

源自统计物理的数学论题 ——相变现象与数学的交叉

献给王梓坤教授 90 华诞

陈木法

北京师范大学数学科学学院, 北京 100875

E-mail: mfchen@bnu.edu.cn

收稿日期: 2017-12-27; 接受日期: 2018-03-07; 网络出版日期: 2019-03-18

国家自然科学基金 (批准号: 11771046) 资助项目

摘要 本文目标是探讨统计物理的核心课题—相变现象. 为此, 需要发展已有的或寻找新的数学工具. 重点在于刻画各种稳定性的速度. 主要内容有耦合与距离方法及遍历性蕴含关系图, 各种遍历性的显式判断标准与一种格子量子场模型, 一维情形对偶变分公式、统一基本估计与 Hardy 不等式.

关键词 耦合与距离方法 遍历性蕴含关系图 显式判断标准 对偶变分公式 基本估计 Hardy 不等式

MSC (2010) 主题分类 60J27, 60K35, 34L05, 42B35, 58C40, 60K90

1 引言

本文是作者 2017 年 10 月在 “International Conference on Spatial Probability and Statistical Physics” (中国科学院数学与系统科学研究院) 的学术报告的第二部分.

在前一部分里, 我们已经刻画了平衡态和非平衡态, 并构造了后一类系统的典型 Markov 过程—反应扩散过程. 在这一部分里, 我们进入统计物理的核心课题—相变现象. 相变的简单例子是水的三态: 常温时的液态、低温时的固态和高温时的气态. 这也称为物质的固相、液相和气相. 现在, “相变” 一词已经大众化. 不久前, 因为在理论上发现了物质的拓扑相变, 三位物理学家获 2016 年诺贝尔物理学奖. “拓扑相变” 是一种新发现的奇异相变, 已用上了拓扑学这一数学工具. 这里要讲的是传统的相变现象, 性质不同. 所使用的数学工具也不同. 我们所知道的方法可分为两类 (相关文献容易在文献 [1] 中找到): 其一是直接进入多相共存区域, 研究相分离性质, 例如, 统计力学中经典的 Peierls 方法, 以及后来发展起来的 Sinai 相变理论和各种共存现象; 其二是从稳定区域出发, 研究其稳定性速度, 如何下降于 0 (进入多相区域). 例如, 研究描述系统的算子的第一非平凡特征值如何从正变成 0. 此刻, 我

英文引用格式: Chen M F. Mathematical topics motivated from statistical physics—Interaction of phase transition and mathematics (in Chinese). *Sci Sin Math*, 2019, 49: 327–338, doi: 10.1360/N012017-00269

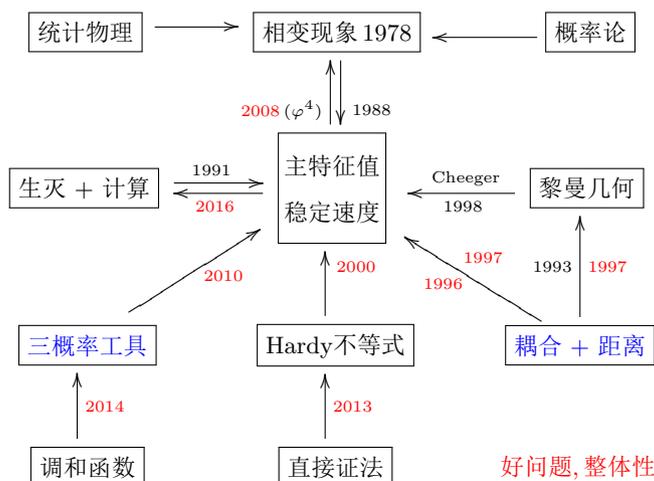


图 1 研究路线图

们想起《安娜·卡列尼娜》里的名言：“幸福的家庭家家相似，不幸的家庭各有各的不幸”。上述两种方法对应于这里的两种家庭。第一种方法描述“不幸家庭”；第二种所对应的是“幸福家庭”。我们选用了第二种方法。原以为已有大量的数学成果可直接应用，结果与所想象的完全相反，因而经历了漫长的岁月，见图 1。

图 1 的第一行是从统计物理和概率论两方面进入相变专题，大体上已在文献 [2] 中介绍过。1988 年，我们从文献 [3] 中获悉，可用谱（空）隙（即非平凡第一特征值）刻画相变。这种 L_2 技术早先已由 Holley 和 Stroock^[4] 引入粒子系统研究。

以下分三部分介绍图 1 所示的研究路线。

- 耦合与距离方法及遍历性蕴含关系图。这形成于下面的研究：
生灭 + 计算 → 主特征值/稳定速度 ← 耦合 + 距离 → Riemann 几何。
- 各种遍历性的显式判断标准与 φ^4 模型。其路线图为：
Hardy 不等式 → 主特征值/稳定速度 → 相变 (φ^4 模型)。
- 一维情形的对偶变分公式、统一基本估计与 Hardy 不等式。路线图为：
三概率工具 → 主特征值/稳定速度；直接证法 → Hardy 不等式。

2 耦合与距离方法及遍历性蕴含关系图

我们从 Markov 链入手，更确切地说是从生灭过程入手。王梓坤老师是生灭过程的奠基者之一，代表作之一是文献 [5]。这是最基础的一类 Markov 过程，常常是笔者研究问题的首选。我们这个方向上的第一篇文献 [6] 发表于 1991 年（于 1988 年投稿）。开始，我们计算了 2 至 5 阶矩阵，发现问题极为复杂，束手无策。所以，我们尝试与概率论中的经典的指数遍历性比较。称具有平稳分布 π 的 Markov 半群指数遍历，如果依全变差范数有

$$\|P_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{Var}} \leq C(x)e^{-\varepsilon t}, \quad t \geq 0.$$

以 $\|\cdot\|_2$ 记 $L^2(\pi)$ 范数, 称此半群 L^2 指数式收敛, 例如,

$$\|P_t f(x) - \pi(f)\|_2 \leq \|f - \pi(f)\|_2 e^{-\lambda t}, \quad t \geq 0,$$

其中

$$\pi(f) = \int f d\pi.$$

尽管这两种收敛性的拓扑相差很远, 但我们在文献 [6] 中证出下述结论.

定理 1 对于生灭过程, 两种收敛性重合:

$$\varepsilon_{\max} = \lambda_{\max}.$$

许多年之后, 我们证出此结论对于大多具有局部紧状态空间的可逆 Markov 过程也是对的, 参见文献 [7, 定理 8.13]. 定理 1 的作用是显然的, 因为两方面的研究可以互补. 当年, 笔者在寻找数学工具的时候, 曾学了一些矩阵的特征值计算方法, 文献 [6, 定理 8] 就是基于对称矩阵特征值的经典算法. 没有想到, 25 年之后 (2016 年), 我们又回到计算数学, 做出了一点成果. 此处不能详述, 只是提及 2014 年笔者和张旭所引进的一种等谱技术 [8], 这使我们能够完整地处理次对角线元素为正的三对角矩阵, 从而进入矩阵特征值计算领域. 参见两篇综述报告 [9, 10] (后者的第一部分改进了前者的算法, 稍有重复). 现在回头考察文献 [6], 几乎所有成果都已更新换代. 又见新作 [11].

1992 年春, 写完文献 [1] 第一版的时候, 笔者最不满意的是该书的第 9 章: Spectral Gap (谱隙). 那时仅有文献 [6] 在手, 对于这么好的题目, 仅做出那么少的东西, 当然不满意. 于是当年就决定大干此方向. 在经过一些调研之后, 我们发现此课题在 Riemann 几何中已有长期研究和相当系统的理论. 于是我们开始学习几何方法. 没有多久, 发现使用我们很熟悉的概率 (耦合) 方法, 也能处理这个课题. 于是走上了用概率方法做几何的反向道路. 期间经历了

概率方法 \rightarrow Riemann 几何 \rightarrow Markov 链与椭圆算子 \rightarrow Riemann 几何

的多年历程. 特别是当中的“Markov 链与椭圆算子”, 经历了三年多才完成. 文献 [2] 讲到的耦合三部曲, 后两部就是在这一阶段发展起来的. 这里的难点是仅有尚能改进的预感, 至于往哪里走一无所知, 完全是在黑暗中摸索. 苍天有眼, 助我度过艰难的一关. 稍详细地讲, 因为我们使用耦合方法来估计收敛速度, 自然问所使用的耦合是不是最好的. 这引导“最优耦合”的探索, 答案已在文献 [2] 中给出 (该文献定义 8): 分类依赖于距离 ρ , 故称为“ ρ 最优耦合”. 幸运的是, 常常对于一大类距离, 有共同的“最优耦合”. 这是一个大优点, 但对于收敛速度而言, 还需要更精细地挑选距离函数. 从道理上讲, 这是很自然的, 因为收敛速度非拓扑概念, 沉重地依赖于距离. 如何找距离? 通过一个简单例子, 我们意外地发现, 所需距离与最小特征函数有紧密联系 (马后炮, 因为我们要估计最小特征值). 问题更难了: 特征函数比特征值更难. 万幸的是, 虽然我们不可能真正算出最小特征函数, 但我们却可以模拟之. 本文随后将要用到的各种试验函数类, 都可视为最小特征函数的模拟. 更详细的解释参见文献 [7, 第 3.4 小节]. 这些试验函数类都是无穷集, 所以, 实质上我们使用了基于最小特征函数 (谱性质) 所导出的无穷多个距离 (几何). 也许, 文献 [12–14] 可作为这个时期的三篇代表作. 此处陈述其中一个易于表述的代表性成果.

定理 2 (参见文献 [14, 定理 1]) 分别以 d 、 D 和 K 表示一个给定的紧 Riemann 流形的维数、直径和 Ricci 曲率下界, 则其 Laplace 算子的第一非平凡特征值有如下估计:

$$\lambda_1 \geq 4 \sup_{f \in \mathcal{F}} \inf_{r \in (0, D)} f(r) / \left[\int_0^r C(s)^{-1} ds \int_s^D (fC)(u) du \right],$$

这里仅用到两个记号 (因此有一种美感):

$$C(r) = \left(\cosh \left[\frac{r}{2} \sqrt{\frac{-K}{d-1}} \right] \right)^{d-1},$$

\mathcal{F} 为 $(0, D]$ 上正的连续函数的全体.

此公式不仅统一而且能够改进几何学家在文献 [14] 前后的 50 多年采用各种不同的优美方法所得到的 10 种著名估计. 此估计后来由文献 [15, 16] (还有一批很遗憾未能在这里列出的文献) 做了进一步改进.

关于这个阶段的工作, 有两篇综述报告 [17, 18]. 后文包含了当年所得到的各种遍历性的蕴含关系图 (参见文献 [7, 定理 1.9]).

定理 3 设 (E, \mathcal{E}) 为可数生成的可测空间 (即 \mathcal{E} 可数生成), 则其上的可逆 Markov 过程, 只要它的转移概率关于可逆测度 π 有密度, 图 2 所示的蕴含关系就成立.

这里的各种遍历性的定义如下:

$$\text{通常遍历: } \lim_{t \rightarrow \infty} \|P_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{Var}} = 0;$$

$$\text{指数式遍历: } \exists \alpha > 0 \text{ 使得 } \|P_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{Var}} \leq C(x)e^{-\alpha t};$$

$$\text{强遍历: } \lim_{t \rightarrow \infty} \sup_x \|P_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{Var}} = 0 \Leftrightarrow \exists \beta > 0 \text{ 使得 } \lim_{t \rightarrow \infty} e^{\beta t} \sup_x \|P_t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{Var}} = 0,$$

其中 $P_t(x, dy)$ 是 Markov 过程的转移概率, 而 $\|\cdot\|_{\text{Var}}$ 是全变差范数. 相应地, 记 $\|\cdot\|_p$ 为 $L^p(\pi)$ 范数, $\text{Var}(f) = \pi(f^2) - \pi(f)^2$, $D(f)$ 为可逆 Markov 过程的 Dirichlet 型的对角线元素 (对于随后将用到的生灭过程, $D(f) = \sum_{k=0}^N \mu_k b_k (f_{k+1} - f_k)^2$), 则有

$$\text{Poincaré 不等式: } \text{Var}(f) \leq CD(f), \quad f \in L^2(\pi),$$

$$\text{对数 Sobolev 不等式: } \int f^2 \log \frac{f^2}{\|f\|_2^2} d\pi \leq CD(f), \quad f \in L^2(\pi),$$

$$\text{Nash 不等式: } \text{Var}(f) \leq CD(f)^{1/p} \|f\|_1^{2/p^*}, \quad f \in L^2(\pi), \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{p^*} = 1.$$

它们代表着关于半群的不同收敛性:

$$\text{Poincaré 不等式} \Leftrightarrow L^2 \text{指数式收敛: } \|P_t f - \pi(f)\|_2^2 = \text{Var}(P_t f) \leq \text{Var}(f) \exp[-2\lambda_1 t],$$

$$\text{对数 Sobolev 不等式} \Rightarrow \text{依相对熵指数式收敛: } \text{Ent}(P_t f) \leq \text{Ent}(f) \exp[-2\sigma t],$$

$$\text{其中 } \text{Ent}(f) = \pi(f \log f) - \pi(f) \log \|f\|_1,$$

$$\text{Nash 不等式} \Leftrightarrow \text{Var}(P_t f) \leq \frac{C\|f\|_1^2}{t^{p^*-1}}.$$

还有

$$L^p \text{指数式收敛: } \|P_t f - \pi(f)\|_p \leq \|f - \pi(f)\|_p e^{-\epsilon t}, \quad t \geq 0, \quad f \in L^p(\pi),$$

$$L^2 \text{代数式收敛: } \text{Var}(P_t f) \leq CV(f)t^{1-p^*}, \quad t > 0, \quad \text{其中 } V \text{ 满足 } V(cf + d) = c^2 V(f).$$

为什么需要这么多不同的收敛性? Kolmogorov 早已给出解答. “It was Kolmogorov who stated that every approximation problem has its own distance measure in which the problem can be solved in a most natural way. Kolmogorov also contended that without estimates of the rate of convergence in the

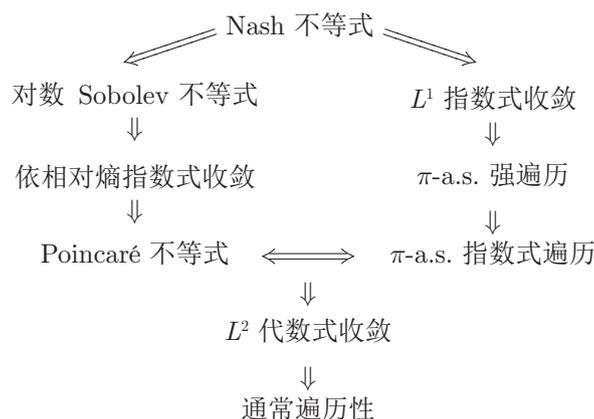


图 2 各种遍历性蕴含关系图

central limit theorem (CLT) . . . , limit theorems provide very limited information.” (参见文献 [19, 第 vii 页]). 众所周知, 收敛性问题是数学大多数分支共同的研究课题; 然而关于其速度的研究相当有限, 这源于问题的难度, 定量比定性研究要艰难得多. 然而, 一种数学理论, 如果仅有稳定性的定性结果而无稳定性的速度估计, 那么无论从理论上还是从应用角度看, 都是不够成熟的.

图 2 的新颖之处主要在于顶部 Nash 不等式的蕴含关系与图中、下部的等价关系. 它们将概率论中古典的遍历理论与现代分析中的几类基本不等式联系在一起. 当然, 这种交叉渗透产生很大威力. 例如, 早期的定理 1, 让我们从生灭过程的指数遍历速度的估计和精确解 (两个半模型) 得出关于谱隙的相应结果. 这是难能可贵的第一步. 现在, 反过来, 我们从谱隙研究所得的一套理论, 大多可直接移植到指数遍历性. 特别地, 即使对于生灭过程, 其指数遍历性的判断标准也是通过 Poincaré 不等式的相应结果导出的.

3 各种遍历性的显式判断标准和 φ^4 模型

基于许多具体算例 (参见文献 [7, 第 1.1 小节]), 我们知道特征值估计极其敏感. 有许多年笔者一直觉得大概不会有定性判断标准 (即是否有 $\lambda_1 > 0$). 直到获悉关于加权 Hardy 不等式已有完整的解答 (参见文献 [20]) 之后, 我们才开始这个方向的研究. 因为已有 10 年的积累, 这对我们并无很大困难. 我们使用自己的方法, 很快得到谱隙的正性判断标准 [21], 然后找到谱隙的对偶变分公式和逼近定理 [22]. 这些工作成为后来一系列发展的基础. 这期间, 还有一些重要进展. 例如, 关于生灭过程的强遍历准则由张汉君等 [23] 得到; 然后, 张余辉使用不同方法, 得到单生过程的强遍历性准则 [24]. 对数 Sobolev 不等式及谱离散判断标准来自 Bobokov 和 Götze [25, 26] 及 Mao [27-29]. 这些工作和文献 [30] 都是基于加权 Hardy 不等式, 与我们的证法不同. 进一步, 我们将线性情形的成果 [21, 22] 扩充到非线性 [31, 32]. 基于这些进展, 我们得到如下的 10 个显式判别准则. 此处仅写出离散情形 (生灭过程) 的解答, 对于一维扩散过程的解答是平行的.

定理 4 对于生灭过程, 假设生速为 b_k , 死速为 a_k . 定义

$$\mu_0 = 1, \quad \mu_n = \frac{b_0 \cdots b_{n-1}}{a_1 \cdots a_n}, \quad n \geq 1; \quad \mu[i, k] = \sum_{i \leq j \leq k} \mu_j;$$

$$\hat{\nu}_n = \frac{1}{\mu_n b_n}, \quad \hat{\nu}[i, k] = \sum_{i \leq j \leq k} \hat{\nu}_j.$$

那么, 我们有表 1 所示的显式判别准则 (留心只用测度 μ 和 $\hat{\nu}$ 表达), 其中的“关于相对熵指数收敛?” 是一个待解问题.

关于图 2 和表 1 的更详细的综述可参见文献 [33,34]. 前 3 节的更完整的综述见专著 [7].

在经过了 20 年的探索有了一套理论之后, 我们回到起始点: 研究相变现象. 以此检阅所发展的工具的有效性. 我们考察格子上的 Euclid 量子场模型: φ^4 模型. 我们的格子是 d 维空间上的 \mathbb{Z}^d . 在每一格子点 $i \in \mathbb{Z}^d$ 上, 势函数是 4 阶: $u(x_i) = x_i^4 - \beta x_i^2$, $x_i \in \mathbb{R}$, 其中 β 表示反温度. 系统的交互作用是紧邻的: $H(x) = -J \sum_{\langle ij \rangle} x_i x_j$, 其中 $J \geq 0$, $i, j \in \mathbb{Z}^d$, $\langle ij \rangle$ 表示 \mathbb{Z}^d 中的紧邻边, $x_i, x_j \in \mathbb{R}$. 这样, 对于固定的边界 ω 和有限盒子 $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, 系统的局部算子可写成 $L_\Lambda^\omega = \sum_{i \in \Lambda} [\partial_{ii} - \partial_i(u + H_\Lambda^\omega) \partial_i]$. 我们的目标是此算子的谱隙 $\lambda_1^\beta(\Lambda, \omega)$ 和最佳对数 Sobolev 常数 $\sigma^\beta(\Lambda, \omega)$ 关于边界条件 ω 和有限盒子 Λ 的一致估计.

定理 5 [35] 我们有

$$\begin{aligned} \inf_{\Lambda \in \mathbb{Z}^d} \inf_{\omega \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}} \lambda_1^\beta(\Lambda, \omega) &\approx \inf_{\Lambda \in \mathbb{Z}^d} \inf_{\omega \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}} \sigma^\beta(\Lambda, \omega) \\ &\approx \exp \left[-\frac{\beta^2}{4} - c \log \beta \right] - 4dJ, \end{aligned}$$

其中, $c := c(\beta) \in [1, 2]$. 这里, $f(\beta) \approx g(\beta)$ 是指当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, $f(\beta)$ 与 $g(\beta)$ 有相同的收敛主阶.

图 3 中的阴影部分为遍历区域, 曲线往左上方外一点, 是非遍历区域. 这个模型会发生相变是因为, 如图 4 所示, 势函数是双井的, 处于一个坑时, 在低温区难于跨出去.

在处理这个模型时, 我们之前所得到的大部分成果都是有效的, 只是最佳衰减常数 $-\beta^2/4$ 中的系数 $1/4$ 未能得到, 我们只得到大约 0.8. 物理学家猜想这个常数等于分布密度为 $\exp[-x^4 + \beta x^2]$ 的随机变量的方差的平方. 所以, 本文在抽屉里锁了 5 年之久, 直到与对数 Sobolev 常数比较, 使用文献 [36] 的结果, 算出精确主阶之后才投稿的. 如图 5 所示, 物理学家的猜想是高度精确的, 令人惊叹!

表 1 生灭过程 10 种遍历性的显式判别准则

| 性质 | 判断标准 |
|----------------|---|
| 唯一性 | $\sum_{n \geq 0} \hat{\nu}_n \mu[0, n] = \infty$ (*) |
| 常返性 | $\hat{\nu}[0, \infty) = \infty$ |
| 遍历性 | (*) & $\mu[0, \infty) < \infty$ |
| 指数遍历性 | (*) & $\sup_{n \geq 1} \mu[n, \infty) \hat{\nu}[0, n-1] < \infty$ |
| Poincaré 不等式 | |
| 离散谱 | (*) & $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{k \geq n+1} \mu[k, \infty) \hat{\nu}[n, k-1] = 0$ |
| 对数 Sobolev 不等式 | (*) & $\sup_{n \geq 1} \mu[n, \infty) [\log \frac{1}{\mu[n, \infty)}] \hat{\nu}[0, n-1] < \infty$ |
| 关于相对熵指数收敛? | |
| 强遍历性 | (*) & $\sum_{n \geq 0} \hat{\nu}_n \mu[n+1, \infty) = \sum_{n \geq 1} \mu_n \hat{\nu}[0, n-1] < \infty$ |
| L^1 指数收敛性 | |
| Nash 不等式 | (*) & $\sup_{n \geq 1} \mu[n, \infty)^{(p^*-2)/(p^*-1)} \hat{\nu}[0, n-1] < \infty$ |

其中第一行的条件 (*) 用于随后的 6 种情形

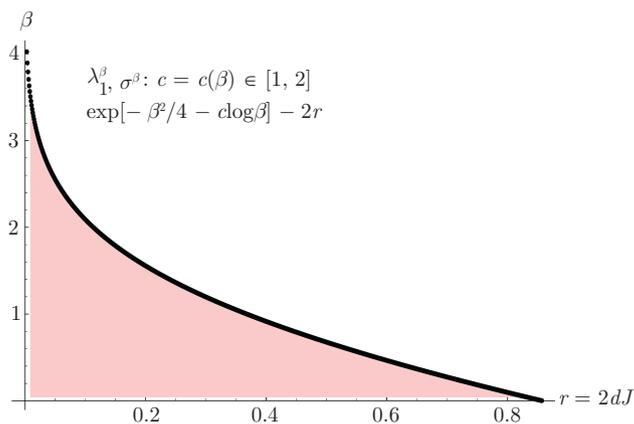


图 3 谱隙与对数 Sobolev 常数

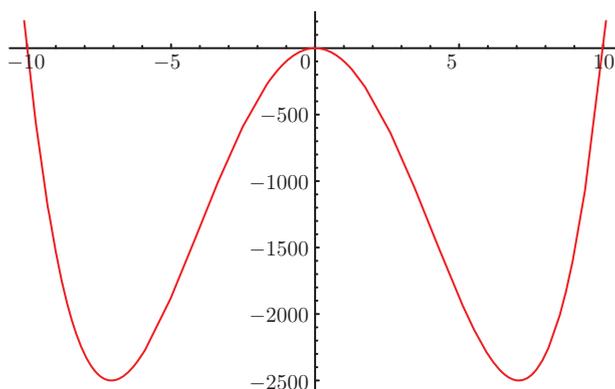


图 4 当 $\beta = 100$ 时, 函数 $u(x) = x^4 - \beta x^2$ 的图像

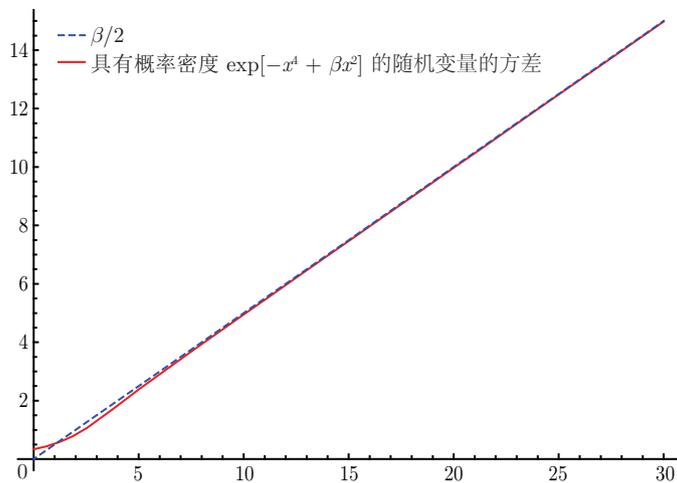


图 5 分布密度为 $\exp[-x^4 + \beta x^2]$ 的随机变量的方差与 $\beta/2$ 的比较

4 一维情形的对偶变分公式、统一的基本估计和 Hardy 不等式

表 1 的定性理论源自困难得多的基本估计. 尽管定理 5 讨论的是无穷维模型, 其实其核心部分还是一维的精确估计. 作为例子, 此处介绍一下生灭过程的基本估计. 设状态空间为 $E = \{0, 1, \dots, N\}$, $N \leq \infty$. 仍然使用前面的 (a_k) 、 (b_k) 、 (μ_k) 和 $(\hat{\nu}_k)$ 等记号. 我们说 0 为 Dirichlet 边界 (以 D 示之), 如果函数在 0 处为 0. 我们说 0 为 Neumann 边界 (以 N 示之), 如果函数在 0 与 -1 处等值 (在连续情形, 这表示一阶导数在 0 处为 0). 如 $N < \infty$, 可同样定义在 N 或 $N+1$ 处的边界条件; 如 $N = \infty$, 则以极限定义之. 总之, 我们现在有 NN、DD、ND 和 DN 4 种边界. 若以 # 表示这 4 种边界之一, 则有相应的主特征值 $\lambda^\#$. 详言之, 我们有

- λ^{NN} : 在 0 和 N 处都是 Neumann 边界条件;
- λ^{ND} : 在 0 处为 Neumann, 在 $N+1$ 为 Dirichlet;
- λ^{DN} : 在 0 为 Dirichlet, 在 N 处为 Neumann;
- λ^{DD} : 在 0 和 $N+1$ 处都是 Dirichlet 边界条件.

关于这 4 个特征值, 我们有统一的显式估计.

定理 6 我们有基本估计: $(\kappa^\#)^{-1}/4 \leq \lambda^\# \leq (\kappa^\#)^{-1}$. 特别地, $\lambda^\# > 0$ 当且仅当 $\kappa^\# < \infty$, 其中

$$\begin{aligned} (\kappa^{\text{NN}})^{-1} &= \inf_{n < m} (\mu[0, n]^{-1} + \mu[m, N]^{-1}) \hat{\nu}[n, m-1]^{-1}, \\ (\kappa^{\text{DD}})^{-1} &= \inf_{n < m} (\hat{\nu}[0, n-1]^{-1} + \hat{\nu}[m, N]^{-1}) \mu[n, m]^{-1}, \\ \kappa^{\text{DN}} &= \sup_{1 \leq n \leq N} \hat{\nu}[0, n-1] \mu[n, N], \\ \kappa^{\text{ND}} &= \sup_{0 \leq n \leq N} \mu[0, n] \hat{\nu}[n, N]. \end{aligned}$$

这个定理有显然的美感. 首先, 估计式有普适因子 4. 其次, 需要两参数 $n < m$ 以平衡两边. 再则, 两边对称. 所有常数只用两个测度 μ 和 $\hat{\nu}$ 表出, 当 D 与 N 互换时, 只需将 μ 与 $\hat{\nu}$ 互换.

这个定理来之不易, 实际上, 我们把所有本事都用上了: 耦合与距离方法、对偶方法和容度方法. 详细内容参见文献 [37]. 定理 6 是 L^2 情形, 即线性情形. 如果想再往前走, 进入非线性情形, 那么这三个方法全部失效. 幸运的是, 我们找到了直接方法, 使我们能将定理 6 推广到一般的 Hardy 不等式, 参见文献 [38]. 从使用 Hardy 不等式的 2000 年, 到在这方向上做出点成果, 期间跨过了 13 年. 此处, 我们不准准备深入讨论, 因为这些题材已在文献 [39, 40] 中综述过.

作为本文的最后一部分, 我们介绍导出上述基本估计的核心部分. 此处我们依然限于 ND 情形. 与古典变分公式

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \lambda^{\text{ND}} = \inf \{ D(f) : f(N+1) = 0, \|f\|_2 = 1 \}, \\ D(f) &:= \sum_{k=0}^N \mu_k b_k (f_{k+1} - f_k)^2 \end{aligned}$$

不同, 我们将使用三个算子给出关于 λ_0 的三对对偶变分公式.

算子 I 记 $E = \{k \in \mathbb{Z}_+ : k < N+1\}$, $N \leq \infty$. 定义 $\partial_j f = f_{j+1} - f_j$. 由特征方程

$$\text{在 } E \text{ 上, } Qg = -\lambda_0 g \quad (\text{约定 } a_0 = 0)$$

知 $b_j \partial_j g - a_j \partial_{j-1} g = -\lambda_0 g_j$. 两边同乘以 μ_j , 得出

$$\nu_j \partial_j g - \nu_{j-1} \partial_{j-1} g = -\lambda_0 \mu_j g_j \quad (\nu_j := \mu_j b_j).$$

对 j 从 0 到 i 求和, 得

$$\nu_i \partial_i g = -\lambda_0 \sum_{j=0}^i \mu_j g_j \quad (\nu_{-1} := 0). \tag{4.1}$$

于是,

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{\hat{\nu}_i}{-\partial_i g} \sum_{j \leq i} \mu_j g_j = \frac{\hat{\nu}_i}{g_i - g_{i+1}} \sum_{j \leq i} \mu_j g_j =: I_i(g) \quad (\hat{\nu}_j := \nu_j^{-1}).$$

现在可以写下算子 I 的准确定义:

$$I_i(f) = \frac{\hat{\nu}_i}{f_i - f_{i+1}} \sum_{j \leq i} \mu_j f_j.$$

它有两个定义域

$$\mathcal{F}_I = \{f : f > 0, f \Downarrow\} \quad (\text{用于下界估计, “}\Downarrow\text{” 表示严格下降}),$$

$$\mathcal{F}'_I = \{f : f_i = f_{i \vee \ell} \mathbb{1}_{\{i \leq m\}}, \text{对于某 } \ell < m, \text{在 } [\ell, m] \text{ 上 } f \Downarrow\} \quad (\text{用于上界估计}).$$

这里 $a \vee b = \max\{a, b\}$. 类似地, $a \wedge b = \min\{a, b\}$. 第二个定义域需要局部化是因当 $N = \infty$ 时, 级数可能不可和. 当然, 当 $N < \infty$ 时, 此条件及 supp 都可去掉. 以下类同.

定理 7 (使用单重和的对偶变分公式)

$$\inf_{f \in \mathcal{F}'_I} \sup_{i \in E} I_i(f)^{-1} = \lambda_0 = \sup_{f \in \mathcal{F}_I} \inf_{i \in E} I_i(f)^{-1}.$$

将定理 7 应用于试验函数

$$f_i = \sqrt{\hat{\nu}[i, N]} \quad \text{和} \quad f_i = \mathbb{1}_{\{i \leq m\}} \hat{\nu}[i \vee \ell, m], \quad i \in E,$$

得出下面的推论.

推论 8 $\lambda_0 > 0$ 当且仅当 $\delta < \infty$, 此处 $\delta = \sup_{n \geq 0} \mu[0, n] \hat{\nu}[n, N]$. 更精确地, $(4\delta)^{-1} \leq \lambda_0 \leq \delta^{-1}$. 这正是定理 6 所给出的答案.

算子 II (特征函数 (向量) 的模拟) 由 (4.1) 知, $\nu_i \partial_i g = -\lambda_0 \sum_{j \leq i} \mu_j g_j$, 即

$$-\partial_i g = \lambda_0 \hat{\nu}_i \sum_{j \leq i} \mu_j g_j.$$

两边对 i 从 n 到 N 求和, 得

$$g_n = \lambda_0 \sum_{i=n}^N \hat{\nu}_i \sum_{j \leq i} \mu_j g_j.$$

于是得出

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{g_n} \sum_{i=n}^N \hat{\nu}_i \sum_{j=0}^i \mu_j g_j =: II_n(g).$$

由此看出, 对于每个试验函数 f , 可将 $fII(f)$ 视为特征函数 g 的模拟.

今给出算子 Π 的严格定义:

$$\Pi_i(f) = \frac{1}{f_i} \sum_{i \leq j \in \text{supp}(f)} \hat{\nu}_j \sum_{k \leq j} \mu_k f_k, \quad i \in \text{supp}(f).$$

它的两个定义域为

$$\mathcal{F}_\Pi = \{f : f > 0\} \quad (\text{用于下界估计}),$$

$$\mathcal{F}'_\Pi = \{f : \text{存在 } m \text{ 使得在 } [0, m] \text{ 上 } f > 0, \text{ 而在 } [m+1, N] \text{ 上为 } 0\} \quad (\text{用于上界估计}).$$

定理 9 (使用双重和的对偶变分公式)

$$\inf_{f \in \mathcal{F}'_\Pi} \sup_{i \in \text{supp}(f)} \Pi_i(f)^{-1} = \lambda_0 = \sup_{f \in \mathcal{F}_\Pi} \inf_{i \in E} \Pi_i(f)^{-1}.$$

下述结果是此变分公式的直接应用.

定理 10 (逼近程序) (1) 设 $f_1 = \sqrt{\hat{\nu}[\cdot, N]}$, $f_n = f_{n-1} \Pi(f_{n-1})$, $\delta_n = \sup_{i \geq 0} \Pi_i(f_n)$, 则

$$\lambda_0 \geq \delta_\infty^{-1} \geq \dots \geq \delta_1^{-1} \geq (4\delta)^{-1}.$$

(2) 固定 $\ell < m$. 设

$$\begin{aligned} f_1^{(\ell, m)} &= \mathbb{1}_{\{ \cdot \leq m \}} \hat{\nu}[\cdot \vee \ell, m], \\ f_n^{(\ell, m)} &= \mathbb{1}_{\{ \cdot \leq m \}} f_{n-1}^{(\ell, m)} \Pi(f_{n-1}^{(\ell, m)}), \quad n \geq 1, \\ \delta'_n &= \sup_{\ell, m: \ell < m} \min_{i \leq m} \Pi_i(f_{n-1}^{(\ell, m)}), \end{aligned}$$

则

$$\delta^{-1} \geq \delta'_1{}^{-1} \geq \dots \geq \delta'_\infty{}^{-1} \geq \lambda_0.$$

此结果是我们这两年研究矩阵最大特征对子计算的主要理论依据 (参见文献 [9, 10]). 至少我们已知当 $N < \infty$ 时, 两个逼近序列 $\{\delta_n^{-1}\}$ 和 $\{\delta'_n{}^{-1}\}$ 均收敛于 λ_0 (参见文献 [41]).

算子 R . 定义为 $R_i(v) = a_i + b_i - a_i/v_{i-1} - b_i v_i$. 两个定义域分别为

$$\mathcal{V} = \{v : v \in (0, 1)\}, \quad v_{-1} \text{ 可流动},$$

$$\mathcal{V}' = \left\{ v : \text{存在 } m \text{ 使得在 } [0, m] \text{ 上 } v \in (0, 1), \text{ 而在 } [m+1, N] \text{ 上为 } 0; \text{ 并且 } \min_{0 \leq i \leq m} R_i(v) > 0 \right\}.$$

定理 11 (差分形式的对偶变分公式)

$$\inf_{v \in \mathcal{V}'} \sup_{i \in E} R_i(v) = \lambda_0 = \sup_{v \in \mathcal{V}} \inf_{i \in E} R_i(v).$$

作为定理 11 的非平凡推论, 我们得到如下简单结果.

推论 12 $\lambda_0 \geq \sup_{c \in (0, 1)} \inf_{i \geq 0} [b_i(1-c) - a_i(c^{-1} - 1)]$.

关于以上三个算子, 最好算的是 R , 其次是 I . 当然, 它们的精度反序. 上述相关结果是文献 [37] 前三节的主题.

致谢 本文是笔者发表在《中国科学: 数学》庆贺侯振挺教授 80 华诞专辑^[39]和庆贺严士健教授 90 华诞专辑文章^[2]的续篇. 这三篇序列文章概略地回顾了笔者在严士健、侯振挺两位导师的指导和王梓坤先生的指点下所走过的研究历

程. 这些回忆一方面让笔者深感惭愧, 仔细一算, 没有做出多少好成果, 有愧师恩; 另一方面, 也深深怀念老师们几十年的栽培之情. 仅以此拙文表达对王梓坤老师 90 华诞的衷心祝贺¹⁾.

参考文献

- 1 Chen M F. From Markov Chains to Nonequilibrium Particle Systems, 2nd ed. Singapore: World Scientific Publishing, 2004
- 2 陈木法. 源自统计物理的数学论题—统计物理与概率的交叉. 中国科学: 数学, 2018, doi: 10.1360/N012017-00270
- 3 Liggett T M. Exponential L_2 convergence of attractive reversible nearest particle systems. *Ann Probab*, 1989, 17: 403–432
- 4 Holley R A, Stroock D W. L_2 theory for the stochastic Ising model. *Z Wahrscheinlichkeit Verw Gebiete*, 1976, 35: 87–101
- 5 王梓坤. 生灭过程与马尔科夫链. 北京: 科学出版社, 1980 [王梓坤, 杨向群. 生灭过程与马尔科夫链 (第二版). 北京: 科学出版社, 2005]
- 6 Chen M F. Exponential L^2 -convergence and L^2 -spectral gap for Markov processes. *Acta Math Sin Engl Ser*, 1991, 7: 19–37
- 7 Chen M F. Eigenvalues, Inequalities, and Ergodic Theory. New York: Springer, 2005
- 8 Chen M F, Zhang X. Isospectral operators. *Commun Math Stat*, 2014, 2: 17–32
- 9 Chen M F. The charming leading eigenpair. *Adv Math (China)*, 2017, 46: 281–297
- 10 Chen M F. Trilogy on computing maximal eigenpair. In: *Queueing Theory and Network Applications. Lecture Notes in Computer Science*, vol. 10591. New York: Springer, 2017, 312–329
- 11 Chen M F. Hermitizable, isospectral complex matrices or differential operators. *Front Math China*, in press, 2018
- 12 Chen M F. Estimation of spectral gap for Markov chains. *Acta Math Sin New Ser*, 1996, 12: 337–360
- 13 Chen M F, Wang F Y. Estimation of spectral gap for elliptic operators. *Trans Amer Math Soc*, 1997, 349: 1239–1267
- 14 Chen M F, Wang F Y. General formula for lower bound of the first eigenvalue on Riemannian manifolds. *Sci China Ser A*, 1997, 40: 384–394 [陈木法, 王凤雨. Riemann 流形第一特征值下界估计的一般公式. 中国科学 A 辑, 1997, 27: 34–42]
- 15 Chen M F, Scacciatelli E, Yao L. Linear approximation of the first eigenvalue on compact manifolds. *Sci China Ser A*, 2002, 45: 450–461 [陈木法, 姚亮, Scacciatelli E. Riemann 流形第一特征值的线性逼近. 中国科学 A 辑, 2001, 31: 807–816]
- 16 Chen M F. General estimate of the first eigenvalue on manifolds. *Front Math China*, 2011, 6: 1025–1043
- 17 Chen M F. Eigenvalues, inequalities and ergodic theory. *Chinese Sci Bull*, 2000, 45: 769–774 [1999, 44: 2465–2470]
- 18 Chen M F. Eigenvalues, inequalities and ergodic theory (II). *Adv Math*, 1999, 28: 481–505
- 19 Rachev S T, Klebanov L, Stoyanov S V, et al. *The Methods of Distances in the Theory of Probability and Statistics*. New York: Springer, 2013
- 20 Muckenhoupt B. Hardy's inequality with weights. *Studia Math*, 1972, 44: 31–38
- 21 Chen M F. Explicit bounds of the first eigenvalue. *Sci China Ser A*, 2000, 43: 1051–1059
- 22 Chen M F. Variational formulas and approximation theorems for the first eigenvalue in dimension one. *Sci China Ser A*, 2001, 44: 409–418
- 23 张汉君, 林祥, 侯振挺. 标准转移函数的多项式一致收敛性. *数学年刊 A 辑*, 2000, 21: 351–356
- 24 Zhang Y H. Strong ergodicity for single-birth processes. *J Appl Probab*, 2001, 38: 270–277
- 25 Bobkov S G, Götze F. Discrete isoperimetric and Poincaré-type inequalities. *Probab Theory Related Fields*, 1999, 114: 245–277
- 26 Bobkov S G, Götze F. Exponential integrability and transportation cost related to logarithmic Sobolev inequalities. *J Funct Anal*, 1999, 163: 1–28
- 27 Mao Y H. The logarithmic Sobolev inequalities for birth-death process and diffusion process on the line. *Chinese J Appl Probab Statist*, 2002, 18: 94–100
- 28 Mao Y H. Nash inequalities for Markov processes in dimension one. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2002, 18: 147–156
- 29 Mao Y H. On the empty essential spectrum for Markov processes in dimension one. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2006, 22: 807–812
- 30 Miclo L. An example of application of discrete Hardy's inequalities. *Markov Processes Relat Fields*, 1999, 5: 319–330
- 31 Chen M F. Variational formulas of Poincaré-type inequalities in Banach spaces of functions on the line. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2002, 18: 417–436

1) 本文中所用到的作者的论文, 应当都可从其主页 <http://math0.bnu.edu.cn/~chenmf> 中找到. 特别是中间的论文集: Vol.1–Vol.4.

- 32 Chen M F. Variational formulas of Poincaré-type inequalities for birth-death processes. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2003, 19: 625–644
- 33 Chen M F. Ten explicit criteria of one-dimensional processes. In: *Proceedings of the Conference on Stochastic Analysis on Large Scale Interacting Systems*, Shonan Village Center, Hayama, Japan (July 17–26, 2002), *Advanced Studies in Pure Mathematics*. Tokyo: Mathematical Society of Japan, 2004, 39: 89–114
- 34 Chen M F. Ergodic convergence rates of Markov processes—Eigenvalues, inequalities and ergodic theory. In: *Proceedings of ICM*, vol. 3. Beijing: Higher Education Press, 2002
- 35 Chen M F. Spectral gap and logarithmic Sobolev constant for continuous spin systems. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2008, 24: 705–736
- 36 Chen M F, Wang F Y. Estimates of logarithmic Sobolev constant: An improvement of Bakry-Emery criterion. *J Funct Anal*, 1997, 144: 287–300
- 37 Chen M F. Speed of stability for birth-death processes. *Front Math China*, 2010, 5: 379–515
- 38 Chen M F. Bilateral Hardy-type inequalities. *Acta Math Sin Engl Ser*, 2013, 29: 1–32
- 39 陈木法. 一维算子两个谱问题的判别准则. *中国科学: 数学*, 2015, 45: 429–438
- 40 Chen M F. Unified speed estimation of various stabilities. *Chinese J Appl Probab Statist*, 2016, 32: 1–22
- 41 Chen M F. Efficient initials for computing maximal eigenpair. *Front Math China*, 2016, 11: 1379–1418

Mathematical topics motivated from statistical physics —Interaction of phase transition and mathematics

Mufa Chen

Abstract The goal of the paper is to explore the core issue of statistical physics—The phenomenon of phase transition. To do this, we need to develop some existing ones or find new mathematical tools, and the emphasis is on the speed at which we can characterize various stabilities. The main contents are as follows: the coupling and distance methods and ergodic implication diagram, explicit criteria of various ergodicity and a lattice quantum field model, one-dimensional dual variational formulas, unified basic estimates and Hardy-inequality.

Keywords coupling and distance method, ergodicity implication diagram, explicit criteria, dual variational formulas, basic estimate, Hardy-inequality

MSC(2010) 60J27, 60K35, 34L05, 42B35, 58C40, 60K90

doi: 10.1360/N012017-00269