

分类号: O242.1
U.D.C.: 519.6

密级: 公开
编号: 82817

中国工程物理研究院

学位论文

基于环流的大偏差理论和涨落定理的研究

姜瑜浩

指导教师姓名 贾晨 助理教授

申请学位级别 硕士 专业名称 应用数学

论文提交日期 2022 年 4 月 论文答辩日期 2022 年 6 月

授予学位单位和日期 中国工程物理研究

答辩委员会主席

评阅人

2022 年 4 月 5 日

Classified Index: O242.1
U.D.C.: 519.6
Secret State: Public
Number: 82817

China Academy of Engineering Physics

Dissertation for the Master Degree in Engineering

Large deviations and fluctuation theorems for cycle currents

Yuhao Jiang

Supervisor: Prof. Chen Jia

Academic Degree Applied for: Master of Science

Specialty: Applied Mathematics

Date of Submitting: April, 2022 Date of Defence: June, 2022

Degree-Confering-Institution: China Academy of Engineering Physics

Chairman of defence committee

Paper Reviewers

5th 4, 2022

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。据我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得中国工程物理研究院或其他教育机构的学位或证书使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示谢意。

学位论文作者签名：

签字日期： 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解并接受中国工程物理研究院研究生部有关保存、使用学位论文的规定，允许论文被查阅、借阅和送交国家有关部门或机构，同时授权中国工程物理研究院研究生部可以将学位论文全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

学位论文作者签名：

导师签名：

签字日期： 年 月 日

签字日期： 年 月 日

摘 要

环流理论一直是随机热力学理论的关键内容。马氏系统中的环流和净环流可以由两种方式定义，即环擦除和生成树。该研究针对两种研究下的大偏差理论和涨落定理进行比较研究。首先研究环拓扑结构系统，并计算出环擦除定义下大偏差速率函数的隐式表达式，然后研究生成树定义下的大偏差速率函数，并阐明两者之间的关系。进一步，检验两个定义下的结论和涨落定理的相容性。经过严格对照，生成树定义下的环流不满足涨落定理，然而生成树的结果满足涨落定理的弱形式。

关键词：环流；大偏差；涨落定理

Abstract

The cycle current is a crucial quantity in stochastic thermodynamics. The absolute and net cycle currents of a Markovian system can be defined in the loop-erased (LE) or the spanning tree (ST) manner. Here we make a comparative study between the large deviations and fluctuation theorems for the LE and ST currents, i.e. cycle currents defined in the LE and ST manners. First, we give the explicit expression of the large deviation rate functions for the LE currents of a system with a cyclic topology and for the ST currents of a general system. The relationship between the rate functions for the LE and ST currents are clarified. Furthermore, we examine various types of fluctuation theorems satisfied by the LE and ST currents. We show that both the absolute and net LE currents satisfy the strong form of all types of fluctuation theorems. In contrast, the absolute ST currents do not satisfy fluctuation theorems, while the net ST currents only satisfy the weak form of fluctuation theorems.

Keywords: cycle currents, large deviations, fluctuation theorems

目录

第一章 绪论

1.1 问题的背景和研究现状

过去二十年，随机热力学取得显著进展，并且这个领域逐渐成为了非平衡态统计物理的重要分支 [1]。该领域中，热力学系统通常被建模为马氏过程。马尔科夫链的状态空间是离散的，并且它是最基本和最重要的动态模型，因为任何马尔科夫过程总是可以被马尔科夫链所近似。依据这一思路，平衡状态被定义为一个可逆的马氏过程，对平衡的偏差通常由熵的产生这一概念定量刻画，它可以写成热力学通量和力的双线性函数 [2]。Kolmogorov [3] 早就注意到，马尔科夫系统的可逆性可以通过其环动力学来描述：当且仅当沿每个环的转移概率的乘积完全相同于沿其反向的环时，该系统是可逆的，这概括了细致平衡化学反应网络的 Wegscheider 条件。可以深刻认识到，熵的产生可以沿着环分解，热力学通量可以表示为环流（也叫环通量），热动力可以表示为环关系 [4]。

// 马氏链的环表示法在物理学、化学和生物学中得到了广泛的应用 [5]。事实上，环流可以用几种不同的方式来定义。生成树和环消除是两个常见的定义方法。Hill [6] 和 Schnakenberg [7] 发展了一套网络理论，并定义了环流的基环族。该理论把生成树与马氏系统的有向转移图相关联。图中每条不属于生成树的边，被称为弦，并由此产生一个基环。一个基环的环流被定义为单位时间内相应的弦形成的次数。Qians [8] 和 Kalpazidou [9] 进一步发展了环表示理论，并定义了图中所有简单环的环流，即除了开始和结束的顶点，没有重复顶点的环。该理论中，马氏系统的轨迹被追踪。一旦一个环形成，该环就会从轨迹中抹去，接着追踪剩余的轨迹，直到下一个环形成。那么，一个简单环的环流被定义为单位时间内形成的次数。近年来，基于序列匹配的思想 [10] 提出了另一种类型的环流，即图中所有环的环流，即第一和最后一个顶点相等的有向路径的环流。

所有类型的环流也可以沿着单一的随机轨迹来定义。随机热力学的重大突破之一是发现一大类热力学量，如熵的产生及其绝热和非绝热部分，以及环流所满足各种类型的涨落定理 [11]，这些定理以等式，而不是不等式的方式给出了热力学第二定律的非平凡概括。对于以生成树方式定义的环流，Andrieux 和 Gaspard [12] 证明了涨落定理在限制下对于净环流成立。此外，Polettini 和 Esposito [13] 表明，如果对涨落定义稍作修正，在任何有限时间内，瞬时涨落定理都是成立的。对于环消除方式定义的环流，Andrieux 和 Gaspard

从数学角度看，另一个重要的问题是沿单一随机轨迹定义的各种热力学量是否满足大偏差原理 [14]。大偏差关注的是小概率的随机过程的长期涨落行为，在无穷时间极

限下，它与涨落定理密切相关。对于马氏系统，经验测度的大偏差（即图中一个顶点在单位时间内通过的次数的大偏差）已被广泛研究，而经验环流的大偏差（即图的一个顶点在单位时间内被通过的次数）以及经验流量（即图的一条边在单位时间内被通过的次数）则相对来说很少受到关注。对于以生成树方式定义的环流，大偏差理论已经被建立。因为在这种情况下，经验环流恰好是弦的经验流 [? ?]。对于以循环消除方式定义的环流，其大偏差率函数的明确表达方式仍然是未知的，即使对具有简单拓扑结构的系统也是如此。

在本文中，我们对以生成树和循环消除方式定义的环流进行了全面的比较研究，并阐明了它们之间的联系和区别。本文的结构安排如下。第 2 节中，回顾了这两类环流的定义，并对它们进行了简单的比较。第 3 节中，研究了这两类环流的大偏差，并用环插入法得到了单环马氏系统的环擦除环流的精确联合分布和速率函数，同时也得到了一般马氏系统的生成树环流的精确速率函数。第 4 节中，陈述并比较了这两类环流所满足的各种类型的涨落定理及对称关系。进一步阐明了这些涨落定理的应用范围，并表明所有针对生成树环流的结果都可以从环擦除环流的结果中到处。我们在第 5 节得出最后结论。

致 谢

三年前，不知什么原因让我执着地来到了这里，可能是科研兴趣，可能是当时家庭变故，也可能只是想为慌乱的心灵找一个可以安静地方。这么说，并不是过分夸张，我本科的朋友不理解我为什么来到此处做这个方向；研究生的同学和老师对我的评价是，你在这条路好像可以走下去，但并不是很适合；找工作面试我的 HR 也问我，你为什么去那个地方读研。好像每次解释这件事的时候，我说的都不是很一致三年即将结束，三年时间很漫长，甚至有些不愿承认这只是三年，他不是很精彩，却依然丰富。

不敢谈英雄主义，三年让我认清了些生活的真相，也不减对生活的热爱。

附录 2 攻读硕士学位期间发表的论文及其他成果

(一) 发表的学术论文

- [1] Liu Z, Cai W, Xu Z. Multi-scale Deep Neural Network (MscaleDNN) for Solving Poisson-Boltzmann Equation in Complex Domains[J]. 2020.

(二) 参加学术活动情况

- [1] 2019.06 深度学习在计算机视觉、求解微分方程和计算建模中的应用
- [2] 2019.07 第三届“偏微分方程数值方法与理论暑期学校”
- [3] 2020.07 2020 年度北京大学“应用数学专题讲习班”
- [4] 2020.07 机器学习和大数据在复杂性科学中的应用暑期培训班
- [5] 2020.12 【百旺科学论坛】认识我们的宇宙