arXiv:2303.08535v1 [cond-mat.stat-mech] 15 Mar 2023

采用 Metropolis 蒙特卡洛动力学的盒中随机游走的奇异弛豫

Alexei D. Chepelianskii*Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, 91405 Orsay, France.*

SatyaN. Majumdar*Université Paris-Saclay, CNRS, LPTMS, 91405 Orsay, France.*

Hendrik Schawe*LPTM, UMR 8089, CY Cergy Paris Université, CNRS, 95000 Cergy, France.*

Emmanuel Trizac*Université Paris-Saclay, CNRS, LPTMS, 91405 Orsay, France.*（日期：2023年3月16日）

我们对一个简单蒙特卡洛算法的弛豫本征模进行解析研究。该算法对应于一个在盒子中通过均匀随机跳跃移动的粒子，超出盒子范围的移动会被拒绝。经过足够长的时间后，系统趋近平衡概率密度，该密度在盒子内均匀分布。我们表明，趋近平衡态的过程具有不同寻常的特征：当跳跃长度与盒子大小相当时，弛豫本征模的数量可能少得惊人，只有一个或两个。我们对这两种机制之间的转变给出了完整的解析描述。当仅存在一个弛豫本征模时，适当选择初始条件的对称性，便可使系统局部化地衰减至平衡态。在这种情况下，偏离平衡态的部分会集中在盒子的边缘，那里拒绝概率最大。最后，除了分析主方程的弛豫行为外，我们还描述了主方程的完整本征谱，包括次领先的特征模态。

I. 引言

蒙特卡洛类随机抽样技术能够用于求解确定性和随机性问题。尽管最初的 Metropolis–Hastings 算法是在经典多体统计物理的背景下提出的 [1], ，如今这一方法的推广形式已应用于从基础科学到经济或流行病学规划与预测等广泛领域 [2–11]。马尔可夫链蒙特卡洛技术 [12, 13]提供了一类简单而强大的算法：通过一系列具有适当转移概率的随机游走样本，得到目标概率分布。在 Metropolis-Hastings 算法中，部分尝试的移动可能会被拒绝，此时系统状态在一次迭代中保持不变。拒绝概率的设定旨在确保细致平衡 [2, 3, 13]。拒绝移动与接受移动的比例会影响算法的收敛速率，并取决于所尝试跳跃的概率分布。一条广为接受的经验法则是，若要使参数达到最佳收敛效果，尝试移动的接受概率应接近 50% [3, 14–16]。关于 Metropolis 算法弛豫速率的数学结果已有不少证明，但这些结果主要适用于小跳跃的扩散极限附近 [17–20] ；在该范围内，人们已发展出基于微局部分析的强大数学技术 [21–23] ，从而能够得到弛豫速率的精确结果。

概率分布随算法步骤数的演化通常由线性主方程描述。当施加细致平衡条件时，可以证明目标概率分布是主方程的一个不变特征向量。一般性定理保证了系统会收敛到所需的稳态 [24, 25], ，但对于主方程的完整特征谱及其特征向量，目前所知甚少，现有结果主要来自数值研究 [26, 27]。对于状态数有限的马尔可夫链，特征值的数量等于状态数，弛豫速率由绝对值最大的特征值决定 $|\lambda| < 1$ （$\lambda = 1$ 对应于平衡态／稳态）。然而，马尔可夫链蒙特卡罗算法通常涉及连续变量（例如构型空间中的粒子坐标），而对于这类情形，尚无关于特征谱结构的一般性定理。在 [28], 中，我们表明，连续变量情况下接受与拒绝之间的平衡可能导致两种机制之间发生转变。除了弛豫速率由主方程的主导特征值决定这一标准情形外，还会出现一种新的机制：随着典型跳跃长度的变化，弛豫转而由最大可能拒绝概率支配。在这种机制下，算法的实际稳态与预期稳态之间的差异会逐渐局域在拒绝概率最大的点附近，这在某种程度上令人联想到

零温蒙特卡洛动力学 [29]。这种类比使我们将两种机制之间的转变称为局域化转变，但当时尚未获得完整的解析理解。本文分析了一种简单的连续马尔可夫过程，其特征谱和特征向量可以通过解析方法求得，从而能够解析描述完整的特征值／特征向量谱，并深入研究局域化转变。第二节定义了本文所研究的蒙特卡洛动力学所基于的、限制在盒子中的随机游走，并讨论由此产生的一般弛豫行为。一个关键量是尝试随机跳跃的幅度；根据其取值，系统的长时间演化会由不同机制支配。第三节讨论大跳跃的情形，此时弛豫本征模的数量最少；第四节则讨论较小跳跃的情形。由此呈现出一种新颖的弛豫图景：长时间解与平衡解之间的差异会“钉扎”在盒子边缘。第五节总结谱分析结果及其与弛豫的联系。第六节给出结论。附录中，我们通过直接数值实验以及对主方程进行数值模拟，详细比较了针对 Metropolis 算法弛豫过程的解析计算与数值模拟，二者吻合极佳。

II. 设定：主方程与弛豫动力学

A. Metropolis 规则

本文关注一个被限制在盒子 $[-L, L]$中的简单随机游走：在每个离散时间步，随机游走粒子尝试从位置 x_{n-1} 跳至 $x_n = x_{n-1} + \eta_n$，其中 η_n 是从分布$w\eta$)中抽取的随机变量。若满足条件 $-L \le x_n \le L$，则接受跳跃 η_n，见图 1。该过程导出随机游走粒子的概率分布函数（PDF） P_n(x)所满足的以下主方程：

$$P_n(x) = \int_{-L}^{L} P_{n-1}(x')\, w(x - x')\, dx' + R(x) P_{n-1}(x). \tag{1}$$

右侧第一项描述在第 n 步从其他位置x'（第 $n-1$ 步）流向位置 x 的净概率流。第二项描述粒子在第 ($n-1$) 步位于位置 x，且在下一步仍停留在该位置的概率。该项：

$$R(x) = 1 - \int_{-L}^{L} w(x' - x)\, dx' \tag{2}$$

描述了.....的概率 从 x 尝试的移动被拒绝。函数 P_0(x) 给出了
随机游走粒子并设置 in 主方程的初始条件。

我们可以检验这个主方程的一些一般性质。将式 (1) 对 x积分，可以验证每一步 n 的总概率均守恒。另一个一般性检验是，对于 $x \in [-L, L]$， P_∞(x) $= 1/(2L)$ 是式 (1) 的一个不动点解，与跳跃概率密度函数 $w(\eta = x - x')$ 无关。因此，在长时间演化中，系统将趋近于这个不动点，作为其稳态“平衡态”解。由于跳跃分布函数是对称的，方程 (1) 直接为自伴，并且在 (-1， 1] 中具有实特征值（有趣的是，由于细致平衡 [28, 30]，对于一般的 U(x)，这一性质也成立）。

B. 收敛速率和长时间演化

一个核心关注的问题是，随着时间 n 增长， $\delta P_n \equiv P_n - P_\infty$ 趋于零的速度。收敛速率可以根据某个可观测量$\mathcal{O}$(x)偏离平衡态的长时间极限来定义：

$$\log \Lambda \;=\; \max_{\{\mathcal{O}(x), P_0(x)\}} \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \left| \int \mathcal{O}(x)\, \delta P_n(x)\, dx \right| \tag{3}$$

其中，最大值是在所有可能的函数 $\mathcal{O}$(x) 和初始分布 P_0(x) 中取的。若 $\Lambda < 1$，则概率分布 $P_n\ x$ n $|P_n\ x\ - P_\infty\ x\ |$ ∝ ( ) 会以指数速度收敛到平衡分布（当 $\Lambda^n \propto e^{-n/\tau}$ $\tau = -\ \Lambda^{-1}$ 较大时），即 ( ) ( )，其中 (log) 表示去相关时间（以蒙特卡洛算法步骤数计）。收敛速率 –log(Λ) > 0 是衡量算法优劣的指标； Λ 越小，弛豫速率越大。

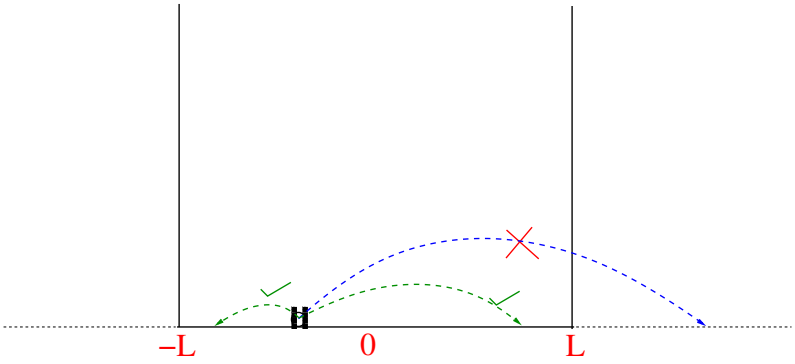


图 1. 盒子 $[-L, L]$ 中的一个粒子（以实心圆表示）在每个离散时间步尝试进行一次跳跃，随机位移 η 从对称连续分布 $w(\eta)$中独立抽取。如果尝试的跳跃会使粒子移出盒子 $[-L, L]$，则该移动会被拒绝（示意图中以蓝色虚线和红色叉号表示禁止移动），粒子留在当前位置。然而，如果跳跃会使粒子到达盒子 $[-L, L]$内的新位置，则跳跃获准，粒子移动到该新位置（获准的位移以绿色虚线表示）。

若主方程 (1) 的弛豫由其特征谱决定，则 $\Lambda = \max|\lambda|$，其中最大值是在主方程的所有特征值 $\lambda \neq 1$ 中取的。另一方面，算法弛豫速率也可能受到拒绝事件的限制： $\Lambda = \max_{x\in[-L,L]} R(x)$。对于盒势，拒绝概率在边界 $x = \pm L$处达到最大值；对于对称的 $w(\eta)$，此处的拒绝概率为 $1/2$。由此得到一般界

$$\Lambda \geq 1/2, \tag{4}$$

这为收敛速率设定了上限。本研究的主要目标之一，是考察 λ 如何取决于 $w(\eta)$所表征的典型跳跃长度。

对于任意点 x，都可以构造一个形式上的奇异特征函数，其特征值为拒绝概率$R(x)$。考虑满足以下条件的 $\Psi_{R(x)}$：仅当 $y = x$ 时， $\Psi_{R(x)}(y) = 1$；而对于所有其他 $y \neq x$， $\Psi_{R(x)}(y) = 0$。将其代入主方程 (1) 可知， $\Psi_{R(x)}$ 是一个特征函数，且其特征值为 $\lambda = R(x)$。这类解几乎处处为零。尽管如此，我们将在下文证明，它们会为特征向量展开增加一项，而马尔可夫链定义在离散集合上的主方程中并不存在这一项。为突出平滑特征函数的缺失，我们将 $R([-L, L])$称为特征值的奇异连续谱。

下面，通过显式求解盒子问题的主方程，我们证明，为了描述两种可能的弛豫情形，概率分布的特征函数展开为

$$P_n(x) = \sum_{\lambda\in\{\lambda_0\ldots\lambda_{\mathcal{N}}\}} \mathcal{A}_\lambda\, \mathcal{P}_\lambda(x)\, \lambda^n + \mathcal{L}_n(x), \tag{5}$$

其中， $\mathcal{L}_n(x)$ 描述奇异连续谱的贡献，振幅 $\mathcal{A}_\lambda$ 由初始分布 $P_0(x)$ 与主方程特征函数的重叠确定。这里，离散求和遍历有限个（也可能很少的） $\mathcal{N}+1$ 项，其中 $\mathcal{N} \geq 0$。特征值按如下方式排序： $\lambda_0 \geq \lambda_1 \geq \lambda_2 \ldots$，其中 $\lambda_0 = 1$ 对应平衡解。剩余项 $\mathcal{L}_n(x)$ 在大时间 $n \to \infty$下局域于有限个点 x_l 附近，这些点是式 (1) 中拒绝率 $R(x)$ 的最大值所在处：对于任意 $x \neq x_l$， $\lim_{n\to\infty} \mathcal{L}_n(x)/\mathcal{L}_n(x_l) = 0$。从这个意义上说，项 $\mathcal{L}_n$ 渐近收敛到一个几乎处处为零的函数，就像奇异连续谱的特征函数一样。情形 $\mathcal{N} = 0$ 对应于局域化情形，此时展开中只有平衡项 $\lambda_0 = 1$，而弛豫完全由 $\mathcal{L}_n$ 项支配。我们已在 [28] 中推导出由 $\mathcal{L}_n$支配的渐近行为的显式解析表达式，适用于具有 $\mathcal{N} = 0$的问题；然而，对于 $\mathcal{N}$取不同值的参数，无法得到显式解。本文将推导适用参数范围更广的精确解，从而能够解析地描述 $\mathcal{N} = 1$ 与 $\mathcal{N} = 2$之间行为的变化。

C. 盒子约束的谱问题

为便于进行解析推导，以下我们考虑前文提到的均匀跳跃分布情形：

$$w(\eta) = \frac{1}{2a}\left[\theta(\eta + a) - \theta(\eta - a)\right]. \tag{6}$$

这是大量蒙特卡洛模拟中一种自然的选择，并使得能够显式求出关于 $a \geq 2L/3$ 的主方程的特征值/特征函数解析解。这将使我们能够确定式（1）中 Metropolis-Hastings 算法的特征谱所蕴含的微妙性质，并以完全解析的方式描述弛豫性质中的局域化转变。我们的结果还将表明，对于 $a = 2L$，式（6）中关于 $w(\eta)$ 的形式实现了式（4）中的下界 $\Lambda = 1/2$，因此是最优选择。

下文中，位置和长度均以盒子尺寸为单位，因此 $L = 1$。给定式（6）的跳跃分布，主方程（1）可写为

$$P_n(x) \;=\; \frac{1}{2a}\int_{\max(-1,x-a)}^{\min(1,x+a)} P_{n-1}(x')dx' + \frac{|a-1+x| + |a-1-x| + 2a - 2}{4a} P_{n-1}(x). \tag{7}$$

于是，主方程相应的特征值/特征函数方程为：

$$\frac{1}{2a}\int_{\max(-1,x-a)}^{\min(1,x+a)} \Psi(x')dx' + \frac{|a-1+x| + |a-1-x| + 2a - 2}{4a}\Psi(x) = \lambda\Psi(x), \tag{8}$$

其中，λ 是特征值，Ψ 是相应的特征函数。下文中，我们用紧凑记法$\Psi(x)$表示特征函数，仅在需要完整的概率分布 $P_n(x)$时才使用记法 $\mathcal{P}_\lambda$。我们求解特征值/特征函数的解析方法与参考文献 [31] 中的方法有些相似。对式（8）关于 x 求导后，可将该积分方程转化为一组耦合微分方程。我们将发现，这组方程中耦合方程的数量取决于跳跃距离 a。

III. 大跳跃的求解（$a > 1$）

A. $a \geq 2$ 的情形：无限谱简并

对于 $a > 2$，特征值方程 Eq. (8) 可简化为：

$$\lambda\Psi(x) = \frac{1}{2a}\int_{-1}^{1}\Psi(y)dy + \left(1 - \frac{1}{a}\right)\Psi(x). \tag{9}$$

在（-1,1）区间上积分，我们得到 $\lambda S = S$其中 $S = \int_{-1}^{1}\Psi(y)dy$。于是有两种可能的解：$S \neq 0$，得到 $\lambda = 1$，这对应于稳态分布（$\Psi = \text{const}$）；或者 $S = 0$，代入 Eq. (9) 后得到：

$$\lambda_1 = 1 - \frac{1}{a}, \quad (\text{for } a > 2). \tag{10}$$

特征值 (10) 是无限简并的，因为所有满足 $\int_{-1}^{1}\Psi(y)dy = 0$ 的函数实际上都是特征向量。此外，不存在其他特征值。对于 $a = 2$，我们得到最优值 $\lambda_1 = 1/2$，见 Eq. (4)。

在此情形下 $a > 2$，完整的积分方程 (7) 为

$$P_{n+1}(x) \;=\; \frac{1}{a}\,\frac{1}{2} \;+\; \left(1 - \frac{1}{a}\right)P_n(x), \tag{11}$$

考虑到归一化 $\int_{-1}^{1}P_{n-1}(x')dx' = 1$。方程 (11) 可作如下物理解释：从任意位置 x_0 出发，尝试跳跃时，以概率 $2L/(2a) = 1/a$ 接受跳跃，因为 $L = 1$，且与 x_0无关。因此，这次跳跃后行走者密度在 $[-1, 1]$中均匀分布。以互补概率$1 - 1/a$拒绝跳跃，此时 P_{n-1} 不变。将方程 (11) 改写为

$$P_n(x) \;=\; \frac{1}{2} \;+\; \left(1 - \frac{1}{a}\right)\left(P_{n-1}(x) - \frac{1}{2}\right) \tag{12}$$

可得对所有 n均成立的解

$$P_n(x) = \frac{1}{2} + \left(1 - \frac{1}{a}\right)^n \left(P_0(x) - \frac{1}{2}\right), \tag{13}$$

这表明了特征值 $\lambda_1 = 1 - 1/a$。这种行为源于均匀势与均匀跳跃分布所具有的高度对称性，并不能代表对约束势 $U(x)$ 采取更一般选择时的情况。

虽然 $a > 2$ 的解很容易求得，但 $a < 2$ 的问题则更难处理。我们成功求得了 $a \geq 2/3$ 的解析解；这使我们能够观察在对式 (1) 所依据的算子进行平滑变化时，无限简并的特征值 λ_1 如何演化。

B. $1 \leq a < 2$ 的解

对于 $a \leq 2$，当初始位置靠近 ± 1 处的边界墙时，特征值方程变为：

$$\lambda\Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a}\int_{x-a}^{1} \Psi(y)dy + \left(\frac{1}{2} - \frac{1-x}{2a}\right)\Psi(x) & (x > -1+a) \\ \frac{1}{2a}\int_{-1}^{x+a} \Psi(y)dy + \left(\frac{1}{2} - \frac{x+1}{2a}\right)\Psi(x) & (x < 1-a). \end{cases} \tag{14}$$

对于 $1 < a \leq 2$，式 (9) 适用于中心区域 $x \in (1-a, -1+a)$。对于描述弛豫模态且满足 $\lambda < 1$、$\int_{-1}^{1}\Psi(y)dy = 0$ 的“波函数”，若 $\Psi(x)$ 在 $(1-a, -1+a)$ 中某处非零，我们便可得到 $\lambda = 1 - 1/a$。相应的特征函数在 $x < 1-a$ 和 $x > -1+a$ 时恒为零，并满足 $\int_{-1}^{1}\Psi(y)dy = 0$。因此，特征值 $\lambda = 1-1/a$ 仍然是无限简并的。其余特征值可通过假设 $\Psi(x) = 0$ 对 $x \in (1-a, -1+a)$ 成立，并将式 (14) 的积分方程转化为微分方程组来求得。

我们引入

$$\Psi(x) = \Psi_L(1-a-x) \qquad \text{for} \quad x \in [-1, 1-a] \tag{15}$$

$$\Psi(x) = \Psi_R(1-x) \qquad \text{for} \quad x \in [-1+a, 1], \tag{16}$$

使得 Ψ_L 和 Ψ_R 的自变量都属于 $(0,\ 2-a)$。这一变量替换使我们能够将积分方程转化为两个耦合微分方程：

$$\frac{d}{dx}\left[(x - 2 - 2a(\lambda-1))\Psi_L\right] = \Psi_R \tag{17}$$

$$\frac{d}{dx}\left[(x + 2a\lambda - a)\Psi_R\right] = \Psi_L \tag{18}$$

边界条件为 $\Psi_L(0) = 0$。解为

$$\Psi_L(x) = \frac{x(2 - 3a + 4a\lambda)}{2(1 + a(-1+\lambda))(-2 + x + 2a - 2a\lambda)} + \log\left|\frac{(-2 + x + 2a - 2a\lambda)(-a + 2a\lambda)}{(-2 + 2a - 2a\lambda)(x - a + 2a\lambda)}\right|. \tag{19}$$

已知 $\Psi_L(x)$ 后，可由方程（17）得到 $\Psi_R(x)$。

此时，唯一未知量是 λ，可由一致性条件 $\int \Psi(y)dy = 0$确定，该条件为

$$\int_0^{2-a} dx(\Psi_L(x) + \Psi_R(x)) = 0. \tag{20}$$

这给出了代数特征值方程：

$$-2 + 3a - 4a\lambda + (2 + 2a\lambda - 2a)\log\left|\frac{2 + 2a\lambda - 2a}{a - 2a\lambda}\right| = 0. \tag{21}$$

我们发现，对于 $1 \leq a < 2$，该方程在区间 $\lambda \in [-1, 1]$ 内有两个解。其中一个是伪解，$\lambda = \frac{3a-2}{4a}$：由式 (19) 得到的相应“波函数” Ψ_L 恒为零 $\Psi_L = 0$。因此只有一个有效解；使用变量 (X, Y) 显式重写式 (21) 即可求得该解，这些变量定义为 $\lambda = \frac{-4-X+3Y}{4\ Y-2}$() 和 $a = 2 - Y$，此时式 (21) 可化为简单得多的形式 $(X+Y)\log[(X+Y)/(X-Y)] = 2X$。由此可显式求得 ~~$\lambda_1$~~：

$$\lambda_1 = \frac{(3-\nu)a + 2\nu - 2}{4a} \tag{22}$$

其中 $\nu \simeq 1.77187$ 是以下方程的解：

$$-\nu + \frac{1+\nu}{2}\log\frac{\nu+1}{\nu-1} = 0. \tag{23}$$

可以验证，与方程（22）对应的特征函数 $\Psi(x) = -\Psi(-x)$ 是反对称的。由于该特征函数对应于特征值 λ_1，下文将其记为 $\Psi_1(x)$。图2给出了 Ψ_1 的图像。它是连续的，但在 $1-a$ 和 $a-1$ 处导数不连续。

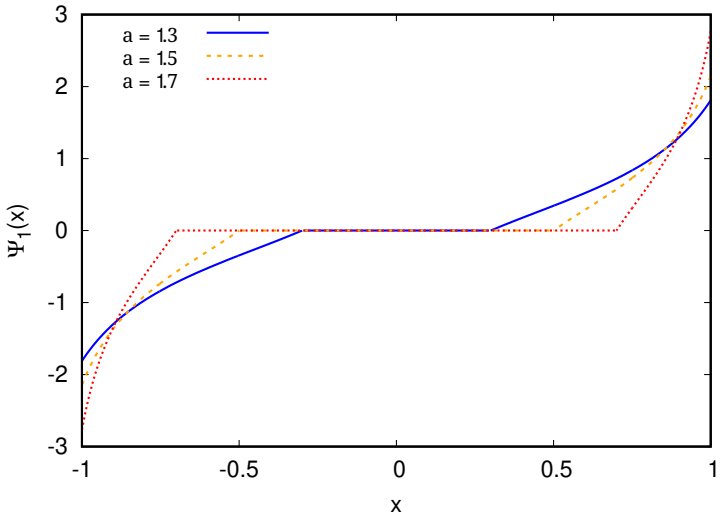


图2. 三个 a 值下，特征函数 $\Psi_1(x)$（反对称）的图像，其中 a 位于范围 $1 < a < 2$ 内。

方程（10、22）解析地描述了均匀跳跃分布 $w(x)$ 下 Metropolis 算法方程（1）的弛豫速率行为。它们给出了区域 $a \geq 1$ 内 λ_1 的显式值，并证明最小值 $\lambda_1 = 1/2$ 仅在 $a = 2$ 处取得。它们还揭示了该问题中特征值的不寻常结构。对于 $a \geq 2$，只有两个特征值： $\lambda_0 = 1$ ，它对应于对称模态；以及无穷简并的特征值 $\lambda = 1 - 1/a$ ，它既可以对应对称波函数，也可以对应反对称波函数。对于 $1 \leq a < 2$，这两个特征值表达式仍然成立，简并度也相同；此外，还会出现一个由方程（22）描述的新非简并模态，它在最优值 $a = 2$ 处从 $\lambda = 1 - 1/a$ 分支分离出来。相应的特征函数是反对称的，并局域于系统边缘，即拒绝概率最大的地方。第五节将总结谱性质。附录 A 展示了特征函数的行为。

C. $1 < a < 2$的对称初始条件弛豫

在上一节求解 $1 < a < 2$ 的特征值方程时，我们发现该范围内只有两个特征值满足 $\lambda < 1$ 。我们还证明了对应于 λ_1 的特征向量是反对称的。这引出了一个问题：对于这类对称观测量，该特征向量的贡献为零，其弛豫动力学会是怎样的？我们将在此证明，一般而言，对称观测量的弛豫并非由 $\lambda_2 = 1-1/a$决定；只有当 $P_0(x)$ 在区间 $(-1+a,\ a-1)$ 之外为零时例外，此时 III B 节表明 $P_0(x) - 1/2$ 属于 λ_2的特征子空间。弛豫实际上由奇异连续谱支配。

将注意力限制在对称观测量上，我们可以假设 $P_n(x)$是对称的。于是，主方程 (1) 可改写为仅取决于限制在 $x \in (-1,\ 1-a)$ 上的 $P_n(x)$ 的形式。

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{2a} - \frac{1}{2a}\int_{-1}^{-x-a} P_n(y)dy + \left(\frac{1}{2} - \frac{x+1}{2a}\right)P_n(x). \tag{24}$$

通过引入 $x = -1 + (2-a)\tilde{x}$ ，对 x 进行重新缩放会更方便，其中 $\tilde{x} \in (0,1)$。然后将 $P_n(x)$ 表示为

$$P_n(x) = \frac{1}{2} + \phi_n(\tilde{x}) \tag{25}$$

我们发现，公式（24）可写成更简单的形式

$$\phi_{n+1}(\tilde{x}) = -\tilde{K}\int_0^{1-\tilde{x}} \phi_n(\tilde{y})d\tilde{y} + \left(\frac{1}{2} - \tilde{K}\tilde{x}\right)\phi_n(\tilde{x}) \tag{26}$$

其中 $K = (2-a)/2a$。

在 III B 节中，我们证明了特征向量假设 $\phi_n(\tilde{x}) = \lambda^n\phi(\tilde{x})$ 无法得到具有良好定义的特征向量的解。因此，我们转而提出以下拟设，用于描述主方程（26）中 $\phi_n(\tilde{x})$ 的渐近行为：

$$\phi_n(\tilde{x}) = 2^{-n}\left[e^{-nf(\tilde{x})} + h_n\left(e^{-nf(1-\tilde{x})} - 1\right)\right] \tag{27}$$

其中，函数 $f(\tilde{x})$ 满足 $f(0) = 0$，但当 $x > 0$ 时 $e^{-nf(\tilde{x})}$ 快速衰减。常数 h_n 的取值使得 $\int_0^1 \phi_n(\tilde{x})d\tilde{x} = 0$。这种 $\phi_n(\tilde{x})$ 的形式使我们能够将方程（26）中的积分替换为边界项；通过分部积分，在 $n \to \infty$ 的极限下，这些边界项成为积分的主导渐近贡献。例如，我们采用以下近似：

$$\int_0^{1-\tilde{x}} e^{-nf(\tilde{y})}d\tilde{y} = \int_0^{1-\tilde{x}} \frac{-1}{nf'(\tilde{y})}(e^{-nf(\tilde{y})})'d\tilde{y} = \frac{1}{nf'(0)} + O(n^{-2}) \tag{28}$$

这里我们还忽略了与 $e^{-nf(1-\tilde{x})}$ 成正比的第二个边界项，因为当 $\tilde{x} < 1$ 时，它随 n 指数级快速衰减。利用这一点以及类似的展开，并忽略所有衰减速度快于 n^{-1} 的项，我们得到

$$f(\tilde{x}) = -\log(1 - 2\tilde{K}\tilde{x})\ ,\ h_n = \frac{1}{2n\tilde{K}}. \tag{29}$$

将这一结果改写为原变量后，我们得到 $P_n(x)$ 与其平衡值之差的主导渐近项：

$$P_n(x) - 1/2 \propto \left[R(x)^n - \frac{a}{(2-a)n}\left(2^{-n} - R(|x|-a)^n\right)\right]\theta(|x|+1-a). \tag{30}$$

我们注意到，在边缘附近（例如左边缘 $x = -1$ 附近），$\delta P_n(x)$ 会弛豫到一种固定渐近形式：

$$\delta P_n(x) \propto \exp(-n(1+x)/a). \tag{31}$$

有趣的是，这种依赖关系类似于零温蒙特卡洛动力学中得到的标度解[29],，其中比例常数取决于初始条件。当 $P_0(x)$ 在 $x \in (1-a,\ a-1)$ 之外并非恒等于零时，这一形式成立。附录 A 中图（7）所示的对主方程（1）进行直接数值迭代，证实了公式（30）的有效性。我们看到，对于 $1 < a \leq 2$，$P_n(x)$ 与其稳态值 $P_\infty(x)$ 之差的对称分量 $= 1/2$ 会在 $R(x)$ 达到最大值的位置 $x = 1$ 附近形成峰值，但并不会恰好趋于一个 δ 函数，因为整个区间上的积分必须为零。

将公式（30）的渐近行为推广后，我们可以用以下方式描述该区域内向稳态弛豫的过程：

$$\lim_{n\to\infty} \frac{P_n(x') - P_\infty(x')}{\left(\max_{x'} R(x')\right)^{-n}} = 0 \tag{32}$$

除 x' 拒绝概率 $R(x)$ 达到最大值的点之外，处处如此；在这些点上，极限可能非零，并且取决于初始条件。看来，上述关系式（32）是公式（5）在离散求和因对称性（继承自初始条件）而抵消时的特例。

IV. $2/3 \leq a < 1$ 的解

A. 五区间划分

这里的方法与处理 $1 \leq a < 2$ 的方法类似：我们将可达域 $[-1, 1]$ 划分为若干子区间，并为每个子区间中的波函数表达式选择不同的原点，从而将特征向量方程转化为微分方程

。当 $2/3 \le a < 1$ 时，将定义域 $[-1,1]$ 划分为 5 个互不重叠的区间会比较方便： I_{-2}， I_{-1}， I_0， I_1，$I_2 = [-1, 1-2a]$， $[1-2a, -1+a]$， $[-1+a, 1-a]$， $[1-a, -1+2a]$， $[-1+2a, 1]$。在每个子区间中，我们写作 $\Psi(x) = \Phi_n(x - y_n)$，其中 y_n 是区间 I_n 的中心，且 $n \in \{-2,-1,0,1,2\}$。采用这些记号，方程 (8) 可转化为以下微分方程组：对于 $x \in [-1+a, 1-a]$:

$$(2a\lambda)\frac{d\Phi_{-2}}{dx} = \Phi_0 + \frac{d\left[(2a-1-x)\Phi_{-2}\right]}{dx} \tag{33}$$

$$(2a\lambda)\frac{d\Phi_0}{dx} = \Phi_2 - \Phi_{-2} \tag{34}$$

$$(2a\lambda)\frac{d\Phi_2}{dx} = -\Phi_0 + \frac{d\left[(2a-1+x)\Phi_2\right]}{dx}. \tag{35}$$

对于 $x \in [-a_2, a_2]$，引入 $a_2 = 3a/2 - 1$，得到

$$(2a\lambda)\frac{d\Phi_{-1}}{dx} = \Phi_1 + \frac{d\left[(a_2-x)\Phi_{-1}\right]}{dx} \tag{36}$$

$$(2a\lambda)\frac{d\Phi_1}{dx} = -\Phi_{-1} + \frac{d\left[(x+a_2)\Phi_1\right]}{dx}. \tag{37}$$

方程组 (33,34,35) 可化为关于 Φ_0 的二阶微分方程:

$$\frac{h_0}{2x_\lambda}\frac{d}{dx}\left[(x_\lambda^2 - x^2)\frac{d\Phi_0}{dx}\right] + \Phi_0 = A \tag{38}$$

其中 $h_0 = 2a\lambda$， $x_\lambda = 2a\lambda - 2a + 1$，而 A 是积分常数，会使 Φ_0 产生偏移。

方程 (38) 具有勒让德微分方程的形式，其解可用第一类勒让德函数 [32] 表示。将对称与反对称分量（它们的定义相差一个整体比例常数）分离后，可得:

$$\Phi_{0S}(x) = P_\sigma(x/x_\lambda) + P_\sigma(-x/x_\lambda) \tag{39}$$

$$\Phi_{0A}(x) = P_\sigma(x/x_\lambda) - P_\sigma(-x/x_\lambda) \tag{40}$$

其中 P_σ 是指标为 σ 的勒让德函数，其定义为:

$$\sigma = -\frac{a\lambda + \sqrt{a\lambda(4 - 8a + 9a\lambda)}}{2a\lambda}\ ,\ x_\lambda = 1 + 2a(-1+\lambda) \tag{41}$$

符号 Φ_{0S} 和 Φ_{0A} 强调它们分别是对称和反对称波函数。限制在区间 I_{-2} 和 I_2 上的波函数可表示为 Φ_0 的函数:

$$\Phi_2(x) = \frac{h_0(x+x_\lambda)}{2x_\lambda}\frac{d\Phi_0}{dx} + A \tag{42}$$

$$\Phi_{-2}(x) = \frac{h_0(x-x_\lambda)}{2x_\lambda}\frac{d\Phi_0}{dx} + A. \tag{43}$$

注意， A 是对所有波函数 Φ_{-2}， Φ_0， Φ_2的整体平移。

方程组 (36,37) 的解可用初等函数表示 s:

$$r_\lambda(x) = \frac{1}{2w_\lambda(x-w_\lambda)} + \frac{1}{4w_\lambda^2}\log\frac{w_\lambda - x}{w_\lambda + x}, \tag{44}$$

其中我们引入了记号 $w_\lambda = 2a\lambda - a_2 = 2a\lambda - \frac{3a}{2} + 1$。由此可得

$$\Phi_1(x) = C_2 + C_1 r_\lambda(x) \tag{45}$$

$$\Phi_{-1}(x) = C_2 - C_1 r_\lambda(-x), \tag{46}$$

C_1 和 C_2 是两个积分常数。

通过要求波函数在不同区间之间的连接点处连续，可以得到特征值方程。由于我们已将解分为对称类和反对称类，因此只需写出

区间 I_0、I_1 和 I_2 连接点处的连续性条件。由此得到 $\Phi_0(1-a) = \Phi_1(-a_2)$ 和 $\Phi_1(a_2) = \Phi_2(-1+a)$（提醒一下，$a_2 = \frac{3a}{2} - 1$）。

对于反对称波函数，对称性确定了 $A = C_2 = 0$，由此得到

$$r_\lambda(-a_2)\Phi_2(-1+a) - \Phi_0(1-a)r_\lambda(a_2) = 0. \tag{47}$$

考虑到定义了 $\Phi_0(x) = \Phi_{0A}(x)$ 的式 (40)，以及给出 $\Phi_2(x)$ 关于 $\Phi_0(x)$ 的函数关系的式 (42)，我们得到关于反对称波函数的特征值 λ 的显式方程。我们在图3中将此特征值记为 λ_1。

在对称子空间内，我们有 $\Phi_{-1}(-x) = \Phi_1(x)$。这一要求给出 $C_1 = 0$，并且我们发现 $\Phi_{-1}(x) = \Phi_1(x) = C_2 =$ 常数。在这种情况下，A 是对称解的整体平移，并由 $\int_{-1}^{1} \Psi(x)dx = 0$ 确定。匹配条件不依赖于 A，因此我们得到:

$$\Phi_2(-1+a) - \Phi_0(1-a) = 0 \tag{48}$$

其中，利用式 (39)，我们令 $\Phi_0(x) = \Phi_{0S}(x)$，并使用式 (42) 求得 $\Phi_2(x)$ 关于 $\Phi_0(x)$ 的函数关系。求解式 (48)，得到特征值 λ_2，如图3所示。根据五区间划分，我们重构出整个对称函数 $\Psi(x)$，并将其记为 $\Psi_2(x)$，因为它与 λ_2相关。见图4。

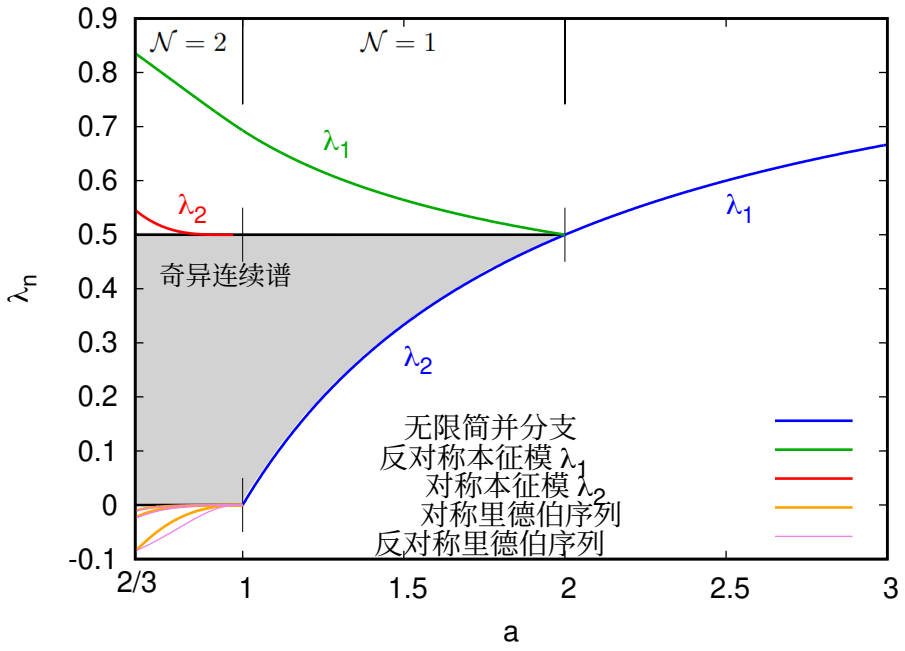


图 3. Metropolis 算法公式（8）在 $a \geq 2/3$ 下的精确特征值谱 λ_n $(n \geq 1)$ 概览。图的上半部分显示了相关离散弛豫模的值 $\mathcal{N}$，见公式（5）。此外，图 5 展示了当前图左下角附近的放大图，位置在点 $a = 1, \lambda = 0$ 附近。对于 $a > 2$，特征值为 λ_1 的分支是无限简并的。

公式（47、48）的特征值方程无法以一般形式解析求解。不过，这些方程可以用于数值求得特征值，并推导出它们的一些性质。对于对称和反对称特征函数，我们都发现了一列无限多个负特征值，它们满足性质 $\lambda \to 0$（当 $a \to 1$ 时），并且两种对称性各有一个正特征值。这两个特征值与其余特征谱分离，是奇异连续谱之上的仅有特征值，表明这种情况对应于 $\mathcal{N} = 2$。所有已得特征值的汇总图将在下一小节展示（见图（3））；此处我们着重介绍解析结果。

B. 放大观察 $a = 1, \lambda = 0$ 点附近

接下来，我们将考察 $\lambda \to 0$ 和 $a \to 1$对应特征值的渐近性质。根据式 (41)，这一极限对应于 $\sigma \simeq \frac{1}{\sqrt{-\lambda}} \to \infty$ 和 $\frac{1-a}{x_\lambda} \simeq a - 1 \to 0$。在此极限下分析式 (48,47) 的渐近性质，

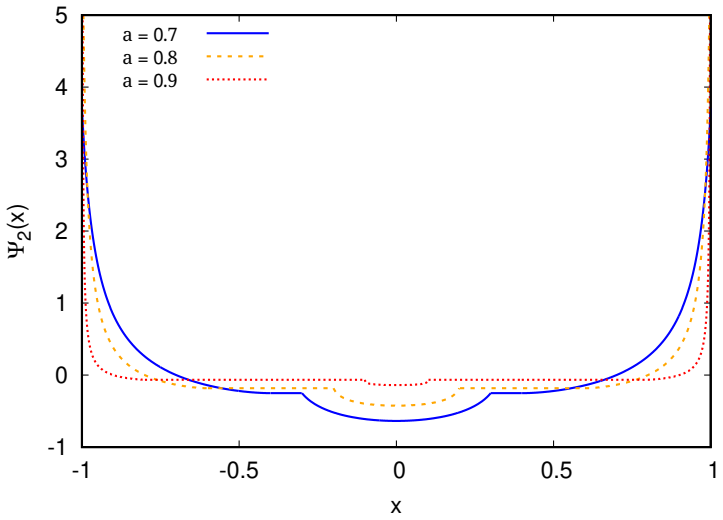


图4. 当 a 取 $2/3 < a < 1$ 范围内的三个值时，特征函数 $\Psi_2(x)$ 的图像。该函数是对称的，在五个扇区内连续，但在相邻两个扇区的连接点处导数不连续。对于 $a = 0.8$ 和 $a = 0.9$，特征函数 $\Psi_2(x)$ 在盒子 $x = \pm 1$ 的边缘附近迅速增大，其最大值超出了所选的纵轴范围。

我们发现了一组类里德伯特征值序列（分母为奇数）：

$$\lambda_n^{(s,a)} \simeq -\frac{4(a-1)^2}{\pi^2(1+2n)^2}. \tag{49}$$

值得注意的是，对称 $\lambda_n^{(s)}$ 波函数与反对称 $\lambda_n^{(a)}$ 波函数的首阶渐近行为相同。负特征值的渐近里德伯序列行为与数值特征值在图5中进行了比较，该图展示了这一特征。当 a 偏离 1 时，特征值的对称分支和反对称分支彼此进一步远离。

反对称特征值 λ_1 是在区间 $a \in (2/3,\ 1)$ 内对在 $a \in (1,\ 2)$ 时得到的方程（22）解的平滑延续。因此，我们不讨论它的解析性质。对称特征值 λ_2 的解析行为更为微妙，因为我们在上一节已经证明，当 $a > 1$ 时不存在对称特征值。

数值上，我们发现，当 a 从下方趋近于 1 时， λ_2 会迅速趋于极限值 $\lambda_2 = 1/2$ 。因此，自然要在此极限下展开方程（48）。然而我们发现，要获得精确的渐近估计，需要进行变量替换。我们引入变量 $X = 1 - \frac{1-a}{x_\lambda}$ ，它表示方程（39）中勒让德函数的（正）自变量在 $x = 1 - a$ 处取值时与 1 的偏差。在小参数 X 和 $1 - a$ 下展开方程（48）（利用 $x_\lambda = 2a\lambda_2 - 2a + 1$，可见 $\lambda \to 1/2$ 对应于 $X \to 0$）。需要指出的是，在此次展开中，勒让德函数的参数 σ 也必须表示为 X 的函数。进行展开后，我们得到 $\log X$ 关于 $1 - a$ 的如下洛朗级数:

$$\log X = -\frac{1}{2(1-a)} - \frac{3}{2} + \log 2 + (1-a)(\pi^2/3 - 4) + ... \tag{50}$$

将此解代 入 $X = 1 - (1-a)/x_\lambda$，并将其视为关于 λ_2 （通过 x_λ）的方程，我们发现 d:

$$\lambda_2 - \frac{1}{2} = \exp\left(-\frac{1}{2(1-a)} + \log(1-a) - \frac{3}{2} + \frac{(1-a)(\pi^2-15)}{3} + ...\right) \tag{51}$$

这个渐近展开展示了 λ_2 在 $1/2$附近的非解析行为；我们还看到，由于存在额外的 $\log(1-a)$ 项，$\log(\lambda_2 - 1/2)$ 关于 $a - 1$ 的展开并不具有洛朗级数的形式。这个对数项很可能解释了为什么直接对参数 $\lambda_2 - 1/2$ 展开未能成功。由于式（51）的推导在很大程度上依赖形式化数学计算软件，我们对式（51）进行了数值检验，以确认推导的有效性。我们发现，对于 $a = 0.95$， λ_2 的数值与式（51）的估计值之间的相对误差为 3.9×10^{-3}；随着 a 趋近于 1，该误差还会进一步减小。

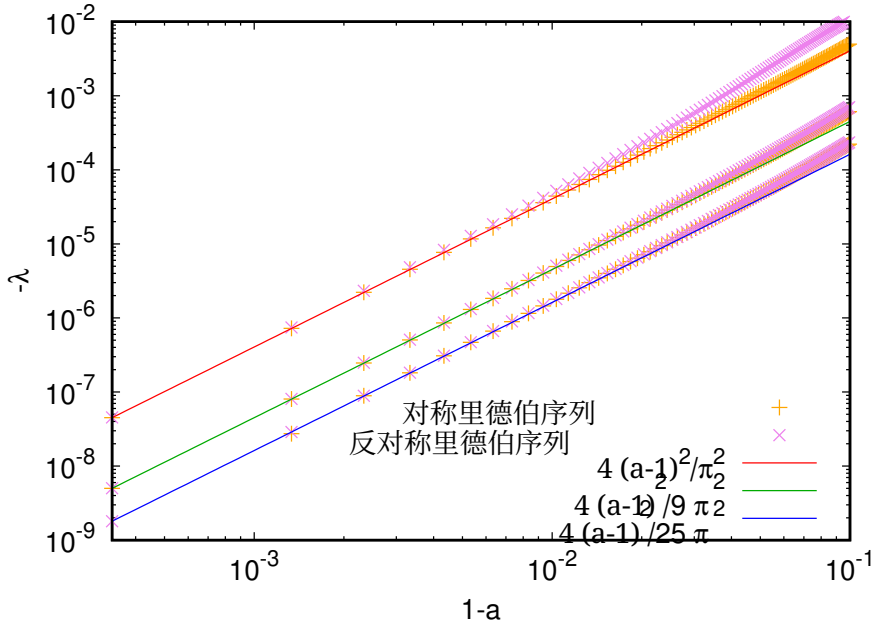


图 5. 在极限 $a \to 1$ 下， $a < 1$ 的负特征值的标度行为。图中绘出了对称/反对称波函数的模最大的三个负特征值（对于 $n = 0$, 1 和 2）。在极限 $a \to 1$ 下，偶/奇波函数变得简并，并遵循方程 (49) 的里德伯序列。

V. 精确特征值谱总结

本质上，我们完整描述了 $a \geq 2/3$范围内 Metropolis 主方程（8）的特征值谱。这为我们理解这类自伴算子的特征值谱结构提供了一个参照案例；这种结构与盒子中薛定谔方程的谱显著不同。图（3）展示了整个 $a \geq 2/3$范围内的完整特征谱，其中部分解析解可以显式求得；这概括了我们的研究发现。

范围 $a \geq 2$: 我们在第三节 A 中得到了关于 $a \geq 2$ 的显式解析解。此情形对应于 $\mathcal{N} = 1$，其特点是特征值 λ_1 具有无限重简并。选择 $a = 2$ 得到 $\Lambda = \lambda_1 = 1/2$，因为 1/2 也是盒子边缘处的拒绝概率（因此是 Λ 的一个下界）；在所有可能的跳跃分布函数 $w(x)$ 中，这一选择实现了该问题的最优收敛速率。

范围 $1 \leq a < 2$: 第三节 B 讨论的这一情形同样对应于 $\mathcal{N} = 1$，但特征值 λ_1 是非简并的，且对应一个反对称特征函数。该特征值也是唯一小于 1 的特征值，且位于奇异连续谱 $R([-1, 1])$ 之上。根据对称性，任何对称的初始概率分布$P_0(x)$与该特征模态的矩阵重叠均为零。因此，这种概率分布的弛豫将由奇异连续谱支配。 $P_n(x)$ 与 $P_\infty(x)$ 之间的偏差将由局域项 $\delta P_n(x) \simeq \mathcal{L}_n(x)$ 给出，该项满足：对于任意 $x \neq \pm 1$, $\lim_{n\to\infty} \mathcal{L}_n(x)/\mathcal{L}_n(\pm 1) = 0$ 。盒子边缘处的点 $x = \pm 1$ 具有最高的拒绝概率 $R(x)$。 $\mathcal{L}_n$ 的主导渐近行为已在第三节 C 中确立。

范围 $2/3 \leq a < 1$: 在第 IV 节中，我们推导出了相关特征值问题的精确解。这使我们得以证明， $a = 1$ 是一个临界点，对应于从 $\mathcal{N} = 2$ （当 $2/3 < a < 1$ 时）到 $\mathcal{N} = 1$（当 $1 < a < 2$ 时）的跃迁。为此，我们推导出了一个涉及第一类勒让德函数的特征值代数方程（见第 IV 节）。这些方程已无法显式求解。我们通过数值方法求得了特征值，并推导出它们在极限 $a \to 1$ 下的一些渐近性质，从而刻画了跃迁 $\mathcal{N} = 2 \to \mathcal{N} = 1$。

本文的主要结果是对 $\mathcal{N} = 1$与 $\mathcal{N} = 2$之间跃迁处特征谱的解析描述。对于 $2/3 < a < 1$，会出现一种对称本征函数解，而对于 $a > 1$则不存在；它对应的特征值为 λ_2 ，在 $a \to 1$ 时的极限为 $\lambda_2 \to 1/2$ ，如方程（51）所述。特征值 λ_2 与奇异连续谱 $\Lambda = 1/2$ 的顶端合并，其变化关系令人联想到超导中的能隙方程 [33]，其首项为 $\lambda_2 - 1/2 \sim \exp([2(a-1)]^{-1})$，无法展开为关于 $a - 1$的幂级数。我们还发现， $\mathcal{N}$的这一变化伴随着（近似）负特征值里德伯序列（$a < 1$）的出现，这些特征值从无限简并特征值 $\lambda_2 = 1 - 1/a$ （$a > 1$）处分支而出。

最后这一观察可能是盒子问题所特有的，因为其中存在无限简并分支λ_2 （对于 $1 < a < 2$）。另一方面，我们预计，本文所描述的弛豫本征模与奇异连续谱之间的合并，是不同弛豫机制之间跃迁的一种普遍现象；这些机制具有不同数量的非平衡弛豫本征模 $\mathcal{N}$，并且这些本征模出现在弛豫展开（5）中。

VI. 结论

我们研究了一种简单蒙特卡洛算法的弛豫性质。该算法描述了一个受限于（重新缩放后的）盒子 $x \in (-1,\ 1)$ 且处于平坦势 $U(x) = \text{const}$ 下的随机游走粒子。因此，平衡概率分布在 $(-1,\ 1)$ 上均匀分布。在每个算法步骤中，我们尝试改变粒子的位置 $x \to x + \eta$，其中跳跃距离 η 是从 $(-a,\ a)$ 上的均匀概率分布中抽取的。长度尺度 a 是最大尝试跳跃长度。如果尝试的跳跃落在盒子 $(-1,\ 1)$ 之外，则拒绝这次移动，且 x 保持不变。否则接受移动，并将位置更新为 $x + \eta$。对于任意 $a > 0$，随机游走粒子的概率分布都会趋近平衡态，但弛豫速率对 a 有很强的依赖性。

为分析弛豫速率，我们研究了描述这一过程的主方程。这是一个积分方程，在某些情况下可以转化为微分方程组。对于 $a > 2/3$，我们解析地求解了这个方程组，从而得到完整的特征值谱和特征函数。我们发现，通常情况下，弛豫动力学并非仅由特征值谱描述。相反，我们还需要考虑一组奇异特征值的贡献；这些特征值在某个点 $x \in (-1,\ 1)$ 处等于拒绝概率 $R(x)$。与这种奇异特征值相对应的一种可能特征函数，除点 x外处处为零。这个函数几乎处处为零，且范数为零。为凸显这类特征函数的特殊性质，我们将特征谱中的这一部分 $R([-1, 1])$ 称为奇异连续谱。这个名称旨在将这些特征值与实数轴上薛定谔方程可能出现的连续特征值区分开来；与此相反，后者的特征向量范数会变得无限大。一般而言，只有在计入若干个$+\mathcal{N}$ 弛豫本征模的贡献后，奇异连续谱的贡献才会主导渐近平衡收敛。我们最近展示了一些可能发生向 $\mathcal{N} = 0$ 转变的例子。在这些情况下，弛豫行为完全由奇异连续谱 [28]主导；然而，我们无法解析地研究不同 $\mathcal{N}$ 取值之间的转变。

对于当前受限于盒子中的自由粒子，这样的研究是可行的；这也是本文的主要结果。我们证明了，$1 < a < 2$ 对应于 $\mathcal{N} = 1$，此时奇异连续谱之上存在一个反对称弛豫本征模。因此，该本征模与对称初始概率分布的重叠为零；在这种情况下，奇异连续谱主导动力学，偏离平衡态的部分会在晚期（经过大量迭代后）集中到拒绝率最高的点，即盒子的边缘 ± 1。事实上，奇异连续谱的特征函数几乎处处为零。随后我们证明了，对于 $2/3 < a < 1$，$\mathcal{N} = 2$ 。在 $a = 1$处，弛豫本征模与奇异连续谱发生合并，这一过程描述了该跃迁。我们得到了渐近估计，用以描述特征值谱与奇异连续谱顶端之间的间隙。有趣的是，该间隙在 $1 - a$ 中所有阶上都趋于零，且无法通过在 $a = 1$附近作常规微扰展开得到。我们认为，这种与连续谱的合并是一种普遍情形，它描述了弛豫本征模数量的变化 $\mathcal{N}$。在同一点 $a = 1$，我们发现了一系列类里德伯负特征值的出现；这两种现象之间的联系仍是一个悬而未决的问题。

[1] N. Metropolis 和 S. Ulam，《美国统计学会杂志》**44**，335（1949）。[2] D. Landau 和 K. Binder，*A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*（剑桥大学出版社，2021）。[3] D. Frenkel 和 B. Smith，*Understanding Molecular Simulations*，第2版（Adademic Press，2002）。[4] C. J. Mode，*Applications of Monte Carlo Methods in Biology, Medicine and Other Fields of Science*（IntechOpen，2011）。[5] P. G. Bolhuis、D. Chandler、C. Dellago 和 P. L. Geissler，《物理化学年度评论》**53**，291（2002）。[6] F. Becca 和 S. Sorella，*Quantum Monte Carlo Approaches for Correlated Systems*（剑桥大学出版社，2017）。[7] C. M. Bishop，*Pattern recognition and machine learning*（施普林格纽约，2006）。[8] M. R. Shaebani、A. Wysocki、R. G. Winkler、G. Gompper 和 H. Rieger，《自然综述：物理学》**2**，181（2020）。[9] R. Y. Rubinstein 和 D. P. Kroese，*Simulation and the Monte Carlo Method*（威立，2016，1996）。[10] P. Glasserman，*Monte Carlo Methods in Financial Engineering*（施普林格，纽约，2003）。[11] W. R. Gilks、S. Richardson 和 D. Spiegelhalter，*Markov Chain Monte Carlo in Practice*（Chapman and Hall/CRC，1996）。[12] G. O. Roberts、A. Gelman 和 W. R. Gilks，《应用概率年刊》**7**，110（1997）。[13] M. E. J. Newman 和 G. T. Barkema，*Monte Carlo Methods in Statistical Physics*（牛津大学出版社，1999）。

[14] W. Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*（牛津物理学大师系列，2006）。[15] M. P. Allen 和 D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*，第2版（牛津大学出版社，2017）。[16] J. Talbot、G. Tarjus 和 P. Viot，《物理学杂志A：数学与通论》36，9009（2003）。[17] K. K. Dey 和 S. Bhattacharya，《巴西概率与统计杂志》33，222（2019）。[18] B. Jourdain、T. Leli`evre 和 B. Miasojedow，《应用概率年刊》25，2263（2015）。[19] P. Peskun，《生物统计学》60，607（1973）。[20] G. O. Roberts 和 J. S. Rosenthal，《概率调查》[仅电子版] 1, 20 （2004）。[21] P. Diaconis 和 G. Lebeau，《数学杂志》262，411（2009）。[22] P. Diaconis、G. Lebeau 和 L. Michel，《数学新进展》185，239（2011）。[23] P. Diaconis、G. Lebeau 和 L. Michel，《数学杂志》272，109（2012）。[24] L. Wasserman, *All of Statistics*，第2版（施普林格出版社，2004）。[25] D. A. Levin、Y. Peres 和 E. L. Wilmer, *Markov Chains and Mixing Times*，第2版（美国数学学会，2017）。[26] P. Diaconis 和 J. W. Neuberger，《实验数学》13，207（2004），https://doi.org/10.1080/10586458.2004.10504534。[27] P. Diaconis，《美国数学学会通报》46，179（2009）。[28] A. Chepelianskii、S. N. Majumdar、H. Schawe 和E. Trizac，已投稿，arXiv:2207.10488v1（2022）。[29] A. Chepelianskii、S. N. Majumdar、H. Schawe 和 E. Trizac，《物理学杂志A：数学与理论》54，485001 2021( )。[30] H. Risken, *The Fokker-Planck equation*，第3版（施普林格，2007）。[31] T. Antal 和 S. Redner，《统计物理学杂志》123，1129（2006）。[32] A. D. Polianin 和 V. F. Zaitsev, *Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations*（Crc Pr In，2003）。[33] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*，第2版（威立，1991）。

附录　附录 A：与数值对角化和蒙特卡罗模拟的比较

为了检验我们的解析结果，我们进行了若干数值模拟：直接模拟蒙特卡罗算法，并对主方程进行数值研究（包括对离散化版本的主方程进行对角化，或从特定的初始概率分布$P_0(x)$出发迭代主方程本身）。图 6 展示了从蒙特卡罗算法模拟中估算得到的弛豫速率 Λ 之间的一致性。我们发现，对于任意（非对称）

初始条件和我们的解析结果。与对应于对称$P_0(x)$的下一个主导特征值的吻合度较低。特别是，在跃迁 $\mathcal{N}=2\to1$ 附近可以看到一些偏差，我们认为这是该跃迁附近更显著的瞬态效应所致。

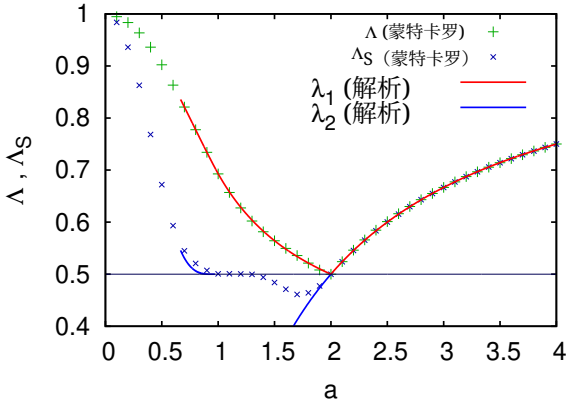


图 6. 蒙特卡洛动力学数值计算得到的弛豫速率（圆点）与我们的解析计算结果（实线）的比较。蒙特卡洛数据来自 10^{10} 次独立模拟，模拟时间最长为 $n=50$，初始条件为 $P_0(x)=\delta(x-1)$。 Λ 的数值通过计算 $\mathcal{O}(x)=|x+0.5|$ 的均值得到，而 Λ_S 的数值则来自对称观测量 $\mathcal{O}(x)=|x|$（因此，下标 S 指代对称分支）。我们认为， Λ_S 中低于 $1/2$ 的数值是数值收敛不充分所致。

图 7 展示了蒙特卡洛动力学在 $a=1$ 处弛豫性质的变化，其中给出了经过 n 步蒙特卡洛算法后，偏离平衡态的（归一化）程度 $\delta P_n(x)=P_n(x)-1/2$。我们报告了 $a=0.7$ 和 $a=1.3$的结果，采用了两种初始概率分布：一个没有任何对称性的通用 $P_0(x)$,

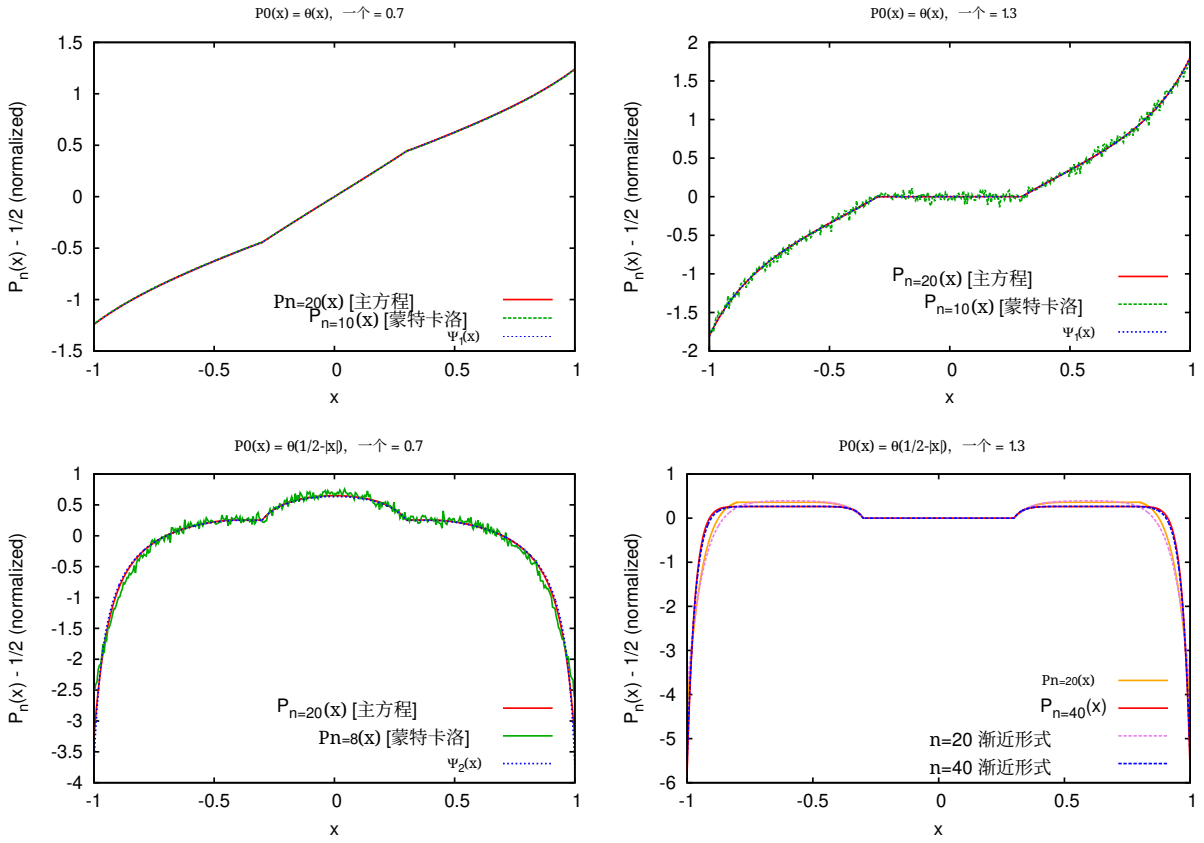


图 7. 上排图展示了从非对称初始条件出发时，偏离平衡态的偏差 $P_n(x) - 1/2$（归一化为 1）向特征向量 $\Psi_1(x)$ 弛豫的过程，适用于 $a = 0.7$ 和 $a = 1.3$。下排图展示了从对称初始条件出发时的同一物理量；对于 $a < 1$，归一化后的 $P_n(x) - 1/2$ 收敛至解析结果 $\Psi_2(x)$；但对于 $a > 1$，随着 n 增大，偏离平衡态的偏差越来越局域于边缘。离散化采用在盒子中均匀分布的 $N = 5000$ 个点（-1，1）。蒙特卡洛数据由 10^{10} 次独立的动力学迭代收集而得。右下图将 $a > 1$ 的情形与式（19）的渐近预测进行比较；右上图则与第三节 C 部分的结果比较；对于 $a < 1$（左上和左下图），我们使用第四节的结果。

以及一个对称函数 $P_0(-x) = P_0(x)$。数值结果通过直接蒙特卡罗模拟和迭代主方程获得；但对称的 $a = 1.3$ 情形除外，由于需要更多步数 n，因此仅展示主方程的结果。对于 $a = 0.7$，两种 $P_0(x)$的选择都会弛豫至主导弛豫本征模，其对称性与 $P_0(x)$相符：对于通用 $P_0(x)$，我们观察到反对称特征模；对于对称的 $P_0(x)$，则观察到次主导对称特征模。弛豫至该特征模的过程很快，算法约需 ~ 10 步。对于 $a = 1.3$，通用 $P_0(x)$呈现出类似的情况，但对称的 $P_0(x)$则截然不同。我们看到，δP_n 并未收敛至固定特征函数，而是持续聚集在盒子的边缘 $x = \pm 1$处，那里拒绝概率最高。这对应于奇异连续谱带来的局域化贡献。我们将数值结果与第 III C 节推导出的 δP_n预测渐近形式进行了比较，二者吻合得非常好。

最后，我们展示主导弛豫本征模随（最大跳跃长度）参数a的演化，见图 8。当 $a \ll 1$时，两个主导弛豫本征模与相应福克-普朗克问题的解非常接近：$\Psi_1(x) \simeq \sin \pi x/2$ 和 $\Psi_2(x) \simeq \cos \pi x$。随着 a 增大，特征模态在边缘处的权重增大，而此处的拒绝概率最大。当 $a > 1$时，我们看到数值模拟的 Ψ_2完全塌缩到系统边缘（局域化）。这体现了在 $1 < a < 2$时，奇异连续谱之上不存在对称弛豫特征模。

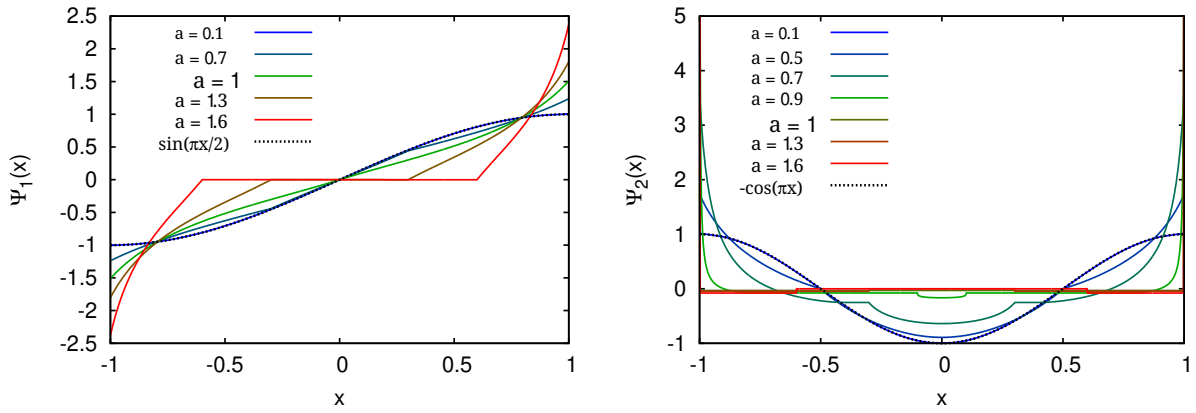


图 8. 数值特征向量 $\Psi_1(x)$ 和 $\Psi_2(x)$ 随跳跃距离 a 的演变，离散化点数为 $N = 1000$ 。对于 $\Psi_2(x)$，大部分权重局域在边缘点 ± 1：由于局域化，Ψ_2 超出了图中显示的纵向范围。