二维双 Target 首达双峰条件报告

从马尔可夫链推导到反射边界热图验证

结论先行

本报告回答的问题是：**在二维、两个吸收 target 的配置下，什么时候总首达分布会出现 double peak**。

采用全反射边界 + 局部 bias 双走廊模型，四个案例 C1–C4 均出现双峰。机制可归结为两点：

1. 总首达分布严格分解为两条 splitting 分布之和；
2. 两条 splitting 的主峰时刻分离，且权重不极端时，总曲线出现两个局部极大。

1 数学机理推导（从最开始定义）

1.1 单步随机游走定义

考虑有限晶格 $\Omega = \{0, \dots, N-1\}^2$，$N = 31$。每一步若无局部异质性时，内部格点的转移概率为

$$P((x,y) \to (x \pm 1, y)) = \frac{q}{4}, \tag{1}$$

$$P((x,y) \to (x, y \pm 1)) = \frac{q}{4}, \tag{2}$$

$$P((x,y) \to (x,y)) = 1 - q, \tag{3}$$

其中本报告取 $q = 0.2$，故四方向各 0.05，停留概率为 0.8。

反射边界的定义是：若某方向越界，则该方向概率质量加回停留概率。因此每行转移概率仍归一。

局部 bias 规则 在带箭头的格点，将停留概率的 $\delta = 0.2$ 比例转移到箭头方向：

$$\Delta = \delta\, p_{\text{stay}}, \qquad p_{\text{stay}} \leftarrow p_{\text{stay}} - \Delta, \qquad p_{\text{arrow}} \leftarrow p_{\text{arrow}} + \Delta. \tag{4}$$

在本模型中，偏置点的箭头方向概率从 0.05 提高到 0.21，对应净漂移近似

$$v_{\text{eff}} \approx p_{\text{forward}} - p_{\text{backward}} = 0.21 - 0.05 = 0.16 \text{ (格/步)}. \tag{5}$$

1.2 双吸收 target 的马尔可夫链分块

设两个吸收点为 m_1, m_2，其余状态组成 transient 集合 $\mathcal{T}$。按行随机约定（行向量右乘），全转移矩阵可写成

$$P = \begin{bmatrix} Q & R \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}, \qquad R = [r_1\ r_2], \tag{6}$$

其中 $Q \in \mathbb{R}^{|\mathcal{T}|\times|\mathcal{T}|}$，$r_1, r_2 \in \mathbb{R}^{|\mathcal{T}|}$。初始分布记为 α（起点 n_0 对应 one-hot 行向量）。

令 u_t 为第 t 步后仍在 transient 子空间的分布，则

$$u_0 = \alpha, \qquad u_t = u_{t-1}Q = \alpha Q^t. \tag{7}$$

1.3 splitting 与总首达分布的严格推导

第 t 步第一次命中 m_1（此前未命中任一 target）的概率质量为

$$f_1(t) := F_{n_0\to(m_1|m_2)}(t) = u_{t-1}r_1 = \alpha Q^{t-1}r_1, \quad t \geq 1. \tag{8}$$

同理

$$f_2(t) := F_{n_0\to(m_2|m_1)}(t) = \alpha Q^{t-1}r_2. \tag{9}$$

因此总首达分布

$$F_{n_0\to(m_1;m_2)}(t) = f_1(t) + f_2(t) = \alpha Q^{t-1}(r_1 + r_2). \tag{10}$$

式 (10) 是互斥事件分解的严格恒等式，不是近似。

生存概率

$$S(t) = \Pr(T > t) = u_t\mathbf{1} = \alpha Q^t\mathbf{1}, \tag{11}$$

故离散 hazard 为

$$h(t) = \frac{F_{n_0\to(m_1;m_2)}(t)}{S(t-1)} = \frac{f_1(t)}{S(t-1)} + \frac{f_2(t)}{S(t-1)}. \tag{12}$$

当两通道在某时间窗都远离 target 时，两个分量同时变小，便出现谷底。

1.4 生成函数形式与两 target 解析结构

定义 z-变换 $\tilde{f}(z) = \sum_{t\geq1} f(t)z^t$，则

$$\tilde{f}_i(z) = z\,\alpha(I - zQ)^{-1}r_i, \qquad \tilde{F}_{\text{any}}(z) = \tilde{f}_1(z) + \tilde{f}_2(z). \tag{13}$$

在有限吸收链中 $\rho(Q) < 1$，故在 $z = 1$ 处可得 splitting 概率

$$p_i = \sum_{t\geq1} f_i(t) = \tilde{f}_i(1) = \alpha(I - Q)^{-1}r_i, \quad p_1 + p_2 = 1. \tag{14}$$

与 2311.00464v2 的多 target determinant 公式对应到 $M = 2$ 时，可写成

$$\tilde{F}_{n_0\to(m_1|m_2)}(z) = \frac{G_1(z)B(z) - C(z)G_2(z)}{A(z)B(z) - C(z)D(z)}, \quad \tilde{F}_{n_0\to(m_2|m_1)}(z) = \frac{A(z)G_2(z) - G_1(z)D(z)}{A(z)B(z) - C(z)D(z)}, \tag{15}$$

其中 A, B 含 target return 项，C, D 为 target 间首达项，G_1, G_2 为起点到各 target 的首达项。分母极点结构决定时间域中的主导时间尺度与是否出现振荡/多峰。

1.5 双峰条件的可检验形式

将两条 splitting 归一化为条件分布

$$g_i(t) = \frac{f_i(t)}{p_i}, \qquad F_{\text{any}}(t) = p_1 g_1(t) + p_2 g_2(t). \tag{16}$$

因此总分布是两分量混合。对双峰可见性，关键是：

- **峰位分离**：$|t_1^* - t_2^*|$ 要超过两分量宽度尺度；
- **权重非极端**：p_1, p_2 不能过小（否则弱峰被强峰尾部覆盖）。

若近似为同方差高斯混合且 $p_1 \approx p_2$，经典结果给出双峰需要 $|\mu_2 - \mu_1| \gtrsim 2\sigma$。本报告的数值筛选实际上在离散情形实现了这两个条件。

1.6 数学符号与图件映射总表

符号	数学定义	图中对应含义
X_t	第 t 步 walker 位置随机变量	热图面板的空间分布对象。
T	首次命中 $\{m_1, m_2\}$ 的时间	FPT 曲线横轴对应离散时间。
$f_1(t)$	$F_{n_0\to(m_1\|m_2)}(t) = \alpha Q^{t-1} r_1$	橙/蓝分解中的一条 splitting（图中蓝线）。
$f_2(t)$	$F_{n_0\to(m_2\|m_1)}(t) = \alpha Q^{t-1} r_2$	另一条 splitting（图中橙线）。
$F_{\text{any}}(t)$	$f_1(t) + f_2(t)$	总首达分布（图中黑线）。
$S(t)$	$\Pr(T > t) = \alpha Q^t \mathbf{1}$	“未吸收质量”；用于归一化 hazard 与条件热图。
$h(t)$	$F_{\text{any}}(t)/S(t-1)$	每步吸收危险率（新增 hazard 图黑线）。
h_1, h_2	$f_1(t)/S(t-1)$, $f_2(t)/S(t-1)$	两条通道对 hazard 的贡献（新增 hazard 图蓝/橙线）。
p_1, p_2	$\sum_t f_1(t), \sum_t f_2(t)$	两目标 splitting 权重；表中 $P(m_1), P(m_2)$。
$\frac{\|\Delta t^*\|}{w_{1/2}^{(1)} + w_{1/2}^{(2)}}$	两通道主峰分离度（峰距/半高宽和）	分离度表与相图分区的关键判据。

表 1: 数学定义、计算公式与图件对象的一一对应。

1.7 为何走廊参数会系统改变双峰

快慢通道长度分别约为 $L_1 = 7$ 与 $L_2 = 48$（格），由 $t \sim L/v_{\text{eff}}$ 估算

$$t_1 \sim \frac{7}{0.16} \approx 44, \qquad t_2 \sim \frac{48}{0.16} \approx 300. \tag{17}$$

这与实测峰位量级一致（例如 C1 为 35 与 284）。

参数作用：

- 增大 w_2：慢通道漏出减少，晚峰更集中且更靠前；
- 减小 `skip2`：慢通道更早抓取概率质量，p_2 增大，晚峰权重上升。

2 实验配置与真实热图（非示意）

固定(1-based) $n_0 = (15, 15), m_1 = (22, 15), m_2 = (7, 7)$。快通道中心线：$(15, 15) \to (22, 15)$；慢通道中心线：$(15, 15) \to (15, 27) \to (3, 27) \to (3, 7) \to (7, 7)$。慢通道覆盖单元（米黄色/淡紫

重叠区）都施加局部 bias；本节总览图中红箭头为防拥挤只沿中心线抽样绘制，不代表“只有箭头画到的格点”有偏置。文末附录给出“每个偏置格点都画箭头”的全分布大图。慢通道的三个拐点（1-based）为 $(15, 27)$、$(3, 27)$、$(3, 7)$，在配置图中用黑色圆点显式标出。

四个案例只调 $(w_2, \texttt{skip2})$：C1$(3, 2)$、C2$(2, 1)$、C3$(2, 0)$、C4$(1, 1)$。

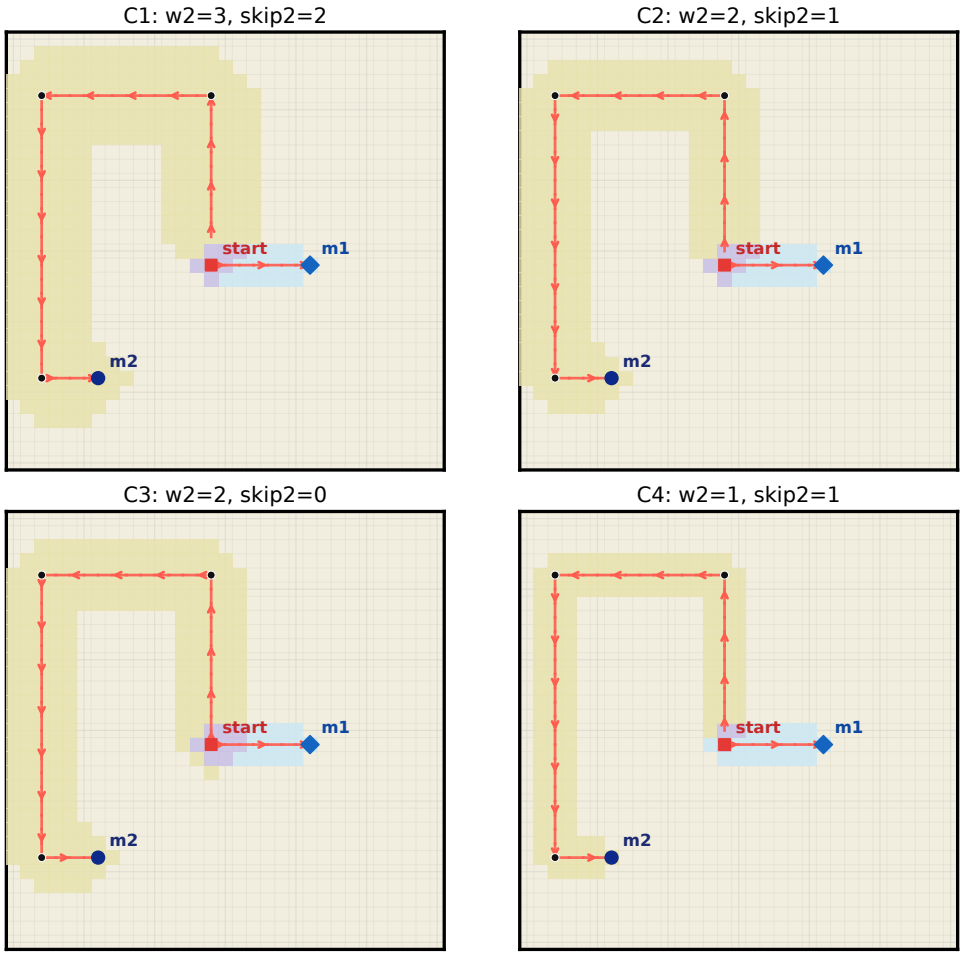


图 1: 四个案例的配置示意总览（改进后的工程图风格）：底色网格为反射边界晶格，蓝/黄分别为快/慢通道区域，红色箭头为通道主导输运方向。

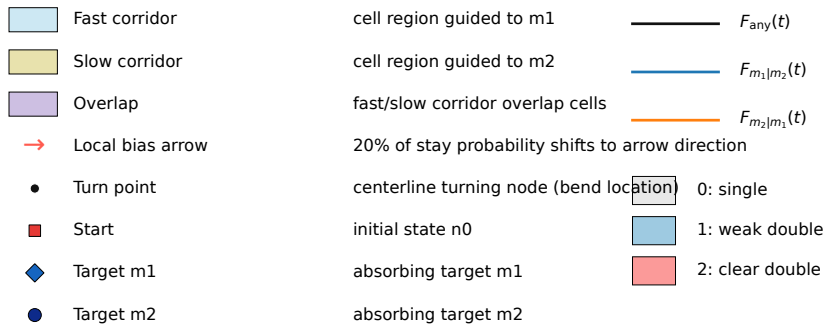


图 2: 统一符号图例面板（由同一绘图脚本直接输出）：用于校准颜色、标记、曲线与相图分类符号的一致性。

图示元素逐项说明

图中元素	图中示意	物理含义（统一约定）
米白网格背景		反射边界二维晶格，越界概率质量回收到停留概率。
快通道区域		快通道（fast corridor）覆盖单元，主要引导到 m_1。
慢通道区域		慢通道（slow corridor）覆盖单元，主要引导到 m_2。
重叠区域		快慢通道重叠区（两种通道影响叠加）。
局部 bias 方向	→	该点停留概率的 20% 被转移到箭头方向。
慢通道拐点	●	慢通道中心线转弯位置（仅用于几何可视化标识）。
起点（start）	■	初始位置 n_0。
target m_1 标记	◆	吸收点 m_1，在所有图中固定为蓝色菱形。
target m_2 标记	●	吸收点 m_2，在所有图中固定为深蓝圆形。
热图色标		条件占据概率大小：深色低、亮色高，对应 $P(X_t = n \mid T > t)$。
热图中的 target 标记	◆ / ●	与配置图保持同一组 (m_1, m_2) 符号，不再使用另一套符号。
时间标注	$t = 200$	当前热图对应离散时间步。
总首达曲线	——	$F_{n_0\to(m_1;m_2)}(t) = f_1(t) + f_2(t)$。
splitting 曲线（1）	——	$f_1(t) = F_{n_0\to(m_1\mid m_2)}(t)$。
splitting 曲线（2）	——	$f_2(t) = F_{n_0\to(m_2\mid m_1)}(t)$。
主峰标记	●	总首达曲线自动检测到的两个主峰位置。
	0	
	1	
相图类别 0/1/2	2	0=single；1=weak double；2=clear double。

表 2: 本报告全部图件的符号、颜色与曲线含义对照。

热图说明 下图热图不是模板图，而是由同一转移矩阵做精确递推得到的 $P(X_t = n \mid T > t)$ 条件占据概率热图。具体计算为

$$\pi_t(n) := P(X_t = n \mid T > t) = \frac{u_t(n)}{S(t)},$$

其中 $u_t = \alpha Q^t$ 是第 t 步仍在 transient 子空间的概率分布。图中时刻分别选在 “早期扩散/谷附近/晚峰附近”。

3 总首达与 splitting 结果

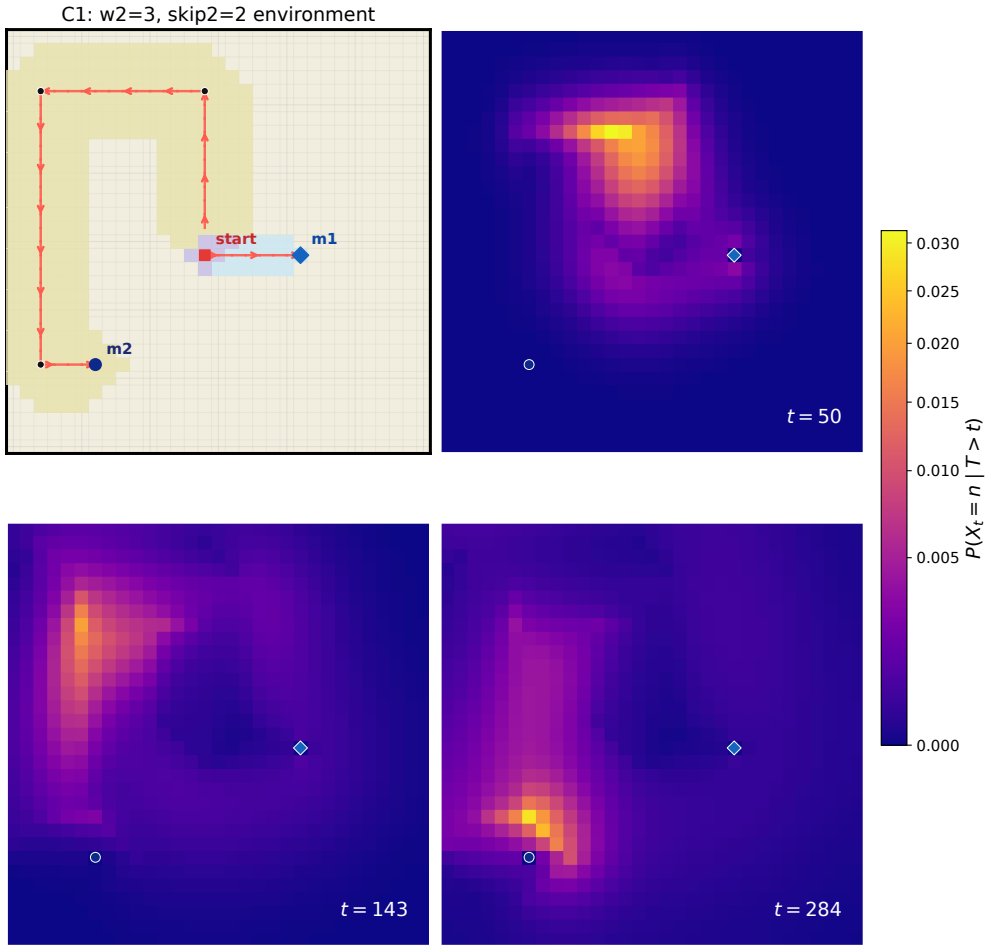


图 3: C1 的环境 + 热图四联图（真实计算）：$t = 50, 143, 284$。

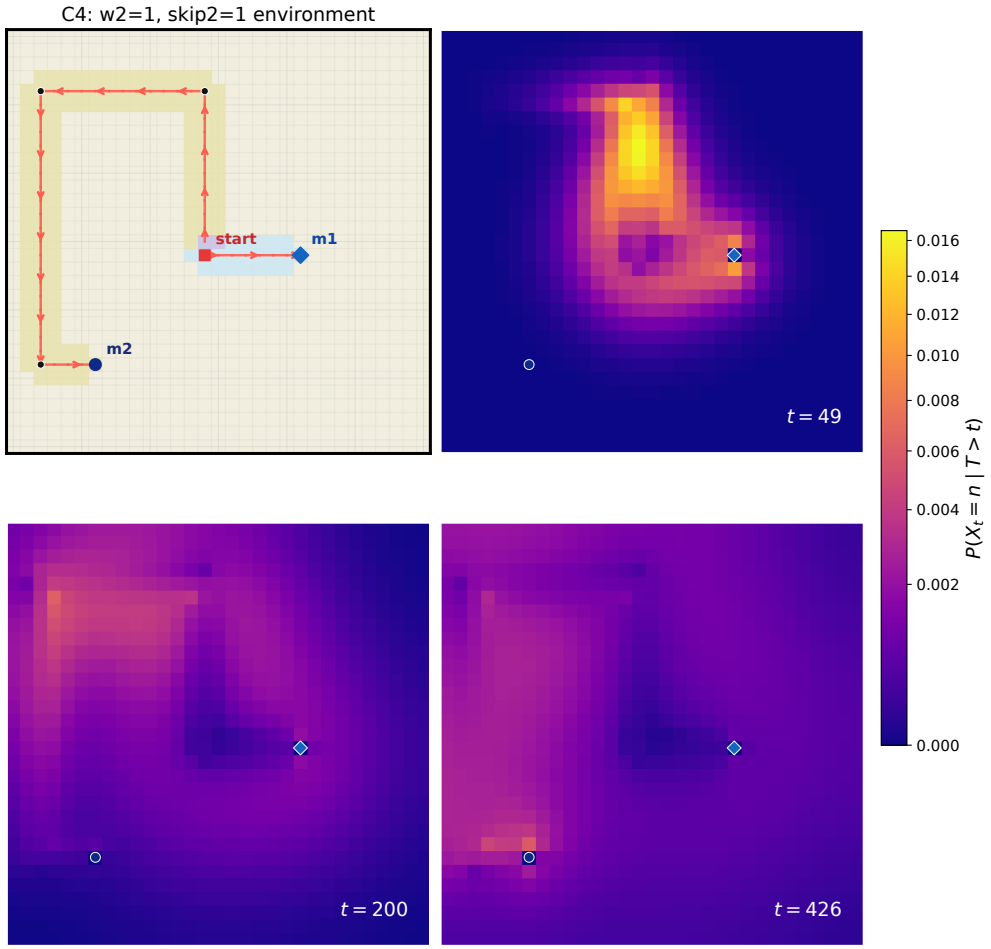


图 4: C4 的环境 + 热图四联图（真实计算）：$t = 49, 200, 426$。

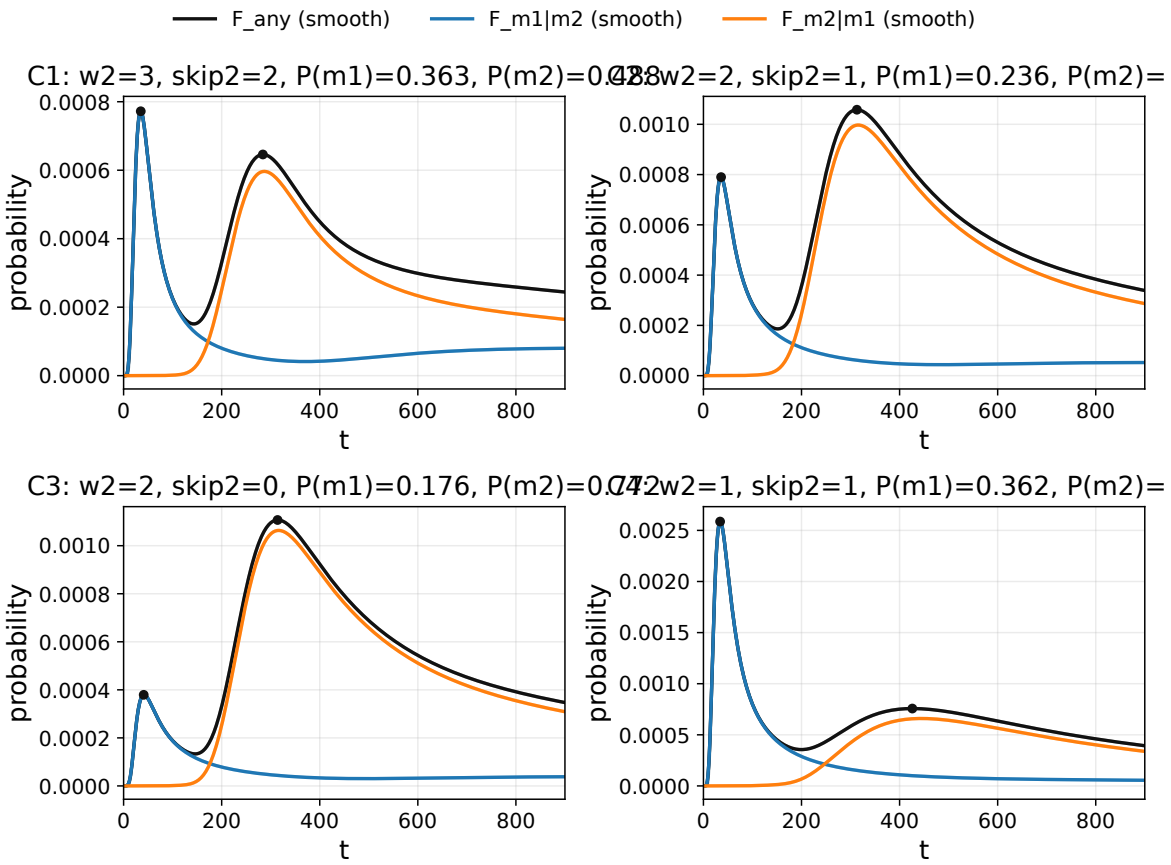


图 5: 四个案例的总首达曲线与 splitting 分解。黑线：$F_{n_0\to(m_1;m_2)}$；蓝/橙：两条 splitting。

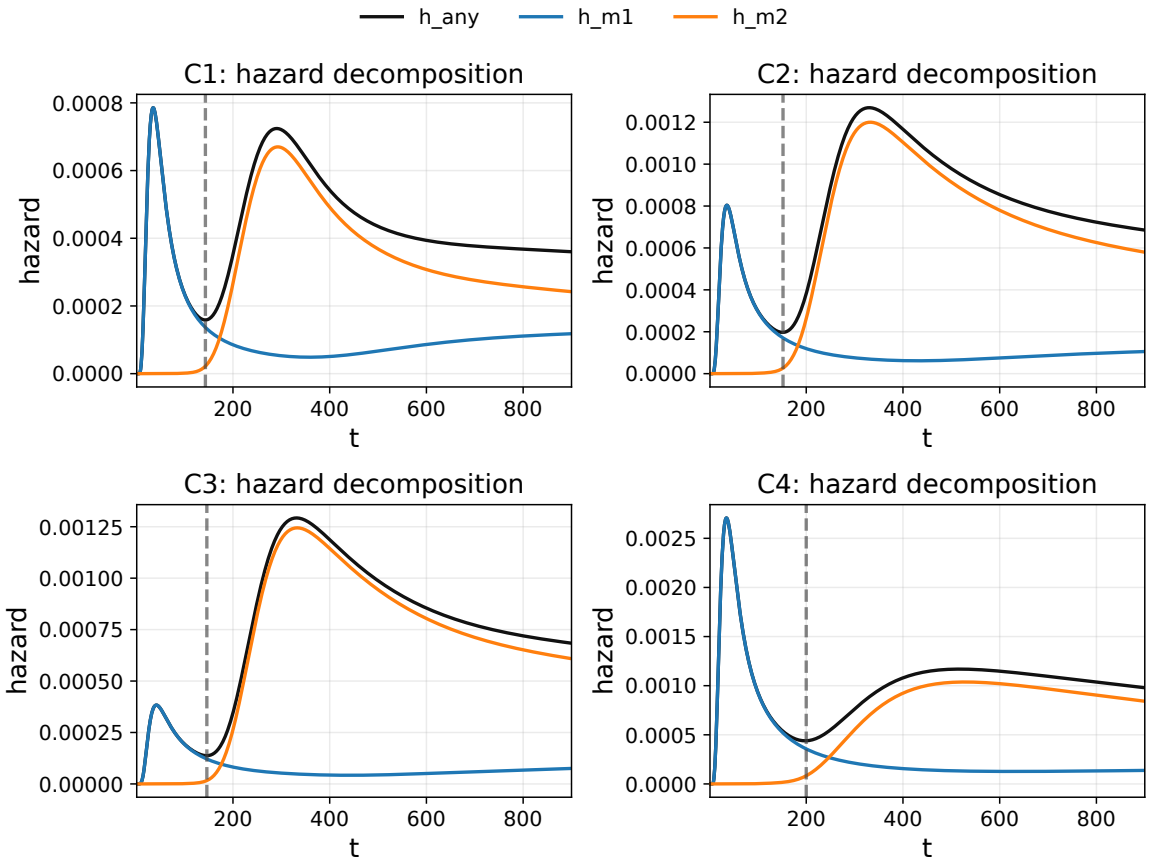


图 6: hazard 分解：$h = h_1 + h_2$。黑线为总 hazard，蓝/橙为两通道贡献，虚线为谷底时刻 t_v。

Case	w_2	skip2	t_{p1}	t_{p2}	h_1	h_2	$P(m_1)$	$P(m_2)$
C1	3	2	35	284	7.77e-04	6.46e-04	0.363	0.488
C2	2	1	36	313	7.94e-04	1.06e-03	0.236	0.713
C3	2	0	41	314	3.81e-04	1.11e-03	0.176	0.772
C4	1	1	34	426	2.60e-03	7.57e-04	0.362	0.611

表 3: 双峰峰位、峰高与 splitting 权重（截断时间 $t_{\max} = 6000$）。

Case	$t^*_{m_1\|m_2}$	$t^*_{m_2\|m_1}$	t_v	valley/max	absorbed@6000	tail@6000
C1	35	287	143	0.194	0.851	0.149
C2	36	316	152	0.176	0.949	0.051
C3	41	316	146	0.120	0.948	0.052
C4	34	445	200	0.137	0.973	0.027

表 4: 两条 splitting 主峰、谷深与截断吸收质量。

Case	$t^*_{m_1\|m_2}$	$t^*_{m_2\|m_1}$	$w^{(1)}_{1/2}$	$w^{(2)}_{1/2}$	$\|\Delta t^*\|/(w^{(1)}_{1/2} + w^{(2)}_{1/2})$
C1	35	287	25.0	141.5	1.514
C2	36	316	28.5	179.5	1.346
C3	41	316	37.5	177.0	1.282
C4	34	445	26.0	319.0	1.191

表 5: 主峰半高宽分离度量化。分离度 $|\Delta t^*|/(w^{(1)}_{1/2} + w^{(2)}_{1/2}) > 1$ 表示两通道峰位分离超过峰宽叠加，通常有利于总曲线出现可见双峰。

读表可见：

- C1 权重较平衡，双峰高度接近；
- C2/C3 随 `skip2` 下降，$P(m_2)$ 升高，晚峰变主导；
- C4 因慢通道更窄而出现最大峰距（晚峰右移最明显）；
- 四个案例的分离度均大于 1（表 5），与双峰可见性一致。
- hazard 图（图 6）显示谷底附近 h_1, h_2 同时降低，直接支持“中间低吸收窗口”机理。

4 参数相图：从案例到区域

除四个代表案例外，对 $(w_2, \texttt{skip2})$ 做网格扫描（$w_2 = 1 \ldots 5$，`skip2`$= 0 \ldots 6$，每组迭代到 $t_{\max} = 2500$），并按以下判据分类：

$$\text{clear-double} \iff \begin{cases} \text{检测到两个主峰,} \\ \dfrac{|\Delta t^*|}{w^{(1)}_{1/2} + w^{(2)}_{1/2}} \geq 1. \end{cases} \tag{18}$$

其中不满足 clear-double 但仍检测到双峰者标记为 weak-double。$\min(p_1, p_2)$、$h_{\text{valley}}/\max(h_1, h_2)$ 等量继续保留为 secondary diagnostics，用于解释而不再作为 phase 的硬门槛。

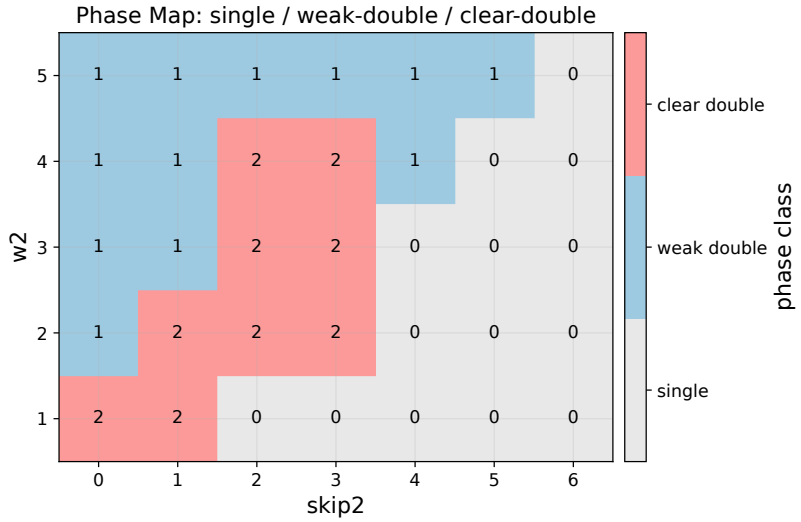


图 7: $(w_2, \texttt{skip2})$ 分类相图。颜色和数字对应：0=single，1=weak double，2=clear double。

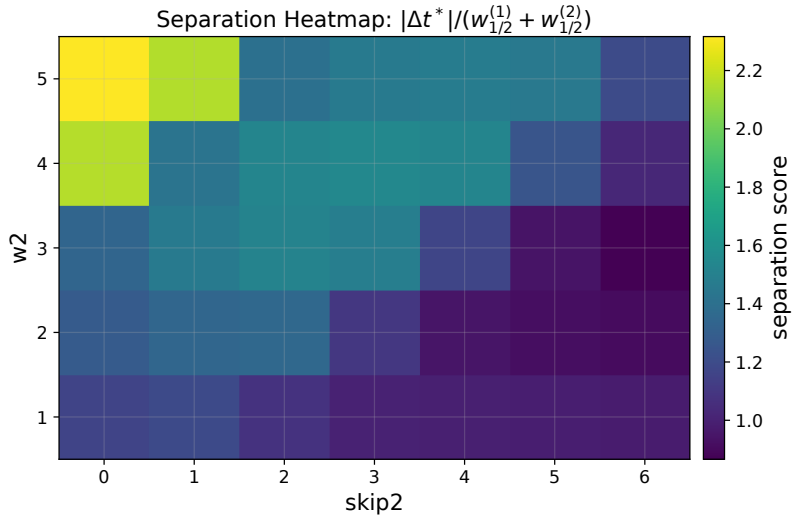


图 8: 分离度热图：$|\Delta t^*|/(w_{1/2}^{(1)} + w_{1/2}^{(2)})$。颜色越亮代表两通道峰位相对峰宽越分离。

5 外部 Sparse Testset 配置补充

基于你提供的 external/sparse_double_peak_testset.json，新增 11 组稀疏配置（无偏置、细通道、稀疏箭头、barrier、sticky、long-range shortcut、global bias、混合无序）。同一组 (n_0, m_1, m_2) 与基础 LRW 参数下，全部配置都用精确马尔可夫迭代跑到 $t_{\max} = 6000$，然后**仅保留检测到双峰（phase>0）的配置**进入下述图表。

ID	Name	Type	local-bias	sticky	barriers	shortcuts
S02	corridor thin w2 1 skip2 0	corridor_model	160	0	0	0
S03	centerline only bias fast and slow	explicit_bias_list	54	0	0	0

表 6: 外部 testset 配置统计：每个案例的异质性元素计数（local-bias / sticky / barrier / shortcut）。

ID	t_{p1}	t_{p2}	valley/max	$P(m_1)$	$P(m_2)$	sep-score	phase
S02	38	436	0.235	0.233	0.740	1.17	2
S03	38	925	0.217	0.411	0.511	0.92	1

表 7: 外部 testset 双峰判据结果。phase: 0=single, 1=weak double, 2=clear double。

从这批稀疏配置可见：在该 testset 中，**S02（细慢通道 + 无 skip）达到 clear double**；S03（仅中心线箭头）呈 weak double；其余配置均为 single，故不在本节展示。

6 复现

```
python3 scripts/reportctl.py run --report grid2d_two_target_double_peak -- python3 code/two_
python3 scripts/reportctl.py build --report grid2d_two_target_double_peak --lang cn
```

主要产物：

- 数据汇总：research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/data/case_summary.jso
- 参数扫描：research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/data/scan_w2_skip2.cs
  research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/data/scan_w2_skip2.json
- 曲线数据：research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/outputs/C1_fpt.csv
  – .../C4_fpt.csv
- 热图：research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/figures/case_C1_env_heatm
  等
- 机理图：research/reports/grid2d_two_target_double_peak/artifacts/figures/hazard_grid.pdf
  .../phase_w2_skip2.pdf

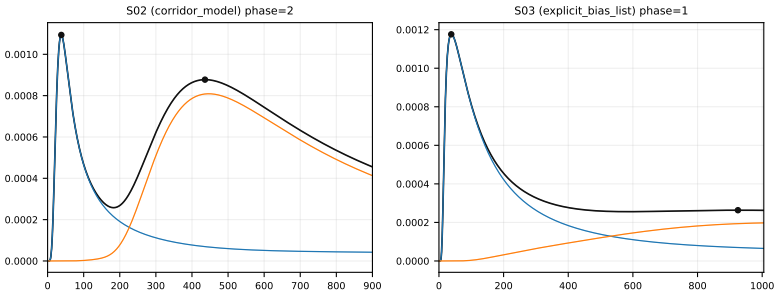


图 9: 外部 sparse testset 中“检测到双峰”的配置总览（当前为 S02, S03）。

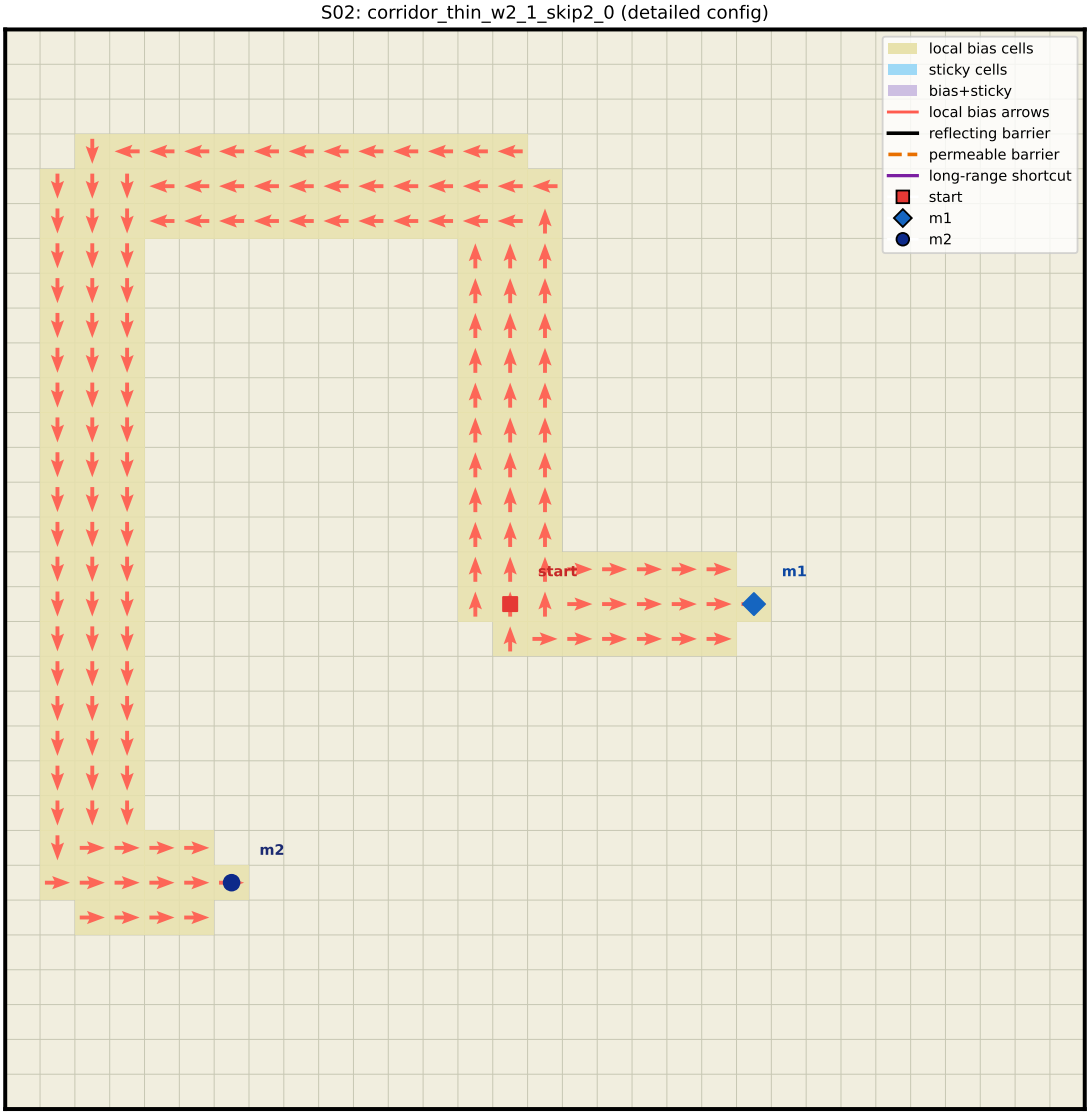


图 10: S02 详细配置图：显示全部局部偏置箭头与通道单元。

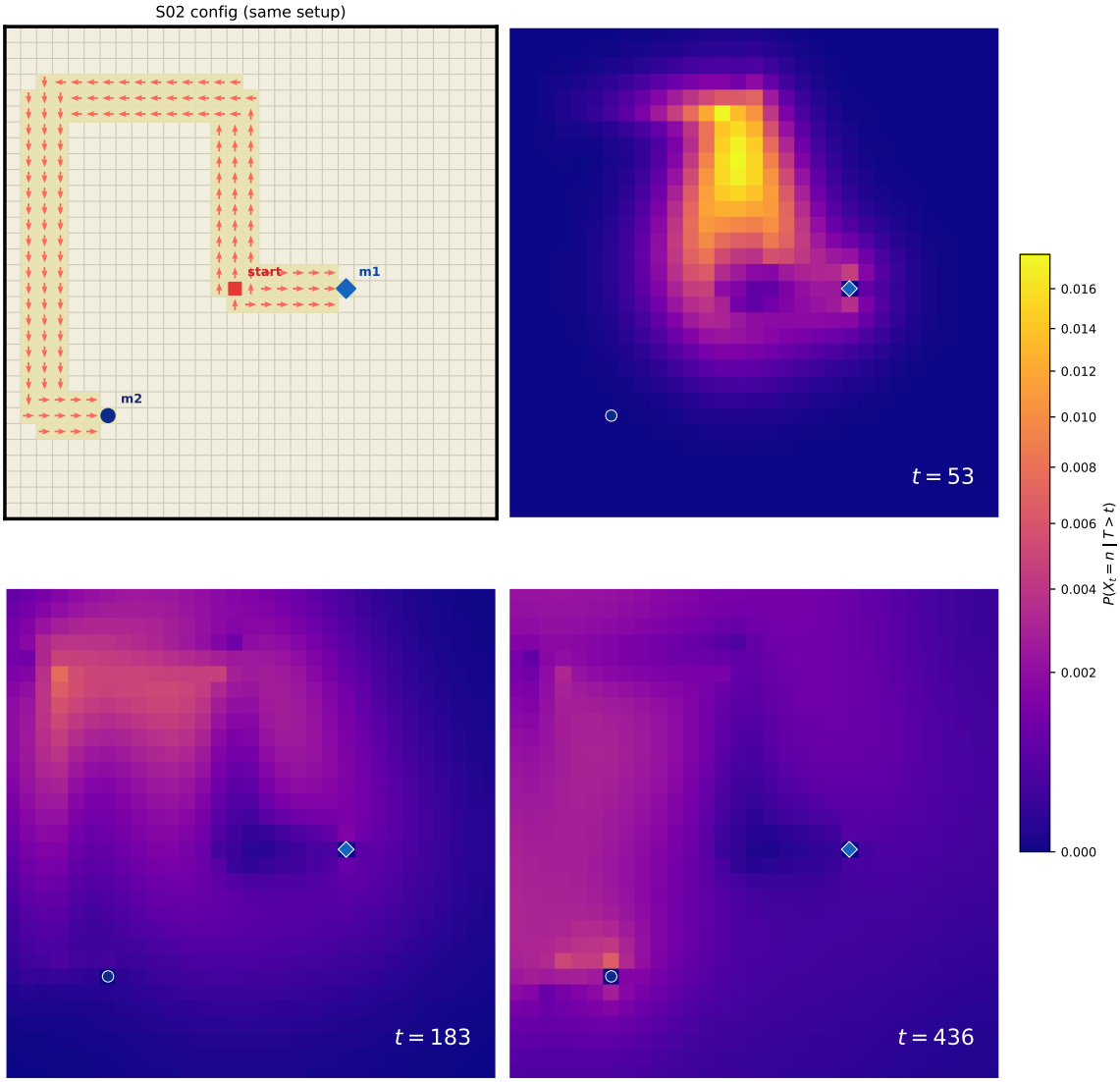


图 11: S02 配置 + 热图：左上为同一详细配置，右上/左下/右下分别为早峰、谷底、晚峰附近的条件占据概率热图。

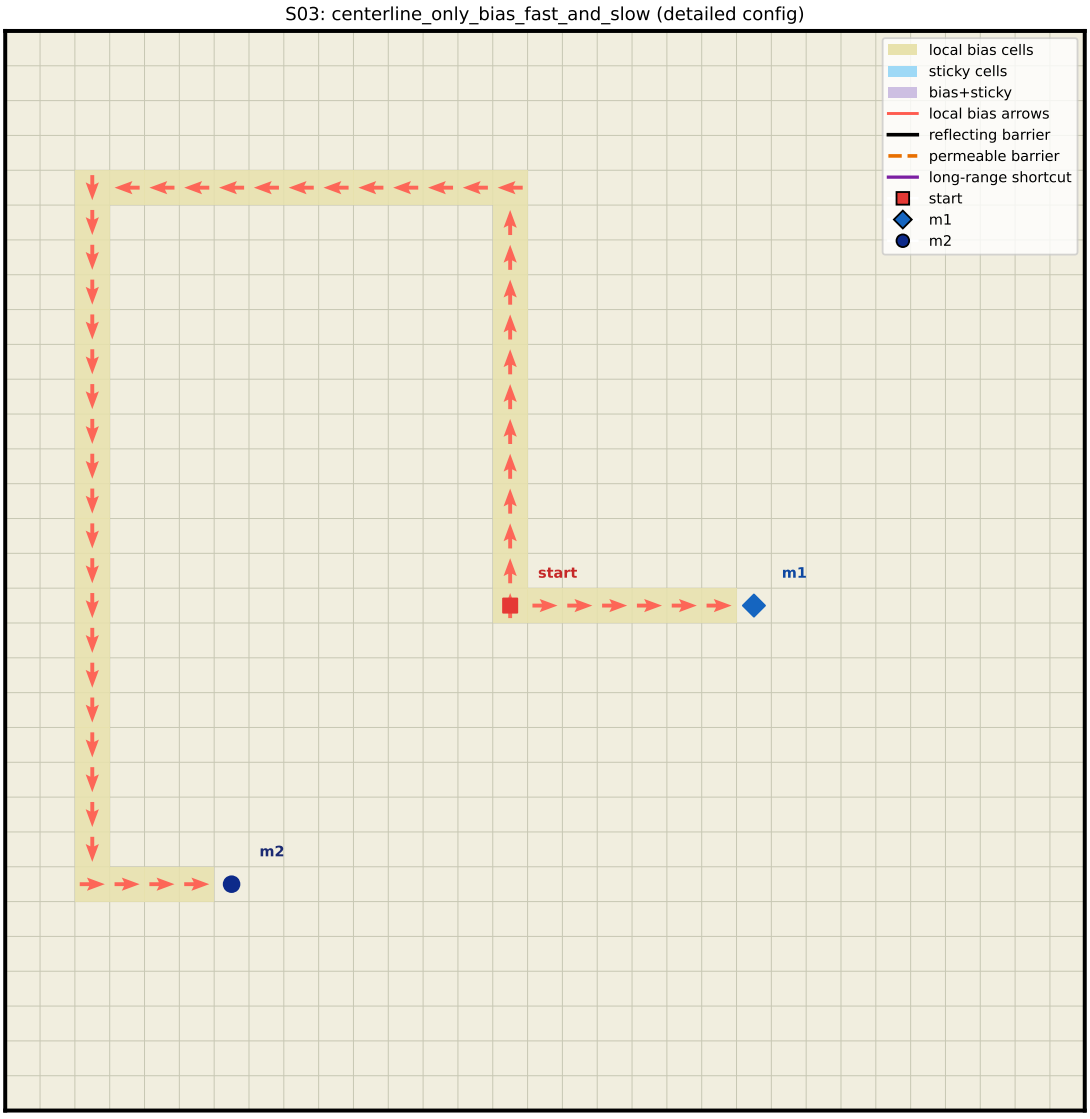


图 12: S03 详细配置图：仅中心线偏置时的箭头全分布。

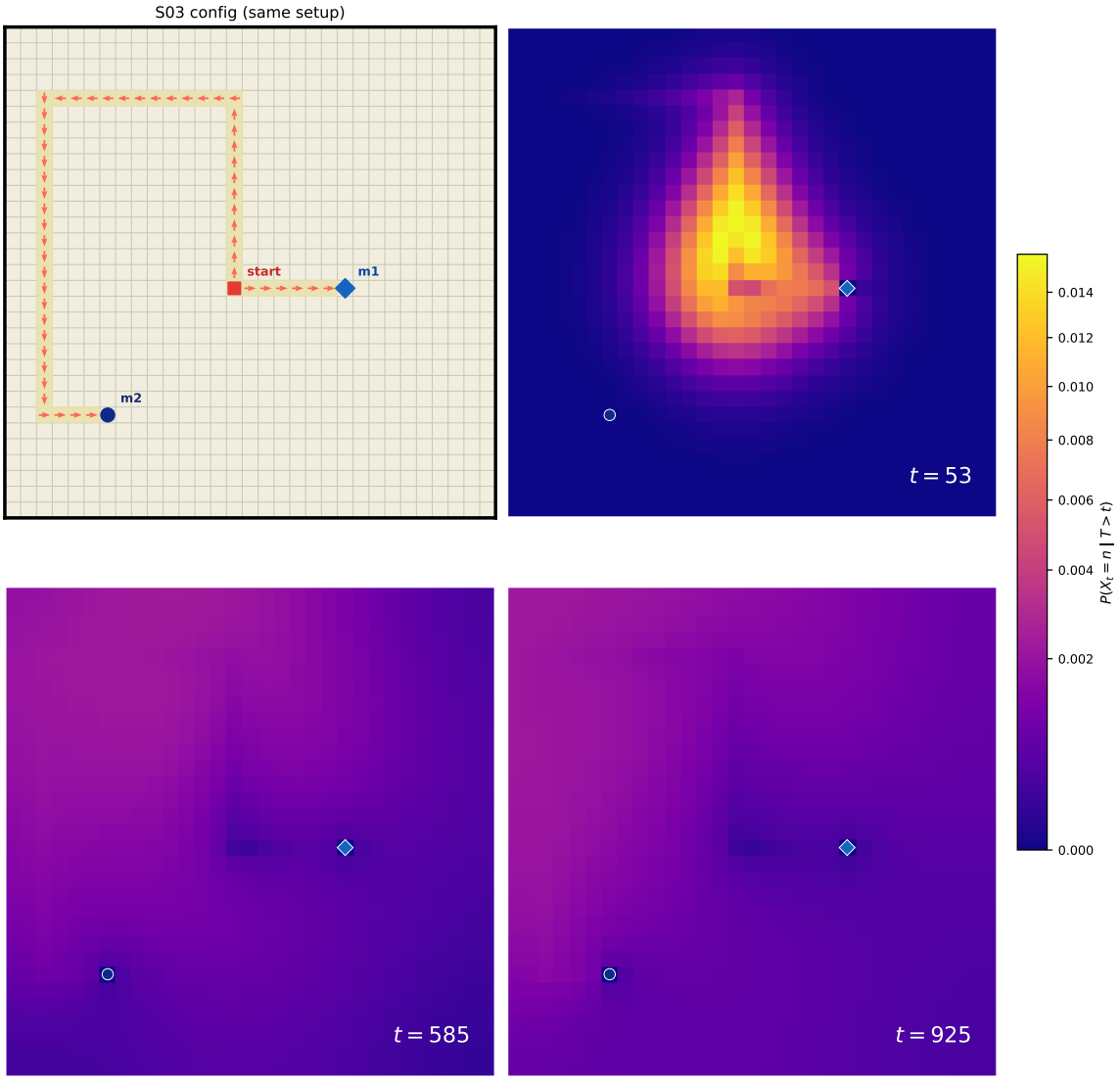


图 13: S03 配置 + 热图：显示该弱双峰配置在三阶段时刻的条件占据概率演化。

附录：红箭头全分布大图（每个偏置格点）

本附录中的红箭头不是抽样，而是对该案例中每一个有偏置的格点 (x, y) 都按其箭头方向绘制一支矢量。可直接看到“在哪些格点向东/西/南/北偏置”，因此拐弯是通过相邻区域箭头方向切换形成的，而不是一条单独曲线。

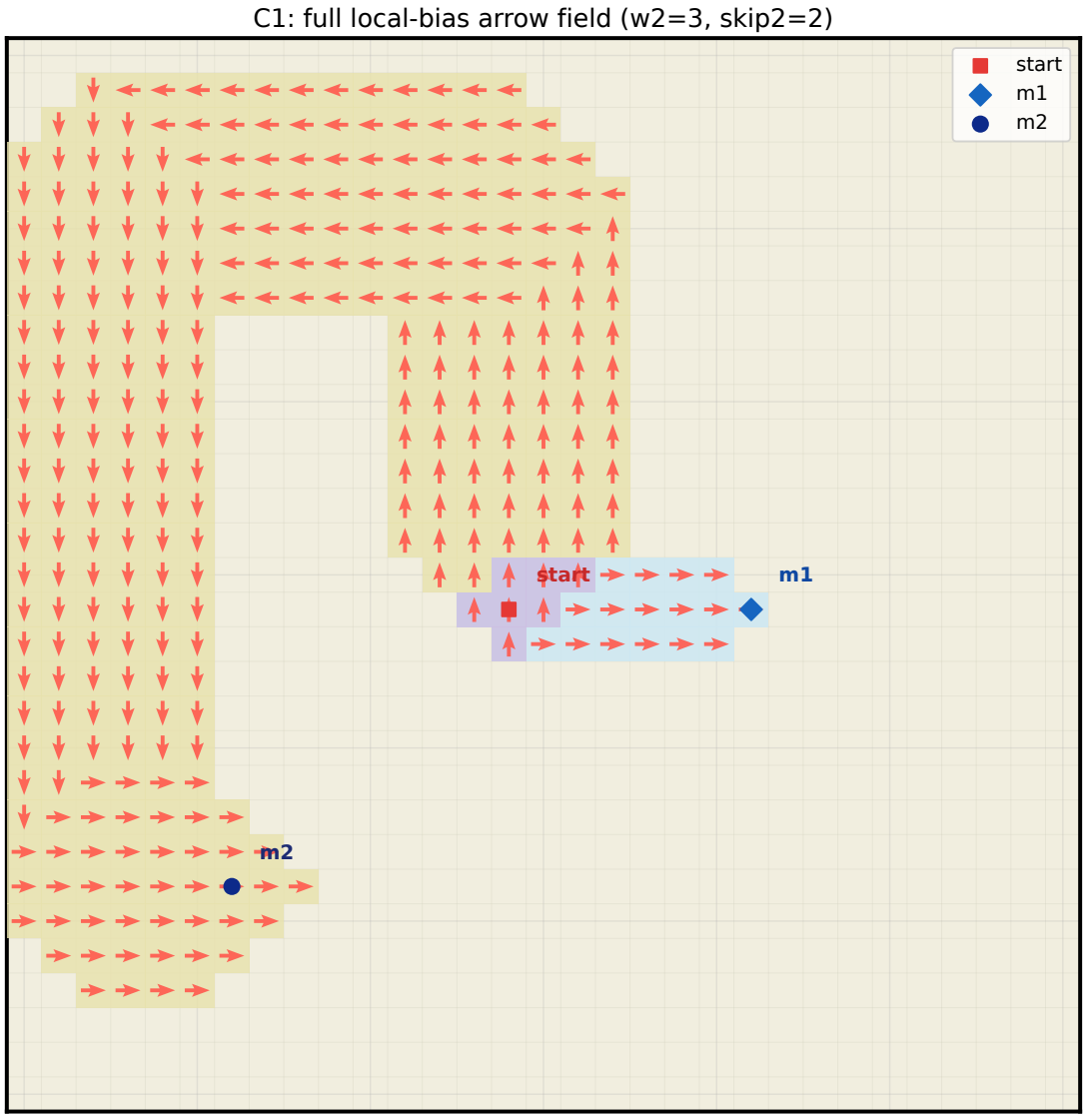


图 14: C1 全箭头分布大图（$w_2 = 3$, `skip2` $= 2$）：每个偏置格点均绘制红箭头。

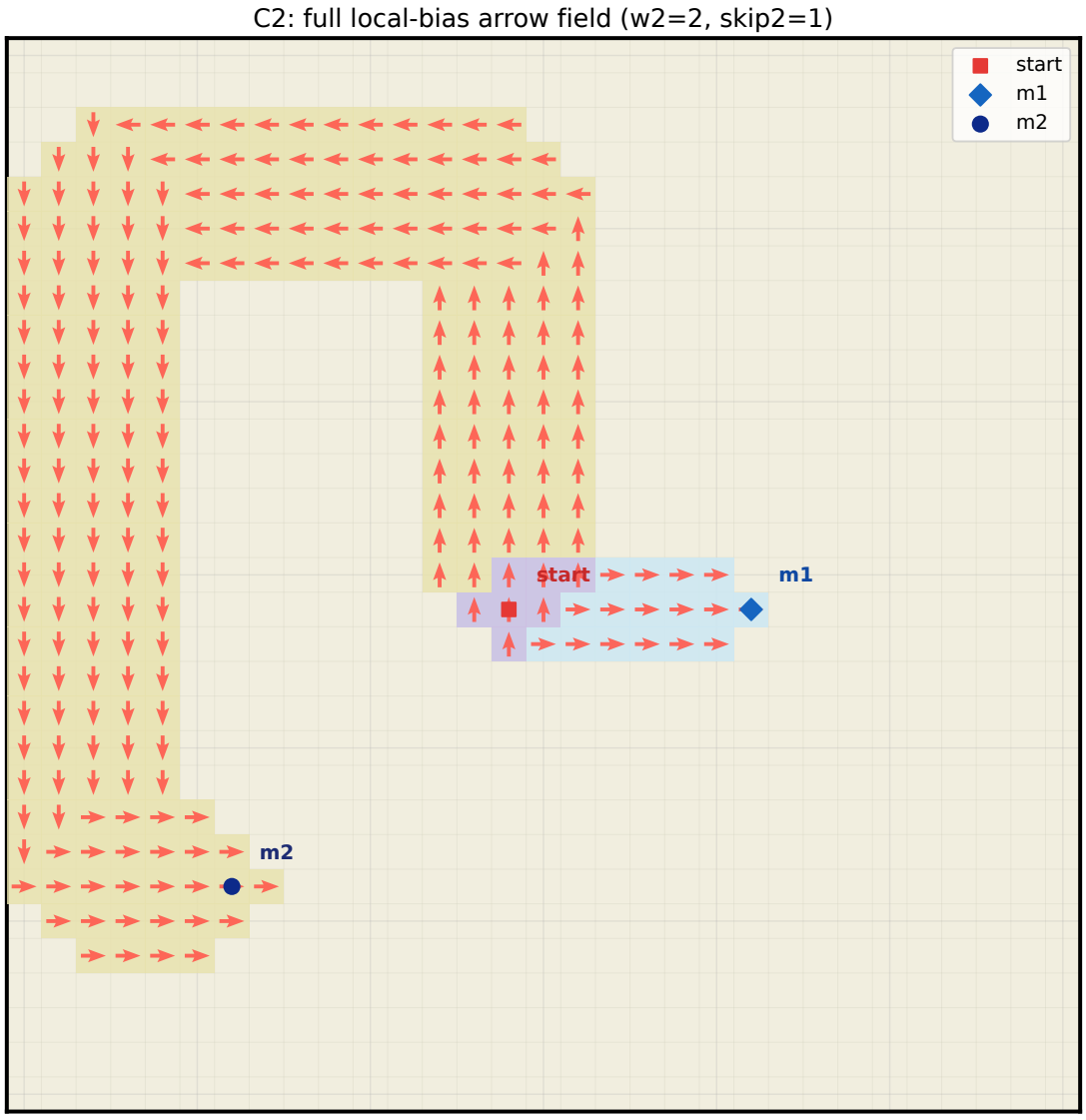


图 15: C2 全箭头分布大图（$w_2 = 2$, `skip2` $= 1$）：可见慢通道在起点附近更早接管偏置方向。

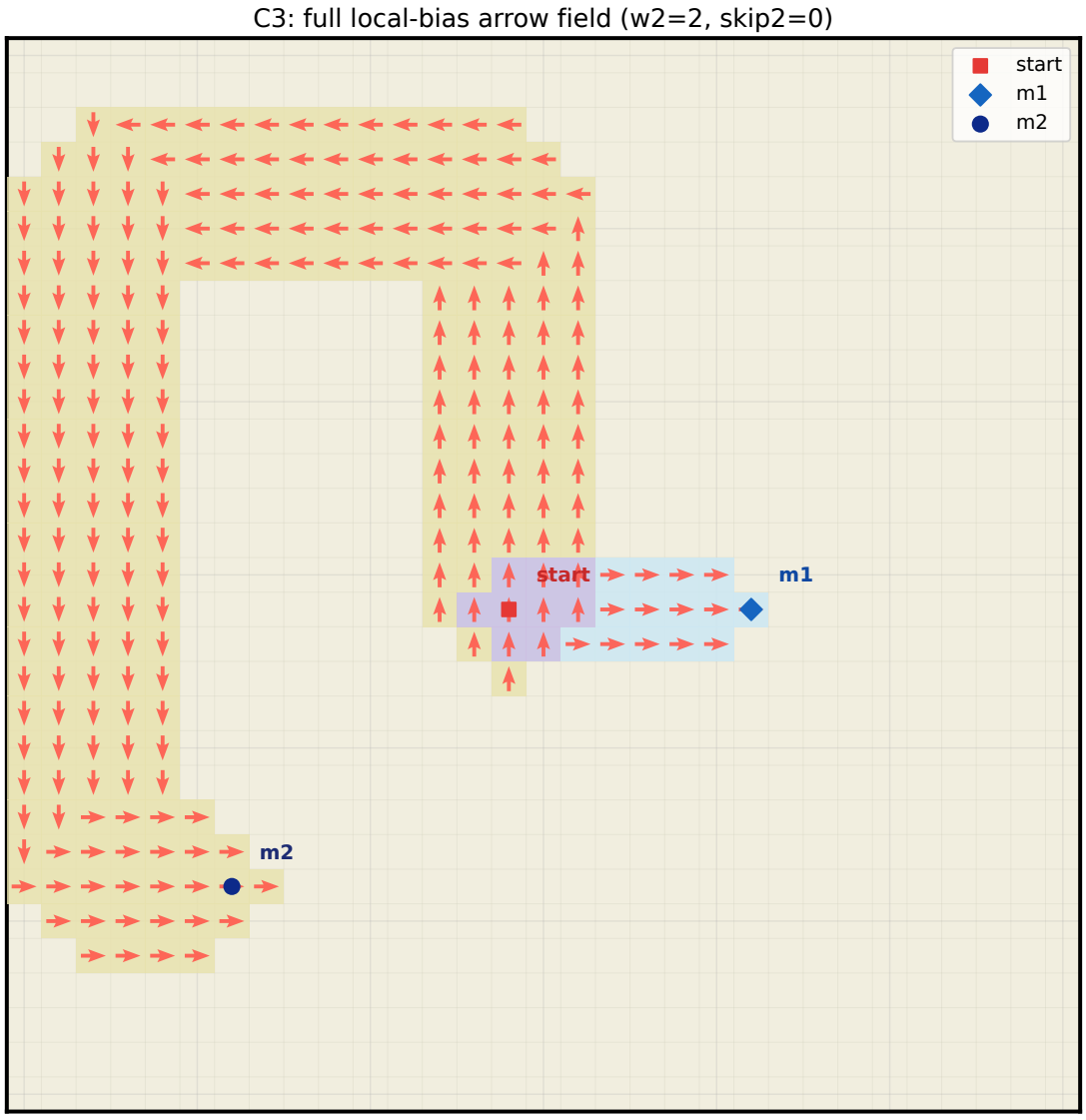


图 16: C3 全箭头分布大图（$w_2 = 2$, `skip2` $= 0$）：慢通道自起点即施加偏置。

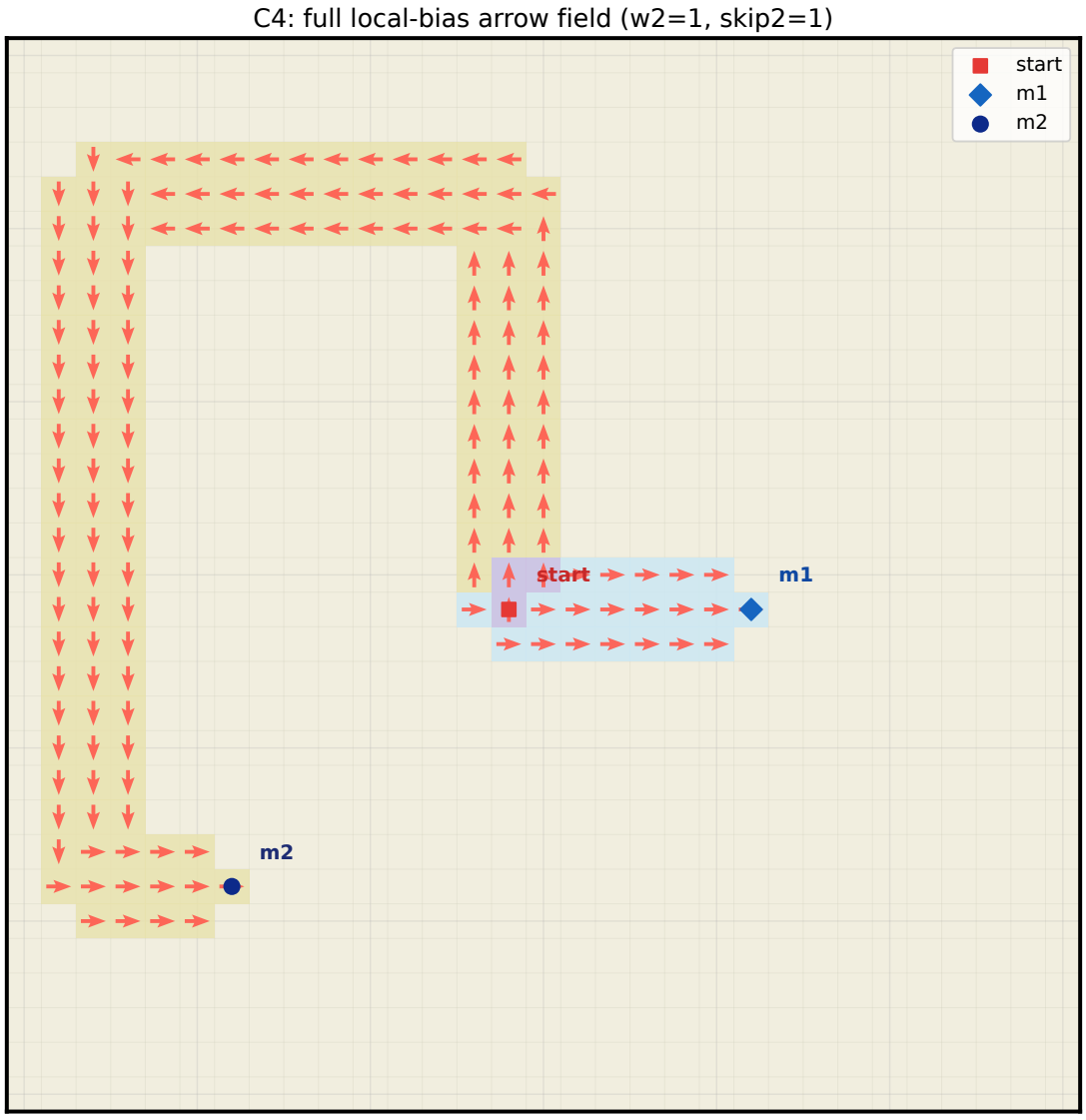


图 17: C4 全箭头分布大图（$w_2 = 1$，`skip2` $= 1$）：慢通道更窄，箭头带更细。