单环马氏链环流的大偏差与涨落定理

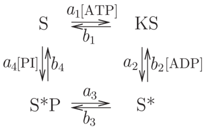
姜瑜浩

指导老师：贾晨 特聘研究员
北京计算科学研究中心

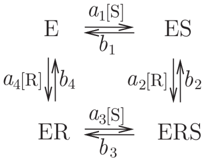
May 18, 2022

生化反应

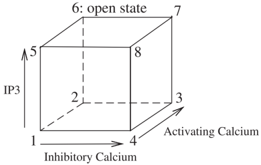
常见的生化反应模型：



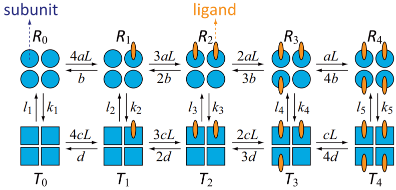
磷酸-脱磷酸化循环



广义的修正机制



De Young-Keizer 模型

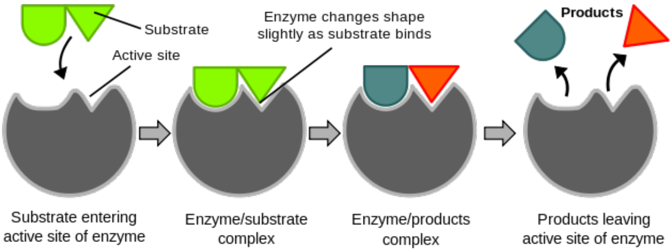


MW 模型

酶：生物系统中化学反应的催化剂

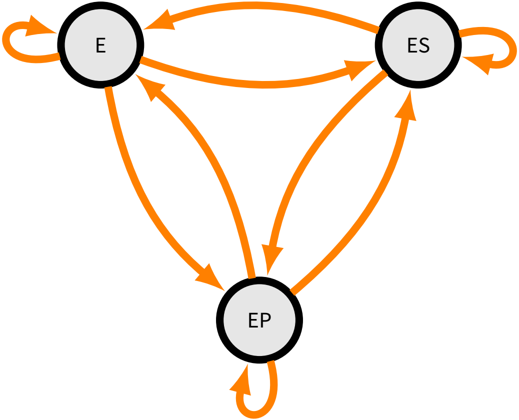
三步 Michaelis-Menten 酶动力学模型：

$$E + S \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} ES \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} EP \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} E + P$$



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

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：$i_1 \to i_2 \to \cdots \to i_s \to i_1$

回路的等价关系

记 $j_1 \to j_2 \to \cdots \to j_r \to j_1$ 为另一个回路，若存在一个整数 k 且 $r = s$，使得 $j_1 = i_{k+1}, j_2 = i_{k+2}, \cdots, j_n = i_{k+s}$ 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。

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 $i_1 \to i_2 \to \cdots \to i_s \to i_1$ 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

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 $\overline{T \cup \{l\}}$ 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

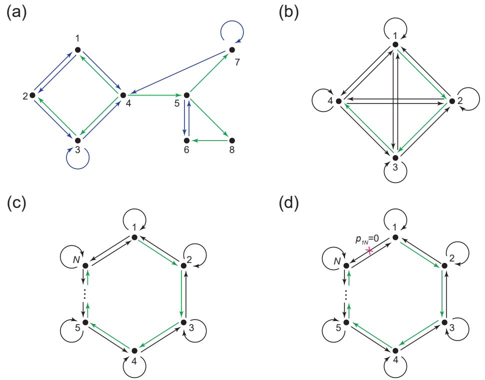


Figure: 马氏链的转移图和相应的生成树 (a) 一般转移图的马氏链，绿色线表示根节点为 4 的生成树 T，并且蓝色线表示 T 的弦 (b) 四状态全连接马氏链，其中每个状态可以转移到自己和其他状态 (c) N 状态单环马氏链。系统有一个环拓扑。每个状态转移到自身和它两个相邻节点 (d) 一个 N 状态的单环马尔科夫链，该系统无法从状态 1 转移到状态 N (b)-(d) 中，绿色箭头表示生成树 T

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 环流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 $\Gamma=\{1,\cdots,r\}$，概率分布为 $\rho=(\rho_s)_{s\in\Gamma}$。定义 ρ 所处的空间为：

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

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

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

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：

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

其中 $B_a(\rho) = \{\nu \in \mathfrak{M}_1(\Gamma) : d(\nu,\rho) \le a\}$ 是 ρ 的邻域，$B_a^c(\rho) = \mathfrak{M}_1(\Gamma)\backslash B_a(\rho)$，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 $n\to\infty$ 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：

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

其中 $B_a(\rho\times\rho) = \{\nu\in\widetilde{\mathfrak{M}}_1(\Gamma\times\Gamma) : d(\nu,\rho\times\rho)\le a\}$，$\bar{\nu}_s = \sum_t \nu_{st}$，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 $I_J:\mathcal{V}\to[0,\infty]$ 的大偏差原理：

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

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

- 对于任意闭集 $F\subset\mathcal{V}$,

$$\varlimsup_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mathbb{P}((J_n^c)_{c\in\mathcal{C}}\in F)\leq-\inf_{x\in F}I_J(x).$$

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：

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

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：

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

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，
$\gamma^c = p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \cdots p_{i_s i_1}$ 表示沿该环所有转移概率的乘积。并且称该类轨道为容许轨道。

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

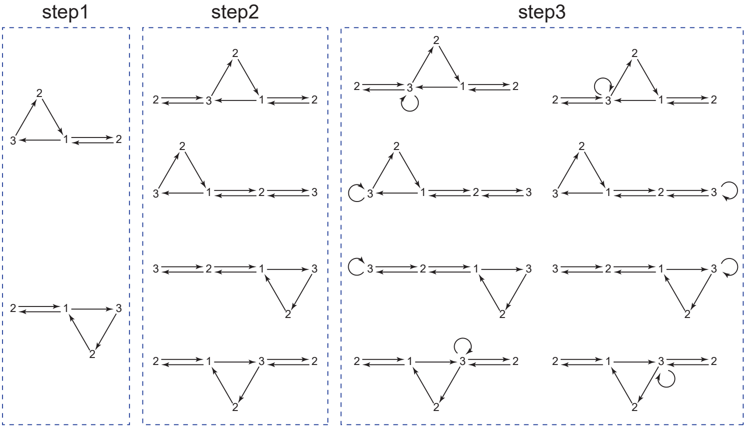


Figure: 构建所有容允许轨道的环插入法示意图。依然使用15中的例子。环插入法分为三步：首先我们将所有包含初始状态的环插入轨道，接下来我们将所有剩余的两元环插入轨道，最后我们将所有剩余的一元环插入轨道。经过这三步的环插入，找到了所有八个容许轨道。

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：

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

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

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

环流大偏差速率函数表达式：

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

化简可得：

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

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

由环流大偏差速率函数表达式：

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

证明环流大偏差速率函的存在唯一性，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。

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

$$\begin{gathered} \frac{x^i}{x^{i-1}+x^i+\nu^+} \frac{x^i+\nu^+}{x^i+x^{i+1}+\nu^+} = \frac{y^i+\nu^-}{y^{i-1}+y^i+\nu^-} \frac{y^i}{y^i+y^{i+1}+\nu^-} = e^{-\lambda_i}, \\ x^i + y^i = \nu^{i,i+1}, \qquad 2 \le i \le N-1. \end{gathered} \tag{1}$$

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 1 的解存在且唯一

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

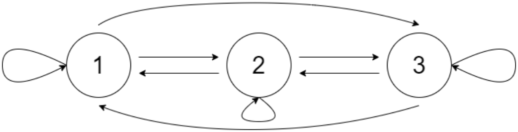
环流大偏差速率函数

三环马氏链

环流大偏差速率函数，可简化为：

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

$$+ \sum_{c\in\mathcal{C},|c|\neq 1} \nu^c \log\left(\frac{\nu^c/\tilde{\nu}}{J^c/\tilde{J}}\right).$$

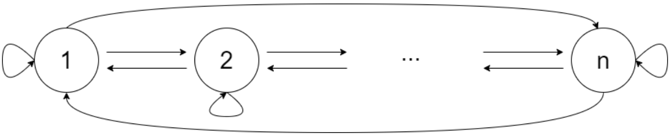


状态转移图

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：

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



状态转移图

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：

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

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

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

对经验测度的大偏差

定义 n 时刻的对经验测度 $R_n : E \to [0,1]$ 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：

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

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

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

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。

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：

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

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 $I_Q : \mathcal{M} \to [0,\infty]$ 为：

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

强对称关系

单环马氏链 LE 环流满足强对称关系，即：

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

$$= \left(\frac{\gamma^+}{\gamma^-}\right)\mathbb{P}\left(N_n^+ = k^+ - 1, N_n^- = k^-, N_n^c = k^c,\ \forall c \neq C^+, C^-\right) \tag{3}$$

该式中 $C^+ = (1, 2, \cdots, N)$ 和 $C^- = (1, N, \cdots, 2)$ 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。

LE 环流满足的各种涨落定理

- 暂态涨落定理:

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

- Kurchan-Lebowitz-Spohn 类型涨落定理:

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

- Gallavotti-Cohen 类型涨落定理:

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

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:

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

相似环

记 $c_1 = (i_1, i_2, \cdots, i_s)$ 和 $c_2 = (j_1, j_2, \cdots, j_r)$ 是两个环。如果 $s = r$ 且 $\{i_1, i_2, \cdots, i_s\} = \{j_1, j_2, \cdots, j_r\}$，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：

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

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：

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

重复4式，可以给出 LE 环流的暂态涨落定理：

$$\frac{\mathbb{P}(N_n^{c_1}=k^{c_1},N_n^{c_2}=k^{c_2},N_n^{c}=k^{c},\ \forall c\neq c_1,c_2)}{\mathbb{P}(N_n^{c_1}=k^{c_2},N_n^{c_2}=k^{c_1},N_n^{c}=k^{c},\ \forall c\neq c_1,c_2)}=\left(\frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_t}}\right)^{k^{c_1}-k^{c_2}}. \tag{5}$$

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）：

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

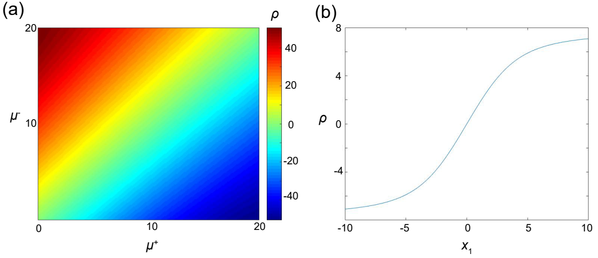
这表明对于任意环 c_i，LE 经验净环流满足对称关系。在该方程中，对所有 $1\leq i\leq r$，交换 x_i 和 $-x_i$ 的值，可以得到（弱形式）：

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

环流的涨落定理

ST 环流的涨落定理

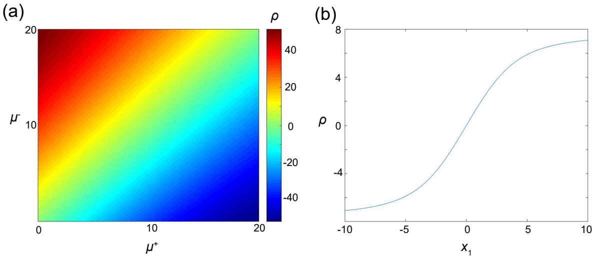
一般马氏链 ST 环流不满足涨落定理



(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，$\rho = I_{\tilde{Q}}(\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) - I_{\tilde{Q}}(-\tilde{\mu}^{c_1}, \tilde{\mu}^{c_2}, \tilde{\mu}^{c_3}) + (\log \frac{\gamma^{c_1}}{\gamma^{c_1-}})\tilde{\mu}^{c_1}$ 的函数图像，表明 Gallavotti-Cohen 类型涨落定理对 ST 净环流不成立。

一般马氏链 ST 环流不满足涨落定理



该图 (a) 说明了 $I_Q(\cdots,\mu^+,\mu^-)$ 和 $I_Q(\cdots,\mu^-,\mu^+)-\log(\gamma^+/\gamma^-)(\mu^+-\mu^-)$ 之间的差异，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。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。

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：

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

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。

总结和展望

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！