

单环马氏链环流的大偏差与涨落定理

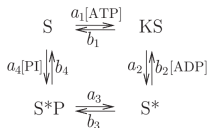
姜瑜浩

指导老师：贾晨教授
北京计算科学研究中心

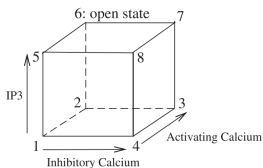
May 17, 2022

生化反应

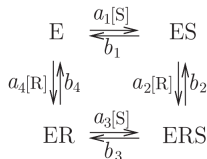
常见的生化反应模型：



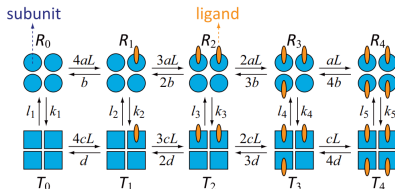
磷酸-脱磷酸化循环



De Young-Keizer 模型



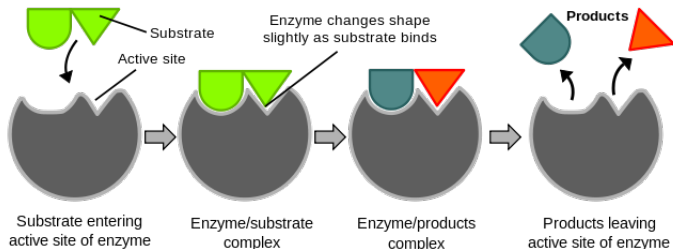
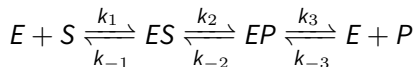
广义的修正机制



MW 模型

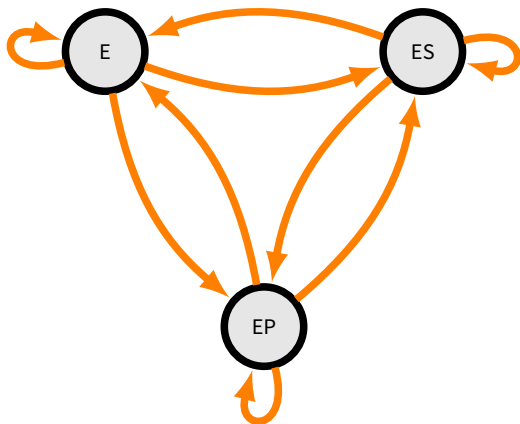
酶：生物系统中化学反应的催化剂

三步 Michaelis-Menten 酶动力学模型：



酶：生物系统中化学反应的催化剂

酶化反应的马氏链模型



马氏链中的环流

为什么研究上述马氏链中的环？

考虑上述马氏链中，若环 $E \rightarrow EP \rightarrow ES \rightarrow E$ 出现的频率大于环 $E \rightarrow ES \rightarrow EP \rightarrow E$ 出现的频率，则化学反应整体向正反应进行，否则向负反应进行。通过研究马氏链中每个环出现的频率，可以研究化学反应整体方向以及反应进程。

马氏链中的环流

环擦除方式形成的环

回路的定义

马氏链的轨迹中，一段路径的起点和终点相同的，且路径中其他状态各不相同，我们称它为回路，如： $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$

回路的等价关系

记 $j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \cdots \rightarrow j_r \rightarrow j_1$ 为另一个回路，若存在一个整数 k 且 $r = s$ ，使得 $j_1 = i_{k+1}, j_2 = i_{k+2}, \cdots, j_r = i_{k+s}$ 成立，则称两个回路等价，其中指标 $k+1, k+2, \cdots, k+s$ 为模 n 后的结果。

马氏链中的环流

环擦除方式形成的环

LE 环的定义

依据回路的等价关系，可以定义等价类，我们称这个等价类为环，并且称所有环构成的集合为环空间 \mathcal{C} 。例如，回路 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_s \rightarrow i_1$ 所属的环为 $c = (i_1, i_2, \cdots, i_s) \in \mathcal{C}$ 。

LE(环擦除) 环的形成过程

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: 导出链的变化过程和轨道中形成的环

马氏链中的环流

生成树方式形成的环

生成树定义

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。

ST(生成树) 环

一般称有向边 $l \notin T$ 为 T 的弦。记 $|E| = M$, $|T| = N - 1$ (T 边的数量)，那么任意生成树 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 $\bar{T} \cup \{l\}$ 恰好有一条回路。因此 c_l 是由此产生的环，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。

马氏链中的环流

两种类型环的比较

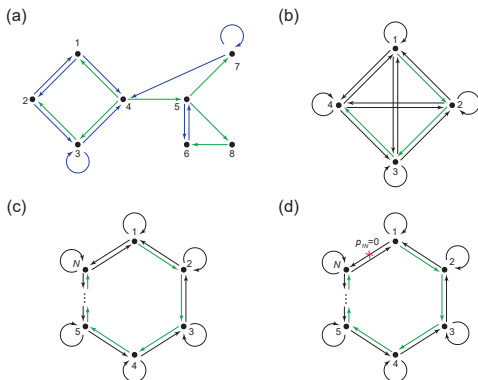


Figure: 马氏链的转移图和相应的生成树 (a) 一般转移图的马氏链，绿色线表示根节点为 4 的生成树 T ，并且蓝色线表示 T 的弦 (b) 四状态全连接马氏链，其中每个状态可以转移到自己和其他状态 (c) N 状态单环马氏链。系统有一个环拓扑。每个状态转移到自身和它两个相邻节点 (d) 一个 N 状态的单环马尔科夫链，该系统无法从状态 1 转移到状态 N (b)-(d) 中，绿色箭头表示生成树 T

马氏链中的环流

两种定义方式下的环流

LE 环流

记 N_n^c 为环 c 在时刻 n 时总共形成的次数，环 c 在 n 时刻的经验环流为：

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

ST 环流

记 $Q_n^{c_l}$ 表示单位时间通过弦 l 的次数，ST 弦和弦是一一对应关系，因此可以用通过弦 l 的次数定义 c_l 形成的次数。 c_l 在 n 时刻的经验环流为：

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

大偏差理论

大数定律

设独立同分布的随机变量序列 $(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$ 定义于状态空间 $\Gamma = \{1, \dots, r\}$, 概率分布为 $\rho = (\rho_s)_{s \in \Gamma}$. 定义 ρ 所处的空间为:

$$\mathfrak{M}_1(\Gamma) = \{\nu = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_r) \in [0, 1]^r : \sum_{s=1}^r \nu_s = 1\}$$

令经验测度 $L_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$, 即 $L_n \in \mathfrak{M}_1(\Gamma)$, 则根据大数定律, 有

$$d(L_n, \rho) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad \mathbb{P} - a.s.$$

其中上述度量为全变差距离

$$d(\mu, \nu) = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^r |\mu_s - \nu_s|, \quad \mu, \nu \in \mathfrak{M}_1(\Gamma)$$

大偏差理论

Level-1 大偏差 (Cramers 定理)

$(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$ 是上述定义的独立同分布的随机变量序列, 相应的经验测度为 $L_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$ 。那么, 对于 $\forall a > 0$, 有:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(L_n \in B_a^c(\rho)) = - \inf_{\nu \in B_a^c(\rho)} I(\nu)$$

其中 $B_a(\rho) = \{\nu \in \mathfrak{M}_1(\Gamma) : d(\nu, \rho) \leq a\}$ 是 ρ 的邻域, $B_a^c(\rho) = \mathfrak{M}_1(\Gamma) \setminus B_a(\rho)$, 且称

$$I_\rho(\nu) = \sum_{s=1}^r \nu_s \log \left(\frac{\nu_s}{\rho_s} \right)$$

为速率函数。

大偏差理论

Level-2 大偏差 (Sanov 定理)

在随机变量序列 $(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$ 上, 定义对经验测度 $L_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{(X_i, X_{i+1})}$ 不妨令 $X_{n+1} = X_1$ (当 $n \rightarrow \infty$ 时, 该假设对 L_n^2 取值无影响。) 则 L_n^2 所在的概率测度空间 $\widetilde{\mathfrak{M}}_1(\Gamma \times \Gamma) = \{\nu = (\nu_{st}) \in \mathfrak{M}_1(\Gamma \times \Gamma) :$

$$\sum_t \nu_{st} = \sum_t \nu_{ts}, \forall s\}.$$

Sanov 证明了对于 $\forall a > 0$, 有:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(L_n^2 \in B_a^c(\rho \times \rho)) = - \inf_{\nu \in B_a^c(\rho \times \rho)} I_\rho^2(\nu)$$

其中 $B_a(\rho \times \rho) = \{\nu \in \widetilde{\mathfrak{M}}_1(\Gamma \times \Gamma) : d(\nu, \rho \times \rho) \leq a\}$, $\bar{\nu}_s = \sum_t \nu_{st}$, 且速率函数为

$$I_\rho^2(\nu) = \sum_{s,t} \nu_{st} \log \left(\frac{\nu_{st}}{\bar{\nu}_s \rho_t} \right)$$

环流的大偏差原理

环流大偏差原理的定义

若满足下列三个条件, 则称经验 LE 环流 $(J_n^c)_{c \in \mathcal{C}}$ 为满足速率函数为 $I_J: \mathcal{V} \rightarrow [0, \infty]$ 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 $U \subset \mathcal{V}$,

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

- 对于任意闭集 $F \subset \mathcal{V}$,

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

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

定义中的条件 (ii) 和 (iii) 表明, 对任意 $(\nu^c)_{c \in \mathcal{C}} \in \mathcal{V}$, 速率函数满足:

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

假设轨道满足周期边界条件, 还可得 LE 经验环流的联合分布为:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(J_n^c = \nu^c, \forall c \in \mathcal{C}) &= \mathbb{P}(N_n^c = k^c, \forall c \in \mathcal{C}) \\ &= |G_n(k)| \prod_{c \in \mathcal{C}} (\gamma^c)^{k^c}, \end{aligned}$$

其中 $\nu^c = k^c/n$, $G_n(k)$ 表示 n 时刻可能形成的轨道的集合, 并且称该类轨道为容许轨道。

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

例：三状态马氏链的一段轨道中，环的数量 $k = (k^c)_{c \in C}$ 为：

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

那么在时刻 $n = 8$ ，有 8 个容许轨道，如表2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: 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

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

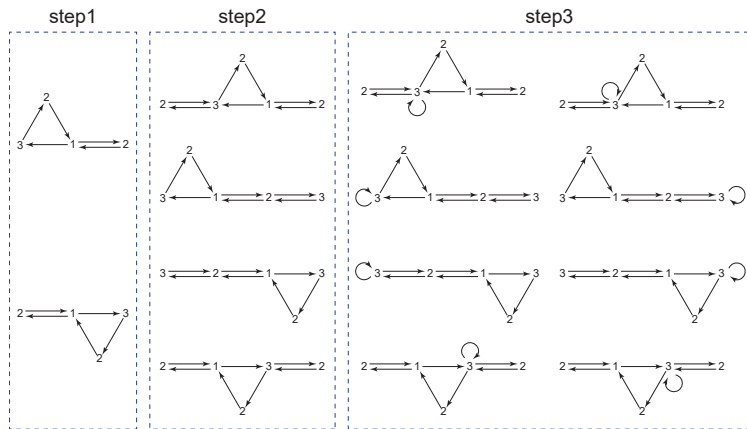


Figure: 构建所有容允许轨道的环插入法示意图。依然使用16中的例子。环插入法分为三步：首先我们将所有包含初始状态的环插入轨道，接下来我们将所有剩余的两元环插入轨道，最后我们将所有剩余的一元环插入轨道。经过这三步的环插入，找到了所有八个容许轨道。

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

计算容许轨道空间的规模

依据图中所示的计算方法，对于所有单环马氏链，可得容许轨道空间的规模为：

$$|G_n(k)| = A_1 A_2 A_3$$

其中：

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

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

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

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

环流大偏差速率函数表达式:

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

化简可得:

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

其中 $h(x) = x \log x$, $\nu^c = \frac{k^c}{n}$, $\nu_i = \sum_{c \ni i} \nu^c$.

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

由环流大偏差速率函数表达式：

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

环流大偏差速率函数的存在唯一性，转换为优化问题：

$$\inf_{X \in V(\nu)} F_\nu(X) = F_\nu(x^j, y^j),$$

的存在唯一性。

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

定义相应的拉格朗日函数：

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

其中 $X = (x^i, y^i)_{2 \leq i \leq N-1} \in V(\nu)$ 并且 $\lambda = (\lambda_i)_{2 \leq i \leq N-1} \in \mathbb{R}^{N-2}$
经过化简得到：

$$\frac{x^i}{x^{i-1} + x^i + \nu^+} \frac{x^i + \nu^+}{x^i + x^{i+1} + \nu^+} = \frac{y^i + \nu^-}{y^{i-1} + y^i + \nu^-} \frac{y^i}{y^i + y^{i+1} + \nu^-} = e^{-\lambda_i},$$
$$x^i + y^i = \nu^{i,i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1. \quad (3)$$

其中 $x^1 = \nu^{12}$, $x^N = 0$, $y^1 = 0$ 和 $y^N = \nu^{1N}$ 。
最终我们证明了该方程 3 的解存在且唯一

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

环流大偏差速率函数的性质:

- 有界性
- 凸函数
- 对称性: 上述推导中, 都是假设马氏链从状态 1 出发, 我们证明了从任意状态出发都可以得到此结果
- 连续性: 在 $[0, +\infty)$ 上连续

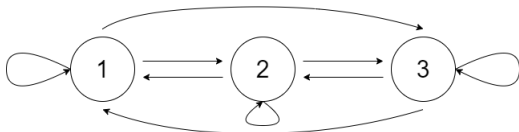
环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

三环马氏链

环流大偏差速率函数，可简化为：

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



状态转移图

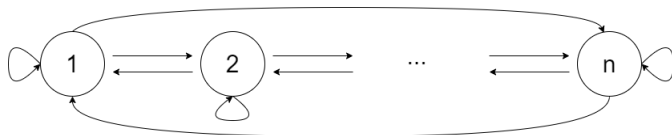
环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

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

环流大偏差速率函数，可简化为：

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



状态转移图

环流的大偏差原理

环流大偏差速率函数

净环流大偏差速率函数

记 LE 经验净环流为 $(\tilde{J}_n^c)_{c \in \mathcal{C}}$, 由收缩原理可以得到:

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

因此 \tilde{J}_n^+ 满足大偏差原理, 相应的速率函数 I_J 为:

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

环流的大偏差原理

一般马氏链的 ST 环流的大偏差

回顾对经验测度的大偏差

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

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

对经验测度满足下面的大偏差原理：

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

其中的速率函数为 $I_{\text{pair}} : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$ 为

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

环流的大偏差原理

一般马氏链的 ST 环流的大偏差

ST 环流大偏差速率函数

对经验测度可以被分解为下面 ST 环流的加权和：

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

其中：

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

并且该分解是唯一的。

环流的大偏差原理

一般马氏链的 ST 环流的大偏差

ST 环流大偏差速率函数

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 $\nu^{c_l} = Q_n^{c_l}$ 。由上式分解的唯一性, 可得:

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

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:

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

环流的涨落定理

单环马氏链 LE 环流的涨落定理

强对称关系

单环马氏链 LE 环流满足强对称关系，即：

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

$$= \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-} \right) \mathbb{P} (N_n^+ = k^+ - 1, N_n^- = k^-, N_n^c = k^c, \forall c \neq C^+, C^-) \quad (5)$$

该式中 $C^+ = (1, 2, \dots, N)$ 和 $C^- = (1, N, \dots, 2)$ 表示单环系统中两个 N 元环， N_n^+ 和 N_n^- 分别表示 n 时刻环 C^+ 和 C^- 分别形成的数量。并且 $\gamma^+ = p_{12}p_{23} \cdots p_{N1}$ 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。

环流的涨落定理

单环马氏链 LE 环流的涨落定理

LE 环流满足的各种涨落定理

- 暂态涨落定理:

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

- Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理:

$$g_n(\lambda^+, \lambda^-, \dots) = g_n \left(\lambda^- - \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}, \lambda^+ + \log \frac{\gamma^+}{\gamma^-}, \dots \right),$$

- Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

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

环流的涨落定理

单环马氏链 LE 环流的涨落定理

LE 净环流满足的各种涨落定理

- 暂态涨落定理:

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

- Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理:

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

- 积分涨落定理:

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

- Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

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

环流的涨落定理

一般马氏链 LE 环流的涨落定理

相似环

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。因此, 下面六个环 $(1, 2, 3, 4), (1, 2, 4, 3), (1, 3, 2, 4), (1, 3, 4, 2), (1, 4, 2, 3), (1, 4, 3, 2)$ 互为相似关系。

一般马氏链 LE 经验环流的对称关系

一般马氏链, 如果环 c_1 和 c_2 相似, LE 经验环流 $(J_n^c)_{c \in \mathcal{C}}$, $J_n^c = N_n^c/n$ 满足下列的对称关系:

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

环流的涨落定理

一般马氏链 LE 环流的涨落定理

一般马氏链 LE 环流的暂态涨落定理

一般马氏链 LE 经验环流的对称关系：

$$\frac{k^{c_1} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1}, N_n^{c_2} = k^{c_2} - 1, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)}{k^{c_2} \mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1} - 1, N_n^{c_2} = k^{c_2}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)} = \frac{\gamma^{c_s}}{\gamma^{c_t}}. \quad (6)$$

重复6式，可以给出 LE 环流的暂态涨落定理：

$$\frac{\mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_1}, N_n^{c_2} = k^{c_2}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)}{\mathbb{P}(N_n^{c_1} = k^{c_2}, N_n^{c_2} = k^{c_1}, N_n^c = k^c, \forall c \neq c_1, c_2)} = \left(\frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_2}} \right)^{k^{c_1} - k^{c_2}}. \quad (7)$$

环流的涨落定理

一般马氏链 LE 环流的涨落定理

一般马氏链 LE 环流的暂态涨落定理

进一步得到 LE 净环流的暂态涨落定理（强形式）：

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) \\ &= \mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_s, \tilde{J}_n^{c_m} = x_m, \forall 2 \leq m \leq r) e^{n x_s \log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1^-}}}. \end{aligned}$$

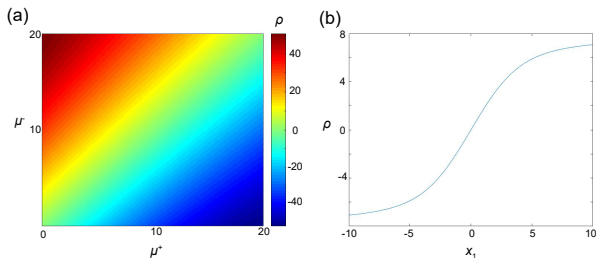
这表明对于任意环 c_i ，LE 经验净环流满足对称关系。在方程 ?? 中，对所有 $1 \leq i \leq r$ ，交换 x_i 和 $-x_i$ 的值，可以得到（弱形式）：

$$\frac{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = x_r)}{\mathbb{P}(\tilde{J}_n^{c_1} = -x_1, \tilde{J}_n^{c_2} = -x_2, \dots, \tilde{J}_n^{c_r} = -x_r)} = e^{n \sum_{i=1}^r x_i \log \frac{\gamma^{c_i}}{\gamma^{c_i^-}}}. \quad (8)$$

环流的涨落定理

ST 环流的涨落定理

一般马氏链 ST 环流不满足涨落定理



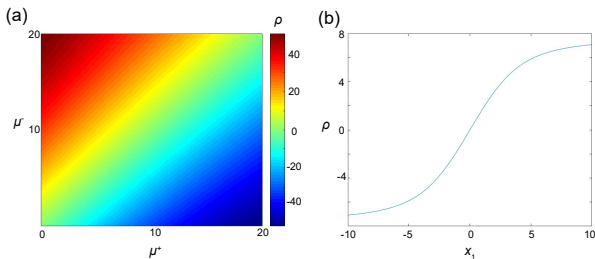
(a) 三状态全连接马氏链, $\rho = I_Q(\cdots, \mu^+, \mu^-) - I_Q(\cdots, \mu^-, \mu^+) + (\log \frac{\gamma^+}{\gamma})(\mu^+ - \mu^-)$ 的热力图, 表明 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对 ST 环流不成立。

(b) 四状态全连接马氏链, $\rho = I_Q(\tilde{\mu}^{c1}, \tilde{\mu}^{c2}, \tilde{\mu}^{c3}) - I_Q(-\tilde{\mu}^{c1}, \tilde{\mu}^{c2}, \tilde{\mu}^{c3}) + (\log \frac{\gamma^{c1}}{\gamma^{c1-}})\tilde{\mu}^{c1}$ 的函数图像, 表明 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对 ST 净环流不成立。

环流的涨落定理

ST 环流的涨落定理

一般马氏链 ST 环流不满足涨落定理



该图 (a) 说明了 $I_Q(\dots, \mu^+, \mu^-)$ 和 $I_Q(\dots, \mu^-, \mu^+) - \log(\gamma^+/\gamma^-)(\mu^+ - \mu^-)$ 之间的差异, 因此有:

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

这说明了 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对于 ST 环流不成立。由于 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理成立条件最弱, 因此其他类型涨落定理也不成立。

环流的涨落定理

ST 环流的涨落定理

ST 净环流涨落定理

周期边界条件下，ST 净环流满足暂态涨落定理的弱形式，即：

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

上图中 (b) 说明了 $I_{\tilde{Q}}(x_1, x_2, x_3)$ 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，因此：

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

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

总结

主要工作

- 建立 LE 环流的大偏差原理
- 单环马氏链中 LE 经验环流的速率大偏差函数的表达式
- 一般马氏系统的经验 ST 环流的速率函数的表达式
- LE（净）环流是否满足的各种涨落定理
- ST（净）环流是否满足的各种涨落定理

未来展望

- 大偏差速率函数的结果是否可以推广到一般马氏链模型
- 除 LE 和 ST 环流，其他类型环流是否满足涨落定理

谢谢！