IME

Introdução ao formalismo *Mori-Zwanzig*

Lucas Amaral Taylor

Instituto de Matemática e Estatística
(IME-USP)

Estrutura da apresentação

Objetivo

1. O artigo de [CLM21] busca **simplificar o modelo de Lorenz 80 (L80)** preservando seu comportamento.
2. Para isso, utiliza-se o **método de Mori-Zwanzig (MZ)**, uma abordagem físico-estatística adequada a sistemas como o L80.
3. Dada sua importância, realizaremos esta apresentação para:
   - Apoiar a compreensão da aplicação ao L80.
   - Oferecer uma base teórica sólida para possíveis explorações posteriores.

Introdução

- O método MZ foi desenvolvido por Hajime Mori e Robert W. Zwanzig na segunda metade do século XX.
- **Ideia central do método MZ**:
  - Classificação das variáveis em:
    - Resolvidas
    - Não resolvidas:
  - Substituição das variáveis não resolvidas por:
    - *Ruído estocástico* (*noise*).
    - *Termo de memória* (*memory term*), ou de amortecimento.
- Essa substituição permite preservar a dinâmica do sistema resolvido, mesmo com informações incompletas.

Motivação: exemplo didático

Tomemos o exemplo motivador [CH13].
O sistema é constituído por duas partículas em 1 dimensão. Esse é um sistema de dois osciladores harmônicos sem interação acoplados, com o Hamiltoniano dado por:

$$H = \frac{1}{2}\left(q_1^2 + q_2^2 + q_1^2 q_2^2 + p_1^2 + p_2^2\right)$$

Equações de movimento

O sistema é dado por:

$$\begin{aligned}
\dot{q}_1 &= p_1\,, \\
\dot{p}_1 &= -q_1(1+q_2^2) \\
\dot{q}_2 &= p_2 \\
\dot{p}_2 &= -q_2(1+q_1^2)
\end{aligned}$$

Onde p_i e q_i são o momento e a posição da partícula i
Temos que apenas $q_1(0)$ e $p_1(0)$ são conhecidos. E $q_2(0)$ e $p_2(0)$ são definidos por:

$$W = \frac{e^{-H(q,p)}}{Z}$$

Simulação e estimativa

- Para cada amostra de $q_2(0)$ e $p_2(0)$, obtemos uma nova trajetória de $q_1(t)$ e $p_1(t)$.
- Interesse em:

$$\mathbb{E}[q_1(t) \mid q_1(0), p_1(0)], \quad \mathbb{E}[p_1(t) \mid q_1(0), p_1(0)]$$

- Média feita sobre várias simulações.

Limitação da abordagem

- A abordagem é válida apenas para **tempos curtos**.
- Para t grande: as médias se afastam dos valores reais.

Gráfico

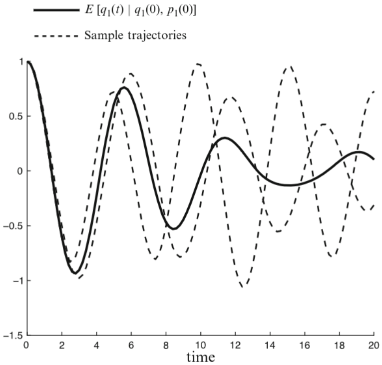

Figure: Simulação - Exemplo motivador

EDOs como EDPs lineares

A partir do sistema de EDO:

$$\frac{d}{dt}\phi(x,t) = R(\phi(x,t)), \quad \phi(x,0) = x$$

Define-se o Operador de Liouville:

$$L = \sum_i R_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}$$

Assim, temos o sistema equivalente de EDP:

$$u_t = Lu, \quad u(x,0) = g(x), \quad u(x,t) = g(\phi(x,t))$$

Notação de semigrupo

- Usada para representar soluções de EDPs de forma compacta.
- Exemplo: equação do calor

$$v_t - \frac{1}{2}\Delta v = 0, \quad v(x,0) = \phi(x)$$

- Solução escrita como:

$$v(t) = e^{\frac{1}{2}t\Delta}\phi$$

- Propriedade: $e^{(t+s)\Delta} = e^{t\Delta}e^{s\Delta}$

Aplicando ao Operador de Liouville

- Solução da EDP:
$$e^{tL}g(x) = g(\phi(x, t))$$
- g comuta com a evolução do sistema.
- Relação de comutação:
$$Le^{tL} = e^{tL}L$$
- Para matrizes: fórmula de Dyson:

$$\exp(t(A+B)) = \exp(tA) + \int_0^t \exp((t-s)(A+B))B\exp(sA)\,ds$$

Produto interno hermitiano

- Produto interno unidimensional:

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} u(x)v(x)\, dx$$

- Ortogonalidade: $\langle p_n, p_m \rangle = 0$ se $n \neq m$
- Normalização: $\langle p_n, p_n \rangle = 1$

Extensão n-dimensional

- Produto interno generalizado:

$$\langle u, v \rangle = \int \cdots \int (2\pi)^{-n/2} e^{-\sum \frac{x_i^2}{2}} u(x) v(x)\, dx$$

- Possibilidade de definir polinômios ortonormais em q, p com densidade $e^{-H/T}$

Projeção e Mori-Zwanzig

- Espaço Γ n-dimensional com densidade de probabilidade.
- Divide-se x em $\hat{x}$ (resolvidas) e $\tilde{x}$ (não resolvidas).
- Projeção ortogonal: $\mathbb{P}g = \mathbb{E}[g \mid \hat{x}]$
- Subespaço gerado por polinômios hermitianos em $\hat{x}$.

Construção do formalismo MZ

- Separação das variáveis: $x = (\hat{x}, \tilde{x})$ e $\phi = (\hat{\phi}, \tilde{\phi})$ e $R = (\hat{R}, \tilde{R})$
- Foco nas m primeiras componentes: variáveis resolvidas.
- Escrevemos: $\hat{\phi}_j(x, t) = e^{tL}x_j$, $1 \leq j \leq m$
- Derivando no tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{tL} x_j = e^{tL} L x_j$$

- Com projeções ortogonais: $\mathbb{Q} = I - \mathbb{P}$

Equação de Mori-Zwanzig via Dyson

- Fórmula de Dyson aplicada:

$$e^{tL} = e^{t\mathbb{Q}L} + \int_0^t e^{(t-s)L}\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L}\, ds$$

- Substituindo na equação de evolução:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{tL} x_j = e^{tL}\mathbb{P}Lx_j + e^{t\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j + \int_0^t e^{(t-s)L}\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j\, ds$$

Análise termo a termo

Vamos decompor o termo $e^{tL}x_j$ segundo a equação de Mori-Zwanzig, analisando separadamente:

- O termo markoviano (primeiro termo),
- O termo de ruído (segundo termo),
- O termo de memória (terceiro termo).

Primeiro termo

O primeiro termo é dado por:

$$e^{tL}\mathbb{P}Lx_j \tag{1}$$

A partir dele, temos que:

$$\begin{aligned}
Lx_j &= \sum_i R_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right) x_j = R_j(x),\\
\mathbb{P}Lx_j &= \mathbb{E}[R_j(x) \mid \hat{x}],\\
e^{tL}\mathbb{P}Lx_j &= \bar{R}_j\left(\hat{\phi}(x,t)\right).
\end{aligned}$$

Note que é um termo markoviano, pois depende apenas do estado atual $\hat{\phi}(x,t)$.

Segundo termo

O segundo termo é dado por:

$$w_j = e^{t\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j$$

A partir dele, temos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} w_j(x,t) &= \mathbb{Q}Lw_j(x,t), \\ w_j(x,0) &= \mathbb{Q}Lx_j = R_j(x) - \mathbb{E}[R_j \mid \hat{x}]. \end{aligned} \tag{2}$$

A função $w_j(x,0)$ representa a *parte flutuante* de $R_j(x)$ e evolui segundo a dinâmica ortogonal. Temos $\mathbb{P}w_j(x,t) = 0$ para todo t.

Subespaço de ruído

O *subespaço do ruído* é formado por funções ortogonais às funções de $\hat{x}$. Isso corresponde, geralmente, a termos que dependem de $\tilde{x}$. Esses termos são imprevisíveis dado $\hat{x}$.

Terceiro termo

O terceiro termo é dado por:

$$\int_0^t e^{(t-s)L}\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j$$

Este termo depende do histórico do sistema: é o **termo de memória**.
Projeção usando polinômios hermitiano $H_1, H_2, \ldots$:

$$\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j = \sum_k \langle L\mathbb{Q}e^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j, H_k(\hat{x})\rangle H_k(\hat{x}).$$

Produto interno e antissimetria de L

Se L é antissimétrico: $(u, Lv) = -(Lu, v)$, então:

$$\begin{aligned}(L\mathbb{Q}e^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j, H_k) &= -(\mathbb{Q}e^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j, LH_k) \\ &= -(e^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j, \mathbb{Q}LH_k).\end{aligned}$$

O terceiro termo é uma soma de covariâncias temporais de ruído.

Sistema hamiltoniano

Vamos relembrar o sistema trabalhado:

$$H = \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2 + q_1^2 q_2^2 + p_1^2 + p_2^2)$$

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= p_1, & \dot{p}_1 &= -q_1(1 + q_2^2), \\ \dot{q}_2 &= p_2, & \dot{p}_2 &= -q_2(1 + q_1^2) \end{aligned}$$

Operador e densidade

A evolução temporal é governada pelo operador de Liouville:

$$L = p_1 \frac{\partial}{\partial q_1} - q_1(1 + q_2^2)\frac{\partial}{\partial p_1} + p_2 \frac{\partial}{\partial q_2} - q_2(1 + q_1^2)\frac{\partial}{\partial p_2}.$$

As variáveis não resolvidas seguem uma distribuição canônica com temperatura $T = 1$:

$$W(x) = \exp\left(\frac{-H(q,p)}{Z}\right)$$

Primeira aproximação: Modelo-t

Para simplificar o termo de memória, usamos a chamada aproximação modelo-t:

$$\int_0^t e^{(t-s)L}\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L}ds \approx te^{tL}\mathbb{P}L\mathbb{Q}Lx_j$$

Chegamos à seguinte equação aproximada:

$$\frac{d}{dt}e^{tL}\hat{x} = e^{tL}\mathbb{P}L\hat{x} + te^{tL}\mathbb{P}L\mathbb{Q}L\hat{x} + e^{tL}\mathbb{Q}L\mathbb{Q}Lx_j$$

Sistema com ruído

Com isso, as equações para q_1 e p_1 se tornam:

$$\frac{d}{dt}q_1 = p_1\,,$$
$$\frac{d}{dt}p_1 = -q_1\left(1 + \frac{1}{1+q_1^2}\right) - 2t\frac{q_1^2 p_1}{(1+q_1^2)^2} + e^{tL}\mathbb{Q}L\mathbb{Q}Lp_1$$

O termo final representa o ruído originado pelas variáveis não resolvidas.

Esperanças condicionais

Nosso objetivo é estimar:

$$\mathbb{E}[q_1(t)|q_1(0), p_1(0)], \quad \mathbb{E}[p_1(t)|q_1(0), p_1(0)]$$

Ao aplicar o operador $\mathbb{P}$ às equações anteriores, o termo de ruído desaparece.

Segunda aproximação

Adotamos uma segunda aproximação: comutação entre média e função.

$$\mathbb{E}[(1 + q_1^2(t))^{-1} | q_1(0), p_1(0)] \approx \left(1 + \mathbb{E}[q_1(t)]^2\right)^{-1}$$

Com isso, definimos:

$$Q_1(t) = \mathbb{E}[q_1(t)], \quad P_1(t) = \mathbb{E}[p_1(t)]$$

Sistema final

Finalmente, obtemos o sistema determinístico aproximado:

$$\frac{d}{dt}Q_1 = P_1\,,$$
$$\frac{d}{dt}P_1 = -Q_1\left(1 + \frac{1}{1+Q_1^2}\right) - t\cdot\frac{2Q_1^2P_1}{(1+Q_1^2)^2}$$

Essa é a versão suavizada das equações iniciais, onde os efeitos do ruído foram absorvidos pela média.

Gráfico

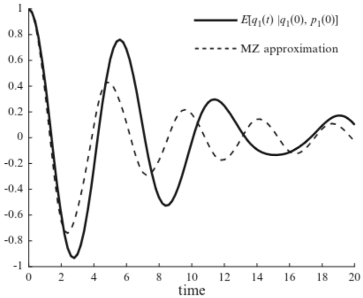

Figure: Simulação - Exemplo motivador com o método Mori-Zwanzig

Principais dúvidas

1. Equação densidade probabilidade canônica;
2. Valor esperado de funções
3. Hamiltonianos, sistemas hamiltonianos
4. Espaço de projeção
5. Segunda aproximação

Referências

[CH13] Alexandre J. Chorin and Ole H Hald. *Stochastic Tools in Mathematics and Science*. Springer New York, 2013. ISBN: 9781461469803. DOI: 10.1007/978-1-4614-6980-3. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-6980-3.

[CLM21] Mickaël D. Chekroun, Honghu Liu, and James C. McWilliams. "Stochastic rectification of fast oscillations on slow manifold closures". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118.48 (Nov. 2021). ISSN: 1091-6490. DOI: 10.1073/pnas.2113650118. URL: http://dx.doi.org/10.1073/pnas.2113650118.

Fim da apresentação!