)$ 与 $(v \to u)$ 具有 $\eta_{u,v} = (p_{\text{pass}} - 1)P^{\text{base}}_{u\to v}$。
- sticky：所有出边概率乘 α，每条出边 $(u \to n)$ 的 $\eta_{u,n} = (\alpha - 1)P^{\text{base}}_{u\to n}$，并对 $(u \to u)$ 添加补偿项以保持列和为 1。

feature	规则（以 $u \to v$ 为例）	对应 $\lambda_{u,v}$
local bias	$p_{u\to v} = p^0_{u\to v} + \Delta$	$-\Delta/p^0_{u\to v}$
sticky	$p_{u\to v} = \alpha p^0_{u\to v}$	$1-\alpha$
barrier	$p_{u\to v} = 0$	1
door	$p_{u\to v} = p_{\text{pass}} p^0_{u\to v}$	$1 - p_{\text{pass}}$

表 3: 特征到 λ 的映射（$\eta_{u,v} = -\lambda_{u,v}p^0_{u\to v}$）。

4.4 FPT 生成函数与 AW 反演

考虑包含吸收态的主方程

$$\mathbf{p}_{t+1} = P\,\mathbf{p}_t, \qquad \mathbf{p}_0 = \mathbf{e}_{n_0}, \tag{19}$$

对时间做 z 变换 $\tilde{\mathbf{p}}(z) = \sum_{t\ge 0}\mathbf{p}_t z^t$ 得

$$\tilde{\mathbf{p}}(z) = (I - zP)^{-1}\mathbf{p}_0. \tag{20}$$

记累积到达概率 $F(t) = \mathbf{e}_{n_t}^\top \mathbf{p}_t$，则

$$\tilde{F}(z) = \mathbf{e}_{n_t}^\top (I - zP)^{-1}\mathbf{p}_0. \tag{21}$$

由 $f(t) = F(t) - F(t-1)$（取 $F(-1) = 0$）得到 PMF 的生成函数

$$\tilde{f}(z) = (1-z)\tilde{F}(z) = (1-z)\,\mathbf{e}_{n_t}^\top (I - zP)^{-1}\mathbf{p}_0. \tag{22}$$

本文保留两者记号：$\tilde{F}$ 为 CDF 的生成函数，$\tilde{f}$ 为 PMF 的生成函数（AW 反演使用 $\tilde{f}$）。Exact recursion 的时域表达为

$$f(t) = r^\top Q^{t-1} p_0, \quad t \geq 1, \tag{23}$$

因此生成函数可写为

$$\tilde{f}(z) = \sum_{t\geq 1} f(t) z^t = z\, r^\top (I - zQ)^{-1} p_0. \tag{24}$$

另一方面，由 renewal 关系亦有

$$\tilde{f}_{n_0 \to n_t}(z) = \frac{\tilde{P}_{n_0}(n_t, z)}{\tilde{P}_{n_t}(n_t, z)}, \tag{25}$$

两者等价：前者以 transient 子矩阵 Q 表达，后者以无吸收 propagator 表达。随后采用 Abate–Whitt (AW) 数值反演将 z 域系数化：

$$f(t) \approx r^{-t} \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \tilde{f}(z_k)\, e^{-2\pi i k t/m}, \qquad z_k = r\, e^{2\pi i k/m}, \quad t = 1, \ldots, t_{\max}^{\mathrm{AW}}. \tag{26}$$

本文选取 $m = \mathrm{pow2}(\mathrm{oversample} \cdot (t_{\max}^{\mathrm{AW}} + 1))$，并设 $r^m = 10^{-\mathrm{r_pow10}}$，与仓库内 AW 设置保持一致。其中 r 越接近 1，截断误差越小但数值更敏感；r 过小则会放大截断误差，本文沿用自动选参策略以平衡稳定性与精度。

实现流程（Algorithm box）

1. 构建无缺陷 A 的谱分解（反射边界），得到 $\tilde{P}^e(n, z)$ 的显式模态和。
2. 由缺陷列表构造 $H(z)$ 与向量 $\mathbf{a}, \mathbf{b}$，解线性系统得到 $\tilde{P}(n, z)$。
3. 用 renewal 公式 $\tilde{f}(z) = \tilde{P}_{n_0}(n_t, z)/\tilde{P}_{n_t}(n_t, z)$ 得到生成函数。
4. 对 $z_k = re^{2\pi i k/m}$ 采样并用 AW 反演得到 $f(t)$。
5. 与 exact recursion/MC 对比误差，并记录为指标 JSON。

4.5 AW vs exact recursion：原理与速度对比

方法原理（含公式） 设 Q 为 transient 子矩阵，r 为从 transient 进入吸收态的概率向量，p_0 为起点分布。Exact recursion 通过时域递推

$$p_{t+1} = Q p_t, \qquad f(t) = r^\top p_t, \quad t \geq 1,$$

并可写为闭式

$$f(t) = r^\top Q^{t-1} p_0, \qquad F(t) = 1 - \mathbf{1}^\top Q^t p_0.$$

因此在给定 $t_{\max}$ 时得到确定性 PMF（数值误差仅来自浮点运算与截断）。AW 则先在 z 域构造生成函数

$$\tilde{f}(z) = z\, r^\top (I - zQ)^{-1} p_0 = \frac{\tilde{P}_{n_0}(n_t, z)}{\tilde{P}_{n_t}(n_t, z)},$$

再由 Cauchy 积分提取系数：

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=r} \frac{\tilde{f}(z)}{z^{t+1}}\, dz \approx r^{-t} \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \tilde{f}(z_k) e^{-2\pi i k t/m}.$$

复杂度与适用性 Exact recursion 的时间复杂度为 $O(T|E|)$（$T = t_{\max}$，$|E|$ 为非零转移数），内存 $O(|E|)$，对大多数中等尺度参数扫描更稳健。AW 每个 z 需解 $M \times M$ 线性系统（M 为 defect 数），总体 $O(mM^3)$，FFT 的 $O(m \log m)$ 通常不占主导；当 M 很小时，AW 在长时间窗口上更具优势。AW 的 z_k 采样天然可并行，而 Exact recursion 迭代性强但实现简单、数值稳定。

准确性说明 Exact recursion 在给定 $t_{\max}$ 内是“确定性精确”的（仅有浮点舍入误差），本报告以其作为基准。AW 属于数值反演，误差来自有限 m 的离散化、r 的选择以及 $\tilde{f}(z)$ 线性求解的数值条件；增大 m 或调整 r 可系统降低误差。本报告中 AW 与 exact 的 L^1 误差约 10^{-14}（表 5），因此两者在数值精度意义下“同等准确”。

速度对比设置 选取本报告双峰构造 R1、R7、C3、R6、NB4、NB5 作为速度基准，使用各自 $t_{\max}$；AW 取 oversample=4、r_pow10=12，对应 $m = 8192/16384/65536/131072$。为避免完整 AW 过慢，先在 $n_z = 32$ 个 z_k 上计时得到单点耗时，再估计

$$t_{\mathrm{AW}} \approx t_{\mathrm{setup}} + (m/n_z)\, t_{\mathrm{eval}} + t_{\mathrm{FFT}}.$$

同时加入低缺陷对照 S0（全网格无内墙，仅 1 个 sticky 与 1 个 door，$M = 9$），可完整测量 AW 全流程，用于展示 AW 的可行区间。其参数如下：S0 的参数为 $N = 30$、start=(1,15)、target=(30,15)、$g_x = -0.4$，并设置 sticky$(15, 15, \alpha = 0.1)$ 与 door$(20, 15) \leftrightarrow (21, 15)$、$p_{\mathrm{pass}} = 0.05$。计时脚本为 `code/benchmark_aw_exact.py`（单线程），结果见表 4。

case	$t_{\max}$	M	Exact (s)	AW-inv (ms)	AW-total (s)
R1	1500	973	0.057	4.71	633 (10.6 min)
R7	2000	754	0.080	0.23	314 (5.2 min)
C3	3000	1004	0.106	0.45	1483 (24.7 min)
R6	12000	988	0.421	2.02	4862 (81.0 min)
NB4	20000	936	0.692	3.91	16786 (279.8 min)
NB5	20000	936	0.698	4.76	15946 (265.8 min)
S0	5000	9	0.056	0.97	1.44 (full AW)

表 4: AW 与 exact recursion 的速度对比（M 为 defect 数；R1/R7/C3/R6/NB4/NB5 为 AW 估计总耗时，S0 为完整 AW 实测）。

结论（速度优先） 对走廊/门构造（$M \approx 7.5 \times 10^2$–$10^3$），Exact recursion 在 $t_{\max} \le 2 \times 10^4$ 内用时 0.06–0.70 s；AW 估计总耗时为 5–280 min，瓶颈来自每个 z 的线性求解。即便 R7（$M = 754$）和 C3（$M = 1004$）这样的“小走廊”，AW 估计总耗时仍达 5.2 min 与 24.7 min，但 AW 反演本身仅 0.23–4.76 ms。S0（$M = 9$）可完整测量 AW 全流程并进入秒级（1.44 s），但仍慢于 Exact（0.056 s）；若缺陷更少或可并行/加速线性求解，AW 才可能占优。总体上，若需参数扫描或中等 $t_{\max}$，Exact recursion 更稳健；若缺陷极少且需要长尾，AW 更具优势。

5 数值基线：Exact/flux 递推与 MC

Exact 递推在 transient 空间计算 $f(t) = r^\top Q^{t-1} p_0$（式 23），作为确定性基准，并与 AW 反演及 MC 直方图叠加对比（图 7、15、23、31、39、47、55、63）。MC 轨迹同时按 “快/慢通道” 分类，以解释双峰来源。

峰谷指标定义 对平滑后的 $f(t)$，取两个局部主峰位置 t_{p1}, t_{p2} 及其间最小值 t_v，并定义

$$h_1 = f(t_{p1}), \quad h_2 = f(t_{p2}), \quad \text{peak ratio} = \frac{\min(h_1, h_2)}{\max(h_1, h_2)}, \quad \text{valley ratio} = \frac{f(t_v)}{\min(h_1, h_2)}. \tag{27}$$

平滑窗口采用 9，峰谷指标与通道权重均由统一脚本输出并写入 metrics JSON，保证一致性。

case	L^1 error	L^∞ error
R1	2.55×10^{-15}	2.88×10^{-17}
R7	1.59×10^{-14}	1.10×10^{-16}
C3	4.93×10^{-15}	2.31×10^{-17}
R6	6.77×10^{-15}	1.32×10^{-17}
NB4	3.11×10^{-15}	3.12×10^{-18}
NB5	2.53×10^{-15}	2.53×10^{-18}
S1	3.08×10^{-14}	9.22×10^{-17}
S2	2.21×10^{-14}	6.32×10^{-17}

表 5: AW 反演与 exact recursion 在 $t \le t^{\mathrm{AW}}_{\max}$ 内的误差（L^1 与 L^∞）。

上述误差表明，AW 在截断窗口内可视为 exact recursion 的数值验证，并与 MC 叠加曲线一致。

6 经典构造与机制

下文保留八类代表构造（R1、R7、C3、R6、NB4、NB5、S1、S2）作为正文展示。

6.1 R1：短直走廊 vs 顶部 U 形绕行

机制对应 “双通道几何绕行” 的最简构造：底部短直走廊为 fast，上方 U 形绕行为 slow。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (-0.20, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)。走廊几何为主走廊 $y = 30$, $x = 10..50$，绕行支路由 $x = 10$, $y = 1..30$、$y = 1$, $x = 10..50$、$x = 50$, $y = 1..30$ 组成。局部 bias 在主走廊取 $\delta = 0.95$，分叉点 $(10, 30)$ 取 $\delta = 0.6$，绕行段按 U/R/D 方向取 $\delta = 0.95$。通道判据为：命中前未进入绕行支路（未到达 $y = 1$ 或 $x = 10, 50$ 的上侧段）记为 fast，进入绕行支路记为 slow。峰谷指标为 $t_{p1} = 136$, $t_v = 269$, $t_{p2} = 424$，peak ratio= 0.451，valley ratio= 0.035，$P_{\mathrm{fast}} = 0.321$。

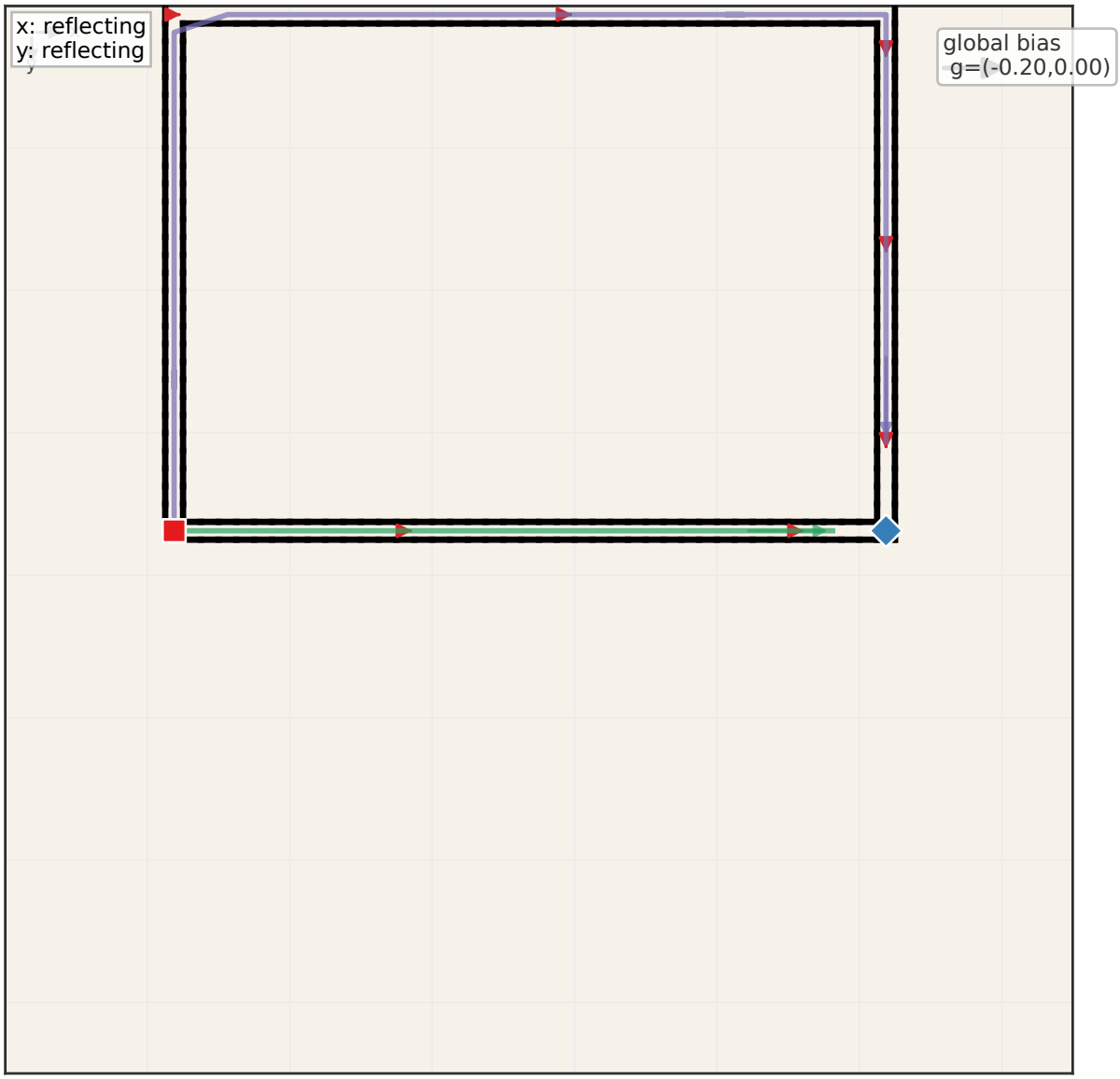


图 3: R1：环境示意图。符号语法与图 2 一致。

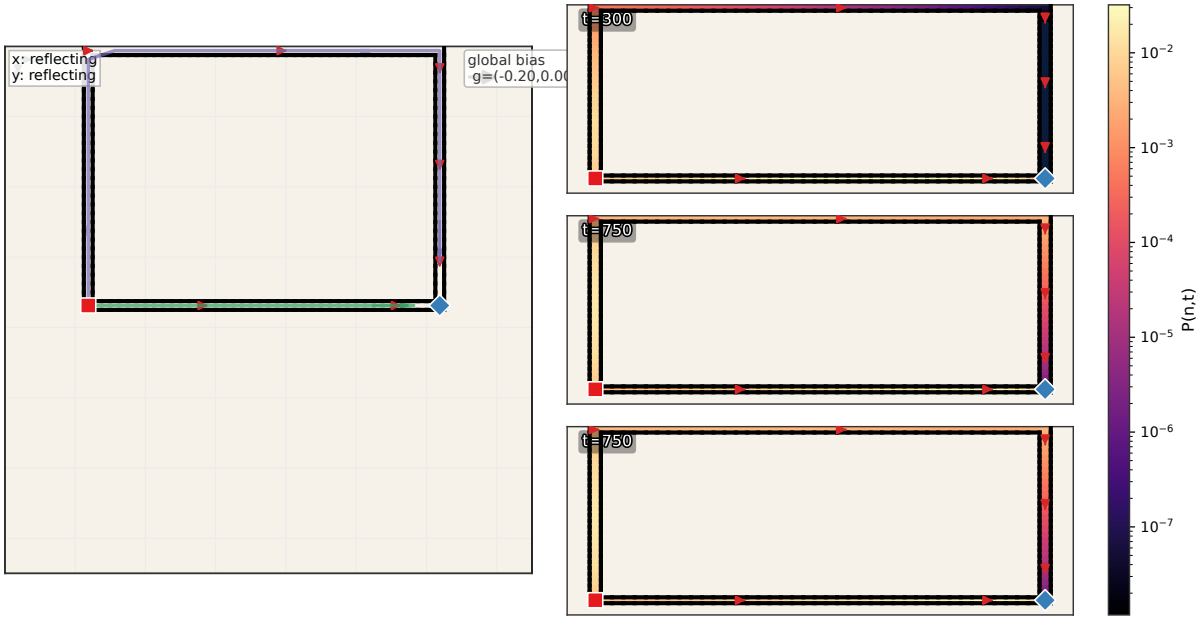


图 4: R1：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

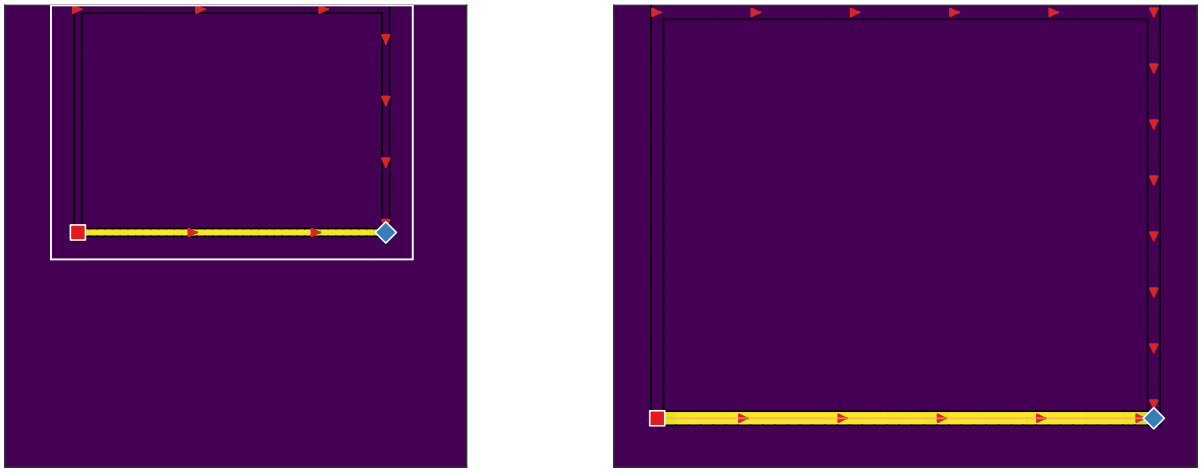


图 5: R1：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

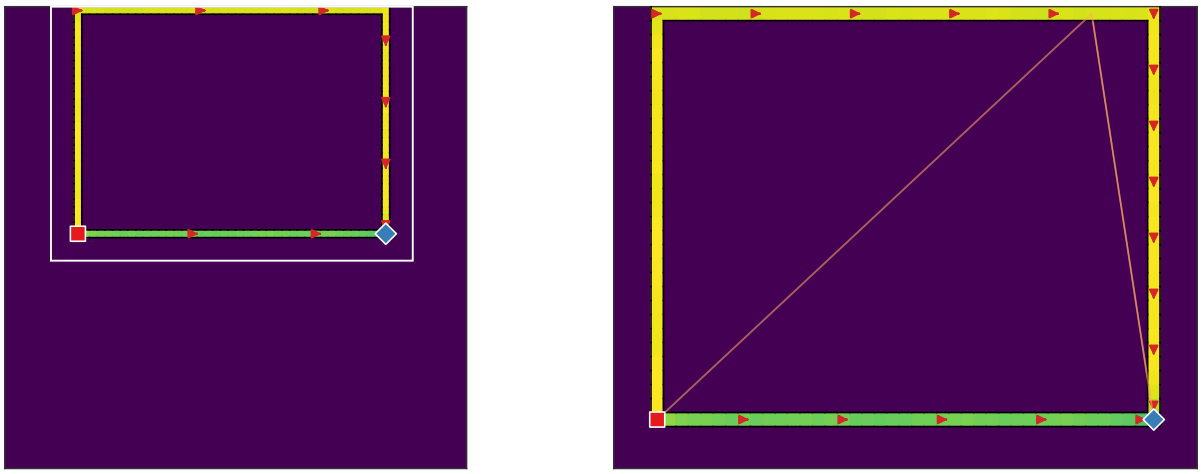


图 6: R1：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

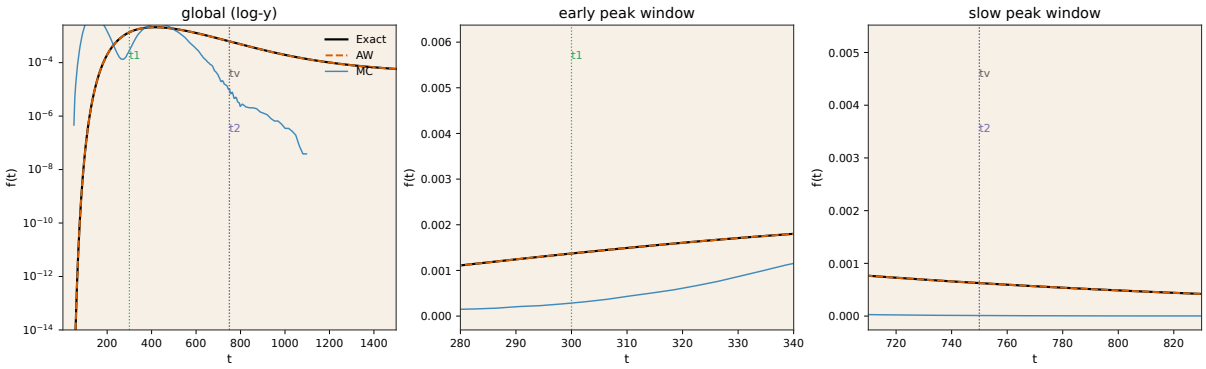


图 7: R1：FPT 多尺度图（全局 log + fast/slow 局部，Exact/AW/MC 叠加）。

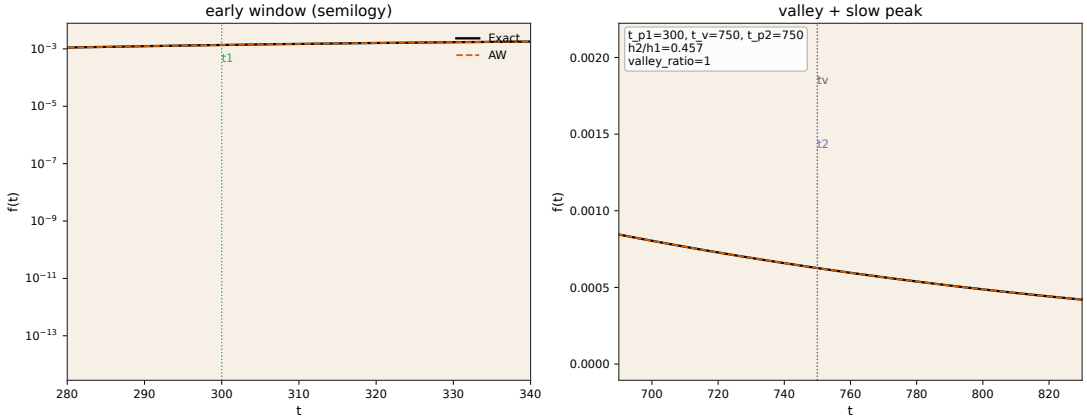


图 8: R1：峰谷放大图（双峰判据）。

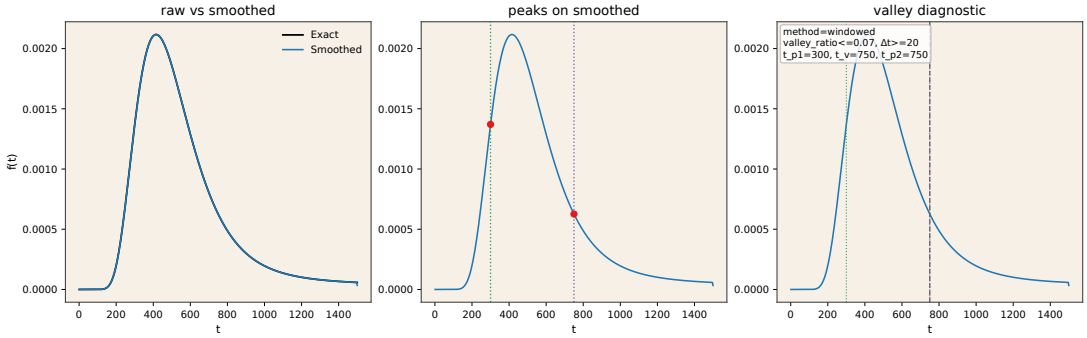


图 9: R1：双峰诊断图（平滑与主峰检测）。

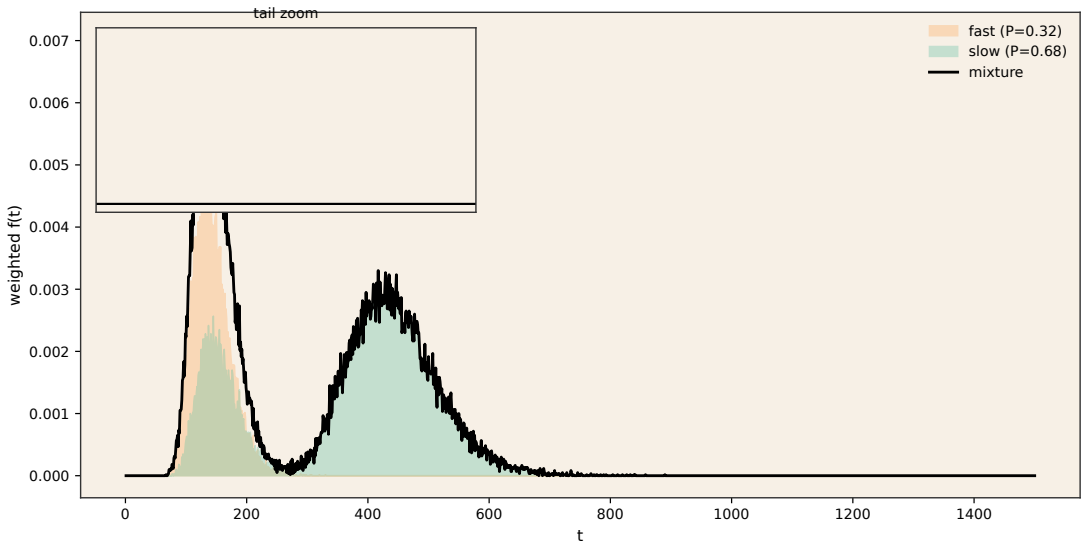


图 10: R1：通道分解与混合。

6.2 R7：半透膜孔道 vs 绕行慢通道

R7 在主走廊中设置单个半透门作为快速孔道，同时提供 U 形绕行作为慢通道，模拟 “孔道 + 绕行” 的物理结构。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (-0.20, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)。仅允许在主走廊 $y = 30$, $x = 10..50$ 与绕行支路（左竖 $x = 29$, $y = 1..30$、顶边 $y = 1$, $x = 29..31$、右竖 $x = 31$, $y = 1..30$）上运动，其余由反射墙封闭。半透门位于 $(30, 30) \leftrightarrow (31, 30)$，$p_{\text{pass}} = 0.8$；局部 bias 仅沿走廊/支路设置（主走廊向右，左竖向上，顶边向右，右竖向下），$\delta = 0.95$。通道判据为：命中前到达绕行支路任一格点（$x = 29$ 或 $x = 31$ 的上段，或 $y = 1$ 的顶边段）即为 slow，否则仅沿 $y = 30$ 主走廊到达为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 140$, $t_v = 280$, $t_{p2} = 428$，peak ratio= 0.294，valley ratio= 0.066，$P_{\text{fast}} = 0.248$。

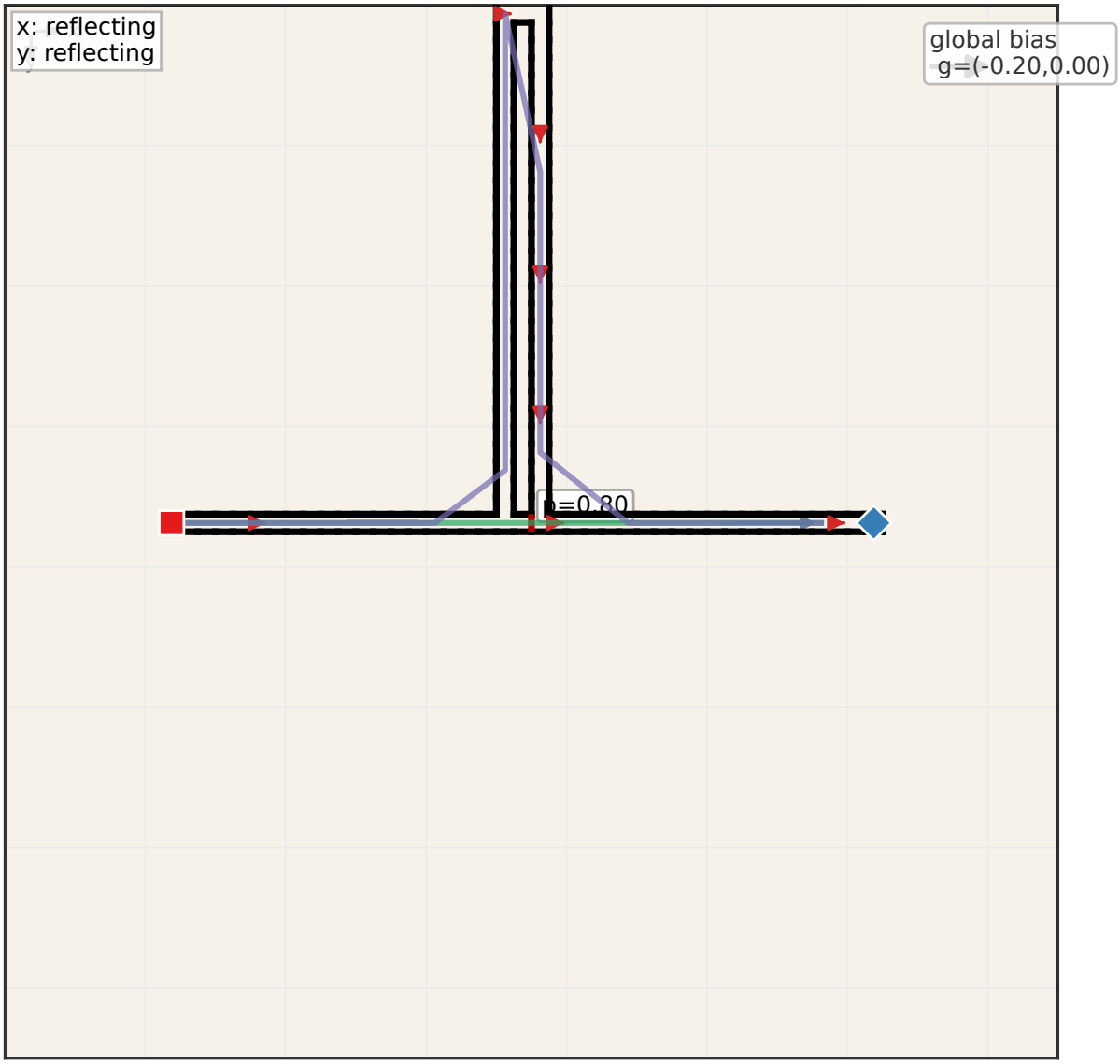


图 11: R7：环境示意图。

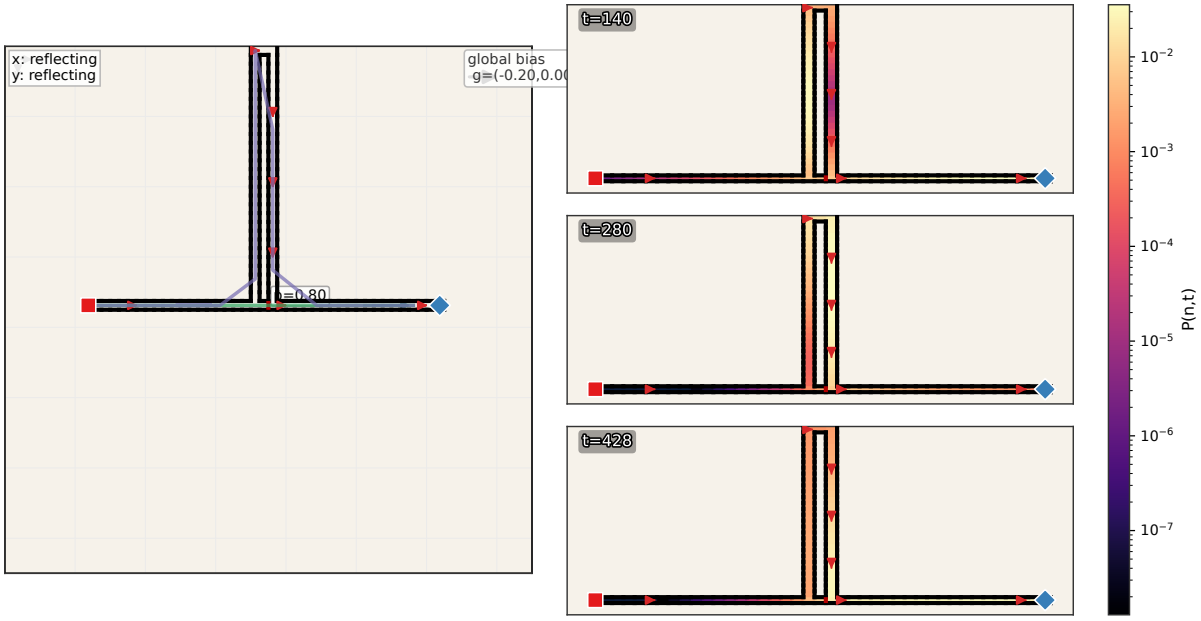


图 12: R7：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

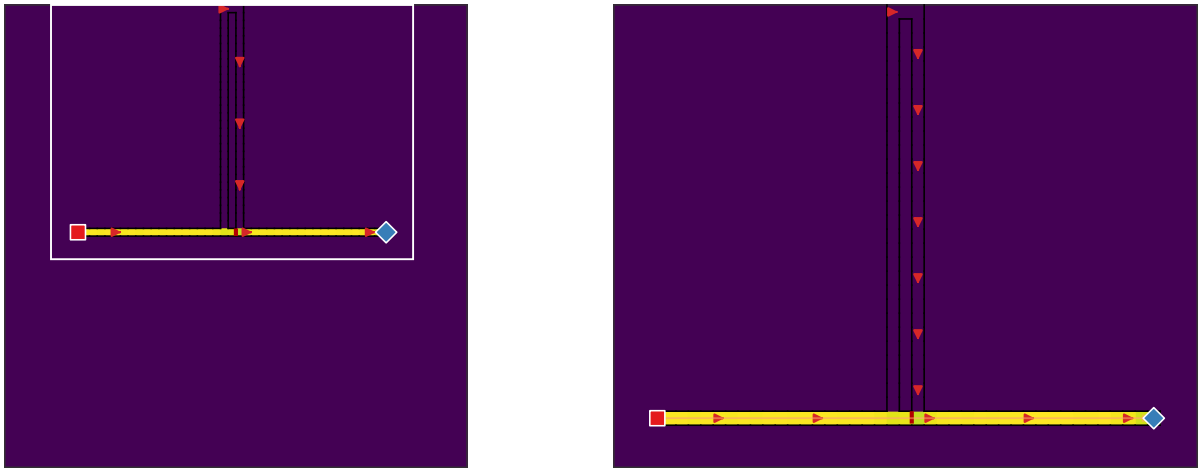


图 13: R7：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

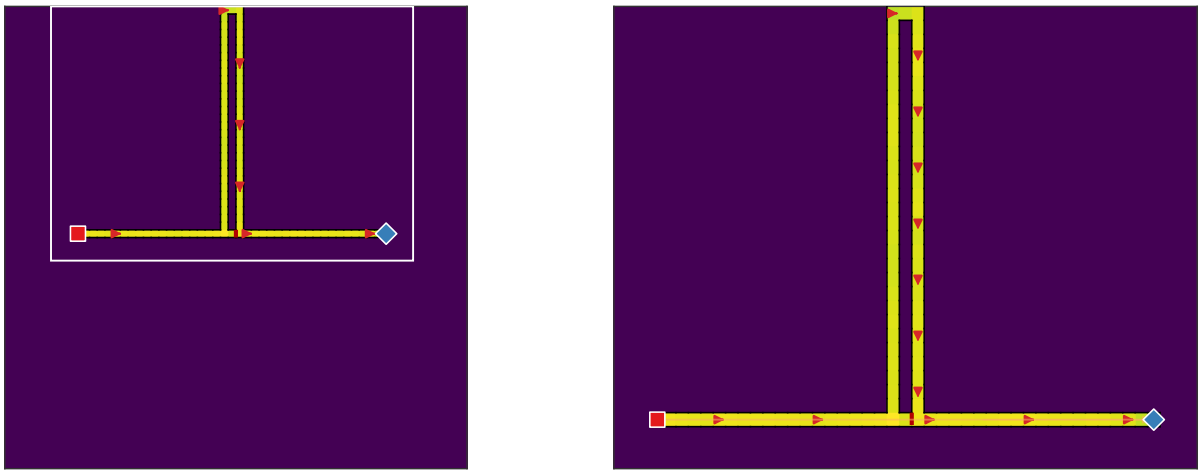


图 14: R7：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

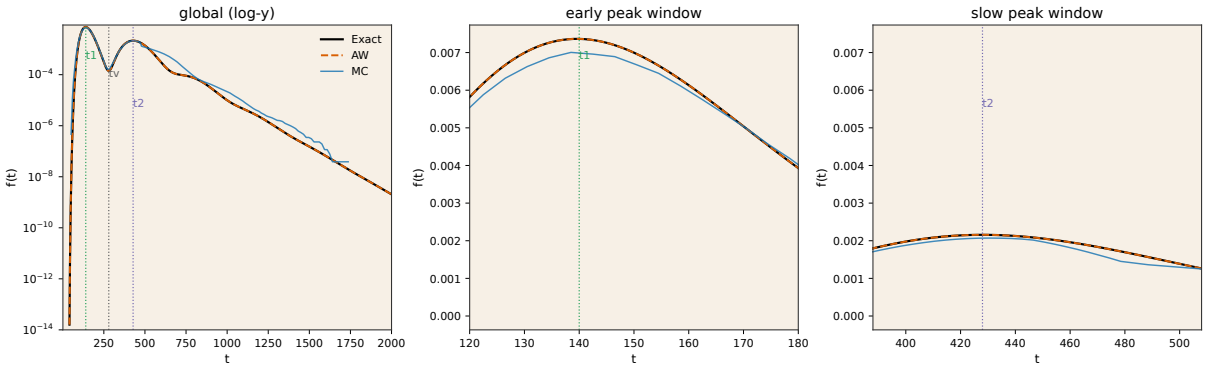


图 15: R7：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

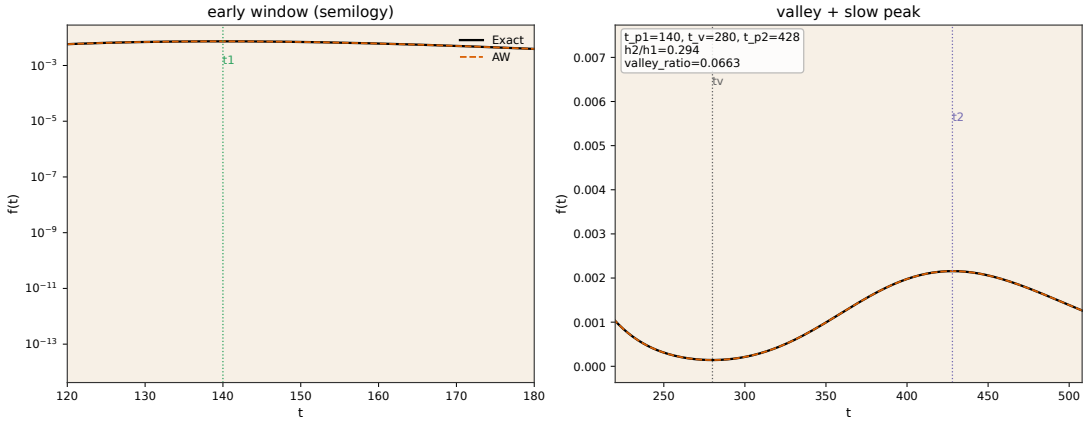


图 16: R7：峰谷放大图。

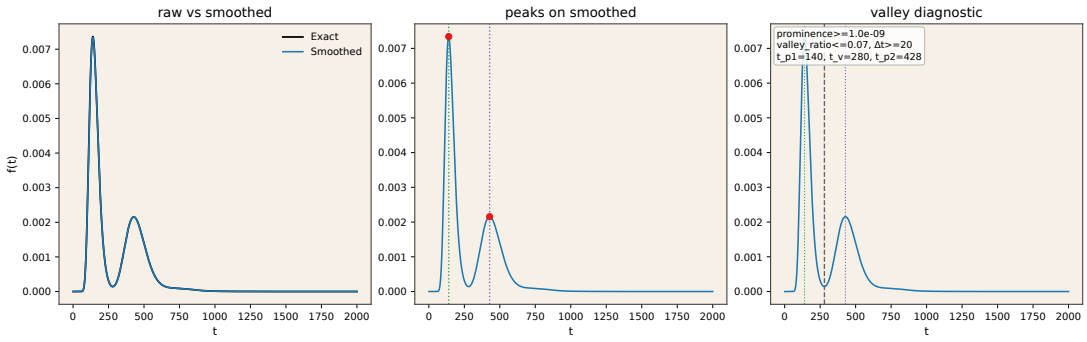


图 17: R7：双峰诊断图。

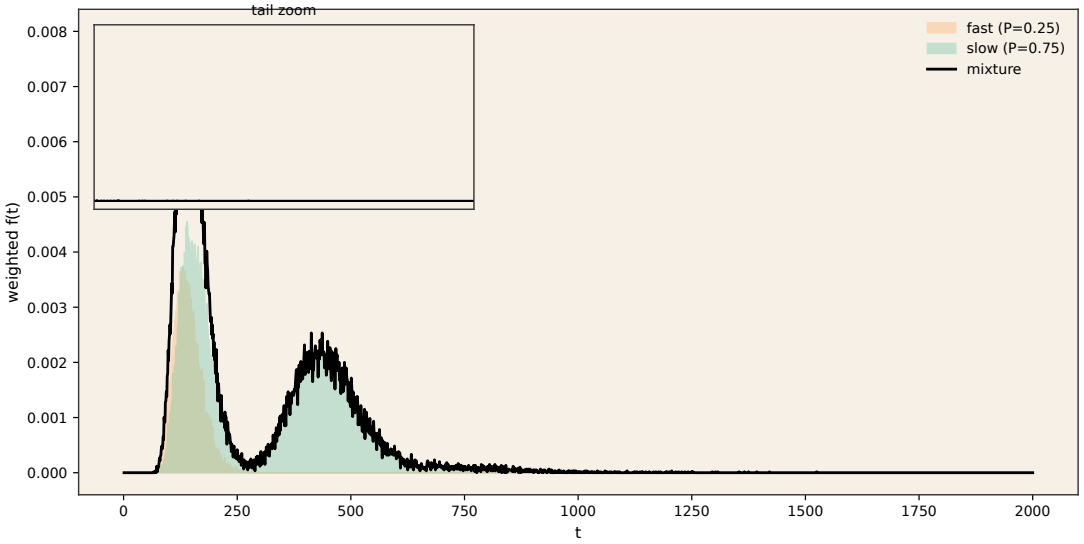


图 18: R7：通道分解与混合。

6.3 C3：局部主动运输轨道 vs 长 detour 回路

C3 在内部构造一条强 local bias 轨道（快通道），并引导错过入口的轨迹进入长 detour 回路（慢通道），模拟 “主动运输轨道 + 旁路回流” 的情形。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (-0.15, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)。仅允许在快轨道 $y = 29$, $x = 10..50$ 与慢回路（左竖 $x = 10$, $y = 30..60$、底边 $y = 60$, $x = 10..50$、右竖 $x = 50$, $y = 30..60$）内运动，并通过 $(10, 30) \leftrightarrow (10, 29)$ 与 $(50, 29) \leftrightarrow (50, 30)$ 连接到 start/target。局部 bias 在快轨道向右取 $\delta = 0.95$，慢回路按下/右/上方向取 $\delta = 0.55$，入口点 $(10, 30)$ 额外设置向下弱箭头 $\delta = 0.35$。通道判据为：命中前到达慢回路任一格点（$x = 10, y \geq 30$ 或 $x = 50, y \geq 30$ 或 $y = 60$）即为 slow，否则仅沿快轨道 $y = 29$ 到达为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 160$, $t_v = 388$, $t_{p2} = 702$，peak ratio= 0.231，valley ratio= 0.022，$P_{\text{fast}} = 0.293$。

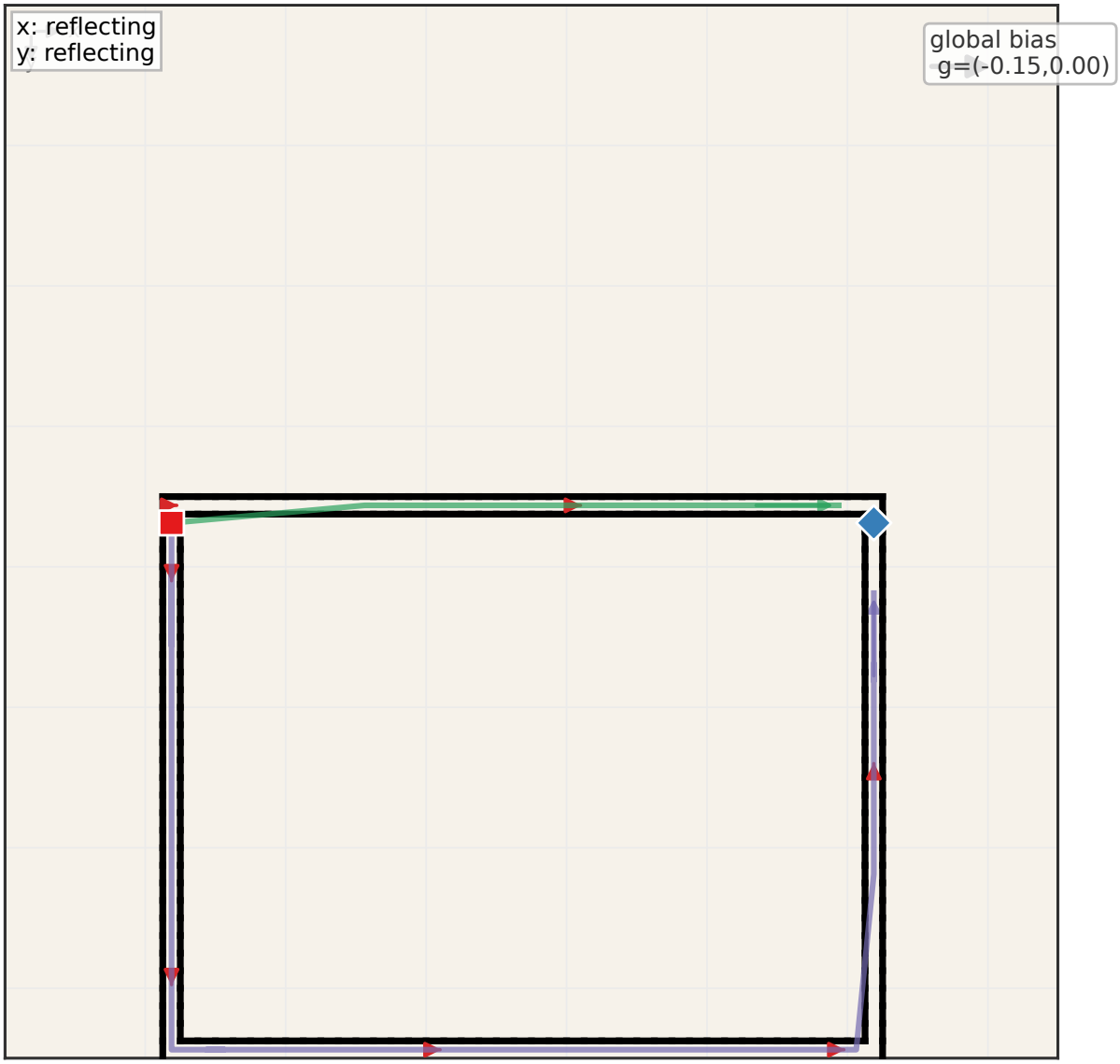


图 19: C3：环境示意图。

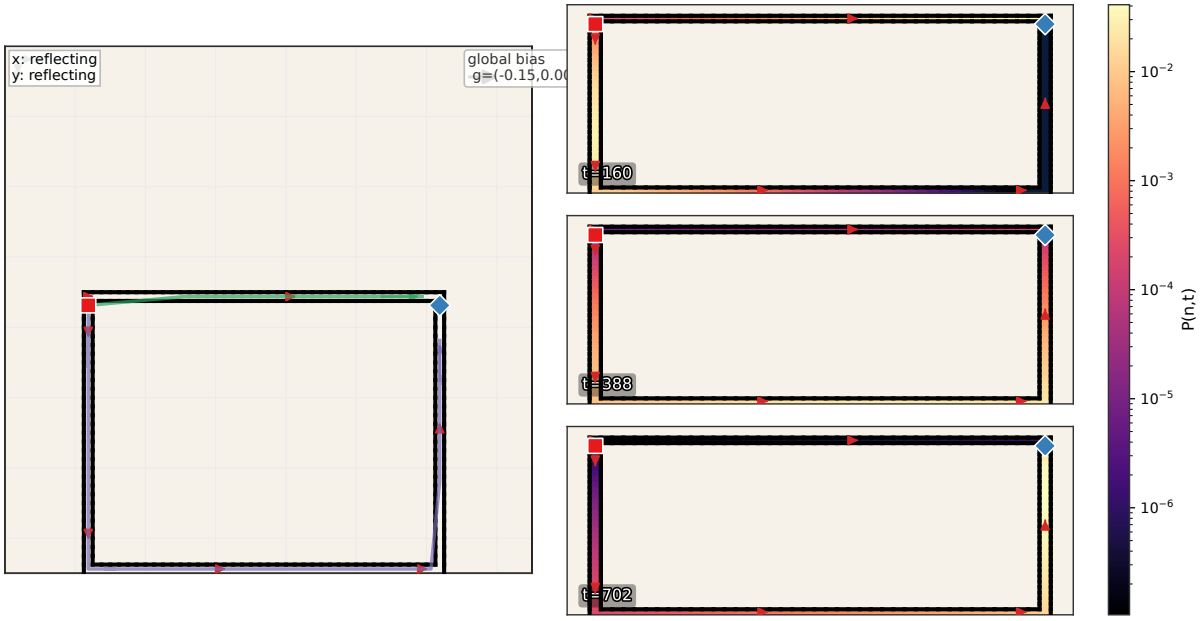


图 20: C3：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

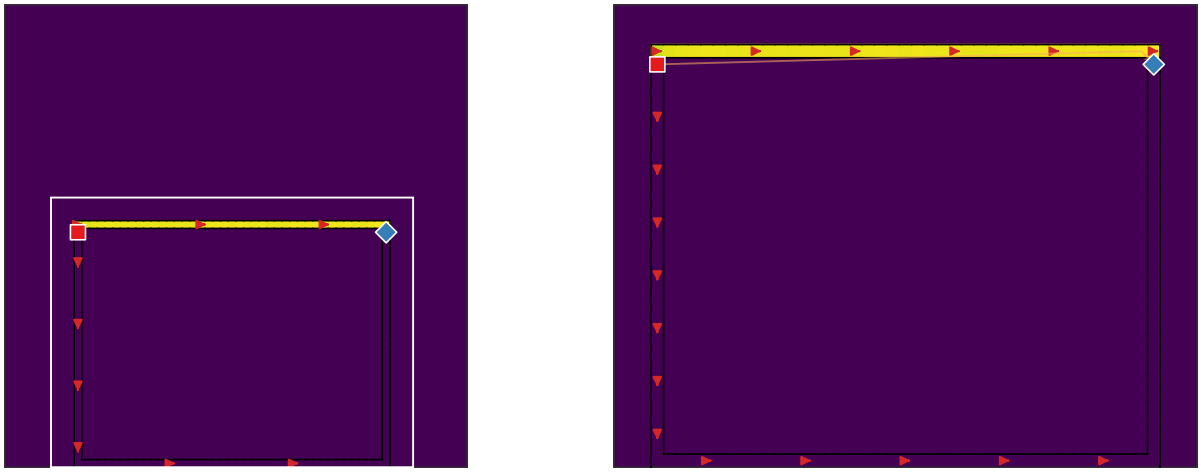


图 21: C3：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

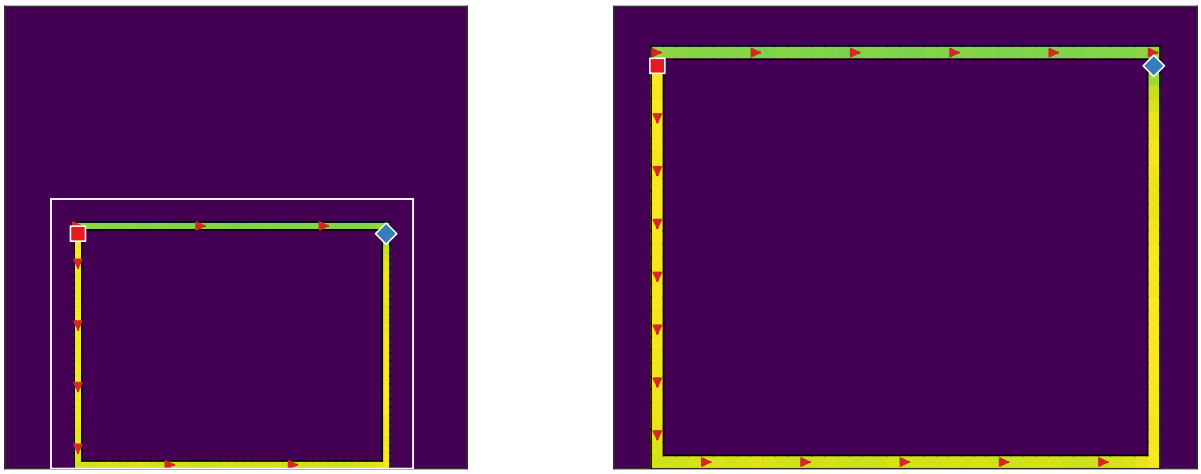


图 22: C3：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

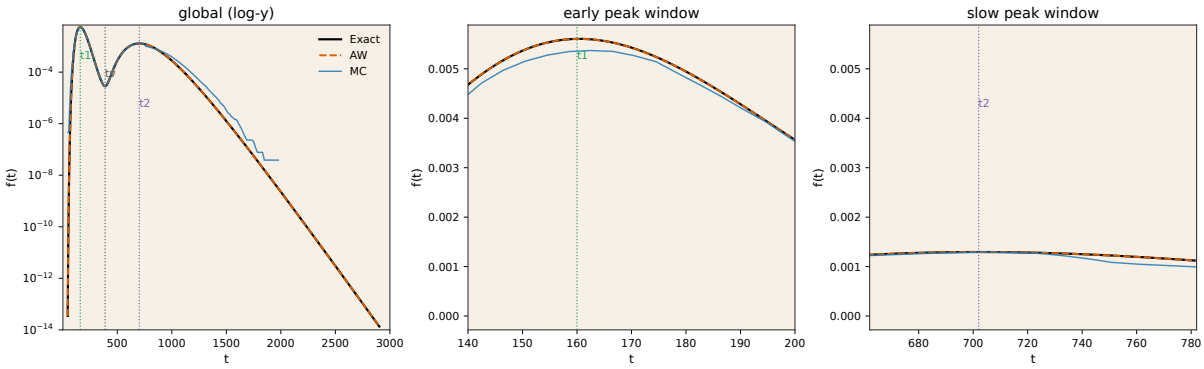


图 23: C3：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

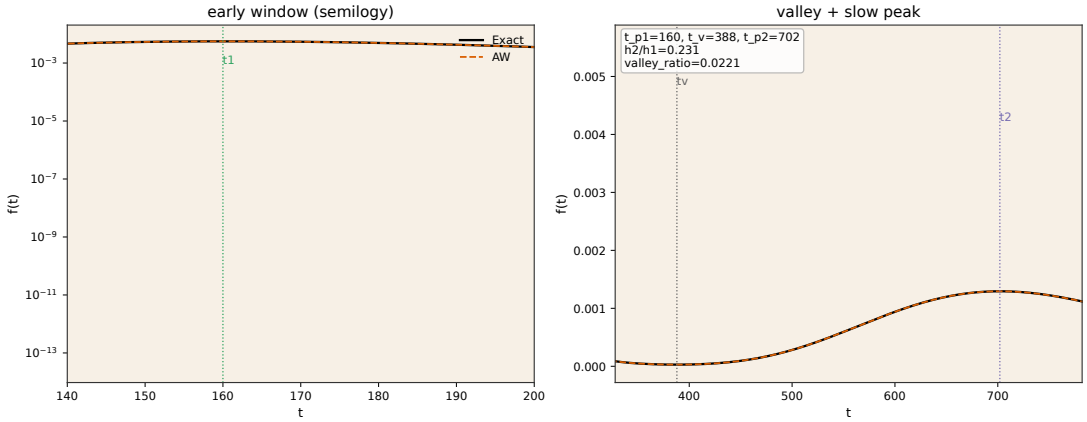


图 24: C3：峰谷放大图。

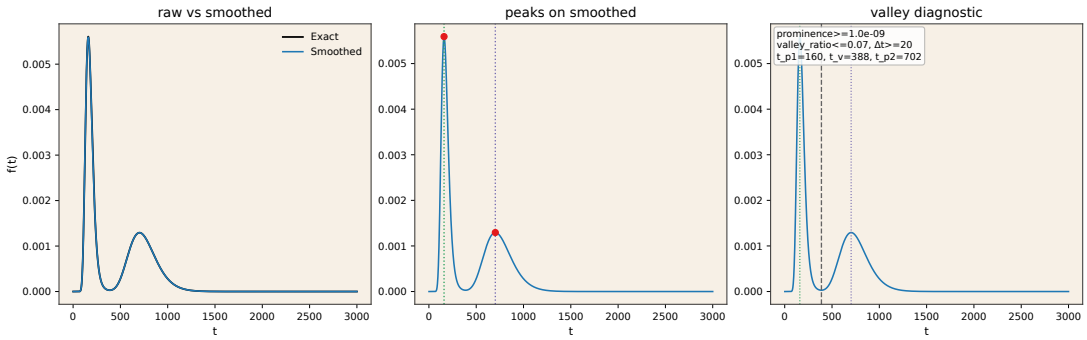


图 25: C3：双峰诊断图。

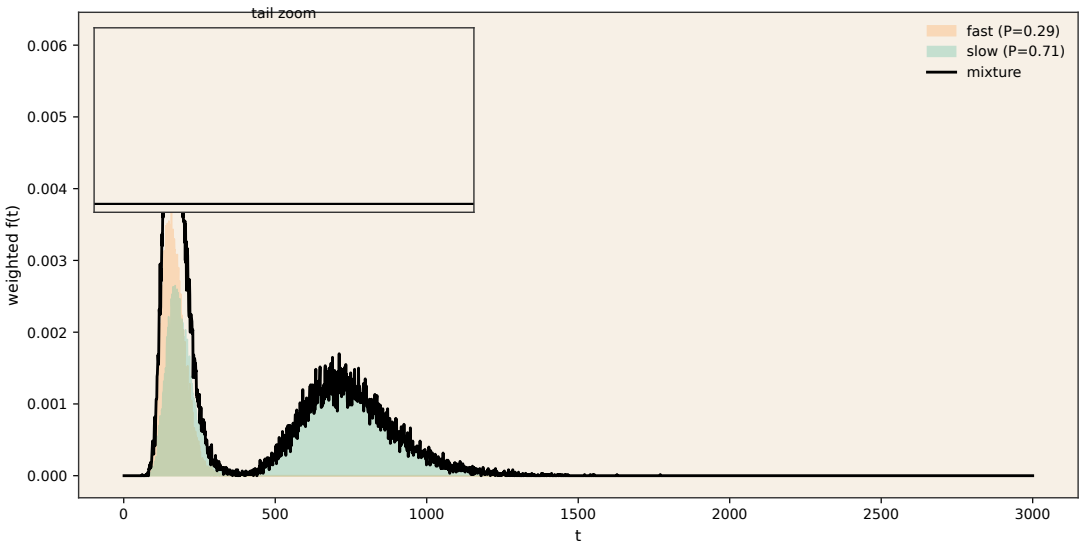


图 26: C3：通道分解与混合。

6.4 R6：并行车道 + door 阵列减速

R6 采用两条几何长度近似相等的车道，慢通道由 door 阵列提供动力学延迟。

Configuration Card 参数为 $N = 60$，$q = 0.8$，$g = (0, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)。仅允许在矩形回路内运动：水平车道 $y = 20$ 与 $y = 40$（$x = 10..50$）通过左右竖边 $x = 10, 50\,(y = 20..40)$ 连接，start/target 位于左右竖边中点。慢车道 $y = 40$ 的每一条水平边 $(x, 40) \leftrightarrow (x+1, 40)$ 设置 door，$p_{\text{pass}} = 0.1$；同时在车道与竖边沿行进方向施加局部 bias（水平向右 $\delta = 0.95$，竖边转向处 $\delta = 0.6$）。通道判据为：命中前到达 $y = 40$ 车道任一点即为 slow，未进入 $y = 40$ 而沿 $y = 20$ 车道到达为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 347$，$t_v = 1021$，$t_{p2} = 2160$，peak ratio= 0.141，valley ratio= 0.063，$P_{\text{fast}} = 0.498$。

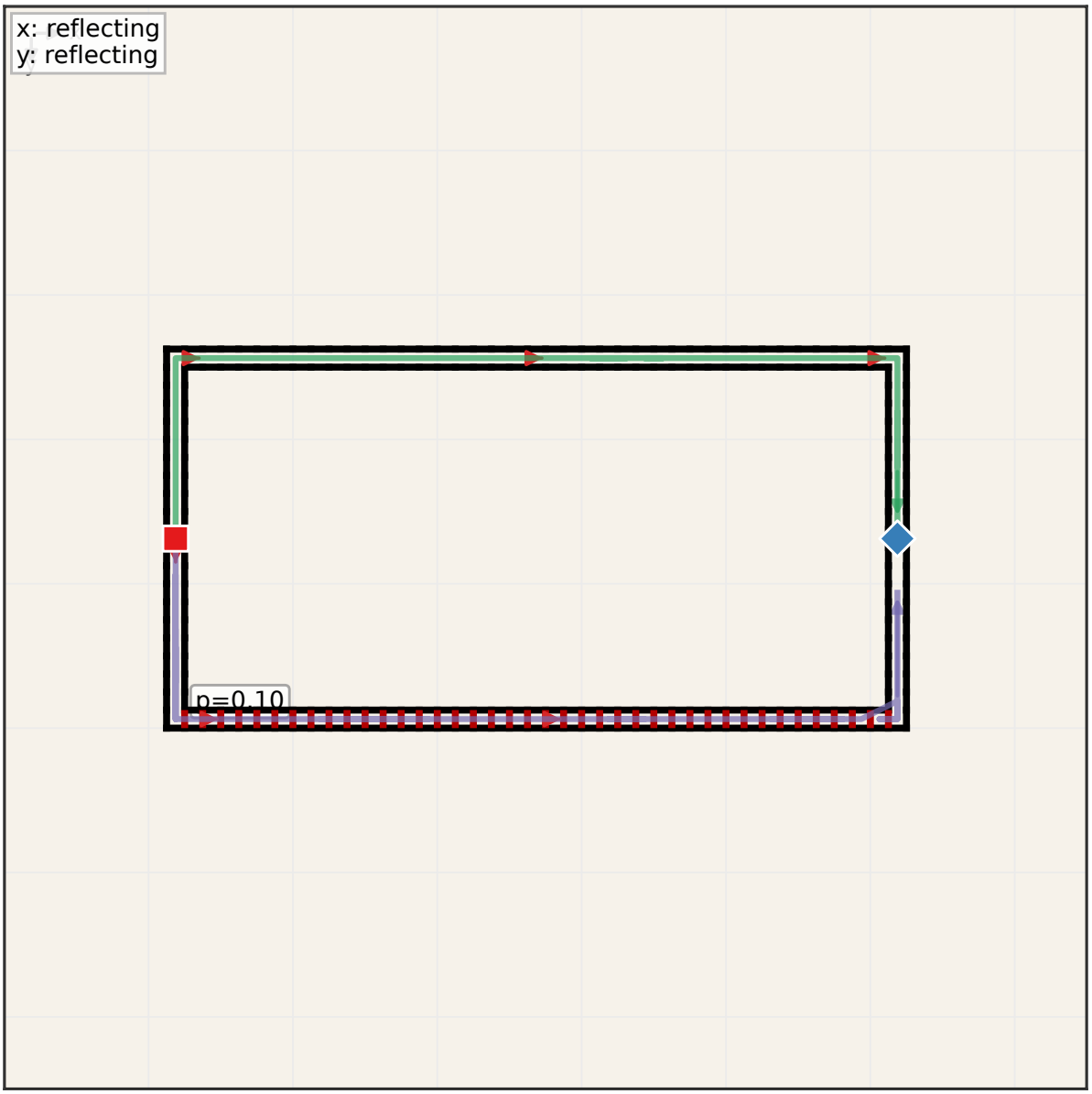


图 27: R6：环境示意图。

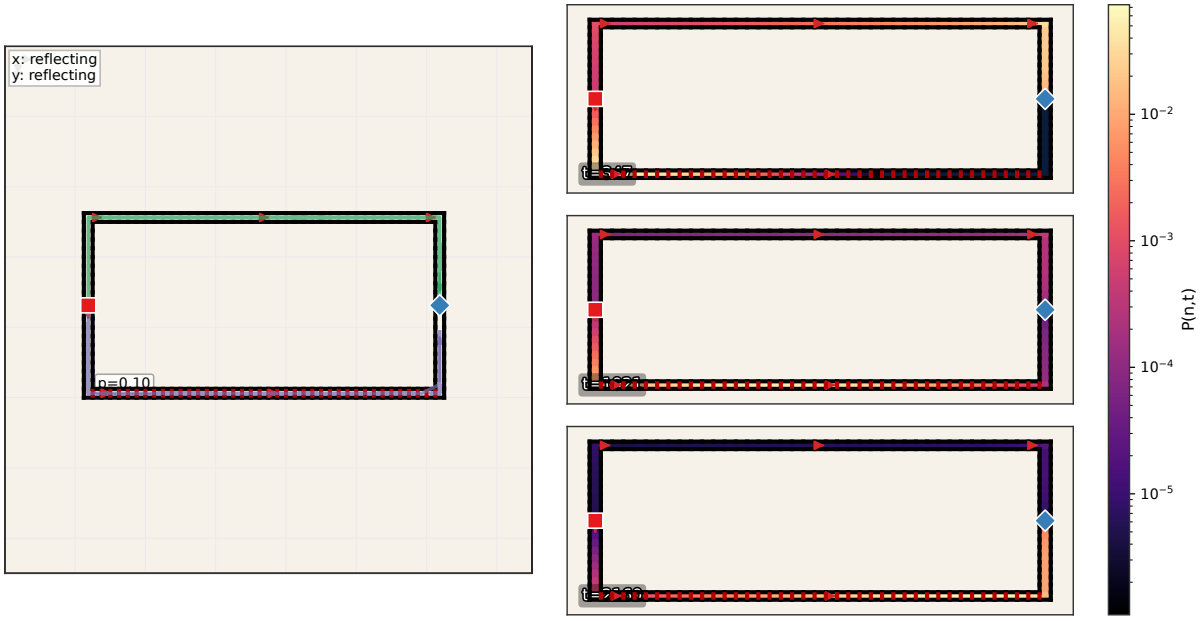


图 28: R6：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

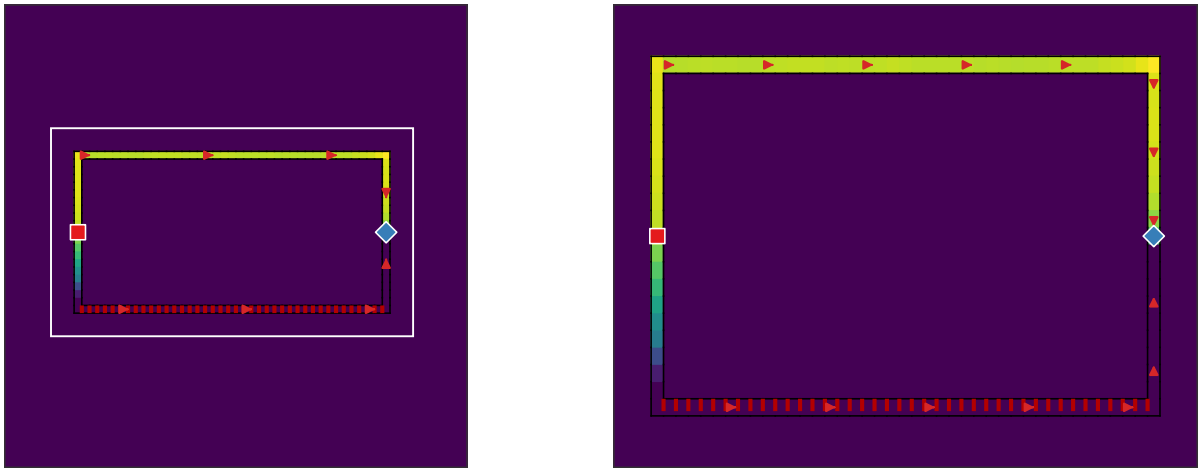


图 29: R6：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

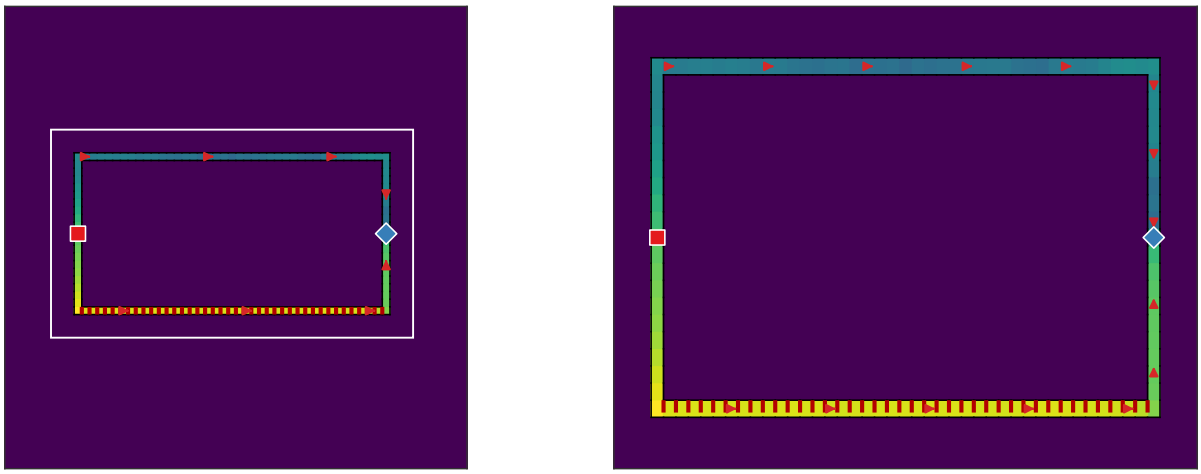


图 30: R6：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

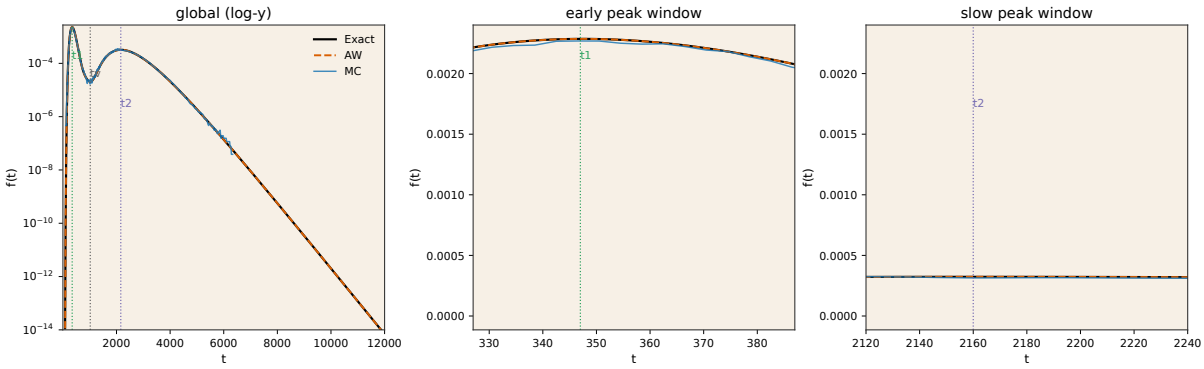


图 31: R6：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

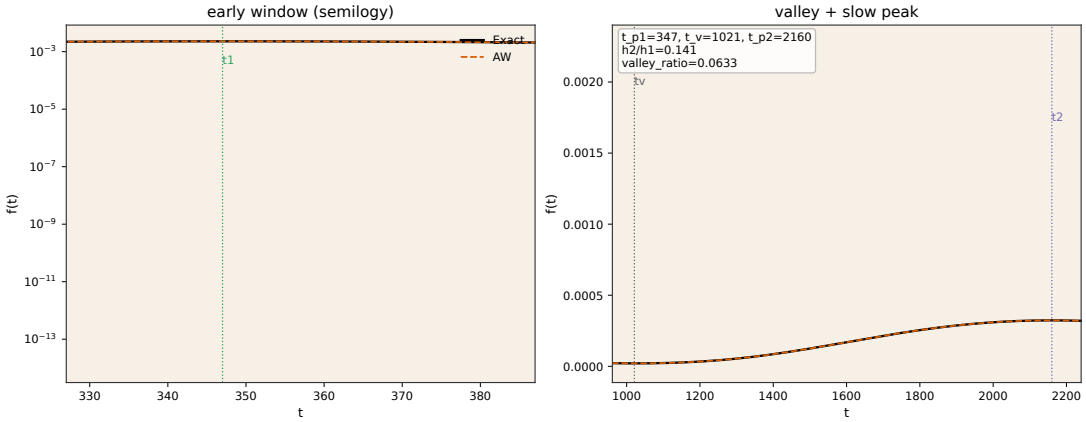


图 32: R6：峰谷放大图。

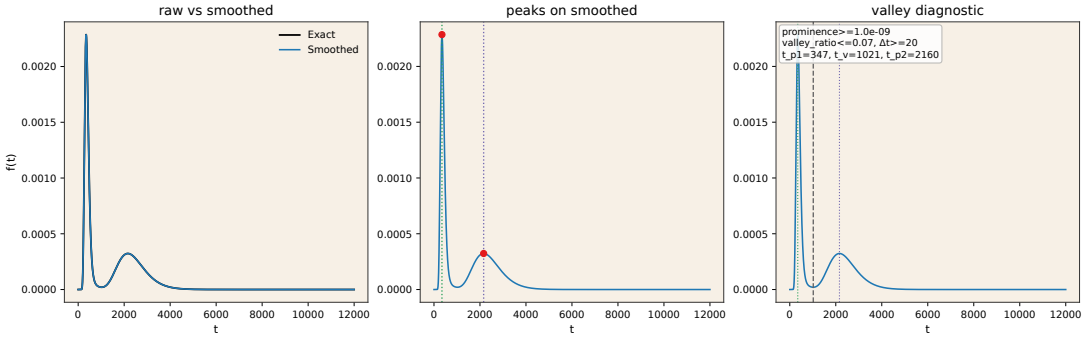


图 33: R6：双峰诊断图。

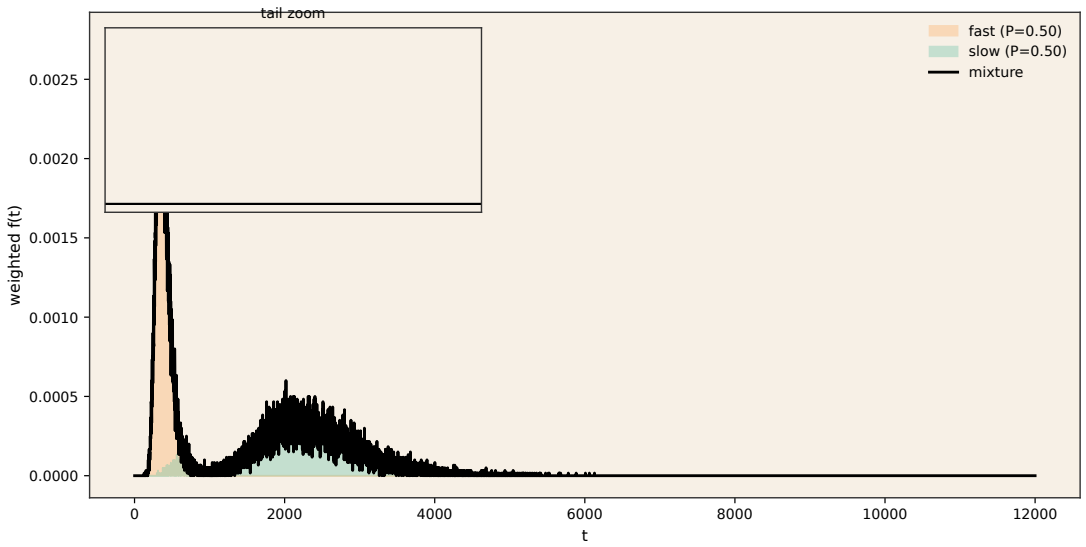


图 34: R6：通道分解与混合。

6.5 NB4：外边界顺时针“传送带”（无内部 barrier/door）

NB4 仅在外边界一圈施加 sticky 与顺时针 local bias，无内部墙/门；起点与目标沿边界逆向相邻，形成“逆向短路 vs 顺时针绕行”的深双峰。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (0.00, 0.00)$，边界全反射，start=(12,60)，target=(10,60)，全域可达且无内部 barrier/door。仅在外边界一圈设置 sticky（$x = 1..60$ 的 $y = 1, 60$ 以及 $y = 1..60$ 的 $x = 1, 60$），factor=0.2，并在边界施加顺时针 local bias（底边 R、右边 U、顶边 L、左边 D），$\delta = 0.63$，角点按边界方向统一。通道判据为：命中前到达顶边 $y = 1$ 的任意格点即为 slow（对应顺时针绕行到顶边），未触顶则在底边附近逆向短路到达为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 6$, $t_v = 389$, $t_{p2} = 642$，peak ratio= 0.932，valley ratio= 0.062，$P_{\text{fast}} = 0.104$。



图 35: NB4：环境示意图。

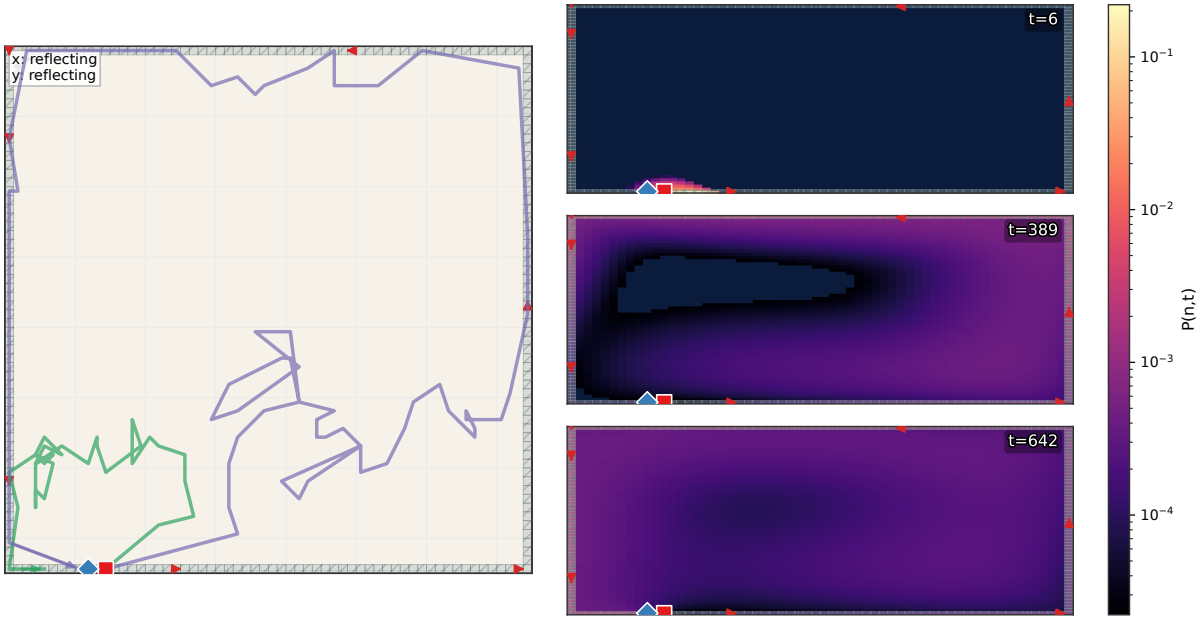


图 36: NB4：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

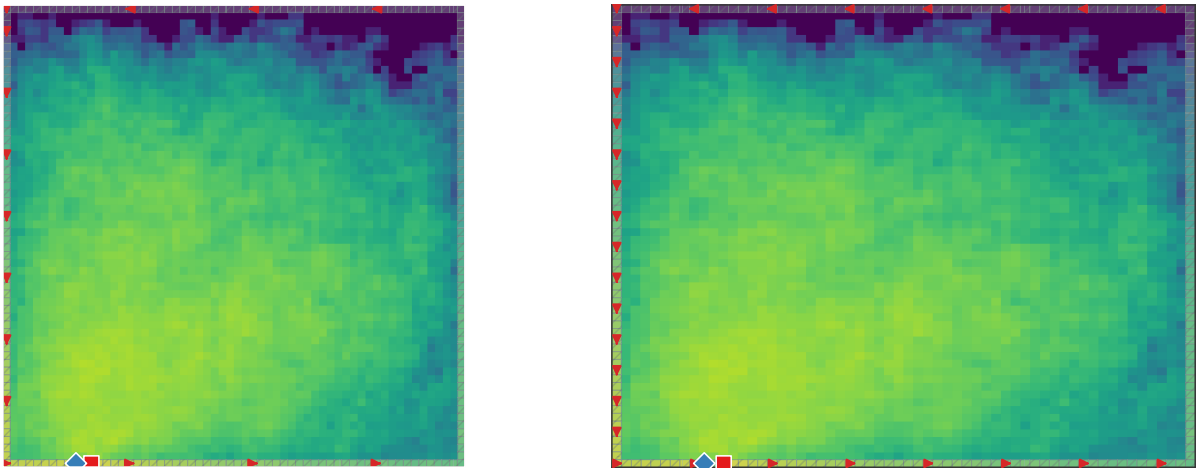


图 37: NB4：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

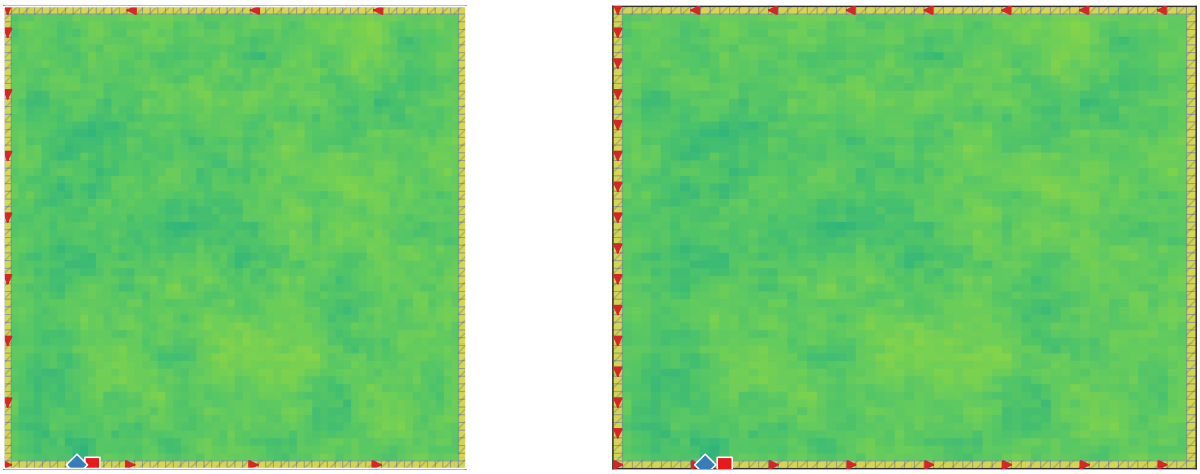


图 38: NB4：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

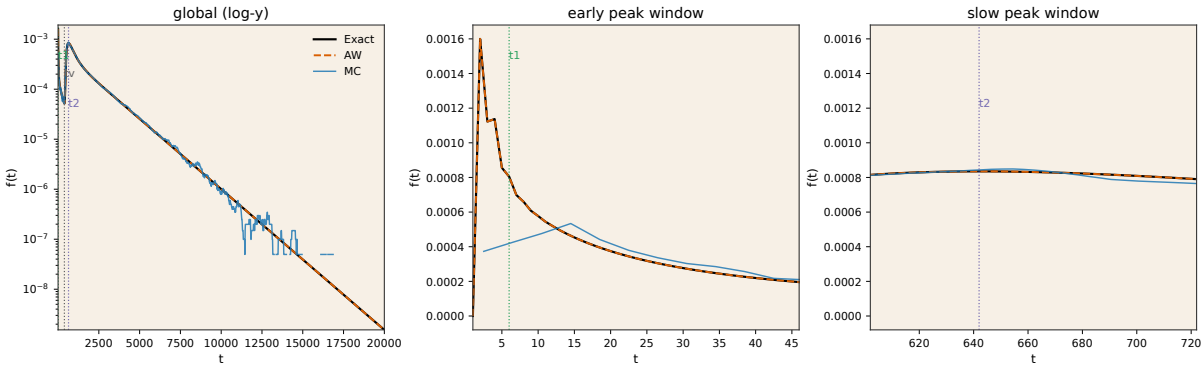


图 39: NB4：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

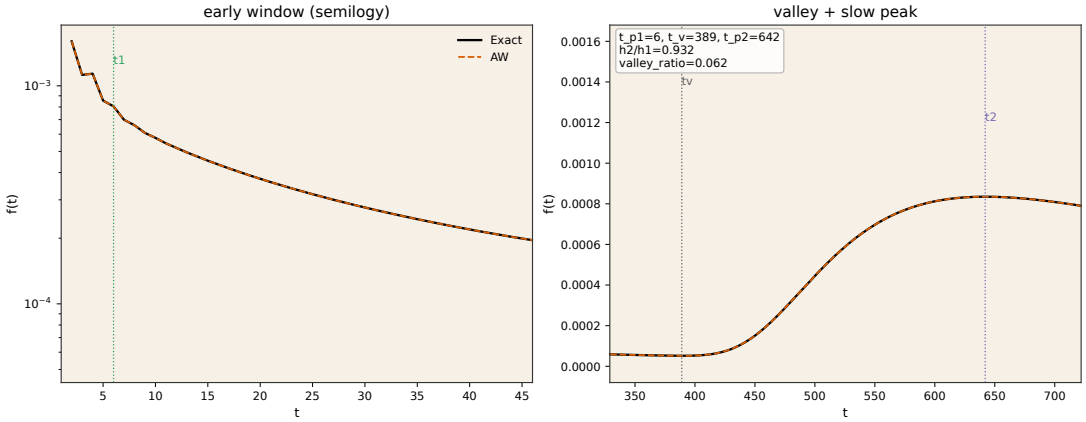


图 40: NB4：峰谷放大图。

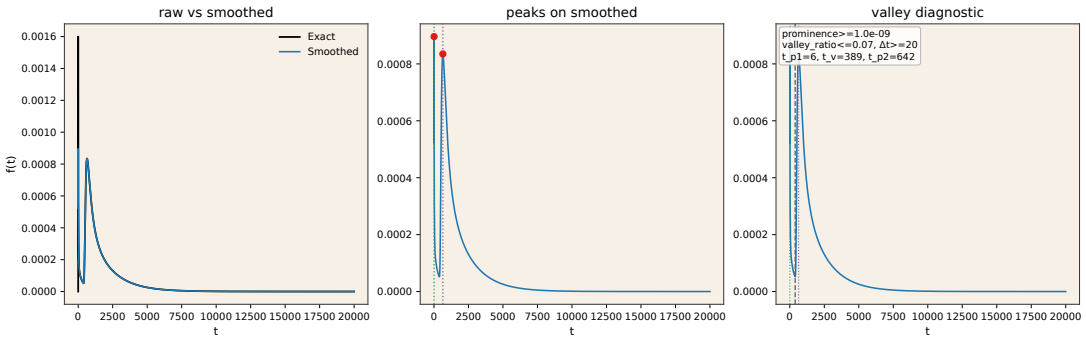


图 41: NB4：双峰诊断图。

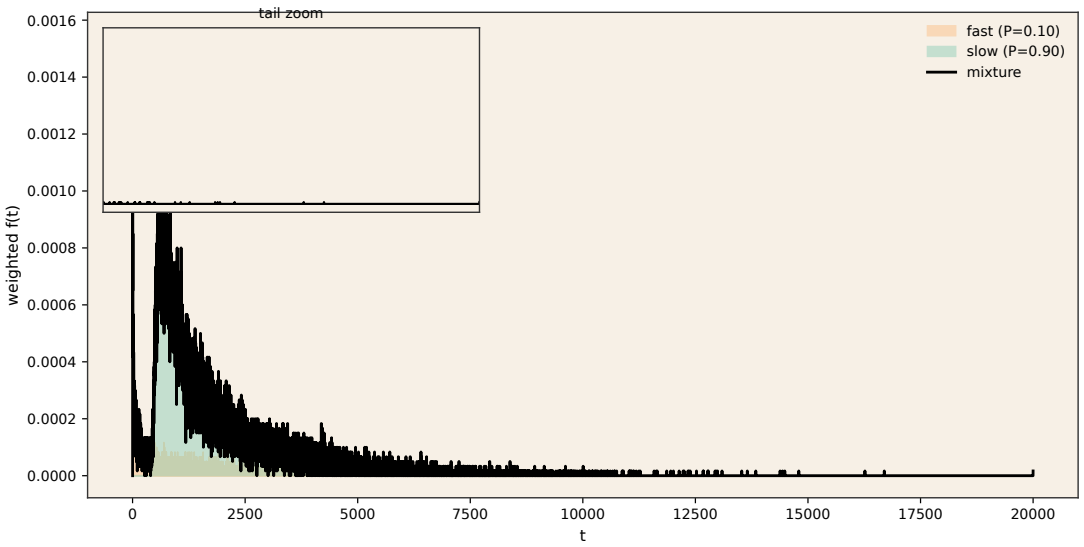


图 42: NB4：通道分解与混合。

6.6 NB5：外边界“传送带”+ 全局偏置

NB5 在 NB4 的边界传送带基础上叠加全局右偏置（$g_x < 0$），形成更强的顺时针趋势；快通道为逆向短路，慢通道为顺时针绕行。

Configuration Card 参数为 $N = 60,\ q = 0.8,\ g = (-0.10, 0.00)$,边界全反射,start=(12,60), target=(10,60), 全域可达且无内部 barrier/door。外边界一圈设置 sticky（$x = 1..60$ 的 $y = 1, 60$ 以及 $y = 1..60$ 的 $x = 1, 60$），factor=0.2；边界 local bias 取顺时针方向（底边 R、右边 U、顶边 L、左边 D），$\delta = 0.63$，并叠加全局右偏置 $g_x = -0.10$。通道判据为：命中前到达顶边 $y = 1$ 的任意格点即为 slow，未触顶则在底边附近逆向短路到达为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 6,\ t_v = 379,\ t_{p2} = 621$，peak ratio= 0.930，valley ratio= 0.009，$P_{\text{fast}} = 0.024$。

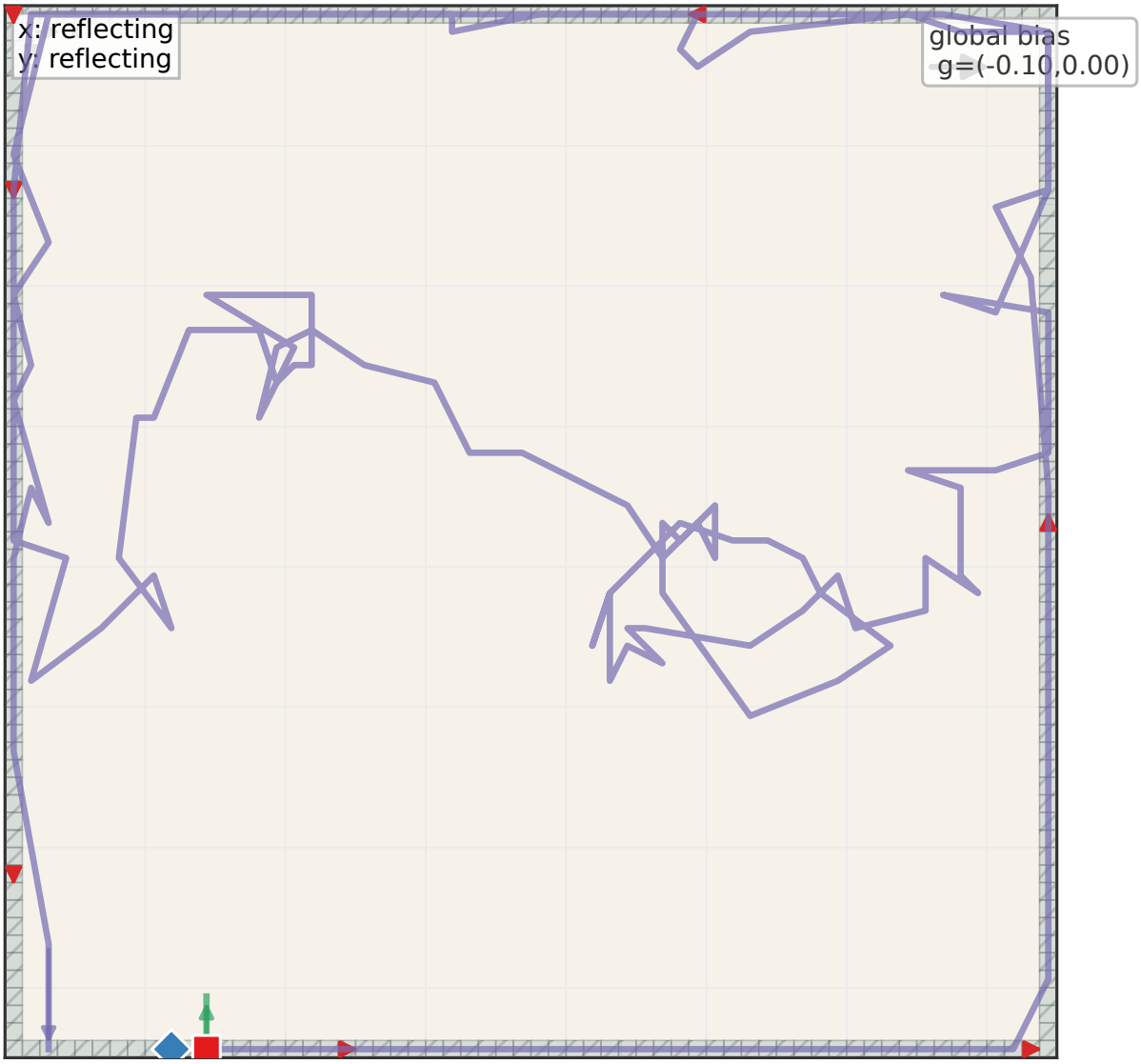


图 43: NB5：环境示意图。

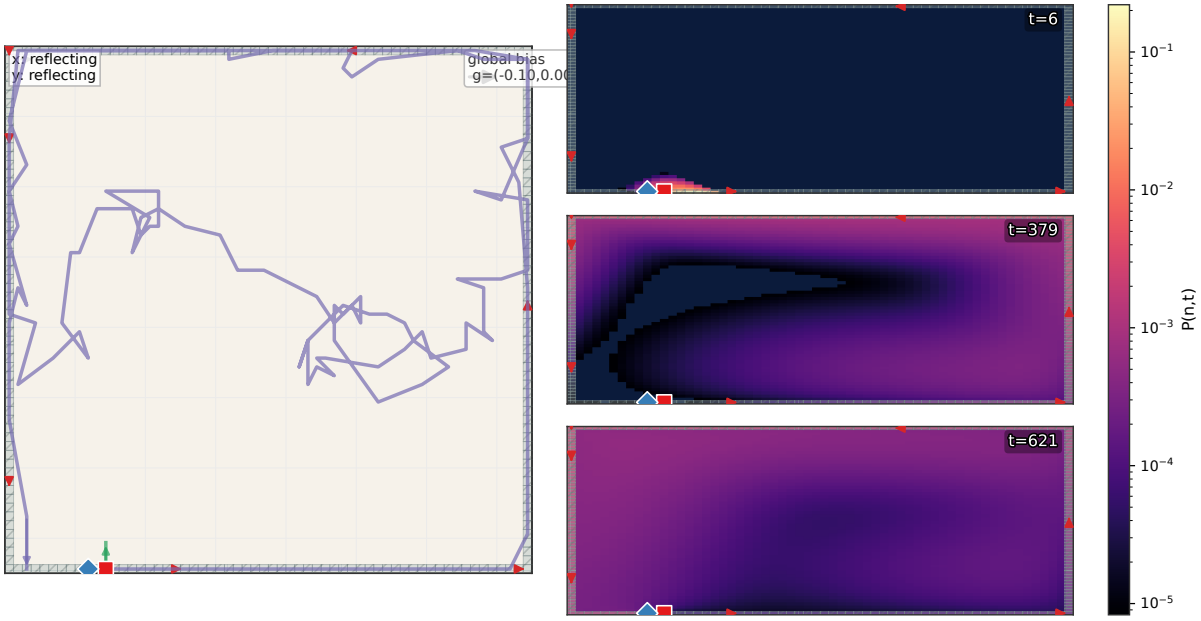


图 44: NB5：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

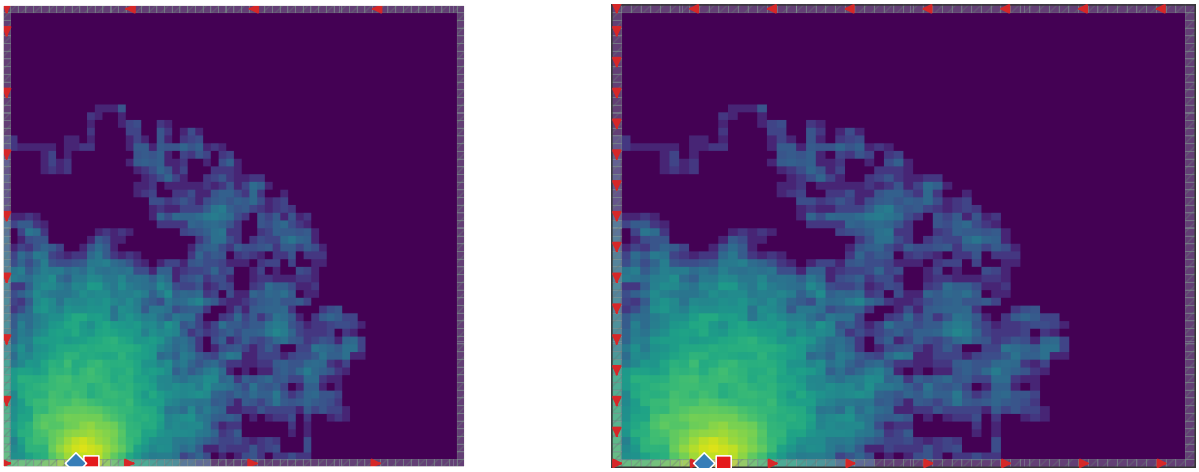


图 45: NB5：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

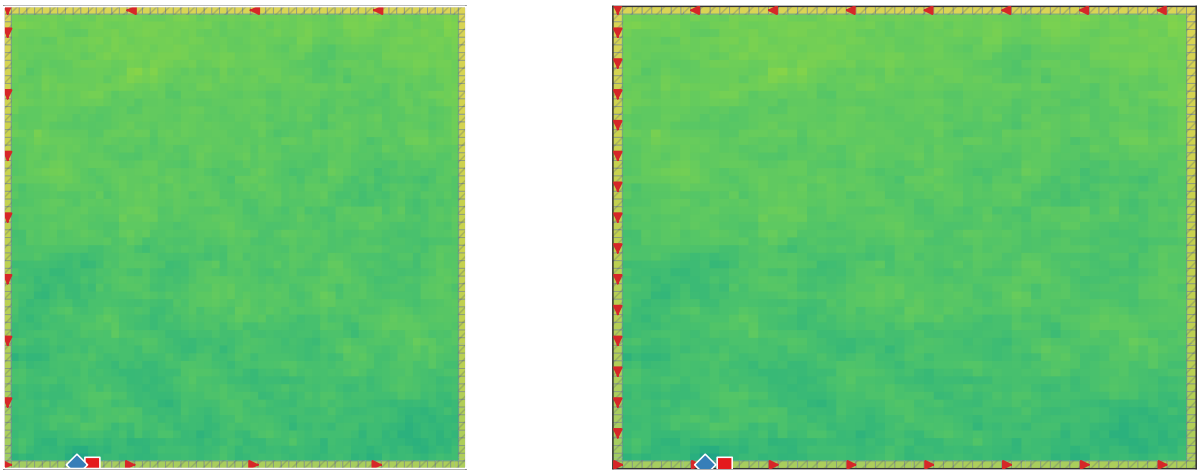


图 46: NB5：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

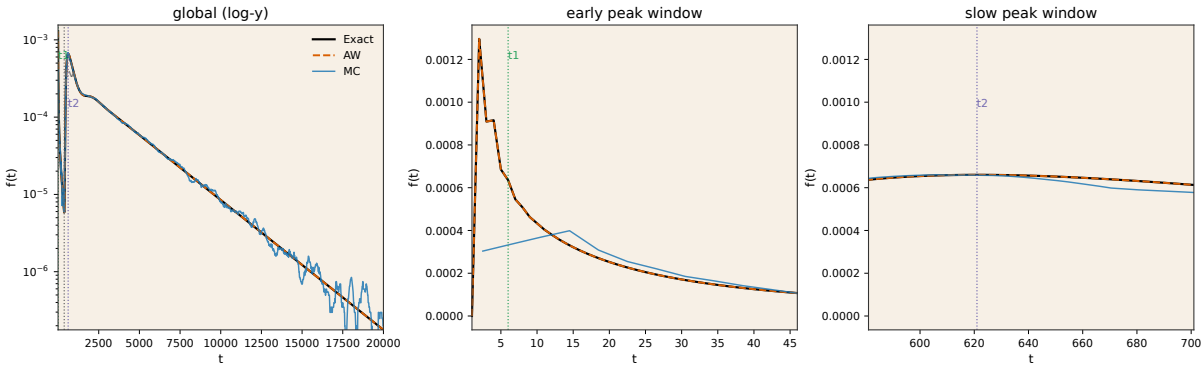


图 47: NB5：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

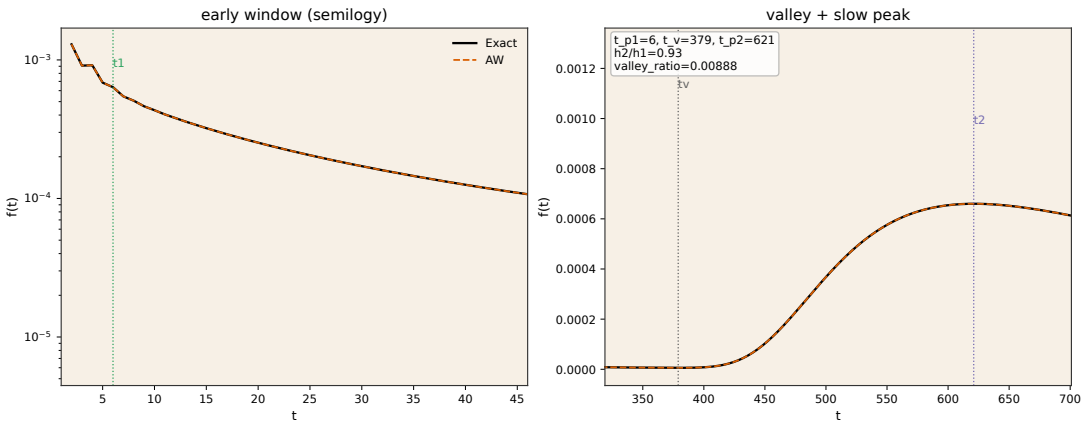


图 48: NB5：峰谷放大图。

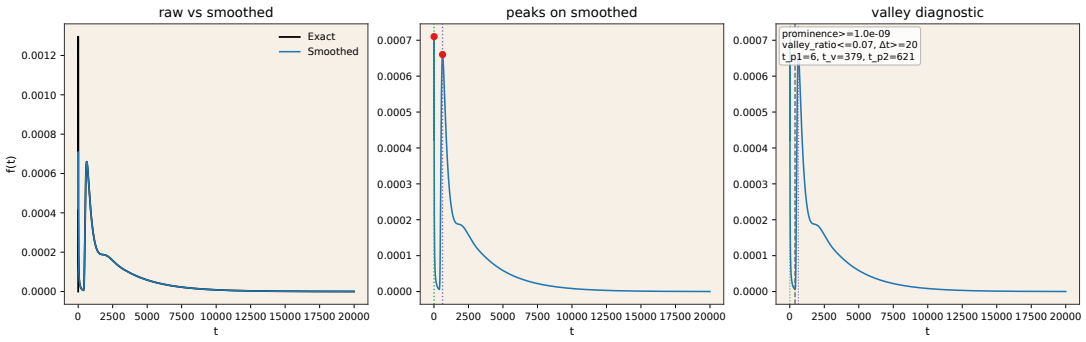


图 49: NB5：双峰诊断图。

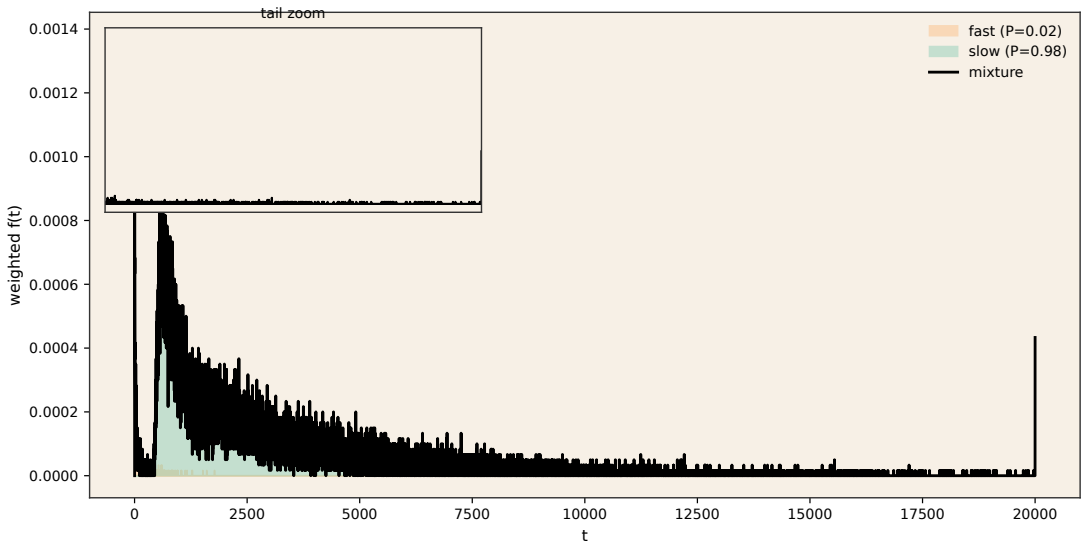


图 50: NB5：通道分解与混合。

6.7 S1：无内墙软通道双轨（转折在 $y = 1$）

S1 不设置任何内部 barrier/door，仅通过 sticky 与局部箭头在全域内塑造两条 “软通道”：短直 fast 轨道与沿顶边绕行的 slow 轨道。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (0, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)，全域可达且无内部 barrier/door。fast 轨道为 $y = 30$, $x = 11..49$，sticky factor=0.05，向右 bias $\delta = 0.95$；slow 轨道为左竖 $x = 10$, $y = 2..30$（向上）、顶边 $y = 1$, $x = 10..49$（向右）、右竖 $x = 50$, $y = 1..29$（向下），同样设置 sticky factor=0.05，局部 bias 取 $\delta = 0.30$。通道判据为：命中前到达顶边 $y = 1$ 段即为 slow，否则为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 47$, $t_v = 240$, $t_{p2} = 363$，peak ratio= 0.641，valley ratio= 0.037，$P_{\text{fast}} = 0.127$。

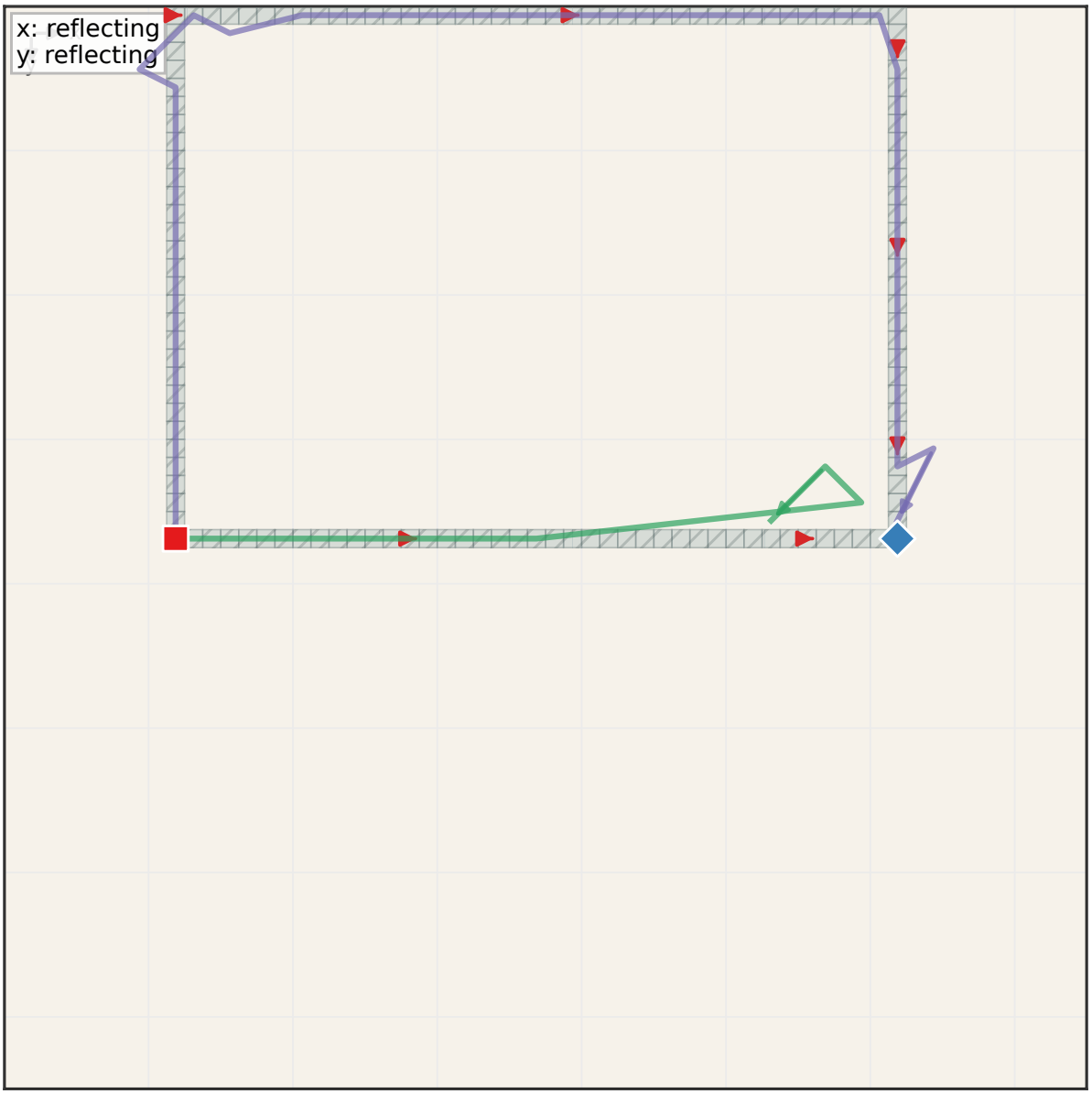


图 51: S1：环境示意图。

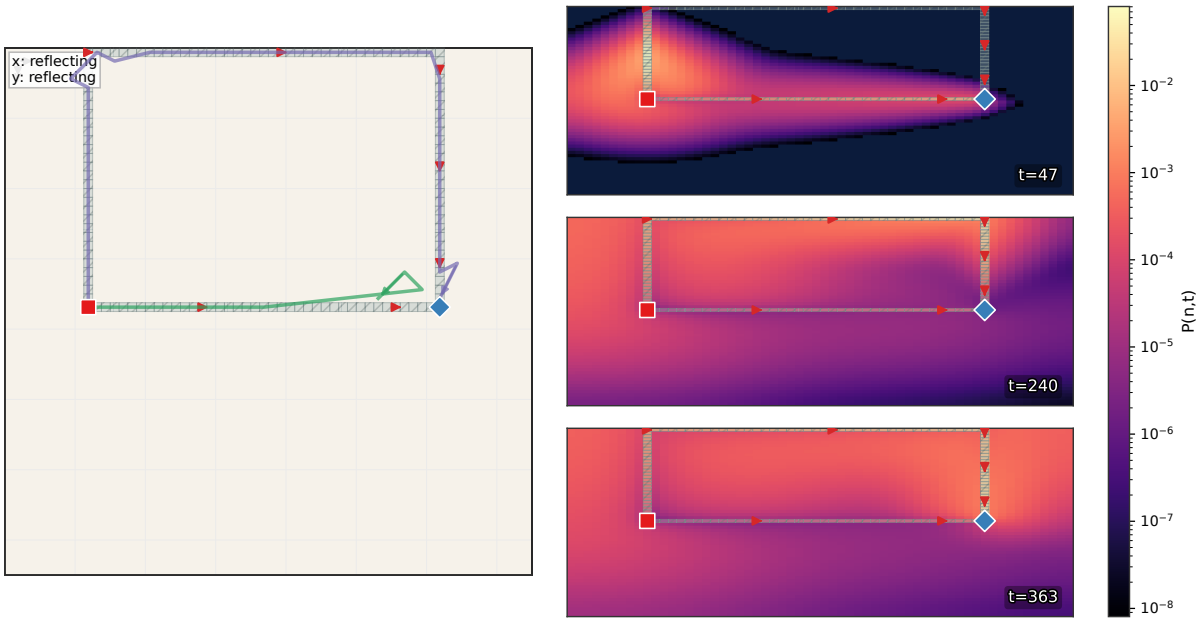


图 52: S1：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

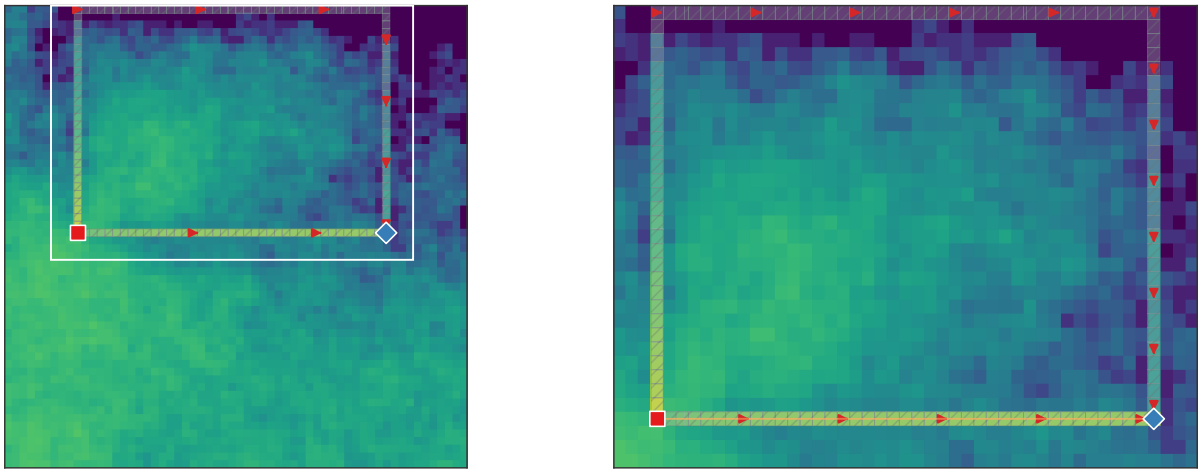


图 53: S1：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

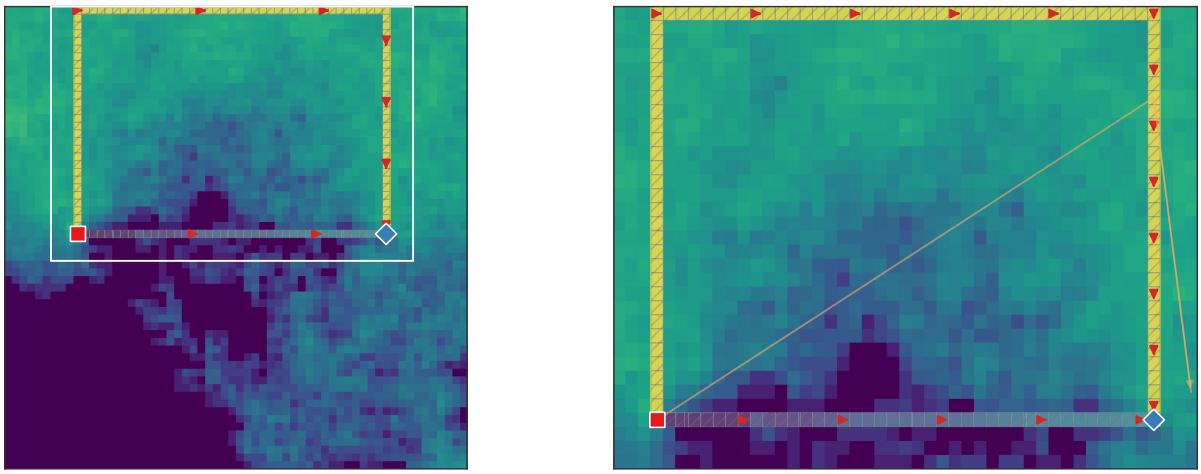


图 54: S1：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

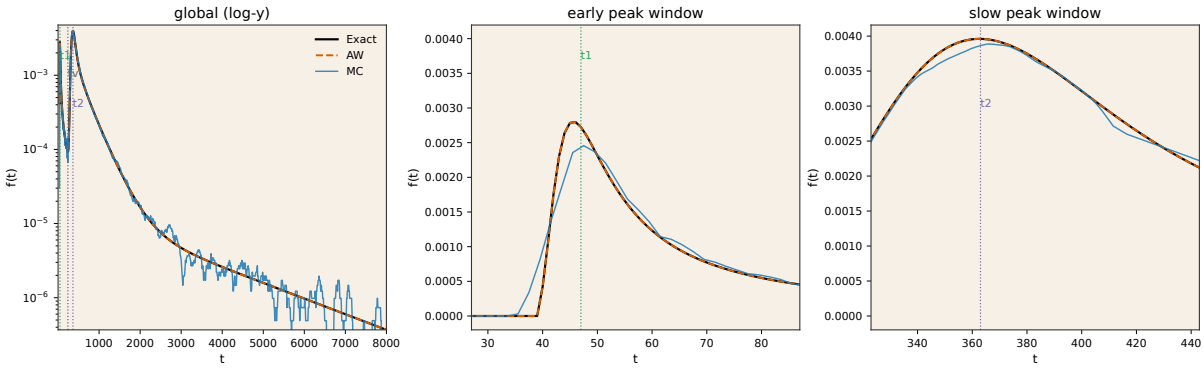


图 55: S1：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

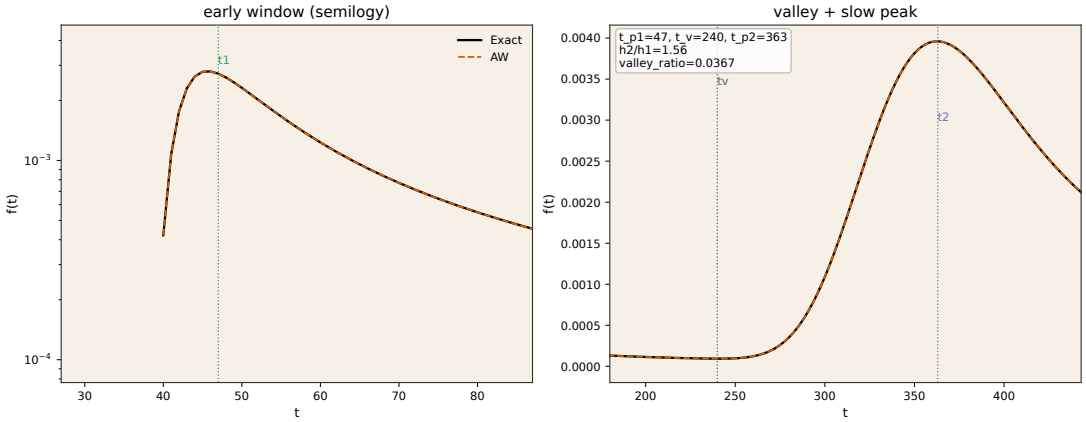


图 56: S1：峰谷放大图。

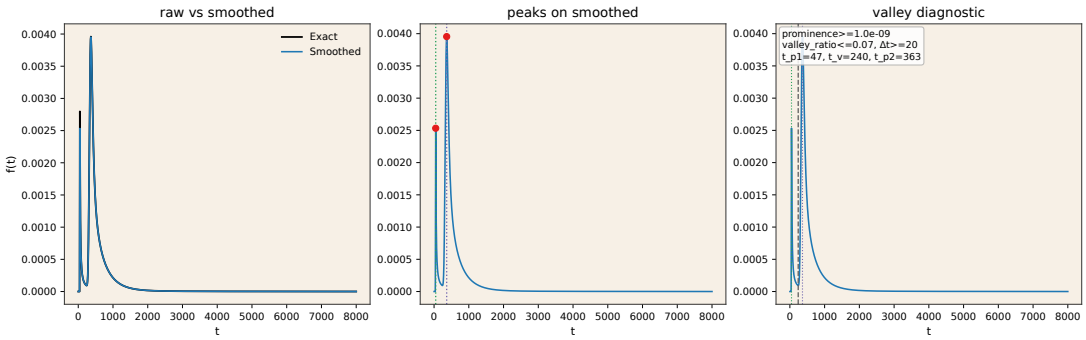


图 57: S1：双峰诊断图。

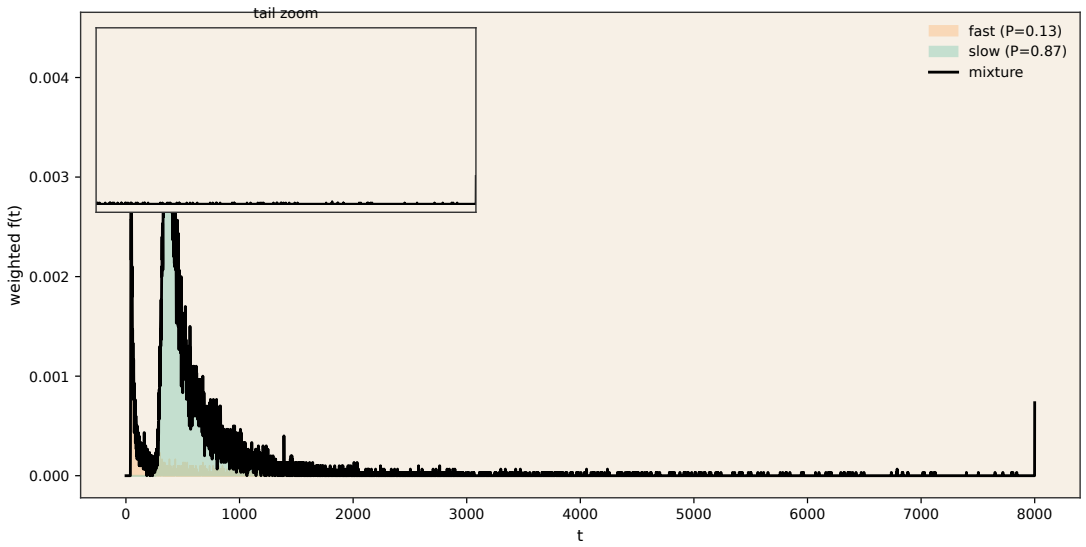


图 58: S1：通道分解与混合。

6.8 S2：无内墙软通道双轨（转折在 $y = 10$）

S2 将 slow 轨道的转折高度上移至 $y = 10$，在保持“零内墙”的前提下进一步减少靠边依赖。

Configuration Card 参数为 $N = 60$, $q = 0.8$, $g = (0, 0)$，边界全反射，start=(10,30)，target=(50,30)，全域可达且无内部 barrier/door。fast 轨道为 $y = 30$, $x = 11..49$，sticky factor=0.05，向右 bias $\delta = 0.95$；slow 轨道为左竖 $x = 10$, $y = 11..30$（向上）、中层 $y = 10$, $x = 10..49$（向右）、右竖 $x = 50$, $y = 10..29$（向下），同样设置 sticky factor=0.05，局部 bias 取 $\delta = 0.20$。通道判据为：命中前到达 $y = 10$ 段即为 slow，否则为 fast。峰谷指标为 $t_{p1} = 48$, $t_v = 274$, $t_{p2} = 462$，peak ratio= 0.647，valley ratio= 0.061，$P_{\text{fast}} = 0.171$。

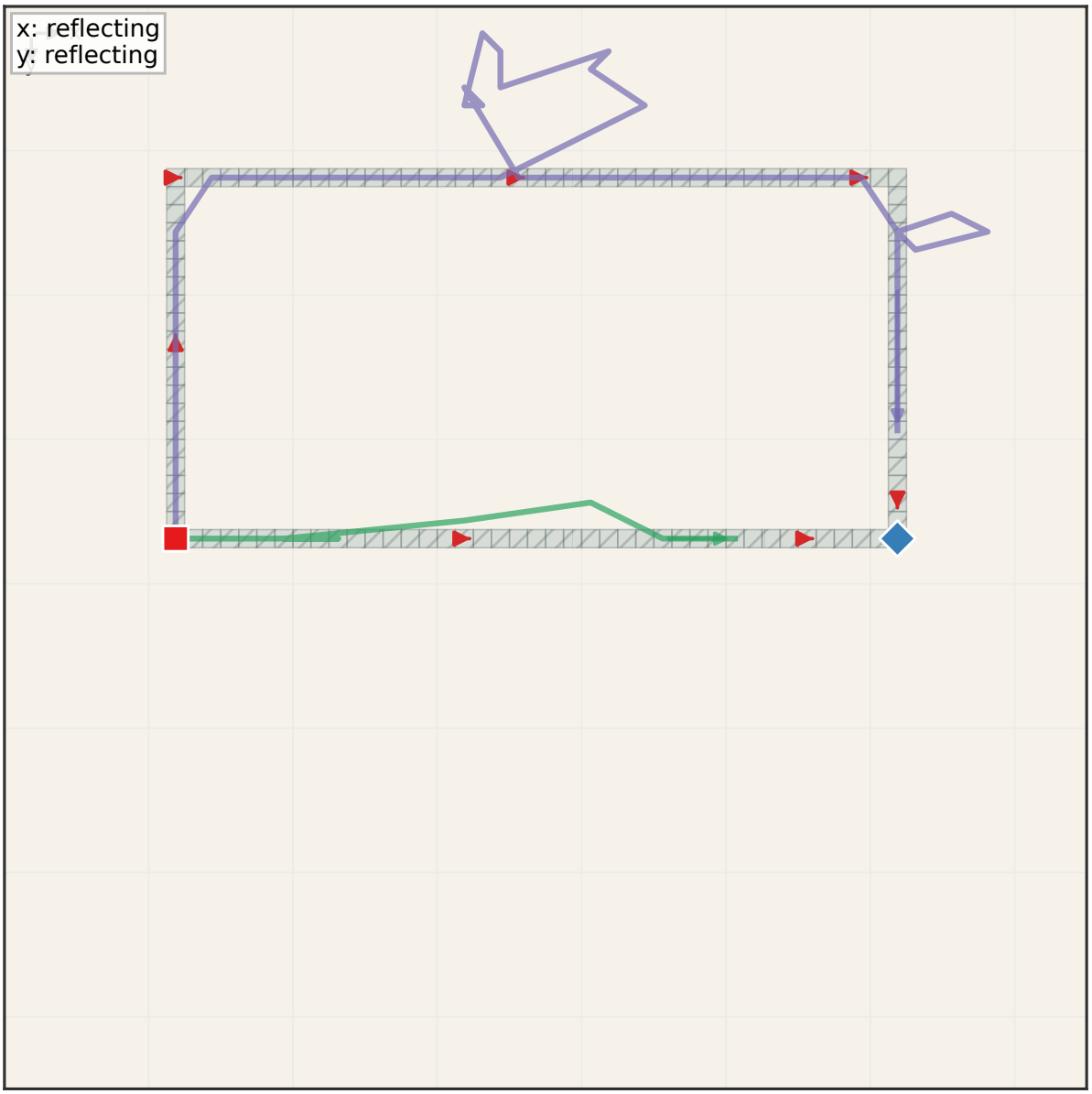


图 59: S2：环境示意图。

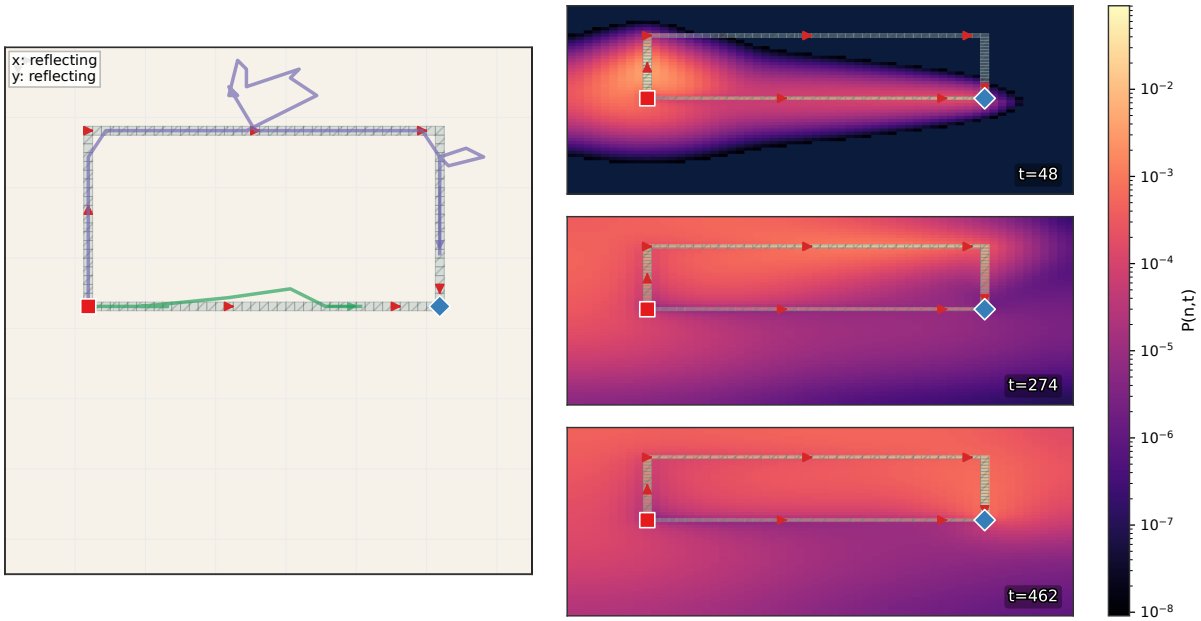


图 60: S2：环境示意与 t_{p1}, t_v, t_{p2} 的 $P(n,t)$ 切片。

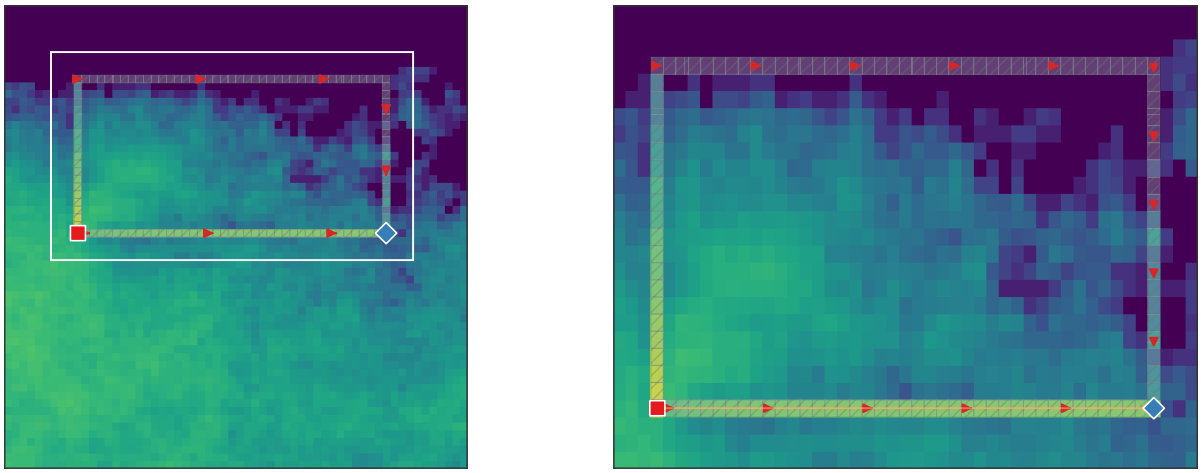


图 61: S2：fast 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

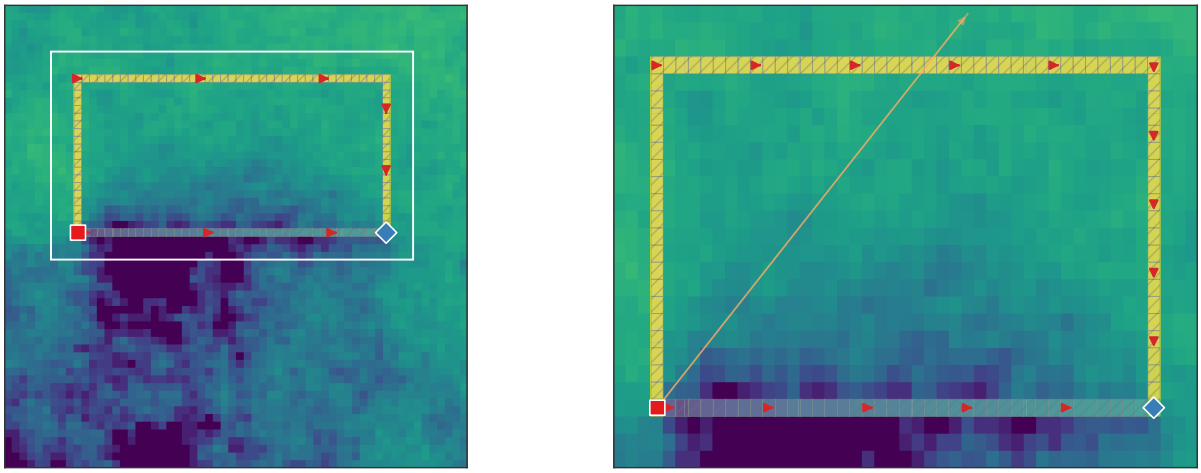


图 62: S2：slow 通道轨迹密度 + 代表轨迹（full + ROI）。

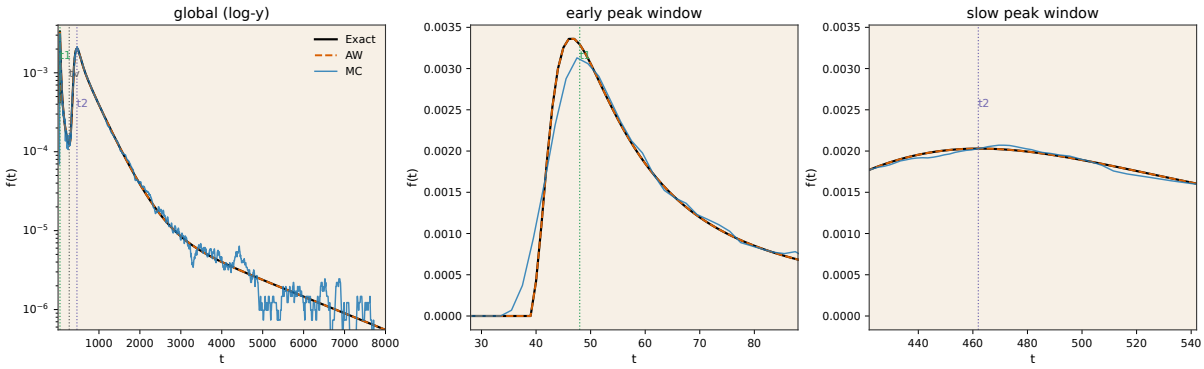


图 63: S2：FPT 多尺度图（Exact/AW/MC 叠加）。

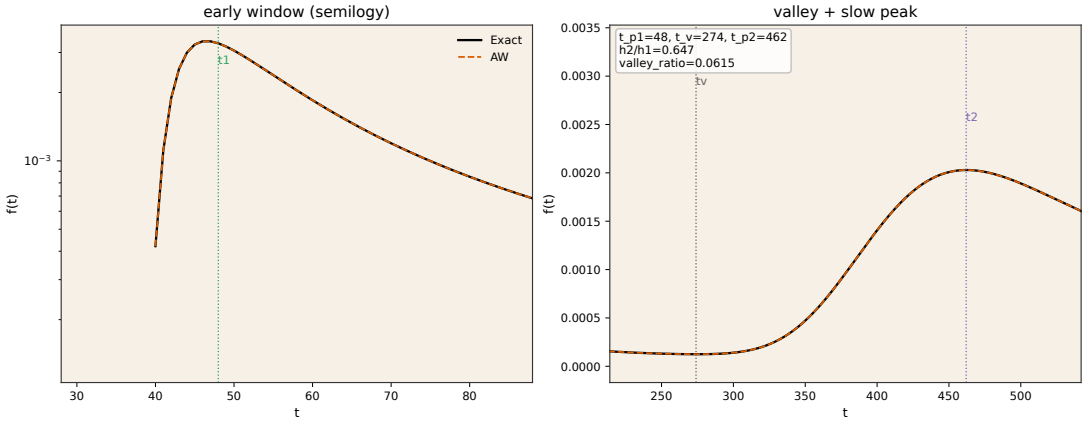


图 64: S2：峰谷放大图。

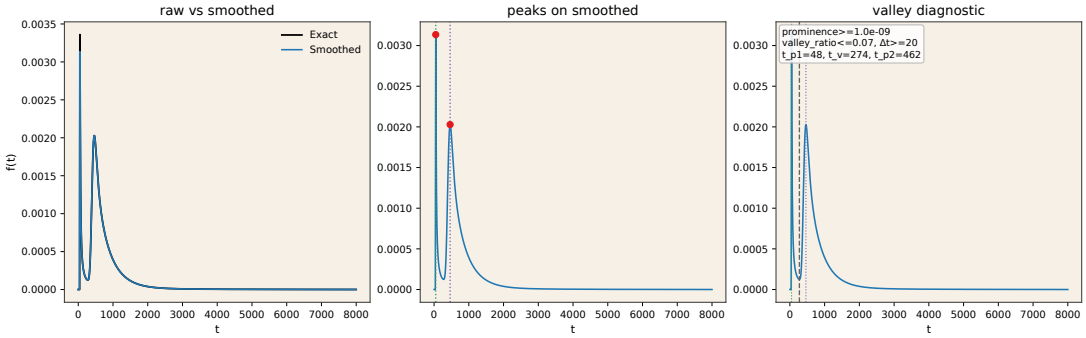


图 65: S2：双峰诊断图。

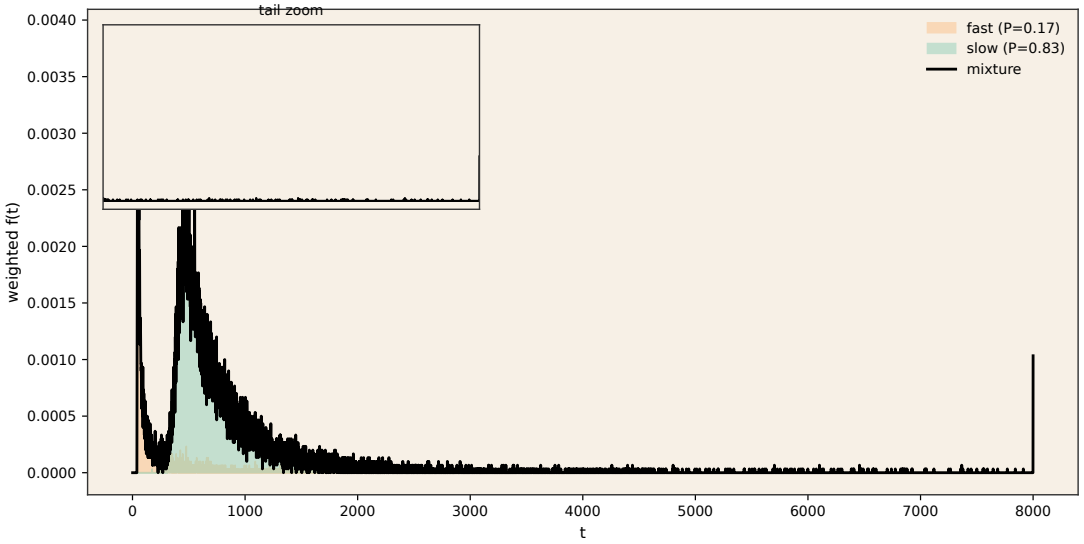


图 66: S2：通道分解与混合。

7 直观机制图解：两通道混合 + 时间尺度分离

将轨迹按通道事件 $C \in \{\text{fast}, \text{slow}\}$ 分类，则

$$f(t) = \mathbb{P}(C = \text{fast})\, f(t \mid C = \text{fast}) + \mathbb{P}(C = \text{slow})\, f(t \mid C = \text{slow}). \tag{28}$$

当两类条件分布的典型时间满足 $t_{\text{fast}} \ll t_{\text{slow}}$，且 $\mathbb{P}(C = \text{fast})$ 不过小，则整体 $f(t)$ 在两峰之间形成明显 valley。

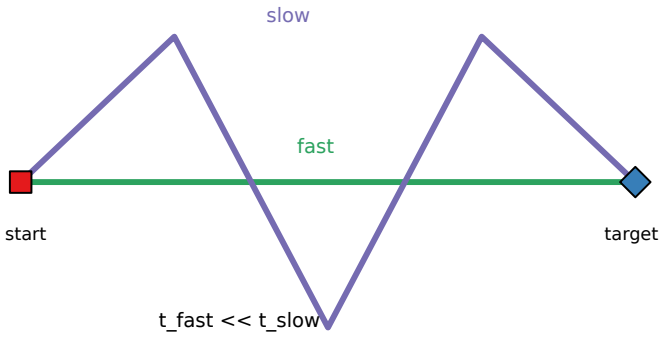


图 67: 双峰的概念示意图：fast/slow 两通道混合 + 时间尺度分离。

通道判据（用于 fast/slow 分类）

- R1：命中前始终在主走廊（$y = 30$）为 fast；进入 U 形绕行为 slow。
- R7：命中前始终在主走廊（$y = 30$）为 fast；进入上方绕行支路为 slow。
- C3：命中前始终在主动轨道（$y = 29$）为 fast；进入 detour 回路为 slow。
- R6：主要沿 $y = 20$ 车道为 fast；主要沿 $y = 40$ door 车道为 slow。
- NB4：命中前未到达顶边 $y = 1$ 为 fast；到达过顶边则为 slow（对应顺时针绕行）。
- NB5：判据与 NB4 相同；全局偏置仅改变 fast/slow 权重与峰位。

- S1：命中前未到达顶边 $y = 1$ 段为 fast；到达顶边段则为 slow（软通道绕行）。
- S2：命中前未到达 $y = 10$ 段为 fast；到达 $y = 10$ 段则为 slow（内层软绕行）。

构造的几何/动力学解释

- R1：反射墙将空间压缩为准 1D 走廊；短直走廊为 fast，长绕行为 slow。
- R7：主走廊内的半透门提供快捷通道；绕行支路形成更长的几何路程，实现孔道 vs 绕行的时间尺度分离。
- C3：强 local bias 轨道提供“主动运输”快通道；错过入口后进入长回路形成慢通道。
- R6：两车道几何长度相近，但 door 阵列显著降低有效通行率，形成动力学慢通道。
- NB4：外边界顺时针 bias 形成“传送带”，逆向短路与顺时针绕行形成深双峰。
- NB5：在 NB4 传送带上叠加全局偏置，进一步倾向顺时针路径，使谷更深。
- S1/S2：通过 sticky 将通道内的横向逃逸压到很小，再用 local bias 将 stay 质量定向释放，从而在无内部墙的情况下形成准 1D 软通道与清晰的 fast/slow 分离。

粗略峰位预测 以局部 bias 方向上的有效漂移速度 $v \approx p_{\text{forward}} - p_{\text{backward}}$ 近似通道内运动，得到 $t_{\text{pred}} \approx L/v$ 的粗略估计（仅用于量级直观解释）。表 6 给出走廊/门构造的估计与数值峰位对照；NB4/NB5 为边界环形漂移，未纳入该直线走廊近似。

case	channel	L_{geom}	t_{pred}	t_{peak}
R1	fast	40	148	136
R1	slow	98	453	424
R7	fast	40	148	140
R7	slow	98	453	428
C3	fast	40	160	160
C3	slow	100	746	702
R6	fast	60	377	347
R6	slow	60 + door	2272	2160

表 6: 粗略峰位预测（基于局部 bias 的一维漂移近似）与数值峰位对比。

表中可见，R1/R7/C3 的几何预测与数值峰位同量级；R6 的偏差主要来自 door 引入的有效等待时间修正。

8 边界条件的物理含义与保留价值

reflecting 对应有限容器或围墙区域的扩散/搜索问题：概率守恒且不会漏出系统。本文全部采用反射边界，强调双峰无需周期拓扑即可产生。

9 与参考文献的对应

- PhysRevE 102, 062124：双峰与通道混合机制（1D 明确论述），为本文反射走廊构造提供理论动机。
- 参见 arXiv:2311.00464v2（Giuggioli 等，2024，Fig.3）对 permeable barrier 与 sticky 的构造说明；本文 R6/R7/NB4/NB5 采用该思路。

10 数据与代码可得性

本文所用脚本与数据已整理在仓库 `research/reports/grid2d_reflecting_bimodality/`。图形输出位于 `research/reports/grid2d_reflecting_bimodality/artifacts/figures/`，数值指标与中间结果保存在 `research/reports/grid2d_reflecting_bimodality/artifacts/data/` 与 `research/reports/grid2d_reflecting_bimodality/artifacts/outputs/`。本文 PDF 由 LaTeX 编译生成。需要复现时，可运行 `python3scripts/reportctl.pyrun--reportgrid2d_reflecting_bimodality--python3code/reflecting_bimodality_pipeline.py`，然后通过 `python3scripts/reportctl.pybuild--reportgrid2d_reflecting_bimodality--langcn` 与 `...--langen` 重建主文稿。

参考文献

[1] S. Sarvaharman and L. Giuggioli, *Phys. Rev. E* **102**, 062124 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevE.102.062124.

[2] L. Giuggioli, S. Sarvaharman, D. Das, D. Marris, and T. Kay, *Multi-target search in bounded and heterogeneous environments: a lattice random walk perspective*, arXiv:2311.00464v2 [cond-mat.stat-mech] (11 Sep 2024).