

Introdução ao Formalismo Mori-Zwanzig

Aluno: Lucas Amaral Taylor

Orientador: Prof. Dr. Breno Raphaldini Ferreira da Silva

Abril de 2025

1 Introdução

O principal objetivo do artigo de Chekroun, Liu e McWilliams (2021) é simplificar o modelo de Lorenz 80, preservando seu comportamento. Para isso, utilizaremos o método de Mori-Zwanzig, que é uma abordagem física-estatística aplicável em sistemas como o L80.

O método de Mori-Zwanzig, desenvolvido por Robert Walter Zwanzig e Hajime Mori na segunda metade do século XX, é utilizado em sistemas hamiltonianos. Esse método consiste em classificar as variáveis do sistema em duas categorias: “resolvidas” e “não resolvidas”. As variáveis resolvidas são aquelas cujos comportamentos e valores são bem conhecidos, enquanto as não resolvidas são aquelas para as quais não se possui informações diretas. Para substituir essas variáveis não resolvidas, o método introduz termos estocásticos, denominados ruídos (*noise*), além de um termo de amortecimento (*damping*), também conhecido como termo de memória (*memory term*). Essa abordagem permite que o comportamento do sistema de interesse seja preservado de maneira adequada, mesmo sem conhecer completamente as variáveis não resolvidas.

Dada a relevância deste método para o trabalho de Chekroun, Liu e McWilliams (2021), optamos por incluir uma introdução ao formalismo de Mori-Zwanzig, a fim de proporcionar uma melhor compreensão de sua aplicação no contexto do modelo de Lorenz 80 e permitir uma base teórica sólida para eventuais explorações.

2 Motivação

Consideremos o exemplo de Chorin e Hald (2013, p.173): um sistema com duas partículas em uma dimensão espacial, com Hamiltoniano dado por:

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

onde q_i e p_i , $i = 1, 2$, representam posições e momentos. Os osciladores harmônicos, uma vez em movimento, oscilam indefinidamente. As equações de movimento são expressas por:

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

Suponha que os valores iniciais $q_1(0)$ e $p_1(0)$ sejam conhecidos. Assuma que $q_2(0)$ e $p_2(0)$ são amostrados a partir da função densidade de probabilidade:

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

Essa amostragem pode ser realizada, por exemplo, por meio do método de Monte Carlo via cadeia de Markov.

Dada uma amostra de $q_2(0)$ e $p_2(0)$, o sistema (1) pode ser resolvido. Contudo, para cada nova amostra de $q_2(0)$ e $p_2(0)$, obtém-se uma trajetória distinta para $q_1(t)$ e $p_1(t)$. Em particular, pode-se querer calcular os valores esperados de q_1 e p_1 no tempo t , dados seus valores iniciais, os quais representam as melhores estimativas de $q_1(t)$ e $p_1(t)$:

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

Uma vez que q_2 e p_2 foram amostrados, o sistema completo de quatro equações pode ser resolvido. Isso pode ser feito repetidamente, permitindo calcular a média dos valores de $q_1(t)$ e $p_1(t)$ ao longo de várias execuções.

No entanto, há uma limitação: essa abordagem é adequada apenas para os instantes iniciais do sistema. À medida que o tempo avança, o valor esperado de $q_1(t)$ se distancia do valor real, comprometendo a precisão da aproximação.

3 Prolegômenos

3.1 Escrevendo sistemas de EDO não lineares como sistemas de EDPs lineares

Considere o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) dado por:

$$\frac{d}{dt}\phi(x, t) = R(\phi(x, t)), \quad \phi(x, 0) = x, \quad (2)$$

onde R é uma função não linear, ϕ é uma função dependente do tempo, e R , ϕ e x podem assumir dimensões infinitas, sendo formados pelos vetores R_i , ϕ_i e x_i , respectivamente.

A partir disso, podemos definir o *Operador de Liouville* associado à equação (2) como:

$$L = \sum_i R_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (3)$$

Utilizando o *Operador de Liouville*, podemos transformar o sistema de EDOs não lineares em um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) lineares da forma:

$$u_t = Lu, \quad u(x, 0) = g(x) \quad (4)$$

A solução desse sistema existe, é única, e é dada por:

$$u(x, t) = g(\phi(x, t)) \quad (5)$$

Portanto, temos que a equação (4) é bem definida¹.

3.2 Notação de semigrupo

3.3 Definição de semigrupo

Tomemos X um conjunto não vazio, dotado de uma operação binária $*$, ou seja, $X \times X \rightarrow X$, que satisfaz a propriedade de associatividade:

$$(a * b) * c = a * (b * c), \quad \forall a, b, c \in X.$$

¹Detalhes da demonstração podem ser encontrados em Chorin e Hald (2013, p. 181-182)

3.3.1 Introdução à notação

A notação de semigrupo oferece uma forma compacta e eficiente de representar soluções para equações diferenciais, particularmente as parciais ou de evolução.

Considere o operador Δ definido por:

$$\Delta\psi = \psi_{xx}, \quad \text{onde } \psi \text{ é uma função suave.}$$

Agora, considere a equação diferencial:

$$\frac{dv}{dt} - kv = 0, \quad v(0) = v_0,$$

cuja solução é bem conhecida: $v(t) = v_0 e^{kt}$.

De forma análoga, considere a equação do calor:

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

onde v_t é a derivada de v em relação ao tempo e $\phi(x)$ é a condição inicial. Em vez de resolver diretamente, expressamos a solução utilizando a notação de semigrupo:

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

Aqui, $\mathbb{E}^{\frac{1}{2}t\Delta}$ é um operador semigrupo gerado pela operação de difusão (pelo operador Δ). Ele é aplicado à condição inicial $\phi(x)$, e a solução $v(t)$ descreve a evolução temporal de $v(x, t)$ ao longo do tempo t . Essa notação permite representar soluções de equações diferenciais de maneira compacta, explorando a estrutura associativa da operação de semigrupo. Especificamente, ela satisfaz a propriedade de composição:

$$e^{\frac{1}{2}(t+s)\Delta} = e^{\frac{1}{2}t\Delta} e^{\frac{1}{2}s\Delta}.$$

3.4 Aplicação da notação

Dada a notação de semigrupo apresentada anteriormente, aplicamos esta notação à equação (5):

$$e^{tL}g(x) = g(\phi(x, t)) \tag{6}$$

Note que $\mathbb{E}^{tL}x$ não representa uma avaliação direta de \mathbb{E}^{tL} , mas sim a ação do operador \mathbb{E}^{tL} sobre o vetor formado pelos componentes x_i . Além disso, a função g comuta com a variação temporal das condições iniciais de x_i .

Vale destacar que g é uma função independente do tempo em relação às variáveis que descrevem o sistema físico, e sua variação ocorre exclusivamente devido à mudança dessas variáveis ao longo do tempo. Assim, a equação (4) pode ser expressa como:

$$Le^{tL} = e^{tL}L \quad (7)$$

Essa mesma relação se aplica a matrizes: sejam A e B duas matrizes, então a seguinte identidade é válida:

$$\exp(t(A+B)) = \exp(tA) + \int_0^t \exp((t-s)(A+B)) B \exp(sA) ds \quad (8)$$

Esta equação, conhecida como *Fórmula de Duhamel* ou *fórmula de Dyson*, é bem definida.

3.5 Polinômios Hermitianos

Primeiramente, definimos o produto interno como:

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} u(x)v(x) dx \quad (9)$$

Os polinômios $p_n(x)$ e $p_m(x)$ são ortonormais em relação a esse produto interno (9) quando satisfazem a seguinte condição:

$$\langle p_n, p_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} p_n(x)p_m(x) dx = \delta_{nm},$$

em que δ_{nm} é o delta de Kronecker, que apresenta as propriedades:

1. **Ortogonalidade:** Para $n \neq m$, os polinômios são ortogonais, ou seja, o produto interno entre eles é nulo:

$$\langle p_n, p_m \rangle = 0 \quad \text{quando} \quad n \neq m$$

2. **Normalização:** Para $n = m$, os polinômios são normalizados, de modo que o produto interno é igual a 1:

$$\langle p_n, p_n \rangle = 1$$

No caso n -dimensional, o produto interno se generaliza para:

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} (2\pi)^{-n/2} \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{2}\right) u(x)v(x) dx_1 \dots dx_n$$

De forma mais geral, se $H(q, p)$ é um Hamiltoniano, é possível definir uma família de polinômios nas variáveis q e p que sejam ortonormais com respeito à densidade canônica $Z^{-1}e^{-H/T}$. Os polinômios que satisfazem essa condição ainda são chamados de *polinômios hermitianos*.

Por fim, para o formalismo de Mori-Zwanzig, consideraremos um espaço n -dimensional Γ com uma densidade de probabilidade dada. Dividiremos as coordenadas em dois tipos: \hat{x} e \tilde{x} . Seja g uma função de x ; então $\mathbb{P}g = \mathbb{E}[g \mid \hat{x}]$ é uma projeção ortogonal sobre o subespaço das funções de \hat{x} . Temos que essa projeção gera um subespaço de polinômios hermitianos que são funções de \hat{x} e projetando sobre esses polinômios.

4 Mori-Zwanzig

4.1 Construção

Tomemos novamente o sistema (2), reproduzido abaixo:

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

Lembremos que a equação é composta por componentes de dimensão n . Dentre essas n componentes, definimos as primeiras m componentes de ϕ , com $m < n$, como as variáveis de interesse. Em seguida, classificamos $\hat{\phi}$ como as variáveis “resolvidas” e $\tilde{\phi}$ como as variáveis “não resolvidas”:

$$\phi = (\hat{\phi}, \tilde{\phi}), \quad \hat{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_m), \quad \tilde{\phi} = (\phi_{m+1}, \dots, \phi_n)$$

O mesmo vale para x e R : $x = (\hat{x}, \tilde{x})$ e $R = (\hat{R}, \tilde{R})$. A partir das variáveis resolvidas, buscamos criar predições para o modelo de interesse, utilizando as soluções de uma parte da equação.

Com base no *Operador de Liouville* e na *notação de semigrupo*, podemos reescrever as componentes de $\hat{\phi}$ como²:

$$\hat{\phi}_j(x, t) = e^{tL}x_j, \quad 1 \leq j \leq m$$

Ainda na notação de semigrupo, a equação dessas componentes é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}e^{tL}x_j = Le^{tL}x_j = e^{tL}Lx \tag{10}$$

A partir da *projeção ortogonal* introduzida na seção anterior, definimos \mathbb{P} como a projeção dada por: $\mathbb{P}g(x) = \mathbb{E}[g|\hat{x}]$. Assumimos que, no instante $t = 0$, conhecemos a densidade conjunta de todas as variáveis x , mas apenas os dados iniciais \hat{x} são conhecidos. A densidade das variáveis em \tilde{x} é, então, a densidade conjunta de todas as variáveis x com \hat{x} fixado. Assim, \mathbb{P} é uma projeção sobre um espaço de funções com variáveis fixas e, portanto, independente do tempo.

As projeções $\mathbb{P}\hat{\phi}(t) = \mathbb{E}[\hat{\phi}(t)|\hat{x}]$ são de nosso maior interesse, pois estimam o comportamento do sistema a partir de um conjunto reduzido de variáveis.

Definindo $\mathbb{Q} = I - \mathbb{P}$ e considerando que as seguintes propriedades são válidas para quaisquer projeções ortogonais:

1. $\mathbb{P}^2 = \mathbb{P}$;

²Note que cada componente depende de **todos** os valores de x . Portanto, se \tilde{x} for aleatório, então $\hat{\phi}$ também será.

$$2. \mathbb{Q}^2 = \mathbb{Q};$$

$$3. \mathbb{P}\mathbb{Q} = 0.$$

Podemos reescrever a equação (10) como:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{tL} x_j = e^{tL} \mathbb{P} L x_j + e^{tL} \mathbb{Q} L x_j \quad (11)$$

Utilizando agora a *fórmula de Dyson*, com $A = \mathbb{Q}L$ e $B = \mathbb{Q}L$, obtemos:

$$e^{tL} = e^{t\mathbb{Q}L} + \int_0^t e^{(t-s)L} \mathbb{P} L e^{s\mathbb{Q}L} ds \quad (12)$$

Pela linearidade da equação de Liouville e a partir das equações (11) e (12), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{tL} x_j = e^{tL} \mathbb{P} L x_j + e^{t\mathbb{Q}L} \mathbb{Q} L x_j + \int_0^t e^{(t-s)L} \mathbb{P} L e^{s\mathbb{Q}L} \mathbb{Q} L x_j ds \quad (13)$$

A equação acima expressa a *equação de Mori-Zwanzig*.

4.2 Análise termo a termo

4.2.1 Primeiro termo

O primeiro termo é dado por:

$$e^{tL} \mathbb{P} L x_j \quad (14)$$

Observe que:

$$L x_j = \sum_i R_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right) x_j = R_j(x)$$

Portanto,

$$\mathbb{P} L x_j = \mathbb{E}[R_j(x) | \hat{x}] \quad \text{Note que esta é uma função exclusivamente de } \hat{x}.$$

Com isso, podemos concluir que:

$$e^{tL} \mathbb{P} L x_j = \bar{R}_j \left(\hat{\phi}(x, t) \right)$$

Mais do que isso: o primeiro termo representa a dinâmica própria do sistema nas variáveis resolvidas. Além disso, trata-se de um termo markoviano, pois depende apenas do estado atual do sistema no tempo t .

4.2.2 Segundo termo

Para o segundo termo, definimos:

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

Por definição, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}w_j(x, t) = \mathbb{Q}Lw_j(x, t), \quad (15)$$

$$w_j(x, 0) = \mathbb{Q}Lx_j = (I - \mathbb{P})R_j(x) = R_j(x) - \mathbb{E}[R_j \mid \hat{x}]. \quad (16)$$

Note que $w_j(x, 0) = \mathbb{Q}Lx_j = R_j(x) - \mathbb{E}[R_j(x) \mid \hat{x}]$ representa a *parte flutuante* da variável $R_j(x)$, ou seja, o componente imprevisível dado \hat{x} . Essa parte evolui de acordo com as *dinâmicas ortogonais*, de modo que $\mathbb{P}w_j(x, t) = 0$ para todo t , mantendo o termo como um ruído puramente não resolvido ao longo do tempo.

Mais especificamente, o subespaço do ruído (*noise subspace*) é formado pelas componentes das funções que são ortogonais às funções de \hat{x} , geralmente, isso corresponde a termos que dependem de \tilde{x} .

4.2.3 Terceiro termo

O terceiro termo, dado por:

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

é classificado como o termo de memória (*memory term*), já que este envolve a integração de quantidades que dependem de estados anteriores ao atual.

Tomemos que \mathbb{P} seja projete na extensão dos polinômios hermitianos $H - 1, H_2, \dots$ com argumentos em \hat{x} . Assim, para dada função ψ , temos que: $\mathbb{P}\psi = \sum (\psi, H_k) H_k$, assim, temos:

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

O produto interno é definido como um valor esperado com respeito à densidade de probabilidade inicial. Vamos assumir que L é antissimétrico, ou seja, $(u, Lv) = -(Lu, v)$, então:

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

Tanto QLx_j quanto QLH_k estão no subespaço de ruído, e $\mathbb{E}^{sQL}QLx_j$ é uma solução no tempo s da equação de dinâmica ortogonal com dados no subespaço de ruído; $PLe^{sQL}QLx_j$ é então uma **soma de covariâncias temporais de ruídos**.

5 Voltando à motivação

5.1 Introdução

Inicialmente, vamos relembrar o problema em questão: temos um sistema hamiltoniano, com o hamiltoniano definido por

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

As equações do movimento associadas são dadas por:

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

Aplicando o *Operador de Liouville*, obtemos:

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

Como antes, assumimos que os valores iniciais $q_1(0)$ e $p_1(0)$ são conhecidos, enquanto q_2 e p_2 são definidos por uma função densidade de probabilidade dada por:

$$W(x) = \exp\left(\frac{-H(q_1, p_1, q_2, p_2)}{Z}\right) \quad (\text{uma densidade canônica com temperatura } T = 1).$$

Nosso objetivo é avaliar $q_1(t)$ e $p_1(t)$ a partir das equações de Mori-Zwanzig (13).

5.2 Primeira aproximação

Dada a natureza do sistema, é necessário realizar uma aproximação para introduzir o termo de memória. Sabemos que as dinâmicas ortogonais descritas em (16) são aproximadamente equivalentes às dinâmicas completas, uma vez que não são sensíveis às variáveis resolvidas. Com base nisso, a aproximação consiste em substituir e^{tQL} por e^{tL} no termo de memória. Essa substituição é válida quando a influência das variáveis resolvidas sobre as não resolvidas é pequena³.

³Essa substituição é justificada quando o acoplamento entre as variáveis resolvidas e não resolvidas é fraco.

Dito isso, podemos iniciar a manipulação algébrica. Um operador comuta com qualquer função de si mesmo, de modo que:

$$\mathbb{Q}Le^{s\mathbb{Q}L} = e^{s\mathbb{Q}L}\mathbb{Q}L.$$

Usando essa identidade e substituindo $e^{s\mathbb{Q}L} \rightarrow e^{sL}$ no lado direito da igualdade, obtemos:

$$\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L} \approx Le^{sL} - e^{sL}\mathbb{Q}L.$$

Então,

$$e^{(t-s)L}\mathbb{P}Le^{s\mathbb{Q}L} \approx e^{(t-s)L}Le^{sL} - e^{(t-s)L}e^{sL}\mathbb{Q}L = e^{tL}\mathbb{P}L,$$

o que torna o integrando no termo integral da equação de Mori-Zwanzig independente de s , resultando em:

$$\int_0^t e^{tL}\mathbb{P}L\mathbb{Q}Lx_j ds = te^{tL}\mathbb{P}L\mathbb{Q}Lx_j,$$

onde \hat{x} é o vetor com componentes $x_1 = q_1$ e $x_2 = p_1$. O termo de memória foi assim reduzido a um operador diferencial multiplicado pelo tempo t . Note que $t = 0$ corresponde ao instante em que os valores iniciais de $q_1(t)$ e $p_1(t)$ são atribuídos, ou seja, quando não há incerteza. Essa aproximação também pode ser justificada assumindo que o integrando no termo de memória é aproximadamente constante em s , e portanto pode ser avaliado em $s = 0$.

As equações com o termo integral simplificado constituem o chamado modelo- t . Reunindo os termos, temos:

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

No caso particular considerado, com os componentes $x_j = q_1$ e $x_j = p_1$, obtemos:

$$Lq_1 = p_1,$$

$$\mathbb{P}Lq_1 = p_1,$$

$$\mathbb{Q}Lq_1 = 0,$$

$$L\mathbb{Q}Lq_1 = 0,$$

$$\mathbb{P}L\mathbb{Q}Lq_1 = 0,$$

e

$$\begin{aligned}
Lp_1 &= -q_1(1 + q_2^2), \\
\mathbb{P}Lp_1 &= -q_1 \left(1 + \frac{1}{1 + q_1^2} \right), \\
\mathbb{Q}Lp_1 &= -q_1(1 + q_2^2) + q_1 \left(1 + \frac{1}{1 + q_1^2} \right), \\
L\mathbb{Q}Lp_1 &= p_1 \left(-(1 + q_2^2) + \left(1 + \frac{1}{1 + q_1^2} \right) \right) - \frac{2q_1^2}{(1 + q_1^2)^2} - 2q_1q_2p_2, \\
\mathbb{P}L\mathbb{Q}Lp_1 &= -\frac{2q_1^2p_1}{(1 + q_1^2)^2}.
\end{aligned}$$

Assim, as equações aproximadas de movimento para q_1 e p_1 tornam-se:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}q_1 &= p_1, \\
\frac{d}{dt}p_1 &= -q_1 \left(1 + \frac{1}{1 + q_1^2} \right) - 2t \frac{q_1^2p_1}{(1 + q_1^2)^2} + e^{tL}\mathbb{Q}L\mathbb{Q}Lp_1.
\end{aligned} \tag{17}$$

Suponha agora que desejamos conhecer apenas as quantidades:

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

ou seja, as esperanças condicionais de $q_1(t)$ e $p_1(t)$ dado $q_1(0), p_1(0)$.

Uma equação para essas quantidades pode ser obtida aplicando o operador \mathbb{P} às equações (17), lembrando que, por definição, $\mathbb{P}q_1(t) = \mathbb{E}[q_1(t) \mid q_1(0), p_1(0)]$, e de forma análoga para $p_1(t)$. Nesse processo, o termo de ruído desaparece.

Contudo, surge um problema: a média de uma função de uma variável, em geral, não é igual à função da média. Para contornar essa dificuldade, uma simplificação adicional é necessária. Essa complicação pode ser evitada ao considerar trajetórias específicas das variáveis resolvidas, onde tal distinção se torna irrelevante, permitindo aplicar diretamente as equações aproximadas sem as dificuldades associadas às dinâmicas ortogonais.

5.3 Segunda aproximação

Assuma que, para as funções no lado direito das equações (17), a operação de média e a avaliação da função comutam. Isso significa que, por exemplo,

$$\mathbb{E}[(1 + q_1^2(t))^{-1} \mid q_1(0), p_1(0)] \approx (1 + \mathbb{E}[q_1(t) \mid \cdot]^2)^{-1}.$$

Essa aproximação de campo médio é válida quando o ruído é suficientemente pequeno. No caso limite em que o ruído é nulo, a aproximação torna-se exata. No problema específico

considerado, essa hipótese deve ser razoável caso os dados iniciais sejam amostrados de uma densidade canônica com temperatura baixa. Aqui, utilizamos uma temperatura inicial $T = 1$.

Com isso, definimos:

$$Q_1(t) = \mathbb{E}[q_1(t) \mid q_1(0), p_1(0)], \quad P_1(t) = \mathbb{E}[p_1(t) \mid q_1(0), p_1(0)].$$

As equações aproximadas de movimento passam a ser:

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

A equação acima é resolvível numericamente e, a partir dela, temos a aproximação de Mori-Zwanzig para o nosso problema de interesse.

Referências

CHEKROUN, Mickaël D.; LIU, Honghu; MCWILLIAMS, James C. Stochastic rectification of fast oscillations on slow manifold closures. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, Proceedings of the National Academy of Sciences, v. 118, n. 48, nov. 2021. ISSN 1091-6490. DOI: 10.1073/pnas.2113650118. Disponível em:

<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.2113650118>.

CHORIN, Alexandre J.; HALD, Ole H. **Stochastic Tools in Mathematics and Science**. [S.l.]: Springer New York, 2013. ISBN 9781461469803. DOI: 10.1007/978-1-4614-6980-3.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-6980-3>.