

Superestadística: Temperatura en sistemas fuera del equilibrio

Sergio Davis^{1,2} <sergio.davis@cchen.cl>

¹Centro de Investigación en la Intersección de Física de Plasmas, Materia y Complejidad (P²mc),
Comisión Chilena de Energía Nuclear

²Departamento de Física y Astronomía, Facultad de Ciencias Exactas,
Universidad Andrés Bello



Comisión Chilena de Energía Nuclear



P²mc Plasma Physics, Matter and Complexity



Termodinámica fuera del equilibrio:

Estados estacionarios, superestadística

Complejidad e información:

Entropía de información, inferencia Bayesiana

Mecánica Estadística Computacional:

Simulación Monte Carlo en *ensembles* generalizados

Estudiantes y colaboradores



Estudiantes de Doctorado



Leonardo Herrera
(U. Andrés Bello)

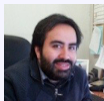


Jim Tortella
(U. Andrés Bello)



Edward Larroza
(U. Andrés Bello)

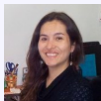
Colaboradores



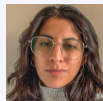
Joaquín Peralta
(UNAB)



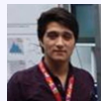
Yasmín Navarrete
(IFICC)



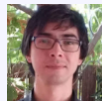
Claudia Loyola
(UNAB)



Constanza Farías
(UNAB)



Abiam Tamburrini
(UChile)

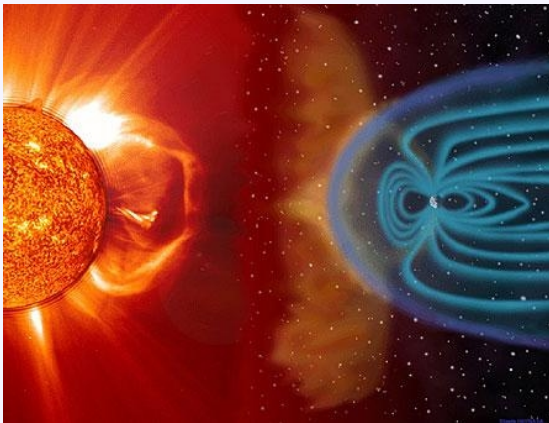


Boris Maulén
(UNAB)

Plan de la presentación

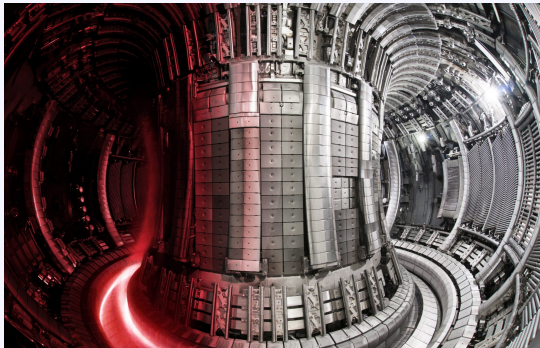
- ▶ Motivación: Distribuciones “anómalas” en sistemas fuera del equilibrio
- ▶ Estadística no extensiva de Tsallis
- ▶ Superestadística de Beck y Cohen
- ▶ Nuestra propuesta: temperatura en estados estacionarios
- ▶ Conclusiones

Plasmas espaciales



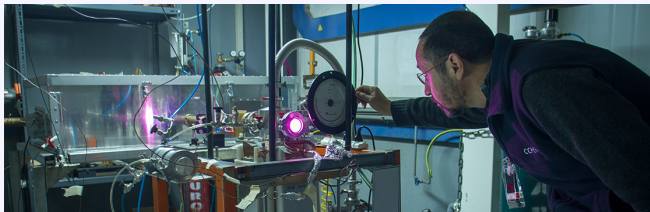
Plasmas no colisionales en el viento solar

Plasmas de laboratorio

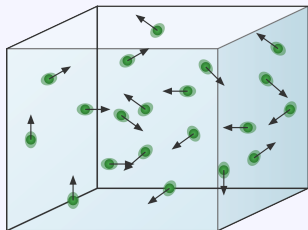
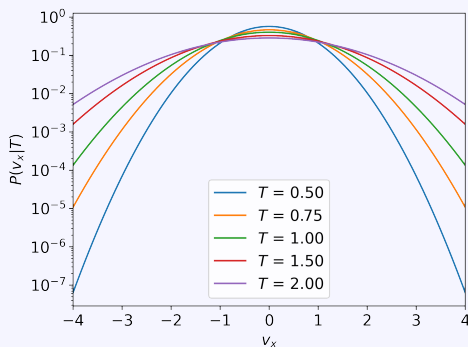


Reactor tipo Tokamak

**Generador tipo
Plasma Focus**



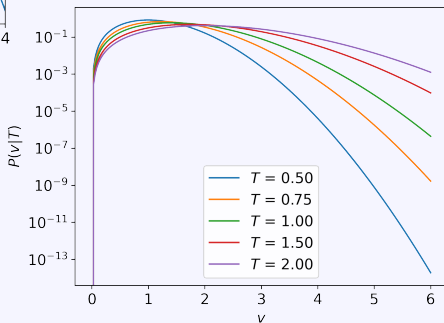
Un gas en equilibrio térmico



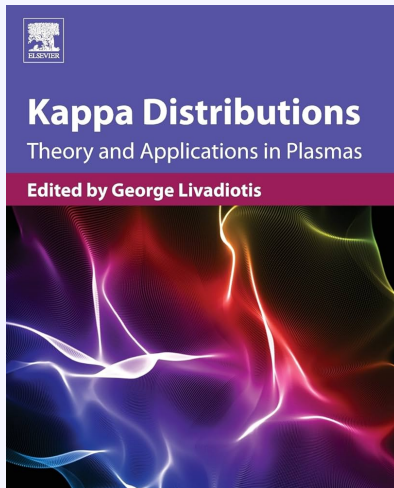
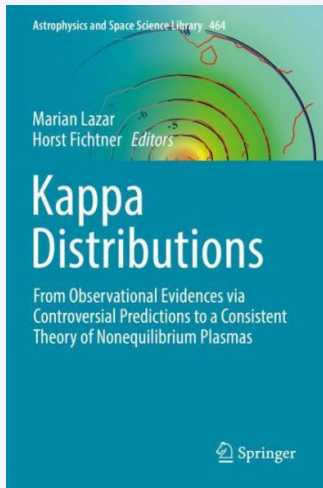
$$P(\mathbf{v}|T) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T} \right)$$

Distribución Maxwelliana de velocidad

$$\left\langle \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \right\rangle_T = \frac{3}{2} k_B T$$



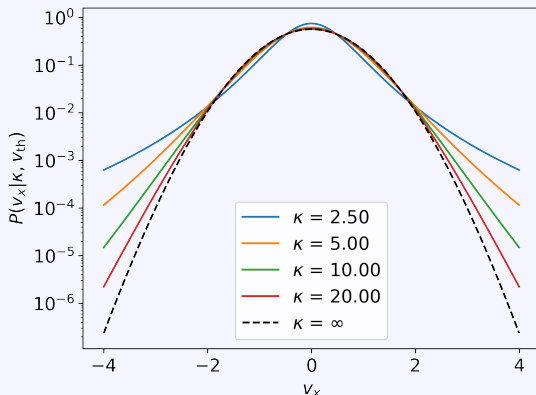
La distribución kappa



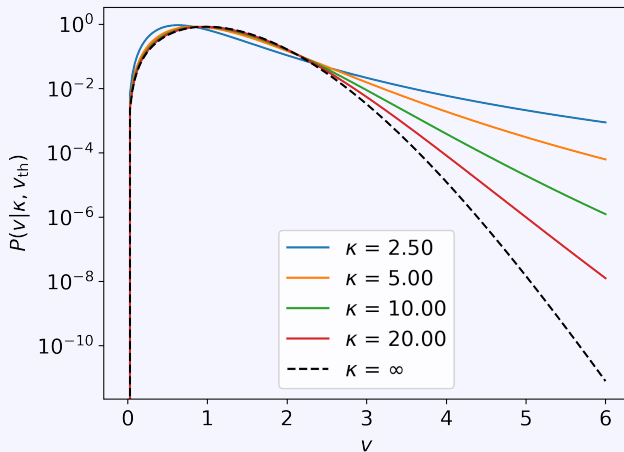
La distribución kappa

$$P(\mathbf{v}|\kappa, v_{\text{th}}) = \left[\pi \left(\kappa - \frac{3}{2} \right) v_{\text{th}}^2 \right]^{-\frac{3}{2}} \frac{\Gamma(\kappa + 1)}{\Gamma(\kappa - \frac{1}{2})} \left[1 + \frac{1}{\kappa - \frac{3}{2}} \frac{\mathbf{v}^2}{v_{\text{th}}^2} \right]^{-(\kappa+1)}$$

Distribución Kappa



La distribución kappa



$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle_{\kappa, v_{th}} = \frac{3}{2} \cdot \frac{mv_{th}^2}{2} \stackrel{?}{=} \frac{3}{2} k_B T$$

Origen de la distribución Maxwelliana

Entropía de Boltzmann-Gibbs

$$\mathcal{S} = -k_B \int d\Gamma p(\Gamma) \ln p(\Gamma)$$

$$\Gamma := (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$$

Restricciones

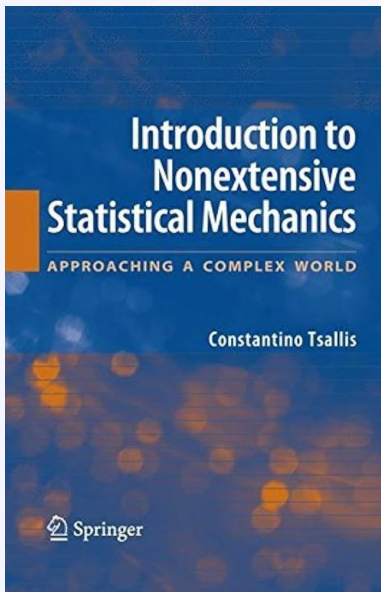
$$\langle \mathcal{H} \rangle = \int d\Gamma p(\Gamma) \mathcal{H}(\Gamma) = E_0$$

$$\mathcal{H}(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

$$\beta := \frac{1}{k_B T}$$

Distribución Canónica

$$p(\Gamma; \beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta \mathcal{H}(\Gamma))$$



$$S_{AB} = S_A + S_B + (1 - q)S_{AB}$$

Para $q = 1$ se recupera la aditividad

Estadística (no extensiva) de Tsallis

Entropía de Tsallis

$$\mathcal{S}_q = \frac{1}{q-1} \left(1 - \int d\Gamma p(\Gamma)^q \right)$$



Restricciones

$$\langle \mathcal{H} \rangle_q = \frac{1}{Z} \int d\Gamma p(\Gamma)^q \mathcal{H}(\Gamma) = E_0$$



Distribución q-Canónica

$$p(\Gamma; \beta, q) = \frac{1}{Z_q(\beta)} \left[1 + (q-1)\beta \mathcal{H}(\Gamma) \right]^{\frac{1}{1-q}}$$

La distribución kappa como una q -Maxwelliana

$$P(\mathbf{v}|\kappa, v_{\text{th}}) \propto \left[1 + \frac{1}{\kappa - \frac{3}{2}} \frac{\mathbf{v}^2}{v_{\text{th}}^2} \right]^{-(\kappa+1)}$$

$$P(\mathbf{v}|\beta_0, q) \propto \left[1 + (q-1)\beta_0 \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \right]^{\frac{1}{1-q}}$$

La equivalencia entre κ y q es:

$$q = 1 + \frac{1}{\kappa + 1}$$

Definiendo la función q -exponencial como

$$\exp_q(x) := \left[1 + (1-q)x \right]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad \text{tal que} \quad \lim_{q \rightarrow 1} \exp_q(x) = \exp(x),$$

podemos escribir la distribución kappa como una q -Maxwelliana,

$$P(\mathbf{v}|\beta_0, q) = \frac{1}{Z_q(\beta_0)} \exp_q \left(-\frac{\beta_0 m \mathbf{v}^2}{2} \right).$$

Critique of q -entropy for thermal statistics

[Michael Nauenberg](#)*

Show more ▾

Phys. Rev. E **67**, 036114 – Published 24 March, 2003

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.036114>

Nonadditive Entropies Yield Probability Distributions with Biases not Warranted by the Data

[Steve Pressé](#)^{1,*}, [Kingshuk Ghosh](#)², [Julian Lee](#)³, and [Ken A. Dill](#)⁴

Show more ▾

Phys. Rev. Lett. **111**, 180604 – Published 1 November, 2013

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.180604>

Inconsistencias en el uso de la entropía de Tsallis

Nonadditive entropy maximization is inconsistent with Bayesian updating

[Steve Pressé](#)*

Show more ▾

Phys. Rev. E **90**, 052149 – Published 24 November, 2014

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.052149>

PAPER

On the foundations of the maximum entropy principle using Fenchel duality for Shannon and Tsallis entropies

Pierre Maréchal, Yasmín Navarrete and Sergio Davis

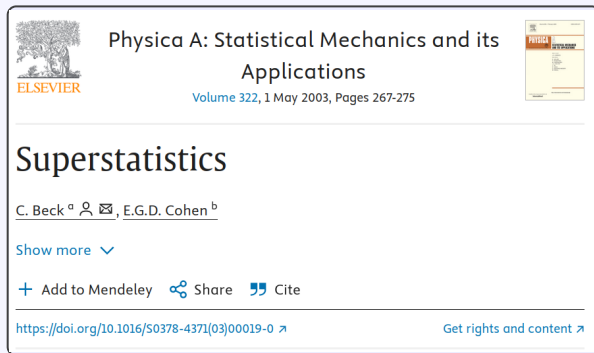
Published 21 June 2024 • © 2024 IOP Publishing Ltd

[Physica Scripta](#), Volume 99, Number 7

Citation Pierre Maréchal et al 2024 *Phys. Scr.* **99** 075265

DOI 10.1088/1402-4896/ad55b8

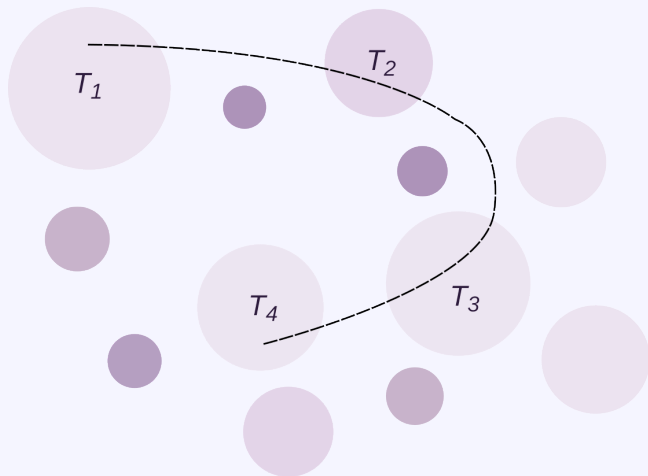
Superestadística: una nueva esperanza



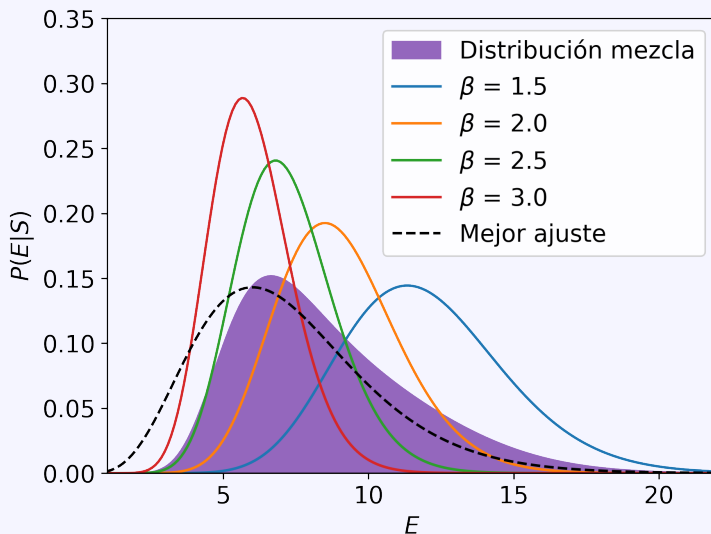
Superestadística explica las distribuciones tipo Tsallis (y otras) sin modificar la entropía de Gibbs.

Para esto postula modelos que son mezclas de equilibrios canónicos:

$$\exp(-\beta \mathcal{H}(\Gamma)) \longrightarrow \int_0^\infty d\beta f(\beta) \exp(-\beta \mathcal{H}(\Gamma))$$



$$P(\Gamma, \beta | \mathbf{S}) = P(\Gamma | \beta) \times P(\beta | \mathbf{S})$$



Superestadística: una formulación minimalista

Superestadística es una generalización del modelo canónico

$$P(\Gamma|\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta\mathcal{H}(\Gamma))$$

donde ahora β es una variable aleatoria con distribución $P(\beta|S)$.

El microestado Γ pasa a un microestado ampliado (Γ, β) , con distribución

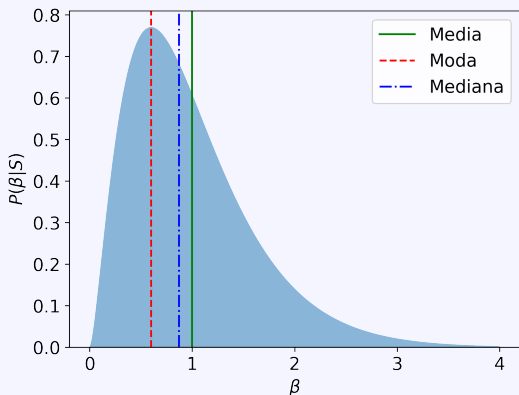
$$P(\Gamma, \beta|S) = P(\beta|S)P(\Gamma|\beta) = P(\beta|S) \times \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta\mathcal{H}(\Gamma)).$$

Integrando sobre β obtenemos la forma usual de la superestadística,

$$P(\Gamma|S) = \int_0^\infty d\beta f(\beta; S) \exp(-\beta\mathcal{H}(\Gamma))$$

$$\text{con } f(\beta; S) := \frac{P(\beta|S)}{Z(\beta)}.$$

¿Cómo hablar de temperatura en superestadística?



Dos medidas convenientes son la media y la varianza

$$\beta_S := \langle \beta \rangle_S$$

$$\mathcal{U} := \langle (\delta\beta)^2 \rangle_S$$

de la distribución de temperatura inversa β .

Notemos que $\mathcal{U} = 0$ corresponde al modelo canónico, esto es, $S = \beta_0$ tal que

$$P(\beta|\beta_0) = \delta(\beta - \beta_0).$$

También podemos definir la varianza relativa de β ,

$$u := \frac{\mathcal{U}}{(\beta_S)^2}.$$

La distribución kappa desde superestadística

Podemos obtener la distribución kappa como una mezcla de Maxwellianas,

$$P(\mathbf{v}|S) = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \left[\left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\beta m \mathbf{v}^2}{2} \right) \right]$$

Suponiendo una distribución gamma para $P(\beta|S)$, que escribimos como

$$P(\beta|u, \beta_S) = \frac{1}{u\beta_S \Gamma\left(\frac{1}{u}\right)} \exp\left(-\frac{\beta}{u\beta_S}\right) \left(\frac{\beta}{u\beta_S}\right)^{\frac{1}{u}-1}$$

recuperamos la distribución kappa en la forma

$$P(\mathbf{v}|u, \beta_S) = \frac{u^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{u}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{u}\right)} \left(\frac{m\beta_S}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left[1 + u\beta_S \frac{m\mathbf{v}^2}{2}\right]^{-\left(\frac{1}{u} + \frac{3}{2}\right)}$$

donde β_S es precisamente la media de β , y la varianza relativa u cumple

$$0 \leq u \leq 1.$$

La distribución kappa desde superestadística

$$P(\mathbf{v}|u, \beta_S) \propto \left[1 + u\beta_S \frac{m\mathbf{v}^2}{2} \right]^{-\left(\frac{1}{u} + \frac{3}{2}\right)}$$

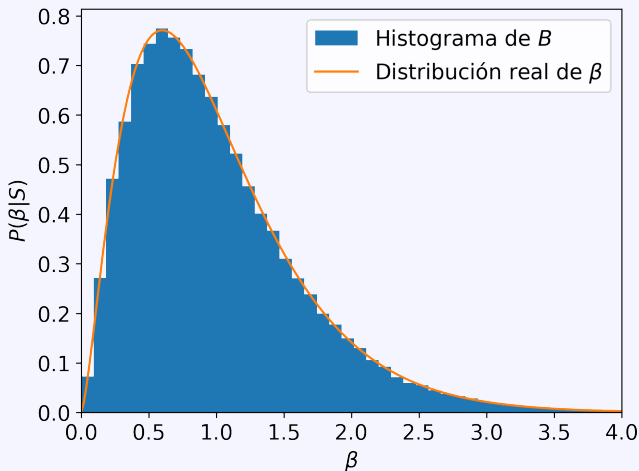
$$P(\mathbf{v}|\kappa, v_{\text{th}}) \propto \left[1 + \frac{1}{\kappa - \frac{3}{2}} \frac{\mathbf{v}^2}{v_{\text{th}}^2} \right]^{-(\kappa+1)}$$

Tenemos que los parámetros β_S y u están dados por

$$\beta_S = \left(\frac{\kappa - \frac{3}{2}}{\kappa - \frac{1}{2}} \cdot \frac{mv_{\text{th}}^2}{2} \right)^{-1},$$
$$u = \frac{\mathcal{U}}{(\beta_S)^2} = \frac{1}{\kappa - \frac{1}{2}}.$$

Como $u \leq 1$, tenemos en principio que $\kappa \geq 3/2$.

¿Es posible medir la distribución de temperaturas?



Es esperable que exista una función $B(\Gamma)$ del microestado que corresponda a β , de la misma manera que $\mathcal{H}(\Gamma)$ corresponde a la energía E .

Un teorema de imposibilidad en la superestadística

Physica A 505 (2018) 864–870



Contents lists available at ScienceDirect

Physica A

journal homepage: www.elsevier.com/locate/physa



Temperature is not an observable in superstatistics

Sergio Davis^{a,b,*}, Gonzalo Gutiérrez^c

^a Comisión Chilena de Energía Nuclear, Casilla 188-D, Santiago, Chile

^b Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andres Bello, Sazié 2212, piso 7, 8370136, Santiago, Chile

^c Grupo de Nanomateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile



No existe un observable $B(\Gamma)$ tal que

$$\int_0^\infty d\beta P(\beta|S)G(\beta) = \int d\Gamma P(\Gamma|S)G(B(\Gamma))$$

para cualquier función G si el modelo S no es canónico.

Restricciones para la superestadística

Es posible mostrar que la distribución condicional

$$P(\beta|\Gamma, S) = \frac{P(\beta, \Gamma|S)}{P(\Gamma|S)} = \frac{f(\beta; S) \exp(-\beta \mathcal{H}(\Gamma))}{\rho(\mathcal{H}(\Gamma); S)}$$

de β dado el microestado Γ tiene valor medio y varianza dados por

$$\langle \beta \rangle_{\Gamma, S} = \beta_F(\mathcal{H}(\Gamma); S),$$

$$\langle (\delta\beta)^2 \rangle_{\Gamma, S} = -\beta_F'(\mathcal{H}(\Gamma); S),$$

donde hemos definido la *temperatura inversa fundamental* β_F como

$$\beta_F(E; S) := -\frac{\partial}{\partial E} \ln \rho(E; S)$$

En superestadística, hay una incerteza en β que no es consecuencia de la incerteza sobre Γ . Además, todo modelo superestadístico cumple

$$\beta_F'(E; S) \leq 0.$$

Algunos ejemplos de temperatura fundamental

Modelo canónico:

$$\rho(E; \beta_0) = \frac{\exp(-\beta_0 E)}{Z(\beta_0)}$$

$$\beta_F(E; \beta_0) = \beta_0$$

Modelo gaussiano:

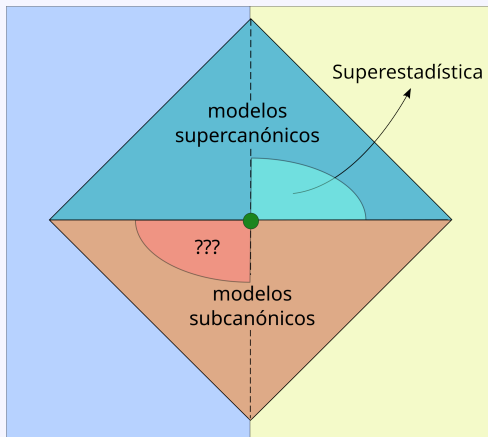
$$\rho(E; A, E_0) = \frac{1}{\eta_A(E_0)} \exp(-A(E - E_0)^2) \quad \beta_F(E; A, E_0) = 2A(E - E_0)$$

Modelo q -canónico (Tsallis):

$$\rho(E; q, \beta) = \frac{1}{Z_q(\beta_0)} \left[1 + (q-1)\beta_0 E \right]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad \beta_F(E; q, \beta_0) = \frac{\beta_0}{1 + (q-1)\beta_0 E}$$

Clasificación de los estados estacionarios

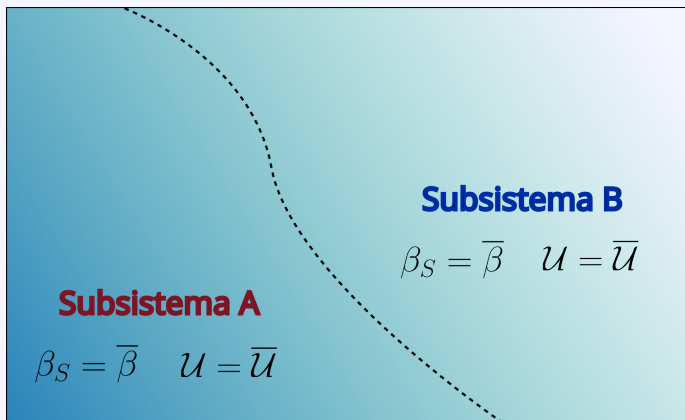
$$\mathcal{U} = \langle (\delta\beta_F)^2 \rangle_S - \langle \beta_F' \rangle_S$$



En superestadística, $\mathcal{U} \geq 0$ con $\mathcal{U} = 0$ ($\beta_F = \text{constante}$) el modelo canónico.

S. Davis. J. Phys. A: Math. Theor. **608**, 128249 (2022).

Generalización del equilibrio a estados estacionarios



¡Las cantidades β_S y $\mathcal{U}$ son invariantes ante la elección de subsistemas!

$$\beta_S^{(A)} = \beta_S^{(B)} = \beta_S^{(AB)}$$
$$\mathcal{U}_A = \mathcal{U}_B = \mathcal{U}_{AB}$$

Conclusiones

- ▶ Es posible explicar las distribuciones kappa usando la superestadística
- ▶ Superestadística evita inconsistencias en la estadística de Tsallis
- ▶ Superestadística no es compatible con estados que tienen $\mathcal{U} < 0$
- ▶ El parámetro $\mathcal{U}$ hace posible una clasificación de estados estacionarios



Agradecimientos al proyecto
ANID FONDECYT 1220651
(Chile)

