# 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:

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

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

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

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

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

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

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

$$u(x,t) = g(\phi(x,t)) \tag{5}$$

Portanto, temos que a equação (4) é bem definida[1].

## 3.2 Notação de semigrupo

## 3.3 Definição de semigrupo

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

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

### 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 $\Delta$ 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: $v(t) = v_0 e^{kt}$.

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

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 $\Delta$). 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:

$$Le^{tL} = e^{tL}L \tag{7}$$

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

$$\exp(t(A+B)) = \exp(tA) + \int_0^t \exp\left((t-s)(A+B)\right) B \exp(sA)\, ds \tag{8}$$

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

## 3.5 Polinômios Hermitianos

Primeiramente, definimos o produto interno como:

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

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 $\delta_{nm}$ 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 $\Gamma$ 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 $\phi$, 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":

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

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 $\hat{\phi}$ como[2]:

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

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. $\mathbb{P}^2 = \mathbb{P}$;
2. $\mathbb{Q}^2 = \mathbb{Q}$;
3. $\mathbb{P}\mathbb{Q} = 0$.

Podemos reescrever a equação (10) como:

$$\frac{\partial}{\partial t}e^{tL}x_j = e^{tL}\mathbb{P}Lx_j + e^{tL}\mathbb{Q}Lx_j \tag{11}$$

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

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

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

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

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

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:

$$e^{tL}\mathbb{P}Lx_j \tag{14}$$

Observe que:

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

Portanto,

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

Com isso, podemos concluir que:

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

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:

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

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 $H-1, H_2, \ldots$ com argumentos em $\hat{x}$. Assim, para dada função $\psi$, 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:

$$\begin{aligned}(LQe^{sQL}QLx_j, H_k(\hat{x})) &= -(Qe^{sQL}QLx_j, LH_k) \\ &= -(e^{sQL}QLx_j, QLH_k).\end{aligned}$$

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**.

# 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¿.