arXiv:2304.00307v1 [math.AP] 1 Apr 2023

布朗振子的模型约化：误差量化与长时间行为

Matteo Colangeli*[1]、Manh Hong Duong†[2]和Adrian Muntean‡[3]

[1]拉奎拉大学信息工程、计算机科学与数学系，意大利。[2]伯明翰大学数学学院，英国。[3]卡尔斯塔德大学数学与计算机科学系及社会风险研究中心（社会风险研究中心），瑞典。

2023年4月4日

摘要

近期提出了一种对含加性噪声的随机常微分方程进行模型约化的方法，见[CDM22]，，该方法基于不变流形方法和涨落耗散关系。因此，一个普遍的问题随之而来：能否严格量化用约化动力学取代原始动力学所产生的误差？本文给出了以Wasserstein距离表示的误差显式公式和估计，既涵盖描述中保留变量与消去变量之间存在或不存在明显时间尺度分离的情形，也涵盖长时间行为。

关键词：模型约化、Wasserstein距离、误差估计、耦合布朗振子、不变流形、涨落耗散关系。

1 引言

尺度分离的概念广泛应用于多尺度建模和均匀化方法（包括模型约化和算子分裂技术）[GKS04、PS08]，，并且还在科学与工程的不同领域中得到广泛应用，例如气候动力学[GL20]，、生化系统[SS17]，、化学反应网络[KK13]，、阴燃[IOMF14]，等。Haken关于协同学的开创性著作的序言[Hak04]，中对这一概念作出了清晰的阐释，作者写道：“对于原本由许多变量描述的大类系统，系统的行为仅由少数变量，即序参量来描述和决定。它们通过从属原理决定各个部分的行为。”从物理角度看，从属原理意味着运动分解这一假设：存在一个短时间尺度，在此期间慢变量不会发生显著变化，而快变量则迅速趋于由慢变量决定的某个值。反过来，后者的演化则发生在长得多的时间尺度上。这一原理的一种具体形式体现为快变量的绝热消去方法，该方法构成了从欠阻尼朗之万方程推导Smoluchowski方程的基础。在应用Mori-Zwanzing方法[Zwa01]从原始方程推导约化方程时，对慢变量和快变量作出明确区分同样是必要条件，

*matteo.colangeli1@univaq.it
†h.duong@bham.ac.uk
‡adrian.muntean@kau.se

高维随机动力学中，通过规定完美的时间尺度分离，在压缩描述中保留原过程的马尔可夫结构。相同的指导原则也支撑着动力学理论中的Grad矩方法 [Gra49、CKK07], ，并且人们还利用不变流形框架，从玻尔兹曼方程推导线性流体力学 [GK05、CKO09]。后者还被用于 [CDM22] 刻画由两个耦合的（欠阻尼）布朗谐振子组成的系统中压缩描述的确定性分量。反过来，马尔可夫约化动力学的噪声项结构则通过涨落耗散关系确定。于是，一个普遍问题是：如何定量估计以约化动力学替代原始动力学所产生的误差。针对这一问题，[CM22], 中提出了首次尝试，其基础是研究约化过程和原过程中的平衡关联函数。事实证明，在所谓的过阻尼极限下，即摩擦参数发散时，在两个过程中计算得到的关联函数可以实现一致的、关于时间的收敛。

在本文中，我们更进一步，明确计算原始过程与约化过程的概率分布之间的Wasserstein距离。这为明确量化压缩描述中固有的误差铺平了道路。我们聚焦于两个在统计物理学和分子动力学中得到深入研究的经典模型，即欠阻尼布朗谐振子和由两个耦合过阻尼布朗谐振子构成的系统。在基于运动慢快分解的传统方法中，可以通过令参数趋于某个极限来获得约化描述，从而确立完美的时间尺度分离，参见例如 [Zwa01、GLCG21]。而在本文中，我们推导了具有有限时间尺度分离的约化动力学；在所考虑的两个模型中，该分离分别由摩擦参数或耦合参数控制。我们证明，约化动力学与原始动力学在任意时刻都指数接近，并且当参数趋于相应极限时二者重合。我们还证明，这两种动力学具有相同的平衡测度，并且都以相同的速率指数收敛到该平衡测度。这一显著性质直接源于所提出的约化方案，尤其是源于不变流形方法所得到的不变性方程解的选取。因此，约化漂移矩阵的谱是原始漂移矩阵的谱的子集。模型和结果的精确表述见第 3 节和第 4节。

本文结构如下。在第2 节中，我们回顾两个概率测度之间 Wasserstein距离的定义，并介绍全文所使用的基本记号。在第3 节中，我们针对布朗谐振子，基于 Wasserstein距离计算误差估计，其中原始描述和压缩描述的概率分布均已知晓析表达式。在第4 节中，我们将该方法应用于一个稍微复杂的模型，该模型由一对耦合过阻尼布朗谐振子构成。最后，在第5节中给出结论和最终展望。

2 预备知识

本节介绍两个概率测度之间的 Wasserstein距离，并确定全文所使用的记号。

2.1 Wasserstein距离

本节回顾两个概率测度之间 Wasserstein距离的定义，以及当这两个概率测度为高斯分布时的显式公式。Wasserstein度量在许多研究领域中都发挥着核心作用，例如最优传输、偏微分方程和数据科学。有关这些主题的详细介绍，请参阅 Villani 的专著[Vil03]。

令 $P_2(\mathbb{R}^d)$ 表示具有有限二阶矩的概率测度空间 μ，其定义为

$$\int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 \mu(dx) < \infty.$$

设 μ 和 ν 是属于 $P_2(\mathbb{R}^d)$ 的两个概率测度。L^2-Wasserstein距离 $W_2(\mu,\nu)$ 定义为 μ 和 ν 之间的距离，其定义如下：

$$W_2^2(\mu,\nu) := \inf_{\gamma\in\Gamma(\mu,\nu)} \int_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} |x-y|^2 \,\gamma(dx,dy), \tag{1}$$

其中，$\Gamma(\mu,\nu)$ 表示 μ 和 ν 之间所有耦合的集合，即在 $\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d$ 上以 μ 和 ν 分别作为第一边缘和第二边缘的所有概率测度的集合。更准确地说，

$$\Gamma(\mu,\nu) := \{\gamma \in P(\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d) : \gamma(A\times\mathbb{R}^d) = \mu(A) \text{ and } \gamma(\mathbb{R}^d\times A) = \nu(A)\},$$

对所有 Borel可测集 $A\subset\mathbb{R}^d$ 均成立。

特别地，两个高斯测度之间的 Wasserstein距离可以根据其均值和协方差矩阵显式计算[GS84], 另见，例如 [Tak12]

$$W_2(\mathcal{N}(u,U),\mathcal{N}(v,V))^2 = |u-v|^2 + \mathrm{tr}U + \mathrm{tr}V - 2\mathrm{tr}\sqrt{V^{\frac12}UV^{\frac12}}, \tag{2}$$

其中，u、v 是均值，U、V 是协方差矩阵。在一维空间中，上述公式可化简为

$$W_2(\mathcal{N}(u_1,\sigma_1^2),\mathcal{N}(u_2,\sigma_2^2)^2 = (u_1-u_2)^2 + (\sigma_1-\sigma_2)^2. \tag{3}$$

2.2 线性漂移-扩散方程

我们在此回顾一个众所周知的结果，其涉及初始数据为高斯分布的一般线性漂移-扩散方程的显式解。在后续章节中，我们将把这一结果应用于我们的（耦合）布朗振子模型。

为作铺垫，我们考虑以下一般线性漂移-扩散方程

$$\partial_t\rho = -\operatorname{div}(Cx\rho) + \operatorname{div}(D\nabla\rho), \quad \rho(0) = \rho_0. \tag{4}$$

在上述方程中，未知量是概率测度 $\rho = \rho(t,x)$，满足 $(t,x)\in(0,\infty)\times\mathbb{R}^d$；$C$ 而 D 是两个阶数为 d 的常矩阵，分别表示漂移矩阵和扩散矩阵；初始数据 ρ_0 是 $\mathbb{R}^d$上的概率测度。

以下引理给出了当初始数据为4时解的显式公式 ta is a 高斯分布，例如参见[GP18]。

Lem理 2.1. 假设初始数据为高斯分布，$\rho_0\sim\mathcal{N}(\mu(0)\ \Sigma(0))$，则方程的解为 (4) *is g由……给出*

$$\rho(t,x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d\det\Sigma(t)}}\exp\Big[-\frac12(x-\mu(t))^T\Sigma^{-1}(t)(x-\mu(t))\Big] \tag{5}$$

其中 $\mu(t)$ 和 $\Sigma(t)$ 由以下式子给出

$$\mu(t) := e^{tC}\mu(0), \quad \Sigma(t) := e^{tC}\Sigma(0)e^{tC^T} + 2\int_0^t e^{sC}De^{sC^T}\,ds. \tag{6}$$

在对 C 和 K 的适当条件下，我们有 $\mu(t)\to0$ 和 $\Sigma(t)\to\Sigma_\infty$，其中

$$\Sigma_\infty := 2\int_0^\infty e^{sC}De^{sC^T}\,ds.$$

注意到 Σ_∞ 满足所谓的李雅普诺夫方程

$$2D = C\Sigma_\infty + \Sigma_\infty C^T.$$

2.3 矩阵的指数

引理 2.1 给出了初始数据为高斯分布时，线性漂移-扩散方程（4）唯一解的显式形式。然而，一般而言，公式（6）在解析上难以计算，因为其中涉及矩阵的指数。以下引理给出了一个 2×2 矩阵指数的显式公式，该公式将在后续分析中使用。

引理 2.2。 任取 a、b、c、$d \in \mathbb{R}$，满足 $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 > 0$。 则有以下恒等式成立

$$\exp\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}, \tag{7}$$

其中 $\Delta := \sqrt{(a-d)^2 + 4bc}$ 且

$$\begin{aligned} m_{11} &:= e^{(a+d)/2}\Big[\Delta \cosh\frac{1}{2}\Delta + (a-d)\sinh\frac{1}{2}\Delta\Big], \\ m_{12} &:= 2be^{(a+d)/2}\sinh\frac{1}{2}\Delta, \\ m_{21} &:= 2ce^{(a+d)/2}\sinh\frac{1}{2}\Delta, \\ m_{22} &:= e^{(a+d)/2}\Big[\Delta \cosh\frac{1}{2}\Delta + (d-a)\sinh\frac{1}{2}\Delta\Big]. \end{aligned}$$

证明。 有关公式（ [BS93] 7）的证明，请参阅相关文献。 □

3 布朗振子的模型约化

作为讨论的开始，我们首先研究 CM [中考虑的一个 22], 简单的欠阻尼布朗振子模型，该模型可得到显式的解析解。原始动力学如下：

$$\begin{aligned} dx(t) &= v(t)\,dt \\ dv(t) &= -\omega^2 x(t)\,dt - \gamma v(t)\,dt + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\,dW(t), \\ (x(0), v(0)) &= (x_0, v_0) \end{aligned}$$

运用不变流形方法和涨落耗散关系（有关该方法的简要概述，请参见下文第4 节，其中将对耦合过阻尼布朗谐振子系统应用相同的约化过程），约化动力学具有如下形式：

$$d\bar{x}(t) = -\alpha\bar{x}(t)\,dt + \sqrt{2D_r}\,dW(t), \quad \bar{x}(0) = x_0,$$

其中

$$\alpha = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2}, \quad D_r = \frac{\alpha}{\omega^2\beta}.$$

有关计算细节，请参阅 [CM22] 。本节的主要结果如下定理所示。

定理 3.1。

（i）（原始动力学和约化动力学的精确解） μ_t 和 $\bar{\mu}_t$ 是高斯测度

$$\mu_t = \mathcal{N}(m(t), \sigma(t)), \quad \bar{\mu}_t = \mathcal{N}(\bar{m}_t, \bar{\sigma}(t)), \tag{8}$$

其中

$$
\begin{aligned}
m(t) &= \frac{\lambda_1 e^{-\lambda_2 t} - \lambda_2 e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} x_0 + \frac{e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} v_0, \\
\sigma(t) &= \frac{\gamma \beta^{-1}}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2} \Big[\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{4}{\lambda_1 + \lambda_2} (e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t} - 1) - \frac{1}{\lambda_1} e^{-2\lambda_1 t} - \frac{1}{\lambda_2} e^{-2\lambda_2 t} \Big], \\
\bar{m}(t) &= e^{-\lambda_2 t} \bar{x}_0, \\
\bar{\sigma}(t) &= \frac{1}{\omega^2 \beta} (1 - e^{-2\lambda_2 t})
\end{aligned}
$$

其中

$$
\lambda_1 = \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2} = \frac{2\omega^2}{\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}. \tag{9}
$$

(ii)（原始动力学与约化动力学的概率分布之间的精确 Wasserstein距离） μ_t 与 $\bar{\mu}_t$ 之间的Wasserstein距离可通过以下公式显式计算：

$$
W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t) = (m(t) - \bar{m}(t))^2 + \Big(\sqrt{\sigma_{xx}(t)} - \sqrt{\bar{\sigma}(t)} \Big)^2. \tag{10}
$$

(iii)（高摩擦极限下的显式收敛速率）有

$$
W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t) \le \frac{4}{\gamma^2 - 4\omega^2} \Big[(\omega |x_0| + |v_0|)^2 + \frac{4}{\beta} \Big] \quad \forall t > 0. \tag{11}
$$

因此,

$$
\lim_{\gamma \to +\infty} W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t) = 0.
$$

请注意(11) 是一个强得多的结论，它给出了显式的收敛速率。

(iv)（收敛至平衡态的共同速率）存在一个常数 $C > 0$，可显式求得，使得

$$
W_2(\mu_t, \mu_\infty),\ W_2(\bar{\mu}_t, \bar{\mu}_\infty) \le C e^{-\lambda_2 t},
$$

其中

$$
\mu_\infty = \bar{\mu}_\infty = \mathcal{N}\Big(0, \frac{1}{\beta \omega^2}\Big).
$$

这一结果表明，原始动力学与约化动力学不仅具有相同的平衡态，而且它们在Wasserstein 距离下收敛到平衡态的速率也相同。

(v)（长时间行为）有

$$
W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t) \le \Big[\frac{\omega |x_0| + |v_0|}{\sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}} + \frac{10}{\beta(\gamma^2 - 4\omega^2)} \Big] e^{-\lambda_2 t}. \tag{12}
$$

由此可得

$$
\lim_{t \to +\infty} W_2(\mu_t, \bar{\mu}_t) = 0,
$$

这已在前一部分中得到。估计式 (12) 是一个更强的结论，表明两种动力学在任意时刻都指数接近 $t > 0$。

(vi) 假设初始数据 x_0 根据偶概率测度 $\rho_0 \in L^1(\mathbb{R})$ 随机分布，则第 (iii) 和 (iv) 部分中的估计仍然成立。

证明。(i)。 $z(t) = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}(t)\ (t)\Big)$ 的分布律 ρ_t 满足动理学福克–普朗克方程

$$\partial_t \rho_t = \mathscr{L}^* \rho_t, \quad \rho|_{t=0} = \delta_{(x_0,v_0)},$$

其中 $\mathscr{L}^*\rho := -v\partial_x\rho + \omega^2 x\partial_v\rho + \gamma\big[\partial_v(v\rho) + \beta^{-1}\partial^2_{vv}\rho\big]$。

根据 [Risken 第 10 节。2] μ_t 是一个均值为 $M(t) \in \mathbb{R}^2$、协方差矩阵为 $\Sigma(t) \in \mathbb{R}^{2\times 2}$的二元高斯测度。它们是 t 由以下关系给出的相关对象

$$M(t) = \begin{pmatrix} m_x(x) \\ m_v(t) \end{pmatrix}, \quad \Sigma^{-1}(t) = \begin{pmatrix} [\sigma_{xx}(t)]^{-1} & [\sigma_{xv}(t)]^{-1} \\ [\sigma_{vx}(t)]^{-1} & [\sigma_{vv}(t)]^{-1} \end{pmatrix},$$

其中

$$\begin{aligned}
m_x(t) &= \frac{\lambda_1 e^{-\lambda_2 t} - \lambda_2 e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} x_0 + \frac{e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} v_0, \\
m_v(t) &= \omega^2 \frac{e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} x_0 + \frac{\lambda_1 e^{-\lambda_1 t} - \lambda_2 e^{-\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} v_0, \\
\sigma_{xx}(t) &= \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}\Big[\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1\lambda_2} + \frac{4}{\lambda_1 + \lambda_2}(e^{-(\lambda_1+\lambda_2)t} - 1) - \frac{1}{\lambda_1}e^{-2\lambda_1 t} - \frac{1}{\lambda_2}e^{-2\lambda_2 t}\Big], \\
\sigma_{xv}(t) &= \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}(e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t})^2, \\
\sigma_{vv}(t) &= \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2}\Big[\lambda_1 + \lambda_2 + \frac{4\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}(e^{-(\lambda_1+\lambda_2)t} - 1) - \lambda_1 e^{-2\lambda_1 t} - \lambda_2 e^{-2\lambda_2 t}\Big],
\end{aligned}$$

其中

$$\lambda_1 = \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2}, \quad \text{thus} \quad \lambda_1 + \lambda_2 = \gamma, \quad \lambda_1\lambda_2 = \omega^2, \quad \lambda_1 - \lambda_2 = \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}. \tag{13}$$

注意，由于在过阻尼状态下 $\gamma \geq 2\omega$，我们有

$$\lambda_2 = \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2} = \frac{4\omega^2}{2(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2})} \leq \frac{4\omega^2}{4\omega} = \omega.$$

由于 $z(t)$ 是二元高斯分布，因此 $x(t)$ 的分布（即 $z(t)$ 的第一边缘分布）是一元高斯测度，$\mu_t = \mathcal{N}(m(t)\ \sigma(t))$，其均值为 $m(t) = m_x(t)$，方差为$\sigma(t) = \sigma_{xx}(t)$，其中 $m_x(t)$ 和 $\sigma_{xx}(t)$ 如上所定义。利用 (13)，我们可以将 $m(t)$ 和$\sigma(t)$ 重写如下

$$m(t) = e^{-\lambda_2 t}x_0 + \frac{e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2 x_0 + v_0), \tag{14}$$

$$\sigma(t) = \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{\gamma}{\omega^2} + \frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{1}{\lambda_1}e^{-2\lambda_1 t} - \frac{1}{\lambda_2}e^{-2\lambda_2 t}\Big] \tag{15}$$

$$= \frac{1}{\beta\omega^2\left[1 - 4(\omega/\gamma)^2\right]}\big(1 - e^{-2\lambda_2 t}\big) + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big], \tag{16}$$

其中，在最后一个等式中，我们用到了以下等式

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\lambda_1}e^{-2\lambda_1 t} + \frac{1}{\lambda_2}e^{-2\lambda_2 t} &= \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1\lambda_2} + \frac{(e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t})}{\lambda_1} \\
&= \frac{\gamma e^{-2\lambda_2 t}}{\omega^2} + \frac{(e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t})}{\lambda_1}
\end{aligned}$$

约化动力学是一个奥恩斯坦-乌伦贝克过程，因此其概率律是一个高斯测度，$\bar{\mu}_t = \mathcal{N}(\bar{m}(t)\ \bar{\sigma}^2(t))$，其均值为

$$\bar{m}(t) = e^{-\alpha t}x_0 = e^{-\lambda_2 t}x_0, \tag{17}$$

和方差

$$\bar{\sigma}(t) = \frac{D_r}{\alpha}(1 - e^{-2\alpha t}) = \frac{1}{\omega^2\beta}(1 - e^{-2\lambda_2 t}). \tag{18}$$

(ii) 利用两个单变量高斯测度之间 Wasserstein 距离的一般显式公式，我们得到原始动力学与约化动力学之间的 Wasserstein 距离 $W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t)$，如下所示

$$W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t)^2 = \Big(m_x(t) - \bar{m}(t)\Big)^2 + \Big(\sqrt{\sigma_{xx}(t)} - \sqrt{\bar{\sigma}(t)}\Big)^2, \tag{19}$$

(iii) 现在我们给出高摩擦区间内 $W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t)$ 的估计；该区间对应较大的时间尺度分离，因为在 ω 固定时，差值 $\lambda_1 - \lambda_2 = \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}$ 随 γ 增大。我们有

$$m(t) - \bar{m}(t) = \frac{e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2 x_0 + v_0). \tag{20}$$

因此，由于 $|e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t} \le |e^{-\lambda_2 t}| + |e^{-\lambda_1 t}| \le 2$,

$$|m(t) - \bar{m}(t)| \le \frac{2}{\sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}\big(\lambda_2|x_0| + |v_0|\big) \le \frac{2}{\sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}\big(\omega|x_0| + |v_0|\big)$$

接下来我们估计 $|\sigma(t) - \bar{\sigma}_t|$。由于

$$|e^{-\gamma t} - 1| \le e^{-\gamma t} + 1 \le 2, \quad |e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}| \le e^{-2\lambda_1 t} + e^{-2\lambda_2 t} \le 2, \quad \gamma_1 \ge \frac{\gamma}{2}$$

我们有

$$\Big|\frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big| \le \frac{4}{\gamma}|e^{-\gamma t} - 1| + \frac{|e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}|}{\lambda_1} \le \frac{12}{\gamma}.$$

因此，

$$\begin{aligned}
|\sigma(t) - \bar{\sigma}(t)| &= \left|\frac{1 - e^{-2\lambda_2 t}}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} - 1\Big] + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big]\right| \\
&= \left|\frac{1 - e^{-2\lambda_2 t}}{\beta}\frac{4(1/\gamma)^2}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big]\right| \\
&\le \frac{4}{\beta(\gamma^2 - 4\omega^2)} + \frac{12}{\beta(\gamma^2 - 4\omega^2)} = \frac{16}{\beta(\gamma^2 - 4\omega^2)}.
\end{aligned} \tag{21}$$

由此可得

$$\begin{aligned}
W_2^2(\mu, \bar{\mu}) &= \big(m(t) - \bar{m}(t)\big)^2 + \Big(\sqrt{\sigma(t)} - \sqrt{\bar{\sigma}(t)}\Big)^2 \\
&\le \big(m_x(t) - \bar{m}(t)\big)^2 + |\sigma_{xx}(t) - \bar{\sigma}(t)| \\
&\le \frac{4}{\gamma^2 - 4\omega^2}(\omega|x_0| + |v_0|)^2 + \frac{16}{\beta(\gamma^2 - 4\omega^2)} = \frac{4}{\gamma^2 - 4\omega^2}\Big[(\omega|x_0| + |v_0|)^2 + \frac{4}{\beta}\Big],
\end{aligned}$$

为了由第一行得到第二行，我们使用了不等式 $(a-b)^2 \le |a^2 - b^2|$，其中 a、$b \ge 0$。

(*iv*) 我们有

$$\lim_{t\to\infty} m(t) = \lim_{t\to\infty} \bar{m}(t) = 0 \quad \forall x_0, v_0; \quad \lim_{t\to\infty} \sigma(t) = \frac{1}{\beta\omega^2} =: \sigma_\infty; \quad \lim_{t\to\infty} \bar{\sigma}(t) = \frac{1}{\beta\omega^2} =: \bar{\sigma}_\infty = \sigma_\infty.$$

因此，原始动力学与约化动力学具有相同的平衡测度

$$\mu_\infty = \bar{\mu}_\infty = \mathcal{N}(0, \sigma_\infty).$$

此外，我们还明确计算了收敛速率

$$\begin{aligned} W_2(\mu_t, \mu_\infty)^2 &= (m(t) - m_\infty)^2 + (\sqrt{\sigma(t)} - \sqrt{\sigma_\infty})^2 \\ &\le m(t)^2 + |\sigma(t) - \sigma_\infty| \\ &= \Big(e^{-\lambda_2 t} x_0 + \frac{e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2 x_0 + v_0)\Big)^2 + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big|\frac{4}{\gamma}e^{-\gamma t} - \frac{1}{\lambda_1}e^{-2\lambda_1 t} - \frac{1}{\lambda_2}e^{-2\lambda_2}\Big| \\ &= e^{-2\lambda_2 t}\Big(x_0 + \frac{1 - e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)t}}{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2 x_0 + v_0)\Big)^2 + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}e^{-2\lambda_2 t}\Big|\frac{4}{\gamma}e^{-2\lambda_1 t} - \frac{1}{\lambda_1}e^{-2(\lambda_1 - \lambda_2)t} - \frac{1}{\lambda_2}\Big| \\ &\le Ce^{-2\lambda_2 t}, \end{aligned}$$

for 某个常数 C，它可以明确计算出来（但这并非本部分的重点），wh ere we 我们利用了 $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$这一事实。因此

$$W_2(\mu_t, \mu_\infty) \le Ce^{-\lambda_2 t}.$$

类似地

$$\begin{aligned} W_2(\bar{\mu}_t, \bar{\mu}_\infty)^2 &= (\bar{m}(t) - \bar{m}_\infty)^2 + (\sqrt{\bar{\sigma}(t)} - \sqrt{\bar{\sigma}_\infty})^2 \\ &\le \bar{m}(t)^2 + |\overline{\sigma}(t) - \overline{\sigma}_\infty| \\ &= e^{-2\lambda_2 t}\Big[x_0^2 + \frac{1}{\beta\omega^2}\Big]. \end{aligned}$$

因此我们还得到

$$W_2(\bar{\mu}_t, \bar{\mu}_\infty) \le Ce^{-\lambda_2 t}.$$

(*v*) 现在我们估计 $W_2^2(\mu_t, \bar{\mu}_t)$在大时间范围内的情形。我们只需估计方差 $|\sigma(t) - \bar{\sigma}(t)|$之间的差值。根据（21），有

$$\begin{aligned} \sigma(t) - \bar{\sigma}(t) &= \frac{1 - e^{-2\lambda_2 t}}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} - 1\Big] + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}(e^{-\gamma t} - 1) - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big] \\ &= -\frac{e^{-2\lambda_2 t}}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} - 1\Big] + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}e^{-\gamma t} - \frac{e^{-2\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_2 t}}{\lambda_1}\Big] \end{aligned}$$

其中，为了得到第二行，我们使用了以下消去关系

$$\frac{1}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} - 1\Big] - \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\frac{4}{\gamma} = 0.$$

因此，有

$$|\sigma(t) - \bar{\sigma}(t)| \le \frac{e^{-2\lambda_2 t}}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1 - 4(\omega/\gamma)^2} - 1\Big] + \frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2 - 4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}e^{-\gamma t} + \frac{e^{-2\lambda_2 t} - e^{-2\lambda_1 t}}{\lambda_1}\Big].$$

(vi) 现在，我们可以估计 Wasserstein距离 $W_2^2(\mu_t,\ \bar{\mu}_t)$ 以探究长时间行为，即

$$
\begin{aligned}
W_2^2(\mu_t,\bar{\mu}_t) &= \big(m(t)-\bar{m}(t)\big)^2+\Big(\sqrt{\sigma(t)}-\sqrt{\bar{\sigma}(t)}\Big)^2\\
&\le \big(m_x(t)-\bar{m}(t)\big)^2+|\sigma_{xx}(t)-\bar{\sigma}(t)|\\
&\le \frac{e^{-\lambda_2 t}-e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1-\lambda_2}(\omega|x_0|+|v_0|)+\frac{e^{-2\lambda_2 t}}{\beta\omega^2}\Big[\frac{1}{1-4(\omega/\gamma)^2}-1\Big]+\frac{\gamma\beta^{-1}}{(\gamma^2-4\omega^2)}\Big[\frac{4}{\gamma}e^{-\gamma t}+\frac{e^{-2\lambda_2 t}-e^{-2\lambda_1 t}}{\lambda_1}\Big]\\
&= \frac{4}{\beta(\gamma^2-4\omega^2)}e^{-\gamma t}+\Big[\frac{\omega|x_0|+|v_0|}{\sqrt{\gamma^2-4\omega^2}}+\frac{4}{\beta(\gamma^2-4\omega^2)}+\frac{\gamma}{\beta\lambda_1(\gamma^2-4\omega^2)}\Big]e^{-\lambda_2 t}\\
&\quad -\Big[\frac{\omega|x_0|+|v_0|}{\sqrt{\gamma^2-4\omega^2}}+\frac{\gamma}{\beta\lambda_1(\gamma^2-4\omega^2)}\Big]e^{-\lambda_1 t}\\
&\le \Big[\frac{\omega|x_0|+|v_0|}{\sqrt{\gamma^2-4\omega^2}}+\frac{8}{\beta(\gamma^2-4\omega^2)}+\frac{\gamma}{\beta\lambda_1(\gamma^2-4\omega^2)}\Big]e^{-\lambda_2 t}\\
&\le \Big[\frac{\omega|x_0|+|v_0|}{\sqrt{\gamma^2-4\omega^2}}+\frac{10}{\beta(\gamma^2-4\omega^2)}\Big]e^{-\lambda_2 t}.
\end{aligned}
$$

这里 我们利用了以下事实： $\gamma\ge\lambda_2$ 以及 $\frac{\gamma}{\lambda_1}=\frac{2\gamma}{\gamma+\sqrt{\gamma^2-4\omega^2}}\le 2$。

(vi)。设 x_0 遵循偶分布 ρ_0随机分布。那么， $x(t)$ 和 $\bar{x}(t)$ 的概率分布分别为

$$\mu_t=\mathcal{N}(m(t),\sigma(t))*\rho_0,\quad \mu_t=\mathcal{N}(\bar{m}(t),\bar{\sigma}(t))*\rho_0.$$

由于 $\mathcal{N}(m(t)\ \sigma(t))\ \mathcal{N}(\bar{m}(t)\ \bar{\sigma}(t))\in\mathcal{P}_2(\mathbb{R})$，根据 [San15，引理 5，2] 我们有

$$W_2^2(\mu_t,\bar{\mu}_t)=W_2^2(\mathcal{N}(m(t),\sigma(t))*\rho_0,\mathcal{N}(\bar{m}(t),\bar{\sigma}(t))*\rho_0)\le W^2(\mathcal{N}(m(t),\sigma(t)),\mathcal{N}(\bar{m}(t),\bar{\sigma}(t)),$$

因此，前两部分中的上界估计仍然成立。 □

4 两个耦合欠阻尼布朗振子的模型约化

现在我们继续计算一个稍微复杂的模型所对应的 Wasserstein距离，该模型对应于一个由两个耦合过阻尼布朗谐振子组成的系统。该模型的动力学可以方便地写成如下形式：

$$\dot{x}_1=ax_1+k(x_2-x_1)+\sigma_1\dot{W}_1 \tag{22a}$$
$$\dot{x}_2=-k(x_2-x_1)+dx_2+\sigma_2\dot{W}_2, \tag{22b}$$

其中 $\dot{W}$ 表示 Wiener过程的形式导数，对应于白噪声， a， $d<0$是表征各个振子特性的参数（不失一般性，我们还假设$a\ge d$）， σ_1， $\sigma_2>0$ 表示噪声强度，最后， $k>0$ 是耦合参数。

系统（22）表示两个振子的耦合欠阻尼朗之万动力学的过阻尼版本。在适当的尺度分离假设下，本文研究了确定性情形（即，满足 $\sigma_1=\sigma_2=0$）的压缩描述，并探讨其在蛋白质弛豫动力学中的应用，见 [SMR11]。按照 [CM22、CDM22]中提出的步骤，通过消去变量 x_2，可从（22）推导出一个约化系统。该过程分为两个不同步骤： (i) 使用不变流形方法求得动力学的确定性分量，然后 (ii) 通过满足涨落耗散关系确定扩散项。

4.1 确定性演化

Let $\langle \mathcal{O} \rangle$ 表示对变量 $\mathcal{O}$ 关于噪声取平均。原始动力学可写为

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{Q}\ \mathbf{z}\ , \tag{23}$$

其中 $\mathbf{z} = (\langle x_1 \rangle, \langle x_2 \rangle)$，且

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(k) = \begin{pmatrix} a-k & k \\ k & -k+d \end{pmatrix} \tag{24}$$

Q 的特征多项式为

$$\lambda^2 - (a+d-2k)\lambda + (ad - ak - dk) = 0.$$

因此，Q 有两个实负特征值:

$$\lambda_\pm = \lambda_\pm(k) := \frac{(a+d-2k) \pm \sqrt{(a-d)^2 + 4k^2}}{2}\ , \tag{25}$$

在该模型中，时间尺度分离编码在 差值 $\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{(a-d)^2 + 4k^2}$中；对于固定参数， k, 随着其增大 a， d。我们寻求如下形式的闭合关系 $\langle x_2 \rangle = \alpha \langle x_1 \rangle$，因此，遵循[CDM22], ，我们定义 宏观时间导数 $\langle x_2 \rangle$ 如下，并应用链式法则:

$$\begin{aligned} \partial_t^{macro} \langle x_2 \rangle &:= \frac{\partial \langle x_2 \rangle}{\partial \langle x_1 \rangle} \langle \dot{x}_1 \rangle \\ &= (\alpha(a-k) + \alpha^2 k) \langle x_1 \rangle\ , \end{aligned}$$

这体现了 从属原理 （第 1 节提及）。此外，我们还根据方程（23）中给出的向量场定义 $\langle x_2 \rangle$ 的微观时间导数，其中 $\langle x_2 \rangle$ 通过上述闭合关系表示。因此，我们设:

$$\begin{aligned} \partial_t^{micro} \langle x_2 \rangle &:= k \langle x_1 \rangle + (d-k) \langle x_2 \rangle \\ &= (k + \alpha(d-k)) \langle x_1 \rangle\ . \end{aligned}$$

不变流形方法要求$\langle x_2 \rangle$ 的微观和宏观时间导数相等，且与观测量 $\langle x_1 \rangle$的取值无关。因此，我们得到以下不变性方程

$$\alpha(a-k) + \alpha^2 k = k + \alpha(d-k) \quad \Longleftrightarrow \quad k\alpha^2 + (a-d)\alpha + k = 0\ , \tag{26}$$

该方程有两个解

$$\alpha_\pm = \alpha_\pm(k) := \frac{-(a-d) \pm \sqrt{(a-d)^2 + 4k^2}}{2k}\ .$$

确定性部分的约化动力学为

$$\langle \dot{x}_1 \rangle = (a - k + k\hat{\alpha}) \langle x_1 \rangle\ , \tag{27}$$

其中 $\hat{}\alpha \in \{\alpha_+, \alpha_-\}$ 将在后文给出。值得注意的是

$$a - k + k\alpha_\pm = \frac{(a+d-2k) \pm \sqrt{(a-d)^2 + 4k^2}}{2} \equiv \lambda_\pm\ .$$

观察 (27) 可知，乘以 $\langle x_1 \rangle$ 的系数与矩阵 $\mathbf{Q}$ 的某个特征值相同。为了选出正确的特征值，我们采用以下判据：从满足 α 不变性方程（ $\alpha_\pm$ 26）的解 中选取 $\hat{}\ a - k + k$，使得 $\alpha \to a < 0\ \hat{}$ $k \to 0$当 k 时趋于 $\alpha \to 0\ \hat{}\ k \to 0$。由于我们假设 $a \geq d$，因此取

$$\hat{\alpha} = \alpha_+ = \frac{-(a-d) + \sqrt{(a-d)^2 - 4k^2}}{2k}\ .$$

4.2 纳入噪声

为了刻画噪声项，我们 采用 [CDM22] 提出的方法。因此，我们首先将扩散矩阵 $\boldsymbol{D}$ 定义为

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} , \tag{28}$$

并且我们还记

$$\dot{\mathbf{W}} = (\dot{W}_1, \dot{W}_2) .$$

方程（22）的解为:

$$\mathbf{z}(t) = e^{\mathbf{Q}t}\mathbf{z}_0 + \int_0^t e^{\mathbf{Q}(t-s)}\mathbf{D}\ \dot{\mathbf{W}} ds . \tag{29}$$

由此可得

$$\lim_{t\to\infty} \mathbb{E}[z_1(t)^2] \equiv \overline{\Sigma}_{11} = -\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{a-2k} + \frac{1}{a}\Big).$$

因此，完整的约化系统形式为

$$d\hat{x}(t) = \lambda_+ \hat{x}(t)\, dt + \hat{D} dW_t , \tag{30}$$

其中，漂移系数 λ_+ 定义见（25），扩散系数$\hat{D}$ 为

$$\hat{D} = -\lambda_+ \overline{\Sigma}_{11} . \tag{31}$$

4.3 误差量化与长时间行为

本节将显式计算 x_1 的原始动力学与约化动力学（30）的概率分布之间的Wasserstein距离，并研究它们的长时间行为。与完整原始动力学（22）相对应的福克–普朗克方程是以下线性漂移扩散方程

$$\partial_t \rho = -\operatorname{div}(\mathbf{Q}\rho) + \operatorname{div}(\boldsymbol{D}\nabla\rho), \tag{32}$$

其中 $\rho = \rho(t, x_1, x_2)$ 是 (x_1, x_2) 的联合概率密度，漂移矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和扩散矩阵 $\boldsymbol{D}$ 分别由（24）和（28）给出。注意，上述系统是第2.2节介绍的一般漂移扩散方程的一个特例。

由于我们关注耦合参数的作用，为简洁起见，考虑相同的振子，即 $a = d < 0$ 并将 $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ 归一化，使得

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} a-k & k \\ k & a-k \end{pmatrix}, \quad \text{and} \quad \boldsymbol{D} = I.$$

本节的主要结果如下定理所述。

定理4.1. 设 $\rho_1(t)$ 为原始耦合动力学 (30) 从确定性初始数据 $(x_1, x_2)(0) = (x_1, x_2)$ 出发时 $x_1(t)$ 的分布，$\hat{\rho}_1(t)$ 为约化动力学 (30) 从 x_1 出发时的分布。那么存在一个常数 $C > 0$，使得以下结论成立

(i) $W_2(\rho_1(t), \hat{\rho}_1(t))^2 \le Ck.$

(ii) $\max\{W_2(\rho_1(t), \rho_\infty), W_2(\hat{\rho}_1(t), \rho_\infty)\} \le Ce^{at},$ *where* $\rho_\infty = \mathcal{N}(0, \overline{\Sigma}_{11})$

(iii) $W_2(\rho_1(t), \hat{\rho}_1(t) \le Ce^{at}.$

证明。 根据引理 2.1，方程（32）的解为 $\rho(t,\ x_1,\ x_2)\ = \mathcal{N}(\mu(t)\ \Sigma(t))$，其中

$$\mu(t) = e^{t\mathbf{Q}} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma(t) = 2\int_0^t e^{s\mathbf{Q}} e^{s\mathbf{Q}^T}\, ds.$$

由于 $\mathrm{Q}\mathrm{Q}^T = \mathrm{Q}^T\mathrm{Q}$ 和 $\mathrm{Q}\ = \mathrm{Q}^T$，我们有

$$e^{s\mathbf{Q}} e^{s\mathbf{Q}^T} = e^{s(\mathbf{Q}+\mathbf{Q}^T)} = e^{2s\mathbf{Q}}.$$

因此，我们可以将 $\Sigma(t)$ 化简为

$$\Sigma(t) = 2\int_0^t e^{2s\mathbf{Q}}\, ds.$$

应用引理 2.2，我们计算得

$$\begin{aligned}
e^{t\mathbf{Q}} &= \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}, \quad \Delta = 2kt, \\
m_{11} &= m_{22} = e^{(a-k)t}\Delta\cosh\frac{1}{2}\Delta = \frac{1}{2}e^{(a-k)t}\Delta(e^{kt}+e^{-kt}) = \frac{1}{2}\Delta(e^{(a-2k)t}+e^{at}) \\
m_{12} &= m_{21} = 2kte^{(a-k)t}\sinh\frac{1}{2}\Delta = \frac{1}{2}\Delta e^{(a-k)t}(e^{kt}-e^{-kt}). = \frac{1}{2}\Delta(e^{at}-e^{(a-2k)t}).
\end{aligned}$$

Thus

$$e^{t\mathbf{Q}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{(a-2k)t}+e^{at} & e^{at}-e^{(a-2k)t} \\ e^{at}-e^{(a-2k)t} & e^{(a-2k)t}+e^{at} \end{pmatrix}.$$

类似地

$$e^{2t\mathbf{Q}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{2(a-2k)t}+e^{2at} & e^{2at}-e^{2(a-2k)t} \\ e^{2at}-e^{2(a-2k)t} & e^{2(a-2k)t}+e^{2at} \end{pmatrix}.$$

因此，

$$\Sigma(t) = 2\int_0^t e^{2sQ}\, ds = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{e^{2(a-2k)t}-1}{a-2k}+\frac{e^{2at}-1}{a} & \frac{e^{2at}-1}{a}-\frac{e^{2(a-2k)t}-1}{a-2k} \\ \frac{e^{2at}-1}{a}-\frac{e^{2(a-2k)t}-1}{a-2k} & \frac{e^{2(a-2k)t}-1}{a-2k}+\frac{e^{2at}-1}{a} \end{pmatrix}.$$

由此可得

$$\rho_1(t) = \mathcal{N}(\mu_1(t),\Sigma_{11}(t)) = \mathcal{N}\left(\frac{1}{2}\Big((e^{(a-2k)t}+e^{at})x_1+(e^{at}-e^{(a-2k)t})x_2\Big), \frac{1}{2}\Big(\frac{e^{2(a-2k)t}-1}{a-2k}+\frac{e^{2at}-1}{a}\Big)\right),$$

由于 $\hat{}x$ 是一个OU过程，我们得到

$$\hat{\rho}_1(t) = \mathcal{N}(\hat{\mu}_1(t),\hat{\Sigma}_1(t)) = \mathcal{N}\Big(e^{\lambda_+ t}x_1, -\frac{\hat{D}}{\lambda_+}(1-e^{2\lambda_+ t})\Big) = \mathcal{N}\Big(e^{\lambda_+ t}x_1, \overline{\Sigma}_{11}(1-e^{2\lambda_+ t})\Big),$$

回想一下，结合 $a = d$

$$\lambda_+ = \frac{(a+d-2k)+\sqrt{(a-d)^2+4k^2}}{2} = a, \quad \overline{\Sigma}_{11} = -\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{a-2k}+\frac{1}{a}\Big).$$

ρ_1 与$\hat{}\rho_1$ 之间的Wasserstein距离为

$$W_2(\rho_1(t),\hat{\rho}_1(t))^2 = (\mu_1(t)-\hat{\mu}_1(t))^2 + \Big(\sqrt{\Sigma_{11}}(t)-\sqrt{\hat{\Sigma}_1}(t)\Big)^2 \tag{33}$$

(*i*) 我们计算

$$\begin{aligned}|\mu_1(t)-\hat{\mu}_1(t)| &= \frac{1}{2}\Big|\Big(e^{(a-2k)t}+e^{at}\Big)x_1+(e^{at}-e^{(a-2k)t})x_2\Big)-e^{at}x_1\Big| \\ &= \frac{1}{2}|(e^{at}-e^{(a-2k)t})(x_2-x_1)| \\ &= \frac{1}{2}e^{at}|x_2-x_1|(1-e^{-2kt}) \\ &\le |x_2-x_1|ke^{at}t \\ &\le k\,|x_2-x_1|\frac{1}{|a|e},\end{aligned} \tag{34}$$

其中，第一个不等式用到了初等不等式 $1-e^{-x}\le x$，该不等式对所有 $x>0$ 都成立；最后一个不等式则用到了（注意 $a<0$）

$$\max_{t>0} te^{at}=\frac{1}{|a|e}. \tag{35}$$

我们还估计

$$\begin{aligned}\Sigma_{11}(t)-\hat{\Sigma}_1(t) &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{a-2k}\Big(e^{2(a-2k)t}-e^{2\lambda_+ t}\Big)+\frac{1}{a}\Big(e^{2at}-e^{2\lambda_+ t}\Big)\right] \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{a-2k}\Big(e^{2(a-2k)t}-e^{2at}\Big) \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{2k-a}e^{2at}\Big(1-e^{-4kt}\Big) \\ &\le \frac{2k}{2k-a}e^{2at}t \\ &\le \frac{k}{a^2e},\end{aligned} \tag{36}$$

从（36）推导到下一行时，我们用到了 $1-e^{-4kt}\le 4kt$ 以及再次使用了（35）（其中将 a替换为 $2a$）。因此，我们有

$$\begin{aligned}W_2(\rho_1(t),\hat{\rho}_1(t))^2 &\le (\mu_1(t)-\hat{\mu}_1(t))^2+\Big|\Sigma_{11}(t)-\overline{\Sigma}_1(t)\Big| \\ &\le k^2\,|x_2-x_1|^2\frac{1}{|a|^2e^2}+\frac{k}{a^2e}\le Ck,\end{aligned}$$

对任意有界的 k。

（*iii*）由于 $a<0$,

$$\lim_{t\to\infty}\mu_1(t)=\lim_{t\to\infty}\hat{\mu}_1(t)=0,\quad \lim_{t\to\infty}\Sigma_{11}(t)=-\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{a-2k}+\frac{1}{a}\Big)=\overline{\Sigma}_{11}.$$

这意味着

$$\lim_{t\to\infty}\rho_1(t)=\lim_{t\to\infty}\hat{\rho}_1(t)=\rho_\infty=\mathcal{N}(0,\overline{\Sigma}_{11}).$$

我们还可以显式计算这些极限在 Wasserstein距离下的收敛速率。我们有

$$W_2(\rho_1(t),\rho_\infty)^2=\mu_1(t)^2+\Big(\sqrt{\Sigma_{11}}(t)-\sqrt{\overline{\Sigma}}\Big)^2\le\mu_1(t)^2+\Big|\Sigma_{11}(t)-\overline{\Sigma}_{11}\Big|. \tag{37}$$

我们估计（37）右侧的每一项。对于第一项，我们得到

$$\begin{aligned}\mu_1(t) &= \frac{1}{2}\Big(\Big(e^{(a-2k)t}+e^{at}\Big)x_1+(e^{at}-e^{(a-2k)t})x_2\Big) \\ &= \frac{1}{2}e^{at}\Big((1+e^{-2kt})x_1+(1-e^{-2kt})x_2\Big) \\ &\le Ce^{at}.\end{aligned} \tag{38}$$

对于第二项，我们有

$$|\Sigma_{11}(t)-\overline{\Sigma}_{11}|=\frac{1}{2}\Big|\frac{e^{2(a-2k)t}}{a-2k}+\frac{e^{2at}}{a}\Big|=\frac{1}{2}e^{2at}\Big|\frac{1}{a}+\frac{e^{-4kt}}{a-2k}\Big|\leq Ce^{2at}. \tag{39}$$

将（38）和（39）代入（37），我们得到

$$W_2(\rho_1(t),\rho_\infty)\leq Ce^{at},$$

因此， ρ_1 以速率 a指数收敛于 ρ_∞。类似地，

$$\begin{aligned}W_2(\hat{\rho}_1(t),\rho_\infty)^2&=\hat{\rho}_1(t)^2+\Big(\sqrt{\hat{\Sigma}_1(t)}-\sqrt{\overline{\Sigma}_{11}}\Big)^2\\&\leq\hat{\rho}_1(t)^2+\Big|\hat{\Sigma}_1(t)-\overline{\Sigma}_{11}\Big|\\&=(x_1^2+\overline{\Sigma}_{11})e^{2at}.\end{aligned}$$

因此，$\hat{}\rho_1$ 以相同的速率 a 指数收敛于 ρ_∞。

（iv）根据（34）和（36），我们有

$$\begin{aligned}|\mu_1(t)-\hat{\mu}_1(t)|&=\frac{1}{2}e^{at}|x_2-x_1|(1-e^{-2kt})\leq Ce^{at},\\|\Sigma_{11}(t)-\hat{\Sigma}_1(t)|&=\frac{1}{2}\frac{1}{|2k-a|}e^{2at}\Big(1-e^{-4kt}\Big)\leq Ce^{2at}.\end{aligned}$$

Thus

$$W_2(\rho_1(t),\hat{\rho}_1(t))^2\leq(\mu_1(t)-\hat{\mu}_1(t))^2+|\Sigma_{11}(t)-\hat{\Sigma}_1(t)|\leq Ce^{2at},$$

也就是说

$$W_2(\rho_1(t),\hat{\rho}_1(t))\leq Ce^{at}.$$

定理的证明至此完成。我们注意到，前文假设的是确定性初始数据，但该定理也可以扩展到初始数据服从对称分布的情形，如第 3 节所述。

□

5 总结与展望

在本项工作中，我们采用了最近在 [CM22中提出的 CDM22],约化方案，该方案 恰当地将不变流形方法 与 涨落-耗散关系相结合，为统计物理学中的两个经典模型推导出压缩描述，即欠阻尼布朗谐振子和由两个耦合过阻尼布朗谐振子组成的系统。本项工作大幅拓展了此前的研究成果：我们在此成功地明确量化了原始动力学与约化动力学之间的误差，以及它们向平衡态收敛的速率。我们所采用的技术工具是 Wasserstein距离，该距离在最优传输理论中得到广泛应用。由此，我们证明了两种动力学在任意时刻都以指数速率接近，具有相同的平衡测度，并以相同的速率指数收敛于 同一 平衡测度。此外， 两种动力学 还被发现：当控制原始 模型时间尺度分离的相关参数趋于无穷时，二者也会完全一致。所研究模型的线性特征显然在本项工作的分析中发挥了重要作用，使我们能够显式计算其解以及所涉及的 Wasserstein距离。未来发展的一个关键挑战，是推广我们的分析，以处理 非线性模型，因为这类模型无法获得显式解和显式计算结果。另一个研究方向是考察具有大量自由度的系统，例如与气候动力学相关的模型 [HAK23], ，或现代纳米技术中受到关注的小型系统，例如生物分子马达 [WKST16]。

致谢

MC 的研究是在意大利国家数学物理小组（GNFM）和 INdAM 的支持下开展的。MHD 的研究得到了英国工程与自然科学研究委员会（EPSRC）资助项目 EP/W008041/1 和 EP/V038516/1 的支持。

参考文献

[BS93] D.S. Bernstein 和 W. So。《矩阵指数的一些显式公式》。IEEE自动控制汇刊，38(8):1228–1232，1993。[CDM22] M. Colangeli、M. H. Duong 和 A. Muntean。《耦合布朗谐振子的约化方案》。《物理学杂志A：数学与理论》，55:505002，2022。[CKK07] M. Colangeli、I. V. Karlin 和 M. Kr¨oger。《三维线性化Grad方程精确流体力学的双曲性》。《物理评论E》，76:022201，2007。[CKO09] M. Colangeli、M. Kr¨oger 和 H. C. Ottinger。《玻尔兹曼方程与流体动力学涨落》。《物理评论E》，80:051202，2009。[CM22] M. Colangeli 和 A. Muntean。《布朗动力学的约化马尔可夫描述：迈向精确理论》。《物理学前沿》10:903030。doi: 10.3389/fphy.2022.903030，10:903030，2022。[GK05] A. N. Gorban 和 I. V. Karlin。《物理与化学动力学的不变流形》，《物理学讲义》第660卷。施普林格出版社，柏林，2005。[GKS04] D. Givon、R. Kupferman 和 A. Stuart。《提取宏观动力学：模型问题与算法》。《非线性》，17(6):R55，2004。[GL20] M. Ghil 和 V. Lucarini。《气候变率与气候变化的物理学》。《现代物理评论》，92:035002，2020。[GLCG21] M. S. Guti´errez、V. Lucarini、M. D. Chekroun 和 M. Ghil。《耦合动力系统的降阶模型：数据驱动方法与Koopman算子》。《混沌》，31:053116，2021。[GP18] S. N. Gomes 和 G. A. Pavliotis。《双尺度势中相互作用扩散过程的平均场极限》。《非线性科学杂志》，28(3):905–941，2018。[Gra49] H. Grad。《稀薄气体的动力学理论》。《纯粹与应用数学通讯》，2:331–407，1949。[GS84] C. R. Givens 和 R. M. Shortt。《一类概率分布的Wasserstein度量》。《密歇根数学杂志》，31(2):231–240，1984。[Hak04] H. Haken。《协同学：导论与进阶专题》。《数学研究生教材》。施普林格出版社（柏林·海德堡），2004。[HAK23] F. Hummel、P. Ashwin 和 C. Kuehn。《气候动力学中的约化方法：简要综述》。《物理学D辑：非线性现象》，第133678页，2023。[IOMF14] E.R. Ijioma、T. Ogawa、A. Muntean 和 T. Fatima。《非均质薄层中过滤燃烧的均匀化与降维》。《网络与非均质介质》，9(4):709–737，2014。[KK13] H.-W. Kang 和 T.G. Kurtz。《随机反应网络的时间尺度分离与模型约化》。《应用概率年刊》，23(2):529–583，2013。

[PS08] G. Pavliotis 和 A. Stuart。《多尺度方法：平均化与均匀化》。Springer Science & Business Media，2008。[San15] F. Santambrogio。《应用数学家的最优传输》。Birk ¨ auser，纽约，55(58-63):94，2015。[SMR11] R. Soheilifard、D. E. Makarov 和 G. J. Rodin。《线性系统动力学的严格粗粒化及其在蛋白质弛豫动力学中的应用》。《化学物理学杂志》，135(5):054107，2011。[SS17] S. K. Schoffner 和 S. Schnell。《气候变率与气候变化的物理学》。《数学生物科学》，287:122–129，2017。[Tak12] A. Takatsu。《多孔介质方程的Wasserstein几何》。载于《亨利·庞加莱研究所年刊C辑：非线性分析》，第29卷，第217–232页。爱思唯尔，2012。[Vil03] C. Villani。《最优传输专题》。《数学研究生教材》。美国数学会，2003。[WKST16] S.-W. Wang、K. Kawaguchi、S. Sasa 和 K.-H. Tang。《时间尺度分离下纳米系统的熵产生》。《物理评论快报》，117:070601，2016。[Zwa01] R. Zwanzig。《非平衡统计力学》。牛津大学出版社，2001。