Temperatura en sistemas fuera del equilibrio: Superestadística y otros formalismos

Sergio Davis <sergio.davis@cchen.cl>

Centro de Investigación en la Intersección de Física de Plasmas,
Materia y Complejidad (P^2mc), **Comisión Chilena de Energía Nuclear**

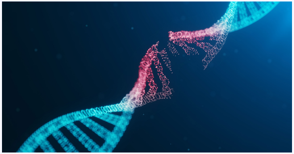
Comisión Chilena de Energía Nuclear
Ministerio de Energía

8 Abril 2024 | Centro Multidisciplinario de Física | Universidad Mayor

Investigación Fundamental y Aplicada en CCHEN

Plasma Physics, Matter and Complexity

Comisión Chilena de Energía Nuclear


Termodinámica fuera del equilibrio:
Estados estacionarios, superestadística, modelos de máximo calibre

Complejidad e información:
Entropía de información, inferencia bayesiana

Mecánica Estadística Computacional:
Simulación Monte Carlo en *ensembles* generalizados

Estudiantes y colaboradores

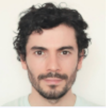
Estudiantes de Magister y Doctorado

Constanza Farías
(U. Andrés Bello)

Vivianne Olguín
(U. de Chile)

Abiam Tamburrini
(U. de Chile)

Boris Maulén
(U. Andrés Bello)

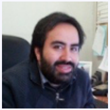


Leonardo Herrera
(U. Andrés Bello)

Colaboradores

Gonzalo Gutiérrez
(U. de Chile)

Yasmín Navarrete
(IFICC)



Joaquín Peralta
(U. Andrés Bello)

Claudia Loyola
(U. Andrés Bello)

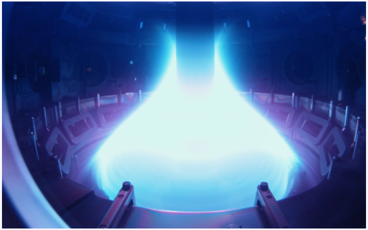
Pablo Moya
(U. de Chile)

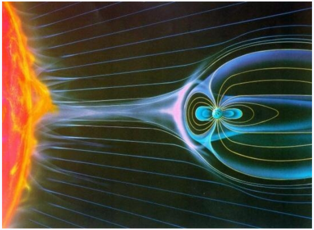
Plan de la presentación

- Motivación: más allá de la estadística de Boltzmann-Gibbs
- Modelos estacionarios: ejemplos y definición general
- Temperatura en modelos estacionarios
- Una familia especial de modelos: superestadística
- Clasificación de los modelos estacionarios
- Conclusiones

Sistemas no térmicos

Muchos sistemas (ej. 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),

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

y esto no se cumple.

¿Cómo podemos asignar temperatura a este tipo de sistemas?

Los modelos tradicionales en Mecánica Estadística

Pensemos en un sistema con grados de libertad $\mathbf{\Gamma}$. Para fijar ideas, supongamos

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

donde en este caso $\mathbf{\Gamma} := (\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_N)$.

$$P(\mathbf{\Gamma}|\beta) = \frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)}, \quad \beta := \frac{1}{k_B T}$$

modelo canónico

$$P(\mathbf{\Gamma}|E_0) = \frac{\delta\big(\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}) - E_0\big)}{\Omega(E_0)}$$

modelo microcanónico

$$Z(\beta) := \int d\mathbf{\Gamma} \exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)$$

(función partición)

$$\Omega(E) := \int d\mathbf{\Gamma}\, \delta\big(\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}) - E\big)$$

(densidad de estados)

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

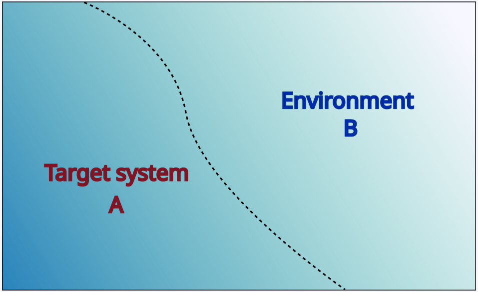
$$\mathcal{S}(E) := k_B \ln \Omega(E)$$

Otros modelos: el modelo gaussiano

El modelo gaussiano se define por

$$P(\boldsymbol{\Gamma}|A,\beta_0,E_0)=\frac{1}{\eta_A(\beta_0,E_0)}\exp\Big(-\beta_0\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})-A\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})-E_0\big)^2\Big)$$

con $A\geq 0$. Describe un sistema rodeado por un entorno finito.



$A\to 0$: Canónico con $\beta=\beta_0$

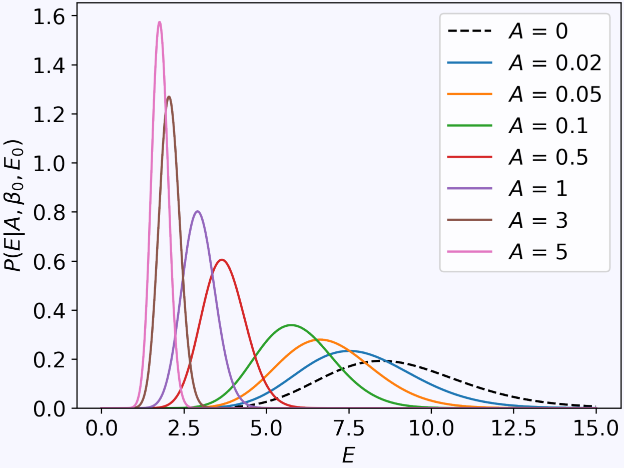
$A\to\infty$: Microcanónico con $E=E_0$

M. S. S. Challa, J. H. Hetherington. Phys. Rev. Lett. **60**, 77-80 (1988).

D. Suzuki, D. Suzuki, S. Miura. J. Phys. Soc. Japan **91**, 044006 (2022).

Otros modelos: el modelo gaussiano

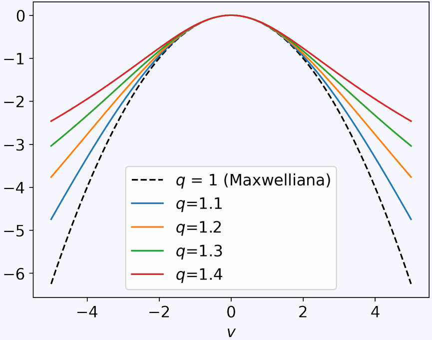
Gas ideal con $N = 12$ partículas, $\beta_0 = 2$, $E_0 = 1$.



Otros modelos: el modelo q-canónico

El modelo q-canónico se define por

$$P(\boldsymbol{\Gamma}|q,\beta_0) = \frac{1}{Z_q(\beta_0)}\Big[1+(q-1)\beta_0\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})\Big]_+^{\frac{1}{1-q}} = \frac{\exp_q\big(-\beta_0\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})\big)}{Z_q(\beta_0)}$$



$$\exp_q(x) := \Big[1+(1-q)x\Big]_+^{\frac{1}{1-q}}$$

$$\lim_{q\to 1}\exp_q(x) = \exp(x)$$

Vemos que se reduce al modelo canónico con $\beta = \beta_0$ cuando $q \to 1$.

C. Tsallis. *Introduction to nonextensive statistical mechanics* (2009).
J. Naudts. *Generalised thermostatistics* (2011).

Modelo q-canónico desde la estadística de Tsallis

Estadística "no extensiva" de Tsallis:

Maximiza bajo restricciones una **entropía generalizada** $\mathcal{S}_q$ que generaliza a la de Boltzmann-Gibbs, y depende de un nuevo parámetro q.

Boltzmann-Gibbs	Tsallis
$\mathcal{S} = -\int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma}) \ln p(\mathbf{\Gamma})$	$\mathcal{S}_q := \frac{1}{q-1}\Big(1 - \int d\mathbf{\Gamma}\, p(\mathbf{\Gamma})^q\Big)$
$\int d\mathbf{\Gamma} p(\mathbf{\Gamma})\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}) = \overline{E}$	$\dfrac{\int d\mathbf{\Gamma} p(\mathbf{\Gamma})^q \mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})}{\int d\mathbf{\Gamma} p(\mathbf{\Gamma})^q} = \overline{E}$
$P(\mathbf{\Gamma}\vert\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta H(\mathbf{\Gamma}))$	$P(\mathbf{\Gamma}\vert\beta, q) = \frac{1}{Z_q(\beta)} \left[1 - (1-q)\beta H(\mathbf{\Gamma})\right]_+^{\frac{1}{1-q}}$

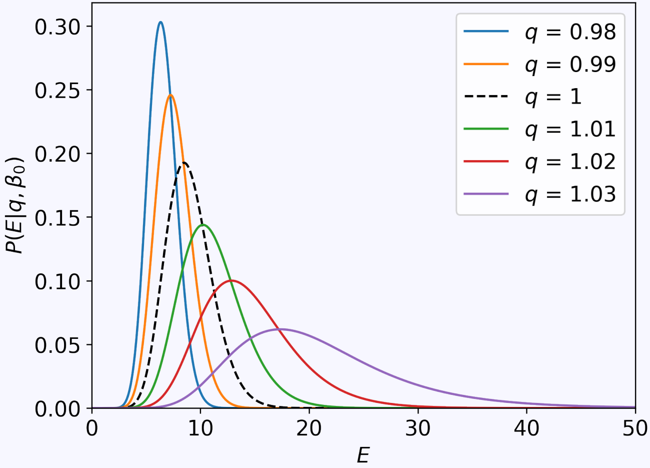
Algunas críticas:

- Maximizar $\mathcal{S}_q$ introduce sesgos en las distribuciones óptimas
- Es necesario redefinir el concepto de valor esperado
- El parámetro q es introducido como un ajuste *ad hoc*

S. Pressé, K. Ghosh, J. Lee, K. A. Dill. Phys. Rev. Lett. **111**, 180604 (2013).

Otros modelos: el modelo q-canónico

Gas ideal con N = 12 partículas, β_0 = 2



Modelos estacionarios: una definición

Un estado estacionario S será tal que, en él, la energía sigue una distribución $P(E|S)$ conocida, y ésta es independiente del tiempo.

En un modelo estacionario, $P(\mathbf{\Gamma}|S)$ depende de $\mathbf{\Gamma}$ a través de $\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})$,

$$\boxed{P(\mathbf{\Gamma}|S) = \rho\big(\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}); S\big)}$$

donde ρ es la *función de ensemble*. Además se cumple que

$$P(E|S) = \rho(E; S)\Omega(E). \quad (2)$$

Demostración

$$P(\mathbf{\Gamma}|\beta) = \frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)} \quad \Rightarrow \quad P(E|\beta) = \frac{\exp(-\beta E)}{Z(\beta)}\Omega(E)$$

$$P(\mathbf{\Gamma}|E_0) = \frac{\delta\big(\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}) - E_0\big)}{\Omega(E_0)} \quad \Rightarrow \quad P(E|E_0) = \frac{\delta(E-E_0)}{\cancel{\Omega(E_0)}}\cancel{\Omega(E)} = \delta(E-E_0)$$

Temperatura en modelos estacionarios

Recordemos nuestra definición de modelo estacionario,

$$P(\mathbf{\Gamma}|S) = \rho\big(\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma}); S\big). \tag{3}$$

¿Cómo definir temperatura en esta clase general de modelos?

Un punto de partida es la definición de temperatura microcanónica,

$$\frac{1}{T(E)} := \frac{\partial \mathcal{S}(E)}{\partial E} \tag{4}$$

con $\mathcal{S}(E) = k_B \ln \Omega(E)$ la entropía de Boltzmann. Dividiendo (4) por k_B podemos definir la *temperatura inversa microcanónica* como

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

Esta función sólo depende de la forma de $\mathcal{H}$, ya que depende de Ω.

Temperatura en modelos estacionarios

En el modelo microcanónico, por supuesto se tiene

$$\big\langle \beta_\Omega \big\rangle_{E_0} = \int_0^\infty dE\, P(E|E_0)\beta_\Omega(E) = \int_0^\infty dE\, \delta(E-E_0)\beta_\Omega(E) = \beta_\Omega(E_0). \qquad (5)$$

Veamos cuál es el valor esperado de $\beta_\Omega(E)$ en el modelo canónico:

$$\begin{aligned}
\big\langle \beta_\Omega \big\rangle_{\beta} &= \int_0^\infty dE\, P(E|\beta)\beta_\Omega(E) = \int_0^\infty dE \left[\frac{\exp(-\beta E)\Omega(E)}{Z(\beta)}\right] \frac{\partial}{\partial E}\ln \Omega(E) \\
&= \frac{1}{Z(\beta)}\int_0^\infty dE\, \exp(-\beta E)\frac{\partial \Omega(E)}{\partial E} \qquad = \text{(integración por partes)} \\
&= \frac{1}{Z(\beta)}\left\{\cancelto{0}{\Big[\exp(-\beta E)\Omega(E)\Big]_{E=0}^{E=\infty}} + \beta \underbrace{\int_0^\infty dE\, \exp(-\beta E)\Omega(E)}_{=Z(\beta)}\right\} = \beta.
\end{aligned}$$

¡En ambos casos se tiene que el valor esperado de β_Ω coincide con la temperatura inversa!

Una definición general de temperatura

En un modelo estacionario cualquiera, tendremos

$$
\begin{aligned}
\beta_S := \langle \beta_\Omega \rangle_S &= \int_0^\infty dE\, P(E|S)\beta_\Omega(E) \\
&= \int_0^\infty dE\, \rho(E;S)\Omega(E)\frac{\partial}{\partial E}\ln\Omega(E) \\
&= \int_0^\infty dE\, \rho(E;S)\frac{\partial\Omega(E)}{\partial E} \qquad = \text{(integración por partes)} \\
&= \cancelto{0}{\Big[\rho(E;S)\Omega(E)\Big]_{E=0}^{E=\infty}} - \int_0^\infty dE\, \frac{\rho(E;S)}{\rho(E;S)}\frac{\partial\rho(E;S)}{\partial E}\Omega(E) = \langle \beta_F \rangle_S
\end{aligned}
$$

donde hemos definido la *temperatura inversa fundamental*,

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

Esta función sólo depende de la forma del modelo, es decir, de ρ.

S. Davis. AIP Conf. Proc. **2731**, 030006 (2023).

Temperatura fundamental: Algunos ejemplos

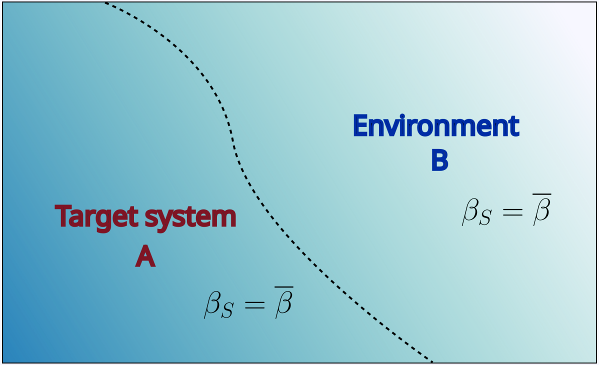
$$\boxed{\beta_F(E;S) := -\frac{\partial}{\partial E}\ln\rho(E;S)}$$ es tal que $\beta_S := \big\langle \beta_\Omega \big\rangle_S = \big\langle \beta_F \big\rangle_S$

Modelo	Parámetros S	Función $\beta_F(E;S)$	Tipo de función
Canónico	β_0	β_0	Constante
Microcanónico	E_0	No existe	No existe
Gaussiano	A, β_0, E_0	$\beta_0 + 2A(E - E_0)$	Lineal
q-Canónico	β_0, q	$\beta_0\Big(1 + (q-1)\beta_0 E\Big)^{-1}$	Inversa

Existe una relación *uno a uno* entre $\rho(E;S)$ y $\beta_F(E;S)$

Invariantes en estados estacionarios

$$P(\mathbf{\Gamma}_A, \mathbf{\Gamma}_B|S) = \rho\big(\mathcal{H}_A(\mathbf{\Gamma}_A) + \mathcal{H}_B(\mathbf{\Gamma}_B)\big) \tag{6}$$



$$\boxed{\beta_S^{(A)} = \beta_S^{(B)}}$$

Demostración

Superestadística: una clase de modelos estacionarios

Superestadística considera β como una variable aleatoria con su propia distribución $P(\beta|S)$.

Es decir, pasamos del modelo canónico, donde

$$P(\mathbf{\Gamma}|\beta) = \frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)} \tag{7}$$

a un modelo ampliado donde a $\mathbf{\Gamma}$ se agrega β como variable, así

$$P(\mathbf{\Gamma}, \beta|S) = P(\beta|S)P(\mathbf{\Gamma}|\beta). \tag{8}$$

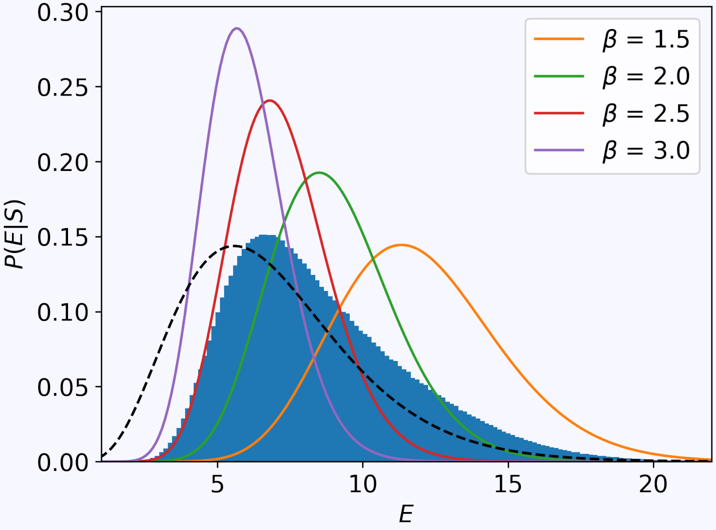
Un modelo superestadístico es un modelo estacionario tal que

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

es decir, una mezcla de modelos canónicos a distintas temperaturas.

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

Superestadística



Superestadística

$$P(\mathbf{\Gamma}|S) = \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|S) \left[\frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)}\right] \tag{9}$$

Podemos escribir la función de *ensemble* en superestadística como

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

es decir, ρ es la transformada de Laplace de la *función de peso*

$$f(\beta;S) := \frac{P(\beta|S)}{Z(\beta)}. \tag{10}$$

Para que un modelo sea superestadístico, ρ debe ser la transformada de Laplace de alguna función $f \geq 0$

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

Superestadística

El valor esperado de un observable G en superestadística se obtiene según

$$\boxed{\big\langle G\big\rangle_S = \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|S)\big\langle G\big\rangle_\beta}$$

El modelo canónico es un caso particular de superestadística, donde

$$P(\beta|\beta_0) = \delta\big(\beta - \beta_0\big), \tag{11}$$

es decir, existe una única temperatura inversa β_0 posible, y de esta forma

$$\big\langle G\big\rangle_S \to \big\langle G\big\rangle_{\beta_0}$$

Superestadística: un ejemplo

Suponiendo una **distribución gamma** de temperatura inversa

$$P(\beta|u,\beta_S) = \frac{1}{u\beta_S\Gamma(1/u)}\exp\Big(-\frac{\beta}{u\beta_S}\Big)\Big(\frac{\beta}{u\beta_S}\Big)^{\frac{1}{u}-1} \tag{12}$$

para un gas ideal de N partículas tenemos que

$$\begin{aligned} P(\mathbf{\Gamma}|u,\beta_S) &= \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|u,\beta_S)\frac{\exp\big(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\big)}{Z(\beta)} \\ &= \frac{1}{Z_q(\beta_0)}\Big[1+(q-1)\beta_0\mathcal{H}(\mathbf{\Gamma})\Big]_+^{\frac{1}{1-q}} \end{aligned} \tag{13}$$

que es un modelo q-canónico con

$$q = 1 + \frac{2u}{2+3Nu} \tag{14}$$

$$\beta_0 = \beta_S\left(1+\frac{3Nu}{2}\right) \tag{15}$$

La temperatura fundamental en superestadística

Recordemos que

$$\beta_S := \left\langle \beta_\Omega \right\rangle_S = \left\langle \beta_F \right\rangle_S \tag{16}$$

$$\left\langle \beta_\Omega \right\rangle_S = \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|S) \underbrace{\left\langle \beta_\Omega \right\rangle_\beta}_{=\beta} = \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|S)\beta = \left\langle \beta \right\rangle_S. \tag{17}$$

Luego, también se tiene que

$$\beta_S = \left\langle \beta \right\rangle_S \tag{18}$$

Además podemos demostrar que

$$\boxed{\beta_F(E;S) = -\frac{\partial}{\partial E} \ln \rho(E;S) = \left\langle \beta \right\rangle_{E,S}} \tag{19}$$

esto es, β_F es la media de β dada una energía E en el modelo S.

Demostración

Condiciones para la validez de la superestadística

En superestadística, se cumple que

$$\beta_F{}'(E;S) = -\big\langle(\delta\beta)^2\big\rangle_{E,S} \tag{20}$$

por lo tanto, una condición necesaria para que un β_F sea superestadístico es

$$\boxed{\beta_F{}'(E;S) \leq 0}$$

Demostración:

$$\rho(E;S) = \int_0^\infty d\beta f(\beta;S)\exp(-\beta E)$$

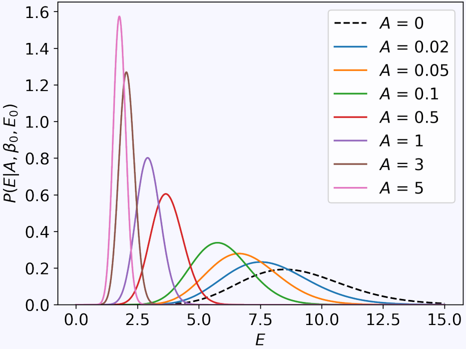
$$\begin{aligned}
\text{luego}\quad \beta_F{}'(E;S) &= \frac{\partial}{\partial E}\left[\int_0^\infty d\beta f(\beta;S)\frac{\exp(-\beta E)}{\rho(E;S)}\beta\right] \\
&= \int_0^\infty d\beta \underbrace{\left[\frac{f(\beta;S)\exp(-\beta E)}{\rho(E;S)}\right]}_{=P(\beta|E,S)}\Big(-\beta^2 - \underbrace{\frac{\rho'(E;S)}{\rho(E;S)}}_{=\beta_F(E;S)}\beta\Big) \\
&= -\big\langle\beta^2\big\rangle_{E,S} + \big\langle\beta\big\rangle_{E,S}^2 = -\big\langle(\delta\beta)^2\big\rangle_{E,S} \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{21}$$

El modelo gaussiano, revisitado

$$\rho(E; A, \beta_0, E_0) = \frac{\exp\big(-\beta_0 E - A(E-E_0)^2\big)}{\eta_A(\beta_0, E_0)}, \quad A \geq 0 \tag{22}$$

$$\beta_F(E; A, \beta_0, E_0) = \beta_0 + 2A(E - E_0)$$

$$\beta_F{}'(E; A, \beta_0, E_0) = 2A \geq 0.$$



¡El modelo gaussiano con $A > 0$ es incompatible con superestadística!

Esto incluye al modelo microcanónico ($A \to \infty$). ▶▶ Demostración

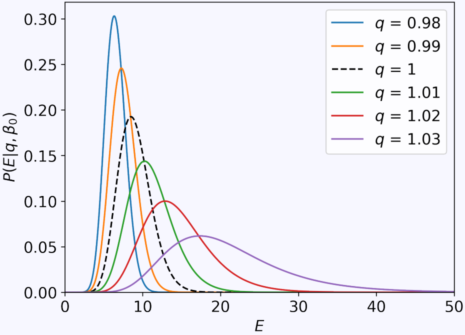
El modelo q-canónico, revisitado

$$\rho(E;\beta_0,q) = \frac{1}{Z_q(\beta_0)}\Big[1+(q-1)\beta_0 E\Big]_+^{\frac{1}{1-q}} \tag{23}$$

$$\beta_F(E;\beta_0,q) = \frac{\beta_0}{1+(q-1)\beta_0 E}$$

$$\begin{aligned}{\beta_F}'(E;\beta_0,q) &= \frac{(1-q)(\beta_0)^2}{(1+(q-1)\beta_0 E)^2}\\ &= (1-q)\beta_F(E;\beta_0,q)^2\end{aligned}$$

$$\text{sgn}\,({\beta_F}') = \text{sgn}\,(1-q)$$

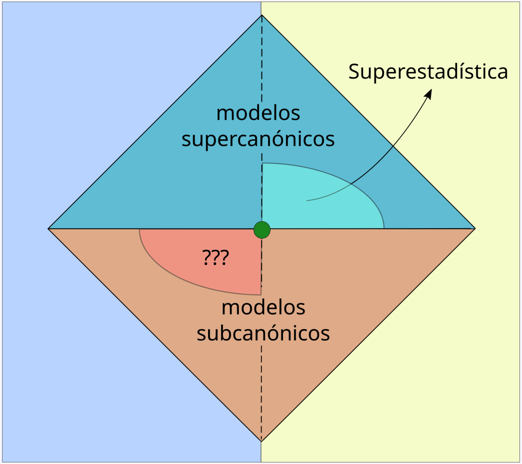


¡El modelo q-canónico sólo es compatible con superestadística para $q \geq 1$!

Una clasificación de modelos estacionarios

$$\boxed{\mathcal{U} := \big\langle \delta\beta_F \delta\beta_\Omega \big\rangle_S}$$

(covarianza de temperaturas inversas)



En superestadística,

$$\mathcal{U} = \big\langle (\delta\beta)^2 \big\rangle_S \geq 0$$

y el modelo canónico tiene

$$\mathcal{U} = 0.$$

S. Davis. Phys. A **608**, 128249 (2022).

Regiones supercanónica y subcanónica

Modelo q-canónico

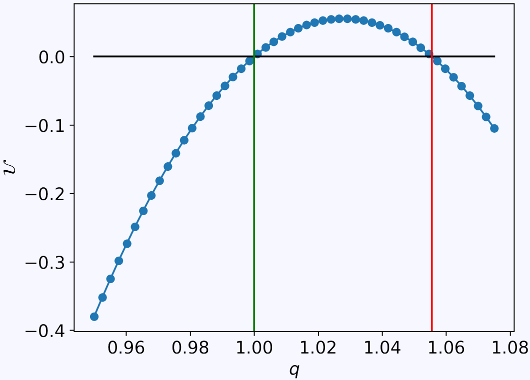
para $\Omega(E) = \Omega_0\, E^\alpha$ se tiene $\beta_\Omega(E) = \dfrac{\alpha}{E}$

$$\beta_S = \beta_0\big(1 - (q-1)(\alpha+1)\big)$$

Límite de Lutsko y Boon:

$$q < 1 + \frac{1}{\alpha+1}$$

$$\mathcal{U} = \frac{(\beta_S)^2(q-1)}{1-(q-1)(\alpha+1)}$$

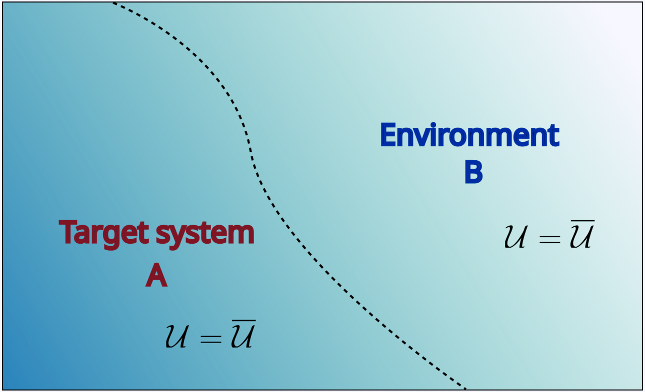


$$\boxed{\mathrm{sgn}\,\mathcal{U} = \mathrm{sgn}\,(q-1)}$$

J. F. Lutsko, J. P. Boon. EPL **95**, 020006 (2011).

Invariantes en estados estacionarios

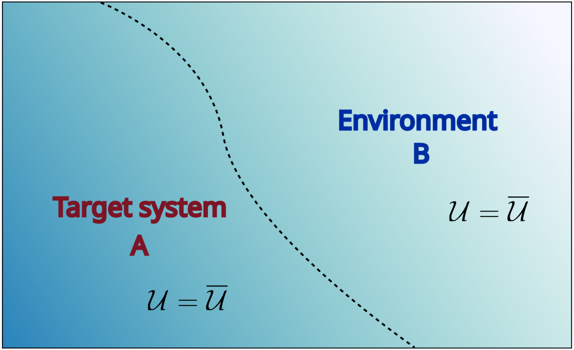
$$P(\boldsymbol{\Gamma}_A, \boldsymbol{\Gamma}_B|S) = \rho\big(\mathcal{H}_A(\boldsymbol{\Gamma}_A) + \mathcal{H}_B(\boldsymbol{\Gamma}_B)\big) \tag{24}$$



$$\boxed{\mathcal{U}^{(A)} = \mathcal{U}^{(B)}}$$

Demostración

Invariantes en estados estacionarios: Consecuencias



- No es posible que dos sistemas en contacto con distinto $\mathcal{U}$ alcancen un estado estacionario
- Si un sistema es subcanónico ($\mathcal{U} < 0$), ni él ni sus subsistemas pueden ser descritos por superestadística

Conclusiones

- Es posible definir una temperatura inversa β_S de manera consistente para un modelo estacionario
- Superestadística es una clase de modelos estacionarios donde existe una temperatura fluctuante o incierta
- La cantidad $\mathcal{U}$ distingue entre dos clases de modelos, *supercanónicos* y *subcanónicos*
- Los modelos superestadísticos son supercanónicos ($\mathcal{U} > 0$) y son incompatibles con el modelo microcanónico
- Tanto β_S como $\mathcal{U}$ son invariantes ante una separación sistema / entorno

Algunas referencias

- S. Davis, G. Gutiérrez. *Temperature is not an observable in superstatistics*. Phys. A **505**, 864-870 (2018).
- S. Davis, G. Gutiérrez. *Emergence of Tsallis statistics as a consequence of invariance*. Phys. A **533**, 122031 (2019).
- S. Davis. *On the possible distributions of temperature in nonequilibrium steady states*. J. Phys. A: Math. Theor. **53**, 045004 (2020).
- S. Davis. *Conditional maximum entropy and superstatistics*. J. Phys. A: Math. Theor. **53**, 445006 (2020).
- H. Umpierrez, S. Davis. *Fluctuation theorems in q-canonical ensembles*. Phys. A **563**, 125337 (2021).
- S. Davis. *Fluctuating temperature outside superstatistics: Thermodynamics of small systems*. Phys. A **589**, 126665 (2022).
- S. Davis. *A classification of nonequilibrium steady states based on temperature correlations*. Phys. A **608**, 128249 (2022).
- C. Farías, S. Davis. *Temperature distribution in finite systems: Application to the one-dimensional Ising chain*. Eur. Phys. J. B **96**, 39 (2023).
- S. Davis. *Superstatistics and the fundamental temperature of steady states*. AIP Conf. Proc. **2731**, 030006 (2023).

¡Gracias por su atención!

Puede descargar esta charla aquí:

Este trabajo ha sido financiado por el
Proyecto FONDECYT Regular 1220651 de ANID
(Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo, Chile)

Demostración:

Si llamamos $p(E) := P(E|S)$, usando la regla de la marginalización tendremos

$$P(\boldsymbol{\Gamma}|S) = \int_0^\infty dE\, P(\boldsymbol{\Gamma}, E|S) = \int_0^\infty dE\, P(\boldsymbol{\Gamma}|E)P(E|S), \tag{25}$$

donde $P(\boldsymbol{\Gamma}|E)$ es el modelo microcanónico,

$$P(\boldsymbol{\Gamma}|E) = \frac{\delta\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma}) - E\big)}{\Omega(E)}. \tag{26}$$

Reemplazando, tenemos

$$P(\boldsymbol{\Gamma}|S) = \int_0^\infty dE \left[\frac{\delta\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma}) - E\big)}{\Omega(E)}\right] p(E) = \frac{p\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})\big)}{\Omega\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma})\big)} = \rho\big(\mathcal{H}(\boldsymbol{\Gamma}); S\big) \;\blacksquare$$

Volver

Demostración:

$$P(E_A, E_B|S) = \rho(E_A + E_B; S)\Omega_A(E_A)\Omega_B(E_B) \tag{27}$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial E_A} \ln P(E_A, E_B|S) \right\rangle_S = 0 \tag{28}$$

$$\frac{\partial}{\partial E_A} \ln P(E_A, E_B|S) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial E_A} \ln \rho(E_A + E_B; S)}_{=-\beta_F(E_A+E_B;S)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial E_A} \ln \Omega_A(E_A)}_{=\beta_\Omega^{(A)}(E_A)} \tag{29}$$

$$\left\langle \beta_F(E_A + E_B; S) \right\rangle_S = \left\langle \beta_\Omega^{(A)} \right\rangle_S \tag{30}$$

$$\left\langle \beta_F(E_A + E_B; S) \right\rangle_S = \left\langle \beta_\Omega^{(B)} \right\rangle_S \tag{31}$$

$$\left\langle \beta_\Omega^{(A)} \right\rangle_S = \left\langle \beta_\Omega^{(B)} \right\rangle_S \tag{32}$$

Volver

Demostración:

De acuerdo al teorema de Bayes,

$$P(\beta|E,S) = \frac{P(\beta|S)P(E|\beta)}{P(E|S)} = \frac{P(\beta|S)}{\rho(E;S)\cancel{\Omega(E)}}\frac{\exp(-\beta E)\cancel{\Omega(E)}}{Z(\beta)}$$
$$= \frac{f(\beta;S)\exp(-\beta E)}{\rho(E;S)},$$

y de la definición de β_F y reemplazando la función ρ superestadística,

$$\beta_F(E;S) = -\frac{\partial}{\partial E}\ln\rho(E;S) = -\frac{1}{\rho(E;S)}\frac{\partial}{\partial E}\underbrace{\int_0^\infty d\beta f(\beta;S)\exp(-\beta E)}_{=\rho(E;S)}$$
$$= -\int_0^\infty d\beta\frac{f(\beta;S)}{\rho(E;S)}\underbrace{\frac{\partial}{\partial E}\exp(-\beta E)}_{=-\beta\exp(-\beta E)} = \int_0^\infty d\beta\left[\frac{f(\beta;S)\exp(-\beta E)}{\rho(E;S)}\right]\beta$$
$$= \int_0^\infty d\beta\, P(\beta|E,S)\beta = \langle\beta\rangle_{E,S} \quad \blacksquare$$

Volver

Microcanónico es incompatible con superestadística

Demostración:

De la *ley de la varianza total* puede deducirse que, en superestadística,

$$\big\langle (\delta E)^2 \big\rangle_S = \big\langle V_\beta \big\rangle_S + \big\langle (\delta E_\beta)^2 \big\rangle_S \tag{33}$$

donde

$$V_\beta := \big\langle (\delta E)^2 \big\rangle_\beta \tag{34}$$

$$E_\beta := \big\langle E \big\rangle_\beta \tag{35}$$

Luego, si S fuera un modelo microcanónico, tendría que cumplirse

$$0 = \underbrace{\big\langle V_\beta \big\rangle_S}_{\geq 0} + \underbrace{\big\langle (\delta E_\beta)^2 \big\rangle_S}_{\geq 0} \tag{36}$$

que implicaría $\big\langle (\delta E)^2 \big\rangle_\beta = 0$ para todo β, y $\big\langle E \big\rangle_\beta$ independiente de β, y estas condiciones son incompatibles con un modelo canónico.

Volver

Invarianza de $P(\beta|S)$ en superestadística

Demostración:

$$P(\mathbf{\Gamma}_A, \mathbf{\Gamma}_B|S) = \int_0^\infty d\beta P(\beta|S) \left[\frac{\exp(-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B))}{Z_{AB}(\beta)}\right]$$

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

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

Luego se tiene

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

Es decir, $P(\beta|S)$ es invariante, y como β_S y $\mathcal{U}$ son funcionales de $P(\beta|S)$,

$$\beta_S^{(A)} = \beta_S^{(B)}, \qquad \mathcal{U}^{(A)} = \mathcal{U}^{(B)} \quad \blacksquare$$

Volver