

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

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:

$$\frac{d}{dt}\phi(x, t) = R(\phi(x, t)), \quad \phi(x, 0) = x, \quad (1)$$

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 (1) como:

$$L = \sum_i R_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (2)$$

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

$$u_t = Lu, \quad u(x, 0) = g(x) \quad (3)$$

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

$$u(x, t) = g(\phi(x, t)) \quad (4)$$

Portanto, temos que a equação (3) 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:

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

cujas 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, $e^{\frac{1}{2}t\Delta}$ 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 (4):

$$e^{tL}g(x) = g(\phi(x, t)) \tag{5}$$

Note que $e^{tL}x$ não representa uma avaliação direta de e^{tL} , mas sim a ação do operador 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 (3) pode ser expressa como:

$$Le^{tL} = e^{tL}L \quad (6)$$

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

$$\exp(t(A+B)) = \exp(tA) + \int_0^t \exp((t-s)(A+B)) B \exp(sA) ds \quad (7)$$

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

3.5 Polinômios Hermitianos

Primeiramente, definimos o produto interno como:

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} u(x)v(x) dx \quad (8)$$

Os polinômios $p_n(x)$ e $p_m(x)$ são ortonormais em relação a esse produto interno (8) 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 de Hermite*.

O Hamiltoniano $H(q, p)$ descreve a energia total de um sistema físico e, em muitos casos, é expresso como:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q),$$

onde $\frac{p^2}{2m}$ representa a energia cinética e $V(q)$ a energia potencial.

A densidade canônica $Z^{-1}e^{-H/T}$ surge no contexto da mecânica estatística e descreve a distribuição de probabilidade dos estados do sistema em equilíbrio térmico à temperatura T . Nessa configuração, dizemos que dois polinômios $f(q, p)$ e $g(q, p)$ são ortonormais quando:

$$\langle f, g \rangle = \int f(q, p)g(q, p) Z^{-1}e^{-H(q, p)/T} dq dp = \delta_{fg}.$$

Esse produto interno ponderado define a ortogonalidade no espaço de fases segundo a medida induzida pela densidade canônica, e é fundamental na análise de sistemas de interesse.

4 Mori-Zwanzig

4.1 Definição

4.2 Exemplos e propriedades

A Sistemas Hamiltonianos

B Casos particulares apresentados

C Aproximações

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>.