arXiv:2611.29778v1 [math-ph] 22 Nov 2026

通过功刻画超快过程

Bernard Derrida[1,2],Michael Entov[3], Leonid Polterovich[4] 和 Lenya Ryzhik[5]

11月24日 , 2026

摘要

考虑一个最初处于热力学平衡的平均场系统经历的以下循环：瞬时参数跃迁、弛豫至新的平衡态，以及反向跃迁。对于某些系统和参数值，在热力学极限下，这两个平衡宏观态会重合。

我们通过执行该循环所需的功来刻画这种匹配现象。我们的主要结果针对满足适当假设的标量多粒子平均场系统。在匹配情形下，总功具有非退化的非高斯极限分布，而单粒子平均功趋于零。偏离匹配时，对总功的涨落进行适当缩放后，将得到可能退化的高斯极限分布，而单粒子平均功收敛到一个严格为正的常数。进一步的研究动机来自热力学的接触几何模型；在该模型中，匹配对应于两个平衡 Legendrian 子流形之间的一条 Reeb 弦。

目录

1 引言 **2**

1.1 跃迁–弛豫–跃迁循环与功的正性 .3 1.2 平均场系统中的功循环 .5 1.2.1 两个值得注意的函数 .6 1.2.2 关于每粒子能量的假设 .7 1.2.3 对 $I(m)$ 和 $\Phi_i(m)$ 的解释 .8 1.3 主定理 .8 1.4 进一步推广 .11 1.5 与 Reeb 弦的联系 .12

2 吉布斯测度的集中 **14**

[1]法兰西学院，法国[2]高等师范学院物理实验室，ENS，PSL大学、法国国家科学研究中心、索邦大学、巴黎大学，法国[3]数学系，以色列理工学院，以色列[4]数学科学学院，特拉维夫大学，以色列[5]数学系，斯坦福大学，美国。

3 矩的渐近式16 3.1 指数倾斜密度.17 3.2 加权矩.19 3.3 尾部估计的证明.21

4 定理 1.3 的证明 **25**
4.1 联合高斯极限 .25 4.2 功的极限分布 .26 4.3 重标度功的矩的界 .28 4.4 期望与标准差 .29

5 一个例子：高斯振子 **30**
5.1 吉布斯测度 .30 5.1.1 配分函数 .31 5.1.2 关于 m.32 5.2 跳变循环中的功.32 5.2.1 功的分布 .33 5.2.2 功的期望 .34 5.2.3 功的方差和标准差 .35

A 基本的大偏差结果 **36**

B 对数矩母函数与速率函数 **36**

1 引言

在物理学的许多情况下，可以几乎瞬时地改变系统的哈密顿量。例如，当作用于磁性系统的场被关闭时，便是如此。另一个例子是使用光镊快速改变原子或分子的限制势 [2, 7, 8]。在这种瞬时变化过程中，系统没有时间与热浴交换热量，因此系统能量的全部变化都源于对其所做的功。在本文中，我们研究一个系统经历一系列此类哈密顿量变化时的演化：在任意两次连续跃迁之间，系统都有足够的时间弛豫到新的平衡态。具体而言，我们希望确定系统在一个循环中所做的功；该循环包括从一个哈密顿量跃迁到另一个哈密顿量、弛豫到新的平衡态、随后反向跃迁并弛豫回原始平衡态。

我们尤其关注在热力学极限下，宏观变量的吉布斯分布弱收敛到同一个狄拉克测度的情形：此时，两个不同的平均场哈密顿量之间发生瞬时变化。我们将这种跃迁称为宏观意义上的 超快过程 ：哈密顿量的瞬时变化不会改变宏观变量的极限平衡值。这里的术语指的是热力学极限下的平衡匹配，并不意味着有限系统达到平衡所需的时间。此前，超快过程已与辛拓扑中的 Reeb 弦联系起来，见 [5, 6]。

在其中所讨论的热力学接触几何模型中，这些弦连接两个系统的平衡 Legendrian 子流形。

我们的主要结果涉及标量 N 粒子平均场系统。我们证明，在以下假设下，超快过程的另一特征是：在循环过程中对系统所做总功的非退化、非高斯极限分布的出现。相应的极限随机变量是两个相互独立的高斯变量的二次表达式。单位粒子功的平均值为 N^{-1} 阶，并且具有一个明确的严格正系数，其中 N 是平均场系统中的粒子数。另一方面，在偏离匹配时，总功围绕其主导确定性项的涨落在按 $N^{-1/2}$ 重新缩放后具有一个可能退化的高斯极限，而单位粒子平均功收敛于一个严格正的常数。我们还将平均功表示为对称化相对熵，并计算单位粒子功标准差的渐近行为。

1.1 跳跃–弛豫–跳跃循环与功的正性

设 $E_0, E_1 \colon X \to \mathbb{R}$ 是定义在概率测度空间 (X, ρ) 上的两个能量函数，且 $\beta > 0$ 是一个参数（在物理模型中表示温度的倒数），使得相应的配分函数

$$Z_i = \int_X e^{-\beta E_i(x)}\, d\rho(x)$$

均为有限值。与两个能量 $E_{0,1}$ 相对应的吉布斯测度为

$$d\mu_i(x) = \frac{1}{Z_i} e^{-\beta E_i(x)}\, d\rho(x), \quad x \in X, \quad i = 0, 1.$$

我们假设差值 $E_1 - E_0$ 关于两个吉布斯测度都是可积的。我们用分别服从 μ_0 和 μ_1 分布的独立随机变量，来描述第一次和第二次跃迁之前系统的微观状态。

考虑如下循环。系统从与能量函数 $E_0(x)$ 相对应的平衡吉布斯测度 μ_0 开始。能量从 $E_0(x)$ 瞬时变化为 $E_1(x)$，而微观状态 $x \in X$ 仍按照测度 μ_0 分布。随后，系统在能量 $E_1(x)$ 下弛豫至吉布斯测度 μ_1。接着，能量从 E_1 瞬时变回 E_0，此时微观状态按照测度 μ_1 分布。第二次跃迁后，系统弛豫回到吉布斯测度 μ_0。

两次弛豫都不做功，而微观态 $x \in X$ 在跃迁时的能量变化为

$$\Delta E(x) := E_1(x) - E_0(x), \tag{1.1}$$

当从 $E_0(x)$ 切换到 $E_1(x)$时，以及切换回来时的 $(-\Delta E(x))$。因此，在微观层面上，一个循环中的功为，

$$w(x, x') = \Delta E(x) + (-\Delta E(x')) = E_1(x) - E_0(x) + E_0(x') - E_1(x'). \tag{1.2}$$

这里，第一项对应于原微观状态 $x \in X$下的能量跃变，第二项则对应于第一次弛豫过程后形成的第二个微观状态 $x' \in X$ 下的能量跃变。因此，系统在这两次跃迁中所受的总平均功为

$$\begin{aligned} W &= \int_X (E_1(x) - E_0(x))\, d\mu_0(x) - \int_X (E_1(x') - E_0(x'))\, d\mu_1(x') \\ &= \int_{X\times X} w(x,x') d\mu_0(x) d\mu_1(x'). \end{aligned} \tag{1.3}$$

现在我们说明，按照热力学第二定律的要求，这种循环中的平均功为何总是非负的。回顾一下，对于定义在同一测度空间 X 上的概率测度 μ 和 ν，若 μ 关于 ν 绝对连续，则它们的相对熵为

$$D(\mu\|\nu) = \int_X \log\left(\frac{d\mu}{d\nu}\right) d\mu.$$

根据詹森不等式，它满足 $D(\mu\|\nu) \geq 0$，且当且仅当 $\mu = \nu$ 时取等号。

命题 1.1 (功的正性)。 循环中的总平均功为

$$W = \frac{1}{\beta}\big[D(\mu_0\|\mu_1) + D(\mu_1\|\mu_0)\big]. \tag{1.4}$$

因此，循环中的总平均功总是非负的： $W \geq 0$，且 $W = 0$ 当且仅当 $\mu_0 = \mu_1$。

证明。由于

$$\log\frac{d\mu_0}{d\mu_1}(x) = \beta(E_1(x) - E_0(x)) + \log\frac{Z_1}{Z_0},$$

且 μ_0 是一个概率测度，我们有

$$D(\mu_0\|\mu_1) = \beta\int_X (E_1(x) - E_0(x))\, d\mu_0 + \log\frac{Z_1}{Z_0}.$$

同样，我们有

$$D(\mu_1\|\mu_0) = \beta\int_X (E_0(x) - E_1(x))\, d\mu_1 + \log\frac{Z_0}{Z_1}.$$

将这两个恒等式相加得到（1.4）。 □

现在我们专门讨论本文研究的标量平均场系统。设 $s_1, \ldots, s_N$ 是一组独立同分布的实值随机变量，其共同的连续概率密度为 $\rho(s)$，并设 P_N 为它们经验均值的分布

$$m = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} s_j. \tag{1.5}$$

对于 $i = 0, 1$，令 $H_i(m)$ 表示每粒子能量，因此 N 粒子哈密顿量为 $NH_i(m)$。经验均值的平衡分布为吉布斯测度

$$d\nu_i^{(N)}(m) = \frac{1}{Z_{i,N}} e^{-\beta N H_i(m)} \, P_N(dm), \qquad i = 0, 1, \tag{1.6}$$

其中

$$Z_{i,N} = \int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H_i(m)} \, P_N(dm). \tag{1.7}$$

设 $M_0^{(N)}$ 和 $M_{(N)}1$ 分别为服从 $\nu_0^{(N)}$ 和 $\nu_1^{(N)}$ 分布的独立随机变量。在两个宏观态处计算的循环单位粒子功为

$$w(m, m') = \Delta H(m) - \Delta H(m'), \tag{1.8}$$

其中

$$\Delta H(m) = H_1(m) - H_0(m), \qquad m \in \mathbb{R}, \tag{1.9}$$

循环中的单位粒子随机功为

$$\mathsf{w}_N = w(M_0^{(N)}, M_1^{(N)}). \tag{1.10}$$

其期望和方差为

$$\begin{aligned} w_N := \mathbb{E}[\mathsf{w}_N] &= \int_{\mathbb{R}} \Delta H(m) \, d\nu_0^{(N)}(m) - \int_{\mathbb{R}} \Delta H(m) \, d\nu_1^{(N)}(m) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} w(m, m') \, d\nu_0^{(N)}(m) \, d\nu_1^{(N)}(m'), \end{aligned} \tag{1.11}$$

and

$$\sigma_N := \sqrt{\mathrm{Var}(\mathsf{w}_N)} = \left(\mathbb{E}[(\mathsf{w}_N - w_N)^2]\right)^{1/2}. \tag{1.12}$$

第 1.2 节中的假设确保配分函数有限且为正，并确保此处使用的矩对所有充分大的 N均有限。应用 1.1 命题，并令 $E_i = NH_i$，可得 $w_N \geq 0$。

我们的目标是确定经过适当重标度的功的极限分布、其期望的渐近行为，以及其涨落的大小，其中 $N \to \infty$。我们将看到，当两个极限平衡宏观态不同时，与二者相同时的情形之间存在鲜明区别。

1.2 平均场系统中的功循环

现在我们陈述第 ρ 节概率框架下关于参考密度 H_0和单个粒子能量 H_1 的假设1.1。

1.2.1 两个重要函数

我们假设对数矩母函数

$$\Lambda(\theta) = \log \int_{\mathbb{R}} e^{\theta s} \rho(s)\, ds \tag{1.13}$$

在 $\theta = 0$ 的邻域内是有限的。为方便起见，我们还假设其定义域

$$D = \{\theta \in \mathbb{R} : \Lambda(\theta) < +\infty\} \tag{1.14}$$

是一个开区间（$-a$，b），其中 a，$b \in$（0，$+\infty$]。这一假设确保下面（I 1.15）中定义的速率函数在其有限的所有点上都是光滑且严格凸的，并且其定义中的上确界在 D 的内部点处取得。

柯拉默 ´速率函数是 Λ 的勒让德变换：

$$I(m) = \sup_{\theta \in \mathbb{R}} \{\theta m - \Lambda(\theta)\}. \tag{1.15}$$

它描述了经验均值 $m = N^{-1} \sum_{i=1}^{N} s_i$ 的大偏差。有关更多详细信息，请参阅第1.2.3 节。

Set

$$\bar{s}_- = \inf\{s \in \mathbb{R} : \rho(s) > 0\}, \qquad \bar{s}_+ = \sup\{s \in \mathbb{R} : \rho(s) > 0\}, \tag{1.16}$$

并记作

$$D' = (\bar{s}_-, \bar{s}_+). \tag{1.17}$$

的任一端点 D' 都可能是无穷远点。下面的命题汇总了下文将用到的性质。证明见附录B。

命题 1.2。在上述假设下，以下结论成立。

(i) 函数 Λ 在 D 上是 C^∞，

$$\Lambda''(\theta) > 0, \qquad \theta \in D, \tag{1.18}$$

and

$$D' = \{\Lambda'(\theta) : \theta \in D\}. \tag{1.19}$$

(ii) 函数 I 在 D' 上光滑，并且

$$I(m) = +\infty, \qquad m \notin D'. \tag{1.20}$$

¯(iii) 对于每个 $m \in D'$，式(1.15) 中的上确界在唯一一点处取得 $\theta(m) \in D$，其特征为

$$m = \Lambda'(\bar{\theta}(m)). \tag{1.21}$$

此外，对于所有 $m \in D'$，

$$\begin{aligned} I(m) &= m\bar{\theta}(m) - \Lambda(\bar{\theta}(m)), \\ I'(m) &= \bar{\theta}(m). \end{aligned} \tag{1.22}$$

此外，I 在 D' 上严格凸：

$$I''(m) = \bar{\theta}'(m) = \frac{1}{\Lambda''(\bar{\theta}(m))} > 0. \tag{1.23}$$

1.2.2 关于每粒子能量的假设

我们始终假设，每个粒子的两种能量 H_0、H_1 都属于光滑性类别 C^2。与第 1.1节一样，它们依赖于经验均值（1.5），相应的N粒子哈密顿量为 $NH_i(m)$、$i = 0$、1。我们提出若干假设，以便在大偏差的框架下应用拉普拉斯方法。该方法是本文使用的主要技术工具。

- H_0 和 H_1 有下界：存在 $D_i > 0$，使得

$$H_i(m) \geq -D_i, \quad \text{for all } m \in \mathbb{R} \text{ and } i = 0, 1, \tag{1.24}$$

- H_0 和 H_1 至多呈指数增长：存在常数 C_i，$\kappa_i > 0$ 使得 t

$$|H_i(m)| \leq C_i e^{\kappa_i |m|}, \qquad m \in \mathbb{R}. \tag{1.25}$$

我们还定义函数

$$\Phi_i(m) = I(m) + \beta H_i(m), \tag{1.26}$$

，其中逆温度为 $\beta > 0$。其含义也将在下文第 1.2.3 节中讨论。我们假设 Φ_i，$i = 0$，1 具有以下性质。

(A) 对每个 $i = 0$，1，函数 $\Phi_i(m)$ 都有唯一的全局极小值点 m_i。该极小值点是非退化的，

$$A_i := \Phi_i''(m_i) > 0, \tag{1.27}$$

and

$$A_0 \neq A_1. \tag{1.28}$$

原则上，下面的结果对 $A_0 = A_1$ 也成立。作出这一假设，仅仅是为了使下面某些计算中的首阶项不为零。

满足这些假设的一对系统的重要示例，高斯振子，将在第5节中详细阐述。

由于 $\Phi_i(m)$ 的最小值 $i = 0$，1 在 $m = m_i$处取得，且该值有限，因此由（1.20）可知 $m_i \in D'$。我们记

$$\theta_i = \bar{\theta}(m_i), \tag{1.29}$$

使得

$$m_i = \Lambda'(\theta_i), \tag{1.30}$$

由于（1.21）。由于 m_i 是 $\Phi_i(m)$ 的临界点，并且由（1.22）和（1.29），我们还有

$$\theta_i = -\beta H_i'(m_i). \tag{1.31}$$

1.2.3 对 I（m）和 Φ_i（m）的解释

回顾一下， P_N 是在乘积参考测度下经验均值的分布，而 $\nu_i^{(N)}$ 是哈密顿量 NH_i的吉布斯分布（1.6）。点 m_0 和 m_1 是极限平衡宏观态：我们将在下文引理 2.1 中看到，测度 $\nu_i^{(N)}$ 集中于 $m = m_i$，当 $N \to +\infty$时。因此，条件 $m_0 = m_1$ 正是与超快过程相关的匹配条件 *in the thermodynamic limit*。

现在我们来解释函数 $I(m)$ 和 $\Phi_i(m)$ 的含义。就大偏差而言，函数 $I(m)$ 是测度 $P_N(dm)$ 的速率函数，即对于任意闭集 $F \subset \mathbb{R}$ 和任意开集 $G \subset \mathbb{R}$，我们都有

$$\limsup_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log P_N(F) \leq -\inf_F I,$$

and

$$\liminf_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log P_N(G) \geq -\inf_G I.$$

这就是 Cramér 定理的结论，参见附录 A.1 中的定理 A。类似地，Varadhan 引理（附录 A.2 中的定理 A）的一个推论是

$$J_i(m) := \Phi_i(m) - \Phi_i(m_i) \tag{1.32}$$

是吉布斯测度 $\nu_i^{(N)}(dm)$ 的速率函数。

因此，除去一个常数后， $\Phi_i(m)$ 是吉布斯测度 $\nu_i^{(N)}(dm)$ 的速率函数。这使我们能够对 $\Phi_i(m)$ 作出更具物理意义的解释。对于 $i = 0, 1$，令

$$f_{i,N} := -\frac{1}{\beta N} \log Z_{i,N}$$

表示与哈密顿量 NH_i 相对应的每粒子平衡自由能。再次利用 Varadhan 引理以及 Φ_i 的极小值点 m_i 的唯一性，我们有

$$f_i := \lim_{N\to+\infty} f_{i,N} = H_i(m_i) + \frac{1}{\beta} I(m_i) = \frac{1}{\beta} \Phi_i(m_i). \tag{1.33}$$

因此， $\Phi_i(m_i)$ 是极限（当 $N \to +\infty$ 时）每粒子自由能的倍数。

1.3 主定理

我们使用独立随机变量 $M_{(N)0}, M_1^{(N)}$ 以及随机功 w_N、其期望 w_N和标准差 σ_N，这些内容在第 1.1 节中介绍。极限平衡宏观态 m_i 和常数 $A_i > 0$ 由假设 (A) 指定。回顾一下，

$$\Delta H(m) = \frac{1}{\beta}[\Phi_1(m) - \Phi_0(m)], \qquad m \in D'. \tag{1.34}$$

Set

$$d_i = \Delta H'(m_i), \qquad i = 0, 1, \tag{1.35}$$

并记为

$$w_\infty = \Delta H(m_0) - \Delta H(m_1), \qquad V = \frac{d_0^2}{A_0} + \frac{d_1^2}{A_1}. \tag{1.36}$$

在匹配情形 $m_0 = m_1 = m_*$下，我们还设

$$c = \Delta H''(m_*) = \frac{A_1 - A_0}{\beta}. \tag{1.37}$$

我们用 $X_N \Longrightarrow X$ 表示依分布收敛，即 X_N 的概率分布弱收敛到 X的分布。

定理 1.3 (功的分布、期望与涨落)。 在第 *1.1* 节和 *1.2*节的假设下，当 $N \to \infty$。

(i) 依分布收敛。若 $m_0 \neq m_1$，则

$$\sqrt{N}\,(\mathsf{w}_N - w_\infty) \Longrightarrow \mathcal{N}(0, V), \tag{1.38}$$

其中 V 定义于 (1.36)。当至少一个 d_0、d_1 （定义于 (1.35) ）非零时，极限高斯分布是非退化的。若 $m_0 = m_1 = m_*$，则

$$N\mathsf{w}_N \Longrightarrow \zeta := \frac{c}{2A_0}\xi_0^2 - \frac{c}{2A_1}\xi_1^2, \tag{1.39}$$

其中 ξ_0、ξ_1 是相互独立的标准正态随机变量，数值 $A_{0、1}$ 定义于 (1.35)，而 c 定义于 (1.37)。在我们的常设假设 (1.28)下， $c \neq 0$， ζ 的分布是非高斯且非退化的。

（ii）期望收敛。如果 $m_0 \neq m_1$，那么

$$w_N = w_\infty + o(1), \qquad w_\infty > 0. \tag{1.40}$$

如果 $m_0 = m_1 = m_*$，那么

$$w_N = \frac{c}{2N}\left(\frac{1}{A_0} - \frac{1}{A_1}\right) + o(N^{-1}) = \frac{(A_1 - A_0)^2}{2\beta N A_0 A_1} + o(N^{-1}). \tag{1.41}$$

因此，当平衡宏观态不同时，单粒子平均功为一阶；在匹配时则为 N^{-1} 阶。

（iii）标准差收敛。如果 $m_0 \neq m_1$，那么

$$\sqrt{N}\,\sigma_N \longrightarrow \sqrt{V} = \left(\frac{d_0^2}{A_0} + \frac{d_1^2}{A_1}\right)^{1/2}. \tag{1.42}$$

如果 $m_0 = m_1 = m_*$，那么

$$N\sigma_N \longrightarrow \sqrt{\mathrm{Var}(\zeta)} = \frac{|c|}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{A_0^2} + \frac{1}{A_1^2}\right)^{1/2}. \tag{1.43}$$

[1]这里，如果某个概率分布不集中在单个点上，或者等价地说，相应的随机变量并非几乎必然为常数，则称该概率分布是非退化的。

第 (i) 部分中的分布极限也满足所有矩的收敛（见下文注4.3 ）。特别是，期望和标准差的极限与极限分布律相一致。

注 1.4。 即使 $V = 0$ ，也可能出现 $m_0 \neq m_1$。当 $\Phi_1'(m_0) = \Phi_0'(m_1) = 0$ 时，就会发生这种情况。在这种情况下，

$$\sqrt{N}\,(\mathsf{w}_N - w_\infty)$$

弱收敛到零处的狄拉克测度，或者等价地说，该随机变量依概率收敛到零。因此，总功 $N\mathsf{w}_N$具有一个正的主导项 Nw_∞，但其涨落小于 $\sqrt{N}$。此外，定理的第 (iii) 部分给出

$$N\sigma_N = o(\sqrt{N})$$

总功标准差的表达式。该定理无法确定这些涨落的更精细尺度，也无法确定其首个非退化极限分布。

注 1.5（ Jarzynski 恒等式。 匹配极限的特征函数为

$$\mathbb{E}[e^{it\zeta}] = \left(1 - \frac{ict}{A_0}\right)^{-1/2} \left(1 + \frac{ict}{A_1}\right)^{-1/2}, \qquad t \in \mathbb{R}, \tag{1.44}$$

其中平方根选取为在 $t = 0$ 处取值 1 的连续分支。由于 $c = (A_1 - A_0)/\beta$，同一个高斯积分在 $t = i\beta$ 处也是有限的，得到

$$1 + \frac{\beta c}{A_0} = \frac{A_1}{A_0} > 0, \qquad 1 - \frac{\beta c}{A_1} = \frac{A_0}{A_1} > 0.$$

因此，取 $it = -\beta$ 于（1.44）中，我们得到

$$\mathbb{E}[e^{-\beta\zeta}] = \left(\frac{A_1}{A_0}\right)^{-1/2} \left(\frac{A_0}{A_1}\right)^{-1/2} = 1.$$

因此，极限总功满足 Jarzynski 恒等式的循环形式 [9], ，其中初始平衡态与最终平衡态之间的自由能差为零。

当 $m_0 \neq m_1$且 $V > 0$ 时，总功 $N\mathsf{w}_N$具有正的主导项 Nw_∞，并呈现阶为 $\sqrt{N}$的渐近高斯涨落。在匹配条件下，总功则收敛于非高斯随机变量 ζ。因此，平衡匹配并不能消除总功的涨落：两个平衡测度具有不同的涨落方差，即使单位粒子功趋于零，仍会产生一阶的随机功。

由于在匹配情形下 $w_\infty = 0$ ，两种分布极限都涉及 $\mathsf{w}_N - w_\infty$，即相对于其极限均值的功；当 $m_0 \neq m_1$ 时按$\sqrt{N}$ 重新缩放，当 $m_0 = m_1$时按 N 重新缩放。下表总结了该定理；最后一行指经过这些重新缩放后的极限分布。

	$m_0 \neq m_1$	$m_0 = m_1 = m_*$
单粒子平均功	$O(1)$	$O(N^{-1})$
标准差	$O(N^{-1/2})$	$O(N^{-1})$
极限分布	高斯	非高斯

非匹配情形下的标准差阶在 $V > 0$时达到；如果 $V = 0$，高斯极限是点质量，且 $\sigma_N = o(N^{-1/2})$。匹配阶由 $A_0 \neq A_1$达到。匹配情形下的 N^{-1} 涨落尺度反映了恒等式 $\Delta H'(m_*) = 0$：经验均值大小为 $N^{-1/2}$ 的偏差会对跃迁功产生二次贡献，因此其阶为 N^{-1}。

为完整性，在非匹配情形下，w_∞ 的正性直接由

$$w_\infty = \frac{1}{\beta}\big[\Phi_0(m_1) - \Phi_0(m_0) + \Phi_1(m_0) - \Phi_1(m_1)\big] > 0,$$

因为 m_i 是 Φ_i的唯一极小值点。在匹配情形下，(1.41)中的系数由 $A_0 \neq A_1$可知为正。若去掉这一最后的假设并且 $A_0 = A_1$，则 $\zeta = 0$，$w_N = o(N^{-1})$，以及 $\sigma_N = o(N^{-1})$；需要进行更精细的渐近分析，以确定下一个尺度。

注 1.6。在匹配情形 $m_0 = m_1 = m_*$下，由(1.33)可知

$$f_1 - f_0 = H_1(m_*) - H_0(m_*) = \Delta H(m_*).$$

因此，每粒子能量的跃变恰好等于极限平衡每粒子自由能之差。

1.4 进一步推广

标量结果引出了这样一个问题：当能量取决于多个宏观变量时会发生什么。下面我们简要概述期望功的渐近行为如何推广到这一情形。考虑可观测量

$$\vec{v}(s) = (s, s^2, \dots, s^K), \qquad s \in \mathbb{R},$$

以及宏观状态

$$\vec{m} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \vec{v}(s_j) \in \mathbb{R}^K.$$

令两个哈密顿量为 $NH_i(\vec{m})$，并令 $I(\vec{m})$ 为该经验均值的 Cramér 速率函数。假设上述假设的多维类比成立，包括对 $\vec{v}(s)$ 所必需的指数矩假设，并设

$$\Phi_i(\vec{m}) = I(\vec{m}) + \beta H_i(\vec{m}), \qquad i = 0, 1,$$

具有唯一的非退化全局极小点 $\vec{m}_i$。令

$$A_i = \nabla^2 I(\vec{m}_i) + \beta \nabla^2 H_i(\vec{m}_i), \qquad \Delta H = H_1 - H_0.$$

其中 A_0，A_1 是正定矩阵。与标量情形一样，我们假设两次跃迁处的宏观状态相互独立，且分别服从各自的吉布斯分布，并将 w_N记为每粒子的期望功。

对于期望，我们有与定理1.3(ii)中相同的二分性：

$$w_N = \Delta H(\vec{m}_0) - \Delta H(\vec{m}_1) + o(1). \tag{1.45}$$

若 $\vec{m}_0 \neq \vec{m}_1$，极限常数严格为正。若 $\vec{m}_0 = \vec{m}_1 = \vec{m}_*$，类似的二阶计算给出

$$w_N = \frac{1}{2\beta N}\operatorname{Tr}(B + B^{-1} - 2\mathbb{I}) + o(N^{-1}), \qquad B = A_0^{-1/2} A_1 A_0^{-1/2}. \tag{1.46}$$

首项系数非负，且当且仅当 $A_0 = A_1$ 时为零。

关于期望的这一结果引出了以下问题：相应的极限分布和涨落渐近行为是什么？特别是，高斯与非高斯二分性是否仍然成立？哪些二次型描述匹配时的极限功？这些问题留待进一步研究。

1.5 与 Reeb 弦的联系

假设函数 $H_i(m)$、$i = 0, 1$ 依赖于外部参数 $q \in \mathbb{R}$，如下所示：

$$H_i(m, q) = h_i(m) + mq. \tag{1.47}$$

对于每个 q 和 $i = 0, 1$，记 $m_i(q)$ 为以下函数的极小值点

$$\Phi_i(m, q) = I(m) + \beta H_i(m, q).$$

我们假设，关于每粒子能量的先前假设对于 $H_i(m, q)$、$i = 0, 1$ 对所有 q 都成立，并且函数 $m_i(q)$、$i = 0, 1$ 都是可微的。令

$$f_i(q) := \frac{1}{\beta}\Phi_i(m_i(q), q) = \min_{m\in\mathbb{R}} \left\{ \frac{1}{\beta} I(m) + h_i(m) + mq \right\}. \tag{1.48}$$

根据（1.33），f_i（q），$i = 0, 1$ 是当 $N \to +\infty$ 时，i系统在参数值 q 下的极限每粒子平衡自由能。

由于 m_i（q）是（m，q）的临界点，对（1.48）关于 q 求导得

$$f_i'(q) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \Phi_i(m_i(q), q)}{\partial q} = \frac{\partial H_i(m_i(q), q)}{\partial q} = m_i(q).$$

因此，匹配条件

$$m_0(q) = m_1(q), \tag{1.49}$$

等价于

$$(f_1 - f_0)'(q) = 0.$$

因此， q 满足（1.49）的匹配值恰好是自由能差 $f_1 - f_0$的临界点。

根据 [6], ，在非平衡热力学的接触几何模型中，每个这样的临界点都对应一条 Reeb 弦，它连接两个系统的平衡 Legendrian 子流形。这一现象相当值得关注，因为 Reeb 弦是接触拓扑研究中的核心对象。设 q_* 为这样的临界点，并记

$$m_0(q_*) = m_1(q_*) =: m_*.$$

在热力学极限下，从系统 0 到系统 1 的瞬时跳跃会将一个平衡宏观态映射到具有相同 m_* 值的平衡宏观态。因此，这一跃迁是超快的。反向跳跃也是如此。

由备注 1.6，在这种情况下，我们有

$$f_1(q_*) - f_0(q_*) = H_1(m_*, q_*) - H_0(m_*, q_*) = h_1(m_*) - h_0(m_*).$$

因此，在热力学极限下，沿 Reeb 弦前进所做的单粒子平均功为 $f_1(q_*) - f_0(q_*)$，而沿原路返回所做的单粒子平均功则与之相反。这两个数量级为一的贡献在完整循环中恰好抵消。从这个意义上说，沿弦往返的循环在热力学极限下变得可逆。

然而，对于有限的 N，两个吉布斯测度不一定重合；根据命题1.1，只要它们不同，循环上的平均功就严格为正。在匹配值 q_*处，表达式（1.41）给出

$$w_N = \frac{(A_1 - A_0)^2}{2\beta N A_0 A_1} + o(N^{-1}).$$

因此，Reeb 弦条件的特征在于：沿弦及返回路径所做的单位粒子功中，一阶平均功相互抵消，只留下一个 $O(N^{-1})$ 有限尺寸贡献（当 $A_0 = A_1$ 时还可能有更小的贡献）。这种抵消正是超快过程在功理论上的标志。

本文结构： 在第2节中，我们证明关键的技术引理（引理2.1），描述所研究系统的吉布斯测度的集中性。在第3节中，我们证明定理1.3的证明所需的矩的渐近式。在第4节中，我们证明定理1.3。首先建立功的极限分布，然后利用重标度功的矩的界，推导其期望和标准差的渐近行为。在第5节中，我们研究高斯振子——这是前几节所讨论系统类别的一个例子。本节篇幅较短，技术上也较为简单，可以独立于本文其余部分阅读。最后，在附录A中，我们回顾定理1.3证明中所使用的两个标准大偏差结果；在附录B中，我们证明命题1.2 中上述对数矩母函数和速率函数的若干辅助事实。

致谢： L.P.感谢Kostya Khanin在本项目早期阶段进行的富有启发性的讨论。M.E.获得了以色列科学基金会项目# 2033/23的部分资助。L.R.获得了项目DMS-2205497和DMS-2510166的资助。

人工智能陈述： 我们提出并证明了第1.1节所讨论的总平均功正性的结果。我们的原始证明与正文中给出的证明略有不同：与熵的联系由ChatGPT 6 Astra提出。我们在第5节所述的高斯振子背景下发现了本文的核心现象，并发展了其证明。我们还提出了定理1.3中给出的推广，其中某些技术性假设随后由ChatGPT 6 Astra补充。这些基于大偏差理论的定理证明由ChatGPT 6 Astra提供。随后，我们对这些证明进行了重新处理和改写。

2 吉布斯测度的集中

回顾一下，根据（1.25），哈密顿量 $NH_i(m)$ 在无穷远处可能呈指数增长。以下集中估计将帮助我们处理这种潜在的增长。

引理 *2.1*。假设函数 $H_i(m)$满足估计（*1.24*）和（*1.25*），且m_i 是（*1.26*）中定义的函数 $\Phi_i(m)$ 的唯一极小值点，并且 m_i 按照（*1.27*）的意义是非退化的。那么，对所有 $r>0$ 和 $\kappa \geq 0$，存在 $c_1(r,\kappa)>0$ 和 $c_2(r,\kappa)>0$ 以及 $N_0(r,\kappa)\in\mathbb{N}$，使得对于 $i=0$、*1* 以及所有 $N \geq N_0(r,\kappa)$，我们有

$$I_{N,r,i} := \int_{|m-m_i|>r} e^{\kappa|m|}\, d\nu_i^{(N)}(m) = \frac{1}{Z_{i,N}} \int_{|m-m_i|>r} e^{\kappa|m|} e^{-\beta N H_i(m)}\, P_N(dm) \leq c_1 e^{-c_2 N}. \quad (2.1)$$

证明。令我们固定某个 $R>r$，并考虑中间积分

$$I_{med,N,i} := \int_{r\leq|m-m_i|\leq R} e^{\kappa|m|}\, d\nu_i^{(N)}(m) \quad \leq e^{\kappa(R+|m_i|)} \int_{r\leq|m-m_i|\leq R} d\nu_i^{(N)}(m). \quad (2.2)$$

由于函数 $H_i(m)$ 根据（1.24）有下界，我们可以使用 Varadhan 引理的指数倾斜推论（A.3），即下文的定理 A.2。它表明概率测度

$$d\nu_i^{(N)} = \frac{1}{Z_{i,N}} e^{-\beta N H_i(m)}\, P_N(dm), \quad (2.3)$$

由 (1.6) 定义，满足大偏差原理，其速率函数为

$$J_i(m) = I(m) + \beta H_i(m) - \inf_{m\in\mathbb{R}} (I(m) + \beta H_i(m)) = \Phi_i(m) - \Phi_i(m_i).$$

由 (A.3) 可推得

$$\limsup_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log(I_{med,N,i}) \leq - \inf_{r\leq|m-m_i|\leq R} J_i(m). \quad (2.4)$$

由于 m_i 是 $\Phi_i(m)$ 的唯一极小值点，存在 $C_{r,\ R}$ 使得

$$J_i(m) \geq C_{r,R} > 0, \quad \text{for all } r \leq |m-m_i| \leq R. \quad (2.5)$$

现在，(2.4) 和 (2.5) 表明

$$\limsup_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log(I_{med,N,i}) \leq -C_{r,R}. \quad (2.6)$$

接下来，我们控制外层积分

$$I_{out,N,i} := \frac{1}{Z_{i,N}} \int_{|m-m_i|\geq R} e^{\kappa|m|} e^{-\beta N H_i(m)}\, P_N(dm) \leq \frac{e^{\beta N D_i}}{Z_{i,N}} \int_{|m-m_i|\geq R} e^{\kappa|m|}\, P_N(dm), \tag{2.7}$$

其中常数 D_i 如假设（1.24）中关于 H_i（m）的规定。注意，对于任意 $\eta > 0$ 固定的值，只要增大 R 使得 $R \geq 4$最大值$_i\, |m_i|$，对于所有 $N \geq 4\kappa/\eta$，都有

$$e^{\kappa|m|} \leq e^{-\eta N R/2} e^{\eta N|m|}, \quad \text{for all } m \text{ s.t. } |m - m_i| \geq R. \tag{2.8}$$

由此得到

$$I_{out,N,i} \leq \frac{e^{-\eta N R/2} e^{\beta N D_i}}{Z_{i,N}} \int_{|m-m_i|\geq R} e^{\eta N|m|}\, P_N(dm) \leq \frac{e^{-\eta N R/2} e^{\beta N D_i}}{Z_{i,N}} \int_{\mathbb{R}} e^{\eta N|m|}\, P_N(dm). \tag{2.9}$$

由于我们假设由（ D 1.14）定义的集合 是一个开区间，因此可以选择 $\eta > 0$足够小，使得 Λ（η）和 Λ（$-\eta$）均有限，并令

$$M_\eta = \int_{\mathbb{R}} e^{\eta|s|} \rho(s)\, ds < +\infty. \tag{2.10}$$

回顾一下， m 与变量 s_j 之间的关系由（1.5）给出，这意味着

$$N|m| \leq \sum_{j=1}^{N} |s_j|. \tag{2.11}$$

由测度 P_N（dm）作为经验均值上的推前测度的定义，以及（2.10）和（2.11），可得

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} e^{\eta N|m|}\, P_N(dm) &= \int_{\mathbb{R}^N} \exp\Big(\eta N \Big|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} s_j\Big|\Big) \prod_{j=1}^{N} \rho(s_j)\, ds_j \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^N} \Big(\prod_{j=1}^{N} e^{\eta|s_j|}\Big)\Big(\prod_{j=1}^{N} \rho(s_j)\Big)\, ds_1 \dots ds_N = M_\eta^N. \end{aligned} \tag{2.12}$$

最后，为了对$Z_{i,\ N}$进行界定，我们再次注意到，由于函数 H_i（m）由（1.24）可知有下界，因此可以将 Varadhan 引理（定理A.2）应用于函数（$-\beta H_i$（m））。由此得到

$$\begin{aligned} \lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log Z_{i,N} &= \lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H_i(m)}\, P_N(dm) \\ &= \sup_{m\in\mathbb{R}} \{-\beta H_i(m) - I(m)\} = \sup_{m\in\mathbb{R}} (-\Phi_i(m)) = -\inf_{m\in\mathbb{R}} \Phi_i(m) = -\Phi_i(m_i). \end{aligned} \tag{2.13}$$

因此，对于每个 $\varepsilon > 0$，以及所有充分大的 N，我们有

$$Z_{i,N} \geq e^{-N(\Phi_i(m_i)+\varepsilon)}. \tag{2.14}$$

结合式（2.9）、（2.12）和（2.14），可知存在 c_1，$c_2>0$ 使得

$$\begin{aligned} I_{out,N,i} &\le \frac{e^{-\eta NR/2}e^{\beta ND_i}}{Z_{i,N}}\int_{\mathbb{R}} e^{\eta N|m|}\,P_N(dm) \\ &\le \exp\Big\{-N\Big[\frac{\eta R}{2}-\log M_\eta-\Phi_i(m_i)-\varepsilon-\beta D_i\Big]\Big\}\le c_1e^{-c_2N}, \end{aligned} \tag{2.15}$$

如果我们选择 R 充分大。结合（2.6），即可证明（2.1），从而完成引理的证明。

□

3 矩的渐近式

本节将证明以下矩的渐近行为，这将在定理 1.3的证明中用到。令

$$\alpha_i := \frac{\beta H_i''(m_i)}{2}, \tag{3.1}$$

and

$$\sigma_i^2 := \Lambda''(\theta_i). \tag{3.2}$$

回顾 1.27 中 A_i 的定义，并利用（1.23）和（1.29），可得

$$A_i := \Phi_i''(m_i) = I''(m_i)+\beta H_i''(m_i) = \frac{1}{\sigma_i^2}+2\alpha_i. \tag{3.3}$$

引理 3.1（矩的渐近式）。对任意 $k\in\mathbb{Z}_{\ge 0}$，有

$$N^{k/2}\int_{\mathbb{R}}(m-m_i)^k\,d\nu_i^{(N)}(m)\to\frac{\mathbb{E}[\xi^k e^{-\alpha_i\xi^2}]}{\mathbb{E}[e^{-\alpha_i\xi^2}]},\quad as\ N\to+\infty. \tag{3.4}$$

这里，ξ 是一个均值为0 、方差为 σ_i^2的高斯随机变量。

本节余下部分将给出引理 3.1 的证明。证明思路如下。我们将通过将式（3.4）化归为某个随机变量集合的中心极限定理来证明式（3.1 ）中（3.4）左侧将以另一种形式写为式（3.10）。接着，在第 3.2 节中，我们将利用式（3.10）证明式（3.27），它是式（3.4）的一种等价形式。证明过程中将用到尾部估计（3.35），其证明将在第 3.3 节给出。

现在，我们为引理 3.1 的证明做一些准备。在整个证明过程中，我们省略下标 i（特别是在 α_i、σ_i 中），并记

$$m_*:=m_i,\ A_*:=A_i\ \text{and}\ \theta_*:=\theta_i. \tag{3.5}$$

当 $k=2p-1$ 为奇数时，(3.4) 的右侧等于零。当 $k=2p$ 为偶数时，我们可以利用 (3.3) 和分部积分迭代计算：

$$\begin{aligned} I_p :&= \mathbb{E}\big[\xi^{2p}e^{-\alpha\xi^2}\big]=\int_{\mathbb{R}} z^{2p}\frac{e^{-z^2/(2\sigma^2)}}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}e^{-\alpha z^2}dz=\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}} z^{2p}e^{-A_*z^2/2}dz \\ &= \frac{1}{A_*^{(2p+1)/2}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}} z^{2p}e^{-z^2/2}dz=\frac{(2p-1)}{A_*^{(2p+1)/2}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}} z^{2p-2}e^{-z^2/2}dz \\ &= \frac{2p-1}{A_*}\frac{1}{A_*^{(2(p-1)+1)/2}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}} z^{2(p-1)}e^{-z^2/2}dz=\frac{2p-1}{A_*}I_{p-1}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

我们得出

$$\frac{I_p}{I_0} = \frac{(2p-1)\cdot(2p-3)\cdot\cdots\cdot 3\cdot 1}{A_*^p}. \tag{3.7}$$

特别地，对于 $k=2$，我们有

$$N\int_{\mathbb{R}}(m-m_*)^2\,d\nu^{(N)}(m) \to \frac{1}{A_*}, \quad \text{as } N\to+\infty, \tag{3.8}$$

对于 $k=4$，我们有

$$N^2\int_{\mathbb{R}}(m-m_*)^4\,d\nu^{(N)}(m) \to \frac{3}{A_*^2}, \quad \text{as } N\to+\infty. \tag{3.9}$$

3.1 指数倾斜密度

我们首先通过将其归结为某个随机变量集合的中心极限定理，来证明（3.4）。在这一预备小节中，我们将把（3.4）的左侧改写为以下形式

$$N^{k/2}\int_{\mathbb{R}}(m-m_*)^k\,d\nu^{(N)}(m) = \frac{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[U_N^k e^{-R_N(U_N)}\right]}{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{-R_N(U_N)}\right]}. \tag{3.10}$$

更一般地，对于任意关于测度 $\nu^{(N)}(m)$ 可积的函数 $F(m)$，我们有

$$\int_{\mathbb{R}}F(m)\,d\nu^{(N)}(m) = \frac{1}{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{-R_N(U_N)}\right]}\mathbb{E}_{\theta_*}\left[F\left(m_*+U_N/\sqrt{N}\right)e^{-R_N(U_N)}\right]. \tag{3.11}$$

在第 3.1 节的其余部分，我们将解释（3.10）和（3.11）右侧出现的概念，并推导这些恒等式。

我们定义指数倾斜密度

$$\rho_{\theta_*}(x) = e^{\theta_* x-\Lambda(\theta_*)}\rho(x), \quad x\in\mathbb{R}.$$

注意，$\rho_{\theta_*}(x)$ 根据 1.13 对 $\Lambda(\theta_*)$ 的定义，是一个概率密度。给定一组独立随机变量 $X_1,\ldots,X_N$，它们各自服从 $\rho_{\theta_*}(x)$，我们用 $\mathbb{E}_{\theta_*}$ 表示关于 $X_j,\ j=1,\ldots,N$ 的联合分布的期望：

$$\mathbb{E}_{\theta_*}[f(X_1,\ldots,X_N)] = \int_{\mathbb{R}^N} f(x)\rho_{\theta_*}(x_1)\ldots\rho_{\theta_*}(x_N)dx, \tag{3.12}$$

f或任何关于上述积分中的乘积测度可积的函数 $f(x)$。注意，每个 X_j 的均值为

$$\mathbb{E}_{\theta_*}X_j = \int_{\mathbb{R}} x\rho_{\theta_*}(x)dx = \int_{\mathbb{R}} se^{\theta_* s-\Lambda(\theta_*)}\rho(s)ds = e^{-\Lambda(\theta_*)}\frac{d}{d\theta}\Big(\int_{\mathbb{R}}e^{\theta s}\rho(s)ds\Big)\Big|_{\theta=\theta_*} = \Lambda'(\theta_*).$$

由于根据（1.21），我们有

$$\Lambda'(\theta_*) = m_*, \tag{3.13}$$

我们得到

$$\mathbb{E}_{\theta_*} X_j = m_*. \tag{3.14}$$

回顾 1.13 中 $\Lambda(\theta)$ 的定义，我们可以计算相应的方差：

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}_{\theta_*}(X_j) &= \int_{\mathbb{R}} (x-m_*)^2 \rho_{\theta_*}(x)dx = \int_{\mathbb{R}} (s-m_*)^2 e^{\theta_* s - \Lambda(\theta_*)} \rho(s)ds \\
&= e^{-\Lambda(\theta_*)} \int_{\mathbb{R}} (s^2 - 2m_* s + m_*^2) e^{\theta_* s} \rho(s)ds \\
&= e^{-\Lambda(\theta_*)} \Big[\frac{d^2}{d\theta^2} - 2m_* \frac{d}{d\theta} + m_*^2\Big] \Big(\int_{\mathbb{R}} e^{\theta s} \rho(s)ds \Big) \Big|_{\theta=\theta_*} \\
&= e^{-\Lambda(\theta)} \Big[\frac{d^2}{d\theta^2} - 2m_* \frac{d}{d\theta} + m_*^2\Big] e^{\Lambda(\theta)} \Big|_{\theta=\theta_*}.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

结合 3.13，可得

$$\mathrm{Var}_{\theta_*}(X_j) = \Lambda''(\theta_*) + |\Lambda'(\theta_*)|^2 - 2m_* \Lambda'(\theta_*) + m_*^2 = \Lambda''(\theta_*) = \sigma^2, \tag{3.16}$$

由 3.2 得。

牢记 3.14，借鉴中心极限定理的思路，引入经过中心化和重新缩放的经验均值：

$$U_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} (X_j - m_*), \tag{3.17}$$

以及

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} X_k. \tag{3.18}$$

我们还定义函数

$$G(m) := \beta H(m) + \theta_* m, \tag{3.19}$$

并设定

$$R_N(u) = N \left[G\left(m_* + \frac{u}{\sqrt{N}} \right) - G(m_*) \right], \tag{3.20}$$

因此

$$NG(\overline{X}_N) = NG(m_*) + R_N(U_N). \tag{3.21}$$

由于 P_N 是乘积密度 $\prod_{j=1}^{N} \rho(x_j)$ 在映射下的推前

$$(x_1, \ldots, x_N) \longmapsto \overline{x} := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_j,$$

对于每个关于 $\nu^{(N)}$ 可积的函数 F，我们都有，

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}} F(m) e^{-\beta N H(m)} P_N(dm) = \int_{\mathbb{R}^N} F(\overline{x}) e^{-\beta N H(\overline{x})} \prod_{j=1}^{N} \rho(x_j)\, dx_1 \cdots dx_N \\
&= e^{N\Lambda(\theta_*)} \int_{\mathbb{R}^N} F(\overline{x}) e^{-NG(\overline{x})} \prod_{j=1}^{N} \rho_{\theta_*}(x_j)\, dx_1 \cdots dx_N = e^{N\Lambda(\theta_*)} \mathbb{E}_{\theta_*} \left[F(\overline{X}_N) e^{-NG(\overline{X}_N)} \right].
\end{aligned} \tag{3.22}$$

将表达式（3.19）—（3.21）代入（3.22）的右端，得到

$$\int_{\mathbb{R}} F(m)e^{-\beta NH(m)}P_N(dm) = e^{N\Lambda(\theta_*)-NG(m_*)}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[F\Big(m_* + \frac{U_N}{\sqrt{N}}\Big)e^{-R_N(U_N)}\Big]. \tag{3.23}$$

特别取 $F = 1$ 在（3.23）中，得到

$$Z_N = e^{N\Lambda(\theta_*)-NG(m_*)}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]. \tag{3.24}$$

将这两个恒等式相除，并回顾（1.6），可得

$$\int_{\mathbb{R}} F(m)\, d\nu^{(N)}(m) = \frac{1}{\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[F\Big(m_* + \frac{U_N}{\sqrt{N}}\Big)e^{-R_N(U_N)}\Big]. \tag{3.25}$$

这就是（3.11）。注意，在 $F(m) = (m-m_*)^k$ 时，（3.25）左侧恰好就是我们需要在引理 3.1 中估计的（3.4）左侧的积分：

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} (m-m_*)^k\, d\nu^{(N)}(m) &= \frac{1}{\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[\frac{U_N^k}{N^{k/2}}e^{-R_N(U_N)}\Big] \\ &= \frac{1}{N^{k/2}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[U_N^k e^{-R_N(U_N)}\Big],\end{aligned} \tag{3.26}$$

这就是（3.10）。

至此，（3.10）和（3.11）的证明完成。

3.2 加权矩

有了（3.10），为了证明（3.4），我们需要证明

$$\frac{\mathbb{E}_{\theta_*}\big[U_N^k e^{-R_N(U_N)}\big]}{\mathbb{E}_{\theta_*}\big[e^{-R_N(U_N)}\big]} \to \frac{\mathbb{E}[\xi^k e^{-\alpha\xi^2}]}{\mathbb{E}[e^{-\alpha\xi^2}]}, \quad \text{as } N \to +\infty. \tag{3.27}$$

这里，ξ是一个 $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$正态变量。首先注意到，由于 $\theta_* \in \text{int}(D)$，$X_k$的所有矩均有限：

$$\mathbb{E}_{\theta_*}(X_k^{2p}) = \int_{\mathbb{R}} x^{2p}\rho_{\theta_*}(x)dx = \int_{\mathbb{R}} s^{2p}e^{\theta_* s-\Lambda(\theta_*)}\rho(s)ds < +\infty, \tag{3.28}$$

对所有 $p \in \mathbb{N}$。因此，中心极限定理结合（3.16）可推出

$$U_N \Longrightarrow \xi, \qquad \xi \sim \mathcal{N}(0,\sigma^2). \tag{3.29}$$

的所有矩 U_N 均由（3.28）、独立性和中心化条件界定 ：

$$\sup_{N\geq 1}\mathbb{E}_{\theta_*}|U_N|^{2r} < \infty, \text{ for all } r \in \mathbb{N}.$$

因此，（3.29）表明，对于每个有界连续函数 g 满足 $\mathbb{E}g(\xi) \neq 0$,

$$\frac{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[U_N^k g(U_N)\right]}{\mathbb{E}_{\theta_*}[g(U_N)]} \to \frac{\mathbb{E}(\xi^k g(\xi))}{\mathbb{E}g(\xi)}. \tag{3.30}$$

分析（3.27）左侧的唯一困难在于，由（$-R_N(u)$ 定义的函数 exp（3.20）不一定在 u 上有界，并且依赖于 N。另一方面，由于该指数函数在紧集上一致收敛于 $e^{-\alpha u^2}$，当 $N \to +\infty$ 时，它已相当接近于在 u 上有界且几乎与 N 无关。事实上，由（$G(m)$ 定义的函数（3.19）满足

$$G'(m_*) := \beta H'(m_*) + \theta_* = 0, \tag{3.31}$$

由（1.31）。由于 $G''(m) = \beta H''(m)$，由泰勒定理可得

$$R_N(u) = N\left[G\left(m_* + \frac{u}{\sqrt{N}}\right) - G(m_*)\right] = \frac{\beta H''(m_*)}{2}u^2 + r_N(u), \tag{3.32}$$

with

$$\sup_{u\in K}|r_N(u)| \to 0, \quad \text{as } N \to +\infty, \tag{3.33}$$

对于任意紧集 $K \subset \mathbb{R}$。

然而，在这个阶段我们只知道 r_N 在紧集上一致收敛于零，当 $N \to +\infty$ 时，而不是在整个 $\mathbb{R}$ 上。为规避这一问题，我们引入一个光滑截断函数 $\chi_M(u)$，以及一个满足下式的整数 $M \geq 1$：

$$\chi_M(u) = 1 \quad \text{for } |u| \leq M, \qquad \chi_M(u) = 0 \quad \text{for } |u| \geq 2M,$$

以及 $0 \leq \chi_M(u) \leq 1$ 对所有 $u \in \mathbb{R}$。于是，（3.32）和中心极限定理（3.29）意味着我们有

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\left[\chi_M(U_N)U_N^k e^{-R_N(U_N)}\right] \longrightarrow \mathbb{E}\left[\chi_M(\xi)\xi^k e^{-\alpha\xi^2}\right], \quad \text{as } N \to +\infty, \tag{3.34}$$

由 α giv 于 (3.1) 给出。注意，α 恰好是 (u^2 在 (3.32) 中的系数。

为了去掉截断，只需证明以下尾部估计

$$\lim_{M\to+\infty}\limsup_{N\to+\infty}\mathbb{E}_{\theta_*}\left[|U_N|^k e^{-R_N(U_N)}; |U_N| > M\right] = 0. \tag{3.35}$$

应用 (3.35)，取指数 0 和 k，我们选择足够大的 M_ε，使得

$$\limsup_{N\to+\infty}\mathbb{E}_{\theta_*}\left[(1+|U_N|^k)e^{-R_N(U_N)}; |U_N| > M\right] < \varepsilon, \quad \text{for all } M > M_\varepsilon, \tag{3.36}$$

然后，对所有 $M > M_\varepsilon$ pick $N_\varepsilon(M)$，取足够大，使得

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\left[(1+|U_N|^k)e^{-R_N(U_N)}; |U_N| > M\right] < 2\varepsilon, \quad \text{for all } M > M_\varepsilon \text{ and } N > N_\varepsilon(M). \tag{3.37}$$

接下来，对于任意的 $M \geq 1$ 和 $N \geq 1$，我们分解为

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{-R_N(U_N)}\right] &= \mathbb{E}_{\theta_*}\left[\chi_M(U_N)e^{-R_N(U_N)}\right] + \mathbb{E}_{\theta_*}\left[(1-\chi_M(U_N))e^{-R_N(U_N)}\right] \\ &= I_{M,N} + II_{M,N}.\end{aligned} \tag{3.38}$$

对于第一项，根据（3.34），我们有：

$$I_{M,N} \to \mathbb{E}\big[\chi_M(\xi)e^{-\alpha\xi^2}\big], \quad \text{as } N \to +\infty, \text{ for all } M \geq 1, \tag{3.39}$$

使得存在 $N'_\varepsilon(M)$，满足

$$\Big|I_{M,N} - \mathbb{E}\big[\chi_M(\xi)e^{-\alpha\xi^2}\big]\Big| < \varepsilon, \quad \text{for all } N > N'_\varepsilon(M). \tag{3.40}$$

此外，我们可以找到 M'_ε，使得

$$\Big|\mathbb{E}\big[\chi_M(\xi)e^{-\alpha\xi^2}\big] - \mathbb{E}\big[e^{-\alpha\xi^2}\big]\Big| < \varepsilon \quad \text{for all } M > M'_\varepsilon. \tag{3.41}$$

右侧的第二项（3.38）可利用（3.37）进行估计：

$$II_{M,N} \leq \mathbb{E}_{\theta_*}\big[e^{-R_N(U_N)}; |U_N| > M\big] < 2\varepsilon, \quad \text{for all } M > M_\varepsilon \text{ and } N > N_\varepsilon(M). \tag{3.42}$$

给定 $\varepsilon > 0$，我们取 $M > \max(M_\varepsilon, M'_\varepsilon)$ 和 $N > \max(N_\varepsilon(M), N'_\varepsilon(M))$，并记

$$\begin{aligned}\Big|\mathbb{E}_{\theta_*}\big[e^{-R_N(U_N)}\big] - \mathbb{E}\big[e^{-\alpha\xi^2}\big]\Big| \leq \Big|I_{M,N} - \mathbb{E}\big[\chi_M(\xi)e^{-\alpha\xi^2}\big]\Big| + \Big|\mathbb{E}\big[\chi_M(\xi)e^{-\alpha\xi^2}\big] - \mathbb{E}\big[e^{-\alpha\xi^2}\big]\Big| \\ + II_{M,N} \leq 20\varepsilon,\end{aligned} \tag{3.43}$$

由（3.40）、（3.41）和（3.42）。

几乎完全相同的论证表明

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\left[U_N^k e^{-R_N(U_N)}\right] \longrightarrow \mathbb{E}\big[\xi^k e^{-\alpha\xi^2}\big].$$

我们看到

$$\frac{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[U_N^k e^{-R_N(U_N)}\right]}{\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{-R_N(U_N)}\right]} \to \frac{\mathbb{E}\big[\xi^k e^{-\alpha\xi^2}\big]}{\mathbb{E}\big[e^{-\alpha\xi^2}\big]}, \tag{3.44}$$

这就是（3.27）。

3.3 尾部估计的证明

因此，要完成引理3.1 的证明，只需证明尾部估计（3.35）。我们首先提出如下断言。

引理 3.2。 对于任意 $\varepsilon > 0$，存在 $C_\varepsilon > 0$，使得对所有 $N \in \mathbb{N}$，都有

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big] \leq C_\varepsilon e^{\varepsilon N}. \tag{3.45}$$

证明。 Varadhan 引理（附录中的定理 A.2）意味着

$$\lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \log\Big(\int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H(m)} P_N(dm)\Big) = \sup_{m\in\mathbb{R}}\big[-\beta H(m) - I(m)\big] = \sup_{m\in\mathbb{R}}[-\Phi(m)] = -\Phi(m_*). \tag{3.46}$$

我们还有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big] &= \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[\exp\Big(-N\Big[G\Big(m_*+\frac{U_N}{\sqrt{N}}\Big)-G(m_*)\Big]\Big)\Big]\\ &= \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[\exp\Big(-N\Big[\beta H\Big(m_*+\frac{U_N}{\sqrt{N}}\Big)-\beta H(m_*)+\frac{\theta_* U_N}{\sqrt{N}}\Big]\Big)\Big]\\ &= \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[\exp\Big(-N\Big[\beta H(\bar{X}_N)-\beta H(m_*)+\theta_*(\bar{X}_N-m_*)\Big]\Big)\Big].\end{aligned} \tag{3.47}$$

这里，我们已回到 X_N 在（3.18）中定义的变量。现在，如同（3.22），但反向推导，并利用（3.47）及记号

$$\bar{x}_N := N^{-1}\sum_{j=1}^{N} x_j,$$

我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big] &= \int_{\mathbb{R}^N}\exp\Big(-N\Big[\beta H(\bar{x}_N)-\beta H(m_*)+\theta_*(\bar{x}_N-m_*)\Big]\Big)\\ &\quad\times e^{\theta_* x_1+\cdots+\theta_* x_N-N\Lambda(\theta_*)}\rho(x_1)\ldots\rho(x_N)dx_1\ldots dx_N\\ &= e^{-N\Lambda(\theta_*)+N\beta H(m_*)+N\theta_* m_*}\int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H(m)}P_N(dm)\\ &= e^{-N\Lambda(\theta_*)+N\Phi(m_*)-NI(m_*)+N\theta_* m_*}\int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H(m)}P_N(dm).\end{aligned} \tag{3.48}$$

此外，由于函数 $\Lambda(\theta)$ 在 θ上严格凸，函数 $\theta m-\Lambda(\theta)$ 至多取得一个最大值；并且由（1.30）可知，该最大值在 $\theta=\theta_*$处取得。也就是说，我们有

$$I(m_*)=\sup_{\theta\in\mathbb{R}}[\theta m_*-\Lambda(\theta)]=m_*\theta_*-\Lambda(\theta_*). \tag{3.49}$$

将此恒等式代入（3.48），得到

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]=e^{N\Phi(m_*)}\int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H(m)}P_N(dm). \tag{3.50}$$

回想（3.46），可得

$$\lim_{N\to+\infty}\frac{1}{N}\log\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big]=\Phi(m_*)+\lim_{N\to+\infty}\frac{1}{N}\log\Big[\int_{\mathbb{R}} e^{-\beta N H(m)}P_N(dm)\Big]=0. \tag{3.51}$$

现在，（3.45）即得。 □

我们转而证明尾部估计（3.35）。取 $\delta>0$，其值稍后确定，并分别考虑事件 $\{|U_N|\geq\delta\sqrt{N}\}$和 $\{M\leq|U_N|\leq\delta\sqrt{N}\}$。首先，我们考察事件 $\{|U_N|\geq\delta\sqrt{N}\}$。将恒等式（3.25）应用于函数

$$F_N(m)=N^{k/2}|m-m_*|^k\mathbf{1}_{\{|m-m_*|>\delta\}},$$

我们得到

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[|U_N|^k e^{-R_N(U_N)}; |U_N| > \delta\sqrt{N}\Big] &= \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[e^{-R_N(U_N)}\Big] N^{k/2} \int_{|m-m_*|>\delta} |m-m_*|^k \, d\nu^{(N)}(m) \\ &\le c_1 e^{-c_2 N}.\end{aligned} \tag{3.52}$$

在上面的最后一步中，我们使用了界（2.1）和（3.45）。事实上，由于

$$|m-m_*|^k \le C_k e^{|m|},$$

估计（2.1）将积分界定为 $Ce^{-\gamma N}$ 对于某个 $\gamma > 0$。接下来，我们取（3.45），其中 $\varepsilon = \gamma/2$。随后，通过减小衰减指数（例如取为 $\gamma/4$），即可吸收剩余因子 $N^{k/2}$。

剩下需要考虑事件 $\{M \le |U_N| \le \delta\sqrt{N}\}$。注意到

$$G'(m_*) = \beta H'(m_*) + \theta_* = 0, \tag{3.53}$$

根据（1.31），而

$$G''(m_*) = \beta H''(m_*) = A_* - \frac{1}{\sigma^2}, \tag{3.54}$$

根据（3.1）和（3.3）。固定 $0 < \varepsilon < A_*$。我们可以选择 $h_\varepsilon > 0$ 使得

$$G(m_*+h) - G(m_*) \ge \Big(A_* - \frac{1}{\sigma^2} - \varepsilon\Big)\frac{h^2}{2}, \quad \text{for } |h| \le h_\varepsilon. \tag{3.55}$$

令

$$a_\varepsilon = \max\Big\{0, \frac{1}{2\sigma^2} + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{A_*}{2}\Big\} = \frac{1}{2}\max\Big\{0, \frac{1}{\sigma^2} + \varepsilon - A_*\Big\}. \tag{3.56}$$

我们的选择 ε 确保

$$0 \le a_\varepsilon < \frac{1}{2\sigma^2}. \tag{3.57}$$

由 (3.55) 和 (3.56) 可知，只要

$$0 < \delta \le h_\varepsilon, \tag{3.58}$$

我们就有

$$-R_N(u) = -N\Big[G\Big(m_* + \frac{u}{\sqrt{N}}\Big) - G(m_*)\Big] \le a_\varepsilon u^2, \quad \text{for } |u| \le \delta\sqrt{N}. \tag{3.59}$$

我们现在使用（3.59）来得到

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\Big[|U_N|^k e^{-R_N(U_N)};\, M \le |U_N| \le \delta\sqrt{N}\Big] &\le \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[|U_N|^k e^{a_\varepsilon U_N^2}; M \le |U_N| \le \delta\sqrt{N}\Big] \\ &\le \sum_{p=M}^{[\delta\sqrt{N}]} \mathbb{E}_{\theta_*}\Big[|U_N|^k e^{a_\varepsilon U_N^2}; p \le |U_N| \le p+1\Big] \\ &\le \sum_{p=M}^{[\delta\sqrt{N}]} (p+1)^k e^{a_\varepsilon (p+1)^2} \mathbb{P}_{\theta_*}(|U_N| \ge p).\end{aligned} \tag{3.60}$$

为了估计概率 $\mathbb{P}_{\theta_*}(|U_N| \geq p)$ 在（3.60）中，我们先作出几点初步观察。由于 $\theta_* \in \mathrm{int}(D)$，存在 $t_0 > 0$ 使得

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{t(X_1-m_*)}\right] < +\infty, \quad \text{for all } |t| \leq t_0, \tag{3.61}$$

并且我们可以定义对数矩母函数

$$K(t) = \log \mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{t(X_1-m_*)}\right], \quad |t| \leq t_0. \tag{3.62}$$

由（3.16）可知

$$\mathbb{E}_{\theta_*}(X_1 - m_*)^2 = \sigma^2,$$

我们有

$$K(t) = \frac{\sigma^2 t^2}{2} + o(t^2), \quad \text{as } t \to 0. \tag{3.63}$$

现在我们固定 b，使得

$$a_\varepsilon < b < 1/(2\sigma^2).$$

我们可以减小 $t_0 > 0$，使得

$$K(t) \leq \frac{t^2}{4b}, \quad \text{for all } |t| \leq t_0. \tag{3.64}$$

现在我们固定 $\delta > 0$ 使其除了满足（3.58）之外，还满足

$$0 < \delta \leq \min\left\{h_\varepsilon, \frac{t_0}{2b}\right\}.$$

因此，参数 ε、b、t_0 和 δ 均独立于 M 和 N。现在，我们利用 X_k 与（3.64）的独立性来估计 $\mathbb{P}_{\theta_*}(|U_N| \geq p)$，如下所示。首先，对于任意 $t \in (0, t_0\sqrt{N}]$ 和 $p \geq 1$,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_{\theta_*}(U_N \geq p) &= \mathbb{P}_{\theta_*}\left(e^{tU_N} \geq e^{tp}\right) \leq e^{-tp}\mathbb{E}_{\theta_*}(e^{tU_N}) = e^{-tp}\left(\mathbb{E}_{\theta_*}\left[e^{t(X_1-m_*)/\sqrt{N}}\right]\right)^N \\ &= e^{-tp}\exp\left[NK\left(\frac{t}{\sqrt{N}}\right)\right] \leq e^{-tp}e^{Nt^2/(4Nb)} = e^{-tp+t^2/(4b)}.\end{aligned} \tag{3.65}$$

给定任意 $p \leq [\delta\sqrt{N}]$，我们知道

$$t_p := 2bp \leq t_0\sqrt{N}, \tag{3.66}$$

根据我们对 δ 的选择，这保证了

$$\delta \leq \frac{t_0}{2b}. \tag{3.67}$$

因此，我们可以在 $t = t_p$（3.65）中使用它。这给出

$$\mathbb{P}_{\theta_*}(U_N \geq p) \leq e^{-bp^2}, \quad \text{for all } 1 \leq p \leq [\delta\sqrt{N}]. \tag{3.68}$$

同样的计算表明

$$\mathbb{P}_{\theta_*}(U_N \le -p) \le e^{-bp^2}, \quad \text{for all } 1 \le p \le [\delta\sqrt{N}]. \tag{3.69}$$

回到（3.60）并使用（3.68）-（3.69），我们得到

$$\mathbb{E}_{\theta_*}\left[|U_N|^k e^{-R_N(U_N)}; M \le |U_N| \le \delta\sqrt{N}\right] \le C\sum_{p=M}^{\delta\sqrt{N}} (p+1)^k e^{a_\varepsilon(p+1)^2 - bp^2}. \tag{3.70}$$

由于 $b > a_\varepsilon$ 按照我们上面的选择，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\theta_*}\left[|U_N|^k e^{-R_N(U_N)};\ M \le |U_N| \le \delta\sqrt{N}\right] &\le C\sum_{p=M}^{\infty} (p+1)^k e^{a_\varepsilon(p+1)^2 - bp^2} \\ &\le C\sum_{p=M}^{\infty} (p+1)^k e^{2bp - (b-a_\varepsilon)p^2} \to 0, \quad \text{as } M \to +\infty.\end{aligned} \tag{3.71}$$

现在，（3.35）由（3.52）和（3.71）推出。这就完成了（3.27）的证明，也完成了引理 3.1的证明。 □

定理 1.3 的证明

本节证明定理 1.3。我们首先使用引理 3.1 得到经验均值的联合高斯极限。随后通过泰勒展开得到第（i）部分中功的极限分布。为推出第（ii）和（iii）部分，我们对重标度功的矩进行界定，并令其期望和方差取极限。最后一步将匹配情形和非匹配情形一并处理。

4.1 联合高斯极限

我们设

$$U_{i,N} = \sqrt{N}\,(M_i^{(N)} - m_i), \qquad i = 0, 1. \tag{4.1}$$

这里， $M_i^{(N)}$ 服从吉布斯分布 $\nu_i^{(N)}$ 。因此$U_{i,\ N}$ 描述吉布斯测度下的涨落，而 U_N 在第 3.1 节中描述指数倾斜乘积测度下的涨落。

引理 4.1. 重标度后的经验均值满足

$$(U_{0,N}, U_{1,N}) \Longrightarrow \left(\frac{\xi_0}{\sqrt{A_0}}, \frac{\xi_1}{\sqrt{A_1}}\right), \tag{4.2}$$

其中， ξ_0、 ξ_1 为相互独立的标准正态随机变量。

证明。 引理 3.1 指出，对于每个整数 $k \geq 0$,

$$\lim_{N\to\infty} \mathbb{E}[U_{i,N}^k] = \frac{\mathbb{E}[\xi^k e^{-\alpha_i \xi^2}]}{\mathbb{E}[e^{-\alpha_i \xi^2}]}, \tag{4.3}$$

其中 ξ 是方差为 σ_i^2的中心高斯随机变量。

由于 $\sigma_i^{-2} + 2\alpha_i = A_i > 0$，因此（4.3）的右侧具有如下形式

$$\frac{\mathbb{E}[\xi^k e^{-\alpha_i \xi^2}]}{\mathbb{E}[e^{-\alpha_i \xi^2}]} = \frac{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} z^k e^{-z^2/(2\sigma_i^2)-\alpha_i z^2}\, dz}{\displaystyle\int_{\mathbb{R}} e^{-z^2/(2\sigma_i^2)-\alpha_i z^2}\, dz} = \int_{\mathbb{R}} z^k \sqrt{\frac{A_i}{2\pi}}\, e^{-A_i z^2/2}\, dz. \tag{4.4}$$

因此，$U_{i,N}$ 的所有矩都收敛到方差为 A_i^{-1} 的中心高斯分布的矩。

还需注意，矩的收敛意味着依分布收敛。事实上，切比雪夫不等式和矩的收敛表明，$U_{i,N}$的分布族是紧的。这是因为对任意 $R > 0$ ，都有

$$\mathbb{P}\big[|U_{i,N}| > R\big] \leq \frac{1}{R^k}\mathbb{E}\big[|U_{i,N}|^k \mathbf{1}_{\{|U_{i,N}|>R\}}\big] \leq \frac{1}{R^k}\mathbb{E}\big[|U_{i,N}|^k\big] \leq \frac{C_k}{R^k} \to 0, \quad \text{as } R \to +\infty, \tag{4.5}$$

关于 N一致。此外，$U_{i,N}$ 的任何子列极限都必须具有高斯矩，这是由（4.3）-（4.4）得出的。最后，高斯分布由其矩唯一确定；参见 [1,定理 30.1 和例 30。1]。由此可得

$$U_{i,N} \Longrightarrow \frac{\xi_i}{\sqrt{A_i}}.$$

系统在 $i = 0,1$ 时的独立性给出了联合收敛（4.2）。 □

4.2 功的极限分布

定理 *1.3(i)* 的证明。 首先，假设 $m_0 \neq m_1$。由于 ΔH 是 C^2，因此存在 $C > 0$和 $\ell > 0$ ，使得

$$\Delta H(m_i + h) = \Delta H(m_i) + d_i h + r_i(h), \quad |r_i(h)| \leq C h^2, \tag{4.6}$$

对于 $i = 0,\ 1$ 以及所有 $|h| \leq \ell$。这里， d_i 由（1.35）定义。

回顾一下，

$$M_i^{(N)} = m_i + \frac{U_{i,N}}{\sqrt{N}},$$

而w_N 由（1.8）—（1.10）给出：

$$\mathsf{w}_N = w(M_0^{(N)}, M_1^{(N)}) = \Delta H(M_0^{(N)}) - \Delta H(M_1^{(N)}). \tag{4.7}$$

代入 将其代入两个泰勒展开（4.6）并相减，可得 n

$$\sqrt{N}\,(\mathsf{w}_N - w_\infty) = d_0 U_{0,N} - d_1 U_{1,N} + \mathcal{R}_N, \tag{4.8}$$

其中

$$\mathcal{R}_N = \sqrt{N}\left[r_0\left(\frac{U_{0,N}}{\sqrt{N}}\right) - r_1\left(\frac{U_{1,N}}{\sqrt{N}}\right)\right].$$

现在证明 $\mathcal{R}_N$ 依概率收敛于零。由紧性可知，对于每个 $\varepsilon > 0$，我们都可以选取 $K_\varepsilon > 0$，使得

$$\mathbb{P}\big(|U_{0,N}| \le K_\varepsilon,\ |U_{1,N}| \le K_\varepsilon\big) \ge 1 - \varepsilon \tag{4.9}$$

对所有 N均成立。在此事件上，当 N充分大时，我们有

$$\frac{|U_{i,N}|}{\sqrt{N}} < \ell, \tag{4.10}$$

且（4.6）蕴含

$$|\mathcal{R}_N| \le \frac{C}{\sqrt{N}}\big(U_{0,N}^2 + U_{1,N}^2\big) \le \frac{2CK_\varepsilon^2}{\sqrt{N}}. \tag{4.11}$$

结合（4.9）和（4.11），我们看到

$$\mathcal{R}_N \to 0 \text{ in probability}, \tag{4.12}$$

如所声称。由（4.2）和（4.12），（4.8）右侧依分布收敛于

$$\frac{d_0}{\sqrt{A_0}}\xi_0 - \frac{d_1}{\sqrt{A_1}}\xi_1,$$

它是一个方差为 V 的中心高斯分布。这证明了（1.38）。

现在假设 $m_0 = m_1 = m_*$。由于 m_* 是 Φ_0 和 Φ_1 的最小值，我们有

$$I'(m_*) + \beta H_i'(m_*) = 0, \qquad i = 0, 1.$$

将这些方程相减，可得

$$\Delta H'(m_*) = 0. \tag{4.13}$$

此外，回想一下（1.27）中 A_i 和（1.37）中 c 的定义，我们得到

$$A_1 - A_0 = \beta\big(H_1''(m_*) - H_0''(m_*)\big) = \beta c.$$

m_* 附近的二阶泰勒展开形式为

$$\Delta H(m_* + h) = \Delta H(m_*) + \frac{\Delta H''(m_*)}{2}h^2 + h^2 q(h), \qquad \lim_{h\to 0} q(h) = 0. \tag{4.14}$$

因此，在这种情况下，我们有

$$N\mathsf{w}_N = \frac{c}{2}\big(U_{0,N}^2 - U_{1,N}^2\big) + o_{\mathbb{P}}(1).$$

上式中的最后一项依概率收敛于零，所依据的论证与（4.12）的证明基本相同。

□

4.3 重标度功的矩界

令

$$a_N = \begin{cases} \sqrt{N}, & m_0 \neq m_1, \\ N, & m_0 = m_1, \end{cases} \qquad Y_N = a_N(\mathsf{w}_N - w_\infty). \tag{4.15}$$

回想一下， $w_\infty = 0$ 当 $m_0 = m_1$时。因此， Y_N 恰好是式（1.38）或式（1.39）中出现的重标度随机变量。

下面的引理使我们能够从依分布收敛推出期望和方差的收敛。为此，只需对四阶矩给出一个界。我们陈述所有偶数阶矩的界，因为证明相同，而且还能得到定理1.3之后所述的所有矩的收敛。

引理 4.2 （矩的界）。对于每个整数 $k \geq 1$，存在 $C_k > 0$ 和$N_k \in \mathbb{N}$ ，使得

$$\mathbb{E}|Y_N|^{2k} \leq C_k, \qquad N \geq N_k. \tag{4.16}$$

特别地，当 N充分大时， Y_N 的四阶矩均有界。

证明。根据 w_N 和 w_∞的定义，我们有

$$Y_N = a_N\big[\Delta H(M_0^{(N)}) - \Delta H(m_0) - \Delta H(M_1^{(N)}) + \Delta H(m_1)\big].$$

利用初等不等式 $|x-y|^{2k} \leq 2^{2k-1}(|x|^{2k} + |y|^{2k})$，我们得到

$$\mathbb{E}|Y_N|^{2k} \leq 2^{2k-1} \sum_{i=0}^{1} a_N^{2k} \int_{\mathbb{R}} |\Delta H(m) - \Delta H(m_i)|^{2k}\, d\nu_i^{(N)}(m). \tag{4.17}$$

剩下的工作是对右侧的两项进行界定，且该界对所有充分大的 N 一致成立。

固定 $i = 0, 1$ 以及一个充分小的 $\delta > 0$。我们将 (4.17) 中的积分拆分到以下区域$|m - m_i| \leq \delta$ 和 $|m - m_i| > \delta$。根据假设 (1.25)，存在常数 C， $\kappa > 0$，它们可以依赖于 k ，但不依赖于 N，使得

$$|\Delta H(m) - \Delta H(m_i)|^{2k} \leq Ce^{\kappa|m|}.$$

Th引理 2.1中的集中估计 (2.1)，取 $r = \delta$，现在推出 s

$$\begin{aligned} a_N^{2k} \int_{|m-m_i|>\delta} |\Delta H(m) - \Delta H(m_i)|^{2k}\, d\nu_i^{(N)}(m) \\ \leq Ca_N^{2k} \int_{|m-m_i|>\delta} e^{\kappa|m|}\, d\nu_i^{(N)}(m) \leq CN^{2k}e^{-\gamma N}, \end{aligned} \tag{4.18}$$

对于某个 C， $\gamma > 0$以及所有充分大的 N。这里我们用到了 $a_N \leq N$。特别地，该项当 $N \to +\infty$ 时趋于零。

同时，我们可以使用 ΔH在区域 $|m - m_i| \leq \delta$ 中的泰勒展开。如果$m_0 \neq m_1$，那么

$$|\Delta H(m) - \Delta H(m_i)| \leq C|m - m_i|, \qquad |m - m_i| \leq \delta,$$

且 $a_N = \sqrt{N}$。因此，

$$\begin{aligned} a_N^{2k} \int_{|m-m_i|\le\delta} |\Delta H(m) - \Delta H(m_i)|^{2k}\, d\nu_i^{(N)}(m) \\ \le C N^k \int_{\mathbb{R}} |m - m_i|^{2k}\, d\nu_i^{(N)}(m) = C\mathbb{E}|U_{i,N}|^{2k}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

最后一个表达式由引理3.1界定。

如果 $m_0 = m_1 = m_*$，那么 $\Delta H'(m_*) = 0$，由 (4.13)。选择 $\delta > 0$，使泰勒展开 (4.14) 对 $|h| \le \delta$ 成立，并且 $q(h)$ 在此区间上有界。因此

$$|\Delta H(m) - \Delta H(m_*)| \le C|m - m_*|^2, \qquad |m - m_*| \le \delta.$$

由于 $a_N = N$，我们得到

$$\begin{aligned} a_N^{2k} \int_{|m-m_*|\le\delta} |\Delta H(m) - \Delta H(m_*)|^{2k}\, d\nu_i^{(N)}(m) \\ \le C N^{2k} \int_{\mathbb{R}} |m - m_*|^{4k}\, d\nu_i^{(N)}(m) = C\mathbb{E}|U_{i,N}|^{4k}. \end{aligned} \tag{4.20}$$

这个表达式也由引理3.1界定。结合 (4.18) 与 (4.19) 或 (4.20)，再利用 (4.17)，即可证明 (4.16)。□

4.4 期望与标准差

现在我们同时推导定理1.3中匹配情形和非匹配情形的 (ii) 与 (iii) 部分。

根据上面已证明的第 (i) 部分，Y_N 依分布收敛于随机变量 Y。在非匹配情形 $m_0 \ne m_1$下，极限分布为 $\mathcal{N}(0,\ V)$：因此 Y是方差为 V的中心高斯随机变量。在匹配情形 $m_0 = m_1$下，我们取

$$Y = \zeta = \frac{c}{2A_0}\xi_0^2 - \frac{c}{2A_1}\xi_1^2,$$

其中 $\xi_0,\ \xi_1$ 是相互独立的标准正态随机变量，每个变量的均值为零、方差为一。

我们断言

$$\mathbb{E}Y_N \longrightarrow \mathbb{E}Y, \quad \mathbb{E}Y_N^2 \longrightarrow \mathbb{E}Y^2. \tag{4.21}$$

为证明这一断言，注意到引理 $k = 2$ 中的情形 4.2 意味着的四阶矩一致有界 Y_N：存在 $C > 0$ 和 $N_0 \in \mathbb{N}$ 使得

$$\mathbb{E}|Y_N|^4 \le C, \quad \text{for all } N \ge N_0. \tag{4.22}$$

这说明前两个矩一致可积：

$$\sup_{N\ge N_0} \mathbb{E}\big[|Y_N|^j \mathbf{1}_{\{|Y_N|>R\}}\big] \le \frac{C}{R^{4-j}} \to 0, \qquad \text{as } R \to +\infty, \text{ for } j = 1, 2. \tag{4.23}$$

综上，第一矩和第二矩的一致可积性与依概率收敛共同推出（4.21）。

现在只需计算极限分布的矩。对于高斯极限，它们为

$$\mathbb{E}Y = 0, \qquad \mathrm{Var}(Y) = V.$$

对于匹配极限，利用 ξ_0、ξ_1、$\mathbb{E}\xi_i^2 = 1$ 的独立性以及 $\mathrm{Var}(\xi_i^2) = 2$，我们得到

$$\mathbb{E}\zeta = \frac{c}{2}\left(\frac{1}{A_0} - \frac{1}{A_1}\right), \qquad \mathrm{Var}(\zeta) = \frac{c^2}{2}\left(\frac{1}{A_0^2} + \frac{1}{A_1^2}\right). \tag{4.24}$$

由于 $c = (A_1 - A_0)/\beta$，第一个表达式等于

$$\mathbb{E}\zeta = \frac{(A_1 - A_0)^2}{2\beta A_0 A_1}.$$

这些公式给出（1.40）、（1.41）、（1.42）和（1.43）。当 w_∞ 时$m_0 \neq m_1$ 的严格正性已在定理 1.3之后作了解释。定理的证明至此完成。 □

注 4.3。 同样的论证结合引理4.2给出了所有矩的收敛性。这证明了定理 1.3之后关于矩的附加断言。

5 一个例子：高斯振子

本节讨论高斯振子，这是前几节所讨论的一般系统的一个例子。这个简单系统的优点在于，可以精确计算吉布斯测度、功的分布、其期望和方差，并与定理1.3的一般结果进行比较。我们按照该定理中相同的顺序，讨论功的这三个方面。

5.1 吉布斯测度

考虑 N 个独立振子，其位移 s_i 服从正态分布 $\mathcal{N}(0, 1)$。假设每粒子能量具有如下形式

$$H_{q,b}(m) = bm^2 + qm, \tag{5.1}$$

平均位移为 m，由 (1.5) 给出，耦合常数为 $b > 0$，且 $q \in \mathbb{R}$。微观高斯密度为

$$\rho(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-|s|^2/2}, \tag{5.2}$$

且 $\mathbb{R}^N$ 上的吉布斯测度为

$$d\mu_{q,b}^{(N)}(s_1, \ldots, s_N) = Z_N(q,b)^{-1} e^{-\beta N H_{q,b}(m)}\, d\gamma_N(s_1, \ldots, s_N),$$

with

$$d\gamma_N = (2\pi)^{-N/2} \exp\Big\{ -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N s_i^2 \Big\} ds_1 \cdots ds_N.$$

5.1.1 配分函数

配分函数

$$Z_N = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-\frac{1}{2}\sum_i s_i^2} e^{-\beta N(bm^2+qm)} \frac{ds_1 \dots ds_N}{(2\pi)^{N/2}}$$

可按如下方式计算。引入正交归一基

$$\begin{aligned} v_k &= \frac{1}{\sqrt{k+k^2}}(e_1 + \dots + e_k - k e_{k+1}), \quad k = 1, \dots, N-1, \\ v_N &= \frac{1}{\sqrt{N}}(e_1 + \dots + e_N). \end{aligned} \tag{5.3}$$

相应的坐标为

$$\begin{aligned} u_k &= (s \cdot v_k) = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k+1}}\Big(\frac{s_1 + \dots + s_k}{k} - s_{k+1}\Big), \quad k = 1, \dots, N-1, \\ u_N &= (s \cdot v_N) = \frac{s_1 + \dots + s_N}{\sqrt{N}}. \end{aligned} \tag{5.4}$$

于是有

$$\sum_{k=1}^N u_k^2 = \sum_{k=1}^N s_k^2, \quad m = \frac{1}{\sqrt{N}} u_N, \tag{5.5}$$

and

$$Z_N = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-\frac{1}{2}\sum_i s_i^2} e^{-\beta N(bm^2+qm)} \frac{ds_1 \dots ds_N}{(2\pi)^{N/2}} = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-\frac{1}{2}\sum_i u_i^2} e^{-\beta(bu_N^2 + \sqrt{N} q u_N)} \frac{du_1 \dots du_N}{(2\pi)^{N/2}}. \tag{5.6}$$

对 $u_1, \dots, u_{N-1}$ 进行积分并令 $x = \sqrt{N} u_N$，得到

$$\begin{aligned} Z_N &= \int_{\mathbb{R}} \exp\Big[-\frac{x^2}{2N} - \beta\Big(b\frac{x^2}{N} + qx\Big)\Big] \frac{dx}{\sqrt{2\pi N}} = \int_{\mathbb{R}} \exp\Big[-\frac{(1+2b\beta)x^2}{2N} - \beta q x\Big] \frac{dx}{\sqrt{2\pi N}} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \exp\Big[-\frac{y^2}{2N} - \frac{\beta q}{\sqrt{1+2b\beta}} y\Big] \frac{dy}{\sqrt{2\pi(1+2b\beta)N}} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \exp\Big[-\frac{1}{2N}\Big(y + \frac{N\beta q}{\sqrt{1+2b\beta}}\Big)^2 + \frac{N\beta^2 q^2}{2(1+2b\beta)}\Big] \frac{dy}{\sqrt{2\pi(1+2b\beta)N}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(1+2b\beta)}} \exp\Big[\frac{N\beta^2 q^2}{2(1+2b\beta)}\Big]. \end{aligned} \tag{5.7}$$

因此，对于固定的 q，在平衡态下，每个振子的自由能为

$$-\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{\beta q^2}{2(1+2\beta b)} + O\big(N^{-1}\big). \tag{5.8}$$

5.1.2 m 上的吉布斯测度

接下来，我们明确计算测度 $\nu_{q\,b}^{(N)}{}_{,}(m)$ 的推前 $d\mu_{q\,b}^{(N)}{}_{,}$到宏观变量 m。任取一个连续紧支撑函数 $f(m)$。通过与式 (5.4)-(5.6) 中非常相近的计算可得

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^N} f(m)d\mu_{q,b}^{(N)} &= Z_N^{-1}\int_{\mathbb{R}} f\Big(\frac{x}{N}\Big)\exp\Big[-\frac{x^2}{2N}-\beta\Big(b\frac{x^2}{N}+qx\Big)\Big]\frac{dx}{\sqrt{2\pi N}}\\ &= Z_N^{-1}\int_{\mathbb{R}} f(y)\exp\Big[-\frac{(1+2b\beta)Ny^2}{2}-\beta qNy\Big]\frac{\sqrt{N}dy}{\sqrt{2\pi}}.\end{aligned} \tag{5.9}$$

现在我们可以利用（5.7）得到

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^N} f(m)d\mu_{q,b}^{(N)} &= \int_{\mathbb{R}} f(y)\exp\Big[-\frac{(1+2b\beta)N}{2}\Big[y^2+\frac{2\beta qy}{1+2b\beta}+\frac{\beta^2q^2}{(1+2b\beta)^2}\Big]\frac{\sqrt{(1+2b\beta)N}dy}{\sqrt{2\pi}}\\ &= \int_{\mathbb{R}} f(y)\exp\Big[-\frac{(1+2b\beta)N}{2}\Big(y+\frac{\beta q}{1+2b\beta}\Big)^2\Big]\frac{\sqrt{(1+2b\beta)N}dy}{\sqrt{2\pi}}.\end{aligned} \tag{5.10}$$

由（5.10）可知，吉布斯测度是一个高斯分布

$$d\nu_{q,b}^{(N)}(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_N^2(q,b)}}e^{-|m-m_*(q,b)|^2/(2\tau_N^2(q,b))}dm \tag{5.11}$$

其均值为

$$m_*(q,b) = -\frac{\beta q}{1+2\beta b}, \tag{5.12}$$

其方差为

$$\tau_N^2(q,b) = \frac{1}{(1+2b\beta)N}\to 0,\quad \text{as } N\to+\infty. \tag{5.13}$$

特别地，我们有如下弱收敛

$$\nu_{q,b}^{(N)} \Rightarrow \delta(m-m_*(q,b)),\quad \text{as } N\to+\infty.$$

5.2 跳变循环中的功

本节讨论第 5.1 节所述系统经历瞬时跳跃时会发生什么。假设刚度参数从 b_0 变为 b_1，外场从 q_0 变为 $q_1=q_0+\delta q$。当 $b_1\neq b_0$时，由式（ $m_*(q_0,b_0)$ 和 $m_*(q_1,b_1)$ 给出的两个极限平衡宏观态（5.12）重合，条件为

$$q_0 = q_0^* := \delta q\,\frac{1+2\beta b_0}{2\beta(b_1-b_0)}. \tag{5.14}$$

对于这个值， [5, 6] 中的跃迁被认定为热力学极限下的超快跃迁。

如果随后再将参数从 $(q_0^*+\delta q, b_1)$ 改回 (q_0^*, b_0)，反向转变同样是超快的。在极限平衡宏观态的层面上，这看起来可能像是由哈密顿量瞬时变化驱动的可逆循环，而

标准热力学中的可逆过程通常是准静态的；例如参见[3, 第 43]节。事实上，这种表面上的可逆性促使我们研究完成该循环所需的功。命题 1.1 和定理 1.3(ii) 表明，只要两个有限的N 吉布斯测度不同，该有限N 循环仍不可逆。接下来，我们计算高斯振子的功的分布、期望及其方差。

令

$$H_i(m) = H_{q_i,b_i}(m), \qquad \nu_i^{(N)} = \nu_{q_i,b_i}^{(N)},$$
$$m_i = m_*(q_i, b_i), \qquad \tau_{i,N} = \tau_N(q_i, b_i), \qquad i = 0, 1.$$

由于标准正态密度满足 $I(m) = m^2/2$ ，因此有

$$\Phi_i(m) = \frac{m^2}{2} + \beta(b_i m^2 + q_i m), \qquad A_i = \Phi_i''(m_i) = 1 + 2\beta b_i.$$

我们还记

$$B = b_1 - b_0, \qquad \Delta H(m) = Bm^2 + (q_1 - q_0)m,$$

并按照第 1.3 节的记号，令

$$d_i = \Delta H'(m_i) = 2Bm_i + q_1 - q_0, \qquad w_\infty = \Delta H(m_0) - \Delta H(m_1).$$

5.2.1 功的分布

回顾一下，两次跃迁处的经验均值 $M_0^{(N)}$和 $M_{(N)1}$相互独立，且分别服从分布 $\nu_0^{(N)}$ 和 $\nu_1^{(N)}$ 。由（5.11）可知

$$(M_0^{(N)}, M_1^{(N)}) \overset{\text{law}}{=} \left(m_0 + \frac{\xi_0}{\sqrt{NA_0}}, m_1 + \frac{\xi_1}{\sqrt{NA_1}} \right), \tag{5.15}$$

其中 ξ_0， ξ_1 是相互独立的标准正态随机变量。由于 ΔH 是二次项，恒等式

$$\Delta H(m_i + u) = \Delta H(m_i) + d_i u + Bu^2$$

对每个 $u \in \mathbb{R}$都成立。将（5.15）代入随机功的表达式（1.10），得到

$$\mathsf{w}_N \overset{\text{law}}{=} w_\infty + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{d_0}{\sqrt{A_0}} \xi_0 - \frac{d_1}{\sqrt{A_1}} \xi_1 \right) + \frac{B}{N} \left(\frac{\xi_0^2}{A_0} - \frac{\xi_1^2}{A_1} \right). \tag{5.16}$$

对每个 $N \geq 1$，这个公式都是精确的。

首先假设 $m_0 \neq m_1$。减去 w_∞ 并将（5.16）乘以 $\sqrt{N}$后，二次项依概率趋于零。因此

$$\sqrt{N}\,(\mathsf{w}_N - w_\infty) \Longrightarrow \mathcal{N}(0, V), \qquad V = \frac{d_0^2}{A_0} + \frac{d_1^2}{A_1}, \tag{5.17}$$

与定理1.3(i)中一样。在这个例子中，当$m_0 \neq m_1$时，极限高斯分布总是非退化的。事实上，利用（5.12）来表示 $q_i = -A_i m_i/\beta$，我们得到

$$d_0 = \frac{A_1}{\beta}(m_0 - m_1), \qquad d_1 = \frac{A_0}{\beta}(m_0 - m_1). \tag{5.18}$$

因此，在非匹配情形下，$V > 0$。

假设 现在 $m_0 = m_1 = m_*$。那么 $w_\infty = d_0 = d_1 = 0$，且 (5.16) 化简为 to

$$N\mathsf{w}_N \overset{\text{law}}{=} \frac{B}{A_0}\xi_0^2 - \frac{B}{A_1}\xi_1^2, \qquad N \geq 1. \tag{5.19}$$

由于 $\Delta H''(m_*) = 2B = (A_1 - A_0)/\beta$，右侧的随机变量恰好是定理 ζ 1.3(i) 中的匹配极限。因此，对于高斯振子，匹配时总功的分布与 N无关：对每个有限的N，极限分布都已精确成立。其特征函数为

$$\mathbb{E}[e^{itN\mathsf{w}_N}] = \left(1 - \frac{2itB}{A_0}\right)^{-1/2}\left(1 + \frac{2itB}{A_1}\right)^{-1/2}, \qquad t \in \mathbb{R}, \tag{5.20}$$

其中，平方根连续选取，并在 $t = 0$ 处取值为 1。当 $b_0 \neq b_1$ 时，该分布是非高斯且非退化的。尽管经验均值的涨落服从高斯分布，但功中的线性项在匹配时消失，而功由这些涨落的平方决定。如果 $b_0 = b_1$ 且 $m_0 = m_1$，那么 $q_0 = q_1$ 也成立，并且功恒等于零。

5.2.2 功的期望

现在，我们来计算式（5.16）中随机功的期望。一个循环中的单粒子平均功为

$$\begin{aligned} w_N(q_0, b_0; q_1, b_1) &= \int_{\mathbb{R}} (H_1(m) - H_0(m))\, d\nu_0^{(N)} - \int_{\mathbb{R}} (H_1(m) - H_0(m))\, d\nu_1^{(N)} \\ &= \int_{\mathbb{R}} ((b_1 - b_0)m^2 + (q_1 - q_0)m)\, d\nu_0^{(N)}(m) \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}} ((b_1 - b_0)m^2 + (q_1 - q_0)m)\, d\nu_1^{(N)}. \end{aligned} \tag{5.21}$$

从显式表达式（5.11）可知

$$\int_{\mathbb{R}} m\, d\nu_i^{(N)} = m_i, \qquad \int_{\mathbb{R}} m^2\, d\nu_i^{(N)} = m_i^2 + \tau_{i,N}^2. \tag{5.22}$$

将这些表达式代入式（5.21）可得

$$\begin{aligned} w_N(q_0, b_0; q_1, b_1) &= (b_1 - b_0)\big(m_0^2 + \tau_{0,N}^2\big) + (q_1 - q_0)m_0 - (b_1 - b_0)\big(m_1^2 + \tau_{1,N}^2\big) - (q_1 - q_0)m_1 \\ &= (m_0 - m_1)\big((b_1 - b_0)(m_0 + m_1) + q_1 - q_0\big) + (b_1 - b_0)(\tau_{0,N}^2 - \tau_{1,N}^2). \end{aligned} \tag{5.23}$$

在上式的第一项中，用（5.12）替换 $q_{0,\ 1}$：

$$\begin{aligned} (b_1 - b_0)(m_0 + m_1) + q_1 - q_0 &= (b_1 - b_0)(m_0 + m_1) - \frac{1 + 2\beta b_1}{\beta}m_1 + \frac{1 + 2\beta b_0}{\beta}m_0 \\ &= (b_1 - b_0)(m_0 + m_1) - 2b_1 m_1 + 2b_0 m_0 + \frac{1}{\beta}(m_0 - m_1) \\ &= (b_1 + b_0)(m_0 - m_1) + \frac{1}{\beta}(m_0 - m_1) = \big(b_1 + b_0 + \beta^{-1}\big)(m_0 - m_1). \end{aligned} \tag{5.24}$$

等式右侧的最后一项（5.23）可写为

$$\tau_{0,N}^2 - \tau_{1,N}^2 = \frac{1}{(1+2b_0\beta)N} - \frac{1}{(1+2b_1\beta)N} = \frac{2\beta(b_1-b_0)}{(1+2b_0\beta)(1+2b_1\beta)N}. \tag{5.25}$$

利用（5.24）和（5.25）代入（5.23），我们得到

$$w_N(q_0,b_0;q_1,b_1) = \big(b_1+b_0+\beta^{-1}\big)(m_0-m_1)^2 + \frac{2\beta(b_1-b_0)^2}{(1+2b_0\beta)(1+2b_1\beta)N}. \tag{5.26}$$

上式右侧的两项均为非负数，且它们的和仅当 $b_0 = b_1$和 $m_0 = m_1$时才为零，这意味着 $q_1 = q_0$ 也成立。与定理1.3(ii)中一样，我们看到，如果$m_0 \neq m_1$，那么单位粒子功 w_N 在极限 $N \to +\infty$下仍为正。在另一方面，在匹配情形 $m_0 = m_1$ 下，我们在热力学极限中有 $w_N = O(1/N)$。

5.2.3 功的方差和标准差

让我们回到（5.16）。由于

$$\mathbb{E}[\xi_i] = \mathbb{E}[\xi_i^3] = 0, \qquad \mathbb{E}[\xi_i^2] = 1, \qquad \mathbb{E}[\xi_i^4] = 3,$$

我们有

$$\mathrm{Cov}(\xi_i, \xi_i^2) = 0, \qquad \mathrm{Var}(\xi_i^2) = 2.$$

结合 ξ_0 和 ξ_1的独立性可知，（5.16）中的线性项与二次项之间的协方差为零。因此，单位粒子功的方差为

$$\sigma_N^2 = \mathrm{Var}(\mathsf{w}_N) = \frac{1}{N}\left(\frac{d_0^2}{A_0} + \frac{d_1^2}{A_1}\right) + \frac{2B^2}{N^2}\left(\frac{1}{A_0^2} + \frac{1}{A_1^2}\right). \tag{5.27}$$

此处 σ_N 表示功的标准差，如式（1.12）所示。式（$\tau_{i,\,N}$ 中出现的量（5.13）是经验均值的标准差。

若 $m_0 \neq m_1$，则得到

$$\sqrt{N}\,\sigma_N \longrightarrow \left(\frac{d_0^2}{A_0} + \frac{d_1^2}{A_1}\right)^{1/2} > 0.$$

在匹配情形 $m_0 = m_1$下， d_0 和 d_1 均为零，因此式（5.27）给出精确公式

$$N\sigma_N = \sqrt{2}\,|B|\left(\frac{1}{A_0^2} + \frac{1}{A_1^2}\right)^{1/2}. \tag{5.28}$$

由于 $\Delta H''(m_*) = 2B$，这些公式与定理 1.3(iii)一致。在匹配情形下，总功的均值和标准差均与 N 无关。

如 [5, 6] 以及上文第1.5 节所述，匹配条件 $m_0 = m_1$对应于连接平衡 Legendrian 子流形的 Reeb 弦。有趣的是，对于高斯粒子和二次哈密顿量，这一解释对每个有限 N 都成立，并且不需要集中到狄拉克测度。

大偏差结果基础

我们回顾证明定理1.3时所使用的两个标准大偏差结果。详情请参阅 [4] 。

设 $X_1, X_2, \ldots$ 是独立同分布的实值随机变量，并令

$$\Lambda(\theta) = \log \mathbb{E}\left[e^{\theta X_1}\right], \quad D = \{\theta : \Lambda(\theta) < +\infty\}.$$

假设 $0 \in \operatorname{int} D$，并令 P_N 为.....的分布

$$m_N = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} X_j.$$

定义

$$I(m) = \sup_{\theta \in \mathbb{R}} \{\theta m - \Lambda(\theta)\}.$$

定理 A.1 (柯拉默定理)。 序列 P_N 满足速度为 N 的大偏差原理，且具有良好的[2] 凸速率函数 I。也就是说，对于任意闭集 $F \subset \mathbb{R}$ 和任意开集 $G \subset \mathbb{R}$,

$$\limsup_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \log P_N(F) \leq -\inf_F I, \tag{A.1}$$

and

$$\liminf_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \log P_N(G) \geq -\inf_G I. \tag{A.2}$$

定理 A.2 (Varadhan 引理)。 设 $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 连续且有上界。则

$$\lim_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{R}} e^{NF(m)} P_N(dm) = \sup_{m \in \mathbb{R}} \{F(m) - I(m)\}.$$

我们还使用标准的指数倾斜推论。如果

$$Z_N = \int_{\mathbb{R}} e^{NF(m)} P_N(dm), \qquad Q_N(dm) = Z_N^{-1} e^{NF(m)} P_N(dm),$$

那么 Q_N 满足具有速率函数的 大偏差原理

$$J(m) = I(m) - F(m) - \inf_{m'} \big(I(m') - F(m')\big). \tag{A.3}$$

B 对数矩母函数与速率函数

命题 *1.2* 的光滑性和严格凸性 Λ。 由于 D 是开集，因此可对积分（1.13）在积分号下逐阶求导，且在 $\theta \in D$上局部一致成立。事实上，两个相近参数处的指数矩可以控制被积函数及其所有

[2]速率函 数若所有次水平集 $\{m \in \mathbb{R} : I(m) \leq a\}$（其中 $a < \infty$）都是紧集，则称其为良好的 t.

在任意较小参数区间上的导数。因此， Λ 在 D上是 C^∞ 。对于 $\theta \in D$，引入概率密度

$$\rho_\theta(s) = e^{\theta s - \Lambda(\theta)}\rho(s).$$

求导可得

$$\Lambda'(\theta) = \int_{\mathbb{R}} s\rho_\theta(s)\,ds, \qquad \Lambda''(\theta) = \int_{\mathbb{R}} (s - \Lambda'(\theta))^2\rho_\theta(s)\,ds > 0.$$

方差为正，因为具有密度的概率分布不可能集中在单个点上。特别地， Λ' 严格递增，其取值范围为（$\bar{s}_-$， $\bar{s}_+$）。

的取值范围 Λ'。在 D 的有限端点处，由法图引理和 D 的定义可得

$$\begin{aligned} \lim_{\theta\to -a^+} \Lambda(\theta) &= +\infty \quad \text{if } a < +\infty, \\ \lim_{\theta\to b^-} \Lambda(\theta) &= +\infty \quad \text{if } b < +\infty. \end{aligned} \tag{B.1}$$

根据凸性， Λ' 在有限左端点处趋于 $-\infty$ ，在有限右端点处趋于 $+\infty$ 。此外， $a < +\infty$ 迫使 $\bar{s}_- = -\infty$成立，因为有下界的分布具有所有负指数矩。同样地， $b < +\infty$ 迫使 $\bar{s}_+ = +\infty$成立。

现在假设 $b = +\infty$。对于每个 $c < \bar{s}_+$，都有

$$p_c := \int_c^{+\infty} \rho(s)\,ds > 0.$$

对于 $\theta > 0$，可得

$$\Lambda(\theta) \geq c\theta + \log p_c.$$

由于 $\Lambda(0) = 0$，由凸性可得

$$\Lambda'(\theta) \geq \frac{\Lambda(\theta)}{\theta} \geq c + \frac{\log p_c}{\theta}.$$

令 $\theta \to +\infty$ ，再令 $c \to \bar{s}_+$ ，可得 $\Lambda'(\theta) \to \bar{s}_+$，即使在 $\bar{s}_+ = +\infty$ 时也成立。对 $-s$ 的密度应用相同的论证，即可处理 $a = +\infty$ 的情形。因此，我们证明了

$$\lim_{\theta\to -a^+} \Lambda'(\theta) = \bar{s}_-\,, \qquad \lim_{\theta\to b^-} \Lambda'(\theta) = \bar{s}_+\,,$$

在无穷端点处作自然解释。结合 $\Lambda'' > 0$，这些极限表明 Λ' 是一个从 D 到 D' 的递增 C^∞ 微分同胚。

$\bar{}$定义在 D' 上的速率函数。对于 $m \in D'$，令 $\theta(m)$ 为方程 $\Lambda'(\theta(m)) = m$ 的唯一解。$\bar{}\Lambda$ 的严格凸性表明， $\theta(m)$ 是 $\theta m - \Lambda(\theta)$ 在 D 上的唯一最大值点。在 D 之外，该表达式为 $-\infty$，因此

$$I(m) = m\bar{\theta}(m) - \Lambda(\bar{\theta}(m)).$$

$\bar{}$反函数定理表明， θ 是 C^∞，因此 I 在 D'上也是如此。求导得

$$I'(m) = \bar{\theta}(m) + \big(m - \Lambda'(\bar{\theta}(m))\big)\bar{\theta}'(m) = \bar{\theta}(m),$$

and

$$I''(m) = \bar{\theta}'(m) = \frac{1}{\Lambda''(\bar{\theta}(m))} > 0.$$

外部的速率函数 D'。假设 $\ell := \bar{s}_-$ 是有限的。那么 $(-\infty,\ 0] \subset D$，并且对于$\theta \le 0$,

$$e^{\Lambda(\theta)-\ell\theta} = \int_{\ell}^{+\infty} e^{\theta(s-\ell)}\rho(s)\,ds \le 1.$$

由于该分布具有密度，因此在 ℓ 处没有原子质量。因此，由控制收敛定理可得

$$\Lambda(\theta) - \ell\theta \longrightarrow -\infty \qquad \text{as } \theta \to -\infty.$$

对于每个 $m \le \ell$,

$$\theta m - \Lambda(\theta) = \theta(m-\ell) - \big(\Lambda(\theta) - \ell\theta\big) \longrightarrow +\infty,$$

因此 $I(m) = +\infty$。将同样的论证应用于 $-s$ 可得 $I(m) = +\infty$，当 $m \ge \bar{s}_+$有限时，$\bar{s}_+$ 成立。这就证明了（1.20），并完成了证明。 □

参考文献

[1] Billingsley, P.，《概率与测度》，第3版，约翰·威利父子公司，1995年。[2] Bustamante, C. J., Chemla, Y. R., Liu, S., Wang, M. D，《单分子生物物理学中的光镊》，《自然评论：方法学入门》1 （2021），25。[3] Callen, H. B.，《热力学与热统计学导论》，Wiley，1985年。[4] Dembo, A., Zeitouni, O.，《大偏差技术及其应用》，施普林格，2009年。[5] Entov, M., Polterovich, L., Ryzhik, L.，《自旋链的几何方面》，Jour. Stat. Phys.191 （2024），154。[6]Entov, M., Polterovich, L., Ryzhik, L.，《非平衡热力学接触拓扑术语表》，Lett. Math. Phys. 2026年6月；116(3):59。[7] Gieseler, J., Gomez-Solano, J. R., Magazz`u, A., P´erez Castillo, I., P´erez Garc´ıa, L., Gironella-Torrent, M., Viader-Godoy, X., Ritort, F., Pesce, G., Arzola, A. V., Volke- Sep´ulveda, K.，《光镊——从校准到应用：教程》，Advances in Optics and Photonics 13 （2021），74–241。[8] Grier, D. G.，《光学操控领域的一场革命》，Nature424 （2003），810–816。[9] Jarzynski, C.，《自由能差的非平衡等式》，Phys. Rev. Lett. 78（1997），2690–2693。
https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.2690。