Introdução ao formalismo *Mori-Zwanzig*

Lucas Amaral Taylor

Instituto de Matemática e Estatística
(IME-USP)

Estrutura da apresentação

Objetivo

- O artigo de [CLM21] busca **simplificar o modelo de Lorenz 80 (L80)** preservando seu comportamento dinâmico.
- Para isso, utiliza-se o **método de Mori-Zwanzig (MZ)**, uma abordagem físico-estatística adequada a sistemas como o L80.
- Dada sua importância, o método MZ é introduzido no trabalho 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, inicialmente para sistemas hamiltonianos.
- **Ideia central do método MZ**:
  - Classificação das variáveis em:
    - **Resolvidas**: bem conhecidas e observáveis.
    - **Não resolvidas**: desconhecidas ou inobserváveis.
  - 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

- Exemplo de [CH13].
- Sistema com duas partículas em 1D.
- Hamiltoniano:

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

Equações de movimento

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

- Inicialmente, apenas $q_1(0)$ e $p_1(0)$ são conhecidos.
- $q_2(0)$ e $p_2(0)$ são amostrados de

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

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.

EDOs como EDPs lineares

- Sistema de EDO:

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

- Define-se o Operador de Liouville:

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

- Sistema equivalente de EDP:

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

- Solução: $u(x,t) = g(\phi(x,t))$

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 Duhamel:

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

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 $\phi = (\hat{\phi}, \tilde{\phi})$
- 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: markoviano

- Primeiro termo: $e^{tL}\mathbb{P}Lx_j$
- $Lx_j = R_j(x) \implies \mathbb{P}Lx_j = \mathbb{E}[R_j(x) \mid \hat{x}]$
- Concluímos: $e^{tL}\mathbb{P}Lx_j = \bar{R}_j(\hat{\phi}(x,t))$
- Termo markoviano: depende apenas de $\hat{\phi}(x,t)$.

Análise termo a termo: ruído

- Segundo termo: $w_j = e^{t\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}Lx_j$
- Evolui pela equação: $\partial_t w_j = \mathbb{Q}Lw_j$
- Condição inicial: $w_j(0) = R_j(x) - \mathbb{E}[R_j(x) \mid \hat{x}]$
- Representa a parte imprevisível, ou *flutuante*, da dinâmica.
- Sempre ortogonal às funções de $\hat{x}$: $\mathbb{P}w_j = 0$.

Análise termo a termo: memória

- Terceiro termo:

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

- Termo de **memória**: depende da história passada do sistema.
- Projeção pode ser expandida em polinômios hermitianos:

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

- Representa uma soma de covariâncias temporais de ruídos.

Referências

fazer depois

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!