Distancia al equilibrio y correlación en plasmas con distribuciones kappa

Sergio Davis[1,2], Leonardo Herrera, Biswajit Bora, Jalaj Jain, José Moreno, Cristian Pavez, Leopoldo Soto

[1]Centro de Investigación en la Intersección de Física de Plasma, Materia y Complejidad (P^{2}mc),
Comisión Chilena de Energía Nuclear

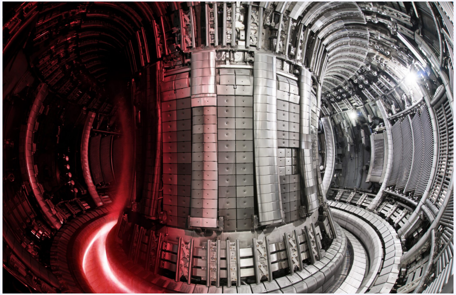
[2]Departamento de Física y Astronomía, Facultad de Ciencias Exactas,
Universidad Andrés Bello

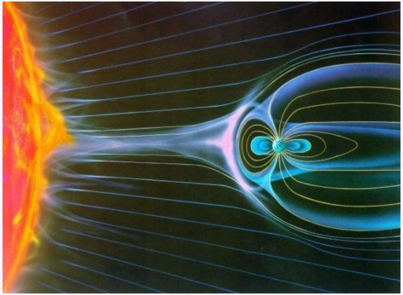
Comisión Chilena de Energía Nuclear
Ministerio de Energía

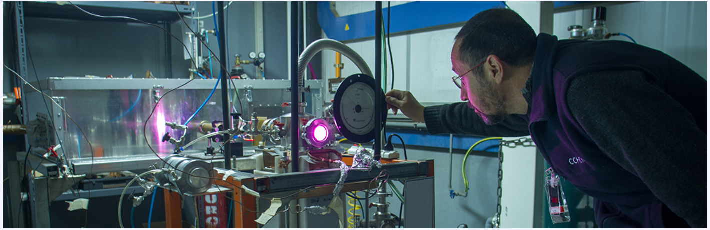
UNIVERSIDAD ANDRES BELLO

| 2do Congreso Chileno de Física de Plasmas | Universidad Técnica Federico Santa María |

Motivación: Plasmas fuera del equilibrio



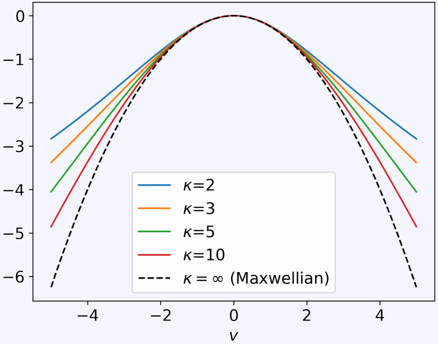




Distribuciones de velocidad en plasmas

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

(Maxwell-Boltzmann)



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

(Kappa)

Origen de la distribución Maxwelliana

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

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

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

Entropía de Boltzmann-Gibbs

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

$\downarrow$

Restricciones

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

$\downarrow$

Distribución Canónica

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

Estadística no extensiva de Tsallis

Predice leyes de potencia en lugar de exponenciales:

$$P(\mathbf{\Gamma}|\beta) = \frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)} \quad \rightarrow \quad P(\mathbf{\Gamma}|\beta_0, q) = \frac{1}{Z_q(\beta)}\Big[1 + (q-1)\beta_0\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\Big]^{\frac{1}{1-q}}$$

Para esto:

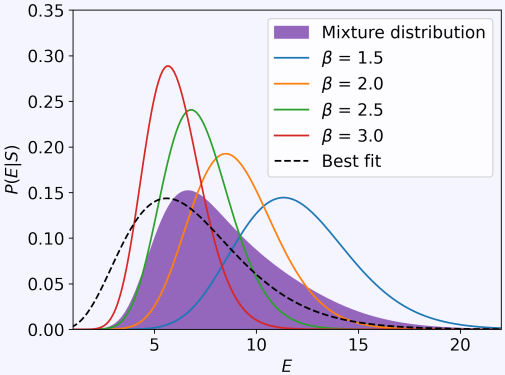
- Reemplaza la entropía de Gibbs por la llamada “q-entropía” (entropía de Tsallis),

$$\mathcal{S} := -\int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma}) \ln p(\Gamma) \quad \rightarrow \quad \mathcal{S}_q := \frac{1}{q-1}\left(1 - \int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma})^q\right)$$

- Reemplaza la operación expectación por una “q-expectación” (distribución *escolta*),

$$\big\langle A\big\rangle_p = \int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma})A(\mathbf{\Gamma}) \quad \rightarrow \quad \langle\langle A\rangle\rangle = \frac{\int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma})^q A(\mathbf{\Gamma})}{\int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma})^q}$$

Superestadística



Superestadística explica las distribuciones no canónicas sin modificar la entropía de Gibbs.

Para esto postula modelos que son mezclas de equilibrios canónicos:

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

C. Beck, E. G. D. Cohen, Physica A **322**, 267-275 (2003).

Superestadística: una explicación basada en la probabilidad

La idea central:

Al microestado $\mathbf{\Gamma}$ se agrega una nueva variable (¿dinámica?) β, tal que

$$\mathbf{\Gamma} \quad \rightarrow \quad (\mathbf{\Gamma}, \beta)$$

Es decir, reemplazamos la distribución de microestados $P(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda})$ por la distribución conjunta $P(\mathbf{\Gamma}, \beta|\boldsymbol{\lambda})$.

Aquí $\boldsymbol{\lambda}$ representa el conjunto de parámetros particulares del modelo superestadístico a considerar.

$$P(\mathbf{\Gamma}, \beta|\boldsymbol{\lambda}) = P(\mathbf{\Gamma}|\beta) \times P(\beta|\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)} \times P(\beta|\boldsymbol{\lambda}) \tag{1}$$

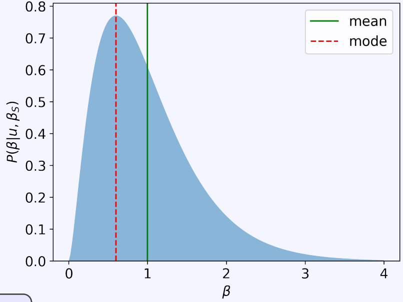
$$P(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}) = \int_0^\infty d\beta\, P(\mathbf{\Gamma}, \beta|\boldsymbol{\lambda}) = \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|\boldsymbol{\lambda}) \left[\frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)}\right] \tag{2}$$

Temperaturas asociadas a la distribución kappa

Las distribuciones superestadísticas de velocidades son de la forma

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

por lo que constituyen *deformaciones* de la distribución Maxwelliana.



Si postulamos que $P(\beta|\boldsymbol{\lambda})$ es una distribución gamma,

$$\boxed{P(\beta|u,\beta_S) = \frac{1}{u\beta_S\Gamma(1/u)} \exp\left(-\frac{\beta}{u\beta_S}\right)\left(\frac{\beta}{u\beta_S}\right)^{\frac{1}{u}-1}} \qquad 0 \leq u < 1$$

obtenemos la distribución kappa en la forma

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

S. Davis, G. Avaria, B. Bora, J. Jain, J. Moreno, C. Pavez, L. Soto. Phys. Rev. E **108**, 065207 (2023).

Parametrización invariante de la distribución kappa

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

Los parámetros originales (κ, v_{th}) de la distribución kappa se obtienen como

$$\boxed{\kappa = \frac{1}{u} + \frac{1}{2}} \qquad \boxed{\frac{mv_{\text{th}}^2}{2} = \frac{1}{(1-u)\beta_S}}$$

y vemos que $u \to 0$ es equivalente a $\kappa \to \infty$ (Maxwelliana).

Los parámetros u y β_S pueden definirse para cualquier superestadística, como

$$\beta_S := \big\langle \beta \big\rangle_{\boldsymbol{\lambda}} \qquad u := \frac{\big\langle (\delta\beta)^2 \big\rangle_{\boldsymbol{\lambda}}}{(\beta_S)^2} \tag{3}$$

y de hecho son **independientes del número de partículas**.

Distribución kappa para N partículas

La distribución kappa para una partícula

$$P(\boldsymbol{v}|u,\beta_S)=\left(\frac{mu\beta_S}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{u}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{u}\right)}\left[1+u\beta_S\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}\right]^{-\left(\frac{1}{u}+\frac{3}{2}\right)} \tag{4}$$

se generaliza al caso de N partículas como

$$P(\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_N|u,\beta_S)=\left(\frac{\tilde{m}u\beta_S}{2\pi}\right)^{\frac{3N}{2}}\frac{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+\frac{1}{u}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{u}\right)}\left[1+u\beta_S\sum_{i=1}^{N}\frac{m_i\boldsymbol{v}_i^2}{2}\right]^{-\left(\frac{1}{u}+\frac{3N}{2}\right)} \tag{5}$$

por lo que tiene sentido definir el índice kappa de N partículas,

$$\kappa_N:=\frac{1}{u}+\frac{3N}{2}-1=\kappa+\frac{3(N-1)}{2} \tag{6}$$

De (5) podemos ver que

$$\boxed{P(\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_N|u,\beta_S)\neq\prod_{i=1}^{N}P(\boldsymbol{v}_i|u,\beta_S)}$$

excepto para $u=0$, luego dos velocidades $\boldsymbol{v}_i$, $\boldsymbol{v}_j$ $(i\neq j)$ están **correlacionadas**.

Muestreo de Gibbs

Permite generar muestras de variables (X, Y) cuando la distribución conjunta $P(X, Y|\boldsymbol{\lambda})$ no se conoce, o es complicada de tratar.

En lugar de ésta, sólo se necesitan las distribuciones condicionales $P(X|Y, \boldsymbol{\lambda})$, $P(Y|X, \boldsymbol{\lambda})$.

Algoritmo:

(1) Comenzamos con una semilla (x_0, y_0), inicializamos $t = 0$

(2) Generamos x_{t+1} usando la distribución condicional $P(X|Y = y_t, \boldsymbol{\lambda})$

(3) Generamos y_{t+1} usando la distribución condicional $P(Y|X = x_{t+1}, \boldsymbol{\lambda})$

(4) Guardamos la muestra (x_{t+1}, y_{t+1})

(5) Hacemos $t = t + 1$ y volvemos a (2)

¿Podemos usar esta idea para generar velocidades kappa con las correlaciones correctas?

Generación de velocidades kappa para N partículas

Desafío:

Generar muestras de $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N$ de acuerdo a la distribución kappa de N partículas

$$P(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N|u, \beta_S) = \left(\frac{\tilde{m}u\beta_S}{2\pi}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+\frac{1}{u}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{u}\right)} \left[1 + u\beta_S \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i \boldsymbol{v}_i^2}{2}\right]^{-\left(\frac{1}{u}+\frac{3N}{2}\right)}$$

Solución: muestreo de Gibbs por medio de las distribuciones Maxwellianas

$$P(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N|\beta) = \prod_{i=1}^{N} P(\boldsymbol{v}_i|\beta), \qquad P(\boldsymbol{v}_i|\beta) = \left(\frac{m_i\beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\beta \frac{m_i \boldsymbol{v}_i^2}{2}\right)$$

y la distribución de temperatura (inversa) dado el conjunto de velocidades del sistema,

$$P(\beta|\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N, u, \beta_S) = \frac{1}{\beta_0\,\Gamma(\kappa_N+1)} \exp\left(-\frac{\beta}{\beta_0}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}\right)^{\kappa_N}. \tag{7}$$

que es una distribución gamma con $\boxed{\kappa_N := \frac{1}{u} + \frac{3N}{2} - 1}$ $\boxed{\beta_0 := \frac{u\beta_S}{1 + u\beta_S\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{m\boldsymbol{v}_i^2}{2}\right)}}$

Algoritmo: Muestreo de Gibbs para N partículas kappa

(1) Inicializamos el sistema con $\beta = \beta_S$
(2) Para cada i desde 1 hasta N:
    Generamos la nueva velocidad $\boldsymbol{v}_i$ usando la Maxwelliana $P(\boldsymbol{v}_i|\beta)$
    Guardamos $\boldsymbol{v}_i$
(3) Calculamos β_0 usando las N velocidades actuales
(4) Actualizamos β sacándolo de la distribución $P(\beta|\kappa_N, \beta_0)$
(5) Volvemos a (2)

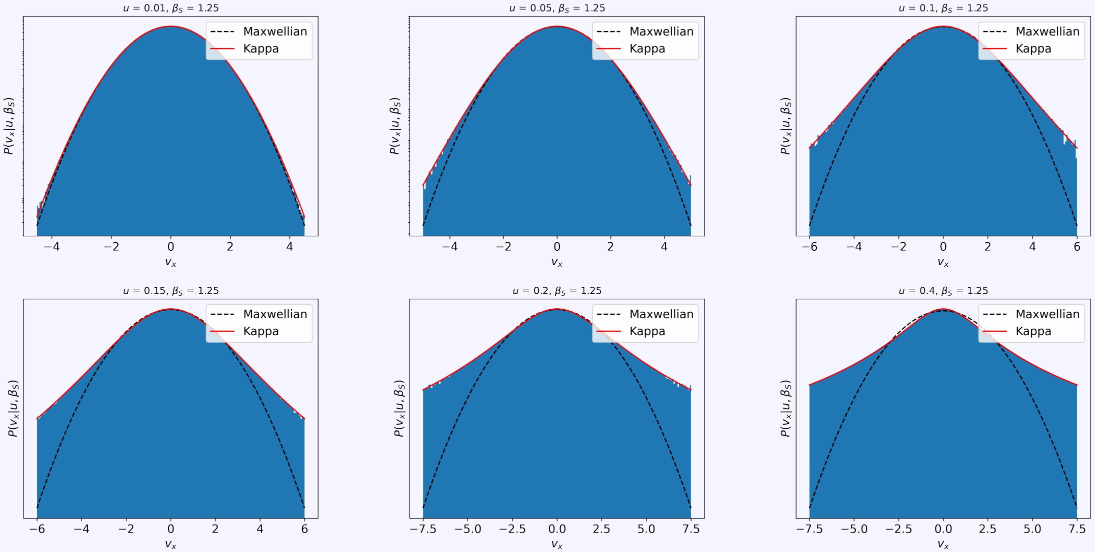
El muestreo de Gibbs garantiza que β se distribuye de acuerdo a $P(\beta|u, \beta_S)$.

Notemos que β es una variable auxiliar que se obtiene a partir de

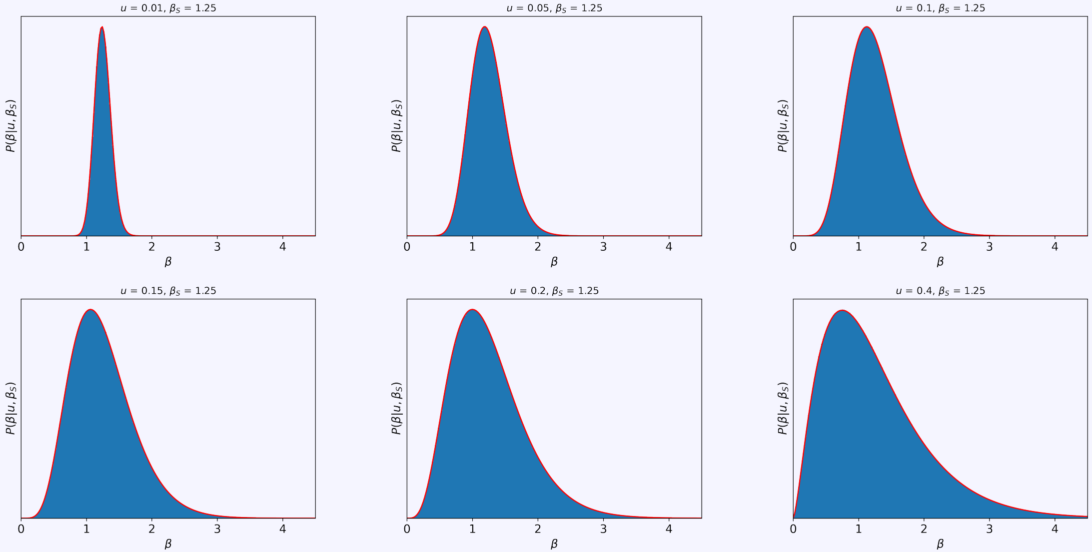
$$P(\beta|\kappa_N, \beta_0) = \frac{1}{\beta_0\,\Gamma(\kappa_N + 1)} \exp\left(-\frac{\beta}{\beta_0}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}\right)^{\kappa_N}$$

donde $$\kappa_N := \frac{1}{u} + \frac{3N}{2} - 1, \qquad \beta_0 := \frac{u\beta_S}{1 + u\beta_S\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{m\boldsymbol{v}_i^2}{2}\right)}$$

Distribuciones de velocidad kappa mediante muestreo de Gibbs



Distribuciones de temperatura inversa mediante muestreo de Gibbs



¿Cuál es la relación entre β y las velocidades?

En superestadística existe la distribución conjunta

$$P(\boldsymbol{V}, \beta|u, \beta_S) = P(\beta|u, \beta, S) \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i \beta}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\beta \frac{m_i \boldsymbol{v}_i^2}{2}\right)$$

entre las velocidades $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N$ y la temperatura inversa β.

Es sabido* que β no es una función de las velocidades (en el sentido tradicional), pero claramente β está muy correlacionada con éstas.

¿Cuánta información acerca de β está contenida en las velocidades mismas?

* S. Davis, G. Gutiérrez. Phys. A **505**, 864-870 (2018).

Información mutua

La información mutua $\mathcal{I}_{XY}$ entre dos variables X e Y se define como

$$\boxed{\mathcal{I}_{XY}(\boldsymbol{\lambda}) := \left\langle \ln\left[\frac{P(X,Y|\boldsymbol{\lambda})}{P(X|\boldsymbol{\lambda})P(Y|\boldsymbol{\lambda})}\right]\right\rangle_{\boldsymbol{\lambda}}}$$

y mide la correlación entre ellas. Para cualquier par de variables X, Y se cumple que

$$\mathcal{I}_{XY}(\boldsymbol{\lambda}) \geq 0, \tag{8}$$

siendo cero únicamente en el caso en que X e Y son independientes, esto es, si

$$P(X,Y|\boldsymbol{\lambda}) = P(X|\boldsymbol{\lambda})P(Y|\boldsymbol{\lambda}). \tag{9}$$

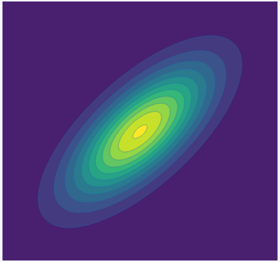
Ejemplo: Distribución gaussiana bivariante

$$P(X,Y|\mu_X,\mu_Y,\sigma_X,\sigma_Y,R) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y}\exp\left(-\frac{1}{2(1-R^2)}\left[\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)^2+\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)^2\right]\right.$$
$$\left.+\frac{R}{1-R^2}\left(\frac{(x-\mu_X)(y-\mu_Y)}{\sigma_X\sigma_Y}\right)\right) \tag{10}$$

donde R es el coeficiente de correlación de Pearson entre X e Y.

En este caso la información mutua está dada por

$$\boxed{\mathcal{I}_{XY}(\mu_X,\mu_Y,\sigma_X,\sigma_Y,R) = -\frac{1}{2}\ln\left(1-R^2\right)}$$



Consideremos la información mutua entre la temperatura inversa β y las velocidades $\boldsymbol{V}$,

$$\mathcal{D}(\boldsymbol{\lambda}) := \mathcal{I}_{\beta,\boldsymbol{V}}(\boldsymbol{\lambda}) = \left\langle \ln\left[\frac{P(\boldsymbol{V},\beta|\boldsymbol{\lambda})}{P(\boldsymbol{V}|\boldsymbol{\lambda})P(\beta|\boldsymbol{\lambda})}\right]\right\rangle_{\boldsymbol{\lambda}}. \tag{11}$$

Podemos escribirla como una distancia (entropía relativa) entre la distribución superestadística y la Maxwelliana, ya que

$$\mathcal{D}(\boldsymbol{\lambda}) = -\left\langle \ln\frac{P(\boldsymbol{V}|\boldsymbol{\lambda})}{P(\boldsymbol{V}|\beta)}\right\rangle_{\boldsymbol{\lambda}} = -\int_0^\infty d\beta \int d\boldsymbol{V} P(\boldsymbol{V},\beta|\boldsymbol{\lambda}) \ln\frac{P(\boldsymbol{V}|\boldsymbol{\lambda})}{P(\boldsymbol{V}|\beta)}$$

Esta función $\mathcal{D}(\boldsymbol{\lambda})$ sólo es mínima (e igual a cero) cuando $\boldsymbol{\lambda}$ representa un estado de equilibrio.

$$\mathcal{D}(\boldsymbol{\lambda}) = \underbrace{-\int d\boldsymbol{V}\, P(\boldsymbol{V}|\boldsymbol{\lambda}) \ln P(\boldsymbol{V}|\boldsymbol{\lambda})}_{=\text{entropía dado }\boldsymbol{\lambda}} - \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|\boldsymbol{\lambda}) \underbrace{\left[-\int d\boldsymbol{V} P(\boldsymbol{V}|\beta) \ln P(\boldsymbol{V}|\beta)\right]}_{=\text{entropía dado }\beta} \tag{12}$$

S. Davis. J. Phys. A: Math. Theor. **57**, 295004 (2024).

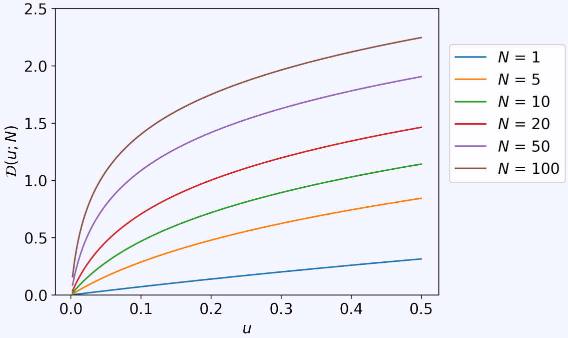
Para el caso de la distribución kappa, la distancia al equilibrio está dada por

$$\boxed{\mathcal{D}(u; N) = F\left(\frac{1}{u} + \frac{3N}{2}\right) - F\left(\frac{1}{u}\right) - \frac{3N}{2}}$$

y vemos que no depende de β_S, sólo de u.

Aquí hemos definido la función auxiliar $F(z)$ como

$$F(z) := z\frac{\partial}{\partial z}\ln\Gamma(z) - \ln\Gamma(z).$$



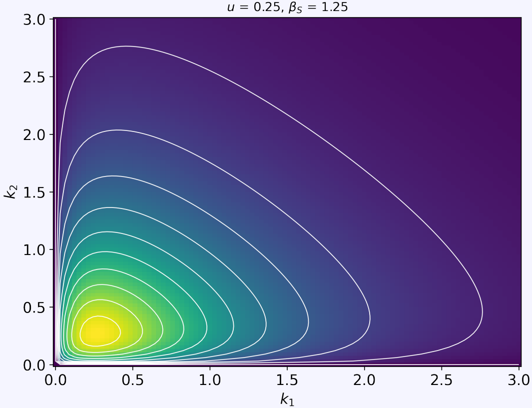
Esto hace posible entender u (también κ) como un "sustituto" de la distancia al equilibrio $\mathcal{D}(u)$

$$\mathcal{D}(u; N) \approx \frac{1}{2}\ln\left(1 + \frac{3Nu}{2}\right)$$

Correlación entre energías cinéticas

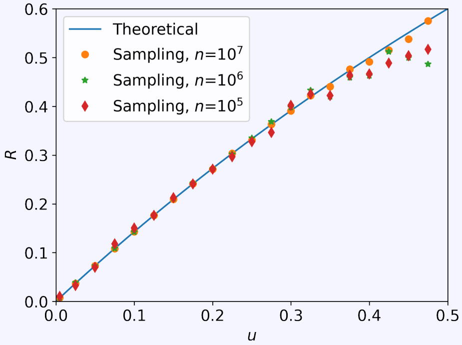
$$P(k_1, k_2|u, \beta_S) = \frac{4}{\pi}(\beta_S)^3(1+u)(1+2u)\sqrt{k_1 k_2}\Big[1 + u\beta_S(k_1+k_2)\Big]^{-\left(\frac{1}{u}+3\right)}$$

$$P(k_i|u, \beta_S) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}(u\beta_S)^{\frac{3}{2}}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{u}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{u}\right)}\Big[1 + u\beta_S k_i\Big]^{\frac{1}{u}+\frac{3}{2}}\sqrt{k_i}$$



Correlación entre energías cinéticas

$$R(u) = \frac{\big\langle \delta k_1 \delta k_2 \big\rangle_{u,\beta_S}}{\big\langle (\delta k_1)^2 \big\rangle_{u,\beta_S}} = \frac{3u}{2+u} = \frac{3}{2\kappa}$$



$$\mathcal{I}_{k_1,k_2}(u) = 2F\left(\frac{1}{u} + \frac{3}{2}\right) - F\left(\frac{1}{u}\right) - F\left(\frac{1}{u} + 3\right) = 2\mathcal{D}(u;1) - \mathcal{D}(u;2)$$

Conclusiones

- La superestadística proporciona una formulación elegante para las distribuciones kappa
- La distribución kappa puede escribirse en términos de parámetros invariantes u y β_S, donde u mide la incerteza acerca de la temperatura
- La distancia al equilibrio en un plasma con distribuciones kappa se corresponde uno-a-uno con el parámetro u, y por tanto, también con κ
- Con el muestreo de Gibbs es posible generar velocidades kappa eficientemente y preservando las correlaciones entre partículas, usando sólo números aleatorios gaussianos y gamma

Para más información:

(1) *Single-particle velocity distributions of collisionless, steady-state plasmas must follow Superstatistics.*
Sergio Davis, Gonzalo Avaria, Biswajit Bora, Jalaj Jain, José Moreno, Cristian Pavez, Leopoldo Soto.
Physical Review E **100**, 023205 (2019).

(2) *Kappa distribution from particle correlations in non-equilibrium, steady-state plasmas.*
Sergio Davis, Gonzalo Avaria, Biswajit Bora, Jalaj Jain, José Moreno, Cristian Pavez, Leopoldo Soto.
Physical Review E **108**, 065207 (2023).

(3) *A superstatistical measure of distance from canonical equilibrium.*
Sergio Davis.
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **57**, 295004 (2024).

(4) *Kappa distributions in the framework of superstatistics.*
Sergio Davis, Biswajit Bora, Cristian Pavez, Leopoldo Soto.
`https://arxiv.org/abs/2507.03757`

Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo

Agradecimientos al proyecto
ANID FONDECYT 1220651 (Chile)