

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6日

Classified Index: O242.1 Secret State: Public
U.D.C.: 519.6 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-Conferring-Institution: China Academy of Engineering Physics

Chairman of defence committee

Paper Reviewers

6th 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

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 环擦除定义下的环流	3
2.2 生成树定义下的环流	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	13
第四章 环流的涨落定理	15
4.1 单环马氏链 LE 环流的涨落定理	15
4.2 单环马氏链 ST 环流的涨落定理	17
4.3 一般马氏链 LE 环流的涨落定理	18
4.4 一般马氏链的 ST 环流的涨落定理	20
第五章 总结和讨论	21
5.1 附录	22
5.2 附录 A: 单环马氏链速率函数 I_J 的表达式	22
5.3 速率函数的对称性	24
5.4 Proof of Theorem 3.1	29
5.5 简化速率函数 I_J	31
5.6 经验 LE 环流的暂态涨落定理的证明	33
致 谢	34
参考文献	35
附录 6 攻读硕士学位期间发表的论文及其他成果	37

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]。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 [8–10] 和 Schnakenberg [5] 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 [11–13] 和 Kalpazidou [14] 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 [15–17] 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, 2], 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 [18] 证明了涨落定理在限制下对于净环流成立。此外, Poletini 和 Esposito [19] 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 [20] 以及 Jia 等人 [21] 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 [17]。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[22]。

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[23, 24]。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 [25, 26]。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。该马氏链的转移图表示为 $G = (S, E)$ ，其中顶点集合 S 是状态空间， E 是转移概率有向连接边的集合。在这篇论文里，用 $\langle i, j \rangle$ 表示状态 i 到状态 j 的有向边，所以有 $E = \{\langle i, j \rangle \in S \times S : p_{ij} > 0\}$ ，并且令 $M = |E|$ ，其中 $|E|$ 表示集合 E 中元素的数量。本文中假设马氏链是不可约的，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。

本文首先研究只有一个多于两状态的环的图 G ，如图1(a)所示，并称具有这种图结构的马氏链为单环。也就是说，如果马氏链的转移概率矩阵满足， $p_{ij} = 0$ 且 $|\text{mod}(i - j, N)| \geq 2$ ($\text{mod}(*, N)$ 表示模 N 同余)。生化反应中的很多物理过程也都用单环马氏链建模，比如酶的构象变化，磷酸化-脱磷酸化环，染色体重塑引起的启动子激活等。本文会过多关注单环系统，很多结论也会延展到一般系统中。

2.1 环擦除定义下的环流

本文研究马氏链中两种类型的环流，该章节回顾环擦除定义下的环流。马氏链中的回路是用路径定义的，比如路径 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ (i_1, i_2, \dots, i_s 是顶点集合 S 中不同点) 的环流为 $p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \dots p_{i_s i_1} > 0$ 。令 $j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \dots \rightarrow j_r \rightarrow j_1$ 为另一个环，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。环流 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ 在上述等价关系下所属的等价类被表示为 (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。环 (i_1, i_2, \dots, i_s) 的反环被定义为 (i_1, i_s, \dots, i_2) 。通常称马氏链中所用环的集合为环空间 C 。

马氏链的一条轨迹会形成各种换。直观看，如果我们抛弃马氏链 ξ 中环，并且在该过程中，始终关注轨迹中剩余状态形成的轨道，那么称剩余的轨迹为导出链 $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}_n)_{n \geq 0}$ 。例如，如果马氏链 ξ 的轨迹为 $\{1, 2, 3, 3, 2, 3, 4, 1, 4, \dots\}$ ，那么相应的导出链 $\tilde{\xi}$ 的轨迹和环形成表1所示

特别地，导出链的状态用 S 的中状态组成的有限序列表示，即 $[i_1, i_2, \dots, i_s]$ 。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 ，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 $i_{n+1} = i_r$ ，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

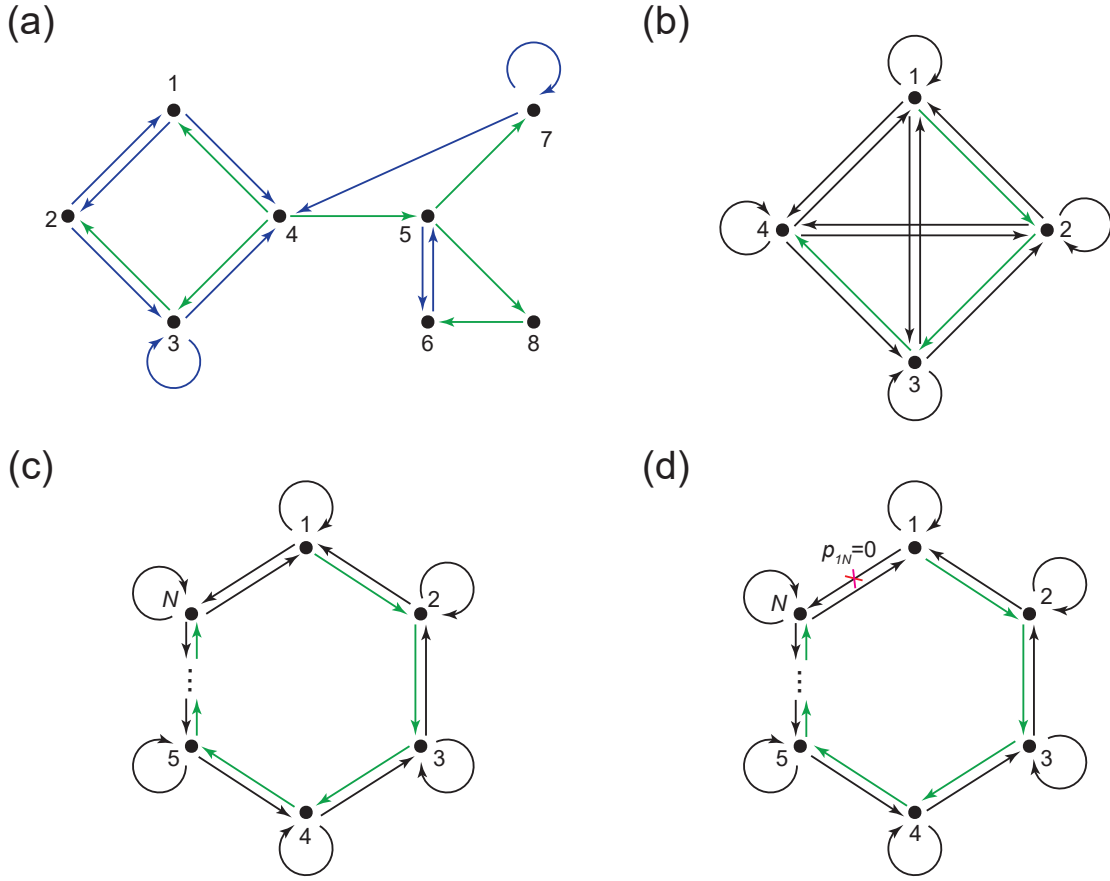


Figure 2.1 不同马氏链的转移图 (a) 一般马氏链的转移图，绿色线表示生成树 T ，并且蓝色线表示 T 的弦. (b) 转移概率矩阵满足 $p_{ij} > 0$ ， $\forall i, j, 1 \leq i, j \leq 4$ 的马氏链。绿色线表示生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$. (c) N 状态单环马氏链。绿线表示生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N$. (d) 转移概率矩阵有 $p_{1N} = 0$ 的单环马氏链，绿色线表示生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N$.

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]
环				(3)	(2,3)			(1,2,3,4)	

Table 2.1 导出链和形成的环

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 平均每个单位时间形成的数量， \tilde{J}_n^c 表示环 c 平均每个单位

时间形成的净数量。若令 $n \rightarrow \infty$ ，则有经验环流 J_n^c 和经验净环流 \tilde{J}^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 分别被视为环 c 的环流和净环流。关于 J_n^c 和 \tilde{J}^c 更为细致的描述，可以参考文献 [1]。著名的环流分解定理可以用上述定义表示为：

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

其中 $c \ni \langle i, j \rangle$ 表示环 c 中有边 $\langle i, j \rangle$ 。

2.2 生成树定义下的环流

环的环流可以用生成树的方式定义。令 T 为 G 的一个有向子图，也就是说 T 的所有边也是 G 的边，再令 \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：

- T 是 G 的覆盖子图，也就是说 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。

易知生成树 T 包含 G 的所有顶点，并且 $|T| = N - 1$ 。接下来，会通过 T 表示生成树和它的边集合。图的生成树并不唯一，一个图可以有很多完全不同的生成树。

若有向边 $l \notin T$ ，则被称为 T 的弦。（图1a）。因为 $|T| = N - 1$ ，生成树 T 有 $M - N + 1$ 个弦，也就是说明图 G 中有 $M - N + 1$ 条边不会在 T 中出现。同时 \bar{T} 是连通的，并且没有环的，如果添加一根弦 l 到 T ，则导出的子图 $\overline{T \cup \{l\}}$ 会恰巧有一个回路，表示其为 C_l 。记 c_l 是从回路 C_l 中获得的环，并且和 l 保持同样的指向。由弦生成的环的集合 $\mathcal{L} = \{c_l : l \in E \setminus T\}$ 被称为基本集。很明显，弦和基本集之间没有一一对应的关系，可以用 c_l 形成的次数定义通过弦 l 的次数。那么经验时间 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 $p_{ji} > 0$ ，这个条件可以保障熵增量是有限的。【1】考虑 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，那么易知 $c_l = c_{l^{-}}$ ，因此 $\tilde{Q}_n^{c_l} = 0$ 。对于弦 $l = \langle i, j \rangle$ ，如果 c_l 中有三个以上的状态，那么 l^{-} 也是一个弦，并且 $c_{l^{-}}$ 是由弦 l^{-} 生成的环。在文献 [3-6]，净环流的定义只是考虑有三个及以上状态的环，本文参考文献【2】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_l} 和 \tilde{Q}^{c_l} 分别被当做环 c 的环流与净环流。根据马氏链的遍历性, 有 $Q^{c_l} = \pi_i p_{ij}$ 。

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。为叙述简便, 由环擦除方式定义的环流称为 LE 环流, 由生成树方式定义的环流称为 ST 环流。 LE 环流是对环空间 C 中所有环定义的, 然而 ST 环流仅是针对基本集 \mathcal{L} 定义的。因此, 对于马氏链的环动态性, LE 环流相较于 ST 环流给出了更完整的描述。而且, 由于生成树不具有唯一性, 不同的生成树选择会对应不同的 ST 环流。对比之下, LE 环流并不依赖生成树的选择。

经过上述的比对, 自然会问到基本集 \mathcal{L} 和环空间 C 的差距会有多大。因为每根弦对应集合 \mathcal{L} 唯一一个元素, 即 $|\mathcal{L}| = |E \setminus T| = M - N + 1$, 所以很难对 $|C|$ 给出一般性的表述。下面将主要考虑几个重要的特例。首先考虑转移图是全连接的马氏链 (图1b), 也就是 $p_{ij} > 0, \forall i, j \in S$ 。有 k 个状态的环的数量是 $\frac{N(N-1)\cdots(N-K+2)(N-k+1)}{k}$, 因此

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

特别地, 若 $N = 4$, 可得 $|C| = 24$, 环空间为:

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

若选择 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ 作为生成树, 那么有基本集 $|\mathcal{L}| = 13$, 且可以表示为:

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

这也说明了 LE 环流的值可能会和 ST 的值差很多。

接下来考虑单环马氏链【图1 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 $p_{ij} > 0$ 。对于这种情况, $|C| = 2N + 2$, 并且环空间为:

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

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

对于这种情况, 只有一个环 $(N, 1)$ 在环空间 C 中出现, 而没有在基本集 \mathcal{L} 中出现。

最后考虑单环马氏链 [图1d]。从状态 1 到状态 N 的转移概率为 0。为了叙述方便, 假设 $p_{1N} = 0$, 且对于其他相邻状态 i, j , 马氏链满足 $p_{ii} > 0$ 并且 $p_{ij} > 0$ 。易知 $|C| = 2N$,

环空间为:

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

若令 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N$ 为生成树, 那么有 $\mathcal{L} = C$, 也就是说环空间和基本集是一致的。而且, 很容易验证两种类型的环流也是一致的, 也就是:

$$Q_n^{c_l} = J_n^{c_l}, \quad c_l \in \mathcal{L}. \quad (2-2)$$

为了进一步理解经验 LE 环流 J_n^c 和经验 ST 环流 Q_n^c 的关系。下面使用周期边界条件假设, 也就是 $\xi_0 = \xi_1$, 这是文献 [7] 中标准的假设条件。基于这个假设, 对任意弦 l , 易得:

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

注意到上述方程两边都表示弦 l 形成的速度。这表、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

在概率论的研究中，大偏差是与稀有事件发生概率有关的物理量。本文在此考察了经验环流的大偏差。注意到单环马氏链的经验 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，也就是环 c 包含的状态数量。若满足下列三个条件，则称经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 满足速率为 n 的大偏差原则：

- 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 $F \subset \mathcal{V}$,

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

同样地，也可以定义经验 ST 环流的大偏差，和经验 LE/ST 净环流的大偏差。从上述条件中可以看出，(ii) 和 (iii) 表明了上述定义对 $\forall (v^c)_{c \in C} \in \mathcal{V}$ ，满足：

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

在此考虑的是所有环的大偏差，而不是单个环的大偏差。

3.1 单环马氏链 LE 环流的大偏差

一般的马氏链中，经验环流 LE 的速率函数很难求出。本文将证明经验 LE 环流的大偏差原理，并给出【图1c】单环系统速率函数的表达式。单环系统中所有可能形成的环都在 (2) 中列出。

为简化叙述推导过程，假设系统从状态 1 出发，这并不会降低命题的一般性。为了计算经验环流的速率函数，下面将证明 (7) 对某些离散值 v 成立。若环 c 形成的速度是 k^c ，那么环 c 的经验环流是 $v^c = k^c/n$ 。为书写方便，记 k^i 替代 k^c 表示包含一个状态的环 $c = (i)$ 的形成速度。类似的，记 $k^{i,i+1}$ 表示环 $c = (i, i+1)$ 形成的速度，记 k^+ 表示环 $c = (1, 2, \dots, N)$ 形成的速度， k^- 表示环 $c = (1, N, \dots, 2)$ 形成的速度（图1c）。类似地，本文用 $v^i, v^{i,i+1}, v^+, v^-$ 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。因为上述假设周期边界条件，对于某些 $k = (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2}$ ，容易得到：

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

其中 $\gamma^c = p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \cdots p_{i_s i_1}$ 是沿着环 c 产生的所有转移概率的乘积。 $G_n(k)$ 是 n 时刻可能形成的轨迹的集合，该集合中的轨迹满足 $c \in C$ 出现恰好 k^c 次，并称这样的轨迹为容许轨迹。例如，若 $N = 3, n = 8, k^3 = k^{12} = k^{23} = k^- = 1, k^1 = k^2 = k^{13} = k^+ = 0$ ，那么有 8 个容许轨迹，在表（2）中已经列出。从这个例子中，可看到容许轨迹可以通过重拍环的顺序互相转化。

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 给定每种环形成的次数 k ，所有可能的轨迹

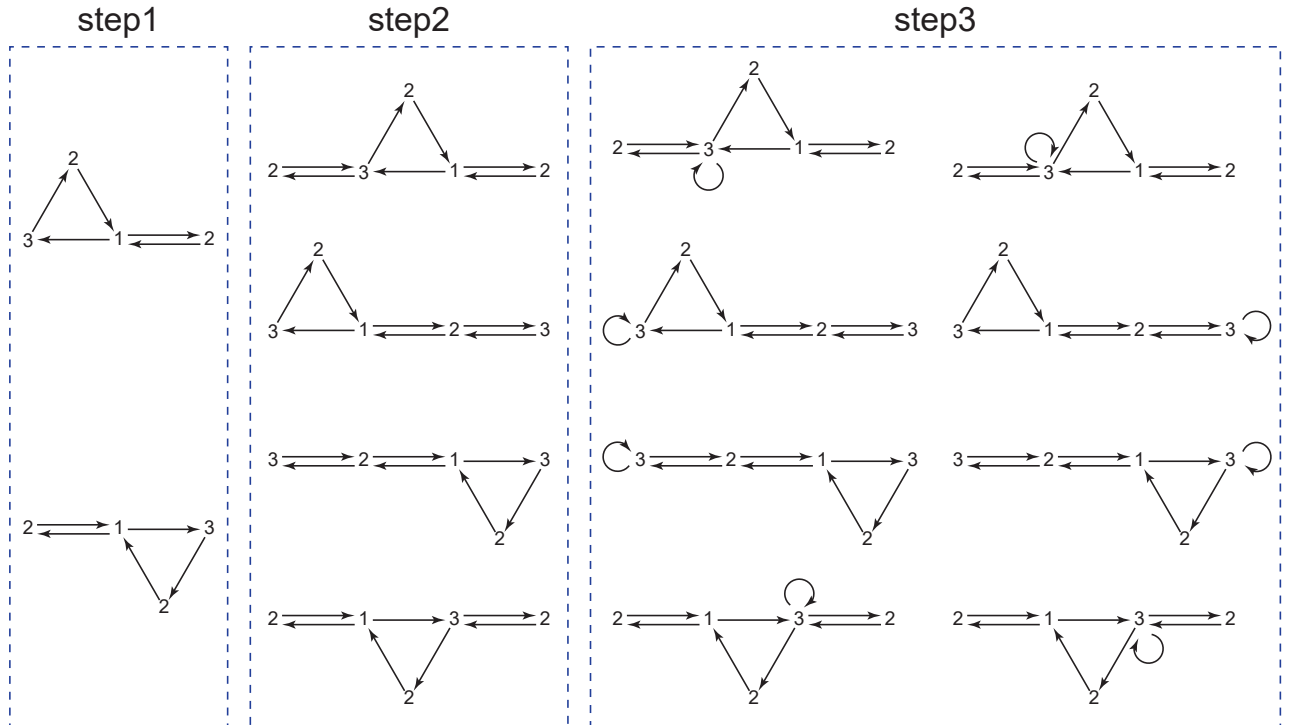


Figure 3.1 给定每种环形成的次数 k ，所有可能的轨迹 ($k^3 = k^{12} = k^{23} = k^- = 1, k^1 = k^2 = k^{13} = k^+ = 0$)。所有轨迹都是从状态 1 出发。在第一步之后，顺时针向左移动

接下来，计算容许轨迹的数量 $G_n(k)$ 。计算过程分为三个步骤：

1) 已假设系统从状态 1 出发, 从环集合 C 选出通过状态 1 的环, 也就是 $(1), (1, 2), (1, N), (1, 2, \dots, N), (1, N, \dots, 2)$, 并且插入到初始状态 1 中。这些环的排列数为:

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

$$\binom{k^+ + k^{12} + l^2 - 1}{l^2}.$$

接下来, 把每个状态 $3 \leq i \leq N$ 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:

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

最终, 把每个状态 $2 \leq i \leq N-1$ 对应的 m^i 个环 $(i, i+1)$ 插入轨迹, 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:

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

其中 $l^1 := k^{12}$ 且 $m^N = k^{1N}$ 。

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:

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

结合上述三个步骤, 最终可以得到容许轨迹的数量为:

$$|G_n(k)| = A_1 A_2 A_3. \quad (3-5)$$

为了得到更明确的速率函数表达式, 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 $v_i = \sum_{c \ni i} v^c$, 那么有:

$$\begin{aligned} \log A_1 &= \log \frac{(k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-)!}{k^1! k^{12}! k^{1N}! k^+! k^-!} \\ &= h(k_1) - h(k^1) - h(k^{12}) - h(k^{1N}) - h(k^+) - h(k^-) + O(\log n) \\ &= n \left[h(v_1) - h(v^1) - h(v^{12}) - h(v^{1N}) - h(v^+) - h(v^-) \right] + O(\log n). \end{aligned} \quad (3-6)$$

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 $|D| \leq (n+1)^{N-2}$, 因此, 可以得到:

$$\max_{L \in D} B_L \leq A_2 \leq (n+1)^{N-2} \max_{L \in D} B_L, \quad (3-7)$$

该式中还运用了 $A_2 = \sum_{L \in D} B_L$ 。类似于 (11) 式, 有:

$$\begin{aligned} \log B_L &= \sum_{i=2}^{N-1} [h(l^i + l^{i-1} + k^+) - h(l^i) - h(l^{i-1} + k^+)] \\ &\quad + \sum_{i=2}^{N-1} [h(m^i + m^{i+1} + k^-) - h(m^i) - h(m^{i+1} + k^-)] + O(\log n) \\ &= \sum_{i=2}^{N-1} n[h(x^i + x^{i-1} + v^+) - h(x^i) - h(x^{i-1} + v^+)] \\ &\quad + \sum_{i=2}^{N-1} n[h(y^i + y^{i+1} + v^-) - h(y^i) - h(y^{i+1} + v^-)] + O(\log n), \end{aligned} \quad (3-8)$$

其中 $x^i = l^i/n$ 和 $y^i = m^i/n$ 。对于给定的 $v \in \mathcal{V}$, 考虑其到处的空间:

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

且记 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 。定义函数:

$$\begin{aligned} F_v(X) &= \sum_{i=2}^{N-1} [h(x^{i-1} + v^+) + h(x^i) - h(x^{i-1} + x^i + v^+)] \\ &\quad + \sum_{i=2}^{N-1} [h(y^i) + h(y^{i+1} + v^-) - h(y^i + y^{i+1} + v^-)]. \end{aligned} \quad (3-9)$$

那么联系 (12) 式的结果, 可知:

$$\log A_2 = \max_{L \in D} \log B_L + O(\log n) = n \sup_{X \in V(v)} F_v(X) + O(\log n). \quad (3-10)$$

结合(3-3), (3-4) 和 (3-5)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(3-6), (??), 和 (3-10)式, 可得:

$$\begin{aligned} I_J(v) &= [h(v^{12}) + h(v^{1N}) + h(v^+) + h(v^-) - h(v^{12} + v^{1N} + v^+ + v^-)] \\ &\quad + \inf_{X \in V(v)} F_v(X) + \sum_{i \in S} [h(v_i - v^i) + h(v^i) - h(v_i)] - \sum_{c \in C} v^c \log \gamma^c, \end{aligned} \quad (3-11)$$

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

上述论证, 都是基于系统的初始状态是 1, 自然会联想到, 基于其他初始分布, 速率函数的表达式是否与其一致。附录 B 给出了速率函数不依赖初始状态的证明, 由 (3-11) 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 5.4 中给出。总结上面的论述, 可以得到下面的定理

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 (3-11). 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。

一般单环马氏链的速率函数表达式 (3-11) 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。若 $N = 3$, 则速率函数可以化简为: (证明细节见 5.5)

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

其中

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

若 $p_{1N} = 0$, 速率函数可以化简为 (证明细节见 5.5):

$$\begin{aligned} I_J(v) &= \sum_{i \in S} \left[v^i \log \left(\frac{v^i/v_i}{J^i/J_i} \right) + v^{i,i+1} \log \left(\frac{v^{i,i+1}/v_i}{J^{i,i+1}/J_i} \right) \right. \\ &\quad \left. + (v^{i-1,i} + v^+) \log \left(\frac{(v^{i-1,i} + v^+)/v_i}{(J^{i-1,i} + J^+)/J_i} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3-12)$$

最好, 考虑经验经验净 LE 环流 $(\tilde{J}_n^c)_{c \in C}$ 的大偏差原理。因为 $\tilde{J}_n^c = 0, |S| = 1, 2$ 且 $\tilde{J}_n^+ = -J_n^-$, 所以只需要考虑环 $(1, 2, \dots, N)$ 的经验净环流。那么由收缩原理可以得到:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = x) &= \mathbb{P}(J_n^+ - J_n^- = x) \\ &= \sum_{v^+ - v^- = x} \mathbb{P}(J_n^c = v^c, \forall c \in C) \\ &\propto \sum_{v^+ - v^- = x} e^{-nI_J(v)}. \end{aligned} \quad (3-13)$$

由此说明 \tilde{J}_n^+ 满足大偏差原则, 相应的速率函数 $I_J : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty]$ 为:

$$I_J(x) = \inf_{\{v \in \mathcal{V} : v^+ - v^- = x\}} I_J(v).$$

从上述表达式, 也可以看出 I_J 与初始分布的选择无关。

3.1.1 一般马氏链的 ST 环流的大偏差

ST 经验净环流的大偏差，以及速率函数的对称性已经在文献 [25] 中有过相关介绍。本文将着重研究经验 ST 环流的大偏差原理，涉及对经验测度部分可参考 [?]。

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

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

其中假设周期边界条件 $X_0 = X_n$ 。显然 $R_n(i, j)$ 表示边 $\langle i, j \rangle$ 形成的速度。注意到，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则：

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

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可以表示为有着明显的相对熵形式。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 [14] 可知，该分解是唯一的。那么有：

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

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

$$I_Q(\mu) = I_{\text{pair}}\left(\sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}\right). \quad (3-14)$$

最终，考虑 ST 经验净环流 $(\tilde{Q}_n^{c_l})_{c_l \in \mathcal{L}}$ 的大偏差原理。考虑基本集中三状态或者更多状态的环，令 $l_1, l_1-, l_2, l_2-, \dots, l_s, l_s-$ 为对应的弦。类似于 LE 经验净环流的论证，只考虑环 $c_{l_1}, c_{l_2}, \dots, c_{l_s}$ 的经验净环流。则 $(\tilde{Q}^{c_{l_i}})_{1 \leq i \leq s}$ 满足大偏差原则，且相应的速率函数 $I_{\tilde{Q}} : \mathbb{R}^s \rightarrow [0, \infty]$ 为：

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}; \mu^{c_{l_i}} - \mu^{c_{l_i}^-} = x_{l_i}, \forall 1 \leq i \leq s\}} I_Q(\mu). \quad (3-15)$$

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 (3-14) 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 2.1(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 (2-2) 式，可得 LE 经验环流 $(J^c)_{c_l \in \mathcal{L}}$ 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 (3-12) 中给出。

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

本章节将验证前面讨论的经验环流是否满足各类涨落定理。LE 经验环流的暂态涨落定理已经在文献 [20] 中证明，不过该文中的证明还有些许不完整，下面先简述该文中关于单环马氏链的证明。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。由文献 (3-4) 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 $\gamma^+ = p_{12}p_{23} \cdots p_{N1}$ 和 $\gamma^- = p_{1N}p_{N,N-1} \cdots p_{21}$ 分别是环 C^+ 和环 C^- 中的转移概率的乘积， $G_n(k^+, k^-, (k^c)_{c \neq C^+, C^-})$ 表示所有容许轨迹的集合，这些轨迹满足 C^+ 形成 k^+ 次， C^- 形成 k^- 次，环 $c \neq C^+, C^-$ 形成 k^c 次。上述方程可以重写为：

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

类似地，如果交换上式中的 k^+ 和 k^- ，可以得到

$$\mathbb{P}(N_n^+ = k^-, N_n^- = k^+, \dots) = (\gamma^+)^{k^-} (\gamma^-)^{k^+} \prod_{c \neq C^+, C^-} (\gamma^c)^{k^c} |G_n(k^-, k^+, \dots)|. \quad (4-2)$$

文献 [20] 中的证明是基于 $G_n(k^+, k^-, \dots)$ 与 $G_n(k^-, k^+, \dots)$ 之间的一一对应关系的，即对 $G_n(k^+, k^-, \dots)$ 的任意轨迹 $(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n)$ 都可以在 $G_n(k^-, k^+, \dots)$ 中找到对应的逆轨迹 $(\xi_n, \xi_{n-1}, \dots, \xi_0)$ 。也就是说轨迹中环 C^+ 形成 k^+ 次，环 C^- 形成 k^- 次，相应的逆轨迹中环 C^+ 形成 k^- 次，环 C^- 形成 k^+ 次。同时也可得到两个集合中的元素数量相同，即：

$$|G_n(k^+, k^-, \dots)| = |G_n(k^-, k^+, \dots)|. \quad (4-3)$$

结合 (4-1)，(4-2)，和 (4-3)，可以得到 LE 经验环流的暂态涨落定理：

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

然而，上面也指出直观的想法是基于周期边界条件。例如，表 4.1 中的四状态单环系统的轨迹，其中环 C^+ 形成一次，然而相应的反环并没有形成 C^+ 和 C^- 。这说明逆轨迹并没有 $G_n(k^+, k^-, \dots)$ 和 $G_n(k^-, k^+, \dots)$ 之间的一一对应关系。通过上述论证，确实可以通过假设周期边界条件简化，简化论证。只是逆轨迹无法做到两个集合之间的一一映射，但这并不能否认暂态涨落定理 (4-4) 是错误的。在附录 E 中，给出了暂态涨落定理的严格证明。该证明的出发点是式 (3-5) 中 $|G_n(k)|$ 的非平凡对称性。因为证明过于复杂，所以放在附录部分。这表明 LE 经验环流的联合分布满足一种非平凡对称性。

n	0	1	2	3	4	5	6	7
trajectory	1	2	3	4	4	1	4	3
derived chain	[1]	[1,2]	[1,2,3]	[1,2,3,4]	[1,2,3,4]	[1]	[1,4]	[1,4,3]
cycles formed					(4)	(1,2,3,4)		

n	0	1	2	3	4	5	6	7
reversed trajectory	3	4	1	4	4	3	2	1
derived chain	[3]	[3,4]	[3,4,1]	[3,4]	[3,4]	[3]	[3,2]	[3,2,1]
cycles formed				(1,4)	(4)	(3,4)		

Table 4.1 环擦除方式形成环的例子

通过暂态涨落定理，可以进一步得到其他两种涨落定理。首先，回顾 LE 经验环流的矩母函数：

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

可以得出 Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理成立：

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

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

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

这蕴含着下面 Gallavotti-Cohen 形式的涨落定理成立：

$$I_J(\dots, \nu^+, \nu^-) = I_J(\dots, \nu^-, \nu^+) - \left(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) (\nu^+ - \nu^-). \quad (4-5)$$

类似地，可以得到 LE 经验净环流的涨落定理。类似于章节 ?? 中讨论 $(\tilde{J}_n^c)_{c \in C}$ ，只

需关注环 C^+ 的经验净环流。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。下面各种有关的涨落皆可得出: 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 $\lambda = -\log \gamma^+/\gamma^-$ 带入上式 2) 可得

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

4) Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

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

最后考虑熵产生涨落和环流涨落之间的关系。回顾熵产生的定义 [13]:

$$W_n = \frac{1}{2} \sum_{c \in C} \tilde{J}_n^c \log \frac{\gamma^c}{\gamma^{c-}} = \tilde{J}_n^+ \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}.$$

熵产生的暂态涨落定理可以整理为:

$$\frac{\mathbb{P}(W_n = x)}{\mathbb{P}(W_n = -x)} = \frac{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = x/(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}))}{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = -x/(\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}))} = e^{nx}.$$

其他形式的涨落定理也有类似形式, 在此省略。

4.2 单环马氏链 ST 环流的涨落定理

有关 LE 经验环流和 LE 经验净环流的涨落定理已经很完整了。自然会想到是否 ST 经验环流和 ST 经验净环流是否也满足相似的涨落定理。下面将通过一个例子说明, ST 经验环流不具有 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理, 即使只考虑单环系统。

考虑三状态马氏链, 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 (3-14) 中的 ST 经验环流的速率函数为:

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

其中 $R^\mu(i, j) = \sum_{c \in \mathcal{L}} \mu^c H^{c \downarrow}(i, j)$ 且 $R^\mu(i) = \sum_{j \in S} R^\mu(i, j)$ 。再记 $\mu^+ = \mu^{(1,2,3)}$, $\mu^- = \mu^{(1,3,2)}$, 易知 (参考图 4.1 (a))

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

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。ST 经验环流无法满足各种涨落定理, ST 经验净环流却是在很多情况下成立 (参考 [18, 25])。对于单环

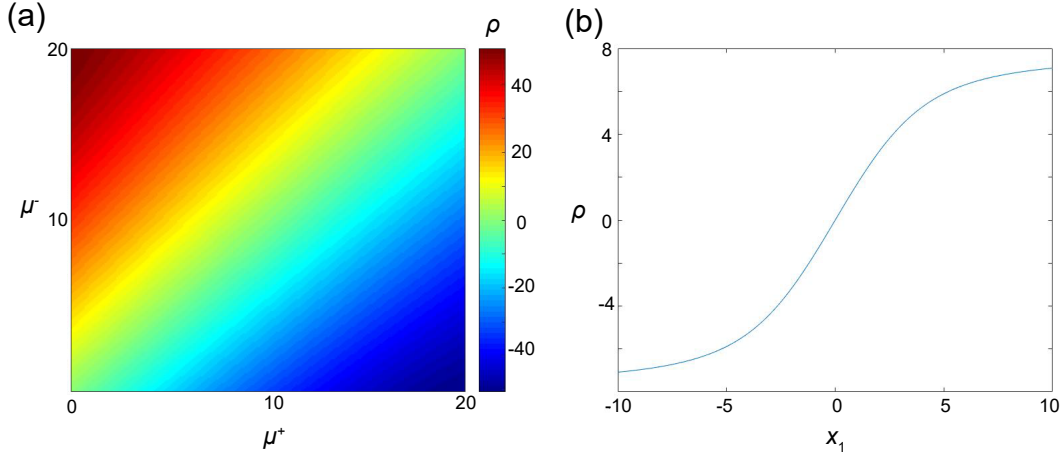


Figure 4.1 ST 经验环流和经验净环流的速率函数图像 (a)

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

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

系统，只需考虑环 C^+ 的净环流。从 (2-3) 式中易知环 C^+ 的 ST 经验净环流 \tilde{Q}_n^+ 等于该环的 LE 经验净环流 \tilde{J}_n^+ 。记弦 l^+ 和 l^- 分别对应于 C^+ 和 C^- ，由于 $l^+ = l^-$ ，则：

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_n^+ &= \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l^+ \in c\}} - \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l^- \in c\}} \\ &= \sum_{c \in C} J_n^c 1_{\{l^+ \in c\}} - \sum_{c \in C} J_n^{c^-} 1_{\{l^+ \in c\}} = \tilde{J}_n^+. \end{aligned}$$

因此 ST 净环流的涨落定理自然等同于 LE 环流的涨落定理。然而，(2-3) 式只在周期边界条件下成立，也就意味着，只能得到 ST 经验净环流满足 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理。并且，容易验证 \tilde{Q}_n^+ 对其他三种类型涨落定理不成立。

4.3 一般马氏链 LE 环流的涨落定理

目前，已经验证了单环马氏链环流相关的涨落定理，自然会问到环流涨落定理是否会适用于一般的马氏链。下面从回顾文献 [21] 的相关结论开始。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 c 和它的反环 c^- 一定是相似的。

首先考虑 LE 经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 。记 c_1, c_2, \dots, c_r 是一族环，比如，它们可以是环空间中环的全体。若环 c_s 和环 c_t ($1 \leq s, t \leq r$) 相似，那么有下面的暂态涨落定理成立：

$$\frac{\mathbb{P}(N_n^{c_s} = k^{c_s}, N_n^{c_t} = k^{c_t}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, \forall m \neq s, t)}{\mathbb{P}(N_n^{c_s} = k^{c_t}, N_n^{c_t} = k^{c_s}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, \forall m \neq s, t)} = \left(\frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}} \right)^{k^{c_s} - k^{c_t}}. \quad (4-6)$$

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。若环 c_s 和环 c_t 不仅相似，而且互为正反环，则上述方程可以化为：

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

这与单环系统的暂态涨落定理有着相同的表达形式。针对从 i 出发的马氏链，并且环 c_1, c_2, \dots, c_r 通过相同状态 $i \in S$ 的情况，并且文献 [21] 已经给出了 (4-6) 式的有关证明。实际上，使这个结论成立的假设，可以简化为对任意一族环，并且任意初始分布。此外，对任意一族环 c_1, c_2, \dots, c_r ，任意 $1 \leq s \leq r$ ，下式成立：

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_s} = x^{c_s}/n, \tilde{J}_n^{c_m} = x^{c_m}/n, \forall m \neq s) \\ &= \mathbb{P}(N_n^{c_s} - N_n^{c_s-} = x^{c_s}, N_n^{c_m} - N_n^{c_m-} = x^{c_m}, \forall m \neq s) \\ &= \sum_{k^{c_m} - k^{c_m-} = x^{c_m}, \forall m} \mathbb{P}(N_n^{c_s} = k^{c_s}, N_n^{c_s-} = k^{c_s-}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, N_n^{c_m-} = k^{c_m-}, \forall m \neq s) \\ &= \sum_{k^{c_m} - k^{c_m-} = x^{c_m}, \forall m} \mathbb{P}(N_n^{c_s} = k^{c_s-}, N_n^{c_s-} = k^{c_s}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, N_n^{c_m-} = k^{c_m-}, \forall m \neq s) \left(\frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s-}}\right)^{k^{c_s} - k^{c_s-}} \\ &= \sum_{k^{c_m} - k^{c_m-} = x^{c_m}, \forall m} \mathbb{P}(N_n^{c_s} = k^{c_s-}, N_n^{c_s-} = k^{c_s}, N_n^{c_m} = k^{c_m}, N_n^{c_m-} = k^{c_m-}, \forall m \neq s) \left(\frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s-}}\right)^{x^{c_s}} \\ &= \mathbb{P}(N_n^{c_s} - N_n^{c_s-} = -x^{c_s}, N_n^{c_m} - N_n^{c_m-} = x^{c_m}, \forall m \neq s) \left(\frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s-}}\right)^{x^{c_s}} \\ &= \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_s} = -x^{c_s}/n, \tilde{J}_n^{c_m} = x^{c_m}/n, \forall m \neq s) \left(\frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s-}}\right)^{x^{c_s}}. \end{aligned}$$

因此最终可得到下列的 LE 环流的暂态涨落定理：

$$\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_s} = x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall m \neq s) = \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_s} = -x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall m \neq s) e^{n x_s \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_s-}}}. \quad (4-7)$$

也就是说，对任意环 c_s ，LE 经验净环流的联合分布满足对称关系。且一状态和两状态的环 c 满足 $\tilde{J}_n^c = 0$ ，三状态或更多状态的环满足 $\tilde{J}_n^c = -\tilde{J}_n^{c-}$ 。令 $c_1, c_1-, c_2, c_2-, \dots, c_{r*}, c_{r*-}$ 表示所有三状态或更多状态的环。若把上述方程中的 $x_s, 1 \leq s \leq r^*$ 改为 $-x_s$ ，则可以得到：

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_{r*}} = x_{r*}) \\ &= \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = -x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_{r*}} = -x_{r*}) e^{n \sum_{i=1}^{r*} x_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_i-}}}. \end{aligned} \quad (4-8)$$

通过对比，可以看到(4-8)式的结论弱于 (4-7)式。因此，本文称 (4-7) 式为强形式的暂态涨落定理，(4-8)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，下面会整理处这些定理的强形式。考虑任意一族环 c_1, c_2, \dots, c_r ，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。

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

$$g_n(\cdots, \lambda_s, \cdots, \lambda_t, \cdots) = g_n\left(\cdots, \lambda_t - \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}, \cdots, \lambda_s + \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}, \cdots\right).$$

$$\tilde{g}_n(\cdots, \lambda_s, \cdots) = \tilde{g}_n\left(\cdots, -\left(\lambda_s + \log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_{s-}}}\right), \cdots\right).$$

积分涨落定理:

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

Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

$$I_J(\cdots, x_s, \cdots, x_t, \cdots) = I_J(\cdots, x_t, \cdots, x_s, \cdots) - \left(\log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}\right)(x_s - x_t).$$

$$I_J(\cdots, x_s, \cdots) = I_J(\cdots, -x_s, \cdots) - \left(\log \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_{s-}}}\right)x_s.$$

4.4 一般马氏链的 ST 环流的涨落定理

关于单环马氏系统, ST 经验环流无法满足各种涨落定理, 然而 ST 经验净环流满足 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理。对于一般情形的马氏链, Andrieux 和 Gaspard 在文献 [18] 中已经证实了 ST 经验净环流满足弱形式下的 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理: 对于基本集 \mathcal{L} 中三状态以上的环 $c_1, c_1-, c_2, c_2-, \cdots, c_r, c_r-$, 满足:

$$I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, \cdots, x_r) = I_{\tilde{Q}}(-x_1, -x_2, \cdots, -x_r) - \sum_{i=1}^r x_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}}.$$

这表明 ST 经验净环流的联合分布具有对称性。

更加让人难以置信的是, 对比 LE 经验净环流, 可以发现 ST 经验净环流不满足强形式下的 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理。下面将通过举出反例证实。考虑图 2.1(b) 中的具有全连接转移图的四状态马氏链, 并且令生成树为 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ 。由于对有一状态和两状态的环 c_l , 有 $\tilde{Q}_n^{c_l} = 0$, 因此只考虑其余的环:

$$c_1 = (1, 2, 3), c_2 = (2, 3, 4), c_3 = (1, 2, 3, 4), c_4 = (1, 3, 2), c_5 = (2, 4, 3), c_6 = (1, 4, 3, 2).$$

注意到所有三状态以上的环满足 $\tilde{Q}_n^{c_l} = -\tilde{Q}_n^{c_l-}$ 且 $c_1 = c_4-, c_2 = c_5-, c_3 = c_6-$ 。回顾 ST 经验环流的速率函数, 可知 $(\tilde{Q}_n^{c_1}, \tilde{Q}_n^{c_2}, \tilde{Q}_n^{c_3})$ 的速率函数为:

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}; \mu^{c_i} - \mu^{c_{i-}} = x_i, \forall 1 \leq i \leq 3\}} I_{\tilde{Q}}(\mu).$$

对于环 c_1 , 如果把 $\tilde{\mu}^{c_1}$ 换为 $-\tilde{\mu}^{c_1}$, 那么有图 4.1 (b) 可以得到:

$$I_{\tilde{Q}}(\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) \neq I_{\tilde{Q}}(-\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) - \left(\log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_{1-}}}\right)\tilde{\mu}^{c_1},$$

这表明 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[25]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，并阐明它们的适用范围。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：当基本集合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[15–17]之间的关系还不清楚，这些工作尚处于调研中。

5.1 附录

5.2 附录 A：单环马氏链速率函数 I_J 的表达式

因此，可以得到速率函数：

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

下面将使用拉格朗日乘子法化简该式。固定 $\nu \in \mathcal{V}$ ，令拉格朗日函数 [?] $\mathcal{A}_\nu : V(\nu) \times \mathbb{R}^{N-2} \rightarrow \mathbb{R}$ 为：

$$\mathcal{A}_\nu(X, \lambda) = F_\nu(X) + \sum_{i=2}^{N-1} \lambda_i (x^i + y^i - \nu^{i,i+1}),$$

其中 $X = (x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1} \in V(\nu)$ 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：

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

而且，可以把方程组 (5-1) 写为：

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

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

引理 5.1 方程 (5-2) 有解 $X = (x^i, y^i) \in V(\nu)$ 。

证明： 若对某些 $2 \leq k \leq N-1$ 存在 $\nu^{k,k+1} = 0$ ，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 $\nu^{k,k+1} > 0, \forall k, 2 \leq k \leq N-1$ 证明引理，下面会从三种不同情况考虑这个引理。

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

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

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 $x^i, y^i > 0, \forall i, 2 \leq i \leq k$ 。

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

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

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 5.2 令 $X = (x^i, y^i) \in V(\nu)$ 是引理 5.1 的解, 那么 X 是 $F_\nu(\cdot)$ 定义在 $V(\nu)$ 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 (3-9) 写为:

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

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

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

其中 λ_i 被表示为 (5-2)。证毕。 □

5.3 速率函数的对称性

下面将证明速率函数与初始分布的选择无关 (见命题 5.2)。在开始证明之前, 先给出下面的定义。

给定 $k = (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2}$ 和 $\eta = [i_0, i_1, \dots, i_t]$, 记 $|k| = \sum_{c \in C} k^c |c|$, 并且令 $n = |k| + |\eta| = |k| + t$, 其中 $|c|$ 和 $|\eta|$ 分别表示环 c 的长度和导出链的长度。令 $G^\eta(k)$ 为所有 n 步长的轨道 $(\xi_m)_{0 \leq m \leq n}$ 组成的集合, 这些轨道满足环 c 形成 k^c 次, 并且去环遗留的轨道是 η , 定义为

$$G^\eta(k) = \{(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n) \in S^{n+1} : N_n^c = k^c (\forall c \in C), \tilde{\xi}_n = \eta, \text{ and } n = |k| + |\eta|\}.$$

在此, 对只有一个状态的 $\eta = [i]$, 用 $G^i(k)$ 表示 $G^\eta(k)$ 。对任意包含状态 i 的环 $\tilde{c} \in C$, $G^i(k)$ 的一个子集 $G^{i,\tilde{c}}(k)$ 定义为:

$$G^{i,\tilde{c}}(k) = \{(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n) \in S^{n+1} : N_n^c = k^c (\forall c \in C), \tilde{\xi}_n = [i], T_{k^{\tilde{c}}}^{\tilde{c}} = n, \text{ and } n = |k|\},$$

其中 $T_{k^{\tilde{c}}}^{\tilde{c}}$ 表示为第 $k^{\tilde{c}}$ 次形成的环 \tilde{c} 。即对任意轨道 $(\xi_m)_{0 \leq m \leq n} \in G^{i,\tilde{c}}(k)$, 最后一次形成的环是 \tilde{c} 。

注意到等式 $n = |k| + |\eta|$ 对 $G^\eta(k)$ 和 $G^{i,\tilde{c}}(k)$ 成立。因此在章节 ?? 省略 $G_n(k)$ 的角标 n 。

下面将针对 $|G^i(k)|$ 和 $|G^{i,\tilde{c}}(k)|$, 给出两个重要的等式。记

$$B^i(\tilde{k}) = |G^{i,+}(1, 0, \tilde{k})|, \quad C^i(\tilde{k}) = |G^{i,-}(0, 1, \tilde{k})|,$$

其中 $\tilde{k} = (k^1, \dots, k^N, k^{12}, \dots, k^{N-1,N}, k^{1N})$, 即 B^i (C^i) 表示满足下列条件的轨迹数量: 1) 环 c 形成 k^c 次; 2) $k^+ = 1, k^- = 0$ ($k^+ = 0, k^- = 1$); 3) 从状态 i 出发, 状态 i 结束; 4) 最后形成的环是 $(1, \dots, N)$ ($(1, N, \dots, 2)$)。

引理 5.3 对任意 $i, j \in S$, 有:

$$B^i(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k}) = C^i(\tilde{k}) = C^j(\tilde{k}).$$

证明: 不降低一般性, 令 $i = 1$, 只须证 $B^1(\tilde{k}) = C^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。

首先证明 $B^1(\tilde{k}) = C^1(\tilde{k})$ 。注意到该系统是单环马氏链, ξ 的每条轨迹可以被看作是

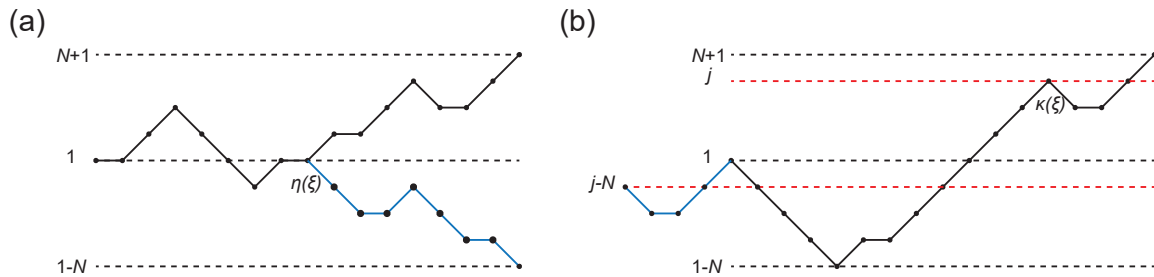


Figure 5.1 ξ 的轨迹对应的折线图。(a) 第一种类型的轨迹映射 (b) 第二种类型的轨迹映射

一个折线图 (见图 5.1 (a)) 折线在状态 i 时间 m 处的水平移动表示环 (i) 在时间 m 处形成。折线从状态 $i+1$ ($-j$) 到状态 i ($1-j$) 的每次上升对应于 (其中的加减运算的结果都会经过模 N 运算)。对任意轨迹 $\xi = (\xi_m)_{0 \leq m \leq n} \in G^{1,+}(1, 0, \tilde{k})$, 令 $\eta(\xi) = \max\{m : 0 \leq m \leq n-1, \xi_m = 1\}$ 。回顾定义 $G^{1,+}(1, 0, \tilde{k})$, 轨迹 $(\xi_m)_{0 \leq m \leq n}$ 在时间 n 和状态 $N+1$ 到达集合

$\{N+1, 1-N\}$ 。那么构造 ξ 对应的轨迹 $\tilde{\xi}$ (见图 5.1 (a))

$$\tilde{\xi}_m := \begin{cases} \xi_m, & \text{if } 0 \leq m \leq \eta(\xi), \\ \xi_{n+\eta(\xi)-m}, & \text{if } \eta(\xi) < m \leq n. \end{cases}$$

所有 $(\xi_m)_{0 \leq m \leq \eta(\xi)}$ 中形成的环, 在 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq \eta(\xi)}$ 中也有形成。折线轨迹 $(\xi_m)_{\eta(\xi) \leq m \leq n}$ 在状态 i 时间 m 的水平移动对应于 $(\tilde{\xi}_m)_{\eta(\xi) \leq m \leq n}$ 在状态 $i-N$ 时间 $n+\eta(\xi)-m$ 的水平移动。类似的, 折线轨迹 $(\xi_m)_{\eta(\xi) \leq m \leq n}$ 在时间 m 从状态 $i+1$ 到状态 i 的下落对应于 $(\tilde{\xi}_m)_{\eta(\xi) \leq m \leq n}$ 在时间 $n+\eta(\xi)-m$ 从状态 $i-N$ 到状态 $i+1-N$ 的下落。那么所有 $(\xi_m)_{0 \leq m \leq \eta(\xi)}$ 中形成的单状态和两状态环在 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq \eta(\xi)}$ 中也有对应。而且, 轨迹 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq n}$ 在时间 n 和状态 $1-N$ 第一次到达集合 $\{N+1, 1-N\}$, 这说明轨迹 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq n}$ 最后形成的环是 $(1, N, \dots, 2)$, 使得 $\tilde{\xi} \in G^{1,-}(0, 1, \tilde{k})$ 。那么 $\xi \rightarrow \tilde{\xi}$ 是从 $G^{1,+}(1, 0, \tilde{k})$ 到 $G^{1,-}(0, 1, \tilde{k})$ 的一一映射, 这说明 $B^1(\tilde{k}) = C^1(\tilde{k})$ 。

现在已经证明 $B^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。对任意 \tilde{k} , 令 $\tilde{G}^i(\tilde{k})$ 为满足下列所有条件路径的集合, 1) 前 n 步 ($n = N + \sum_{i \in S} (k^i + 2k^{i,i+1})$) 是从状态 i 出发。2) 边 $\langle i, i \rangle$ 被通过 k^i 次。3) 边 $\langle i, i+1 \rangle$ 被通过 $k^{i,i+1}$ 次。4) 在时间 n 第一次到达状态 $N+i$ 。

已经阐明对任意 $j \in S$, $|\tilde{G}^1(\tilde{k})| = |\tilde{G}^j(\tilde{k})|$ 成立。对任意轨迹 $\xi = (\xi_m)_{0 \leq m \leq n} \in \tilde{G}^1(\tilde{k})$, 令 $\kappa^j(\xi) = \min\{m : 0 \leq m \leq n, \xi_m = j\}$, ξ 也可以被视为折线图 (见图 5.1 (b))。那么构造 ξ 对应的轨迹 $\tilde{\xi}$ 为:

$$\tilde{\xi}_k := \begin{cases} \xi_{\kappa(\xi)+k}, & \text{if } 0 \leq k \leq n - \kappa(\xi), \\ \xi_{k+\kappa(\xi)-n}, & \text{if } n - \kappa(\xi) < k \leq n. \end{cases}$$

因此 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq n} \in \tilde{G}^j(\tilde{k})$ 。注意到 $\kappa(\xi)$ 是 ξ 第一次到达状态 j , 这说明 n 也是 $\tilde{\xi}$ 第一次到达状态 $j+N$, 那么 $\tilde{\xi} \in \tilde{G}^j(\tilde{k})$ 。显然, $\xi \rightarrow \tilde{\xi}$ 是从 $\tilde{G}^1(\tilde{k})$ 到 $\tilde{G}^j(\tilde{k})$ 的一一映射, 这说明 $|\tilde{G}^1(\tilde{k})| = |\tilde{G}^j(\tilde{k})|$ 。

对轨迹 $\xi \in \tilde{G}^j(\tilde{k})$, 环 (i) , $(i, i+1)$, $(1, \dots, N)$, $(1, N, \dots, 2)$ 分别形成 k^i , $k^{i,i+1} - l$, $l+1$, l 次, 其中 $l \leq \min_{i \in S} k^{i,i+1}$ 依赖于 ξ 。注意到 ξ 在 n 时到达状态 $N+j$, 那么 ξ 形成的最后一个环是 $(1, \dots, N)$, 因此

$$\begin{aligned} \tilde{G}^j(\tilde{k}) &= \bigsqcup_{l=0}^{\min_{i \in S} k^{i,i+1}} G^{j,+}(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l), \\ |\tilde{G}^j(\tilde{k})| &= \sum_{l=1}^{\min_{i \in S} k^{i,i+1}} |G^{j,+}(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l)| + B^j(\tilde{k}). \end{aligned} \quad (5-9)$$

下面用归纳法证明 $B^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。当 $\min_{i \in S} k^{i,i+1} = 0$, 通过方程 (5-9), 可以得到

$$B^1(\tilde{k}) = |\tilde{G}^1(\tilde{k})| = |\tilde{G}^j(\tilde{k})| = B^j(\tilde{k}).$$

假设等式对 $\min_{i \in S} k^{i,i+1} \leq m$ 成立。当 $\min_{i \in S} k^{i,i+1} = m+1$ 时, 固定 $1 \leq l \leq \min_{i \in S} k^{i,i+1}$, 并且令 $\xi \in G_n^{j,+}(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l)$ 。那么轨迹 ξ 可以被分为 $2l+1$ 个子

轨迹，是的每一个子轨迹最后形成的环是 $(1, \dots, N)$ 或 $(1, N, \dots, 2)$ 。注意到最后一个环 $(1, \dots, N)$ 在 $\binom{2l}{l}$ 形成前，在状态 1 处插入 l 个环 $(1, \dots, N)$ 和 l 个环 $(1, N, \dots, 2)$ 的排列数是 $\binom{2l}{l}$ 。固定剩余的环的分区（即 $\sum_{s=1}^{2l+1} \tilde{k}_s = (k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l)$ ），因为对任意 i 和 \tilde{k} ，插入方式的排列数为 $\prod_{s=1}^{2l+1} B^j(\tilde{k}_s)$ ，那么：

$$\begin{aligned} & \left| G^{j+} \left(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l \right) \right| \\ &= \binom{2l}{l} \sum_{\sum_{s=1}^{2l+1} \tilde{k}_s = (k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l)} \prod_{s=1}^{2l+1} B^j(\tilde{k}_s). \end{aligned}$$

因为 $l \geq 1$ ，所以有 $B^1(\tilde{k}_s) = B^j(\tilde{k}_s)$ ，那么：

$$\begin{aligned} & \left| G^{1,+} \left(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l \right) \right| \\ &= \left| G^{j+} \left(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l \right) \right|. \end{aligned}$$

依据式 (5-9)，可知 $B^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。最后通过归纳法，完成证明。 \square

命题 5.1 考虑任意 $1 \leq i, j \leq N, k \in \mathbb{N}^{2N+2}$ 和导出链 η ，可得下面三条结论：

(i)

$$\left| G^i(k^+, k^-, \tilde{k}) \right| = \left| G^i(k^-, k^+, \tilde{k}) \right|. \quad (5-10)$$

(ii)

$$\left| G^{i+}(k) \right| = \left| G^{i+}(k) \right|, \quad \left| G^{i-}(k) \right| = \left| G^{j-}(k) \right|. \quad (5-11)$$

(iii)

$$\left| G^\eta(k^+, k^-, \tilde{k}) \right| = \left| G^\eta(k^-, k^+, \tilde{k}) \right|. \quad (5-12)$$

证明： (1) 首先考虑在状态 i 插入环 k^+ 个环 $(1, \dots, N)$ 和 k^- 个环 $(1, N, \dots, 2)$ ，那么相应的排列数为 $\binom{k^++k^-}{k^+}$ 。接下来把剩余的环（i.e. k^i 个环 (i) 和 k^{i+1} 个环 $(i, i+1)$ ）分为 $k^+ + k^- + 1$ 个部分。将剩余环的分区固定为 $\sum_{s=1}^{k^++k^-+1} \tilde{k}_s = \tilde{k}$ 。通过引理 5.3，插入的数量为：

$$\left[\prod_{s=1}^{k^++k^-} B^i(\tilde{k}_s) \right] \left| G^i(0, 0, \tilde{k}_{k^++k^-+1}) \right|,$$

其中 $B^i(\tilde{k}_s)$ 是在第 $(s-1)$ 个和第 s 个 N 状态环之间插入 \tilde{k}_s 个环的排列数，且 $|G^i(0, 0, \tilde{k}_{k^++k^-+1})|$ 是在第 $(k^+ + k^-)$ 个 N 状态环之后插入 $\tilde{k}_{k^++k^-+1}$ 个环的排列数。在所有分区中增加插入数量 $\sum_{s=1}^{k^++k^-+1} \tilde{k}_s = \tilde{k}$ ，可以得到：

$$\left| G^i(k^+, k^-, \tilde{k}) \right| = \binom{k^++k^-}{k^+} \sum_{\sum_{s=1}^{k^++k^-+1} \tilde{k}_s = \tilde{k}} \left[\prod_{s=1}^{k^++k^-} B^i(\tilde{k}_s) \right] \left| G^i(0, 0, \tilde{k}_{k^++k^-+1}) \right|. \quad (5-13)$$

注意到 (5-13) 是关于 k^+ 和 k^- 对称的，故(1)证毕。

(ii) 上面只证明了 (5-11) 中的第一个等式，第二个等式的证明与其相似。但是这里考虑的是轨迹 $\xi \in G_n^{i+}(k)$ ，最后的环是 $(1, \dots, N)$ ，只需在状态 i 处插入 $k^+ - 1$ 个环

$(1, \dots, N)$ 和 k^- 个环 $(1, N, \dots, 2)$, 可以得到:

$$\begin{aligned} |G^{i,+}(k)| &= \binom{k^+ + k^- - 1}{k^+ - 1} \sum_{\sum_{s=1}^{k^+ + k^-} \tilde{k}_s = \tilde{k}} \prod_{s=1}^{k^+ + k^-} B^i(\tilde{k}_s) \\ &= \binom{k^+ + k^- - 1}{k^+ - 1} \sum_{\sum_{s=1}^{k^+ + k^-} \tilde{k}_s = \tilde{k}} \prod_{s=1}^{k^+ + k^-} B^j(\tilde{k}_s) = |G^{j,+}(k)|, \end{aligned}$$

其中第二步出自引理 5.3。

(iii) 记 $\eta = [i_0, i_1, \dots, i_t]$, 首先把所有的环分为 $t+1$ 个部分, 固定一部分为 $\sum_{s=0}^t k_s = k$, 那么 k_s^c 个环 $c (\forall c \in C)$ 将被插入在 η 的状态 $i_s (0 \leq s \leq t)$ 。那么可插入方式的数量为 $\prod_{s=0}^t |G^{i_s}(k_s)|$ 。增加所有分区数量 $\sum_{s=0}^t k_s = k$, 可以得到

$$|G^\eta(k)| = \sum_{\sum_{s=0}^t k_s = k} \prod_{s=0}^t |G^{i_s}(k_s)|.$$

注意到对任意分区 $\sum_{s=0}^t k_s = k$, 可知 $\sum_{s=0}^t (k_s^-, k_s^+, \tilde{k}_s) = (k^-, k^+, \tilde{k})$ 是 (k^-, k^+, \tilde{k}) 的一个分区。那么由方程 (5-10), 可得:

$$\begin{aligned} |G^\eta(k^-, k^+, \tilde{k})| &= \sum_{\sum_{s=0}^t (k_s^-, k_s^+, \tilde{k}_s) = (k^-, k^+, \tilde{k})} \prod_{s=0}^t |G^{i_s}(k_s^-, k_s^+, \tilde{k}_s)| \\ &= \sum_{\sum_{s=0}^t k_s = k} \prod_{s=0}^t |G^{i_s}(k_s)| = |G^\eta(k)|. \end{aligned}$$

□

下面将陈述 $|G^i(k)|$ 和 $|G^{i,c}(k)|$ 的相关性。

引理 5.4 对任意 $k \in \mathbb{N}^{2N+2}$ 和 $i \in S$, 令 $c \in C$ 包含状态 i 的环, 那么:

$$|G^{i,c}(k)| = \frac{k^c}{k_i} |G^i(k)|.$$

证明: 下面只证明 $i = 1$ 时的情况, 并不降低一般性。回顾章节 ?? 中计算 $|G^1(k)|$ 的三个步骤。在第一个步骤中固定最后一个环 c , 并且把排列数转换为

$$\frac{k^c}{k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-} A_1.$$

第二, 三个步骤不变。在这种情况下, 轨迹形成的最后一个环是 c , 这意味着:

$$|G^{1,c}(k)| = \frac{k^c}{k_1} |G^1(k)|.$$

□

命题 5.2 I_J 不依赖于初始分布的选择 ξ .

证明: 记 $c = (1, \dots, N)$ 或 $(1, N, \dots, 2)$, 通过命题 5.1 和引理 5.4, 易知 $\log |G^1(k)| = \log |G^i(k)| + O(\log n)$, 那么由式 (3-11), 命题得证。 □

5.4 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 $I_J : \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 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 5.3 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 (3-9)， $\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X) = F_\nu(Y(\nu))$ 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：

$$(a_1 + a_2) \log \frac{a_1 + a_2}{b_1 + b_2} \leq a_1 \log \frac{a_1}{b_1} + a_2 \log \frac{a_2}{b_2}, \quad (5-14)$$

注意到

$$I_1(\nu) = \nu^{12} \log \left(\frac{\nu^{12}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^{1N} \log \left(\frac{\nu^{1N}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^+ \log \left(\frac{\nu^+}{\hat{\nu}} \right) + \nu^- \log \left(\frac{\nu^-}{\hat{\nu}} \right), \quad (5-15)$$

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 (3-9) 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：

$$A_1^i(\alpha \nu + \beta \mu, \alpha X + \beta Z)$$

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

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 5.4 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:

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}((J_n^c)_{c \in C} \in \Gamma) \leq - \inf_{v \in \Gamma} I_J(v). \quad (5-16)$$

证明: 记

$$K_n := \left\{ (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2} : \sum_{c \in C} k^c |c| = n \right\}. \quad (5-17)$$

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:

$$\mathbb{P}_1 \left(J_n^c = \frac{k^c}{n}, \forall c \in C \right) = |G_n(k)| \prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c}, \quad (5-18)$$

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

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

显然有:

$$Q_n(\Gamma) \leq \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) \leq |K_n| Q_n(\Gamma). \quad (5-19)$$

易知 $|K_n| \leq (2N+2)(n+1)^{2N+3}$, 那么有公式 (5-18), (5-19), (3-6), (??), 和 (3-10)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n} \log \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) &= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \frac{1}{n} \log Q_n(\Gamma) \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \max_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} \left[\frac{1}{n} \log |G_n(k)| + \sum_{c \in C} \frac{k^c}{n} \log \gamma^c \right] \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) - \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k)).
\end{aligned} \quad (5-20)$$

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

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

那么对任意开集 $U \subset \mathcal{V}$

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

对 $\nu \in U$ 取极小, 可得:

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in U} I_J(\mu_n(k))} \leq \inf_{\nu \in U} I_J(\nu). \quad (5-21)$$

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

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k))} \geq \inf_{\nu \in \Gamma} I_J(\nu). \quad (5-22)$$

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

5.5 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:

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

命题 5.5 三状态马氏链的速率函数为

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

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

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

根据引理 5.2

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

那么通过计算, 可以得到:

$$I_1(\nu) + I_2(\nu) + I_3(\nu) = \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{\nu^i}{\nu_i} + (\nu_i - \nu^i) \log \frac{\nu_i - \nu^i}{\nu_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} \nu^c \log \frac{\nu^c}{\tilde{\nu}}. \quad (5-23)$$

回顾环流的表达 [13, Theorem.1.3.3], 有

$$J^+ = \gamma^+ \frac{1}{C}, \quad J^- = \gamma^- \frac{1}{C}, \quad J^{i,i+1} = \gamma^{i,i+1} \frac{1 - p_{i-1,i-1}}{C}, \quad 1 \leq i \leq 3, \quad (5-24)$$

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),

$$p_{ij} = \frac{\sum_{c \ni \langle i,j \rangle} J^c}{\sum_{c \ni i} J^c}. \quad (5-25)$$

结合 (5-24) 和 (5-25), 有:

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + (\nu_i - \nu^i) \log \frac{J_i - J^i}{J_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} \nu^c \log \left(\frac{J^c}{\tilde{J}} \right) \\ &= \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \left(\left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \left(1 - \frac{J^{i+1}}{J_{i+1}} \right) \frac{J^{i,i+1}}{\tilde{J}} \right) \right] \\ & \quad + \nu^+ \log \left(\frac{J^+}{\tilde{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) + \nu^- \log \left(\frac{J^-}{\tilde{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) \\ &= \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c = -I_4(\nu). \end{aligned} \quad (5-26)$$

结合 (5-23) 和 (5-26), 得证。 □

命题 5.6 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:

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

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(??)中的 $\nu^{1N} = \nu^- = 0$, 并且 $x^i = \nu^{i,i+1}, y^i = 0$ 是方程(??)的解, 那么

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

其中

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

通过 ν_i 的定义, 有

$$\nu_1 = \nu^1 + \nu^{12} + \nu^+, \quad \nu_i = \nu^i + \nu^{i-1,i} + \nu^{i,i+1} + \nu^+, \quad 2 \leq i \leq N-1, \quad \nu_N = \nu^N + \nu^{N-1,N} + \nu^+.$$

然后通过计算, 可以得到:

$$I_1(\nu) = \nu^{12} \log \frac{\nu^{12}}{\nu_1 - \nu^{12}} + \nu^+ \log \frac{\nu^+}{\nu_1 - \nu^1}, \quad (5-27)$$

$$I_2(\nu) = \sum_{i=2}^N \left[\nu^{i,i+1} \log \frac{\nu^{i,i+1}}{\nu_i - \nu^i} + \nu^+ \log \frac{\nu^{i-1,i} + \nu^+}{\nu_i - \nu^i} \right] + \sum_{i=1}^N \nu^{i,i+1} \log \frac{\nu^{i,i+1} + \nu^+}{\nu_{i+1} - \nu^{i+1}}, \quad (5-28)$$

和

$$I_3(\nu) = \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{\nu^i}{\nu_i} + \nu^+ \log \frac{\nu_i - \nu^i}{\nu_i} \right] + \sum_{i \in S} \nu^{i,i+1} \left(\log \frac{\nu_i - \nu^i}{\nu_i} + \log \frac{\nu_{i+1} - \nu^{i+1}}{\nu_{i+1}} \right). \quad (5-29)$$

根据 (5-25), 可得

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}}{J_i} + (\nu^{i-1,i} + \nu^+) \log \frac{J^{i-1,i} + J^+}{J_i} \right] \\
&= \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}(J^{i,i+1} + J^+)}{J_{i+1}J_i} \right] + \nu^+ \log \frac{\prod_{i=1}^N (J^{i,i+1} + J^+)}{\prod_{i=1}^N J_i} \\
&= \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c = -I_4(\nu).
\end{aligned} \tag{5-30}$$

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

5.6 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:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C) &= \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C, \tilde{\xi}_n = \eta_1) + \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in C, \tilde{\xi}_n = \eta_2) \\
&= |G^{\eta_1}(k)| \left[\prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c} \right] \gamma^{\eta_1} + |G^{\eta_2}(k)| \left[\prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c} \right] \gamma^{\eta_2},
\end{aligned} \tag{5-31}$$

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] Minping Q, Min Q. Circulation for recurrent Markov chains[J]. *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete*, 1982, 59(2):203–210.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] Kalpazidou S L. Cycle representations of Markov processes[M]. Vol. 28.[S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007.

-
- [15] Roldán É, Vivo P. Exact distributions of currents and frenesy for Markov bridges[J]. *Physical Review E*, 2019, 100(4):042108.
- [16] Biddle J W, Gunawardena J. Reversal symmetries for cyclic paths away from thermodynamic equilibrium[J]. *Physical Review E*, 2020, 101(6):062125.
- [17] 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.
- [18] Andrieux D, Gaspard P. Fluctuation theorem for currents and Schnakenberg network theory[J]. *Journal of statistical physics*, 2007, 127(1):107–131.
- [19] Poletini 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.
- [20] 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.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Varadhan S S. Large deviations and applications[M].[S.l.]: SIAM, 1984.
- [24] Den Hollander F. Large deviations[M]. Vol. 14.[S.l.]: American Mathematical Soc., 2000.
- [25] 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.
- [26] 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.

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