

密级: 公开
编号: 82817

学位论文

单环马氏链环流的大偏差与涨落定理

姜瑜浩

指导教师姓名 贾晨 特聘研究员

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 中国工程物理研究院

答辩委员会主席

评阅人

2022年4月26日

Classified Index: 0242.1 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 of monocyclic Markov chains

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

26th 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是由环擦除（LE）或生成树（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。首先我们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。然后我们阐明了LE和ST环流的速率函数之间的关系。此外，我们还研究了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。本文最终表明，LE环流和LE净环流皆满足各种强形式下的涨落定理，ST净环流只满足弱形式下的涨落定理，而ST环流并不满足涨落定理。

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 环形动力学介绍	3
2.2 马氏链中的环	3
2.3 环擦除方式定义的环境	4
2.4 生成树方式定义的环境	5
2.5 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 大偏差速率函数的基本推导	8
3.1.2 速率函数的对称性	15
3.1.3 大偏差原理的严格证明和速率函数的性质	19
3.1.4 大偏差速率函数的简化形式	22
3.2 一般马氏链的ST环流的大偏差	24
第 四 章 环流的涨落定理	27
4.1 单环马氏链LE环流的涨落定理	27
4.2 一般马氏链LE环流的涨落定理	29
4.3 一般马氏链ST环流的涨落定理	31
第 五 章 总结和讨论	35
致 谢	36
参考文献	37
附录 6 攻读硕士学位期间发表的论文及其他成果	40

第一章 绪论

1.1 问题的背景和研究现状

随机过程，是从物理问题中抽象出的一种数学模型，并逐渐应用于化学，生物，金融，人工智能等领域，其中的数学理论为很多学科建立了理论基础。随着各学科发展，其中背后的数学结构更加多样化，同时也带给了数学领域新挑战，新问题。过去二十年，随机热力学取得显著进展，并且逐渐成为了非平衡态统计物理的重要分支 [1–3]。随机热力学系统通常被建模为马尔科夫过程，如郎之万方程，主方程和福克-普朗克方程等。一般称具有离散状态空间的马尔科夫过程是马尔科夫链，因为任何马尔科夫过程总是可以被马尔科夫链近似表示，所以它也是最基本和最重要的动力学模型。物理学中的平衡状态可以由可逆的马氏过程定义，进一步用熵的产生定量刻画偏离平衡的程度，并写成热力学通量和力的双线性函数 [4]。Kolmogorov [5] 很早就认识到，马尔科夫系统的可逆性可以通过其环动态性来描述：当且仅当沿每个环的转移概率的乘积完全相同于沿其反向的环时，该系统是可逆的，这概括了细致平衡化学反应网络的 Wegscheider 条件。一个更为深刻观点是：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]。

本文的第二章节介绍了环的两种表示方法，生成树和环消除，并对其进行比较性的探讨。自然系统中很多随机模型都具有环结构，因此马氏链的环表示法在物理学、化学和生物学中应用广泛 [7, 8]。在数学层面上，环流有几种不同的定义方法，Hill [9–11] 和 Schnakenberg [6] 研究了一套网络理论，其中定义了环流的基环族，并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，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。钱敏平 [12–14] 和 Kalpazidou [15] 则是研究了环表示理论，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。近年来，也有学者基于序列匹配的思想 [16–18] 提出了其他类型的环流，即图中所有回路的环流，也就是第一和最后一个顶点相等的有向路径的环流。

本文的第三章节研究了两种环流的大偏差原理。环流是沿单一随机轨道定义的热力学量，很多数学领域的研究者都会关注其是否满足大偏差原理 [19, 20]。大偏差关注的是小概率的随机过程的长期涨落行为，且与无穷时间极限下的涨落定理密切相关。对于马氏系统，经验测度的大偏差（单位时间内通过图中顶点的次数的大偏差）和经验流的大偏差（单位时间内通过图中边的次数的大偏差）已被广泛研究，然而经验环流的大偏差（单位时间内通过图中环的次数的的大偏差）很少受到关注。关于生成树方式定义的环流，相关的大偏差理论已经被建立，这是由于经验环流恰好是弦的经验流 [21, 22]。

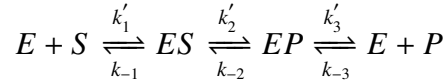
而对于循环消除方式定义的环流，大偏差率函数的表达方式目前还没有相关的研究成果，即使对简单拓扑结构的系统也是如此。

本文的第四章陈述并比较了这两类环流所满足的涨落定理及对称关系。随机热力学是非平衡态统计物理的重要分支。随机统计热力学中，某些物理量的发现往往是该领域的重大突破，如绝热和非绝热过程中的熵产生。环流所满足的涨落定理以等式的方式给出了热力学第二定律的非平凡概括[1–3]。因此，涨落定理也是非平衡态统计物理的重要概念。对于生成树方式定义的环流，Andrieux和Gaspard [23]证明了涨落定理在某些限制条件下对于净环流成立。此外，Polettini 和 Esposito [24]表明，如果稍作修正环流的定义，任何有限时间内，暂态涨落定理都是成立的。对于环擦除方式定义的环流，Andrieux 和 Gaspard [25]以及贾晨等人 [26] 证明了环流和净环流都满足各有类型的涨落定理和对称关系。对于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]。针对某些具有连续状态空间的随机过程，一些学者也在研究相应的环流涨落定理，例如圆周上的 Langevin动力学[27]。

第二章 模型介绍

2.1 环形动力学介绍

环形结构在自然科学中极为常见，生化系统中，系统完成封闭的环形运动，标志着生物活动的进行。下面通过酶促反应的例子，理解环形结构和环形动力学在生化系统中的重要作用。



上面的公式是酶促（Michaelis-Menten）反应方程，其中E是一个酶分子，反应物S在它的催化作用下生成产物P。追踪单个酶分子，它有三种状态：结合态ES，EP和自由态E，并持续在三者间转化。从时间维度，可以把酶状态的变化过程建模为三状态连续时间马氏链。酶分子在方程最左面的状态，和方程最右面的状态相同，因此该系统具有明显的环形结构。沿着该反应的正（反）方向会形成正（反）向环，这也对应了酶催化反应物S（产物P）转变为产物P（反应物S）的过程。

从上面例子可以看出，研究系统中的环结构和环形动力学是十分必要的。环形动力学理论的发展与非平衡态统计物理的发展是紧密相连的。其中的平衡态热力学是研究与外界没有能量和物质交换的系统，这对应于细致平衡条件下的马氏链。由于细致平衡下的马氏链是可逆的，因此可以用可逆马氏链对平衡态热力学系统建模。上个世纪初，Wegscheider给出了化学反应系统处于细致平衡的充要条件，称为Wegscheider条件。后来，Kolmogorov从马氏链的角度给出了类似于该条件的命题，称为Kolmogorov环条件。该条件从数学层面严格证明出，如果平稳马氏链的任意环，沿着正向环的转移概率乘积与反向环的相等，那么它是可逆的。Kolmogorov环条件巧妙地把非平衡态统计物理的概念转化为环动力学的数学命题，这是一个重大的进步。大偏差和涨落定理都是非平衡态统计物理的重要概念，本文正是通过环流理论，解析它们的数学结构和物理内涵。

2.2 马氏链中的环

本文通过离散时间马氏链 $\xi = (\xi_n)_{n \geq 0}$ 对随机热力学系统建模，该模型的状态空间是 $S = \{1, \dots, N\}$ ，转移概率矩阵是 $P = (p_{ij})_{i,j \in S}$ ，从状态 i 到状态 j 的转移概率为 p_{ij} 。记该马氏链对应的转移图为 $G = (S, E)$ ，顶点集是状态空间 S ，有向边集是所有正转移概率的边 E 。令 $\langle i, j \rangle$ 表示状态 i 到状态 j 的有向边，因此有 $E = \{\langle i, j \rangle \in S \times S : p_{ij} > 0\}$ ，且记 $|E| = M$ 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 不仅包含其他状态流入的边，还包含到其自身的边，也

就是一元环 ??。

图??(c)所示的图拓扑是转移图 G 中的特殊情形，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，重点关注单环系统，大部分的结论也可以扩展到一般系统。

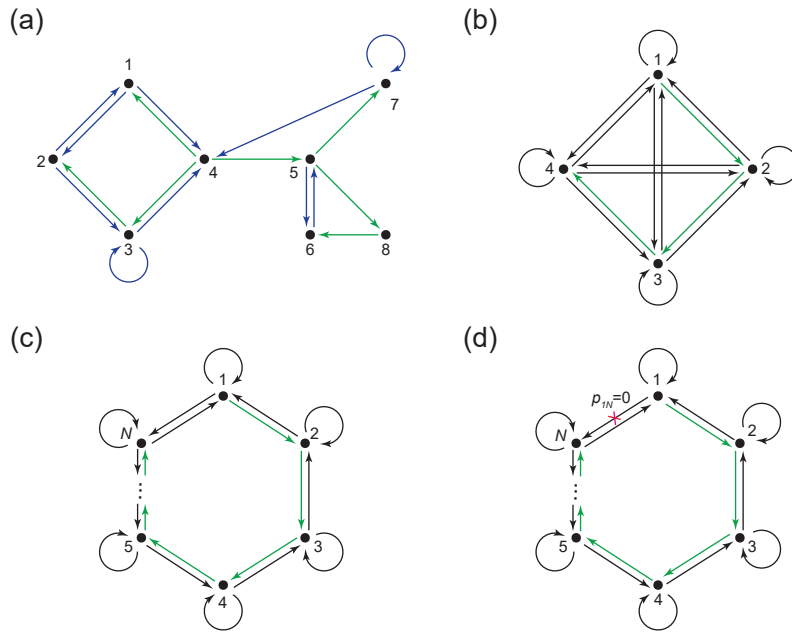


Figure 2.1: 各类马氏链的转移图和相应的生成树 (a) 一般转移图的马氏链，绿色线表示根节点为4的生成树 T ，并且蓝色线表示 T 的弦 (b) 四状态全连接马氏链，其中每个状态可以转移到自己和其他状态 (c) N 状态单环马氏链。系统有一个环拓扑。每个状态转移到自身和它两个相邻节点 (d) 一个 N 状态的单环马尔科夫链，该系统无法从状态1转移到状态 N (b)-(d)中，绿色箭头表示生成树 T

2.3 环擦除方式定义的环境

本文主要研究和比较了马氏链中两种类型的环流，这个章节回顾环擦除方式定义的环境流[14, 15]。马氏链中的回路是一个起点和终点相同的路径，比如路径 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ （其中 i_1, i_2, \cdots, i_s 是顶点集合 S 中不同点），其中 $p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \cdots p_{i_s i_1} > 0$ 。若 $j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \cdots \rightarrow j_r \rightarrow j_1$ 为另一个回路，两个回路等价，则是存在一个整数 k 且 $r = s$ ，使得

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

成立，其中指标 $k + 1, k + 2, \cdots, k + s$ 为模 n 后的结果。在上述等价关系下，所有与回

路 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ 等价的回路构成一个等价类，在此成为环 $c = (i_1, i_2, \cdots, i_s)$ 。例如， $(1, 2, 3), (2, 3, 1)$ 和 $(3, 1, 2)$ 表示相同的环，且令环 (i_1, i_2, \cdots, i_s) 的反环为 (i_1, i_s, \cdots, i_2) 。系统中所有环的集合称为环空间 \mathcal{C} 。

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，并且持续关注轨道中剩余的轨道，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，最初的马氏链 ξ 的轨道为 $\{1, 2, 3, 3, 2, 3, 4, 1, 4, \cdots\}$ ，相应的导出链 $\tilde{\xi}$ 的变化过程和轨迹中形成的环为表 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: 导出链的变化过程和轨道中形成的环

更为准确地说，导出链的状态是 S 的中不同状态组成的有限序列，一般记为 $[i_1, i_2, \cdots, i_s]$ 。下面假设 $\tilde{\xi}_{n-1} = [i_1, i_2, \cdots, i_s]$ 且 $\xi_n = i_{s+1}$ 。若 i_{s+1} 不同于 i_1, i_2, \cdots, i_s 中任意一个，那么 $\tilde{\xi}_n$ 就是 $\tilde{\xi}_n = [i_1, i_2, \cdots, i_s, i_{s+1}]$ 。其次，若 $i_{n+1} = i_r, \forall 1 \leq r \leq s$ ，那么 $\tilde{\xi}_n$ 则是 $\tilde{\xi}_n = [i_1, i_2, \cdots, i_r]$ 。对于该情况，称马氏链在时刻 n 形成环 $(i_r, i_{r+1}, \cdots, i_s)$ 。令 N_n^c 为环 c 在时刻 n 时总共形成的次数。那么可以定义环 c 在 n 时刻的经验环流：

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

相应的， n 时刻经验净环流为：

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

更直观地看， J_n^c 表示环 c 单位时间形成的数量， \tilde{J}_n^c 表示环 c 单位时间形成的净数量。多数相关成果只研究了净环流的性质 [6, 23, 25]，本文还会进一步考虑环流的性质。

若令 $n \rightarrow \infty$ ，那么经验环流 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 更为细致的叙述，可参考文献 [14]。著名的环流分解定理 [14] 可以通过上述定义写为：

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

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

2.4 生成树方式定义的环境

环流还可以通过生成树方式定义[6, 15]。记 T 为转移图 G 的有向子图，即 T 的所有边也是 G 的边， \bar{T} 表示与 T 对应的无向图。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 来表示生成树和它的边的集合。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。任何生成树 T 必须包含 G 的所有顶点, 因此必须有 $N - 1$ 条边 (见图 ??中的绿色箭头) [15]。

一般称有向边 $l \notin T$ 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 , 会导致无向子图 $\overline{T \cup \{l\}}$ 恰好有一条回路。记 c_l 是由此产生的环, 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的一一对应关系, 可以用 c_l 形成的次数定义通过弦 l 的次数。 c_l 在 n 时刻的经验环流定义为:

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

其中 $Q_n^{c_l}$ 表示单位时间通过弦 l 的次数。环擦除方式对于任意类型的环都可以定义, 生成树方式只能把定义局限在基本集中环的环流。

类似的, 也可以用生成树方式定义净环流。为此假设转移概率满足 $p_{ij} > 0$, 当且仅当 $p_{ji} > 0$, 这保障了系统的熵增量是有限值[6, 14]。对于任意弦 l , c_l 在时刻 n 的净环流为:

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

如果 c_l 是一元环或者二元环, 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 是三元环或者多元环 (包含超过三个状态的环), 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。文献 [6, 23, 25]中, 净环流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考虑了一元环和二元环。

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1趋于 Q^{c_l} 和 \tilde{Q}^{c_l} 。极限 Q^{c_l} 和 \tilde{Q}^{c_l} 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, 可得 $Q^{c_l} = \pi_i p_{ij}$ 成立。

2.5 两种类型环流的比较

下面将简述两种类型环流的差异。为讨论过程清晰, 我们称环擦除方式定义的环流称为LE环流, 生成树方式定义的环流称为ST环流。易知LE环流是定义在整个环空间 \mathcal{C} , 然而ST环流仅是针对基本集 \mathcal{L} 中的环定义。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。

自然会问到基本集 \mathcal{L} 的规模会比环空间 C 小多少。每根弦对应集合 \mathcal{L} 唯一的一个元素，因此有 $|\mathcal{L}| = |E \setminus T| = M - N + 1$ ，所以很难对 $|C|$ 给出统一的表达式。为了深入探索，下面讨论两个特殊的案例。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 k 元环的数量是 $\frac{N(N-1)\cdots(N-k+2)(N-k+1)}{k}$ ，因此

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

特别的，当 $N = 4$ 时，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环流少很多。

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

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

其中前 N 个环是一元环。中间 N 个环是二元环，最后两个环是 N 元环。如果选定生成树 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \cdots \rightarrow N$ ，那么有 $|\mathcal{L}| = 2N + 1$ ，并且基本集是：

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

对于单环系统，只有唯一一个环，也就是说 $(N, 1)$ 在环空间 C 中，却没有在基本集 \mathcal{L} 中。

为了进一步理解LE经验环流 J_n^c 和ST经验环流 Q_n^{cN} 的关系，下面假设周期边界条件，即 $\xi_0 = \xi_1$ ，这也是文献[20]中的标准假设条件。基于该假设，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经过弦 l 的环 c （符号 $c \ni l$ 表明 c 经过状态 i ）。既然上述方程两边都表示弦 l 单位时间形成的次数，这说明了ST环流可以表示为LE环流的线性组合。

第三章 环流的大偏差原理

大偏差原理关系到随机过程中小概率事件的长时涨落行为 [19, 20]。本文在此考察了经验环流的大偏差。既然假设周期边界条件，那么单环马氏链的经验LE环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ 也要定义在空间：

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

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[19]，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：

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

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

- 对于任意闭集 $F \subset \mathcal{V}$,

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

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 $(Q_c^{cl})_{l \in \mathcal{L}^o}$ 。

3.1 单环马氏链LE环流的大偏差

3.1.1 大偏差速率函数的基本推导

首先我们讨论经验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 很难被求出，因此下面将研究单环马氏链。单环系统中所有可能形成的环都已在(2-2)中列出。

下面假设系统都从状态1出发，这样会简化叙述步骤，且不会降低命题的适用性。为了求出速率函数 I_J ，需要计算LE经验环流的联合分布。对任意环 $c = (i_1, i_2, \dots, i_s)$ ，令 $\gamma^c = p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \dots p_{i_s i_1}$ 表示沿该环所有转移概率的乘积。对任意满足 $\sum_{c \in C} |c| k^c = n$ 的非负整数序列 $k = (k^c)_{c \in C}$ ，由于周期边界条件，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 时刻可能形成的轨道的集合，且称该类轨道为容许轨道。

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 $\nu^i, \nu^{i,i+1}, \nu^+, \nu^-$ 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：

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

那么在时刻 $n = 8$ ，有8个容许轨道，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个容许轨道，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

接下来计算容许轨道的数量 $G_n(k)$ 。基本的思路是在近似有序的轨道中插入各种环，插入方式的数量将会是容许轨道的数量。计算过程分为三个步骤：

1) 由于系统从状态1出发，作为第一步，选出所有包含初始状态1的环，即(1),(1,2),(1,N),(1,2,⋯,N),(1,N,⋯,2)，并且插入到轨道中。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，也就是环的排列数为：

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

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) 在轨道中插入剩余的二元环。仔细观察系统形成环 $(i, i+1)$ 的情况，可能是在状态 i ，也可能是 $i+1$ 。例如，轨道 $\{1, 3, 2, 3, \dots\}$ ，形成环(2,3)时，导出链是[1,3]。对此，称该环是在状态3处形成。作为对比，轨道 $\{1, 2, 3, 2, \dots\}$ ，形成环(2,3)时，导出链是[1,2]，因此称该环是在状态2处形成的。

考虑两状态环 $(i, i+1)$, $2 \leq i \leq N-1$ ，记 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 的值，相应的容许轨道数量可以计算得到。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。既然这些位置没有包含环(1,N,⋯,2)中的状态2，如果插入(2,3)，那么这个环将会在状态3处形成，而不是状态2。因此可能的插入方式数量是：

$$\binom{k^+ + k^{12} + l^2 - 1}{l^2}. \quad (3-6)$$

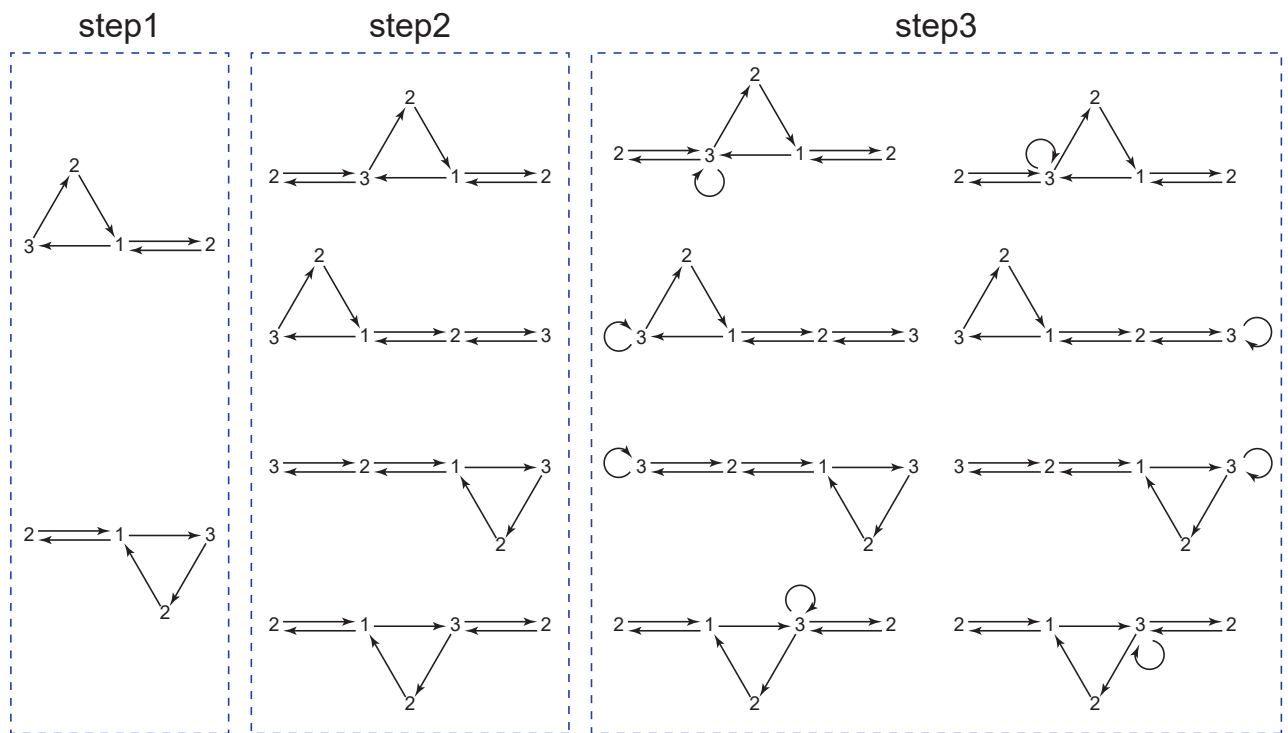


Figure 3.1: 构建所有容允许轨道的环插入法示意图。依然使用3-5中的例子。环插入法分为三步：首先我们将所有包含初始状态的环插入轨道，接下来我们将所有剩余的两元环插入轨道，最后我们将所有剩余的一元环插入轨道。经过这三步的环插入，找到了所有八个容许轨道，这与表中列出的轨道完全吻合。

接下来，考虑状态 $3 \leq i \leq N$ 对应的 l^i 个环，即 $(i, i+1)$ 。把它们插入轨道中，其中每个状态 i 有 $k^+ + l^{i-1}$ 个可能的位置插入，也就是环 $(1, 2, \dots, N)$ 和环 $(i-1, i)$ 中的位置。因此总共插入方式数量是：

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

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 $l^1 := k^{12}$ 。

同理，把状态 $2 \leq i \leq N-1$ 对应的 m^i 个环 $(i, i+1)$ 插入轨道，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) 最终把所有剩余的一元环插入轨道中。对每个环 $(i), 2 \leq i \leq N$, 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) 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道的数量为: $|G_n(k)| = A_1 A_2 A_3$ 。因此LE经验环流的联合分布为:

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

为了得到更明确的速率函数表达式 I_J , 先回顾 S irling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 $\nu_i = \sum_{c \ni i} \nu^c$, 注意到 k_i 和 k^i 的定义是不同的, 因此有 S irling可得:

$$\begin{aligned} \log A_1 &= \log \frac{(k^1 + k^{12} + k^{1N} + k^+ + k^-)!}{k^1! k^{12}! k^{1N}! k^+! k^-!} \\ &= h(k_1) - h(k^1) - h(k^{12}) - h(k^{1N}) - h(k^+) - h(k^-) + O(\log n) \\ &= n \left[h(\nu_1) - h(\nu^1) - h(\nu^{12}) - h(\nu^{1N}) - h(\nu^+) - h(\nu^-) \right] + O(\log n). \end{aligned} \quad (3-9)$$

类似地, 有:

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

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, 可得:

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

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 $x^1 = v^{12}$, $y^N = v^{N1}$ ，再由式联系 3-11 的结论，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 $h(x) = x \log x$, $v_i = \sum_{c \ni i} v^c$ 。这就是LE经验完整的环流速率函数表达式。该式中的 $\inf_{X \in V(v)} F_v(X)$ 难以计算，下面将会介绍如何通过拉格朗日乘子法把该优化问题转化为代数方程求解的问题，即证明：

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

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 $x^1 = v^{12}$, $x^N = 0$, $y^1 = 0$, 且 $y^N = v^{N1}$ 。

首先定义拉格朗日函数为:

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

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

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

最终, 可以把方程组 (3-17) 写为:

$$\begin{aligned} \frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + v^+} \frac{x^i + v^+}{x^i + x^{i+1} + v^+} &= \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + v^-} = e^{-\lambda_i}, \\ x^i + y^i &= v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1. \end{aligned} \quad (3-18)$$

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

引理 3.1 方程 (3-18) 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 (3-18) 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, 对任意 $\alpha \in (0, 1)$,

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

都是 (3-18) 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 (3-18) 的解。

情况 3: $v^{12} + v^+ > 0$ 或 $v^{1N} + v^- > 0$ 。上面以证明对任意 $2 \leq i \leq k$, 只要 $x^{k+1} \geq 0$, $y^{k+1} > 0$, 和 $x^{k+1} + y^{k+1} = v^{k+1,k+2}$, 存在满足下列方程的解:

$$\begin{aligned} \frac{x^i}{y^i} &= \frac{x^i + x^{i+1} + v^+}{x^i + v^+} \frac{y^i + v^-}{y^{i-1} + y^i + v^-} \frac{x^{i-1} + x^i + v^+}{y^i + y^{i+1} + v^-}, \\ x^i + y^i &= v^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq k. \end{aligned} \quad (3-19)$$

并且这个方程的解也满足 $x^i, y^i, 2 \leq i \leq k$ 。下面通过归纳法证明。若 $k = 2$, 方程 (3-19) 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, 有

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

通过中值定理，可以找到满足 $x^2, y^2 > 0$ 的方程 (3-19) 的解，并且有 $x^2 + y^2 = v^{2,3}$ 。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 (3-19) 在 $k = n - 1$ 时的解。可以得到：

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

并且

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

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。

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

和

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

那么通过中值定理，可以找到方程 (3-19) 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。由归纳法，命题可以得到对 $k \geq 2$ 成立。

既然 $k = N - 1$ 时，方程 (3-19) 与方程 (3-18) 等价。这时。有 $y^{k+1} = y^N = v^{1N}$ 。由于 $v^{N1} + v^- > 0$ ，易知(3-20)，(3-21)，(3-22) 和 (3-23) 成立。类似上述证明，通过中值定理，找到方程 (3-19) 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。证毕。 \square

引理 3.2 令 $X = (x^i, y^i) \in V(v)$ 是引理 3.1 中 (3-18) 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 (3-30)），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 (3-18) 和 (3-24)

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

其中 λ_i 被表示为 (3-18)。证毕。 □

3.1.2 速率函数的对称性

上述论证，都是基于系统的初始状态是1考虑，从数学角度，自然问到其他初始分布会不会影响速率函数的表达式。下面将证明速率函数与初始分布的选择无关（命题 3.2）。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，并且导出链是 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} 。

既然到等式 $n = |k| + |\eta|$ 对 $G^n(k)$ 和 $G^{i,c}(k)$ 成立。因此省略 $G_n(k)$ 的角标 n 。下面将针对 $|G^i(k)|$ 和 $|G^{i,c}(k)|$ ，给出两个重要的等式，即

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

其中 $\tilde{k} = (k^1, \dots, k^N, k^{12}, \dots, k^{N-1,N}, k^{1N})$ ， 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 $(1, \dots, N) ((1, N, \dots, 2))$ 。

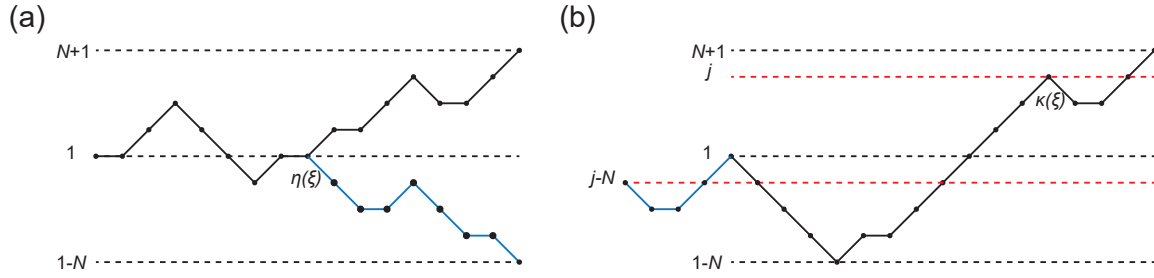


Figure 3.2: ξ 的轨迹对应的折线图。(a) 第一种类型的轨迹映射 (b) 第二种类型的轨迹映射

引理 3.3 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： 下面证明中令 $i = 1$ ，并不影响命题的适用性。故只需证 $B^1(\tilde{k}) = C^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。首先证明 $B^1(\tilde{k}) = C^1(\tilde{k})$ 。该系统是单环马氏链， ξ 的每条轨迹可以被看作是一个折线图（见图 3.2 (a)）。在 m 时刻，折线在状态 i 处的水平移动表示环 (i) 形成。折线从状态 $i+1$ ($-j$) 到状态 i ($1-j$) 的每次上升（下降）对应于环 $(i, i+1)$ 的形成。（其中的加减运算的结果都会经过模 N 运算后的结果）。对任意轨迹 $\xi = (\xi_m)_{0 \leq m \leq n} \in G^{1,+}(1, 0, \tilde{k})$ ，令 $\eta(\xi) = \max\{m : 0 \leq m \leq n-1, \xi_m = 1\}$ 。由定义 $G^{1,+}(1, 0, \tilde{k})$ ，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 3.2 (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 时刻 m 的水平移动对应于 $(\tilde{\xi}_m)_{\eta(\xi) \leq m \leq n}$ 在状态 $i-N$ 时刻 $n+\eta(\xi)-m$ 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 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq \eta(\xi)}$ 中也有形成。而且，轨迹 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq n}$ 在时刻 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轨道的集合，1) 从状态 i 出发的 n 步轨道 ($n = N + \sum_{i \in S} (k^i + 2k^{i,i+1})$) 是。2) 经过边 $\langle i, i \rangle$ k^i 次。3) 经过边 $\langle i, i+1 \rangle$ $k^{i,i+1}$ 次。4) 在时刻 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 $\kappa^j(\xi) = \min\{m : 0 \leq m \leq n, \xi_k = j\}$ ， ξ 也可以被视为折线图 (见图 3.2 (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 $(\tilde{\xi}_m)_{0 \leq m \leq n} \in \tilde{G}^i(\tilde{k})$ 。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 。既然 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

$$\begin{aligned} \tilde{G}^j(\tilde{k}) &= \bigsqcup_{l=0}^{\min_{i \in S} k^{i,i+1}} G^{j,+}(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l), \\ |\tilde{G}^j(\tilde{k})| &= \sum_{l=1}^{\min_{i \in S} k^{i,i+1}} |G^{j,+}(l+1, l, k^1, \dots, k^N, k^{12} - l, \dots, k^{N1} - l)| + B^j(\tilde{k}). \end{aligned} \quad (3-25)$$

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 (3-25)，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 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：

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

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

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

依据式 (3-25), 可知 $B^1(\tilde{k}) = B^j(\tilde{k})$ 。最后通过归纳法, 完成证明。 \square

命题 3.1 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)

$$|G^i(k^+, k^-, \tilde{k})| = |G^i(k^-, k^+, \tilde{k})|. \quad (3-26)$$

(ii)

$$|G^{i,+}(k)| = |G^{j,+}(k)|, \quad |G^{i,-}(k)| = |G^{j,-}(k)|. \quad (3-27)$$

(iii)

$$|G^\eta(k^+, k^-, \tilde{k})| = |G^\eta(k^-, k^+, \tilde{k})|. \quad (3-28)$$

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 $k^{i,i+1}$ 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 3.3, 插入的数量为:

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

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:

$$|G^i(k^+, k^-, \tilde{k})| = \binom{k^++k^-}{k^+} \sum_{\sum_{s=1}^{k^++k^-+1} \tilde{k}_s = \tilde{k}} \left[\prod_{s=1}^{k^++k^-} B^i(\tilde{k}_s) \right] |G^i(0, 0, \tilde{k}_{k^++k^-+1})|. \quad (3-29)$$

注意到 (3-29) 是关于 k^+ 和 k^- 对称的, 故(1)证毕。

(ii) 上面证明了 (3-27) 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 3.3。

(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 $\prod_{s=0}^t |G^{i_s}(k_s)|$ 。增加所有分区的数量 $\sum_{s=0}^t k_s = k$, 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 (3-26), 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 3.4 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 3.2 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 3.1 和引理 3.4, 易知 $\log |G^1(k)| = \log |G^i(k)| + O(\log n)$, 那么由式 (3-15), 命题得证。□

3.1.3 大偏差原理的严格证明和速率函数的性质

建立经验LE环流大偏差原理, 还要严格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)。下面给出经验LE环流大偏差原理的严格阐述:

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。

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 3.3 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 (3-18) 的解, 由于 (3-18) 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。由于 h 是连续的, 根据 (3-13), 可得 $\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X) = F_\nu(Y(\nu))$ 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:

$$(a_1 + a_2) \log \frac{a_1 + a_2}{b_1 + b_2} \leq a_1 \log \frac{a_1}{b_1} + a_2 \log \frac{a_2}{b_2}, \quad (3-30)$$

注意到

$$I_1(\nu) = \nu^{12} \log \left(\frac{\nu^{12}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^{1N} \log \left(\frac{\nu^{1N}}{\hat{\nu}} \right) + \nu^+ \log \left(\frac{\nu^+}{\hat{\nu}} \right) + \nu^- \log \left(\frac{\nu^-}{\hat{\nu}} \right), \quad (3-31)$$

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 (3-30), 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 (3-31) 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, 那么也是凸函数, 最后只需证明 $\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X)$ 是凸函数。把 (3-13) 重写为:

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

既然对任意 $X = (x^i, y^i) \in V(\nu)$ 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

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

最后, 对 F_v 和 F_μ 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 3.4 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:

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}((J_n^c)_{c \in C} \in \Gamma) \leq - \inf_{v \in \Gamma} I_J(v). \quad (3-32)$$

证明: 记

$$K_n := \left\{ (k^c)_{c \in C} \in \mathbb{N}^{2N+2} : \sum_{c \in C} k^c |c| = n \right\}. \quad (3-33)$$

接下来的证明还会假设马氏链从状态 1 出发。那么, 对任意 $k = (k^c)_{c \in C} \in K_n$, 由 (3-4) 式, 可得:

$$\mathbb{P}_1 \left(J_n^c = \frac{k^c}{n}, \forall c \in C \right) = |G_n(k)| \prod_{c \in C} (\gamma^c)^{k^c}, \quad (3-34)$$

记 $\mu_n(k) = k/n \in \mathcal{V}$ 。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:

$$Q_n(\Gamma) \leq \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) \leq |K_n| Q_n(\Gamma). \quad (3-35)$$

易知 $|K_n| \leq (2N+2)(n+1)^{2N+3}$, 那么由公式 (3-34), (3-35), (3-9), (3-10), 和(3-14), 可得:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n} \log \mathbb{P}_1(J_n \in \Gamma) &= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \frac{1}{n} \log Q_n(\Gamma) \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) + \max_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} \left[\frac{1}{n} \log |G_n(k)| + \sum_{c \in C} \frac{k_c}{n} \log \gamma^c \right] \\
&= O\left(\frac{\log n}{n}\right) - \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k)).
\end{aligned} \quad (3-36)$$

由于 $\cup_{n \in \mathbb{N}} \{\mu_n(k) : k \in K_n\}$ 在 \mathcal{V} 中稠密, 且 $v \rightarrow I_J(v)$ 在 \mathcal{V} 中连续 (见命题 3.3), 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:

$$\overline{\lim_{n \rightarrow \infty}} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in U} I_J(\mu_n(k)) \leq \inf_{v \in U} I_J(v). \quad (3-37)$$

结合 (3-36) 和 (3-37), 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

$$\underline{\lim_{n \rightarrow \infty}} \min_{k \in K_n; \mu_n(k) \in \Gamma} I_J(\mu_n(k)) \geq \inf_{v \in \Gamma} I_J(v). \quad (3-38)$$

结合 (3-36) 和 (3-38), 可得大偏差原理的上界 (3-2)。 \square

3.1.4 大偏差速率函数的简化形式

一般单环马氏链的速率函数表达式 (3-15) 十分复杂。不过, 针对下面两种特殊情况, 速率函数 I_J 形式将会被简化, 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:

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

命题 3.5 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 (3-18) 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 3.2

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

那么通过计算, 可以得到:

$$I_1(v) + I_2(v) + I_3(v) = \sum_{i \in S} \left[v^i \log \frac{v^i}{v_i} + (v_i - v^i) \log \frac{v_i - v^i}{v_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} v^c \log \frac{v^c}{\tilde{v}}. \quad (3-39)$$

回顾环流的表达 [14, Theorem.1.3.3], 有

$$J^+ = \gamma^+ \frac{1}{C}, \quad J^- = \gamma^- \frac{1}{C}, \quad J^{i,i+1} = \gamma^{i,i+1} \frac{1 - p_{i-1,i-1}}{C}, \quad 1 \leq i \leq 3, \quad (3-40)$$

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),

$$p_{ij} = \frac{\sum_{c \ni \langle i,j \rangle} J^c}{\sum_{c \ni i} J^c}. \quad (3-41)$$

结合 (3-40) 和 (3-41), 有:

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + (\nu_i - \nu^i) \log \frac{J_i - J^i}{J_i} \right] + \sum_{c \in C, |c| \neq 1} \nu^c \log \left(\frac{J^c}{\tilde{J}} \right) \\ &= \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \left(\left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \left(1 - \frac{J^{i+1}}{J_{i+1}} \right) \frac{J^{i,i+1}}{\tilde{J}} \right) \right] \\ & \quad + \nu^+ \log \left(\frac{J^+}{\tilde{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) + \nu^- \log \left(\frac{J^-}{\tilde{J}} \prod_{i \in C} \left(1 - \frac{J^i}{J_i} \right) \right) \\ &= \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c = -I_4(\nu). \end{aligned} \quad (3-42)$$

结合 (3-39) 和 (3-42), 得证。 \square

命题 3.6 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(3-16)中的 $\nu^{1N} = \nu^- = 0$, 并且 $x^i = \nu^{i,i+1}, y^i = 0$ 是方程 (3-16) 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:

$$I_1(\nu) = \nu^{12} \log \frac{\nu^{12}}{\nu_1 - \nu^{12}} + \nu^+ \log \frac{\nu^+}{\nu_1 - \nu^1}, \quad (3-43)$$

$$I_2(\nu) = \sum_{i=2}^N \left[\nu^{i,i+1} \log \frac{\nu^{i,i+1}}{\nu_i - \nu^i} + \nu^+ \log \frac{\nu^{i-1,i} + \nu^+}{\nu_i - \nu^i} \right] + \sum_{i=1}^N \nu^{i,i+1} \log \frac{\nu^{i,i+1} + \nu^+}{\nu_{i+1} - \nu^{i+1}}, \quad (3-44)$$

和

$$I_3(\nu) = \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{\nu^i}{\nu_i} + \nu^+ \log \frac{\nu_i - \nu^i}{\nu_i} \right] + \sum_{i \in S} \nu^{i,i+1} \left(\log \frac{\nu_i - \nu^i}{\nu_i} + \log \frac{\nu_{i+1} - \nu^{i+1}}{\nu_{i+1}} \right). \quad (3-45)$$

根据 (3-41), 可得

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}}{J_i} + (\nu^{i-1,i} + \nu^+) \log \frac{J^{i-1,i} + J^+}{J_i} \right] \\
&= \sum_{i \in S} \left[\nu^i \log \frac{J^i}{J_i} + \nu^{i,i+1} \log \frac{J^{i,i+1}(J^{i,i+1} + J^+)}{J_{i+1}J_i} \right] + \nu^+ \log \frac{\prod_{i=1}^N (J^{i,i+1} + J^+)}{\prod_{i=1}^N J_i} \\
&= \sum_{c \in C} \nu^c \log \gamma^c = -I_4(\nu).
\end{aligned} \tag{3-46}$$

结合 (3-43), (3-44), (3-45), 和 (3-46), 证毕。 \square

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。这也进一步验证了定理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:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(\tilde{J}_n^+ = x) &= \mathbb{P}(J_n^+ - J_n^- = x) \\
&= \sum_{\nu^+ - \nu^- = x} \mathbb{P}(J_n^c = \nu^c, \forall c \in C) \\
&\propto \sum_{\nu^+ - \nu^- = x} e^{-nI_J(\nu)}.
\end{aligned} \tag{3-47}$$

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:

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

3.2 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 [21] 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 [20]。

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 $\langle i, j \rangle$ 形成的速度。由于周期边界条件, 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具有相对熵形式。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, 可得:

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

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:

$$I_Q(\mu) = I_{\text{pair}}\left(\sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}\right). \quad (3-48)$$

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 (3-48) 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:

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

$$\propto \sum_{\{v \in \mathcal{V}: \sum_c v^c 1_{\{l \in c\}} = \mu^{cl}\}} e^{-n I_J(v)}.$$

这表明 LE 和 ST 经验环流的内在关系为:

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

易知上式中的 I_Q 和式 (3-48) 中的一致, 故该式的证明在此省略。

利用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。对于一元环和二元环, ST 经验净环流为 0, 因此只需考虑三元环或者多元环。令 $\{c_{l_1}, c_{l_2}, \dots, c_{l_s}\} \subset \mathcal{L}$ 表示基本集中所有三元环或者多元环, 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:

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}: \mu^{c_{l_i}} - \mu^{c_{l_i}^-} = x_i, \forall 1 \leq i \leq s\}} I_Q(\mu). \quad (3-49)$$

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

下面将讨论一个重要的问题，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 [25] 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 元环为 $C^+ = (1, 2, \dots, N)$ 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。对于序列匹配方式定义的环流，也可以得到类似的等式[18]。接下来。针对LE环流，证明4-1。在周期边界条件下，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 时刻所有可能出现的轨道的集合，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，如果把上式中的 k^+ 替换为 $k^+ - 1$ ， $k^- - 1$ 替换为 k^- ，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 $G_n(k^+, k^- - 1, \dots)$ 中的任意轨道 $(\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n)$ ，由于 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 中的轨道，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} 之间翻转轨道 ξ ，那么得到新轨道 $\tilde{\xi}$ ，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，逆轨道必定处于集合 $G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)$ 。因为环 C^+ 形成 k^+ 次，所以有 $k^+|G_n(k^+, k^- - 1, \dots)|$ 种可能的轨道。在这些逆轨道中， k^- 轨道是完全相同的，因此被重复计算。例如，如果环 $C^+ = (1, 2, 3)$ ，那么 $G_8(2, 1, \dots)$ 中的轨道 $\{1, 2, 3, 1, 2, 3, 1, 3, 2\}$ 和轨道 $\{1, 2, 3, 1, 3, 2, 1, 2, 3\}$ 都是 $G_8(1, 2, \dots)$ 中 $\{1, 2, 3, 1, 3, 2, 1, 3, 2\}$ 的逆轨道，被计算了两次。因此， $G_n(k^+ - 1, k^-, \dots)$ 的所有可能的轨道数是：

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

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：

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

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 趋于无穷时，易知：

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

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，上述结论还能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。在开始讨论之前，先回顾文献 [26]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。依据这个定义，任意环 c 和它的反环 c^- 一定是相似的。

首先考虑LE经验环流 $(J_n^c)_{c \in C}$ ，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 [26]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($\tilde{J}_n^{c_i}$) $_{c_i \in C}$ 。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 ，LE经验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(4-13)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，(4-13)式为弱形式的暂态涨落定理。

其他类型LE经验（净）环流的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：

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

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

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：

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

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

4.3 一般马氏链ST环流的涨落定理

已经清楚了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（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 (3-48) 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 $R^\mu(i, j) = \sum_{c_l \in \mathcal{L}} \mu^{c_l} H^{c_l}(i, j)$ 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，易知两者的值并不相同，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经验环流无法满

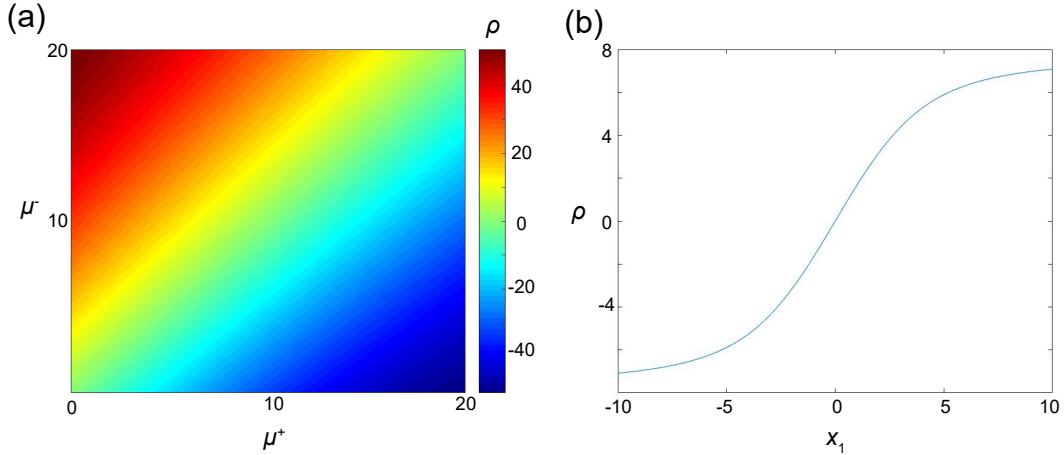


Figure 4.1: ST经验（净）环流的速率函数图像 (a) 三状态全连接马氏链， $\rho = I_Q(\cdots, \mu^+, \mu^-) - I_Q(\cdots, \mu^-, \mu^+) + (\log \frac{\gamma^+}{\gamma^-})(\mu^+ - \mu^-)$ 的热力图，表明Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对ST环流不成立。选择的参数是： $\mu^1 = 15, \mu^2 = 20, \mu^3 = 3, \mu^{12} = 21, \mu^{23} = 37, p_{11} = 0.28, p_{12} = 0.22, p_{13} = 0.5, p_{21} = 0.1, p_{22} = 0.6, p_{23} = 0.3, p_{31} = 0.3, p_{32} = 0.3, p_{33} = 0.4$ (b) 四状态全连接马氏链， $\rho = I_Q(\tilde{\mu}^1, \tilde{\mu}^2, \tilde{\mu}^3) - I_Q(-\tilde{\mu}^1, \tilde{\mu}^2, \tilde{\mu}^3) + (\log \frac{\gamma^1}{\gamma^{1^-}})\tilde{\mu}^1$ 的函数图像，表明Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对ST净环流不成立。选择的参数是： $x_2 = 2, x_3 = 3, p_{11} = 0.1, p_{12} = 0.2, p_{13} = 0.3, p_{14} = 0.4, p_{21} = 0.5, p_{22} = 0.15, p_{23} = 0.15, p_{24} = 0.2, p_{31} = 0.1, p_{32} = 0.4, p_{33} = 0.25, p_{34} = 0.25, p_{41} = 0.2, p_{42} = 0.2, p_{43} = 0.3, p_{44} = 0.3$

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 [23]）。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 $T = 1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N$ 。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[24] 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[23]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 [32] 成立。下面证明，在周期边界条件下，ST净环流满足暂态涨落定理的弱形式，即：

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

证明： 由公式，对任意三状态或者更多状态的环 $c_l \in \mathcal{L}$ ，有：

$$\tilde{Q}_n^{c_l} = \sum_{i=1}^r \tilde{J}_n^{c_i} [1_{\{l \in c_i\}} - 1_{\{l \in c_i^-\}}]$$

其中 1_A 是指示函数，若A成立，则为1，否则为0。那么，可以得到：

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(\tilde{Q}_n^{c_{l_1}} = x_1, \dots, \tilde{Q}_n^{c_{l_s}} = x_s) \\
&= \mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^r \tilde{J}_n^{c_i} [1_{\{l_1 \in c_i\}} - 1_{\{l_1 \in c_{i-}\}}] = x_1, \dots, \sum_{i=1}^r \tilde{J}_n^{c_i} [1_{\{l_s \in c_i\}} - 1_{\{l_s \in c_{i-}\}}] = x_s\right) \\
&= \sum_{\sum_{i=1}^r y_i [1_{\{l_m \in c_i\}} - 1_{\{l_m \in c_{i-}\}}] = x_m, 1 \leq m \leq s} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = y_1, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = y_r) \\
&= \sum_{\sum_{i=1}^r y_i [1_{\{l_m \in c_i\}} - 1_{\{l_m \in c_{i-}\}}] = x_m, 1 \leq m \leq s} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -y_1, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = -y_r) e^{n \sum_{i=1}^r y_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}}} \\
&= \sum_{\sum_{i=1}^r y_i [1_{\{l_m \in c_i\}} - 1_{\{l_m \in c_{i-}\}}] = x_m, 1 \leq m \leq s} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -y_1, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = -y_r) e^{n \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i-}}}} \\
&= \sum_{\sum_{i=1}^r y_i [1_{\{l_m \in c_i\}} - 1_{\{l_m \in c_{i-}\}}] = -x_m, 1 \leq m \leq s} \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = y_1, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = y_r) e^{n \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i-}}}} \\
&= \mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^r \tilde{J}_n^{c_i} [1_{\{l_1 \in c_i\}} - 1_{\{l_1 \in c_{i-}\}}] = -x_1, \dots, \sum_{i=1}^r \tilde{J}_n^{c_i} [1_{\{l_s \in c_i\}} - 1_{\{l_s \in c_{i-}\}}] = -x_s\right) e^{n \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i-}}}} \\
&= \mathbb{P}(\tilde{Q}_n^{c_{l_1}} = x_1, \dots, \tilde{Q}_n^{c_{l_s}} = x_s) e^{n \sum_{i=1}^s x_i \log \frac{\gamma^{c_{l_i}}}{\gamma^{c_{l_i-}}}},
\end{aligned}$$

其中使用下面条件，在约束 $\sum_{i=1}^r y_i [1_{\{l_m \in c_i\}} - 1_{\{l_m \in c_{i-}\}}] = x_m, 1 \leq m \leq s$ 下，有：

$$\sum_{i=1}^r y_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}} = \sum_{j=1}^s x_j \log \frac{\gamma^{c_{l_j}}}{\gamma^{c_{l_j-}}} \quad (4-16)$$

这个等式是非平凡的，接下来下面会证明它。对于任意环 c ，令 L^c 为 E 上的函数：

$$L^c(i, j) = \begin{cases} 1, & \text{if } \langle i, j \rangle \in c \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

通过 H^c 的定义，可以证明 [15]：

$$L^c = \sum_{l \notin T} L^c(l) H^{c_l}$$

令 E 上的函数 w 定义为：

$$w(i, j) = \log \frac{p_{ij}}{p_{ji}}$$

对任意环 $c = (i_1, i_2, \dots, i_t)$ ，有：

$$\log \frac{\gamma^c}{\gamma^{c-}} = \sum_{k=1}^t \log \frac{p_{i_k, i_{k+1}}}{p_{i_{k+1}, i_k}} = \langle w, L^c \rangle,$$

其中 $i_{t+1} = i_1$ ，且 $\langle w, L^c \rangle = \sum_{\langle i, j \rangle \in E} w(i, j) L^c(i, j)$ 表示内积。此外，对于任意环 $c_l \in \mathcal{L}$ ，很难证明：

$$\log \frac{\gamma^{c_l}}{\gamma^{c_{l-}}} = \langle w, H^{c_l} \rangle$$

注意到对任意一状态和两状态环，有 $\log(\gamma^c / \gamma^{c-})$ 。那么对任意环 c ，有：

$$\sum_{j=1}^s [L^c(l_j) - L^{c-}(l_j)] \log \frac{\gamma^{c_{l_j}}}{\gamma^{c_{l_j-}}} = \sum_{l \notin T} L^c(l) \log \frac{\gamma^{c_l}}{\gamma^{c_{l-}}}$$

因此最终可得：

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^s x_j \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}} &= \sum_{j=1}^s \sum_{i=1}^r y_i [L^{c_i}(l_j) - L^{c_{i-}}(l_j)] \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}} \\
&= \sum_{i=1}^r y_i \sum_{j=1}^s [L^{c_i}(l_j) - L^{c_{i-}}(l_j)] \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}} \\
&= \sum_{i=1}^r y_i \sum_{l \notin T} L^{c_i}(l) \langle w, H^{c_l} \rangle \\
&= \sum_{i=1}^r y_i \left\langle w, \sum_{l \notin T} L^{c_i}(l) H^{c_l} \right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^r y_i \langle w, L^{c_i} \rangle = \sum_{i=1}^r y_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_{i-}}}
\end{aligned}$$

4-16得证，同时弱形式暂态涨落定理的证明也完成了。

□

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 [34–37]。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或者是它的反环，或者就是一元环和二元环，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：

$$I_{\tilde{Q}}(x) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{M}; \mu^{c_i} - \mu^{c_{i-}} = x_i, \forall 1 \leq i \leq 3\}} I_Q(\mu). \quad (4-17)$$

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：

$$I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, x_3) \neq I_{\tilde{Q}}(-x_1, x_2, x_3) - \left(\log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_{1-}}} \right) \tilde{\mu}^{c_1}, \quad (4-18)$$

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

本文考察了LE和ST方式定义的环流，并从大偏差和涨落定理角度，对两种环流做比较性探讨。LE环流定义适用于环空间中的所有类型的环，而ST环流只能在由生成树的弦产生的基本集中定义。基本集的规模远小于一般马氏系统的环空间。然而，对于一个环拓扑结构的系统，最多只有一个环会出现在环空间，但不会在基本集中。相比于ST环流，LE环流对环动态性给出了更完整和详细的描述。在周期性边界条件下，任意环的ST环流都能通过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LE经验环流的速率大偏差函数的明确表达式。该证明是基于封闭形式下LE经验环流的联合分布，并在计算联合分布过程里，提出了环插入方法的三个步骤。(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二元环插入轨迹中，(iii) 第三步是将所有不包含初始状态的一元环插入轨迹中。此外，还证明了速率函数与马氏系统的初始分布无关。对于一般的单环系统，速率函数的解析表达式是很复杂的。然而，对于三状态系统和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 [21] 中提出的ST经验净环流，本文也给出了一般系统的经验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LE (ST) 经验环流是否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LE经验 (净) 环流满足所有类型的涨落定理和对称关系。特别是，本文还引入了相似环的概念，得到了暂态涨落定理的强形式。(i) 当某一对相似环被交换时，经验LE环流的联合分布满足对称关系；(ii) 当某个环的净环流的值取其相反数时，经验性LE净环流的联合分布满足对称关系。由于在周期性边界下，ST经验环流可以用的经验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。然而只有在周期性边界条件下，ST经验净环流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对称关系。

在本文中，一些结果只适用于单环马氏链。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，这些工作尚处于研究中。

致 谢

三年时间匆匆过去，硕士生涯即将结束。陪我走过这段路的人有很多，或许我会在下面提到，也或许我已经忘了他们的名字，这仅代表写这篇致谢时的状态。然而三年时光是不可逆的，这份感谢也是永恒的。

首先感谢带领我学术研究和完成这篇论文的老师，我的硕士阶段指导老师，贾晨老师。在我的上一位导师离职的时候，他刚好入职，我也有幸成为了他的第一名研究生。由于我的研究方向发生变化，长时间都处在入门阶段，最后能够完成这篇论文，非常感谢贾老师两年来的悉心指导。

中物院留下过许多英雄的足迹，每当和别人谈到我是在这里读研究生，都觉得这是段会让我难忘的经历。在此感谢招收我进来的导师，胡广辉老师，还有计科中心，是你们给了我这段经历。特别是胡老师，多次让我外出参加会议和外地的暑期学校，即使离职后，还是很关心我，对我的学习和生活都提供了很多帮助。在中物院学习期间，有幸去清华，北大上课，也有幸多次听到各种前沿问题的学术报告。这些学习机会，让我受益良多，充分满足了我的学术好奇心，也增添了对自己未来道路的思考。

三年的时光，还要感谢和我一起走过来的同窗们，是你们让我在枯燥科研过程中不孤独，状态低沉时不迷茫，遇到失败时不灰心。此外，还要感谢我的父母和我过去的同学朋友，是你们给了我信心和肯定，让我面对各种挑战。最后一段时光，我是在公司实习中度过，感谢超参数公司，以及在这里遇到的同事，带我认识象牙塔外面的世界，开启新的征程。

回想这三年，确实经历了很多人和事，感谢有你们，让我认清生活，还依然热爱生活。

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] Varadhan S S. Large deviations and applications[M].[S.l.]: SIAM, 1984.
- [20] Den Hollander F. Large deviations[M]. Vol. 14.[S.l.]: American Mathematical Soc., 2000.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Andrieux D, Gaspard P. Fluctuation theorem for currents and Schnakenberg network theory[J]. *Journal of statistical physics*, 2007, 127(1):107–131.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [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.
- [34] Mehl J, Lander B, Bechinger C, et al. Role of hidden slow degrees of freedom in the fluctuation theorem[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(22):220601.
- [35] Poletini M, Esposito M. Effective thermodynamics for a marginal observer[J]. *Physical review letters*, 2017, 119(24):240601.

-
- [36] Uhl M, Pietzonka P, Seifert U. Fluctuations of apparent entropy production in networks with hidden slow degrees of freedom[J]. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2018, 2018(2):023203.
- [37] Kahlen M, Ehrich J. Hidden slow degrees of freedom and fluctuation theorems: an analytically solvable model[J]. *Journal of statistical mechanics: theory and experiment*, 2018, 2018(6):063204.

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] Yuhao Jiang, Bingjie Wu, Chen Jia. Large deviations and fluctuation theorems for cycle currents defined in the loop-erased and spanning tree manners: a comparative study. (Submitted)

（二）参加学术活动情况

- [1] 2019年度北京大学“应用数学专题讲习班”
- [2] 2020年“基于机器学习的PDE数值计算与应用”暑期短课程
- [3] 2020年江苏省研究生“科学计算与大数据分析”暑期学校
- [4] 2020年度北京大学“应用数学专题讲习班”
- [5] 2021年南开大学散射与反散射暑期短期课程
- [6] 机器学习和大数据在复杂性科学中的应用暑期培训班