

Temperatura y sus fluctuaciones en estados estacionarios fuera del equilibrio

Sergio Davis <sergio.davis@cchen.cl>

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

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello



Comisión
Chilena de
Energía Nuclear

Ministerio de Energía



UNIVERSIDAD
ANDRÉS BELLO

XXIII Simposio Chileno de Física | 22-24 Noviembre 2022 | Valparaíso

P²mc

Plasma Physics, Matter and Complexity



Investigación en Física en CCHEN



Centro P^2mc :

Gonzalo Avaria	José Moreno
Biswajit Bora	Cristian Pavez
Sergio Davis	Mirtha Ríos
Jalaj Jain	Leopoldo Soto

Centro de Investigación en Física Nuclear y Espectroscopia de Neutrones:

Francisco Molina	Marcelo Zambra
------------------	----------------

Estudiantes y colaboradores

Estudiantes de Doctorado:

Constanza Farías	Física UNAB
Vivianne Olguín	Física U. de Chile
Abiam Tamburrini	Física U. de Chile
Boris Maulén	Fisicoquímica UNAB



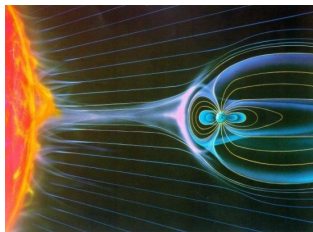
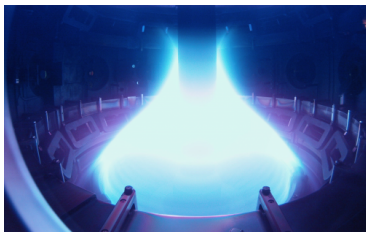
Colaboradores:

Gonzalo Gutiérrez	Física U. de Chile
Joaquín Peralta	Física UNAB
Claudia Loyola	Física UNAB
Pablo S. Moya	Física U. de Chile



Sistemas no térmicos

Muchos sistemas (entre ellos plasmas de laboratorio y espaciales) **no siguen las predicciones** de la termodinámica en equilibrio.

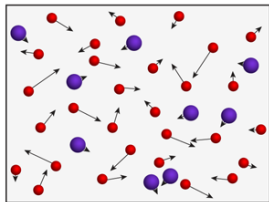


Ejemplo: la velocidad de una partícula debería seguir la distribución de Maxwell-Boltzmann (canónica en velocidades):

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

y esto no se cumple. ¿Qué temperatura tiene un plasma entonces?

¿Qué es temperatura? Tres «definiciones»



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

Ensemble canónico, $\beta := 1/(k_B T)$

Termodinámica:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S(E)}{\partial E}$$

$$\Rightarrow \quad \beta_{\Omega}(E) := \frac{\partial}{\partial E} \ln \Omega(E)$$

donde $S(E) := k_B \ln \Omega(E)$.

Teorema de equipartición:

$$\left\langle \frac{K}{N} \right\rangle_{\beta} = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\text{donde } K = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i}.$$

Temperatura y las identidades de expectación

La probabilidad de observar una energía E en equilibrio es

$$P(E|\beta) = \frac{\exp(-\beta E)\Omega(E)}{Z(\beta)}. \quad (1)$$

Usando la identidad¹

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial x} \right\rangle_I = - \left\langle \omega \frac{\partial}{\partial x} \ln P(x|I) \right\rangle_I \quad (2)$$

y reemplazando

$$\frac{\partial}{\partial E} \ln P(E|\beta) = -\beta + \beta_{\Omega}(E) \quad \Rightarrow \quad \left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_{\beta} = \left\langle \omega [\beta - \beta_{\Omega}] \right\rangle_{\beta}$$

para cualquier* función $\omega(E)$. Como $\omega = 1 \Rightarrow \langle \beta_{\Omega} \rangle_{\beta} = \beta$, la función β_{Ω} es un **estimador** de temperatura. Equipartición se obtiene con $\beta_{\Omega}(E) = \frac{3N-2}{2E}$ para el gas ideal,

$$\omega(E) = E \quad \Rightarrow \quad \langle E \rangle_{\beta} = \frac{3N}{2\beta}.$$

¹S. Davis, G. Gutiérrez. Phys. Rev. E **86**, 051136 (2012).

Temperatura en estados estacionarios no canónicos

Si $P(\Gamma|S)$ depende sólo de $\mathcal{H}(\Gamma)$, entonces

$$P(\Gamma|S) = \rho(\mathcal{H}(\Gamma)) \quad \Rightarrow \quad P(E|S) = \rho(E)\Omega(E)$$

y nuestra identidad de expectación se generaliza a

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_S = \left\langle \omega [\beta_F - \beta_\Omega] \right\rangle_S$$

donde hemos definido un nuevo estimador de temperatura,

Temperatura inversa fundamental

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

Usando $\omega = 1$, vemos que $\langle \beta_F \rangle_S = \langle \beta_\Omega \rangle_S$.

Ejemplos de temperatura fundamental

Ensemble canónico:

$$\rho(E; \beta) = \frac{\exp(-\beta E)}{Z(\beta)} \iff \beta_F(E; \beta) = \beta$$

Ensemble q -canónico (Tsallis):

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

Ensemble gaussiano:

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

Superestadística (Beck & Cohen, 2003)

Formaliza la idea de temperatura como variable aleatoria.

Existe una única manera consistente de formularla:

Predicción superestadística = $\langle$ predicción canónica $\rangle$

Para una función arbitraria $g = g(\Gamma)$ se cumple

$$\langle g \rangle_S = \langle G_\beta \rangle_S \quad (3)$$

con $G_\beta := \langle g \rangle_\beta$. Ejemplo: $\langle \mathcal{H} \rangle_S = \langle E_\beta \rangle_S$, $E_\beta = \langle \mathcal{H} \rangle_\beta$.

Usando (3) con $g(\Gamma) = \delta(\Gamma - \Gamma_0)$ se tiene que

$$P(\Gamma_0|S) = \left\langle P(\Gamma_0|\beta) \right\rangle_S = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \underbrace{P(\Gamma_0|\beta)}_{=f_\beta(\mathcal{H}(\Gamma_0))} = \rho(\mathcal{H}(\Gamma_0)). \quad (4)$$

La función de *ensemble* ρ es

$$\rho(E) = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \left[\frac{\exp(-\beta E)}{Z(\beta)} \right]. \quad (5)$$

Temperatura fundamental en superestadística

Tomando expectación $\langle \bullet \rangle_S$ sobre la identidad canónica,

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_\beta = \left\langle \omega [\beta - \beta_\Omega] \right\rangle_\beta \implies \left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_S = \left\langle \omega [\beta - \beta_\Omega] \right\rangle_S$$

para superestadística. Por otro lado $P(E|S) = \rho(E)\Omega(E)$ conduce a

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_S = \left\langle \omega [\beta_F - \beta_\Omega] \right\rangle_S \quad \text{luego} \quad \langle \omega \beta \rangle_S - \langle \omega \beta_\Omega \rangle_S = \langle \omega \beta_F \rangle_S - \langle \omega \beta_\Omega \rangle_S$$

y se tiene $\langle \omega \beta \rangle_S = \langle \omega \beta_F \rangle_S$ para toda $\omega(E)$. Con $\omega = 1$ tenemos

$$\beta_S := \langle \beta_F \rangle_S = \langle \beta_\Omega \rangle_S = \langle \beta \rangle_S \quad (6)$$

mientras que $\omega(z) = \delta(z - E)$ implica

$$\langle \beta \rangle_{E,S} = \beta_F(E)$$

Incerteza y fluctuaciones de temperatura

Usando $\omega(E) = \beta_\Omega(E)$ en nuestra identidad de expectación

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_S = \left\langle \omega [\beta - \beta_\Omega] \right\rangle_S \quad (7)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \beta_\Omega' \rangle_S &= \underbrace{\langle \beta_\Omega \beta \rangle_S}_{=\langle \beta^2 \rangle_S} - \beta_S^2 - \langle \beta_\Omega^2 \rangle_S + \beta_S^2 = \langle (\delta\beta)^2 \rangle_S - \langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S \end{aligned} \quad (8)$$

donde hemos usado $\omega = \beta$ en (7) para reemplazar $\langle \beta \beta_\Omega \rangle_S = \langle \beta^2 \rangle_S$.

Varianza de β en superestadística

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

De aquí se sigue que $\mathcal{U} \geq 0$ en superestadística, y $\mathcal{U} = 0$ en equilibrio.

Condiciones necesarias para tener superestadística

Hemos definido una nueva cantidad $\mathcal{U}$ que depende de la estadística de β_Ω ,

$$\mathcal{U} := \langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S + \langle \beta_\Omega' \rangle_S$$

Como $\mathcal{U} = 0$ en equilibrio, se debe cumplir que

$$\langle \beta_\Omega' \rangle_\beta = -\langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_\beta \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \beta_\Omega' \rangle_S \leq 0$$

es decir, la capacidad calórica **debe ser positiva**. De aquí se sigue que

$$\langle (\delta\beta)^2 \rangle_S \leq \langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S. \quad (9)$$

Por otro lado, usando $\frac{\partial}{\partial E} \ln P(\beta|E, S) = \beta_F(E) - \beta$, tenemos

$$\beta_F'(E) = \frac{\partial \langle \beta \rangle_{E,S}}{\partial E} = \left\langle \beta \frac{\partial}{\partial E} \ln P(\beta|E, S) \right\rangle_{E,S} = \langle \beta \rangle_{E,S}^2 - \langle \beta^2 \rangle_{E,S} = -\langle (\delta\beta)^2 \rangle_{E,S}$$

y entonces superestadística requiere $\beta_F'(E) \leq 0$ para todo E .

¿Estados incompatibles con la superestadística?

¿Es posible tener estados estacionarios con $\mathcal{U} < 0$?

Usando la identidad general para estados estacionarios

$$\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial E} \right\rangle_S = \left\langle \omega [\beta_F - \beta_\Omega] \right\rangle_S$$

con $\omega_1(E) = \beta_\Omega(E)$ por un lado, y $\omega_2(E) = \beta_F(E)$ por otro, obtenemos

$$\langle \beta_\Omega' \rangle_S = \langle \beta_F \beta_\Omega \rangle_S - \beta_S^2 - \langle \beta_\Omega^2 \rangle_S + \beta_S^2 \Rightarrow \mathcal{U} = \langle \delta \beta_F \delta \beta_\Omega \rangle_S$$

$$\langle \beta_F' \rangle_S = \langle \beta_F^2 \rangle_S - \beta_S^2 - \langle \beta_F \beta_\Omega \rangle_S + \beta_S^2 \Rightarrow \mathcal{U} = \langle (\delta \beta_F)^2 \rangle_S - \langle \beta_F' \rangle_S$$

En superestadística debe cumplirse $\langle (\delta \beta_F)^2 \rangle_S \leq \langle (\delta \beta)^2 \rangle_S \leq \langle (\delta \beta_\Omega)^2 \rangle_S$.

Es posible tener $\mathcal{U} < 0$ siempre y cuando $\beta_F' > 0$.

Ejemplo: el *ensemble* gaussiano

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

$$\beta_F(E; A, E_0) = 2A(E - E_0) \quad \Rightarrow \quad \beta_F'(E) = 2A > 0$$

Este *ensemble* no puede ser descrito por superestadística.

$$\mathcal{U} = \langle (\delta\beta_F)^2 \rangle_{A, E_0} - \langle \beta_F' \rangle_{A, E_0} = 2A \left[2A \langle (\delta E)^2 \rangle_{A, E_0} - 1 \right]. \quad (10)$$

Para $\Omega(E) \propto E^\alpha$, es posible demostrar que

$$\mathcal{U} = 2A\alpha \left(1 - \left\langle \frac{1}{E} \right\rangle_{A, E_0} \langle E \rangle_{A, E_0} \right) \leq 0 \quad (11)$$

y además

$$\langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S > \langle (\delta\beta_F)^2 \rangle_S. \quad (12)$$

¿Es el ordenamiento $\Omega > F$ una regla general de los estados estacionarios?

Ejemplo: el *ensemble* q -canónico (Tsallis)

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

$$\beta_F(E) = \frac{\beta}{1 + (q-1)\beta E} \quad \Rightarrow \quad \beta_F'(E) = (1-q)\beta_F(E)^2$$

Este *ensemble* sólo puede ser descrito por superestadística para $q \geq 1$.

Para $\Omega(E) = \Omega_0 E^\alpha$,

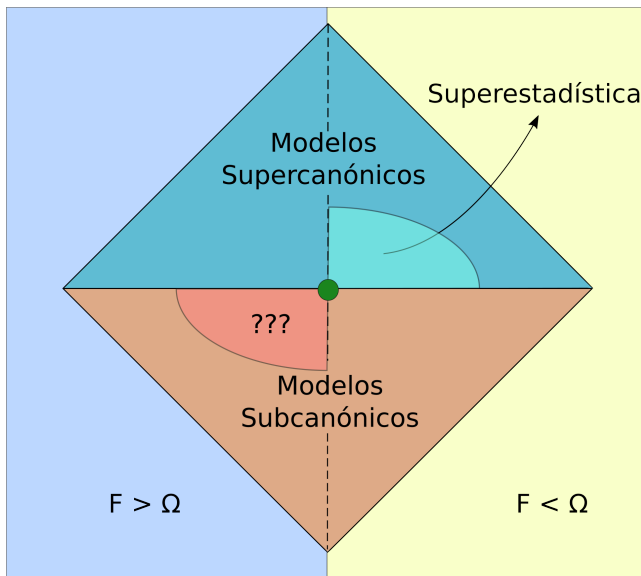
$$\mathcal{U} = (\beta_S)^2 \left[\frac{q-1}{1 - (\alpha+1)(q-1)} \right]. \quad (13)$$

$$q < 1: \quad \mathcal{U} < 0; \quad \langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S < \langle (\delta\beta_F)^2 \rangle_S$$

$$q \geq 1: \quad \mathcal{U} \geq 0; \quad \langle (\delta\beta_\Omega)^2 \rangle_S > \langle (\delta\beta_F)^2 \rangle_S$$

Es como si los estados $q < 1$ fueran una **inversión** de los estados con $q \geq 1$...

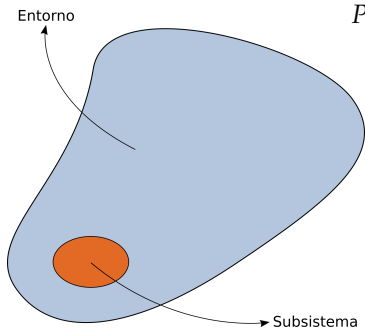
Una clasificación de los estados estacionarios



Una ley de invarianza para $\mathcal{U}$ en subsistemas

Si $P(\Gamma_A, \Gamma_B|S) = \rho(\mathcal{H}_A(\Gamma_A) + \mathcal{H}_B(\Gamma_B))$ entonces $\mathcal{U}_{AB} = \mathcal{U}_A = \mathcal{U}_B$.

Válido en general pero más fácil de demostrar en superestadística:



$$P(\Gamma_A, \Gamma_B|S) = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \frac{\exp(-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B))}{Z_{AB}(\beta)}$$

donde $Z_{AB}(\beta) = Z_A(\beta)Z_B(\beta)$.

$$\begin{aligned} P(\Gamma_A|S) &= \int d\Gamma_B P(\Gamma_A, \Gamma_B|S) \\ &= \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \left[\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_A)}{Z_A(\beta)\cancel{Z_B(\beta)}} \right] \cancel{Z_B(\beta)} \end{aligned}$$

$$P(\Gamma_A|S) = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \left[\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_A)}{Z_A(\beta)} \right]$$

Como $\mathcal{U}$ es un funcional de $P(\beta|S)$, se tiene $\mathcal{U}_{AB} = \mathcal{U}_A = \mathcal{U}_B$.

En resumen...

Un *ensemble* con $P(\Gamma|S) = \rho(\mathcal{H}(\Gamma))$ tiene temperatura inversa fundamental:

$$\beta_F(E) := -\frac{\partial}{\partial E} \ln \rho(E) = \langle \beta \rangle_{E,S}$$

Las distintas temperaturas (inversas) tienen igual valor de expectación:

$$\beta_S := \langle \beta_F \rangle_S = \langle \beta_\Omega \rangle_S = \langle \beta \rangle_S$$

Las incertezas (fluctuaciones) de las temperaturas se relacionan a través de

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

ya que también se cumple

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

Para un sistema dividido en dos subsistemas A y B tal que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B$,

$$\mathcal{U}_{AB} = \mathcal{U}_A = \mathcal{U}_B$$

Para más información

Physica A 608, 128249 (2022)



Physica A: Statistical Mechanics and its Applications

Volume 608, Part 1, 15 December 2022, 128249



A classification of nonequilibrium steady states based on temperature correlations

Sergio Davis  



Comisión
Chilena de
Energía Nuclear

Ministerio de Energía



Agradecimientos a ANID FONDECYT 1220651