

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12日

Classified Index:	<u>O242.1</u>	Secret State:	<u>Public</u>
U.D.C.:	<u>519.6</u>	Number:	<u>82817</u>

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-Conferring-Institution: China Academy of Engineering Physics

Chairman of defence committee

Paper Reviewers

12th 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

环流是随机热力学中的重要物理量。马氏系统中的环流和净环流可以用环擦除（LE）和生成树（ST）方式定义。本文从大偏差理论和涨落定理的角度，对这两种定义模式进行比较性的研究。首先推导出环拓扑结构系统的LE环流联合分布和大偏差率函数，同时也得到一般系统的ST环流的速率函数。阐明了LE和ST环流的速率函数之间的关系。此外，还研究了LE和ST环流满足的各种类型的涨落定理，并说明了它们的适用范围。本文表明，LE环流和LE净环流都满足所有类型的强形式涨落定理。相比之下，ST环流不满足涨落定理的，然而ST净环流只满足弱形式涨落定理。

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 derive the exact joint distribution and the large deviation rate function for the LE currents of a system with a cyclic topology and also obtain the rate function for the ST currents of a general system. The relationship between the rate functions for the LE and ST currents is clarified. Furthermore, we examine various types of fluctuation theorems satisfied by the LE and ST currents and clarify their ranges of applicability. 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

摘 要	I
Abstract	II
第一章 绪论	1
1.1 问题的背景和研究现状	1
第二章 模型介绍	3
2.1 环擦除模式定义的环流	4
2.2 生成树定义的环流	5
2.3 两种类型环流的比较	6
第三章 环流的大偏差原理	8
3.1 单环马氏链LE环流的大偏差	8
3.1.1 一般马氏链的ST环流的大偏差	14
第四章 环流的涨落定理	16
4.1 单环马氏链 LE 环流的涨落定理	16
4.2 一般马氏链 LE 环流的涨落定理	18
4.3 一般马氏链 ST 环流的涨落定理	20
第五章 总结和讨论	22
5.1 附录 A: 单环马氏链速率函数 I_J 的表达式	23
5.2 速率函数的对称性	25
5.3 Proof of Theorem 3.1	29
5.4 简化速率函数 I_J	32
5.5 经验 LE 环流的暂态涨落定理的证明	34
致 谢	35
参考文献	36
附录 6 攻读硕士学位期间发表的论文及其他成果	38

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 [1–3]。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 [4]。Kolmogorov [5] 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过渡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 [6]。

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 [7, 8]。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 [9–11] 和 Schnakenberg [6] 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 [12–14] 和 Kalpazidou [15] 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 [16–18] 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 [1–3],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 [19] 证明了涨落定理在限制下对于净环流成立。此外, Poletini 和 Esposito [20] 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。对于环擦除方式定义的环流,Andrieux 和 Gaspard [21] 以及 Jia 等人 [22] 证明所有类型的涨落定理和对称关系,对于绝对的和净环流都满足。对于以序列匹配方式定义的环流,相应的涨落定理和对称关系最近也被提出了 [18]。对于一些具有连续状态空间的随机过程,环流的涨落定理也得到了发展,例

如圆周上的 Langevin 动力学[23]。

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[24, 25]。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 [26, 27]。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。

第二章 模型介绍

在此考虑基于离散时间马氏链 $\xi = (\xi_n)_{n \geq 0}$ 建模的随机热力学系统，该模型的状态空间是 $S = \{1, \dots, N\}$ 转移概率矩阵是 $P = (p_{ij})_{i,j \in S}$ ，其中 p_{ij} 表示从状态 i 到状态 j 的转移概率。该马氏链对应的转移图为 $G = (S, E)$ ，其中顶点集合 S 是状态空间， E 是转移概率有向边的集合。本文用 $\langle i, j \rangle$ 表示状态 i 到状态 j 的有向边，因此有 $E = \{\langle i, j \rangle \in S \times S : p_{ij} > 0\}$ ，并且令 $|E| = M$ ，其中 $|E|$ 表示集合 E 中元素的数量。本文所考虑的马氏链都是不可约的，也就是有向图 G 是连通的。因此对某个状态，图 G 不仅包含其他状态到其的边，还包括它到其自身的边，也就是自循环。

转移图 G 中如果有一个如图 所示的图拓扑（除了自循环），将被视为一种特殊情形，在以往的研究中称该系统为单环马氏链。具体来说，如果马氏链 ξ 满足 $p_{ij} = 0$ 且 $|i - j| \geq 2$ （其中的 i, j 是模 N 运算后的结果），则称为单环马氏链。单环系统在生物学方面具有特殊的意义。许多重要的生化过程，如酶和离子通道的构象变化[28, 29]，磷酸化-磷酸化循环[30]，甲基化-去甲基化循环[31]，以及染色体重塑导致的启动子的激活[32, 33]都可以被建模为单环马氏链。下文中，主要关注单环系统，大部分的结论也可以扩展到一般系统。

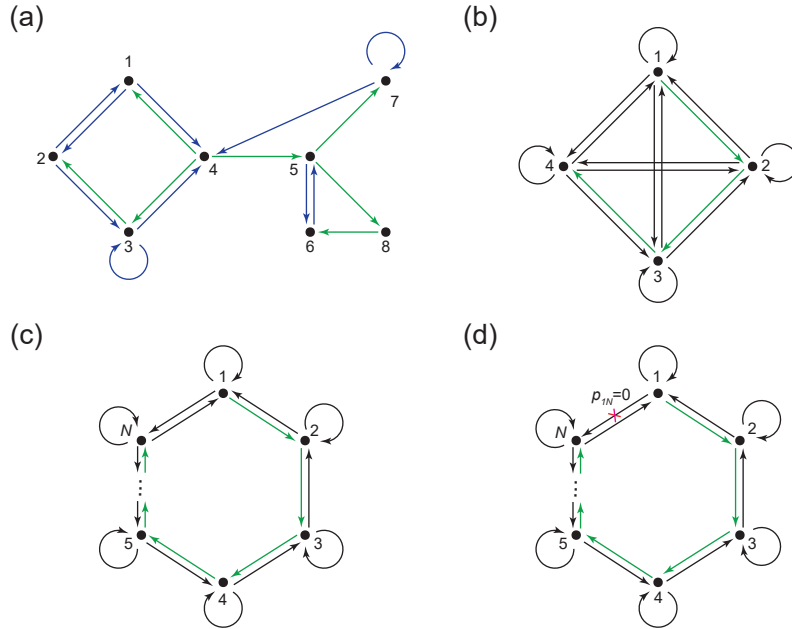


Figure 2.1 各类马氏链的转移图和相应的生成树 (a) 一般转移图的马氏链，绿色线表示根节点为4的生成树 T ，并且蓝色线表示 T 的弦 (b) 四状态全连接马氏链，其中每个状态可以转移到自身和其他状态 (c) N 状态单环马氏链。系统有一个环拓扑。每个状态转移到自身和它两个相邻节点 (d) 一个 N 状态的单环马尔科夫链，该系统无法从状态1转移到状态 N (b)-(d)中，绿色箭头表示生成树 T

2.1 环擦除模式定义的环境

本文调查和比较了马氏链中两种类型的环流。首先回顾环擦除模式定义的环境[14, 15]。马氏链中的回路是一个状态到自身的路径，比如路径 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ （其中 i_1, i_2, \dots, i_s 是顶点集合 S 中不同点），其中 $p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \cdots p_{i_s i_1} > 0$ 。令 $j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \cdots \rightarrow j_r \rightarrow j_1$ 为另一个回路，若上述两个环满足存在一个整数 k 使得

$$j_1 = i_{k+1}, j_2 = i_{k+2}, \dots, j_n = i_{k+s},$$

且 $r = s$ 则称两个回路是等价的，其中指标 $k+1, k+2, \dots, k+s$ 被视为模 n 同余的。回路 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ 在上述等价关系下所属的等价类被表示为环 $c = (i_1, i_2, \dots, i_s)$ 。例如， $(1, 2, 3), (2, 3, 1)$ 和 $(3, 1, 2)$ 表示相同的环。定义环 (i_1, i_2, \dots, i_s) 的反环为 (i_1, i_s, \dots, i_2) 。系统中所用环的集合称为环空间 C 。

沿着马氏链轨道的会不断形成各种类型的环。如果持续去除马氏链 ξ 中的环，并且在该过程中，持续聚焦在轨道中剩余状态的轨迹，那么将会获得一个新的马氏链 $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}_n)_{n \geq 0}$ ，称其为导出链。例如，如果原始的马氏链 ξ 的轨道为 $\{1, 2, 3, 3, 2, 3, 4, 1, 4, \dots\}$ ，那么相应的导出链 $\tilde{\xi}$ 的轨迹和形成的环为表 2.1所示。

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8
ξ_n	1	2	3	3	2	3	4	1	4
$\tilde{\xi}_n$	[1]	[1,2]	[1,2,3]	[1,2,3]	[1,2]	[1,2,3]	[1,2,3,4]	[1]	[1,4]
形成的环				(3)	(2,3)			(1,2,3,4)	

Table 2.1 导出链和形成环的案例

确切地说，导出链的状态是 S 的中不同状态组成的有限序列，表示为 $[i_1, i_2, \dots, i_s]$ 。假设 $\tilde{\xi}_{n-1} = [i_1, i_2, \dots, i_s]$ 且 $\xi_n = i_{s+1}$ 。若 i_{s+1} 不同于 i_1, i_2, \dots, i_s 中任意一个，那么 $\tilde{\xi}_n$ 被定义为 $\tilde{\xi}_n = [i_1, i_2, \dots, i_s, i_{s+1}]$ 。其次，若 $i_{n+1} = i_r, \forall 1 \leq r \leq s$ ，那么 $\tilde{\xi}_n$ 被定义为 $\tilde{\xi}_n = [i_1, i_2, \dots, i_r]$ 。对于这种情况，称马氏链在时间 n 形成环 $(i_r, i_{r+1}, \dots, i_s)$ 。令 N_n^c 为环 c 在时间 n 时形成的次数。那么在时间 n 时，环 c 的经验环流可以被定义为：

$$J_n^c = \frac{1}{n} N_n^c,$$

并且在时间 n 时，经验净环流可以定义为：

$$\tilde{J}_n^c = J_n^c - J_n^{c-}.$$

用更直观的表述， J_n^c 表示环 c 每个单位时间形成的数量， \tilde{J}_n^c 表示环 c 每个单位时间形成的净数量。多数研究只多关注净环流的性质 [6, 19, 21]，本文还会关注环流的性质。若令 $n \rightarrow \infty$ ，则有经验环流 J_n^c 和经验净环流 \tilde{J}_n^c 分别以概率为 1 趋近于 J^c 和 \tilde{J}^c 。极限 J^c 和 \tilde{J}^c 分别为环 c 的环流和净环流。关于 J_n^c 和 \tilde{J}_n^c 更为细致的描述，可以参考文献 [14]。著名的环流分解定理 [14] 可以用上述定义写为：

$$\pi_i p_{ij} = \sum_{c \ni \langle i, j \rangle} J^c, \quad (2-1)$$

其中求和项考虑到了所有通过边 $\langle i, j \rangle$ 的环 c （符号 $c \ni \langle i, j \rangle$ 表示环 c 通过边 $\langle i, j \rangle$ ）。这表明任意状态对的概率流可以分解为环流的和。

2.2 生成树定义的环流

流也可以通过生成树定义 [6, 15]。令 T 为转移图 G 的有向子图，即 T 的所有边也是 G 的边，且令 \hat{T} 表示 \bar{T} 表示与 T 有关的无向图。满足下列三个条件的 T 被称为图 G 的生成树（极大树）：

- T 是 G 的覆盖子图，即 T 包含 G 的所有顶点。
- \bar{T} 是连通的。
- \bar{T} 没有回路，其中无向图的回路是顶点到自身的无向路径。

下文使用 T 来表示生成树本身和它的边集合。一般情况，生成树的选择不是唯一的，一个图可能有許多不同的生成树。易知任何生成树 T 必须包含 G 的所有顶点，并且必须有 $N - 1$ 条边（见图 中的绿色箭头）[15]。

有向边 $l \notin T$ 被称为 T 的弦（见图 (a) 中的蓝色箭头）。因为 $|E| = M$ 且 $|T| = N - 1$ ，所以任意生成树 T 都有 $M - N + 1$ 个弦。由于 \bar{T} 是连通的且没有回路，如果添加一根弦 l 到 T ，将会导致无向子图 $\overline{T \cup \{l\}}$ 必有恰好一个回路。记 c_l 是从这个回路中获得的环，并且和 l 保持同样的指向。例如图 (c) 中所示的系统，如果在生成树 T 中添加弦 $l = \langle 2, 1 \rangle$ （蓝色箭头所示），那么可以得到环 $c_l = (2, 1, 4, 3)$ 。由弦生成的环的集合 $\mathcal{L} = \{c_l : l \in E \setminus T\}$ 被称为基本集。由于弦和基本集之间一一对应的关系，可以用 c_l 形成的次数定义通过弦 l 的次数。在 n 时刻， c_l 的经验环流可以被定义为：

$$Q_n^{c_l} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{\{\langle \xi_{i-1}, \xi_i \rangle = l\}}.$$

$Q_n^{c_l}$ 表示单位时间通过弦 l 的次数。生成树方式和环擦除方式有很大的不同，环擦除可以很便捷的定义环流，生成树只能定义基本集的环流。

类似的，也可以用生成树方式定义净环流。最终，假设转移概率满足 $p_{ij} > 0$ ，当且仅当 $p_{ji} > 0$ ；这个条件可以保证系统的熵增量是有限值[6, 14]。对于任意弦 l ，在时间步 n ， c_l 的净环流定义为：

$$\tilde{Q}_n^{c_l} = Q_n^{c_l} - Q_n^{c_l^-}.$$

如果 c_l 中只有一个或两个状态，那么 $c_l = c_{l^-}$ ，因此 $\tilde{Q}_n^{c_l} = 0$ 。对于弦 $l = \langle i, j \rangle$ ，如果 c_l 中有三个及以上的状态，那么 $l^- = \langle j, i \rangle$ 也是一个弦，并且 c_{l^-} 恰好是由弦 l^- 生成的环。在文献 [6, 19, 21]，净环流的只针对有三个及以上状态的环定义，本文参考[15]中的定义，使得净环流的定义也可以包含只有一个或两个状态的环。

若 $n \rightarrow \infty$ ，则经验环流 $Q_n^{c_l}$ 和经验净环流 $\tilde{Q}_n^{c_l}$ 将会分别以概率为 1 趋于 Q^{c_l} 和 \tilde{Q}^{c_l} 。极

限 Q^c 和 \tilde{Q}^c 分别作为环 c 的环流与净环流。对于弦 $l = \langle i, j \rangle$ ，依据马氏链的遍历性，有 $Q^c = \pi_i p_{ij}$ 。

2.3 两种类型环流的比较

下面将简述两种类型环流的差异。为讨论过程更加清晰，下面称环擦除方式定义中环流称为 LE 环流，生成树方式定义中环流称为 ST 环流。 LE 环流是定义在整个环空间 C ，然而 ST 环流仅是针对基本集 \mathcal{L} 中的环定义。因此，从环动力学角度， LE 环流相较于 ST 环流给出了更完整的描述。而且，由于生成树一般并不唯一，不同的生成树选择会对应不同的 ST 环流。相比之下， LE 环流并不依赖生成树的选择。

经过论述，自然会问到基本集 \mathcal{L} 相比环空间 C 小多少。因为每根弦对应集合 \mathcal{L} 唯一的一个元素，有 $|\mathcal{L}| = |E \setminus T| = M - N + 1$ ，所以很难对 $|C|$ 给出统一的表达。为了得到更深刻的观点，下面关注两个特殊的案例。首先考虑转移图是全连接的马氏链，即 $p_{ij} > 0, \forall i, j \in S$ ，如图 (b)。其中包含 k 个状态的环的数量是 $\frac{N(N-1)\cdots(N-k+2)(N-k+1)}{k}$ ，因此

$$|C| = \sum_{k=1}^N \frac{N \cdots (N-k+1)}{k}.$$

特别的，当 $N = 4$ ，有 $|C| = 24$ ，环空间为：

$$\begin{aligned} C = & \{(1), (2), (3), (4), (1, 2), (1, 3), (1, 4), (2, 3), (2, 4), (3, 4), \\ & (1, 2, 3), (1, 2, 4), (1, 3, 2), (1, 3, 4), (1, 4, 2), (1, 4, 3), (2, 3, 4), (2, 4, 3), \\ & (1, 2, 3, 4), (1, 2, 4, 3), (1, 3, 2, 4), (1, 3, 4, 2), (1, 4, 2, 3), (1, 4, 3, 2)\}. \end{aligned}$$

若选定生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ ，那么有 $|\mathcal{L}| = 13$ ，基本集为：

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \{(1), (2), (3), (4), (1, 2), (2, 3), (3, 4) \\ & (1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 3, 4), (2, 4, 3), (1, 2, 3, 4), (1, 4, 3, 2)\}. \end{aligned}$$

因此对于全连接系统， ST 环流会比 LE 环流小很多。

接下来考虑单环马氏链 (c)。为了叙述方便，假设任意一对相邻状态 i 和 j 满足 $p_{ii} > 0$ 和 $p_{ij} > 0$ 。这里， $|C| = 2N + 2$ ，并且环空间为：

$$C = \{(1), \dots, (N), (1, 2), \dots, (N-1, N), (N, 1), (1, 2, \dots, N), (1, N, \dots, 2)\}. \quad (2-2)$$

其中前 N 个环是只包含一个状态的环，即自循环的。中间 N 个环是两状态的环，最后两个环是 N 个状态的环。如果选定生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N$ ，那么有 $|\mathcal{L}| = 2N + 1$ ，并且基本集是：

$$\mathcal{L} = \{(1), \dots, (N), (1, 2), \dots, (N-1, N), (1, 2, \dots, N), (1, N, \dots, 2)\}.$$

对于单环系统，只有环 $(N, 1)$ 在环空间 C 中，却没有在基本集 \mathcal{L} 中。

为了进一步理解经验 LE 环流 J_n^c 和经验 ST 环流 Q_n^{cN} 的关系，面使用周期边界条件假

设，即 $\xi_0 = \xi_1$ ，这也是文献[25]中标准的假设条件。基于这个假设，对任意弦 l ，易得：

$$Q_n^{c_l} = \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l \in c\}}. \quad (2-3)$$

其中求和项考虑到了所有通过弦 l 的环 c （符号 $c \ni l$ 表明 c 通过状态 l ）。注意到上述方程两边都表示弦 l 单位时间按形成的数量。这说明经验 ST 环流可以表示为经验 LE 环流的线性组合。

第三章 环流的大偏差原理

大偏差关系到随机过程中小概率事件的长时涨落行为 [24, 25]。本文在此考察了经验环流的大偏差。注意到周期边界条件下，单环马氏链的经验LE环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 定义在空间：

$$\mathcal{V} = \left\{ (v^c)_{c \in C} : v^c \geq 0, \sum_{c \in C} |c| v^c = 1 \right\},$$

其中 $|c|$ 表示环 c 的长度，即环 c 中状态数量。若满足下列三个条件[24]，则称经验LE环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 满足速率函数为 $I_J : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 的大偏差原理：

- 对 $\forall \alpha \geq 0$ ，水平集 $\{x \in \mathcal{V} : I_J(x) \leq \alpha\}$ 是紧的。
- 对任意开集 $U \subset \mathcal{V}$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}((J_n^c)_{c \in C} \in U) \geq - \inf_{x \in U} I_J(x). \quad (3-1)$$

- 对任意闭集 $F \subset \mathcal{V}$,

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}((J_n^c)_{c \in C} \in F) \leq - \inf_{x \in F} I_J(x). \quad (3-2)$$

从中可以看出，定义中的条件(ii)和(iii)表明对 $\forall (v^c)_{c \in C} \in \mathcal{V}$ ，满足：

$$\mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) \propto e^{-n I_J(v)}, \quad n \rightarrow \infty, \quad (3-3)$$

同样地，也可以定义经验ST环流的大偏差 $(Q_n^c)_{c \in C}$ 。

3.1 单环马氏链LE环流的大偏差

先讨论经验LE环流的大偏差原理。一般的马氏链中，速率函数的解析表达式 I_J 很难求出，因此下面将关注单环马氏链。单环系统中所有可能形成的环都已在 (2-2)中列出。

简化叙述推导过程，假设系统从状态1出发，这并不会降低命题的一般性。为了求出速率函数 I_J ，需要计算经验LE环流的联合分布。对任意环 $c = (i_1, i_2, \dots, i_s)$ ，令 $\gamma^c = p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \dots p_{i_s i_1}$ 表示沿着环 c 产生的所有转移概率的乘积。对任意满足 $\sum_{c \in C} |c| k^c = n$ 的负整数序列 $k = (k^c)_{c \in C}$ ，因为假设周期边界条件，经验LE环流的联合分布为：

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) &= \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C) \\ &= |G_n(k)| \prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c}, \end{aligned} \quad (3-4)$$

其中 $v^c = k^c/n$ ， $G_n(k)$ 表示 n 时刻可能形成的轨迹的集合，且称该类轨迹为容许轨迹。

为书写方便，若 $c = (i)$ 是一状态环，则用 k^i 替代 k^c ；若 $c = (i, i+1)$ 是两状态环，则用 $k^{i,i+1}$ 表示；若 $c = (1, 2, \dots, N)$ 是顺时针 N 状态环，则用 k^+ 表示；若 $c = (1, N, \dots, 2)$ 是逆时针 N 状态环，则用 k^- 表示。类似地，也用 $v^i, v^{i,i+1}, v^+, v^-$ 表示相应的经

验环流，用 $J^i, J^{i,i+1}, J^+, J^-$ 表示相应的经验净环流。例如，对于三状态马氏链，如果序列 $k = (k^c)_{c \in C}$ 为：

$$k^3 = k^{12} = k^{23} = k^- = 1, \quad k^1 = k^2 = k^{13} = k^+ = 0 \quad (3-5)$$

那么再说时刻 $n = 8$ ，有8个容许轨迹，如表3.1所示。

m	0	1	2	3	4	5	6	7	8
ξ_m	1	3	3	2	3	2	1	2	1
ξ_m	1	3	2	3	3	2	1	2	1
ξ_m	1	3	3	2	1	2	3	2	1
ξ_m	1	3	2	1	2	3	3	2	1
ξ_m	1	2	3	3	2	1	3	2	1
ξ_m	1	2	3	2	1	3	3	2	1
ξ_m	1	2	1	3	3	2	3	2	1
ξ_m	1	2	1	3	2	3	3	2	1

Table 3.1 三状态马氏链中，8个容许轨迹，环(3),(12),(23)和(1,3,2)形成一次，环(1),(2),(13)和(1,2,3)没有形成过

接下来，计算容许轨迹的数量 $G_n(k)$ 。基本的想法是在已部分排好序的轨迹中插入各种环。所有可能的插入方式的数量将会是容许轨迹的数量。计算过程分为三个步骤：

1) 由于系统从状态1出发，第一步，选出初始状态是1的环，即(1),(1,2),(1,N),(1,2,⋯,N),(1,N,⋯,2)，并且插入到轨迹中。因为环 c 形成 k^c 次，所以步骤1)所有可能的插入方式的数量，即这些环的排列数为：

$$A_1 = \binom{k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-}{k^1, k^{12}, k^{1N}, k^+, k^-} := \frac{(k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-)!}{k^1! k^{12}! k^{1N}! k^+! k^-!}.$$

对于3-5中的例子，步骤1)中所有可能的插入方式为图3.1左部分所示。

2) 在轨迹中插入剩余的两状态环。仔细观察系统形成环 $(i, i+1)$ 的情况，可能在状态 i ，也可能是 $i+1$ 。例如，轨迹 $\{1, 3, 2, 3, \dots\}$ ，形成环(2,3)时，导出链是 $[1, 3]$ 。对此，称这个环是在状态3处形成。相对比，轨迹 $\{1, 2, 3, 2, \dots\}$ ，形成环(2,3)时，导出链是 $[1, 2]$ ，因此称环是在状态2处形成的。

考虑两状态环 $(i, i+1)$, $2 \leq i \leq N-1$ ，令 l^i 和 m^i 分别表示在状态 i 和 $i+1$ 处形成环 $(i, i+1)$ 的数量，显然 $l^i + m^i = k^{i,i+1}$ 。固定 l^i 和 m^i ，容许轨迹的数量可以计算得到。首先，在状态2处插入 l^2 个环(2,3)，总共有 $k^+ + k^{12}$ 个可能的位置可以插入，然而环(1,2,⋯,N)和环(1,2)已经在步骤1)中考虑。还要注意到，这些位置没有包含环(1,N,⋯,2)中的状态2，因此如果插入(2,3)，这个环将会在状态3处形成，而不是状态2。因此可能的插入方式数量是：

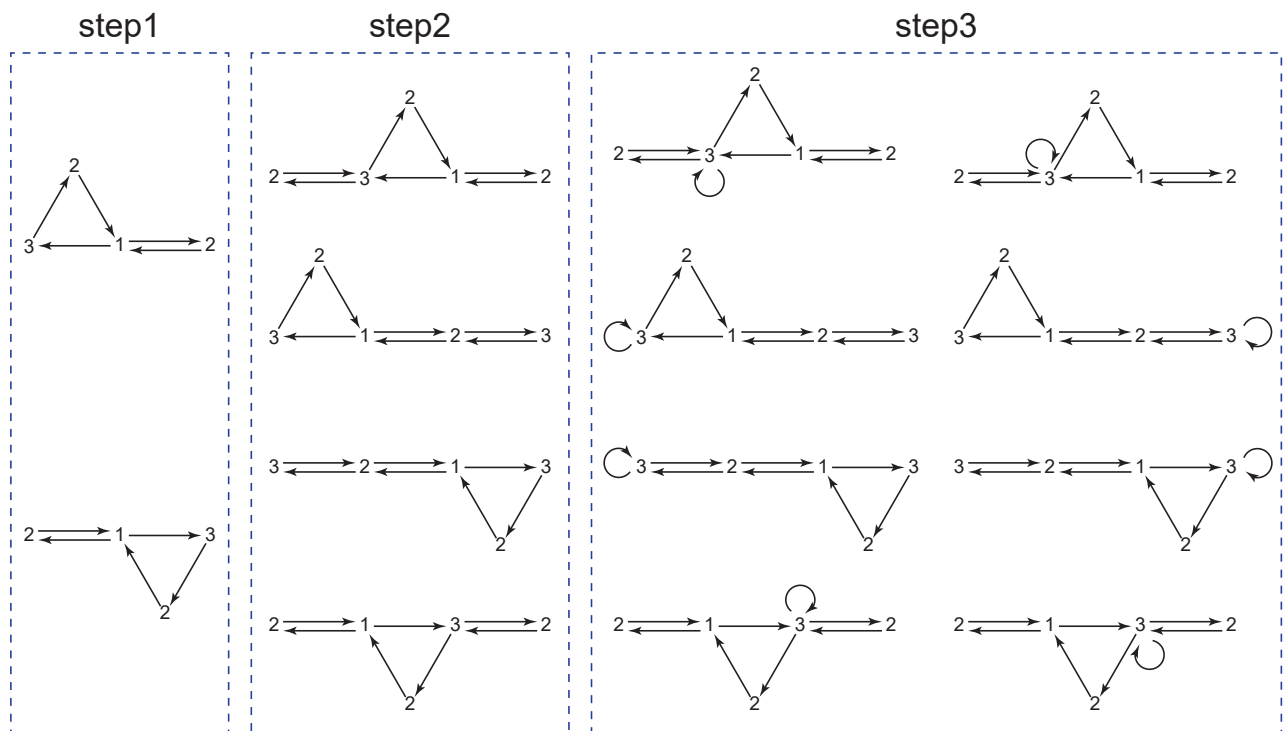


Figure 3.1 构建所有容允许轨迹的环插入法示意图。依然使用3-5中的例子。环插入法分为三步：首先我们将所有包含初始状态的环插入轨迹，接下来我们将所有剩余的两状态循环插入轨迹，最后我们将所有剩余的单状态循环插入轨迹。经过这三步的环插入，找到了所有八个可允许的轨迹，这与表中所列的轨迹完全吻合。

$$\binom{k^+ + k^{l^2} + l^2 - 1}{l^2}. \quad (3-6)$$

接下来，把状态 $3 \leq i \leq N$ 对应的 l^i 个环 $(i, i+1)$ 插入轨迹中，且每个状态 i 总共有 $k^+ + l^{i-1}$ 个可能的位置插入，这对应了环 $(1, 2, \dots, N)$ 和环 $(i-1, i)$ 。因此可能的插入方式数量是：

$$\binom{k^+ + l^{i-1} + l^i - 1}{l^i}, \quad 3 \leq i \leq N-1. \quad (3-7)$$

目前，已经插入 l^i 个环 $(i, i+1)$ 。结合 3-6 和 3-7，所有可能的插入方式的数量：

$$\prod_{i=2}^{N-1} \binom{l^i + l^{i-1} + k^+ - 1}{l^i}$$

其中 $l^1 := k^{l^2}$ 。

同理，把状态 $2 \leq i \leq N-1$ 对应的 m^i 个环 $(i, i+1)$ 插入轨迹，所有可能的插入方式的数量：

$$\prod_{i=2}^{N-1} \binom{m^i + m^{i+1} + k^- - 1}{m^i},$$

其中 $m^N := k^{N1}$ 。所有两状态的环就已经完全被插入。步骤 2) 中所有可能的插入方式数量为：

$$A_2 = \sum_{l^2+m^2=k^{23}} \cdots \sum_{l^{N-1}+m^{N-1}=k^{N-1,N}} \prod_{i=2}^{N-1} \binom{l^i + l^{i-1} + k^+ - 1}{l^i} \prod_{i=2}^{N-1} \binom{m^i + m^{i+1} + k^- - 1}{m^i},$$

例子 3-5中, 步骤2) 中的插入方式在图 3.1的中间部分。

3) 最终把剩下的所有一状态的环插入轨迹中。对每个环 $(i), 2 \leq i \leq N$, 总共有 $\sum_{c \ni i} k^c - k^i$ 个可选择的位置插入。因此步骤 3) 总共的可能的插入方式数量为:

$$A_3 = \prod_{i=2}^N \binom{\sum_{c \ni i} k^c - 1}{k^i}.$$

例子 3-5中, 步骤3) 中的插入方式在图 3.1的右部分。

结合上述三个步骤, 最终可以得到容许轨迹的数量为: $|G_n(k)| = A_1 A_2 A_3$ 。因此经验LE环流的联合分布为:

$$\mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) = A_1 A_2 A_3 \prod_{c \in C} (\gamma^c)^{K^c} \quad (3-8)$$

为了得到更明确的速率函数表达式 I_J , 先回顾 $Stirling$ 公式:

$$\log n! = n \log n - n + O(\log n) = h(n) - n + O(\log n),$$

其中 $h(x) = x \log x, x \geq 0$ 。记 $k_i = \sum_{c \ni i} k^c$ 且 $v_i = \sum_{c \ni i} v^c$, 注意到 k_i 和 k^i 的定义是不同的, 那么 $Stirling$ 公式有:

$$\begin{aligned} \log A_1 &= \log \frac{(k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-)!}{k^1! k^{12}! k^{1N}! k^+! k^-!} \\ &= h(k_1) - h(k^1) - h(k^{12}) - h(k^{1N}) - h(k^+) - h(k^-) + O(\log n) \\ &= n \left[h(v_1) - h(v^1) - h(v^{12}) - h(v^{1N}) - h(v^+) - h(v^-) \right] + O(\log n). \end{aligned} \quad (3-9)$$

类似地, 有:

$$\begin{aligned} \log A_3 &= \log \left[\prod_{i=2}^N \binom{k_i - 1}{k^i} \right] = \sum_{i=2}^N \log \left(\frac{(k_i)!}{(k^i)! (k_i - k^i)!} \right) + O(\log n) \\ &= \sum_{i=2}^N \left[h(k_i) - h(k^i) - h(k_i - k^i) \right] + O(\log n) \\ &= \sum_{i=2}^N n \left[h(v_i) - h(v^i) - h(v_i - v^i) \right] + O(\log n). \end{aligned} \quad (3-10)$$

最后, 估计 $\log A_2$, 令 $D = \{(l^i, m^i)_{2 \leq i \leq N-1} : l^i, m^i \in \mathbb{N}, l^i + m^i = k^{i,i+1}\}$ 表示 l^i 和 m^i 可能的组合形成的集合。记 $L = (l^i, m^i) \in D$, 令

$$B_L = \prod_{i=2}^{N-1} \binom{l^i + l^{i-1} + k^+ - 1}{l^i} \binom{m^i + m^{i+1} + k^- - 1}{m^i}.$$

表示在给定 l^i 和 m^i 时, 步骤 2) 中插入方式的数量。易知 $|D| \leq n^{N-2}$, 因此, 可以得到:

$$\max_{L \in D} B_L \leq A_2 \leq (n+1)^{N-2} \max_{L \in D} B_L, \quad (3-11)$$

该式中还运用了 $A_2 = \sum_{L \in D} B_L$ 。类似于 3-10 式, 有:

$$\begin{aligned}
\log B_L &= \sum_{i=2}^{N-1} [h(l^i + l^{i-1} + k^+) - h(l^i) - h(l^{i-1} + k^+)] \\
&\quad + \sum_{i=2}^{N-1} [h(m^i + m^{i+1} + k^-) - h(m^i) - h(m^{i+1} + k^-)] + O(\log n) \\
&= \sum_{i=2}^{N-1} n[h(x^i + x^{i-1} + v^+) - h(x^i) - h(x^{i-1} + v^+)] \\
&\quad + \sum_{i=2}^{N-1} n[h(y^i + y^{i+1} + v^-) - h(y^i) - h(y^{i+1} + v^-)] + O(\log n),
\end{aligned} \tag{3-12}$$

其中 $x^i = l^i/n$ 和 $y^i = m^i/n$ 。对于任意的 $v \in \mathcal{V}$ ，考虑空间：

$$V(v) = \{(x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1} : x^i, y^i \geq 0, x^i + y^i = v^{i,i+1}\},$$

且对任意 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 。定义函数：

$$\begin{aligned}
F_v(X) &= \sum_{i=2}^{N-1} [h(x^{i-1} + v^+) + h(x^i) - h(x^{i-1} + x^i + v^+)] \\
&\quad + \sum_{i=2}^{N-1} [h(y^i) + h(y^{i+1} + v^-) - h(y^i + y^{i+1} + v^-)].
\end{aligned} \tag{3-13}$$

其中 $x^1 = v^{12}$ 且 $y^N = v^{N1}$ ，由式联系 3-11 的结果，可得：

$$\log A_2 = \max_{L \in D} \log B_L + O(\log n) = n \sup_{X \in V(v)} F_v(X) + O(\log n). \tag{3-14}$$

结合(3-3)和(3-8)，可得：

$$\begin{aligned}
I_J(v) &= -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) \\
&= -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left[\log A_1 + \log A_2 + \log A_3 + \sum_{c \in C} k^c \log \gamma^c \right].
\end{aligned}$$

再联系(3-9), (3-10)，和 (3-14)式，可得：

$$\begin{aligned}
I_J(v) &= [h(v^{12}) + h(v^{1N}) + h(v^+) + h(v^-) - h(v^{12} + v^{1N} + v^+ + v^-)] \\
&\quad + \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \sum_{i \in S} [h(v_i - v^i) + h(v^i) - h(v_i)] - \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c,
\end{aligned} \tag{3-15}$$

其中 $h(x) = x \log x$ 且 $v_i = \sum_{c \ni i} v^c$ 。这就是经验LE完整的环流速率函数表达式。该式中的 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 难以直接计算，不过可以通过拉格朗日乘子法得到。在附录 A 中，证明了

$$\inf_{X \in V(v)} F_v(X) = F_v(x^i, y^i),$$

其中 $(x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1}$ 是下面代数方程的解：

$$\begin{aligned}
\frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \cdot \frac{x^i + v^+}{x^i + x^{i+1} + v^+} &= \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \cdot \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-}, \\
x^i + y^i &= v^{i,i+1},
\end{aligned} \tag{3-16}$$

这里 $x^1 = v^{12}$ ， $x^N = 0$ ， $y^1 = 0$ ，并且 $y^N = v^{1N}$ 。

上述论证，都是基于系统的初始状态是1，自然问到其他初始分布会不会影响速率函数的表达式。由于证明过程非常复杂，所以在附录部分给出了速率函数不依赖初始状态的证明。由 (3-15) 的形式，可以看出这是一个极不平凡的结论。

为建立经验LE环流大偏差原理，依然要证明速率函数的水平集是紧的，也就是验证条件 (3-1) 和 (3-2)。大偏差原理严格的证明在附录 5.3 中给出，经过整理后，得到下面的定理

定理 3.1 单环马氏链的经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 满足大偏差原理，并且相应的速率函数 $I_J : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 满足上式 (3-15)。速率函数 I_J 满足有界性，连续性和凸性。并且，速率函数 I_J 并不依赖初始分布的选择。

附录 A：单环马氏链速率函数 I_J 的表达式

回顾单环系统，LE经验净环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 的速率函数为：

$$I_J(v) = \left[h(v^{12}) + h(v^{1N}) + h(v^+) + h(v^-) - h(v^{12} + v^{1N} + v^+ + v^-) \right] \\ + \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \sum_{i \in S} \left[h(v_i - v^i) + h(v^i) - h(v_i) \right] - \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c,$$

这里 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 不是闭形式，下面利用拉格朗日乘子法求解 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 。对任意 $v \in \mathcal{V}$ ，定义拉格朗日函数为：

$$\mathcal{A}_v(X, \lambda) = F_v(X) + \sum_{i=2}^{N-1} \lambda_i (x^i + y^i - v^{i,i+1}),$$

其中 $X = (x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1} \in V(v)$ 并且 $\lambda = (\lambda_i)_{2 \leq i \leq N-1} \in \mathbb{R}^{N-2}$ 。分别对 x^i , y^i 和 λ_i 求导，可以得到下列方程：

$$\begin{aligned} \log(x^i) - \log(x^{i-1} + x^i + v^+) + \log(x^i + v^+) - \log(x^i + x^{i+1} + v^+) + \lambda_i &= 0, \\ \log(y^i + v^-) - \log(y^{i-1} + y^i + v^-) + \log(y^i) - \log(y^i + y^{i+1} + v^-) + \lambda_i &= 0, \\ x^i + y^i &= v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1. \end{aligned} \quad (3-17)$$

而且，可以把方程组 (5-1) 写为：

$$\frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \frac{x^i + v^+}{x^i + x^{i+1} + v^+} = \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} = e^{-\lambda_i}, \quad (3-18)$$

$$x^i + y^i = v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1.$$

其中 $x^1 = v^{12}$, $x^N = 0$, $y^1 = 0$ 和 $y^N = v^{1N}$ 。

引理 3.1 方程 (5-2) 有解 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 。

证明： 若对某些 $2 \leq k \leq N-1$ 存在 $v^{k,k+1} = 0$ ，则有 $x^k = y^k = 0$ 成立。那么依据指标 $2 \leq i \leq k-1$ 和 $k+1 \leq i \leq N-1$ ，方程 (5-2) 可以被分为两个方程。因此对 $v^{k,k+1} > 0, \forall k, 2 \leq k \leq N-1$ 证明引理，下面会从三种不同情况考虑这个引理。

情况 1： $v^{12} = v^+ = v^{1N} = v^- = 0$ 。易知，对每个 $\alpha \in (0, 1)$ ，

$$x^i = \alpha v^{i,i+1}, \quad y^i = (1 - \alpha) v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1,$$

都是 (5-2) 的解。

情况 2: $\nu^{12} = \nu^+ = 0, \nu^{1N} + \nu^- > 0$ 或 $\nu^{1N} = \nu^- = 0, \nu^{12} + \nu^+ > 0$ 。容易验证若 $\nu^{12} = \nu^+ = 0, \nu^{1N} + \nu^- > 0$ 成立, 则 $x^i = 0, y^i = \nu^{i,i+1}$ 是方程 (5-2) 的解。

情况 3: $\nu^{12} + \nu^+ > 0$ 或 $\nu^{1N} + \nu^- > 0$ 。上述已证明对任意给定的 $x^{k+1} \geq 0, y^{k+1} > 0$, 和 $x^{k+1} + y^{k+1} = \nu^{k+1,k+2}$, 下列方程 (5-3) 满足 $x^i, y^i > 0, \forall i, 2 \leq i \leq k$ 。

$$\frac{x^i}{y^i} = \frac{x^i + x^{i+1} + \nu^+}{x^i + \nu^+} \frac{y^i + \nu^-}{y^{i-1} + y^i + \nu^-} \frac{x^{i-1} + x^i + \nu^+}{y^i + y^{i+1} + \nu^-}, \quad (3-19)$$

$$x^i + y^i = \nu^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq k.$$

下面通过归纳法证明。若 $k = 2$, 方程 (5-3) 可以简化为:

$$\frac{x^2}{\nu^{23} - x^2} = \frac{x^2 + x^3 + \nu^+}{x^2 + \nu^+} \frac{\nu^{12} + x^2 + \nu^+}{\nu^{23} - x^2 + y^3 + \nu^-}.$$

易得:

$$\lim_{x^2 \downarrow 0} \frac{x^2}{\nu^{23} - x^2} = 0, \quad \lim_{x^2 \downarrow 0} \frac{x^2 + x^3 + \nu^+}{x^2 + \nu^+} \frac{\nu^{12} + x^2 + \nu^+}{\nu^{23} - x^2 + y^3 + \nu^-} \geq \frac{\nu^{12} + \nu^+}{\nu^{23} + y^3 + \nu^-} > 0.$$

另外,

$$\lim_{x^2 \uparrow \nu^{23}} \frac{x^2}{\nu^{23} - x^2} = \infty, \quad \lim_{x^2 \uparrow \nu^{23}} \frac{x^2 + x^3 + \nu^+}{x^2 + \nu^+} \frac{\nu^{12} + x^2 + \nu^+}{\nu^{23} - x^2 + y^3 + \nu^-} = \frac{\nu^{23} + x^3 + \nu^+}{\nu^{23} + \nu^+} \frac{\nu^{12} + \nu^{23} + \nu^+}{y^3 + \nu^-} < \infty.$$

通过中值定理, 可以找到满足 $x^i, y^i > 0$ 的方程 (5-3) 的解, 并且有 $x^i + y^i = \nu^{i,i+1}$ 。假设对 $k = n - 1$ 命题成立, 那么可以考虑方程:

$$\frac{x^n}{\nu^{n,n+1} - x^n} = \frac{x^n + x^{n+1} + \nu^+}{x^n + \nu^+} \frac{\nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-}{y^{n-1} + \nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-} \frac{x^{n-1} + x^n + \nu^+}{\nu^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + \nu^-},$$

其中 x^{n-1}, y^{n-1} 是方程 (5-3) 在 $k = n - 1$ 时的解。可以得到:

$$\lim_{x^n \downarrow 0} \frac{x^n}{\nu^{n,n+1} - x^n} = 0, \quad (3-20)$$

并且

$$\begin{aligned} & \lim_{x^n \downarrow 0} \frac{x^n + x^{n+1} + \nu^+}{x^n + \nu^+} \frac{\nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-}{y^{n-1} + \nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-} \frac{x^{n-1} + x^n + \nu^+}{\nu^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + \nu^-} \\ & \geq \frac{\nu^{n,n+1} + \nu^-}{\lim_{x^n \downarrow 0} (y^{n-1}) + \nu^{n,n+1} + \nu^-} \frac{\lim_{x^n \downarrow 0} (x^{n-1}) + \nu^+}{\nu^{n,n+1} + y^{n+1} + \nu^-} > 0. \end{aligned} \quad (3-21)$$

利用归纳法得出的结论 $\lim_{x^n \downarrow 0} (x^{n-1}) > 0$, 可以得到下面两个式子成立。

$$\lim_{x^n \uparrow \nu^{n,n+1}} \frac{x^n}{\nu^{n,n+1} - x^n} = \infty, \quad (3-22)$$

和

$$\begin{aligned} & \lim_{x^n \uparrow \nu^{n,n+1}} \frac{x^n + x^{n+1} + \nu^+}{x^n + \nu^+} \frac{\nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-}{y^{n-1} + \nu^{n,n+1} - x^n + \nu^-} \frac{x^{n-1} + x^n + \nu^+}{\nu^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + \nu^-} \\ & \leq \frac{\nu^{n,n+1} + x^{n+1} + \nu^+}{\nu^{n,n+1} + \nu^+} \frac{\lim_{x^n \uparrow \nu^{n,n+1}} x^{n-1} + \nu^{n,n+1} + \nu^+}{y^{n+1} + \nu^-} < \infty. \end{aligned} \quad (3-23)$$

那么通过中值定理, 可以找到方程 (5-3) 满足条件 $x^i, y^i > 0, x^i + y^i = \nu^{i,i+1}, \forall i = 2, 3, \dots, n$ 的解, 就是说上述命题对 $k = n$ 成立。

当 $k = N - 1$ 时, 有 $y^{k+1} = y^N = \nu^{1N}$ 成立。注意到 $\nu^{1N} + \nu^- > 0$, 那么可以得到

(5-4), (5-5), (5-6) 和 (5-7) 成立。通过中值定理, 可以找到方程 (5-3) 满足条件 $x^i, y^i > 0, x^i + y^i = v^{i,i+1}, \forall i = 2, 3, \dots, n$ 的解。当 $k = N - 1$ 时, 方程 (5-3) 与方程 (5-2) 等价。证毕。

□

引理 3.2 令 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 是引理 5.1 的解, 那么 X 是 $F_v(\cdot)$ 定义在 $V(v)$ 下的最小值点。

证明: 对任意 $a_1, a_2, b_1, b_2 \geq 0$, 通过 log-sum 不等式 (见 (5-14)), 可以得到:

$$a_1 \log \frac{a_1}{a_1 + a_2} + a_2 \log \frac{a_2}{a_1 + a_2} \geq a_1 \log \frac{b_1}{b_1 + b_2} + a_2 \log \frac{b_2}{b_1 + b_2}. \quad (3-24)$$

对任意 $Z = (z^i, w^i) \in V(v)$, 可以把 (3-13) 写为:

$$\begin{aligned} F_v(Z) = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(z^{i-1} + v^+) \log \frac{z^{i-1} + v^+}{z^{i-1} + z^i + v^+} + z^i \log \frac{z^i}{z^{i-1} + z^i + v^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[w^i \log \frac{w^i}{w^i + w^{i+1} + v^-} + (w^{i+1} + v^-) \log \frac{w^{i+1} + v^-}{w^i + w^{i+1} + v^-} \right], \end{aligned}$$

其中 $z^1 = v^{12}, w^N = v^{1N}$ 。再根据方程 (5-2) 和 (5-8)

$$\begin{aligned} F_v(Z) \geq & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(z^{i-1} + v^+) \log \frac{x^{i-1} + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} + z^i \log \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[w^i \log \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} + (w^{i+1} + v^-) \log \frac{y^{i+1} + v^-}{y^i + y^{i+1} + v^-} \right] \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[v^+ \log \frac{x^{i-1} + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} + z^i \log \frac{x^i + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[v^- \log \frac{y^{i+1} + v^-}{y^i + y^{i+1} + v^-} + w^i \log \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} \right] \\ & + v^{12} \log \frac{v^{12} + v^+}{v^{12} + x^2 + v^+} + v^{1N} \log \frac{v^{1N} + v^-}{v^{1N} + y^{N-1} + v^-} \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[-\lambda_i v^{i,i+1} + v^+ \log \frac{x^{i-1} + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} + v^- \log \frac{y^{i+1} + v^-}{y^i + y^{i+1} + v^-} \right] \\ & + v^{12} \log \frac{v^{12} + v^+}{v^{12} + x^2 + v^+} + v^{1N} \log \frac{v^{1N} + v^-}{v^{1N} + y^{N-1} + v^-} \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(x^{i-1} + v^+) \log \frac{x^{i-1} + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} + x^i \log \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[y^i \log \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} + (y^{i+1} + v^-) \log \frac{y^{i+1} + v^-}{y^i + y^{i+1} + v^-} \right] \\ = & F_v(X), \end{aligned}$$

其中 λ_i 被表示为 (5-2)。证毕。

□

一般单环马氏链的速率函数表达式 (3-15) 十分复杂。不过，如果令状态1到状态 N 的转移概率为 0，或者只考虑三状态的马氏链，速率函数表达式会被简化。对于三状态马氏链，则速率函数可以化简为：（证明细节见 5.4）

$$I_J(\nu) = \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \left(\frac{\nu^i / \nu_i}{J^i / J_i} \right) + (\nu_i - \nu^i) \log \left(\frac{(\nu_i - \nu^i) / \nu_i}{(J_i - J^i) / J_i} \right) \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} \nu^c \log \left(\frac{\nu^c / \tilde{\nu}}{J^c / \tilde{J}} \right),$$

其中

$$\tilde{\nu} = \sum_{c \in C, |c| \neq 1} \nu^c = \nu^{12} + \nu^{13} + \nu^{23} + \nu^+ + \nu^-,$$

$$\tilde{J} = \sum_{c \in C, |c| \neq 1} J^c = J^{12} + J^{13} + J^{23} + J^+ + J^-.$$

对于 N 状态单环马氏链，且 $p_{1N} = 0$ ，速率函数可以化简为（证明细节见 5.4）：

$$I_J(\nu) = \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \left(\frac{\nu^i / \nu_i}{J^i / J_i} \right) + \nu^{i,i+1} \log \left(\frac{\nu^{i,i+1} / \nu_i}{J^{i,i+1} / J_i} \right) + (\nu^{i-1,i} + \nu^+) \log \left(\frac{(\nu^{i-1,i} + \nu^+) / \nu_i}{(J^{i-1,i} + J^+) / J_i} \right) \right]. \quad (3-25)$$

注意到上述两种情况下的速率函数表达式更简单更对称 (3-15)。易知，上述表达式有着完美的对称性，因此与初始状态的选择无关。这也验证了定理3.1的相关结论。

LE经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 的大偏差原理结果可以直接应用到经验LE净环流 $(\tilde{J}_n^c)_{c \in C}$ 。因为对一状态和两状态马氏链 $\tilde{J}_n^c = 0$ 且 $\tilde{J}_n^+ = -J_n^-$ ，所以只需要考虑环 $(1, 2, \dots, N)$ 的经验净环流 \tilde{J}_n^+ 。那么由收缩原理可以得到：

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = x) &= \mathbb{P}(J_n^+ - J_n^- = x) \\ &= \sum_{\nu^+ - \nu^- = x} \mathbb{P}(J_n^c = \nu^c, \forall c \in C) \\ &\propto \sum_{\nu^+ - \nu^- = x} e^{-nI_J(\nu)}. \end{aligned} \quad (3-26)$$

由此说明 \tilde{J}_n^+ 满足大偏差原理，相应的速率函数 $I_{\tilde{J}}$ 为：

$$I_{\tilde{J}}(x) = \inf_{\{\nu \in \mathcal{V} : \nu^+ - \nu^- = x\}} I_J(\nu).$$

3.1.1 一般马氏链的ST环流的大偏差

经验ST净环流的大偏差，以及速率函数的对称性已经在文献 [26] 中有过相关介绍。接下来将着重研究经验ST环流的大偏差原理，涉及的对经验测度内容可参考 [?] 。

n 时刻的对经验测度 $R_n : E \rightarrow [0, 1]$ ，可以定义为

$$R_n(i, j) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n 1_{\{\xi_{m-1}=i, \xi_m=j\}},$$

显然 $R_n(i, j)$ 表示边 (i, j) 形成的速度。注意到在周期边界条件下，对经验测度 R_n 处于空间

$$\mathcal{M} = \left\{ R : E \rightarrow [0, 1] : \sum_{i,j \in S} R(i, j) = 1, \sum_{j \in S} R(i, j) = \sum_{j \in S} R(j, i) \right\}.$$

众所周知，对经验测度满足下面的大偏差原理：

$$\mathbb{P}(R_n(i, j) = R(i, j), \forall \langle i, j \rangle \in E) \propto e^{-nI_{\text{pair}}(R)}, \quad n \rightarrow \infty,$$

上式中的速率函数 $I_{\text{pair}} : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$ 的表达式为

$$I_{\text{pair}}(R) = \sum_{\langle i, j \rangle \in E} R(i, j) \log \frac{R(i, j)}{R(i)p_{ij}}$$

其中 $R(i) = \sum_{j \in S} R(i, j)$ ，可以看到，对经验测度的速率函数是相对熵形式。给定生成树 T ，定义在空间 E 上的函数 H^{c_l} 为：

$$H^{c_l}(i, j) = \begin{cases} 1, & \text{if } \langle i, j \rangle \in c_l \text{ and } \langle i, j \rangle \in T, \text{ or } \langle i, j \rangle = l, \\ -1, & \text{if } \langle i, j \rangle \notin c_l, \langle j, i \rangle \in c_l, \text{ and } \langle i, j \rangle \in T, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

对经验测度可以被分解为下面 ST 环流的加权和：

$$R_n(i, j) = \sum_{c_l \in \mathcal{L}} H^{c_l}(i, j) Q_n^{c_l},$$

且由文献 [15] 可知，该分解是唯一的。也就是说，如果 $R_n = \sum_{c_l \in \mathcal{L}} \nu^{c_l} H^{c_l}$ ，那么对任意 $c_l \in \mathcal{L}$ 会有 $\nu^{c_l} = Q_n^{c_l}$ 。由上述表达式的唯一性可以得到：

$$\mathbb{P}(Q_n^{c_l} = \mu^{c_l}, \forall c_l \in \mathcal{L}) = \mathbb{P}\left(R_n(i, j) = \sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}(i, j), \forall \langle i, j \rangle \in E\right) \propto e^{-nI_{\text{pair}}(\sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l})}.$$

这表明 ST 经验环流 $(Q_n^{c_l})_{c_l \in \mathcal{L}}$ 满足大偏差原理，相应的速率函数 $I_Q : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$ 为：

$$I_Q(\mu) = I_{\text{pair}}\left(\sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}\right). \quad (3-27)$$

目前，已经得到了单环马氏链经验环流的速率函数，和一般马氏链的经验 ST 环流的速率函数。自然会想到两种速率函数的关系。前面也说过 ST 环流可以通过 LE 表示为 $Q_n^{c_l} = \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l \in c\}}$ 。从收缩原理中，可以得到：

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Q_n^{c_l} = \mu^{c_l}, \forall l \in \mathcal{L}) &= \mathbb{P}\left(\sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}, \forall l \in \mathcal{L}\right) \\ &= \sum_{\{v \in \mathcal{V} : \sum_c \nu^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} \mathbb{P}(J_n^c = \nu^c, \forall c \in C) \\ &\propto \sum_{\{v \in \mathcal{V} : \sum_c \nu^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} e^{-nI_J(v)}. \end{aligned}$$

这表明 LE 和 ST 经验环流的内部关系为：

$$I_Q(\mu) = \inf_{\{v \in \mathcal{V} : \sum_c \nu^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} I_J(v).$$

易知上式中的 I_Q 和式 (3-19) 中的一致。

前面论述已得出单环马氏链 LE 经验环流的速率函数，和一般马氏链的 ST 经验环

流的速率函数，下面将探讨两者之间的关系。前面也说过 ST 环流可以通过 LE 表示为 $Q_n^{c_l} = \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l \in c\}}$ 。从收缩原理中，可以得到：

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Q_n^{c_l} = \mu^{c_l}, \forall l \in \mathcal{L}) &= \mathbb{P}\left(\sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}, \forall l \in \mathcal{L}\right) \\ &= \sum_{\{v \in \mathcal{V}: \sum_c v^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} \mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) \\ &\propto \sum_{\{v \in \mathcal{V}: \sum_c v^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} e^{-nI_J(v)}. \end{aligned}$$

这表明 LE 和 ST 经验环流的内部关系为：

$$I_Q(\mu) = \inf_{\{v \in \mathcal{V}: \sum_c v^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{c_l}\}} I_J(v).$$

易知上式中的 I_Q 和式 (3-19) 中的一致，故该式的证明在此省略。

由于 LE 环流的定义相比于 ST 环流更为精确，所以多数情况下，LE 经验环流的速率函数有别于 ST 环流。然而，对于图 (d) 所示的单环系统，基本集 \mathcal{L} 与环空间 C 完全一致。那么结合 (??) 式，可得 LE 经验环流 $(J^{c_l})_{c_l \in \mathcal{L}}$ 和 ST 经验环流 $(Q^{c_l})_{c_l \in \mathcal{L}}$ 恰好相等，并且

$$I_J(v) = I_Q(v),$$

其中 $I_J(v)$ 已经在 (3-17) 中给出。

收缩原理也可以建立 ST 经验净环流 $(\tilde{Q}_n^{c_l})_{c_l \in \mathcal{L}}$ 的大偏差原理。对于一状态和两状态环，ST 经验净环流为 0，因此只需考虑三状态或者更多状态的环。令 $\{c_{l_1}, c_{l_2}, \dots, c_{l_s}\} \subset \mathcal{L}$ 表示基本集中所有三状态及更多状态的环，那么环 c 及相应的反环 c^- 只出现一次。再令 $l_1, l_1^-, l_2, l_2^-, \dots, l_s, l_s^-$ 为基本集中环对应的弦。那么 ST 经验净环流 $(\tilde{Q}^{c_{l_i}})_{1 \leq i \leq s}$ 满足大偏差原理，且相应的速率函数 $I_{\tilde{Q}}$ 为：

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}: \mu^{c_{l_i}} - \mu^{c_{l_i}^-} = x_i, \forall 1 \leq i \leq s\}} I_Q(\mu). \quad (3-28)$$

第四章 环流的涨落定理

4.1 单环马氏链 LE 环流的涨落定理

一个重要的问题是经验环流是否满足各种对称关系和涨落定理。LE经验环流的暂态涨落定理已经在文献 [21] 中证明。这里将证明单环马氏链的对称关系，它甚至强于暂态涨落定理。记单环系统中两个 N 状态环为 $C^+ = (1, 2, \dots, N)$ 和 $C^- = (1, N, \dots, 2)$ ，令 N_n^+ 和 N_n^- 分别表示 n 时刻环 C^+ 和 C^- 分别形成的数量。强对称关系为：

$$k^+ \mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^- - 1, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-) \quad (4-1)$$

$$= \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) \mathbb{P}(N_n^+ = k^+ - 1, N_n^- = k^-, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-) \quad (4-2)$$

$$(4-3)$$

其中 $\gamma^+ = p_{12}p_{23}\dots p_{N1}$ 和 $\gamma^- = p_{1N}p_{N,N-1}\dots p_{21}$ 分别是环 C^+ 和环 C^- 中的转移概率的乘积。对于序列匹配中得到的另一种环流，也可以得到类似的等式[18]。接下来。针对LE环流，证明4-1。在周围边界条件下，由公式 (3-8) 可以得到：

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^-, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-) \\ &= (\gamma^+)^{k^+} (\gamma^-)^{k^-} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} |G_n(k^+, k^-, (k^c)_{c \neq C^+, C^-})|, \end{aligned}$$

其中 $G_n(k^+, k^-, (k^c)_{c \neq C^+, C^-})$ 表示n时刻所有容许轨迹的集合，那么 C^+ 形成 k^+ 次， C^- 形成 $k^- - 1$ 次，环 $c \neq C^+, C^-$ 形成 k^c 次。简化记号，上述方程可以重写为：

$$\mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^- - 1, \dots) = (\gamma^+)^{k^+} (\gamma^-)^{k^-} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} |G_n(k^+, k^- - 1, \dots)|. \quad (4-4)$$

类似地，如果交换上式中的 k^+ 和 $k^- - 1$ ，可以得到

$$\mathbb{P}(N_n^+ = k^+ - 1, N_n^- = k^-, \dots) = (\gamma^+)^{k^+ - 1} (\gamma^-)^{k^-} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} |G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)|. \quad (4-5)$$

因此，为证明公式 4-1，只需说明：

$$k^+ |G_n(k^+, k^- - 1, \dots)| = k^- |G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)|. \quad (4-6)$$

对于 $G_n(k^+, k^- - 1, \dots)$ 中的任意轨迹 $(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n)$ ，因为 C^+ 形成 k^+ 次，这个环有 k^+ 个初始时刻和 k^+ 个终止时刻。令 T_i^{begin} 和 T_i^{end} 分别表示环 C^+ 的第 i 个初试时刻和第 i 个终止时刻。例如，表 2.1 中的轨迹，环 $(1, 2, 3, 4)$ 的首次初始时刻是 $n = 0$ ，首次终止时刻是 $n = 7$ 。如果在 T_i^{begin} 和 T_i^{end} 之间翻转轨迹 ξ ，那么得到新轨迹 $\tilde{\xi}$ ，即：

$$\tilde{\xi} = \begin{cases} \xi_{T_i^{begin} + T_i^{end} - m}, & \text{if } T_i^{begin} \leq m \leq T_i^{end} \\ \xi_m, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

易知，逆轨迹一定处于集合 $G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)$ 。因为环 C^+ 形成 k^+ 次，所以有 $k^+ |G_n(k^+, k^- - 1, \dots)| = k^- |G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)|$ 。

$1, \dots)$ 种可能的轨迹。在这些逆轨迹中， k^- 轨迹是完全相同的，因此被重复计算。例如，如果环 $C^+ = (1, 2, 3)$ ，那么 $G_8(2, 1, \dots)$ 中的轨迹 $\{1, 2, 3, 1, 2, 3, 1, 3, 2\}$ 和轨迹 $\{1, 2, 3, 1, 3, 2, 1, 2, 3\}$ 都是 $G_8(1, 2, \dots)$ 中 $\{1, 2, 3, 1, 3, 2, 1, 3, 2\}$ 的逆轨迹，因此被计算两次。因此， $G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)$ 的所有可能的轨迹数是：

$$|G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)| = \frac{k^+}{k^-} |G_n(k^+, k^- - 1, \dots)|. \quad (4-7)$$

这恰好就是公式4-6。因此已经证明了强对称关系4-1。应用对称关系 $|k^+ - k^-|$ 次，可以得到暂态涨落定理：

$$\mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^-, \dots) = \mathbb{P}(N_n^+ = k^-, N_n^- = k^+, \dots) \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right)^{k^+ - k^-}. \quad (4-8)$$

目前，在周期边界条件下，已经证明了对称关系 4-1 和涨落定理 ??。没有周期边界条件，两个等式在单环系统下也是成立的；证明过程类似，在此省略。

暂态涨落定理可以进用来其他两种涨落定理。回顾经验LE环流的矩母函数：

$$g_n(\lambda^+, \lambda^-, \dots) = \mathbb{E} \left[e^{\lambda^+ N_n^+ + \lambda^- N_n^- + \sum_{c \in C^+, C^-} \lambda^c N_n^c} \right].$$

可以得出 Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理成立：

$$\begin{aligned} g_n(\lambda^+, \lambda^-, \dots) &= \sum_k e^{\sum_{c \in C} \lambda^c k^c} \mathbb{P}(N^+ = k^+, N^- = k^-, \dots) \\ &= \sum_k e^{\sum_{c \in C} \lambda^c k^c} \mathbb{P}(N^+ = k^-, N^- = k^+, \dots) \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right)^{k^+ - k^-} \\ &= \sum_k e^{\left(\lambda^+ - \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) k^+ + \left(\lambda^- - \log \frac{\gamma^-}{\gamma^+} \right) k^- + \dots} \mathbb{P}(N^+ = k^-, N^- = k^+, \dots) \\ &= \mathbb{E} \left[e^{\dots + \left(\lambda^- - \log \frac{\gamma^-}{\gamma^+} \right) N_n^+ + \left(\lambda^+ + \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) N_n^-} \right] \\ &= g_n \left(\lambda^- - \log \frac{\gamma^-}{\gamma^+}, \lambda^+ + \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}, \dots \right), \end{aligned}$$

其中 $\log(\gamma^+/\gamma^-)$ 是环 C^+ 的匹配度。接下来，考虑单环系统的极限行为，当 n 趋于无穷是时，易知：

$$\begin{aligned} e^{-nI_J(\dots, v^+, v^-)} &\propto \mathbb{P}(J_n^+ = v^+, J_n^- = v^-, \dots) \\ &= \mathbb{P}(\dots, J_n^+ = v^-, J_n^- = v^+) \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right)^{n(v^+ - v^-)} \\ &\propto e^{-n \left[I_J(v^-, v^+, \dots) - \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) (v^+ - v^-) \right]}. \end{aligned}$$

这蕴含着下面 Gallavotti-Cohen 形式的涨落定理成立：

$$I_J(\dots, v^+, v^-) = I_J(\dots, v^-, v^+) - \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) (v^+ - v^-). \quad (4-9)$$

类似地，可以得到经验LE净环流的涨落定理。对于单环系统，只需关注环 C^+ 经验LE净环流 \tilde{J}_n^+ 。令 $\tilde{g}_n(\lambda) = \mathbb{E}[e^{\lambda n \tilde{J}_n^+}]$ 为 \tilde{J}_n^+ 的矩母函数， $I_J(x)$ 为相应的速率函数。LE净环

流满足的各种涨落定理在此列出。证明方式类似，在此省略。 1) 暂态涨落定理:

$$\frac{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = x)}{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = -x)} = \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-}\right)^{nx}.$$

2) Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理:

$$\tilde{g}_n(\lambda) = \tilde{g}_n\left(-\left(\lambda + \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}\right)\right).$$

3) 积分涨落定理: 取 $\lambda = -\log \gamma^+/\gamma^-$ 带入上面方程可得

$$\mathbb{E}\left[e^{\lambda n \tilde{J}_n^+}\right] = 1.$$

4) Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

$$\tilde{I}_J(x) = \tilde{I}_J(-x) - \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}\right)x.$$

因此熵产生可以分解为LE净环流[2]的和，上述结论可以用来证明熵产生的涨落定理。

4.2 一般马氏链 LE 环流的涨落定理

目前，已经验证了单环系统中马氏链环流相关的涨落定理，自然会联想到这些结论是否会适用于一般的马氏链。再开始讨论之前，先回顾文献 [22]中的定义。记 $c_1 = (i_1, i_2, \dots, i_s)$ 和 $c_2 = (j_1, j_2, \dots, j_r)$ 是两个环。如果 $s = r$ 且 $\{i_1, i_2, \dots, i_s\} = \{j_1, j_2, \dots, j_r\}$ ，则称环 c_1 和环 c_2 相似。换句话说，如果两个环包含的状态完全一致，则称两个环相似。例如，下面六个环 $(1, 2, 3, 4)$, $(1, 2, 4, 3)$, $(1, 3, 2, 4)$, $(1, 3, 4, 2)$, $(1, 4, 2, 3)$ 和 $(1, 4, 3, 2)$ ，互为相似关系。根据这个定义，环任意 c 和它的反环 c^- 一定是相似的。

首先考虑 LE 经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ ，其中 $J_n^c = N_n^c/n$ 。对于一般马氏链，如果环 c_1 和 c_2 相似，有下列的对称关系成立:

$$\frac{k^{c_1} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1}, N_n^{c_2} = k^{c_2} - 1, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)}{k^{c_2} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1} - 1, N_n^{c_2} = k^{c_2}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)} = \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}. \quad (4-10)$$

如果把环 c_1 和 c_2 分别设环 C^+ 和它的反环 C^- ，那么等式可以化为:

$$\frac{k^+ \mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^- - 1, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-)}{k^- \mathbb{P}(N_n^+ = k^+ - 1, N_n^- = k^-, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-)} = \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}.$$

这可以被看做单环情况4-1的一般化。重复使用??，可以给出下面LE环流的暂态涨落定理:

$$\frac{\mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1}, N_n^{c_2} = k^{c_2}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)}{\mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_2}, N_n^{c_2} = k^{c_1}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)} = \left(\frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_2}}\right)^{k^{c_1} - k^{c_2}}. \quad (4-11)$$

这表明如果环 c_s 和环 c_t 相似，那么 LE 经验环流的联合分布满足非平凡的对称关系。实际上，对于具有下面限制条件的情况，公式4-10的证明已经在 [22]中给出: 1) 所有环都通过状态 $i \in S$; 2) 马氏链也是从状态 i 出发。

接下来考虑经验LE净环流 $(\tilde{J}_n^c)_{c \in C}$ 。令 $\{c_1, c_2, \dots, c_r\}$ 表示所有环的集合，那么环 c 和它

的反环 c^- 只出现一次，那么由4-11，可得：

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_1, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) \\
&= \mathbb{P}(N_n^{c_1} - N_n^{c_1^-} = nx_1, N_n^{c_m} - N_n^{c_m^-} = nx_m, \forall 2 \leq m \leq r) \\
&= \sum_{k^{c_i} - k^{c_i^-} = nx_i, \forall 1 \leq i \leq r} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1}, N_n^{c_1^-} = k^{c_1^-}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, N_n^{c_m^-} = k^{c_m^-}, \forall 2 \leq m \leq r) \\
&= \sum_{k^{c_i} - k^{c_i^-} = nx_i, \forall 1 \leq i \leq r} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1^-}, N_n^{c_1^-} = k^{c_1}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, N_n^{c_m^-} = k^{c_m^-}, \forall 2 \leq m \leq r) \left(\frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}} \right)^{nx_1} \\
&= \mathbb{P}(N_n^{c_1} - N_n^{c_1^-} = -nx_1, N_n^{c_m} - N_n^{c_m^-} = nx_m, \forall 2 \leq m \leq r) e^{nx_1 \log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}}} \\
&= \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_1, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) e^{nx_1 \log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}}}.
\end{aligned}$$

因此最终可得到下列的 LE 环流的暂态涨落定理：

$$\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) = \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) e^{nx_s \log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}}}. \quad (4-12)$$

这表明对于任意环 c_i ，经验LE净环流满足对称关系。如果对所有 $1 \leq i \leq r$ ，在上述方程中交换 x_i 和 $-x_i$ ，那么可以得到：

$$\frac{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = x_r)}{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = -x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = -x_r)} = e^{n \sum_{i=1}^r x_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_i^-}}}. \quad (4-13)$$

通过对比，可以看到(4-15)式的结论弱于 (4-12)式。因此，本文称 (4-12) 式为强形式的暂态涨落定理，(4-15)式为弱形式的暂态涨落定理。

有关 LE 经验环流和 LE 经验净环流的其他类型涨落定理都可以通过暂态涨落定理得到。这里主要关注强形式；弱形式也可以通过类似的方式得到。令 $g_n(\lambda) = \mathbb{E}[e^{n \sum_{i=1}^r \lambda_i J_n^{c_i}}]$ 和 $\tilde{g}_n(\lambda) = \mathbb{E}[e^{n \sum_{i=1}^r \lambda_i \tilde{J}_n^{c_i}}]$ 分别为 $(J_n^{c_i})_{1 \leq i \leq r}$ 和 $(\tilde{J}_n^{c_i})_{1 \leq i \leq r}$ 的矩母函数，并且令 $I_J(x)$ 和 $I_{\tilde{J}}(x)$ 为相应的速率函数。

1) Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理：对任意相似的两个环 c_s 和 c_t ($1 \leq s, t \leq r$)，下列公式成立：

$$\begin{aligned}
g_n(\dots, \lambda_s, \dots, \lambda_t, \dots) &= g_n\left(\dots, \lambda_t - \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}, \dots, \lambda_s + \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}, \dots\right). \\
\tilde{g}_n(\dots, \lambda_s, \dots) &= \tilde{g}_n\left(\dots, -\left(\lambda_s + \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s^-}}\right), \dots\right).
\end{aligned}$$

2) 积分涨落定理，对任意子集 $\{c_1, c_2, \dots, c_t\} \subset \{c_1, c_2, \dots, c_r\}$ ，有：

$$\mathbb{E}\left[e^{-n \sum_{i=1}^t (\log \gamma^{c_i} / \gamma^{c_i^-}) \tilde{J}_n^{c_i}}\right] = 1.$$

3) Gallavotti-Cohen 类型涨落定理， c_s 和 c_t 相似，则有：

$$\begin{aligned}
I_J(\dots, x_s, \dots, x_t, \dots) &= I_J(\dots, x_t, \dots, x_s, \dots) - \left(\log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}\right)(x_s - x_t). \\
I_{\tilde{J}}(\dots, x_s, \dots) &= I_{\tilde{J}}(\dots, -x_s, \dots) - \left(\log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s^-}}\right)x_s.
\end{aligned}$$

4.3 一般马氏链 ST 环流的涨落定理

已经清楚了 LE 经验环流和 LE 经验净环流满足的各种涨落定理。自然会想到是否 ST 经验环流和 ST 经验净环流是否也满足类似的关系。事实上，所有的涨落定理对于经验ST环流都是不成立的，即使考虑单环系统。考虑全连接三状态马氏链，并且令 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ 是一个生成树，那么相应基本集为 $\mathcal{L} = \{(1), (2), (3), (1, 2), (2, 3), (1, 2, 3), (1, 3, 2)\}$ 。回顾式 (3-19) 中的 ST 经验环流的速率函数为：

$$I_Q(\mu) = \sum_{(i,j) \in E} R^\mu(i, j) \log \frac{R^\mu(i, j)}{R^\mu(i) p_{ij}},$$

其中 $R^\mu(i, j) = \sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}(i, j)$ 且 $R^\mu(i) = \sum_{j \in S} R^\mu(i, j)$ 。再记 $\mu^+ = \mu^{(1,2,3)}$ ， $\mu^- = \mu^{(1,3,2)}$ 。图4.1(a)说明的是在一组适当参数下， $I_Q(\cdots, \mu^+, \mu^-)$ 和 $I_Q(\cdots, \mu^-, \mu^+) - \log(\gamma^+/\gamma^-)(\mu^+ - \mu^-)$ 之间的差异，易知两者相差不是0，因此有：

$$I_Q(\cdots, \mu^+, \mu^-) \neq I_Q(\cdots, \mu^-, \mu^+) - \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) (\mu^+ - \mu^-),$$

这说明了 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对于 ST 环流不成立。且由于Gallavotti-Cohen 类型涨落定理成立条件最弱，所以其他类型涨落定理也不成立。 尽管 ST 经验环流无

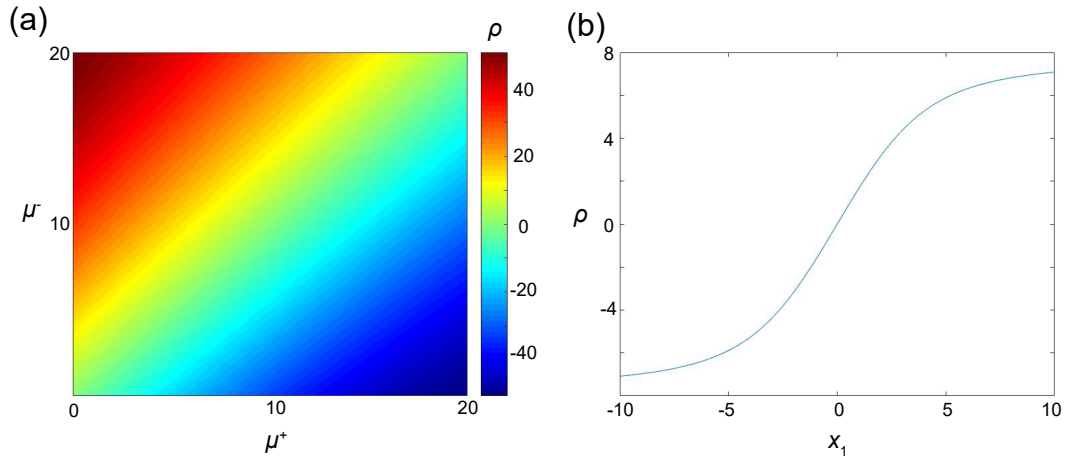


Figure 4.1 ST 经验环流和经验净环流的速率函数图像 (a)

$$\rho = I_Q(\cdots, \mu^+, \mu^-) - I_Q(\cdots, \mu^-, \mu^+) + \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) (\mu^+ - \mu^-). \quad (\mathbf{b})$$

$$\rho = I_{\tilde{Q}}(\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) - I_{\tilde{Q}}(-\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) + \left(\log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1-}} \right) \tilde{\mu}^{c_1}$$

法满足各种涨落定理，ST经验净环流在很多情况下成立却是可以的（参考 [19]）。对于单环系统，只需考虑环 C^+ 的经验净环流 \tilde{Q}_n^+ 。假设选定生成树为 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \cdots N$ 。在周期边界条件下，由公式 2-3可得 $Q_n^+ = J_n^+ + J^{(N,1)}$ 和 $Q_n^- = J_n^- + J^{(N,1)}$ 。这两个方程表明 $\tilde{Q}_n^+ = \tilde{J}_n^+$ ，因此ST净环流的涨落定理自然可以由LE净环流的涨落定理得出。如果没有周期边界条件，Gallavotti-Cohen型涨落定理仍然成立，因为它反映了系统的长期行为，是否假设周期边界条件并不会影响大偏差速率函数，然而其他三种类型的涨落定理将不会成立。文献[20]表明针对ST净环流，四种类型的涨落定理都成立。

上述结论可以扩展到一般马氏链。对于一状态和两状态的环，ST经验净环流为0，只需考虑有三状态或者更多状态的环。令 $\{c_{l_1}, c_{l_2}, \dots, c_{l_s}\} \subset \mathcal{L}$ 表示基本集中所有三状态及更多状态的环，那么环 c 及相应的反环 c^- 只出现一次。事实上，文献[19]已经证明了ST净环流满足弱形式下的Gallavotti-Cohen型涨落定理：

$$I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, \dots, x_s) = I_{\tilde{Q}}(-x_1, -x_2, \dots, -x_s) - \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i}^-}}. \quad (4-14)$$

这说明ST经验净环流的联合分布满足对称关系。事实上，上述等式可以由LE净环流的涨落定理直接得出。对于任意三状态或者更多状态的环 $c_l \in \mathcal{L}$ ，在周期边界条件下，由公式2-3，可得：

$$\tilde{Q}_n^{c_l} = \sum_{c \ni l} J_n^c - \sum_{c \ni l^-} J_n^c = \sum_{c \ni l} J_n^c - \sum_{c \ni l} J_n^{c^-} = \tilde{J}_n^c.$$

因此ST经验净环流可以分解为LE经验净环流的和。由公式4-15(附录D)，可得：

$$\frac{\mathbb{P}(\tilde{Q}_n^{c_{l_1}} = x_1, \dots, \tilde{Q}_n^{c_{l_s}} = x_s)}{\mathbb{P}(\tilde{Q}_n^{c_{l_1}} = -x_1, \dots, \tilde{Q}_n^{c_{l_s}} = -x_s)} = e^{n \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i}^-}}}. \quad (4-15)$$

这表明周期边界条件下，ST净环流满足暂态涨落定理的弱形式。由于是否假设周期边界条件不会影响大偏差速率函数，则Gallavotti-Cohen类型涨落定理的弱形式[?]成立。

对比LE经验净环流，会发现ST经验净环流不满足强形式下的Gallavotti-Cohen类型涨落定理，可以参考文献[????]。为举出反例，考虑图(b)中的具有全连接的四状态马氏链。由于基本集中的其他环要不是它的反环，要不就是就是一状态和两状态环，所以选定生成树为 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ ，只需考虑三个环 $c_1 = (1, 2, 3)$ ， $c_2 = (2, 3, 4)$ 和 $c_3 = (1, 2, 3, 4)$ 的ST净环流。回顾ST经验净环流的速率函数 $(\tilde{Q}_n^{c_1}, \tilde{Q}_n^{c_2}, \tilde{Q}_n^{c_3})$ 为：

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}: \mu^{c_i} - \mu^{c_i^-} = x_i, \forall 1 \leq i \leq 3\}} I_Q(\mu). \quad (4-16)$$

在选定适当参数下，图4.1(b)展现了， $I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, x_3)$ 和 $I_{\tilde{Q}}(-x_1, x_2, x_3) - (\log \gamma^{c_1} / \gamma^{c_1^-}) \tilde{\mu}^{c_1}$ 之间的差异。易知，两者差值非零，因此有：

$$I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, x_3) \neq I_{\tilde{Q}}(-x_1, x_2, x_3) - \left(\log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}} \right) \tilde{\mu}^{c_1}, \quad (4-17)$$

因此ST经验净环流不满足Gallavotti-Cohen类型涨落定理的强形式。

第五章 总结和讨论

本文对以 LE 和 ST 方式定义的马氏链的经验环流的大偏差和涨落定理作了比较研究，并对以LE和ST方式定义的马氏链的经验环流进行比较研究。LE环流可以针对环空间中的所有环定义，而ST环流只能定义在由生成树的和弦产生的基本集中。基本集可能比远小于一般马氏系统的环空间。然而，对于一个周期拓扑结构的系统，最多只有一个环包含在环空间中，但在基本集中却没有。与ST环流相比，LE环流对环动态性提供了更完整和详细的描述。在周期性边界条件下，任何环的ST环流都可以用LE环流的加权和来表示。

此外，本文建立了相应的大偏差原理，并给出了单环马氏链中经验LE环流的相关速率函数的明确表达。该证明是基于，封闭形式下所有环的经验LE环流的联合分布。在计算联合分布时，提出了三步环插入的方法。(i) 第一步是将所有经过初始状态的环插入轨迹中，(ii) 第二步是将所有不包含初始状态的两状态环插入轨迹中，(iii) 第三步是将所有不包含初始状态的单状态环插入轨迹中。此外，还证明了速率函数与马氏系统的初始分布无关。速率函数的解析表达式对于一般的单环系统来说是复杂的。然而，对于三态系统和某种相邻状态之间的转移被禁止的单环系统，该公式却可以简化。仿照[26]中提出的经验净ST环流的方法，本文也给出了一般系统的经验（绝对）ST环流的速率函数的精确表达式，并阐明了经验性LE和ST环流的速率函数之间的关系。

最后，还研究了由经验LE和ST环流所满足的各种类型的涨落定理，并阐述了它们的适用范围。其中表明了经验的绝对（净）LE环流满足所有类型的涨落定理和对称关系。特别是，我们引入了相似环的概念，并得到暂态涨落定理的强形式。(i) 当相似环中的某一对被交换时，经验LE环流的联合分布满足一个对称关系；(ii) 当任何一对环的净环流取其相反数时，经验性LE净环流的联合分布满足对称关系。当任何周期的净环流被其相反的数字取代时，满足对称关系。由于在周期性边界下，经验的ST环流可以用的经验LE环流的加权和来表示。进一步表明，经验ST环流不满足任何形式的涨落定理，然而经验ST净环流只在周期性边界条件下满足弱形式的暂态涨落定理：当基本集中所有环的净环流取其相反数时，经验净ST净环流的联合分布满足一个对称关系。

在本文中，一些结果只针对单环马氏链得出。希望这些结果可以被推广到更普遍的马氏系统，甚至是半马氏或非马氏系统。此外，本文只对LE和ST的环流进行了比较。这两类环流与以序列匹配方式定义的环流[16–18]之间的关系还不清楚，这些工作尚处于调研中。

5.1 附录 A：单环马氏链速率函数 I_J 的表达式

回顾单环系统，LE经验净环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 的速率函数为：

$$I_J(v) = \left[h(v^{12}) + h(v^{1N}) + h(v^+) + h(v^-) - h(v^{12} + v^{1N} + v^+ + v^-) \right] \\ + \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \sum_{i \in S} \left[h(v_i - v^i) + h(v^i) - h(v_i) \right] - \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c,$$

这里 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 不是闭形式，下面利用拉格朗日乘子法求解 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 。对任意 $v \in \mathcal{V}$ ，定义拉格朗日函数为：

$$\mathcal{A}_v(X, \lambda) = F_v(X) + \sum_{i=2}^{N-1} \lambda_i (x^i + y^i - v^{i,i+1}),$$

其中 $X = (x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1} \in V(v)$ 并且 $\lambda = (\lambda_i)_{2 \leq i \leq N-1} \in \mathbb{R}^{N-2}$ 。分别对 x^i ， y^i 和 λ_i 求导，可以得到下列方程：

$$\begin{aligned} \log(x^i) - \log(x^{i-1} + x^i + v^+) + \log(x^i + v^+) - \log(x^i + x^{i+1} + v^+) + \lambda_i &= 0, \\ \log(y^i + v^-) - \log(y^{i-1} + y^i + v^-) + \log(y^i) - \log(y^i + y^{i+1} + v^-) + \lambda_i &= 0, \\ x^i + y^i &= v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1. \end{aligned} \quad (5-1)$$

而且，可以把方程组 (5-1) 写为：

$$\frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \frac{x^i + v^+}{x^i + x^{i+1} + v^+} = \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} = e^{-\lambda_i}, \quad (5-2)$$

$$x^i + y^i = v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1.$$

其中 $x^1 = v^{12}$ ， $x^N = 0$ ， $y^1 = 0$ 和 $y^N = v^{1N}$ 。

引理 5.3 方程 (5-2) 有解 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 。

证明： 若对某些 $2 \leq k \leq N-1$ 存在 $v^{k,k+1} = 0$ ，则有 $x^k = y^k = 0$ 成立。那么依据指标 $2 \leq i \leq k-1$ 和 $k+1 \leq i \leq N-1$ ，方程 (5-2) 可以被分为两个方程。因此对 $v^{k,k+1} > 0, \forall k, 2 \leq k \leq N-1$ 证明引理，下面会从三种不同情况考虑这个引理。

情况 1： $v^{12} = v^+ = v^{1N} = v^- = 0$ 。易知，对每个 $\alpha \in (0, 1)$ ，

$$x^i = \alpha v^{i,i+1}, \quad y^i = (1 - \alpha) v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1,$$

都是 (5-2) 的解。

情况 2： $v^{12} = v^+ = 0, v^{1N} + v^- > 0$ 或 $v^{1N} = v^- = 0, v^{12} + v^+ > 0$ 。容易验证若 $v^{12} = v^+ = 0, v^{1N} + v^- > 0$ 成立，则 $x^i = 0, y^i = v^{i,i+1}$ 是方程 (5-2) 的解。

情况 3： $v^{12} + v^+ > 0$ 或 $v^{1N} + v^- > 0$ 。上述已证明对任意给定的 $x^{k+1} \geq 0, y^{k+1} > 0$ ，和 $x^{k+1} + y^{k+1} = v^{k+1,k+2}$ ，下列方程 (5-3) 满足 $x^i, y^i > 0, \forall i, 2 \leq i \leq k$ 。

$$\frac{x^i}{y^i} = \frac{x^i + x^{i+1} + v^+}{x^i + v^+} \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{x^{i-1} + x^i + v^+}{y^i + y^{i+1} + v^-}, \quad (5-3)$$

$$x^i + y^i = v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq k.$$

下面通过归纳法证明。若 $k = 2$ ，方程 (5-3) 可以简化为：

$$\frac{x^2}{v^{23} - x^2} = \frac{x^2 + x^3 + v^+}{x^2 + v^+} \frac{v^{12} + x^2 + v^+}{v^{23} - x^2 + y^3 + v^-}.$$

易得:

$$\lim_{x^2 \downarrow 0} \frac{x^2}{v^{23} - x^2} = 0, \quad \lim_{x^2 \downarrow 0} \frac{x^2 + x^3 + v^+}{x^2 + v^+} \frac{v^{12} + x^2 + v^+}{v^{23} - x^2 + y^3 + v^-} \geq \frac{v^{12} + v^+}{v^{23} + y^3 + v^-} > 0.$$

另外,

$$\lim_{x^2 \uparrow v^{23}} \frac{x^2}{v^{23} - x^2} = \infty, \quad \lim_{x^2 \uparrow v^{23}} \frac{x^2 + x^3 + v^+}{x^2 + v^+} \frac{v^{12} + x^2 + v^+}{v^{23} - x^2 + y^3 + v^-} = \frac{v^{23} + x^3 + v^+}{v^{23} + v^+} \frac{v^{12} + v^{23} + v^+}{y^3 + v^-} < \infty.$$

通过中值定理, 可以找到满足 $x^i, y^i > 0$ 的方程 (5-3) 的解, 并且有 $x^i + y^i = v^{i,i+1}$ 。假设对 $k = n - 1$ 命题成立, 那么可以考虑方程:

$$\frac{x^n}{v^{n,n+1} - x^n} = \frac{x^n + x^{n+1} + v^+}{x^n + v^+} \frac{v^{n,n+1} - x^n + v^-}{y^{n-1} + v^{n,n+1} - x^n + v^-} \frac{x^{n-1} + x^n + v^+}{v^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + v^-},$$

其中 x^{n-1}, y^{n-1} 是方程 (5-3) 在 $k = n - 1$ 时的解。可以得到:

$$\lim_{x^n \downarrow 0} \frac{x^n}{v^{n,n+1} - x^n} = 0, \quad (5-4)$$

并且

$$\begin{aligned} & \lim_{x^n \downarrow 0} \frac{x^n + x^{n+1} + v^+}{x^n + v^+} \frac{v^{n,n+1} - x^n + v^-}{y^{n-1} + v^{n,n+1} - x^n + v^-} \frac{x^{n-1} + x^n + v^+}{v^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + v^-} \\ & \geq \frac{v^{n,n+1} + v^-}{\lim_{x^n \downarrow 0} (y^{n-1}) + v^{n,n+1} + v^-} \frac{\lim_{x^n \downarrow 0} (x^{n-1}) + v^+}{v^{n,n+1} + y^{n+1} + v^-} > 0. \end{aligned} \quad (5-5)$$

利用归纳法得出的结论 $\lim_{x^n \downarrow 0} (x^{n-1}) > 0$, 可以得到下面两个式子成立。

$$\lim_{x^n \uparrow v^{n,n+1}} \frac{x^n}{v^{n,n+1} - x^n} = \infty, \quad (5-6)$$

和

$$\begin{aligned} & \lim_{x^n \uparrow v^{n,n+1}} \frac{x^n + x^{n+1} + v^+}{x^n + v^+} \frac{v^{n,n+1} - x^n + v^-}{y^{n-1} + v^{n,n+1} - x^n + v^-} \frac{x^{n-1} + x^n + v^+}{v^{n,n+1} - x^n + y^{n+1} + v^-} \\ & \leq \frac{v^{n,n+1} + x^{n+1} + v^+}{v^{n,n+1} + v^+} \frac{\lim_{x^n \uparrow v^{n,n+1}} x^{n-1} + v^{n,n+1} + v^+}{y^{n+1} + v^-} < \infty. \end{aligned} \quad (5-7)$$

那么通过中值定理, 可以找到方程 (5-3) 满足条件 $x^i, y^i > 0, x^i + y^i = v^{i,i+1}, \forall i = 2, 3, \dots, n$ 的解, 就是说上述命题对 $k = n$ 成立。

当 $k = N - 1$ 时, 有 $y^{k+1} = y^N = v^{1N}$ 成立。注意到 $v^{1N} + v^- > 0$, 那么可以得到 (5-4), (5-5), (5-6) 和 (5-7) 成立。通过中值定理, 可以找到方程 (5-3) 满足条件 $x^i, y^i > 0, x^i + y^i = v^{i,i+1}, \forall i = 2, 3, \dots, n$ 的解。当 $k = N - 1$ 时, 方程 (5-3) 与方程 (5-2) 等价。证毕。

□

引理 5.4 令 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 是引理 5.1 的解, 那么 X 是 $F_v(\cdot)$ 定义在 $V(v)$ 下的最小值点。

证明: 对任意 $a_1, a_2, b_1, b_2 \geq 0$, 通过 log-sum 不等式 (见 (5-14)), 可以得到:

$$a_1 \log \frac{a_1}{a_1 + a_2} + a_2 \log \frac{a_2}{a_1 + a_2} \geq a_1 \log \frac{b_1}{b_1 + b_2} + a_2 \log \frac{b_2}{b_1 + b_2}. \quad (5-8)$$

对任意 $Z = (z^i, w^i) \in V(\nu)$, 可以把 (3-13) 写为:

$$\begin{aligned} F_\nu(Z) = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(z^{i-1} + \nu^+) \log \frac{z^{i-1} + \nu^+}{z^{i-1} + z^i + \nu^+} + z^i \log \frac{z^i}{z^{i-1} + z^i + \nu^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[w^i \log \frac{w^i}{w^i + w^{i+1} + \nu^-} + (w^{i+1} + \nu^-) \log \frac{w^{i+1} + \nu^-}{w^i + w^{i+1} + \nu^-} \right], \end{aligned}$$

其中 $z^1 = \nu^{12}, w^N = \nu^{1N}$. 再根据方程 (5-2) 和 (5-8)

$$\begin{aligned} F_\nu(Z) \geq & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(z^{i-1} + \nu^+) \log \frac{x^{i-1} + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} + z^i \log \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[w^i \log \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} + (w^{i+1} + \nu^-) \log \frac{y^{i+1} + \nu^-}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right] \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[\nu^+ \log \frac{x^{i-1} + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} + z^i \log \frac{x^i + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[\nu^- \log \frac{y^{i+1} + \nu^-}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} + w^i \log \frac{y^i + \nu^-}{y^{i-1} + y^i + \nu^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right] \\ & + \nu^{12} \log \frac{\nu^{12} + \nu^+}{\nu^{12} + x^2 + \nu^+} + \nu^{1N} \log \frac{\nu^{1N} + \nu^-}{\nu^{1N} + y^{N-1} + \nu^-} \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[-\lambda_i \nu^{i,i+1} + \nu^+ \log \frac{x^{i-1} + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} + \nu^- \log \frac{y^{i+1} + \nu^-}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right] \\ & + \nu^{12} \log \frac{\nu^{12} + \nu^+}{\nu^{12} + x^2 + \nu^+} + \nu^{1N} \log \frac{\nu^{1N} + \nu^-}{\nu^{1N} + y^{N-1} + \nu^-} \\ = & \sum_{i=2}^{N-1} \left[(x^{i-1} + \nu^+) \log \frac{x^{i-1} + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} + x^i \log \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \right] \\ & + \sum_{i=2}^{N-1} \left[y^i \log \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} + (y^{i+1} + \nu^-) \log \frac{y^{i+1} + \nu^-}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right] \\ = & F_\nu(X), \end{aligned}$$

其中 λ_i 被表示为 (5-2)。证毕。 □

5.2 Proof of Theorem 3.1

这里把大偏差原理的证明 3.1 分为两部分。首先研究经验环流的速率函数的性质。回顾速率函数 $I_f : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 的形式为:

$$\begin{aligned}
I_J(\nu) &= \left[h(\nu^{12}) + h(\nu^{1N}) + h(\nu^+) + h(\nu^-) - h(\nu^{12} + \nu^{1N} + \nu^+ + \nu^-) \right] \\
&\quad + \inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X) + \sum_{i \in S} \left[h(\nu_i - \nu^i) + h(\nu^i) - h(\nu_i) \right] - \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c \\
&:= I_1(\nu) + I_2(\nu) + I_3(\nu) + I_4(\nu).
\end{aligned}$$

命题 5.1 速率函数 I_J 是有界, 连续的凸函数。

证明: 易知 I_J 有界。首先证明 I_J 连续。易知 h 是定义在 $[0, \infty)$ 的连续函数。那么 I_1 和 I_3 是连续的。注意到 I_4 是关于 ν 的连续函数, 因此还需证明 I_2 是连续函数。令 $Y(\nu) \in V(\nu)$ 是方程 (5-2) 的解, 由于 (5-2) 是一个多项式方程组, 因此易知 $Y(\nu)$ 是关于变量 ν 的连续函数。因为 h 是连续的, 再根据 (3-13), $\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X) = F_\nu(Y(\nu))$ 是关于 ν 的连续函数。

然后证明 I_J 是凸函数。回顾 log-sum 不等式, 对任意 $a_1, a_2, b_1, b_2 \geq 0$, 有:

$$(a_1 + a_2) \log \frac{a_1 + a_2}{b_1 + b_2} \leq a_1 \log \frac{a_1}{b_1} + a_2 \log \frac{a_2}{b_2}, \quad (5-9)$$

注意到

$$I_1(\nu) = \nu^{12} \log \left(\frac{\nu^{12}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^{1N} \log \left(\frac{\nu^{1N}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^+ \log \left(\frac{\nu^+}{\hat{\nu}} \right) + \nu^- \log \left(\frac{\nu^-}{\hat{\nu}} \right), \quad (5-10)$$

其中 $\hat{\nu} = \nu^{12} + \nu^{1N} + \nu^+ + \nu^-$ 。对任意满足 $\alpha + \beta = 1$ 的 $\alpha, \beta \geq 0$ 和 $\nu, \mu \in \mathcal{V}$, 通过 log-sum 不等式 (5-14), 可以得到:

$$(\alpha \nu^{12} + \beta \mu^{12}) \log \left(\frac{\alpha \nu^{12} + \beta \mu^{12}}{\alpha \hat{\nu} + \beta \hat{\mu}} \right) \leq \alpha \nu^{12} \log \left(\frac{\nu^{12}}{\hat{\nu}} \right) + \beta \mu^{12} \log \left(\frac{\mu^{12}}{\hat{\mu}} \right),$$

其中 $\hat{\mu} = \mu^{12} + \mu^{1N} + \mu^+ + \mu^-$ 。这说明 (5-15) 式的第一项的右边是关于 ν 的连续函数, 同理, 其他三项的右边也是关于 ν 的连续函数。因此 $I_1(\nu)$ 是凸函数, 同理, 可以通过 log-sum 不等式得到 $I_3(\nu)$ 也是凸函数。由于 $I_4(\nu)$ 是线性函数, 故也是凸函数, 最后只需证明 $\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X)$ 是凸函数。吧 (3-13) 重写为:

$$\begin{aligned}
F_\nu(X) &= \sum_{i=2}^{N-1} \left[(x^{i-1} + \nu^+) \log \left(\frac{x^{i-1} + \nu^+}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \right) + x^i \log \left(\frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \right) \right] \\
&\quad + \sum_{i=2}^{N-1} \left[y^i \log \left(\frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right) + (y^{i+1} + \nu^-) \log \left(\frac{y^{i+1} + \nu^-}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} \right) \right] \\
&:= \sum_{i=2}^{N-1} [A_1^i(\nu, X) + A_2^i(\nu, X) + A_3^i(\nu, X) + A_4^i(\nu, X)].
\end{aligned}$$

注意到对任意 $X = (x^i, y^i) \in V(\nu)$ 和 $Z = (z^i, w^i) \in V(\mu)$, 有 $\alpha X + \beta Z \in V(\alpha \nu + \beta \mu)$ 。那么通过 log-sum 不等式, 可得:

$$\begin{aligned}
&A_1^i(\alpha \nu + \beta \mu, \alpha X + \beta Z) \\
&= (\alpha x^{i-1} + \beta z^{i-1} + \alpha \nu^+ + \beta \mu^+) \log \left(\frac{\alpha x^{i-1} + \beta z^{i-1} + \alpha \nu^+ + \beta \mu^+}{\alpha x^{i-1} + \alpha x^i + \beta z^{i-1} + \beta z^i + \alpha \nu^+ + \beta \mu^+} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (\alpha(x^{i-1} + v^+) + \beta(z^{i-1} + \mu^+)) \log \left(\frac{\alpha(x^{i-1} + v^+) + \beta(z^{i-1} + \mu^+)}{\alpha(x^{i-1} + x^i + v^+) + \beta(z^{i-1} + z^i + \mu^+)} \right) \\
&\leq \alpha(x^{i-1} + v^+) \log \left(\frac{x^{i-1} + v^+}{x^{i-1} + x^i + v^+} \right) + \beta(z^{i-1} + \mu^+) \log \left(\frac{z^{i-1} + \mu^+}{z^{i-1} + z^i + \mu^+} \right) \\
&= \alpha A_1^i(v, X) + \beta A_1^i(\mu, Y).
\end{aligned}$$

同理, 对任意 $j = 2, 3, 4$ 有 $A_j^i(\alpha v + \beta \mu, \alpha X + \beta Y) \leq \alpha A_j^i(v, X) + \beta A_j^i(\mu, Y)$ 。这说明

$$F_{\alpha v + \beta \mu}(\alpha X + \beta Y) \leq \alpha F_v(X) + \beta F_\mu(Y).$$

针对 X 和 Y 取极小, 可以得到:

$$\inf_{Z \in V(\alpha v + \beta \mu)} F_{\alpha v + \beta \mu}(Z) \leq \alpha \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \beta \inf_{Y \in V(\mu)} F_\mu(Y).$$

证毕。 □

下面给出 LDP 原理的严格证明。

命题 5.2 经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 满足速率为 n 的大偏差原理, 并且相应的速率函数为 $I_J : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 。此外, 它的上界可以提升为: 对任意集合 $\Gamma \subset \mathcal{V}$, 有:

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}((J_n^c)_{c \in C} \in \Gamma) \leq - \inf_{\nu \in \Gamma} I_J(\nu). \quad (5-11)$$

证明: 记

$$K_n := \left\{ (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2} : \sum_{c \in C} k^c |c| = n \right\}. \quad (5-12)$$

接下来的证明将假设马氏链从状态 1 出发, 这并不会降低命题的一般性。那么, 对任意 $k = (k^c)_{c \in C} \in K_n$, 由 (3-4) 式, 可得:

$$\mathbb{P}_1 \left(J_n^c = \frac{k^c}{n}, \forall c \in C \right) = |G_n(k)| \prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c}, \quad (5-13)$$

令 $\mu_n(k) = k/n \in \mathcal{V}$ 。对任意 $\Gamma \subset \mathcal{V}$, 令

$$\mathcal{Q}_n(\Gamma) = \max_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} \mathbb{P}_1 \left(J_n^c = \frac{k^c}{n}, \forall c \in C \right).$$

显然有:

$$\mathcal{Q}_n(\Gamma) \leq \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) \leq |K_n| \mathcal{Q}_n(\Gamma). \quad (5-14)$$

易知 $|K_n| \leq (2N+2)(n+1)^{2N+3}$, 那么有公式 (5-18), (5-19), (3-9), (3-10), 和 (3-14)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n} \log \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) &= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \frac{1}{n} \log \mathcal{Q}_n(\Gamma) \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \max_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} \left[\frac{1}{n} \log |G_n(k)| + \sum_{c \in C} \frac{k^c}{n} \log \gamma^c \right] \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) - \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k)).
\end{aligned} \quad (5-15)$$

由于 $\cup_{n \in \mathbb{N}} \{\mu_n(k) : k \in K_n\}$ 在 \mathcal{V} 中稠密, 且 $\nu \rightarrow I_J(\nu)$ 在 \mathcal{V} 中连续 (见命题 5.3), 这保证

了对每个 $v \in \mathcal{V}$, 存在序列 $(k_n)_{n \in \mathbb{N}}$, 使得:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mu_n(k_n) - v\| = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} I_J(\mu_n(k_n)) = I_J(v).$$

那么对任意开集 $U \subset \mathcal{V}$

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty}} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in U} I_J(\mu_n(k)) \leq I_J(v), \quad \forall v \in U.$$

对 $v \in U$ 取极小, 可得:

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty}} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in U} I_J(\mu_n(k)) \leq \inf_{v \in U} I_J(v). \quad (5-16)$$

结合 (5-20) 和 (5-21), 可得大偏差原理的下界 (3-1)。此外, 对任意 $\Gamma \subset \mathcal{V}$, 同理可得反向的不等式, 即

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty}} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k)) \geq \inf_{v \in \Gamma} I_J(v). \quad (5-17)$$

结合 (5-20) 和 (5-22), 可得大偏差原理的上界 (3-2)。 \square

5.3 简化速率函数 I_J

这里将对两种特殊情况, 给出速率函数 I_J 的简化形式, 1) 三状态马氏链。2) 状态 1 到状态 N 的转移概率为 0 的单环马氏系统。回顾速率函数 $I_J : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 的公式为:

$$\begin{aligned} I_J(v) &= \left[h(v^{12}) + h(v^{1N}) + h(v^+) + h(v^-) - h(v^{12} + v^{1N} + v^+ + v^-) \right] \\ &\quad + \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \sum_{i \in S} \left[h(v_i - v^i) + h(v^i) - h(v_i) \right] - \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c \\ &:= I_1(v) + I_2(v) + I_3(v) + I_4(v). \end{aligned}$$

命题 5.3 三状态马氏链的速率函数为

$$I_J(v) = \sum_{i \in S} \left[v^i \log \left(\frac{v^i/v_i}{J^i/J_i} \right) + (v_i - v^i) \log \left(\frac{(v_i - v^i)/v_i}{(J_i - J^i)/J_i} \right) \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} v^c \log \left(\frac{v^c/\tilde{v}}{J^c/\tilde{J}} \right).$$

证明: 易知 $X = (x^2, y^2)$ 为方程 (5-2) 的解, 其中

$$x^2 = \frac{v^{23}(v^{12} + v^+)}{v^{12} + v^{13} + v^+ + v^-}, \quad y^2 = \frac{v^{23}(v^{13} + v^-)}{v^{12} + v^{13} + v^+ + v^-}.$$

根据引理 5.2

$$I_2(v) = F_v(X) = v^{23} \log \frac{v^{23}}{\tilde{v}} + (v^{12} + v^{13} + v^+ + v^-) \log \frac{\tilde{v} - v^{23}}{\tilde{v}}.$$

那么通过计算, 可以得到:

$$I_1(v) + I_2(v) + I_3(v) = \sum_{i \in S} \left[v^i \log \frac{v^i}{v_i} + (v_i - v^i) \log \frac{v_i - v^i}{v_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} v^c \log \frac{v^c}{\tilde{v}}. \quad (5-18)$$

回顾环流的表达 [14, Theorem.1.3.3], 有

$$J^+ = \gamma^+ \frac{1}{C}, \quad J^- = \gamma^- \frac{1}{C}, \quad J^{i,i+1} = \gamma^{i,i+1} \frac{1 - p_{i-1,i-1}}{C}, \quad 1 \leq i \leq 3, \quad (5-19)$$

其中 $C = 3 + \sum_{i \in S} [p_{ii} p_{i+1,i+1} - p_{i,i+1} p_{i+1,i} - 2(p_{ii} + p_{i+1,i+1})]$. 根据 (2-1),

$$p_{ij} = \frac{\sum_{c \ni \langle i, j \rangle} J^c}{\sum_{c \ni i} J^c}. \quad (5-20)$$

结合 (5-24) 和 (5-25), 有:

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in S} \left[v^i \log \frac{J^i}{J_i} + (v_i - v^i) \log \frac{J_i - J^i}{J_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} v^c \log \left(\frac{J^c}{\bar{J}} \right) \\ &= \sum_{i \in S} \left[v^i \log \frac{J^i}{J_i} + v^{i,i+1} \log \left(\left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \left(1 - \frac{J^{i+1}}{J_{i+1}} \right) \frac{J^{i,i+1}}{\bar{J}} \right) \right] \\ & \quad + v^+ \log \left(\frac{J^+}{\bar{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) + v^- \log \left(\frac{J^-}{\bar{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) \\ &= \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c = -I_4(v). \end{aligned} \quad (5-21)$$

结合 (5-23) 和 (5-26), 得证. \square

命题 5.4 状态 1 到状态 N 的转移概率为 0 的单环马氏链的速率函数为:

$$I_J(v) = \sum_{i \in S} \left[v^i \log \left(\frac{v^i/v_i}{J^i/J_i} \right) + v^{i,i+1} \log \left(\frac{v^{i,i+1}/v_i}{J^{i,i+1}/J_i} \right) + (v^{i-1,i} + v^+) \log \left(\frac{(v^{i-1,i} + v^+)/v_i}{(J^{i-1,i} + J^+)/J_i} \right) \right].$$

证明: 在 $p_{1N} = 0$ 的条件下, 环 $(1, N)$ 和环 $(1, N, \dots, 2)$ 不会被形成. 因此, 可以得到 (3-16) 中的 $v^{1N} = v^- = 0$, 并且 $x^i = v^{i,i+1}, y^i = 0$ 是方程 (3-16) 的解, 那么

$$I_2(v) = F_v(x^i, y^i) = \sum_{i=2}^{N-1} \left[-\lambda_i v^{i,i+1} + v^+ \log \frac{v^{i-1,i} + v^+}{v^{i-1,i} + v^{i,i+1} + v^+} \right] + v^{12} \log \frac{v^{12} + v^+}{v^{12} + v^{23} + v^+},$$

其中

$$\lambda_i = -\log \left(\frac{v^{i,i+1}}{v^{i-1,i} + v^{i,i+1} + v^+} \frac{v^{i,i+1} + v^+}{v^{i,i+1} + v^{i+1,i+2} + v^+} \right).$$

通过 v_i 的定义, 有

$$v_1 = v^1 + v^{12} + v^+, \quad v_i = v^i + v^{i-1,i} + v^{i,i+1} + v^+, \quad 2 \leq i \leq N-1, \quad v_N = v^N + v^{N-1,N} + v^+.$$

然后通过计算, 可以得到:

$$I_1(v) = v^{12} \log \frac{v^{12}}{v_1 - v^{12}} + v^+ \log \frac{v^+}{v_1 - v^1}, \quad (5-22)$$

$$I_2(v) = \sum_{i=2}^N \left[v^{i,i+1} \log \frac{v^{i,i+1}}{v_i - v^i} + v^+ \log \frac{v^{i-1,i} + v^+}{v_i - v^i} \right] + \sum_{i=1}^N v^{i,i+1} \log \frac{v^{i,i+1} + v^+}{v_{i+1} - v^{i+1}}, \quad (5-23)$$

和

$$I_3(v) = \sum_{i \in S} \left[v^i \log \frac{v^i}{v_i} + v^+ \log \frac{v_i - v^i}{v_i} \right] + \sum_{i \in S} v^{i,i+1} \left(\log \frac{v_i - v^i}{v_i} + \log \frac{v_{i+1} - v^{i+1}}{v_{i+1}} \right). \quad (5-24)$$

根据 (5-25), 可得

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}}{J_i} + (\nu^{i-1,i} + \nu^+) \log \frac{J^{i-1,i} + J^+}{J_i} \right] \\
&= \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}(J^{i,i+1} + J^+)}{J_{i+1}J_i} \right] + \nu^+ \log \frac{\prod_{i=1}^N (J^{i,i+1} + J^+)}{\prod_{i=1}^N J_i} \\
&= \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c = -I_4(\nu).
\end{aligned} \tag{5-25}$$

结合 (5-27), (5-28), (5-29), 和 (5-30), 证毕. \square

5.4 经验 LE 环流的暂态涨落定理的证明

在此, 将给出无周期条件下, 经验 LE 环流的暂态涨落定理的证明. 记 $k = (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2}$. 在时间步 n , 轨迹中环 c 形成 k^c 次, 因此有:

$$n = \sum_{c \in C} k^c |c| + |\eta|,$$

其中 η 表示剩下的导出链, 且 $0 \leq |\eta| \leq N-1$. 假设系统从状态 1 出发, 这并不降低命题的一般性. 令 $[\eta] = t$, 那么 $\eta = \eta_1$ 或者 η_2 , 其中 $\eta_1 = [1, 2, \dots, t+1]$ 且 $\eta_2 = [1, N, \dots, N+1-t]$. 同时, (3-4) 可以被写为:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C) &= \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C, \tilde{\xi}_n = \eta_1) + \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C, \tilde{\xi}_n = \eta_2) \\
&= |G^{\eta_1}(k)| \left[\prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c} \right] \gamma^{\eta_1} + |G^{\eta_2}(k)| \left[\prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c} \right] \gamma^{\eta_2},
\end{aligned} \tag{5-26}$$

其中 $\gamma^{\eta_1} = p_{12} \cdots p_{t,t+1}$ 且 $\gamma^{\eta_2} = p_{1N} \cdots p_{N+2-t, N+1-t}$. 那么有

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^-, \dots) &= (\gamma^+)^{k^+} (\gamma^-)^{k^-} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} \\
&= [|G^{\eta_1}(k^+, k^-, \dots)| \gamma^{\eta_1} + |G^{\eta_2}(k^+, k^-, \dots)| \gamma^{\eta_2}].
\end{aligned}$$

同理, 如果交换上述方程中的 k^+ 和 k^- , 可以得到:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(N_n^+ = k^-, N_n^- = k^+, \dots) &= (\gamma^+)^{k^-} (\gamma^-)^{k^+} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} \\
&= [|G^{\eta_1}(k^-, k^+, \dots)| \gamma^{\eta_1} + |G^{\eta_2}(k^-, k^+, \dots)| \gamma^{\eta_2}].
\end{aligned}$$

根据 (5-12) 式, 可以得到下列的暂态涨落定理成立:

$$\mathbb{P}(N_n^+ = k^+, N_n^- = k^-, \dots) = \mathbb{P}(N_n^+ = k^-, N_n^- = k^+, \dots) \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right)^{k^+ - k^-}.$$

致 谢

参考文献

- [1] Jarzynski C. Equalities and Inequalities: Irreversibility and the Second Law of Thermodynamics at the Nanoscale[J]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2011, 2(1):329–351. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-062910-140506>.
- [2] Seifert U. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines[J]. Reports on Progress in Physics, 2012, 75(12):126001. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/75/12/126001>.
- [3] Van den Broeck C, Esposito M. Ensemble and trajectory thermodynamics: A brief introduction[J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2015, 418:6–16. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037843711400346X>. Proceedings of the 13th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [4] Onsager L, Machlup S. Fluctuations and Irreversible Processes[J]. Phys. Rev., 1953, 91:1505–1512. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.91.1505>.
- [5] Kolmogoroff A. Zur Theorie der Markoffschen Ketten[J]. Math. Ann, 1936, 112:155–160. <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01565412>.
- [6] Schnakenberg J. Network theory of microscopic and macroscopic behavior of master equation systems[J]. Reviews of Modern Physics, 1976, 48:571–585.
- [7] Zhang X J, Qian H, Qian M. Stochastic theory of nonequilibrium steady states and its applications. Part I[J]. Physics Reports, 2012, 510(1):1–86. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157311002420>. Stochastic Theory of Nonequilibrium Steady States and Its Applications: Part I.
- [8] Ge H, Qian M, Qian H. Stochastic theory of nonequilibrium steady states. Part II: Applications in chemical biophysics[J]. Physics Reports, 2012, 510(3):87–118. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157311002419>. Stochastic theory of nonequilibrium steady states (Part II): Applications in chemical biophysics.
- [9] Hill T L, Kedem O. Studies in irreversible thermodynamics. 3. Models for steady state and active transport across membranes.[J]. Journal of theoretical biology, 1966, 10 3:399–441.
- [10] Hill T L. Studies in irreversible thermodynamics. IV. Diagrammatic representation of steady state fluxes for unimolecular systems.[J]. Journal of theoretical biology, 1966, 10 3:442–59.
- [11] Hill T L. Free energy transduction and biochemical cycle kinetics[M].[S.l.]: Courier Corporation, 2013.
- [12] Minping Q, Min Q. Circulation for recurrent Markov chains[J]. Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete, 1982, 59(2):203–210.
- [13] JIAN M B, JIAN M, JIAN C. Circulations of Markov chains with continuous time and the probability interpretation of some determinants[J]. Science in China Series A-Mathematics, Physics, Astronomy & Technological Science, 1984, 27(5):470–481.
- [14] Jiang D Q, Jiang D. Mathematical theory of nonequilibrium steady states: on the frontier of probability and dynamical systems[M].[S.l.]: Springer Science & Business Media, 2004.

-
- [15] Kalpazidou S L. Cycle representations of Markov processes[M]. Vol. 28.[S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007.
- [16] Roldán É, Vivo P. Exact distributions of currents and frenesy for Markov bridges[J]. *Physical Review E*, 2019, 100(4):042108.
- [17] Biddle J W, Gunawardena J. Reversal symmetries for cyclic paths away from thermodynamic equilibrium[J]. *Physical Review E*, 2020, 101(6):062125.
- [18] Pietzonka P, Guioth J, Jack R L. Cycle counts and affinities in stochastic models of nonequilibrium systems[J]. *Physical Review E*, 2021, 104(6):064137.
- [19] Andrieux D, Gaspard P. Fluctuation theorem for currents and Schnakenberg network theory[J]. *Journal of statistical physics*, 2007, 127(1):107–131.
- [20] Poletti M, Esposito M. Transient fluctuation theorems for the currents and initial equilibrium ensembles[J]. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2014, 2014(10):P10033.
- [21] Andrieux D, Gaspard P. Network and thermodynamic conditions for a single macroscopic current fluctuation theorem[J]. *Comptes Rendus Physique*, 2007, 8(5-6):579–590.
- [22] Jia C, Jiang D Q, Qian M P. Cycle symmetries and circulation fluctuations for discrete-time and continuous-time Markov chains[J]. *The Annals of Applied Probability*, 2016, 26(4):2454–2493.
- [23] Ge H, Jia C, Jiang D Q. Cycle symmetry, limit theorems, and fluctuation theorems for diffusion processes on the circle[J]. *Stochastic Processes and their Applications*, 2017, 127(6):1897–1925.
- [24] Varadhan S S. Large deviations and applications[M].[S.l.]: SIAM, 1984.
- [25] Den Hollander F. Large deviations[M]. Vol. 14.[S.l.]: American Mathematical Soc., 2000.
- [26] Bertini L, Faggionato A, Gabrielli D. Flows, currents, and cycles for Markov chains: large deviation asymptotics[J]. *Stochastic Processes and their Applications*, 2015, 125(7):2786–2819.
- [27] Bertini L, Faggionato A, Gabrielli D. Large deviations of the empirical flow for continuous time Markov chains[C]//*Annales de l’IHP Probabilités et statistiques*. [S.l.]: [s.n.] , 2015, 51:867–900.
- [28] Cornish-Bowden A. Fundamentals of enzyme kinetics[M].[S.l.]: John Wiley & Sons, 2013.
- [29] Sakmann B. Single-channel recording[M].[S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- [30] Beard D A, Qian H. Chemical biophysics: quantitative analysis of cellular systems[M]. Vol. 126.[S.l.]: Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [31] Jia C. Nonequilibrium nature of adaptation in bacterial chemotaxis: A fluctuation-dissipation theorem approach[J]. *Physical Review E*, 2017, 95(4):042116.
- [32] Pedraza J M, Paulsson J. Effects of molecular memory and bursting on fluctuations in gene expression[J]. *Science*, 2008, 319(5861):339–343.
- [33] Jia C, Li Y. Analytical time-dependent distributions for gene expression models with complex promoter switching mechanisms[J]. *bioRxiv*, 2022.

附录6 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